

Universidade Federal do Paraná
Programa de Pós-Graduação em Geologia

GEOL7048: Tópicos Especiais em Geologia Exploratória II

Métodos semiquantitativos

Saulo P. Oliveira

Departamento de Matemática, Universidade Federal do Paraná



Aula 19

- Sistemas Lineares
- Quadrados mínimos

Sistemas Lineares



Objetivo: Dada uma matriz A de tamanho $m \times n$ e um vetor b de tamanho $m \times 1$, encontre o vetor x de tamanho $n \times 1$ tal que $Ax = b$.

Objetivo: Dada uma matriz A de tamanho $m \times n$ e um vetor b de tamanho $m \times 1$, encontre o vetor x de tamanho $n \times 1$ tal que $Ax = b$.

Em muitos problemas, é suficiente usar o operador \

```
function testasis(n)
tic
A = rand(n);
xver = ones(n,1);
b = A*xver;
x = A\b;
norm(x-xver)/norm(xver)
toc
```

testasis.m

Objetivo: Dada uma matriz A de tamanho $m \times n$ e um vetor b de tamanho $m \times 1$, encontre o vetor x de tamanho $n \times 1$ tal que $Ax = b$.

Em muitos problemas, é suficiente usar o operador \

```
function testasis(n)
tic
A = rand(n);
xver = ones(n,1);
b = A*xver;
x = A\b;
norm(x-xver)/norm(xver)
toc
```

testasis.m

Alternativas para resolver $Ax = b$:

1. Métodos diretos (\ entra aqui)

inversa e pseudo-inversa (`inv()`, `pinv()`)

fatorações LU e Cholesky (`lu()`, `chol()`)

fatoração QR (`qr()`)

fatoração SVD (`svd()`)

Alternativas para resolver $Ax = b$:

1. Métodos diretos (\ entra aqui)

inversa e pseudo-inversa (`inv()`, `pinv()`)
fatorações LU e Cholesky (`lu()`, `chol()`)
fatoração QR (`qr()`)
fatoração SVD (`svd()`)

2. Métodos iterativos

gradientes conjugados (`pcg()`)
resíduos mínimos generalizados (`gmres()`)
LSQR (`lsqr()`)

Sugestões:

- usar as fatorações se precisar resolver $Ax = b$ para vários b
- usar `pcg` se A for “grande”, esparsa (muitos zeros) e simétrica
- usar `lsqr` ou `gmres` se A for “grande” e esparsa (muitos zeros)

Pré-alocação de variáveis



Vamos montar o sistema linear $Ax = b$ com $b = (1, 1, \dots, 1)$ e

$$A = \begin{bmatrix} 99 & 0 & 9 & 0 & 8 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & 99 & 0 & 9 & 0 & 8 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 9 & 0 & 99 & 0 & 9 & 0 & 8 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \ddots & & \ddots & & \ddots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 9 & 0 & 99 & 0 & 9 & 0 & 8 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 9 & 0 & 99 & 0 & 9 & 0 & 8 & 0 & \dots & 1 \\ & & & & & & \ddots & & & & & & \\ & & & & & & & & & & & & \\ 0 & \dots & 1 & \dots & 8 & 0 & 9 & 0 & 99 & 0 & 9 & 0 & 8 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 8 & 0 & 9 & 0 & 99 & 0 & 9 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 8 & 0 & 9 & 0 & 99 & 0 & 9 \\ 0 & & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 8 & 0 & 9 & 0 & 99 & 0 \\ 0 & & & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 8 & 0 & 9 & 0 & 99 \end{bmatrix}$$

Pré-alocação de variáveis



```
clear all
tic
N=1000;
b = ones(N,1);
for i = 1:N
    A(i,i) = 99;
    for k = 1:9
        if(i+2*k<=N)
            A(i,i+2*k) = 10-k;
            A(i+2*k,i) = 10-k;
        end
    end
end
x = A\b;
toc
```

MontaSistema.m

Pré-alocação de variáveis



```
clear all
tic
N=1000; A = zeros(N);
b = ones(N,1);
for i = 1:N
    A(i,i) = 99;
    for k = 1:9
        if(i+2*k<=N)
            A(i,i+2*k) = 10-k;
            A(i+2*k,i) = 10-k;
        end
    end
end
x = A\b;
toc
```

MontaSistema.m

Matrizes esparsas

Experimente trocar $N=1000$ por $N=50000$ no script anterior

Matrizes esparsas

Experimente trocar $N=1000$ por $N=50000$ no script anterior

Tente agora trocar zeros por sparse

Matrizes esparsas

Experimente trocar $N=1000$ por $N=50000$ no script anterior

Tente agora trocar zeros por sparse

Para pré-alocar espaço, tente

```
A = sparse( [], [], [], N, N, 19*N );
```

Matrizes esparsas

Experimente trocar $N=1000$ por $N=50000$ no script anterior

Tente agora trocar zeros por sparse

Para pré-alocar espaço, tente

```
A = sparse( [], [], [], N, N, 19*N );
```

Para visualizar a matriz:

```
>> A(1:5, 1:5)
```

Matrizes esparsas

Experimente trocar $N=1000$ por $N=50000$ no script anterior

Tente agora trocar zeros por sparse

Para pré-alocar espaço, tente

```
A = sparse( [], [], [], N, N, 19*N );
```

Para visualizar a matriz:

```
>> A(1:5, 1:5)
```

```
>> spy(A)
```

Sistemas sobredeterminados geralmente não possuem solução

$$\begin{cases} a + b = 1 \\ -a + b = 0 \\ a + 2b = 0 \end{cases}$$

Quadrados mínimos



Sistemas sobredeterminados geralmente não possuem solução

$$\begin{bmatrix} a + b \\ -a + b \\ a + 2b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



Sistemas sobredeterminados geralmente não possuem solução

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Sistemas sobredeterminados geralmente não possuem solução

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Algumas “quase” soluções:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Sistemas sobredeterminados geralmente não possuem solução

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Algumas “quase” soluções:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



Sistemas sobredeterminados geralmente não possuem solução

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Algumas “quase” soluções:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Qual é a melhor ?

Quadrados mínimos



Sistemas sobredeterminados geralmente não possuem solução

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Algumas “quase” soluções:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Qual é a melhor ?

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{3}{2} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



Interpretação geométrica: Se $f(x) = ax + b$

$$\begin{cases} a + b = 1 \\ -a + b = 0 \\ 2a + b = 0 \end{cases}$$

Quadrados mínimos



Interpretação geométrica: Se $f(x) = ax + b$

$$\begin{cases} a(1) + b = 1 \\ a(-1) + b = 0 \\ a(2) + b = 0 \end{cases}$$

Quadrados mínimos



Interpretação geométrica: Se $f(x) = ax + b$

$$\begin{cases} f(1) = 1 \\ f(-1) = 0 \\ f(2) = 0, \end{cases}$$

ou seja, há uma reta $y = ax + b$ que passa por $(1,1), (-1,0), (2,0)$?

Quadrados mínimos



Interpretação geométrica: Se $f(x) = ax + b$

$$\begin{cases} f(1) = 1 \\ f(-1) = 0 \\ f(2) = 0, \end{cases}$$

ou seja, há uma reta $y = ax + b$ que passa por $(1,1), (-1,0), (2,0)$?

Voltando às “quase” soluções:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



Interpretação geométrica: Se $f(x) = ax + b$

$$\begin{cases} f(1) = 1 \\ f(-1) = 0 \\ f(2) = 0, \end{cases}$$

ou seja, há uma reta $y = ax + b$ que passa por $(1,1), (-1,0), (2,0)$?

Voltando às “quase” soluções:

$$f(x) = \frac{1}{2}x + \frac{1}{2} \quad f(x) = -x + 2 \quad f(x) = 0$$

Quadrados mínimos



Interpretação geométrica: Se $f(x) = ax + b$

$$\begin{cases} f(1) = 1 \\ f(-1) = 0 \\ f(2) = 0, \end{cases}$$

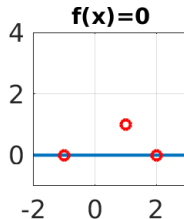
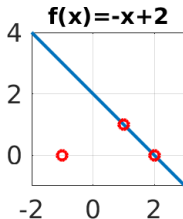
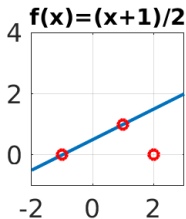
ou seja, há uma reta $y = ax + b$ que passa por $(1,1), (-1,0), (2,0)$?

Voltando às “quase” soluções:

$$f(x) = \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}$$

$$f(x) = -x + 2$$

$$f(x) = 0$$



Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sqrt{(f(1) - 1)^2 + (f(-1) - 0)^2 + (f(2) - 0)^2}$$

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$. Quem é $\mathbf{u}$?

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$. Quem é $\mathbf{u}$?

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} f(1) \\ f(-1) \\ f(2) \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$. Quem é $\mathbf{u}$?

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} a(1) + b \\ a(-1) + b \\ a(2) + b \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$. Quem é $\mathbf{u}$?

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$ e $\mathbf{u} = \mathbf{A}\mathbf{x}$.

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$ e $\mathbf{u} = \mathbf{Ax}$. Em vez de resolver $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, buscamos

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|$$

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$ e $\mathbf{u} = \mathbf{Ax}$. Em vez de resolver $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, buscamos

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|$$

Este é o **problema de quadrados mínimos** (*least-squares problem*).

Quadrados mínimos



A melhor reta $f(x) = ax + b$ é aquela para a qual a distância entre $\mathbf{u} = (f(1), f(-1), f(2))$ e $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ é a menor possível

$$\text{dist}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_2, \quad \|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Note que $\mathbf{v} = \mathbf{b}$ e $\mathbf{u} = A\mathbf{x}$. Em vez de resolver $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, buscamos

$$\min_{\mathbf{x}} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$$

Este é o **problema de quadrados mínimos** (*least-squares problem*).
Pode-se mostrar que a solução deste problema satisfaz

$$A^T A\mathbf{x} = A^T \mathbf{b} \quad (\text{equações normais})$$

Quadrados mínimos



No problema anterior,

$$A^T A x = A^T b$$

Quadrados mínimos



No problema anterior,

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



No problema anterior,

$$\begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Quadrados mínimos



No problema anterior,

$$\begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/14 \\ 74/14 \end{bmatrix}$$

Assim, a melhor reta é $f(x) = x/14 + 4/14$:

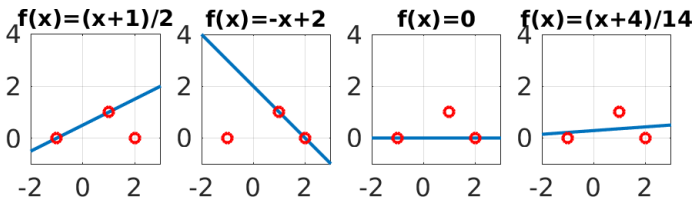
Quadrados mínimos



No problema anterior,

$$\begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/14 \\ 7/14 \end{bmatrix}$$

Assim, a melhor reta é $f(x) = x/14 + 4/14$:



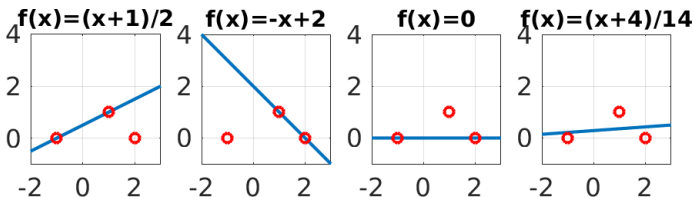
Quadrados mínimos



No problema anterior,

$$\begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/14 \\ 74/14 \end{bmatrix}$$

Assim, a melhor reta é $f(x) = x/14 + 4/14$:



No matlab/octave: `lsqr` e `\`