



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ**  
**ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**  
**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ**  
**ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ**

**ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ ΣΑΚΑΒΕΛΗΣ**

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ : ΔΡΟΣΟΣ ΓΚΙΝΤΙΔΗΣ**

**ΑΝ. ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ Ε.Μ.Π**

**ΑΘΗΝΑ, ΜΑΡΤΙΟΣ 2015**





**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ**  
**ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ**  
**ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ**

**ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ ΣΑΚΑΒΕΛΗΣ**

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ : ΔΡΟΣΟΣ ΓΚΙΝΤΙΔΗΣ**  
**ΑΝ. ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ Ε.Μ.Π**

**Εγκρίθηκε από την τριμελή επιτροπή:**

<b>Δρόσος Γκιντίδης</b>	<b>Κυριακή Κυριάκη</b>	<b>Παναγιώτης Ψαρράκος</b>
<b>Αν.Καθηγητής ΕΜΠ</b>	<b>Καθηγήτρια ΕΜΠ</b>	<b>Καθηγητής ΕΜΠ</b>

**ΑΘΗΝΑ, ΜΑΡΤΙΟΣ 2015**



## Περίληψη

Σε αυτή τη διπλωματική εργασία εξετάζονται τα διακριτά αντίστροφα προβλήματα και οι υπολογιστικές μέθοδοι επίλυσής τους. Η μαθηματική διατύπωση των προβλημάτων αυτών βασίζεται σε γραμμικές ολοκληρωτικές εξισώσεις Fredholm πρώτου είδους. Οι εξισώσεις αυτές αξιοποιούνται τόσο στα ευθέα όσο και στα αντίστροφα προβλήματα. Η υπολογιστική επίλυση των αντίστροφων προβλημάτων πραγματοποιείται μέσω των μεθόδων ομαλοποίησης. Αρχικά, παρουσιάζονται οι μέθοδοι διακριτοποίησης των αντίστροφων προβλημάτων και στη συνέχεια οι υπολογιστικές μέθοδοι αντιμετώπισής τους. Οι μέθοδοι αυτές κατηγοριοποιούνται σε επαναληπτικές και μη επαναληπτικές. Τέλος, παρουσιάζονται υλοποιήσεις δύο εφαρμογών. Η πρώτη χρησιμοποιείται συνήθως ως πρότυπο δοκιμαστικό πρόβλημα για τον έλεγχο των μεθόδων ομαλοποίησης (πρόβλημα Baart) και η δεύτερη σχετίζεται με τον καθαρισμό εικόνας.

### **Λέξεις κλειδιά:**

Αντίστροφα Προβλήματα, Ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm, Μέθοδοι Ομαλοποίησης, Επαναληπτικές Μέθοδοι Ομαλοποίησης

## **Abstract**

In this diploma thesis, we consider the discrete inverse problems and their computational solution methods. The mathematical description of these problems is based on the Fredholm integration equation of first kind, which is the basis for direct and inverse problems. The computational solution of inverse problems is achieved by applying regularization methods. First, we present the discretization methods of the inverse problems and next the computational methods. The computational methods are divided in iterative and not iterative regularization methods. Finally, we present a computational implementation of two applications. The first one is an artificial test problem for regularization methods (Baart problem) and the second one is an application for image deblurring.

### **Keywords:**

Inverse Problems, Fredholm Integral Equation, Regularization Methods, Iterative Regularization Methods

## Ευχαριστίες

Στο σημείο αυτό θα ήθελα να ευχαριστήσω μέσα από την καρδιά μου πρώτα και πάνω από όλα την οικογένεια μου για την όλη υποστήριξη της καθ' όλη τη διάρκεια της φοιτητικής μου ζωής. Επιπρόσθετα, επιθυμώ να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ.Δρόσο Γκιντίδη για τη συνεργασία, βοήθεια και στήριξη του στη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας διπλωματικής εργασίας, όπως επίσης και όλους τους φίλους και συγγενείς για την ενθάρρυνση και ψυχολογική υποστήριξη που έλαβα κατά τη διάρκεια όλου αυτού του αγώνα.

## Κατάλογος Σχημάτων

<b>Σχήμα 2.1:</b> Σχηματική Αναπαράσταση Συστήματος .....	<b>6</b>
<b>Σχήμα 5.1:</b> Γραφική παράσταση $x^2$ μεταξύ των σημείων $a$ και $b$ . ....	<b>39</b>
<b>Σχήμα 5.2:</b> Γραφικές παραστάσεις της $x^2$ (μαύρη γραμμή) και της ομαλοποιημένης $x^2$ (κόκκινη γραμμή) μεταξύ των σημείων $a$ και $\beta$ .....	<b>39</b>
<b>Σχήμα 5.3:</b> Γραφική παράσταση των παραγόντων φιλτραρίσματος της μεθόδου Tikhonov συναρτήσει των ιδιζουσών τιμών $\sigma_i$ .....	<b>43</b>
<b>Σχήμα 6.1:</b> Συνθήκη Picard για το Test Πρόβλημα χωρίς Θόρυβο.....	<b>66</b>
<b>Σχήμα 6.2:</b> Συνθήκη Picard για το Test Πρόβλημα με Θόρυβο .....	<b>66</b>
<b>Σχήματα 6.3,6.4,6.5:</b> Λύσεις του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Kaczmarz για 5,25 και 50 επαναλήψεις αντίστοιχα .....	<b>67-68</b>
<b>Σχήματα 6.6,6.7,6.8:</b> Λύσεις του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Cojugate Gradient για 5,25 και 50 επαναλήψεις αντίστοιχα .....	<b>69-70</b>
<b>Σχήματα 6.9,6.10,6.11:</b> Λύσεις του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Ελαχίστων Τετραγώνων για 5,25 και 50 επαναλήψεις αντίστοιχα .....	<b>70-71</b>
<b>Σχήμα 6.12:</b> Η Καμπύλη $L$ για τη Μέθοδο Kaczmarz.....	<b>72</b>
<b>Σχήμα 6.13:</b> Η Καμπύλη $L$ για τη Μέθοδο Conjugate Gradient .....	<b>73</b>
<b>Σχήμα 6.14:</b> Η Καμπύλη $L$ για τη Μέθοδο Ελαχίστων Τετραγώνων.....	<b>73</b>
<b>Σχήμα 6.15:</b> Αποσαφηνισμένη και Θολή Εικόνα του Παραδείγματος - Μοντέλου Αποσαφήνισης Εικόνας .....	<b>76</b>
<b>Σχήμα 6.16:</b> Εικόνες του Παραδείγματος - Μοντέλου Αποσαφήνισης Εικόνας που Παράγονται από τη Μέθοδο CGLS για 1, 25, 50 και 100 Επαναλήψεις ....	<b>77</b>
<b>Σχήμα 6.17:</b> Καμπύλη $L$ για το Πρόβλημα – Μοντέλο Αποσαφήνισης Εικόνας.....	<b>78</b>



<b>Σχήμα 6.18:</b> Εικόνες του Παραδείγματος - Μοντέλου Αποσαφήνισης Εικόνας με Θόρυβο που Παράγονται από τη Μέθοδο CGLS για 1, 25, 50 και 100 Επαναλήψεις.....	<b>79</b>
<b>Σχήμα 6.19:</b> Καμπύλη L για το Πρόβλημα – Μοντέλο Αποσαφήνισης Εικόνας με Θόρυβο .....	<b>80</b>
<b>Σχήμα 6.20:</b> Λύσεις Προβλήματος – Μοντέλου Πριονωτής Συνάρτησης με τη Μέθοδο CGLS για 1 έως 16 Επαναλήψεις.....	<b>81</b>
<b>Σχήμα 6.21:</b> Λύσεις Προβλήματος – Μοντέλου Πριονωτής Συνάρτησης με τη Μέθοδο CGLS με Επανορθογωνοποίηση για 1 έως 16 Επαναλήψεις .....	<b>82</b>
<b>Σχήμα 6.22:</b> Λύσεις Προβλήματος – Μοντέλου Πριονωτής Συνάρτησης με τη Μέθοδο TSVD για $k=1$ έως 16.....	<b>83</b>

## **Κατάλογος Πινάκων**

<b>Πίνακας 3.1:</b> Βασικές Αντιστοιχίες SVE - SVD .....	<b>15</b>
<b>Πίνακας 4.1:</b> Σύγκριση Μεθόδων Τετραγωνισμού και Αναπτύγματος .....	<b>24</b>

## Πίνακας Περιεχομένων

ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	V
ABSTRACT.....	VI
ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ.....	VII
ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ.....	VIII
ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ.....	X
<b>1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ .....</b>	<b>1</b>
1.1. ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΕΡΓΑΣΙΑΣ.....	1
1.2. ΔΟΜΗ ΕΡΓΑΣΙΑΣ.....	2
<b>2. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ.....</b>	<b>3</b>
2.1. ΟΡΙΣΜΟΣ ΚΑΙ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΤΥΠΩΣΗ .....	3
2.2. ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ – ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ .....	6
2.2.1. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΙΔΙΟΤΙΜΩΝ STURM – LIOUVILLE .....	6
2.2.2. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΟΜΟΓΡΑΦΙΑΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗΣ.....	7
2.2.3. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΗ ΕΞΙΣΩΣΗ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ .....	8
2.2.4. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ ΤΟΥ ABEL.....	8
2.2.5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ STEFAN .....	9
2.2.6. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΓΕΩΛΟΓΙΚΟΥ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΥ .....	10
<b>3. ΟΛΟΚΛΗΡΩΤΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ FREDHOLM .....</b>	<b>12</b>
3.1. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΤΥΠΩΣΗ ΚΑΙ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ .....	12
3.2. ΑΝΑΠΤΥΓΜΑ ΙΔΙΑΖΟΥΣΩΝ ΤΙΜΩΝ ΚΑΙ ΣΥΝΘΗΚΗ PICARD.....	14
<b>4. ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΩΝ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ.....</b>	<b>18</b>
4.1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ .....	18
4.2. ΚΥΡΙΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗΣ.....	19

4.2.1. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΗΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ .....	19
4.2.2. ΜΕΘΟΔΟΣ ΑΝΑΠΤΥΓΜΑΤΟΣ GALERKIN .....	20
4.2.3. ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΚΑΙ ΚΡΙΤΗΡΙΑ ΕΠΙΛΟΓΗΣ .....	23
4.3. ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΗ ΙΔΙΑΖΟΥΣΩΝ ΤΙΜΩΝ .....	25
<b>5. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΟΜΑΛΟΠΟΙΗΣΗΣ .....</b>	<b>31</b>
5.1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ .....	31
5.2. ΑΜΕΣΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΟΜΑΛΟΠΟΙΗΣΗΣ .....	33
5.2.1. ΜΕΘ. ΑΠΟΚΟΜΜΕΝΗΣ ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΙΔΙΑΖΟΥΣΩΝ ΤΙΜΩΝ .....	33
5.2.2. ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΠΙΛΕΚΤΙΚΗΣ ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΙΔΙΑΖΟΥΣΩΝ ΤΙΜΩΝ .....	37
5.2.3. ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΙΚΗΟΝΟΝ .....	38
5.3. ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΥΑΙΣΘΗΣΙΑΣ ΑΜΕΣΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΟΜΑΛΟΠΟΙΗΣΗΣ .....	44
5.3.1. ΑΠΛΟΪΚΗ (ΝΑΪΒΕ) ΛΥΣΗ.....	45
5.3.2. ΛΥΣΗ TSVD .....	45
5.3.3. ΛΥΣΗ ΤΙΚΗΟΝΟΝ .....	46
5.3.4. ΛΥΣΗ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ .....	46
5.4. ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΠΑΡΑΜΕΤΡΩΝ ΟΜΑΛΟΠΟΙΗΣΗΣ.....	47
5.4.1. ΣΦΑΛΜΑΤΑ ΟΜΑΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΔΙΑΤΑΡΑΧΗΣ.....	47
5.4.2. ΕΠΙΠΤΩΣΗ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΠΑΡΑΜΕΤΡΩΝ ΟΜΑΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΣΤΗ ΛΥΣΗ.....	48
5.4.2.1. ΚΡΙΤΗΡΙΟ ΚΑΜΠΥΛΗΣ L.....	49
5.4.2.1. ΑΡΧΗ ΤΗΣ ΑΣΥΜΦΩΝΙΑΣ .....	52
5.5. ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΟΜΑΛΟΠΟΙΗΣΗΣ .....	53
5.5.1. ΚΛΑΣΣΙΚΕΣ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ .....	54

5.5.1.1. ΕΠΑΝ. ΜΕΘ. ΚΑCΖΜΑΡΖ.....	54
5.5.1.2. ΣΤΑCΙΜΕC ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕC ΜΕΘΟΔΟΙ.....	55
5.5.2. ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΟΛΗC.....	57
5.5.3. ΜΕΘΟΔΟΙ ΥΠΟΧΩΡΟΥ ΚΡΥΛΟΝ.....	60
<b>6. ΥΛΟΠΟΙΗCΗ ΜΕΘΟΔΩΝ – ΕΦΑΡΜΟΓΕC.....</b>	<b>63</b>
6.1. ΕΦΑΡΜΟΓΕC.....	63
6.2. ΔΟΚΙΜΑCΤΙΚΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΒΑΑΡΤ.....	64
6.2.1. ΤΕCΤ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥCΗC.....	65
6.2.2. ΑΠΟΤΕΛΕCΜΑΤΑ ΕΠΙΛΥCΗC – CΧΟΛΙΑCΜΟC.....	65
6.3. ΔΟΚΙΜΑCΤΙΚΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΒΛUR & DERIV2.....	74
6.3.1. ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥCΗC.....	75
6.3.2. ΑΠΟΤΕΛΕCΜΑΤΑ ΕΠΙΛΥCΗC – CΧΟΛΙΑCΜΟC.....	76
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	86

# 1. Εισαγωγή

## 1.1. Αντικείμενο Εργασίας

Στην παρούσα μελέτη εξετάζονται τα αντίστροφα προβλήματα, η θεωρητική τους θεμελίωση και οι υπολογιστικές μέθοδοι επίλυσής τους. Σημαντικό ρόλο στη δημιουργία μεθόδων επίλυσης αντίστροφων προβλημάτων διαδραματίζει η κατάλληλη διατύπωση του προβλήματος, έτσι ώστε αυτό να είναι όσο το δυνατό λιγότερο ευαίσθητο σε συσσώρευση σφαλμάτων. Η επίλυση των προβλημάτων αυτών μπορεί να επιτευχθεί με τη χρήση μεθόδων ομαλοποίησης. Η λογική αυτών των μεθόδων εν γένει άπτεται της αντικατάστασης του κακώς τοποθετημένου προβλήματος από ένα άλλο προσεγγιστικό, το οποίο είναι καλώς τοποθετημένο. Τα αντίστροφα διακριτά προβλήματα συναντώνται σε μεγάλο αριθμό πρακτικών εφαρμογών από διάφορες επιστημονικές περιοχές, όπως για παράδειγμα είναι η ιατρική απεικόνιση και η γεωλογία. Η μαθηματική τους διατύπωση στηρίζεται στην ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους, η οποία αποτελεί τη βάση υπολογισμού για το ευθύ αλλά και για το αντίστροφο πρόβλημα [18].

Στην παρούσα εργασία επιδιώκεται η παρουσίαση μεθόδων διακριτοποίησης (discretization methods) των αντίστροφων γραμμικών προβλημάτων, η χρήση των οποίων απαιτείται προκειμένου να καταστεί εφικτή η αριθμητική επίλυσή τους, δεδομένου ότι η αναλυτική λύση τους δεν είναι εφικτή, ή ακόμη και όταν είναι δεν είναι πρακτικά χρήσιμη. Επίσης εξετάζονται οι υπολογιστικές μέθοδοι (γνωστές και ως μέθοδοι ομαλοποίησης) που χρησιμοποιούνται για την επίλυση των αντίστροφων διακριτών προβλημάτων βάσει της κατηγοριοποίησής τους σε επαναληπτικές και μη επαναληπτικές. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στις επαναληπτικές μεθόδους, οι οποίες αποτελούν και αντικείμενο υλοποίησης της παρούσας μελέτης.

Τέλος, σημαντικό τμήμα της εργασίας αποτελεί η υλοποίηση πρακτικών εφαρμογών, οι οποίες επιλύουν δοκιμαστικά (test) προβλήματα κάνοντας χρήση επαναληπτικών μεθόδων. Οι εν λόγω εφαρμογές έχουν αναπτυχθεί σε Matlab και στηρίζονται σε ρουτίνες του έχουν αναπτυχθεί από τον Hansen (2010). Τα προβλήματα που έχουν επιλεγεί είναι η ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους, το

πρόβλημα καθαρισμού εικόνας (image deblurring) και το πρόβλημα «πριονωτής συνάρτησης» (sawtooth function).

## **1.2. Δομή Εργασίας**

Στο επόμενο Κεφάλαιο εξετάζεται ο ορισμός και η μαθηματική διατύπωση των αντίστροφων προβλημάτων και παρατίθεται ένας αριθμός σημαντικών παραδειγμάτων – πρακτικών εφαρμογών τους. Στο Κεφάλαιο 3 εξετάζεται θεωρητικά η εξίσωση Fredholm πρώτου είδους στην οποία στηρίζεται η μαθηματική διατύπωση των αντίστροφων προβλημάτων, ενώ στο Κεφάλαιο 4 παρουσιάζονται οι μέθοδοι διακριτοποίησης των αντίστροφων προβλημάτων. Το Κεφάλαιο 5 εξετάζει θεωρητικά και πρακτικά τις μεθόδους ομαλοποίησης (άμεσες και επαναληπτικές), τη διατύπωσή τους, και τα κύρια χαρακτηριστικά τους. Τέλος, στο Κεφάλαιο 6 εξετάζεται ο τρόπος και τα αποτελέσματα υλοποίησης δύο πρακτικών εφαρμογών επίλυσης αντίστροφων προβλημάτων με χρήση επαναληπτικών μεθόδων.

## 2. Αντίστροφα Προβλήματα

### 2.1. Ορισμός και Μαθηματική Διατύπωση

Σύμφωνα με έναν από τους δημοφιλέστερους γενικούς ορισμούς των αντίστροφων προβλημάτων που έχει δοθεί από τον Keller (1976), δύο προβλήματα καλούνται αντίστροφα αν η διατύπωση του ενός εμπεριέχει όλη ή τμήμα της λύσης του άλλου. Το πρώτο από τα δύο αυτά προβλήματα είναι γνωστό ως «ευθύ» (forward, ή direct), ενώ το δεύτερο ως αντίστροφο (inverse). Σε πολλές περιπτώσεις συμβαίνει μάλιστα το ένα από τα δύο προβλήματα να έχει μελετηθεί ευρέως, ενώ το άλλο να μην έχει υποκινήσει σημαντικό ερευνητικό ενδιαφέρον. Επίσης, σε πολλές περιπτώσεις συμβαίνει ένα από τα δύο προβλήματα να μην είναι καλώς τοποθετημένο (well-posed), το οποίο σύμφωνα με τον ορισμό του Hadamard καλείται κακώς τοποθετημένο (ill-posed). Πρακτικά ένα πρόβλημα είναι κακώς τοποθετημένο (ill-posed) όταν ικανοποιεί τουλάχιστον μία από τις παρακάτω απαιτήσεις:

1. Μη ύπαρξη λύσης του προβλήματος (non-existence)
2. Ύπαρξη περισσοτέρων της μιας λύσης (non-uniqueness)
3. Εξάρτηση της λύσης από τα δεδομένα με μη συνεχή τρόπο (instability)

Εάν ο χώρος προέλευσης των δεδομένων ορίζεται ως ένα σύνολο λύσεων του ευθέως προβλήματος, η ύπαρξη λύσης του αντίστροφου προβλήματος είναι ξεκάθαρη. Ωστόσο, η λύση μπορεί να μην υφίσταται αν τα δεδομένα αλλοιώνονται από «θόρυβο». Η μη ύπαρξη λύσης δεν αποτελεί σημαντικό ζήτημα δεδομένου ότι αν το πρόβλημα δεν έχει λύση, μπορεί να βρεθεί μαθηματική διατύπωση τέτοια ώστε να επιδέχεται λύση. Η μοναδικότητα της λύσης ενός αντίστροφου προβλήματος είναι πολλές φορές δύσκολο να καταδειχτεί. Αν η μοναδικότητα δε διασφαλίζεται από τα δεδομένα του προβλήματος, τότε για να είναι η λύση μοναδική θα πρέπει είτε να χρησιμοποιηθούν επιπρόσθετα συμπληρωματικά δεδομένα, είτε το σύνολο των αποδεκτών λύσεων θα πρέπει να περιοριστεί εκ των προτέρων με χρήση πληροφοριών που είναι γνωστές εκ των



προτέρων. Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι τυχόν έλλειψη μοναδικής λύσης μπορεί να αντιμετωπιστεί με αναδιατύπωση του προβλήματος [49].

Ιδιαίτερης σημασίας αποτελεί το κριτήριο της ευστάθειας. Στην πράξη αυτό που δημιουργεί την αστάθεια είναι η συσσώρευση σφαλμάτων μέτρησης και στρογγυλοποίησης και η ενίσχυσή τους με αυθαίρετα μεγάλο τρόπο κατά την εκτέλεση των απαιτούμενων υπολογισμών προς επίλυση του προβλήματος. Η υπολογισθείσα λύση μπορεί έτσι να καταστεί εντελώς λανθασμένη και πρακτικά άχρηστη. Μέχρι τις αρχές του περασμένου αιώνα ήταν γενικά αποδεκτό ότι για όλα τα προβλήματα που συναντώνται στη φύση, η λύση είναι πάντα ευσταθής και σε περίπτωση που κάτι τέτοιο δε συνέβαινε, θεωρούνταν ότι η μαθηματική διατύπωση-μοντελοποίηση του προβλήματος ήταν ανεπαρκής. Κατά συνέπεια, προβλήματα με μη ευσταθή λύση χαρακτηρίζονταν κακώς τοποθετημένα. Ωστόσο, κατά το δεύτερο μισό του περασμένου αιώνα έγινε αντιληπτό ότι ένας πολύ μεγάλος αριθμός επιστημονικών και τεχνολογικών προβλημάτων είναι κακώς τοποθετημένα με οποιαδήποτε λογική μαθηματική διατύπωση. Μετά την εν λόγω διαπίστωση, η ερευνητική κοινότητα δραστηριοποιήθηκε σημαντικά στην κατεύθυνση εύρεσης ευσταθών και ακριβών μεθόδων αριθμητικής επίλυσης των κακώς τοποθετημένων προβλημάτων [49, 54].

Σημαντικό ρόλο στη δημιουργία τέτοιων μεθόδων διαδραματίζει η ενδεδειγμένη διατύπωση του προβλήματος, προκειμένου αυτό να είναι όσο το δυνατό λιγότερο ευαίσθητο σε συσσώρευση σφαλμάτων. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με τις μεθόδους ομαλοποίησης. Η λογική αυτών των μεθόδων θα εξηγηθεί σε επόμενο κεφάλαιο, αλλά εν γένει άπτεται της αντικατάστασης του κακώς τοποθετημένου προβλήματος από ένα άλλο προσεγγιστικό, το οποίο είναι καλώς τοποθετημένο. Δύο άλλοι παράγοντες οι οποίοι μπορούν να δυσκολέψουν σημαντικά τη λύση ενός αντίστροφου προβλήματος είναι ότι τα δεδομένα μπορεί να είναι συμβατά με διαφορετικές τιμές των παραμέτρων του συστήματος που υπάρχουν προς διερεύνηση και ότι πολλές φορές δύναται να απαιτούνται πειραματικά δεδομένα μεγάλου εύρους τιμών για τον υπολογισμό των παραμέτρων του συστήματος [17].

Πλέον, σημαντικός αριθμός διεθνών επιστημονικών περιοδικών (π.χ. “*Inverse Problems*”, “*Inverse and Ill-Posed Problems*”, “*Inverse Problems in Engineering*”) και

άρθρων επιβεβαιώνουν την ενασχόληση της ερευνητικής κοινότητας με τα αντίστροφα προβλήματα [4, 5, 11, 14, 16, 35, 36, 39, 40, 41, 44, 45, 56, 57].

Υπάρχει εκτενής βιβλιογραφία με αντικείμενο τα αντίστροφα προβλήματα. Το βιβλίο των Engl et al. (1996) περιλαμβάνει μία λεπτομερή ανασκόπηση του θέματος χωρίς όμως να δίνει έμφαση στο μαθηματικό φορμαλισμό. Στον Neumaier (1998) οφείλεται μία επίσης σημαντική δουλειά η οποία δίνει έμφαση και στη μαθηματική διατύπωση μη πεπερασμένων αντίστροφων προβλημάτων. Ακόμη, το βιβλίο του Hansen (2010) εστιάζει περισσότερο σε διακριτά, πεπερασμένης διάστασης, αντίστροφα προβλήματα, ενώ περιλαμβάνει και σημαντικό αριθμό υλοποιημένων παραδειγμάτων σε Matlab, και ως εκ τούτου αποτελεί ιδιαίτερα σημαντική πηγή για την παρούσα εργασία. Στη συνέχεια της ενότητας εισάγεται ο μαθηματικός φορμαλισμός που απαιτείται για να περιγράψει τα διακριτά αντίστροφα προβλήματα, η μελέτη των οποίων αποτελεί αντικείμενο της παρούσας εργασίας.

Αν προσπαθήσει κανείς να μελετήσει τη συσχέτιση μεταξύ των παραμέτρων ενός φυσικού προβλήματος  $\mu$  και των πειραματικών μετρήσεων μίας φυσικής ποσότητας  $\kappa$ , η οποία σχετίζεται με τις παραμέτρους αυτές μέσω μίας σχέσης της μορφής  $f(\mu, \kappa) = 0$ , θα διαπιστώσει ότι το είδος και η ποιότητα των πειραματικών μετρήσεων διαδραματίζει πολύ σημαντικό ρόλο στη συμπεριφορά του μοντέλου που περιγράφει ένα αντίστροφο πρόβλημα. Πρακτικά, διαφορετικά είδη μετρήσεων για τις ίδιες παραμέτρους δύνανται να οδηγήσουν σε διαφορετικές εκτιμήσεις των παραμέτρων του προβλήματος. Αυτό συμβαίνει γιατί η μαθηματική μοντελοποίηση ενός αντίστροφου προβλήματος στοχεύει στη διερεύνηση του “εσωτερικού” ενός συστήματος βάσει δεδομένων που καταγράφονται στο “εξωτερικό” του συστήματος [32].

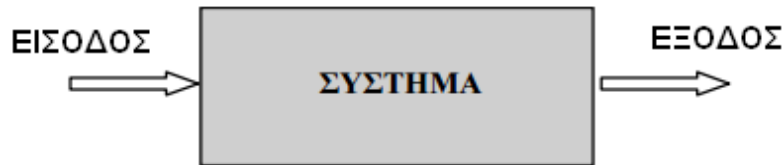
Τα αντίστροφα προβλήματα κατά κανόνα διατυπώνονται υπό τη μορφή ολοκληρωτικών εξισώσεων ως εξής [3]:

$$\int_{\alpha}^{\beta} K(s, t) f(t) dt = g(s), \quad \alpha \leq s \leq \beta \quad (2.1)$$

όπου τα  $K(s, t)$ ,  $g(s)$  είναι γνωστά, ενώ η συνάρτηση  $f$  είναι άγνωστη. Εξετάζοντας την ανωτέρω εξίσωση από την οπτική της θεωρίας συστημάτων, αυτή δύναται να διατυπωθεί με την ακόλουθη ισοδύναμη σχέση:

$$\hat{K}f = g, \quad \hat{K} = \int_a^\beta K(s, t) f(t) dt \quad (2.2)$$

όπου  $\hat{K}$  ο τελεστής σχήματος,  $f$  η είσοδος και  $g$  η έξοδος του συστήματος, όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 2.1. Στα αντίστροφα προβλήματα ζητούμενο είναι είτε η εύρεση της εισόδου της οποίας η έξοδος είναι γνωστή, είτε ο υπολογισμός του τελεστή συστήματος εάν είναι γνωστή η είσοδος και η έξοδος του συστήματος.



Σχήμα 2.1: Σχηματική Αναπαράσταση Συστήματος

## 2.2. Παραδείγματα – Εφαρμογές

Τα αντίστροφα διακριτά προβλήματα συναντώνται σε μεγάλο αριθμό πρακτικών εφαρμογών από διάφορες επιστημονικές περιοχές όπως για παράδειγμα είναι η ιατρική απεικόνιση και η γεωλογία. Στην ενότητα αυτή παρουσιάζεται συνοπτικά ένας αριθμός τέτοιων εφαρμογών και ο τρόπος μαθηματικής διατύπωσής τους, προκειμένου να καταδειχτεί η ευρύτητα εφαρμογής των αντίστροφων προβλημάτων και να εισαχθεί το σκεπτικό της λεπτομερούς και αναλυτικής μαθηματικής διατύπωσης του αντίστροφου προβλήματος, η οποία παρουσιάζεται στο επόμενο κεφάλαιο.

### 2.2.1. Αντίστροφο Πρόβλημα Ιδιοτιμών Sturm – Liouville

Το συγκεκριμένο πρόβλημα πραγματεύεται τον προσδιορισμό της πυκνότητας μάζας  $\rho$  μέσα από έναν αριθμό συχνοτήτων  $\omega$  που έχουν μετρηθεί πειραματικά με τη βοήθεια παλλόμενης χορδής μήκους  $L$ . Ειδικότερα, έστω χορδή μήκους  $L$ , με άκρα τα σημεία  $x = 0$  και  $x = L$  και πυκνότητα μάζας  $\rho(x) > 0$ , ( $0 \leq x \leq L$ ). Πάλλοντας τη χορδή

δημιουργούνται δονήσεις οι οποίες παράγουν ήχους. Έστω ακόμη ότι η μετατόπιση της χορδής κατά  $x$  σε χρόνο  $t$ , αναπαρίσταται από τη συνάρτηση  $v(x, t)$  με  $0 \leq x \leq L$  και  $t > 0$ . Η  $v(x, t)$  ικανοποιεί την παρακάτω «κυματική» εξίσωση [12]:

$$\rho(x) \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq L, \quad t > 0 \quad (2.3)$$

με συνοριακές συνθήκες:

$$v(0, t) = v(L, t) = 0, \quad t > 0 \quad (2.4)$$

Όταν και μόνο όταν τα  $w$  και  $\omega$  ικανοποιούν την ακόλουθη μαθηματική σχέση (γνωστή και ως πρόβλημα ιδιοτιμών Sturm-Liouville):

$$w''(x) + \omega^2 \rho(x) w(x) = 0, \quad 0 < x < L, \quad w(0) = w(L) = 0 \quad (2.5)$$

τότε η λύση του προβλήματος, γνωστή και ως καθαρός ήχος, είναι μία περιοδική μετατόπιση της μορφής:

$$v(x, t) = w(x) \cdot (a \cos(\omega t) + b \sin(\omega t)), \quad \omega > 0 \quad (2.6)$$

### 2.2.2. Αντίστροφο Πρόβλημα Τομογραφίας Αντίστασης

Στο αντίστροφο πρόβλημα τομογραφίας αντίστασης (Impedance Tomography Problem) στόχος είναι ο υπολογισμός μιας άγνωστης συνάρτησης  $\gamma$  που λαμβάνει τιμές στο σύνορο  $D$  του πεδίου ορισμού ενός προβλήματος, έχοντας ως δεδομένα τα  $u$  και  $\gamma \frac{\partial u}{\partial t}$  στο σύνορο  $\partial D$ . Πρόκειται για πρόβλημα προσδιορισμού μιας εκ των παραμέτρων διαφορικής εξίσωσης, η οποία είναι γνωστή ως εξίσωση διάχυσης δύο διαστάσεων σε ανομοιογενές μέσο και περιγράφεται μαθηματικά από τη σχέση [7]:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{c} \cdot \operatorname{div}(\gamma \nabla u(x, t)), \quad x \in D, \quad t > 0 \quad (2.7)$$

η οποία για την περίπτωση στατικού προβλήματος εκφυλίζεται σε:

$$\operatorname{div}(\gamma \nabla u(x)) = 0, \quad x \in D \quad (2.8)$$

### 2.2.3. Αντίστροφη Εξίσωση Θερμότητας

Η εξίσωση θερμότητας μίας διάστασης περιγράφεται μαθηματικά από την ακόλουθη διαφορική εξίσωση μερικών παραγώγων:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \quad (2.9)$$

με συνοριακές συνθήκες:

$$u(0,t) = u(\pi,t) = 0, \quad t > 0 \quad (2.10)$$

και αρχική συνθήκη:

$$u(x,0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq \pi \quad (2.11)$$

Στο αντίστροφο πρόβλημα εξίσωσης θερμότητας η τελική κατανομή θερμοκρασίας  $u(.,T)$  είναι γνωστή και το ζητούμενο είναι να προσδιοριστεί η θερμοκρασία σε προηγούμενες χρονικές περιόδους  $t < T$ , και τελικά η αρχική θερμοκρασία  $u(.,0)$ . Ο προσδιορισμός της ζητούμενης θερμοκρασίας  $u_0 = u(.,0)$  πραγματοποιείται με την επίλυση της ακόλουθης ολοκληρωτικής εξίσωσης:

$$u(x,t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi k(x,y) \cdot u_0(y) dy, \quad 0 \leq x \leq \pi, \quad k(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cdot e^{-n^2 T} \cdot \sin(nx) \cdot \sin(ny) \quad (2.12)$$

### 2.2.4. Αντίστροφο Πρόβλημα Ολοκλήρωσης του Abel

Το αντίστροφο πρόβλημα ολοκλήρωσης του Abel έχει ως ζητούμενο τον προσδιορισμό της καμπύλης πάνω στην οποία κινείται στοιχείο μάζας  $m$  με εκκίνηση σημείο  $p_1$  που βρίσκεται σε ύψος  $h > 0$  και τερματισμό σημείο  $p_0$  που βρίσκεται σε ύψος  $h = 0$ . Η μοναδική δύναμη που ασκείται πάνω στη μάζα  $m$  είναι η βαρυτική δύναμη  $mg$ . Στο εν λόγω αντίστροφο πρόβλημα δεδομένο αποτελεί το χρόνος  $T = T(h)$  σε διάφορα ύψη και ζητούμενο, όπως προαναφέρθηκε, ο προσδιορισμός της καμπύλης κίνησης.

Έστω καμπύλη  $x = \psi(y)$  και ένα τυχαίο σημείο  $p$  αυτής με συντεταγμένες  $(x, y) = (\psi(y), y)$ . Σύμφωνα με την Αρχή Διατήρησης της Ενέργειας ισχύει ότι:

$$E + U = \frac{m}{2}u^2 + mgy = mgh = \text{σταθερά} \quad (2.13)$$

Από την παραπάνω σχέση προκύπτει:

$$\frac{ds}{dt} = u = \sqrt{2g(h-y)} \quad (2.14)$$

Ο συνολικός χρόνος μετάβασης από το σημείο  $p_1$  στο σημείο  $p_0$  είναι:

$$T = T(h) = \int_{p_0}^{p_1} \frac{ds}{u} = \int_0^h \frac{\sqrt{1+\psi'(y)^2}}{\sqrt{2g(h-y)}} dy, \quad h > 0 \quad (2.15)$$

Εάν

$$\phi(y) = \sqrt{1+\psi'(y)^2} \quad (2.16)$$

και θεωρώντας γνωστή τη συνάρτηση:

$$f(h) = T(h) \cdot \sqrt{2g} \quad (2.17)$$

για την επίλυση του αντίστροφου προβλήματος θα πρέπει να προσδιοριστεί η άγνωστη συνάρτηση  $\phi$ , επιλύοντας την ακόλουθη ολοκληρωτική εξίσωση, η οποία είναι γνωστή και ως ολοκληρωτική εξίσωση του Abel:

$$\int_0^h \frac{\phi(y)}{\sqrt{h-y}} dy = f(h), \quad h > 0 \quad (2.18)$$

### 2.2.5. Αντίστροφο Πρόβλημα Stefan

Ο Stefan έχει μοντελοποιήσει το φαινόμενο του λωσίματος του πάγου και της μετατροπής του σε νερό. Η ταχύτητα με την οποία μετακινείται η διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ νερού και πάγου (καμπύλη  $s$ ) εξαρτάται από τη ροή της θερμότητας και περιγράφεται από την συνθήκη Stefan:

$$\frac{\partial s(t)}{\partial t} = -\frac{\partial u(s(t), t)}{\partial x}, \quad t \in [0, T] \quad (2.19)$$

Το Αντίστροφο Πρόβλημα Stefan έχει ως δεδομένη την καμπύλη  $s$  και ως ζητούμενο τον προσδιορισμό της θερμοκρασίας  $u$  και την αρχική ροή θερμότητας  $u_0$ .

Ειδικότερα, η μοντελοποίηση του προβλήματος Stefan υποθέτει ένα ομογενές τμήμα πάγου έκτασης  $x \geq l$  κατά τη χρονική στιγμή  $t \geq 0$ , στο οποίο ο πάγος λιώνει σταδιακά από αριστερά προς τα δεξιά λόγω της εφαρμοζόμενης θέρμανσης. Κατά τη χρονική στιγμή  $t > 0$  η περιοχή μεταξύ  $x = 0$  και  $s(t)$  είναι καλυμμένη από νερό, ενώ η περιοχή  $x \geq s(t)$  είναι καλυμμένη από πάγο. Εάν  $u(x, t)$  είναι η θερμοκρασία τη χρονική στιγμή  $t$  για  $0 \leq x \leq s(t)$ , τότε η συνάρτηση  $u$  ικανοποιεί τη μονοδιάστατη εξίσωση θερμότητας:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad D = \{(x, t) \in R^2 : 0 < x < s(t), t > 0\} \quad (2.20)$$

με συνοριακές συνθήκες:

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = f(t) \quad \text{και} \quad u(s(t), t) = 0, \quad t \in [0, T] \quad (2.21)$$

και αρχική συνθήκη:

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq l \quad (2.22)$$

Η  $u_0$  είναι η αρχική θερμοκρασία και η  $f(t)$  η ροή της θερμότητας στο αριστερό σύνορο του πάγου  $x = 0$ .

### 2.2.6. Αντίστροφο Πρόβλημα Γεωλογικού Προσδιορισμού

Το Αντίστροφο Πρόβλημα Γεωλογικού Προσδιορισμού (Geological Prospecting) έχει ως ζητούμενο τον προσδιορισμό της θέσης, του σχήματος, της αγωγιμότητας, των γεωλογικών ανωμαλιών και άλλων παρόμοιων παραμέτρων στο εσωτερικό της γης βάσει μετρήσεων που πραγματοποιούνται στην επιφάνεια αυτής. Ειδικότερα, ζητείται ο προσδιορισμός συνάρτησης  $\rho(x)$ , για  $0 \leq x \leq 1$ , η οποία περιγράφει τη μεταβολή της πυκνότητας μάζας σε βάθος  $h$  μίας μη ομαλής περιοχής βάσει μετρήσεων της κάθετης συνιστώσας  $f_v(x)$  της μεταβολής της ασκούμενης δύναμης στον άξονα  $x$ .

Έστω  $\rho(x') \cdot \Delta(x')$ , η μάζα ενός στοιχείου στο σημείο  $x'$  και  $\sqrt{(x-x')^2 + h^2}$  η απόσταση του από την επιφάνεια στην οποία λαμβάνονται οι μετρήσεις. Η μεταβολή της βαρύτητας περιγράφεται από το νόμο του Newton ως εξής:

$$f = \gamma \frac{m}{r^2} \quad (2.23)$$

όπου  $\gamma$  η σταθερά της βαρύτητας.

Για την κάθετη συνιστώσα  $f_v(x)$  ισχύει ότι:

$$\Delta f_v(x) = \gamma \cdot \frac{\rho(x') \cdot \Delta(x')}{(x-x')^2 + h^2} \cdot \cos \theta = \gamma \cdot \frac{h \cdot \rho(x') \cdot \Delta(x')}{\left[ (x-x')^2 + h^2 \right]^{3/2}} \quad (2.24)$$

Από την ανωτέρω σχέση προκύπτει η ολοκληρωτική εξίσωση μέσω της οποίας μπορεί να προσδιοριστεί η άγνωστη συνάρτηση  $\rho$ :

$$f_v(x) = \gamma \cdot h \int_0^1 \frac{\rho(x')}{\left[ (x-x')^2 + h^2 \right]^{3/2}} dx', \quad 0 \leq x \leq l \quad (2.25)$$



### 3. Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm

#### 3.1. Μαθηματική Διατύπωση και Ιδιότητες

Η ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους διατυπώνεται μαθηματικά ως εξής:

$$f(x) = \int_{\alpha}^{\beta} K(x,t)\varphi(t)dt \quad (3.1)$$

όπου η συνάρτηση  $K(x,t)$  είναι γνωστή ως «πυρήνας» (kernel) και  $\varphi(t)$  είναι μία άγνωστη, προς προσδιορισμό, συνάρτηση (Arfken, 1985). Έστω, χωρίς βλάβη της γενικότητας, ότι:

$$f(x) = \int_0^1 K(x,t)\varphi(t)dt, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.2)$$

Η συνάρτηση του πυρήνα  $K(x,t)$  είναι αυτή που προσδιορίζει το βαθμό συσχέτισης των συναρτήσεων  $f$  και  $\varphi$ . Όπως ήδη εξηγήθηκε στο προηγούμενο Κεφάλαιο, η ανωτέρω ολοκληρωτική εξίσωση αποτελεί τη βάση υπολογισμού για το ευθύ αλλά και για το αντίστροφο πρόβλημα [18]. Στην ειδικότερη τώρα περίπτωση που η συνάρτηση του πυρήνα μπορεί να διατυπωθεί βάσει της διαφοράς  $x-t$ , είναι δηλαδή της μορφής  $K(x-t)$ , η εν λόγω εξίσωση είναι γνωστή ως πρόβλημα αποσυνέλιξης (deconvolution) και λαμβάνει τη μορφή [28]:

$$f(x) = \int_0^1 K(x-t)\varphi(t)dt \quad (3.3)$$

Επιπλέον, στην περίπτωση που τα όρια του ολοκληρώματος είναι μη πεπερασμένα, η εν λόγω εξίσωση λαμβάνει τη μορφή:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x-t)\varphi(t)dt \quad (3.4)$$

και επιλύεται με τη βοήθεια του μετασχηματισμού Fourier  $F_x$  (αν υπάρχει). Στην περίπτωση αυτή, η λύση της μαθηματικά διατυπώνεται ως εξής:

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F_x[f(x)](k)}{F_x[K(x)](k)} e^{2\pi i k x} dk \quad (3.5)$$

Οι Lebesgue – Riemann διατύπωσαν μία από τις σημαντικότερες ιδιότητες της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους, η οποία είναι γνωστή και ως Λήμμα Lebesgue – Riemann. Σύμφωνα με το Λήμμα αυτό, για συνάρτηση:

$$\varphi_p(t) = \sin(2\pi p t), \quad p = 1, 2, \dots \quad (3.6)$$

και οποιαδήποτε συνάρτηση πυρήνα  $K(x, t)$  ισχύει ότι (Hansen, 2010):

$$f_p(x) = \int_0^1 K(x, t) \varphi_p(t) dt \rightarrow 0 \quad (3.7)$$

Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι για  $p \rightarrow \infty$ ,  $f_p(x) \rightarrow 0$ , δηλαδή με την αύξηση της συχνότητας της  $\varphi_p$  το εύρος ταλάντωσης της  $f_p$  ελαττώνεται. Μ' άλλα λόγια, η ολοκλήρωση «ομαλοποιεί» τις υψηλές συχνότητες, καθιστώντας τη συνάρτηση  $f$  «ομαλότερη» σε σχέση με την  $\varphi$  [28, 29, 33].

Βάσει της ανωτέρω ανάλυσης, γίνεται αντιληπτή η σημαντική δυσκολία κατά τη διαδικασία επίλυσης αντίστροφων προβλημάτων Fredholm πρώτου είδους, δεδομένου ότι επιχειρείται μετάβαση από τη γνωστή συνάρτηση  $f$  στην άγνωστη  $\varphi$ . Η παραμικρή διαταραχή  $\delta f_p$  της  $f_p$ , όσο μικρή και αν είναι, προκαλεί πολλαπλάσια μεγαλύτερη διαταραχή στην  $\varphi_p$ . Επιπλέον, με την αύξηση της συχνότητας  $p$ , αυξάνεται και η διαταραχή της  $\varphi$ . Κατά συνέπεια, μικρή μεταβολή των δεδομένων της  $f$  (π.χ. λόγω θορύβου) προκαλεί δυσανάλογα μεγάλη διαταραχή στη λύση  $\varphi$ , καθιστώντας την επίλυση των αντίστροφων προβλημάτων πρόκληση όσον αφορά την ευστάθεια της προκύπτουσας λύσης.

### 3.2. Ανάπτυγμα Ιδιαζουσών Τιμών και Συνθήκη Picard

Για κάθε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση πυρήνα  $K$ , μπορεί να παραχθεί το ανάπτυγμα ιδιαζουσών τιμών (Singular Value Expansion) ως εξής:

$$K(s, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i u_i(s) v_i(t) \quad (3.8)$$

Οι συναρτήσεις  $u_i$  και  $v_i$  είναι γνωστές ως αριστερά και δεξιά ιδιάζουσες συναρτήσεις, ενώ όλες οι  $u_i$ ,  $v_i$  είναι ορθοκανονικές συναρτήσεις ως προς το σύνηθες εσωτερικό γινόμενο, δηλαδή ισχύει ότι [35]:

$$\langle u_i, u_j \rangle = \langle v_i, v_j \rangle = \delta_{i,j} \quad (3.9)$$

Οι ανωτέρω ποσότητες  $\mu_i$  καλούνται ιδιάζουσες τιμές και αποτελούν μία μη αύξουσα ακολουθία, δηλαδή:

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3 \geq \dots \geq \mu_n \geq \dots \geq 0 \quad (3.10)$$

Στην περίπτωση που το πλήθος των μη αρνητικών  $\mu_i$  είναι πεπερασμένο τότε η συνάρτηση πυρήνα  $K$  χαρακτηρίζεται ως «εκφυλισμένη».

Μία από τις βασικές σχέσεις που ισχύουν για το ανάπτυγμα ιδιαζουσών τιμών είναι η ακόλουθη:

$$\int_0^1 K(s, t) v_i(t) dt = \mu_i u_i(s), \quad i = 1, 2, \dots \quad \text{και } s \in [0, 1] \quad (3.11)$$

Για τον προσδιορισμό του αναπτύγματος ιδιαζουσών τιμών, απαιτείται, όπως θα παρουσιαστεί αναλυτικά στο επόμενο Κεφάλαιο, διακριτοποίηση του προβλήματος προκειμένου να είναι εφικτή πρακτικά η λύση του. Αυτό επιτυγχάνεται με τη βοήθεια της διατύπωσης παραγοντοποίησης ιδιαζουσών τιμών (Singular Value Decomposition), η οποία για ένα πίνακα πραγματικών τιμών θα μπορούσε να περιγραφεί ως εξής:

$$A = U \Sigma V^T = \sum_{i=1}^n \sigma_i u_i v_i^T \quad (3.12)$$

όπου:

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_n) \in R^{n \times n} \quad (3.13)$$

$$U = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in R^{n \times n} \quad (3.14)$$

$$V = (v_1, v_2, \dots, v_n) \in R^{n \times n} \quad (3.15)$$

Οι βασικές αντιστοιχίες μεταξύ της παραγοντοποίησης ιδιαιζουσών τιμών (SVD) και του αναπτύγματος ιδιαιζουσών τιμών (SVE) συνοψίζονται στον ακόλουθο Πίνακα 3.1.

	SVE	SVD
1.	Για όλες τις μη μηδενικές ιδιαιζουσες τιμές, ισχύει $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq 0$	$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$
2.	$\ K\ _2^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i^2$	$\ A\ _F^2 = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2$
3.	$\left. \begin{aligned} (u_i, u_j) &= \delta_{ij} \\ (v_i, v_j) &= \delta_{ij} \end{aligned} \right\} i, j = 1, 2, \dots$	$\left. \begin{aligned} u_i^T u_j &= \delta_{ij} \\ (v_i, v_j) &= \delta_{ij} \end{aligned} \right\} i, j = 1, 2, \dots, n$
4.	$\int_{I_x} K(s, x) v_i(x) dx = \mu_i u_i(s)$ $\int_{I_s} K(s, x) u_i(s) ds = \mu_i v_i(x)$	$Av_i = \sigma_i u_i$ $A^T u_i = \sigma_i v_i$

**Πίνακας 3.1: Βασικές Αντιστοιχίες SVE - SVD**

Ο υπολογισμός του αναπτύγματος ιδιαιζουσών τιμών πραγματοποιείται με τη βοήθεια ειδικών αλγορίθμων. Ο ακόλουθος αλγόριθμος (Αλγόριθμος MM-SVD) αποτελεί ένα ενδεικτικό παράδειγμα [20]:

1. Επιλογή μιας ορθοκανονικής βάσης συναρτήσεων  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  και  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$
2. Υπολογισμός πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  με χρήση του εσωτερικού γινομένου. Τα στοιχεία του πίνακα  $A$  είναι τα ακόλουθα:

$$a_{ij} = (\psi_i, K\varphi_j), \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (3.16)$$

3. Υπολογισμός της παραγοντοποίησης ιδιάζουσων τιμών SVD του πίνακα  $A$
4. Προσέγγιση ιδιάζουσων τιμών  $\mu_j$  από τις τιμές  $\sigma_j$  του πίνακα  $A$  και των συναρτήσεων του  $K$ ,  $u_j$ ,  $v_j$ , για όλα τα  $j$ , ως εξής:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_j(s) &= \sum_{i=1}^n u_{i,j} \psi_i(s) \\ \tilde{v}_j(t) &= \sum_{i=1}^n v_{i,j} \varphi_i(t) \end{aligned} \quad (3.17)$$

όπου τα  $u_{i,j}$  και  $v_{i,j}$  είναι τα στοιχεία των πινάκων  $U$ ,  $V$  της SVD.

Ο ρόλος του αναπτύγματος ιδιάζουσών τιμών είναι ιδιαίτερα σημαντικός, διότι οι ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$  φθίνουν προς το μηδέν. Μάλιστα, όσο πιο ομαλή (smooth) είναι η συνάρτηση πυρήνα, τόσο ταχύτερη είναι η σύγκλιση. Αν επιχειρηθεί η συσχέτιση της ύπαρξη λύσης συνάρτησης  $f$ , με την ομαλότητα των ιδιοτιμών  $\mu_i$  πάνω σε δύο ορθοκανονικές βάσεις  $v_i, u_i$  του  $L^2$ , θα πρέπει καταρχάς να εκφραστούν οι  $f, g$  βάσει των  $v_i, u_i$ :

$$\begin{aligned} f(t) &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i, f \rangle v_i(t) \\ g(s) &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i, g \rangle u_i(s) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Αν αντικατασταθούν οι συναρτήσεις  $f$  και  $g$  στην ολοκληρωτική εξίσωση, κάνοντας χρήση της θεμελιώδους σχέσης, τότε λαμβάνεται η ακόλουθη σχέση:

$$g(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i \langle v_i, f \rangle u_i(s) \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i, g \rangle u_i(s) \quad (3.19)$$

Από την ανωτέρω σχέση προκύπτουν οι ακόλουθες δύο συνθήκες:

- Αν υπάρχει  $i$  τέτοιο ώστε  $\mu_i = 0$ , τότε η  $f(t)$  έχει λύση αν και μόνο αν:

$$\langle u_i, g \rangle u_i(s) = 0 \quad (3.20)$$

- Αν για κάθε  $i$   $\mu_i \neq 0$ , τότε η  $f(t)$  περιγράφεται από την ακόλουθη σχέση:

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\langle u_i, g \rangle}{\mu_i} u_i(t) \quad (3.21)$$

Βάσει της ανωτέρω ανάλυσης προκύπτει και η Συνθήκη Picard, σύμφωνα με την οποία προκειμένου η συνάρτηση  $f$  να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση θα πρέπει η δεύτερη νόρμα της  $f$  να είναι φραγμένη. Θα πρέπει δηλαδή το  $\langle u_i, g \rangle$  να συγκλίνει στο μηδέν ταχύτερα απ' ό τι οι ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$ . Η Συνθήκη Picard διατυπώνεται μαθηματικά ως εξής:

$$\|f\|_2^2 = \int_0^1 f^2(t) dt = \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i, f \rangle^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \left( \frac{\langle u_i, g \rangle}{\mu_i} \right)^2 < \infty \quad (3.22)$$

## 4. Διακριτοποίηση Αντίστροφων Γραμμικών Προβλημάτων

### 4.1. Εισαγωγή

Στο Κεφάλαιο αυτό επιχειρείται η παρουσίαση μεθόδων διακριτοποίησης (discretization methods) των αντίστροφων γραμμικών προβλημάτων. Η διακριτοποίηση απαιτείται προκειμένου να καταστεί εφικτή η αριθμητική επίλυση προβλημάτων των οποίων η διατύπωση στηρίζεται στην ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm, δεδομένου ότι η αναλυτική λύση τους δεν είναι εφικτή, ή ακόμη και όταν είναι δεν είναι πρακτικά χρήσιμη. Πρακτικά, η διακριτοποίηση μετατρέπει το συνεχές πρόβλημα σε διακριτό και τη μαθηματική του διατύπωση σε σχέσεις γραμμικής άλγεβρας. Με την εφαρμογή της διακριτοποίησης καθίσταται εφικτή η αλγοριθμική επίλυση των εν λόγω προβλημάτων με χρήση υπολογιστή και η λύση που παράγεται είναι προσεγγιστική.

Αν κάποιος επιχειρούσε να αντιστοιχίσει το συνεχές πρόβλημα:

$$g(s) = \int K(s,t) f(t) dt \quad (4.1)$$

με το διακριτό πρόβλημα:

$$Ax = b \quad (4.2)$$

θα μπορούσε να ισχυριστεί ότι ο πίνακας  $A$  αντιστοιχεί στο ολοκλήρωμα της συνάρτησης πυρήνα  $\int K$ , το δεξί μέλος  $b$  αντιστοιχεί στη συνάρτηση  $g$  και η λύση του διακριτού προβλήματος  $x$  αντιστοιχεί στην προσέγγιση της άγνωστης, προς προσδιορισμό, συνάρτησης  $f$ .

Στη συνέχεια του Κεφαλαίου παρουσιάζονται αναλυτικά δύο από τις σημαντικότερες μεθόδους διακριτοποίησης που χρησιμοποιούνται συχνά σε προβλήματα που διατυπώνονται με τη βοήθεια της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm, συγκεκριμένα τις μεθόδους Προσεγγιστικής Ολοκλήρωσης (Τετραγωνισμού) (Quadrature Method) και Αναπτύγματος (Expansion Method). Εκτός των προαναφερθεισών, στη βιβλιογραφία συναντώνται και άλλες μέθοδοι διακριτοποίησης, ή διάφορες παραλλαγές των ανωτέρω

μεθόδων. Πέραν των δύο βασικών μεθόδων διακριτοποίησης, στο παρόν Κεφάλαιο εξετάζεται η Παραγοντοποίηση Ιδιάζουσων Τιμών (Singular Value Decomposition) ως εργαλείο ανάλυσης των αντίστροφων διακριτών προβλημάτων που προκύπτουν από τη διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους.

## 4.2. Κύριες Μέθοδοι Διακριτοποίησης

### 4.2.1. Μέθοδος Προσεγγιστικής Ολοκλήρωσης (Τετραγωνισμού)

Η μέθοδος προσεγγιστικής ολοκλήρωσης (Quadrature Method) υπολογίζει καταρχάς την προσέγγιση του ολοκληρώματος σε συγκεκριμένα σημεία  $t_1, t_2, \dots, t_n$  και στη συνέχεια εφαρμόζει ένα κανόνα «τετραγωνισμού» για να υπολογίσει τον Πίνακα  $A$  και το διάνυσμα  $b$ . Ο γενικός κανόνας τετραγωνισμού που χρησιμοποιείται στην εν λόγω μέθοδο (general quadrature rule) είναι ο ακόλουθος:

$$\int_0^1 \phi(t) dt = \sum_{j=1}^n \omega_j \phi(t_j) + E_n \quad (4.3)$$

όπου  $E_n$  είναι το σφάλμα της προσέγγισης,  $t_1, t_2, \dots, t_n$  τα σημεία υπολογισμού και  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$  τα βάρη ολοκλήρωσης κάθε σημείου στην προσέγγιση. Μία δημοφιλής εξειδίκευση του παραπάνω κανόνα γνωστή και ως «κανόνας του μέσου» (midpoint rule):

$$t_j = \frac{j - \frac{1}{2}}{n}, \quad \omega_j = \frac{1}{n}, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (4.4)$$

Θέτοντας:

$$\phi(t) = K(s, t) f(t) \quad (4.5)$$

λαμβάνεται η ακόλουθη σχέση:

$$\int_0^1 K(s, t) f(t) dt = \sum_{j=1}^n \omega_j K(s, t_j) f(t_j) + E_n(s) \quad (4.6)$$

όπου  $E_n(s)$  είναι συνάρτηση σφάλματος του  $s$ .

Θέτοντας:



$$g(s) - E_n(s) = \sum_{j=1}^n \omega_j K(s, t_j) f(t_j) \quad (4.7)$$

λαμβάνεται μία γραμμική εξίσωση ως προς  $f(t_j)$ . Δεδομένου ότι η παραπάνω εξίσωση είναι συνάρτηση του  $s$ , απαιτείται περαιτέρω διακριτοποίηση ως προς  $s$ . Αυτό μετασχηματίζει την ανωτέρω σχέση στην ακόλουθη:

$$g(s_i) - E_n(s_i) = \sum_{j=1}^n \omega_j K(s_i, t_j) f(t_j), \quad i = 1, \dots, n \quad (4.8)$$

Αγνοώντας το σφάλμα  $E_n(s_i)$  που εισάγει η προσέγγιση, αυτό που τελικά υπολογίζεται ως λύση δεν είναι η ακριβής συνάρτηση  $f(t_j)$  αλλά μία προσέγγισή της, η οποία συμβολίζεται με  $\tilde{f}_j(t)$ . Μπορεί επομένως η ανωτέρω σχέση να διατυπωθεί ως εξής:

$$g(s_i) = \sum_{j=1}^n \omega_j K(s_i, t_j) \tilde{f}(t_j), \quad i = 1, \dots, n \quad (4.9)$$

Αναλυτικά σε μορφή πινάκων, η σχέση μπορεί γραφεί ως εξής:

$$G = K\tilde{F} \quad (4.10)$$

ή

$$\begin{pmatrix} \omega_1 \cdot K(s_1, t_1) & \cdots & \omega_n \cdot K(s_1, t_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_1 \cdot K(s_n, t_1) & \cdots & \omega_n \cdot K(s_n, t_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{f}_1 \\ \vdots \\ \tilde{f}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(s_1) \\ \vdots \\ g(s_n) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Το ανωτέρω σύστημα γραμμικών εξισώσεων μπορεί να επιλυθεί με πληθώρα διαθέσιμων μεθόδων επίλυσης γραμμικών συστημάτων.

#### 4.2.2. Μέθοδος Αναπτύγματος Galerkin (Expansion Method)

Για τη μέθοδο αυτή η διακριτοποίηση στηρίζεται στη χρήση προεπιλεγμένης βάσης συναρτήσεων και την αξιοποίηση της ιδιότητας της ορθογωνιότητας για την επίλυση των διπλών ολοκληρωμάτων που προκύπτουν. Ειδικότερα, η εν λόγω μέθοδος δομείται ως εξής:

Αρχικά γίνεται επιλογή δύο βάσεων συναρτήσεων με τη βοήθεια των οποίων θα επιχειρηθεί η προσέγγιση των  $f$  και  $g$  :

$$\begin{aligned}\Phi_n &= \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\} \\ \Psi_n &= \{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}\end{aligned}\quad (4.12)$$

Στη συνέχεια γίνεται προσέγγιση των  $f$ ,  $g$  καθώς και του ολοκληρώματος που προκύπτει με τη βοήθεια των ανωτέρω συναρτησιακών βάσεων, δηλαδή:

$$\begin{aligned}f^{(n)}(t) &= \sum_{j=1}^n \zeta_j \varphi_j(t) \\ g^{(n)}(s) &= \sum_{j=1}^n \xi_j \psi_j(s)\end{aligned}\quad (4.13)$$

Τέλος γίνεται χρήση της ιδιότητας της ορθογωνιότητας για το μετασχηματισμό του προβλήματος σε σύστημα εξισώσεων:

$$\langle \psi_i, g \rangle = \left\langle \psi_i, \int_0^1 K(s, t) f^{(n)}(t) dt \right\rangle \quad (4.14)$$

Αναλυτικότερα, οι συναρτήσεις  $f$  και  $g$  της εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους μπορούν να αναπτυχθούν σε αθροίσματα των συναρτήσεων  $\varphi_j(t)$  και  $\psi_j(t)$  ως εξής:

$$\begin{aligned}f(t) &= \sum_{j=1}^{\infty} \zeta_j \phi_j(t), \quad f \in \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_n\} \\ g(s) &= \sum_{j=1}^{\infty} \xi_j \psi_j(s), \quad g \in \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}\end{aligned}\quad (4.15)$$

Στη γενική περίπτωση, οι  $f$  και  $g$  διατυπώνονται με τις ακόλουθες μαθηματικές σχέσεις:

$$\begin{aligned}f(t) &= \sum_{j=1}^n \zeta_j \phi_j(t) + \sum_{j=n+1}^{\infty} \zeta_j \phi_j(t) \\ g(s) &= \sum_{j=1}^n \xi_j \psi_j(s) + \sum_{j=n+1}^{\infty} \xi_j \psi_j(s)\end{aligned}\quad (4.16)$$

ή

$$\begin{aligned} f(t) &= f^{(n)}(t) + E_f(t), & f^{(n)}(t) &\in \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_n\} \\ g(s) &= g^{(n)}(s) + E_g(s), & g^{(n)}(s) &\in \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\} \end{aligned} \quad (4.17)$$

όπου

$$\begin{aligned} E_f(t) &= \sum_{j=n+1}^{\infty} \zeta_j \phi_j(t) \\ E_g(s) &= \sum_{j=n+1}^{\infty} \xi_j \psi_j(s) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Δηλαδή, οι  $f^{(n)}(t)$  και  $g^{(n)}(s)$  μπορούν να θεωρηθούν προσεγγίσεις των  $f$  και  $g$  αντίστοιχα, ενώ τα  $E_f(t)$  και  $E_g(s)$  τα σχετικά σφάλματα τους.

Αν τώρα οριστεί ως  $\theta(s)$  η ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους, τότε:

$$\theta(s) = \int_0^1 K(s,t) f^{(n)}(t) dt = \sum_{j=1}^n \zeta_j \int_0^1 K(s,t) \phi_j(t) dt \quad (4.19)$$

Δεδομένου ότι η συνάρτηση  $\theta$  στη γενική περίπτωση δεν ανήκει στο  $\text{span}(\Psi)$ , μπορεί να περιγραφεί μαθηματικά ως εξής:

$$\theta(s) = \theta^{(n)}(s) + E_\theta(s), \quad \theta^{(n)}(s) \in \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\} \quad (4.20)$$

δηλαδή συναρτήσει της  $\theta^{(n)}(t)$  η οποία είναι η ορθοκανονική προβολή της  $\theta$  στη συναρτησιακή βάση  $\Psi$ . Για τον υπολογισμό των τιμών  $f^{(n)}(t)$ , τίθεται:

$$\begin{aligned} \theta^{(n)}(s) = g^{(n)}(s) &\Rightarrow \theta(s) - E_\theta(s) = g(s) - E_g(s) \\ &\Rightarrow \theta(s) - g(s) = E_\theta(s) - E_g(s) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Η ποσότητα  $\theta(s) - g(s)$  είναι το υπόλοιπο σφάλματος (residual) και είναι ορθοκανονική ως προς κάθε  $\psi_i$ . Λόγω της ορθοκανονικότητας ισχύει ότι, για  $i = 1, 2, \dots, n$ :

$$\langle \psi_i, \theta(s) - g(s) \rangle = \langle \psi_i, E_\theta(s) - E_g(s) \rangle = 0 \quad (4.22)$$

Αυτό είναι ισοδύναμο με τη σχέση:

$$\langle \psi_i, g(s) \rangle = \sum_{j=1}^n \zeta_j \int_0^1 \int_0^1 \psi_i(s) K(s,t) \phi_j(t) ds dt, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.23)$$

Η τελευταία σχέση ουσιαστικά αναπαριστά ένα σύστημα της μορφής  $Ax = b$  όπου:

$$\begin{cases} a_{i,j} = \int_0^1 \int_0^1 \psi_i(s) K(s,t) \phi_j(t) ds dt \\ x_j = \zeta_j \\ b_i = \langle \psi_i, g(s) \rangle = \int_0^1 \psi_i(s) g(s) ds \end{cases}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.24)$$

Ιδιαίτερα σημαντικός είναι ο τρόπος με τον οποίο επιλέγονται οι βάσεις συναρτήσεων που χρησιμοποιούνται στην εν λόγω μέθοδο διακριτοποίησης. Για παράδειγμα, οι συναρτήσεις  $\psi_j$  είναι σημαντικό να επιλέγονται έτσι ώστε να συλλέγονται οι πιο σημαντικές πληροφορίες από τα μετρήσιμα δεδομένα  $g(s)$  [48]. Επίσης, η χρήση συναρτήσεων με επιθυμητές ιδιότητες, όπως για παράδειγμα ορθοκανονικών συναρτήσεων, απλοποιεί τους αριθμητικούς υπολογισμούς που απαιτούνται. Τέλος, αν η συνάρτηση πυρήνα είναι συμμετρική (Πρόβλημα Rayleigh-Ritz), αυτό αντανακλάται και στη διακριτή διατύπωση του προβλήματος, δηλαδή στην περίπτωση αυτή και ο πίνακας του προκύπτοντος γραμμικού συστήματος είναι συμμετρικός [58].

#### 4.2.3. Σύγκριση Μεθόδων και Κριτήρια Επιλογής

Οι μέθοδοι διακριτοποίησης που παρουσιάστηκαν στις προηγούμενες ενότητες, έχουν πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα. Είναι λογικό λοιπόν να τίθεται το ερώτημα ποια είναι η πλέον ενδεδειγμένη προς χρήση και σε ποιες περιπτώσεις. Η απάντηση στο ερώτημα αυτό δεν είναι μονοσήμαντη. Για να αποφασιστεί ποια είναι η καλύτερη κάθε φορά μέθοδος πρέπει πρώτα να απαντηθούν τα ακόλουθα ερωτήματα:

- Ποιο είναι το πρόβλημα στο οποίο ζητείται απάντηση και τι ακριβώς ζητείται;
- Ποια είναι τα δεδομένα που δίνονται για το πρόβλημα αυτό;
- Τι μπορεί να υπολογιστεί;

Σε κάθε περίπτωση, αν επιχειρηθεί σύγκριση των δύο μεθόδων θα πρέπει να καταγραφούν τα θετικά και αρνητικά τους. Αυτό ακριβώς έχει επιχειρηθεί και στην παρούσα ενότητα και το αποτέλεσμα της σύγκρισης καταγράφεται στον Πίνακα 4.1 που ακολουθεί.

	Μέθοδος Τετραγωνισμού	Μέθοδος Αναπτύγματος
1.	Απλή υπολογιστικά (+)	Εμπεριέχει υπολογισμό διπλού ολοκληρώματος, ο οποίος εν γένει είναι δύσκολος υπολογιστικά (-)
2.	Προσέγγιση μόνο πάνω σε συγκεκριμένα σημεία του πλέγματος (-)	Προσέγγιση με τη βοήθεια συναρτήσεων (+)
3.	Δυνατότητα εξειδίκευσης της μεθόδου, ώστε να αντανακλά τις ιδιότητες των συναρτήσεων $K$ και $f$ (+)	- Δυνατότητα επιλογής κατάλληλων συναρτήσεων $\varphi_j$ (+) - Αν οι συναρτήσεις $\varphi_j$ είναι ορθοκανονικές τότε υφίσταται σχέση μεταξύ των διατυπώσεων αναπτύγματος ιδιαζουσών τιμών και παραγοντοποίησης ιδιαζουσών τιμών (+)
4.	Οι τιμές δειγμάτων που χρησιμοποιούνται για το δεξί μέλος του γραμμικού συστήματος είναι διακριτές (+)	Δύο εναλλακτικές για την επιλογή δειγμάτων: (1) $\psi_i(s) = \delta(s - s_i)$ και (2) $\psi_i(s) = x_i(s)$ (+)

**Πίνακας 4.1: Σύγκριση Μεθόδων Τετραγωνισμού και Αναπτύγματος**

### 4.3. Παραγοντοποίηση Ιδιάζουσων Τιμών

Στο προηγούμενο κεφάλαιο εισήχθη η αντιστοιχία μεταξύ του Αναπτύγματος Ιδιάζουσων Τιμών (Singular Value Expansion – SVE) και του προβλήματος Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών (Singular Value Decomposition – SVD). Στην παρούσα ενότητα χρησιμοποιείται η διατύπωση του SVD ως εργαλείο ανάλυσης των διακριτών αντίστροφων προβλημάτων. Δεδομένου ενός πίνακα  $A \in R_{n \times m}$ ,  $m \geq n$  το πρόβλημα Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών ορίζεται ως εξής:

$$A = U \Sigma V^T = \sum_{i=1}^n u_i \sigma_i v_i^T \quad (4.25)$$

Ο πίνακας  $\Sigma$  είναι ένας διαγώνιος πίνακας που περιέχει τις ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ :

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_i, \dots, \sigma_n), \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0 \quad (4.26)$$

Επίσης  $U \in R^{m \times m}$  και  $V \in R^{n \times n}$  με:

$$U = \{u_1, u_2, \dots, u_m\}, \quad V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\} \quad (4.27)$$

Τα  $u_i, v_i$  καλούνται ιδιάζοντα διανύσματα και ισχύει:

$$u_i^T u_j = v_i^T v_j = \delta_{ij}, \quad \forall i, j \quad (4.28)$$

και

$$U^T U = V^T V = I \quad (4.29)$$

Δύο πολύ σημαντικές νόρμες πινάκων μπορούν να εκφραστούν εύκολα συναρτήσει των ιδιάζουσών τιμών:

$$\begin{aligned} \|A\|_F &= \left( \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2} = \left( \text{trace}(A^T A) \right)^{1/2} = \left( \text{trace}(V \Sigma V^T) \right)^{1/2} \\ &= \left( \text{trace}(\Sigma^2) \right)^{1/2} = \left( \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_n^2 \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (4.30)$$

και

$$\|A\|_2 = \max \|Ax\|_2 = \sigma_1, \quad \|x\|_2 = 1 \quad (4.31)$$

Ο αντίστροφος του πίνακα  $A$  δίνεται από τη σχέση:

$$A^{-1} = V\Sigma^{-1}U^T \quad (4.32)$$

Συνεπώς:

$$\|A^{-1}\|_2 = \sigma_n^{-1} \quad (4.33)$$

Τέλος, ο δείκτης κατάστασης (condition index) του πίνακα  $A$  διατυπώνεται ως εξής:

$$\text{cond}(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} \quad (4.34)$$

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, για τις ιδιάζουσες τιμές και συναρτήσεις του προβλήματος SVD ισχύουν μια σειρά σχέσεων που είναι αντίστοιχες των σχέσεων για το SVE [52]. Οι σημαντικότερες εξ αυτών είναι:

$$Av_i = \sigma_i u_i, \quad \|Av_i\|_2 = \sigma_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.35)$$

Στην περίπτωση που ο πίνακας  $A$  είναι τετραγωνικός και αντιστρέψιμος ισχύει επίσης:

$$A^{-1}u_i = \sigma_i^{-1}v_i, \quad \|A^{-1}u_i\|_2 = \sigma_i^{-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.36)$$

Με τη βοήθεια των ανωτέρω σχέσεων εξάγεται μία μαθηματική διατύπωση για τη λύση  $x = A^{-1}b$ . Λαμβάνοντας υπόψη ότι ο πίνακας  $V$  είναι ορθογώνιος, για τα διανύσματα  $x$  και  $b$  ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις:

$$\begin{aligned} x &= VV^T x = V \begin{pmatrix} V_1^T x \\ \vdots \\ V_n^T x \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n (V_i^T x) V_i \\ b &= UU^T b = U \begin{pmatrix} U_1^T b \\ \vdots \\ U_n^T b \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n (U_i^T b) U_i \end{aligned} \quad (4.37)$$

Από τις ανωτέρω σχέσεις, σε συνδυασμό με τη διατύπωση SVD, προκύπτει ότι:

$$x = A^{-1}b = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (4.38)$$

Η στενή συσχέτιση μεταξύ των διατυπώσεων SVE και SVD καθιστά εφικτή τη χρήση του SVD σε συνδυασμό με τη μέθοδο διακριτοποίησης αναπτύγματος Galerkin προκειμένου να υπολογιστεί προσεγγιστικά το SVE [53]. Ειδικότερα, εάν:

$$a_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \psi_i(s) K(s,t) \phi_j(t) ds dt \quad (4.39)$$

τότε οι ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A(\sigma_i)$  είναι προσεγγίσεις των ιδιάζουσών τιμών  $\mu_i$  του  $K$ . Ακριβέστερα, αν οι συναρτήσεις βάσης της μεθόδου αναπτύγματος Galerkin είναι ορθοκανονικές, τότε ορίζοντας μία θετική ποσότητα  $\Delta_n$  ως:

$$\Delta_n^2 = \|K\|_2^2 - \|A\|_F^2 = \int_0^1 \int_0^1 |K(s,t)|^2 ds dt \quad (4.40)$$

και αν  $\sigma_i^{(n)}$  οι ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$  διάστασης  $n \times n$ , τότε μπορεί να δειχθεί ότι [33]:

$$\begin{aligned} 0 \leq \mu_i - \sigma_i^{(n)} &\leq \Delta_n, \quad i = 1, 2, \dots, n \\ \sigma_i^{(n)} \leq \sigma_i^{(n+1)} &\leq \mu_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (4.41)$$

Δύναται επιπρόσθετα να υπολογιστούν προσεγγίσεις και για τις αριστερές και δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις μέσω του SVD. Αν θεωρήσουμε τις συναρτήσεις:

$$u_j^{(n)}(s) = \sum_{i=1}^n u_{ij} \psi(s), \quad v_j^{(n)}(s) = \sum_{i=1}^n v_{ij} \phi(t), \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (4.42)$$

τότε αποδεικνύεται ότι καθώς το  $n$  μεγαλώνει οι συναρτήσεις αυτές συγκλίνουν στις ιδιάζουσες συναρτήσεις (Hansen, 2010), δηλαδή:

$$u_j^{(n)}(s) \rightarrow u_j(s), \quad v_j^{(n)}(s) \rightarrow v_j(t), \quad n \rightarrow \infty \quad (4.43)$$

Μία ιδιαίτερα σημαντική συνέπεια που προκύπτει από την ανωτέρω ιδιότητα των ιδιάζουσών συναρτήσεων είναι ότι οι συντελεστές  $u_j^T b$  της SVD είναι προσεγγίσεις των αντίστοιχων εσωτερικών γινομένων  $\langle u_j, g \rangle$  της SVE [53]. Τα εσωτερικά γινόμενα



$\langle u_j^{(n)}, g^{(n)} \rangle$  γίνονται, όσο μεγαλώνει το  $n$ , όλο και καλύτερες προσεγγίσεις του  $\langle u_j, g \rangle$ .

Εισάγοντας τις εκφράσεις για τα  $u_j^{(n)}$  και  $g^{(n)}$  στον ορισμό του εσωτερικού τους γινομένου λαμβάνεται:

$$\langle u_j^{(n)}, g^{(n)} \rangle = \int_0^1 \sum_{i=1}^n u_{ij} \psi_i(s) \sum_{k=1}^n b_k \psi_k(s) ds = \sum_{i=1}^n u_{ij} \sum_{k=1}^n b_k \langle \psi_i, \psi_k \rangle = \sum_{i=1}^n u_{ij} b_i = u_j^T b \quad (4.44)$$

Προκύπτει συνεπώς το συμπέρασμα ότι μπορούν να μελετηθούν όλες οι σημαντικές σχέσεις της SVE, περιλαμβανομένης και της Συνθήκης Picard στο διακριτό πρόβλημα, υπολογίζοντας την SVD του πίνακα  $A$ . Μάλιστα, η συνθήκη Picard όπως και στην περίπτωση των συνεχών προβλημάτων αποτελεί βασικό εργαλείο για την διερεύνηση της πιθανότητας εύρεσης λύσης σε αντίστροφα προβλήματα [28].

Έστω ότι σε ένα αντίστροφο διακριτό πρόβλημα η τιμή  $\tau$  υποδηλώνει το επίπεδο στο οποίο οι υπολογιζόμενες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  σταθεροποιούνται λόγω κάποιων σφαλμάτων στρογγυλοποίησης. Η συνθήκη Picard ικανοποιείται εάν για όλες τις ιδιάζουσες τιμές που είναι μεγαλύτερες του  $\tau$  οι αντίστοιχοι συντελεστές  $|u_i^T b|$  κατά μέσο όρο φθίνουν γρηγορότερα απ' ότι οι  $\sigma_i$ . Υπάρχει μία τιμή  $\tau$  για την οποία όλες οι ιδιάζουσες τιμές που είναι μεγαλύτερες από αυτή σταθεροποιούνται στο επίπεδο του «θορύβου» των δεδομένων του διανύσματος  $b$ , ή σε περίπτωση που δεν υπάρχει θόρυβος στο επίπεδο αριθμητικής ακρίβειας των διεξαχθέντων υπολογισμών [28].

Για να γίνει αντιληπτός ο λόγος για τον οποίο η συνθήκη Picard δε λαμβάνει υπόψη τις τιμές  $|u_i^T b|$  που αντιστοιχούν σε ιδιάζουσες τιμές που βρίσκονται κοντά στο  $\tau$  ( $\sigma_i \approx \tau$ ) μελετάται το προς επίλυση γραμμικό σύστημα υπό την επήρεια λευκού θορύβου  $e$ :

$$Ax = b, \quad b = b^{exact} + e, \quad b^{exact} = Ax^{exact} \quad (4.45)$$

Σύμφωνα με τη συνθήκη Picard για διακριτά προβλήματα, για τις τιμές  $u_i^T b$  ισχύει [28]:

$$u_i^T b = u_i^T b^{exact} + u_i^T e = \begin{cases} u_i^T b^{exact}, & \alpha \nu \quad |u_i^T b^{exact}| > |u_i^T e| \\ u_i^T e, & \alpha \nu \quad |u_i^T b^{exact}| < |u_i^T e| \end{cases} \quad (4.46)$$

Οι τιμές  $|u_i^T \cdot e|$  αντιστοιχούν σε πολύ μικρές ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i \approx \tau$ . Για αυτές τις πολύ μικρές τιμές  $u_i^T b$  η πραγματική πληροφορία  $u_i^T \cdot b^{exact}$  «χάνεται» μέσα στο θόρυβο  $|u_i^T \cdot e|$ . Αυτός καθιστά δυνατό το να αγνοούνται χωρίς αντίκτυπο στην όποια ανάλυση πραγματοποιείται βάσει της διακριτής συνθήκης Picard [28].

Πέραν των προαναφερθέντων, η διατύπωση SVD χρησιμοποιείται και για την εξέταση σύγκλισης ή μη σύγκλισης της SVE [21], όπως θα δειχθεί και παρακάτω με τη βοήθεια ενός αριθμητικού παραδείγματος. Όπως έχει προαναφερθεί, προκειμένου να υπάρχει η SVE θα πρέπει η συνάρτηση πυρήνα  $K$  της ολοκληρωτικής εξίσωσης να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, δηλαδή:

$$\int_0^1 \int_0^1 K(s, t)^2 ds dt < \infty \quad (4.47)$$

Έστω αρχικά ο μετασχηματισμός Laplace μίας συνάρτησης  $f$ , ο οποίος ορίζεται ως εξής:

$$g(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (4.48)$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace συνίσταται στον υπολογισμό της συνάρτησης  $f$  για δεδομένη συνάρτηση  $g$ . Πρακτικά ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace υπολογίζει την πρώτη τάξης ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm:

$$\int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt = g(s), \quad 0 \leq s < \infty \quad (4.49)$$

Η συνάρτηση πυρήνα  $K(s, t)$  είναι ο όρος  $e^{-st}$  ο οποίος δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμος και ως εκ τούτου δεν επιδέχεται διατύπωση SVE. Εφαρμόζοντας τη διπλή ολοκλήρωση της SVE, προκύπτει ότι:

$$\int_0^a e^{-2st} ds = \frac{1 - e^{-2ta}}{2t} \rightarrow \frac{1}{2t} \text{ για } a \rightarrow \infty \quad (4.50)$$

Γνωρίζοντας ότι το ολοκλήρωμα  $\int_0^{\infty} t^{-1} dt$  απειρίζεται, και το ολοκλήρωμα  $\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-2st} ds dt$

επίσης απειρίζεται, στην περίπτωση που η  $f(t)$  παραμένει φραγμένη (για  $t \rightarrow \infty$ ), τότε η ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους υπάρχει για όλα τα  $s \geq 0$  και εισάγεται μόνο ένα μικρό σφάλμα λόγω του περιορισμού του διαστήματος ολοκλήρωσης σε  $[0, a]$ , όπου  $a$  επαρκώς μεγάλο. Επιπλέον, η συνάρτηση  $g(s)$  φθίνει με την αύξηση του  $s$ , οπότε επίσης εισάγεται ένα μικρό σφάλμα λόγω του περιορισμού του  $s$  στο διάστημα  $[0, a]$ . Με τον τρόπο αυτό η ολοκληρωτική εξίσωση γίνεται:

$$\int_0^a e^{-st} f(t) dt = g(s), \quad 0 \leq s \leq a \quad (4.51)$$

και εμπεριέχει πλέον τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση πυρήνα  $K(s, t)$ .

## 5. Υπολογιστικές Μέθοδοι Ομαλοποίησης

### 5.1. Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάζονται οι υπολογιστικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την επίλυση των αντίστροφων διακριτών προβλημάτων βάσει της κατηγοριοποίησής τους σε επαναληπτικές και μη επαναληπτικές (άμεσες). Έμφαση δίνεται στις επαναληπτικές μεθόδους ομαλοποίησης, κάποιες από τις οποίες θα χρησιμοποιηθούν σε παραδείγματα αντίστροφων προβλημάτων, όπως θα αναλυθεί στο επόμενο κεφάλαιο.

Ο στόχος των μεθόδων ομαλοποίησης είναι η «ομαλοποίηση» της λύσης, η οποία επιτυγχάνεται μέσω της εξάλειψης του θορύβου που υπεισέρχεται κατά την προσεγγιστική επίλυση ενός προβλήματος. Κατά κανόνα, οι μέθοδοι ομαλοποίησης παράγουν προσεγγιστικές λύσεις, οι οποίες μπορούν να εκφραστούν βάσει ενός φιλτραρισμένου αναπτύγματος παραγοντοποίησης ιδιάζουσων τιμών (Singular Value Decomposition - SVD) της μορφής:

$$x_{reg} = \sum_{i=1}^n \phi_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (5.1)$$

όπου  $\phi_i$  οι παράγοντες φίλτρου (φιλτραρίσματος) που σχετίζονται με την επιλεγμένη μέθοδο. Για το λόγο αυτό οι μέθοδοι αυτές καλούνται και μέθοδοι φιλτραρίσματος.

Όπως αποτυπώθηκε στην ανάλυση του προηγούμενου κεφαλαίου, όλα τα προβλήματα που αντιμετωπίζονται περιλαμβάνουν έναν πίνακα συντελεστών  $A$  διαστάσεων  $m \times n$ , τα δεδομένα του προβλήματος  $b$  με  $m$  στοιχεία καθώς επίσης και το διάνυσμα της λύσης  $x$  μήκους  $n$ . Όταν οι γραμμές  $m$  του πίνακα  $A$  είναι ίσες με τις στήλες  $n$  ( $m=n$ ), τότε ο πίνακας είναι τετραγωνικός και το υπό εξέταση πρόβλημα λαμβάνει τη μορφή συστήματος γραμμικών εξισώσεων:

$$Ax = b \text{ με } A \in R^{m \times n} \text{ και } x, b \in R^n \quad (5.2)$$

Αντίθετα, όταν οι γραμμές του πίνακα  $A$  είναι περισσότερες από τις στήλες ( $m > n$ ), τότε το υπό εξέταση πρόβλημα είναι υπερορισμένο και λαμβάνει τη μορφή ενός γραμμικού προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων:

$$\min_x \|Ax - b\|_2, \quad A \in R^{m \times n}, \quad x \in R^n, \quad b \in R^m \quad (5.3)$$

Έτσι, όταν χρησιμοποιείται η φράση «απλή λύση» (naive solution), τότε θα υπονοείται είτε η λύση  $A^{-1}b$  (για  $m = n$ , υπό την προϋπόθεση ότι υπάρχει ο αντίστροφος του πίνακα  $A$ ), είτε το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων (για  $m > n$ ). Ένα πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό της λύσης (naive solution) που αξίζει να σημειωθεί εδώ είναι ότι και για τις δύο προαναφερθείσες περιπτώσεις η λύση αυτή έχει ακριβώς το ίδιο ανάπτυγμα SVD, ενώ ο δείκτης κατάστασης,  $\text{cond}(A) = \sigma_1 / \sigma_n$ , του πίνακα  $A$  είναι ο ίδιος.

Τα διακριτά μη καλά τοποθετημένα προβλήματα χαρακτηρίζονται από πίνακες συντελεστών, οι οποίοι έχουν πολύ μεγάλο δείκτη κατάστασης. Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι η ευστάθεια της λύσης επηρεάζεται σημαντικά ακόμη και από μικρά σφάλματα στα δεδομένα  $b$ . Ειδικότερα, έστω η ακριβής λύση  $x^{exact}$  και η προσεγγιστική λύση  $x$  ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$Ax^{exact} = b^{exact}, \quad Ax = b = b^{exact} + e \quad (5.4)$$

όπου το  $e$  δηλώνει το σφάλμα. Από τη θεωρία σφαλμάτων είναι γνωστό ότι το σχετικό σφάλμα ικανοποιεί την εκτίμηση [28]:

$$\frac{\|x^{exact} - x\|_2}{\|x^{exact}\|_2} \leq \text{cond}(A) \frac{\|e\|_2}{\|b^{exact}\|_2} \quad (5.5)$$

Όσο μεγαλύτερος είναι ο δείκτης κατάστασης τόσο μεγαλύτερο αναμένεται να είναι και το σφάλμα, δηλαδή τόσο περισσότερο απέχει η προσεγγιστική λύση από την ακριβή λύση. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο εισάγονται οι μέθοδοι ομαλοποίησης, οι οποίες παρουσιάζουν μεγαλύτερη ανοχή στα σφάλματα που υπεισέρχονται στα δεδομένα  $b$ . Λόγω της ασθενούς κατάστασης του πίνακα  $A$ , η λύση  $x = A^{-1}b$  αναμένεται να βρίσκεται αρκετά μακριά από την ακριβή λύση  $x^{exact}$  ακόμη και εάν η διαταραχή είναι μικρή, δηλαδή όταν  $\|e\|_2 \ll \|b^{exact}\|_2$ .

## 5.2. Άμεσες Μέθοδοι Ομαλοποίησης

Στη σχετική βιβλιογραφία συναντώνται πολλές μέθοδοι ομαλοποίησης. Μερικά παραδείγματα αποτελούν, η μέθοδος Tikhonov [56], η προσέγγιση «Εξάπλωσης – Συρρίκνωσης» [34, 59], η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων (Least Squares) [37, 43], η μέθοδος Επιλεκτικής Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών (Selective Singular Value Decomposition-SSVD) [50] και η μέθοδος Αποκομμένης Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών (Truncated Singular Value Decomposition-TSVD), γνωστή επίσης και ως μέθοδος Κύριων Συνιστωσών (Principal Components) [9, 15, 22, 33, 42, 51].

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζονται τρεις από τις σημαντικότερες μεθόδους ομαλοποίησης, η Truncated SVD (TSVD), η Selective SVD (SSVD) και η μέθοδος Tikhonov. Πριν όμως αναλυθούν οι εν λόγω μέθοδοι, παρουσιάζονται κάποια σημαντικά σημεία ορολογίας και ορισμών που απαιτούνται για τη μαθηματική διατύπωση και περιγραφή των μεθόδων [28].

### 5.2.1. Μέθοδος Αποκομμένης Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών

Η μέθοδος Αποκομμένης Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών (Truncated Singular Value Decomposition - TSVD) αξιοποιεί το γεγονός ότι τα μεγάλα σφάλματα στην αντίστροφη λύση οφείλονται σε εκείνες τις συνιστώσες της λύσης που συνδέονται με τις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές. Ειδικότερα, σύμφωνα με τους Zha και Hansen (1990), ισχύει:

$$u_i^T b = u_i^T b^{exact} + u_i^T e \approx \begin{cases} u_i^T b^{exact}, & \alpha\nu \quad |u_i^T b^{exact}| > |u_i^T e| \\ u_i^T e, & \alpha\nu \quad |u_i^T b^{exact}| < |u_i^T e| \end{cases} \quad (5.6)$$

το οποίο δείχνει ότι η απλοϊκή (naive) λύση κυριαρχείται από συντελεστές που αντιστοιχούν σε μικρότερες ιδιάζουσες τιμές της μορφής:

$$\frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T e}{\sigma_i} \quad (5.7)$$

όπου  $e$  το σφάλμα των δεδομένων  $b$ . Όμως, σύμφωνα με την ίδια ανάλυση ισχύει επίσης ότι οι συντελεστές που αντιστοιχούν σε μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές, δηλαδή οι συντελεστές της μορφής:

$$\frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} = \frac{u_i^T Ax^{exact}}{\sigma_i} \quad (5.8)$$

είναι περισσότερο αξιόπιστοι. Ακόμη, είναι φυσικό να υποθέσει κανείς ότι τα ακριβή δεδομένα ικανοποιούν τη διακριτή συνθήκη Picard. Κατά συνέπεια, οι μεγαλύτεροι συντελεστές της ακριβούς λύσης είναι εκείνοι που προσεγγίζονται καλύτερα, δεδομένου ότι για μικρούς δείκτες  $i$  ισχύει:

$$\frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} = v_i^T x^{exact} \quad (5.9)$$

Αποκόπτοντας τις συνιστώσες οι οποίες εμπεριέχουν υψηλό θόρυβο, προκύπτει η μέθοδος TSVD, σύμφωνα με την οποία η λύση  $x_k$  λαμβάνεται κρατώντας μόνο τις  $k$  πρώτες συνιστώσες της απλοϊκής (naive) λύσης [60]:

$$x_k \equiv \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (5.10)$$

Η παράμετρος  $k$  είναι γνωστή ως παράμετρος «αποκοπής» και ο ενδεδειγμένος τρόπος επιλογής της είναι κρίσιμος για την αποτελεσματικότητα της εν λόγω μεθόδου. Πρακτικά, μία κατάλληλη τιμή του  $k$  μπορεί να προκύψει ύστερα από εποπτικό έλεγχο του διαγράμματος Picard.

Η μέθοδος TSVD μπορεί να διατυπωθεί μαθηματικά και με εναλλακτική μορφή μέσω ενός καλύτερα ορισμένου προβλήματος. Ειδικότερα, ορίζοντας τον πίνακα  $A_k$  ως:

$$A_k = \begin{pmatrix} | & & | \\ u_i & \cdots & u_k \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & & | \\ v_i & \cdots & v_k \\ | & & | \end{pmatrix}^T = \sum_{i=1}^k u_i \sigma_i v_i^T \quad (5.11)$$

αποδεικνύεται ότι ο δείκτης κατάστασης του δίνεται από τη σχέση [60]:

$$\text{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_k} \quad (5.12)$$

όπου  $\sigma_1 \geq \sigma_k$  αφού τα  $\sigma_i$  φθίνουν καθώς το  $i$  αυξάνεται.

Αντικαθιστώντας το αρχικό ασθενώς ορισμένο πρόβλημα  $Ax = b$  με το καλύτερα ορισμένο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων  $\min_x \|A_k \cdot x - b\|_2$ , αποδεικνύεται ότι η γενική λύση (μη μοναδική) είναι της μορφής:

$$x = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i + \sum_{i=k+1}^n \zeta_i v_i \quad (5.13)$$

για τυχαίο  $\zeta_i$ . Για να προκύψει η μοναδικότητα της λύσης, η οποία όπως σημειώθηκε είναι απαραίτητη απαίτηση που πρέπει να ικανοποιεί ένα καλώς ορισμένο πρόβλημα, θα πρέπει να εισαχθεί ένας επιπλέον περιορισμός που αφορά την ελαχιστοποίηση της νόρμας. Ειδικότερα λοιπόν ισχύει:

$$\{ \min \|x\|_2 \text{ υπό τον περιορισμό } \|A_k x - b\|_2 = \min \} \quad (5.14)$$

Στην περίπτωση αυτή, η λύση στο περιορισμένο αυτό πρόβλημα είναι ακριβώς η λύση TSVD, δηλαδή:

$$x_k \equiv \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (5.15)$$

η οποία διαπιστώνεται ότι προκύπτει από τη σχέση (5.13) εάν τεθεί  $\zeta_i = 0, \forall i \in [k+1, n]$ .

Βάσει του παραπάνω ορισμού του  $x_k$ , η λύση TSVD μπορεί να διατυπωθεί στην ακόλουθη μορφή:

$$x_k = \begin{pmatrix} | & & | \\ v_i & \cdots & v_k \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & & | \\ u_i & \cdots & u_k \\ | & & | \end{pmatrix}^T b \quad (5.16)$$

Από την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι υπάρχει πίνακας:



$$A_k^+ = \sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \quad (5.17)$$

για τον οποίο ισχύει:

$$x_k = A_k^+ b \quad (5.18)$$

όπου  $A_k^+$  ο ψευδοαντίστροφος του πίνακα  $A_k$ . Αν το  $e$  είναι ο λευκός θόρυβος Gauss ( $Cov(e) = \eta^2 I$ , όπου  $\eta^2$  η διασπορά), τότε ο πίνακας συνδιακύμανσης της λύσης TSVD είναι:

$$Cov(x_k) = A_k^+ Cov(b) (A_k^+)^T = \eta^2 \sum_{i=1}^k \sigma_i^{-2} v_i v_i^T \quad (5.19)$$

$$\text{όπου } Cov(b) = \eta^2 I$$

με νόρμα:

$$\|Cov(x_k)\|_2 = \frac{\eta^2}{\sigma_k^2} \quad (5.20)$$

Προκύπτει επομένως το συμπέρασμα ότι από στη στιγμή που το  $\sigma_k$  είναι πάντα μεγαλύτερο του  $\sigma_n$ , τα στοιχεία του πίνακα  $Cov(x_k)$  θα είναι λιγότερα από εκείνα του πίνακα  $Cov(x)$  για την αντίστροφη λύση. Επιπλέον, το τίμημα αυτής της μείωσης στη διακύμανση της  $x_k$  συγκρινόμενο με αυτό της απλής λύσης  $x = A^{-1} b$  είναι ότι η λύση δεν είναι «αμερόληπτη» (unbiased), ενώ η λύση  $A^{-1} b$  είναι. Δηλαδή ισχύει ότι [60]:

$$E(x^k) = \sum_{i=1}^k (v_i^T x^{exact}) v_i = x^{exact} - \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i \quad (5.21)$$

Λόγω της διακριτής συνθήκης Picard οι συντελεστές  $|v_i^T \cdot x^{exact}|$  καθώς και η νόρμα:

$$\left\| \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i \right\|_2 = \left( \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.22)$$

τα οποία καθορίζουν το βαθμό μεροληψίας της λύσης είναι μικρά συγκρινόμενα με τον όρο που αντιστοιχεί στην ακριβή λύση:

$$\|x^{exact}\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n (v_i^T x^{exact})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.23)$$

Τέλος, θα πρέπει να τονιστεί ότι ένα λάθος που συχνά γίνεται στη συγκεκριμένη μέθοδο είναι η επιλογή της παραμέτρου  $k$  να γίνεται βάσει του μεγέθους των ιδιάζουσων τιμών  $\sigma_i$ . Εφόσον ο θόρυβος στα δεδομένα  $b$  είναι περιορισμένος, η παράμετρος  $k$  θα πρέπει να καθορίζεται από το σε ποιο σημείο παύουν να λαμβάνονται υπόψιν οι συντελεστές θορύβου  $u_i^T b$ .

### 5.2.2. Μέθοδος Επιλεκτικής Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών

Η μέθοδος Επιλεκτικής Παραγοντοποίησης Ιδιάζουσων Τιμών (Selective Singular Value Decomposition - SSSVD) αξιοποιεί επιλεγμένες συνιστώσες με μεγάλη συνεισφορά στην ομαλοποιημένη λύση. Ειδικότερα, δοθέντος ενός ορίου συντελεστών  $\tau$ , η λύση  $x_\tau$  δίνεται από την ακόλουθη σχέση [21]:

$$x_\tau \equiv \sum_{|u_i^T b| > \tau} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (5.24)$$

Όπως φαίνεται από την ανωτέρω σχέση, οι παράγοντες φίλτρου για τη μέθοδο SSSVD είναι:

$$\phi_i^{[\tau]} = \begin{cases} 1, & \text{αν } |u_i^T b| \geq \tau \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (5.25)$$

Ως προς την επιλογή του ορίου  $\tau$ , είναι λογικό να γίνεται με το σκεπτικό τα φίλτρα να απαλείφουν εκείνους τους συντελεστές  $u_i^T \cdot b$  που βρίσκονται κάτω από το επίπεδο του θορύβου τους. Σύμφωνα δε με την ανάλυση της προηγούμενης ενότητας, αν ο θόρυβος στα δεδομένα  $b$  είναι Γκαουσιανός, τότε και ο θόρυβος στους συντελεστές  $u_i^T b$  θα είναι επίσης Γκαουσιανός ( $\text{Cov}(u_i^T b) = \eta^2 I$ ). Συνεπώς, μπορεί να επιλεγεί το όριο:

$$\tau = v_s \eta \quad (5.26)$$

όπου το  $v_s$  είναι ένας συντελεστής ασφαλείας που αποκόπτει συνιστώσες οι οποίες βρίσκονται κοντά στο επίπεδο του θορύβου. Επισημαίνεται ότι για προβλήματα όπου όλοι οι συντελεστές  $u_i^T b^{exact}$  φθίνουν, δεν αναμένονται σημαντικές διαφορές μεταξύ των λύσεων TSVD και SSVD. Και για τη μέθοδο αυτή, όπως και στην περίπτωση της TSVD, μία κατάλληλη τιμή του  $\tau$  μπορεί να προκύψει μετά από έλεγχο του διαγράμματος Picard της λύσης  $x = A^{-1} b$ , καθορίζοντας το σημείο πέρα από το οποίο οι τιμές  $u_i^T b / \sigma_i$  αρχίζουν να αποκλίνουν [21].

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να τονιστεί ότι, για υπολογιστικά προβλήματα μεγάλης κλίμακας ο προσδιορισμός της λύσης μέσω του αναπτύγματος SVD απαιτεί πολύ μεγάλης κλίμακας υπολογισμούς και ως εκ τούτου καθίσταται πρακτικά εξαιρετικά δαπανηρός αν όχι αδύνατος. Αυτό σημαίνει ότι η μέθοδος SSVD (άλλα και η TSVD), δύσκολα μπορούν να εφαρμοστούν στην πράξη [21].

### 5.2.3. Μέθοδος Tikhonov

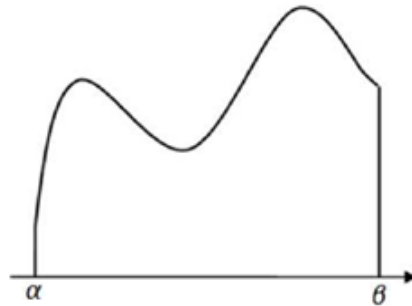
Όπως διαπιστώθηκε στις προηγούμενες παραγράφους, οι μέθοδοι TSVD και SSVD είχαν ως κύριο δομικό τους στοιχείο τον υπολογισμό ενός αναπτύγματος SVD. Σε προβλήματα μικρής κλίμακας αυτός ο υπολογισμός είναι σχετικά εύκολος και τις περισσότερες φορές και γρήγορος. Ωστόσο, σε προβλήματα μεγάλης κλίμακας ο συγκεκριμένος υπολογισμός καθίσταται πρακτικά δύσκολος μιας και ο υπολογισμός του απαιτεί πολλές πράξεις και κατ' επέκταση πολύ χρόνο. Έτσι, δημιουργείται η ανάγκη εύρεσης μιας μεθόδου η οποία θα μπορεί να εξασφαλίζει ακριβή αποτελέσματα σε σχετικά σύντομο χρονικό διάστημα. Μία τέτοια μέθοδος είναι η μέθοδος Tikhonov [55] η οποία έχει σαν βάση την επίλυση ενός προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων υπό έναν περιορισμό. Ειδικότερα, το προς επίλυση πρόβλημα είναι το ακόλουθο:

$$\begin{cases} \min_x \|Ax - b\|_2^2 \\ \|x\|_2^2 \leq \delta^2 \end{cases} \quad (5.27)$$

Ο περιορισμός  $\|x\|_2^2 \leq \delta^2$  εισάγεται για την ομαλοποίηση της λύσης. Ακολούθως αναλύεται πως αυτό στοιχειοθετείται [55]. Είναι γνωστό ότι:

$$\|x\|_2^2 = \langle x | x \rangle = \int_a^b x^2 dx \quad (5.28)$$

Το ολοκλήρωμα  $\int_a^b x^2 dx$  ισοδυναμεί με το εμβαδόν της περιοχής ανάμεσα στην γραφική παράσταση της συνάρτησης  $x^2$  και των ευθειών  $x = a$  και  $x = b$ . Έστω ότι η γραφική παράσταση της είναι μια καμπύλη της μορφής που φαίνεται στο Σχήμα 5.1.

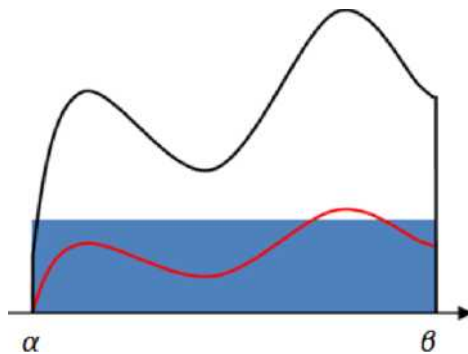


**Σχήμα 5.1:** Γραφική παράσταση της  $x^2$  μεταξύ των σημείων  $a$  και  $b$

Έτσι λοιπόν σύμφωνα με τον περιορισμό της σχέσης (5.27) ισχύει:

$$\int_a^b x^2 dx = \|x\|_2^2 \leq \delta^2 \quad (5.29)$$

Αν  $\delta^2$  είναι το εμβαδόν της γαλάζιας επιφάνειας όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.2, τότε για να είναι το εμβαδό μικρότερο ή ίσο του  $\delta^2$ , διατηρώντας ταυτόχρονα την μορφή της καμπύλης  $x^2$  όσο το δυνατόν πιο κοντά στην αρχική της μορφή, θα πρέπει η καμπύλη να γίνει πιο ομαλή, όπως αναπαρίσταται από την κόκκινη γραμμή [55].



**Σχήμα 5.2:** Γραφικές παραστάσεις της  $x^2$  (μαύρη γραμμή) και της ομαλοποιημένης  $x^2$  (κόκκινη γραμμή) μεταξύ των σημείων  $a$  και  $b$

Η αντιμετώπιση της εύρεσης του ελαχίστου υπό έναν περιορισμό μπορεί να επιτευχθεί μέσω της μεθόδου Tikhonov η οποία βασίζεται στην παρακάτω ισοδυναμία:

$$\begin{cases} \min_x \|Ax - b\|_2^2 \\ \|x\|_2^2 \leq \delta \end{cases} \Leftrightarrow \min_x \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \gamma (\|x\|_2^2 + \delta^2) \right\} \quad (5.30)$$

Απαιτώντας η παράγωγος της (Σχ. 5.30) ως προς  $x$  να είναι ίση με το μηδέν και θέτοντας  $\gamma = \lambda^2$ , λαμβάνεται το ισοδύναμο πρόβλημα της μεθόδου Tikhonov [55]:

$$\min_x \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2 \right\} \quad (5.31)$$

Στην ανωτέρω διατύπωση ο κάθε όρος διαδραματίζει ένα συγκεκριμένο ρόλο. Ειδικότερα:

- Ο όρος  $\|Ax - b\|_2^2$  εκφράζει την καλή προσαρμογή, δηλαδή περιγράφει πόσο καλά προβλέπει η λύση  $x$  τα δεδομένα  $b$  τα οποία σηνύθως εμπεριέχουν θόρυβο.
- Ο όρος  $\|x\|_2^2$  ομαλοποιεί την λύση.
- Ο όρος  $\lambda$  ονομάζεται παράμετρος ομαλοποίησης των δεδομένων και καθορίζει το βαθμό ομαλοποίησης της λύσης. Για  $\lambda \rightarrow \infty$ ,  $x \rightarrow 0$ , ενώ όταν  $\lambda \rightarrow 0$ ,  $x \rightarrow A^{-1}b$

Για την εξαγωγή της λύσης του προβλήματος που περιγράφεται από τη σχέση (5.31) απαιτείται προηγουμένως ο μετασχηματισμός του σε ένα ισοδύναμο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων, η μορφή του οποίου θα επιτρέψει τη χρήση θεωρημάτων της άλγεβρας για τον προσδιορισμό της λύσης. Έστω λοιπόν  $y, z \in R^n$  τότε:

$$\left\| \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} = y^T y + z^T z = \|y\|_2^2 + \|z\|_2^2 \quad (5.32)$$

Θέτοντας:

$$\begin{cases} y = Ax - b \\ z = \lambda x \end{cases} \quad (5.33)$$

και αντικαθιστώντας στην εξίσωση της μεθόδου Tikhonov, λαμβάνεται η κάτωθι σχέση:

$$\min_x \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2 \right\} = \min_x \left\{ \left\| \begin{pmatrix} Ax - b \\ \lambda x \end{pmatrix} \right\|_2^2 \right\} = \min_x \left\{ \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \right\} \quad (5.34)$$

Στη συνέχεια αποτυπώνεται ένα χρήσιμο θεώρημα, με τη βοήθεια του οποίου θα ευρεθεί η λύση της μεθόδου Tikhonov.

Θεώρημα: Για κάθε γραμμικό σύστημα της μορφής  $Ax=b$  το αντίστοιχο κανονικό  $A^T A x^* = A^T b$  είναι συμβιβαστό και όλες οι λύσεις του είναι λύσεις ελαχίστων τετραγώνων του συστήματος  $Ax=b$ .

Έτσι λοιπόν σύμφωνα με το παραπάνω θεώρημα η λύση του προβλήματος που περιγράφεται από τη (Σχ.5.34) θα είναι:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x &= \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow (A^T A + \lambda^2 I) x = A^T b \\ &\Leftrightarrow x_\lambda = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T b \end{aligned} \quad (5.35)$$

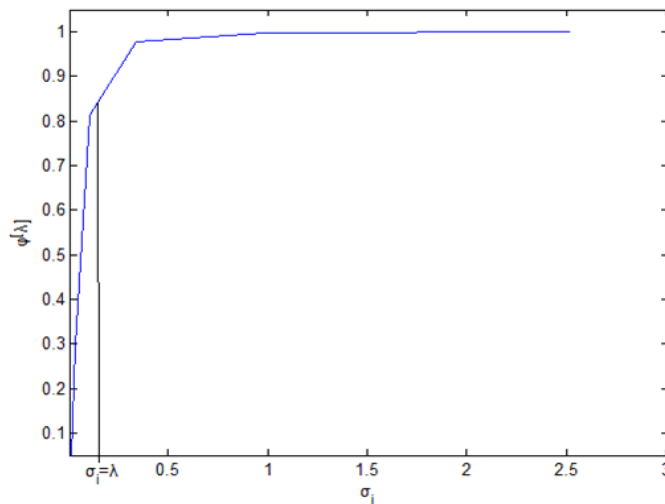
Με την αντικατάσταση  $I = VV^T$  και του SVD του πίνακα  $A$  προκύπτει τελικά ότι:

$$\begin{aligned} x_\lambda &= (V\Sigma^2 V^T + \lambda^2 VV^T)^{-1} V\Sigma U^T b = \\ &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} V^T V\Sigma U^T b = \\ &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \lambda^2} (u_i^T b) v_i \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \frac{u_i^T \cdot b}{\sigma_i} v_i \\ &= \sum_{i=1}^n \phi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T \cdot b}{\sigma_i} v_i \end{aligned} \quad (5.36)$$

με παράγοντες φιλτραρίσματος:

$$\phi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} = \begin{cases} 1, & \sigma_i \gg \lambda \\ \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}, & \sigma_i \ll \lambda \end{cases} \quad (5.37)$$

Η συμπεριφορά αυτών των παραμέτρων φιλτραρίσματος φαίνεται στο Σχήμα 5.3. Είναι εμφανές ότι για ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  μεγαλύτερες από  $\lambda$  οι παράγοντες φιλτραρίσματος τείνουν στη μονάδα με αποτέλεσμα οι αντίστοιχοι όροι SVD να έχουν μεγάλη συνεισφορά στην τελική λύση. Οι παράγοντες φιλτραρίσματος ιδιάζουσών τιμών που είναι μικρότερες από  $\lambda$  τείνουν στο μηδέν άρα οι συνεισφορά των όρων SVD στην τελική λύση είναι μηδαμινή. Επομένως, οι συνιστώσες SVD της λύσης,  $u_j^T b$ , που αντιστοιχούν σε μεγάλες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  συνεισφέρουν κατά σχεδόν 100% στην λύση Tikhonov, ενώ για ιδιάζουσες τιμές μικρότερες από  $\lambda$ , η συνεισφορά των αντίστοιχων συνιστωσών SVD της λύσης μειώνεται δραστικά δεδομένου ότι οι συνιστώσες αυτές εμπεριέχουν υψηλό θόρυβο  $\left\{ \frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T e}{\sigma_i} \right\}$ . Στην ενδιάμεση περιοχή, όπου οι ιδιάζουσες τιμές είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με το  $\lambda$  ( $\sigma_i \sim \lambda$ ) οι συντελεστές  $\phi$  μειώνονται κατά τρόπο σχετικά ομαλό, κατά τη μετάβαση από μεγαλύτερες σε μικρότερες τιμές. Η ανωτέρω ανάλυση είναι ένας ακόμη τρόπος κατανόησης του πώς η επιλογή του  $\lambda$  καθορίζει το βαθμό ομαλοποίησης της λύσης.



**Σχήμα 5.3: Γραφική παράσταση των παραγόντων φιλτραρίσματος της μεθόδου Tikhonov συναρτήσει των ιδιάζουσών τιμών  $\sigma_i$**

Η λύση Tikhonov μπορεί να ερμηνευθεί κάτω από το πρίσμα της στατιστικής. Ειδικότερα, δεδομένου ότι:

$$\begin{aligned}
 x_\lambda &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b \\
 &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T (b^{exact} + e) \\
 &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b^{exact} + V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T e
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

ο πίνακας συνδιακύμανσης του  $x_\lambda$  είναι:

$$Cov(x_\lambda) = \eta^2 \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]})^2 \sigma_i^{-2} v_i v_i^T \tag{5.39}$$

όπου  $\eta^2$  η διασπορά, ενώ η νόρμα συνδιακύμανσης  $Cov(x_\lambda)$  είναι άνω φραγμένη:

$$\|Cov(x_\lambda)\|_2 \leq \frac{\eta^2}{(2\lambda)^2}. \tag{5.40}$$

Έτσι, επιλέγοντας το  $\lambda$  να είναι λίγο μεγαλύτερο από την μικρότερη ιδιάζουσα τιμή, τότε η λύση  $x_\lambda$  έχει μικρότερη διασπορά από την  $x = A^{-1} b$ . Το τίμημα αυτής της μείωσης, όπως συνέβη και με τη μέθοδο TSVD, είναι και πάλι η εισαγωγή «μη αμεροληψίας»:

$$\varepsilon(x_\lambda) = \sum_{i=1}^n \phi_i^{[\lambda]} (v_i^T x^{exact}) v_i = x^{exact} - \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]}) (v_i^T x^{exact}) v_i \neq 0 \tag{5.41}$$

Όμως, δεδομένου ότι ισχύει:

$$1 - \phi_i^{[\lambda]} = \frac{\lambda^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \tag{5.42}$$

και αφού ταυτόχρονα ισχύει η διακριτή συνθήκη Picard, τότε αναμένεται ο βαθμός μεροληψίας να είναι μικρός συγκριτικά με τη νόρμα της ακριβούς λύσης:

$$\left\| \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]}) (v_i^T x^{exact}) v_i \right\|_2 \ll \|x^{exact}\|_2 \tag{5.43}$$



### 5.3. Ανάλυση Ευαισθησίας Άμεσων Μεθόδων Ομαλοποίησης

Όπως προκύπτει από την ανάλυση που προηγήθηκε, βασική επιδίωξη των μεθόδων ομαλοποίησης είναι να μειώσουν την επίδραση του θορύβου στην προσεγγιστική λύση του αντίστροφου προβλήματος. Σημαντικό ρόλο στη διαδικασία αυτή διαδραματίζουν οι παράμετροι ομαλοποίησης  $k$  ή  $\lambda$  (ανάλογα με τη μέθοδο). Στην παρούσα ενότητα εξετάζεται αφενός η ευστάθεια των λύσεων που προκύπτουν από την εφαρμογή των άμεσων μεθόδων ομαλοποίησης, και αφετέρου ο βαθμός επίδρασης των παραμέτρων ομαλοποίησης στην ευστάθεια των λύσεων αυτών.

Για την ανάλυση της ευαισθησίας των μεθόδων ομαλοποίησης, μελετώνται τα ακόλουθα δύο συναφή προβλήματα [25]:

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ \tilde{A}\tilde{x} &= \tilde{b} \end{aligned} \tag{5.44}$$

όπου  $\tilde{A}$  και  $\tilde{b}$  οι προσεγγιστικές εκδοχές των  $A$  και  $b$  αντίστοιχα, δηλαδή:

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= A + \Delta A \\ \tilde{b} &= b + \Delta b \end{aligned} \tag{5.45}$$

Τα διανύσματα  $x$  και  $\tilde{x}$  είναι οι λύσεις των δύο ανωτέρω προβλημάτων. Ζητούμενο αποτελεί η εύρεση ενός άνω φράγματος της διαφοράς των δύο λύσεων, δηλαδή της ποσότητας  $\tilde{x} - x$ , και ακριβέστερα του σχετικού σφάλματος  $\|\tilde{x} - x\|_2 / \|x\|_2$  με την προϋπόθεση φυσικά ότι και οι δύο λύσεις υπολογίζονται κάνοντας χρήση της ίδιας μεθόδου. Σε κάθε περίπτωση, τα άνω φράγματα αποτελούν μέτρο εκτίμησης της ευαισθησίας της υπολογιζόμενης προσεγγιστικής λύσης. Στη συνέχεια δίνονται ορισμένες εκτιμήσεις του σχετικού σφάλματος για τις λύσεις μερικών μεθόδων ομαλοποίησης.

### 5.3.1. Απλοϊκή (Naïve) Λύση

Για την απλοϊκή (naive) λύση  $x = A^{-1} b$  και  $\tilde{x} = \tilde{A}^{-1} \cdot \tilde{b}$ , όπου  $A$  αντιστρέψιμος πίνακας, εάν ο πίνακας διαταραχής  $\Delta A$  ικανοποιεί τη σχέση  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n$ , τότε ισχύει [33]:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \gamma} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} \right), \quad \gamma = \|\Delta A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_n} \quad (5.46)$$

Η ανωτέρω συνθήκη που πρέπει να ικανοποιεί η ποσότητα  $\Delta A$  είναι απαραίτητη προκειμένου να εξασφαλιστεί ότι ο διαταραγμένος πίνακας  $\tilde{A}$  παραμένει αντιστρέψιμος. Ο βαθμός διαταραχής προσδιορίζεται από το δείκτη κατάστασης του πίνακα  $A$ , δηλαδή από την σχέση:

$$\text{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} \quad (5.47)$$

### 5.3.2. Λύση TSVD

Έστω  $x_k$  και  $\tilde{x}_k$  οι λύσεις TSVD για την ίδια παράμετρο  $k$ . Αν ο πίνακας διαταραχής  $\Delta A$  ικανοποιεί τη σχέση  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_k - \sigma_{k+1}$ , τότε ισχύει ότι:

$$\frac{\|\tilde{x}_k - x_k\|_2}{\|x_k\|_2} \leq \frac{k_k}{1 - \gamma_k} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_k\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \frac{\gamma_k}{1 - \gamma_k - \hat{\gamma}_k} \frac{\|b - b_k\|_2}{\|b_k\|_2} \right)$$

$$k_k = \text{cond}(A_k) = \frac{\sigma_1}{\sigma_k} = \frac{\|A\|_2}{\sigma_k}, \quad b_k = A \cdot x_k, \quad \gamma_k = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_k}, \quad \hat{\gamma}_k = \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} \quad (5.48)$$

Η ποσότητα  $k_k = \sigma_1 / \sigma_k$  αποτελεί το δείκτη κατάστασης της λύσης TSVD, και δύναται να είναι αρκετά μικρότερος σε σχέση με το δείκτη κατάστασης του πίνακα  $A$ .

Η ευστάθεια της λύσης εδώ διαπιστώνεται ότι εξαρτάται εκτός από τον δείκτη κατάστασης  $k_k$  και από την επιλογή του παράγοντα κανονικοποίησης  $k$  αλλά και από τον

παράγοντα  $\hat{\gamma}_k = \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k}$  ο οποίος μετρά την απόσταση μεταξύ της ελάχιστης παραμένουσας

στη λύση ιδιάζουσας τιμής και της μέγιστης από αυτές που απορρίπτονται.

### 5.3.3. Λύση Tikhonov

Έστω  $x_\lambda$  και  $\tilde{x}_\lambda$  οι λύσεις Tikhonov για την ίδια παράμετρο  $\lambda$ . Αν ο πίνακας διαταραχής  $\Delta A$  ικανοποιεί τη σχέση  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_\lambda - \sigma_{\lambda+1}$  τότε:

$$\frac{\|\tilde{x}_\lambda - x_\lambda\|_2}{\|x_\lambda\|_2} \leq \frac{k_\lambda}{1 - \gamma_\lambda} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_\lambda\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \frac{\gamma_\lambda}{1 - \gamma_\lambda - \hat{\gamma}_\lambda} \frac{\|b - b_\lambda\|_2}{\|b_\lambda\|_2} \right)$$

$$k_\lambda = \text{cond}(A_\lambda) = \frac{\sigma_1}{\sigma_\lambda} = \frac{\|A\|_2}{\sigma_\lambda}, \quad b_\lambda = A \cdot x_\lambda, \quad \gamma_\lambda = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_\lambda}, \quad \hat{\gamma}_\lambda = \frac{\sigma_{\lambda+1}}{\sigma_\lambda}$$

(5.49)

Η ποσότητα  $k_\lambda = \frac{\sigma_1}{\sigma_\lambda}$  αποτελεί το δείκτη κατάστασης της λύσης Tikhonov, η οποία και πάλι μπορεί να είναι αρκετά μικρότερη σε σχέση με το δείκτη κατάστασης του πίνακα  $A$  [27]. Και εδώ όπως και στην προηγούμενη μέθοδο η ευστάθεια της λύσης επηρεάζεται από τον δείκτη κατάστασης του πίνακα  $A$  και από την επιλογή του παράγοντα κανονικοποίησης  $\lambda$ .

### 5.3.4. Λύση Ελαχίστων Τετραγώνων

Έστω  $x$  και  $\tilde{x}$  οι λύσεις της μεθόδου Ελαχίστων Τετραγώνων. Το όριο διαταραχής της λύσης προσδιορίζεται από τη σχέση [26]:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \gamma} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_n\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \gamma \frac{\|b - b_n\|_2}{\|b_n\|_2} \right), \quad b_n = A \cdot x, \quad \gamma = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_n}$$

(5.50)

Όπως και στην περίπτωση της απλοϊκής λύσης, το ύψος της διαταραχής προσδιορίζεται από το δείκτη κατάστασης του πίνακα  $\text{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$ .

## 5.4. Προσδιορισμός Παραμέτρων Ομαλοποίησης

Στόχος της παρούσας ενότητας είναι η συζήτηση τεχνικών προσδιορισμού κατάλληλων παραμέτρων  $k$  και  $\lambda$ , προκειμένου οι μέθοδοι ομαλοποίησης να δουλεύουν αποτελεσματικά. Ο προσδιορισμός αυτός σχετίζεται άμεσα με τα σφάλματα ομαλοποίησης (regularization error) και διαταραχής (perturbation error), τα οποία συζητούνται και αναλύονται στην παρούσα παράγραφο.

### 5.4.1. Σφάλματα Ομαλοποίησης και Διαταραχής

Για τον προσδιορισμό των παραμέτρων ομαλοποίησης πρέπει να επιδιωχθεί η ελαχιστοποίηση των σφαλμάτων της ομαλοποιημένης λύσης. Για τη θεμελίωση των συμπερασμάτων ακολουθεί εστίαση στη μέθοδο Tikhonov και επέκταση των συμπερασμάτων για τη μέθοδο TSVD. Έστω ο διαγώνιος πίνακας  $\Phi^{[\lambda]}$  όπως περιγράφηκε σε προηγούμενη παράγραφο, ο οποίος αποτελείται από τις σταθερές φιλτραρίσματος Tikhonov [28]:

$$\Phi^{[\lambda]} = \begin{pmatrix} \phi_1^{[\lambda]} & & \\ & \ddots & \\ & & \phi_n^{[\lambda]} \end{pmatrix}, \quad \phi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2}. \quad (5.51)$$

Τότε με τη βοήθεια της σχέσης (5.36) και της σχέσης  $b = Ax^{exact} + e$  το σφάλμα της ομαλοποιημένης λύσης Tikhonov  $x_\lambda$  μπορεί να διατυπωθεί ως εξής:

$$\begin{aligned} x^{exact} - x_\lambda &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T b = \\ &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T Ax^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T e = \\ &= (I - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T U \Sigma V^T) x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T e = \\ &= V(I - \Phi^{[\lambda]})V^T x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T e \end{aligned} \quad (5.52)$$

Το σφάλμα ομαλοποίησης είναι ο πρώτος όρος της ανωτέρω σχέσης, προέρχεται από την εισαγωγή του φιλτραρίσματος και εκφράζει την απόκλιση της υπολογιζόμενης προσεγγιστικής τιμής  $x_\lambda$  από την ακριβή λύση :

$$\Delta x_{bias} = V(I - \Phi^{[\lambda]})V^T x^{exact} = \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]}) (v_i^T x^{exact}) v_i \quad (5.53)$$

Το σφάλμα διαταραχών είναι ο δεύτερος όρος σφάλματος και προκύπτει αντιστρέφοντας και φιλτράροντας τη συνιστώσα θορύβου στα δεδομένα.

Για τη μέθοδο Tikhonov, όταν η τιμή της παραμέτρου  $\lambda$  είναι πολύ μικρή, τότε οι παράγοντες φιλτραρίσματος  $\phi_i^{[\lambda]}$  βρίσκονται κοντά στη μονάδα και συνεπώς το σφάλμα ομαλοποίησης είναι μικρό, ενώ το σφάλμα διαταραχών είναι μεγάλο. Το αντίθετο ακριβώς συμβαίνει όταν το  $\lambda$  είναι μεγάλο. Η αντίστοιχη λογική ισχύει για τα σφάλματα ομαλοποίησης και διαταραχής της μεθόδου TSVD, τα οποία περιγράφονται από την ακόλουθη σχέση:

$$\begin{cases} \Delta x_{bias} = \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i \\ \Delta x_{pert} = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T e}{\sigma_i} v_i \end{cases} \quad (5.54)$$

Αν το  $k$  είναι μικρό, τότε το σφάλμα διαταραχής θα είναι μικρό και το σφάλμα ομαλοποίησης θα είναι μεγάλο, ενώ αν η παράμετρος  $k$  βρίσκεται κοντά στο  $n$  ισχύει ακριβώς το αντίστροφο. Είναι επομένως λογικό να αναζητηθεί η «χρυσή τομή» που προκύπτει επιλέγοντας το  $k$  με τέτοιο τρόπο, ώστε να εξισορροπούνται τα δύο σφάλματα [28].

#### 5.4.2. Επίπτωση Επιλογής Παραμέτρων Ομαλοποίησης στη Λύση

Στην παρούσα ενότητα διενεργείται ανάλυση προκειμένου να εξεταστεί η συμπεριφορά των μεγεθών  $\|Ax_k - b\|_2^2$  και  $\|x_k\|_2^2$  της μεθόδου TSVD (παρόμοια ανάλυση μπορεί να πραγματοποιηθεί με αντίστοιχο τρόπο και για τη μέθοδο Tikhonov), προκειμένου να αποτιμηθεί ποσοτικά η επίπτωση της μεταβολής των παραμέτρων ομαλοποίησης στα μεγέθη αυτά. Έστω  $k_n$  η τιμή του  $k$  που σηματοδοτεί τη μετάβαση από τις φθίνουσες συνιστώσες  $|u_i^T b|$  στις σταθερές. Τότε ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις για τις νόρμες του υπολοίπου και της λύσης αντίστοιχα [28]:

$$\|Ax_k - b\|_2^2 \approx \begin{cases} \sum_{i=k_n+1}^{k_n} (u_i^T b)^2 + (n - k_n)\eta^2 \approx \sum_{i=k+1}^{k_n} (u_i^T b^{exact})^2, & k < k_n \\ (n - k)\eta^2, & k > k_n \end{cases} \quad (5.55)$$

και

$$\|x_k\|_2^2 \approx \begin{cases} \sum_{i=1}^k \left( \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} \right)^2, & k < k_n \\ \sum_{i=1}^{k_n} \left( \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} \right)^2 + \sum_{i=k_n+1}^k \left( \frac{\eta}{\sigma_i} \right)^2 \approx \|x^{exact}\|_2^2 + \eta^2 \sum_{i=k_n+1}^k \sigma_i^{-2}, & k > k_n \end{cases} \quad (5.56)$$

Προκύπτει ότι για  $k < k_n$  η νόρμα υπολοίπου μειώνεται σταθερά με το  $k$ , ενώ για  $k > k_n$  μειώνεται με βραδύτερο ρυθμό, σε αντίθεση με τη νόρμα της λύσης που αυξάνεται αργά με το  $k$  για  $k < k_n$  και με ταχύτερο ρυθμό για  $k > k_n$ . Και για τις δύο ποσότητες τα σφάλματα ομαλοποίησης και διαταραχής εξισορροπούνται για  $k = k_n$ . Κατά συνέπεια, για την εύρεση των παραμέτρων ομαλοποίησης πρέπει να εξετάζεται η τιμή του δείκτη  $k_n$  που ορίζεται ως το βέλτιστο σημείο της λύσης. Για τον προσδιορισμό του  $k_n$  υπάρχουν αρκετές μέθοδοι στη βιβλιογραφία. Στις ενότητες που ακολουθούν εξετάζονται δύο από αυτές, το «Κριτήριο Καμπύλης  $L$ » (L-Curve Criterion) και η «Αρχή της Ασυμφωνίας» (Discrepancy Principle) [24, 32].

#### 5.4.2.1. Κριτήριο Καμπύλης $L$

Το Κριτήριο Καμπύλης  $L$  αποτελεί την δημοφιλέστερη μέθοδο υπολογισμού των παραμέτρων  $k, \lambda$ . Η μέθοδος αυτή στηρίζεται στο γεγονός ότι η συμπεριφορά της Καμπύλης  $L$  είναι άμεσα συνδεδεμένη με το εύρος των σφαλμάτων διαταραχής και ομαλοποίησης και αποτελείται από δύο διαφορετικά τμήματα, ένα στο οποίο κυριαρχεί το σφάλμα ομαλοποίησης και ένα δεύτερο στο οποίο κυριαρχεί το σφάλμα διαταραχής.

Είναι γνωστό ότι η Καμπύλη  $L$  είναι μία διλογαριθμική (log-log) καμπύλη της νόρμας της ομαλοποιημένης λύσης σε σχέση με την αντίστοιχη νόρμα υπολοίπου

(residual) για κάθε τιμή της παραμέτρου ομαλοποίησης  $\lambda$ . Η εν λόγω καμπύλη έχει το σχήμα του γράμματος  $L$ , από το οποίο αντλεί το όνομά της. Η καλύτερη τιμή της παραμέτρου ομαλοποίησης πρέπει να βρίσκεται στη γωνία της  $L$ , δεδομένου ότι για τιμές μεγαλύτερες από αυτή, τα υπόλοιπα αυξάνουν ταχύτατα και η νόρμα της λύσης μειώνεται αργά, ενώ για τιμές μικρότερες από αυτή, η νόρμα της λύσης αυξάνει ταχέως χωρίς ιδιαίτερη μείωση του υπολοίπου.

Ειδικότερα, για τη μέθοδο Tikhonov, ένας ορισμός της γωνίας που μπορεί να αποτυπωθεί μαθηματικά με ενδεδειγμένο τρόπο είναι να αποτελεί το σημείο της  $L$ -Curve με τη μέγιστη καμπυλότητα. Έστω ότι η Καμπύλη  $L$  της μεθόδου Tikhonov περιγράφεται από την ακόλουθη σχέση [28, 24]:

$$\left( \frac{\hat{\rho}}{2}, \frac{\hat{\xi}}{2} \right) \quad (5.57)$$

όπου:

$$\hat{\xi} = \log \|x_{\lambda}\|_2^2, \quad \hat{\rho} = \log \|Ax_{\lambda} - b\|_2^2 \quad (5.58)$$

Η πρώτη και η δεύτερη παράγωγος των ανωτέρω ποσοτήτων δίνονται από τη σχέση:

$$\hat{\xi}' = \frac{\xi''}{\xi'}, \quad \hat{\rho}' = \frac{\rho''}{\rho} \quad (5.59)$$

$$\hat{\xi}'' = \frac{\xi''' \cdot \xi - (\xi'')^2}{\xi'^2}, \quad \hat{\rho}'' = \frac{\rho''' \cdot \rho - (\rho'')^2}{\rho^2} \quad (5.60)$$

Εισάγοντας τις τελευταίες σχέσεις στον ορισμό της καμπυλότητας ισχύει:

$$\hat{c} = 2 \frac{\hat{\rho}' \cdot \hat{\xi}'' - \hat{\rho}'' \cdot \hat{\xi}'}{\left( (\hat{\rho}')^2 + (\hat{\xi}')^2 \right)^{\frac{3}{2}}} \quad (5.61)$$

και

$$\hat{c}_\lambda = 2 \cdot \frac{\xi \cdot \rho}{\xi'} \cdot \frac{\lambda^2 \cdot \xi' \cdot \rho + 2\lambda \cdot \xi \cdot \rho + \lambda^4 \cdot \xi \cdot \xi'}{\left( (\lambda \cdot \xi)^2 + (\rho)^2 \right)^{\frac{3}{2}}} \quad (5.62)$$

Οι τιμές:

$$\xi = \|x_\lambda\|_2^2, \quad \rho = \|Ax_\lambda - b\|_2^2 \quad (5.63)$$

είναι εύκολο να υπολογισθούν. Για τον υπολογισμό του  $\xi'$  χρησιμοποιείται η διατύπωση

Ιδιάζουσων Τιμών:

$$\xi' = \frac{4}{\lambda} x_\lambda^T \cdot z_\lambda, \quad z_\lambda = \left( A^T A + \lambda^2 I \right)^{-1} A^T (Ax_\lambda - b) \quad (5.64)$$

όπου το  $z_\lambda$  αποτελεί λύση Tikhonov του προβλήματος:

$$\min_z \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} z - \begin{pmatrix} Ax_\lambda - b \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \quad (5.65)$$

Για τον υπολογισμό του Κριτηρίου  $L$  της λύσης Tikhonov, απαιτείται αρχικά ο προσδιορισμός της καμπυλότητας  $\hat{c}_\lambda$  για τις διάφορες τιμές του  $\lambda$ , και εν συνεχεία η κατάλληλη τιμή εκείνου του  $\lambda = \lambda_L$ , το οποίο μεγιστοποιεί την καμπυλότητα  $\hat{c}_\lambda$ . Για τη μέθοδο TSVD επιλέγεται αντίστοιχα το  $k = k_L$  του σημείου της καμπύλης  $L$  με τη μεγαλύτερη γωνία. Ωστόσο, ο υπολογισμός αυτής της γωνίας δεν είναι πάντα απλός δεδομένης της ενδεχόμενης ύπαρξης και άλλων μικρότερων τοπικών γωνιών. Σε κάθε περίπτωση, αν και το Κριτήριο Καμπύλης  $L$  είναι η δημοφιλέστερη μέθοδος, στηρίζεται εν γένει στη διαίσθηση και ως εκ τούτου δεν είναι πάντα βέβαιο ότι μέσω αυτού θα εντοπίζεται μία καλή παράμετρος ομαλοποίησης [28].



#### 5.4.2.2. Αρχή της Ασυμφωνίας (Discrepancy Principle)

Η προφανής σκέψη για βέλτιστο προσδιορισμό του  $k$  είναι να επιλεγεί τέτοιο  $k = k_n$ , ώστε να ισχύει [29]:

$$\|Ax_k - b\|_2 \approx \eta (n - k_n)^{\frac{1}{2}} \quad (5.66)$$

Στην πράξη όμως για υπολογιστικά προβλήματα μεγάλης κλίμακας, ο υπολογισμός των συνιστωσών SVD (και κατ'επέκταση του  $k_n$ ) προκειμένου να απεικονιστεί το διάγραμμα Picard, είναι πρακτικά ανέφικτος, οπότε στη περίπτωση αυτή χρησιμοποιείται η νόρμα:

$$\|e\|_2 \approx n^{\frac{1}{2}} \quad (5.67)$$

πολλαπλασιασμένη με ένα παράγοντα ασφαλείας  $v_{dp}$ . Η μέθοδος που προκύπτει με αυτό τον τρόπο είναι γνωστή ως Αρχή της Ασυμφωνίας (Discrepancy Principle) και σύμφωνα με αυτή επιλέγεται το μεγαλύτερο  $k = k_{DP}$  για το οποίο ισχύει:

$$\|Ax_k - b\|_2 \geq v_{dp} \|e\|_2 > \|Ax_{k+1} - b\|_2 \quad (5.68)$$

Κατ' αντιστοιχία, για τη λύση Tikhonov  $x_\lambda$  επιλέγεται  $\lambda = \lambda_{DP}$  τέτοιο ώστε:

$$\|Ax_\lambda - b\|_2 = v_{dp} \|e\|_2 \quad (5.69)$$

Η Αρχή της Ασυμφωνίας, λόγω της απλότητάς της, χρησιμοποιείται συχνά σε μελέτες μεθόδων ομαλοποίησης. Το κύριο μειονέκτημα της είναι η ακρίβεια υπολογισμού του  $\|e\|_2$  η οποία έχει σημαντικό αντίκτυπο στην ποιότητα της υπολογιζόμενης παραμέτρου ομαλοποίησης  $k_{DP}$  ή  $\lambda_{DP}$  [29].

## 5.5. Επαναληπτικές Μέθοδοι Ομαλοποίησης

Οι άμεσες μέθοδοι που μελετήθηκαν έως τώρα είναι αποτελεσματικές για περιπτώσεις προβλημάτων μικρής κλίμακας. Τα περισσότερα πρακτικά προβλήματα οδηγούν σε μεγάλους πίνακες, γεγονός που καθιστά τις μεθόδους αυτές πρακτικά ανεφάρμοστες. Από την άλλη, η διακριτοποίηση ορισμένων κλάσεων αντίστροφων προβλημάτων μεγάλης κλίμακας οδηγούν σε «αραιούς» (sparse) πίνακες συντελεστών, των οποίων η επίλυση παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα.

Προκειμένου μία μέθοδος ομαλοποίησης να είναι αποτελεσματική για την επίλυση προβλημάτων μεγάλης κλίμακας θα πρέπει αφενός τα κύρια δομικά της στοιχεία να είναι πολλαπλασιασμοί πίνακα-διανύσματος (προκειμένου να αποφεύγεται οποιαδήποτε παραγοντοποίηση πίνακα) και αφετέρου να είναι εφικτή η επιλογή της παραμέτρου ομαλοποίησης  $\lambda$ , χωρίς να απαιτείται η εκ νέου συνολική επίλυση του προβλήματος για κάθε νέα παράμετρο. Οι επαναληπτικές (iterative) μέθοδοι ομαλοποίησης κατά κανόνα στηρίζονται σε πολλαπλασιασμούς πίνακα-διανύσματος και ως εκ τούτου ικανοποιούν την πρώτη από τις παραπάνω συνθήκες, χωρίς όμως να ισχύει απαραίτητα κάτι αντίστοιχο και για τη δεύτερη από τις προαναφερθείσες συνθήκη [28].

Εν γένει, οι επαναληπτικές μέθοδοι εκκινούν με ένα αρχικό διάνυσμα αυθαίρετα ορισμένο, συνήθως το μηδενικό. Ακολουθώς παράγεται μία ακολουθία λύσεων  $x^{[1]}$ ,  $x^{[2]}$ , ..., η οποία συγκλίνει σε κάποια τελική λύση. Κάποιες επαναληπτικές μέθοδοι, μετά από ένα σχετικά μεγάλο αριθμό επαναλήψεων μπορεί να αρχίζουν να αποκλίνουν από την ακριβή λύση και συγκλίνουν στην αντίστροφη λύση. Πρόκειται για σύγκλιση η οποία είναι γνωστή ως ημισύγκλιση (semiconvergence) και στις περιπτώσεις αυτές καθίσταται σημαντική η χρονική στιγμή κατά την οποία πρέπει να τερματιστούν οι επαναλήψεις [28].

Στις ενότητες που ακολουθούν παρουσιάζονται οι επιμέρους κατηγορίες επαναληπτικών μεθόδων ομαλοποίησης μαζί με τους σημαντικότερους εκπρόσωπούς τους. Θα πρέπει να τονιστεί ότι οι μέθοδοι αυτές σε καμιά περίπτωση δεν εξαντλούν την ευρεία βιβλιογραφία που υφίσταται στην εν λόγω επιστημονική περιοχή.

### 5.5.1. Κλασσικές Επαναληπτικές Μέθοδοι

Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζεται ένας αριθμός κλασσικών επαναληπτικών μεθόδων, οι οποίες παρουσιάζουν το φαινόμενο της ημισύγκλισης. Οι μέθοδοι αυτές παρότι παρουσιάζουν σχετικά αργή σύγκλιση προτιμώνται σε πολύ συγκεκριμένες περιπτώσεις εφαρμογών για τις οποίες κρίνονται αρκετά αποτελεσματικές συγκρινόμενες με άλλες μεθόδους. Ειδικότερα, εξετάζονται η Επαναληπτική Μέθοδος Αλγεβρικής Ανακατασκευής Kaczmarz και οι Επαναληπτικές Μέθοδοι των Landweber και Cimino.

#### 5.5.1.1. Επαναληπτική Μέθοδος Kaczmarz

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζεται μια κλασσική επαναληπτική μέθοδος, η οποία είναι γνωστή ως μέθοδος αλγεβρικής ανακατασκευής (Algebraic Reconstruction), ή μέθοδος Kaczmarz και βρίσκει εφαρμογή στον τομέα της αξονικής τομογραφίας. Ένα ιδιαίτερο χαρακτηριστικό της συγκεκριμένης μεθόδου είναι ότι στις αρχικές επαναλήψεις παρουσιάζει ταχεία σύγκλιση, ενώ μετά από κάποιο σημείο η σύγκλιση αυτή επιβραδύνεται αρκετά. Βασικό δομικό στοιχείο της εν λόγω μεθόδου αποτελεί η «σάρωση» του πίνακα  $A$  κατά γραμμή και ο υπολογισμός κατ'επέκταση επαναλαμβανόμενων τιμών για τη λύση  $x^{[k]}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  ως εξής:

$$\left\{ \begin{array}{l} x^{[k^{(0)}]} = x^{[k]} \\ m \text{ επαναλήψεις: } x^{[k^{(i)}]} = x^{[k^{(i-1)}]} + \frac{b_i - a_i^T x^{[k^{(i-1)}]}}{\|a_i\|_2^2} a_i \\ x^{[k^{(k+1)}]} = x^{[k^{(m)}]} \end{array} \right. \quad (5.70)$$

Η ταχεία αρχική σύγκλιση είναι και ο λόγος που η συγκεκριμένη μέθοδος είναι τόσο διαδεδομένη στον τομέα της αξονικής τομογραφίας. Αν για την ανάλυση της μεθόδου χρησιμοποιηθεί η γεωμετρική οπτική, τότε ισχύει ότι κάθε επανάληψη  $x^{[k^{(i)}]}$  προκύπτει προβάλλοντας την προηγούμενη επανάληψη  $x^{[k^{(i-1)}]}$  ορθογώνια πάνω στο υπερεπίπεδο:

$$H_i = \{x \mid a_i^T x = b_i\} \quad (5.71)$$

το οποίο ορίζεται από την  $i$ -οστή γραμμή  $a_i^T$  και το αντίστοιχο στοιχείο  $b_i$  και αποτελείται από τα  $x$  εκείνα για τα οποία ισχύει ότι  $a_i^T x = b_i$ . Λαμβάνοντας υπόψη ότι η νόρμα υπολοίπου είναι μη αύξουσα (εάν ο πίνακας  $A$  είναι τετραγωνικός και αντιστρέψιμος), συμβολίζοντας με  $\theta_{ij}$  τη γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα  $a_i$  με το  $j$ -οστό δεξί ιδιάζων διάνυσμα  $v_j$ , και χρησιμοποιώντας τη σχέση:

$$a_i^T = e_i^T A \quad (5.72)$$

όπου  $e_i$  το  $i$ -οστό μοναδιαίο διάνυσμα, προκύπτει ότι:

$$\cos \theta_{ij} = \frac{a_i^T v_j}{\|a_i\|_2} = \frac{e_i^T A v_j}{\|a_i\|_2} = \frac{\sigma_j e_i^T u_j}{\|a_i\|_2} = \frac{\sigma_j u_{ij}}{\|a_i\|_2} \quad (5.73)$$

Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι η αποτελεσματικότητα της μεθόδου αυτής στηρίζεται στο γεγονός ότι τα διανύσματα  $a_i$  κωδικοποιούν επαρκώς διανύσματα  $v_j$  που αντιστοιχούν σε μεγάλες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_j$ . Από την άλλη, είναι σχεδόν ορθοκανονικά σε εκείνα τα διανύσματα που αντιστοιχούν σε μικρές ιδιάζουσες τιμές τα οποία κατά συνέπεια δε μπορούν να κωδικοποιήσουν επαρκώς.

### 5.5.1.2. Στάσιμες Επαναληπτικές Μέθοδοι

Οι Στάσιμες Επαναληπτικές Μέθοδοι (Stationary Iterative Methods) είναι μέθοδοι οι οποίες διατυπώνονται βάσει της ακόλουθης σχέσης:

$$x^{[k+1]} = x^{[k]} + \omega A^T M (b - Ax^{[k]}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.74)$$

όπου  $M$  ένας συμμετρικός θετικά ημιορισμένος πίνακας. Οι μέθοδοι Landweber και Cimmino που παρουσιάζονται στην παρούσα ενότητα, αποτελούν ειδικές περιπτώσεις της προαναφερθείσας ευρύτερης κατηγορίας επαναληπτικών μεθόδων και εν γένει παρουσιάζουν το φαινόμενο της ημισύγκλισης.

## Επαναληπτική Μέθοδος Landweber

Μία από τις πλέον γνωστές επαναληπτικές μεθόδους είναι η μέθοδος Landweber, η οποία γενικά παρουσιάζει αργή σύγκλιση. Αυτή η αργή σύγκλιση μπορεί να αποδειχτεί μέσω μιας διαδικασίας μελέτης της επίπτωσης της μεταβολής του αριθμού των επαναλήψεων  $k$  στη θέση των σημείων καμπής ( $\sigma_{break}^{[k]}$ ). Ως  $\sigma_{break}^{[k]}$  ορίζεται το σημείο καμπής των παραγόντων φίλτρου της μεθόδου (σχέση 5.80) για τις οποίες ισχύει  $\phi_i^{[k]} = 0.5$ . Σύμφωνα με αυτή τη διαδικασία η τιμή των σημείων καμπής ( $\sigma_{break}^{[k]}$ ) μειώνεται κατά  $\sqrt{2} \approx 1,4$  φορές κάθε φορά που ο αριθμός των επαναλήψεων  $k$  διπλασιάζεται, γεγονός που αποδεικνύει αυτή την αργή σύγκλιση που αναφέραμε νωρίτερα.

Η βασική μαθηματική διατύπωση της εν λόγω μεθόδου είναι [28]:

$$x^{[k+1]} = x^{[k]} + \omega A^T (b - Ax^{[k]}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.75)$$

όπου  $\omega$  πραγματικός αριθμός που ικανοποιεί τη σχέση:

$$0 < \omega < 2 \cdot \|A^T A\|_2^{-1} = \frac{2}{\sigma_1^2} \quad (5.76)$$

Σε κάθε επανάληψη της μεθόδου απαιτείται ο υπολογισμός του διανύσματος υπολοίπου:

$$r^{[k]} = b - Ax^{[k]} \quad (5.77)$$

και ακολούθως ο πολλαπλασιασμός του με τα  $A^T$  και  $\omega$ . Η επανάληψη  $x^{[k]}$ , όπως συμβαίνει και με τις λύσεις των άμεσων μεθόδων TSVD και Tikhonov, μπορεί να εκφραστεί με τη βοήθεια της συνάρτησης φίλτρου  $\Phi$ , ως εξής:

$$x^{[k]} = V \Phi^{[k]} \Sigma^{-1} U^T b \quad (5.78)$$

όπου τα στοιχεία του διαγώνιου πίνακα:

$$\Phi^{[k]} = \text{diag}(\phi_1^{[k]}, \dots, \phi_n^{[k]}) \quad (5.79)$$

είναι οι παράγοντες φίλτρου για το  $x^{[k]}$ , οι οποίοι δίνονται από τη σχέση:

$$\phi_i^{[k]} = 1 - (1 - \omega \sigma_i^2)^k, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (5.80)$$

Για μικρές ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  οι παράγοντες φίλτρου ικανοποιούν την παρακάτω σχέση:

$$\phi_i^{[k]} \approx k \omega \sigma_i^2, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (5.81)$$

δηλαδή οι παράγοντες φίλτρου φθίνουν με τον ίδιο ρυθμό που στην περίπτωση της μεθόδου Tikhonov φθίνουν οι παράγοντες φίλτρου  $\phi_i^{[\lambda]} \left( \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \rightarrow \lambda^{-2} \sigma_i^2 \right)$ . Επιπλέον, όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του  $k$ , τόσο περισσότερες μικρότερες ιδιάζουσες τιμές λαμβάνονται υπόψη καθιστώντας έτσι τις επαναλήψεις  $x^{[k]}$  περισσότερο ανακριβείς [28].

### Επαναληπτική Μέθοδος Cimmino

Μία ακόμη κλασσική επαναληπτική μέθοδος που παρουσιάζει το φαινόμενο της ημισύγκλισης είναι η μέθοδος Cimmino, η οποία μπορεί να διατυπωθεί με τη βοήθεια της ακόλουθης σχέσης:

$$x^{[k+1]} = x^{[k]} + \omega A^T D (b - Ax^{[k]}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.82)$$

όπου  $D = \text{diag}(d_i)$  διαγώνιος πίνακας, τα στοιχεία του οποίου ορίζονται ως εξής (Hansen, 2010):

$$a_i^T = A(i,:), \quad d_i = \begin{cases} \frac{1}{m} \cdot \frac{1}{\|a_i\|_2^2} \\ 0, & a_i = 0 \end{cases} \quad (5.83)$$

### 5.5.2. Μέθοδοι Προβολής (Projection Methods)

Οι μέθοδοι ομαλοποίησης που εξετάστηκαν μέχρι τώρα, επιλύουν το υπό μελέτη πρόβλημα προσεγγιστικά με κάποιο σφάλμα. Επιπρόσθετα, σύμφωνα με την ανάλυση που πραγματοποιήθηκε στο προηγούμενο Κεφάλαιο οι άμεσες μέθοδοι ομολοποίησης αναζητούν την προσέγγιση της λύσης σε ένα χαμηλής διάστασης υπόχωρο του  $R^n$ . Για παράδειγμα, στη μέθοδο TSVD (η οποία όπως θα δούμε στη συνέχεια αποτελεί μία ειδική περίπτωση μεθόδου προβολής) ο εν λόγω υπόχωρος παράγεται από τα  $k$  πρώτα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα  $v_1, v_2, \dots, v_k$  που ως επί το πλείστον κωδικοποιούν επαρκώς

χαμηλής συχνότητας τμήματα της λύσης (οι υψηλής συχνότητας συνιστώσες εμπεριέχουν υψηλά σφάλματα). Δεδομένου ότι η ομαλοποιημένη λύση εμπεριέχει κυρίως χαμηλής συχνότητας συνιστώσες, είναι ενδεχομένως δυνατή η εκ των προτέρων δημιουργία και χρήση μιας βάσης διανυσμάτων  $w_1, w_2, \dots, w_k$ , τα οποία θα έχουν τα ίδια χαρακτηριστικά με τα ιδιάζοντα διανύσματα, δηλαδή να κυριαρχούνται από χαμηλής συχνότητας συνιστώσες [28].

Έστω λοιπόν ότι έχει επιλεγθεί μία κατάλληλη βάση διανυσμάτων, η οποία δομεί ένα υπόχωρο χαμηλής διάστασης:

$$W_k = (w_1, w_2, \dots, w_k) \in R^{n \times k} \quad (5.84)$$

Εάν το προς επίλυση πρόβλημα διατυπωθεί ως πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων τότε μπορεί να περιγραφεί από την ακόλουθη σχέση:

$$\min \|Ax - b\|_2 \quad \mu\epsilon \quad x \in \text{span}\{w_1, w_2, \dots, w_k\} \quad (5.85)$$

Επαναδιατυπώνοντας το παραπάνω πρόβλημα εισάγοντας έναν νέο άγνωστο της μορφής  $x = W_k y, y \in R^k$  οδηγούμαστε σε ένα νέο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων (συναρτήσει του νέου αγνώστου) της μορφής:

$$x^{(k)} = W_k y^{(k)}, \quad y^{(k)} = \arg \min_y \|(A W_k) y - b\|_2 \quad (5.86)$$

Με βάση την ανωτέρω διατύπωση, μπορεί κανείς να ισχυριστεί ότι το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων ως προς  $y$ :  $\|(A \cdot W_k) y - b\|_2$  αποτελεί πρόβλημα προβολής γιατί προκύπτει προβάλλοντας το αρχικό πρόβλημα στον υπόχωρο  $k$ -διάστασης  $\text{span}\{w_1, \dots, w_k\}$ . Μάλιστα, αν το  $k$  είναι επαρκώς μεγάλο, τότε δύναται να υπολογιστεί αναλυτικά ο πίνακας:

$$A W_k \in R^{n \times k} \quad (5.87)$$

και στη συνέχεια να λυθεί το πρόβλημα προβολής (πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων ως προς  $y$ ).

Εάν ορίσουμε ως  $W_k$  τον υπόχωρο ο οποίος δομείται από τα  $k$  πρώτα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα ( $W_k = (v_1, \dots, v_k)$ ) θα δείξουμε ότι η μέθοδος TSVD αποτελεί μία ειδική περίπτωση μεθόδου προβολής όπως αναφέραμε και στην αρχή της παραγράφου.

Ειδικότερα λοιπόν κάνοντας χρήση του SVD του πίνακα  $A$  και του γεγονότος ότι τα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα έχουν ορθοκανονικές στήλες, το πρόβλημα προβολής μπορεί σύμφωνα με τη σχέση (5.86) να λάβει τη μορφή:

$$\begin{aligned} \|(AW_k)y - b\|_2 &= \|U\Sigma V^T W_k y - b\|_2 = \|U\Sigma V^T V y - b\|_2 = \left\| U \Sigma \begin{pmatrix} I_k \\ 0 \end{pmatrix} y - b \right\|_2 = \\ &= \left\| \begin{pmatrix} | & & | \\ u_1 & \cdots & u_k \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{pmatrix} y - b \right\|_2 \end{aligned} \quad (5.88)$$

απ' όπου προκύπτει άμεσα ότι τα στοιχεία του  $y^{(k)}$  είναι της μορφής  $y_i^{(k)} = \frac{u_i^T b}{\sigma_i}$  και

κατ' επέκταση η λύση προβολής είναι η ακόλουθη:

$$x^{(k)} = W_k y^{(k)} = (v_1, v_2, \dots, v_k) \cdot y^{(k)} \quad (5.89)$$

Παρατηρείται επομένως ότι η λύση που δίνεται από τη σχέση (5.89) ταυτίζεται με τη λύση της μεθόδου TSVD και μπορεί επομένως κανείς να ισχυριστεί ότι η TSVD αποτελεί ειδική περίπτωση μεθόδου προβολής πάνω στον υπόχωρο  $\text{span}\{v_1, \dots, v_k\}$ .

Ολοκληρώνοντας την παρουσίαση των μεθόδων προβολής, θα πρέπει να τονιστεί ότι αν η προς υπολογισμό λύση έχει κάποια γενικά χαρακτηριστικά, γνωστά εκ των προτέρων, τότε δύναται να αξιοποιηθεί το γεγονός αυτό και να επιλεγθούν διανύσματα βάσης με τις ανάλογες ιδιότητες προκειμένου να παραχθεί μία προσεγγιστική λύση με κατά το δυνατό μικρότερο σφάλμα. Γίνεται εύκολα αντιληπτό πως το σημαντικότερο πλεονέκτημα των μεθόδων προβολής είναι ότι με μία κατάλληλα επιλεγμένη βάση διανυσμάτων οι απαιτούμενοι υπολογισμοί μπορούν να εκτελεστούν ταχύτατα. Από την άλλη, το κυριότερο μειονέκτημα αυτής της προσέγγισης είναι ότι η εν λόγω βάση διανυσμάτων δεν μπορεί να είναι πάντα προσαρμοσμένη στο προς επίλυση πρόβλημα,



ενώ σε μεγάλης κλίμακας υπολογισμούς οι εν λόγω μέθοδοι καθίστανται πρακτικά ανεφάρμοστες.

### 5.5.3. Μέθοδοι Υπόχωρου Krylov

Η βασική ιδέα των μεθόδων αυτών είναι η αξιοποίηση ενός κατάλληλου υποχώρου Krylov διάστασης  $k$ , ο οποίος έχει μια σειρά από επιθυμητές ιδιότητες, εκφράζεται συναρτήσει των  $A$  και  $b$  και ορίζεται ως εξής:

$$K_k \equiv \text{span} \left\{ A^T b, (A^T A) A^T b, (A^T A)^2 A^T b, \dots, (A^T A)^{k-1} A^T b \right\} \quad (5.90)$$

Αν και ο υπόχωρος που ορίζεται από την παραπάνω σχέση εμπεριέχει σημαντικές πληροφορίες για το πρόβλημα και μπορεί να διαδραματίσει το ρόλο του υποχώρου  $W_k$  όπως ορίστηκε στη μέθοδο Προβολής της προηγούμενης παραγράφου, ωστόσο εμπεριέχει διανύσματα τα οποία δε διευκολύνουν τους υπολογισμούς στην πράξη. Για να επιτευχθεί μία καλύτερη μαθηματική αναπαράσταση ορθοκανονικοποιούνται τα διανύσματα του  $K_k$  ως εξής:

$$\left\{ \begin{array}{l} w_1 \leftarrow A^T b; \quad w_1 \leftarrow \frac{w_1}{\|w_1\|_2}; \\ w_2 \leftarrow A^T A w_1; \quad w_2 \leftarrow w_2 - w_1^T w_2 w_1; \quad w_2 \leftarrow \frac{w_2}{\|w_2\|_2}; \\ w_3 \leftarrow A^T A w_2; \quad w_3 \leftarrow w_3 - w_1^T w_3 w_1; \quad w_3 \leftarrow w_3 - w_2^T w_3 w_2; \quad w_3 \leftarrow \frac{w_3}{\|w_3\|_2}; \end{array} \right. \quad (5.91)$$

Υποθέτοντας ότι ισχύει η διακριτή συνθήκη Picard, η ανωτέρω βάση διανυσμάτων περιγράφει επαρκώς την πληροφορία που εμπεριέχεται στα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα  $v_1, v_2, \dots$ . Τα διανύσματα  $A^T b, (A^T A) A^T b, (A^T A)^2 A^T b, \dots, (A^T A)^{k-1} A^T b$ , τα οποία ορίζουν τον υπόχωρο Krylov, κυριαρχούνται ολοένα και περισσότερο από τις συνιστώσες του  $v_1$ , ενώ τα ορθοκανονικά διανύσματα της βάσης  $w_1, \dots, w_k$  έχουν διαφορετική συμπεριφορά, αφού η πληροφορία που εμπεριέχουν κυριαρχείται από μικρό αριθμό ιδιάζόντων διανυσμάτων  $v_j$  με δείκτη  $j \approx i$ . Συνεπώς, ο υπόχωρος Krylov αποτελεί μία καλή περίπτωση υποχώρου για να χρησιμοποιηθεί στις μεθόδους προβολής, υπό την προϋπόθεση βέβαια ότι τα προς επίλυση προβλήματα μπορούν να διατυπωθούν ως

ασθενώς ορισμένα αντίστροφα προβλήματα και ικανοποιούν τη διακριτή συνθήκη Picard.

Εάν επιπλέον εφαρμοστεί η διαδικασία τριδιαγωνοποίησης Lanczos (αλγόριθμος Lanczos) ως μία εναλλακτική μέθοδος παραγωγής του πίνακα  $W_k$  τότε εφαρμόζοντας την εν λόγω διαδικασία τριδιαγωνοποίησης στον πίνακα  $A^T A$  με αρχικό διάνυσμα  $A^T b$ , μετά από  $k$  επαναλήψεις παράγεται ο πίνακας  $W_k = (w_1, \dots, w_k)$  καθώς και ένας συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας  $T_k$ , για τους οποίους ισχύει:

$$W_k^T A^T A W_k = T_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.92)$$

Ο αλγόριθμος Lanczos ενδείκνυται για τον υπολογισμό μεγάλων ιδιοτιμών και των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων σε περιπτώσεις μεγάλων αραιών πινάκων και ως εκ τούτου μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των ορθοκανονικών διανυσμάτων του υποχώρου Krylov (Hansen, 2010). Επιπλέον, ο αλγόριθμος Lanczos θα μπορούσε να εφαρμοστεί για την επίλυση του συστήματος  $A^T A x = A^T b$  το οποίο σχετίζεται άμεσα με το μη κανονικοποιημένο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων  $\min_x \|Ax - b\|_2$ , με αρχικό διάνυσμα το μηδενικό. Στην περίπτωση αυτή ο αλγόριθμος επίλυσης είναι γνωστός ως Conjugate Gradient (CG) και αποτελεί μία από τις δημοφιλέστερες μεθόδους επίλυσης. Πρόκειται ουσιαστικά για τη λύση του προβλήματος προβολής με άπειρη ακρίβεια θέτοντας  $W_k = K_k$ . Μία από τις πλέον επιθυμητές ιδιότητες του αλγόριθμου CG είναι ότι υπολογίζει αυτή τη λύση χωρίς να ορθοκανονικοποιεί, ενώ υπολογιστικά δεν απαιτείται η αποθήκευση όλης της βάσης διανυσμάτων  $(w_1, w_2, \dots)$ .

### Αλγόριθμος CGLS

Μία από τις πλέον ευσταθείς παραλλαγές του αλγορίθμου CG είναι ο αλγόριθμος CGLS (Conjugate Gradient Least Squares) (Paige and Saunders, 1982). Σε αντίθεση με τις διατυπώσεις των μεθόδων προβολής που αναπτύχθηκαν στην προηγούμενη ενότητα, η μέθοδος CGLS δίνει τη δυνατότητα περιγραφής της λύσης  $x^{(k)}$  ως φιλτραρισμένο ανάπτυγμα SVD. Δεδομένου ότι η λύση  $x^{(k)}$  βρίσκεται στον υποχώρο Krylov  $K_k$ , μπορεί να διατυπωθεί ως γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων βάσης Krylov. Συνεπώς, υπάρχουν σταθερές  $c_1, c_2, \dots, c_k$  τέτοιες ώστε:

$$x^{(k)} = c_1 A^T b + c_2 (A^T A) A^T b + \dots + c_k (A^T A)^{k-1} A^T b \quad (5.93)$$

Εισάγοντας το ανάπτυγμα SVD του  $A$  υπολογίζουμε την ποσότητα  $A^T A$  ως εξής:

$$A^T A = V \Sigma U^T U \Sigma V^T = V \Sigma^2 V^T \quad (5.94)$$

και ακολούθως προκύπτει η σχέση:

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= (c_1 + c_2 V \Sigma^2 V^T + c_3 V \Sigma^4 V^T + \dots + c_k V \Sigma^{2(k-1)} V^T) V \Sigma U^T b = \\ &= V (c_1 \Sigma^2 + c_2 \Sigma^4 + c_3 \Sigma^6 + \dots + c_k \Sigma^{2k}) \Sigma^{-1} U^T b \\ &= V \Phi^{(k)} \Sigma^{-1} U^T b \end{aligned} \quad (5.95)$$

όπου:

$$\Phi^{(k)} = \text{diag}(\phi_1^{(k)}, \dots, \phi_n^{(k)}) \quad (5.96)$$

έναν διαγώνιο πίνακα αποτελούμενο από τους φιλτραρισμένους CGLS παράγοντες της μορφής:

$$\phi_i^{(k)} = c_1 \sigma_i^2 + c_2 \sigma_i^4 + c_3 \sigma_i^6 + \dots + c_k \sigma_i^{2k}, i = 1, 2, \dots, n. \quad (5.97)$$

Αυτό επιβεβαιώνει ότι η CGLS λύση περιέχει φιλτραρισμένο ανάπτυγμα SVD καθώς επίσης και ότι οι φιλτραρισμένοι παράγοντες CGLS αποτελούν πολυώνυμο των ιδιζουσών τιμών, τα οποία δύναται να εκφραστούν με όρους των ιδιοτιμών του συμμετρικού τριδιαγώνιου πίνακα:

$$T_k = W_k^T A^T A W_k \quad . \quad (5.98)$$

## 6. Υλοποίηση Μεθόδων – Εφαρμογές

### 6.1. Εφαρμογές

Στο προηγούμενο Κεφάλαιο της παρούσας μελέτης παρουσιάστηκαν οι επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης των διακριτών αντιστρόφων προβλημάτων. Με την αναφορά και στις τεχνικές αυτές πλέον δύναται να οριστούν τα προβλήματα προς εξέταση και η επίλυση αυτών που αποτελεί το πειραματικό μέρος της μελέτης. Στο παρόν κεφάλαιο αντιμετωπίζονται υπολογιστικά δύο εφαρμογές. Ειδικότερα, έχουμε:

1. Εφαρμογή η οποία επιλύει ένα δοκιμαστικό (test) πρόβλημα (baart) διακριτοποίησης μιας ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm 1<sup>ου</sup> είδους κάνοντας χρήση τριών επαναληπτικών μεθόδων ομαλοποίησης (Kaczmarz, Conjugate Gradient και LSQR). Το συγκεκριμένο πρόβλημα διακριτοποίησης διατυπώθηκε από τον M. L. Baart το 1982 [61] και φέρει το όνομά του.
2. Εφαρμογή η οποία:
  - i) επιδιώκει το “φιλτράρισμα” μιας εικόνας-δείγματος, η οποία παράγεται μέσω της συνάρτησης (blur) με χρήση της επαναληπτικής μεθόδου CGLS, και
  - ii) συγκρίνει τις ταχύτητες σύγκλισης των μεθόδων CGLS και TSVD για ένα δεύτερο δοκιμαστικό (test) πρόβλημα (deriv2).

Οι προαναφερθείσες εφαρμογές έχουν υλοποιηθεί σε Matlab και στηρίζονται σε ρουτίνες του έχουν αναπτυχθεί από τον Per Christian Hansen.

## 6.2. Δοκιμαστικό Πρόβλημα “Baart”

Το πρόβλημα που έχει επιλεγεί, προς επίδειξη του τρόπου λειτουργίας των επαναληπτικών μεθόδων, είναι η ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους με πυρήνα  $K(s,t) = \exp(s \cos(t))$  και συνάρτηση  $g$  της μορφής  $g(s) = 2 \sinh(s)/s$  με διαστήματα ολοκλήρωσης  $[0, \pi/2]$  για το  $s$  και  $[0, \pi]$  για το  $t$ . Η ακριβής λύση του προβλήματος είναι η  $f(t) = \sin(t)$ . Στο δεξί μέλος του ανωτέρω επιλεγθέντος προβλήματος προστίθεται λευκός θόρυβος. Για την υπολογιστική επίλυση του προβλήματος, πραγματοποιείται αρχικά διακριτοποίηση με τη μέθοδο Galerkin με χρήση βάσης ορθοκανονικών συναρτήσεων, οπότε και προκύπτει ένα γραμμικό σύστημα της μορφής  $Ax = b$  προς επίλυση. Εν συνεχεία, πραγματοποιείται παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών (SVD) του πίνακα συντελεστών  $A$  και υπολογισμός της διακριτής συνθήκης Picard για δεδομένα με θόρυβο και χωρίς θόρυβο αντίστοιχα. Τέλος, επιλύεται το test πρόβλημα με χρήση των επαναληπτικών μεθόδων Art (Kaczmarz), Conjugate Gradient, και LSQR και υπολογίζεται-απεικονίζεται η καμπύλη  $L$  μέσω γραφημάτων και για τις τρεις υπολογισθείσες λύσεις

### 6.2.1. Test Πρόβλημα και Μέθοδοι Επίλυσης

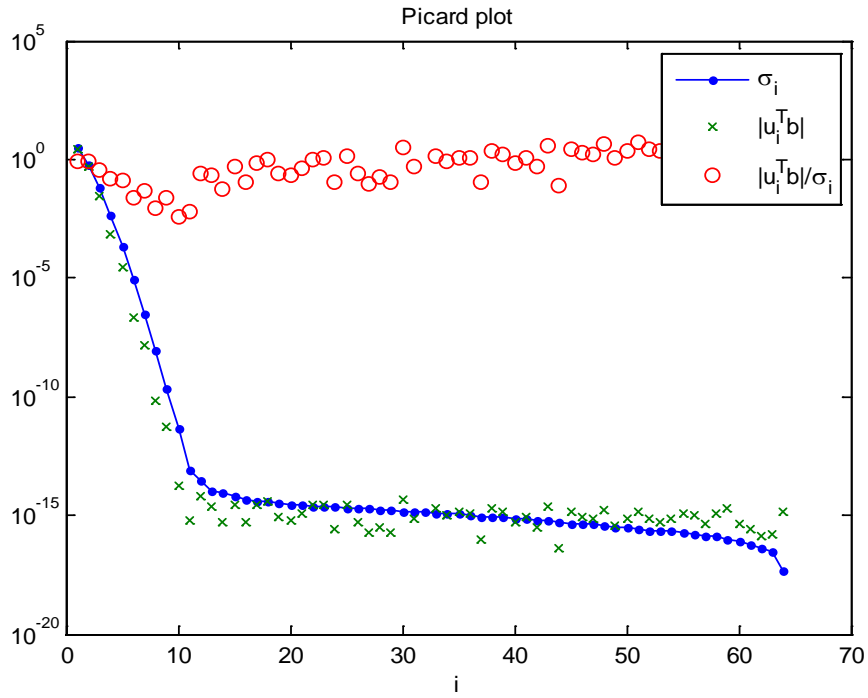
Το test πρόβλημα που έχει επιλεγεί, όπως προαναφέρθηκε, είναι η ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους  $\int_0^{\pi} \exp(s \cos(t)) f(t) dt = g(s), s \in [0, \pi / 2]$ .

Θα πρέπει να τονιστεί ότι για να εφαρμοστούν οι ρουτίνες επαναληπτικής επίλυσης του test προβλήματος, είναι απαραίτητο να έχει προηγηθεί διακριτοποίηση του προβλήματος και παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών (SVD). Το διακριτό πρόβλημα προκύπτει με τη μέθοδο Galerkin και οι υπολογισμοί γίνονται σε 64 σημεία (διάσταση πίνακα συντελεστών των αγνώστων  $64 \times 64$ ). Για τον υπολογισμό της Συνθήκης Picard υπολογίζονται και αποτυπώνονται γραφικά οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ , οι απόλυτες τιμές των συντελεστών Fourier  $|u_i^T b|$  καθώς και η καμπύλη των συντελεστών της λύσης  $\frac{|u_i^T b|}{\sigma_i}$ . Η καμπύλη αυτή, ομαλοποιείται με τη βοήθεια του γεωμετρικού μέσου σε  $2d+1$  σημεία.

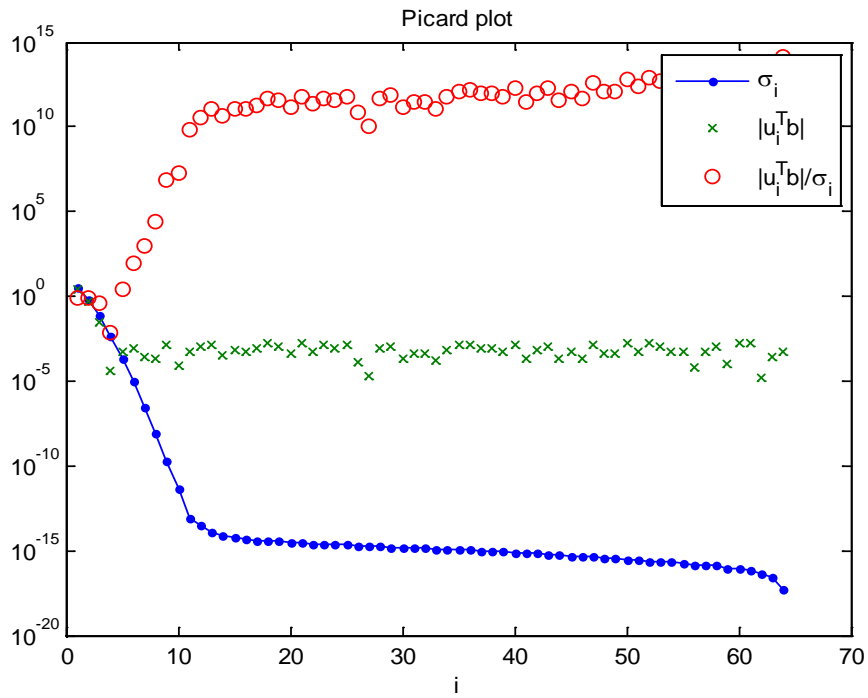
Οι τρεις υλοποιηθείσες επαναληπτικές μέθοδοι (Kaczmarz, Conjugate Gradient μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων) εκτελούν 50 επαναλήψεις πάνω στο διακριτοποιημένο πρόβλημα διάστασης  $n = 64$  που έχει προκύψει από τη διακριτοποίηση Galerkin. Ο αριθμός επαναλήψεων είναι επαρκής για να επιτευχθεί σύγκλιση με ικανοποιητική ακρίβεια και να είναι εφικτή η μελέτη της κάθε μεθόδου σχετικά με την ταχύτητα σύγκλισης, την επιτευχθείσα ακρίβεια, κ.λπ. Τέλος, μετά την προσεγγιστική επίλυση του προβλήματος, πραγματοποιείται υπολογισμός και γραφική αναπαράσταση της Καμπύλης  $L$ , με τη βοήθεια της οποίας μπορεί να εντοπιστεί η λύση του προβλήματος.

### 6.2.2. Αποτελέσματα Επίλυσης – Σχολιασμός

Στα Σχήματα 6.1 και 6.2 παρουσιάζεται η γραφική αναπαράσταση της Συνθήκη Picard χωρίς θόρυβο και με θόρυβο αντίστοιχα. Μπορεί εύκολα να παρατηρήσει κανείς ότι και για τα δύο προβλήματα η Συνθήκη Picard ικανοποιείται για τους συντελεστές που αντιστοιχούν στις μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές, ενώ η επίπτωση του θορύβου γίνεται εμφανής για τις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές.

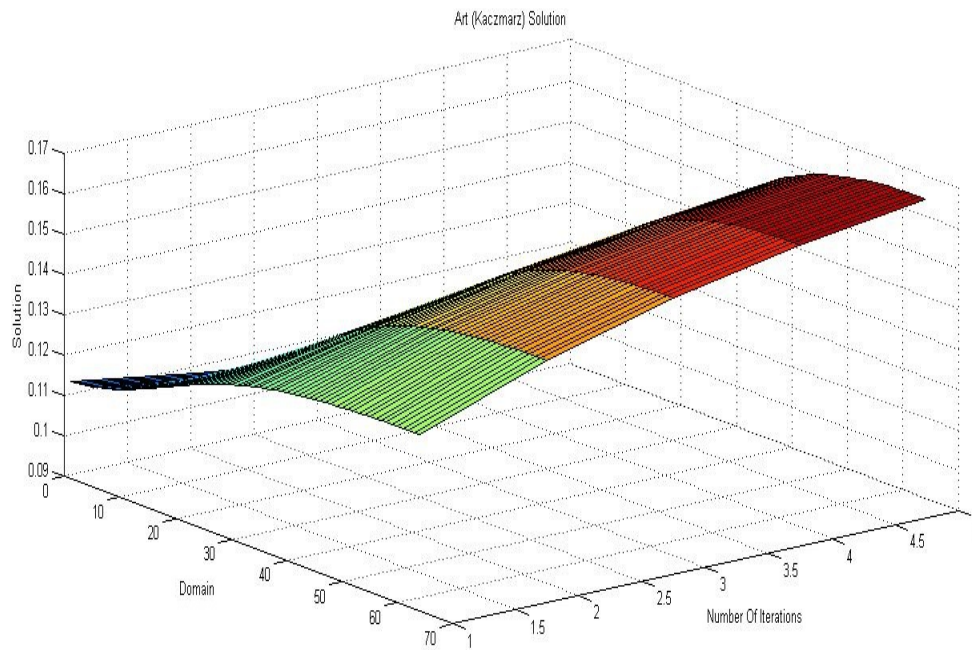


*Σχήμα 6.1: Συνθήκη Picard για το Test Πρόβλημα χωρίς Θόρυβο*



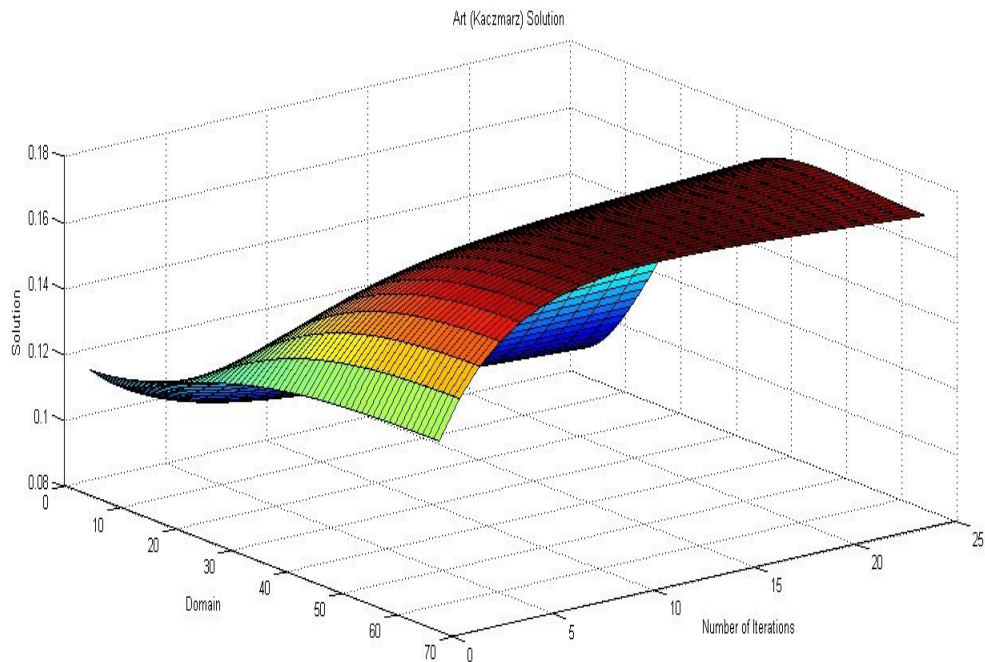
*Σχήμα 6.2: Συνθήκη Picard για το Test Πρόβλημα με Θόρυβο*

Στα Σχήματα 6.3-6.11 απεικονίζονται οι λύσεις του προβλήματος με χρήση των επαναληπτικών μεθόδων Kaczmarz, Cojugate Gradient και Ελαχίστων Τετραγώνων, συναρτήσει του αριθμού επαναλήψεων (5,25,50). Είναι εμφανές ότι η επιτευχθείσα ακρίβεια της λύσης επηρεάζεται άμεσα από τον αριθμό των επαναλήψεων και στις τρεις μεθόδους. Ειδικότερα, η ακρίβεια της λύσης βελτιώνεται ταχύτατα για τη μέθοδο Kaczmarz κατά τη διάρκεια των πρώτων επαναλήψεων ωστόσο στις επόμενες επαναλήψεις δεν διακρίνεται κάποια βελτίωση γεγονός που επιβεβαιώνει τη θεωρία. Αντίθετα, σημαντική βελτίωση παρατηρείται για τις δύο τελευταίες μεθόδους καθώς ο αριθμός των επαναλήψεων αυξάνει. Τέλος, οι Καμπύλες L για τις λύσεις των τριών μεθόδων απεικονίζονται στα Σχήματα 6.12 (Μέθοδος Kaczmarz), 6.13 (Μέθοδος Cojugate Gradient), και 6.14 (Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων). Προκύπτει άμεσα και σε αυτή την περίπτωση ότι η συμπεριφορά των δύο τελευταίων μεθόδων βελτιώνεται ταχύτατα μετά από ένα αριθμό αρχικών επαναλήψεων.

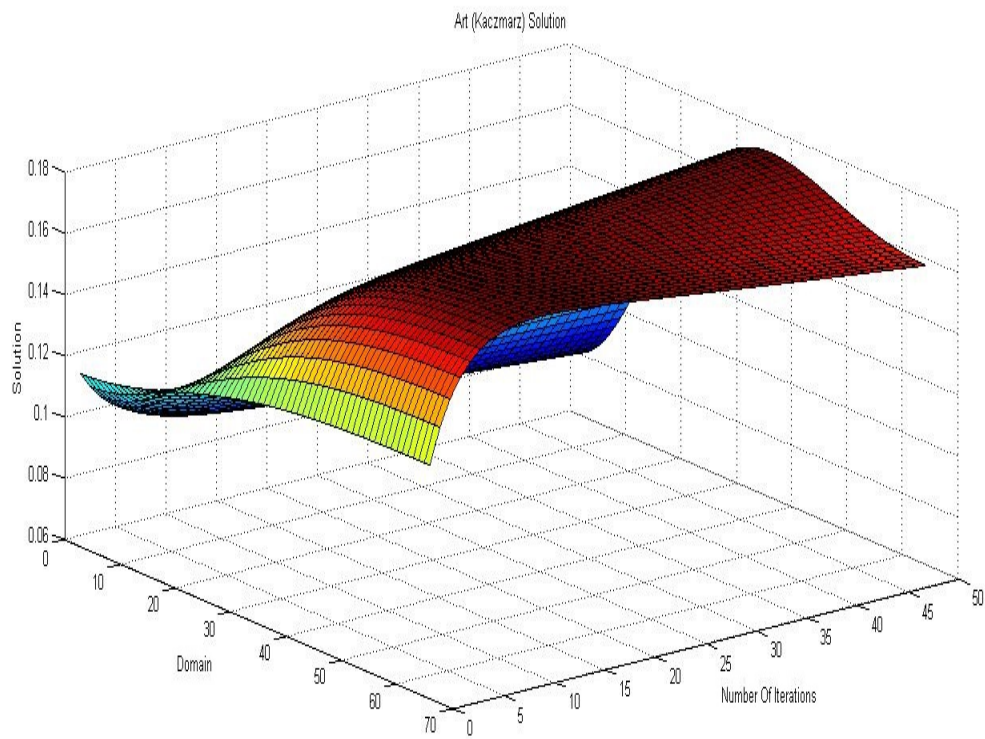


**Σχήμα 6.3:** Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Kaczmarz μετά από 5 επαναλήψεις.

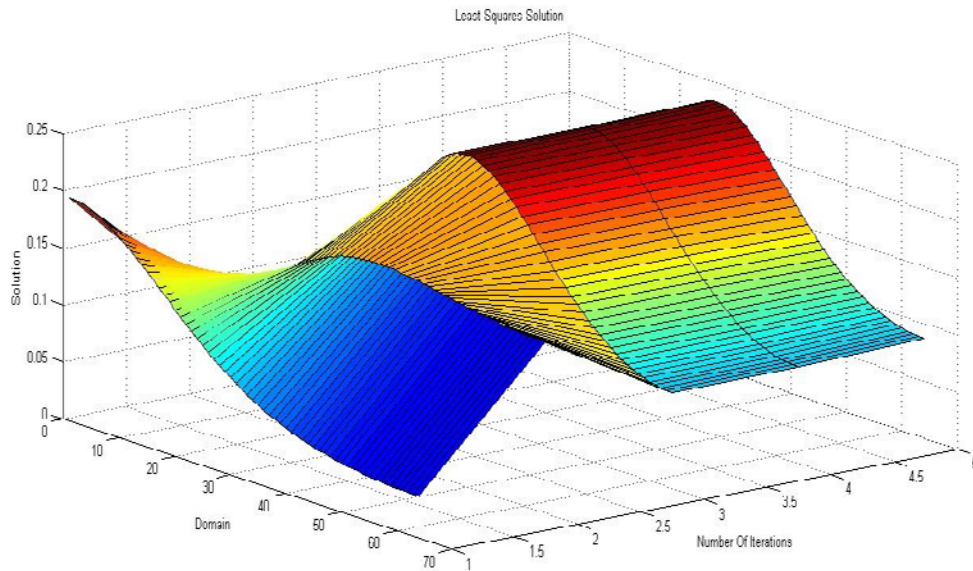




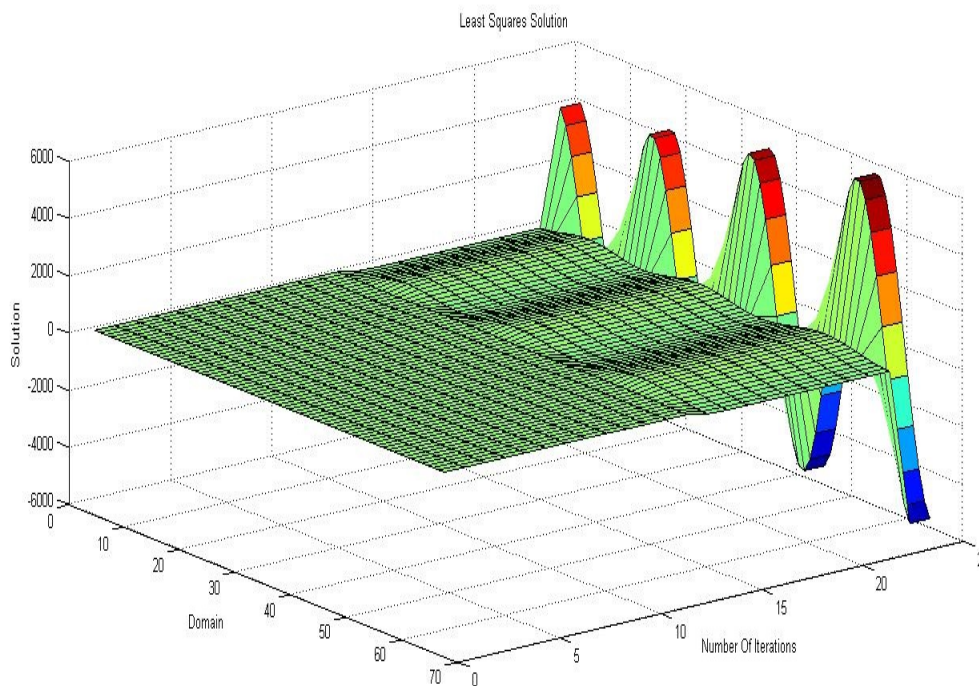
*Σχήμα 6.4: Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Kaczmarz μετά από 25 επαναλήψεις.*



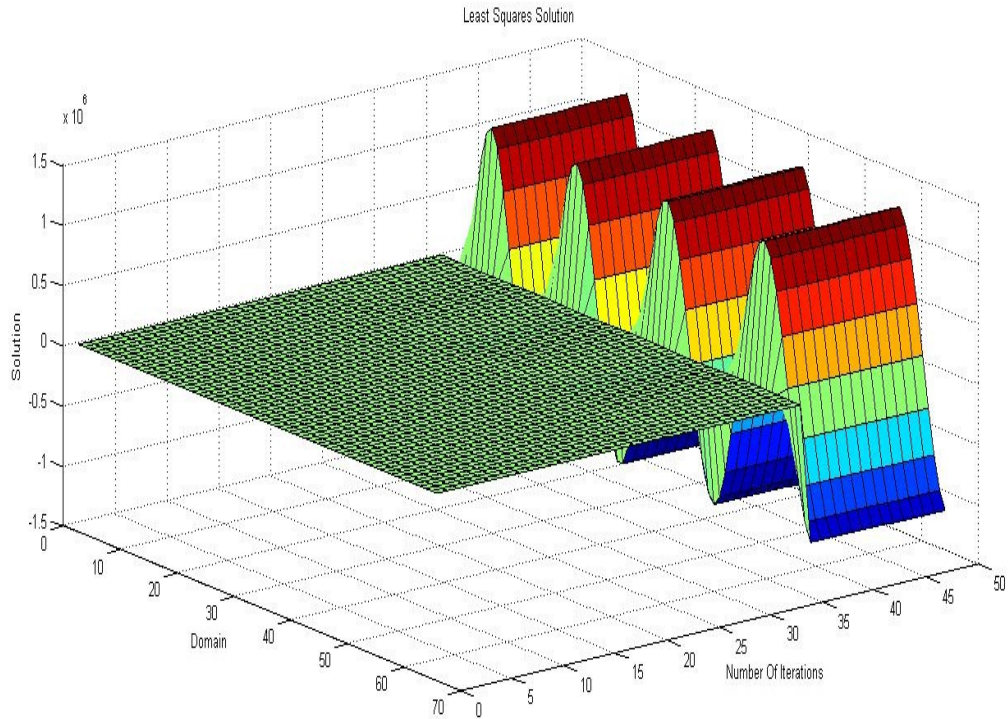
*Σχήμα 6.5: Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Kaczmarz μετά από 50 επαναλήψεις.*



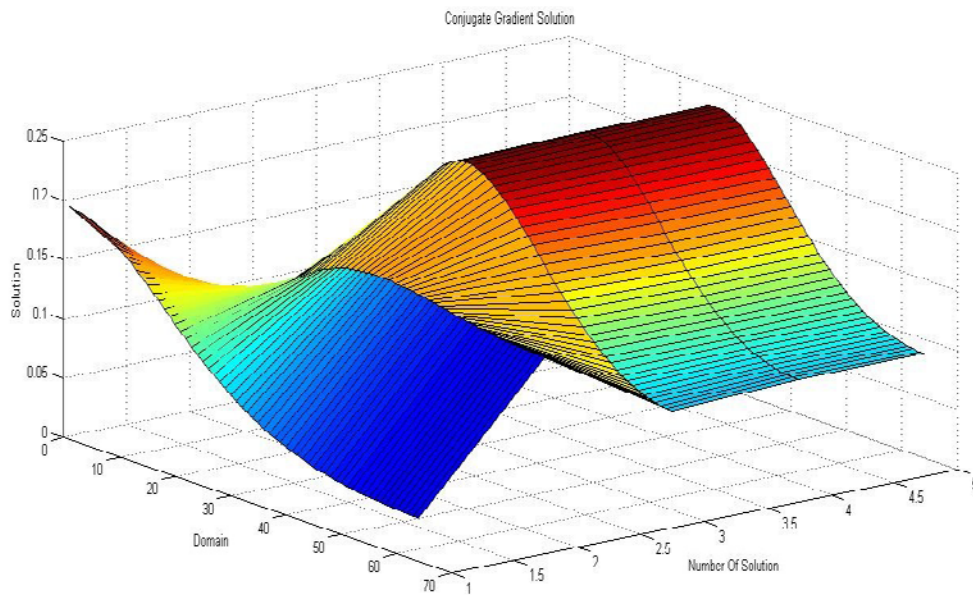
**Σχήμα 6.6:** Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Ελαχίστων Τετραγώνων μετά από 5 επαναλήψεις.



**Σχήμα 6.7:** Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Ελαχίστων Τετραγώνων μετά από 25 επαναλήψεις.

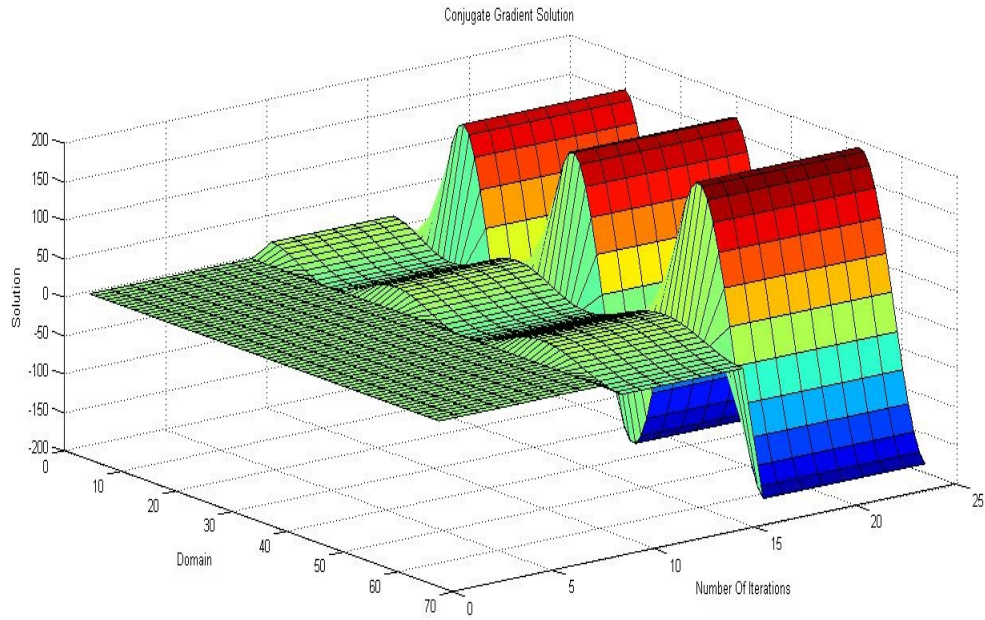


**Σχήμα 6.8:** Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Ελαχίστων Τετραγώνων μετά από 50 επαναλήψεις.

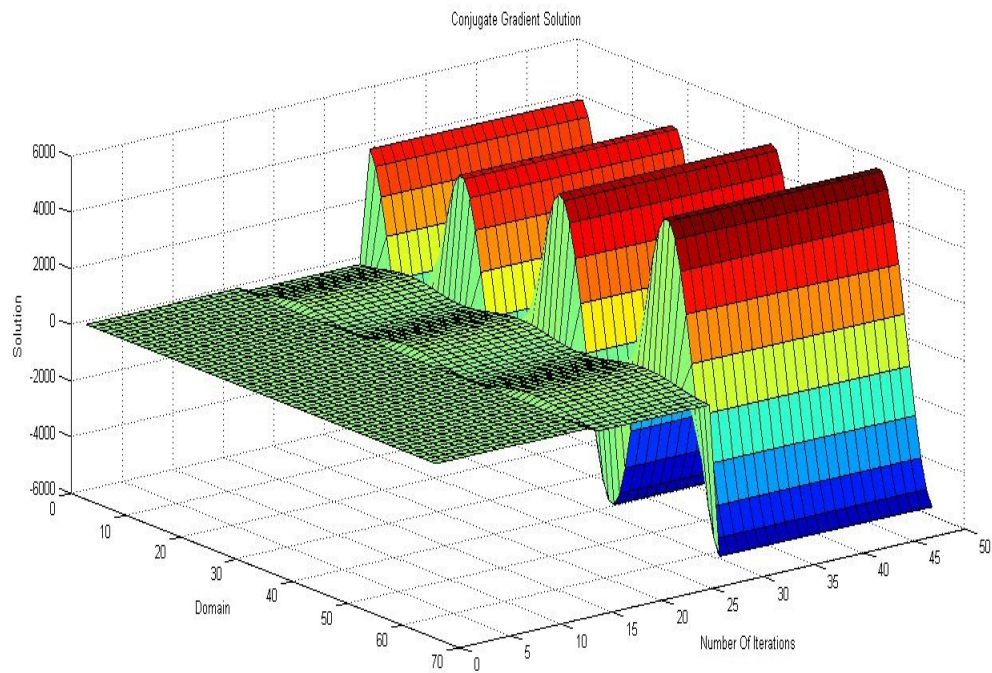


**Σχήμα 6.9:** Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Conjugate Gradient μετά από 5 επαναλήψεις.

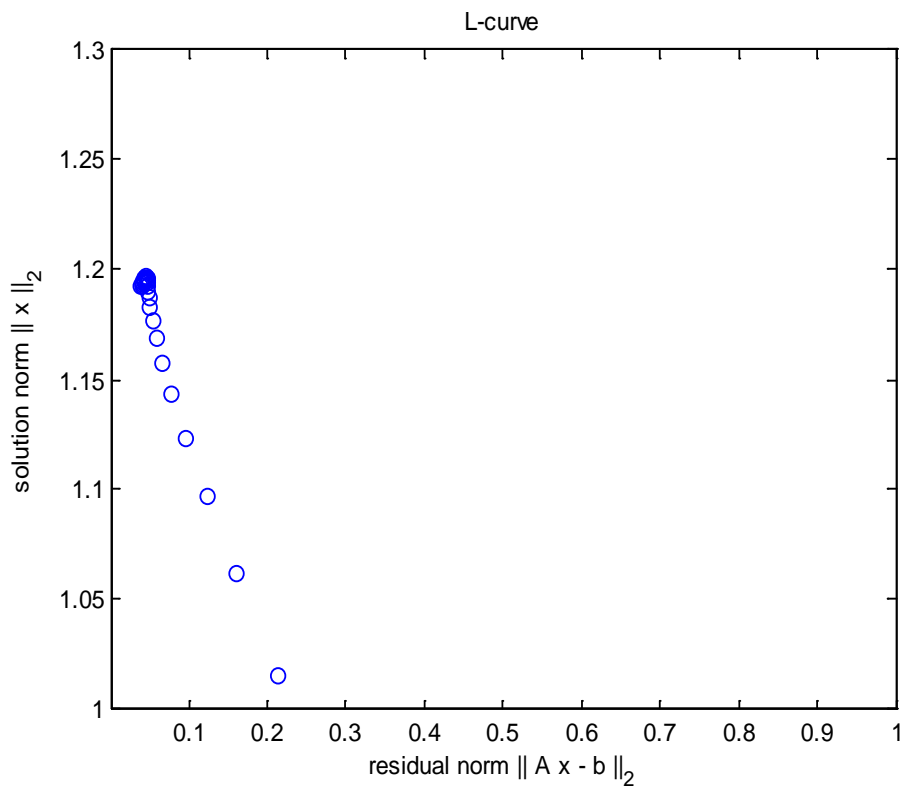




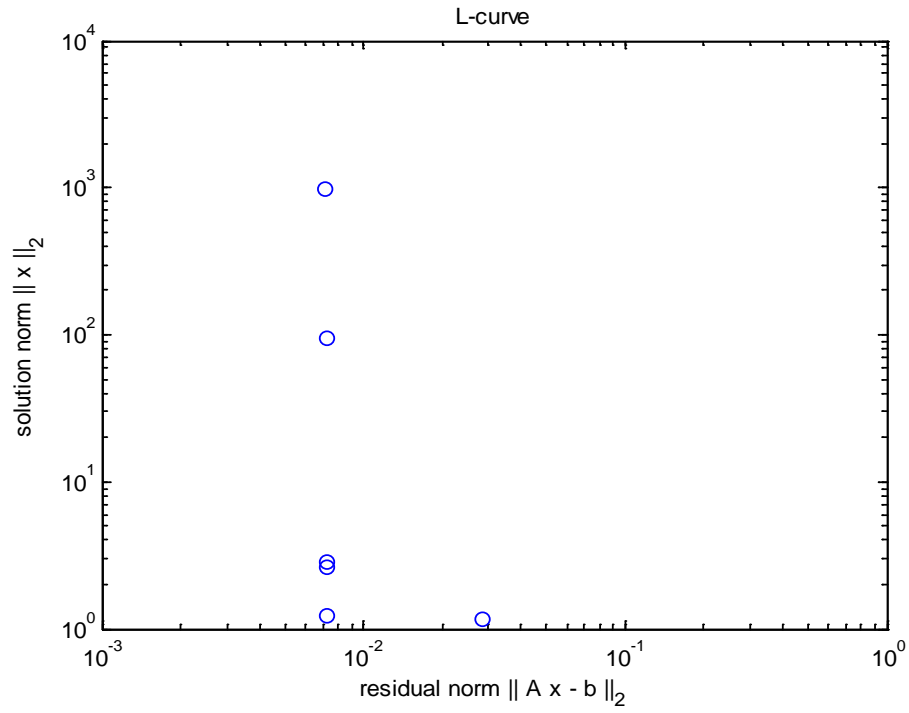
**Σχήμα 6.10:** Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Conjugate Gradient μετά από 25 επαναλήψεις.



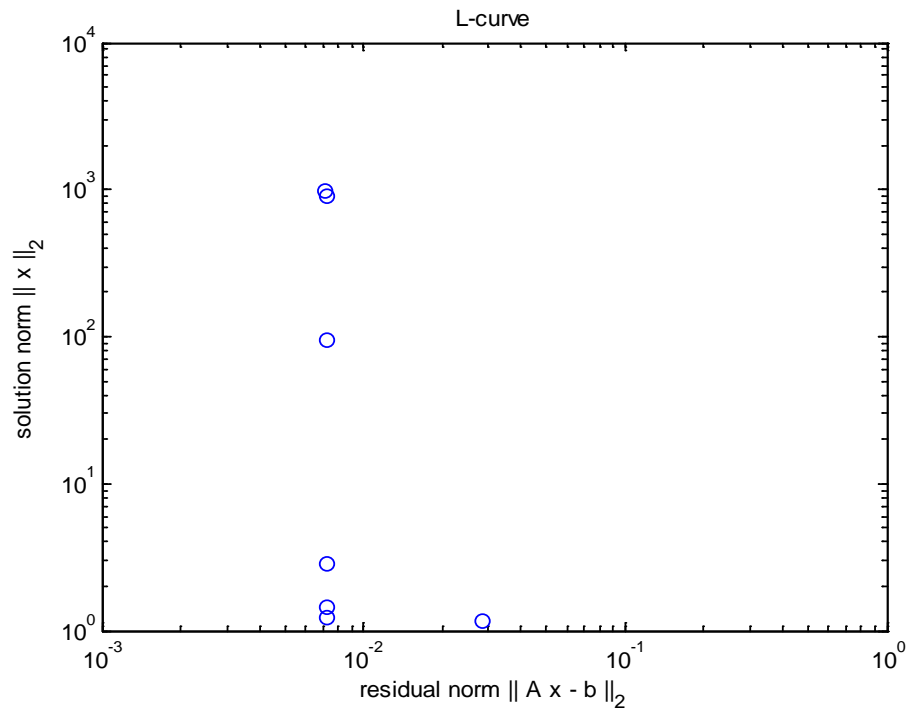
**Σχήμα 6.11:** Λύση του Test Προβλήματος με τη Μέθοδο Conjugate Gradient μετά από 50 επαναλήψεις.



**Σχήμα 6.12: Η Καμπύλη L για τη Μέθοδο Kaczmarz**



**Σχήμα 6.13:** Η Καμπύλη  $L$  για τη Μέθοδο Conjugate Gradient



**Σχήμα 6.14:** Η Καμπύλη  $L$  για τη Μέθοδο Ελαχίστων Τετραγώνων

### 6.3. Δοκιμαστικά Προβλήματα “Blur” & ”Deriv2”

Τα προβλήματα που έχουν επιλεγεί προς υλοποίηση και μελέτη στην παρούσα ενότητα είναι το πρόβλημα αποσαφήνισης εικόνας (image deblurring) και το δοκιμαστικό πρόβλημα (deriv2). Για την επίδειξη του τρόπου λειτουργίας του πρώτου προβλήματος χρησιμοποιείται μία απλή εικόνα – δείγμα η οποία παράγεται μέσω της συνάρτησης του Matlab (blur). Η προσεγγιστική επίλυση παράγει τη λύση γραμμικού συστήματος  $Ax = b$ , όπου ο πίνακας συντελεστών  $A$  και το δεξί μέλος  $b$  παράγονται από τη συνάρτηση του Matlab που μοντελοποιεί την προαναφερθείσα εικόνα-δείγμα. Ειδικότερα, ο πίνακας  $A$  είναι block Toeplitz διάστασης  $(N \times N) \times (N \times N)$  και μοντελοποιεί την «αλλοίωση» της εικόνας μετά την εφαρμογή συνάρτησης εξάπλωσης σημείου Gauss (Gaussian point-spread function), η οποία καθιστά το πρόβλημα κακώς τοποθετημένο.

Για τον υπολογισμό της προσεγγιστικής λύσης του προβλήματος χρησιμοποιείται διάσταση  $N = 64$ , ενώ ως μέθοδος επίλυσης έχει επιλεγεί η επαναληπτική μέθοδος CGLS, η οποία εκτελεί 100 επαναλήψεις, αριθμός επαρκής για να μελετηθεί η συμπεριφορά της και η ταχύτητα σύγκλισης. Επιπλέον, υπολογίζεται και αποτυπώνεται γραφικά η καμπύλη  $L$ , ενώ το πρόβλημα μελετάται και μετά την προσθήκη θορύβου στο δεξί μέλος, και ειδικότερα θορύβου της τάξεως  $\|e\|_2 / \|b\|_2 = 0.1$ .

Στη συνέχεια επιχειρείται σύγκριση της συμπεριφοράς των μεθόδων CGLS και TSVD πάνω σε ένα test πρόβλημα (deriv2) για το οποίο ο πίνακας των συντελεστών  $A$  προκύπτει από τον προσεγγιστικό υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου. Πρόκειται για ήπιου βαθμού κακώς τοποθετημένο πρόβλημα, το οποίο επί της ουσίας διακριτοποιεί την εξίσωση Fredholm πρώτου είδους με πυρήνα  $K$  τη συνάρτηση Green για τη δεύτερη παράγωγο:  $K(s, t) = s(t - 1)$  για  $s < t$  και  $K(s, t) = t(s - 1)$  για  $s \geq t$ . Η ακριβής λύση του προβλήματος αυτού είναι μια πριονωτή συνάρτηση στην οποία κάθε τέταρτο στοιχείο της παραγοντοποίησης ιδιάζουσων τιμών είναι μηδενικό.

Για την επίλυση του προβλήματος δοκιμάζονται (1) η μέθοδος CGLS (με και χωρίς επανορθοκανονικοποίηση) η οποία εκτελεί 16 επαναλήψεις και (2) η μέθοδος TSVD με την παράμετρο  $k$  να λαμβάνει τιμές από 1 έως 16. Το επίπεδο θορύβου στο δεξί μέλος του προσεγγιστικού προβλήματος έχει τεθεί ίσο με  $\|e\|_2 / \|b\|_2 = 10^{-5}$ .

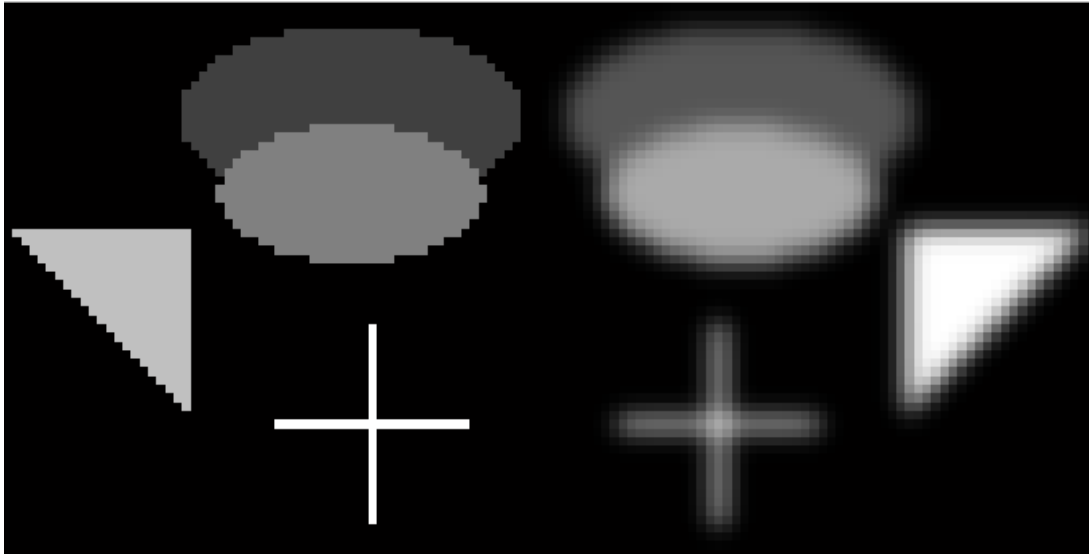
### 6.3.1. Προβλήματα Μοντέλα και Μέθοδοι Επίλυσης

Τα προβλήματα που έχουν επιλεγεί, όπως προαναφέρθηκε, είναι το πρόβλημα αποσαφήνισης εικόνας (image deblurring) και το πρόβλημα με λύση την «πριονωτή συνάρτηση» (sawtooth function). Στην ενότητα που ακολουθεί παρουσιάζονται και επεξηγούνται τα αποτελέσματα της εν λόγω εφαρμογής.



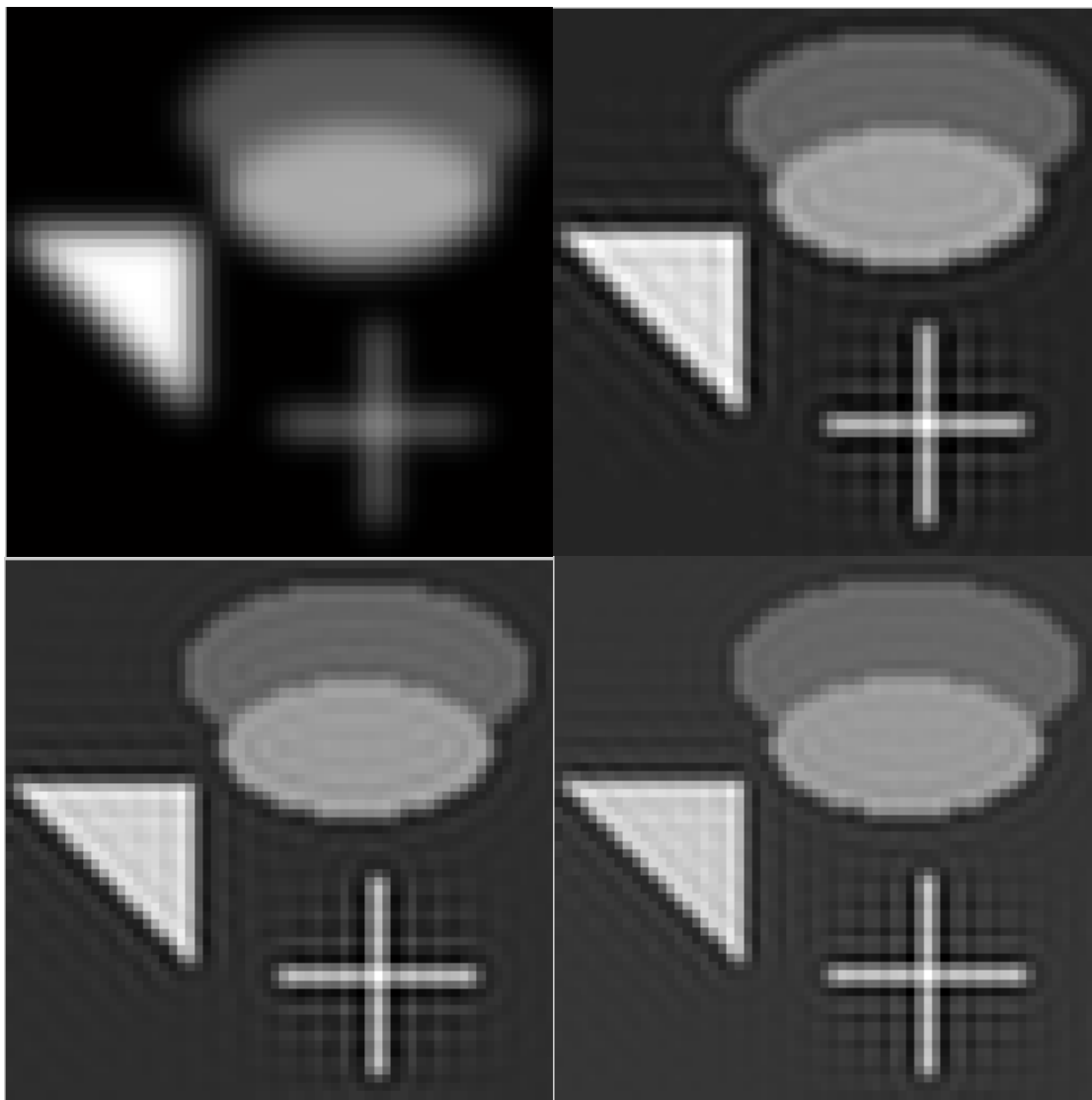
### 6.3.2. Αποτελέσματα Επίλυσης – Σχολιασμός

Το πρόβλημα αποσαφήνισης εικόνας (image deblurring) χρησιμοποιεί μία εικόνα – δείγμα, η οποία παράγεται από τη συνάρτηση του Matlab “blur()”. Στο Σχήμα 6.15 απεικονίζεται η εν λόγω εικόνα στην ακριβή (αποσαφηνισμένη) μορφή της (sharp) και στη θολή, μη αποσαφηνισμένη (blurred) μορφή της.



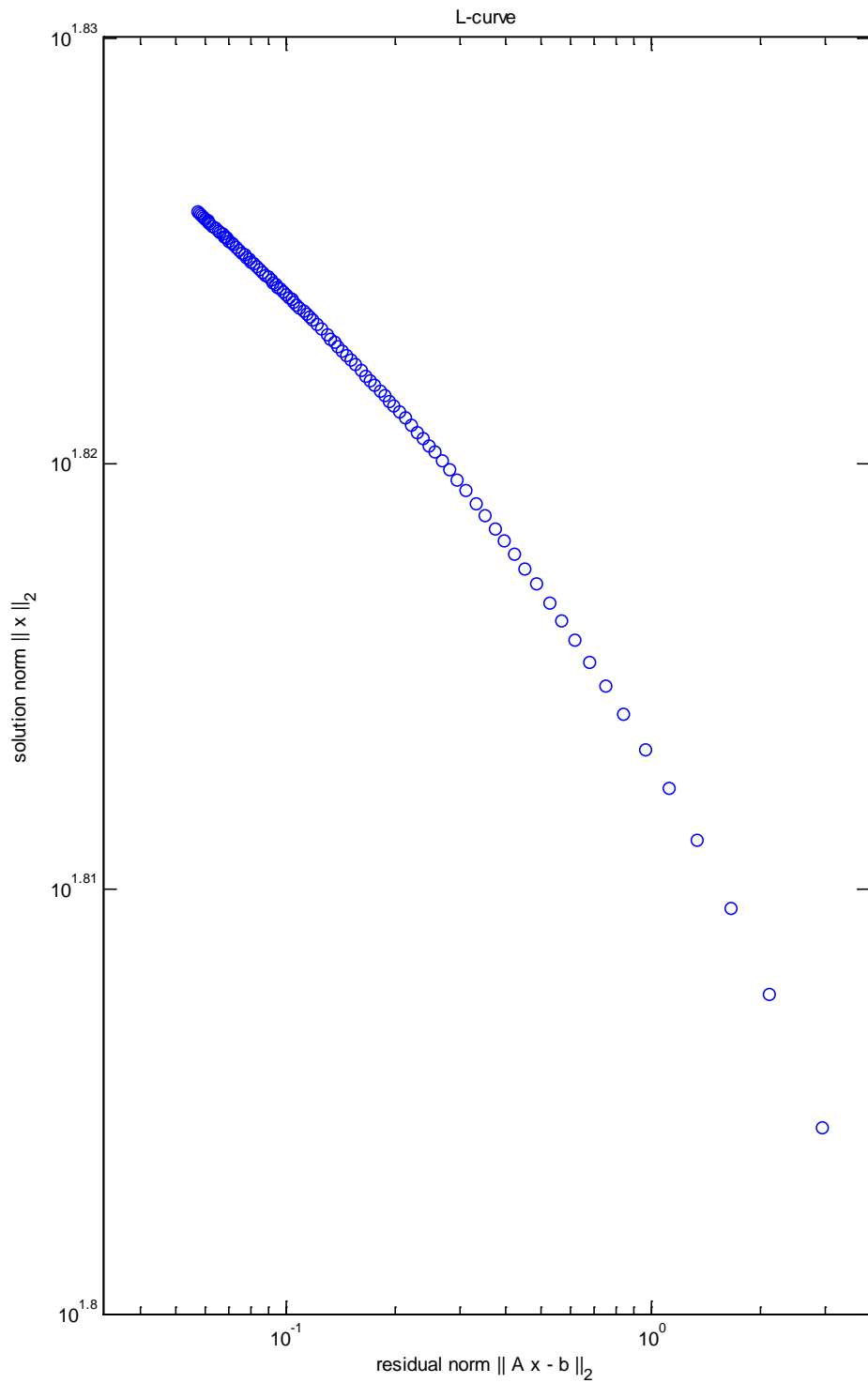
*Σχήμα 6.15: Αποσαφηνισμένη και Θολή Εικόνα του Παραδείγματος - Μοντέλου Αποσαφήνισης Εικόνας*

Στο Σχήμα 6.16 απεικονίζονται αποσαφηνισμένα (deblurred) στιγμιότυπα της εικόνας – δείγματος, τα οποία προκύπτουν μετά την εφαρμογή της μεθόδου CGLS για διαφορετικούς αριθμούς επαναλήψεων. Παρατηρεί εύκολα κανείς ότι όσο αυξάνεται ο αριθμός επαναλήψεων η εικόνα πλησιάζει περισσότερο στην αποσαφηνισμένη μορφή της, αν και μετά από ένα αριθμό επαναλήψεων η βελτίωση είναι μικρή.

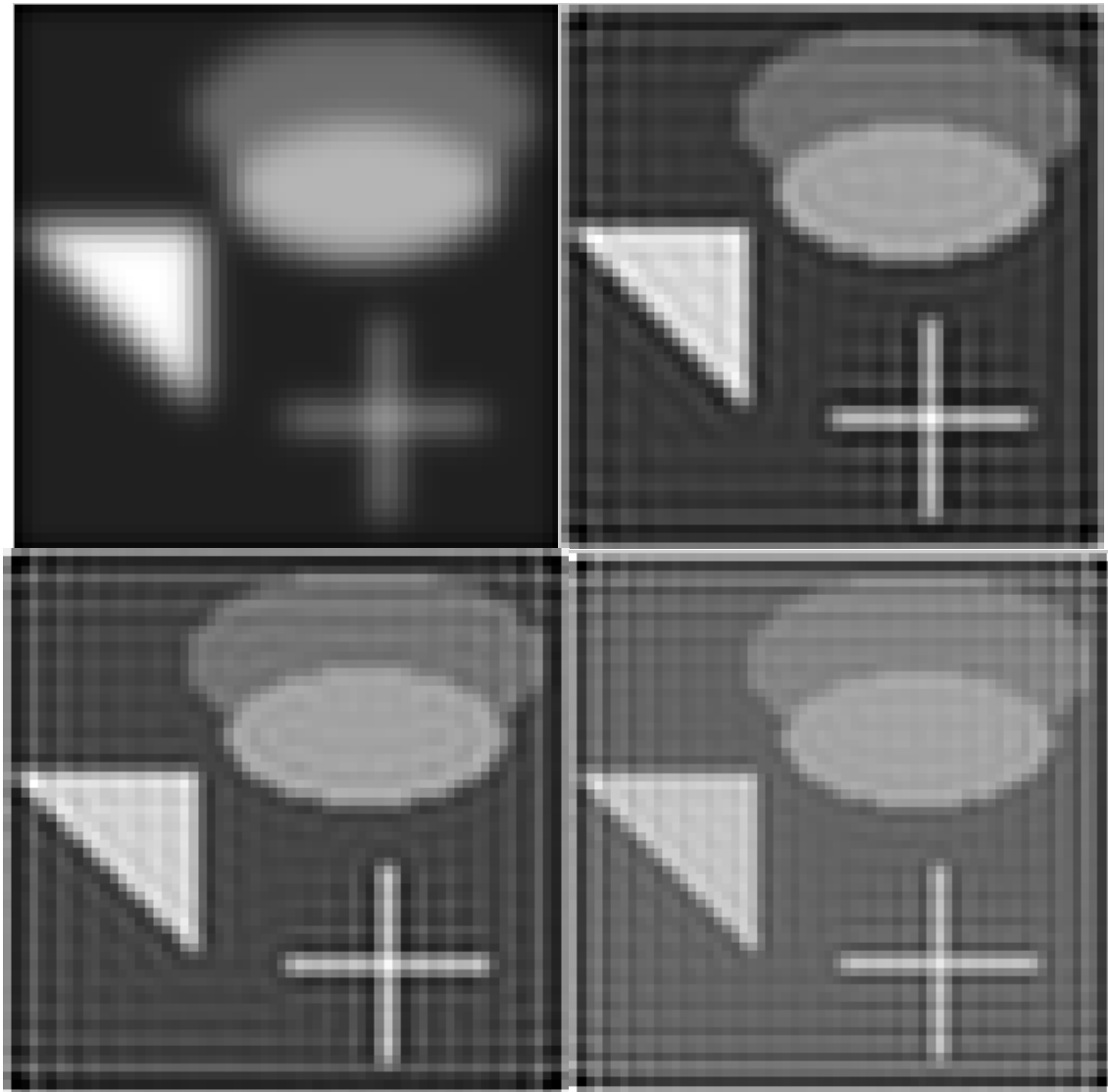


**Σχήμα 6.16: Εικόνες του Παραδείγματος - Μοντέλου Αποσαφήνισης Εικόνας που Παράγονται από τη Μέθοδο CGLS για 1, 25, 50 και 100 Επαναλήψεις**

Στο Σχήμα 6.17, απεικονίζεται η Καμπύλη  $L$ , όπως αυτή προκύπτει για το Πρόβλημα – Μοντέλο μετά την εφαρμογή της μεθόδου CGLS για 100 επαναλήψεις. Είναι εμφανές ότι τόσο η νόρμα της λύσης όσο και αυτή του υπολοίπου μεταβάλλονται πολύ αργά με τον αριθμό των επαναλήψεων. Αυτό καθιστά προβληματική τη χρήση του Κριτηρίου  $L$  για προσδιορισμό της λύσης.

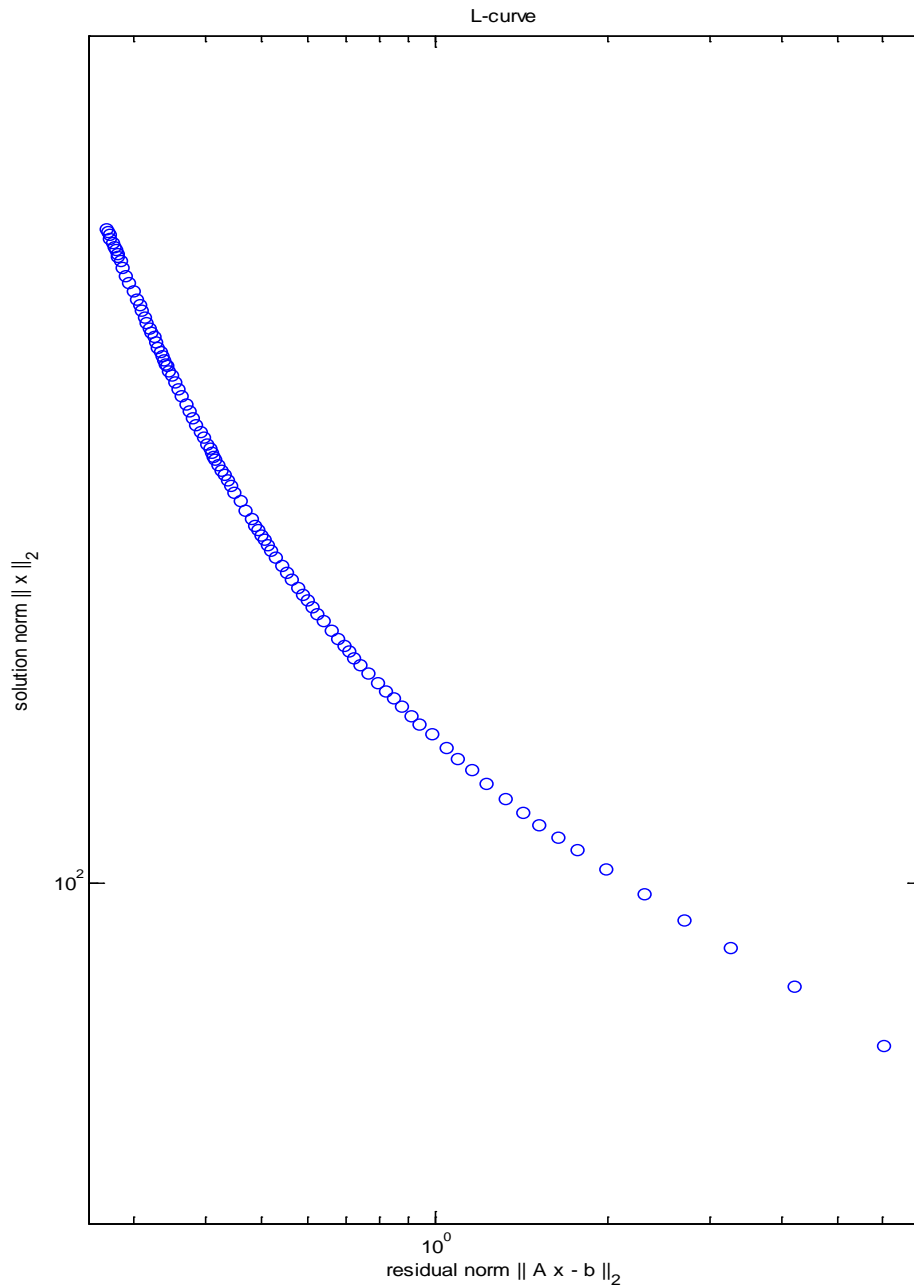


Σχήμα 6.17: Καμπύλη L για το Πρόβλημα – Μοντέλο Αποσαφήνισης Εικόνας



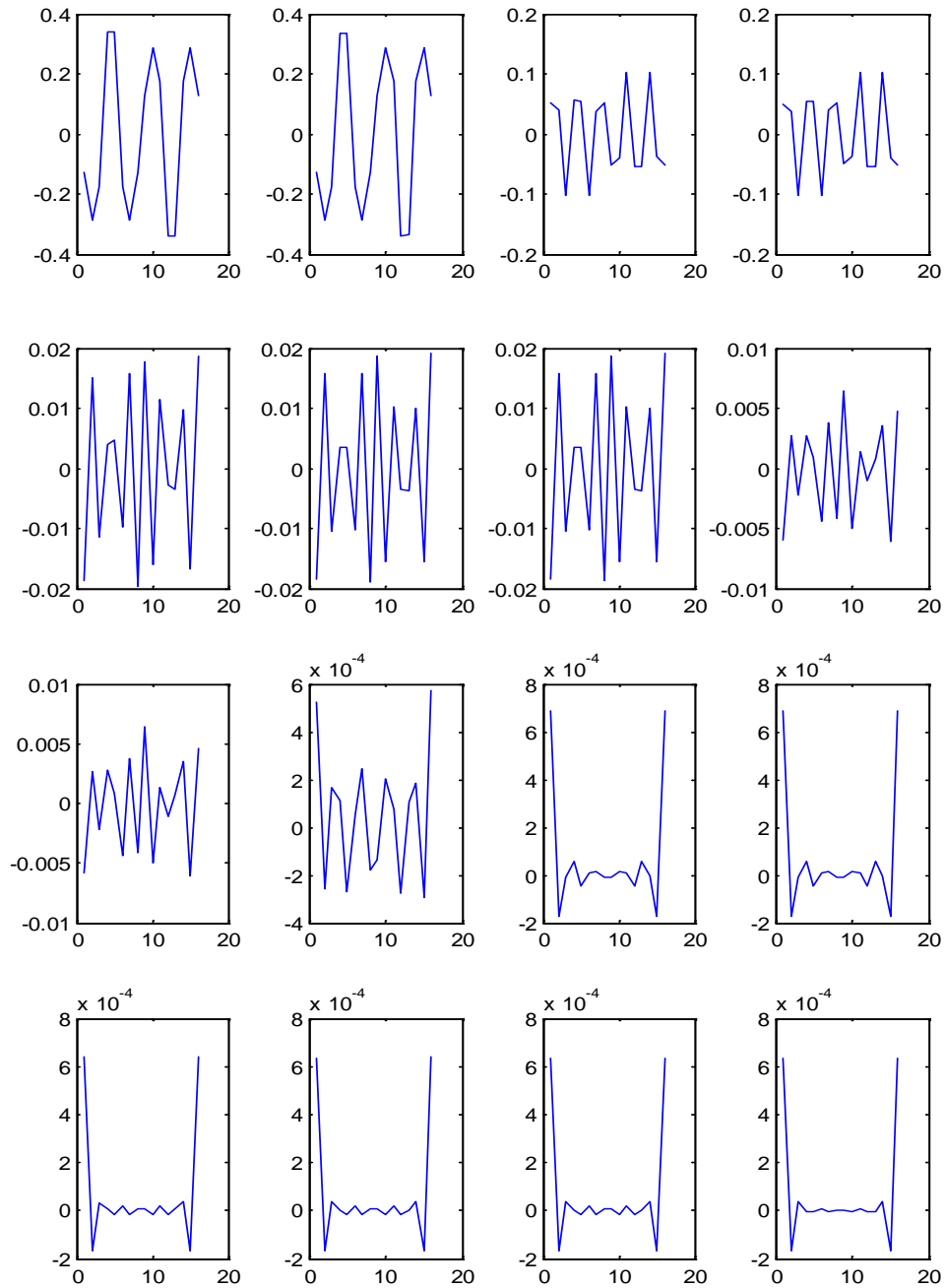
**Σχήμα 6.18:** *Εικόνες του Παραδείγματος - Μοντέλου Αποσαφήνισης Εικόνας με Θόρυβο που Παράγονται από τη Μέθοδο CGLS για 1, 25, 50 και 100 Επαναλήψεις*

Το Σχήμα 6.18 απεικονίζει αποσαφηνισμένα (deblurred) στιγμιότυπα της εικόνας – δείγματος, τα οποία προκύπτουν μετά την εφαρμογή της μεθόδου CGLS για διαφορετικούς αριθμούς επαναλήψεων για το Πρόβλημα – Μοντέλο στο οποίο έχει προστεθεί θόρυβος. Παρατηρεί εύκολα κανείς ότι, αρχικά, όσο αυξάνεται ο αριθμός επαναλήψεων η εικόνα πλησιάζει περισσότερο στην αποσαφηνισμένη μορφή της, αλλά μετά από ένα αριθμό επαναλήψεων ο θόρυβος κυριαρχεί και αλλοιώνει την εικόνα.

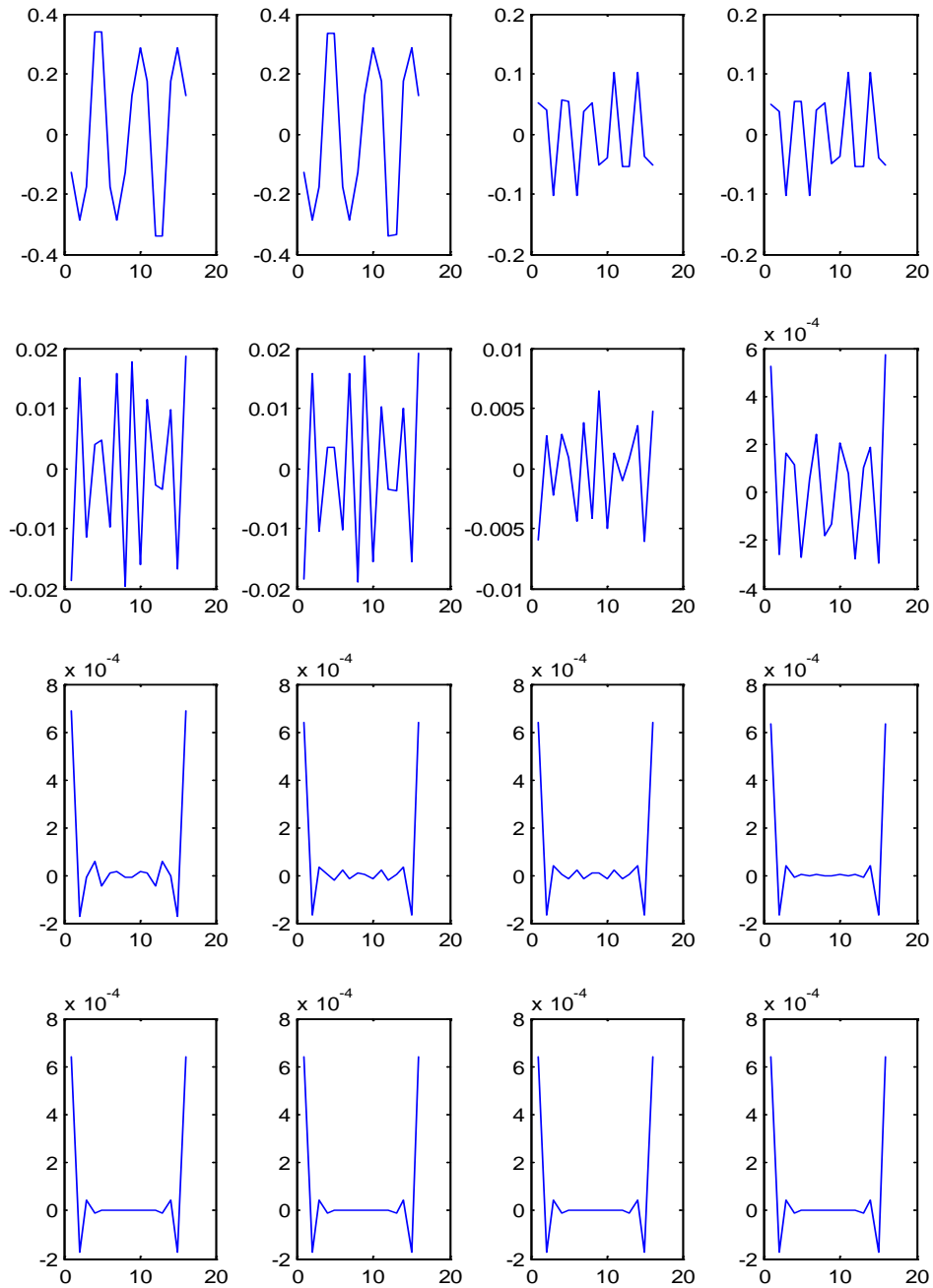


**Σχήμα 6.19: Καμπύλη L για το Πρόβλημα – Μοντέλο Αποσαφήνισης Εικόνας με Θόρυβο**

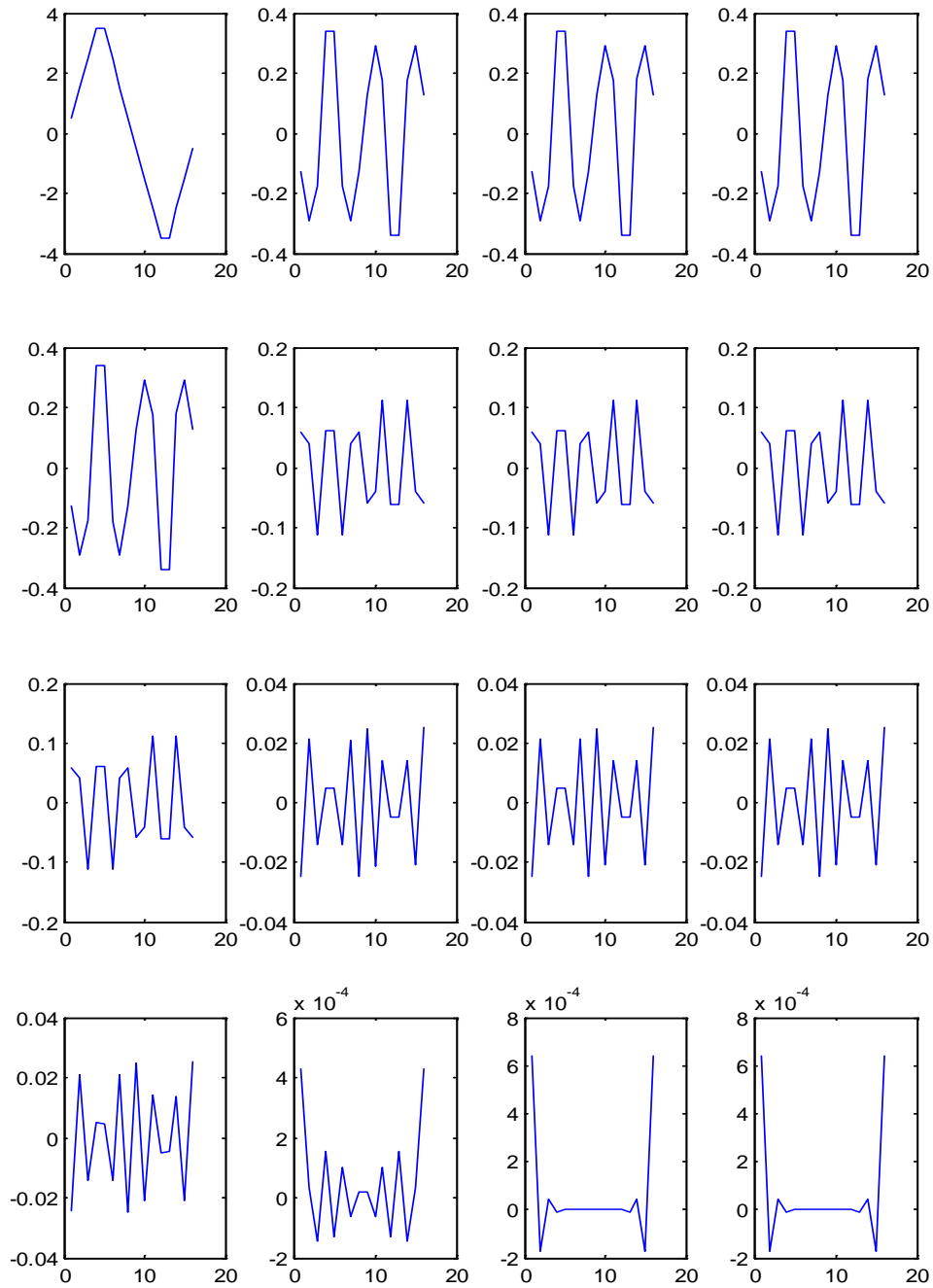
Η Καμπύλη L για το πρόβλημα με θόρυβο απεικονίζεται στο Σχήμα 6.19. Και σε αυτή την περίπτωση παρατηρείται πολύ αργή μεταβολή των νορμών με τις επαναλήψεις και η εφαρμογή της μεθόδου για τον εντοπισμό της λύσης καθίσταται προβληματική.



**Σχήμα 6.20: Αύσεις Προβλήματος – Μοντέλου Πριονωτής Συνάρτησης με τη Μέθοδο CGLS για 1 έως 16 Επαναλήψεις**



**Σχήμα 6.21: Λύσεις Προβλήματος – Μοντέλο Πριονωτής Συνάρτησης με τη Μέθοδο CGLS με Επανορθογωνοποίηση για 1 έως 16 Επαναλήψεις**



**Σχήμα 6.22:** Λύσεις Προβλήματος – Μοντέλου Πριονοτής Συνάρτησης με τη Μέθοδο TSVD για  $k=1$  έως 16



Τα Σχήματα 6.20, 6.21 και 6.22 παρουσιάζουν τη λύση του Προβλήματος Πριονωτής Συνάρτησης με τις μεθόδους CGLS, CGLS με επανορθοκανονικοποίηση και TSVD αντίστοιχα. Για τη μέθοδο CGLS έχουν επιλεγεί 16 επαναλήψεις, ενώ για τη μέθοδο TSVD το  $k$  λαμβάνει τιμές από 1 έως 16. Παρατηρείται εύκολα από τα γραφήματα ότι οι μέθοδοι είναι σχετικά εφάμιλλες και παράγουν ικανοποιητικά αποτελέσματα. Θα πρέπει όμως να τονιστεί ότι η CGLS με επανορθοκανονικοποίηση συγκλίνει ταχύτερα από τη CGLS, γεγονός που προκύπτει και από τη θεωρία δεδομένου πρόκειται για μέθοδο άπειρης ακρίβειας. Η Μέθοδος TSVD δουλεύει καλύτερα όσο μεγαλώνει το  $k$ . Μπορεί εύκολα να παρατηρηθεί από τα γραφήματα ότι ενώ για μικρές τιμές του  $k$ , η παραγόμενη λύση απέχει σημαντικά από την ακριβή λύση, για  $k=16$  το αποτέλεσμα είναι αντίστοιχο αυτού της μεθόδου CGLS με επανορθοκανονικοποίηση και καλύτερο αυτού της απλής CGLS.



## Βιβλιογραφία

1. Arfken, G. (1985). *Mathematical Methods for Physicists*, 3rd ed., Academic Press.
2. Backus G. E. (1988). Bayesian inference in geomagnetism, *Geophys. J.*, vol. 135, pp. 125-142.
3. Baker, C. T. H. & Miller, G. F. (1982). *Treatment of Integral Equations by Numerical Methods*, Academic Press, New York.
4. Bakushinskii, A., and Goncharsky, A. (1995). *Ill-Posed Problems: Theory and Applications*, Kluwer, Dordrecht.
5. Baumeister, J. (1987). *Stable Solution of Inverse Problems*. Vieweg, Braunschweig.
6. Barrett, R., Berry, M., Chan, T. F., Demmel, J., Donato, J., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C., and van der Vorst, H. (1994). *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, 2nd ed. Philadelphia, PA: SIAM, [http://www.netlib.org/linalg/html\\_templates/Templates.html](http://www.netlib.org/linalg/html_templates/Templates.html).
7. Borcea, L. (2002). Electrical impedance tomography, *Inverse Problems*, vol. 18, pp. R99–R136.
8. Cheney, W., Kincaid, D. (2009). *Linear Algebra: Theory and Applications*. Sudbury, Ma, pp. 544-558.
9. Dempster A., Schatzoff M., Wermuth N. (1977). A simulation study of alternatives to ordinary least squares, *J. Am. stat. Assoc.*, vol. 135, pp. 77-106.
10. Engl, H. W., and Gfrerer, H. (1988). A posteriori parameter choice for general regularization methods for solving linear ill-posed problems, *Appl. Numer. Math.*, Vol. 4, pp. 395–417.
11. Engl, H. W., Hanke, M., and Neubauer, A. (1996). *Regularization of Inverse Problems*, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht Boston London.
12. Freiling, G., Yurko, V. A. (2001). *Inverse Sturm-Liouville Problems and Their Applications*, Nova Science, New York.

13. Gfrerer, H. (1987). An a posteriori parameter choice for ordinary and iterated Tikhonov regularization of ill-posed problems leading to optimal convergence rates, *Math. Comp.*, vol. 49, pp. 507-522 and S5–S12.
14. Glasko, V. B. (1984). *Inverse Problems of Mathematical Physics*. American Institute of Physics, New York.
15. Gough, D. (1996). The success story of the transfer and development of methods from geophysics to helioseismology, *Inverse Methods*, pp. 1-31, eds Jacobsen, B., Mosegaard, K. & Sibani, P., Springer Verlag, Berlin.
16. Groetsch, C., W. (1984). *The Theory of Tikhonov regularization for Fredholm equations of the first kind*. Pitman, Boston.
17. Groetsch, C., W. (1993). *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*, Vieweg, Wiesbaden.
18. Hanke, M. (1993). Iterative solution of underdetermined linear systems by transformation to standard form, *Numerical Mathematics in Theory and Practice*, Dept. of Mathematics, University of West Bohemia, Plzen, pp. 55-63.
19. Hanke, M. (1995). *Conjugate Gradient Methods for Ill-Posed Problems*, Longman Scientific and Technical, Essex.
20. Hansen, P. C. (1988). Computation of the Singular Value Expansion, *Computing* 40, Springer-Verlag, pp.185-199.
21. Hansen, P., C. (1990a). Relations between SVD and GSVD of discrete regularization problems in standard and general form, *Lin. Alg. Appl.* 141, pp. 165-176.  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0024379590903154>
22. Hansen, P., C. (1990b). Truncated SVD solutions to discrete ill-posed problems with ill-determined numerical rank, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 11, pp. 503-518.
23. Hansen, P. C. (1990c). The discrete Picard condition for discrete ill-posed problems, *BIT*30, pp.658-672, <http://link.springer.com/article/10.1007%2F01933214#page-1>

24. Hansen, P. C. (1992). Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve, *SIAM Review* 34, pp. 561-580.  
[http://www.atomki.hu/~efo/hornyak/Tikhonov\\_references/SIAM\\_Rev\\_1992\\_Hansen.pdf](http://www.atomki.hu/~efo/hornyak/Tikhonov_references/SIAM_Rev_1992_Hansen.pdf)
25. Hansen, P. C. (1997). Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems, *Numerical Aspects of Linear Inversion*, SIAM, Philadelphia,  
[http://www.ligo.org/pdf\\_public/P060005.pdf](http://www.ligo.org/pdf_public/P060005.pdf)
26. Hansen, P. C. (1999). Regularization Tools Version 3.0 for Matlab 5.2, *Numer. Algo.*, vol. 20, pp. 195-196.
27. Hansen, P. C. (2002). Deconvolution and regularization with Toeplitz matrices, *Numer. Algo.*, Vol. 29, pp. 323-378,  
<http://sintef.org/globalassets/project/evitameeting/2005/deconv.pdf>
28. Hansen, P. C. (2010). *Discrete Inverse Problems: Insights and Algorithms*, SIAM, vol. 7, Philadelphia, Pa, USA.
29. Hansen, P. C. & Jensen, T. K. (2006). Smoothing-norm preconditioning for regularizing minimum-norm methods, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* Vol. 29, pp. 1-14.  
<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/050628453?journalCode=sjmael>.
30. Hansen, P. C., Jensen, T. K. & G. Rodriguez (2007). An adaptive pruning algorithm for the discrete L-curve criterion, *J. Comp. Appl. Math.*, vol. 198, pp. 483-492,  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042705007284>.
31. Hansen, P. C., Kilmer, M. & Kjeldsen, R. H. (2006). Exploiting residual information in the parameter choice for discrete ill-posed problems, *BIT* vol. 46, pp. 41-59.  
<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs10543-006-0042-7>
32. Hansen, P. C. & O'Leary, D. P. (1993). The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems, *SIAM J. Sci. Comput.* Vol. 14, pp. 1487-1503,  
<https://www.cs.umd.edu/users/oleary/reprints/j37.pdf>.
33. Hansen, P. C., Sekii, T. & Shibahashi, H. (1992). The modified truncated SVD method for regularization in general form, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 13, pp. 1142-1150, <http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/0913066>.

34. Hoerl A., E., Kennard R. W. (1970), Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems, *Technometrics*, vol. 135 pp. 55–67.
35. Hofmann, B. (1986). *Regularization of Applied Inverse and Ill-Posed Problems*. Teubner, Leipzig, <http://www2.compute.dtu.dk/~pcha/Regutools/RTv4manual.pdf>.
36. Isakov, V. (1998). *Inverse Problems for Partial Differential Equations*. Springer.
37. Jacobsen, M., Hansen, P. C., & Saunders, M. A. (2003). Subspace preconditioned LSQR for discrete ill-posed problems, *BIT* 43, pp. 975-989, <http://www.convexoptimization.com/sol/papers/JHS.pdf>
38. Keller, J., B. (1976). *Inverse Problems*, *Am. Math. Mon.*, vol. 83, pp.107-118.
39. Kirsch, A. (1996). *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg.
40. Kreb, R. (1989). *Linear Integral Equations*, Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York.
41. Lavrentiev, M. (1967). *Some Improperly Posed Problems of Mathematical Physics*, Springer, New York.
42. Lawless J. F., Wang P. (1976). A simulation study of ridge and other regression estimators, *Commun. Statist. Theor. Meth.*, vol. A5, pp. 307-323.
43. Lawson, C. L., & Hanson, R. J. (1974). *Solving Least Squares Problems*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, <http://www.cs.cornell.edu/cv/ResearchPDF/On%20the%20Method%20of%20Weighting%20for%20Equality-Constrained%20Least-Sq.pdf>
44. Morozov, V., A. (1984). *Methods for Solving Incorrectly Posed Problems*, Springer Verlag, New York, Berlin, Heidelberg.
45. Morozov, V., A. (1993). *Methods for Solving Incorrectly Posed Problems*, CRC Press, Boca Raton, CA.
46. Neubauer, A. (1988). An a posteriori parameter choice for Tikhonov regularization in the presence of modelling error, *Appl. Numer. Math.*, vol. 4, pp. 507-519.

47. Neumaier, A. (1998). Solving ill-conditioned and singular linear systems: A tutorial on regularization. *SIAM Review*, vol. 40 (3), pp. 636-666.
48. Paige, C. C. and Saunders, M. A. (1982). LSQR: An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares, *ACM TOMS* vol. 8(1), pp. 43-71,  
<https://web.stanford.edu/class/cme324/paige-saunders2.pdf>
49. Parker, R. L. (1977). Understanding inverse theory, *Ann. Rev. Earth Planet Sci.* 5, pp. 35-64. <http://www.geo.arizona.edu/geo5xx/geos567/classnotes/ch1-fall09.pdf>
50. Rust, B. W. (1998). Truncating the Singular Value Decomposition for Ill-Posed Problems, Report NISTIR 6131, Mathematical and Computational Sciences Division, NIST.
51. Sekii T. (1991). Two-dimensional inversion for solar internal rotation, *Publ. astr. Soc. Japan*, vol. 135, pp. 381-411.
52. Smith, C. R., & Grandy, W. T. (1985). *Maximum-Entropy and Bayesian Methods in Inverse Problems*, Reidel, Boston,  
<http://documents.irevues.inist.fr/bitstream/handle/2042/2311/005.PDF%20TEXTE.pdf>
53. Talenti, G. (1986). *Inverse Problems*, *Lecture Notes in Mathematics*, vol. 1225, Springer Verlag, Berlin,  
<http://math.uni-heidelberg.de/studinfo/reiss/CavalierInvProb.pdf>.
54. Tarantola, A. (2005). *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*, SIAM,  
<http://www.ipgp.jussieu.fr/~tarantola/Files/Professional/Books/InverseProblemTheory.pdf>
55. Tikhonov, A., N. (1963). Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* 151, pp.501-504, *η Soviet Math. Dokl.* 4, pp.1035-1038.  
[http://grozny.maths.univ-evry.fr/pages\\_perso/crepey/papers/tik\\_qf.pdf](http://grozny.maths.univ-evry.fr/pages_perso/crepey/papers/tik_qf.pdf)
56. Tikhonov, A., N. and Arsenin, V. (1977). *Solutions of Ill-Posed Problems*. Wiley, New York.

57. Tikhonov, A., N., Goncharsky, A., V., Stepanov, V., V., and Yagola, A. G (1995). Numerical Methods for the Solution of Ill-Posed Problems, Kluwer Academic Press, Dordrecht.
58. Trefethen, L. N., and Bau, D. (1997). Numerical Linear Algebra, III, SIAM, ISBN 0-89871-361-7.
59. Vinod, H., Ullah, A. (1981). Recent Advances in Regression, Marcel Dekker, New York.
60. Zha, H., Hansen, P., C. (1990). Regularization and the general Gauss-Markov linear model, Math. Comp. 55, pp. 613-624. <http://www.ams.org/journals/mcom/1990-55-192/S0025-5718-1990-1035946-9/S0025-5718-1990-1035946-9.pdf>
61. M. L. Baart. (1982). The use of auto-correlation for pseudo-rank determination in noisy ill-conditioned linear least-squares problems, IMA J. Numer. Anal. 2