Regularização de um problema não linear

Prof. André L. A. dos Reis

Rio de Janeiro 2022

Objetivos da aula

* Como regularizar um problema não-linear;

* O problema visto de um ponto de vista matemático;

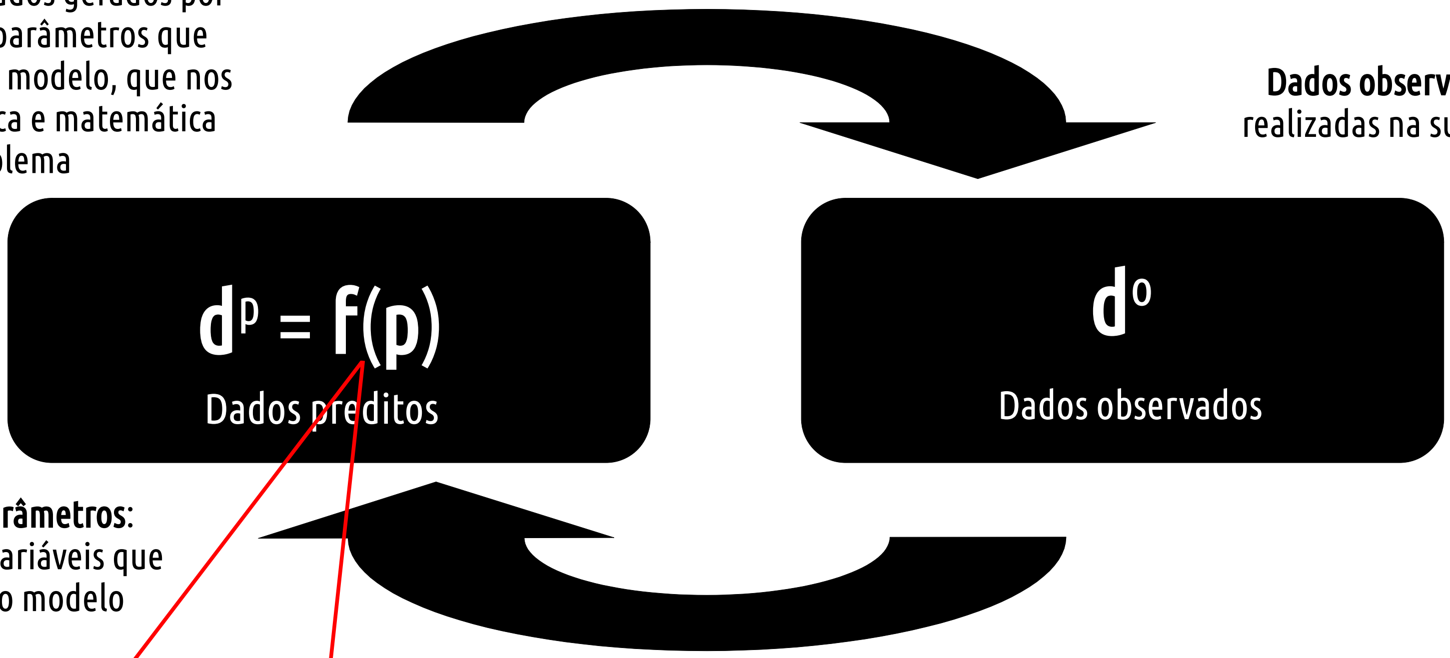
* Como escolher o parâmetro de regularização (problemas lineares e não-lineares).

Como regularizar o problema não linear?

Modelagem direta: sintoniza manualmente o conjunto de parâmetros e compara com os dados observados

Dados preditos: dados gerados por um conjunto de parâmetros que descrevem o nosso modelo, que nos traz a relação física e matemática do problema

Dados observados: medições realizadas na superfície da Terra



Vetor de parâmetros: conjunto de variáveis que descrevem o modelo

Problema inverso: estima automaticamente o conjunto de parâmetros a partir dos dados observados

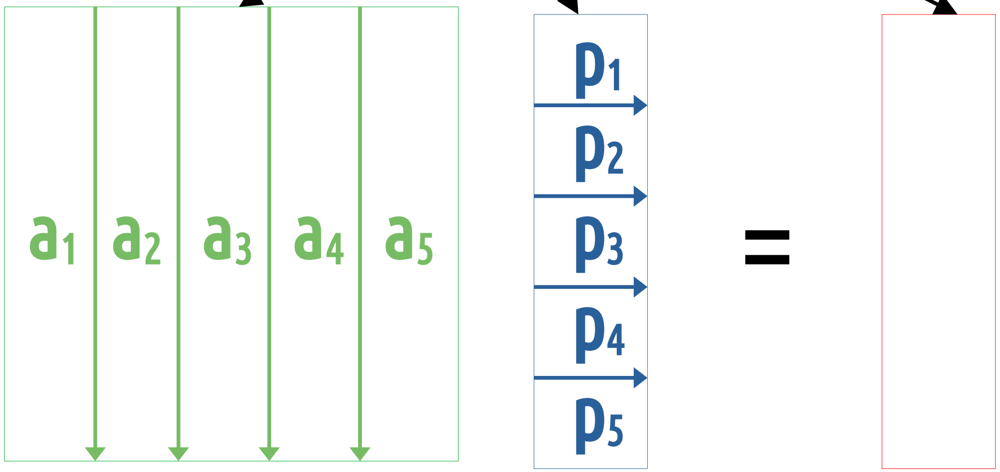
Linear

Não-linear

Sistemas lineares (caso linear)

$$(G^T G)p^{\#} = G^T d^o$$

$$Ap = t$$



Sistemas lineares (caso linear)

$$(G^TG)p^\# = G^T d^o$$

$$Ap = t$$

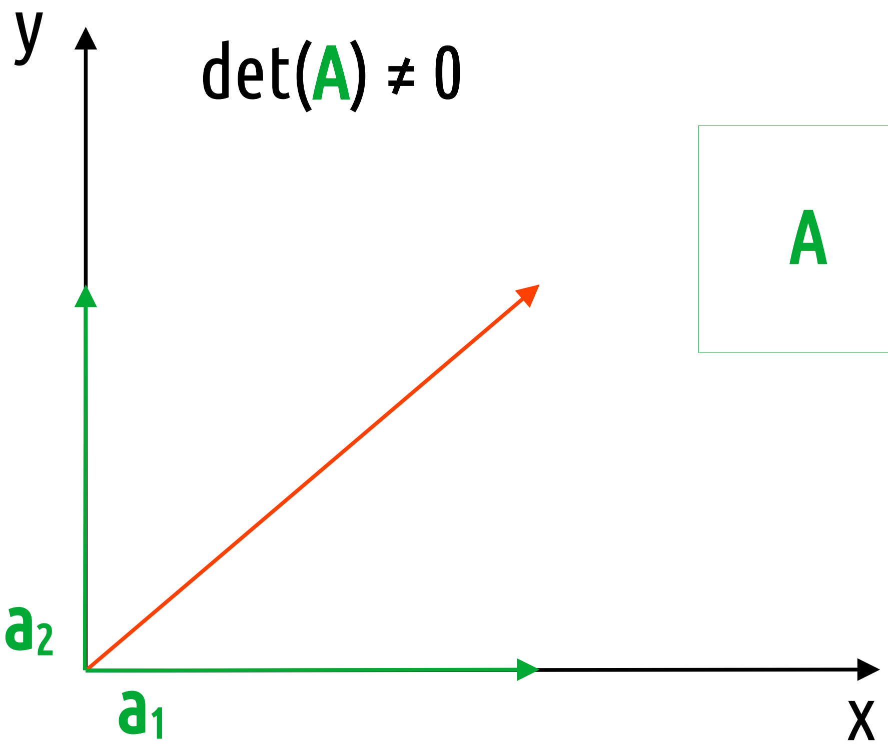
O vetor em vermelho é combinação linear dos vetores em verde

A **dependência linear** entre os vetores em verde nos dá uma pista do **condicionamento deste sistema linear**

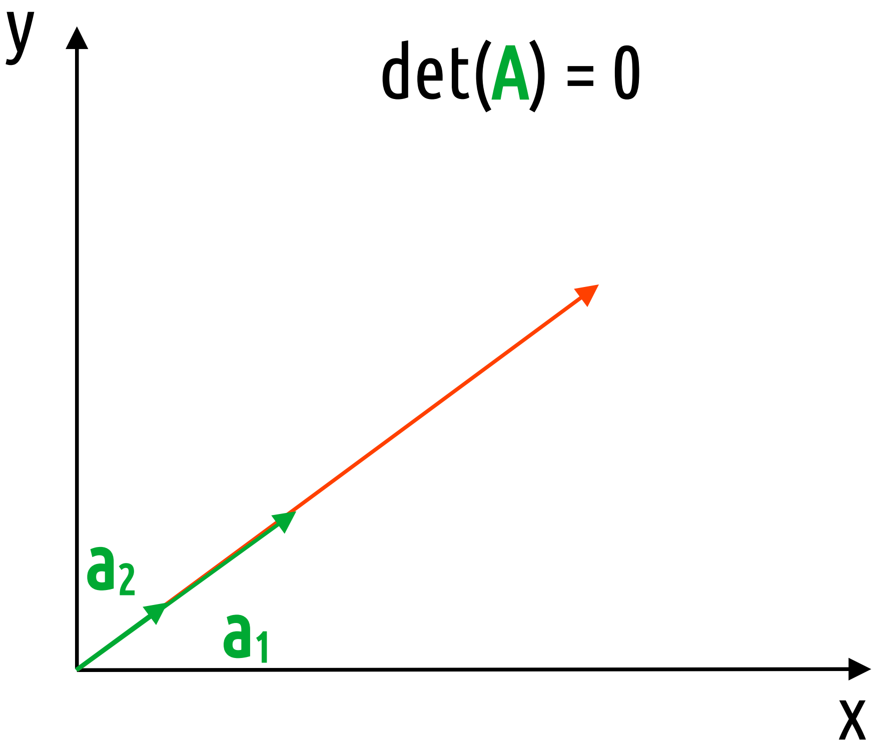
$$\boxed{p_1}\, a_1 + \boxed{p_2}\, a_2 + \boxed{p_3}\, a_3 + \boxed{p_4}\, a_4 + \boxed{p_5}\, a_5 = \boxed{}$$

Sistemas lineares (caso linear)

Exemplo em 2D



$$A \, p = t$$



Neste caso diz-se que o sistema linear é mal-condicionado

Regularização de Tikhonov de Ordem Zero (ou Norma Mínima)

$$\Phi(\mathbf{p}) = \psi(\mathbf{p}) + \mu\theta(\mathbf{p})$$

Função Objetivo

$$\theta(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^T\mathbf{p}$$

Função regularizadora

$$(\mathbf{G}^T\mathbf{G} + \mu\mathbf{I})\mathbf{p}^{\#} = \mathbf{G}^T\,\mathbf{d}^o$$

Estimador de mínimos quadrados regularizado
(Norma mínima)

Regularização de Tikhonov de Ordem Um (ou Suavidade)

$$\Phi(\mathbf{p}) = \psi(\mathbf{p}) + \mu\theta(\mathbf{p})$$

Função Objetivo

$$\theta(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^T\mathbf{R}^T\mathbf{R}\mathbf{p}$$

Função regularizadora

$$(\mathbf{G}^T\mathbf{G} + \mu\mathbf{R}^T\mathbf{R})\mathbf{p}^{\#} = \mathbf{G}^T\,\mathbf{d}^o$$

Estimador de mínimos quadrados regularizado
(Suavidade)

A regularização tem como objetivo tornar bem condicionadas as matrizes envolvidas nas soluções dos **problemas lineares** e **não lineares**

Como regulariza?

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_M \end{bmatrix}$$

Vetor de parâmetros

$$\mathbf{d}^p = \begin{bmatrix} d_1^p \\ \vdots \\ d_N^p \end{bmatrix}$$

Vetor de dados preditos

$$\mathbf{d}^o = \begin{bmatrix} d_1^o \\ \vdots \\ d_N^o \end{bmatrix}$$

Vetor de dados observados

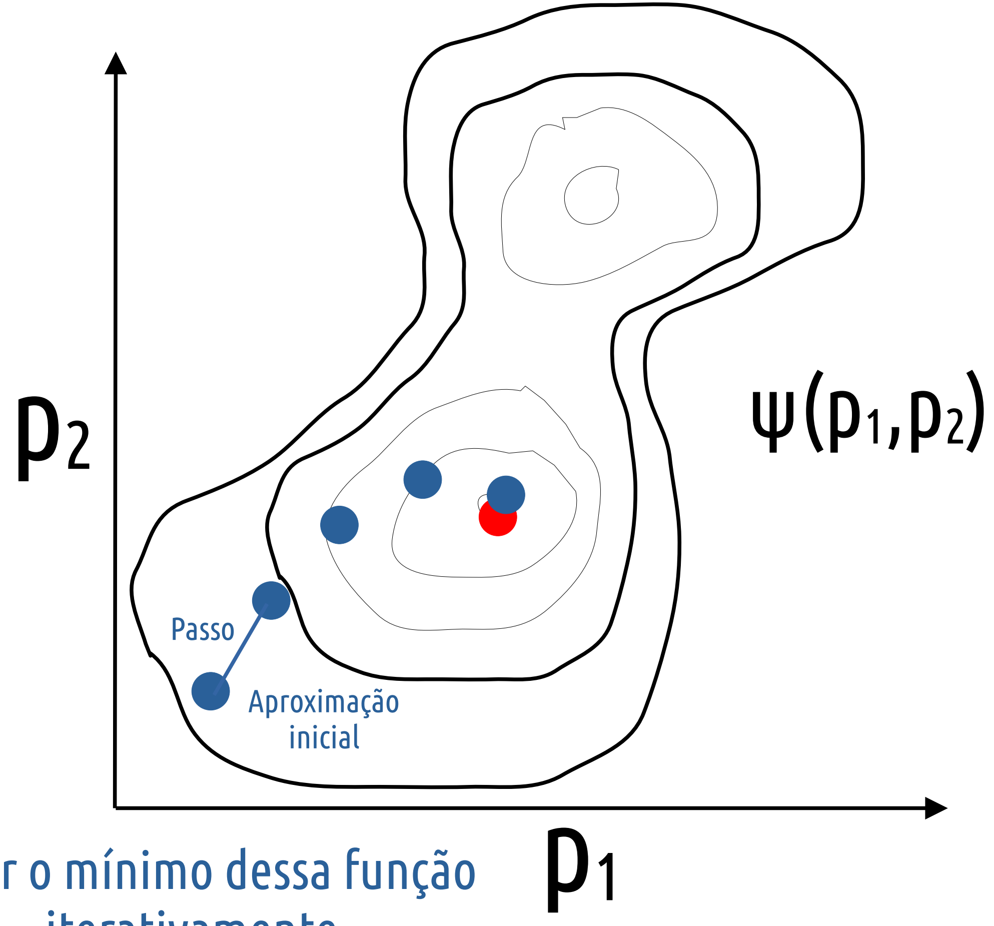
$$\nabla\psi(\mathbf{p}) = \mathbf{0}$$

O gradiente da função de ajuste

$$\psi(\mathbf{p}) = \|\mathbf{d}^o - \mathbf{d}^p\|_2^2$$

Função de ajuste

Curvas de nível



Achar o mínimo dessa função iterativamente

Como regulariza?

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_M \end{bmatrix}$$

Vetor de parâmetros

$$\mathbf{d}^p = \begin{bmatrix} d_1^p \\ \vdots \\ d_N^p \end{bmatrix}$$

Vetor de dados preditos

$$\mathbf{d}^o = \begin{bmatrix} d_1^o \\ \vdots \\ d_N^o \end{bmatrix}$$

Vetor de dados observados

$$\nabla \psi(\mathbf{p}) = \mathbf{0}$$

O gradiente da função de ajuste

$$\psi(\mathbf{p}) = ||\mathbf{d}^o - \mathbf{d}^p||_2^2$$

Função de ajuste

Problema linear

$$\mathbf{d}^p = \mathbf{G}\mathbf{p}$$

$$(\mathbf{G}^T\mathbf{G})\mathbf{p}^\dagger = \mathbf{G}^T\mathbf{d}^o$$

Estimador de mínimos quadrados

Problema não-linear

$$\mathbf{d}^p \neq \mathbf{G}\mathbf{p}$$

$$\left[\mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{G}(\mathbf{p}_0)\right]\boldsymbol{\Delta}\mathbf{p} = \mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{r}$$

Método de Gauss-Newton

O termo de regularização

Resolver esta equação :

Problema não-linear

$$\mathbf{d}^p \neq \mathbf{G}\mathbf{p}$$

$$\left[\mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{G}(\mathbf{p}_0)\right]\Delta\mathbf{p} = \mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{r}$$

Método de Gauss-Newton

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}_0)\Delta\mathbf{p} = -\mathbf{J}(\mathbf{p}_0)$$

Função Objetivo :

$$\Phi(\mathbf{p}) = ||\mathbf{d}^o - \mathbf{f}(\mathbf{p})||^2 + \mu||\mathbf{p}||^2$$

Tikhonov Ordem Zero :

$$[\mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{G}(\mathbf{p}_0) + \mu\mathbf{I}]\Delta\mathbf{p} = \mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)^T\mathbf{r} - \mu\mathbf{p}_0$$

Basta calcularmos a hessiana e o gradiente!

O termo de regularização

Problema não-linear

$$\mathbf{d}^p \neq \mathbf{G}\mathbf{p}$$

$$\left[\mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{G}(\mathbf{p}_0)\right]\Delta\mathbf{p} = \mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{r}$$

Método de Gauss-Newton

Resolver esta equação :

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}_0)\Delta\mathbf{p} = -\,\mathbf{J}(\mathbf{p}_0)$$

Função Objetivo :

$$\Phi(\mathbf{p}) = ||\mathbf{d}^o - \mathbf{f}(\mathbf{p})||^2 + \mu||\mathbf{R}\mathbf{p}||^2$$

Tikhonov Ordem Um :

$$[\mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)\mathbf{G}(\mathbf{p}_0) + \mu\mathbf{R}^T\mathbf{R}]\Delta\mathbf{p} = \mathbf{G}^T(\mathbf{p}_0)^T\mathbf{r} - \mu\mathbf{R}^T\mathbf{R}\mathbf{p}_0$$

Basta calcularmos a hessiana e o gradiente!

Até breve!