

Quadrados Mínimos Lineares

Aluno: Bruno Henrique Cervelin

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Maria Aparecida Diniz Ehrhardt

DMA – IMECC – UNICAMP

RESUMO

Neste trabalho vamos abordar problemas de quadrados mínimos lineares, alguns métodos de resolução (fatoração de Cholesky e de Householder) e suas aplicações em deformações de imagem, tais como deformações de similaridade e deformações rígidas.

1. INTRODUÇÃO

O método dos Quadrados Mínimos Lineares é uma das técnicas de aproximação mais populares. Isto se deve à sua simplicidade e ao fato de que ao aplicarmos este método a, por exemplo, medidas físicas, reduzimos o erro associado às medidas, pois, geralmente, o número de pontos que serão aproximados pela função aproximante é muito maior que o número de subfunções que a compõem. Uma de suas grandes aplicações é na deformação de imagens [3]. Este problema é amplamente estudado devido a seu uso, por exemplo, em imageamento médico [5] e animação [2].

A aproximação por quadrados mínimos envolve a minimização de uma função que é a soma das distâncias dos pontos a serem aproximados aos valores das medidas nos pontos.

Conhecendo as subfunções que compõem a função aproximante, nos resta descobrir o “peso” que cada uma destas subfunções tem. É possível montar um sistema linear utilizando os pontos a serem aproximados e as subfunções para encontrar o valor desses pesos, porém como o número de pontos geralmente é muito maior que o de subfunções, é provável que o sistema não tenha solução. Daí a necessidade de utilizarmos algum método mais elaborado para a resolução do problema.

Um dos métodos é a construção de equações normais, que nos dá um sistema linear quadrado e simétrico, ao qual podemos aplicar a fatoração de Cholesky e obter a solução.

Porém, em geral, este método não é o mais indicado, devido aos possíveis erros de arredondamento e condicionamento na construção do sistema normal. Uma outra maneira de se tratar o problema é através de fatorações ortogonais, que gera um sistema linear triangular. Uma das formas de se obter esta ortogonalização é através da fatoração de Householder.

Deformações de imagens, por sua vez, também podem ser tratadas de várias maneiras; deformação de similaridade e deformação rígida são algumas delas, que como será mostrado a seguir, através de experimentos, obtêm as deformações esperadas.

2. Quadrados Mínimos Lineares

O problema de quadrados mínimos lineares pode ser descrito, de uma forma geral, por:

$$\text{Minimizar } \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2 \quad (1)$$

onde $A = [a_{ij}]$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $a_{ij} = g_j(t_i)$, $b \in \mathbb{R}^n$, $b = f(t_i)$, g_j e $f(t_i)$ são medidas, geralmente experimentais, nos pontos t_i . Em geral, $m \gg n$.

O problema (1) pode ser resolvido de várias maneiras. Sabemos que x^* solução de (1) é também solução do problema

$$\text{Minimizar } \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2.$$

Definindo $\phi(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 = \frac{1}{2} x^T A^T Ax - b^T Ax + \frac{1}{2} b^T b$, então

$\nabla \phi(x) = A^T Ax - A^T b$; igualando o gradiente a zero obtemos o sistema linear normal

$$A^T Ax = A^T b, \quad (2)$$

conforme descrito em [1,4] por exemplo. Se as colunas de A são linearmente independentes, isto é, $\text{posto}(A) = n$, a matriz $A^T A$ é não singular e existe uma única solução x^* para o sistema linear acima que é, portanto, a única solução do problema (1).

De fato, podemos mostrar que $A^T A$ é definida positiva, o que garante que x^* é o único minimizador de $\phi(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2$.

Sendo a matriz $A^T A$ simétrica definida positiva, então podemos aplicar sobre ela a fatoração de Cholesky, que nos dá:

$$A^T A = G G^T, \quad (3)$$

onde $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz triangular inferior. Logo o que nos resta é calcular

$$G G^T x = A^T b, \quad (4)$$

ou seja, precisamos resolver os sistemas

$$\begin{aligned} G y &= A^T b, \\ G^T x &= y, \end{aligned} \quad (5)$$

onde $y \in \mathbb{R}^n$.

No entanto, resolver as equações normais nem sempre é o melhor modo para obter a solução x^* de (1), desde que o cálculo de $A^T A$ pode gerar muitos erros de arredondamentos (*underflows* e/ou *overflows*) e pode dobrar o condicionamento do problema em comparação a um método que usa A diretamente. Quando A tem posto n , podemos usar fatoração QR, onde $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ é uma matriz ortogonal e $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$, triangular superior. Com esta decomposição de A , obtemos a solução de (1) a partir da

resolução de um sistema triangular, ortogonalizando a matriz A e evitando o cálculo do produto $A^T A$.

Uma das formas de se obter a decomposição QR quando $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ é utilizando a decomposição de Householder, ou seja, aplicamos Q como uma matriz de reflexão sobre algum vetor, de modo que todos os seus elementos, exceto o primeiro, se anulem, após a aplicação de Q.

Tomando o vetor a ser refletido como a primeira coluna de A, após a primeira

reflexão obteremos $A' = \begin{bmatrix} \|a^1\| & x & \cdots & x \\ 0 & & & \\ \vdots & & A^1 & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$ e uma matriz H^1 , tal que $A' = H^1 A$

e $A^1 \in \mathbb{R}^{(m-1) \times (n-1)}$.

Aplicando a transformação agora a A^1 obteremos uma matriz A'' e uma matriz H^2 , tal que $A'' = H^2 A' = H^2 H^1 A$. Este processo é repetido até obtermos A^j e H^j , tal que $j = \min\{m-1, n\}$.

Então teremos $A^j = R$ uma matriz triangular superior e como Q é ortogonal, temos que $Q^T = H^j H^{j-1} \cdots H^2 H^1$, e o que nos resta resolver é o sistema linear

$$Rx = Q^T b. \quad (6)$$

Com algumas manipulações algébricas podemos obter uma fórmula fechada para Q, tomando $u = a^{1,k} - \text{sign}(a_1^{1,k}) e^1$, onde $a^{1,k}$ e $a_1^{1,k}$ são a primeira coluna e o primeiro elemento da primeira coluna da matriz A^k , respectivamente, e e^1 é o vetor $(1, 0, \dots, 0)^T$. Temos:

$$H^{k'} = I - \frac{2uu^T}{\|u\|_2^2} \quad (7)$$

e

$$H^k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & H^{k'} \end{bmatrix} \quad (8)$$

3. Aplicação à deformação de imagens

Aplicações que dependem da resolução de problemas do tipo de (1) são muito frequentes. Muitas vezes, mesmo que o problema não seja linear, o ajuste por quadrados mínimos lineares surge como parte de um problema computacional maior.

Neste capítulo aplicaremos quadrados mínimos lineares em deformações de imagens, as quais, por sua vez, são usadas em muitos contextos, como em animação[2] e imageamento médico[5]. A aplicação que vamos abordar está escrita no trabalho de Schaefer et al.[3]. Os autores tratam a deformação como uma função f que aplica pontos $p_i, i=1, \dots, m$ da imagem original em $q_i, i=1, \dots, m$ na imagem deformada. Para que f seja adequada às deformações deve satisfazer as seguintes propriedades:

- interpolação: $f(p_i) = q_i$, para todo $i = 1, \dots, m$;

- suavidade: f deve satisfazer deformações suaves;
- identidade: se os pontos q_i da imagem deformada são iguais a p_i , então, neste caso, f deve ser a função identidade (isto é: $q_i = p_i \rightarrow f(v)=v$).

É construída uma função de deformação satisfazendo estas três propriedades, usando quadrados mínimos. O problema que deve ser resolvido é:

$$\text{Minimizar } \sum_i (w_i) \|l_v(p_i) - q_i\|_2^2, \quad (9)$$

onde p_i e q_i são vetores-linha e w_i são pesos com a forma:

$$w_i = \frac{1}{\|p_i - v\|_2^{2\alpha}} \quad (10)$$

e α pode ser considerado como um coeficiente de deformação ($\alpha > 1$). Definindo a função de deformação f como $f(v) = l_v(v)$, podemos verificar que as três condições listadas acima são satisfeitas

A função $l_v(x)$ é uma transformação afim e pode ser definida como:

$$l_v(x) = xM + T, \quad (11)$$

onde M é uma matriz de transformação e T , uma translação. Com alguma manipulação algébrica, a translação T pode ser removida. A escolha da matriz M se dá de acordo com o tipo de deformação que queremos adotar. Entre as escolhas propostas em [3], optamos por duas delas: *deformações de similaridade* e *deformações rígidas*.

- Deformações de similaridade:

Nestas deformações, além de satisfazer as propriedades explicitadas acima, queremos que f produza somente translações, rotações e mudanças uniformes de escala, para isso devemos limitar a escolha da matriz M em (11), de modo que $M^T M = \lambda^2 I$, com $\lambda \in \mathbb{R}$ esse método possui vantagens em relação a outras deformações como explicitado em [3], pois preserva os ângulos da figura original nos dando assim uma transformação mais real, porém pode haver mudanças de escala em algumas partes da figura, deformando assim a figura de maneira não desejada.

- Deformações rígidas:

Para corrigir a mudança de escala limitamos ainda mais a escolha de M , usamos agora M tal que $M^T M = I$, esse tipo de deformação é chamado deformação rígida e gera imagens realísticas pois mantém os ângulos e não faz mudanças de escala, mas seu custo computacional é maior que a deformação de similaridade.

4. Resultados obtidos

Utilizando o *software* MatLab e sistemas normais para resolver os problemas de quadrados mínimos (neste caso usamos sistemas normais pois como cada subproblema é pequeno temos poucos erros de arredondamento), foram feitas as duas deformações na figura 1 com $\alpha = 1,5$ e 2, de modo a levar os pontos da alavanca à linha desenhada na figura 2. Deste modo, com $\alpha = 1,5$, fizemos a deformação de similaridade e obtivemos a

figura 3, fizemos a deformação rígida e obtivemos a figura 4. Com $\alpha = 2$ obtivemos as figuras 5 e 6.



figura 1: Imagem original



figura 2: Figura 1 com posição esperada após deformação



figura 3: Figura 1 com deformação de similaridade com $\alpha = 1,5$



Figura 4: Figura 1 com deformação rígida com $\alpha = 1,5$



figura 5: Figura 1 com deformação de similaridade com $\alpha = 2$



figura 6: Figura 1 com deformação rígida com $\alpha = 2$

Usando a figura 7 foram feitas novamente as deformações utilizando $\alpha = 1,5$ e 2 , levando os pontos do braço do boneco às linhas desenhadas na figura 8, com isso para $\alpha = 1,5$ obtivemos as figuras 9 e 10, e para $\alpha = 2$ obtivemos as figuras 11 e 12.

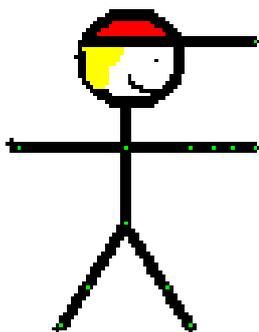


figura 7: Imagem original

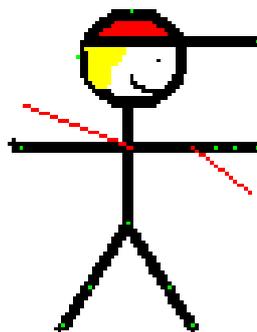


figura 8: Figura 7 original com posição esperada após deformação

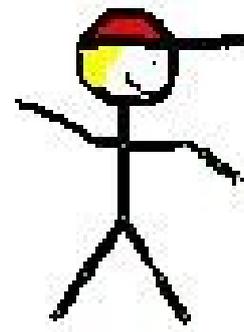


figura 9: Figura 7 com deformação de similaridade com $\alpha = 1,5$

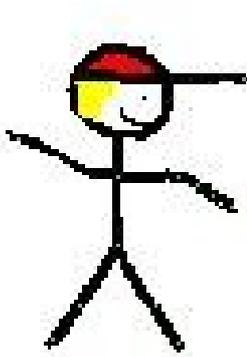


figura 10: Figura 7 com deformação rígida com $\alpha = 1,5$

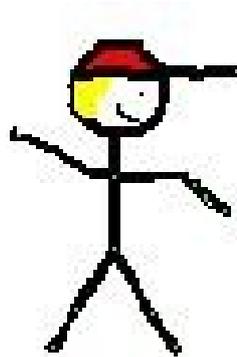


figura 11: Figura 7 com deformação de similaridade com $\alpha = 2$

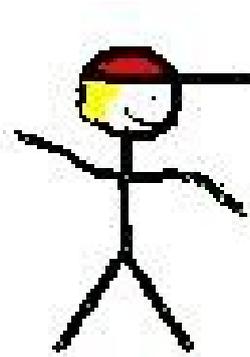


figura 12: Figura 7 com deformação rígida com $\alpha = 2$

5. Conclusões:

Primeiramente, comparando as figuras 3, 4, 5 e 6 com o que era esperado na figura 2 e as figuras 9, 10 11 e 12 com a figura 8 vemos que as deformações levaram os pontos aproximadamente nos locais desejados.

No caso da figura 1, as curvas apresentadas na alavanca em suas deformações se devem ao fato de que nas transformações não foram usados todos os pontos da alavanca em p_i e também ao fato de haver diferença na distância entre os pontos p_i da alavanca original e os pontos q_i da alavanca após as deformações.

Já no caso da figura 7 podemos perceber que o braço esquerdo do boneco não se deformou exatamente na linha como o esperado, mas isto é devido ao fato de termos fixado o ponto no cruzamento dos braços com o tronco do boneco, ou seja, nesse caso temos $p = q$, e termos usado apenas um ponto no final do braço esquerdo para indicar onde o braço deveria ficar.

Pelos experimentos vemos que o valor de α , o qual gera a melhor deformação, depende da figura a que a deformação está sendo aplicada, e também dos pontos p_i e q_i . Vemos que as deformações da figura 1 que geraram menos curvas na alavanca foram as que usaram $\alpha = 2$, enquanto para a figura 7 as deformações com $\alpha = 2$ geraram também uma deformação na cabeça do boneco maior que a deformação gerada por $\alpha = 1,5$. Além da escolha de α , outra causa para esta deformação inesperada foi o fato de nenhum ponto na região deformada na cabeça pertencer ao conjunto de p_i , ou seja, não há nenhuma restrição em relação à localização dos pontos da cabeça na imagem deformada.

Referências:

- [1] J.E. Dennis, R.B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. SIAM, Philadelphia, PA, 1996.
- [2] P. Fua, C. Miccio, Animated heads from ordinary images: at least squares approach. *Computer Vision and Image Understanding*, Vol. 75, Mr. 3, pp. 247 – 259, 1999.

[3] S. Schaefer, T. McPhail, J. Warren, Image deformation using least squares. ACM SIGGRAPH, pp. 533-540, 2006.

[4] G. Strang, *Linear Algebra and its Applications*. Third Edition, Harcourt Brace & Company International Edition, 1988.

[5] J. Warren, T. Ju, G. Eichele, C. Thaller, W. Chiu, J. Carson, A geometric database for gene expression data. SGP'03: *Proceedings of the 2003 Eurographics/ ACM SIGGRAPH symposium on Geometry processing*, pp. 166 – 176, 2003.