

# Um estudo numérico sobre técnicas de regularização diretas e iterativas

**Altemir José Borges,**

UTFPR - Departamento Acadêmico de Matemática  
Campus Curitiba  
80230-901, Curitiba, PR  
E-mail: altemirborges@utfpr.edu.br,

**Fermín S. V. Bazán**

UFSC - Departamento de Matemática  
Campus Trindade  
88040-900, Florianópolis, SC  
E-mail: fermin@mtm.ufsc.br.

**Resumo:** *Este trabalho apresenta alguns métodos diretos e iterativos mais comumente utilizados para resolver problemas mal condicionados, focando diferentes estratégias de escolha do parâmetro de regularização. Tais métodos serão simplificada e aplicados na resolução de alguns problemas teste da literatura.*

**Palavras-chave:** *Regularização de Tikhonov, Regularização iterativa, problema de mínimos quadrados.*

## 1 Introdução

Neste trabalho serão apresentados alguns métodos diretos e iterativos mais comumente utilizados na resolução de problemas provenientes de aplicações práticas. Tais problemas podem ser divididos em problemas diretos e problemas inversos. Os problemas diretos necessitam que se tenha um conhecimento total e rigorosamente preciso de todas as causas para a determinação dos efeitos. Por exemplo, aqueles problemas que buscam determinar a solução de uma equação polinomial, a deformação máxima da linha elástica de um viga simplesmente apoiada sujeita a um determinado carregamento ou, ainda, a quantidade de um medicamento a ser ministrada para o tratamento de determinada doença.

Já os problemas inversos consistem em encontrar uma propriedade desconhecida de um objeto, a partir da observação de uma resposta desse objeto. Por exemplo, a determinação das superfícies potenciais epicárdicas a partir das superfícies potenciais do tronco, que constitui o problema inverso do eletrocardiograma (ECG), conforme De Pierro [7] ou, ainda, a compreensão dos processos fisiológicos dentro do corpo humano, que constitui um exame não invasivo denominado de Tomografia computadorizada por emissão (ECT), segundo Jiang em [5].

Uma característica típica dos problemas inversos é que eles são mal postos no sentido de Hadamard, em [3]. Num problema mal posto, a solução é muito sensível a pequenas variações nos dados de entrada. A tomografia é um típico problema mal posto, pois uma pequena variação nos dados produz uma grande variação na solução.

Neste trabalho, será abordada a solução numérica de sistemas lineares

$$Ax = b, \tag{1}$$

ou a solução do problema de mínimos quadrados

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2, \quad b \in \mathbb{R}^m, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad m \geq n, \quad (2)$$

onde assume-se que a matriz  $A$  provém da discretização de problemas mal postos e portanto possui um grande número de condição, e o vetor  $b$  é da forma  $b = b_{\text{exato}} + e$  onde  $e$  é um vetor de incertezas e ambos  $b_{\text{exato}}$  e  $e$  são desconhecidos. Ou seja, a matriz  $A$  é muito mal condicionada e a solução do problema (1) ou (2) é muito sensível a pequenas perturbações nos dados de entrada.

A resolução estável desses problemas é baseada nos chamados métodos de regularização. O objetivo de qualquer método de regularização é determinar uma solução aproximada que seja compatível com os dados de entrada e que preserve a maior quantidade possível de informações da solução do problema original.

Um método de regularização usual é aquele devido a Tikhonov e Arsenin. Neste método, o problema (2) é substituído por

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} (\|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2), \quad (3)$$

onde  $\lambda > 0$  é conhecido como parâmetro de regularização. Para obter uma solução significativa para o problema (2) deve-se escolher um parâmetro de regularização que realize um equilíbrio entre a norma do resíduo e a norma da solução. Se o valor do parâmetro  $\lambda$  for muito grande, a norma do resíduo será muito sensível a pequenas variações de  $\lambda$ , enquanto a norma da solução será praticamente constante. Já, se  $\lambda$  for um valor muito pequeno, mudanças na norma da solução ocorrerão muito mais rapidamente do que na norma do resíduo.

Uma outra alternativa para a resolução estável dos problemas de interesse é aplicar técnicas de regularização iterativa. A idéia básica neste caso é usar um método iterativo clássico tais como Gradientes conjugados, LSQR, SOR, etc, e parar as iterações quando a qualidade das iteradas começa a incorporar componentes do ruído nos dados, conforme o critério de parada proposto por Morigi et al [6]. Alguns destes métodos (diretos e iterativos), serão detalhados nas seções a seguir.

## 2 Métodos diretos

### 2.1 Método da discrepância

O método da discrepância ou critério de Morozov é, segundo Hansen [3], o método mais difundido baseado na norma do vetor perturbação,  $\|e\|_2 = \|b - b_{\text{exato}}\|_2$ , para escolha do parâmetro de regularização. Se o problema é consistente no sentido que  $Ax_{\text{exato}} = b_{\text{exato}}$  vale exatamente, então a escolha do parâmetro de regularização segundo Morozov é o valor de  $\lambda$  que satisfaz a equação

$$\|Ax_\lambda - b\|_2 = \delta_e, \quad \text{com} \quad \|e\|_2 \leq \delta_e.$$

Isto é, a norma do resíduo deve ser igual a um limite superior  $\delta_e$  para  $\|e\|_2$ . O parâmetro  $\lambda$  satisfazendo a equação acima é determinado através do método de Newton para equações não lineares conforme citado por Hansen em [3].

Quando uma boa estimativa é conhecida para  $\|e\|_2$ , este método produz um parâmetro de regularização que permite construir boas soluções regularizadas.

### 2.2 GCV

A GCV (*Generalized cross-validation*) é um método muito popular e bem sucedido utilizado para a escolha do parâmetro de regularização. Ele tem um caráter de previsão que procura minimizar o erro quadrático médio  $\|Ax_\lambda - b_{\text{exato}}\|_2$ . Desde que  $b_{\text{exato}}$  é desconhecido, o método GCV trabalha preferencialmente com a função GCV, dada por

$$\mathcal{G}(\lambda) = \frac{\|Ax_\lambda - b\|_2^2}{\text{trace}(I_m - A.A^\#)^2},$$

onde  $A^\#$  é chamada de inversa regularizada e é definida pela expressão  $A^\# = VF\Sigma^\dagger U^T$ , sendo  $F = \text{diag}(f_1, \dots, f_n)$  o conjunto de fatores de filtro de Tikhonov, dados por

$$f_i = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \simeq \begin{cases} 1, & \sigma_i \gg \lambda \\ \sigma_i^2/\lambda^2, & \sigma_i \ll \lambda \end{cases}$$

Assim a solução regularizada  $x_{reg}$  pode ser escrita como  $x_\lambda = A^\#b$  e o parâmetro de regularização proposto pelo método é aquele que minimiza a função  $\mathcal{G}(\lambda)$ .

### 2.3 Quasi-Optimality

O método *Quasi-Optimality* tem como objetivo escolher o parâmetro de regularização baseado na estimativa do erro dada por

$$\|x_{exato} - x_\lambda\|_2 = \left( b^T (AA^T + \lambda I_m)^{-4} AA^T \right)^{1/2}.$$

Conforme Hansen [3], a minimização desta estimativa conduz ao problema de minimizar a função

$$\mathcal{Q}(\lambda) = \left\| \lambda^2 \frac{dx_\lambda}{d(\lambda^2)} \right\|_2 = \frac{1}{2} \left\| \lambda \frac{dx_\lambda}{d(\lambda)} \right\|_2 = \left( \sum_{i=1}^p \left( f_i(1 - f_i) \frac{u_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \right)^{1/2}.$$

Por conseguinte o valor de  $\lambda$  procurado é aquele que minimiza a função  $\mathcal{Q}(\lambda)$ , que na prática não é de fácil determinação pelo fato que tal função geralmente admite vários mínimos locais.

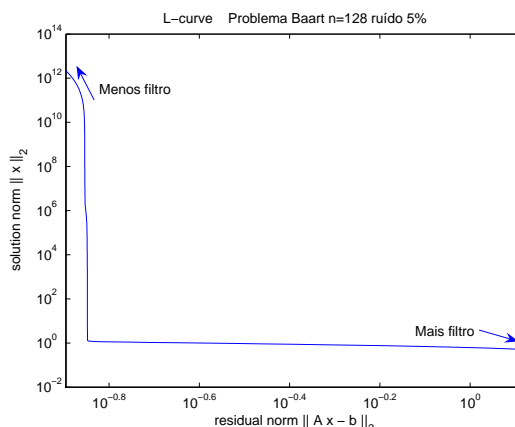


Figura 1: Curva-L referente ao problema Baart com  $n=128$  e 5% de erro relativo no vetor  $b$ .

### 2.4 Curva L

A curva L, ilustrada pela figura (1), é um gráfico bi-log da norma do resíduo  $\|Ax - b\|_2^2$  pela norma do termo de regularização  $\|x\|_2^2$ . O método consiste em obter, a partir do gráfico da curva L, um adequado parâmetro de regularização. Hansen em [3], faz as seguintes observações sobre o comportamento da curva L:

- na parte vertical da curva, pequenas mudanças em  $\lambda$  correspondem a variações muito grandes da solução regularizada e a pouquíssimas mudanças na norma do resíduo,
- na parte horizontal, grandes valores de  $\lambda$  correspondem a lentas variações na norma da solução regularizada e a grandes alterações na norma do resíduo.

Disso conclui-se que uma razoável solução regularizada poderia ocorrer na vizinhança do "canto" da curva L. A proposta do método da curva L é selecionar o parâmetro  $\lambda$  que minimiza a curvatura da curva L, definida por

$$\kappa(\lambda) = \frac{\hat{\rho}'\hat{\eta}'' - \hat{\rho}''\hat{\eta}'}{((\hat{\rho}')^2 + (\hat{\eta}')^2)^{3/2}},$$

onde  $\hat{\eta} = \log \|Ax_\lambda - b\|_2$  e  $\hat{\rho} = \log \|x_\lambda\|_2$ .

## 2.5 Método de ponto fixo

Este método, proposto por Bazán em [2], tem como objetivo determinar o minimizador  $\lambda^*$  da função

$$\psi_\mu(\lambda) = \|b - Ax_\lambda\|_2^{2\mu} \|x(\lambda)\|_2^2, \quad (4)$$

com  $\mu > 0$ , definida por Regińska em [8] em seu estudo sobre a curva L. Objetivamente, o método de ponto fixo determina o minimizador  $\lambda^*$  através de uma sequência de ponto fixo do tipo

$\lambda_0$ : Aprox. inicial

$$\lambda_{k+1} = \phi(\lambda_k), \quad k = 0, \dots,$$

onde  $\phi(\lambda_k) = \sqrt{\mu} \frac{\|Ax_{\lambda_k} - b\|_2}{\|x_{\lambda_k}\|_2}$ .

## 3 Métodos Iterativos

### 3.1 LSQR

O LSQR (*least squares QR*) é um método iterativo de regularização que está apoiado na fatoração QR e no método de Lanczos para a resolução dos problemas (1) ou (2), quando a matriz  $A$  é grande e esparsa. Resumidamente, a idéia do método LSQR é construir em cada iteração uma solução aproximada  $x_k$  através da resolução do subproblema

$$x_k = \arg \min_{x \in \mathcal{K}_k} \|b - Ax\|_2^2,$$

onde  $\mathcal{K}_k(A^T A, A^T b) = \text{span}\{A^T b, (A^T A)A^T b, \dots, (A^T A)^{k-1}A^T b\}$ . Na prática a minimização acima é substituída por um processo recursivo baseado na bidiagonalização de Lanczos e na fatoração QR.

### 3.2 GMRES

O GMRES (*generalized minimal residual*), proposto por Saad e Schultz (1986), é um método iterativo utilizado para resolver o sistema de equações lineares  $Ax = b$ , com  $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ , não singular, e  $b \in \mathbb{R}^m$ . Basicamente este método aproxima a solução  $x$  de  $Ax = b$  por um vetor  $x_n$  pertencente ao subespaço de Krylov,  $\mathcal{K}_n(A, b)$ , de modo que  $x_n$  minimize a norma do resíduo  $r_n = b - Ax_n$ .

Desta maneira o problema  $Ax = b$  reduz-se na determinação de um vetor  $c \in \mathbb{R}^n$  tal que  $\|AK_n c - b\|$  seja mínimo, o que pode ser feito utilizando a fatoração QR de  $Ak_n$ . Determinado o valor do vetor  $c$ , chega-se a  $x_n = K_n c$ .

## 4 Resultados numéricos e conclusões

A aplicação dos métodos anteriormente citados a alguns problemas teste apresentados por Hansen em Regularization Tools [4], levam a conclusões sobre a vantagem ou desvantagem de um dos métodos em relação aos outros. Por exemplo, ilustramos aqui a eficiência dos métodos de regularização diretos e iterativos na resolução do problema teste *Deriv2*, para uma matriz  $A \in \mathbb{R}^{256 \times 256}$  e com um nível de ruído relativo no vetor  $b$  igual a 5%. Nos métodos diretos, figuras (2), (4) e (4), a determinação dos parâmetros de regularização foi feita usando rotinas do pacote Regularization Tools [4]. Nos métodos iterativos, figura (3), o critério de parada utilizado foi o proposto por Morigi et al [6]. A tabela (1), onde Iter representa o número de iterações utilizado, apresenta a comparação dos resultados obtidos pelo métodos aplicados.

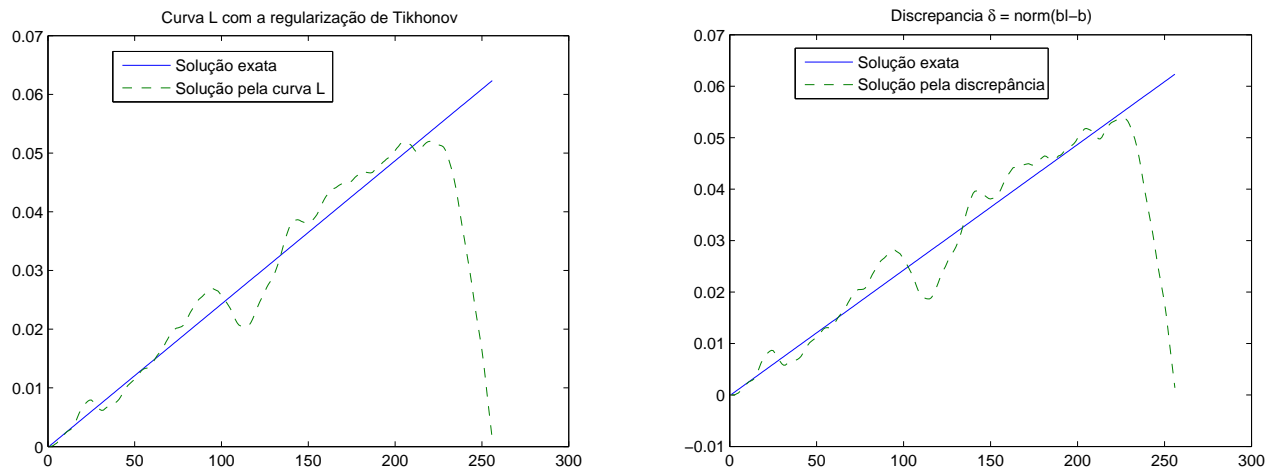


Figura 2: Curva L com a regularização de Tikhonov (esquerda), Discrepância (direita), problema Deriv2 com  $n=256$ , ruído relativo=5%.

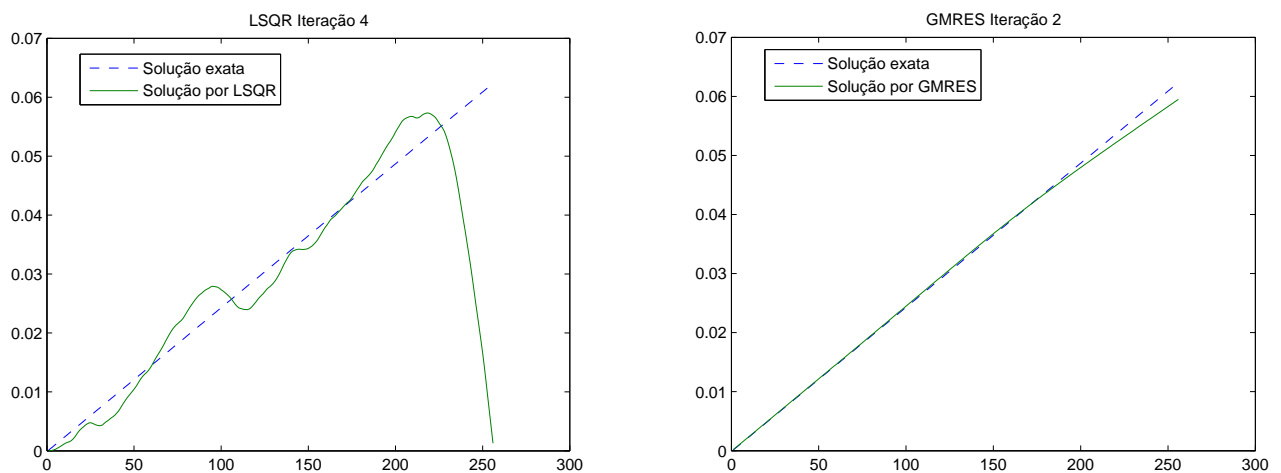


Figura 3: LSQR (esquerda), GMRES (direita), problema Deriv2 com  $n=256$ , ruído relativo=5%.

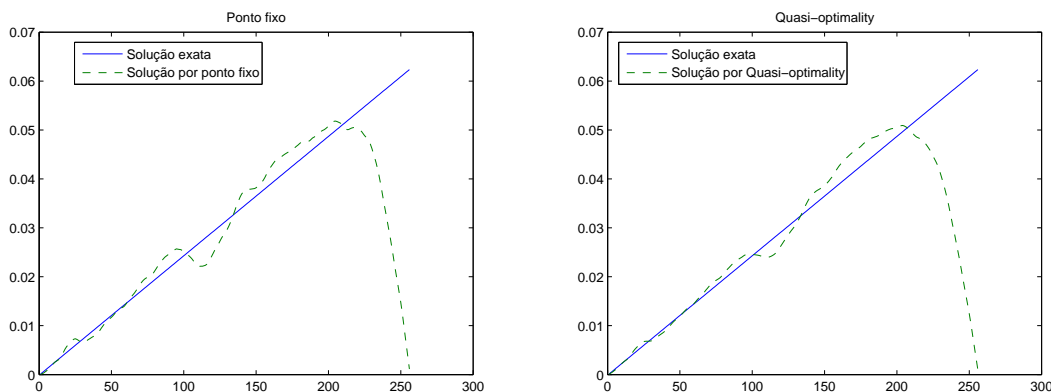


Figura 4: Ponto fixo (esquerda), Quasi-optimality (direita), problema Deriv2 com  $n=256$ , ruído relativo=5%.

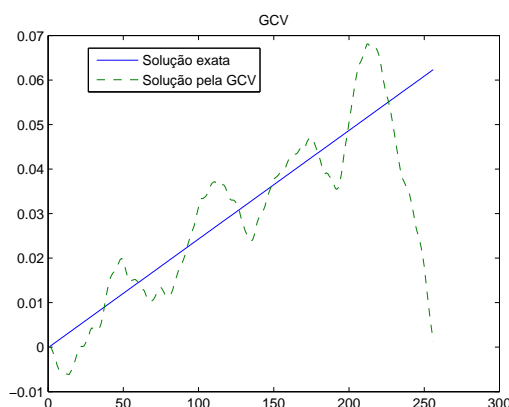


Figura 5: GVC, problema Deriv2 com  $n=256$ , ruído relativo=5%.

	Curva-L	Discrep.	LSQR	GMRES	Ponto fixo	Quasi-opt	GCV
$\ x_{exato}\ $	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773
$\ x\ $	0.5235	0.5276	0.5348	0.5680	0.5183	0.5099	0.5447
$\ Ax - b\ $	5.4360e-4	4.8322e-4	3.4992e-4	1.9713e-4	6.4207e-4	8.4976e-4	3.9398e-4
$\lambda$	0.0037326	0.0023	-	-	0.0043	0.0060015	0.0020545
Iter	-	-	4	2	-	-	-

Tabela 1: Comparação dos resultado dos métodos da curva-L, discrepância, GCV, LSQR, GMRES, ponto fixo e quasi-optimality para o problema Deriv2. O lado direito contém 5% de erro relativo.

Baseado nas figuras (2), (3), (4) e (5) e na tabela (1), pode-se concluir que o método GMRES é o que fornece uma solução mais adequada para o problema Deriv2. Este estudo foi feito também para os problemas testes Foxgood, Heat, Phillips, Shaw e Wing, com níveis de ruído no vetor de dados  $b$  de 1% e 5%, com as seguintes conclusões:

- No problema Foxgood, os métodos da curva L, da discrepância, do LSQR, do ponto fixo e da *quasi-optimality* geraram soluções muito próximas da solução exata. Sendo que o método da discrepância teve a solução gerada mais próxima da solução exata, independente do nível de ruído.
- No problema teste Heat, observou-se que o parâmetro de regularização gerado pelo método *quasi-optimality* foi muito maior, na ordem de  $e+015$ , do que os parâmetros gerados pelos outros métodos, fazendo com que a solução procurada, tivesse uma norma muito grande,

gerando assim uma solução totalmente diferente da solução exata. Os métodos diretos geraram soluções próximas da solução exata, sendo que o aumento do nível de ruído, reduziu a qualidade das soluções. Já, em relação ao *quasi-optimality*, o aumento no ruído, de 1% para 5%, fez com que o parâmetro de regularização tenha se tornado próximo aos outros métodos diretos, ou seja, houve melhora na solução gerada. Com respeito aos métodos iterativos, a solução gerada pelo LSQR foi próxima da solução exata, mas teve sua qualidade reduzida com o aumento do ruído em  $b$ .

- No problema teste Phillips, para um nível de ruído igual a 1%, os métodos da discrepância e *quasi-optimality* tiveram soluções muito próximas da solução exata. Com o aumento do ruído, todos os métodos utilizados, diretos e iterativos, tiveram a solução calculada com uma qualidade diminuída e isto ocorreu especialmente para o método GCV que, pelo fato de ter um parâmetro de regularização aproximadamente 10 vezes menor que o parâmetro dos outros métodos, gerou uma solução nada próxima da solução exata.
- No problema teste Shaw, a solução mais próxima da solução exata foi encontrada pelo método iterativo LSQR para um ruído relativo de 1%. Para o ruído de 5% todos os métodos testados produziram soluções de pior qualidade quando comparadas com as soluções obtidas com 1% de ruído.
- Para o problema teste Wing, nenhum dos métodos testados chegou a uma solução próxima da solução exata, independente do nível de ruído.

Por limitação de espaço, os gráficos que dão embasamento às conclusões aqui relatadas serão apresentados numa versão estendida.

## Referências

- [1] F. S. V. Bazán, Juliano B. Francisco, *An improved fixed-point algorithm for determining the Tikhonov regularization parameter*. Inverse Problems, 2009.
- [2] F. S. V. Bazán, *Fixed-point Iterations in Determining the Tikhonov Regularization Parameter*. Inverse Problems, vol. 24, p.035001-035001, 2008.
- [3] P. C. Hansen, *Rank-Deficient and Discret Ill-Posed Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1997.
- [4] P. C. Hansen, *Regularization Tools Version 4.0 for Matlab 7.3*. Numerical Algorithms, 2007, pp. 189-194.
- [5] M. Jiang, L. Xia and G. Shou, *Combining regularization frameworks for solving the electrocardiography inverse problem*. Communications in Computer and Information Science, vol. 2, pp. 1210-1219, 2007.
- [6] S. Morigi, L. Reichel, F. Sgallari e F. Zama, *Iterative methods for ill-posed problems and semiconvergent sequences*. J. Comput. Appl. Math., vol. 193, pp. 157-167, 2006.
- [7] Alberto R. de Pierro, *Problemas Matemáticos em Tomografia por Emissão*. Matemática Universitária, v. 41, p. 39-55, 2006.
- [8] Teresa Regińska, *A regularization parameter in discrete ill-posed problems*. SIAM, vol 17, pp. 740-749, 1996.