

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



**Διπλωματική Εργασία**

**Διακριτά Αντίστροφα Προβλήματα: Εφαρμογές με Θόρυβο**

**Αίγλη Κυριακούδη**

**Επιβλέπων Καθηγητής: Δρόσος Γκιντίδης**

**Αθήνα, Φεβρουάριος 2018**



## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα αντίστροφα προβλήματα είναι μαθηματικά προβλήματα που εμφανίζονται όταν επιθυμούμε να ανακτήσουμε κάποιες πληροφορίες από δεδομένα που περιέχουν σφάλματα. Σε αυτή τη διπλωματική εργασία ασχολούμαστε με τα αντίστροφα προβλήματα που προκύπτουν για προβλήματα που διατυπώνονται με την ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους. Η ανάλυση της επίλυσης αυτών των προβλημάτων γίνεται με το ανάπτυγμα ιδιαιζουσών τιμών (SVE) για το συνεχές πρόβλημα. Το συνεχές πρόβλημα επιλύεται δύσκολα αριθμητικά οπότε το μετατρέπουμε σε ένα διακριτό πρόβλημα το οποίο ισοδυναμεί με ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων. Η διακριτοποίηση γίνεται με τη μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης ή τη μέθοδο αναπτύγματος Galerkin.

Η παραγοντοποίηση ιδιαιζουσών τιμών (SVD) χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με το SVE για την αριθμητική επίλυση του προβλήματος. Με τη βοήθεια της SVD ορίζεται η συνθήκη Picard, η ικανοποίηση της οποίας εξασφαλίζει την επιλυσιμότητα του προβλήματος.

Στη συνέχεια, μελετάμε τα σφάλματα, δηλαδή το θόρυβο που υπάρχει στα δεδομένα, ο οποίος ακολουθεί την Γκαουσιανή κατανομή. Η ομαλότητα της λύσης έχει ως απαίτηση τη μείωση του θορύβου. Για αυτό το σκοπό εισάγονται τρεις μέθοδοι ομαλοποίησης, η Truncated SVD (TSVD), η Selective SVD (SSVD) και η μέθοδος Tikhonov. Οι δύο πρώτες μέθοδοι απαιτούν τον υπολογισμό της SVD ενώ η μέθοδος Tikhonov απαιτεί την επίλυση ενός προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων. Για τη μέθοδο Tikhonov χρησιμοποιείται η μέθοδος της L-curve για την ανάλυση του προβλήματος.

Εκτός από το θόρυβο που ακολουθεί την Γκαουσιανή κατανομή, υπάρχουν και άλλα είδη θορύβου, τα οποία μετατρέπουμε με κατάλληλους μετασχηματισμούς σε θόρυβο που μοιάζει με τον προηγούμενο, για να είναι πιο εύκολη η διαδικασία επίλυσης.

Τέλος, παρουσιάζονται κάποιες υπολογιστικές εφαρμογές για την εξαγωγή συμπερασμάτων σύμφωνα με τη θεωρία που αναπτύχθηκε.



## **ABSTRACT**

Inverse problems are mathematical problems that appear when we wish to recover some information about noisy data. In this diploma thesis, we focus on inverse problems that arise for problems formulated with Fredholm integral equations of the first kind. The analysis of these problems begins with the singular value expansion (SVE) for the continuous problem. The continuous problem has difficulties in numerical computation, so we transform it into a discrete problem that is equal to a linear system of equations. The discretization of the problem is achieved through the use of quadrature methods or expansion methods.

The singular value decomposition (SVD) is used, in combination with the SVE for the numerical computation of the problem. The analysis of the SVD coefficients of the problem leads to the introduction of the Picard condition, the satisfaction of which ensures the solvability of the problem.

Then, we study the errors, i.e. the noise in the data, which follows the Gaussian distribution. The regularity and stability of the solution requires the reduction of noise. For this reason, three regularization methods are introduced: Truncated SVD (TSVD), Selective SVD (SSVD) and Tikhonov's method. The first two methods require the computation of the SVD, whereas Tikhonov's method requires the solution of a least squares problem. For Tikhonov's method, the method of L-curve is used for the analysis of the problem.

In addition to the noise that follows the Gaussian distribution, there are other types of noise. With appropriate transformations, we transform these types of noise into a noise that resembles the previous one, so that the solution process is easier.

Finally, some computational applications are presented, to draw conclusions according to the theory that was developed.



## Περιεχόμενα

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 Εισαγωγή .....	11
1.1 Ευθύ και αντίστροφο πρόβλημα .....	11
1.2 Μη καλά τοποθετημένα προβλήματα .....	11
1.2.1 Μη ύπαρξη λύσης.....	11
1.2.2 Μη μοναδικότητα λύσης .....	12
1.2.3 Αστάθεια λύσης .....	12
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 Ολοκληρωτικές Εξισώσεις Fredholm Πρώτου Είδους.....	14
2.1 Εισαγωγή.....	14
2.2 Ιδιότητες της ολοκληρωτικής εξίσωσης.....	14
2.3 Ανάπτυγμα ιδιαζουσών τιμών (Singular Value Expansion) .....	15
2.4 Ιδιότητες των ιδιαζουσών τιμών και συναρτήσεων .....	16
2.5 Συνθήκη Picard .....	17
2.6 Μη ύπαρξη λύσης .....	19
2.7 Το πρόβλημα μοναδικότητας λύσης στα αντίστροφα προβλήματα.....	21
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 Διακριτοποίηση Αντίστροφων Προβλημάτων .....	23
3.1 Εισαγωγή.....	23
3.2 Μέθοδος αριθμητικής ολοκλήρωσης .....	23
3.3 Μέθοδος αναπτύγματος Galerkin .....	25
3.4 Επιλογή μεθόδου διακριτοποίησης .....	28
3.5 Παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (SVD).....	29
3.6 Η ανάλυση SVD και η διακριτή συνθήκη Picard .....	32
3.7 Προσέγγιση της μεθόδου SVE μέσω της SVD .....	36
3.8 Δεδομένα με θόρυβο .....	37
3.8.1 Γκαουσιανός Λευκός Θόρυβος (Gaussian White Noise).....	38
3.8.2 Ομοιόμορφα κατανεμημένος Λευκός Θόρυβος .....	40
3.9 Γενική μορφή θορύβου .....	41
3.9.1 Θόρυβος που σχετίζεται με το σήμα .....	41
3.9.2 Θόρυβος Poisson .....	42
3.9.3 Έγχρωμος θόρυβος ευρείας ζώνης .....	44
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 Μέθοδοι Ομαλοποίησης .....	46
4.1 Εισαγωγή.....	46
4.2 Μέθοδος αποκοπής SVD (TSVD) .....	47
4.2.1 Εναλλακτικός ορισμός της μεθόδου TSVD .....	47
4.2.2 Στατιστική ανάλυση .....	48

4.3 Μέθοδος της επιλεκτικής SVD (SSVD) .....	50
4.4 Μέθοδος Tikhonov.....	51
4.4.1 Εναλλακτικοί ορισμοί της μεθόδου Tikhonov .....	53
4.4.2 Στατιστική ανάλυση .....	54
4.5 Θεωρία διαταραχών .....	55
4.6 Η καμπύλη L (L-Curve).....	58
4.7 Δεδομένα με έγχρωμο θόρυβο .....	61
4.7.1 Διαδικασία μετασχηματισμού σε λευκό θόρυβο (Prewhitening).....	62
Κεφάλαιο 5 Εφαρμογές .....	64
5.1 Πρόβλημα βαρύτητας (gravity surveying).....	64
5.2 Πρόβλημα ανακατασκευής εικόνας σε 1 διάσταση .....	70
5.3 Πρόβλημα υπολογισμού 2 <sup>ης</sup> παραγώγου.....	78
5.4 Μετατροπή τυχαίου θορύβου σε λευκό θόρυβο .....	81
Κεφάλαιο 6 Βιβλιογραφία .....	84







## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 Εισαγωγή

### 1.1 Ευθύ και αντίστροφο πρόβλημα

Υπάρχουν πολλοί τρόποι κατηγοριοποίησης των προβλημάτων στην επιστήμη και την τεχνολογία. Ένας από αυτούς είναι ο διαχωρισμός σε ευθέα και αντίστροφα προβλήματα. Ένα πρόβλημα χαρακτηρίζεται ως ευθύ αν ζητείται ο υπολογισμός ενός μεγέθους όταν είναι γνωστές οι παράμετροι εισόδου καθώς και το σύστημα ή μοντέλο που χρησιμοποιείται. Στα αντίστροφα προβλήματα, επιδιώκουμε την ανάκτηση πληροφοριών είτε των παραμέτρων εισόδου είτε του συστήματος, γνωρίζοντας τις άλλες δύο ποσότητες. Είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι στις περισσότερες περιπτώσεις έχουμε μη ακριβείς, δηλαδή με θόρυβο, μετρήσεις του αποτελέσματος.

Τα αντίστροφα προβλήματα εμφανίζονται σε πολλούς τεχνικούς και επιστημονικούς τομείς όπως είναι οι ιατρικές και γεωφυσικές απεικονίσεις, ο υπολογισμός της μαγνήτισης στο εσωτερικό ενός ηφαιστείου σύμφωνα με τις μετρήσεις του μαγνητικού πεδίου πάνω από το ηφαίστειο, καθώς και η ανακατασκευή μιας θολής εικόνας σε μια ευκρινέστερη.

### 1.2 Μη καλά τοποθετημένα προβλήματα

Τα αντίστροφα προβλήματα είναι μη καλά τοποθετημένα, όρος τον οποίο επινόησε ο Hadamard στις αρχές του 20<sup>ου</sup> αιώνα. Κατά τον ορισμό του Hadamard, ένα γραμμικό πρόβλημα είναι καλά τοποθετημένο αν ικανοποιεί τις τρεις παρακάτω απαιτήσεις:

- Ύπαρξη λύσης: το πρόβλημα πρέπει να έχει λύση
- Μοναδικότητα λύσης: η λύση πρέπει να είναι μοναδική
- Ευστάθεια λύσης: η λύση πρέπει να εξαρτάται με συνεχή τρόπο από τα δεδομένα του προβλήματος.

Ένα πρόβλημα το οποίο παραβιάζει μία από τις παραπάνω απαιτήσεις καλείται μη καλά τοποθετημένο. Στη συνέχεια παρουσιάζονται παραδείγματα μη καλά τοποθετημένων προβλημάτων σε καθένα από τα οποία παραβιάζεται μία από τις παραπάνω απαιτήσεις.

#### 1.2.1 Μη ύπαρξη λύσης

Η μη ύπαρξη λύσης διορθώνεται με αναδιατύπωση και επαναπροσδιορισμό της λύσης. Για παράδειγμα, έστω ότι θέλουμε να επιλύσουμε το γραμμικό σύστημα

$$Ax = b, \quad \text{όπου} \quad A = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 4.4 \end{pmatrix}.$$

Παρατηρούμε ότι αυτό το πρόβλημα δεν έχει λύση καθώς δεν υπάρχει κάποιο  $x$  έτσι ώστε  $x=1$  και  $4x=4.4$ . Για να διορθώσουμε αυτή την παραβίαση, θεωρούμε το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων

$$\min_x \left\| \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} 1 \\ 4.4 \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \min_x \left[ (x-1)^2 + (4x-4.4)^2 \right],$$

το οποίο έχει μοναδική λύση  $x = 1.09$ .

### 1.2.2 Μη μοναδικότητα λύσης

Διορθώνεται με μία αναδιατύπωση του προβλήματος, συνήθως προσθέτοντας επιπλέον απαιτήσεις στη λύση. Για παράδειγμα, το πρόβλημα  $x_1 + x_2 = 3$  έχει άπειρες λύσεις. Για να έχουμε μοναδική λύση, αναδιατυπώνουμε το πρόβλημα προσθέτοντας την απαίτηση να ελαχιστοποιείται η νόρμα  $\|x\|_2$  η οποία είναι ίση με  $\|x\|_2 = (x_1^2 + x_2^2)^{1/2}$ , και επομένως υπάρχει μοναδική λύση  $x_1 = x_2 = 3/2$ .

### 1.2.3 Αστάθεια λύσης

Είναι πιο δύσκολο να διορθωθεί διότι η παραβίαση της ευστάθειας υπονοεί ότι αυθαίρετα μικρές διαταραχές των δεδομένων και των παραμέτρων μπορούν να οδηγήσουν σε αυθαίρετα μεγάλες διαταραχές της λύσης. Και σε αυτή την περίπτωση, αναδιατυπώνουμε το πρόβλημα ώστε η λύση του καινούργιου προβλήματος να είναι λιγότερο ευαίσθητη στις διαταραχές, δηλαδή σταθεροποιούμε ή ομαλοποιούμε το πρόβλημα ώστε να έχουμε μία περισσότερο σταθερή ή ομαλή λύση. Ας θεωρήσουμε, για παράδειγμα, το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων  $\min_x \|Ax - b\|_2$  όπου:

$$A = \begin{pmatrix} 0.15 & 0.1 \\ 2.01 & 1.4 \end{pmatrix}, \quad b = A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.01 \\ 0.02 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.26 \\ 3.43 \end{pmatrix}.$$

Θεωρούμε το διάνυσμα  $\begin{pmatrix} 0.01 \\ 0.02 \end{pmatrix}$  ως μία διαταραχή της πραγματικής δεξιάς πλευράς  $\begin{pmatrix} 0.25 \\ 3.41 \end{pmatrix}$ . Δεν υπάρχει κάποιο διάνυσμα  $x$  ώστε  $Ax = b$ , και η λύση ελαχίστων τετραγώνων του προβλήματος είναι

$$x_{LS} = \begin{pmatrix} 2.33 \\ -0.90 \end{pmatrix} \quad \text{με} \quad \|Ax_{LS} - b\|_2 = 5.55 \times 10^{-7}.$$

Δύο ακόμα λύσεις με μικρό υπόλοιπο είναι οι

$$x' = \begin{pmatrix} 1.71 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x'' = \begin{pmatrix} 0 \\ 2.45 \end{pmatrix} \quad \text{με}$$

$$\|Ax' - b\|_2 = 0.008 \quad \text{και} \quad \|Ax'' - b\|_2 = 0.02.$$

Παρατηρούμε ότι και οι τρεις λύσεις  $x, x', x''$  έχουν μικρό υπόλοιπο αλλά απέχουν πολύ από την πραγματική λύση  $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Αυτό συμβαίνει επειδή ο πίνακας  $A$  είναι κακής κατάστασης.

Ο δείκτης κατάστασης ενός πίνακα  $A$  ορίζεται ως:

$$k(A) = \|A^{-1}\| \|A\| \geq \|A^{-1}A\| = 1.$$

Αν ο δείκτης κατάστασης παίρνει τιμές κοντά στη μονάδα, τότε ο πίνακας  $A$  είναι σε καλή κατάσταση. Σε αντίθετη περίπτωση, όπως στο παράδειγμά μας, ο πίνακας είναι σε κακή κατάσταση και μικρές διαταραχές του δεξιού μέλους  $b$  μπορεί να οδηγήσουν σε μεγάλες διαταραχές της λύσης. Ακόμα, πρέπει να τονίσουμε ότι το μικρό υπόλοιπο δεν εγγυάται ότι η διαταραγμένη λύση θα είναι κοντά στην πραγματική.

Μπορούμε να τροποποιήσουμε το πρόβλημα ώστε η καινούργια λύση να είναι λιγότερο ευαίσθητη σε διαταραχές, δηλαδή περισσότερο σταθερή. Για παράδειγμα, μπορούμε να επιβάλουμε ένα ανώτατο όριο  $\delta$  στη νόρμα της λύσης και να λύσουμε το τροποποιημένο πρόβλημα:

$$\min_x \|Ax - b\|_2 \quad \text{υπό τον περιορισμό} \quad \|x\|_2 \leq \delta,$$

όπου πλέον η λύση εξαρτάται μοναδικά αλλά όχι γραμμικά από το  $\delta$ .

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 Ολοκληρωτικές Εξισώσεις Fredholm Πρώτου Είδους

### 2.1 Εισαγωγή

Οι ολοκληρωτικές εξισώσεις Fredholm πρώτου είδους είναι μία σημαντική κατηγορία των γραμμικών αντίστροφων προβλημάτων. Κάποιες επιστημονικές εφαρμογές στις οποίες προκύπτουν τέτοιου είδους προβλήματα είναι:

- η ιατρική απεικόνιση, για παράδειγμα, οι ακτινογραφίες,
- η γεωφυσική έρευνα, για παράδειγμα, η έρευνα για πετρέλαιο ,
- η ανακατασκευή εικόνας (image deblurring), για παράδειγμα, οι εικόνες που προέρχονται από τους δορυφόρους.

### 2.2 Ιδιότητες της ολοκληρωτικής εξίσωσης

Η ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους παίρνει τη γενική μορφή:

$$\int_0^1 K(s,t) f(t) dt = g(s) , \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (2.1)$$

Η συνάρτηση  $K(s,t)$  καλείται πυρήνας και ο πυρήνας καθώς και το δεξί μέλος  $g(s)$  είναι γνωστές συναρτήσεις ενώ η  $f(t)$  είναι η άγνωστη συνάρτηση. Η ολοκληρωτική εξίσωση περιγράφει μία γραμμική σχέση ανάμεσα στις συναρτήσεις  $f(t)$  και  $g(s)$ , ενώ ο πυρήνας  $K(s,t)$  περιγράφει την ακριβή σχέση μεταξύ τους.

Αν είναι γνωστές οι  $f$ ,  $K$  τότε μπορούμε υπολογίζοντας το παραπάνω ολοκλήρωμα να βρούμε τη συνάρτηση  $g$ . Το αντίστροφο πρόβλημα είναι ο υπολογισμός της συνάρτησης  $f$ , γνωρίζοντας το δεξί μέλος και τον πυρήνα.

Στο πρόβλημα της ανακατασκευής εικόνας, η πηγή  $f$  είναι η καθαρή εικόνα, τα δεδομένα  $g$  είναι η θολή εικόνα και ο πυρήνας  $K$  είναι η συνάρτηση εξάπλωσης σημείου (point spread function). Το ευθύ πρόβλημα είναι η απεικόνιση της θολής εικόνας ενώ το αντίστροφο πρόβλημα είναι η ανακατασκευή της ευκρινέστερης εικόνας.

Μία συγκεκριμένη περίπτωση της εξίσωσης (2.1) προκύπτει όταν ο πυρήνας είναι μία συνάρτηση της διαφοράς των  $s$  και  $t$ , δηλαδή  $K(s,t) = h(s-t)$ , όπου  $h$  μία συνάρτηση. Τότε έχουμε το ολοκλήρωμα συνέλιξης και η εξίσωση παίρνει τη μορφή:

$$\int_0^1 h(s-t) f(t) dt = g(s) , \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (2.2)$$

Ένα φαινόμενο που παρατηρείται συχνά στις ολοκληρωτικές εξισώσεις είναι η εμφάνιση επιπλέον ομαλότητας όταν πηγαίνουμε από τη συνάρτηση  $f$  στη  $g$ . Κατά την απεικόνιση από την  $f$  στη  $g$ , τα στοιχεία της  $f$  με υψηλότερες συχνότητες μειώνουν τη συνεισφορά τους σε σχέση με τα στοιχεία χαμηλότερων συχνοτήτων. Τότε, η ολοκλήρωση με τον πυρήνα  $K$  στη (2.1) ομαλοποιεί την  $f$  ώστε η  $g$  να φαίνεται πιο ομαλή από την  $f$ . Το φαινόμενο αυτό περιγράφεται μαθηματικά από το Λήμμα Riemann-Lebesgue:

Ορίζουμε τη συνάρτηση  $f_p$  ως  $f_p(t) = \sin(2\pi pt)$ ,  $p=1,2,\dots$  και για οποιοδήποτε πυρήνα  $K$  έχουμε:

$$g_p(s) = \int_0^1 K(s,t) f_p(t) dt \rightarrow 0 \quad \text{για } p \rightarrow \infty. \quad (2.3)$$

Επομένως, με την αύξηση της συχνότητας της  $f_p$  μειώνεται το πλάτος της ταλάντωσης της  $g_p$ . Τα αντίστροφα προβλήματα ενισχύουν τις υψηλές συχνότητες και μία μικρή τυχαία διαταραχή της  $g$  με στοιχεία υψηλής συχνότητας μπορεί να οδηγήσει σε μία πολύ μεγάλη διαταραχή της  $f$ . Αυτή είναι και η βασική δυσκολία επίλυσης των αντίστροφων προβλημάτων, δηλαδή η παραβίαση της συνθήκης ευστάθειας, καθώς η λύση δεν εξαρτάται με συνεχή τρόπο από τα δεδομένα.

### 2.3 Ανάπτυγμα ιδιαιζουσών τιμών (Singular Value Expansion)

Το ανάπτυγμα ιδιαιζουσών τιμών (SVE) είναι ένα χρήσιμο μαθηματικό εργαλείο για να ελέγξουμε την ύπαρξη λύσης σε μία ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους, να τη βρούμε και να μελετήσουμε το φαινόμενο της ομαλότητας. Αρχικά, θα δώσουμε κάποιους ορισμούς. Το εσωτερικό γινόμενο δύο συναρτήσεων  $f$  και  $g$  που ορίζονται στο διάστημα 0 έως 1, ορίζεται ως:

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(t) g(t) dt. \quad (2.4)$$

Η νόρμα 2 της συνάρτησης  $f$  ορίζεται ως

$$\|f\|_2 = \langle f, f \rangle^{1/2} = \left( \int_0^1 f^2(t) dt \right)^{1/2}. \quad (2.5)$$

Ο πυρήνας  $K$  της γενικής μορφής της ολοκληρωτικής εξίσωσης καλείται τετραγωνικά ολοκληρώσιμος αν το ολοκλήρωμα  $\int_0^1 \int_0^1 K^2(s,t) ds dt$  είναι πεπερασμένο. Επομένως για κάθε τετραγωνικά ολοκληρώσιμο πυρήνα  $K$ , το ανάπτυγμα ιδιζουσών τιμών παίρνει τη μορφή:

$$K(s,t) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i u_i(s) v_i(t). \quad (2.6)$$

Οι ποσότητες  $\mu_i$  ονομάζονται ιδιάζουσες τιμές, είναι μη αρνητικές και σχηματίζουν μία φθίνουσα ακολουθία, δηλαδή:  $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3 \geq \dots \geq 0$ . Οι συναρτήσεις  $u_i$  και  $v_i$  ονομάζονται αριστερά και δεξιά ιδιάζουσες συναρτήσεις, αντίστοιχα και είναι ορθοκανονικές όσον αφορά το εσωτερικό τους γινόμενο, δηλαδή

$$\langle u_i, u_j \rangle = \langle v_i, v_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}, \quad i=1,2,\dots \quad (2.7)$$

Ο πυρήνας  $K$  λέγεται εκφυλισμένος αν υπάρχει πεπερασμένος αριθμός μη μηδενικών ιδιζουσών τιμών.

## 2.4 Ιδιότητες των ιδιζουσών τιμών και συναρτήσεων

Η θεμελιώδης σχέση που συνδέει τις ιδιάζουσες τιμές και συναρτήσεις είναι:

$$\int_0^1 K(s,t) v_i(t) dt = \mu_i u_i(s), \quad i=1,2,\dots \quad (2.8)$$

Για κάθε ιδιάζουσα τιμή  $\mu_i$  πολλαπλότητας 1 υπάρχουν μοναδικές ιδιάζουσες συναρτήσεις  $u_i$  και  $v_i$ , οι οποίες μπορούν να αντικατασταθούν από τις  $-u_i$  και  $-v_i$  αντίστοιχα, διότι:

$$\int_0^1 K(s,t)(-v_i(t)) dt = -\int_0^1 K(s,t)(v_i(t)) dt = -\mu_i u_i(s) = \mu_i(-u_i(s)). \quad (2.9)$$



Αν οι ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$  έχουν πολλαπλότητα μεγαλύτερη από 1, για παράδειγμα  $\mu_{i-1} > \mu_i = \dots = \mu_{i+\nu} > \mu_{i+\nu+1}$  τότε δεν αντιστοιχούν σε μοναδικές ιδιάζουσες συναρτήσεις, αλλά οι υπόχωροι  $\text{span}\{u_i, \dots, u_{i+\nu}\}$  και  $\text{span}\{v_i, \dots, v_{i+\nu}\}$  είναι μοναδικοί. Συνεπώς μπορούμε να αντικαταστήσουμε τα  $u_i$  (και αντίστοιχα τα  $v_i$ ) με γραμμικούς συνδυασμούς των  $u_i, \dots, u_{i+\nu}$  (αντίστοιχα των  $v_i, \dots, v_{i+\nu}$ ) με την προϋπόθεση το άθροισμα των τετραγώνων των συντελεστών να είναι ίσο με τη μονάδα. Για παράδειγμα, αν  $\mu_1 = \mu_2$  τότε:

$$\begin{aligned} \int_0^1 K(s,t)(\lambda_1 v_1(t) + \lambda_2 v_2(t))dt &= \lambda_1 \mu_1 u_1(s) + \lambda_2 \mu_2 u_2(s) \\ &= \mu_1 (\lambda_1 u_1(s) + \lambda_2 u_2(s)), \quad (2.10) \end{aligned}$$

όπου  $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$  και  $\lambda_1^2 + \lambda_2^2 = 1$ . Η προϋπόθεση για το άθροισμα των συντελεστών είναι απαραίτητη έτσι ώστε οι καινούργιες ιδιάζουσες συναρτήσεις να έχουν μοναδιαία νόρμα-2, δηλαδή να είναι ορθοκανονικές.

Οι ιδιάζουσες τιμές φθίνουν προς το μηδέν και όσο πιο ομαλή είναι η συνάρτηση πυρήνα  $K$  τόσο πιο γρήγορη είναι η σύγκλιση.

Μία ακόμα σημαντική ιδιότητα των ιδιαζουσών συναρτήσεων είναι ότι σχηματίζουν βάσεις του συναρτησιακού χώρου των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων  $L_2([0,1]) = \left\{ f : [0,1] \rightarrow \mathbb{R} : \int_0^1 |F(x)|^2 dx < \infty \right\}$ .

## 2.5 Συνθήκη Picard

Χρησιμοποιώντας τις ιδιάζουσες τιμές και συναρτήσεις καθώς και τις παραπάνω ιδιότητες μπορούμε να εξάγουμε κάποια συμπεράσματα για την ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους. Θα αναπτύξουμε τις συναρτήσεις  $f$  και  $g$ , μέσω των ορθοκανονικών συναρτήσεων  $u_i$  και  $v_i$ :

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i, f \rangle v_i(t) \quad \text{και} \quad g(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i, g \rangle u_i(s). \quad (2.11)$$

Παρατηρούμε ότι αν εισάγουμε το ανάπτυγμα της  $f$  στην ολοκληρωτική εξίσωση και χρησιμοποιήσουμε τη θεμελιώδη σχέση, η συνάρτηση  $g$  μπορεί να γραφεί ως:

$$\begin{aligned}
g(s) &= \int_0^1 K(s,t) f(t) dt = \\
&= \int_0^1 K(s,t) \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i, f \rangle v_i(t) dt = \\
&= \int_0^1 K(s,t) \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \sum_{i=1}^n \langle v_i, f \rangle v_i(t) \right) dt = \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \int_0^1 K(s,t) \sum_{i=1}^n \langle v_i, f \rangle v_i(t) dt \right) = \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \sum_{i=1}^n \langle v_i, f \rangle \int_0^1 K(s,t) v_i(t) dt \right) = \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i \langle v_i, f \rangle u_i(s)
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Όταν αντικαταστήσουμε τα αναπτύγματα για τις  $f$  και  $g$  στην ολοκληρωτική εξίσωση και κάνουμε πάλι χρήση της θεμελιώδους σχέσης, λαμβάνουμε την παρακάτω σχέση:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \mu_i \langle v_i, f \rangle u_i(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i, g \rangle u_i(s) . \tag{2.13}$$

Από την παραπάνω σχέση παρατηρούμε ότι αν υπάρχουν μηδενικές ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$ , τότε υπάρχει λύση  $f(t)$  που ικανοποιεί την εξίσωση (2.1) αν μηδενίζονται τα αντίστοιχα  $\langle u_i, g \rangle u_i(s)$ .

Αν υποθέσουμε ότι όλες οι ιδιάζουσες τιμές είναι μη μηδενικές, δηλαδή  $\mu_i \neq 0$ ,  $i \in \mathbb{N}$ , τότε εξισώνοντας τους συντελεστές στη σχέση (2.13) παρατηρούμε ότι οι συντελεστές του αναπτύγματος της λύσης είναι  $\langle v_i, f \rangle = \frac{\langle u_i, g \rangle}{\mu_i}$ ,  $i = 1, 2, \dots$

Αντικαθιστώντας την έκφραση αυτή στο ανάπτυγμα για τη συνάρτηση  $f$  (εξίσωση (2.11)), παίρνουμε την παρακάτω έκφραση για τη λύση:

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\langle u_i, g \rangle}{\mu_i} v_i(t) . \tag{2.14}$$

Παρατηρούμε ότι για να υπάρχει μια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση  $f$  της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους, είναι απαραίτητο να είναι φραγμένη η νόρμα-2 της  $f$ ,  $\|f\|_2$ , και έτσι οδηγούμαστε στην εξής συνθήκη:

**Συνθήκη Picard:** Η λύση είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη αν:

$$\|f\|_2^2 = \int_0^1 f^2(t) dt = \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i, f \rangle^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \left( \frac{\langle u_i, g \rangle}{\mu_i} \right)^2 < \infty. \quad (2.15)$$

Από την παραπάνω συνθήκη παρατηρούμε ότι η λύση είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη αν οι συντελεστές του δεξιού μέλους  $\langle u_i, g \rangle$  φθίνουν πιο γρήγορα στο μηδέν από τις ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$ . Το βασικό πρόβλημα της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους είναι ότι ακόμα και αν τα πραγματικά δεδομένα ικανοποιούν τη συνθήκη Picard, τα μετρούμενα δεδομένα περιέχουν θόρυβο με αποτέλεσμα να μην ικανοποιείται η συνθήκη αυτή. Λόγω της παραβίασης της συνθήκης Picard όταν υπάρχει θόρυβος, αλλάζει η συμπεριφορά των ποσοτήτων  $\langle u_i, g \rangle$  και  $\frac{\langle u_i, g \rangle}{\mu_i}$ .

Συμπεραίνουμε ότι η παραβίαση της συνθήκης Picard είναι η πιο απλή εξήγηση για την αστάθεια της λύσης στα γραμμικά αντίστροφα προβλήματα. Μέσω του αναπτύγματος ιδιάζουσών τιμών καταλαβαίνουμε ότι για να αντιμετωπίσουμε τα προβλήματα θορύβου που παραβιάζουν τη συνθήκη Picard πρέπει να φιλτράρουμε τα στοιχεία SVE που περιέχουν θόρυβο.

## 2.6 Μη ύπαρξη λύσης

Σε αυτή την παράγραφο, θα μελετήσουμε ένα παράδειγμα μίας ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους η οποία δεν έχει τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση, δηλαδή δεν υπάρχει λύση με πεπερασμένη νόρμα-2. Έστω ότι για  $0 \leq s \leq 1$  έχουμε την εξίσωση:

$$\int_0^1 \frac{1}{s+t+1} f(t) dt = 1. \quad (2.16)$$

Ο πυρήνας και η συνάρτηση του δεξιού μέλους δίνονται από τις  $K(s, t) = \frac{1}{s+t+1}$  και  $g(s) = 1$  αντίστοιχα. Αν αναπτύξουμε το δεξί μέλος σύμφωνα με τις αριστερά ιδιάζουσες συναρτήσεις παίρνουμε μία προσέγγιση της μορφής:

$$g_k(s) = \sum_{i=1}^k \langle u_i, g \rangle u_i(s). \quad (2.17)$$

Επειδή καθώς το  $k$  αυξάνεται, το σφάλμα στο  $g_k$  μειώνεται, έχουμε ότι:

$$\|g - g_k\| \rightarrow 0, \quad \text{καθώς } k \rightarrow \infty. \quad (2.18)$$

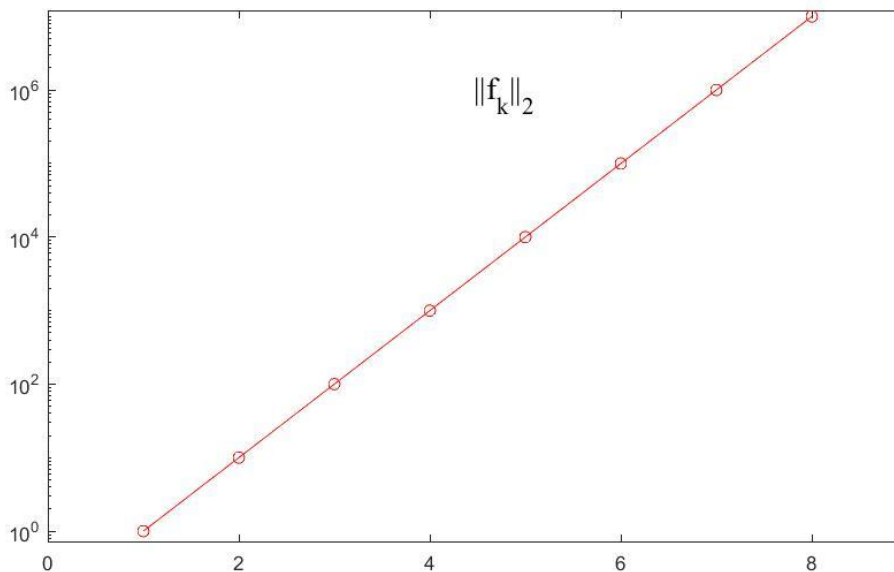
Τώρα, θεωρούμε την ολοκληρωτική εξίσωση  $\int_0^1 \frac{1}{s+t+1} f_k(t) dt = g_k(s)$ , της οποίας η λύση δίνεται από το ανάπτυγμα

$$f_k(t) = \sum_{i=1}^k \frac{\langle u_i, g \rangle}{\mu_i} v_i(t). \quad (2.19)$$

Προφανώς, η  $\|f_k\|_2$  είναι πεπερασμένη για κάθε  $k$ , αλλά παρατηρούμε ότι η νόρμα της λύσης  $f_k$  αυξάνεται καθώς το  $k$  αυξάνεται (Σχήμα 2.1), ώστε:

$$\|f_k\|_2 \rightarrow \infty, \quad \text{καθώς } k \rightarrow \infty. \quad (2.20)$$

Συνεπώς, αυτές οι συναρτήσεις δεν συγκλίνουν σε κάποια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση.



**Σχήμα 2:** Η νόρμα της προσεγγιστικής λύσης  $f_k$ .

## 2.7 Το πρόβλημα μοναδικότητας λύσης στα αντίστροφα προβλήματα

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, τα αντίστροφα προβλήματα είναι μη καλά τοποθετημένα και επομένως παραβιάζουν τις συνθήκες του Hadamard. Έχουμε μελετήσει τις συνθήκες της ύπαρξης λύσης και της αστάθειας της λύσης λόγω της ευαισθησίας της στις διαταραχές του δεξιού μέλους. Η παραβίαση της μοναδικότητας της λύσης είναι πολύ σημαντική, καθώς δεν έχουν όλες οι ολοκληρωτικές εξισώσεις Fredholm πρώτου είδους μοναδική λύση. Η μη μοναδικότητα της λύσης στα αντίστροφα προβλήματα αναφέρεται ως ασάφεια (ambiguity) και υπάρχουν δύο είδη ασάφειας: ασάφεια μηδενικού χώρου (null-space ambiguity) και ασάφεια στη διατύπωση (formulation ambiguity).

### 1. Ασάφεια μηδενικού χώρου (null-space ambiguity)

Στην παραβίαση μοναδικότητας αυτού του είδους, υπάρχουν συναρτήσεις  $f_{null} \neq 0$  ώστε στη γενική περίπτωση:

$$\int_0^1 K(s,t) f_{null}(t) dt = 0. \quad (2.21)$$

Οι συναρτήσεις αυτές λέγονται μηδενιστές (annihilators) και αν μία συνάρτηση  $f_{null}$  είναι μηδενιστής, τότε και κάθε γραμμικό πολλαπλάσιό της είναι μηδενιστής. Το

σύνολο των γραμμικών συνδυασμών των μηδενιστών ονομάζεται μηδενικός χώρος (null space) και σχετίζεται με τον πυρήνα  $K(s, t)$ .

Από τη θεμελιώδη σχέση (2.8) παρατηρούμε ότι ο μηδενικός χώρος αποτελείται από όλες τις δεξιά ιδιάζουσες συναρτήσεις  $v_i(t)$ , καθώς και τους γραμμικούς συνδυασμούς αυτών, που αντιστοιχούν στις μηδενικές ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$ , δηλαδή είναι το σύνολο  $\text{span}\{v_i(t) : \mu_i = 0, i \in \mathbb{N}, t \in [0, 1]\}$ . Στην ιδανική περίπτωση, η διάσταση του μηδενικού χώρου είναι ίση με μηδέν και επομένως η μόνη συνάρτηση που ικανοποιεί τη σχέση (2.21) είναι η τετριμμένη  $f_{null} = 0$ . Γενικά, η διάσταση του μηδενικού χώρου μπορεί να είναι πεπερασμένη, όταν υπάρχει πεπερασμένος αριθμός μηδενικών ιδιάζουσών τιμών, ή άπειρη, όταν υπάρχει πεπερασμένος αριθμός μη μηδενικών ιδιάζουσών τιμών. Αν η διάσταση του μηδενικού χώρου είναι άπειρη, ο πυρήνας  $K(s, t)$  λέγεται εκφυλισμένος.

Οι μηδενιστές εμφανίζονται σε πολλές εφαρμογές, όπως είναι η θεωρία δυναμικού στη γεωφυσική, η ακουστική και η ηλεκτρομαγνητική θεωρία. Μέσω της διακριτοποίησης των προβλημάτων προσπαθούμε να τους εντοπίσουμε και να τους υπολογίσουμε αριθμητικά ώστε να περιορίσουμε τη συνεισφορά τους στη λύση.

## 2. Ασάφεια στη διατύπωση (formulation ambiguity)

Αυτή η παραβίαση μοναδικότητας προκύπτει όταν δύο διαφορετικές ολοκληρωτικές εξισώσεις με διαφορετικούς πυρήνες οδηγούν στην ίδια συνάρτηση  $g$ . Ένα κλασσικό παράδειγμα προέρχεται από τη θεωρία δυναμικού: έστω ένα ηλεκτρικό πεδίο  $g$  εξωτερικά ενός τρισδιάστατου χώρου  $\Omega$ . Τότε από την τρίτη ταυτότητα του Green έχουμε ότι κάθε ηλεκτρικό πεδίο  $g$  εξωτερικά του  $\Omega$  μπορεί να παραχθεί είτε από μία πηγή εσωτερικά του  $\Omega$  είτε από ένα λεπτό στρώμα πηγών στην επιφάνεια του  $\Omega$ .

Η επιλογή της διατύπωσης εξαρτάται από το ποιο μοντέλο περιγράφει καλύτερα το φυσικό πρόβλημα που μελετάμε. Συνεπώς, η ασάφεια στη διατύπωση είναι πρόβλημα μοντελοποίησης του προβλήματος και όχι υπολογιστικό πρόβλημα, όπως είναι η ασάφεια μηδενικού χώρου.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 Διακριτοποίηση Αντίστροφων Προβλημάτων

### 3.1 Εισαγωγή

Το ανάπτυγμα ιδιαιζουσών τιμών που αναπτύχθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο είναι δύσκολο και δύσκολο να υπολογιστεί αναλυτικά. Ως εκ τούτου, σε αυτό το κεφάλαιο θα μετατρέψουμε το συνεχές πρόβλημα της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους σε ένα διακριτό και γραμμικό πρόβλημα το οποίο θα μπορεί να υπολογιστεί αριθμητικά. Θα μελετήσουμε δύο μεθόδους διακριτοποίησης, τη μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης και τη μέθοδο αναπτύγματος Galerkin. Στη συνέχεια θα αναλύσουμε την παραγοντοποίηση ιδιαιζουσών τιμών (Singular Value Decomposition) ενός πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , την οποία θα καλούμε SVD.

Για τη διευκόλυνση της παρουσίασης των μεθόδων, θεωρούμε ότι ο πίνακας  $A$  έχει διάσταση  $m \times n$ , η δεξιά πλευρά  $b$  έχει  $m$  στοιχεία και το διάνυσμα της λύσης  $x$  έχει μήκος  $n$ . Αν ο πίνακας είναι τετραγωνικός, δηλαδή  $m = n$ , το πρόβλημα παίρνει τη μορφή ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων,

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

Όταν  $m > n$  το σύστημα έχει περισσότερες εξισώσεις από αγνώστους και το πρόβλημα παίρνει τη μορφή ενός γραμμικού προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων,

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

### 3.2 Μέθοδος αριθμητικής ολοκλήρωσης

Οι αριθμητικές μέθοδοι ολοκλήρωσης, γνωστές και ως μέθοδοι Nyström, βασίζονται στο γενικό κανόνα προσέγγισης του ολοκληρώματος:

$$\int_0^1 \varphi(t) dt = \sum_{j=1}^n \omega_j \varphi(t_j) + E_n, \quad (3.1)$$

όπου  $\varphi$  η συνάρτηση της οποίας θέλουμε να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα,  $E_n$  το σφάλμα ολοκλήρωσης,  $t_1, t_2, \dots, t_n$  τα  $n$  επιλεγμένα σημεία του διαστήματος ολοκλήρωσης και  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$  τα αντίστοιχα βάρη.

Ουσιαστικά, για το πρόβλημα που μελετάμε, η παραπάνω μέθοδος υπολογίζει προσεγγίσεις  $\tilde{f}_j = \tilde{f}(t_j)$  της λύσης στα επιλεγμένα σημεία  $t_1, t_2, \dots, t_n$  του πεδίου ορισμού της  $f$ . Για παράδειγμα, χρησιμοποιώντας τον κανόνα του μέσου στο διάστημα  $[0,1]$  έχουμε:

$$t_j = \frac{j-1}{n}, \quad \omega_j = \frac{1}{n}, \quad j=1,2,\dots,n. \quad (3.2)$$

Βάσει του παραπάνω κανόνα, το ολοκλήρωμα

$$\psi(s) = \int_0^1 K(s,t) f(t) dt, \quad (3.3)$$

προσεγγίζεται από το παρακάτω άθροισμα:

$$\psi(s) = \sum_{j=1}^n \omega_j K(s, t_j) f(t_j) + E_n(s). \quad (3.4)$$

Παρατηρούμε ότι το αποτέλεσμα συνεχίζει να είναι συνάρτηση του  $s$  και για αυτό και ο όρος του σφάλματος είναι συνάρτηση του  $s$ .

Στη συνέχεια απαιτούμε η συνάρτηση  $\psi$  να ισούται με τη συνάρτηση  $g$  του δεξιού μέλους της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους στα  $n$  επιλεγμένα σημεία, δηλαδή:

$$\psi(s_i) = g(s_i), \quad i=1,2,\dots,n, \quad (3.5)$$

όπου  $g(s_i)$  οι τιμές της συνάρτησης  $g$  που έχουν μετρηθεί πειραματικά. Έτσι οδηγούμαστε στο παρακάτω σύστημα εξισώσεων:

$$\sum_{j=1}^n \omega_j K(s_i, t_j) f(t_j) = g(s_i) - E_n(s_i), \quad i=1,2,\dots,n. \quad (3.6)$$



Απαλείφοντας το σφάλμα  $E_n(s_i)$  σε κάθε σχέση, εισάγουμε ένα σφάλμα στην τελική λύση και επομένως πρέπει να αντικαταστήσουμε τις πραγματικές τιμές  $f(t_j)$  με τις προσεγγιστικές τιμές  $\tilde{f}_j$ . Τότε, καταλήγουμε στις σχέσεις:

$$\sum_{j=1}^n \omega_j K(s_i, t_j) \tilde{f}_j = g(s_i), \quad i=1,2,\dots,n. \quad (3.7)$$

Οι παραπάνω σχέσεις αποτελούν ένα  $n \times n$  σύστημα γραμμικών εξισώσεων με αγνώστους τα  $\tilde{f}_j = \tilde{f}(t_j)$ ,  $j=1,2,\dots,n$ , το οποίο μπορεί να γραφεί σε μορφή πινάκων:

$$\begin{pmatrix} \omega_1 K(s_1, t_1) & \omega_2 K(s_1, t_2) & \dots & \omega_n K(s_1, t_n) \\ \omega_1 K(s_2, t_1) & \omega_2 K(s_2, t_2) & \dots & \omega_n K(s_2, t_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_1 K(s_n, t_1) & \omega_2 K(s_n, t_2) & \dots & \omega_n K(s_n, t_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{f}_1 \\ \tilde{f}_2 \\ \vdots \\ \tilde{f}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(s_1) \\ g(s_2) \\ \vdots \\ g(s_n) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Η παραπάνω σχέση αντιστοιχεί σε ένα γραμμικό σύστημα  $Ax = b$ ,  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  με

$$\begin{cases} a_{ij} = \omega_j K(s_i, t_j) \\ x_j = \tilde{f}(t_j) \\ b_i = g(s_i) \end{cases}, \quad i, j=1,2,\dots,n, \quad (3.9)$$

και άγνωστο το διάνυσμα  $x^T = (\tilde{f}_1, \tilde{f}_2, \dots, \tilde{f}_n)$  των προσεγγιστικών τιμών της συνάρτησης  $f$ .

### 3.3 Μέθοδος αναπτύγματος Galerkin

Στη γενική τους μορφή, οι μέθοδοι αναπτύγματος υπολογίζουν μία προσέγγιση της μορφής:

$$f^{(n)}(t) = \sum_{j=1}^n \zeta_j \varphi_j(t), \quad (3.10)$$

όπου οι συναρτήσεις  $\varphi_1(t), \dots, \varphi_n(t)$  ονομάζονται συναρτήσεις βάσης ή συναρτήσεις αναπτύγματος και τα  $\zeta_1, \dots, \zeta_n$  είναι οι συντελεστές του αναπτύγματος τους οποίους θέλουμε να υπολογίσουμε.

Για τη μέθοδο αναπτύγματος Galerkin, πρέπει να διαλέγουμε δύο σύνολα συναρτήσεων  $\varphi_i$  και  $\psi_j$  με τη βοήθεια των οποίων θα εκφράσουμε τις συναρτήσεις  $f$  και  $g$  αντίστοιχα. Επομένως θα έχουμε:

$$f(t) = f^{(n)}(t) + E_f(t), \quad f^{(n)} \in \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}, \quad (3.11)$$

$$g(s) = g^{(n)}(s) + E_g(s), \quad g^{(n)} \in \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}, \quad (3.12)$$

όπου  $E_f$  και  $E_g$  είναι τα σφάλματα αναπτύγματος των  $f$  και  $g$  αντίστοιχα, εξαιτίας της χρήσης βάσεων πεπερασμένης διάστασης.

Ορίζουμε τη συνάρτηση  $\theta(s)$  η οποία ισούται με το αριστερό μέλος της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους και αντικαθιστώντας την προσεγγιστική λύση  $f^{(n)}(t)$  έχουμε:

$$\theta(s) = \int_0^1 K(s,t) f^{(n)}(t) dt = \sum_{j=1}^n \zeta_j \int_0^1 K(s,t) \varphi_j(t) dt, \quad (3.13)$$

και όμοια με τις συναρτήσεις  $f$  και  $g$ , η συνάρτηση  $\theta$  μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$\theta(s) = \theta^{(n)}(s) + E_\theta(s), \quad \theta^{(n)} \in \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}. \quad (3.14)$$

Οι συναρτήσεις βάσης  $\varphi_i$  και  $\psi_j$  πρέπει να αντιπροσωπεύουν τις πληροφορίες που γνωρίζουμε για τη συνάρτηση λύσης  $f$  και τη συνάρτηση της δεξιάς πλευράς  $g$  αντίστοιχα.

Στη γενική περίπτωση η συνάρτηση  $\theta$  δεν ταυτίζεται με τη  $g$  και η  $\theta$  δεν ανήκει στον υπόχωρο  $\text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$  στον οποίο ανήκει η  $g$ . Αυτό το φαινόμενο οδηγεί στο σφάλμα  $E_\theta(s)$ . Ας θεωρήσουμε τώρα ότι οι  $\theta^{(n)}$  και  $g^{(n)}$  είναι οι μοναδικές

ορθογώνιες προβολές των  $\theta$  και  $g$  στον υπόχωρο  $\text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ . Η βασική ιδέα της μεθόδου Galerkin είναι ο προσδιορισμός των συντελεστών  $\zeta_j$  έτσι ώστε οι συναρτήσεις  $\theta^{(n)}$  και  $g^{(n)}$  να είναι ίσες, δηλαδή:

$$\begin{aligned}\theta^{(n)}(s) &= g^{(n)}(s) \Leftrightarrow \\ \theta(s) - E_\theta(s) &= g(s) - E_g(s) \Leftrightarrow \\ \theta(s) - g(s) &= E_\theta(s) - E_g(s)\end{aligned}\quad (3.15)$$

Επειδή οι συναρτήσεις  $E_\theta(s)$  και  $E_g(s)$  είναι ορθογώνιες στον υπόχωρο  $\text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ , η συνθήκη Galerkin μπορεί να χαρακτηριστεί ως η απαίτηση η συνάρτηση  $\theta(s) - g(s)$ , την οποία ονομάζουμε υπόλοιπο, να είναι ορθογώνια σε κάθε μία από τις συναρτήσεις  $\psi_1, \dots, \psi_n$ . Συνεπώς, για  $i = 1, \dots, n$  έχουμε:

$$\begin{aligned}\langle \psi_i, \theta - g \rangle &= 0 \Leftrightarrow \\ \langle \psi_i, \theta \rangle - \langle \psi_i, g \rangle &= 0 \Leftrightarrow \\ \langle \psi_i, g \rangle &= \langle \psi_i, \theta \rangle \Leftrightarrow \\ \langle \psi_i, g \rangle &= \left\langle \psi_i, \int_0^1 K(s, t) f^{(n)}(t) dt \right\rangle \Leftrightarrow \\ \langle \psi_i, g \rangle &= \sum_{j=1}^n \zeta_j \left\langle \psi_i, \int_0^1 K(s, t) \varphi_j(t) dt \right\rangle\end{aligned}\quad (3.16)$$

Όμοια με τη μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης, καταλήγουμε σε ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων της μορφής  $Ax = b$ , το οποίο σε μορφή πινάκων γράφεται ως:

$$\begin{pmatrix} \int_0^1 \int_0^1 \psi_1(s) K(s, t) \varphi_1(t) ds dt & \dots & \int_0^1 \int_0^1 \psi_1(s) K(s, t) \varphi_n(t) ds dt \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_0^1 \int_0^1 \psi_n(s) K(s, t) \varphi_1(t) ds dt & \dots & \int_0^1 \int_0^1 \psi_n(s) K(s, t) \varphi_n(t) ds dt \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \vdots \\ \zeta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_0^1 \psi_1(s) g(s) ds \\ \vdots \\ \int_0^1 \psi_n(s) g(s) ds \end{pmatrix}\quad (3.17)$$

ή διαφορετικά  $Ax = b$ ,  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  και για κάθε  $i, j = 1, 2, \dots, n$ ,

$$\begin{cases} a_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \psi_i(s) K(s,t) \varphi_j(t) ds dt \\ \quad \quad \quad x_j = \zeta_i \\ b_i = \int_0^1 \psi_i(s) g(s) ds \end{cases}, \quad (3.18)$$

με άγνωστο το διάνυσμα  $x^T = (\zeta_1, \dots, \zeta_n)$  των συντελεστών αναπτύγματος.

Αν η συνάρτηση πυρήνα  $K$  είναι συμμετρική και  $\psi_i = \varphi_i$ , τότε και ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός και αυτή η προσέγγιση ονομάζεται μέθοδος Rayleigh-Ritz.

Μία χαρακτηριστική επιλογή ορθοκανονικής βάσης συναρτήσεων είναι οι “top-hat” συναρτήσεις που ορίζονται ως:

$$\chi_i(t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{h}}, & t \in [(i-1)h, ih] \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}, \quad i=1,2,\dots,n \quad (3.19)$$

Αυτές οι συναρτήσεις είναι ορθοκανονικές και έχουν μοναδιαία νόρμα-2 οπότε επιλέγοντας για κάθε  $i=1,2,\dots,n$ ,  $\varphi_i(t) = \chi_i(t)$  και  $\psi_i(s) = \chi_i(s)$  έχουμε δύο σύνολα ορθοκανονικών συναρτήσεων βάσης για τη μέθοδο αναπτύγματος Galerkin. Επομένως τα στοιχεία του πίνακα  $A$  και του διανύσματος  $b$  της σχέσης (3.18) θα είναι:

$$a_{ij} = \frac{1}{h} \int_{(i-1)h}^{ih} \int_{(j-1)h}^{jh} K(s,t) ds dt, \quad (3.20)$$

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{(i-1)h}^{ih} g(s) ds. \quad (3.21)$$

### 3.4 Επιλογή μεθόδου διακριτοποίησης

Η επιλογή της κατάλληλης από τις παραπάνω δύο μεθόδους διακριτοποίησης εξαρτάται από τα διαθέσιμα δεδομένα, το είδος του προβλήματος το οποίο μας ζητείται να επιλύσουμε και από τι είναι δυνατόν να υπολογιστεί.

Οι μέθοδοι αριθμητικής ολοκλήρωσης είναι απλούστερες στη χρήση και στην εφαρμογή από τη μέθοδο αναπτύγματος Galerkin. Αυτό συμβαίνει διότι τα στοιχεία του πίνακα είναι δειγματικές τιμές του πυρήνα  $K$  σε συγκεκριμένα σημεία. Ακόμα, υπάρχει η δυνατότητα επιλογής της μεθόδου διακριτοποίησης ώστε να λαμβάνονται

υπόψη οι ιδιότητες των συναρτήσεων  $K$  και  $f$ . Πρέπει βέβαια να τονίσουμε ότι με τις μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης υπολογίζουμε προσεγγιστικές τιμές  $\tilde{f}_j$  της συνάρτησης λύσης  $f$  σε συγκεκριμένα σημεία και δεν έχουμε πληροφορία για τη λύση σε άλλα σημεία πέρα των επιλεγμένων.

Από την άλλη μεριά, η μέθοδος αναπτύγματος Galerkin μπορεί να είναι πιο δύσκολη υπολογιστικά διότι τα στοιχεία του πίνακα περιέχουν διπλά ολοκληρώματα, για τον υπολογισμό των οποίων μπορεί να χρειαστεί να γίνει και χρήση μεθόδων αριθμητικής ολοκλήρωσης. Υπάρχει, βέβαια, η δυνατότητα επιλογής κατάλληλων συναρτήσεων βάσης για κάθε πρόβλημα και αν οι συναρτήσεις βάσης είναι ορθοκανονικές τότε δημιουργείται μία σχέση μεταξύ του αναπτύγματος ιδιαζουσών τιμών και της παραγοντοποίησης ιδιαζουσών τιμών του πίνακα. Η μέθοδος αναπτύγματος Galerkin μας δίνει μία προσεγγιστική λύση η οποία είναι γνωστή σε όλο το διάστημα στο οποίο ορίζεται το  $t$  διότι η συνάρτηση  $f^{(n)}$  εκφράζεται μέσω των συναρτήσεων βάσης  $\varphi_j(t)$ .

Στις εφαρμογές, οι πληροφορίες για το δεξί μέλος  $g$  προέρχονται κυρίως από θορυβώδη δείγματα  $b_i = g(s_i)$ . Στις μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης χρησιμοποιούμε διακριτές τιμές στα δειγματικά σημεία  $s_i$ . Στη μέθοδο αναπτύγματος Galerkin, υπάρχουν δύο βασικές επιλογές για τις συναρτήσεις βάσεις  $\psi_i$  της δεξιάς πλευράς. Η πρώτη επιλογή είναι οι “delta” συναρτήσεις  $\psi_i(s) = \delta(s - s_i)$ , οι οποίες αντιπροσωπεύουν δειγματικά τη συνάρτηση  $g$ , διότι  $\int_0^1 \delta(s - s_i) g(s) ds = g(s_i)$ . Η δεύτερη επιλογή είναι οι “top-hat” συναρτήσεις  $\psi_i(s) = \chi_i(s)$  (3.19), οι οποίες αντιπροσωπεύουν καλύτερα τα πραγματικά δεδομένα.

### 3.5 Παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (SVD)

Για να αναλύσουμε τις μεθόδους διακριτοποίησης, είχαμε υποθέσει ότι ο πίνακας  $A$  είναι τετραγωνικός. Σε αυτό το σημείο, για να μελετήσουμε την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών του πίνακα θεωρούμε ότι ο πίνακας είτε είναι τετραγωνικός ή έχει περισσότερες γραμμές από στήλες. Τότε, για κάθε πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  με  $m \geq n$ , η SVD παίρνει τη μορφή:

$$A = U \Sigma V^T = \sum_{i=1}^n u_i \sigma_i v_i^T. \quad (3.22)$$

Ο πίνακας  $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$  είναι ένας διαγώνιος πίνακας, τα στοιχεία του οποίου είναι οι ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$ , δηλαδή οι τετραγωνικές ρίζες των ιδιοτιμών του

πίνακα  $AA^T$  (ή του πίνακα  $A^T A$ ). Οι ιδιάζουσες τιμές σχηματίζουν μία φθίνουσα ακολουθία, οπότε:

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n), \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0. \quad (3.23)$$

Ο πίνακας  $U \in \mathbb{R}^{m \times n}$  αποτελείται από τα αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα, δηλαδή τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα  $AA^T$ . Ο πίνακας  $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  αποτελείται από τα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα, δηλαδή τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα  $A^T A$ . Αυτοί οι δύο πίνακες έχουν ορθοκανονικές στήλες, επομένως:

$$U = (u_1, \dots, u_n), \quad V = (v_1, \dots, v_n) \quad \text{και}$$

$$U^T U = V^T V = I \quad \text{ή} \quad u_i^T u_j = v_i^T v_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (3.24)$$

Με τη χρήση των ιδιάζουσών τιμών μπορούμε να εκφράσουμε τη νόρμα Frobenius και τη νόρμα-2 του πίνακα  $A$  ως εξής:

$$\begin{aligned} \|A\|_F &= \left( \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2} = \left( \text{trace}(A^T A) \right)^{1/2} = \\ &= \left( \text{trace}(V \Sigma^2 V^T) \right)^{1/2} = \left( \text{trace}(\Sigma^2) \right)^{1/2} = \\ &= \left( \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_n^2 \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_1 \quad (3.26)$$

Αν ο πίνακας  $A$  είναι ομαλός ( $\det(A) \neq 0$ ), τότε ορίζεται ο αντίστροφος του  $A$  ως:

$$A^{-1} = V \Sigma^{-1} U^T. \quad (3.27)$$

Συνεπώς έχουμε ότι  $\|A^{-1}\|_2 = \sigma_n^{-1}$ , και ο δείκτης κατάστασης του πίνακα  $A$  είναι:

$$\text{cond}(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} . \quad (3.28)$$

Κάποιες από τις σημαντικότερες σχέσεις των ιδιζουσών τιμών και διανυσμάτων είναι:

$$Av_i = \sigma_i u_i , \|Av_i\|_2 = \sigma_i , i = 1, \dots, n , \quad (3.29)$$

και, αν ο πίνακας  $A$  είναι τετραγωνικός και ομαλός,

$$A^{-1}u_i = \sigma_i^{-1}v_i , \|A^{-1}u_i\|_2 = \sigma_i^{-1} , i = 1, \dots, n . \quad (3.30)$$

Αν η ιδιάζουσα τιμή  $\sigma_i$  έχει πολλαπλότητα 1 υπάρχουν μοναδικά ιδιάζοντα διανύσματα  $u_i$  και  $v_i$ , τα οποία μπορούν να αντικατασταθούν από τα  $-u_i$  και  $-v_i$  αντίστοιχα, όπου και τα δύο ζευγάρια ικανοποιούν την  $Av_i = \sigma_i u_i$ .

Αν οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  έχουν πολλαπλότητα μεγαλύτερη από 1, για παράδειγμα  $\sigma_{i-1} > \sigma_i = \dots = \sigma_{i+\nu} > \sigma_{i+\nu+1}$  τότε δεν αντιστοιχούν σε μοναδικά ιδιάζοντα διανύσματα, αλλά ικανοποιούν την  $Av_i = \sigma_i u_i$  και οι υπόχωροι  $\text{span}\{u_i, \dots, u_{i+\nu}\}$  και  $\text{span}\{v_i, \dots, v_{i+\nu}\}$  είναι μοναδικοί.

Θα χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις (3.29) και (3.30) για να εκφράσουμε τη λύση  $x = A^{-1}b$ . Επειδή οι πίνακες  $U$  και  $V$  είναι ορθογώνιοι, μπορούμε να γράψουμε τα διανύσματα  $x$  και  $b$  ως εξής:

$$x = VV^T x = V \begin{pmatrix} v_1^T x \\ \vdots \\ v_n^T x \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n (v_i^T x) v_i ,$$

$$b = UU^T b = U \begin{pmatrix} u_1^T b \\ \vdots \\ u_n^T b \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n (u_i^T b) u_i . \quad (3.31)$$

Χρησιμοποιώντας την έκφραση για το  $x$  και κάνοντας χρήση της σχέσης (3.29) έχουμε:

$$Ax = A \sum_{i=1}^n (v_i^T x) v_i = \sum_{i=1}^n (v_i^T x) A v_i \stackrel{(3.29)}{=} \sum_{i=1}^n \sigma_i (v_i^T x) u_i. \quad (3.32)$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις για τα  $Ax$  και  $b$ , έχουμε:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sigma_i (v_i^T x) u_i &= \sum_{i=1}^n (u_i^T b) u_i \Rightarrow \\ \sigma_i (v_i^T x) &= (u_i^T b) \stackrel{\sigma_i \neq 0}{\Rightarrow} (v_i^T x) = \frac{(u_i^T b)}{\sigma_i}, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Επομένως η λύση δίνεται από τη σχέση:

$$x = A^{-1}b = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i. \quad (3.34)$$

### 3.6 Η ανάλυση SVD και η διακριτή συνθήκη Picard

Η σχέση μεταξύ της παραγοντοποίησης ιδιαιζουσών τιμών και του αναπτύγματος ιδιαιζουσών τιμών μας επιτρέπει να υπολογίσουμε προσεγγίσεις του SVE χρησιμοποιώντας την SVD και τη μέθοδο αναπτύγματος Galerkin. Αν υπολογίσουμε τα στοιχεία του πίνακα  $A$  σύμφωνα με τη σχέση (3.18), τότε οι ιδιαιζουσες τιμές  $\sigma_i$  του  $A$  είναι προσεγγίσεις των ιδιαιζουσών τιμών  $\mu_i$  του  $K$ . Ειδικότερα, έστω ότι οι συναρτήσεις βάσης της μεθόδου Galerkin είναι ορθοκανονικές και ορίζουμε τη θετική ποσότητα  $\Delta_n$  έτσι ώστε

$$\Delta_n^2 = \|K\|_2^2 - \|A\|_F^2, \quad \text{όπου} \quad \|K\|_2^2 \equiv \int_0^1 \int_0^1 |K(s,t)|^2 ds dt. \quad (3.35)$$

Αν συμβολίσουμε με  $\sigma_i^{(n)}$  τις ιδιαιζουσες τιμές του  $n \times n$  πίνακα  $A$ , αποδεικνύεται ότι:

$$0 \leq \mu_i - \sigma_i^{(n)} \leq \Delta_n, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.36)$$



$$\sigma_i^{(n)} \leq \sigma_i^{(n+1)} \leq \mu_i, \quad i=1, \dots, n, \quad (3.37)$$

Συμπεραίνουμε ότι οι ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$  είναι καλύτερες προσεγγίσεις από τις ιδιάζουσες τιμές του πυρήνα  $K$  και ότι το σφάλμα φράσσεται από την ποσότητα  $\Delta_n$ . Ακόμη, μπορούμε να βρούμε προσεγγίσεις για τις αριστερά και δεξιά ιδιάζουσες συναρτήσεις του SVE με χρήση της SVD, οπότε για  $j=1, \dots, n$  έχουμε:

$$u_j^{(n)}(s) = \sum_{i=1}^n u_{ij} \psi_i(s), \quad v_j^{(n)}(t) = \sum_{i=1}^n v_{ij} \varphi_i(t). \quad (3.38)$$

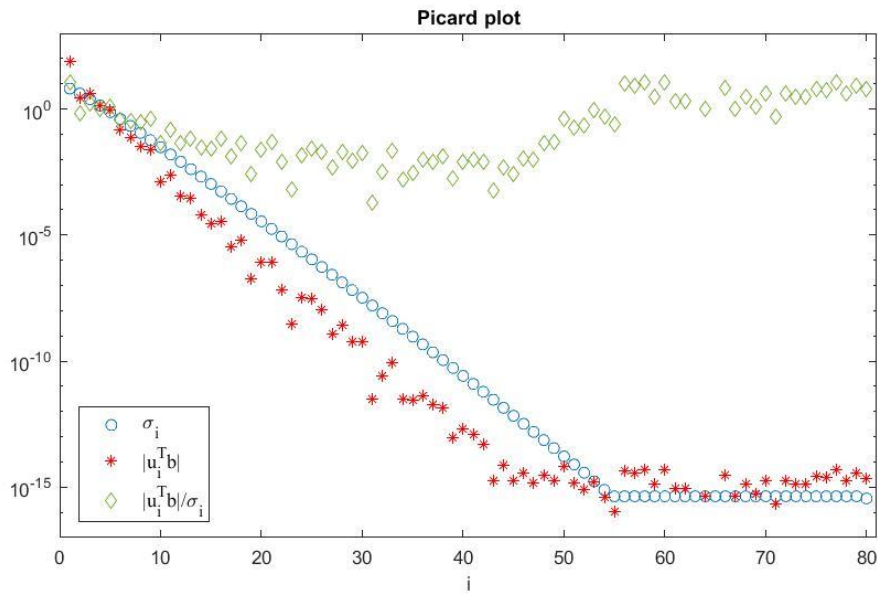
Τότε αυτές οι συναρτήσεις συγκλίνουν στις ιδιάζουσες συναρτήσεις, δηλαδή  $u_j^{(n)}(s) \rightarrow u_j(s)$  και  $v_j^{(n)}(t) \rightarrow v_j(t)$  καθώς  $n \rightarrow \infty$ .

Μία σημαντική συνέπεια αυτής της ιδιότητας των ιδιαζουσών συναρτήσεων είναι ότι οι συντελεστές SVD  $u_i^T b$  είναι προσεγγίσεις των αντίστοιχων εσωτερικών γινομένων  $\langle u_i, g \rangle$  της βάσης του SVE. Παρατηρούμε ότι τα εσωτερικά γινόμενα  $\langle u_j^{(n)}, g^{(n)} \rangle$  είναι καλύτερες προσεγγίσεις από τα  $\langle u_i, g \rangle$ . Από τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου δύο συναρτήσεων και των εκφράσεων για τα  $u_j^{(n)}(s)$  και  $g^{(n)}$  έχουμε για  $j=1, \dots, n$ :

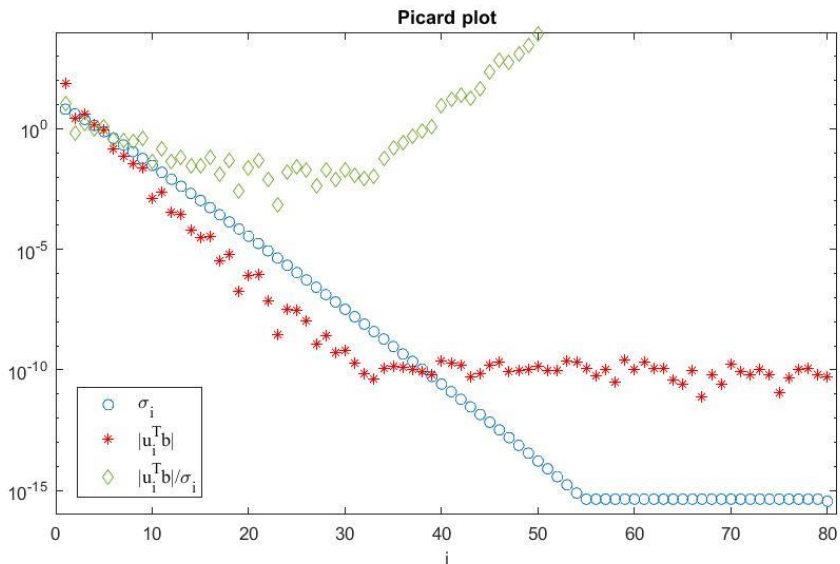
$$\begin{aligned} \langle u_j^{(n)}, g^{(n)} \rangle &= \int_0^1 \sum_{i=1}^n u_{ij} \psi_i(s) \sum_{k=1}^n b_k \psi_k(s) ds = \\ &= \sum_{i=1}^n u_{ij} \sum_{k=1}^n b_k \langle \psi_i, \psi_k \rangle = \sum_{i=1}^n u_{ij} b_i = u_j^T b \end{aligned} \quad (3.39)$$

Συνεπώς, μπορούμε να μελετήσουμε όλες τις σχέσεις του SVE, υπολογίζοντας την SVD του πίνακα  $A$  και έπειτα να χρησιμοποιήσουμε τις αριθμητικές ποσότητες για να εξετάσουμε αν ικανοποιείται η συνθήκη Picard.

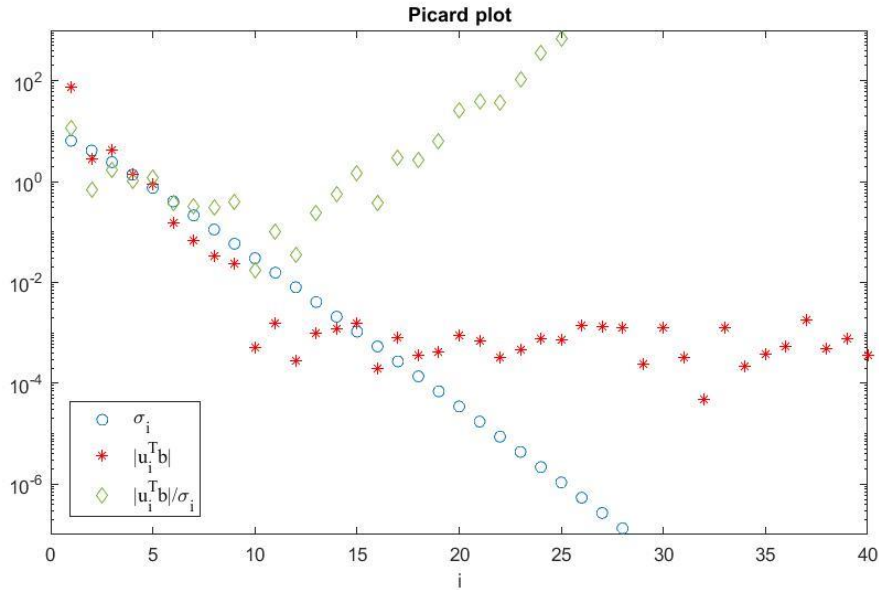
Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε τους συντελεστές  $|u_i^T b|$  του δεξιού μέλους και τους συντελεστές  $|u_i^T b|/\sigma_i$  της λύσης. Το διάγραμμα που περιλαμβάνει τις ιδιάζουσες τιμές και αυτούς τους συντελεστές ονομάζεται διάγραμμα Picard. Στα παρακάτω σχήματα φαίνονται ενδεικτικά διαγράμματα Picard για δεδομένα που δεν περιέχουν θόρυβο και για δεδομένα με μικρής και μεγάλης τάξης Γκαουσιανό λευκό θόρυβο στη δεξιά πλευρά  $b$ .



**Σχήμα 3.1 :** Το διάγραμμα Picard για δεδομένα χωρίς θόρυβο. Παρατηρούμε ότι οι συντελεστές  $|u_i^T b|$  αρχικά μειώνονται και μετά από ένα σημείο σταθεροποιούνται λόγω σφαλμάτων στρογγυλοποίησης. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα οι συντελεστές  $|u_i^T b|/\sigma_i$  της λύσης για μεγάλες τιμές του  $i$  να αυξάνονται.



**Σχήμα 3.2 :** Το διάγραμμα Picard για δεδομένα με θόρυβο της τάξης  $10^{-10}$ .



**Σχήμα 3.3 :** Το διάγραμμα Picard για δεδομένα με θόρυβο της τάξης  $10^{-3}$ . Για μεγάλα επίπεδα θορύβου, παραμένουν λιγότεροι συντελεστές SVD,  $|u_i^T b|$  πάνω από το επίπεδο θορύβου.

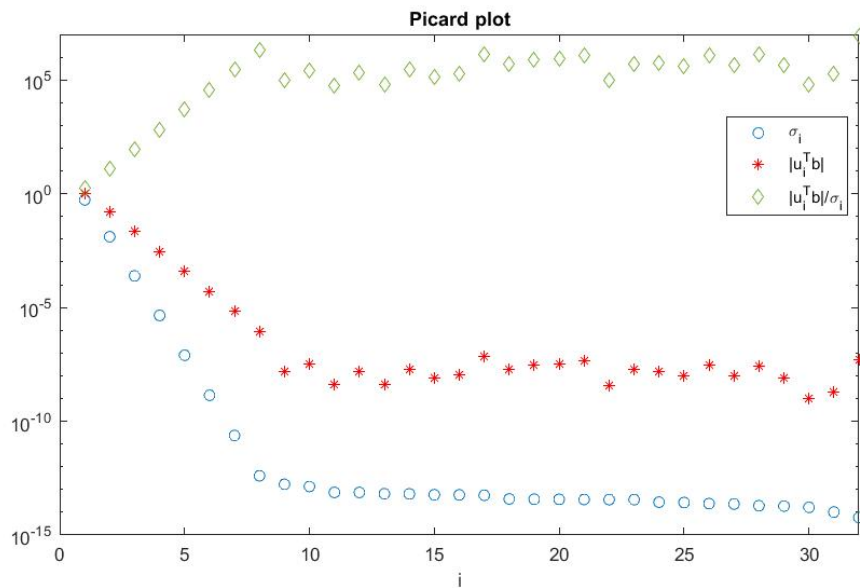
Παρατηρούμε ότι είτε υπάρχει θόρυβος στα δεδομένα είτε όχι, οι συντελεστές της λύσης αρχικά μειώνονται και για μεγάλες τιμές του  $i$  αυξάνονται. Συνεπώς, η λύση που υπολογίζουμε εξαρτάται κυρίως από τους συντελεστές SVD που αντιστοιχούν στις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές. Για να μπορούμε να ελέγχουμε εάν η λύση του διακριτού προβλήματος αποτελεί μία προσεγγιστική λύση του συνεχούς προβλήματος εισάγουμε την παρακάτω συνθήκη.

**Διακριτή συνθήκη Picard:** Αν θεωρήσουμε ως  $\tau$  την τιμή πέρα από την οποία οι υπολογισμένες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  σταθεροποιούνται λόγω λαθών στρογγυλοποίησης, τότε η διακριτή συνθήκη Picard ικανοποιείται αν για όλες τις ιδιάζουσες τιμές που είναι μεγαλύτερες από  $\tau$ , οι αντίστοιχοι συντελεστές  $|u_i^T b|$  φθίνουν με πιο γρήγορο ρυθμό από τις ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ .

Συνήθως, αρκεί να παρατηρήσουμε το διάγραμμα Picard για να ελέγξουμε αν ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard. Στο διάγραμμα Picard, δεν λαμβάνουμε υπόψη το κομμάτι που αντιστοιχεί στις πολύ μικρές ιδιάζουσες τιμές και αν η δεξιά πλευρά  $b$  περιέχει θόρυβο, παραβλέπουμε τις συνιστώσες για τις οποίες τα  $|u_i^T b|$  σταθεροποιούνται λόγω σφαλμάτων στρογγυλοποίησης.

Ας επιστρέψουμε, για παράδειγμα, στο πρόβλημα  $\int_0^1 \frac{1}{s+t+1} f(t) dt = 1$  της παραγράφου (2.6) το οποίο είχαμε δείξει ότι δεν έχει τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση  $f$ .

Από το διάγραμμα Picard του διακριτοποιημένου προβλήματος για  $n = 32$  (σχήμα 3.4) φαίνεται ότι δεν ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard. Ειδικότερα, οι συντελεστές  $|u_i^T b|$  φθίνουν με πολύ πιο αργό ρυθμό από τις ιδιάζουσες τιμές.



**Σχήμα 3.4 :** Το διάγραμμα Picard του διακριτοποιημένου προβλήματος της παραγράφου (2.6). Προφανώς δεν ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard.

### 3.7 Προσέγγιση της μεθόδου SVE μέσω της SVD

Στο προηγούμενο κεφάλαιο, αναφέραμε ότι για να υπάρχει το ανάπτυγμα ιδιάζουσών τιμών πρέπει ο πυρήνας  $K$  της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμος, δηλαδή  $\int_0^1 \int_0^1 K^2(s,t) ds dt < \infty$ .

Θα μελετήσουμε με ένα παράδειγμα τον υπολογισμό προσεγγίσεων του SVE με χρήση της SVD.

Αρχικά, θεωρούμε το μετασχηματισμό Laplace μίας συνάρτησης  $f$  που ορίζεται ως  $g(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt$ . Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace είναι η διαδικασία υπολογισμού της συνάρτησης  $f$  δεδομένης της  $g$ , δηλαδή η λύση της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους:

$$\int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt = g(s), \quad 0 \leq s \leq \infty \quad (3.40)$$

Παρατηρούμε ότι ο πυρήνας  $K(s, t) = e^{-st}$  δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμος διότι

$$\int_0^z (e^{-st})^2 ds = \int_0^z e^{-2st} ds = \frac{1 - e^{-2tz}}{2t} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{2t}, \quad \text{και επειδή} \quad \int_0^{\infty} \frac{1}{t} dt \rightarrow \infty \quad \text{έχουμε ότι και το}$$

ολοκλήρωμα  $\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (e^{-st})^2 ds dt$  τείνει στο άπειρο.

Ωστόσο, αν η συνάρτηση  $f$  είναι φραγμένη για  $t \rightarrow \infty$ , τότε το ολοκλήρωμα της σχέσης (3.40) ορίζεται για κάθε  $s \geq 0$  με ένα μικρό σφάλμα που προέρχεται από την αποκοπή της ολοκλήρωσης σε κάποιο μεγάλο αριθμό  $z$ . Επιπλέον, η συνάρτηση  $g(s)$  φθίνει καθώς το  $s \rightarrow \infty$  και περιορίζοντας το  $s$  στο διάστημα  $[0, z]$ , εισάγουμε ακόμα ένα μικρό σφάλμα. Τότε η ολοκληρωτική εξίσωση  $\int_0^z e^{-st} f(t) dt = g(s)$ ,  $0 \leq s \leq z$ , έχει τετραγωνικά ολοκληρώσιμο πυρήνα διότι ο  $K(s, t) = e^{-st}$  είναι φραγμένος και τα διαστήματα ολοκλήρωσης είναι πεπερασμένα.

Μπορούμε να διακριτοποιήσουμε αυτή την εξίσωση με τις συναρτήσεις βάσης “top-hat” (3.19) με  $h = \frac{z}{n}$ , οπότε τα στοιχεία του πίνακα της σχέσης (3.18) προσεγγίζονται

$$\text{από τα } a_{ij} = hK\left(\left(i - \frac{1}{2}\right)h, \left(j - \frac{1}{2}\right)h\right).$$

Αν ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace είναι περιορισμένος σε ένα πεπερασμένο διάστημα με  $z < n$ , ώστε ο πυρήνας να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμος και να ορίζεται το SVE, τότε οι προσεγγίσεις  $u_j^{(n)}$  συγκλίνουν στις ιδιάζουσες συναρτήσεις του πυρήνα. Η σύγκλιση είναι ταχύτερη για μικρές τιμές του  $s$ . Αντιθέτως, αν σταθεροποιήσουμε το  $n$  και αυξάνουμε συνεχώς το  $z$ , χρησιμοποιώντας όπως και πριν τις συναρτήσεις βάσης “top-hat” του αναπτύγματος Galerkin, τότε οι προσεγγίσεις  $u_j^{(n)}$  δεν συγκλίνουν στις ιδιάζουσες συναρτήσεις. Αυτό είναι αναμενόμενο διότι το SVE σταματάει να ορίζεται καθώς  $z \rightarrow \infty$ .

### 3.8 Δεδομένα με θόρυβο

Όπως έχουμε αναφέρει, όταν λύνουμε προβλήματα με πραγματικά δεδομένα, το βασικό πρόβλημα είναι τα σφάλματα που περιέχουν είτε λόγω ανακρίβειας των οργάνων μέτρησης ή λόγω άλλων παραγόντων. Στα μαθηματικά και τη φυσική, με τον όρο διαταραχή συμβολίζουμε μία δευτερεύουσα επίδραση σε ένα σύστημα η οποία έχει ως αποτέλεσμα η προσέγγιση να απέχει από την πραγματική λύση. Αν αλλάξουμε το δεξί μέλος της ολοκληρωτικής εξίσωσης από  $g(s)$  σε  $\tilde{g}(s) = g(s) + \delta g(s)$ , τότε η συνάρτηση  $\delta g(s)$  είναι μία διαταραχή η οποία προκαλεί αλλαγές στη συνάρτηση  $f$ .

Στο διακριτοποιημένο πρόβλημα  $Ax=b$ , η διαταραχή του δεξιού μέλους  $b$  ονομάζεται θόρυβος. Στη συνέχεια θα μελετηθούν τα σφάλματα που υπάρχουν στο  $b$ , δηλαδή ο θόρυβος.

Θεωρούμε την πραγματική λύση  $x^{exact}$  και ένα αντίστοιχο πραγματικό δεξί μέλος  $b^{exact}$ . Τότε το  $Ax=b$  είναι το διαταραγμένο σύστημα και το  $Ax^{exact}=b^{exact}$  είναι το μη διαταραγμένο σύστημα, όπου  $b=b^{exact}+e$  και το διάνυσμα  $e$  αντιπροσωπεύει το θόρυβο στα δεδομένα.

### 3.8.1 Γκαουσιανός Λευκός Θόρυβος (Gaussian White Noise)

Τα σφάλματα αποτελούν Γκαουσιανό λευκό θόρυβο όταν όλα τα στοιχεία  $e \in \mathbb{R}^m$  προέρχονται από την ίδια κατανομή Gauss με μέση τιμή  $\mu=0$  και τυπική απόκλιση  $\sigma$ , δηλαδή  $e_i \sim N(0, \sigma^2)$ ,  $i=1, \dots, m$ . Αυτό σημαίνει ότι για τον πίνακα συνδιακύμανσης του θορύβου  $e$  ισχύει ότι  $Cov(e) \equiv E(ee^T) = \sigma^2 I$ , όπου  $E(\cdot)$  η αναμενόμενη ή μέση τιμή και  $\sigma^2$  η διασπορά.

Συγκεκριμένα, τα στοιχεία  $e_i$ , ικανοποιούν:

$$E(e_i) = 0, \quad E(e_i^2) = \sigma^2, \quad E(|e_i|) = \sigma \sqrt{\frac{2}{\pi}} \approx \sigma \cdot 0.8 \quad (3.41)$$

ενώ το διάνυσμα θορύβου  $e \in \mathbb{R}^m$  ικανοποιεί:

$$E(e) = 0, \quad E(\|e\|_2^2) = \sigma^2 m, \quad E(\|e\|_2) = \sigma \frac{\sqrt{2} \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)}, \quad (3.42)$$

όπου  $\Gamma$  είναι η συνάρτηση Γάμμα και ο παράγοντας  $\frac{\sqrt{2} \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)}$  πλησιάζει με πολύ

γρήγορο ρυθμό το  $\sqrt{m}$ .

Θεωρούμε ότι τα στοιχεία του  $b^{exact}$  και του  $e$  είναι ασυσχέιστα, επομένως  $E(b) = E(b^{exact})$  και

$$Cov(b) \equiv E\left((b - E(b))(b - E(b))^T\right) =$$

$$\begin{aligned}
&= E\left(\left(b-b^{exact}\right)\left(b-b^{exact}\right)^T\right)= \\
&= E\left(ee^T\right)=\sigma^2 I
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Για τη λύση  $x$  του συστήματος  $Ax=b$ , όπου ο πίνακας  $A$  είναι αντιστρέψιμος, θα έχουμε ότι  $x=A^{-1}b=A^{-1}\left(b^{exact}+e\right)=x^{exact}+A^{-1}e$ . Επομένως ο πίνακας συνδιακύμανσης της λύσης θα είναι

$$Cov(x)=A^{-1}Cov(b)A^{-T}=\sigma^2\left(A^T A\right)^{-1}. \tag{3.44}$$

Η νόρμα αυτού του πίνακα είναι  $\|Cov(x)\|_2=\frac{\sigma^2}{\sigma_n^2}$ , όπου  $\sigma_n$  η μικρότερη ιδιάζουσα τιμή του πίνακα  $A$ .

Αν ο πίνακας είναι πολύ κακής κατάστασης, δηλαδή  $cond(A)\gg 1$ , τότε ο παραπάνω πίνακας συνδιακύμανσης έχει πολύ μεγάλα στοιχεία, το οποίο υποδηλώνει ότι η λύση  $x=A^{-1}b$  είναι πολύ ευαίσθητη σε λάθη των δεδομένων.

Για να ολοκληρωθεί η ανάλυση, θα μελετήσουμε την επίδραση του θορύβου στους συντελεστές SVD, δηλαδή στα στοιχεία του διανύσματος  $U^T b=U^T b^{exact}+U^T e$ , που δίνονται από τη σχέση:

$$u_i^T b=u_i^T\left(b^{exact}+e\right)=u_i^T b^{exact}+u_i^T e, \quad i=1,\dots,n. \tag{3.45}$$

Ο πίνακας συνδιακύμανσης του διανύσματος  $U^T e$  είναι:

$$Cov\left(U^T e\right)=U^T Cov(e)U=\sigma^2 U^T U=\sigma^2 I \tag{3.46}$$

Επομένως, το μετασχηματισμένο διάνυσμα θορύβου  $U^T e$  είναι Γκαουσιανός λευκός θόρυβος και οι σχέσεις (3.41)-(3.42) ισχύουν και για αυτό το διάνυσμα.

Υποθέτουμε ότι το διάνυσμα  $b^{exact}$  ικανοποιεί τη συνθήκη Picard, δηλαδή οι συντελεστές  $\left|u_i^T b^{exact}\right|$  φθίνουν ταχύτερα από τις ιδιάζουσες τιμές, και ότι η νόρμα της

διαταραχής  $e$  είναι μικρότερη από αυτή του  $b^{exact}$ , διότι διαφορετικά όλη η πληροφορία του  $b^{exact}$  χάνεται στο  $b$ .

Από τις παραπάνω υποθέσεις συμπεραίνουμε ότι οι συντελεστές θορύβου  $u_i^T e$  ικανοποιούν:

$$u_i^T b = u_i^T b^{exact} + u_i^T e \approx \begin{cases} u_i^T b^{exact}, & |u_i^T b^{exact}| > |u_i^T e| \\ u_i^T e, & |u_i^T b^{exact}| < |u_i^T e| \end{cases} \quad (3.47)$$

Συνεπώς, υπάρχουν δύο είδη συντελεστών του δεξιού μέλους:

- i. Οι “αξιόπιστοι” συντελεστές SVD, οι οποίοι έχουν πληροφορίες για τα πραγματικά δεδομένα  $b^{exact}$  και για τους οποίους ισχύει ότι  $|u_i^T b| \gg \sigma$ . Λόγω της διακριτής συνθήκης Picard, αυτοί οι συντελεστές αντιστοιχούν στις μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ .
- ii. Οι “θορυβώδεις” συντελεστές, για τους οποίους ισχύει ότι  $|u_i^T b^{exact}| < \sigma$  και  $|u_i^T b| \approx \sigma$ . Λόγω της διακριτής συνθήκης Picard, αυτοί οι συντελεστές αντιστοιχούν στις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ .

### 3.8.2 Ομοιόμορφα κατανεμημένος Λευκός Θόρυβος

Το διάνυσμα του λευκού θορύβου  $e$  δεν απαιτείται να έχει στοιχεία που ακολουθούν την κανονική κατανομή, αλλά πρέπει ο πίνακας συνδιακύμανσης του να ικανοποιεί τη σχέση  $Cov(e) = \sigma^2 I$ . Αν όλα τα στοιχεία  $e_i$  του  $e$  είναι ασυσχέτιστα και προέρχονται από την ίδια ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $[-\sqrt{3}\sigma, \sqrt{3}\sigma]$  τότε το  $e$  είναι διάνυσμα λευκού θορύβου οπότε:

$$E(e_i) = 0, \quad E(e_i^2) = \sigma^2, \quad E(|e_i|) = \frac{\sqrt{3}}{2} \sigma,$$

και το διάνυσμα θορύβου ικανοποιεί:

$$E(e) = 0, \quad E(\|e\|_2^2) = \sigma^2 m, \quad E(\|e\|_2) = \Upsilon_m \sqrt{m} \sigma.$$



Ο παράγοντας  $\Upsilon_m$  ικανοποιεί τη σχέση  $\frac{\sqrt{3}}{2} < \Upsilon_m < 1$  και προσεγγίζει με γρήγορο ρυθμό το 1 καθώς αυξάνεται το  $m$ .

Ο ομοιόμορφα κατανομημένος λευκός θόρυβος εμφανίζεται όταν τα μετρούμενα δεδομένα αναπαρίστανται από ένα πεπερασμένο αριθμό ψηφίων. Για παράδειγμα, αν ένας ακέραιος αντιπροσωπεύει ένα σήμα, τότε τα σφάλματα είναι ομοιόμορφα κατανομημένα στο διάστημα  $[-0.5, 0.5]$ .

### 3.9 Γενική μορφή θορύβου

Σε αρκετές εφαρμογές ο θόρυβος που συναντάται δεν είναι λευκός αλλά μπορεί να μετασχηματιστεί σε λευκό θόρυβο. Όπως έχουμε αναφέρει το βασικό χαρακτηριστικό ενός διάνυσματος λευκού θορύβου  $e$  είναι ότι ο πίνακας συνδιακύμανσης του είναι γραμμικό πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα.

Χρησιμοποιούμε τον  $m \times m$  διακριτό πίνακα Fourier  $F$ , ο οποίος ορίζεται έτσι ώστε για το διάνυσμα  $e$  και το διακριτό μετασχηματισμό Fourier του,  $\hat{e}$ , να ισχύει:

$$\hat{e} = \text{fft}(e) = \text{conj}(F)e, \quad e = \text{ifft}(\hat{e}) = \frac{1}{m} F\hat{e},$$

και να ισχύει ότι  $\text{conj}(F)F = mI$ .

Τότε ο πίνακας συνδιακύμανσης του διακριτού μετασχηματισμού Fourier  $\hat{e}$  είναι  $\text{Cov}(\hat{e}) = \text{Cov}(\text{conj}(F)e) = \text{conj}(F)\text{Cov}(e)F = m\sigma^2 I$ , άρα είναι γραμμικό πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα και επομένως το  $e$  είναι διάνυσμα λευκού θορύβου.

#### 3.9.1 Θόρυβος που σχετίζεται με το σήμα

Θεωρούμε θόρυβο ανάλογο προς τα πραγματικά δεδομένα, έτσι ώστε αν  $e$  είναι ένα διάνυσμα λευκού θορύβου, τότε:

$$b = b^{\text{exact}} + e_b, \quad \text{με } e_b = \text{diag}(b^{\text{exact}})e \quad (3.48)$$

Τα στοιχεία του διανύσματος θορύβου  $e_b$  είναι τα  $(e_b)_i = b_i^{\text{exact}} e_i$ ,  $i = 1, \dots, m$  και ο πίνακας συνδιακύμανσης είναι:

$$\text{Cov}(e_b) = \text{diag}(b^{exact}) \text{Cov}(e) \text{diag}(b^{exact}) = \sigma^2 \left( \text{diag}(b^{exact}) \right)^2$$

Για να δείξουμε ότι το διάνυσμα  $e_b$  συμπεριφέρεται όπως ο λευκός θόρυβος, αρκεί να δείξουμε ότι ο πίνακας συνδιακύμανσης του διακριτού μετασχηματισμού Fourier  $\hat{e}_b = \text{conj}(F)e_b$ ,  $\text{Cov}(\hat{e}_b) = \sigma^2 \text{conj}(F) \left( \text{diag}(b^{exact}) \right)^2 F$  προσεγγίζει κάποιο γραμμικό πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα. Αποδεικνύεται ότι η πρώτη στήλη ενός πίνακα της μορφής  $\text{conj}(F) \text{diag}(d) F$  δίνεται από το  $\hat{d} = \text{conj}(F)d$ . Αν ορίσουμε  $d = \left( (b^{exact})_1^2, \dots, (b^{exact})_m^2 \right)^T$  τότε η πρώτη στήλη του  $\text{Cov}(\hat{e}_b)$  είναι:

$$\left( \text{Cov}(\hat{e}_b) \right)_{:,1} = \sigma^2 \text{conj}(F) \left( (b^{exact})_1^2, \dots, (b^{exact})_m^2 \right)^T = \sigma^2 \hat{d}$$

Δηλαδή, η πρώτη στήλη είναι ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier του διανύσματος  $d$ , τα στοιχεία του οποίου είναι τα  $(b^{exact})_i^2$ . Το διάνυσμα  $d$ , όπως και το  $b^{exact}$ , αποτελείται από στοιχεία με μικρή συχνότητα και επομένως, τα μεγαλύτερα στοιχεία του  $\hat{d}$  βρίσκονται στην κορυφή. Συνεπώς, ο πίνακας  $\text{Cov}(\hat{e}_b)$  έχει μεγάλα όμοια στοιχεία στην κύρια διαγώνιο, τα οποία μειώνονται σε μέγεθος καθώς απομακρυνόμαστε από αυτή. Άρα το διάνυσμα  $e_b$  συμπεριφέρεται σαν λευκός θόρυβος.

### 3.9.2 Θόρυβος Poisson

Ο θόρυβος Poisson εμφανίζεται σε δεδομένα που αφορούν μετρήσεις κάποιας ποσότητας. Αυτά τα δεδομένα αποτελούνται από μη αρνητικούς ακεραίους.

Για να ορίσουμε το θόρυβο Poisson, γράφουμε τα δεδομένα που έχουν Γκαουσιανό λευκό θόρυβο με τυπική απόκλιση  $\sigma$ , στη μορφή:

$$b_i \sim N(b_i^{exact}, \sigma^2), \quad i = 1, \dots, m.$$

Δηλαδή, η  $i$ -οστή τιμή  $b_i$  έχει μέση τιμή  $E(b_i) = b_i^{exact}$  και διασπορά  $V(b_i) = \sigma^2$ . Όμοια, τα δεδομένα της σχέσης (3.48) μπορούν να γραφούν ως:

$$b_i \sim N\left(b_i^{exact}, (\sigma b_i^{exact})^2\right), \quad i=1, \dots, m,$$

όπου  $E(b_i) = b_i^{exact}$  και  $V(b_i) = (\sigma b_i^{exact})^2$ , δηλαδή η τυπική απόκλιση είναι ανάλογη του  $|b_i^{exact}|$  με συντελεστή αναλογίας  $\sigma$ .

Η κατανομή Poisson εξαρτάται από μία μόνο παράμετρο, η οποία ισούται και με τη μέση τιμή και τη διασπορά. Συνεπώς, τα δεδομένα που ακολουθούν την κατανομή Poisson μπορούν να γραφούν ως

$$b_i \sim P(b_i^{exact}), \quad i=1, \dots, m,$$

όπου η μέση τιμή και η διασπορά της  $i$ -οστής τιμής είναι  $E(b_i) = b_i^{exact}$  και  $V(b_i) = b_i^{exact}$ . Ο θόρυβος Poisson είναι ακόμα ένα παράδειγμα του θορύβου που σχετίζεται με το σήμα.

Μπορούμε να εισάγουμε έναν αναλογικό συντελεστή στην έκφραση της διασποράς του θορύβου Poisson γραμμικοποιώντας τα πραγματικά δεδομένα. Ειδικότερα, έστω  $\bar{b}_i^{exact} = k b_i^{exact}$  για κάποιο  $k$  θετικό και ορίζουμε τα δεδομένα Poisson ως  $\bar{b}_i = P(\bar{b}_i^{exact}) = P(k b_i^{exact})$ , οπότε  $E(\bar{b}_i) = V(\bar{b}_i) = k b_i^{exact}$ . Τότε, αν δεχτούμε μη ακέραια δεδομένα, μπορούμε να προσαρμόσουμε το  $\bar{b}_i^{exact}$  με το  $\frac{1}{k}$  για να αποκτήσουμε τα δεδομένα:

$$b_i \sim \frac{P(k b_i^{exact})}{k}, \quad i=1, \dots, m,$$

με μέση τιμή  $E(b_i) = b_i^{exact}$  και διασπορά  $V(b_i) = \frac{k b_i^{exact}}{k^2} = \frac{b_i^{exact}}{k}$ .

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την παραπάνω διαδικασία για την παραγωγή μη ακέραιων δεδομένων που συμπεριφέρονται όπως τα δεδομένα Poisson στα οποία ελέγχουμε τον αναλογικό συντελεστή μεταξύ των πραγματικών δεδομένων και του θορύβου.

### 3.9.3 Έγχρωμος θόρυβος ευρείας ζώνης

Σε αυτή την παράγραφο θα ασχοληθούμε με θόρυβο που δεν είναι λευκός και δεν συμπεριφέρεται σαν λευκός θόρυβος. Θα μελετήσουμε το θόρυβο ευρείας ζώνης, δηλαδή θόρυβο στον οποίο αντιπροσωπεύονται όλες οι συχνότητες. Ο θόρυβος ευρείας ζώνης κυριαρχείται είτε από στοιχεία υψηλών συχνοτήτων (high-frequency), ή από στοιχεία χαμηλών συχνοτήτων (low-frequency). Και οι δύο τύποι θορύβου εμφανίζονται σε εφαρμογές, αναφέρονται ως έγχρωμος θόρυβος ευρείας ζώνης και τους ορίζουμε ως θόρυβος HF και θόρυβος LF αντίστοιχα.

Στη συνέχεια θα περιγράψουμε μία μέθοδο παραγωγής έγχρωμου θορύβου από ένα σήμα λευκού θορύβου. Έστω οι συμμετρικοί τριδιαγώνιοι πίνακες

$$\Psi_{HF} = \text{tridiag}(-1, 2, -1), \quad \Psi_{LF} = \text{tridiag}(1, 2, 1). \quad (3.49)$$

Για παράδειγμα, για  $n = 3$ , έχουμε:

$$\Psi_{HF} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{LF} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Αν πολλαπλασιάσουμε αυτούς τους πίνακες με ένα σήμα λευκού θορύβου  $e$ , προκύπτει έγχρωμος θόρυβος:

$$e_{HF} = \Psi_{HF} e, \quad e_{LF} = \Psi_{LF} e \quad (3.50)$$

Η διαγωνοποίηση των πινάκων  $\Psi_{HF}$  και  $\Psi_{LF}$  μας δίνει τις εκφράσεις:

$$\Psi_{HF} = S \text{diag}(d_m, \dots, d_1) S^T, \\ \Psi_{LF} = S \text{diag}(d_1, \dots, d_m) S^T,$$

όπου ο πίνακας  $S$  είναι ορθογώνιος με στοιχεία

$$s_{ij} = \sqrt{\frac{2}{m+1}} \sin\left(\frac{\pi ij}{m+1}\right), \quad i, j = 1, \dots, m$$

και τα διαγώνια στοιχεία  $0 < d_j < 3$  δίνονται από τη σχέση:

$$d_j = 2 + 2 \cos\left(\frac{\pi j}{m+1}\right), \quad j = 1, \dots, m.$$

Οι πίνακες συνδιακύμανσης για τα διανύσματα έγχρωμου θορύβου είναι:

$$\text{Cov}(e_{HF}) = \sigma^2 S \text{diag}(d_m^2, \dots, d_1^2) S^T, \quad (3.51)$$

$$\text{Cov}(e_{LF}) = \sigma^2 S \text{diag}(d_1^2, \dots, d_m^2) S^T, \quad (3.52)$$

όπου  $\sigma$  είναι η τυπική απόκλιση του λευκού θορύβου  $e$ .

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 Μέθοδοι Ομαλοποίησης

### 4.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναλύσουμε κάποιες μεθόδους για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων οι οποίες είναι λιγότερο ευαίσθητες στις διαταραχές από τη

λύση  $x = A^{-1}b = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$ . Αυτές οι μέθοδοι καλούνται μέθοδοι ομαλοποίησης διότι

επιβάλλουν μία ομαλότητα στην υπολογιζόμενη λύση, εξαλείφοντας τα στοιχεία θορύβου ώστε η λύση να είναι πιο σταθερή. Θα αναλύσουμε τρεις μεθόδους ομαλοποίησης, τη μέθοδο αποκοπής SVD (Truncated SVD), τη μέθοδο της επιλεκτικής SVD (Selective SVD) και τη μέθοδο Tikhonov. Οι μέθοδοι ομαλοποίησης παράγουν λύσεις που εκφράζονται ως ένα φιλτραρισμένο ανάπτυγμα SVD της μορφής:

$$x_{reg} = \sum_{i=1}^n \varphi_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \quad (4.1)$$

όπου  $\varphi_i$  είναι οι παράγοντες φιλτραρίσματος που συνδέονται με την κάθε μέθοδο.

Όπως έχουμε αναφέρει, τα διακριτά μη καλά τοποθετημένα προβλήματα έχουν πίνακες συντελεστών με πολύ μεγάλο δείκτη κατάστασης, το οποίο έχει ως αποτέλεσμα η λύση να είναι ευαίσθητη στις διαταραχές του δεξιού μέλους. Έστω  $x^{exact}$  η πραγματική λύση,  $x$  η διαταραγμένη λύση και  $e$  η διαταραχή, τότε

$$Ax^{exact} = b^{exact}, \quad Ax = b = b^{exact} + e.$$

Από τη θεωρία διαταραχών, γνωρίζουμε ότι

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

Επειδή ο δείκτης κατάστασης  $\text{cond}(A)$  είναι μεγάλος, η προσεγγιστική λύση  $x$  απέχει αρκετά από την πραγματική λύση  $x^{exact}$ . Επομένως, χρειαζόμαστε μεθόδους ομαλοποίησης που θα υπολογίζουν λιγότερο ευαίσθητες προσεγγίσεις της  $x^{exact}$ .

## 4.2 Μέθοδος αποκοπής SVD (TSVD)

Η μέθοδος TSVD είναι μία μέθοδος ομαλοποίησης που εστιάζει στην απομόνωση των συντελεστών της SVD που προκαλούν θόρυβο. Αυτοί οι συντελεστές είναι της μορφής  $\frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T e}{\sigma_i}$ , όπου  $e$  είναι η διαταραχή του  $b$ , και αντιστοιχούν στις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές.

Από την ανάλυση του προηγούμενου κεφαλαίου, είδαμε ότι υπάρχουν και “αξιόπιστοι” συντελεστές SVD της μορφής  $\frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i}$ , που αντιστοιχούν στις μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές. Επίσης, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η διακριτή συνθήκη Picard ικανοποιείται από το  $b^{exact}$  και επομένως για μικρούς δείκτες  $i$  έχουμε ότι  $\frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} = v_i^T x^{exact}$ , δηλαδή οι συντελεστές SVD της λύσης με το μεγαλύτερο μέγεθος προσεγγίζονται καλύτερα.

Ορίζουμε τη λύση της μεθόδου TSVD  $x_k$  ως:

$$x_k \equiv \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i. \quad (4.2)$$

Η επιλογή της παραμέτρου αποκοπής  $k$  πρέπει να γίνεται ώστε να μην συμπεριλαμβάνονται οι συντελεστές SVD που προκαλούν θόρυβο. Συνήθως, μία κατάλληλη τιμή του  $k$  βρίσκεται από το διάγραμμα Picard.

### 4.2.1 Εναλλακτικός ορισμός της μεθόδου TSVD

Ορίζουμε τον πίνακα  $A_k$  της μεθόδου TSVD ως:

$$A_k = \begin{pmatrix} | & & | \\ u_1 & \dots & u_k \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & & | \\ v_1 & \dots & v_k \\ | & & | \end{pmatrix}^T = \sum_{i=1}^k u_i \sigma_i v_i^T. \quad (4.3)$$

Ο πίνακας  $A_k$  έχει δείκτη κατάστασης  $cond(A_k) = \frac{\sigma_1}{\sigma_k}$ , ο οποίος είναι αρκετά μικρότερος από το δείκτη κατάστασης του αρχικού πίνακα  $A$ ,  $cond(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$ .

Θα αντικαταστήσουμε το αρχικό πρόβλημα με ένα καλύτερης κατάστασης πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων  $\min_x \|A_k x - b\|_2$ , το οποίο έχει μη μοναδική λύση της μορφής:

$$x = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i + \sum_{i=k+1}^n \zeta_i v_i, \quad \text{όπου } \zeta_i \text{ αυθαίρετα.} \quad (4.4)$$

Για να ορίσουμε μοναδική λύση στο παραπάνω πρόβλημα πρέπει να προσθέσουμε ένα περιορισμό για το  $x$ , για παράδειγμα

$$\min \|x\|_2 \quad \text{υπό τον περιορισμό} \quad \min_x \|A_k x - b\|_2. \quad (4.5)$$

Η λύση του περιορισμένου προβλήματος είναι η λύση  $x_k$  της σχέσης (4.2) άρα η (4.5) αποτελεί έναν εναλλακτικό ορισμό της λύσης TSVD.

Τέλος, μπορούμε να γράψουμε την παραπάνω λύση στη μορφή:

$$x_k = \begin{pmatrix} | & & | \\ v_1 & \dots & v_k \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & & | \\ u_1 & \dots & u_k \\ | & & | \end{pmatrix}^T b = A_k^\dagger b, \quad (4.6)$$

όπου  $A_k^\dagger = \sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T$  ο ψευδοαντίστροφος του πίνακα  $A_k$ .

#### 4.2.2 Στατιστική ανάλυση

Έστω  $e$  ένα διάνυσμα Γκαουσιανού λευκού θορύβου, δηλαδή  $Cov(e) = \sigma^2 I$ . Ο πίνακας συνδιακύμανσης της λύσης TSVD είναι:

$$\begin{aligned} Cov(x_k) &= Cov(A_k^\dagger b) \\ &= Cov(A_k^\dagger (b^{exact} + e)) \\ &= Cov(A_k^\dagger b^{exact} + A_k^\dagger e) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= \text{Cov}(A_k^\dagger e) \\
&= A_k^\dagger \text{Cov}(b) (A_k^\dagger)^T \\
&= \sigma^2 \left( \sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \right) \left( \sum_{i=1}^k u_i \sigma_i^{-1} v_i^T \right) \\
&= \sigma^2 \sum_{i=1}^k \sigma_i^{-2} v_i v_i^T \tag{4.7}
\end{aligned}$$

Η νόρμα του παραπάνω πίνακα είναι:

$$\| \text{Cov}(x_k) \|_2 = \frac{\sigma^2}{\sigma_k^2} . \tag{4.8}$$

Όπως αναφέραμε και παραπάνω, η  $\sigma_k$  είναι αρκετά μεγαλύτερη από τη  $\sigma_n$ , επομένως τα στοιχεία του πίνακα  $\text{Cov}(x_k)$  είναι αρκετά μικρότερα από αυτά του πίνακα συνδιακύμανσης της αρχικής λύσης,  $\text{Cov}(x)$ .

Το μειονέκτημα της  $x_k$  είναι ότι το πρόβλημα αποκτά μεροληψία (bias). Η αρχική λύση  $x = A^{-1}b$  είναι αμερόληπτη:

$$\begin{aligned}
E(x) &= E(A^{-1}b) \\
&= E(A^{-1}(b^{exact} + e)) \\
&= E(A^{-1}b^{exact}) \\
&= E(x^{exact}) \\
&= x^{exact} \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Αντιθέτως, η λύση TSVD  $x_k$  έχει μεροληψία διότι:

$$E(x_k) = E \left( \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \right)$$

$$\begin{aligned}
&= E \left( \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} v_i \right) \\
&= \sum_{i=1}^k (v_i^T x^{exact}) v_i \\
&= x^{exact} - \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i . \tag{4.10}
\end{aligned}$$

Λόγω της διακριτής συνθήκης Picard, η νόρμα του μεροληπτικού όρου  $\left\| \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i \right\|_2 = \left( \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact})^2 \right)^{1/2}$ , είναι αρκετά μικρότερη από τη νόρμα της πραγματικής λύσης  $\|x^{exact}\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n (v_i^T x^{exact})^2 \right)^{1/2}$ . Συνεπώς, η προσεγγιστική λύση της μεθόδου TSVD είναι αρκετά καλή και διαφοροποιείται σε μικρό βαθμό από την πραγματική λύση.

### 4.3 Μέθοδος της επιλεκτικής SVD (SSVD)

Η επιλεκτική SVD είναι μία παραλλαγή της μεθόδου TSVD στην οποία επιλέγουμε μόνο τους συντελεστές SVD που συνεισφέρουν σημαντικά στη λύση. Επιλέγουμε ένα όριο  $\tau$  ώστε οι συντελεστές  $u_i^T b$  που βρίσκονται κάτω από το επίπεδο θορύβου να μη συμμετέχουν στη λύση. Τότε, η λύση SSVD  $x_\tau$  ορίζεται ως:

$$x_\tau \equiv \sum_{|u_i^T b| > \tau} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i . \tag{4.11}$$

Οι παράγοντες φιλτραρίσματος αυτής της μεθόδου σύμφωνα με τη σχέση (4.1) είναι:

$$\varphi_i^{[\tau]} = \begin{cases} 1, & |u_i^T b| > \tau \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases} . \tag{4.12}$$

Από την ανάλυση του προηγούμενου κεφαλαίου γνωρίζουμε ότι αν η διαταραχή της δεξιάς πλευράς  $b$  είναι Γκαουσιανός λευκός θόρυβος, τότε και ο θόρυβος στους συντελεστές  $u_i^T b$  είναι Γκαουσιανός. Επομένως, μία επιλογή του ορίου  $\tau$  ώστε να μην λαμβάνονται υπόψη όροι που είναι κοντά στο επίπεδο θορύβου, είναι:

$$\tau = v_s \sigma, \quad (4.13)$$

όπου  $\sigma$  η τυπική απόκλιση και  $v_s$  ένας συντελεστής ασφαλείας, που συνήθως παίρνει τις τιμές 3 ή 5.

#### 4.4 Μέθοδος Tikhonov

Οι λύσεις των μεθόδων TSVD και SSVD είναι εύκολα υπολογίσιμες, εφόσον πρώτα έχει υπολογιστεί η SVD του πίνακα  $A$  του διακριτοποιημένου αντίστροφου προβλήματος. Σε προβλήματα μικρής διάστασης, ο υπολογισμός της SVD και επομένως των λύσεων των παραπάνω μεθόδων είναι εύκολος και γρήγορος. Αν όμως έχουμε προβλήματα μεγάλης διάστασης τότε ο υπολογισμός της SVD ακόμα και για τις κύριες  $k$  ιδιάζουσες τιμές της SVD είναι δύσκολος και χρονοβόρος. Τη λύση σε αυτό το πρόβλημα δίνει η μέθοδος Tikhonov. Η λύση Tikhonov  $x_\lambda$  ορίζεται ως η λύση του προβλήματος:

$$\min_x \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2 \right\}. \quad (4.14)$$

Η παράμετρος ομαλοποίησης  $\lambda$  είναι θετική και ο παράγοντας  $\lambda^2$  ελέγχει την ισορροπία μεταξύ των δύο όρων. Οι μεγάλες τιμές του  $\lambda$  δίνουν βαρύτητα στην ελαχιστοποίηση της  $\|x\|_2$  και επομένως στην ομαλότητα της λύσης. Παρατηρούμε ότι  $x \rightarrow 0$  καθώς  $\lambda \rightarrow \infty$ . Αντιθέτως, αν το  $\lambda$  είναι μικρό, τότε η βαρύτητα δίνεται στην προσαρμογή της λύσης στα δεδομένα που έχουν θόρυβο και συνεπώς μειώνεται η ομαλότητα της λύσης. Όταν  $\lambda = 0$  έχουμε το αρχικό πρόβλημα.

Ο πρώτος όρος  $\|Ax - b\|_2^2$  είναι ένα μέτρο της καλής προσαρμογής, δηλαδή περιγράφει πόσο καλά η λύση  $x$  προβλέπει τα δεδομένα του διανύσματος  $b$  τα οποία περιέχουν θόρυβο. Αν αυτός ο όρος είναι πολύ μεγάλος τότε το  $x$  δεν είναι λύση του προβλήματος. Από την άλλη, πρέπει να προσέχουμε ώστε αυτός ο όρος να μην είναι μικρότερος από το μέσο όρο των σφαλμάτων στο  $b$ , διότι τότε ενσωματώνεται ο θόρυβος στα δεδομένα.

Ο όρος  $\|x\|_2^2$  μετρά την ομαλότητα της λύσης. Γνωρίζουμε ότι η λύση  $x = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$

επηρεάζεται από τους όρους μεγάλης συχνότητας λόγω του θορύβου που περιέχουν. Ελέγχοντας τη νόρμα του  $x$  επιθυμούμε να περιορίσουμε όσο είναι εφικτό αυτές τις συνιστώσες που προκαλούν μεγάλο θόρυβο.

Επομένως με τη μέθοδο Tikhonov προσπαθούμε να βρούμε μία κατάλληλη τιμή του  $\lambda$  ώστε η λύση  $x_\lambda$  να είναι ικανοποιητικά ομαλή και ταυτόχρονα να προσαρμόζεται καλά στα δεδομένα έτσι ώστε η ομαλοποιημένη λύση να προσεγγίζει την πραγματική λύση.

Ουσιαστικά, το πρόβλημα της σχέσης (4.14) είναι ένα πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων. Αν θεωρήσουμε τυχαία διανύσματα  $y, z$  τότε:

$$\left\| \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} = y^T y + z^T z = \|y\|_2^2 + \|z\|_2^2,$$

επομένως, για  $y = Ax - b$  και  $z = \lambda x$  το πρόβλημα Tikhonov λαμβάνει τη μορφή:

$$\min_x \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2 \right\} = \min_x \left\| \begin{pmatrix} Ax - b \\ \lambda x \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \min_x \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2, \quad (4.15)$$

το οποίο είναι προφανώς ένα πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων. Οι κανονικές εξισώσεις του παραπάνω προβλήματος παίρνουν τη μορφή:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x &= \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \\ (A^T A + \lambda^2 I) x &= A^T b \Leftrightarrow \\ x_\lambda &= (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T b \end{aligned} \quad (4.16)$$

Χρησιμοποιώντας ότι  $UU^T = I = VV^T$  και την SVD του πίνακα  $A$  έχουμε:

$$\begin{aligned} x_\lambda &= (V \Sigma U^T U \Sigma V^T + \lambda^2 V V^T)^{-1} V \Sigma U^T b \\ &= V (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} V^T V \Sigma U^T b \Leftrightarrow \\ x_\lambda &= V (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b \end{aligned} \quad (4.17)$$

Εισάγοντας τις ιδιάζουσες τιμές και τα ιδιάζοντα διανύσματα στην παραπάνω σχέση έχουμε ότι:

$$x_\lambda = \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \quad (4.18)$$

όπου οι παράγοντες φιλτραρίσματος  $\varphi_i^{[\lambda]}$ , για  $i=1, \dots, n$  ικανοποιούν την:

$$\varphi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \approx \begin{cases} 1, & \sigma_i \gg \lambda \\ \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}, & \sigma_i \ll \lambda \end{cases} \quad (4.19)$$

Από την παραπάνω σχέση, συμπεραίνουμε ότι όταν οι ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$  είναι πολύ μεγαλύτερες από την παράμετρο  $\lambda$ , τότε τα  $\varphi_i^{[\lambda]}$  παίρνουν τιμές κοντά στη μονάδα και οι αντίστοιχοι συντελεστές SVD συνεισφέρουν πλήρως στη λύση. Όμως, για ιδιάζουσες τιμές πολύ μικρότερες του  $\lambda$ , τα  $\varphi_i^{[\lambda]}$  τείνουν στο μηδέν και επομένως η συνεισφορά των αντίστοιχων συντελεστών SVD μειώνεται δραστικά. Αυτοί οι όροι αντιστοιχούν στις μεγάλες τιμές του δείκτη  $i$ , για τις οποίες ισχύει  $\frac{u_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{u_i^T e}{\sigma_i}$ .

Παρατηρούμε ότι μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την παράμετρο ομαλοποίησης  $\lambda$  για να ελέγξουμε το φιλτράρισμα, όπως κάναμε και στη μέθοδο TSVD με την παράμετρο αποκοπής  $k$ . Όμως, στη μέθοδο Tikhonov η μετάβαση από τους αρχικούς συντελεστές SVD στους φιλτραρισμένους είναι πιο ομαλή. Επίσης, το φιλτράρισμα επιτυγχάνεται χωρίς τον ακριβή υπολογισμό της SVD του πίνακα  $A$ , αρκεί να λυθεί το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων (4.15).

#### 4.4.1 Εναλλακτικοί ορισμοί της μεθόδου Tikhonov

Μπορούμε να ορίσουμε ένα άνω όριο  $\delta$  για τη νόρμα της λύσης και επομένως να λύσουμε το περιορισμένο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων:

$$\min_x \|Ax - b\|_2^2 \quad \text{υπό τον περιορισμό} \quad \|x\|_2^2 \leq \delta. \quad (4.20)$$

Από τη θεωρία βελτιστοποίησης γνωρίζουμε ότι μπορούμε να ενσωματώσουμε τον περιορισμό μέσω ενός πολλαπλασιαστή Lagrange  $\gamma$ , οπότε το πρόβλημα γίνεται:

$$\min_x \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \gamma (\|x\|_2^2 - \delta^2) \right\}.$$

Η παράγωγος ως προς  $x$  είναι ίση με  $A^T (Ax - b) + \gamma x$ , και αν τη θέσουμε ίση με μηδέν παίρνουμε τις κανονικές εξισώσεις της λύσης Tikhonov με  $\gamma = \lambda^2$ . Επομένως, το πρόβλημα (4.20) είναι ισοδύναμο με το πρόβλημα Tikhonov.

Ακόμα ένας εναλλακτικός ορισμός του προβλήματος προκύπτει αν ελαχιστοποιήσουμε τη νόρμα της λύσης υπό τον περιορισμό η νόρμα υπολοίπου  $\|Ax - b\|_2$  να είναι μικρότερη από κάποιο  $\varepsilon > 0$ , δηλαδή:

$$\min_x \|x\|_2^2 \quad \text{υπό τον περιορισμό} \quad \|Ax - b\|_2 \leq \varepsilon.$$

Αν ενσωματώσουμε, όπως παραπάνω, τον περιορισμό στο πρόβλημα μέσω ενός πολλαπλασιαστή Lagrange προκύπτει πάλι το πρόβλημα Tikhonov.

#### 4.4.2 Στατιστική ανάλυση

Αν υποθέσουμε ότι στο διάνυσμα των δεδομένων υπάρχει Γκαουσιανός λευκός θόρυβος  $e$ , δηλαδή  $Cov(e) = \sigma^2 I$ , τότε ο πίνακας συνδιακύμανσης της λύσης Tikhonov  $x_\lambda = V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b$  είναι:

$$\begin{aligned} Cov(x_\lambda) &= Cov\left(V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b\right) \\ &= Cov\left(V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T (b^{exact} + e)\right) \\ &= Cov\left(V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T e\right) \\ &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T Cov(e) \left(V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T\right)^T \\ &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T \sigma^2 I U \Sigma (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} V^T \\ &= \sigma^2 \sum_{i=1}^n \frac{\sigma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda^2)^2} v_i v_i^T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sigma^2 \sum_{i=1}^n \left( \frac{\sigma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda^2)^2} \right)^2 \frac{v_i v_i^T}{\sigma_i^2} \Rightarrow \\
\text{Cov}(x_\lambda) &= \sigma^2 \sum_{i=1}^n (\varphi_i^{[\lambda]})^2 \frac{v_i v_i^T}{\sigma_i^2} \tag{4.21}
\end{aligned}$$

Η νόρμα του πίνακα συνδιακύμανσης είναι άνω φραγμένη με  $\|\text{Cov}(x_\lambda)\|_2 \leq \frac{\sigma^2}{(2\lambda)^2}$ .

Συνεπώς, αν η παράμετρος  $\lambda$  είναι μεγαλύτερη από τη μικρότερη ιδιάζουσα τιμή  $\sigma_n$  τότε η διασπορά της λύσης Tikhonov θα είναι μικρότερη από τη διασπορά της αρχικής λύσης. Όπως και στη λύση της μεθόδου TSVD, αυτό επιτυγχάνεται με την εισαγωγή μεροληψίας στη λύση, διότι:

$$\begin{aligned}
E(x_\lambda) &= E\left( \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \right) \\
&= E\left( \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T (b^{exact} + e)}{\sigma_i} v_i \right) \\
&= E\left( \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} v_i \right) + E\left( \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T e}{\sigma_i} v_i \right) \\
&= \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]} (v_i^T x^{exact}) v_i \\
&= x^{exact} - \sum_{i=1}^n (1 - \varphi_i^{[\lambda]}) (v_i^T x^{exact}) v_i \Leftrightarrow \\
E(x_\lambda) &= x^{exact} - \sum_{i=1}^n \frac{\lambda^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} (v_i^T x^{exact}) v_i \tag{4.22}
\end{aligned}$$

Επειδή θεωρούμε ότι ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard αναμένουμε ότι η νόρμα του μεροληπτικού όρου θα είναι μικρότερη από τη  $\|x^{exact}\|_2$ , όπως και στη μέθοδο TSVD.

#### 4.5 Θεωρία διαταραχών

Οι παραπάνω μέθοδοι ομαλοποίησης χρησιμοποιούνται για να φιλτράρουμε τους συντελεστές που προκαλούν θόρυβο, επιλέγοντας κατάλληλα την παράμετρο

ομαλοποίησης. Θα μελετήσουμε πόσο ευαίσθητη είναι η ομαλοποιημένη λύση στις διαταραχές και την εξάρτηση αυτής της ευαισθησίας από την παράμετρο ομαλοποίησης. Θεωρούμε δύο προβλήματα,

$$Ax = b \quad \text{και} \quad (4.23)$$

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b} \quad , \quad (4.24)$$

όπου  $\tilde{A} = A + \Delta A$  και  $\tilde{b} = b + \Delta b$  είναι οι διαταραγμένες μορφές των  $A$  και  $b$ . Ο πίνακας  $\Delta A$  είναι η διαταραχή του πίνακα  $A$  και ο πίνακας  $\Delta b$  είναι η διαταραχή του διανύσματος  $b$ . Ένα κατάλληλο μέτρο για να ελέγξουμε την ευαισθησία της λύσης στο θόρυβο είναι ο υπολογισμός ενός άνω φράγματος για το σχετικό σφάλμα  $\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2}$ , όπου  $x$  και  $\tilde{x}$  οι λύσεις των παραπάνω συστημάτων. Θα ελέγξουμε το σχετικό σφάλμα ξεχωριστά για κάθε λύση του προβλήματος.

## 1. Αρχικές λύσεις

Έστω ότι ο πίνακας  $A$  είναι τετραγωνικός και αντιστρέψιμος και για τον πίνακα διαταραχής  $\Delta A$  ισχύει ότι  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n$ . Αν  $x = A^{-1}b$  και  $\tilde{x} = \tilde{A}^{-1}\tilde{b}$  είναι οι αρχικές λύσεις των προβλημάτων (4.23) και (4.24), τότε:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \gamma} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} \right), \quad (4.25)$$

όπου  $\text{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$  και  $\gamma = \|\Delta A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_n} < 1$ .

## 2. Λύσεις ελαχίστων τετραγώνων

Έστω ότι ο πίνακας  $A$  έχει περισσότερες γραμμές από στήλες, δηλαδή  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $m > n$  και για τον  $\Delta A$  ισχύει ότι  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n$ . Αν  $x$ ,  $\tilde{x}$  είναι οι λύσεις των προβλημάτων ελαχίστων τετραγώνων  $\min \|Ax - b\|_2$  και  $\min \|\tilde{A}\tilde{x} - \tilde{b}\|_2$  αντίστοιχα, τότε:



$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \gamma} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_n\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \gamma \frac{\|b - b_n\|_2}{\|b_n\|_2} \right), \quad (4.26)$$

όπου  $\text{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$ ,  $b_n = Ax$  και  $\gamma = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_n} < 1$ .

### 3. Λύσεις TSVD

Έστω  $x_k$ ,  $\tilde{x}_k$  οι λύσεις TSVD των προβλημάτων (4.23) και (4.24) με την ίδια παράμετρο αποκοπής  $k$ . Αν για τον πίνακα  $\Delta A$  ισχύει ότι  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_k - \sigma_{k+1}$ , τότε:

$$\frac{\|\tilde{x}_k - x_k\|_2}{\|x_k\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A_k)}{1 - \gamma_k} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_k\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \frac{\gamma_k}{1 - \gamma_k - \hat{\gamma}_k} \frac{\|b - b_k\|_2}{\|b_k\|_2} \right), \quad (4.27)$$

όπου  $\text{cond}(A_k) = \frac{\sigma_1}{\sigma_k} = \frac{\|A\|_2}{\sigma_k}$ ,  $b_k = Ax_k$ ,  $\gamma_k = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_k}$  και  $\hat{\gamma}_k = \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k}$ .

### 4. Λύσεις Tikhonov

Έστω  $x_\lambda$ ,  $\tilde{x}_\lambda$  οι λύσεις TSVD των προβλημάτων (4.23) και (4.24) με την ίδια παράμετρο ομαλοποίησης  $\lambda$ . Αν για τον πίνακα  $\Delta A$  ισχύει ότι  $\|\Delta A\|_2 < \lambda$ , τότε:

$$\frac{\|\tilde{x}_\lambda - x_\lambda\|_2}{\|x_\lambda\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A_\lambda)}{1 - \gamma_\lambda} \left( \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_\lambda\|_2} + 2 \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \gamma_\lambda \frac{\|b - b_\lambda\|_2}{\|b_\lambda\|_2} \right), \quad (4.28)$$

όπου  $\text{cond}(A_\lambda) = \frac{\sigma_1}{\lambda} = \frac{\|A\|_2}{\lambda}$ ,  $b_\lambda = Ax_\lambda$  και  $\gamma_\lambda = \frac{\|\Delta A\|_2}{\lambda}$ .

Παρατηρούμε ότι στις αρχικές λύσεις και στις λύσεις ελαχίστων τετραγώνων, το άνω φράγμα εξαρτάται κυρίως από τις τιμές που θα λάβει ο δείκτης κατάστασης του πίνακα  $A$ . Για τις λύσεις των μεθόδων TSVD και Tikhonov, επειδή ο δείκτης κατάστασης εξαρτάται από τις παραμέτρους  $k$  και  $\lambda$  αντίστοιχα, η τιμή του άνω φράγματος μπορεί να είναι μικρότερη σε σχέση με τις αρχικές λύσεις και τις λύσεις των ελαχίστων

τετραγώνων όσο το φιλτράρισμα αυξάνεται. Σε όλες τις λύσεις, το φράγμα για τη νόρμα του πίνακα  $\Delta A$  είναι απαραίτητο ώστε να σχετίζονται οι συντελεστές SVD των διαταραγμένων και μη διαταραγμένων προβλημάτων.

Η βασική διαφορά των άνω φραγμάτων των μεθόδων TSVD και Tikhonov είναι ο παράγοντας  $\hat{\gamma}_k = \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k}$ , ο οποίος εξαρτάται από το σχετικό μέγεθος της μεγαλύτερης

ιδιάζουσας τιμής που δεν συμπεριλαμβάνεται στο άθροισμα TSVD ως προς την ελάχιστη ιδιάζουσα τιμή που παραμένει στη λύση. Αν ο παράγοντας  $\hat{\gamma}_k$  πάρει τιμή κοντά στη μονάδα, τότε η διαφορά  $1 - \hat{\gamma}_k$  είναι μικρή και επομένως επιτρέπεται μόνο μία μικρή διαταραχή του πίνακα. Συνεπώς, αν έχουμε μία ομάδα ιδιαζουσών τιμών πολύ κοντά η μία με την άλλη, οι οποίες είναι διαχωρισμένες από τις υπόλοιπες τότε πρέπει η παράμετρος  $k$  να επιλεγεί κατάλληλα ώστε να μην αποκόπτεται κάποια ιδιάζουσα τιμή από την ομάδα. Αντίθετα, αυτό το πρόβλημα δεν εμφανίζεται στη λύση Tikhonov. Αν επιλέξουμε την τιμή του  $\lambda$  μέσα στην ομάδα των ιδιαζουσών τιμών τότε όλοι οι συντελεστές SVD περιέχονται στη λύση Tikhonov καθώς ο παράγοντας

φιλτραρίσματος  $\varphi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2}$  λαμβάνει σχεδόν τις ίδιες τιμές μέσα στην ομάδα.

#### 4.6 Η καμπύλη L (L-Curve)

Σε αυτή την παράγραφο, θα εστιάσουμε στη νόρμα της λύσης  $\|x\|_2$  και τη νόρμα υπολοίπου  $\|Ax - b\|_2$  και το ρόλο τους στην επίλυση των διακριτών αντίστροφων προβλημάτων. Ο υπολογισμός των δύο νορμών δεν απαιτεί τον υπολογισμό της SVD του πίνακα ή κάποιας άλλης παραγοντοποίησης και μπορεί να γίνει ανεξάρτητα από τη μέθοδο ομαλοποίησης που χρησιμοποιούμε.

Η νόρμα της λύσης TSVD και το αντίστοιχο υπόλοιπο αλλάζουν μονότονα με το  $k$  και έχουμε:

$$\|x_k\|_2^2 = \sum_{i=1}^k \left( \frac{u_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \leq \|x_{k+1}\|_2^2, \quad (4.29)$$

$$\|Ax_k - b\|_2^2 = \sum_{i=k+1}^n (u_i^T b)^2 + \varepsilon_{\perp}^2 \geq \|Ax_{k+1} - b\|_2^2, \quad (4.30)$$

όπου  $\varepsilon_{\perp} = \|(I - UU^T)b\|_2$ .

Αντίστοιχα, για τις νόρμες της λύσης Tikhonov και του αντίστοιχου υπολοίπου, έχουμε ότι:

$$\|x_\lambda\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left( \varphi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} \right)^2, \quad (4.31)$$

$$\|Ax_\lambda - b\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left( (1 - \varphi_i^{[\lambda]}) u_i^T b \right)^2 + \varepsilon_\perp^2, \quad (4.32)$$

όπου  $\varphi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2}$ , οι παράγοντες φιλτραρίσματος. Θα δείξουμε ότι αυτές οι νόρμες αλλάζουν μονότονα με το  $\lambda$ . Θέτουμε:

$$y = \|x_\lambda\|_2^2 \quad \text{και} \quad z = \|Ax_\lambda - b\|_2^2, \quad \text{οπότε} \quad (4.33)$$

$$y' \equiv \frac{dy}{d\lambda} = -\frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - \varphi_i^{[\lambda]}) (\varphi_i^{[\lambda]})^2 \frac{(u_i^T b)^2}{\sigma_i^2} \quad \text{και} \quad (4.34)$$

$$z' \equiv \frac{dz}{d\lambda} = \frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - \varphi_i^{[\lambda]})^2 \varphi_i^{[\lambda]} (u_i^T b)^2 = -\lambda^2 y'. \quad (4.35)$$

Παρατηρούμε ότι  $y' < 0$  και  $z' > 0$  για κάθε τιμή της παραμέτρου  $\lambda$ , επομένως οι νόρμες αλλάζουν μονότονα με το  $\lambda$ . Επειδή  $z' = -\lambda^2 y' \Rightarrow \frac{dy}{dz} = -\frac{1}{\lambda^2}$ , το τετράγωνο της νόρμας της λύσης  $\|x_\lambda\|_2^2$  είναι μία φθίνουσα μονότονη συνάρτηση του τετραγώνου της νόρμας υπολοίπου  $\|Ax_\lambda - b\|_2^2$ . Η τετραγωνική ρίζα είναι μία μονότονη συνάρτηση άρα και οι νόρμες είναι μονότονες.

Για τις δεύτερες παραγώγους των  $y$  και  $z$  έχουμε:

$$z'' \equiv \frac{d^2 z}{d\lambda^2} = \frac{d}{d\lambda} (-\lambda^2 y') = -2\lambda y' - \lambda^2 y'', \quad (4.36)$$

όπου  $y'' \equiv \frac{d^2 y}{d\lambda^2}$ . Θεωρούμε την καμπύλη που προκύπτει αν κάνουμε τη γραφική παράσταση του  $y$  με το  $z$ , με το  $\lambda$  ως παράμετρο. Η κλίση  $c_\lambda$  της καμπύλης είναι μία συνάρτηση του  $\lambda$  και δίνεται από τη σχέση:

$$c_\lambda = \frac{z' y'' - z'' y'}{\left((z')^2 + (y')^2\right)^{3/2}} = \frac{2\lambda (y')^2}{\left((z')^2 + (y')^2\right)^{3/2}}. \quad (4.37)$$

Παρατηρούμε ότι  $c_\lambda > 0$  για κάθε  $\lambda$ , άρα η καμπύλη είναι κυρτή.

Με τη βοήθεια αυτής της καμπύλης, βλέπουμε πως αλλάζει η ομαλοποιημένη λύση για τις διάφορες τιμές της παραμέτρου  $\lambda$ . Παρατηρούμε ότι  $0 \leq \|x_\lambda\|_2 \leq \|A^{-1}b\|_2$  και  $0 \leq \|Ax_\lambda - b\|_2 \leq \|b\|_2$ , και επειδή κάθε σημείο  $(z, y)$  είναι λύση του προβλήματος  $z = \min \|Ax - b\|_2^2$  υπό τον περιορισμό  $\|x\|_2^2 \leq y$ , έπεται ότι η καμπύλη ορίζει ένα όριο μεταξύ δύο περιοχών του πρώτου τεταρτημόριου. Αυτό σημαίνει ότι για κάθε διάνυσμα  $x$ , το σημείο  $(\|Ax - b\|_2, \|x\|_2)$  βρίσκεται είτε πάνω στην καμπύλη είτε στο χωρίο πάνω από αυτήν.

Η γραφική παράσταση της καμπύλης σε γραμμική κλίμακα δυσκολεύει τον έλεγχο των στοιχείων της οπότε συνήθως κάνουμε τη γραφική παράσταση σε διπλή λογαριθμική κλίμακα. Τότε, η αντίστοιχη καμπύλη

$$\left(\frac{1}{2} \log z, \frac{1}{2} \log y\right) = (\log \|Ax_\lambda - b\|_2, \log \|x_\lambda\|_2) \quad (4.38)$$

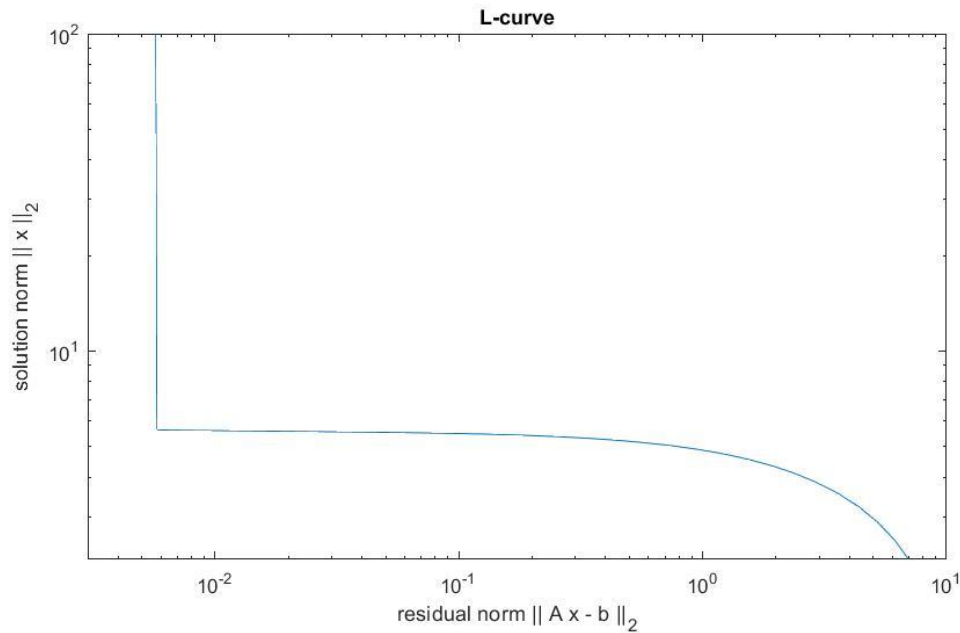
ονομάζεται καμπύλη L (L-curve) της ομαλοποίησης Tikhonov και είναι πολύ σημαντική για την ανάλυση των διακριτών αντίστροφων προβλημάτων.

Η καμπύλη L έχει την ίδια συμπεριφορά με τις λύσεις Tikhonov για μικρές και μεγάλες τιμές του  $\lambda$ .

Για μεγάλες τιμές του  $\lambda$ , η λύση Tikhonov εξαρτάται από τους συντελεστές SVD της δεξιάς πλευράς  $b^{exact}$ , είναι υπερβολικά ομαλή (oversmoothing) και έχουμε ότι  $\|x_\lambda\|_2 \approx \|x^{exact}\|_2 = \text{σταθερό}$  και η νόρμα  $\|Ax - b\|_2$  αυξάνεται με την αύξηση του  $\lambda$ .

Για μικρές τιμές του  $\lambda$ , η λύση Tikhonov εξαρτάται από τις διαταραχές που προέρχονται από το θόρυβο, είναι ελάχιστα ομαλή (undersmoothing) και έχουμε ότι η νόρμα  $\|x_\lambda\|_2$  αυξάνεται με την αύξηση του  $\lambda^{-1}$  και  $\|Ax - b\|_2 \approx \|e\|_2 = \text{σταθερό}$ .

Συνεπώς, η καμπύλη L έχει δύο τμήματα, ένα προσεγγιστικά οριζόντιο και ένα προσεγγιστικά κάθετο. Η γωνία που διαχωρίζει τα δύο τμήματα βρίσκεται περίπου στο σημείο  $(\log \|e\|_2, \log \|x^{exact}\|_2)$ . Προς τα δεξιά, καθώς  $\lambda \rightarrow \infty$ , η καμπύλη L αρχίζει να λυγίζει προς τα κάτω αφού λόγω της αύξησης της ομαλοποίησης, η νόρμα της λύσης τείνει στο μηδέν. Προς τα πάνω αριστερά και πάνω από το κάθετο τμήμα, η καμπύλη L γίνεται λιγότερο απότομη καθώς  $\lambda \rightarrow 0$  και  $\|x_\lambda\|_2 \rightarrow \|A^{-1}b\|_2$ .



**Σχήμα 4.1:** Η καμπύλη L. Παρατηρούμε ότι το οριζόντιο τμήμα αντιστοιχεί στις υπερβολικά ομαλές λύσεις ενώ το κάθετο τμήμα στις ελάχιστα ομαλές λύσεις.

#### 4.7 Δεδομένα με έγχρωμο θόρυβο

Όπως αναφέραμε στην παράγραφο 3.9, πέρα από το λευκό θόρυβο υπάρχει και ο έγχρωμος θόρυβος και συγκεκριμένα ο θόρυβος HF και ο θόρυβος LF. Στον θόρυβο HF τα στοιχεία υψηλής συχνότητας, τα οποία αντιστοιχούν στις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές, είναι πολύ μεγαλύτερα από τα στοιχεία χαμηλής συχνότητας και το αντίθετο ισχύει για τον θόρυβο LF.

Θεωρούμε ένα διάνυσμα Γκαουσιανού λευκού θορύβου  $e$  και τα αντίστοιχα διανύσματα  $e_{HF}$  και  $e_{LF}$  που προκύπτουν ως πολλαπλάσια των SVD συντελεστών του λευκού θορύβου  $u_i^T e$  και γραμμικοποιούμε τα τρία διανύσματα ώστε να έχουν ίδιο

επίπεδο σχετικού θορύβου, το οποίο ορίζεται ως  $ml = \frac{\|e\|_2}{\|b^{exact}\|_2}$ . Οι συνιστώσες  $u_i^T e$

έχουν μία σταθερή συμπεριφορά προς τον δείκτη  $i$ . Οι συνιστώσες  $u_i^T e_{HF}$  του θορύβου

HF αυξάνουν όσο αυξάνεται το  $i$ , το οποίο επιβεβαιώνει ότι αυτός ο θόρυβος κυριαρχείται από στοιχεία υψηλών συχνοτήτων. Παρόμοια, οι συνιστώσες  $u_i^T e_{LF}$  του θορύβου LF μειώνονται όσο αυξάνεται το  $i$ .

Ο θόρυβος HF επηρεάζει πλήρως τους συντελεστές  $u_i^T b^{exact} + u_i^T e_{HF}$  του δεξιού μέλους, σε μεγαλύτερο δείκτη  $i$  από ότι ο λευκός θόρυβος και έτσι μας επιτρέπει να συμπεριλάβουμε περισσότερα στοιχεία SVD στην ομαλοποιημένη λύση TSVD. Αντιθέτως, στο θόρυβο LF, οι συντελεστές SVD μειώνονται συνεχώς και αυτό έχει ως αποτέλεσμα ο θόρυβος να τους κυριαρχεί νωρίτερα. Συνεπώς, με το θόρυβο HF μπορούμε να υπολογίσουμε μία περισσότερο ακριβή λύση TSVD σε σύγκριση με το λευκό θόρυβο, για ίδια επίπεδα θορύβου. Αντίστοιχα, για τον θόρυβο LF δεν έχουμε καλύτερη ακρίβεια στη λύση TSVD από ότι με το λευκό θόρυβο, για ίδια επίπεδα θορύβου.

#### 4.7.1 Διαδικασία μετασχηματισμού σε λευκό θόρυβο (Prewhitening)

Ο λευκός θόρυβος μας διευκολύνει στις πράξεις σε σύγκριση με τα άλλα είδη θορύβου. Η διαδικασία με την οποία μετασχηματίζουμε το θόρυβο που υπάρχει στο πρόβλημα σε λευκό θόρυβο ονομάζεται prewhitening. Θεωρούμε τη διαταραγμένη δεξιά πλευρά  $b = b^{exact} + e$ , όπου  $b^{exact}$  τα πραγματικά δεδομένα και  $e$  το διάνυσμα θορύβου με πίνακα συνδιακύμανσης  $Cov(e)$ .

Εφαρμόζουμε την παραγοντοποίηση Cholesky στον πίνακα συνδιακύμανσης ώστε:

$$Cov(e) = C^T C, \text{ όπου } C \text{ ένας άνω τριγωνικός πίνακας,}$$

και υπολογίζουμε τα τροποποιημένα δεδομένα

$$b^{pw} = C^{-T} b = C^{-T} b^{exact} + C^{-T} e. \quad (4.39)$$

Τότε, ο πίνακας συνδιακύμανσης του τροποποιημένου θορύβου είναι:

$$Cov(C^{-T} e) = C^{-T} Cov(e) C^{-1} = C^{-T} C^T C C^{-1} = I, \quad (4.40)$$

επομένως ο τροποποιημένος θόρυβος είναι λευκός.

Εισάγουμε την ίδια τροποποίηση και στον πίνακα  $A$  και έχουμε να λύσουμε το πρόβλημα:

$$(C^{-T}A)x = C^{-T}b \quad \text{ή} \quad \min \|(C^{-T}A)x - C^{-T}b\|_2, \quad (4.41)$$

το οποίο περιέχει λευκό θόρυβο.

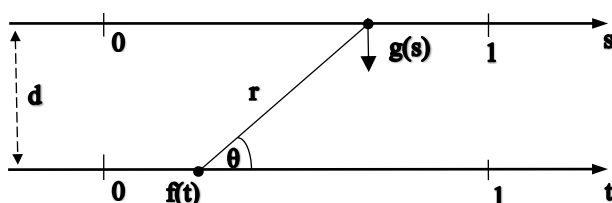
Αν το διάνυσμα  $e$  είναι θόρυβος HF, τότε η διαδικασία prewhitening ελαττώνει κυρίως τις μεγάλες συχότητες και άρα το  $C^{-T}b$  θα έχει περισσότερα στοιχεία χαμηλών συχνοτήτων. Από την άλλη, αν έχουμε θόρυβο LF, τότε θα υπάρχουν περισσότερες υψηλές συχότητες στο  $C^{-T}b$ .

## Κεφάλαιο 5 Εφαρμογές

Στο παρόν κεφάλαιο γίνεται η πρακτική παρουσίαση των μεθόδων που αναλύθηκαν προηγουμένως με τη βοήθεια κάποιων παραδειγμάτων. Τα παραδείγματα αυτού του κεφαλαίου υλοποιήθηκαν με τη βοήθεια του προγράμματος MATLAB και οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιήθηκαν βρίσκονται στο πακέτο *Regularization Tools* του καθηγητή Per Christian Hansen.

### 5.1 Πρόβλημα βαρύτητας (gravity surveying)

Θα μελετήσουμε ένα απλοποιημένο πρόβλημα βαρύτητας από τη γεωφυσική. Έστω άγνωστη κατανομή μάζας με πυκνότητα  $f(t)$  που βρίσκεται σε βάθος  $d$  από την επιφάνεια, με  $t \in [0,1]$ . Υποθέτουμε ότι πέρα από την πηγή  $f$  δεν υπάρχει άλλη μάζα που να παράγει βαρυτικό πεδίο. Στην επιφάνεια, στον άξονα  $s$ ,  $s \in [0,1]$  μετράμε την κατακόρυφη συνιστώσα του βαρυτικού πεδίου,  $g(s)$ , όπως φαίνεται στο σχήμα 5.1.



Σχήμα 5.1: Το πρόβλημα της βαρύτητας.

Οι συναρτήσεις  $f$  και  $g$  συνδέονται μέσω μίας ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους. Το μέγεθος του πεδίου βαρύτητας κατά τον άξονα  $s$  είναι  $\frac{f(t) dt}{r^2}$ , όπου  $r = \sqrt{d^2 + (s-t)^2}$ . Για τη συνάρτηση  $g$  έχουμε ότι  $dg = \frac{\sin \theta}{r^2} f(t) dt$ , όπου  $\theta$  η γωνία του σχήματος 5.1, και χρησιμοποιώντας ότι  $\sin \theta = \frac{d}{r}$  έχουμε:

$$\frac{\sin \theta}{r^2} f(t) dt = \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{3/2}} f(t) dt.$$



Η συνολική τιμή της  $g(s)$  για κάθε  $0 \leq s \leq 1$  δίνεται από το ολοκλήρωμα:

$$g(s) = \int_0^1 \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{3/2}} f(t) dt .$$

Το παραπάνω είναι το ευθύ πρόβλημα και περιγράφει πως μπορούμε να υπολογίσουμε το  $g$  γνωρίζοντας την πηγή  $f$ . Το αντίστροφο πρόβλημα προκύπτει αν γράψουμε την

παραπάνω εξίσωση στη μορφή  $\int_0^1 K(s,t) f(t) dt = g(s)$ ,  $0 \leq s \leq 1$ , όπου

$$K(s,t) = \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{3/2}} \text{ είναι ο πυρήνας του προβλήματος.}$$

Θα μετατρέψουμε το παραπάνω συνεχές πρόβλημα σε ένα διακριτό πρόβλημα με χρήση της μεθόδου αριθμητικής ολοκλήρωσης του μέσου στο  $[0,1]$ , όπου από τη

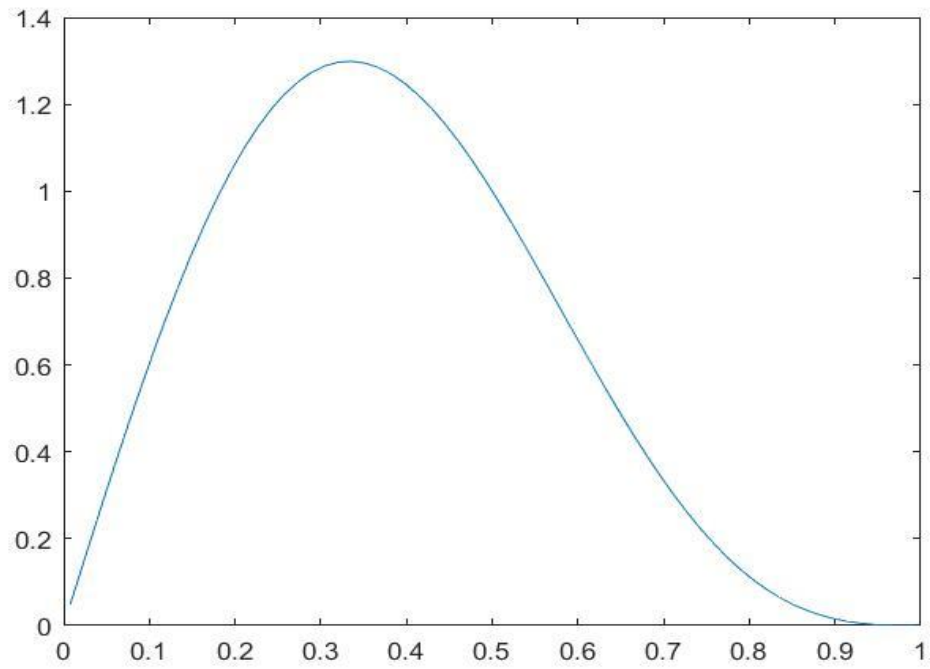
σχέση (3.2) έχουμε ότι  $t_j = \frac{j-1}{n}$  και  $\omega_j = \frac{1}{n}$  για  $j=1, \dots, n$ . Για  $n$  επιλεγμένα

σημεία και αν υποθέσουμε ότι  $s_i = t_i$ , τα στοιχεία του πίνακα  $A$ , λόγω της σχέσης (3.9) γράφονται ως:

$$a_{ij} = \omega_j K(s_i, t_j) = \frac{1}{n} d \left( d^2 + \left( \frac{i-1/2}{n} - \frac{j-1/2}{n} \right)^2 \right)^{-3/2} = \frac{d}{n} \left( d^2 + \left( \frac{i-j}{n} \right)^2 \right)^{-3/2} .$$

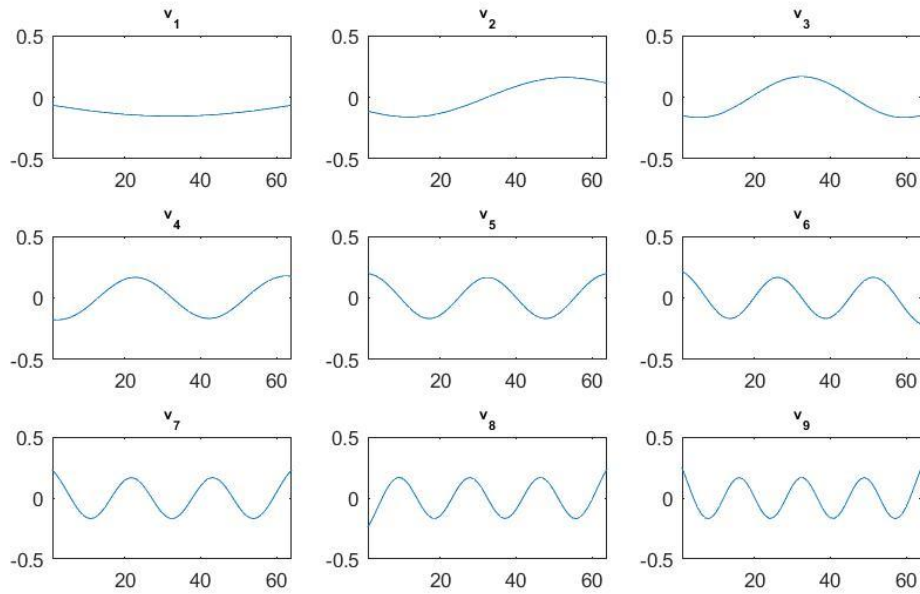
Παρατηρούμε ότι ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός. Υλοποιώντας το αντίστοιχο πρόβλημα στο MATLAB, παρατηρούμε ότι ο δείκτης κατάστασης του πίνακα  $A$  είναι πολύ μεγάλος, οπότε βεβαιωνόμαστε ότι έχουμε ένα μη καλά τοποθετημένο πρόβλημα.

Λύνουμε το πρόβλημα για τη συνάρτηση  $f(t) = \sin(\pi t) + 0.5 \sin(2\pi t)$ ,  $n = 64$  σημεία και  $d = 0.25$ . Στο παρακάτω σχήμα βλέπουμε τη γραφική παράσταση των σημείων  $(t_j, x_j)$ , όπου τα  $x_j$  είναι οι προσεγγίσεις των  $f_j$  για δεδομένα χωρίς θόρυβο.



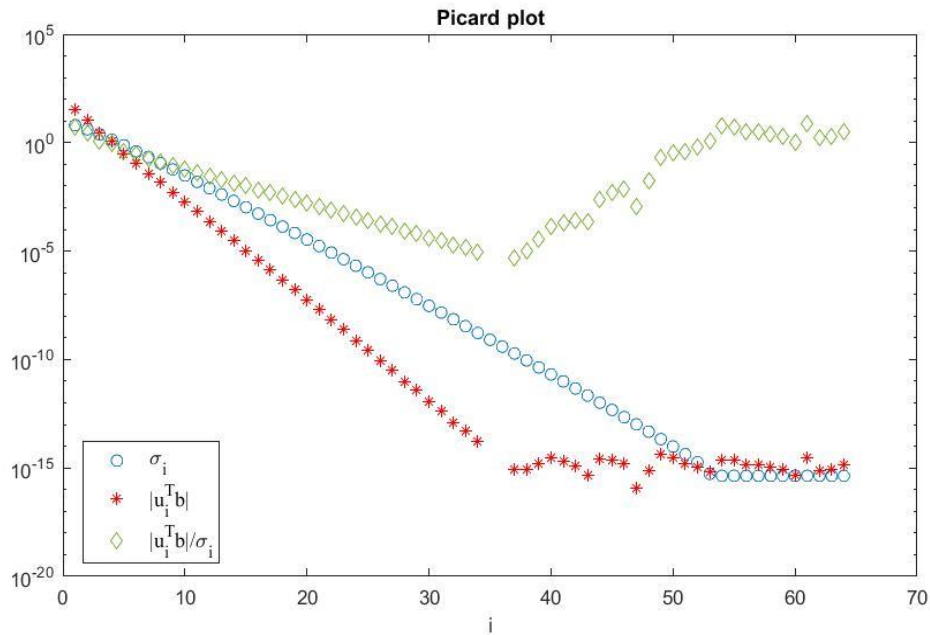
**Σχήμα 5.2:** Πραγματική λύση  $x^{exact}$  του διακριτού αντίστροφου προβλήματος βαρύτητας, χωρίς θόρυβο.

Στο σχήμα 5.3 φαίνονται τα πρώτα εννιά δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα  $v_i$  του παραπάνω προβλήματος. Επειδή ο πίνακας είναι συμμετρικός, οι δεξιά ιδιάζουσες συναρτήσεις είναι ίδιες με τα διανύσματα. Παρατηρούμε ότι όσο αυξάνεται ο δείκτης  $i$  και άρα μειώνονται οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ , τα ιδιάζοντα διανύσματα είναι ανακριβή.



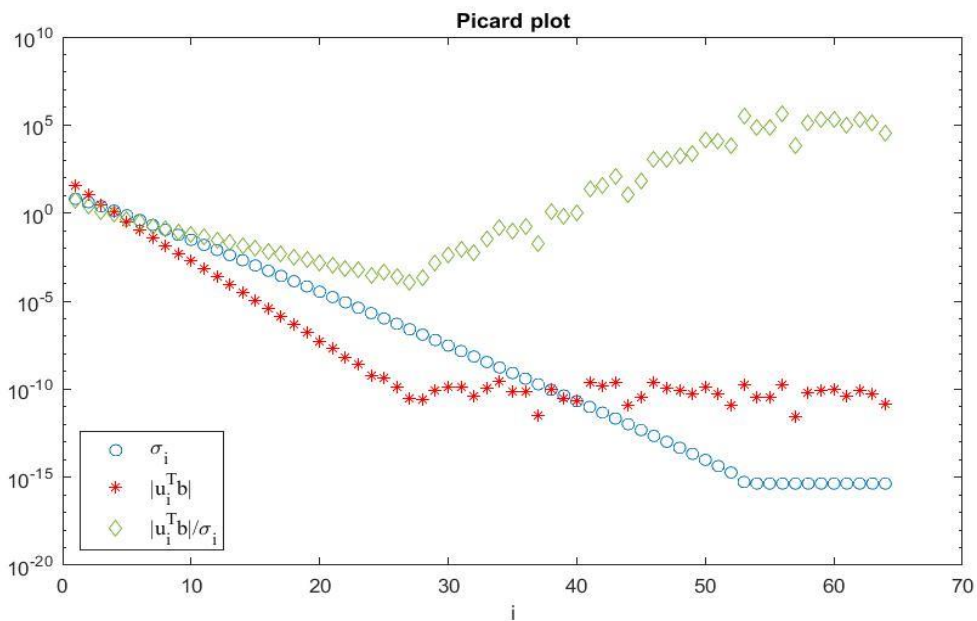
**Σχήμα 5.3:** Τα πρώτα 9 δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα του πίνακα  $A$ .

Στη συνέχεια θα εξετάσουμε το διάγραμμα Picard του παραπάνω προβλήματος. Για τα δεδομένα χωρίς θόρυβο, παρατηρούμε ότι οι συντελεστές  $|u_i^T b|$  φθίνουν πιο γρήγορα από τις ιδιάζουσες τιμές, μέχρι να αρχίσουν να σταθεροποιούνται λόγω σφαλμάτων του υπολογιστή για  $i \geq 35$ . Οι συντελεστές της λύσης  $\frac{|u_i^T b|}{\sigma_i}$  αρχικά μειώνονται και για  $i \geq 35$  φαίνεται ότι αυξάνονται. Αυτό όμως δεν ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα διότι οφείλεται στα ανακριβή στοιχεία που έχουμε για τα  $|u_i^T b|$ , τα οποία σταθεροποιούνται ενώ οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  συνεχίζουν να μειώνονται.



**Σχήμα 5.4:** Το διάγραμμα Picard για το διακριτό πρόβλημα βαρύτητας, χωρίς θόρυβο στη δεξιά πλευρά.

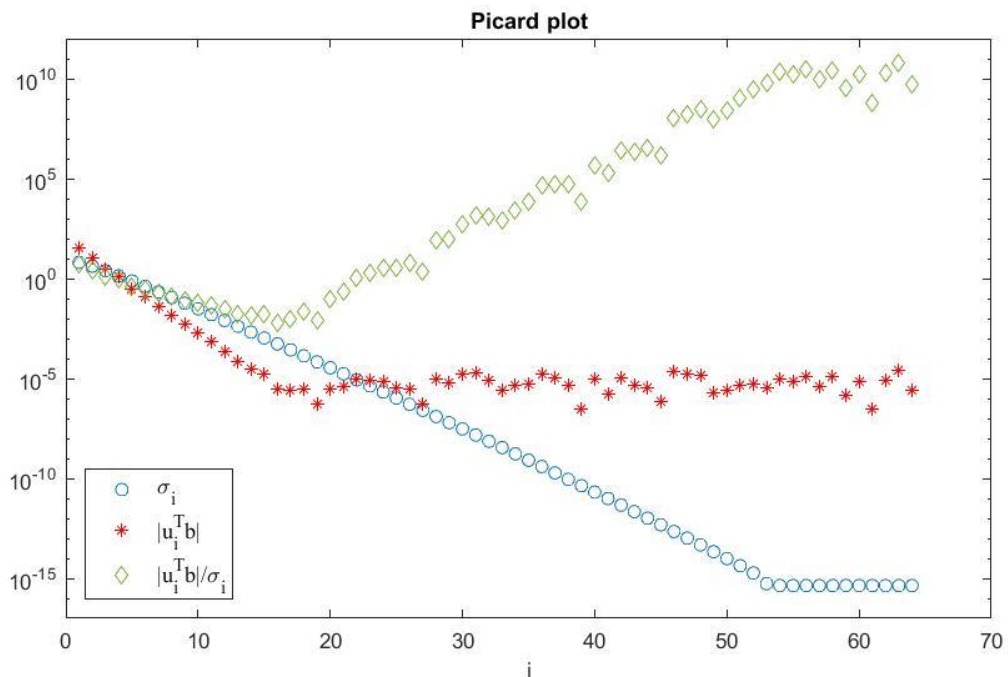
Στη συνέχεια προσθέτουμε στη δεξιά πλευρά Γκαουσιανό λευκό θόρυβο μικρού μεγέθους. Θα μελετήσουμε το διάγραμμα Picard και θα δούμε ότι όταν αυξάνουμε την τάξη θορύβου τότε η υπολογιζόμενη λύση εξαρτάται από τους θορυβώδεις συντελεστές. Ξεκινάμε την ανάλυση με θόρυβο της τάξης  $10^{-10}$ .



**Σχήμα 5.5:** Το διάγραμμα Picard για το διακριτό πρόβλημα βαρύτητας, με μικρής τάξης θόρυβο στη δεξιά πλευρά.

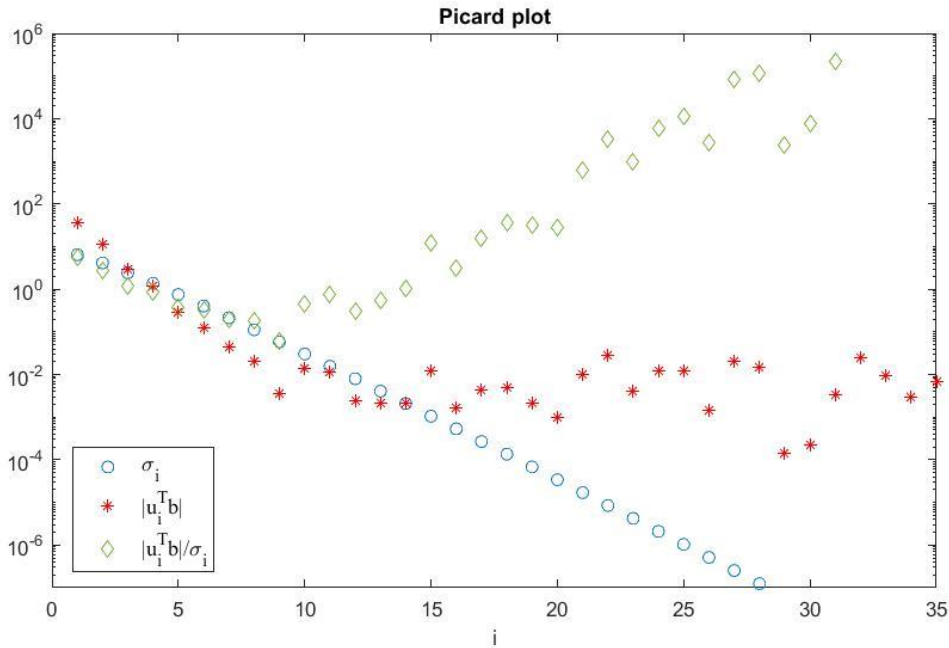
Παρατηρούμε ότι οι συντελεστές  $|u_i^T b|$  και οι συντελεστές της λύσης έχουν την ίδια συμπεριφορά όπως και στο πρόβλημα χωρίς θόρυβο. Ακόμη, παρατηρούμε ότι για  $i=1, \dots, 10$  ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard, παρόλο που έχουμε ότι  $|u_i^T b| > \sigma_i$  για  $i=1, \dots, 4$ . Αυτό συμβαίνει διότι μας ενδιαφέρει ότι αυτές οι ποσότητες μειώνονται και όχι ο βαθμός στον οποίο μειώνονται. Τέλος, βλέπουμε ότι οι συντελεστές  $|u_i^T b|$  πλέον σταθεροποιούνται περίπου για  $i=21$ , επομένως έχουμε περισσότερους ανακριβείς συντελεστές από όταν δεν υπήρχε θόρυβος.

Αν αυξήσουμε και άλλο το επίπεδο θορύβου, για θόρυβο τάξης  $10^{-5}$  παρατηρούμε στο σχήμα 5.6 ότι ακόμα λιγότεροι συντελεστές είναι ακριβείς. Πλέον οι συντελεστές  $|u_i^T b|$  σταθεροποιούνται για  $i=15$  περίπου και επομένως έχουμε περισσότερους μεγάλους συντελεστές λύσης οι οποίοι δεν αντιπροσωπεύουν την πραγματικότητα.



**Σχήμα 5.6:** Το διάγραμμα Picard για το διακριτό πρόβλημα βαρύτητας, με θόρυβο τάξης  $10^{-5}$  στη δεξιά πλευρά.

Προφανώς όσο αυξάνουμε το θόρυβο, τόσο χειρότερα είναι τα αποτελέσματά μας. Στο σχήμα 5.7 παρατηρούμε ότι για θόρυβο τάξης  $10^{-2}$  στη δεξιά πλευρά, μόνο οι πρώτοι έξι συντελεστές είναι αξιόπιστοι.



**Σχήμα 5.7:** Το διάγραμμα Picard για το διακριτό πρόβλημα βαρύτητας, με θόρυβο τάξης  $10^{-2}$  στη δεξιά πλευρά.

## 5.2 Πρόβλημα ανακατασκευής εικόνας σε 1 διάσταση

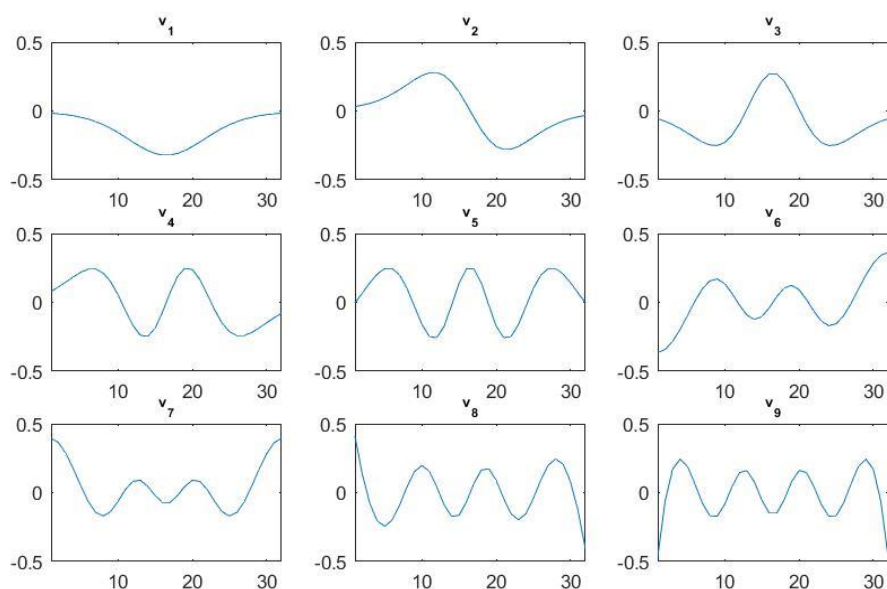
Σε αυτή την εφαρμογή θα δούμε πως μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την SVD για να αναλύσουμε την ομαλότητα της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους. Ο πυρήνας αυτού του προβλήματος είναι:

$$K(s, t) = (\cos(s) + \cos(t))^2 \left( \frac{\sin(\pi(\sin(s) + \sin(t)))}{\pi(\sin(s) + \sin(t))} \right)^2, \quad -\frac{\pi}{2} \leq s, t \leq \frac{\pi}{2}$$

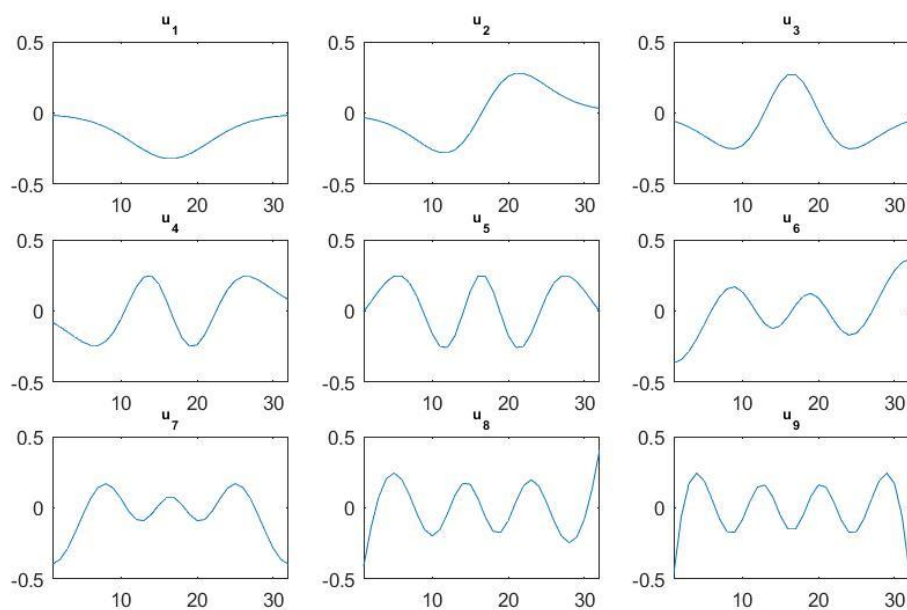
και η λύση είναι  $f(t) = 2 \exp(-6(t-0.8)^2) + \exp(-2(t+0.5)^2)$ .

Αυτή η ολοκληρωτική εξίσωση μοντελοποιεί μία κατάσταση στην οποία το φως περνάει μέσα από μία σχισμή απείρου μήκους και η συνάρτηση  $f(t)$  είναι η εισερχόμενη ένταση της ακτίνας φωτός ως μία συνάρτηση της γωνίας πρόσπτωσης  $t$ . Το συνεχές πρόβλημα μετατρέπεται σε ένα διακριτό αντίστροφο πρόβλημα με τη μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης του μέσου ώστε να βρούμε τον πίνακα  $A$  και την πραγματική λύση  $x^{exact}$ . Έπειτα υπολογίζεται η δεξιά πλευρά ως  $b^{exact} = Ax^{exact}$ . Τα στοιχεία του διανύσματος  $b^{exact}$  αντιπροσωπεύουν την ένταση της ακτίνας φωτός στην άλλη άκρη της σχισμής.

Υλοποιούμε το πρόβλημα για  $n = 32$ . Στα παρακάτω σχήματα φαίνονται οι γραφικές παραστάσεις των πρώτων εννιά δεξιά και αριστερά ιδιάζοντων διανυσμάτων αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι ο αριθμός των αλλαγών στο πρόσημο για κάθε διάνυσμα είναι ίσος με  $i - 1$ , για παράδειγμα για το διάνυσμα  $v_3$  έχουμε δύο αλλαγές προσήμου.

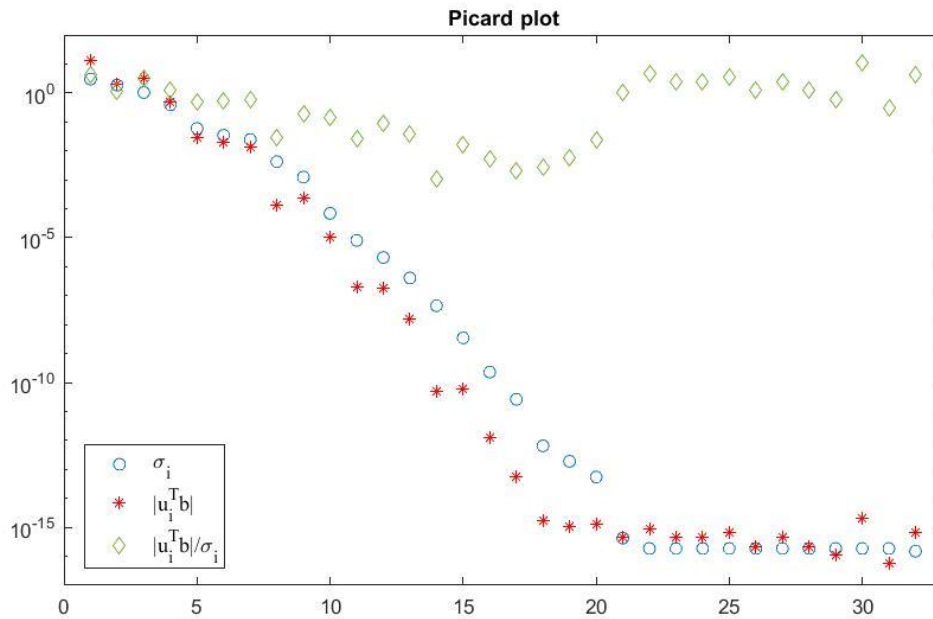


**Σχήμα 5.8:** Τα πρώτα 9 δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα του πίνακα  $A$ .



**Σχήμα 5.9:** Τα πρώτα 9 αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα του πίνακα  $A$ .

Στη συνέχεια, φτιάχνουμε το διάγραμμα Picard και παρατηρούμε τη συμπεριφορά των ιδιζουσών τιμών  $\sigma_i$ , των συντελεστών του δεξιού μέλους  $u_i^T b^{exact}$  και των αντίστοιχων συντελεστών λύσης  $\frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i}$ .

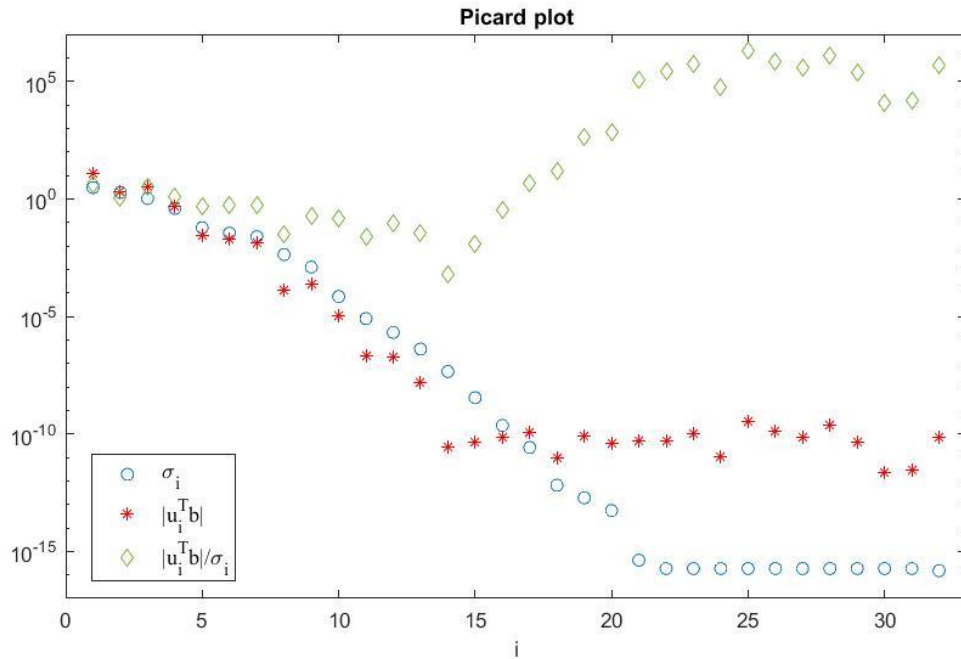


**Σχήμα 5.10:** Το διάγραμμα Picard για το διακριτό πρόβλημα ανακατασκευής εικόνας, χωρίς θόρυβο.

Από το διάγραμμα Picard παρατηρούμε ότι οι συντελεστές  $u_i^T b^{exact}$  μειώνονται με πιο γρήγορο ρυθμό από τις ιδιάζουσες τιμές, εκτός από τους τελευταίους τέσσερις όρους που αντιστοιχούν στις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$ . Λόγω της πεπερασμένης ακρίβειας του υπολογιστή σε αυτό το σημείο, σταθεροποιούνται στο επίπεδο θορύβου. Συνεπώς, ισχύει η διακριτή συνθήκη Picard.

Προσθέτουμε στη δεξιά πλευρά Γκαουσιανό λευκό θόρυβο της τάξης  $10^{-10}$  και σχεδιάζουμε εκ νέου το διάγραμμα Picard.



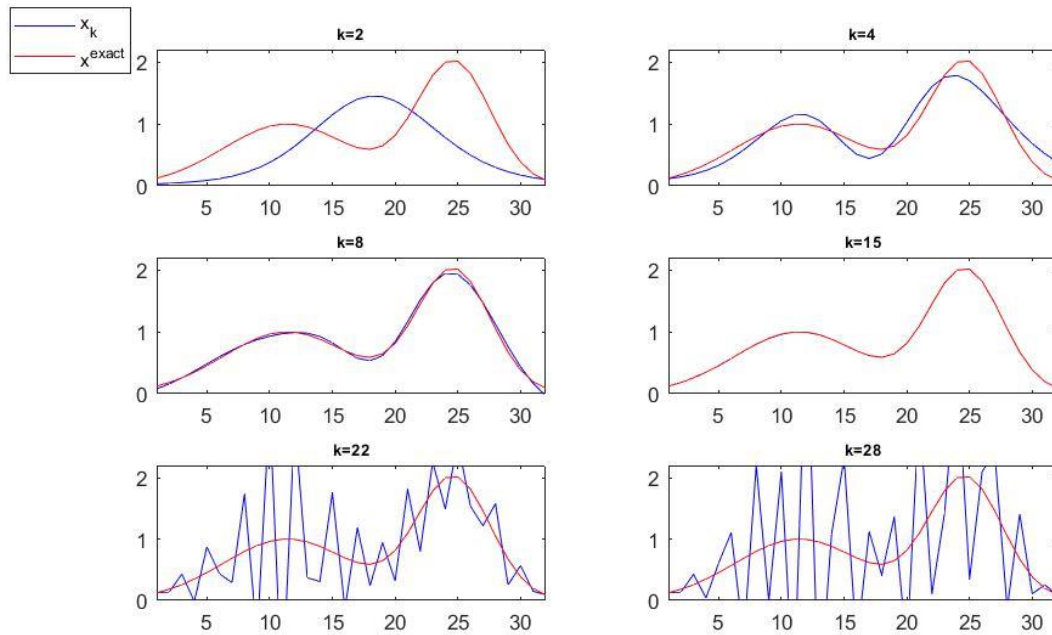


**Σχήμα 5.11:** Το διάγραμμα Picard για το διακριτό πρόβλημα ανακατασκευής εικόνας, με θόρυβο.

Παρατηρούμε ότι ενώ αρχικά οι συντελεστές έχουν την ίδια συμπεριφορά όπως και στο πρόβλημα χωρίς θόρυβο, μετά από ένα σημείο οι συντελεστές  $u_i^T b$  σταθεροποιούνται λόγω του θορύβου. Συνεπώς, οι συντελεστές  $u_i^T b$  που αντιστοιχούν στις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές είναι ανακριβείς και η υπολογιζόμενη λύση επηρεάζεται από αυτούς.

Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε τις μεθόδους TSVD και Tikhonov για την εξαγωγή προσεγγιστικών λύσεων.

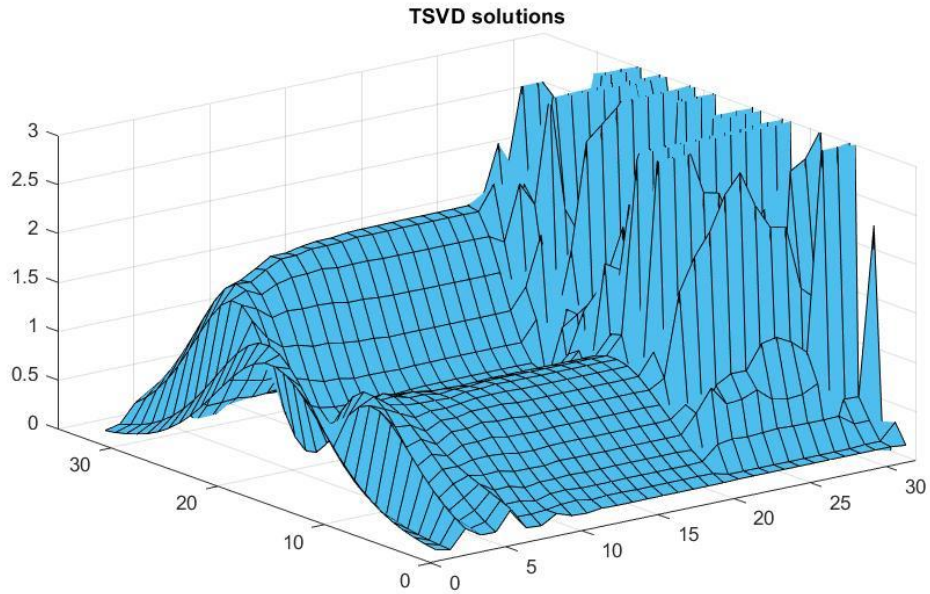
Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι προσεγγιστικές λύσεις της μεθόδου TSVD για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $k$ .



**Σχήμα 5.12:** Οι TSVD λύσεις  $x_k$  για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $k$ .

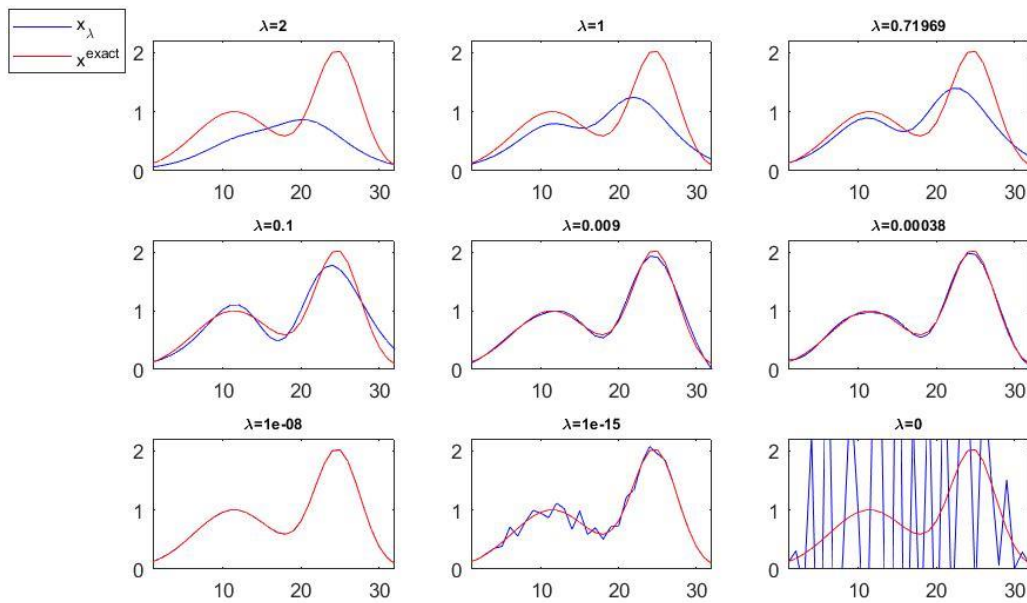
Παρατηρούμε ότι για  $k = 15$  έχουμε μία καλή προσέγγιση της λύσης, ενώ για  $k = 22$  και  $k = 28$  φαίνεται ο θόρυβος στο  $x_k$ . Ακόμα, για μικρές τιμές της παραμέτρου, η προσεγγιστική λύση απέχει αρκετά από την πραγματική λόγω του μεγάλου φιλτραρίσματος που επιβάλλεται.

Στο σχήμα 5.13 απεικονίζεται το τρισδιάστατο γράφημα των λύσεων TSVD. Παρατηρούμε την πορεία της προσεγγιστικής λύσης  $x_k$  καθώς από μικρές τιμές της παραμέτρου  $k$  πηγαίνουμε σε μεγάλες, μέχρι  $k = 32$  όπου περιλαμβάνονται όλοι οι συντελεστές SVD. Για μικρές τιμές του  $k$  φαίνεται η υπερβολική ομαλότητα που δημιουργείται στη λύση, ενώ όταν το  $k$  παίρνει μεγάλες τιμές παρατηρούμε ότι στη λύση κυριαρχεί ο θόρυβος.



**Σχήμα 5.13:** Τρισδιάστατη απεικόνιση των λύσεων TSVD  $x_k$ .

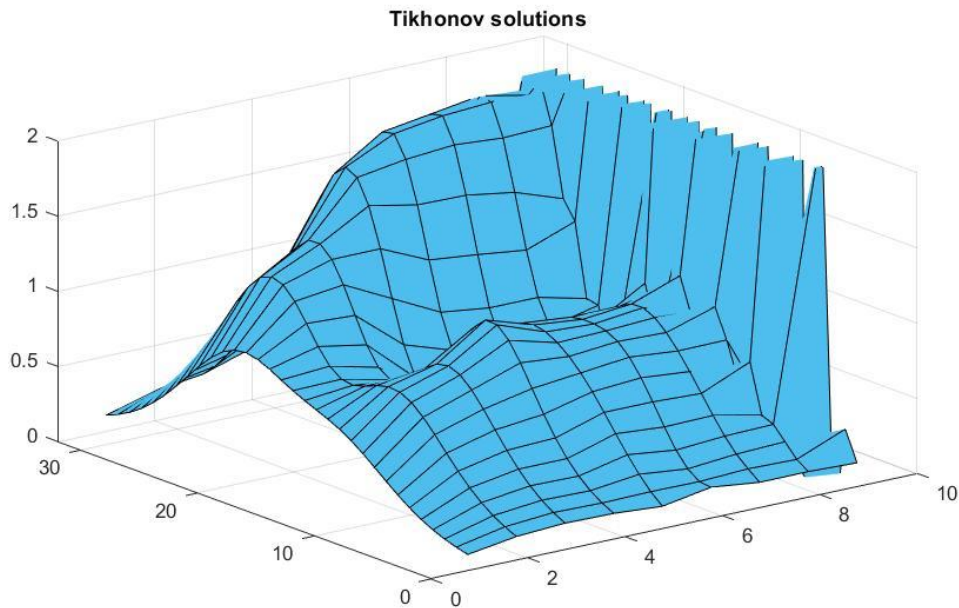
Υπολογίζουμε τις προσεγγιστικές λύσεις Τikhonov και τις απεικονίζουμε για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $\lambda$ .



**Σχήμα 5.14:** Οι λύσεις Τikhonov  $x_\lambda$  για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $\lambda$ .

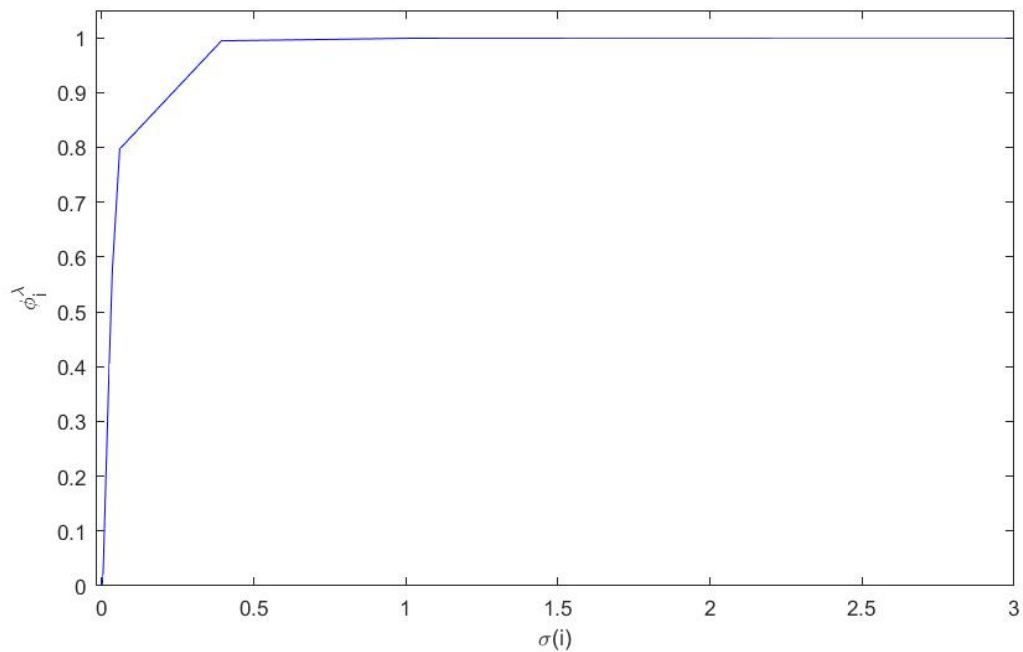
Παρατηρούμε ότι για μικρές τιμές της παραμέτρου  $\lambda$  επειδή επιβάλλεται μικρό φιλτράρισμα στην υπολογιζόμενη λύση έχουμε πολύ μεγάλο σφάλμα. Ειδικότερα, για  $\lambda = 0$  έχουμε την αρχική λύση  $x = A^{-1}b = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$ , η οποία είναι εμφανώς επηρεασμένη από τους θορυβώδεις συντελεστές SVD. Από την άλλη, οι μεγάλες τιμές του  $\lambda$  επιβάλλουν μεγάλη ομαλότητα στην προσέγγιση έτσι ώστε η προσέγγιση να αποκλίνει αρκετά από την πραγματική λύση. Για  $\lambda = 10^{-8}$  έχουμε μία καλή προσέγγιση της πραγματικής λύσης.

Στο σχήμα 5.15 απεικονίζεται το τρισδιάστατο γράφημα των λύσεων Tikhonov. Παρατηρούμε την πορεία της προσεγγιστικής λύσης  $x_\lambda$  καθώς από μεγάλες τιμές του  $\lambda$  πηγαίνουμε σε μικρές τιμές. Για μεγάλες τιμές του  $\lambda$  φαίνεται η υπερβολική ομαλότητα που δημιουργείται στη λύση, ενώ για μικρότερες τιμές παρατηρούμε ελάχιστη ομαλότητα για να καταλήξουμε στην τιμή  $\lambda = 0$  όπου κυριαρχεί ο θόρυβος, όπως αναφέραμε και προηγουμένως.



**Σχήμα 5.15:** Τρισδιάστατη απεικόνιση των λύσεων Tikhonov  $x_\lambda$ .

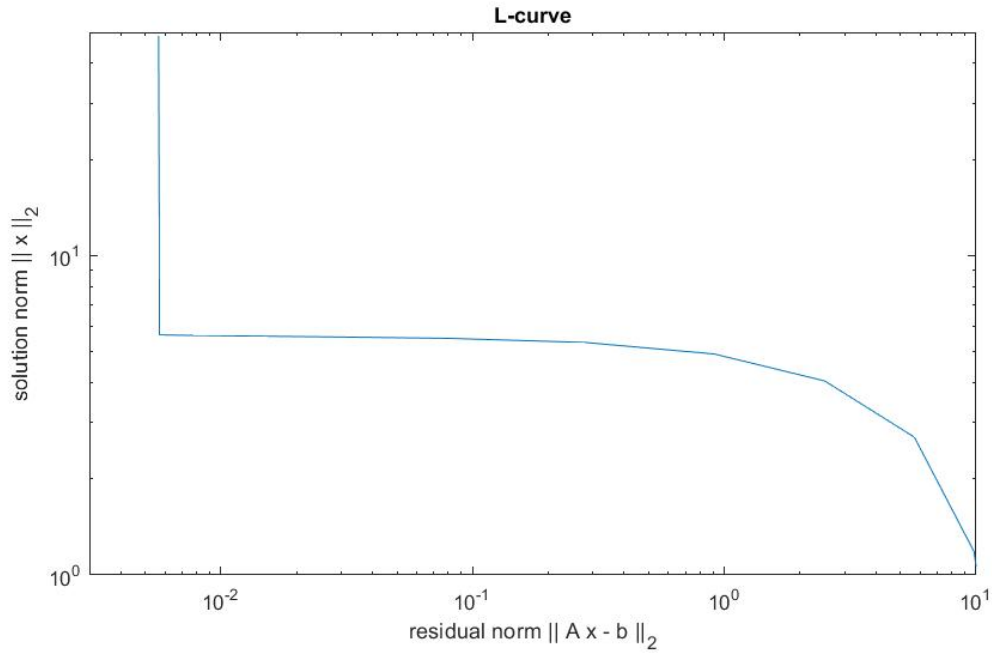
Τροποποιούμε το παραπάνω πρόβλημα ώστε το  $\lambda$  να είναι μία λογαριθμική κατανομή 20 τιμών από  $10^{-5}$  μέχρι 10 και προσθέτουμε στη δεξιά πλευρά Γκαουσιανό λευκό θόρυβο της τάξης  $10^{-3}$ . Υπολογίζουμε τις λύσεις Tikhonov για τις διάφορες τιμές του  $\lambda$  και τους αντίστοιχους παράγοντες φιλτραρίσματος  $\varphi_i^{[\lambda]}$ .



**Σχήμα 5.16:** Οι παράγοντες φιλτραρίσματος  $\phi_i^{[\lambda]} = \sigma_i^2 / (\sigma_i^2 + \lambda^2)$ .

Παρατηρούμε ότι για τις μεγάλες ιδιάζουσες τιμές, οι παράγοντες φιλτραρίσματος παίρνουν τιμές κοντά στη μονάδα και οι αντίστοιχοι συντελεστές  $|u_i^T b|$  συμμετέχουν πλήρως στη λύση. Αντιθέτως, για τις μικρές ιδιάζουσες τιμές οι παράγοντες φιλτραρίσματος τείνουν στο μηδέν και επομένως οι αντίστοιχοι SVD συντελεστές συνεισφέρουν ελάχιστα στη λύση.

Στη συνέχεια, κατασκευάζουμε την καμπύλη L του παραπάνω προβλήματος. Παρατηρούμε ότι για μεγάλες τιμές του  $\lambda$ , η νόρμα της λύσης τείνει στο μηδέν και η καμπύλη παίρνει κλίση προς τα κάτω. Οι μικρές τιμές του  $\lambda$  απεικονίζονται στο κάθετο τμήμα της καμπύλης όπου κυριαρχεί η επίδραση του θορύβου.



**Σχήμα 5.17:** Η καμπύλη L της ομαλοποίησης Tikhonov του προβλήματος ανακατασκευής εικόνας.

### 5.3 Πρόβλημα υπολογισμού 2<sup>ης</sup> παραγώγου

Θεωρούμε την ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους  $\int_0^1 K(s,t)f(t)dt = g(s)$ ,  $0 \leq s \leq 1$ , με πυρήνα τη συνάρτηση του Green για τη

$$\text{δεύτερη παράγωγο: } K(s,t) = \begin{cases} s(t-1) & , s < t \\ t(s-1) & , s \geq t \end{cases} .$$

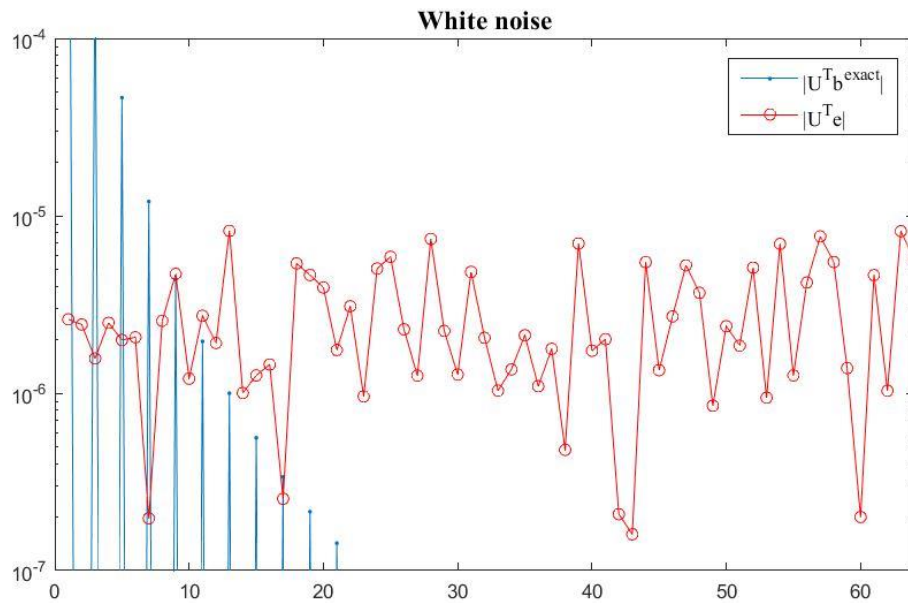
Χρησιμοποιούμε το παράδειγμα 3 της συνάρτησης *deriv2* του πακέτου *Regularization Tools*, για  $n = 64$ , οπότε έχουμε:

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

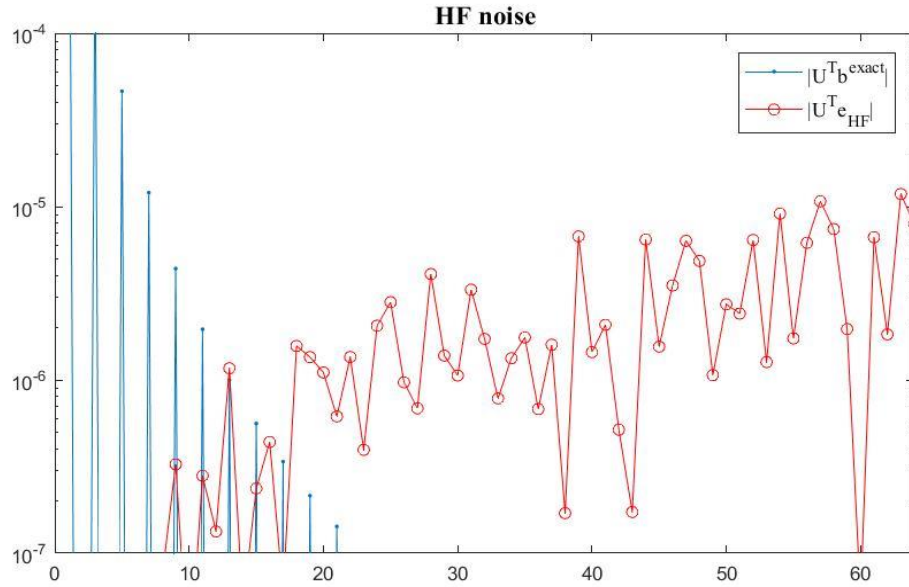
$$f(t) = \begin{cases} t & , t < 0.5 \\ 1-t & , t \geq 0.5 \end{cases} .$$

Παράγουμε Γκαουσιανό λευκό θόρυβο με τη γεννήτρια  $e = randn(n,1)$ , καθώς και θόρυβο HF,  $e_{HF}$  και θόρυβο LF,  $e_{LF}$ . Ο έγχρωμος θόρυβος λαμβάνεται σύμφωνα με τη σχέση (3.49)  $e_{HF} = \Psi_{HF}e$ ,  $e_{LF} = \Psi_{LF}e$ , όπου  $\Psi_{HF} = tridiag(-1,2,-1)$ ,  $\Psi_{LF} = tridiag(1,2,1)$ .

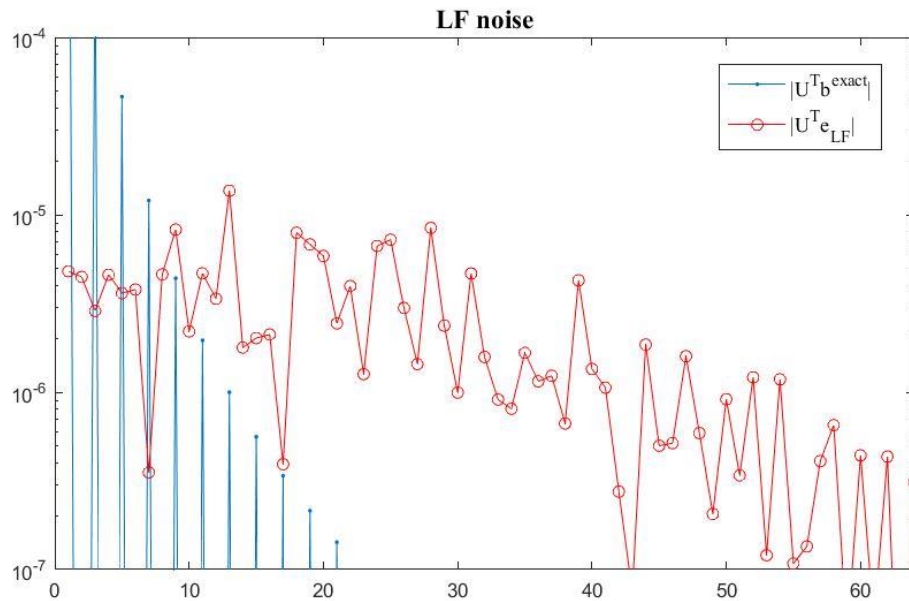
Στη συνέχεια, γραμμικοποιούμε τα διανύσματα θορύβου ώστε να έχουν το ίδιο σχετικό επίπεδο θορύβου  $rnl = 10^{-3}$ .



**Σχήμα 5.18:** Οι συντελεστές SVD της πραγματικής δεξιάς πλευράς,  $U^T b^{exact}$  και οι συντελεστές λευκού θορύβου,  $U^T e$ .



**Σχήμα 5.18:** Οι συντελεστές SVD της πραγματικής δεξιάς πλευράς,  $U^T b^{exact}$  και οι συντελεστές θορύβου HF,  $U^T e_{HF}$ .



**Σχήμα 5.19:** Οι συντελεστές SVD της πραγματικής δεξιάς πλευράς,  $U^T b^{exact}$  και οι συντελεστές θορύβου LF,  $U^T e_{LF}$ .

Οι συνιστώσες  $u_i^T b^{exact}$  φθίνουν, το οποίο είναι αναμενόμενο διότι το δεξί μέλος ικανοποιεί τη διακριτή συνθήκη Picard. Οι συνιστώσες του λευκού θορύβου έχουν σταθερή συμπεριφορά καθώς αυξάνεται το  $i$ . Οι συνιστώσες του θορύβου HF



αυξάνουν όσο αυξάνεται το  $i$ , ενώ οι συνιστώσες του θορύβου LF μειώνονται όσο αυξάνεται το  $i$ .

Παρατηρούμε ότι όταν ο θόρυβος στα δεδομένα μοιάζει με την πραγματική δεξιά πλευρά, η οποία ικανοποιεί τη συνθήκη Picard, δηλαδή όταν ο θόρυβος έχει κυρίως χαμηλές συχνότητες, τότε η επίδραση του θορύβου στην υπολογιζόμενη λύση είναι πολύ μεγάλη.

#### 5.4 Μετατροπή τυχαίου θορύβου σε λευκό θόρυβο

Σε αυτή την παράγραφο, θα εξετάσουμε γραφικά τη διαδικασία του prewhitening μέσω του προβλήματος *phillips* το οποίο διακριτοποιεί την παρακάτω ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm πρώτου είδους. Ορίζουμε τη συνάρτηση

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

Τότε ο πυρήνας  $K$ , η λύση  $f$  και η δεξιά πλευρά  $g$  δίνονται από τις σχέσεις:

$$K(s, t) = \varphi(s - t),$$

$$f(t) = \varphi(t),$$

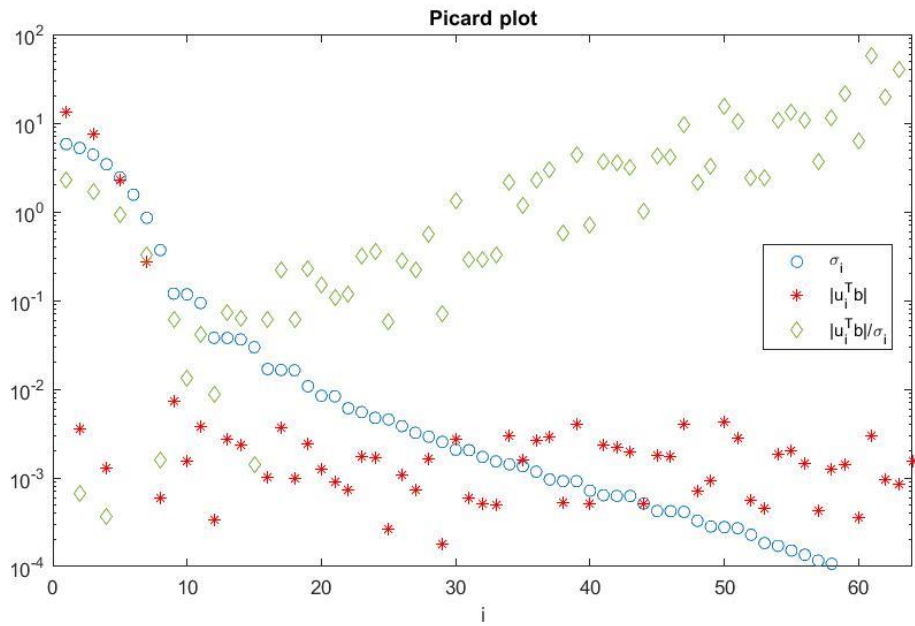
$$g(s) = (6 - |s|) \left( 1 + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi s}{3}\right) \right) + \frac{9}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi |s|}{3}\right).$$

Τα δύο διαστήματα ολοκλήρωσης είναι  $[-6, 6]$  και υλοποιούμε το πρόβλημα για  $n = 64$ .

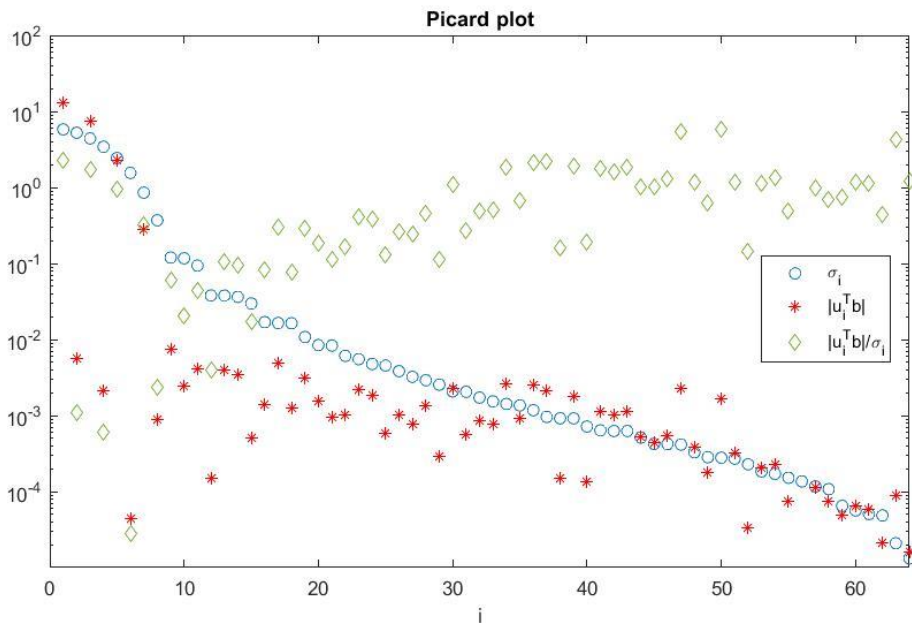
Εισάγουμε στο πρόβλημα λευκό θόρυβο και θόρυβο LF όπως στην παράγραφο 5.3. Εφαρμόζουμε την παραγοντοποίηση Cholesky για τον πίνακα συνδιακύμανσης  $\text{Cov}(e)$  και με τον άνω τριγωνικό πίνακα  $C$  που προκύπτει, υπολογίζουμε τα τροποποιημένα δεδομένα σύμφωνα με τη σχέση (4.39).

Συνεπώς έχουμε τρία είδη δεδομένων, τα δεδομένα με λευκό θόρυβο  $b = b^{exact} + e$ , τα δεδομένα με θόρυβο LF  $b^{LF} = b^{exact} + e_{LF}$  και τα δεδομένα για το prewhitened πρόβλημα  $b^{pw} = C^{-T} b^{exact} + C^{-T} e$ . Στα παρακάτω σχήματα απεικονίζονται τα διαγράμματα Picard για αυτά τα δεδομένα. Τονίζουμε ότι, για το διάνυσμα που

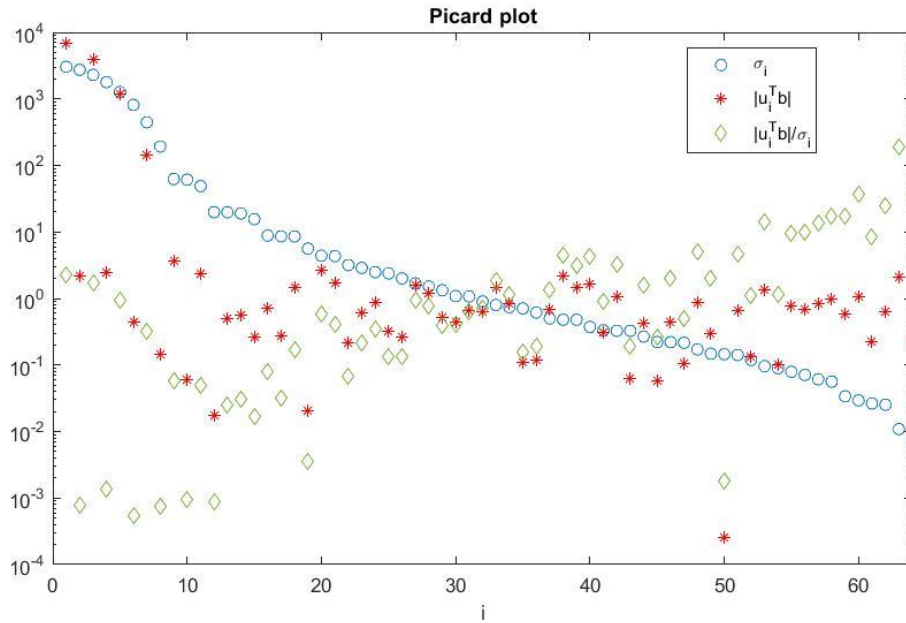
αντιστοιχεί στο prewhitened πρόβλημα και το αντίστοιχο διάγραμμα Picard χρησιμοποιείται η SVD του τροποποιημένου πίνακα  $A$ .



Σχήμα 5.20: Το διάγραμμα Picard για τα δεδομένα με λευκό θόρυβο.



Σχήμα 5.21: Το διάγραμμα Picard για τα δεδομένα με θόρυβο LF.



**Σχήμα 5.22:** Το διάγραμμα Picard για το prewhitened πρόβλημα.

Στο σχήμα 5.21 φαίνεται η συμπεριφορά του θορύβου LF, καθώς οι συνιστώσες του δεξιού μέλους,  $|u_i^T b|$  φθίνουν για  $i > 15$ , δηλαδή όταν επηρεάζονται πλήρως από το θόρυβο.

Στο σχήμα 5.22 έχουμε το διάγραμμα Picard για το τροποποιημένο πρόβλημα  $(C^{-T}A)x = C^{-T}b$  και παρατηρούμε ότι πλέον έχουμε ένα καινούργιο πρόβλημα λευκού θορύβου καθώς οι συνιστώσες  $|u_i^T b|$  σταθεροποιούνται για  $i > 15$ . Στο καινούργιο πρόβλημα είναι πιο εύκολο να διαχωριστεί το σήμα και ο θόρυβος στα δεδομένα μέσω μίας μεθόδου επιλογής παραμέτρου.

## Κεφάλαιο 6 Βιβλιογραφία

1. Hansen P.C., *Discrete Inverse Problems Insight and Algorithms*, SIAM, 2010.
2. Hansen P.C., *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems: Numerical Aspects of Linear Inversion*, SIAM, 1998.
3. Hansen P.C., *Regularization Tools: A MATLAB package for analysis and solution of discrete ill-posed problems*, Numer. Algorithms, 6, pp. 1-35, 1994.
4. Kress, R., *Linear Integral Equations (3<sup>rd</sup> Edition)*, Springer, 2014.
5. Καδιανάκης Ν., Καρανάσιος Σ., *Γραμμική Άλγεβρα – Αναλυτική Γεωμετρία και Εφαρμογές (5<sup>η</sup> Έκδοση)*, Αθήνα 2011.
6. Ψαρράκος Π.Ι., *Θέματα Ανάλυσης Πινάκων*, Αθήνα 2014.