O conceito matemático de espaço nulo.

Já vimos que em um problema linear a relação funcional entre os M parâmetros e as N observações geofísicas pode ser representada por um sistema de N equações por M incógnitas:

$$\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}},$$

Esta a equação nos diz que as observações geofísicas $\bar{\mathbf{y}}^{o}$ é uma combinação linear dos M vetores coluna da matriz de sensibilidade $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ (vetores $\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, ..., \bar{\mathbf{a}}_M$) em que os coeficientes escalares desta combinação linear são os elementos do vetor de parâmetros:

$$\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \bar{\mathbf{a}}_1 p_1 + \bar{\mathbf{a}}_2 p_2 + ... + \bar{\mathbf{a}}_M \; p_M \; .$$

Associado a matriz $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ de dimensão N x M há dois espaços vetoriais: espaço linha[1] e espaço coluna[2]. Agora iremos recordar um terceiro espaço também associado a matriz $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ chamado **espaço nulo** de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$. O espaço nulo de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é o espaço solução do sistema homogêneo de equação $\bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{0}}$, sendo portanto um subespaço de R^M. A dimensão do espaço nulo de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é o número de vetores que satisfazem a equação homogênea $\bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{0}}$

Teorema de dimensão para matrizes:

Se $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é uma matriz N x M, ou seja, com M colunas então

M = posto de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ [3] + Dimensão do espaço nulo de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$

Como denominamos o posto de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ de r, podemos escrever que

Dimensão do espaço nulo de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ = M - r

---

[1] Se $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é uma matriz de dimensão N x M o **espaço linha** de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é o subespaço R^M gerado pelo conjunto das linhas de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ (são os vetores linhas que são LI).

[2] O **espaço coluna** de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é o subespaço R^N gerado pelo conjunto das colunas de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ (são os vetores colunas que são LI).

[3] Posto de uma matriz $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ (N x M) é a dimensão do espaço linha de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$. Lembre-se que o espaço linha é igual ao espaço coluna de uma matriz)

Solução Nula ou Vetor Nulo($\overline{\mathbf{p}}^{Null}$):

É o conjunto de vetores-solução pertencentes ao espaço nulo. Em outras palavras, são os vetores-solução do sistema homogêneo de equações $\overline{\overline{\mathbf{A}}}\,\overline{\mathbf{p}} = \overline{\mathbf{0}}$

Exemplo simples: Interpretação em duas dimensões usando equação de uma observação geofísica.

Vamos supor que um dado fenômeno seja explicado por um modelo linear

$$\overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \overline{\overline{\mathbf{A}}}\,\overline{\mathbf{p}},$$

em que $\overline{\mathbf{y}}^{o}$ é um vetor de dados contendo N observações, $\overline{\mathbf{p}}$ é um vetor de parâmetros M-dimensional e $\overline{\overline{\mathbf{A}}}$ é a matriz de sensibilidade N x M. Por simplicidade, consideraremos apenas uma única observação (N=1) y_1^o e dois parâmetros (M=2) e uma matriz $\overline{\overline{\mathbf{A}}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$, então temos

$$\overline{\overline{\mathbf{A}}}\,\overline{\mathbf{p}} = \overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = y_1^o$$

Veja que a solução $\overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}}$ óbvia para este sistema é

$$\overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} = \begin{bmatrix} y_1^o \\ y_1^o \end{bmatrix}$$

Veremos mais adiante que esta solução $\overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}}$ é chamada de solução de norma Euclidena mínima obtida via estimador de Mínimos Quadrados Subdeterminado.

Veja que neste exemplo M=2 e N=1 como o posto da matriz $\overline{\overline{\mathbf{A}}} \leq$ min(M,N). Neste caso, então o posto é igual a N ($r(\overline{\overline{\mathbf{A}}}) = 1$) e temos 2 parâmetros desconhecidos a serem estimados. Pelo teorema de dimensão para matrizes temos que neste exemplo o espaço nulo de $\overline{\overline{\mathbf{A}}}$ é um espaço R^1

<u>Visualização do Espaço Nulo</u>: Vimos que as soluções nulas são soluções não-triviais que satisfazem o sistema de equações homogênea $\overline{\overline{\mathbf{A}}}\,\overline{\mathbf{p}} = \overline{\mathbf{0}}$ **,** logo

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = 0$$

$$\frac{1}{2} p_1 + \frac{1}{2} p_2 = 0$$

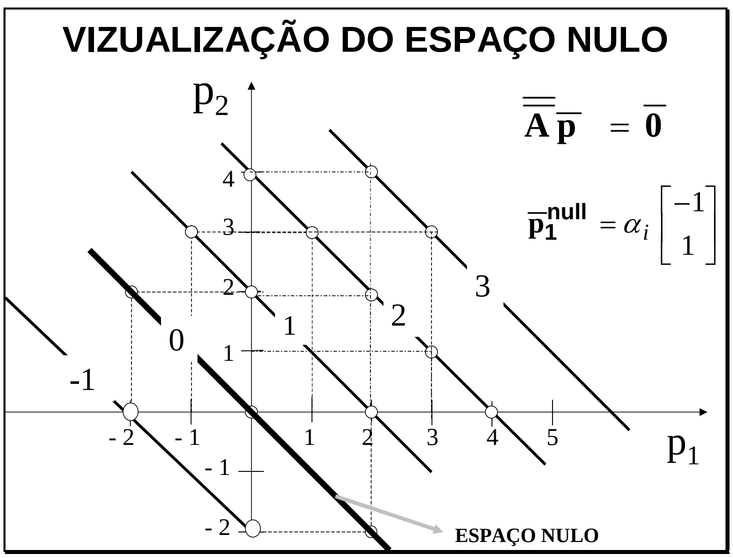

Figura 1

Agora vamos visualizar graficamente o espaço nulo deste problema (espaço R^1) no espaço dos parâmetros (espaço R^2). Veja na Figura 1 que a curva de isovalores ZERO é a visualização do espaço nulo deste problema. Então todos os vetores-solução que caem nesta curva de isovalor zero, pertencem ao espaço nulo, sendo portanto a solução nula $\overline{\mathbf{p}}^{Null}$ do problema em questão. Note que qualquer ponto na curva de isovalores zero satisfaz a equação $\frac{1}{2} p_1 + \frac{1}{2} p_2 = 0$, por exemplo:

$$\overline{\mathbf{p}}_1^{Null} = \begin{bmatrix} -2 \\ 2 \end{bmatrix}, \ \overline{\mathbf{p}}_2^{Null} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \ \overline{\mathbf{p}}_3^{Null} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \ \overline{\mathbf{p}}_4^{Null} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \ \overline{\mathbf{p}}_5^{Null} = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}, \text{ etc...}$$

Portanto generalizando as soluções nulas $\bar{\mathbf{p}}^{Null}$ deste problema em questão são do tipo

$$\bar{\mathbf{p}}_1^{\mathbf{null}} = \alpha_i \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

em que α\`s são parâmetros arbitrários.

<u>Soluções Nulas e a Não Unicidade:</u>

Matematicamente, as soluções nulas são soluções não-triviais que satisfazem o sistema de equações homogênea $\bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{0}}$ **,** isto é

$$\bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}}_1^{\,Null} + \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}}_2^{\,Null} + \ldots + \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}}_{M-r}^{\,Null} = \bar{\mathbf{0}}$$

A existência de soluções não-triviais que satisfazem o sistema de equações homogênea $\bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{0}}$ caracteriza a <u>não unicidade</u> da solução. Portanto concluímos que a existência de soluções nulas implica a existência de infinitas possíveis soluções para o problema. Fisicamente, veja que as soluções nulas não produzem dados observados (anomalia geofísica) e a conseqüência é a não unicidade da solução estimada. Assim por exemplo, se um dado problema inverso $\bar{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}}$ é uma solução particular (por exemplo, solução de mínima norma euclideana) e se houver um único vetor solução-nula $\bar{\mathbf{p}}_1^{Null}$, então se somarmos $\bar{\bar{\mathbf{A}}}\;\bar{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \bar{\bar{\mathbf{A}}}\;\bar{\mathbf{p}}_{\mathbf{1}}^{\mathbf{null}}$ temos:

$$\bar{\bar{\mathbf{A}}}\;\bar{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \bar{\bar{\mathbf{A}}}\;\bar{\mathbf{p}}_{\mathbf{1}}^{\mathbf{null}} = \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

portanto

$$\bar{\bar{\mathbf{A}}}\left(\bar{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \bar{\mathbf{p}}_{\mathbf{1}}^{\mathbf{null}}\right) = \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

Veja que se temos M-r vetores soluções nulas (M-r é a dimensão do espaço nulo), então a equação acima poderia ser reescrita como:

$$\bar{\bar{\mathbf{A}}}\left(\bar{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \bar{\mathbf{p}}_{\mathbf{1}}^{\mathbf{null}} + \bar{\mathbf{p}}_{\mathbf{2}}^{\mathbf{null}} + \ldots + \bar{\mathbf{p}}_{\mathbf{M-r}}^{\mathbf{null}}\right) = \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

$$\overline{\overline{\mathbf{A}}}\left(\overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{M\text{-}r}} \overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{i}}^{\mathbf{null}}\right) = \overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

Generalizando, se um dado problema inverso temos M-r vetores soluções nulas, então a solução geral é escrita como:

$$\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}} = \overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{M\text{-}r}} \overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{i}}^{\mathbf{null}}$$

em que $\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}}$ é uma solução geral. Esta solução geral pode também ser escrita como

$$\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}} = \overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{M\text{-}r}} \alpha_i \overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{i}}^{\mathbf{null}}$$

Esta solução $\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}}$ é também uma solução para qualquer escolha de α, uma vez esta solução geral também explica os dados observados (tal como a solução particular)

$$\overline{\overline{\mathbf{A}}}\ \overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}} = \overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

A existência de M-r vetores soluções nulas implica a existência de infinitas soluções $\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}}$ para o problema, basta escolher arbitrários valores para os α.

<u>Visualização da não unicidade da solução</u>:

Vamos retornar ao nosso exemplo simplificado que temos dois parâmetros e uma única observação relacionados pelo sistema de equações linear

$$\overline{\overline{\mathbf{A}}}\,\overline{\mathbf{p}} = \overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = y_1^o$$

Vimos que há um único vetor solução nula:

$$\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{1}}^{\mathbf{null}} = \alpha_i \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Vamos agora estimar a quase-solução $\hat{\mathbf{p}}$ tal que a distância euclideana $\left\|\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} - \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}}\right\|_2^2$ seja mínima. Em outras palavras, vamos tentar estimar a solução de mínimos quadrados (MQ).

$$\min_{\bar{\mathbf{p}}} \left\|\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} - \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}}\right\|_2^2$$

$$\min_{\bar{\mathbf{p}}} \left(\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} - \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}}\right)^{\mathbf{T}} \left(\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} - \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}}\right) = \min \{Q\}$$

Veja que a função a ser minimizada deste problema pode ser escrita como

$$\min_{\bar{\mathbf{p}}} \{Q\} = \min_{\bar{\mathbf{p}}} \left\{ \left[y_1^o - \frac{1}{2} (p_1 + p_2) \right]^2 \right\}$$

Vamos considerar que a única observação deste problema é $y_1^o = 2$. Então a função-objeto Q a ser minimizada é:

$$\min_{\bar{\mathbf{p}}} \{Q\} = \min_{\bar{\mathbf{p}}} \left\{ \left[2 - \frac{1}{2} (p_1 + p_2) \right]^2 \right\}$$

Agora vamos visualizar graficamente esta função-objeto Q no espaço de parâmetros (p_1-p_2). A Figura 2 mostra que o mínimo desta função está representado pela curva de isovalores zero.

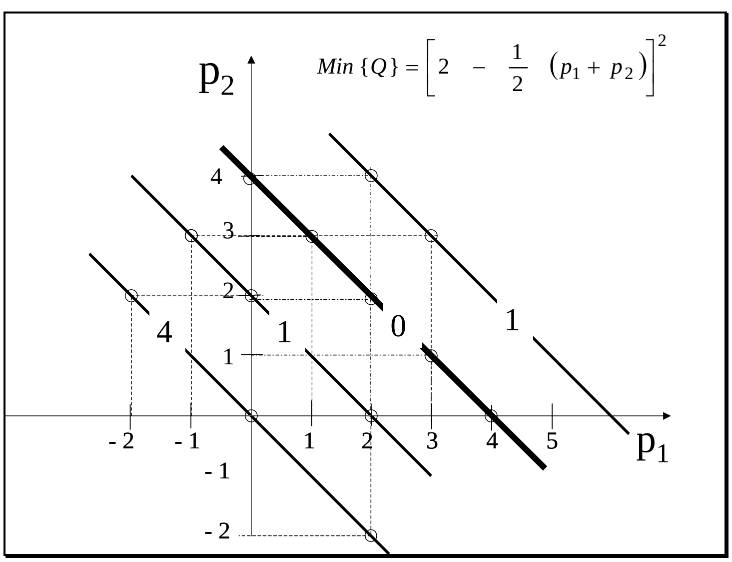

Figura 2

Veja que qualquer solução $\hat{\mathbf{p}}$ sobre esta curva explica os dados geofísicos, ou seja, explica a equação

$$\overline{\overline{\mathbf{A}}}\,\hat{\overline{\mathbf{p}}} = \overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} = 2$$

Como por exemplo

$$\hat{\overline{\mathbf{p}}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \end{bmatrix}, \hat{\overline{\mathbf{p}}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}, \hat{\overline{\mathbf{p}}} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \hat{\overline{\mathbf{p}}} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}, etc...$$

Então, qualquer par de parâmetros $\hat{p}_1$ e $\hat{p}_2$ que caem sobre esta curva de isovalor zero é uma possível solução particular que minimiza a função-objeto Q . A Figura 2 mostra claramente que há infinitas soluções para o nosso simplificado problema em questão. Portanto, não há unicidade da solução.

Neste problema em questão temos dois parâmetros a serem estimados (M=2) a partir de uma única observação (N=1). Temos um espaço nulo com dimensão um (M - r =1) cujo vetor solução nula é $\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{1}}^{\mathbf{null}} = \alpha_i \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Já vimos que em um dado problema inverso a solução geral é dada por

$$\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}} = \overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} + \sum_{\mathbf{i}=\mathbf{1}}^{\mathbf{M-r}} \alpha_i \overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{i}}^{\mathbf{null}} \quad .$$

Veja que se escolhermos qualquer solução particular, ou seja, qualquer par de parâmetros que caem na isolinha zero, por exemplo, $\overline{\mathbf{p}}^{*}_{\mathbf{particular}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \end{bmatrix}$ e se somarmos a esta solução particular uma solução nula, por exemplo $\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{1}}^{\mathbf{null}} = \alpha_i \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$ temos:

$$\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Portanto, obtemos um vetor solução geral $\overline{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$ que também é uma possível solução deste problema porque está sobre a linha de isovalor zero (mínimo da função-obeto Q) na Figura 2. Note que para qualquer escolha de α do vetor soluço nula ($\bar{\mathbf{p}}_1^{\mathbf{null}} = \alpha_i \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$) teremos outras soluções $\bar{\mathbf{p}}_{\mathbf{geral}}$ que também é uma solução para o problema de minimizar a função-objeto Q .

<u>O processo de estabilização visto como um processo de procura de um lugar geométrico no espaço dos parâmetros próximo a um ponto muito bem definido</u>

Apresentamos o problema inverso linear de estimar dois parâmetros a partir de uma única observação via estimador dos mínimos quadrados

$$\min_{\bar{\mathbf{p}}} \{ Q \} = \min_{\bar{\mathbf{p}}} \left\| \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} - \bar{\mathbf{y}}^{c} \right\|_2^2$$

em que $\bar{\mathbf{y}}^{c}$ é um vetor N-dimensional dos dados ajustados ou calculados segundo o modelo interpretativo:

$$\bar{\mathbf{y}}^{c} = \bar{\bar{\mathbf{A}}}\,\bar{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix}$$

Consideramos que a única observação deste problema é $y_1^o = 2$, o que levou a minimizarmos a seguinte função-objeto Q :

$$\min_{\bar{\mathbf{p}}} \{ Q \} = \min_{\bar{\mathbf{p}}} \left\{ \left[2 - \frac{1}{2} (p_1 + p_2) \right]^2 \right\}$$

A Figura 2 ilustra esta função Q e mostra a existência de uma curva de mínimos (isolinha zero) , caracterizando portanto a existência de infinitas soluções $\hat{\mathbf{p}}$ (soluções de mínimos quadrados). Em outras palavras, caracterizando a não unicidade da solução estimada. A falta de unicidade da solução caracteriza um problema inverso como um problema mal-posto então perguntamos:

Como transformar este problema mal-posto em bem-posto?

Veja que se procurarmos uma estimativa dos parâmetros que além de minimizar a função Q esteja próximo de um "*ponto*" bem definido no espaço dos parâmetros, a solução estimada é única e o problema inverso transforma-se em um problema bem-posto.

Geometricamente, este conceito pode ser visualizado usando a função objeto Q a ser minimizada que apresentamos na Figura 2. A Figura 3 (reprodução da Figura 2) mostra que há infinitas soluções $\hat{\mathbf{p}}$ que minimizam a função Q (isolinha zero). Note, no entanto, que há apenas uma única solução que minimiza Q e está próxima ao vetor $\bar{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ (ponto $\bar{\mathbf{p}}_0$ assinalado na Figura 3) e esta solução é $\hat{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$. Mais adiante mostraremos que esta solução é a estimativa via Mínimos Quadrados Subdeterminado (MQ SUB) e provaremos que apesar de garantir a unicidade da solução quando r=N o estimador MQ SUB não garante a estabilidade da solução.

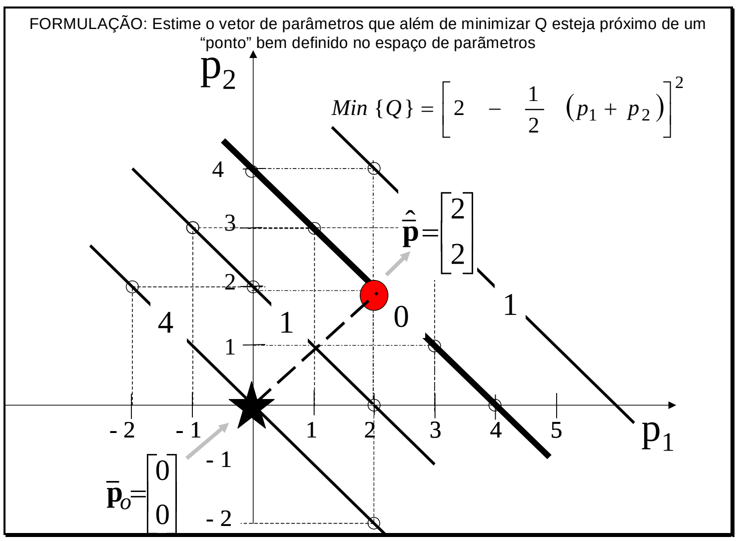

Figura 3

Em resumo, introduzimos o conceito matemático do espaço nulo de um operador matricial e mostramos que a existência M-r vetores soluções nulas caracteriza um problema mal-posto, uma vez que não há unicidade da solução estimada. Podemos dizer então que a existência de soluções não triviais é a essência da não unicidade da solução. A falta de unicidade da solução estimada foi exemplificada graficamente num problema simplificado cujo espaço nulo da matriz é um espaço R^1. Neste exemplo (Figura 2) visualizamos a função-objeto Q (*norma Euclideana mínima dos resíduos*) no espaço dos parâmetros (p1-p2) e mostramos que a existência do espaço nulo implica na existência de infinitas possíveis soluções (não unicidade), uma vez que o mínimo desta função está representado por curvas de isovalores abertas no espaço de parâmetros. O processo de transformar um problema sem unicidade da solução (mal-posto) em um problema com solução única (bem-posto) é visto como um processo a procura de uma solução que ao mesmo tempo explique os dados geofísicos observados e que esteja próximo de um ponto bem definido no espaço dos parâmetros.