

Método TLS Truncado para o Problema de Espectroscopia de Ressonância Magnética

Jonathan Ruiz Quiroz

UFSC - Departamento de Matemática
Campus Trindade
88040-900, Florianópolis, SC
E-mail: Jonathan17r@gmail.com.

Fermín S. V. Bazán

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

Resumo: No problema de quadrados mínimos $\min \|Ax - b\|$, com $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, e $b \in \mathbb{R}^m$, é assumido frequentemente que a matriz A é exata e o vetor b é contaminado por erros. Esta hipótese não é sempre realista, pois existem problemas onde a matriz A também é sujeita a erros. Uma maneira de lidar com problemas desta natureza é através de método de Quadrados Mínimos Totais (TLS). Neste trabalho usamos o método TLS para resolver o problema de espectroscopia em ressonância magnética e apresentamos uma comparação de resultados obtidos com o método dos Quadrados Mínimos (LS).

Palavras-chave: SVD, Quadrados mínimos totais, Espectroscopia em Ressonância Magnética

1 Introdução

Problemas que envolvem matrizes contaminadas por ruídos aparecem em áreas das ciências, como biologia, física e engenharia. Nesses casos a técnica de quadrados mínimos pode produzir resultados insatisfatórios. Golub e Van Loan [3] e Van Huffel e Vandewalle [7] desenvolveram uma análise do problema para o caso em que ambos a matriz A e o vetor b contém incertezas e introduziram o método de Quadrados Mínimos Totais. Para entender a filosofia da técnica TLS, é conveniente introduzir a solução do problema de Quadrados Mínimos (LS) dada por

$$x_{LS} = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|.$$

A solução x_{LS} pode ser determinada a través da Descomposição em Valores Singulares (SVD) da matriz A [4]: $A = U\Sigma V^T$, onde $U = [u_1, \dots, u_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V = [v_1, \dots, v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ são matrizes ortogonais e $\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$, onde os números σ_i são os valores singulares de A e são ordenados de modo que $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$. Se o vetor de dados é da forma $b = b_{exato} + e$, com b_{exato} o vetor sem perturbações e e o vetor de incertezas, e $\operatorname{posto}(A) = n$, usando a SVD obtemos

$$x_{LS} = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i. \quad (1.1)$$

Devido à divisão por pequenos valores singulares, a solução x_{LS} pode ser dominada por componentes associadas ao vetor de erros e . Portanto, é necessário estabilizar a solução. Uma maneira de amenizar o efeito da influência do erro na solução é truncando a soma em (1.1) para $s \leq n$ termos:

$$x_{LS}^s = \sum_{i=1}^s \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \quad (1.2)$$

onde s , chamado índice de truncamento, é escolhido de modo que exista um balanço apropriado entre a qualidade da informação do problema que é capturada e a quantidade de erro que é incluída na solução. Este método é conhecido como o método da SVD Truncada (TSVD) [5].

O desenvolvimento da técnica TLS foi motivada por problemas lineares $Ax \approx b$, $m > n$, onde ambos a matriz A e o vetor b são contaminados por erros. Para amenizar a presença dos erros a técnica TLS considera a matriz aumentada $[A \ b]$ e procura por algum vetor não nulo x tal que

$$[A \ b] \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} = 0. \tag{1.3}$$

Obviamente, o problema acima tem solução $x \neq 0$ só quando o espaço nulo da matriz aumentada é distinto do espaço trivial, o que não é satisfeito em geral quando ambos A e b são contaminados por erros. Para contornar esta incompatibilidade a técnica TLS considera a SVD da matriz ampliada

$$[A \ b] = \bar{U} \bar{\Sigma} \bar{V}^T, \tag{1.4}$$

e particiona as matrizes \bar{V} e $\bar{\Sigma}$ como:

$$\bar{V} = [\bar{v}_1, \dots, \bar{v}_{n+1}] = \begin{bmatrix} \bar{V}_{11} & \bar{v}_{12} \\ \bar{v}_{21}^T & \bar{v}_{22} \end{bmatrix}, \quad \bar{\Sigma} = \begin{bmatrix} \bar{\Sigma}_1 & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}_{n+1} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{1.5}$$

em que $\bar{V}_{11}, \bar{\Sigma}_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $\bar{v}_{12}, \bar{v}_{21} \in \mathbb{R}^n$. Se $\bar{\sigma}_{n+1} \neq 0$, então $\text{posto}([A \ b]) = n + 1$, e o espaço nulo da matriz ampliada é trivial, logo o conjunto de equações (1.3) não é compatível. Para obter uma solução, o posto da matriz aumentada, $[A \ b]$ deve ser reduzido de $n + 1$ par n e isto pode ser feito aproximando $[A \ b]$ por uma matriz $[A_n \ b_n]$ de posto n . O método TLS procura por um matriz \tilde{A} e um vetor \tilde{b} tais que

$$\min_{\substack{[\tilde{A} \ \tilde{b}] \in \mathbb{R}^{m \times (n+1)} \\ A\tilde{x} = \tilde{b}}} \|[A \ b] - [\tilde{A} \ \tilde{b}]\|_F^2, \tag{1.6}$$

onde a $\|\cdot\|_F$ denota a norma Frobenius de uma matriz. A solução do problema de minimização (1.6) é dado pelo teorema de Eckart-Young-Mirsky [7]:

$$[A_n \ b_n] = \sum_{i=1}^n \bar{\sigma}_i \bar{u}_i \bar{v}_i^T, \tag{1.7}$$

que é a matriz de posto n mais próxima de $[A \ b]$ no sentido da norma Frobenius, satisfazendo

$$[A \ b] - [A_n \ b_n] = \bar{\sigma}_{n+1} \bar{u}_{n+1} \bar{v}_{n+1}^T, \quad \text{com} \quad \|[A \ b] - [A_n \ b_n]\|_F = \bar{\sigma}_{n+1}.$$

O sistema homogêneo (1.3) é então substituído pelo sistema homogêneo com matriz de posto n , $[A_n \ b_n]$, e usando o fato de que $v_{n+1} \in \mathcal{N}([A_n \ b_n])$, se $[\bar{v}_{n+1}]_{n+1} \neq 0$, temos que

$$\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{[\bar{v}_{n+1}]_{n+1}} \bar{v}_{n+1}. \tag{1.8}$$

Portanto, usando (1.5) temos que a solução TLS pode ser expressa como:

$$x_{TLS} = -\frac{\bar{v}_{12}}{\bar{v}_{22}}. \tag{1.9}$$

Note que se $\bar{\sigma}_{n+1} = 0$, então $[A \ b]$ tem posto n . Neste caso o sistema é compatível e não precisamos aproximar a matriz ampliada. Também, se $\bar{\sigma}_{n+1}$ é um valor singular simple, temos que $\mathcal{N}([A_n \ b_n]) = \text{span}\{\bar{v}_{n+1}\}$ e a solução TLS é única.

Neste trabalho, apresentamos um estudo comparativo das técnicas LS e TLS aplicadas ao problema de espectroscopia de ressonância magnética, para o caso em que a matriz $[A \ b]$ tem dados inexatos.

2 Método de Quadrados Mínimos Totais Truncado

O método TLS truncado é similar ao método TSVD visto acima. Quando os menores valores singulares de $[A \ b]$ são muito pequenos, truncamos a partir de um índice k . Para determinar o índice k adequado é necessário usar algum método que permita estabelecer um bom balanço entre a qualidade da solução e o tamanho do resíduo. Pelo teorema de Eckart-Young-Mirsky a matriz

$$[A_k \ b_k] = \sum_{i=1}^k \bar{\sigma}_i \bar{u}_i \bar{v}_i^T$$

é a melhor aproximação de posto k da matriz $[A \ b]$ no sentido da norma Frobenius. O espaço nulo da matriz aproximação é dado por:

$$\mathcal{N}([A_k \ b_k]) = \text{span}\{\bar{v}_{k+1}, \dots, \bar{v}_{n+1}\},$$

que fornece a partição

$$\bar{V} = [\bar{v}_1, \dots, \bar{v}_{n+1}] = \begin{bmatrix} \bar{V}_{11} & \bar{V}_{12} \\ \bar{v}_{21}^T & \bar{v}_{22}^T \end{bmatrix}, \tag{2.1}$$

onde $\bar{V}_{11} \in \mathbb{R}^{n \times k}$, $\bar{V}_{12} \in \mathbb{R}^{n \times (n-k+1)}$, e

$$\begin{aligned} \bar{v}_{21} &= [[\bar{v}_1]_{n+1}, \dots, [\bar{v}_k]_{n+1}]^T \in \mathbb{R}^k, \\ \bar{v}_{22} &= [[\bar{v}_{k+1}]_{n+1}, \dots, [\bar{v}_{n+1}]_{n+1}]^T \in \mathbb{R}^{n-k+1} \end{aligned}$$

Procuramos por uma solução no núcleo de $[A_k \ b_k]$. Usando o método em [1] se $\bar{v}_{22} \neq 0$ temos que a solução TLS é

$$x_{TLS}^k = -\frac{1}{\|\bar{v}_{22}\|^2} \bar{V}_{12} \bar{v}_{22}. \tag{2.2}$$

é imediato provar que a norma da solução TLS truncada satisfaz $\|x_{TLS}^k\|^2 = \frac{1}{\|\bar{v}_{22}\|^2} - 1$ e que a norma do resíduo é $\|R_k\|_F^2 = \|[A \ b] - [A_k \ b_k]\|_F^2 = \bar{\sigma}_{k+1}^2 + \dots + \bar{\sigma}_{n+1}^2$. Isso mostra que a norma da solução $\|x_{TLS}^k\|$ cresce como uma função de k , e que a norma do resíduo $\|R_k\|_F$ decresce. Este comportamento sugere usar o Princípio da Discrepancia ou o Método da Curva L [1] para encontrar o índice de truncamento k adequado.

3 Resultados Numéricos Preliminares

Nesta seção apresentamos um estudo comparativo da eficiência dos métodos LS e TLS quando aplicados a um problema da área de espectroscopia de ressonância magnética (MRS). Neste caso a matriz de dados A tem estrutura Hankel, i.e., as entradas são definidas como $a_{i,j} = h_{i+j-1}$

$$A = \begin{bmatrix} h_1 & h_2 & \dots & h_n \\ h_2 & h_3 & \dots & h_{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_n & h_{n+1} & \dots & h_{n+m} \end{bmatrix}$$

e $b = [h_0, \dots, h_{n-1}]^T$, onde $n + m \leq q$, e h_k é um sinal modelado por

$$h_k = \sum_{j=1}^p c_j e^{i\phi_j} e^{(\alpha_j + i\omega_j)k\Delta t}, \quad \iota = \sqrt{-1}, \quad k = 0, 1, \dots, q.$$

O problema consiste em estimar os parâmetros α_j , β_j , ϕ_j , e c_j , a partir de medidas experimentais do sinal h_k . Se h_k é livre de erros, é conhecido que $\text{posto}(A) = p$ e a solução de norma mínima do

problema $\min \|Ax - b\|$ pode ser usada para estimar as constantes de interesse a través de técnicas de predição linear [2]. A principal dificuldade do problema é que, como o sinal experimental é da forma $\tilde{h}_k = h_k^{\text{exato}} + e_k$, então a matriz é da forma $\tilde{A} = A + E$, com posto completo e vetor de dados é $\tilde{b} = b^{\text{exato}} + e$. Maiores informações podem ser encontradas na referência [2].

Para nosso exemplo consideramos os valores da tabela 1, com $p = 11$, $m = n = 256$, $q = 600$, $\Delta t = 0.000333$ e $\phi_j = \xi_j \pi / 180$.

Tabela 1: Valores exatos para o sinal MRS

| j | c_j | ξ_j (graus) | α_j | $\omega_j / 2\pi$ (Hz) |
|-----|-------|-----------------|------------|------------------------|
| 1 | 75 | 135 | 50 | -86 |
| 2 | 150 | 135 | 50 | -70 |
| 3 | 75 | 135 | 50 | -54 |
| 4 | 150 | 135 | 50 | 152 |
| 5 | 150 | 135 | 50 | 168 |
| 6 | 150 | 135 | 50 | 292 |
| 7 | 150 | 135 | 50 | 308 |
| 8 | 150 | 135 | 25 | 360 |
| 9 | 1400 | 135 | 285 | 440 |
| 10 | 60 | 135 | 25 | 490 |
| 11 | 500 | 135 | 200 | 530 |

Consideramos matriz perturbada \tilde{A} , sendo $\tilde{A} = A + \sigma \mathcal{E}$, onde \mathcal{E} é uma matriz de ruído gaussiano, σ é o desvio padrão nas partes real e imaginária. Note que a matriz exata A tem posto 11.

A figure abaixo mostra a parte real do sinal usado no experimento.

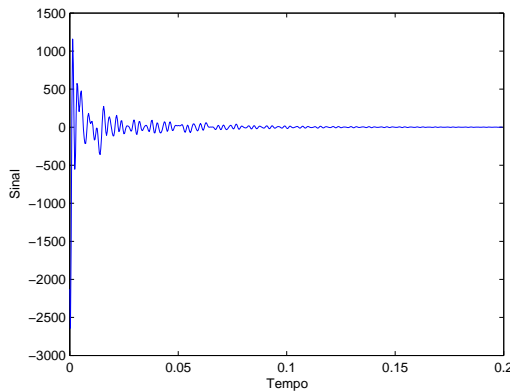


Figura 1: Sinal pura

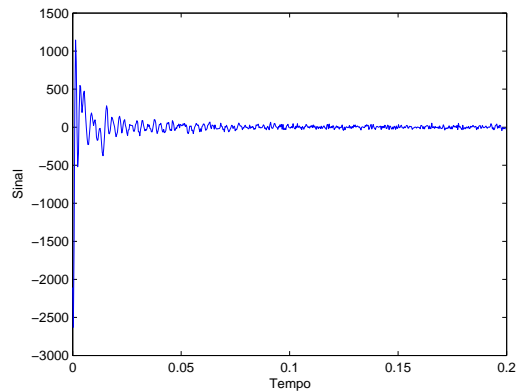


Figura 2: Sinal Perturbada

Apresentamos resultados obtidos com a técnica LS truncada e TLS truncada usando em ambos os casos o índice de truncamento $k = 11$, considerando vários valores do desvio padrão.

A qualidade das soluções x_{LS} , x_{TLS} em termos de erro relativo e resíduos relativos com respeito à solução original x_0 são mostrados na tabela 2 e ilustrados graficamente na figura 3.

Tabela 2: Erro relativo e Resíduo relativo

| σ | $\ x_{LS} - x_0\ /\ x_0\ $ | $\ x_{TLS} - x_0\ /\ x_0\ $ | $\ Ax_{LS} - b\ /\ b\ $ | $\ Ax_{TLS} - b\ /\ b\ $ |
|----------|----------------------------|-----------------------------|-------------------------|--------------------------|
| 2 | 0.0162765 | 0.0163174 | 0.0020342 | 0.0020571 |
| 4 | 0.0326695 | 0.0327974 | 0.0039712 | 0.0040338 |
| 6 | 0.0492881 | 0.0495050 | 0.0058708 | 0.0059408 |
| 8 | 0.0662289 | 0.0665041 | 0.0078041 | 0.0077932 |
| 10 | 0.0835820 | 0.0838643 | 0.0098491 | 0.0096115 |
| 12 | 0.1014382 | 0.1016722 | 0.0120859 | 0.0114216 |
| 14 | 0.1198999 | 0.1200591 | 0.0145900 | 0.0132551 |
| 16 | 0.1391069 | 0.1392916 | 0.0174291 | 0.0151501 |
| 18 | 0.1593645 | 0.1603396 | 0.0206730 | 0.0171669 |

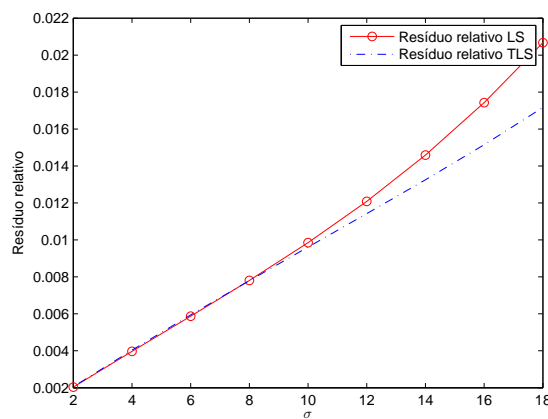


Figura 3: Resíduo relativo

Vemos que os erros relativos associados as soluções LS e TLS são muito próximos. No caso do resíduo relativo, vemos que para valores grandes de σ a solução TLS é melhor.

As estimativas dos valores dos parâmetros α e ω são apresentados na tabela 3 e graficamente nas figuras 4 e 5.

Tabela 3: Erros Relativos

| σ | $\ \tilde{\alpha}_{LS} - \alpha\ /\ \alpha\ $ | $\ \tilde{\alpha}_{TLS} - \alpha\ /\ \alpha\ $ | $\ \tilde{\omega}_{LS} - \omega\ /\ \omega\ $ | $\ \tilde{\omega}_{TLS} - \omega\ /\ \omega\ $ |
|----------|---|--|---|--|
| 2 | 0.0057111 | 0.0061896 | 0.0003957 | 0.0004067 |
| 4 | 0.0101561 | 0.0117233 | 0.0007376 | 0.0007801 |
| 6 | 0.0140621 | 0.0166266 | 0.0010293 | 0.0011192 |
| 8 | 0.0184575 | 0.0209818 | 0.0012792 | 0.0014233 |
| 10 | 0.0244831 | 0.0249581 | 0.0015022 | 0.0016927 |
| 12 | 0.0330535 | 0.0288461 | 0.0017201 | 0.0019288 |
| 14 | 0.0447341 | 0.0330901 | 0.0019607 | 0.0021337 |
| 16 | 0.0598983 | 0.0383309 | 0.0022535 | 0.0023098 |
| 18 | 0.0790414 | 0.0456766 | 0.0026299 | 0.0024639 |

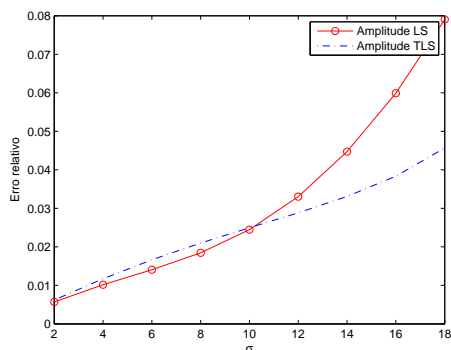


Figura 4: Amplitude

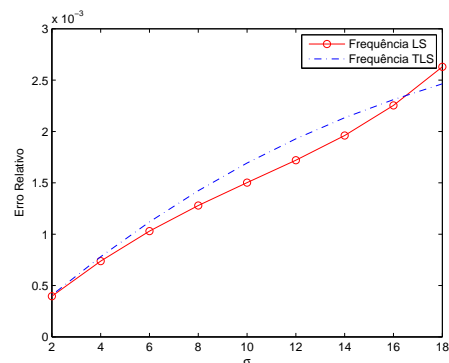


Figura 5: Frequência

Vemos que ambos os métodos fornecem boas estimativas das frequências ω independente do valor de σ . A mesma observação vale para os parâmetros α quando σ é pequeno. Porém, para valores maiores de σ , vemos que o método TLS proporciona uma melhor precisão, confirmando que o método TLS é uma excelente alternativa para problemas onde o ruído afeta a matriz e o vetor de dados.

Referências

- [1] A. Doicu, T. Trautmann, and F. Schreier, “Numerical Regularization for Atmospheric Inverse Problems”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, pp. 254-256, 2010.
- [2] F. S. Bazán V., CGLS-GCV: a hybrid algorithm for low-rank-deficient problems, Applied Numerical Mathematics , Vol. 47, pp. 91-108, 2003.
- [3] G. H. Golub, and C. F. Van Loan, An analysis of the total least square problem, SIAM J. Number. 6, Anal., Vol. 17, pp. 883-893, 1980.
- [4] G. H. Golub, AND C. F. Van Loan, “Matriz Computations”. 3.ed Maryland: Jhon Hopkins University Press, 1996.
- [5] P. C. Hansen, “Rank-deficient and discrete ill-posed problems”, Philadelphia: SIAM, 1998.
- [6] P. C. Hansen, “Discrete inverse problems: Insight and algorithm”, Philadelphia: SIAM, 2010.
- [7] S. Van Huffel. and J. Vandewalle, “The Total Least Square Problems - Computational Aspects and Analysis”, SIAM, Philadelphia, PA, 1991.