

Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática
Pura e Aplicada

Métodos de regularização iterativos para problemas discretos mal postos de grande porte

Lila Lisbeth Tenorio Paredes

Orientador: Prof. Dr. Fermín S. V. Bazán

Florianópolis, Fevereiro de 2014.

Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática
Pura e Aplicada

Métodos de regularização iterativos para
problemas discretos mal postos de grande
porte

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica, do Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina, para a obtenção do grau de Mestre em Matemática, com Área de Concentração em Matemática Aplicada.

Lila Lisbeth Tenorio Paredes

Florianópolis, Fevereiro de 2014.

Métodos de regularização iterativos para problemas discretos mal postos de grande porte

por

Lila Lisbeth Tenorio Paredes

Esta Dissertação foi julgada para a obtenção do Título de “Mestre”, Área de Concentração em Matemática Aplicada, e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-Graduação em Matemática Pura e Aplicada.

Dr. Daniel Gonçalves

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Matemática e Computação Científica

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Fermín Sinforiano Viloche Bazán
(Orientador - UFSC)

Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira (UFPR)

Prof. Dr. Licio Hernanes Bezerra (UFSC)

Prof. Dr. Luciano Bedin (UFSC)

Florianópolis, 14 de fevereiro de 2014.

Ao meus pais
e à minha irmã

Agradecimentos

À Deus por cuidar sempre de mim e dar-me a força para superar as dificuldades.

Ao meu pai Venancio Tenorio, minha mãe Bertha, e minha irmã Violeta pelo apoio, confiança e carinho em todo momento.

Ao meu namorado Jonathan, pelo apoio e paciência.

Ao professor Fermín Bazán, pela orientação, apoio incondicionais e por contribuir a meu crescimento profissional.

Aos meus colegas e professores de mestrado pelo convívio e aprendizado.

A todos os meus amigos pelo apoio e incentivo incondicional.

Aos professores Licio Hernanes, Saulo Pomponet e Luciano Bedin por aceitarem compor a banca, dedicarem tempo para a leitura do trabalho, e contribuírem para seu aperfeiçoamento.

Ao CNPq, pelo auxílio financeiro durante o mestrado.

À secretária Elisa pela sua ajuda e disponibilidade.

Resumo

Neste trabalho apresentamos os métodos de regularização iterativos da família SIRT (Simultaneous Iterative Reconstruction Techniques), ART (Algebraic Reconstruction Techniques), ART por blocos e o método LSQR para problemas discretos mal-postos de grande porte. Esses métodos são baseados na observação que boa parte das informações relevantes da solução são capturadas nas primeiras iterações, e que à medida que as iteradas prosseguem a qualidade das aproximações é deteriorada pela influência do ruído nos dados. Essa propriedade é conhecida como semiconvergência. A ideia dos métodos de regularização iterativa é calcular as iteradas até um certo ponto em que a qualidade das iteradas começa a incorporar o ruído nos dados. Para contornar esta dificuldade, a semiconvergência dos métodos da família SIRT é analisada e, baseados em estimativas do erro nos dados, são introduzidos dois critérios de parada chamados de Princípio de Discrepância e a Regra de Erro Monótono. Além disso, para o caso em que nenhuma estimativa do ruído é disponível, são introduzidos o critério NCP (Normalized Cumulative Peridogram) e a regra do produto mínimo, introduzido recentemente.

Os métodos são aplicados a problemas testes da literatura bem como a problemas de reconstrução de imagens.

Palavras-chave: Problemas discretos mal postos. SIRT. ART. LSQR . AIR-tools. Critérios de parada.

Abstract

We present the iterative regularization methods SIRT, ART, ART blocks and LSQR method for discrete ill-posed large problems. These methods are based on the observation that most of the relevant information of the solution are captured in first iterates, and that as the iterates pursue the quality of iterates is deteriorated by the influence the noise in the data. This property is known as semi-convergence. So the idea of the iterative methods is calculating the iterates until a certain point where the quality of the iterates start to adding the noise in the data. In order to overcome the difficulties, the semi-convergence for SIRT methods is analyzed, and based on estimates of data error are introduced two stopping criteria called Discrepancy Principle and Rule monotonous. Moreover, in the case where no estimate of noise is available, is introduced the NCP (Normalized Cumulative Peridogram) and Product minimum rule recently introduced the literature.

The methods are applied to test problems of the literature and the problems of reconstruction images.

Keywords: Ill-posed large problems. SIRT. ART. LSQR. AIR-Tools. Stopping criteria.

Lista de Símbolos

\mathbb{R}^n	Conjunto dos vetores com n coordenadas reais
$\mathbb{R}^{m \times n}$	Conjunto das matrizes com entrada reais de m linhas e n colunas
$\ x\ _2$	A norma 2 do vetor $x \in \mathbb{R}^n$
$\ x\ _M$	Norma vetorial $\ x\ _M = (x^T M x)^{\frac{1}{2}}$ para $x \in \mathbb{R}^n$ e $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica definida positiva
x^k	k -ésima solução iterada
I_n	Matriz identidade de ordem n
A^T	Matriz tranposta de A
$\text{diag}(\cdot)$	Matriz diagonal
$\mathcal{R}(A)$	Espaço coluna da matriz A
$\mathcal{N}(A)$	Espaço nulo da matriz A
$\rho(A)$	Raio espectral da matriz A
ε	Vetor de perturbações
δ_1	Nível de ruído

Lista de Figuras

2.1	Lado esquerdo: $f_p(y) = \text{sen}(2\pi py)$. Lado direito: g_p decresce quando a frequência p aumenta.	8
2.2	Solução exata e solução $A^{-1}b$ para o problema gravity para $n = 32$. Devido a $\text{cond}(A)$ ser grande, pequenas perturbações nos dados geram uma solução muito diferente da exata.	10
2.3	Valores singulares da matriz A do problema gravity , coeficientes de Fourier e a razão entre eles. Lado esquerdo: vetor b livre de erros. Lado direito: vetor b contendo 5% de erro relativo.	11
2.4	Fator de filtro f_i , com $\lambda = 0.13$ do problema gravity para $n = 32$	15
2.5	Solução x_s para $s = 2, 3, 4, 5, 6, 7$ e solução exata para o problema gravity com dimensão $n = 32$ e erro relativo de 1% nos dados.	16
3.1	Semiconvergência das iterações do método Cimmino. Podemos observar que a medida que iteramos as soluções correspondentes a $k = 35$ e $k = 90$ tendem a divergir. . .	24
3.2	Comportamento das funções $\psi^k(\sigma, \lambda)$ e $\phi^k(\sigma, \lambda)$ com λ fixo e para valores de $\sigma = 0.0017, 0.0016, 0.0015, 0.0014$	28
3.3	A função $\psi^k(\sigma, \lambda)$ como função de σ para $\lambda = 583.2171$ e $k = 10, 30, 90, 270$. A linha pontilhada denota o máximo de $\psi^k(\sigma, \lambda)$ como função de k	31
3.4	Método Cimmino baseado em projeções	34
3.5	Método de Kaczmarz.	39
3.6	Método simétrico de Kaczmarz.	40
4.1	Interpretação geométrica do critério de discrepância para o método de Cimmino no problema Lena.	51

4.2	Ótima $c(r^k)$ para o problema gravity $n = 256$ com erro relativo $\ \varepsilon\ _2/\ b_{\text{exato}}\ _2 = 5\%$. As linhas pontilhadas são os limites de Kolmogorov-Smirnoff $\pm 1.35q^{-1/2} \approx \pm 0.12$.	55
4.3	Comportamento de $E_1(k)$, $E_2(k)$ e da soma $E_1(k) + E_2(k)$ para o problema gravity $n = 32$ com erro relativo nos dados igual a 0.5%.	57
4.4	Comportamento da função ψ_k associado ao TSVD e LSQR para o problema gravity $n = 32$ e o erro relativo do ruído igual a 0.5%.	58
5.1	Solução exata Gravity.	60
5.2	Solução exata Phillips.	61
5.3	Solução exata Deriv2 para o caso 2.	62
5.4	Imagem Lena exata (esquerda) e degrada pelo blur mais ruído (direita).	70
5.5	Imagens obtidas com 5% de ruído nos dados para o método SART e LSQR respectivamente.	73
5.6	Imagem Barbara exata (direita) e degrada pelo blur mais ruído (esquerda).	74
5.7	Imagens obtidas com 5% de ruído nos dados para o método SART e Kaczmarz bloco respectivamente.	77
5.8	Imagem exata Peppers	77
5.9	Imagens obtidas com 5% de ruído nos dados para o método DROP e LSQR respectivamente.	80

Lista de Tabelas

5.1	Legenda para os dados colhidos nos testes numéricos realizados.	63
5.2	Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o critério de discrepância para o problema Gravity após 20 iterações e 5% de erro relativo.	63
5.3	Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de produto mínimo para o problema Gravity após 50 iterações com 5 % de ruído nos dados.	64
5.4	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de regra de erro monótono para o problema Gravity após 20 iterações e 5% de erro relativo.	64
5.5	Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o NCP para o problema Gravity após 20 iterações e 5% de erro relativo.	65
5.6	Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o critério de discrepância para o problema Phillips com 5% de ruído nos dados.	65
5.7	Resultados obtidos para os métodos LSQR usando o critério produto mínimo para o problema Phillips com 5 % de ruído nos dados.	66
5.8	Resultados obtidos para o método SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Phillips com 5% de ruído nos dados.	66
5.9	Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando NCP para o problema Phillips com 5% de ruído nos dados.	66
5.10	Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o critério de discrepância para o problema Deriv2 com 5% de ruído nos dados.	67

5.11	Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de produto mínimo para o problema Deriv2 após 50 iterações com 5 % de ruído nos dados.	67
5.12	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Deriv2 com 5% de ruído nos dados.	68
5.13	Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando NCP para o problema Deriv2 com 5% de ruído nos dados.	68
5.14	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de discrepância para o problema Lena com 5 % de ruído nos dados.	71
5.15	Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de parada produto mínimo para o problema Lena com 5 % de ruído nos dados.	71
5.16	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Lena com 5 % de ruído.	72
5.17	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério NCP para o problema Lena com 5 % de ruído. . .	72
5.18	Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério de discrepância para o problema Lena com 5 % de ruído.	72
5.19	Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério NCP para o problema Lena com 5 % de ruído.	73
5.20	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de discrepância para o problema Barbara com 5 % de ruído.	75
5.21	Resultados obtidos com o método LSQR para o problema Barbara com 5 % de ruído.	75
5.22	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Barbara com 5 % de ruído.	75
5.23	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério NCP para o problema Barbara com 5 % de ruído.	76
5.24	Resultados obtidos com os métodos ART por blocos usando critério de discrepância para o problema Barbara com 5 % de ruído.	76
5.25	Resultados obtidos com os métodos ART por blocos e critério NCP para o problema Barbara com 5 % de ruído nos dados.	76

5.26	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de discrepância para o problema Peppers com 5 % de ruído.	78
5.27	Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de parada produto mínimo para problema Peppers com 5 % de ruído.	79
5.28	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Peppers com 5 % de ruído.	79
5.29	Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério NCP para o problema Peppers com 5 % de ruído.	79
5.30	Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério de discrepância para o problema Peppers com 5 % de ruído.	80
5.31	Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério NCP para o problema Peppers com 5 % de ruído.	80

Sumário

1	Introdução	3
2	Problemas Inversos	6
2.1	Problemas mal postos	6
2.2	Análise da sensibilidade e a SVD (Singular Value Decomposition)	9
2.2.1	Condição Discreta de Picard	11
2.3	Regularização de problemas discretos mal-postos	12
2.3.1	Regularização de Tikhonov	12
2.3.2	TSVD(Truncated Singular Value Decomposition)	15
2.4	Determinação do parâmetro de regularização	16
2.4.1	Método de Validação Cruzada (GCV) e Weighed-GCV	17
2.4.2	Princípio de Discrepância	18
2.4.3	Curva L	18
2.4.4	Método do Ponto Fixo	19
3	Métodos de regularização iterativos	20
3.1	SIRT(Simultaneous Iterative Reconstruction Techniques)	20
3.1.1	Análise da semiconvergência	23
3.1.2	Método de Landweber	32
3.1.3	Método de Cimmino	33
3.1.4	Método CAV (Component Averaging)	35
3.1.5	Método DROP (Diagonally Relaxed Orthogonal Projections)	35
3.1.6	Método SART (Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique)	38
3.2	ART(Algebraic Reconstruction Techniques)	39
3.2.1	O Método de Kaczmarz	39
3.2.2	O Método Simétrico de Kaczmarz	39

3.3	Métodos ART por blocos	40
3.3.1	Método Kaczmarz por blocos	42
3.3.2	Kaczmarz simétrico por blocos	43
3.4	Método LSQR	44
3.4.1	Bidiagonalização de Golub-Kahan	44
4	Critério de Parada	47
4.1	A regra $\alpha - \beta$	47
4.1.1	O princípio de discrepância (DP)	50
4.1.2	A regra do erro monótono (ME)	51
4.1.3	Training Stopping Rules	52
4.2	NCP (Normalized Cumulative Periodogram)	54
4.3	Critério de produto mínimo	55
5	Resultados Numéricos	59
5.1	Equações integrais	59
5.1.1	Apresentação de resultados e discussão	62
5.2	Reconstrução de Imagens	68
6	Considerações Finais	81

Capítulo 1

Introdução

Considere o sistema linear

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m,$$

em que o vetor de dados b é obtido experimentalmente, e portanto, sujeito a incertezas:

$$b = b_{\text{exato}} + \varepsilon, \tag{1.0.1}$$

em que $b_{\text{exato}} = Ax_{\text{exato}}$ e ε é um vetor de ruídos tal que $\|b - b_{\text{exato}}\|_2 \leq \delta_1$.

Em muitas aplicações a matriz A provém da discretização de um problema mal posto e o problema acima é dito problema discreto mal-posto. Uma consequência do problema original ser mal posto é que a matriz A é mal condicionada, isto é, pequenos ruídos no vetor b podem produzir grandes alterações na solução x . Uma maneira intuitiva para resolver um problema mal posto é através da substituição do problema original por um problema associado bem posto. Esta substituição é feita conforme a teoria de regularização. A ideia básica dos métodos de regularização é incorporar informações adicionais ao problema, visando soluções estáveis e compatíveis com os dados de entrada. Nosso objetivo é encontrar aproximações estáveis para x_{exato} a partir do problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2^2.$$

Na literatura encontramos diferentes métodos de regularização tais como o método de Tikhonov [53], métodos iterativos tais como LSQR [45], Landweber [41]. Para problemas mal postos de grande porte (tais como

tomografia, electrocardiologia, etc), em que o cálculo dos valores singulares da matriz não pode ser realizado, são utilizados métodos de regularização iterativos. Os métodos de regularização iterativos para calcular soluções estáveis de problemas inversos são utilizados há décadas em imagens médicas, geofísica, ciências de materiais e muitas outras disciplinas que envolvem problemas de imagens em duas e três dimensões [22, 28, 31, 34, 17].

No início do século 20, o matemático polonês Stefan Kaczmarz [38] desenvolveu um método para a solução de sistemas de equações lineares. Em 1970, o método de Kaczmarz foi redescoberto por Gordon, Bender e Herman [26] no campo da reconstrução de imagens médicas. Este método foi denominado de ART (Algebraic Reconstruction Techniques). Por outro lado, o método do tipo SIRT (Simultaneous Iterative Reconstruction Techniques) foi proposto por Gilbert [23], cujo estudo foi aprofundado por Lakshminarayanan e Lent [40]. Posteriormente, Van der Sluis e Van der Vorst [54] fizeram uma comparação do método SIRT com o CG (Conjugate Gradient).

Preocupados com o custo computacional dos métodos ART para problemas de grande porte, estudamos os métodos ART por blocos. Os métodos iterativos por blocos são uma ferramenta muito importante pois podemos dividir um problema muito grande em subproblemas de menor tamanho e promover a computação em paralelo [13]. Estes métodos foram desenvolvidos por Elfving [21] para problemas de reconstrução de objetos e mais tarde foram estudados por Eggermont, Hermann e Lent [18].

A ideia dos métodos de regularização iterativa é calcular as iteradas e parar o processo iterativo quando a qualidade da iteração começa a incorporar o ruído nos dados. Portanto, a dificuldade dos métodos é determinar o índice de parada ótimo, o que é muito difícil devido a que estes métodos possuem a característica comum denominada semiconvergência: após um número ótimo de passos, as iteradas x^k tendem a estacionar durante alguns passos nos quais a qualidades das iteradas é quase ótima, e depois estas se deterioram como consequência do ruído.

Estudamos critérios de parada tais como o princípio de Discrepância [43, 44], a regra do erro monótono [27], o NCP (Normalized Cumulative Periodogram) [34, 49, 35] e a regra do produto mínimo [5]. Enquanto os dois primeiros critérios de parada avaliam o comportamento de $\|x^k\|_2$ e $\|b - Ax^k\|_2$ para determinar o índice de parada, o NCP utiliza somente a transformada discreta de Fourier do resíduo sem necessidade de conhecer a quantidade de ruído nos dados.

Este trabalho está dividido em cinco capítulos. No capítulo 2 apre-

sentamos generalidades sobre problemas inversos e problemas mal postos, mostrando com exemplos como eles surgem naturalmente. Em particular, mostramos como o ruído pode afetar a solução do problema. A seguir, relembramos a decomposição em valores singulares de uma matriz A e a seguir introduzimos a teoria de regularização. Finalizamos discutindo alguns métodos para a escolha do parâmetro de regularização, como GCV [24], Princípio de Discrepância [43], Curva L [36], e Método do Ponto Fixo [4].

No capítulo três, apresentamos detalhadamente os métodos de regularização iterativa, começando pelos métodos do tipo SIRT. O nome é devido a que em cada iteração as densidades são alteradas usando os dados de todas as projeções simultâneas em todos os hiperplanos $\mathcal{H}_i = \{x \in \mathbb{R}^n | \langle a^i, x \rangle = b_i\}$ para $i = 1, \dots, m$. Na sequência apresentamos o fenômeno da semiconvergência para o caso dos métodos SIRT com $T = I_n$, e dos métodos do tipo ART, para os quais as densidades são alteradas usando dados de uma projeção por vez. Também apresentamos os métodos iterativos por blocos do tipo ART, que são de muita importância quando o tamanho da matriz A é muito grande. Finalizamos descrevendo o método LSQR.

O capítulo quatro é dedicado ao estudo dos critérios de parada para encontrar o índice ótimo. Primeiro, apresentamos o critério de parada chamado de regra $\alpha - \beta$ como sendo uma generalização do princípio de Discrepância e da regra do erro monótono. Devido à presença de um parâmetro (τ) tanto no princípio de discrepância quanto na regra de erro monótono, apresentamos o algoritmo Training Stopping Rules [20]. A grande dificuldade que apresentam os dois critérios já mencionados é que eles precisam conhecer o nível de ruído nos dados. Para contornar esta dificuldade, estudamos um terceiro critério de parada denominado NCP (Normalized Cumulative Periodogram), baseado na transformada discreta de Fourier aplicada ao resíduo. Finalizamos apresentando o critério do produto mínimo para o método LSQR baseado nas propriedades dos resíduos e a norma da solução aproximada.

Por fim, no capítulo cinco, apresentamos resultados numéricos das implementações computacionais. Em particular, apresentamos experimentos usando problemas bem conhecidos da toolbox Regularization Tools [29] tais como *gravity*, *phillips* e *deriv2*. Além disso, mostramos resultados obtidos para o problema de reconstrução de imagens com imagens *Lena*, *Barbara* e *Peppers*. Para encontrar o parâmetro (τ) nos critérios de parada de discrepância e regra de erro monótono, utilizamos a rotina *trainDPME* do pacote AIR-TOOLS [30]. O trabalho termina com algumas considerações no capítulo 6.

Capítulo 2

Problemas Inversos

Problemas inversos aparecem naturalmente nas explorações sísmicas para a detecção de petróleo, na medicina e tomografia para reconstrução de imagens, etc. Eles surgem quando queremos determinar a causa desconhecida a partir de efeitos desejados ou observados. Estes problemas podem ser descritos por meio de equações do tipo

$$\mathcal{A}f = g \tag{2.0.1}$$

dado um efeito representado pela função g , uma causa a ser determinada dada pela função f e $\mathcal{A} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ representa o modelo, com \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 sendo espaços normados, chamados de espaço de soluções e dados respectivamente.

2.1 Problemas mal postos

No estudo de um problema inverso devem ser analisadas previamente a existência, unicidade e estabilidade em relação aos dados de entrada. Esta análise é muito importante para saber se o problema é bem posto ou mal posto, e assim determinar a forma mais adequada para seu tratamento. O termo mal posto surgiu no início do século XX com J.S. Hadamard, que trabalhou em problemas de física-matemática. Hadamard acreditava que nenhum problema mal posto podia refletir o mundo real. Depois, comprovou-se a falsidade de tais ideias.

Segundo Hadamard um problema é bem posto se satisfazem as seguintes três condições

- (a) Existência: Para cada $g \in \mathcal{H}_2$ existe $f \in \mathcal{H}_1$ tal que $\mathcal{A}f = g$. Ou seja o problema 2.0.1 tem solução.
- (b) Unicidade: Para cada $g \in \mathcal{H}_2$ a equação 2.0.1 tem uma única solução.
- (c) Estabilidade: A solução f depende continuamente dos dados de entrada.

Caso alguma das condições anteriores não seja satisfeita o problema é dito mal posto. O exemplo típico de problema mal posto corresponde a equações integrais de primeira espécie. A integral de Fredholm de primeira espécie modela diversos problemas da física tais como radiografia, estereologia, espectroscopia, procesamento de imagens e campos electromagnéticos [38, 2]. A integral de Fredholm de primeira espécie tem a seguinte forma

$$(\mathcal{A}f)(x) := \int_a^b K(x, y)f(y)dy = g(x), \quad c \leq x \leq d \quad (2.1.1)$$

em que a existência e unicidade de soluções nem sempre são garantidas. Por exemplo, se $K(x, y)$ for contínua em $[c, d] \times [a, b]$, $f \in L^2[a, b]$ e g não for contínua. Então, a primeira condição não é satisfeita em $L^2[a, b]$. A segunda condição não é satisfeita se consideramos em (2.1.1), por exemplo $K(x, y) = x\text{sen}(y)$ e $a = c = -\pi$ e $b = d = \pi$, ou seja,

$$\int_{-\pi}^{\pi} x\text{sen}(y)f(y)dy = g(x), \quad -\pi \leq x \leq \pi.$$

Este problema tem infinitas soluções pois o núcleo do operador \mathcal{A} tem dimensão infinita. De fato, basta notar que a família infinita de funções definidas por $f_n(y) = \text{sen}(ny)$, $n = 2, 3, \dots$ pertencem ao núcleo de operador. Finalmente a última condição não é satisfeita se

$$\begin{aligned} f_p(y) &= \text{sen}(2\pi py), \\ K_p(x, y) &= e^{x \cos(2\pi py)}, \quad p \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Obtemos $g_p(x) = \frac{\text{senh}(x)}{2\pi px}$, $p \in \mathbb{N}$. Seja Δf_p a função solução f perturbada

$$\Delta f_p(y) = \epsilon \text{sen}(2\pi py), \quad p \in \mathbb{N} \quad \text{e } \epsilon \text{ é constante.}$$

Então a correspondente função Δg_p é da forma

$$\Delta g_p(x) = \epsilon \frac{\sinh(x)}{2\pi p x}, \quad p \in \mathbb{N}$$

e, devido ao Lema de Riemann-Lebesgue, temos que $\Delta g_p(x) \rightarrow 0$. Logo, $\Delta f/\Delta g$ pode ser muito grande quando p tende ao infinito. Portanto, o problema (2.1.1) é mal posto. A Figura 2.1 mostra que pequenas perturbações das observações g geram grandes perturbações da solução f .

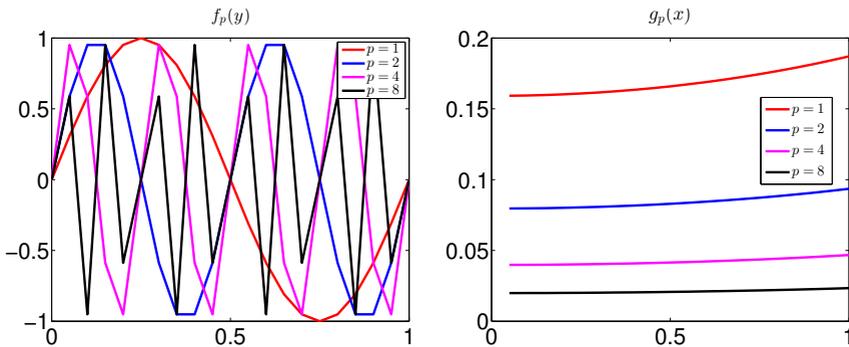


Figura 2.1: Lado esquerdo: $f_p(y) = \text{sen}(2\pi py)$. Lado direito: g_p decresce quando a frequência p aumenta.

Os problemas discretos mal postos que encontramos com muita frequência são os sistemas de equações lineares resultantes da discretização de problemas mal postos descritos pela equação integral (2.1.1). Por exemplo, se o método de Galerkin [3] é usado para discretizar essa equação integral, obtemos um sistema linear como em (2.1.2). Dependendo das escolhas das funções de base ϕ_i e ψ_j , os elementos da matriz $A = [a_{ij}]$ e o vetor $b = [b_i]$ tem a forma

$$a_{ij} = \int_a^b \int_c^d K(x, y) \phi_i(x) \psi_j(y) dx dy$$

$$b_i = \int_c^d \phi_i(x) g(x) dx.$$

em que ϕ_i e ψ_j são funções de base usadas no método de Galerkin. Detalhes sobre os problemas mal postos e mau condicionamento da matriz A podem ser encontrados em [1, 35, 55].

Consideremos o sistema linear obtido por algum método de discretização em (2.0.1)

$$Ax = b, \quad (2.1.2)$$

em que a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, com $m \geq n$ e $b \in \mathbb{R}^m$. Consideremos o problema de mínimos quadrados associado a (2.1.2)

$$x_{LS} = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2^2 \quad (2.1.3)$$

A grande dificuldade que temos é que, pelo fato da matriz se originar da discretização de um problema mal posto, o problema de minimização se torna muito sensível a pequenas variações do vetor b e sua solução está muito longe da solução exata. Por exemplo, o seguinte problema dado por

$$A = \begin{pmatrix} 0.16 & 0.10 \\ 0.17 & 0.11 \\ 2.02 & 1.29 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}, b = \begin{pmatrix} 0.27 \\ 0.25 \\ 3.33 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3.$$

O lado direito b é o resultado de adicionar uma pequena perturbação nos dados correspondentes à solução $x = (1 \ 1)^T$

$$b = Ax + \epsilon, \quad \epsilon = \begin{pmatrix} 0.01 \\ -0.03 \\ 0.02 \end{pmatrix}.$$

Obtemos a solução do problema de mínimos quadrados

$$x_{LS} = (7.01 \quad -8.40)^T.$$

Apesar da perturbação foi muito pequena a solução x_{LS} é diferente da original x .

2.2 Análise da sensibilidade e a SVD (Singular Value Decomposition)

Uma das ferramentas mais poderosas para análise e resolução do problema (2.1.3) é a decomposição SVD (Singular Value Decomposition) da matriz A .

Teorema 2.2.1. *Para cada $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, com $m \geq n$, existem matrizes ortogonais $U = [u_1, u_2, \dots, u_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V = [v_1, v_2, \dots, v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$*

e $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r, 0, \dots, 0)$ tais que

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$$

e os valores singulares σ_i , para cada $i = 1, \dots, r$, ordenados de modo não crescente

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0, \quad r = \text{posto}(A)$$

A demonstração do teorema pode ser encontrada em [25].

Para analisarmos como a presença de ruído nos dados pode afetar a solução devemos analisar o condicionamento do problema. O número da condição de A no sentido da norma 2 é definido como

$$\text{cond}(A) = \frac{\sigma_{\max}(A)}{\sigma_{\min}(A)}$$

em que σ_{\max} e σ_{\min} denotam o maior e menor valor singular da matriz A . Se $\text{cond}(A)$ está próximo de 1, diz-se que o problema é bem-condicionado e a solução é estável com respeito a pequenas variações nos dados. Pelo contrário, se $\text{cond}(A)$ é grande, diz-se que o problema é mal condicionado e o problema é instável. Para o exemplo da seção anterior o problema é instável devido a que o número de condição $\text{cond}(A) = 1.0975e + 03$ é grande. No caso do problema gravity do pacote Regularization Tools [32] com $n = 32$ e sendo o erro nos dados $\|\varepsilon\|_2 = 10^{-7}$, temos que o problema é instável devido ao fato do número de condição $\text{cond}(A) \simeq 3.4e + 09$ ser muito grande.

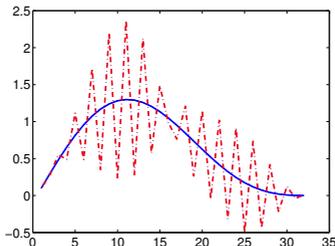


Figura 2.2: Solução exata e solução $A^{-1}b$ para o problema gravity para $n = 32$. Devido a $\text{cond}(A)$ ser grande, pequenas perturbações nos dados geram uma solução muito diferente da exata.

2.2.1 Condição Discreta de Picard

A condição discreta de Picard permite condições favoráveis para o cálculo de soluções aproximadas estáveis de problemas discretos mal postos.

Definição 2.2.1. (*Condição Discreta de Picard*) A condição discreta de Picard é satisfeita se para todos os valores singulares σ_i os coeficientes de Fourier correspondentes decaem em média para zero mais rápido do que σ_i .

Isto significa que, para a maior parte dos índices i , os coeficientes de Fourier satisfazem $|u_i^T b| \leq \sigma_i$.

Analisaremos o comportamento dos coeficientes $|u_i^T b|$ e $\frac{|u_i^T b|}{\sigma_i}$ para o problema `gravity` com $n = 32$ usando vetores de dados b com e sem perturbação (ver Figura 2.3). Na figura da esquerda podemos perceber que a condição discreta de Picard é satisfeita quando consideramos o vetor b livre de erros. Notemos que os coeficientes de Fourier permanecem por baixo dos valores singulares. Entretanto, na figura da direita temos que os coeficientes de Fourier a partir de $i = 9$ estão por cima dos valores singulares, fazendo com que a razão $\frac{|u_i^T b|}{\sigma_i}$ seja grande a medida que i cresce.

Quando resolvemos problemas do mundo real, em que o vetor b , e as vezes a matriz A , são contaminados por erros, raramente a condição discreta de Picard é satisfeita. No entanto, se o vetor de dados exato satisfaz esta condição, é possível encontrar um método de regularização capaz de produzir aproximações estáveis para a solução do problema [35].

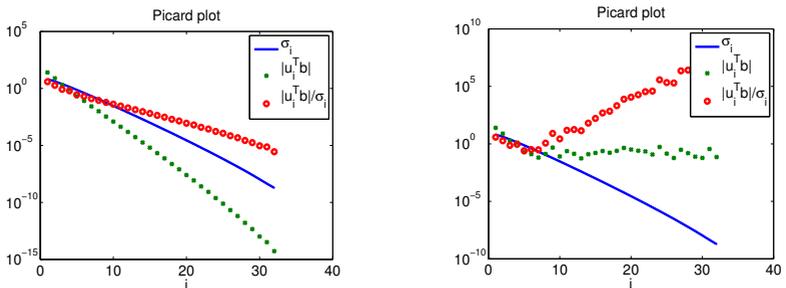


Figura 2.3: Valores singulares da matriz A do problema `gravity`, coeficientes de Fourier e a razão entre eles. Lado esquerdo: vetor b livre de erros. Lado direito: vetor b contendo 5% de erro relativo.

2.3 Regularização de problemas discretos mal-postos

A teoria que trata dos métodos para problemas mal postos é conhecida como teoria de regularização. Intuitivamente, a teoria de regularização é a teoria das "aproximações contínuas" para a inversa descontínua. Portanto, a análise e solução de um problema mal posto é feita via solução de um problema associado bem-posto.

A ideia padrão de muitos métodos de regularização é construir uma família de operadores $R_\lambda : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ limitados, que dependem do parâmetro de regularização $\lambda > 0$, que aproximem pontualmente o operador \mathcal{A}^{-1} (caso ele exista) ou o operador pseudo-inversa \mathcal{A}^\dagger . Isto é,

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} R_\lambda \mathcal{A}(f) = f, \quad \forall f \in \mathcal{H}_1.$$

De modo geral, estudam-se métodos de regularização considerando:

- problemas mal postos como consequência de não existência ou ambiguidade na solução.
- problemas mal postos como consequência de instabilidade.

Para contornar as dificuldades encontradas na solução de um problema mal posto podemos restringir o espaço no qual se encontra a solução ou podemos substituir o problema por algum outro problema que esteja o suficientemente próximo do problema original de modo que esta aproximação seja menos suscetível a pequenas variações.

2.3.1 Regularização de Tikhonov

A regularização de Tikhonov surgiu em 1963 quando Tikhonov [53] considerou o problema $Kf = g$ em que f, g são funções e K é um operador integral. Tikhonov propôs substituir o problema

$$f_\lambda = \operatorname{argmin}_{f \in \mathcal{H}} \{\|g - Kf\|_2^2\}$$

por

$$f_\lambda = \operatorname{argmin}_{f \in \mathcal{H}} \{\|g - Kf\|_2^2 + \lambda^2 \Omega(f)\}$$

em que $\Omega(f) = \int_a^b [v(s)f(s)^2 + w(s)f'(s)^2] ds$ com v e w funções de peso positivas; sendo \mathcal{H} um espaço de funções apropriado.

Para o problema discretizado a regularização de Tikhonov substitui o problema (2.1.3) por

$$x_\lambda = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \{ \|b - Ax\|_2^2 + \lambda^2 \|L(x - x^0)\|_2^2 \} \quad (2.3.1)$$

em que λ é o parâmetro de regularização e L é geralmente a matriz identidade, ou uma aproximação discreta do operador diferencial definido pela primeira ou segunda derivada. O vetor x^0 é uma aproximação inicial para a solução, caso esteja disponível; caso contrário definimos $x^0 = 0$.

Talvez o primeiro autor a descrever um esquema que é equivalente à regularização de Tikhonov foi James Riley [48] em 1955, que propôs resolver o sistema $(A + \alpha I)x = b$, em que α é uma constante positiva pequena. Riley também sugeriu um esquema de iteração que hoje é conhecido como a regularização de Tikhonov iterada.

Golub foi o primeiro autor a propôr, em 1965, uma maneira apropriada de resolver o problema (2.3.1). A ideia é tratar (2.3.1) como o problema de mínimos quadrados

$$x_\lambda = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda L \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b \\ \lambda L x^0 \end{pmatrix} \right\|_2^2. \quad (2.3.2)$$

As equações normais para (2.3.2) são

$$\begin{pmatrix} A \\ \lambda L \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A \\ \lambda L \end{pmatrix} x_\lambda = \begin{pmatrix} A \\ \lambda L \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} b \\ \lambda L x^0 \end{pmatrix},$$

ou seja,

$$(A^T A + \lambda^2 L^T L) x_\lambda = A^T b + \lambda^2 L^T L x^0. \quad (2.3.3)$$

A expressão (2.3.3) é chamada de equação normal regularizada. Se consideramos $L = I_n$, então o problema está na forma padrão. A solução para a equação (2.3.3) pode ser escrita, para $x^0 = 0$, como

$$x_\lambda = (A^T A + \lambda^2 L^T L)^{-1} A^T b.$$

sendo a unicidade obtida se $\mathcal{N}(A) \cap \mathcal{N}(L) = 0$

Considerando a regularização de Tikhonov na forma padrão, x_λ é dado por

$$x_\lambda = \sum_{i=1}^r f_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (2.3.4)$$

em que $r = \text{posto}(A)$ e

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

são chamados fatores de filtro para a regularização de Tikhonov. Os fatores f_i filtram as componentes do erro da solução. Assim, se λ for muito grande, a solução calculada pode em (2.3.4) não ter incorporado informações na solução do problema. Por outro lado, se λ for muito pequena, pouco ruído pode ter sido filtrado e a solução encontrada não é relevante.

O resíduo associado pode ser escrito como

$$r_\lambda = b - Ax_\lambda = \sum_{i=1}^r (1 - f_i) u_i^T b u_i + b_\perp \quad (2.3.5)$$

em que

$$b_\perp = b - \sum_{i=1}^r u_i^T b u_i = \sum_{i=r+1}^m u_i^T b u_i$$

é a componente do vetor b que não pertence ao espaço coluna da matriz A . Lembre-se que, se o conjunto u_i forma uma base ortonormal para \mathbb{R}^m , então $b = \sum_{i=1}^m u_i^T b u_i$. Desta forma

$$\|x_\lambda\|_2^2 = \sum_{i=1}^r \left(f_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \quad \text{e} \quad (2.3.6)$$

$$\|r_\lambda\|_2^2 = \sum_{i=1}^r ((1 - f_i) u_i^T b)^2 + \|b_\perp\|_2^2. \quad (2.3.7)$$

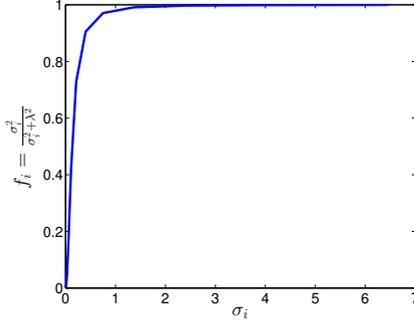


Figura 2.4: Fator de filtro f_i , com $\lambda = 0.13$ do problema `gravity` para $n = 32$.

O comportamento dos fatores de filtros são mostrados na Figura 2.4. Observamos que para valores singulares maiores do que $\lambda = 0.13$, o fator de filtro é muito próximo ao valor 1 e as componentes da SVD contribuem a incrementar o valor de x_λ . Por outro lado, para valores singulares menores do que λ os fatores de filtro são pequenos e, portanto, as componentes da SVD filtram os erros.

2.3.2 TSVD(Truncated Singular Value Decomposition)

Aplicamos a SVD para analisar o comportamento da solução do problema (2.1.3)

$$x_{LS} = \sum_{i=1}^r \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \quad r = \text{posto}(A). \quad (2.3.8)$$

Sendo $b = b_{\text{exato}} + \varepsilon$ temos

$$x_{LS} = \sum_{i=1}^r \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i = \sum_{i=1}^r \left(\frac{u_i^T b_{\text{exato}}}{\sigma_i} v_i + \frac{u_i^T \varepsilon}{\sigma_i} v_i \right)$$

e observamos que para valores de σ_i muito pequenos os coeficientes $\frac{u_i^T \varepsilon}{\sigma_i}$ resultam grandes, fazendo que a parte do erro seja dominante, tornando assim a solução ineficiente. Se a soma (2.3.8) for truncada em $s < r$, com s próximo de r , podemos amenizar o efeito do erro ε . Por outro lado, se s for pequeno deixamos de capturar informações importantes do problema. Portanto, a escolha do s deve estabelecer

um balanço apropriado entre a quantidade de informação do problema que é capturada e a quantidade de erro que é incorporada à solução.

O método da SVD truncada (TSVD) nos permite fazer a escolha do índice satisfazendo esse requerimento. A TSVD é um método de regularização cuja solução é escrita da forma

$$x_s = \sum_{i=1}^s \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

s é um parâmetro de regularização a ser determinado.

Na Figura 2.5 temos sete soluções para o problema **gravity**, cuja solução exata também é apresentada no final desta figura. Podemos observar que o simples fato de termos adicionado $\frac{u_s^T b}{\sigma_s} v_s$ modifica a solução; para este caso o parâmetro de regularização mais adequado é $s = 7$.

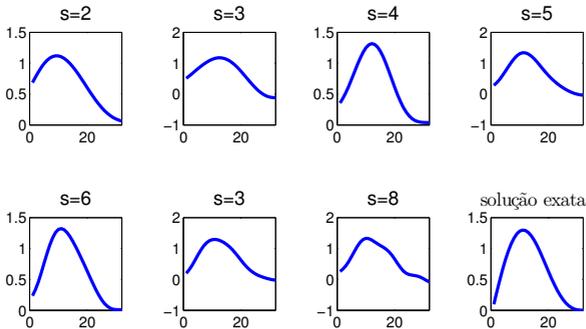


Figura 2.5: Solução x_s para $s = 2, 3, 4, 5, 6, 7$ e solução exata para o problema **gravity** com dimensão $n = 32$ e erro relativo de 1% nos dados.

2.4 Determinação do parâmetro de regularização

A escolha do parâmetro de regularização para o método de Tikhonov não resulta uma tarefa fácil. A seguir apresentamos alguns métodos para escolher este parâmetro de regularização.

2.4.1 Método de Validação Cruzada (GCV) e Weighed-GCV

O método de Validação Cruzada Generalizada (GCV), desenvolvido por G.H. Golub, M.T. Heath e G.Wahba [24], é um método muito usado para a escolha do parâmetro de regularização baseada em considerações estatísticas. A GCV sugere que um bom valor para o parâmetro de regularização deve prever dados no vetor b que estejam faltando ou que foram retirados. Mais precisamente, se um elemento (uma equação do sistema $Ax = b$) arbitrário b_j do vetor b for removido, então a solução regularizada correspondente deve prever essa falta. Baseado nesse princípio, o parâmetro de regularização é o valor que minimiza a função GCV

$$G_{A,b}(\lambda) = \frac{n \left\| (I - AA_{\lambda}^{\dagger}) b \right\|_2^2}{\left(\text{tr}(I - AA_{\lambda}^{\dagger}) \right)^2}$$

em que $A_{\lambda}^{\dagger} = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T$ representa a pseudo-inversa da matriz \bar{A} do sistema $\bar{A}x_{\lambda} = \bar{b}$ em que $\bar{A} = (A^T A + \lambda^2 I)$ e $\bar{b} = A^T b$ e a solução regularizada $x_{\lambda} = A_{\lambda}^{\dagger} b$. Substituindo a SVD da matriz A na função GCV temos

$$G_{A,b}(\lambda) = \frac{n \left(\sum_{i=1}^n \left(\frac{\lambda^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} u_i^T b \right)^2 + \sum_{i=n+1}^m (u_i^T b)^2 \right)}{\left((m - n) + \sum_{i=n+1}^n \frac{\lambda^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \right)^2}$$

o que torna a função GCV computacionalmente conveniente para ser avaliada e utilizada por algoritmos de minimização.

Em estudos comparativos encontrados na literatura podemos apontar que uma desvantagem do método GCV para a determinação do parâmetro de regularização de Tikhonov é que nem sempre este método funciona, no sentido de que, dependendo de como o erro está distribuído nos dados, o parâmetro encontrado pode produzir uma solução não satisfatória [8].

Recentemente um novo método apareceu na literatura, que é baseado na GCV chamado método de Weighed-GCV ou simplesmente W-GCV [15]. Em vez de minimizar a função GCV, o método W-GCV busca minimizar a função

$$G_{A,b}(\omega, \lambda) = \frac{n \left\| (I - \omega AA_{\lambda}^{\dagger}) b \right\|_2^2}{\left(\text{tr}(I - \omega AA_{\lambda}^{\dagger}) \right)^2}$$

em que $0 < \omega < 1$. Detalhes adicionais sobre a escolha do parâmetro w são encontrados em [15].

2.4.2 Princípio de Discrepância

O método mais utilizado que se baseia na estimativa da norma do erro é o princípio de discrepância, atribuído a Morozov [43]. Se o problema mal posto é consistente no sentido de que $Ax_{\text{exato}} = b_{\text{exato}}$, a ideia é escolher o parâmetro de regularização λ tal que a norma do resíduo seja igual a uma cota superior δ_1 para $\|\varepsilon\|_2$ de (1.0.1), isto é, devemos determinar λ da equação não linear

$$\|b - Ax_\lambda\|_2 = \delta_1, \quad \|\varepsilon\|_2 \leq \delta_1. \quad (2.4.1)$$

Usando a SVD da matriz A na equação (2.3.5) temos que a norma do resíduo pode ser escrita como (2.3.7) e podemos perceber que a norma do resíduo é uma função crescente e monótona da variável λ . Então, resolver (2.4.1) equivale a encontrar a interseção entre a curva da norma do resíduo e a reta horizontal $z = \delta_1$.

A grande dificuldade deste método é que precisamos de uma estimativa para a norma do erro ε . Caso essa estimativa seja muito grande, podemos encontrar um parâmetro de regularização muito grande causando os inconvenientes já discutidos. O mesmo acontece com uma estimativa menor.

2.4.3 Curva L

Este método surgiu em 1992 introduzido por P.C.Hansen [36] e é utilizado com sucesso em diversos problemas. O método da curva L escolhe como parâmetro de regularização o valor que maximiza a curvatura da curva parametrizada por $\lambda \in [0, \infty)$ dada por

$$\mathcal{L}(\lambda) = \{(a, b) \mid a = \log(\|r_\lambda\|_2^2), b = \log(\|x_\lambda\|_2^2)\}$$

com x_λ solução regularizada e $r_\lambda = b - Ax_\lambda$ o resíduo associado.

A escolha de λ baseia-se nas expressões para as normas de x_λ e r_λ obtidas em (2.3.6),(2.3.7). Como $b = b_{\text{exato}} + \varepsilon$, então

$$u_i^T b = u_i^T b_{\text{exato}} + u_i^T \varepsilon.$$

Dependendo do λ , são os coeficientes $u_i^T b_{\text{exato}}$ ou $u_i^T \varepsilon$ que dominam. Então, a curva-L resultante consiste de uma parte da curva para b_{exato} e outra parte para ε , e em algum lugar existe uma faixa de valores que corresponde a transição entre as duas curvas.

2.4.4 Método do Ponto Fixo

O algoritmo de Ponto Fixo foi proposto por Bazán [4] baseado num trabalho anterior de Regińska [47]. Diferente do Princípio de Discrepância, este método não precisa a informação do tamanho do ruído nos dados. Este método está baseado na minimização da função

$$\psi_\mu(\lambda) = x(\lambda)y(\lambda)^\mu, \quad \mu > 0 \quad (2.4.2)$$

em que

$$y(\lambda) = \|x_\lambda\|_2^2, \quad x(\lambda) = \|b - Ax_\lambda\|_2^2.$$

Derivando (2.4.2) em relação a λ temos

$$\psi'_\mu(\lambda) = y(\lambda)^\mu y'(\lambda) \left[\mu \frac{x(\lambda)}{y(\lambda)} + \frac{x'(\lambda)}{y'(\lambda)} \right].$$

Como $y(\lambda)^\mu y'(\lambda) \neq 0$ e $\frac{x'(\lambda)}{y'(\lambda)} = -\lambda^2$, a condição necessária para que $\psi_\mu(\lambda)$ tenha um mínimo local em $\lambda = \lambda^* \neq 0$ é que $\psi'_\mu(\lambda^*) = 0$, que é equivalente a

$$\lambda^{*2} = \mu \frac{x(\lambda^*)}{y(\lambda^*)} \Leftrightarrow \lambda^* = \sqrt{\mu \frac{x(\lambda^*)}{y(\lambda^*)}}.$$

Portanto, se λ^* é um minimizador de $\psi_\mu(\lambda)$ então λ^* deve ser um ponto fixo de $\phi_\mu : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ definido por

$$\phi_\mu(\lambda) = \sqrt{\mu} \frac{\|b - Ax_\lambda\|_2}{\|x_\lambda\|_2}.$$

O algoritmo do ponto fixo começa com um chute inicial λ_0 , $\mu = 1$ e prossegue com a sequência para $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\lambda_{k+1} = \phi_\mu(\lambda_k).$$

Capítulo 3

Métodos de regularização iterativos

Métodos iterativos para calcular soluções estáveis de problemas inversos vêm sendo utilizadas por décadas em imagens médicas, geofísica, ciência de materiais e muitas outras disciplinas que envolvem imagens em 2D e 3D. Os métodos apresentados no capítulo anterior são adequados quando se pode calcular facilmente a SVD da matriz A . Para problemas de grande porte em que o cálculo dos valores singulares da matriz A não pode ser realizado em virtude do alto custo computacional, usamos os métodos iterativos.

Os métodos iterativos para a resolução de sistemas de equações lineares baseiam-se em esquemas que geram vetores iterativos x^k , $k \in \mathbb{N}$, que convergem para a solução desejada. Para problemas mal postos cada solução iterada x^k é considerada solução regularizada, em que k cumpre o papel de parâmetro de regularização.

Nesta seção introduzimos a família de métodos iterativos denominados SIRT e ART. Também apresentamos os métodos iterativos ART por blocos, os quais são baseados na mesma ideia dos métodos ART. Finalmente, apresentamos o método LSQR iterativo.

3.1 SIRT(Simultaneous Iterative Reconstruction Techniques)

Os métodos tipo SIRT foram desenvolvidos por Gilbert [23] em 1972. Estes métodos foram usados para tomografias médicas, mas ra-

pidamente alcançaram popularidade entre os algoritmos usados para tomografia sísmica. Estes métodos, também conhecidos na literatura como métodos de tipo Landweber, baseiam-se no princípio dos mínimos quadrados. A característica dos métodos SIRT é que eles só precisam de produtos matriz-vetor em cada iteração.

Os métodos do tipo Landweber são descritos, em forma geral, como

$$x^{k+1} = x^k + \lambda_k T A^T M (b - Ax^k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.1.1)$$

em que x^k denota o vetor atual da iteração, λ_k denota o parâmetro de relaxação, e as matrizes M e T são simétricas e positivas definidas. Os diferentes métodos da família SIRT se diferenciam pelas escolhas das matrizes T e M .

Neste trabalho vamos considerar o parâmetro $\lambda_k = \lambda$ para $k = 0, 1, \dots$

Denotamos por

$$\|x\|_M = \langle x, Mx \rangle$$

e o raio espectral de A

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ é o autovalor de } A\}.$$

O seguinte teorema garante a convergência dos métodos tipo SIRT com $T = I_n$.

Teorema 3.1.1. *Se*

$$0 < \epsilon \leq \lambda \leq \frac{2 - \epsilon}{\rho(A^T M A)}, \quad (3.1.2)$$

em que $\epsilon > 0$ é um número fixo, arbitrário e muito pequeno, então qualquer sequência gerada por (3.1.1) com $T = I_n$ converge para \hat{x} , em que $\hat{x} = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_M$. Adicionalmente, se $x^0 \in \mathcal{R}(A^T)$, \hat{x} é a única solução do problema $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$.

Demonstração. Suponha que dado um $\epsilon > 0$ temos que

$$0 < \epsilon \leq \lambda \leq \frac{2 - \epsilon}{\rho(A^T M A)}. \quad (3.1.3)$$

Usando a SVD da matriz $M^{\frac{1}{2}}A$ segue que existem $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e uma matriz diagonal $\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ tal que

$$M^{\frac{1}{2}}A = U \Sigma V^T \quad (3.1.4)$$

em que $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0$ e $\text{posto}(A) = r$.

Como $\rho(A^T M A) = \rho(A^T (M^{\frac{1}{2}})^T M^{\frac{1}{2}} A) = \|M^{\frac{1}{2}} A\|_2^2$ e usando a propriedade $\sigma_1^2 = \|M^{\frac{1}{2}} A\|_2^2$, temos que $\rho(A^T M A) = \sigma_1^2$.

Logo, em (3.1.3) temos

$$0 < \lambda < \frac{2}{\sigma_1^2}$$

e como $\sigma_1 \geq \sigma_r$ então

$$0 < \lambda < \frac{2}{\sigma_r^2}. \quad (3.1.5)$$

Usando o algoritmo (3.1.1) no caso $T = I_n$

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \lambda A^T M (b - Ax^k) \\ &= x^k + \lambda c - \lambda B x^k \\ &= (I_n - \lambda B) x^k + \lambda c. \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

em que $c = A^T M b$ e $B = A^T M A$. Denotemos $e^{k+1} = x^{k+1} - \hat{x}$ para $k = 0, 1, \dots$ e substituindo x^{k+1} por (3.1.6) temos que

$$\begin{aligned} e^{k+1} &= (I_n - \lambda B) x^k + \lambda c - x^k - ((I_n - \lambda B) \hat{x} + \lambda c) \\ &= (I_n - \lambda B) (x^k - \hat{x}) \\ &= (I_n - \lambda B) e^k, \quad \text{para } k = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Assim,

$$e^{k+1} = (I_n - \lambda B)^{k+1} e^0 \quad (3.1.7)$$

e usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz em (3.1.7),

$$\|e^{k+1}\|_2 \leq \|(I_n - \lambda B)\|_2^{k+1} \|e^0\|_2, \quad \text{para } k = 0, 1, \dots \quad (3.1.8)$$

Como $I_n - \lambda B$ é uma matriz simétrica se cumpre $\|I_n - \lambda B\|_2 = \rho(I_n - \lambda B)$. Vamos calcular o raio espectral da matriz

$$\begin{aligned} I_n - \lambda B &= I_n - \lambda (V \Sigma^T U^T) (U \Sigma V^T) \\ &= I_n - \lambda V \Sigma^T \Sigma V^T \\ &= V (I_n - \lambda \Sigma^T \Sigma) V^T. \end{aligned}$$

Então $\rho(I_n - \lambda B) = \max\{|1 - \lambda \sigma_i^2|, i = 1, 2, \dots, r\}$. Logo, $\rho(I_n - \lambda B) = |1 - \lambda \sigma_r^2|$. Por (3.1.5) temos que $|1 - \lambda \sigma_r^2| < 1$ o qual garante a convergência do algoritmo (3.1.1) para \hat{x} .

Para o caso $M = I_n$ se $x^0 \in \mathcal{R}(A^T)$, então $x^{k+1} \in \mathcal{R}(A^T)$ para $k = 0, 1, \dots$. De fato, para $k = 0$ temos que

$$x^1 = (I_n - \lambda A^T A)x^0 + \lambda A^T b \in \mathcal{R}(A^T).$$

Suponha que se verifica para k , $x^k \in \mathcal{R}(A^T)$. Como

$$x^{k+1} = (I_n - \lambda A^T A)x^k + \lambda A^T b,$$

então $x^{k+1} \in \mathcal{R}(A^T)$. Portanto, qualquer solução do problema

$$\operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

pertence a $\mathcal{R}(A^T)$ e $\mathcal{R}(A^T)$ é fechado em \mathbb{R}^n , então

$$\hat{x} = \lim_{k \rightarrow \infty} x^{k+1} \in \mathcal{R}(A^T).$$

Suponha que \tilde{x} e \bar{x} são soluções do problema $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$, então

$$A^T A \hat{x} = A^T b$$

$$A^T A \bar{x} = A^T b.$$

Assim, $A^T A(\tilde{x} - \bar{x}) = 0$ e fazendo o produto interno

$$\langle A^T A(\tilde{x} - \bar{x}), \tilde{x} - \bar{x} \rangle = 0$$

$$\|A(\tilde{x} - \bar{x})\|_2^2 = 0.$$

Logo, $\tilde{x} - \bar{x} \in \mathcal{N}(A)$. Mas, $\tilde{x}, \bar{x} \in \mathcal{R}(A^T) = \mathcal{N}(A)^\perp$. Assim,

$$\tilde{x} - \bar{x} \in \mathcal{N}(A) \cap \mathcal{N}(A)^\perp = \{0\},$$

ou seja,

$$\tilde{x} = \bar{x},$$

mostrando que a solução de $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$ é única. ■

3.1.1 Análise da semiconvergência

Nos métodos iterativos aplicados aos problemas mal postos a sequência x^k está próxima da solução exata para k pequeno, isto é, a norma do erro $\|x^k - x_{\text{exata}}\|_2$ decresce, mas devido ao ruído nos dados cresce rapidamente quando k é grande, isto é, a solução regularizada x^k começa a incorporar as componentes do ruído e, assim, converge para



Figura 3.1: Semiconvergência das iterações do método Cimmino. Podemos observar que a medida que iteramos as soluções correspondentes a $k = 35$ e $k = 90$ tendem a divergir.

uma solução não desejada. Esta propriedade dos métodos iterativos é chamada de semiconvergência. Por exemplo, a semiconvergência do método de Cimmino (o qual será apresentado em 3.1.3) aplicado ao problema Lena com 0.25% de erro relativo nos dados pode ser observada na Figura 3.1. Note que a imagem começa a incorporar ruído à medida que k cresce.

Analisaremos a semiconvergência dos métodos SIRT para $T = I_n$. Assuma que

$$b = b_{\text{exato}} + \varepsilon,$$

em que ε é um vetor de ruídos e o parâmetro λ_k é constante e igual a λ . Pelo algoritmo SIRT temos que

$$x^{k+1} = (I_n - \lambda B)x^k + \lambda c, \quad k = 0, 1, \dots$$

Daí segue que

$$x^1 = (I_n - \lambda B)x^0 + \lambda c,$$

$$x^2 = (I_n - \lambda B)x^1 + \lambda c = (I_n - \lambda B)^2 x^0 + \lambda [(I_n - \lambda B) + I_n]c$$

e, para k arbitrário, temos

$$x^{k+1} = (I_n - \lambda B)^{k+1} x^0 + \lambda \sum_{j=0}^k (I_n - \lambda B)^j c.$$

Considerando $x^0 = 0$, temos

$$x^{k+1} = \lambda \sum_{j=0}^k (I_n - \lambda B)^j c.$$

Como $B = A^T M A = V F V^T$ em que $F = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_r^2, 0, \dots, 0)$, temos

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^k (I_n - \lambda B)^j &= \sum_{j=0}^k (I_n - \lambda V F V^T)^j \\ &= \sum_{j=0}^k (V V^T - \lambda V F V^T)^j \\ &= \sum_{j=0}^k V (I_n - \lambda F)^j V^T \\ &= V \left(\sum_{j=0}^k (I_n - \lambda F)^j \right) V^T = V E_k V^T. \end{aligned}$$

Note que $E_k = \sum_{j=0}^k (I_n - \lambda F)^j$ tem o i -ésimo elemento da diagonal dado por

$$\sum_{j=0}^k (1 - \lambda \sigma_i^2)^j = \frac{1 - (1 - \lambda \sigma_i^2)^{k+1}}{\lambda \sigma_i^2}. \quad (3.1.9)$$

Assim,

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \lambda V E_{k+1} V^T c \\ &= V (\lambda E_{k+1}) V^T A^T M b \\ &= V (\lambda E_{k+1}) V^T (M^{\frac{1}{2}} A)^T M^{\frac{1}{2}} b \\ &= V (\lambda E_{k+1}) V^T (U \Sigma V^T)^T M^{\frac{1}{2}} b \\ &= V (\lambda E_{k+1}) \Sigma^T U^T M^{\frac{1}{2}} b. \end{aligned}$$

Se $\bar{x} = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b_{\text{exato}}\|_M$. Então $\bar{x} = (A^T M A)^{-1} A^T M b_{\text{exato}}$.

Logo,

$$\begin{aligned}\bar{x} &= (A^T M A)^{-1} (M^{\frac{1}{2}} A)^T M^{\frac{1}{2}} b_{\text{exato}} \\ &= V E \Sigma^T U^T M^{\frac{1}{2}} b_{\text{exato}}\end{aligned}$$

em que $E = \operatorname{diag}(1/\sigma_1, \dots, 1/\sigma_r, 0, \dots, 0)$. O erro na k -ésima iteração é

$$\begin{aligned}x^{k+1} - \bar{x} &= V(\lambda E_{k+1}) \Sigma^T U^T M^{\frac{1}{2}} (b_{\text{exato}} + \varepsilon) - V E \Sigma^T U^T M^{\frac{1}{2}} b_{\text{exato}} \\ &= V((\lambda E_{k+1} - E) \Sigma^T U^T M^{\frac{1}{2}} b_{\text{exato}} + \lambda E_{k+1} \Sigma^T U^T M^{\frac{1}{2}} \varepsilon).\end{aligned}$$

Sejam D_1^{k+1} e D_2^{k+1} definidos por

$$\begin{aligned}D_1^{k+1} &= (\lambda E_{k+1} - E) \Sigma^T \\ &= -\operatorname{diag}\left(\frac{(1 - \lambda \sigma_1^2)^{k+1}}{\sigma_1}, \dots, \frac{(1 - \lambda \sigma_r^2)^{k+1}}{\sigma_r}, 0, \dots, 0\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}D_2^{k+1} &= \lambda E_{k+1} \Sigma^T \\ &= \operatorname{diag}\left(\frac{1 - (1 - \lambda \sigma_1^2)^{k+1}}{\sigma_1}, \dots, \frac{1 - (1 - \lambda \sigma_r^2)^{k+1}}{\sigma_r}, 0, \dots, 0\right).\end{aligned}$$

Denotemos $\hat{b} = U^T M^{\frac{1}{2}} b_{\text{exato}}$, $\delta \hat{b} = U^T M^{\frac{1}{2}} \varepsilon$ e o erro projetado $e^{V,k+1}$ como $e^{V,k+1} \equiv V^T (x^{k+1} - \bar{x}) = D_1^{k+1} \hat{b} + D_2^{k+1} \delta \hat{b}$.

Seja

$$\phi^k(\sigma, \lambda) = \frac{(1 - \lambda \sigma^2)^k}{\sigma} \quad (3.1.10)$$

$$\psi^k(\sigma, \lambda) = \frac{1 - (1 - \lambda \sigma^2)^k}{\sigma}. \quad (3.1.11)$$

Então, a j -ésima componente para $e^{V,k+1}$ é dada por

$$e_j^{V,k+1} = -\phi^{k+1}(\sigma_i, \lambda) \hat{b}_j + \psi^{k+1}(\sigma_i, \lambda) \delta \hat{b}_j, \quad (3.1.12)$$

em que o primeiro termo é o erro de iteração e o segundo é o erro do ruído.

Vamos estudar o comportamento das funções $\phi^k(\sigma, \lambda)$ e $\psi^k(\sigma, \lambda)$.

Proposição 3.1.1. *Seja*

$$0 < \epsilon \leq \lambda \leq \frac{2}{\sigma_1^2} - \epsilon, \quad e \quad 0 < \sigma_p \leq \sigma < \frac{1}{\sqrt{\lambda}}. \quad (3.1.13)$$

- (a) Para λ e σ fixos então $\phi^k(\sigma, \lambda)$ é decrescente e convexa, e $\psi^k(\sigma, \lambda)$ é crescente e côncava como funções de k .
- (b) Para todos os números inteiros $k > 0$ temos que $\phi^k(\sigma, \lambda), \psi^k(\sigma, \lambda) \geq 0$ e $\phi^k(\sigma, 0) = \frac{1}{\sigma}, \psi^k(\sigma, 0) = 0$.
- (c) Para λ fixo e para todo $k \geq 0$, a função $\phi^k(\sigma, \lambda)$ é decrescente.

Demonstração.

- (a) Denotamos por ϕ_k^k e ϕ_{kk}^k a primeira e segunda derivada de $\phi^k(\sigma, \lambda)$ com respeito a k .

Seja $y = y(\sigma) = 1 - \lambda\sigma^2$. Por (3.1.13), temos que

$$0 < y \leq 1 - \epsilon\sigma_p^2 < 1. \quad (3.1.14)$$

Note que $\phi^k(\sigma, \lambda) = y^k/\sigma$ e $\psi^k(\sigma, \lambda) = (1 - y^k)/\sigma$.

Calculamos a primeira e segunda derivada de $\phi^k(\sigma, \lambda)$:

$$\begin{aligned} \phi_k^k &= (\ln(y)/\sigma)y^k \\ \phi_{kk}^k &= (\ln(y))^2/\sigma y^k. \end{aligned}$$

Por (3.1.14), $y \in (0, 1)$. Então $\phi_k^k < 0$ e $\phi_{kk}^k > 0$. Portanto, $\phi^k(\sigma, \lambda)$ é decrescente e convexa.

Para provar que $\psi^k(\sigma, \lambda)$ é crescente e côncava, procedemos de maneira análoga, considerando-se que

$$\psi^k(\sigma, \lambda) = 1/\sigma - \phi^k(\sigma, \lambda).$$

- (b) Segue da definição de $\phi^k(\sigma, \lambda)$ e $\psi^k(\sigma, \lambda)$, em (3.1.10) e (3.1.11) respectivamente.
- (c) Sejam $\sigma', \sigma'' \geq \sigma_p$ tais que

$$1/\sqrt{\lambda} > \sigma'' > \sigma' \geq \sigma_p.$$

De (3.1.13) temos que $1 - \lambda\sigma^2 > 0$ e, assim, $y(\sigma''), y(\sigma') \in (0, 1)$. Logo, $y(\sigma')/\sigma' > y(\sigma'')/\sigma''$. Portanto, $\phi^k(\sigma, \lambda)$ é decrescente como função de σ no intervalo $[\sigma_p, \frac{1}{\sqrt{\lambda}})$. ■

A Figura 3.2 mostra o comportamento das funções $\phi^k(\sigma, \lambda)$ e $\psi^k(\sigma, \lambda)$ para diferentes valores de σ e λ fixo.

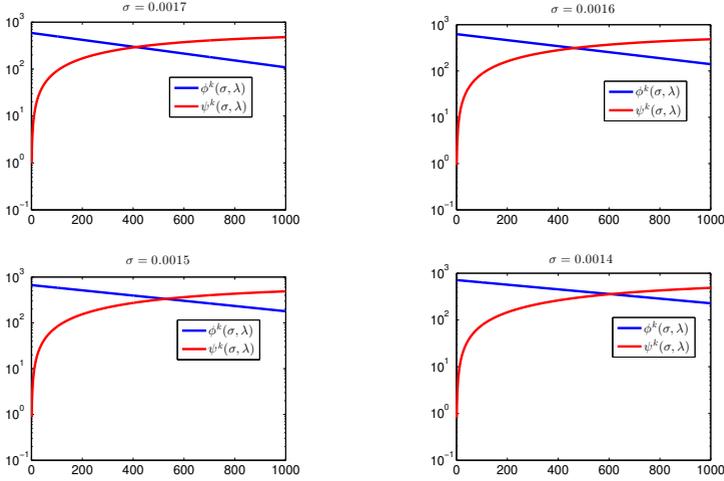


Figura 3.2: Comportamento das funções $\psi^k(\sigma, \lambda)$ e $\phi^k(\sigma, \lambda)$ com λ fixo e para valores de $\sigma = 0.0017, 0.0016, 0.0015, 0.0014$

Proposição 3.1.2. *Assuma que*

$$0 < \epsilon \leq \lambda \leq \frac{2}{\sigma_1^2} - \epsilon, \quad 0 < \sigma_p \leq \sigma < \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \quad (3.1.15)$$

e λ fixo. Para todo $k \geq 2$ existe um $\sigma^* \in (0, 1/\sqrt{\lambda})$ tal que

$$\sigma_k^* = \arg \max_{0 < \sigma < 1/\sqrt{\lambda}} \psi^k(\sigma, \lambda). \quad (3.1.16)$$

Além disso, σ_k^* é único e é dado por

$$\sigma_k^* = \sqrt{\frac{1 - \zeta_k}{\lambda}} \quad (3.1.17)$$

em que ζ_k é a única raiz em $(0, 1)$ de

$$g_{k-1}(y) = (2k - 1)y^{k-1} - (y^{k-2} + \dots + y + 1) = 0. \quad (3.1.18)$$

Demonstração. Denotemos por ψ' a derivada de ψ^k com respeito a σ .

Então,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\lambda}\psi'(\sigma, \lambda) &= 2k(1 - \lambda\sigma^2)^{k-1} - \frac{1 - (1 - \lambda\sigma^2)^k}{\lambda\sigma^2} \\
&= 2k(1 - \lambda\sigma^2)^{k-1} - \frac{1 - (1 - \lambda\sigma^2)^k}{1 - (1 - \lambda\sigma^2)^k} \\
&= (2k - 1)y^{k-1} - (y^{k-2} + \dots + y + 1) = g_{k-1}(y),
\end{aligned}$$

em que $y = 1 - \lambda\sigma^2$. Devido ao fato da função g_{k-1} ser contínua com $g_{k-1}(0) = -1$ e $g_{k-1}(1) = k$, temos pelo Teorema do Valor Intermediário que existe $\zeta_k \in (0, 1)$ tal que $g_{k-1}(\zeta_k) = 0$. Para facilitar a notação, denotamos $g = g_{k-1}$, $z = \zeta_k$ e $\sigma^* = \sigma_k^*$. Então, $\zeta_k = 1 - \lambda\sigma^2$, $\sigma^* = \sqrt{\frac{1-\zeta}{\lambda}}$ é um ponto crítico de ψ^k , que pertence ao intervalo $(0, 1/\sqrt{\lambda})$.

Agora, demonstraremos a unicidade de $z = \zeta_k$. Para tanto, note que

$$\begin{aligned}
\frac{g(y)}{y - z} &= (2k - 1)y^{k-2} + ((2k - 1)z - 1)y^{k-3} \\
&\quad + ((2k - 1)z^2 - z - 1)y^{k-4} + \dots + \\
&\quad + ((2k - 1)z^{k-2} - z^{k-3} - \dots - z - 1) \equiv Q(y).
\end{aligned}$$

Assim, $Q(0) = g(0)/(-z) = 1/z > 0$. Para completar a prova só resta ver que $Q(y)$ cresce com $y > 0$. Seja, $0 < t < 1$ e $\alpha > 0$ tal que $t + \alpha < 1$. Então

$$\begin{aligned}
Q(t + \alpha) - Q(t) &= (2k - 1)((t + \alpha)^{k-2} - t^{k-2}) \\
&\quad + ((2k - 1)z - 1)((t + \alpha)^{k-3} - t^{k-3}) \\
&\quad + ((2k - 1)z^2 - z - 1)((t + \alpha)^{k-4} - t^{k-4}) + \dots \\
&\quad + ((2k - 1)z^{k-3} - z^{k-4} - \dots - z - 1)((t + \alpha) - t).
\end{aligned}$$

Como $g(z) = (2k - 1)z^{k-1} - (z^{k-2} + z^{k-3} + \dots + z + 1) = 0$ e, por (3.1.18), temos que

$$\begin{aligned}
z^{k-2}((2k - 1)z - 1) &= (z^{k-3} + \dots + z + 1), \\
z^{k-3}((2k - 1)z^2 - \zeta - 1) &= (z^{k-4} + \dots + z + 1), \\
&\vdots \\
z^2((2k - 1)z^{k-3} - z^{k-4} - \dots - z - 1) &= z + 1.
\end{aligned}$$

Daí segue que $Q(t + \alpha) - Q(t) > 0$. Portanto, z e σ^* são únicos, pois $g(y) = (y - z)Q(y)$ e $Q(y) > 0$, ou seja,

$$g(y) > 0 \quad \text{quando} \quad y > z \quad (3.1.19)$$

e

$$g(y) < 0 \quad \text{quando} \quad y < z. \quad (3.1.20)$$

Portanto, $y < z$ implica que $1 - \lambda\sigma^2 < z$ ou $\sigma > \sqrt{(1-z)/\lambda}$, ou seja, $\psi' = \lambda g(y) < 0$ quando $\sigma > \sigma^*$ e $\psi' = \lambda g(y) > 0$ quando $\sigma < \sigma^*$. Isto mostra que σ^* é o ponto máximo de $\psi^k(\sigma, \lambda)$. ■

Proposição 3.1.3. *A sequência $\{\zeta_k\}_{k \geq 2}$ definida na proposição acima satisfaz $0 < \zeta_k < \zeta_{k+1} < 1$ e $\lim_{k \rightarrow \infty} \zeta_k = \zeta = 1$.*

Demonstração. Pela Proposição 3.1.2 temos que $\zeta_k \in (0, 1)$. Usando (3.1.18), obtemos

$$g_k(y) = (2k + 1)y^k - 2ky^{k-1} + g_{k-1}(y). \quad (3.1.21)$$

Consideremos $g = g_k$ e $z = \zeta_{k+1}$. Pela Proposição 3.1.2 ζ_{k+1} é raiz de g_k portanto $g(z) = 0$.

Mostremos que $g(\zeta_k) < 0$, o qual por (3.1.20), implica que $\zeta_k < \zeta_{k+1}$. Usando (3.1.18) e a fórmula da série geométrica, obtemos

$$g_{k-1}(y) = (2k - 1)y^{k-1} - \frac{1 - y^{k-1}}{1 - y}. \quad (3.1.22)$$

Para $y = \frac{2k}{2k+1}$, temos que

$$g_{k-1}\left(\frac{2k}{2k+1}\right) = (2k - 1)\left(\frac{2k}{2k+1}\right)^{k-1} - \frac{1 - \left(\frac{2k}{2k+1}\right)^{k-1}}{1 - \frac{2k}{2k+1}} \quad (3.1.23)$$

$$= \frac{2(2k)^k - (2k+1)^k}{(2k+1)^{k-1}}, \quad (3.1.24)$$

sendo $2(2k)^k - (2k+1)^k > 0$, o qual equivale a dizer que $2^{1/k} > 1 + 1/(2k)$. Pela série de Taylor para a função 2^x podemos mostrar que $2^x - \frac{x}{2} - 1 > 0$ para $x > 0$. Assim, para $x = 1/k$ segue que

$g_{k-1}\left(\frac{2k}{2k+1}\right) > 0$. Pela Proposição 3.1.2, $g_{k-1}(\zeta_k) = 0$ e, assim, por (3.1.19)

$$\frac{2k}{2k+1} > \zeta_k. \quad (3.1.25)$$

Utilizando (3.1.22),

$$g_k(\zeta_k) = (2k + 1)(\zeta_k)^k - 2k(\zeta_k)^{k-1} + g_{k-1}(\zeta_k) \quad (3.1.26)$$

$$= (\zeta_k)^{k-1}((2k + 1)\zeta_k - 2k) < 0. \quad (3.1.27)$$

Logo, $0 < \zeta_k < \zeta_{k+1} < 1$. Como a sequência ζ_k é crescente e limitada, então existe o limite

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \zeta_k = \zeta \quad (3.1.28)$$

e $\zeta \in [0, 1]$. Mostraremos que $\zeta = 1$. Como $\zeta_k \in (0, 1)$, então tome $\zeta_k = 1 - z_k$. Além disso, ζ_k é raiz de g_{k-1} ,

$$g_{k-1}(1 - z_k) = 0 = (2k - 1)(1 - z_k)^{k-1} - \frac{1 - (1 - z_k)^{k-1}}{z_k}. \quad (3.1.29)$$

Segue-se que $(1 - z_k)^{k-1}((2k - 1)z_k + 1) = 1$ e assim $(1 - z_k)^{-(k-1)} = (2k - 1)z_k + 1 < 2k$. Tomando o limite quando $k \rightarrow \infty$, temos que $0 < -\ln(1 - z_k) = -\ln(z_k) \leq \ln(2k)/(k - 1) \rightarrow 0$. Consequentemente, $\zeta = \lim_{k \rightarrow \infty} \zeta_k = 1$. ■

A Figura 3.3 mostra o comportamento de $\psi^k(\sigma, \lambda)$ como função de σ , para um λ fixo. Observamos que σ_k^* decresce com k .

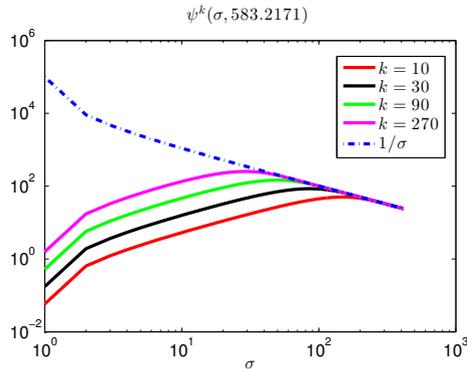


Figura 3.3: A função $\psi^k(\sigma, \lambda)$ como função de σ para $\lambda = 583.2171$ e $k = 10, 30, 90, 270$. A linha pontilhada denota o máximo de $\psi^k(\sigma, \lambda)$ como função de k .

Proposição 3.1.4. *O valor de $\psi^k(\sigma_k^*, \lambda)$ cresce com k .*

Demostração. Pela Proposição 3.1.1 parte (a) temos que

$$\psi^k(\sigma, \lambda) \leq \psi^{k+1}(\sigma, \lambda), \quad \sigma_p \leq \sigma < 1/\sqrt{\lambda}.$$

Este resultado é válido para $\sigma \geq \sigma_p$, mas também é válido para $\sigma > 0$. Logo,

$$\max_{0 < \sigma < 1/\sqrt{\lambda}} \psi^k(\sigma, \lambda) \leq \max_{0 < \sigma < 1/\sqrt{\lambda}} \psi^{k+1}(\sigma, \lambda). \quad (3.1.30)$$

Portanto de (3.1.30) temos que

$$\psi^k(\sigma_k^*, \lambda) \leq \psi^{k+1}(\sigma_{k+1}^*, \lambda)$$

em que $\sigma_k^*, \sigma_{k+1}^* \in (0, 1/\sqrt{\lambda})$. ■

3.1.2 Método de Landweber

Lembremos que o método clássico de Landweber, introduzido por Landweber em 1951 [41], tem a seguinte forma,

$$x^{k+1} = x^k + \lambda A^T(b - Ax^k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.1.31)$$

Notemos que isso corresponde a definir $M = T = I_n$ em (3.1.1).

O próximo teorema garante que, enquanto o princípio de discrepância não é satisfeita, a aproximação para a solução não piora.

Teorema 3.1.2. *Seja $\lambda \in (0, 2/\rho(A^T A))$ tal que $\|b - b_{\text{exato}}\|_2 \leq \delta_1$. Se $\|b - Ax^k\|_2 > 2\delta_1$, então*

$$\|x^{k+1} - x_{\text{exato}}\|_2 \leq \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2, \quad \text{para todo } k = 0, 1, 2, \dots$$

Demostração Calculemos

$$\begin{aligned} \|x^{k+1} - x_{\text{exato}}\|_2^2 &= \|(x^k - x_{\text{exato}}) + \lambda A^T(b - Ax^k)\|_2^2 \\ &= \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + 2\lambda \langle x^k - x_{\text{exato}}, A^T(b - Ax^k) \rangle \\ &\quad + \lambda^2 \langle A^T(b - Ax^k), A^T(b - Ax^k) \rangle \\ &= \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + 2\lambda \langle A(x^k - x_{\text{exato}}), (b - Ax^k) \rangle \\ &\quad + \lambda^2 \langle A^T(b - Ax^k), A^T(b - Ax^k) \rangle. \end{aligned}$$

Como $Ax_{\text{exato}} = b_{\text{exato}}$, então

$$\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x_{\text{exato}}\|_2^2 &= \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + 2\lambda\langle Ax^k - b_{\text{exato}}, b - Ax^k \rangle \\
&\quad + \lambda^2\langle A^T(b - Ax^k), A^T(b - Ax^k) \rangle \\
&= \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + 2\lambda\langle b - b_{\text{exato}}, b - Ax^k \rangle \\
&\quad + 2\lambda\langle Ax^k - b, b - Ax^k \rangle \\
&\quad + \lambda^2\langle b - Ax^k, AA^T(b - Ax^k) \rangle \\
&= \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + 2\lambda\langle b - b_{\text{exato}}, b - Ax^k \rangle \\
&\quad - \lambda\|b - Ax^k\|_2^2 \\
&\quad + \lambda\langle b - Ax^k, (\lambda AA^T - I)(b - Ax^k) \rangle. \tag{3.1.32}
\end{aligned}$$

Usando a decomposição SVD de A (3.1.4) obtemos que os autovalores de $I - \lambda AA^T$ são $1 - \lambda\sigma_i^2$, $i = 1, \dots, r$. Pela hipótese $\lambda \in (0, 1/\rho(A^T A))$, ou seja, $0 < \lambda < 1/\sigma_1^2$. Assim, os autovalores de $I - \lambda AA^T$ são positivos. Logo, a matriz $\lambda AA^T - I$ é definida negativa, ou seja, $\langle (\lambda AA^T - I)x, x \rangle < 0$ para todo $x \in \mathbb{R}^m$.

Em (3.1.32) temos

$$\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x_{\text{exato}}\|_2^2 &< \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + 2\lambda\langle b - b_{\text{exato}}, b - Ax^k \rangle \\
&\quad - \lambda\|b - Ax^k\|_2^2
\end{aligned}$$

e pela desigualdade de Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x_{\text{exato}}\|_2^2 &< \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + 2\lambda\|b - b_{\text{exato}}\|_2\|b - Ax^k\|_2 \\
&\quad - \lambda\|b - Ax^k\|_2^2.
\end{aligned}$$

Pela hipótese $\|b - b_{\text{exato}}\|_2 \leq \delta_1$, então

$$\|x^{k+1} - x_{\text{exato}}\|_2^2 < \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2 + \lambda\|b - Ax^k\|_2(2\delta_1 - \|b - Ax^k\|_2).$$

Além disso, $2\delta_1 - \|b - Ax^k\|_2 < 0$. Logo,

$$\|x^{k+1} - x_{\text{exato}}\|_2^2 < \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2^2.$$

■

3.1.3 Método de Cimmino

Gianfranco Cimmino (1908-1989) [16] desenvolveu outro método iterativo baseado em reflexões sobre hiperplanos. Mas também tem outra

versão com projeções.

Denotemos a i -ésima linha de $A = [a_{ij}]$ por

$$a^i = [a_{i1}, \dots, a_{in}] \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, m.$$

Seja \mathcal{H}_i o hiperplano definido pela equação linear $\langle a^i, x \rangle = b_i$

$$\mathcal{H}_i = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \langle a^i, x \rangle = b_i\}, \quad i = 1, \dots, m.$$

O método Cimmino baseado nas projeções consiste em usar a média das projeções de x^k sobre o hiperplano \mathcal{H}_i . Seja \mathcal{P}_i o operador projeção no hiperplano \mathcal{H}_i . Então segue que

$$\mathcal{P}_i(z) = z + \frac{b_i - \langle a^i, z \rangle}{\|a^i\|_2^2} a^i. \quad (3.1.33)$$

A Figura 3.4 mostra o método de Cimmino em \mathbb{R}^2

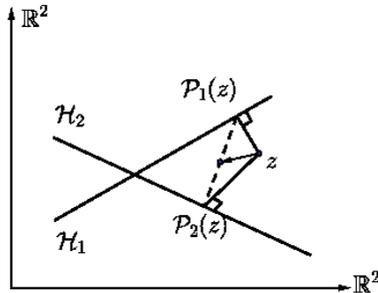


Figura 3.4: Método Cimmino baseado em projeções

A versão do método baseado em projeção calcula as iteradas através de:

$$x^{k+1} = x^k + \lambda \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m w_i (\mathcal{P}_i(x^k) - x^k)$$

em que o parâmetro de relaxação λ determina a longitude do passo entre x^k e x^{k+1} , e $w_i > 0$ são pesos definidos pelo usuário. Usando a definição de projeção ortogonal, podemos reescrever o algoritmo na forma

$$x^{k+1} = x^k + \lambda \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m w_i \frac{b_i - \langle a^i, x^k \rangle}{\|a^i\|_2^2} a^i, \quad i = 0, 1, \dots$$

Em forma matricial o método é

$$x^{k+1} = x^k + \lambda A^T M(b - Ax^k)$$

em que $M = \frac{1}{m} \text{diag}(\frac{w_i}{\|a^i\|_2^2})$ para $i = 1, 2, \dots, m$.

3.1.4 Método CAV (Component Averaging)

O método CAV, desenvolvido por Censor, Gordon and Gordon [11], emprega uma matriz diagonal de pesos w_i que depende da esparsidade da matriz A . O método é uma extensão do método Cimmino que inclui um termo proporcional ao número de elementos não nulos da matriz A . O objetivo deste método é acelerar o processo da convergência. Seja s_j o número de elementos não nulos da j -ésima coluna de A , $j = 1, 2, \dots$ e $\|a^i\|_S^2 = \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 s_j$. O método CAV calcula as iteradas na forma:

$$x_j^{k+1} = x_j^k + \lambda \sum_{i=1}^m w_i \frac{b_i - \langle a^i, x^k \rangle}{\|a^i\|_S^2} a_j^i \quad k = 0, 1, \dots$$

em que $w_i > 0$ são os pesos definidos pelo usuário.

Em forma matricial o algoritmo CAV é

$$x^{k+1} = x^k + \lambda A^T D_S(b - Ax^k),$$

em que $S = \text{diag}(s_1, s_2, \dots, s_n)$, $D_s = \text{diag}(\frac{w_i}{\|a^i\|_S^2})$ para $i = 1, \dots, m$ e $\|a^i\|_S^2 = (a^i)^T S a^i$.

3.1.5 Método DROP (Diagonally Relaxed Orthogonal Projections)

O método DROP foi desenvolvido por Censor, Elfving, Herman e Nikazad [12]. Este método combina a matriz diagonal por pesos e as projeções ortogonais. O método DROP é outra extensão do método Cimmino inspirado no método CAV. No método DROP também temos os pesos correspondentes a cada equação. O algoritmo DROP é da forma

$$x^{k+1} = x^k + \lambda \sum_{i=1}^m w_i S^{-1} (P_i(x^k) - x^k). \quad (3.1.34)$$

em que $P_i(x^k)$ é definido como (3.1.33) e S é definido como no método CAV. Usando (3.1.33) podemos reescrever o algoritmo DROP da

seguinte forma

$$x_j^{k+1} = x_j^k + \lambda_k \frac{1}{s_j} \sum_{i=1}^{i=j} w_i \frac{b_i - \langle a^i, x \rangle}{\|a^i\|_2^2} a_j^i, \quad k = 0, 1, \dots$$

para $j = 1, 2, \dots, n$. Note que se $w_i = 1$ para $i = 1, \dots, m$ e a matriz A é densa, ou seja, $s_j = m$ para $j = 1, \dots, n$, obtemos o método de Cimmino.

O método DROP possui a seguinte forma matricial

$$x^{k+1} = x^k + \lambda_k S^{-1} A^T D (b - Ax^k) \quad (3.1.35)$$

que é da forma (3.1.1) com $T = S^{-1}$ e $M = D = \text{diag}(\frac{w_i}{\|a^i\|_2^2})$.

Visto que no método DROP temos que $T \neq I_n$. Logo, a convergência da sequência (3.1.35) não é consequência imediata do teorema (3.1.1). Porém, se introduzimos $y^k = S^{\frac{1}{2}} x^k$ e $\bar{A} = AS^{-\frac{1}{2}}$, então a sequência (3.1.35) pode ser escrita como

$$y^{k+1} = y^k + \lambda_k \bar{A}^T D (b - \bar{A}y^k).$$

Lema 3.1.1. *Assuma que $w_i > 0$, para todo $i = 1, \dots, m$ e que $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Se $D = \text{diag}(\frac{w_i}{\|a^i\|_2^2}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ e $S^{-1} = \text{diag}(\frac{1}{s_j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, com $s_i \neq 0$, então $\rho(S^{-1} A^T D A) \leq \max\{w_i | i = 1, \dots, m\}$.*

Demonstração. Seja μ o autovalor de $S^{-1} A^T D A$ associado ao autovetor v , ou seja, $S^{-1} A^T D A v = \mu v$ e multiplicando por A . Fazendo $u = D A v$ temos

$$AS^{-1} A^T u = \mu D^{-1} u. \quad (3.1.36)$$

Assim,

$$\langle u, AS^{-1} A^T u \rangle = \mu \langle u, D^{-1} u \rangle$$

implica

$$\mu = \frac{\langle u, AS^{-1} A^T u \rangle}{\langle u, D^{-1} u \rangle}.$$

Também temos que

$$\begin{aligned} \langle u, AS^{-1} A^T u \rangle &= \|S^{-\frac{1}{2}} A^T u\|_2^2 = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m (1/\sqrt{s_j}) a_j^i u_i \right)^2 \\ &= \sum_{j=1}^n (1/s_j) \left(\sum_{i=1}^m a_j^i u_i \right)^2. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\mu = \frac{\sum_{j=1}^n (1/s_j) (\sum_{i=1}^m a_j^i u_i)^2}{\sum_{i=1}^m u_i^2 (\|a^i\|_2^2 / w_i)}. \quad (3.1.37)$$

A desigualdade de Cauchy-Schwarz garante que

$$\left(\sum_{i=1}^m a_j^i u_i \right)^2 \leq s_j \sum_{i=1}^m u_i^2 (a_j^i)^2. \quad (3.1.38)$$

Substituindo (3.1.38) em (3.1.37) e alterando a ordem do somatório

$$\mu \leq \frac{\sum_{i=1}^m u_i^2 \|a^i\|_2^2}{\sum_{i=1}^m (1/w_i) u_i^2 \|a^i\|_2^2} \leq \max\{w_i | i = 1, \dots, m\}, \quad (3.1.39)$$

o que completa a demonstração. \blacksquare

Teorema 3.1.3. *Assuma que $w_i > 0$ para todo $i = 1, \dots, m$. Se para todo $k \geq 0$,*

$$0 < \epsilon \leq \lambda_k \leq \frac{(2 - \epsilon)}{\max\{w_i | i = 1, \dots, m\}},$$

em que $\epsilon > 0$ é um número fixo, arbitrário e muito pequeno, então qualquer sequência gerada por (3.1.34) converge para a solução dos mínimos quadrados $x^ = \operatorname{argmin}\{\|Ax - b\|_D | x \in \mathbb{R}^n\}$. Adicionalmente, se $x^0 \in \mathcal{R}(S^{-1}A^T)$, então x^* é a única solução de norma mínima na norma S .*

Demonstração. Pela hipótese, temos

$$0 < \epsilon \leq \lambda_k \leq \frac{(2 - \epsilon)}{\max\{w_i | i = 1, \dots, m\}}. \quad (3.1.40)$$

Observe que,

$$\begin{aligned} \rho(\bar{A}^T D \bar{A}) &= \rho(S^{-\frac{1}{2}} A^T D A S^{-\frac{1}{2}}) \\ &= \rho(S^{-\frac{1}{2}} S^{-\frac{1}{2}} A^T D A S^{-\frac{1}{2}} S^{\frac{1}{2}}) \\ &= \rho(S^{-1} A^T D A) \end{aligned}$$

e pelo Lema (3.1.1) obtemos

$$\rho(\bar{A}^T D \bar{A}) \leq \max\{w_i | i = 1, \dots, m\}.$$

Logo em (3.1.40) obtemos

$$0 < \epsilon \leq \lambda_k \leq \frac{(2 - \epsilon)}{\rho(\bar{A}^T D \bar{A})}.$$

Usando as transformações $y^k = S^{\frac{1}{2}}x^k$ e $\bar{A} = AS^{-\frac{1}{2}}$ o algoritmo DROP tem a forma

$$y^{k+1} = y^k + \lambda_k \bar{A}^T D(b - \bar{A}y^k).$$

Aplicando o Teorema 3.1.1, obtemos que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y^k = y^* \quad e \quad y^* = \operatorname{argmin}\{\|Ay - b\|_D | y \in \mathbb{R}^m\}$$

então

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = S^{-\frac{1}{2}}y^* = x^* \quad e \quad x^* = \operatorname{argmin}\{\|Ax - b\|_D | x \in \mathbb{R}^n\}.$$

Além disso, se $y^0 \in \mathcal{R}(\bar{A}^T)$ então y^* é o único mínimo de $\|Ax - b\|_2$. Note que

$$\begin{aligned} \|y^*\|_2 &= \|S^{\frac{1}{2}}S^{-\frac{1}{2}}y^*\|_2 = \langle S^{\frac{1}{2}}S^{-\frac{1}{2}}y^*, S^{\frac{1}{2}}S^{-\frac{1}{2}}y^* \rangle \\ &= \langle SS^{-\frac{1}{2}}y^*, S^{-\frac{1}{2}}y^* \rangle \\ &= \langle Sx^*, x^* \rangle \\ &= \|x^*\|_S. \end{aligned}$$

Logo, x^* é o único mínimo de $\|Ax - b\|_S$, desde que $x^0 = S^{-\frac{1}{2}}y^0 \in \mathcal{R}(S^{-1}A^T)$. ■

3.1.6 Método SART (Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique)

O método SART tem a seguinte forma

$$x^{k+1} = x^k + \lambda V^{-1}A^T W(b - Ax^k),$$

em que $V = \operatorname{diag}(\zeta_j)$, $W = \operatorname{diag}(\frac{1}{\zeta_i})$, ζ^i e ζ_j denotam as somas dos elementos das linhas e colunas da matriz A respectivamente. Isto é

$$\begin{aligned} \zeta^i &= \sum_{j=1}^n a_j^i \quad \text{para } i = 1, \dots, m \\ \zeta_j &= \sum_{i=1}^m a_j^i \quad \text{para } j = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

3.2 ART(Algebraic Reconstruction Techniques)

Apresentamos um tipo diferente de métodos iterativos que são técnicas algébricas de reconstrução(ART). Os métodos tipo ART, introduzidos por Gordon em 1970 [26] tem como base os métodos iterativos de Kaczmarz. Todos os métodos tipo ART são totalmente sequenciais, ou seja, cada equação é tratada uma de cada vez.

3.2.1 O Método de Kaczmarz

O clássico e mais famoso método de tipo ART é denominado método de Kaczmarz. Ele é definido por

$$\begin{aligned}x^{k,0} &= x^k \\x^{k,i} &= x^{k,i-1} + \lambda \frac{b_i - \langle a^i, x^{k,i-1} \rangle}{\|a^i\|_2^2} a^i, \quad i = 1, 2, \dots, m, \\x^{k+1} &= x^{k,m}\end{aligned}$$

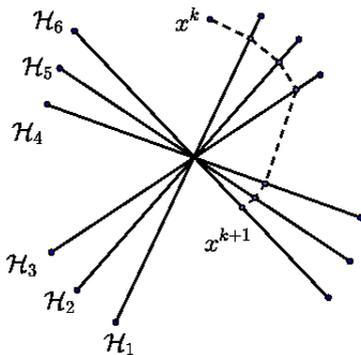


Figura 3.5: Método de Kaczmarz.

3.2.2 O Método Simétrico de Kaczmarz

O método simétrico de Kaczmarz foi introduzido por Björck e T. Elfving [7]. Consiste em um passo do método de Kaczmarz seguido de

outro passo do método Kaczmarz, em que as equações são usadas em ordem reversa.

$$\begin{aligned}
 x^{k,0} &= x^k \\
 x^{k,i} &= x^{k,i-1} + \lambda \frac{b_i - \langle a^i, x^{k,i-1} \rangle}{\|a^i\|_2^2} a^i, \quad i = 1, \dots, m, \dots, 2 \\
 x^{k+1} &= x^{k,1}.
 \end{aligned}$$

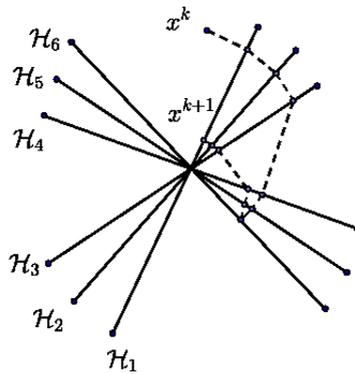


Figura 3.6: Método simétrico de Kaczmarz.

3.3 Métodos ART por blocos

Os métodos iterativos por blocos foram desenvolvidos por Elfving [21]. A ideia deste métodos consiste de projeções simultâneas sobre um conjunto de hiperplanos. Este tipo de métodos consiste em particionar o sistema em bloco de equações e tratar cada bloco com o método iterativo iterando ciclicamente.

Seja p o número dos blocos. Para $t = 1, \dots, p$ sejam os blocos de índices $B_t \subseteq \{1, 2, \dots, m\}$ um subconjunto ordenado da forma $B_t = \{i_1^t, i_2^t, \dots, i_{m(t)}^t\}$, $m(t)$ é o número de elementos em B_t . Assumamos que cada elemento de $\{1, 2, \dots, m\}$ aparece em pelo menos um dos conjuntos B_t , $t = 1, \dots, p$.

Para $t = 1, \dots, p$, seja A_t o bloco da matriz A e b^t o bloco do vetor b

$$A_t := \begin{bmatrix} a^{t_1} \\ a^{t_2} \\ \vdots \\ a^{t_{m(t)}} \end{bmatrix}, \quad b^t := \begin{bmatrix} b_{i_1^t} \\ b_{i_2^t} \\ \vdots \\ b_{i_{m(t)}^t} \end{bmatrix}, \quad t = 1, \dots, p.$$

Dado $x^0 \in \mathbb{R}^n$, o algoritmo tem a forma

$$x^{k+1} = x^k + \lambda_{t(k)} A_{t(k)}^T M_{t(k)} (b^{t(k)} - A_{t(k)} x^k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.3.1)$$

em que $\{\lambda_{t(k)}\}_{k \geq 0}$ são parâmetros de relaxação e $\{t(k)\}_{k \geq 0}$ é a sequência de controle que indica qual bloco é tomado em cada iteração. As matrizes $\{M_t\}_{t=1}^p$ são simétricas e positivas definidas.

Consideremos $\lambda_{t(k)} = \lambda_t$, para $t = 1, \dots, p$. A convergência dos métodos iterativos por blocos é garantida pelo seguinte teorema. A prova do teorema pode ser encontrada em [10].

Teorema 3.3.1. *Suponha que os parâmetros de relaxação satisfazem*

$$0 < \epsilon \leq \lambda_t \leq \frac{2 - \epsilon}{\rho(A_t^T M_t A_t)} \quad \text{para } t = 1, \dots, p$$

em que $\epsilon > 0$ é um número fixo, arbitrário e muito pequeno e $M_{t(k)}$ são matrizes simétricas e positivas definidas. Se $\{t(k)\}_{k \geq 0}$ é uma sequência de controle cíclico então qualquer sequência $\{x^k\}_{k \geq 0}$ gerada pelo algoritmo 3.3.1 converge para uma solução do sistema $Ax = b$. Adicionalmente, se $x^0 \in \mathcal{R}(A^T)$ então a solução converge para uma única solução de $Ax = b$, que tem a menor norma euclideana.

Nos problemas de reconstrução de imagens usamos matrizes da forma

$$A = (2\pi\sigma^2)^{-1} C \otimes C, \quad (3.3.2)$$

em que $C = [c_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica, banda e de Toeplitz. Para este tipo de matrizes os parâmetros de relaxação podem ser escolhidos iguais.

Proposição 3.3.1. *Seja $A = C \otimes C \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$, cujo tamanho dos blocos de A igual a n , ou seja,*

$$A_t = [c_{t,1}C \quad c_{t,2}C \quad \dots \quad c_{t,n}C], \quad t = 1, \dots, n.$$

Se $0 < \epsilon \leq \lambda_t \leq \frac{2 - \epsilon}{\rho(A_t^T M_t A_t)}$ para $t = 1, \dots, n$, então os valores λ_t , $t = 1, \dots, n$ podem ser escolhidos todos iguais:

$$\lambda_t = \lambda_1, \quad t = 1, \dots, n.$$

Demostração. Pela hipótese

$$0 < \epsilon < \lambda_t < \frac{(2 - \epsilon)}{\rho(A_t^T M_t A_t)} \quad \text{para } t = 1, 2, \dots, n.$$

Note que

$$\rho(A_t^T M_t A_t) = \rho(A_t^T M_t^{\frac{1}{2}} M_t^{\frac{1}{2}} A_t) = \rho(M_t^{\frac{1}{2}} A_t A_t^T M_t^{\frac{1}{2}}).$$

Para calcular o raio espectral da matriz $M_t^{\frac{1}{2}} A_t A_t^T M_t^{\frac{1}{2}}$, note que

$$\begin{aligned} A_t A_t^T &= \begin{bmatrix} c_{t,1} C & & & \\ c_{t,2} C & & & \\ & \vdots & & \\ c_{t,n} C & & & \end{bmatrix} \\ &= c_{t,1}^2 C^2 + c_{t,2}^2 C^2 \dots + c_{t,n}^2 C^2 \\ &= (c_{t,1}^2 + c_{t,2}^2 + \dots + c_{t,n}^2) C^2 \\ &= \|[c_{t,1} \quad c_{t,2} \quad \dots \quad c_{t,n}]\|_2^2 C^2 \\ &= \|C e_t\|_2^2 C^2. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\rho(M_t^{\frac{1}{2}} A_t A_t^T M_t^{\frac{1}{2}}) = \|C e_t\|_2^2 \rho(M_t^{\frac{1}{2}} C^2 M_t^{\frac{1}{2}}) = \rho(\|C e_t\|_2^2 C^2 M_t).$$

Agora

$$\begin{aligned} \|C e_t\|_2^2 C^2 M_t &= \|C e_t\|_2^2 C^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\|C e_1\|_2^2 \|C e_t\|_2^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \frac{1}{\|C e_n\|_2^2 \|C e_t\|_2^2} \end{pmatrix} \\ &= C^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\|C e_1\|_2^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \frac{1}{\|C e_n\|_2^2} \end{pmatrix}, \quad \text{para } t = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Assim, o raio espectral da matriz $M_t^{\frac{1}{2}} A_t A_t^T M_t^{\frac{1}{2}}$ é o mesmo para $t = 1, 2, \dots, n$. Portanto, podemos considerar $\lambda_t = \lambda_1$ para $t = 1, \dots, n$. ■

3.3.1 Método Kaczmarz por blocos

Este método foi proposto por Elfving [21] e depois desenvolvido por Eggermont, Hermann e Lent [18]. É também conhecido por método

Kaczmarz por blocos. Para $x^0 \in \mathbb{R}^n$ o algoritmo é da forma

$$\begin{aligned}x^{k,0} &= x^k \\x^{k,t} &= x^{k,t-1} + \lambda_t A_t^T M_t (b^t - A_t x^{k,t-1}), \quad t = 1, 2, \dots, p \\x^{k+1} &= x^{k,p}\end{aligned}$$

em que λ_t é um conjunto de parâmetros de relaxação e M_t é um conjunto de matrizes simétricas e positivas definidas. Em forma matricial o método é descrito como:

$$x^{k+1} = x^k + A^T \overline{M}_B (b - Ax^k), \quad (3.3.3)$$

$$\overline{M}_B = (\overline{D} + L)^{-1} \quad (3.3.4)$$

em que \overline{D} é uma matriz diagonal por blocos e L uma matriz triangular inferior em bloco definidos da seguinte forma:

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_2 A_1^T & \ddots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ A_p A_1^T & \cdots & A_p A_{p-1}^T & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.5)$$

e

$$\overline{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1} M_1^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{-1} M_2^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & & \lambda_p^{-1} M_p^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.3.6)$$

3.3.2 Kaczmarz simétrico por blocos

Para $x^0 \in \mathbb{R}^n$ o algoritmo pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned}x^{k,0} &= x^k \\x^{k,t} &= x^{k,t-1} + \lambda_t A_t^T M_t (b^t - A_t x^{k,t-1}), \quad t = 1, \dots, p-1, p, p-1, \dots, 1 \\x^{k+1} &= x^{k,1}\end{aligned}$$

em que $x^{k,1}$ denota o último passo, λ_t é um conjunto de parâmetros de relaxação e M_t é um conjunto de matrizes simétricas e positivas definidas.

Consideremos AA^T como decomposta na soma de três matrizes

$$AA^T = L + D + L^T$$

em que L é uma matriz triangular inferior por blocos, D uma matriz diagonal por blocos e L^T uma matriz triangular superior por blocos.

Seja $\tilde{D} = 2\bar{D} - D$ em que \bar{D} é dado por (3.3.6) e

$$\bar{M}_{SB} = (\bar{D} + L^T)^{-1} \tilde{D} (\bar{D} + L)^{-1}. \quad (3.3.7)$$

Então \bar{M}_{SB} é uma matriz simétrica e definida positiva.

Em forma matricial pode ser visto da forma

$$x^{k+1} = x^k + A^T \bar{M}_{SB} (b - Ax^k). \quad (3.3.8)$$

3.4 Método LSQR

O método LSQR, apresentado por Paige e Saunders [45], baseia-se na bidiagonalização de Golub-Kahan.

3.4.1 Bidiagonalização de Golub-Kahan

A ideia é explorar o fato de que toda matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pode ser fatorada na forma $A = UBV^T$ em que as matrizes $U \in \mathbb{R}^{m \times (n+1)}$ e $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ têm colunas ortonormais e a matriz $B \in \mathbb{R}^{(n+1) \times n}$ é bidiagonal inferior [25]. Da ortogonalidade da matriz V é imediato que

$$AV = UB \quad e \quad A^T U = VB^T.$$

Para obter tal fatoração, aplica-se um processo iterativo que no k -ésimo passo produz as matrizes

$$\begin{aligned} U_{k+1} &= [u_1, \dots, u_{k+1}] \in \mathbb{R}^{m \times (k+1)} \\ V_k &= [v_1, \dots, v_k] \in \mathbb{R}^{n \times k} \quad e \\ B_k &= \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & & & \\ & \beta_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \alpha_k & \\ & & & & \beta_{k+1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k} \end{aligned}$$

tais que

$$AV_k = U_{k+1} B_k. \quad (3.4.1)$$

Pelo fato da matriz B_k ser bidiagonal podemos considerar $\beta_1 v_0 \equiv 0$, $\alpha_{k+1} v_{k+1} \equiv 0$ e obtemos

$$A^T u_j = \beta_j v_{j-1} + \alpha_j v_j \quad (3.4.2)$$

$$A v_j = \alpha_j u_j + \beta_{j+1} u_{j+1}, \quad j = 1, \dots, k. \quad (3.4.3)$$

Começando com um vetor $u_1 \in \mathbb{R}^m$ com $\|u_1\|_2 = 1$ e $\alpha_1 = \|A u_1\|_2$, podemos gerar recursivamente os vetores

$$v_1, u_2, v_2, \dots, u_k, v_k, u_{k+1}$$

e os elementos da matriz B_k

Definição 3.4.1. (*Subespaço de Krylov*) O subespaço de Krylov de ordem r gerado por $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $b \in \mathbb{R}^n$ é dado por

$$\mathcal{K}_r(A, b) = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{r-1}b\}.$$

Proposição 3.4.1. Para u_j e v_j temos que $u_j \in \mathcal{K}_j(AA^T, u_1)$ e $v_j \in \mathcal{K}(AA^T, A^T u_1)$.

A demonstração da proposição anterior pode ser encontrada em [6].

Se escolhermos como vetor inicial u_1 o vetor $\frac{b}{\|b\|_2}$ teremos pela Proposição(3.4.1, que os vetores u_j e v_j para $j = 1, 2, \dots$ pertencerão aos espaços $\mathcal{K}_j(AA^T, b)$ e $\mathcal{K}_j(A^T A, A^T b)$, respectivamente. Além disso

$$\beta_1 u_1 = b, \quad \alpha_1 v_1 = A^T u_1$$

e usando as equações(3.4.2) e (3.4.3), obtemos no passo k da bidiagonalização U_{k+1} , V_k e B_k satisfazendo

$$\begin{aligned} \beta_1 U_{k+1} e_1 &= b \\ A V_k &= U_{k+1} b \\ A^T U_{k+1} &= V_k B_k^T + \alpha_{k+1} v_{k+1} e_{k+1}^T \end{aligned}$$

em que e_k denota o k -ésimo vetor canônico de dimensão apropriada.

O método LSQR produz uma seqüência de soluções aproximadas $\{x^k\}_k \geq 0$, para o problema (2.1.3) com $x^k \in \mathcal{K}_k(A^T A, A^T b)$. Para tanto, note da Proposição 3.4.1 que $\mathcal{K}_k(A^T A, A^T b) = \text{span}(V_k)$ e assim existe $y^k \in \mathbb{R}^k$ tal que

$$x^k = V_k y^k.$$

Agora consideremos o resíduo $r^k = b - Ax^k$. Utilizando (3.4.1) e o fato que $\beta_1 u_1 = b$ temos

$$\begin{aligned} r^k &= b - AV_k y^k \\ &= \beta_1 u_1 - U_{k+1} B_k y^k \\ &= \beta_1 U_{k+1} e_1 - U_{k+1} B_k y^k \\ &= U_{k+1} (\beta_1 e_1 - B_k y^k) \end{aligned}$$

em que e_1 é o primeiro vetor canônico de \mathbb{R}^{k+1} . Assim,

$$\|r^k\| = \|\beta_1 e_1 - B_k y^k\|_2$$

pois $U_{k+1}^T U_{k+1} = I_{k+1}$. Portanto,

$$x^k = \underset{x \in \mathcal{K}_k(A^T A, A^T b)}{\operatorname{argmin}} \{ \|b - Ax\|_2 \}$$

equivale a encontrar $y^k \in \mathbb{R}^k$ tal que

$$y^k = \underset{y \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} \|\beta_1 e_1 - B_k y^k\|_2. \quad (3.4.4)$$

Para resolver o problema (3.4.4) usamos a decomposição QR da matriz B_k :

$$Q_k B_k = \bar{R}_k = \begin{pmatrix} R_k \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k+1 \times k} \quad e \quad Q_k(\beta_1 e_1) = \begin{pmatrix} f_k \\ \bar{\phi}_{k+1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k+1}$$

em que $R_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ é uma matriz bidiagonal superior. Na prática, o problema (3.4.4) é resolvido eficientemente usando transformações ortogonais de Givens; para detalhes, veja Paige e Saunders [45].

Um resultado importante para as soluções x^k é que enquanto a sequência das normas da solução x^k cresce monotamente com k , as normas do resíduo correspondente $r^k = b - Ax^k$ decrescem monotona-mente com k , isto é,

$$\|x^{k+1}\|_2 \geq \|x^k\|_2 \quad e \quad \|r^{k+1}\|_2 \leq \|r^k\|_2.$$

Capítulo 4

Critério de Parada

Nesta seção introduzimos estratégias de escolha de um índice de parada apropriado para os métodos de regularização iterativos apresentados no capítulo anterior. A escolha de tal índice é crucial no uso de métodos iterativos para problemas discretos mal postos pois se fizermos muitas iterações estas tendem a incorporar ruído nos dados e portanto a solução não é apropriada. Por outro lado, se realizarmos poucas iterações perdemos informação importante.

As primeiras estratégias, a saber, princípio de Discrepância (DP) e regra de erro monótono (ME), são casos particulares de uma regra geral chamada de regra $\alpha - \beta$. Para os casos em que a estimativa do erro não é disponível, apresentamos duas regras de parada para o método LSQR chamada de produto mínimo e NCP.

4.1 A regra $\alpha - \beta$

Apresentamos um critério de parada dependente de dois parâmetros α e β . Desenvolvido por T. Elfving e T. Nikazad [20]. Neste trabalho estudaremos o uso deste critério nos métodos de regularização do tipo SIRT. Por simplicidade, o parâmetro λ_k será considerado constante em (3.1.1), i.e., $\lambda_k = \lambda$ e $\delta = \|\varepsilon\|_2$

Proposição 4.1.1. *Seja $\{x_k\}$ dado por (3.1.1), em que $T = I_n$ e $r^k = M^{\frac{1}{2}}(b - Ax^k)$. Sejam $Q = M^{\frac{1}{2}}AA^TM^{\frac{1}{2}}$, $W = I - \frac{\lambda\beta}{2(1-\alpha)}Q$, em que α e β são números reais. Se $e_k = \|x_{\text{exato}} - x^k\|_2$ e $t_1 = 2\lambda(1-\alpha)\langle r^k, Wr^k \rangle$, então*

$$e_{k+1}^2 = e_k^2 - \lambda(d_{\alpha,\beta} - 2\tau_k\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2r^k) - t_1 \quad (4.1.1)$$

para algum τ_k , $|\tau_k| \leq 1$, em que

$$d_{\alpha,\beta} = \langle r^k, (2\alpha + \beta - 1)r^k + (1 - \beta)r^{k+1} \rangle.$$

Demostração. O erro em cada iteração é da forma

$$\begin{aligned} e_{k+1}^2 &= \|x_{\text{exato}} - x^{k+1}\|_2^2 \\ &= \|x_{\text{exato}} - x^k - \lambda A^T M(b - Ax^k)\|_2^2 \\ &= e_k^2 - 2\lambda \langle x_{\text{exato}} - x^k, A^T M(b - Ax^k) \rangle \\ &\quad + \lambda^2 \|A^T M(b - Ax^k)\|_2^2. \end{aligned}$$

Usando as definições de r_k e Q temos $\lambda^2 \|A^T M(b - Ax^k)\|_2^2 = \lambda^2 \langle r^k, Qr^k \rangle$. Além disso, temos

$$\begin{aligned} &2\lambda \langle x_{\text{exato}} - x^k, A^T M(b - Ax^k) \rangle \\ &= 2\lambda \langle M^{1/2} b_{\text{exato}} - M^{1/2} Ax^k, r^k \rangle \\ &= 2\lambda \langle M^{1/2} b_{\text{exato}} - M^{1/2} b + (M^{1/2} b - M^{1/2} Ax^k), r^k \rangle \\ &= 2\lambda \langle b_{\text{exato}} - b, M^{1/2} r^k \rangle + 2\lambda \langle r^k, r^k \rangle. \end{aligned}$$

Mas, pela desigualdade de Cauchy-Schwarz temos

$$\langle b_{\text{exato}} - b, M^{1/2} r^k \rangle = -\tau_k \delta \|M^{1/2} r^k\|_2, \text{ para algum } \tau_k, -1 \leq \tau_k \leq 1.$$

Portanto,

$$e_{k+1}^2 = e_k^2 - 2\lambda \left(\|r^k\|_2^2 - \delta \tau_k \|M^{1/2} r^k\|_2 - \frac{\lambda}{2} \langle r^k, Qr^k \rangle \right).$$

Escrevendo

$$\|r^k\|_2^2 = \alpha \|r^k\|_2^2 + (1 - \alpha) \|r^k\|_2^2$$

e

$$-\langle r^k, Qr^k \rangle = -\beta \langle r^k, Qr^k \rangle + (\beta - 1) - \langle r^k, Qr^k \rangle$$

obtemos

$$e_k^2 - e_{k+1}^2 = \lambda(2\alpha \|r^k\|_2^2 - \lambda(1 - \beta) \langle r^k, Qr^k \rangle - 2\tau_k \delta \|M^{1/2} r^k\|_2) + t_1. \quad (4.1.2)$$

Notamos que

$$r^{k+1} = r^k - \lambda Qr^k.$$

então

$$-\lambda \langle r^k, Qr^k \rangle = \langle r^k, r^{k+1} - r^k \rangle. \quad (4.1.3)$$

Substituindo (4.1.3) em (4.1.2) obtemos

$$e_{k+1}^2 \leq e_k^2 - \lambda(d_{\alpha,\beta} - \tau\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2\|r^k\|_2) - t_1$$

em que $\tau = 2 \max_k |\tau_k|$. ■

Segundo (4.1.1) o erro decresce se $t_1 \geq 0$ e $d_{\alpha,\beta} - \tau\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2\|r^k\|_2 \geq 0$. Como consequência obtemos a seguinte regra que escolhe o primeiro índice para o qual

$$\text{regra} - \alpha, \beta : \quad \frac{d_{\alpha,\beta}}{\|r^k\|_2} \leq \tau\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2. \quad (4.1.4)$$

A seguir, apresentamos as condições para a regra $\alpha - \beta$ ser bem definida.

Proposição 4.1.2. *Sejam $\alpha, \beta \in (0, 1)$. Temos que :*

(a) *Se $\lambda \leq \lambda_1 = \frac{2(1-\alpha)}{\beta\sigma_1^2}$, então $t_1 \geq 0$.*

(b) *Se $\lambda \leq \lambda_2 = \frac{2\alpha}{(1-\beta)\sigma_1^2}$, então $d_{\alpha,\beta} \geq 0$*

Demonstração.

(a) Note que

$$\begin{aligned} t_1 &= 2\lambda(1-\alpha)\langle r^k, (I - \frac{\lambda\beta}{2(1-\alpha)}Q)r^k \rangle \\ &= 2\lambda(1-\alpha)\left(\|r^k\|_2^2 - \frac{\lambda\beta}{2(1-\alpha)}\langle r^k, Qr^k \rangle\right). \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

Pela hipótese $\alpha < 1$, então $1 - \alpha > 0$. Calculemos

$$\begin{aligned} \langle r^k, Qr^k \rangle &= \langle r^k, M^{1/2}AA^TM^{1/2} \rangle \\ &= \langle A^TM^{1/2}r^k, A^TM^{1/2} \rangle \\ &= \|A^TM^{1/2}r^k\|_2^2 \\ &\leq \|A^TM^{1/2}\|_2^2\|r^k\|_2^2 \\ &= \|M^{1/2}A\|_2^2\|r^k\|_2^2 \end{aligned}$$

Por (3.1.4) temos que

$$\langle r^k, Qr^k \rangle \leq \sigma_1^2\|r^k\|_2^2. \quad (4.1.6)$$

Pela desigualdade (4.1.6) em (4.1.5) obtemos

$$t_1 \geq 2\lambda(1-\alpha) \left(1 - \frac{\lambda\beta}{2(1-\alpha)\sigma_1^2} \right) \|r^k\|_2^2$$

e pela hipótese $\lambda \leq \lambda_1 = \frac{2(1-\alpha)}{\beta\sigma_1^2}$, então $t_1 \geq 0$.

(b) Note que

$$\begin{aligned} d_{\alpha,\beta} &= \langle r^k, (2\alpha + \beta - 1)r^k + (1 - \beta)r^{k+1} \rangle \\ &= (2\alpha + \beta - 1)\|r^k\|_2^2 - (\beta - 1)\langle r^k, r^{k+1} \rangle. \end{aligned}$$

Como $r^{k+1} = r^k - \lambda Qr^k$, então

$$d_{\alpha,\beta} = 2\alpha\|r^k\|_2^2 - \lambda(1 - \beta)\langle r^k, Qr^k \rangle.$$

Logo por (4.1.6) e pela hipótese $\lambda \leq \frac{2\alpha}{(1-\beta)\sigma_1^2}$ obtemos

$$d_{\alpha,\beta} \geq 0.$$

■

4.1.1 O princípio de discrepância (DP)

O método mais utilizado baseado na estimativa da norma do erro é o princípio de discrepância, atribuído a Morozov [43]. A ideia deste método é escolher o valor de k tal que

$$\|b - Ax^k\|_2 = \delta.$$

O critério de discrepância pode ser deducido da regra $\alpha - \beta$. Se $\alpha = 0.5$, $\beta = 1$, então $d_{0.5,1} = \|r^k\|_2^2 = d_{DP}$. O índice de parada $k = k_{0.5,1} = k_{DP}$ é o primeiro índice para o qual obtemos

$$\|r^k\|_2 \leq \tau\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2. \quad (4.1.7)$$

em que $0 \leq \tau \leq 2$. Note que para $\lambda \leq \lambda_1 = \frac{1}{\sigma_1^2}$ então pela proposição 4.1.2 o erro e_k decresce para $k = 1, \dots, k_{DP}$.

Para o caso dos método SIRT com $T = I_n$, o resíduo é decrescente. De fato,

$$\begin{aligned}
 \|r^k\|_2 &= \|M^{\frac{1}{2}}(b - Ax^k)\|_2 \\
 &= \|M^{\frac{1}{2}}(b - A(x^{k-1} + \lambda A^T M(b - Ax^{k-1})))\|_2 \\
 &= \|r^{k-1} - \lambda M^{\frac{1}{2}} A^T M^{\frac{1}{2}} r^{k-1}\|_2 \\
 &= \|(I - \lambda M^{\frac{1}{2}} A^T M^{\frac{1}{2}})r^{k-1}\|_2 \\
 &\leq \|I - \lambda M^{\frac{1}{2}} A^T M^{\frac{1}{2}}\|_2 \|r^{k-1}\|_2 \\
 &\leq \|r^{k-1}\|_2.
 \end{aligned}$$

Então resolver (4.1.7) equivale a encontrar a intersecção entre a curva da norma do resíduo e a reta horizontal $z = \tau\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2$ como se observa na Figura 4.1. A grande dificuldade deste método é que precisamos de uma estimativa para a norma do erro. Caso essa estimativa seja muito grande, podemos encontrar um valor de k muito grande causando inconvenientes já discutidos. O mesmo acontece com uma estimativa menor o que podendp ser mais indesejável pelo fato dos erros serem dominantes na construção da solução.

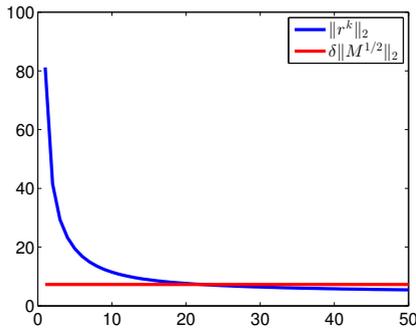


Figura 4.1: Interpretação geométrica do critério de discrepância para o método de Cimmino no problema Lena.

4.1.2 A regra do erro monótono (ME)

O critério foi desenvolvido independentemente por Alifanov, Artjukhin e Runjancev e Hämarik e Tautenhahn [27]. O critério procura

pelo primeiro índice k^* para o qual

$$\|x^{k-1} - x_{\text{exato}}\|_2 < \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2.$$

Para determinar tal índice note que

$$\begin{aligned} & \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2 - \|x^{k-1} - x_{\text{exato}}\|_2 \\ &= \langle x^k + x^{k-1} - 2x_{\text{exato}}, \lambda A^T M(b - Ax^k) \rangle \\ &= \lambda \langle M^{\frac{1}{2}} A(x^k + x^{k-1} - 2x_{\text{exato}}), M^{\frac{1}{2}}(b - Ax^k) \rangle \\ &= \lambda \langle 2M^{\frac{1}{2}}(b - Ax_{\text{exato}}) - (r^k + r^{k-1}), r^k \rangle \\ &= \lambda \langle 2M^{\frac{1}{2}}(b - b_{\text{exato}}) - (r^k + r^{k-1}), r^k \rangle \\ &\leq \lambda \|r^k\|_2 \left\{ 2\delta \|M^{\frac{1}{2}}\|_2 - \frac{\langle r^k + r^{k-1}, r^k \rangle}{\|r^k\|_2} \right\}. \end{aligned}$$

Portanto, devemos escolhemos o primeiro índice para o qual

$$\frac{\langle r^k + r^{k-1}, r^k \rangle}{\|r^k\|_2} \leq 2\delta \|M^{\frac{1}{2}}\|_2.$$

Este critério também é deduzido da regra $\alpha - \beta$ com $\alpha = 1$, $\beta = 0$. Nesse caso, $d_{1,0} = d_{ME} = \langle r^k, r^k + r^{k+1} \rangle$. O índice de parada $k = k_{0.5,1} = k_{ME}$ é o primeiro índice para o qual

$$\frac{d_{ME}}{\|r^k\|_2} \leq \tau \delta \|M^{\frac{1}{2}}\|_2.$$

em que $0 \leq \tau \leq 2$. Note que para $\lambda \leq \lambda_2 = \frac{2}{\sigma_1^2}$, pela Proposição 4.1.2, $d_{\alpha,\beta} \geq 0$. Além disso, $t_1 = 2\lambda(1 - \alpha)\langle r^k, W r^k \rangle = 0$. Logo, o erro e_k decresce para $k = 1, \dots, k_{ME}$.

No critério de parada $\alpha - \beta$ foi introduzido o parâmetro τ . O uso deste parâmetro é muito importante para a construção de um critério de parada que obtenha uma solução próxima da solução exata. Através de resultados numéricos obtidos no artigo [20] foi observado que a qualidade das soluções obtidas pelos métodos tipo SIRT para $M \neq I_n$ foram bastante sensíveis à escolha de τ . Assim, apresentamos um procedimento de escolha de τ para garantir uma regra de parada robusta.

4.1.3 Training Stopping Rules

Para elaborar regras de paradas eficazes usaremos um aspecto da teoria chamada treinamento. O treinamento é baseado no conhecimento

do índice para o qual o erro é mínimo em exemplos com diferentes níveis de ruído. Apresentamos a regra com mais detalhes. De (4.1.1) temos que

$$e_k^2 - e_{k+1}^2 \geq P_k$$

em que $P_k = \lambda(d_{\alpha,\beta} - \tau\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2\|r^k\|_2)$. A quantidade P_k atua como um preditor de $e_k^2 - e_{k+1}^2$. Enquanto $P_k > 0$ a iteração deve continuar até encontrar o primeiro índice para o qual

$$P_{k-1} > 0 \quad \text{e} \quad P_k \leq 0.$$

Portanto, obtemos o seguinte intervalo

$$R_k = \frac{d_{\alpha,\beta}(k)}{\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2\|r^k\|_2} \leq \tau \leq \frac{d_{\alpha,\beta}(k-1)}{\delta\|M^{\frac{1}{2}}\|_2\|r^{k-1}\|_2} = R_{k-1} \quad (4.1.8)$$

que é o intervalo de aceitação para τ .

O processo de treinamento pode ser descrito da seguinte maneira:

- (a) Escolha a solução teste x_{exato} .
- (b) Gere o vetor $b_{\text{exato}} = Ax_{\text{exato}}$.
- (c) Gere um vetor de ruídos para s valores: $b^i = b_{\text{exato}} + \delta b^i$, $i = 1, 2, \dots, s$
- (d) Para cada exemplo b^i , $i = 1, 2, \dots, s$ calcule $\{x^k(b^i)\}$ e encontre o índice

$$k = k_* = k_*(i)$$

tal que o erro relativo

$$E_{k(i)} = \frac{\|x^k(b^i) - x_{\text{exato}}\|_2}{\|x_{\text{exato}}\|_2}$$

seja mínimo.

- (e) Utilize (4.1.8) para encontrar o intervalo correspondente para τ

$$\tau : \tau = \tau_i \in [R_{k_*(i)}, R_{k_*(i-1)}].$$

Faça $\bar{\tau}_i = (R_{k_*(i)} + R_{k_*(i-1)})/2$ e defina $\bar{\tau} = 1/s \sum_{i=1}^s \bar{\tau}_i$.

- (f) Utilize $\tau = \bar{\tau}$ no critério de parada.

4.2 NCP (Normalized Cumulative Periodogram)

Os critérios já apresentados baseiam-se na decomposição SVD da matriz A e a quantidade de erro relativo nos dados. Não obstante, para problemas de grande porte, resulta difícil o cálculo da SVD. Além disso, nem sempre é possível conhecer a quantidade do ruído. Isso motivou o estudo de um novo critério baseado em argumentos estatísticos chamada de NCP.

O NCP foi introduzido por Rust [49]. A ideia é usar a transformada discreta de Fourier do resíduo e calcular o índice de parada que faz com que o resíduo se assemelhe a um ruído branco.

Seja \hat{r}^k a transformada discreta de Fourier (DFT) do vetor r^k

$$\hat{r}^k = \text{dft}(r^k) = ((\hat{r}^k)_1, (\hat{r}^k)_2, \dots, (\hat{r}^k)_m)^T \in \mathbb{C}^m.$$

A transformada é calculada pelo algoritmo conhecido como a FFT (Transformada Rápida de Fourier) que permite avaliar a DFT com menos esforço computacional. O espectro de potência de r^k é definido como o vetor real

$$p^k = (|(\hat{r}^k)_1|^2, |(\hat{r}^k)_2|^2, \dots, |(\hat{r}^k)_{q+1}|^2)^T, \quad q = \lfloor m/2 \rfloor$$

em que q o maior inteiro tal que $q \leq m/2$. Os elementos do espectro de potência $p^k \in \mathbb{R}^{q+1}$ representam a potência no sinal em cada componente da base espectral, a primeira componente de p^k representa o sinal constante e a última componente de p^k representa a maior frequência.

Definimos o NCP para o resíduo r^k como o vetor $c(r^k) \in \mathbb{R}^q$ cujos elementos envolvem as somas cumulativas do espectro de potência:

$$c(r^k)_i = \frac{(p^k)_2 + \dots + (p^k)_{i+1}}{(p^k)_2 + \dots + (p^k)_{q+1}}, \quad i = 1, \dots, q.$$

Note que $c(r^k)_q = 1$, e a primeira componente de p^k não é considerada no NCP.

Se o resíduo r^k consiste só de ruído branco, então por definição, o espectro de potência é constante, ou seja, $\varepsilon((p^k)_2) = \varepsilon((p^k)_3) = \dots = \varepsilon((p^k)_{q+1})$, em que ε denota valor esperado. Portanto, os pontos da curva NCP $(i, \varepsilon(c(r^k)_i))$ permanecem na linha reta do ponto $(0, 0)$ até $(q, 1)$. Porém, em geral o ruído nem sempre tem espectro constante e assim, o critério NCP considera o ruído que esteja próximo da linha reta. Em termos estatísticos, a curva do NCP deve permanecer nos

limites de Kolmogorov-Smirnoff: $\pm 1.35q^{-1/2}$ da linha reta, como observamos na Figura 4.2.

Na prática, é muito complicado alcançar os limites de Kolmogorov-Smirnoff. Assim, escolhemos o parâmetro de regularização para o qual o resíduo representa o melhor ruído branco, no sentido que a curva NCP fique próximo da linha reta.

Assim, o método NCP escolhe o $k_* = k_{NCP}$ como o minimizador da sequência definida por

$$d(k) = \|c(r^k) - c_{branco}\|_2$$

em que $c_{branco} = (1/q, 2/q, \dots, 1)^T$.

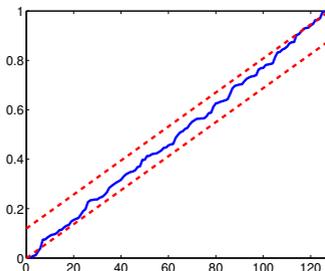


Figura 4.2: Ótima $c(r^k)$ para o problema **gravity** $n = 256$ com erro relativo $\|\varepsilon\|_2/\|b_{\text{exato}}\|_2 = 5\%$. As linhas pontilhadas são os limites de Kolmogorov-Smirnoff $\pm 1.35q^{-1/2} \approx \pm 0.12$.

4.3 Critério de produto mínimo

A ideia deste critério é que o número de iterações faça o papel do parâmetro de regularização, como no caso dos métodos de regularização de tipo Landweber, GMRES (Generalized Minimal Residual), MINRES (Minimum Residual), etc.

Enquanto as propriedades de regularização destes métodos são relativamente bem definidas, resulta menos evidente determinar o número adequado de iterações sem conhecimento a priori da norma do ruído.

Lembremos que o método LSQR constroi uma sequência de aproximações de (2.1.3) minimizando a norma residual no subespaço de Krylov $\mathcal{K}_k(A^T A, A^T b)$. Isto é,

$$x^k = \underset{x \in \mathcal{K}_k(A^T A, A^T b)}{\operatorname{argmin}} \|Ax - b\|_2$$

que pode ser escrito como

$$x^k = V_k y^k, \quad y^k = \underset{y \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} \|B_k y - \beta_1 e_1\|_2,$$

em que B_k e V_k são descritos no capítulo anterior.

O novo critério de parada introduzido por Bazán [5] escolhe o menor índice \hat{k} tal que

$$\hat{k} = \underset{k \geq 1}{\operatorname{argmin}} \{\psi_k\}, \quad \psi^k = \|b - Ax^k\|_2 \|x^k\|_2, \quad (4.3.1)$$

em que x^k resultam do método LQSR na iteração k . Este critério pode ser considerado uma versão discreta da regra de Regińska [47] para a regularização de Tikhonov que busca o mínimo da função contínua $\psi(\lambda) = \|x_\lambda\|_2 \|b - Ax_\lambda\|_2$.

Para uma melhor compreensão do critério vamos analisá-lo em relação ao método TSVD. Assim, consideramos a k -ésima solução via TSVD

$$x_{\text{TSVD}}^k = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i.$$

Assumimos que b_{exato} satisfaz a condição de Picard e assim existe um k^* tal que

$$|u_i^T b| = |u_i^T b_{\text{exato}} + u_i^T \varepsilon| \approx |u_i^T \varepsilon|, \quad \text{para } i > k^*. \quad (4.3.2)$$

Observe que uma estimativa para o erro pode ser escrita da forma

$$\begin{aligned} \|x^k - x_{\text{exato}}\|_2 &\leq \|A_k^\dagger b_{\text{exato}} - x_{\text{exato}}\|_2 + \|A_k^\dagger \varepsilon\|_2 \\ &\equiv E_1(k) + E_2(k), \end{aligned}$$

$$\text{em que } E_1(k) = \left(\sum_{i=k+1}^n \frac{|u_i^T b_{\text{exato}}|}{\sigma_i^2} \right)^{1/2} \text{ e } E_2(k) = \left(\sum_{i=1}^k \frac{|u_i^T \varepsilon|}{\sigma_i^2} \right)^{1/2}.$$

A primeira parcela, chamada erro de regularização, decresce com k e pode ser muito pequena para k muito grande. A segunda parcela, que corresponde ao erro do ruído, cresce com k e pode ser muito grande se $\sigma_i \approx 0$. Por conseguinte, a escolha do k requer um balanço entre estas duas quantidades a fim de fazer o erro global pequeno. Uma análise mais detalhada dos dois tipos do erro mostra que, para $k > k^*$, o erro $E_2(k)$ aumenta consideravelmente enquanto $E_1(k)$ permanece sob controle devido à condição discreta de Picard e assim, o erro total não

deve ser minimizado para $k > k^*$. Ao contrário, para $k < k^*$, o erro $E_1(k)$ aumenta regularmente com k , enquanto $E_2(k)$ permanece sob controle, devido a que os valores singulares σ_i dominam os coeficientes $|u_i^t e|$. Novamente o erro total não é minimizado. Portanto, o erro total deve ser minimizado para $k = k^*$. Na Figura 4.3 se pode apreciar o comportamento dos erros e da soma.

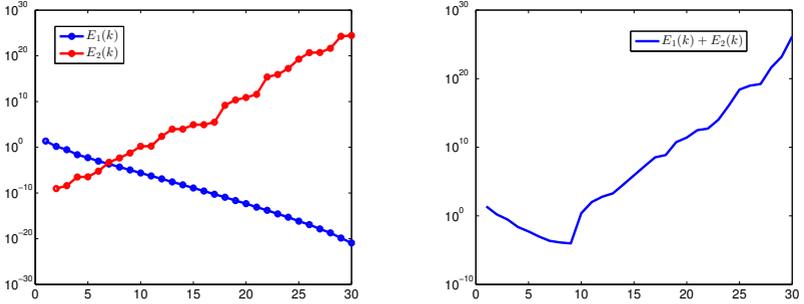


Figura 4.3: Comportamento de $E_1(k)$, $E_2(k)$ e da soma $E_1(k) + E_2(k)$ para o problema *gravity* $n = 32$ com erro relativo nos dados igual a 0.5%.

Entretanto, nem sempre $E_1(k)$ nem $E_2(k)$ são conhecidos e k^* deve ser estimado por outra abordagem. Desta forma, a proposta é minimizar o produto

$$\psi_{\text{TSVD}}^k = \|r_{\text{TSVD}}^k\|_2 \|x_{\text{TSVD}}^k\|_2, \quad k \geq 1,$$

em que

$$r_{\text{TSVD}}^k = b - Ax_{\text{TSVD}}^k = \sum_{j=k+1}^n (u_j^T b) u_j + b^\perp, \quad b^\perp = (I_m - UU^T)b.$$

Observe de (4.3.2) que, se $k > k^*$, a norma do resíduo decresce de forma linear, enquanto a norma da solução cresce drasticamente porque $0 \approx \sigma_k < |u_k^T \varepsilon|$. Portanto, ψ_{TSVD}^k não pode ser minimizada com $k > k^*$. De outro lado, se $k < k^*$, a norma do resíduo é relativamente grande pois os coeficientes $|u_j^T b|$ são grandes, enquanto a solução da norma incrementa gradualmente com k . Assim, ψ_k não pode ser minimizada com $k < k^*$. Daí a sequência ψ_{TSVD}^k deve ser minimizado em $k = k^*$.

A motivação para usar (4.3.1) como regra de parada para LSQR é baseada em duas observações:

- (a) A norma do resíduo e a norma da solução LSQR têm o mesmo comportamento como no caso da TSVD. Ou seja, enquanto $\|b - Ax^k\|_2$ decresce com k a norma da solução $\|x_k\|_2$ cresce.
- (b) É bem conhecida que a iteração x^k obtida pelo método LSQR captura praticamente a mesma informação que a solução da TSVD x_{TSVD}^k .

Baseada nas observações acima, a sequência $\psi_{\text{LSQR}}^k = \|x^k\|_2 \|r^k\|_2$ tem um comportamento semelhante à sequência ψ_{TSVD}^k na vizinhança de k^* ; como pode ser visto na Figura 4.4.

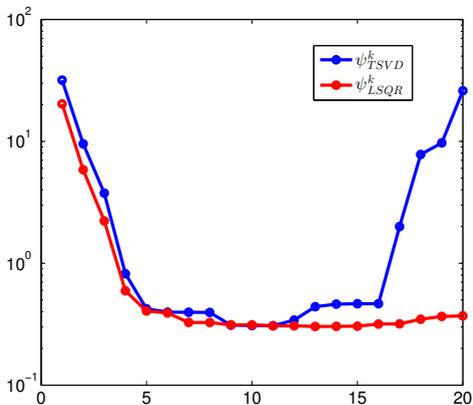


Figura 4.4: Comportamento da função ψ_k associado ao TSVD e LSQR para o problema gravity $n = 32$ e o erro relativo do ruído igual a 0.5%.

Um aspecto importante da regra do produto mínimo é que o processo para em exatamente $\hat{k} + 1$ iterações. Maiores detalhes podem ser encontrados em [5].

Capítulo 5

Resultados Numéricos

Neste capítulo ilustramos nosso estudo aplicando os métodos de regularização iterativos tipo SIRT, ART, ART por blocos e o método LSQR em diversos problemas testes do pacote Regularization Tools, de Hansen [32], e a problemas de restauração de imagens.

5.1 Equações integrais

Para avaliar os métodos escolhemos os problemas testes `gravity`, `philips`, `deriv2`. Os problemas escolhidos provêm da discretização de equações integrais de primeira espécie descritas em (2.1.1). Uma descrição sucinta de cada um dos problemas usados é como segue.

Gravity

A modelagem de um problema gravitacional unidimensional resulta numa equação integral de primeira espécie com núcleo K

$$K(x, y) = d(d^2 + (x - y)^2)^{-\frac{3}{2}}$$

e solução f dada por

$$f(y) = \text{sen}(\pi y) + \frac{1}{2} + \text{sen}(2\pi y).$$

A constante d representa a profundidade do centro de gravidade. O intervalo de integração para t é fixado como $[0, 1]$, enquanto que o intervalo de integração para s é $[a, b]$. O intervalo usual para s é também

$[0, 1]$, conduzindo para uma matriz simétrica de Toeplitz. O parâmetro d considerado padrão é igual a 0.25.

A equação é discretizada por meio da regra do ponto médio com n pontos e produz como resultado uma matriz A e um vetor x . Portanto, o lado direito é calculado como $b = Ax$. A Figura 5.1 apresenta a solução exata do problema

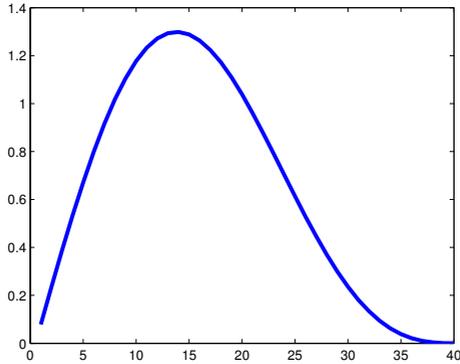


Figura 5.1: Solução exata Gravity.

Phillips

O problema é derivado de uma equação de Fredholm de primeira espécie e estudada por Phillips [46] e obtido mediante o uso do método de Galerkin. Como no problema anterior, a discretização produz um sistema de equações lineares $Ax = b$, com $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}^m$.

Dada a função

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 + \cos(\frac{\pi x}{3}), & |x| < 3 \\ 0, & |x| \geq 3 \end{cases}$$

o núcleo K , as funções f e g são

$$K(x, y) = \phi(x - y)$$

$$f(y) = \phi(y)$$

$$g(x) = (6 - |x|)(1 + \frac{1}{2} \cos(\frac{\pi x}{3})) + \frac{9}{2\pi} \text{sen}(\frac{\pi |x|}{3})$$

o intervalo de integração é $[-6, 6]$.

A Figura 5.2 apresenta a solução exata do problema phillips.

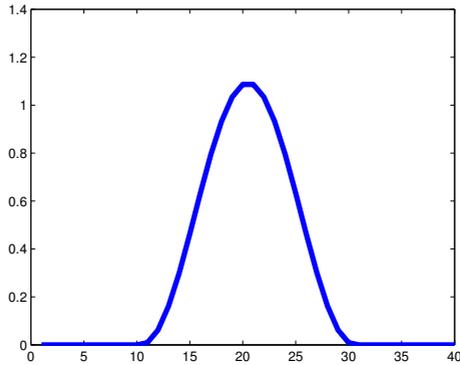


Figura 5.2: Solução exata Phillips.

Deriv2

O problema teste deriv2 é um problema mal posto severo, isto é, os valores singulares decrescem lentamente para zero. Como no problema phillips, a discretização também é feita com o método de Galerkin. O núcleo é a função de Green para a segunda derivada

$$K(x, y) = \begin{cases} x(y-1), & x < y \\ y(x-1), & x \geq y \end{cases} \quad (5.1.1)$$

em que o intervalo de integração é $[0, 1]$ e as funções f e g podem ser escolhidas da seguinte forma

Caso 1 $g(x) = \frac{x^3-x}{6}$ e $f(y) = y$

Caso 2 $g(x) = e^x + (1-e)x - 1$ e $f(y) = e^y$

Caso 3

$$g(x) = \begin{cases} \frac{4x^3-3x}{24}, & x < 0.5 \\ \frac{-4x^3+12x^2-9x+1}{24}, & x \geq 0.5 \end{cases} \quad (5.1.2)$$

$$f(y) = \begin{cases} y, & y < 0.5 \\ 1-y, & y \geq 0.5 \end{cases} \quad (5.1.3)$$

A Figura 5.3 apresenta a solução exata do problema deriv2 para o caso 2.

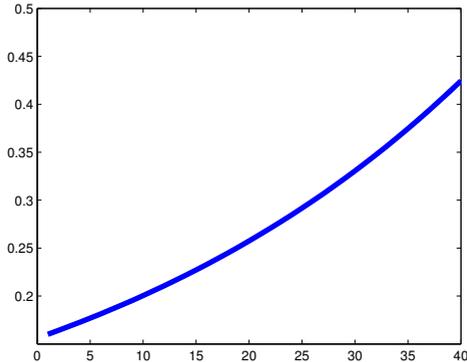


Figura 5.3: Solução exata Deriv2 para o caso 2.

5.1.1 Apresentação de resultados e discussão

Nos testes consideramos $x^0 = 0$ e o lado direito $b = b_{\text{exato}} + \varepsilon$, em que ε é um vetor de perturbações que contém números com distribuição Gaussiana de média zero e desvio padrão um, gerados pela rotina randn do MATLAB. Para controlar a intensidade do vetor de perturbações o vetor b é definido por

$$b = b_{\text{exato}} + \|b_{\text{exato}}\|_2 0.01 NL(e/\|e\|_2) \quad (5.1.4)$$

em que NL é chamado de nível de ruído. Por exemplo, $NL = 1$ resulta em 1% de erro relativo no vetor de dados. Todos os testes foram realizados com 5% de nível de ruído e o tamanho da matriz A igual a 512. Cada problema foi executado 20 vezes para que possamos obter médias das quantidades. O erro ótimo foi executado uma vez para cada método iterativo. Para encontrar o valor de τ foi usada a rotina trainDPME do pacote AIR-tools [33].

Símbolo	Descrição
\bar{E}	Média dos erros relativos encontrados.
E_{ot}	Erro ótimo
E_{min}	Erro relativo mínimo.
E_{max}	Erro relativo máximo.
E_{std}	Desvio padrão dos erros relativos encontrados.
E_{ot}	Erro ótimo
k_{min}	Mínimo número de iterações.
k_{max}	Máximo número de iterações.
\bar{t}	Média dos tempos de execução (segundos).

Tabela 5.1: Legenda para os dados colhidos nos testes numéricos realizados.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART	KA	KAS
λ	0.0240	1.6790	1.6790	1.6790	1	0.25	0.25
τ	0.9959	0.7580	0.7578	0.7562	0.7978	1.0274	1.0443
k_{min}	50	31	35	28	40	7	74
k_{max}	200	200	200	200	200	77	165
E_{min}	0.0291	0.0227	0.0270	0.0275	0.0169	0.0258	0.0314
E_{max}	0.0744	0.0839	0.0803	0.0927	0.0755	0.3741	0.1348
E_{std}	0.0100	0.0143	0.0136	0.0141	0.0152	0.0612	0.0222
\bar{E}	0.0508	0.0531	0.0533	0.0507	0.0431	0.0659	0.0813
E_{ot}	0.0358	0.0440	0.0431	0.0480	0.0499	0.0309	0.0480
\bar{t}	0.1412	0.0718	0.0691	0.0297	0.0287	0.1164	2.0989

Tabela 5.2: Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o critério de discrepância para o problema Gravity após 20 iterações e 5% de erro relativo.

As Tabelas 5.2-5.5 mostram os resultados obtidos com diferentes critérios de parada para o problema gravity. Para simplificar a apresentação, os métodos de Landweber, Cimmino, Kaczmarz, Kaczmarz Simétrico, Kaczmarz por blocos e Kaczmarz simétrico por blocos são denotados por LW, CIM, KA, KAS, KAB, e KABS respectivamente. Para os métodos tipo SIRT, usando os critérios de parada discrepância, regra de erro monótono e NCP obtemos erros médios em torno de 5%. Para os métodos ART com os critérios de discrepância e NCP, obtemos

erros médios em torno de 8%. Os índices de parada obtidos são maiores do que 90, com exceção dos métodos LSQR e Kaczmarz, tanto para o critério de discrepância e NCP. O tempo médio mais alto corresponde ao critério NCP, devido à quantidade de operações realizadas durante a execução. Por último o menor tempo utilizado corresponde ao método SART com a regra do erro monótono.

Portanto, obtemos solução mais precisa usando o método SART da família SIRT com o critério de discrepância. Note que o erro ótimo fica entre o erro médio mínimo e máximo.

LSQR	
k_{min}	6
k_{max}	6
E_{min}	0.0206
E_{max}	0.1441
E_{std}	0.0266
\bar{E}	0.0624
E_{ot}	0.0659
\bar{t}	0.0572

Tabela 5.3: Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de produto mínimo para o problema Gravity após 50 iterações com 5 % de ruído nos dados.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	0.0240	1.6790	1.6790	1.6790	1
τ	1.9900	1.5106	1.5130	1.5107	1.5919
k_{min}	49	32	35	33	33
k_{max}	200	200	200	200	200
E_{min}	0.0312	0.0239	0.0250	0.0267	0.0178
E_{max}	0.0750	0.0877	0.0758	0.0830	0.0906
E_{std}	0.0110	0.0145	0.0136	0.0138	0.0154
\bar{E}	0.0513	0.0503	0.0517	0.0505	0.0483
E_{ot}	0.0358	0.0440	0.0431	0.0480	0.0499
\bar{t}	0.1832	0.0797	0.1686	0.0369	0.0240

Tabela 5.4: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de regra de erro monótono para o problema Gravity após 20 iterações e 5% de erro relativo.

Nas Tabelas 5.6-5.9 mostramos os resultados obtidos com diferentes critérios de parada para o problema phillips. Para os métodos SIRT

	LW	CIM	CAV	DROP	SART	KA	KAS
λ	0.0240	1.6790	1.6790	1.6790	1	0.25	0.25
k_{min}	22	23	20	22	25	7	78
k_{max}	200	200	200	200	200	200	200
E_{min}	0.0359	0.0317	0.0288	0.0286	0.0224	0.0171	0.0340
E_{max}	0.0984	0.0914	0.1005	0.0912	0.0903	0.2000	0.1799
E_{std}	0.0165	0.0150	0.0163	0.0161	0.0173	0.0426	0.0349
\bar{E}	0.0598	0.0594	0.0638	0.0588	0.0538	0.0746	0.0882
E_{ot}	0.0358	0.0440	0.0431	0.0480	0.0499	0.0309	0.0480
\bar{t}	0.4136	0.3026	0.2963	0.2661	0.2581	0.4045	3.4517

Tabela 5.5: Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o NCP para o problema Gravity após 20 iterações e 5% de erro relativo.

usando os três critérios de parada obtemos erros médios em torno de 3% a 5%. Para os métodos tipo ART usando o princípio de discrepância e NCP obtemos um erro maior do que 6%. Finalmente, para o método LSQR o erro médio foi de 7%. Os índices de paradas obtidos são maiores do que 70, com exceção do método LSQR e Kaczmarz tanto para o critério de discrepância e NCP. Além disso, se observa que o método Kaczmarz simétrico leva mais tempo de execução. Novamente, o tempo médio mais alto corresponde ao critério NCP. Por último, o menor tempo corresponde ao método SART com o princípio de discrepância.

Portanto, as melhores soluções corresponde ao método Landweber usando o critério de discrepância e a regra do erro monótono.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART	KA	KAS
λ	0.0297	3.1636	1.4406	1.4352	1	0.25	0.25
τ	0.9934	0.7324	0.6274	0.7346	0.7444	1.0230	1.0047
k_{min}	29	26	38	33	27	8	42
k_{max}	200	200	200	200	200	23	200
E_{min}	0.0181	0.0224	0.0256	0.0279	0.0276	0.0437	0.0237
E_{max}	0.0600	0.0748	0.0601	0.0822	0.0814	0.1127	0.2031
E_{std}	0.0086	0.0101	0.0080	0.0125	0.0132	0.0131	0.0329
\bar{E}	0.0343	0.0385	0.0388	0.0447	0.0440	0.0656	0.0653
E_{ot}	0.0279	0.0326	0.0407	0.0325	0.0354	0.0642	0.0560
\bar{t}	0.1387	0.1728	0.1736	0.0262	0.0149	0.0890	1.6432

Tabela 5.6: Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o critério de discrepância para o problema Phillips com 5% de ruído nos dados.

LSQR	
k_{min}	6
k_{max}	7
E_{min}	0.0290
E_{max}	0.2844
E_{std}	0.0405
\bar{E}	0.0678
E_{ot}	0.1139
\bar{t}	0.0655

Tabela 5.7: Resultados obtidos para o métodos LSQR usando o critério produto mínimo para o problema Phillips com 5 % de ruído nos dados.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	0.0297	3.1636	1.4406	1.4352	1
τ	1.9860	1.4681	1.2593	1.4718	1.4837
k_{min}	33	36	29	33	39
k_{max}	200	200	200	200	200
E_{min}	0.0167	0.0228	0.0238	0.0278	0.0249
E_{max}	0.0703	0.0633	0.0712	0.0740	0.0655
E_{std}	0.0090	0.0088	0.0122	0.0118	0.0096
\bar{E}	0.0343	0.0365	0.0421	0.0434	0.0410
E_{ot}	0.0279	0.0326	0.0407	0.0325	0.0354
\bar{t}	0.0924	0.0818	0.0803	0.0283	0.0241

Tabela 5.8: Resultados obtidos para o método SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Phillips com 5% de ruído nos dados.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART	KA	KAS
λ	0.0240	3.1636	1.4406	1.4352	1	0.25	0.25
k_{min}	14	14	15	17	20	8	35
k_{max}	200	200	200	200	200	200	200
E_{min}	0.0257	0.0200	0.0300	0.0241	0.0273	0.0441	0.0361
E_{max}	0.0886	0.0895	0.0986	0.0962	0.0894	0.1825	0.1524
E_{std}	0.0181	0.0181	0.0154	0.0160	0.0147	0.0357	0.0268
\bar{E}	0.0523	0.0594	0.0519	0.0513	0.0498	0.0842	0.0651
E_{ot}	0.0279	0.0326	0.0407	0.0325	0.0354	0.0642	0.0485
\bar{t}	0.2096	0.2302	0.2300	0.2065	0.1932	0.4708	2.0254

Tabela 5.9: Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando NCP para o problema Phillips com 5% de ruído nos dados.

As Tabelas 5.10-5.13 mostram os resultados obtidos com diferentes critérios de parada para o problema Deriv2. Note que, segundo o resultado das tabelas, os erros relativos são muito altos. Porém podemos dizer que neste caso os métodos iterativos não resultam úteis para o problema Deriv2.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART	KA	KAS
λ	97.4097	1.1662	1.1662	1.1662	1	0.25	0.25
τ	0.9965	0.0569	0.0730	0.0637	0.1256	20.4036	15.3607
k_{min}	236	1	1	1	9	0	1
k_{max}	400	400	400	400	400	0	400
E_{min}	0.3064	0.3323	0.4904	0.3632	0.0513	1	0.8458
E_{max}	0.3622	3.8989	4.0035	3.0622	1.3409	1	63.9080
E_{std}	0.0107	0.8890	0.9417	0.7802	0.4058	0	12.0433
\bar{E}	0.3251	1.2559	1.2264	1.1095	0.4251	1	5.3568
E_{ot}	0.1139	0.3544	0.2555	0.1238	0.0547	0.9967	0.9970
\bar{t}	0.2132	0.1191	0.0940	0.0437	0.0260	5.7682e-04	0.7860

Tabela 5.10: Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando o critério de discrepância para o problema Deriv2 com 5% de ruído nos dados.

LSQR	
k_{min}	4
k_{max}	5
E_{min}	0.2569
E_{max}	0.3285
E_{std}	0.0175
\bar{E}	0.2882
E_{ot}	0.2718
\bar{t}	0.0626

Tabela 5.11: Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de produto mínimo para o problema Deriv2 após 50 iterações com 5 % de ruído nos dados.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	97.4097	1.1662	1.1662	1.1662	1
τ	1.9902	0.1405	0.1338	0.1186	0.2577
k_{min}	305	0	0	1	8
k_{max}	400	400	400	400	400
E_{min}	0.3020	0.3602	0.0993	0.4280	0.0526
E_{max}	0.3543	3.2012	3.1293	3.9938	1.3939
E_{std}	0.0096	0.8059	0.7708	0.9824	0.4076
\bar{E}	0.3241	1.2818	1.1361	1.4145	0.3943
E_{ot}	0.1139	0.3544	0.2555	0.1238	0.0547
\bar{t}	0.2271	0.0853	0.0867	0.0509	0.0248

Tabela 5.12: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Deriv2 com 5% de ruído nos dados.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART	KA	KAS
λ	97.4097	1.1662	1.1662	1.1662	1	0.25	0.25
k_{min}	111	10	9	10	20	1	1
k_{max}	400	400	400	400	400	257	400
E_{min}	0.3002	0.1379	0.1081	0.1710	0.0359	0.6086	0.8908
E_{max}	0.3891	2.4519	2.1902	2.2754	1.9448	19.2315	56.1364
E_{std}	0.0187	0.5570	0.5668	0.5688	0.4014	2.6818	13.0041
\bar{E}	0.3333	0.5508	0.5811	0.6309	0.3230	2.5321	18.1353
E_{ot}	0.1139	0.3544	0.2555	0.1238	0.0547	2.1166	0.9970
\bar{t}	0.8788	0.2685	0.3769	0.2767	0.3974	0.2008	4.4671

Tabela 5.13: Resultados obtidos para os métodos SIRT e ART usando NCP para o problema Deriv2 com 5% de ruído nos dados.

5.2 Reconstrução de Imagens

Nesta seção apresentaremos problemas em que a solução desejada é uma imagem. Na prática, imagens digitais são obtidas através de algum dispositivo eletrônico tais como câmeras e sensores, e são compostas de elementos chamados pixels. Em uma imagem em níveis de cinza, cada pixel assume um valor entre 0 e 255, que determina a intensidade de cinza apresentada naquele pixel.

Consideremos um problema discreto mal posto proveniente da discretização de uma equação integral de primeira espécie em duas dimen-

sões dada por

$$\int_0^1 \int_0^1 K(s, t; x, y) f(x, y) dx dy = g(s, t), \quad 0 \leq s, t \leq 1. \quad (5.2.1)$$

A função K é chamada de *point spread function* (PSF), f é uma imagem contínua (a imagem exata), e g é a imagem embaçada (blurred image) contínua. A determinação de estimativas de f a partir de uma imagem embaçada e contaminada por ruídos $g = \tilde{g} + e$, é conhecida como o problema de deblurring, que aqui chamamos como o problema de reconstrução.

O problema 5.2.1 é discretizado e obtemos um sistema de equações lineares

$$Ax = b. \quad (5.2.2)$$

Quando a PSF é do tipo $K(s, t; x, y) = K_1(s, x)K_2(t, y)$ (conhecido como o caso em que a PSF é separável), a matriz A do problema discretizado torna-se

$$A = A_1 \otimes A_2. \quad (5.2.3)$$

Em alguns casos, a PSF pode ser obtida explicitamente por uma expressão matemática. Por exemplo, os elementos da PSF, p_{ij} , para o out-of-focus blur (imagem fora de foco) são definidos por

$$p_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\pi r^2}, & \text{se } (i - k)^2 + (j - l)^2 \leq r^2 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (5.2.4)$$

em que (k, l) é o centro da PSF e r o raio do embaçamento. A PSF para um embaçamento causado por turbulência atmosférica pode ser descrita como uma função Gaussiana bidimensional e os elementos da PSF são dados por

$$p_{ij} = \exp \left(-\frac{1}{2} \begin{bmatrix} i - k \\ j - l \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} s_1^2 & \rho^2 \\ \rho^2 & s_2^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} i - k \\ j - l \end{bmatrix} \right), \quad (5.2.5)$$

em que os parâmetros s_1 , s_2 e ρ determinam a largura e a orientação da PSF, que é centrada no elemento (k, l) . Diferentes PSFs produzem diferentes matrizes e efeitos na imagem original. A PSF usada pela rotina é descrita pela função Gaussiana

$$h(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}} \quad (5.2.6)$$

em que o parâmetro σ controla a largura da PSF e, então, o nível de suavidade. A matriz $A \in \mathbb{R}^{N^2 \times N^2}$ é simétrica e Toeplitz e pode ser escrita como

$$A = (2\pi\sigma^2)^{-1} R \otimes R, \quad (5.2.7)$$

em que $R \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz simétrica, banda e de Toeplitz, cuja primeira linha é

$$z = \left[1 \quad e^{-\frac{1}{2\sigma^2}} e^{-\frac{4}{2\sigma^2}} e^{-\frac{9}{2\sigma^2}} \dots e^{-\frac{(band-1)}{2\sigma^2}} 0 \dots 0 \right] \quad (5.2.8)$$

em que o parâmetro $band$ é a metade da largura de banda da matriz R .

A seguir apresentamos os resultados obtidos pelos métodos estudados no capítulo 3 para os problemas de reconstrução de imagens.

Para estes problemas torna-se inviável o uso dos métodos ART devido ao tamanho das matrizes envolvidas. Portanto usamos os métodos ART por blocos também descritos no capítulo 3.

Os métodos foram avaliados com ruído nos dados de 5% e foram realizadas 20 rodadas para cada método. Para o cálculo do τ usamos a rotina `trainDPME`.

Imagem Lena

Neste problema usamos a imagem Lena 171×171 . Nosso objetivo é recuperar aproximações da imagem original representada por x_{exato} , a partir de uma imagem embaçada, como mostrado na Figura 5.4 (direita). A matriz $A \in \mathbb{R}^{N^2 \times N^2}$ é um produto de Kronecker de matrizes de ordem $N \times N$, como descrito em (5.2.7).



Figura 5.4: Imagem Lena exata (esquerda) e degradada pelo blur mais ruído (direita).

As Tabelas 5.14 - 5.19 mostram os resultados obtidos com diferentes critérios de parada para o problema Lena. Para os métodos SIRT os erros médios ficaram em torno de 6% a 8%, mantendo desvios padrão bastante pequenos o que significa que o erro ficou próximo da média na maior parte das execuções. Para os métodos ART por blocos os erros

médios ficaram em torno de 9% a 10%. Finalmente, para o método LSQR o erro médio foi de 16%. Note que para os métodos SIRT os menores índices de parada foram para o critério NCP, mas têm um maior tempo de execução à diferença dos outros critérios. Para o caso dos métodos por blocos ART usando o critério de discrepância e NCP os índices de parada foram pequenos. No entanto, no caso NCP o tempo de execução foi maior. Neste problema as melhores soluções obtidas correspondem aos métodos SART com os critérios de discrepância e a regra do erro monótono.

Na Figura 5.5 apresentamos as imagens obtidas com o menor e maior error relativo as quais correspondem ao método SART com regra do erro monótono e LSQR respectivamente.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0026	583.2171	11.1848	11.0791	1
τ	0.9614	0.6222	0.3630	0.6228	0.5859
k_{min}	24	20	29	28	16
k_{max}	28	25	37	36	19
E_{min}	0.0727	0.0706	0.0701	0.0688	0.0677
E_{max}	0.0746	0.0729	0.0724	0.0711	0.0695
E_{std}	4.6642e-04	5.6313e-04	5.4622e-04	4.8757e-04	4.4536e-04
\bar{E}	0.0734	0.0717	0.0711	0.0700	0.0684
E_{ot}	0.0738	0.0710	0.0714	0.0703	0.0680
\bar{t}	0.8502	0.8345	0.3309	0.3332	0.0714

Tabela 5.14: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de discrepância para o problema Lena com 5 % de ruído nos dados.

LSQR	
k_{min}	20
k_{max}	20
E_{min}	0.1593
E_{max}	0.1687
E_{std}	0.0030
\bar{E}	0.1641
\bar{t}	7.6354

Tabela 5.15: Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de parada produto mínimo para o problema Lena com 5 % de ruído nos dados.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0026	583.2171	11.1848	11.0791	1
τ	1.9214	1.2438	0.7264	1.2456	1.1698
k_{min}	22	20	27	28	17
k_{max}	28	26	37	35	21
E_{min}	0.0727	0.0706	0.0702	0.0689	0.0677
E_{max}	0.0747	0.0726	0.0729	0.0709	0.0692
E_{std}	4.9910e-04	5.3824e-04	5.0886e-04	5.1741e-04	4.6737e-04
\bar{E}	0.0736	0.0717	0.0711	0.0699	0.0684
E_{ot}	0.0744	0.0730	0.0703	0.0694	0.0686
\bar{t}	0.8585	0.8534	0.3102	0.3054	0.0594

Tabela 5.16: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Lena com 5 % de ruído.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0026	583.2171	11.1848	11.0791	1
k_{min}	9	8	11	11	6
k_{max}	10	9	13	13	8
E_{min}	0.0803	0.0777	0.0767	0.0756	0.0727
E_{max}	0.0825	0.0803	0.0793	0.0788	0.0772
E_{std}	8.5350e-04	7.9852e-04	6.8278e-04	8.2030e-04	0.0012
\bar{E}	0.0815	0.0793	0.0780	0.0699	0.0747
E_{ot}	0.0801	0.0778	0.0770	0.0759	0.0732
\bar{t}	8.5414	7.7376	10.0317	9.9031	6.2344

Tabela 5.17: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério NCP para o problema Lena com 5 % de ruído.

	KAB	KABS
τ	1.0702	1.0688
k_{min}	10	5
k_{max}	10	6
E_{min}	0.1026	0.0925
E_{max}	0.1055	0.1031
E_{std}	8.0649e-04	0.0032
\bar{E}	0.1041	0.1005
E_{ot}	0.1047	0.0940
\bar{t}	1.0940	1.1959

Tabela 5.18: Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério de discrepância para o problema Lena com 5 % de ruído.

	KAB	KABS
k_{min}	14	7
k_{max}	15	8
E_{min}	0.0994	0.0912
E_{max}	0.1042	0.0964
E_{std}	0.0011	0.0013
\bar{E}	0.1021	0.0935
E_{ot}	0.0985	0.0922
\bar{t}	14.3150	7.4370

Tabela 5.19: Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério NCP para o problema Lena com 5 % de ruído.



Figura 5.5: Imagens obtidas com 5% de ruído nos dados para o método SART e LSQR respectivamente.

Imagem Barbara

A imagem barbara mostrada na Figura 5.2 tem tamanho 300×300 pixels. Neste caso o problema linear envolve 90000 variáveis.



Figura 5.6: Imagem Barbara exata (direita) e degradada pelo blur mais ruído (esquerda).

As Tabelas 5.20-5.25 mostram os resultados obtidos com diferentes critérios de parada para o problema Barbara. Para os métodos SIRT os erros médios ficaram em torno de 12%, mantendo desvios padrões bastante pequenos o que significa que o erro ficou próximo da média na maior parte das execuções. Para os métodos ART por blocos, os erros médios ficaram grandes. Para o método LSQR o erro médio foi de 19%.

Note que para os métodos SIRT os menores índices de parada foram obtidos para o critério NCP com exceção do método Landweber. Os tempos de execução foram muito parecidos para ambos critérios.

Para o caso dos métodos por blocos ART usando o critério NCP os índices de parada foram pequenos. No caso do critério discrepância os índices e o tempo de execução foram maiores do que o critério NCP.

Como no problema anterior, as melhores soluções foram obtidas usando os métodos SART com o princípio de discrepância e a regra do erro monótono.

Para este problema as soluções mais próximas da solução exata correspondem ao métodos DROP usando o critério de discrepância e a regra do erro monótono.

Na Figura 5.7 apresentamos as imagens obtidas com o menor e maior error relativo as quais correspondem ao método SART com regra de erro monótono e Kaczmarz bloco usando o critério NCP respectivamente.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0009	1.7920e+03	11.1848	11.0791	1
τ	0.9676	0.6247	0.3535	0.6250	0.5869
k_{min}	13	11	17	16	9
k_{max}	15	13	20	18	10
E_{min}	0.1256	0.1247	0.1243	0.1238	0.1231
E_{max}	0.1259	0.1251	0.1246	0.1243	0.1234
E_{std}	7.7236e-05	9.0207e-05	7.9215e-05	1.1230e-04	6.4306e-05
\bar{E}	0.1258	0.1249	0.1244	0.1240	0.1232
E_{ot}	0.1257	0.1249	0.1243	0.1240	0.1233
\bar{t}	6.5645	6.3466	1.2312	1.1764	0.1363

Tabela 5.20: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de discrepância para o problema Barbara com 5 % de ruído.

LSQR	
k_{min}	19
k_{max}	19
E_{min}	0.1974
E_{max}	0.2016
E_{std}	0.0013
\bar{E}	0.1998
E_{ot}	0.1259
\bar{t}	15.1627

Tabela 5.21: Resultados obtidos com o método LSQR para o problema Barbara com 5 % de ruído.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0009	1.7920e+03	11.1848	11.0791	1
τ	1.9346	1.2481	0.7198	1.2485	1.1739
k_{min}	13	11	15	16	8
k_{max}	15	12	18	18	9
E_{min}	0.1255	0.1247	0.1243	0.1239	0.1231
E_{max}	0.1259	0.1250	0.1246	0.1241	0.1234
E_{std}	1.2333e-04	8.8369e-05	8.0243e-05	7.7652e-05	8.1084e-05
\bar{E}	0.1258	0.1249	0.1244	0.1240	0.1232
E_{ot}	0.1258	0.1250	0.1246	0.1241	0.1231
\bar{t}	6.1199	6.1229	1.1596	1.1589	0.1740

Tabela 5.22: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Barbara com 5 % de ruído.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0009	1.7920e+03	11.1848	11.0791	1
k_{min}	19	11	13	11	4
k_{max}	25	17	21	23	6
E_{min}	0.1260	0.1248	0.1243	0.1239	0.1235
E_{max}	0.1269	0.1253	0.1246	0.1243	0.1246
E_{std}	3.0720e-04	1.1861e-04	1.0841e-04	1.2105e-04	2.3461e-04
\bar{E}	0.1264	0.1250	0.1245	0.1241	0.1239
E_{ot}	0.1257	0.1250	0.1243	0.1239	0.1235
\bar{t}	6.3081	6.4986	1.3559	1.0953	0.1212

Tabela 5.23: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério NCP para o problema Barbara com 5 % de ruído.

	KAB	KABS
τ	1.0768	1.0809
k_{min}	101	101
k_{max}	101	101
E_{min}	0.2561	0.3258
E_{max}	0.2621	0.3342
E_{std}	0.0016	0.0020
\bar{E}	0.2591	0.3304
E_{ot}	0.1448	0.1416
\bar{t}	36.4473	72.8785

Tabela 5.24: Resultados obtidos com os métodos ART por blocos usando critério de discrepância para o problema Barbara com 5 % de ruído.

	KAB	KABS
k_{min}	3	10
k_{max}	3	10
E_{min}	0.4297	0.1489
E_{max}	0.4303	0.1506
E_{std}	1.9413e-04	4.7158e-04
\bar{E}	0.4300	0.1498
E_{ot}	0.4302	0.1413
\bar{t}	2.2097	11.4191

Tabela 5.25: Resultados obtidos com os métodos ART por blocos e critério NCP para o problema Barbara com 5 % de ruído nos dados.



Figura 5.7: Imagens obtidas com 5% de ruído nos dados para o método SART e Kaczmarz bloco respectivamente.

Imagem Peppers

A imagem tem tamanho 300×300 pixels e o objetivo é recuperar a imagem original mostrada na Figura (5.8). Neste caso o problema linear envolve 90000 variáveis.



Figura 5.8: Imagem exata Peppers

Devido a alta dimensão deste problema, 90000 variáveis para o critério NCP tomamos o valor de $q = n/512$, a fim de ter menor demora

no tempo de execução.

As Tabelas 5.26 a 5.31 mostram os resultados obtidos com diferentes critérios de parada para o problema Peppers. Para os métodos SIRT os erros médios ficaram em torno de 7%, mantendo desvios padrões bastante pequenos o que significa que os erros ficaram próximo da média na maior parte das execuções. Para os métodos ART por blocos os erros médios foram menores do que os métodos SIRT. Para o método LSQR o erro médio foi de 17%.

Note que para os métodos SIRT os menores índices de parada foram para o critério NCP, mas usando um maior tempo de execução em comparação dos outros critérios.

Para os métodos por blocos ART usando o critério de discrepância e NCP os índices de parada foram pequenos em comparação com os métodos SIRT.

Podemos concluir que os melhores resultados foram obtidos usando o método DROP com o critério de discrepância e a regra do erro monótono.

Na Figura 5.9 apresentamos as imagens obtidas com o menor e maior error relativo as quais correspondem ao método DROP com regra de erro monótono e LSQR respectivamente.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0009	1.7920e+03	11.1848	11.0791	1
τ	0.9670	0.6238	0.3533	0.6231	0.5837
k_{min}	14	13	19	20	14
k_{max}	16	14	23	23	15
E_{min}	0.0732	0.0723	0.0718	0.0715	0.0742
E_{max}	0.0741	0.0733	0.0727	0.0722	0.0747
E_{std}	2.2886e-04	2.3771e-04	2.1085e-04	1.8914e-04	1.4101e-04
\bar{E}	0.0736	0.0729	0.0722	0.0719	0.0745
E_{ot}	0.0737	0.0728	0.0723	0.0722	0.0746
\bar{t}	6.1661	6.2550	1.1259	1.1720	0.1861

Tabela 5.26: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério de discrepância para o problema Peppers com 5 % de ruído.

LSQR	
k_{min}	19
k_{max}	19
E_{min}	0.1679
E_{max}	0.1731
E_{std}	0.0016
\bar{E}	0.1701
E_{ot}	0.0740
\bar{t}	15.5623

Tabela 5.27: Resultados obtidos para o método LSQR usando o critério de parada produto mínimo para problema Peppers com 5 % de ruído.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.009	1.7920e+03	11.1848	11.0791	1
τ	1.9313	1.2458	0.7060	1.2464	1.1662
k_{min}	15	13	19	19	13
k_{max}	17	15	23	22	15
E_{min}	0.0732	0.0726	0.0720	0.0715	0.0742
E_{max}	0.0739	0.0731	0.0725	0.0724	0.0750
E_{std}	1.6290e-04	1.4799e-04	1.3453e-04	2.2303e-04	2.0334e-04
\bar{E}	0.0736	0.0728	0.0722	0.0720	0.0746
E_{ot}	0.0736	0.0729	0.0729	0.0721	0.0746
\bar{t}	5.9970	5.8579	1.1899	1.1215	0.2549

Tabela 5.28: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério da regra de erro monótono para o problema Peppers com 5 % de ruído.

	LW	CIM	CAV	DROP	SART
λ	1.0009	1.7920e+03	11.1848	11.0791	1
k_{min}	12	9	10	9	10
k_{max}	18	14	21	15	17
E_{min}	0.0732	0.0726	0.0723	0.0725	0.0744
E_{max}	0.0739	0.0735	0.0745	0.0750	0.0754
E_{std}	2.0492e-04	2.6100e-04	5.5664e-04	6.5811e-04	2.9901e-04
\bar{E}	0.0736	0.0731	0.0736	0.0734	0.0748
E_{ot}	0.0739	0.0727	0.0721	0.0725	0.0745
\bar{t}	6.1141	6.3613	1.1348	1.1339	0.2418

Tabela 5.29: Resultados obtidos para os métodos SIRT usando o critério NCP para o problema Peppers com 5 % de ruído.

	KAB	KABS
τ	1.0795	1.0840
k_{min}	13	7
k_{max}	13	7
E_{min}	0.1031	0.0986
E_{max}	0.1050	0.1003
E_{std}	5.0817e-04	4.9636e-04
\bar{E}	0.1040	0.0994
E_{ot}	0.0986	0.0996
\bar{t}	13.1597	14.4075

Tabela 5.30: Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério de discrepância para o problema Peppers com 5 % de ruído.

	KAB	KABS
k_{min}	2	12
k_{max}	2	15
E_{min}	0.5563	0.1171
E_{max}	0.5567	0.1287
E_{std}	1.0027e-04	0.0037
\bar{E}	0.5565	0.1230
E_{ot}	0.5565	0.0987
\bar{t}	2.8299	31.0962

Tabela 5.31: Resultados obtidos para os métodos ART por blocos usando o critério NCP para o problema Peppers com 5 % de ruído.



Figura 5.9: Imagens obtidas com 5% de ruído nos dados para o método DROP e LSQR respectivamente.

Capítulo 6

Considerações Finais

O desenvolvimento deste trabalho foi muito importante pois me possibilitou aprender área de problemas inversos, assim como `MATLAB` e `LATEX`. As rotinas dos métodos de regularização iterativos foram implementadas no `MATLAB` versão 7.13.0 e executadas no computador Intel Core i5-2500, com 3.8 de memória RAM.

Neste trabalho estudamos, implementamos e comparamos os métodos de regularização iterativos: SIRT, ART e LSQR. Nas aplicações práticas foi possível evidenciar as limitações dos métodos ART para o caso de problemas de grande porte, como ocorre com problemas de reconstrução de imagens. Portanto, resultou de muita importância estudar os métodos ART por blocos para estes problemas. Além disso, entendemos a importância da escolha do critério de parada para incorporar nas iteradas a maior qualidade de informações da solução exata para assim obter uma solução muito próxima da solução desejada. Para o caso do critério NCP para problemas de grande porte, há necessidade de diminuir o número de elementos do vetor transformada discreta do resíduo devido ao alto custo computacional.

Os exemplos apresentados no capítulo anterior ilustraram as ideias desenvolvidas nos capítulos 3 e 4 para resolver problemas com um número maior de variáveis tais como 90000 para o caso do problema Barbara e Peppers. As diferentes tabelas mostram as comparações entre os diferentes métodos e critérios de parada. Os melhores resultados obtidos para os três problemas foram com os métodos da família SIRT: SART, SART e DROP respectivamente usando ambos critérios de discrepância e a regra do erro monótono.

Planos futuros estabelecem-se com intuito de:

- (a) Estudar e implementar um método híbrido Kaczmarz-CG, para o caso dos problemas de grande porte. O método consiste em um passo CG para modificar o lado direito e um passo Kaczmarz para produzir a imagem aproximada.
- (b) Estudar e fazer comparações com outros métodos de regularização iterativos.
- (c) Analisar diferentes métodos para a escolha do parâmetro de regularização.

Considerando os tópicos estudados, vemos que há uma gama de possibilidades para o desenvolvimento e melhoria dos métodos de regularização iterativos. Assim, este trabalho motiva estudos e pesquisas na área de problemas inversos.

Referências Bibliográficas

- [1] Allen, R.C.Jr.; Boland, W. R.; Faber, V.; Wing, G. M. Singular values and condition numbers of Galerkin matrices arising from linear integral equations of the first kind, *J. Math. Anal. Appl.*, pp.564-590, 1985.
- [2] Abdul-Majid, W. *Linear and Nonlinear Integral Equations: Methods and Applications*, Springer, Berlin, 2011.
- [3] Baker, C.T.H. *The numerical treatment of integral equations*, Clarendon Press, Oxford, UK, 1977.
- [4] Bazán, F.S.V. Fixed-point iterations in determining the Tikhonov regularization parameter, *Inverse problems*, Vol.24, 2008.
- [5] Bazán, F.S.V.; Cunha, Maria C.C.; Borges, L.S. Extension of GKB-FP algorithm to large-scale general form Tikhonov regularization, *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol.20, 2013.
- [6] Björck, Å. *A numerical methods for least squares problems*, Philadelphia: SIAM, 1996.
- [7] Björck, Å.; Elfving, T. Accelerated projection methods for computing pseudoinverse solutions of systems of linear equations, *BIT*, Vol. 19, pp. 145-163, 1979.
- [8] Borges, L.S. *Lanc-FP: Um algoritmo para problemas discretos mal-postos de grande porte [dissertação]*. Florianópolis: UFSC, Departamento de Matemática; 2009.
- [9] Calvetti, D.; Reichel, L; Lewis, B. On the regularizing properties of the GMRES method. *Numer. Math.*, pp. 605-625, 2002.

- [10] Censor, Y.; Elfving, T. Block-Iterative Algorithms with Diagonally Scaled Oblique Projections for the Linear Feasibility Problem. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 24, No.1, pp.40-58, 2002.
- [11] Censor, Y.; Gordon, D.; Gordon, R. Component averaging: An efficient iterative parallel algorithm for large sparse unstructured problems, *Parallel Computing*, Vol. 27, pp. 777-808, 2001.
- [12] Censor, Y.; Elfving, T.; Herman, G.T.; Nikazad, T. On diagonally relaxed orthogonal projection methods, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 30, pp. 473-504, 2007.
- [13] Censor, Y. Parallel application of block-iterative methods in medical imaging and radiation therapy. *Math. Program.* Vol.42, No.2,pp.307-323, 1988.
- [14] Censor, Y.; Gordon, D.; Gordon, R. BICAV: a block-iterative parallel algorithm for sparse systems with pixel-related weighting, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, Vol.20, No.20, pp.1050-1060, 2001.
- [15] Chung, J.; Nagy, J.G.; O'leary, D.P. A weighed-GCV method for Lanczos-Hybrid regularization, *Electronic Transaction on Numerical Analysis*, Vol.28, pp.149-167, 2008.
- [16] Cimmino, G. Calcolo approssimato per le soluzioni dei sistemi di equazioni lineari, *La Ric. Sci.*, pp.326-333, 1938.
- [17] De Cezaro, A.; De Cesaro, F.T. *Notas em Matemática Aplicada*, São Carlos-SP: SBMAC, 2012.
- [18] Eggermont, P.P.B.; Herman, G.T.; Lent, A. Iterative algorithms for large partitioned linear systems, with applications to image reconstruction. *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 40, pp.37-67, 1981.
- [19] Elfving, T.; Nikazad, T.; P. C. Hansen. Semi-Convergence and relaxation parameters for a class of SIRT algorithms, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, Vol.37, pp.321-336, 2010.
- [20] Elfving, T.; Nikazad, T. Stopping rules for Landweber-type iteration, *Inverse Problems*, Vol.23, No 4, pp. 1417-1432, 2007.
- [21] Elfving, T. Block-iterative methods for consistent and inconsistent linear equations, *Numer. Math.*, Vol.35, No.1, pp.1-12, 1980.

- [22] Engl, H.W.; Hanke, M; Neubauer, A. Regularization of inverse problems, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [23] Gilbert, P. Iterative methods for the three-dimensional reconstruction of an object from projections, *Journal of Theoretical Biology*, Vol.36, pp.105-117, 1972.
- [24] Golub, G.H.; Heath, M.T.; Wahba, G. Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter. *Technometrics*, Vol.21, pp.215-223, 1979.
- [25] Golub, G.H.; Van Loan, C.F. *Matrix computations*. 3. ed. Maryland: Johns Hopkins University Press, 1996.
- [26] Gordon, R.; Bender, R.; Herman, G.T. Algebraic reconstruction techniques (ART) for threedimensional electron microscopy and x-ray photography. *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 29, pp. 471-481, 1970.
- [27] Hämarik, U.; Tautenhahn, U. On the Monotone Error Rule for Parameter Choice in Iterative and Continuous Regularization Methods, *Kluwer Academic Publishers*, vol. 41, No.5, pp.1029-1038, 2001.
- [28] Hansen, P.C. Rank-deficient and discrete ill-posed problems, Philadelphia: SIAM, 1998.
- [29] Hansen, P.C. Regularization tools, Disponível em: <http://www2.imm.dtu.dk/pcha/Regutools/>
- [30] Hansen, P.C. Air-tools, Disponível em: <http://www2.imm.dtu.dk/pcha/AIRtools/>
- [31] Hansen, P.C.; Nagy, J.G.; O’Leary, D.P. *Deblurring Images. Matrices, Spectra and Filtering*. SIAM, 2006.
- [32] Hansen, P.C. Regularization tools: A Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems, *Numerical Algorithms* 6, pp. 1-35, 1994.
- [33] Hansen, P.C.; Saxild-Hansen, M. AIR Tools-A MATLAB package of algebraic iterative reconstruction methods, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 236, pp.2167 - 2178, 2012.
- [34] Hansen, P.C. *Discrete inverse problems: insight and algorithm*, Philadelphia: SIAM, 2010.

- [35] Hansen, P.C.; Kilmer, M.E.; Kjeldsen, R.H. Exploiting residual information in the parameter for ill-posed problems, *BIT Numerical Mathematics*, Vol.46, No.1, pp.41-59, 2006.
- [36] Hansen, P.C. Computation of the singular value expansion, *Computing*, Vol.40, pp.185-199, 1988.
- [37] Hansen, P.C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve, *SIAM Review*, Vol.34, No.4, pp.561-580, 1992.
- [38] Kaczmarz, S. Angenäherte Auflösung von Systemen linearer Gleichungen, *Bull.Acad.Pol.Sci.Lett*, Vol.35, pp.355-357, 1937.
- [39] Kirsch, A. An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems, *Applied Mathematical Sciences*, Vol.120, New York, 1996.
- [40] Lakshminarayanan, A.V.; Lent, A. Methods of least squares and SIRT in reconstruction. *Journal of Theoretical Biology*, Vol.76, pp.267 - 295, 1979.
- [41] Landweber, L. An iteration formula for Fredholm integral of the first kind, *American Journal of Mathematics*, Vol. 73, p. 615-624, 1951.
- [42] Meyer, C.D. Matrix analysis and applied linear algebra. Philadelphia: SIAM, 2000.
- [43] Morozov, V.A. On the solution of functional equations by the method of regularization, *Soviet Math. Dokl*, Vol. 7, pp. 414-417, 1966.
- [44] Morozov, V.A. The error principle in the solution of operational equations by the regularization method, *USSR Comp. Math. and Phys*, Vol. 8, No.2, pp.63-87, 1968.
- [45] Paige, C.C.; Saunders, M.A. LSQR: An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares, *ACM Trans. Math. Softw.*, Vol.8, No.1, pp.43-71, 1982.
- [46] Phillips, D.L. A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind, *J.of the ACM*, Vol.9, pp.84-97, 1962.

- [47] Regińska, T. A regularization parameter in discrete ill-posed problems, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol.17, pp.740-749, 1996.
- [48] Riley, J. Solving systems of linear equations with a positive definite, symmetric, but possibly ill-conditioned matrix, *Math. Tables Aids Comput.*, Vol.9, pp.96-101, 1955.
- [49] Rust, B.W.; O’Leary, D.P. Residual Periodograms for choosing regularization parameters for ill-posed problems. *Inverse problems*, Vol.24, 2008.
- [50] Rust, B.W. Truncating the singular value decomposition for ill-posed problems. U.S. Dept. of Commerce, Technology Administration, National Institute of Standards and Technology Gaithersburg, MD. 1998.
- [51] Saad, Y.; Schultz, M.H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, Vol.7, pp.856-869, 1986.
- [52] Saxild-Hansen, M. “AIR Tools - A MATLAB Package for Algebraic Iterative Reconstruction Techniques”, Tese de mestrado, Technical University of Denmark , 2010.
- [53] Tikhonov, A.N. Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method, *Soviet Math. Dokl.*, Vol. 4, pp.1035-1038, 1963.
- [54] Van der Sluis, A.; Van der Vorst, H.A. SIRT- and CG-type methods for the iterative solution of sparse linear least-squares problems. *Linear Algebra and its Applications*, Vol.130, pp.257 - 303, 1990.
- [55] Wing, G. M. Condition numbers of matrices arising from the numerical solution of linear integral equations of the first kind, *J. Integral Equations*, pp. 191-204, 1985.