



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

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
ΔΙΑΚΡΙΤΑ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΚΑΙ
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΑ ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ**

ΣΤΑΘΗΣ ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ :
ΔΡΟΣΟΣ ΓΚΙΝΤΙΔΗΣ**

ΑΘΗΝΑ 2011

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Πρώτα από όλα θέλω να εκφράσω την βαθειά ευγνωμοσύνη μου στους γονείς μου Καλούδη και Ειρήνη για την στήριξη και τις θυσίες που έκαναν για εμένα όλα αυτά τα χρόνια. Επίσης θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή κ.Δρόσο Γκιντίδη για την εξαιρετική συνεργασία και την βοήθεια του κατά την εκπόνηση αυτής της διπλωματικής εργασίας. Τέλος θέλω να ευχαριστήσω και τους φίλους-συμφοιτητές μου που σταθήκαμε ο ένας δίπλα στον άλλο κατα την διάρκεια των σπουδών μας.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Αντικείμενο αυτής της διπλωματικής εργασίας είναι τα Αντίστροφα Διακριτά Προβλήματα Fredholm πρώτου είδους. Για την ανάλυση τους χρησιμοποιούνται τα αναπτύγματα ιδιζουσών τιμών (S.V.D), και μελετώνται μέθοδοι επίλυσης με έμφαση στην μέθοδο Tikhonov. Στο τέλος γίνεται παρουσίαση υπολογιστικών εφαρμογών.

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια απλή εισαγωγή στα αντίστροφα προβλήματα, και παραθέτονται ορισμένα χαρακτηριστικά παραδείγματα αντίστροφων προβλημάτων.

Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζεται ο υπολογισμός των ιδιζουσών τιμών (Singular Value Evaluation), ένα ανάπτυγμα το οποίο είναι χρήσιμο για διερεύνηση των ιδιοτήτων των ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm καθώς και η συνθήκη Picard.

Το τρίτο κεφάλαιο αναφέρεται στη διακριτοποίηση των αντίστροφων προβλημάτων, και αναφέρονται οι δύο τρόποι διακριτοποίησης. Οι προσεγγιστικές ολοκληρωτικές μέθοδοι και οι μέθοδοι αναπτύγματος. Ακόμη αναφέρεται η διακριτή συνθήκη Picard και ο προσδιορισμός ιδιζουσών τιμών (Singular Value Decomposition).

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζονται κάποιες μέθοδοι ομαλοποίησης αντίστροφων προβλημάτων, ενώ στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζονται τρεις τεχνικές εύρεσης του βέλτιστου παράγοντα ομαλοποίησης των παραπάνω μεθόδων.

Στο έκτο κεφάλαιο παρουσιάζεται μια υπολογιστική εφαρμογή για το πρόβλημα της βαρύτητας, όπου χρησιμοποιείται κώδικας σε Matlab για την εξαγωγή συμπερασμάτων βάσει της θεωρίας που αναπτύχθηκε στα προηγούμενα κεφάλαια.

ABSTRACT

This dissertation is dedicated to discrete inverse problems. Singular Value Decomposition is a powerful tool that we use to have an insight to the properties of Fredholm integral equation. Moreover, we refer to the most popular computational regularization methods and particularly to Tikhonov regularization method. At the end of the dissertation some computational applications are presented.

Chapter one is a brief introduction to inverse problems. We refer to some examples of inverse problems from different disciplines so as to get a notion of the differences between the inverse and the forward problem.

Chapter two is dedicated to Singular Value Decomposition and Picard condition. They both help to probe into the properties of Fredholm's integral equation of the first kind.

Chapter three generally refers to the Discretization of Linear Inverse Problems. Two methods of discretizing Linear Inverse Problems (Quadrature and Expansion Methods) are mentioned. Singular Value Decomposition and Discrete Picard Condition are also considered.

Chapter four analyses the most important regularization methods, particularly Tikhonov Method. In Chapter five we mention some methods for choosing the optimum regularization parameter which we use along with one regularization method so as to obtain a solution that is close to the exact solution of the unperturbed problem.

In Chapter Six we use Tikhonov Method to solve the discretized gravity surveying problem. We use three different ways to choose Tikhonov regularization parameter so as to find three different Tikhonov solutions for the discretized problem. Then we compare those three approximate solutions with the exact solution. The purpose is to make conclusions based on the theory that has been presented in the previous chapters.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Κεφάλαιο 1 : Εισαγωγή	1
Κεφάλαιο 2 : Ολοκληρωτικές Εξισώσεις Fredholm A' Είδους	
2.1 Εξίσωση Fredholm A' Είδους – Λήμμα Lebesgue	8
2.2 Εκτίμηση Ιδιαζουσών Τιμών (Singular Value Evaluation)	9
2.3 Συνθήκη Picard	11
2.4 Μη Μοναδικότητα Λύσης στα Αντίστροφα Προβλήματα	12
Κεφάλαιο 3 : Διακριτοποίηση Αντίστροφων Προβλημάτων	
3.1 Μέθοδοι Αριθμητικής Ολοκλήρωσης	13
3.2 Μέθοδοι Αναπτύγματος	14
3.3 Υπολογισμός Ιδιαζουσών Τιμών	17
3.4 Συνθήκη Picard για Διακριτοποιημένα Προβλήματα	19
3.5 Συμμετρίες του πίνακα A	22
Κεφάλαιο 4 : Μέθοδοι Ομαλοποίησης	
4.1 Truncated SVD	25
4.2 Selective SVD	29
4.3 Μέθοδος Ομαλοποίησης Tikhonov	30
4.4 Ευαισθησία Μεθόδων Ομαλοποίησης	35
4.5 Prewhitening	37
Κεφάλαιο 5 : Μέθοδοι Εύρεσης Βέλτιστων Παραμέτρων κ και λ	
5.1 Σφάλματα Απόκλισης-Σφάλματα Διαταραχών	39
5.2 Discrepancy Principle	41
5.3 Κριτήριο-L	42
5.4 Generalized Cross Validation	44
Κεφάλαιο 6 : Υπολογιστικά Παραδείγματα	47

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Εισαγωγή

Υπάρχουν πολλοί τρόποι να κατηγοριοποιήσουμε τα προβλήματα. Ένας από αυτούς είναι η κατηγοριοποίησή τους σε ευθέα και αντίστροφα προβλήματα. Η πρόβλεψη των αποτελεσμάτων ενός συστήματος με γνωστές παραμέτρους, είναι το λεγόμενο ευθύ πρόβλημα. Το αντίστροφο πρόβλημα είναι ο προσδιορισμός των παραμέτρων του συστήματος που έχουμε προς διερεύνηση, με την βοήθεια των αποτελεσμάτων που παρατηρούμε.

Με άλλα λόγια προσπαθούμε να διερευνήσουμε το «εσωτερικό» ενός συστήματος, αναζητούμε «κρυφές πληροφορίες» του συστήματος, βάσει δεδομένων που αφορούν το «εξωτερικό» του συστήματος. Για παράδειγμα ο υπολογισμός του μαγνητισμού στο εσωτερικό ενός ηφαιστείου από μετρήσεις ηλεκτρομαγνητικών μεγεθών στην επιφάνεια του είναι ένα αντίστροφο πρόβλημα.

Τα αντίστροφα προβλήματα έχουν εφαρμογή σε ένα ευρύ φάσμα τεχνολογικών εφαρμογών και σε διάφορους επιστημονικούς κλάδους, όπως είναι η ιατρική απεικόνιση, η γεωλογία και άλλα. Τα παρακάτω παραδείγματα θα μας βοηθήσουν να καταλάβουμε την διαφορά μεταξύ ευθέων και αντίστροφων προβλημάτων, και του τρόπου που προκύπτουν τα τελευταία.

Παράδειγμα 1 (Αντίστροφο Πρόβλημα Σκέδασης) [3]

Σε πολλές περιπτώσεις προβλημάτων Ηλεκτρομαγνητισμού και Ακουστικής κύματα γνωστής φάσης και γνωστού πλάτους προσπίπτουν σε ένα γνωστό αντικείμενο - στόχο γνωστών διαστάσεων, γνωστού σχήματος, και ζητούμενο είναι να υπολογίσουμε την μορφή των κυμάτων που σκεδάζονται από το αντικείμενο. Αυτό είναι το ευθύ πρόβλημα. Πολλές φορές όμως είναι γνωστά τα προσπίπτοντα και τα ανακλώμενα κύματα και ζητούμενο είναι να πάρουμε πληροφορίες για το αντικείμενο-σκεδαστή, όπως για παράδειγμα το σχήμα του. Αυτό είναι ένα αντίστροφο πρόβλημα. Το ευθύ πρόβλημα περιγράφεται ως εξής :

Έστω ένα χωρίο $D \subset \mathbb{R}^m$ (με $m = 2$ ή 3), με λείο σύνορο ∂D και ένα προσπίπτον κύμα $u^i = e^{ik\hat{\theta}x}$, όπου $k > 0$ ο κυματαριθμός και $\hat{\theta}$ το μοναδιαίο διάνυσμα της διεύθυνσης διάδοσης του κύματος. Ζητούμενο στο ευθύ πρόβλημα είναι η εύρεση του συνολικού πεδίου $u = u^i + u^s$, όπου u^s το σκεδαζόμενο κύμα, ώστε

$$\Delta u + k^2 u = 0 \text{ στο } \mathbb{R}^m \setminus \bar{D}, \quad u = 0 \text{ στο } \partial D, \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial u^s}{\partial r} - iku^s = \mathcal{O}\left(r^{-\frac{m+1}{2}}\right) \text{ για } r = |x| \rightarrow \infty. \quad (1.1b)$$

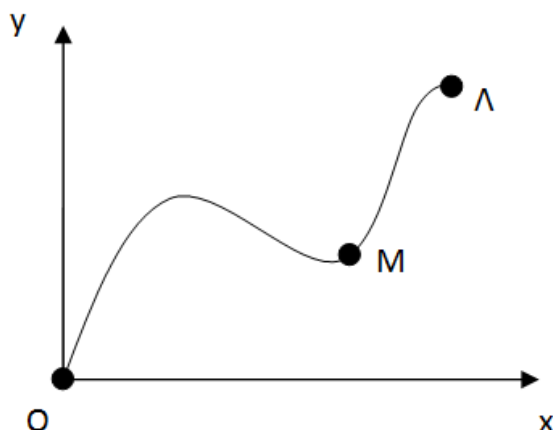
Λόγω της τελευταίας εξίσωσης η ασυμπτωτική συμπεριφορά του u^s είναι

$$u^s(x) = \frac{e^{ik|x|}}{|x|^{\frac{m-1}{2}}} u_\infty(\hat{x}) + \mathcal{O}\left(|x|^{-\frac{m+1}{2}}\right) \text{ καθώς } |x| \rightarrow \infty \quad (1.2)$$

όπου $\hat{x} = x / |x|$. Στο αντίστροφο πρόβλημα ζητούμενο είναι ο καθορισμός του σχήματος του D όταν το πεδίο σε μεγάλη απόσταση $u_\infty(\hat{x})$ είναι γνωστό για κάθε \hat{x} σε μια μοναδιαία σφαίρα στον \mathbb{R}^m .

Το παραπάνω αντίστροφο πρόβλημα έχει εφαρμογές στον μη καταστροφικό έλεγχο υλικών, όπου χρησιμοποιούνται υπέρηχοι για να προσδιοριστεί το σχήμα και το βάθος των ρωγμών που μπορεί να έχει ένα δοκίμιο, στις σεισμικές έρευνες, στην γεωφυσική και στην αξονική τομογραφία.

Παράδειγμα 2 (Ολοκληρωτική Εξίσωση του Abel) [3]



Σχήμα 1.1 Τροχιά σώματος μάζας m .

Έστω ένα σώμα μάζας m που κινείται πάνω σε μια καμπύλη υπό την επίδραση της βαρυτικής δύναμης mg . Το σώμα κατευθύνεται από το σημείο O μηδενικού ύψους προς το σημείο A ύψους h . Στο ευθύ πρόβλημα είναι γνωστή η τροχιά του σώματος και ζητούμενο είναι ο χρόνος T που χρειάζεται για να πάει από το σημείο O στο σημείο A . Στο αντίστροφο πρόβλημα ζητούμενο είναι ο καθορισμός της τροχιάς του σώματος, ενώ σαν δεδομένα έχουμε τον χρόνο που χρειάζεται το σώμα για να βρεθεί σε θέσεις με διαφορετικά ύψη. Δηλαδή έχουμε δεδομένα $T = T(h)$. Υποθέτουμε μια παραμετρικοποίηση της καμπύλης $y = \psi(x)$ και ένα τυχαίο σημείο $M(x, \psi(x))$. Από την Αρχή Διατήρησης της Ενέργειας ισχύει ότι

$$E + U = \frac{m}{2}v^2 + mgy = mgh \quad (1.3)$$

που μετά από πράξεις καταλήγουμε ότι

$$\frac{ds}{dt} = v = \sqrt{2g(h - y)} \quad (1.4)$$

οπότε ο χρόνος T που χρειάζεται για την μετάβαση από το σημείο O στο A είναι

$$T = T(h) = \int_0^A \frac{ds}{v} = \int_0^h \sqrt{\frac{1 + \psi'(y)^2}{2g(h - y)}} dy \quad \text{για } h > 0 \quad (1.5)$$

Θέτοντας

$$\varphi(y) = \sqrt{1 + \psi'(y)^2} \quad \text{και} \quad f(h) = T(h)\sqrt{2g}$$

καταλήγουμε στην ολοκληρωτική εξίσωση Abel

$$\int_0^h \frac{\varphi(y)}{\sqrt{h-y}} dy = f(h), \quad h > 0. \quad (1.6)$$

Στην περίπτωση του αντιστρόφου προβλήματος η συνάρτηση $f(h)$ είναι γνωστή (από μετρήσεις), ενώ άγνωστη είναι η συνάρτηση $\varphi(y)$, η εύρεση της οποίας θα μας προσδιορίσει το $\psi(x)$. Οπότε η τροχιά θα είναι γνωστή σε παραμετρική μορφή.

Παράδειγμα 3 (Εξίσωση Θερμότητας) [3]

Η μονοδιάστατη εξίσωση θερμότητας είναι

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.7)$$

με συνοριακή συνθήκη

$$u(0, t) = u(\pi, t) = 0, \quad t \geq 0 \quad (1.8)$$

και αρχική συνθήκη

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq \pi. \quad (1.9)$$

Το ευθύ πρόβλημα είναι η λύση της εξίσωσης θερμότητας με τις δύο συνθήκες, δηλαδή η εύρεση του $u(x, t)$ που ικανοποιεί τα παραπάνω. Η λύση είναι :

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-n^2 t} \sin(nx), \quad (1.10)$$

με

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} u_0(y) \sin(ny) dy. \quad (1.11)$$

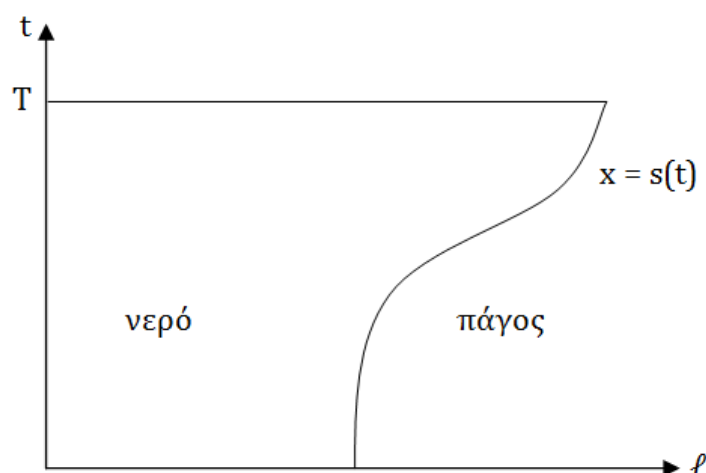
Η παραπάνω εξίσωση μας δίνει την κατανομή της θερμοκρασίας u σε κάποια χρονική στιγμή $t > t_0 > 0$ sec. Στην περίπτωση του αντίστροφου προβλήματος έχουμε σαν δεδομένα την θερμοκρασία σε διάφορα σημεία του χώρου για κάποια χρονική στιγμή $t = T > t_0$, ενώ ζητούμενο είναι ο προσδιορισμός της αρχικής κατανομής της θερμοκρασίας $u_0 = u(\cdot, 0)$ από την εξίσωση

$$u(x, T) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} k(x, y) u_0(y) dy \quad (1.12)$$

όπου

$$k(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-n^2 T} \sin(nx) \sin(ny). \quad (1.13)$$

Παράδειγμα 4 (Διάχυση σε ομογενές μέσο) [3]



Σχήμα 1.2 Διαχωριστική επιφάνεια $x = s(t)$ νερού και πάγου. Ο οριζόντιος άξονας δείχνει την μεταβολή της στον χώρο και ο κάθετος άξονας την μεταβολή της στον χρόνο.

Έστω ένα ομογενές κομμάτι πάγου που καταλαμβάνει την περιοχή $x \geq \ell$ την χρονική στιγμή $t = 0$. Ο πάγος ξεκινά να λιώνει όταν αρχίσει να θερμαίνεται από τα αριστερά. Έτσι την χρονική στιγμή $t > 0$ η περιοχή ανάμεσα στο $x = 0$ και $x = s(t)$ είναι γεμάτη με νερό και στην υπόλοιπη υπάρχει πάγος. Έστω $u(x, t)$ η θερμοκρασία για $0 \leq x \leq s(t)$, την χρονική στιγμή t . Είναι γνωστό ότι η u ικανοποιεί την μονοδιάστατη εξίσωση θερμότητας

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{στο } D = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2: 0 < x < s(t), t > 0\} \quad (1.14)$$

με συνοριακές συνθήκες

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = f(t) \quad \text{και} \quad u(s(t), t) = 0 \quad \text{για } t \in [0, T], \quad (1.15)$$

και με αρχική συνθήκη

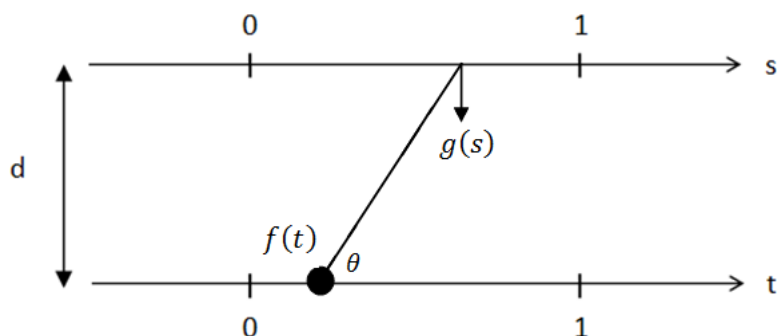
$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq \ell \quad (1.16)$$

όπου το u_0 περιγράφει την αρχική θερμοκρασία και η $f(t)$ την ροή θερμότητας στο σύνορο $x = 0$ του πάγου. Η ταχύτητα με την οποία μετακινείται και αλλάζει η διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ νερού και πάγου εξαρτάται από την ροή της θερμότητας. Το εύλογο αυτό γεγονός περιγράφεται από την συνθήκη Stefan:

$$\frac{ds(t)}{dt} = -\frac{\partial u(s(t), t)}{\partial x} \quad \text{για } t \in [0, T]. \quad (1.17)$$

Στο ευθύ πρόβλημα έχουμε να υπολογίσουμε την καμπύλη s όταν δίνεται το f και το u_0 . Στο αντίστροφο πρόβλημα, η καμπύλη s είναι γνωστή, ενώ ζητούμενα είναι ο προσδιορισμός της θερμοκρασίας u και της ροής θερμότητας f (ή του u_0 αντί του f).

Παράδειγμα 5 (Gravity surveying) [1],[3]



Σχήμα 1.3 Αναπαράσταση του προβλήματος της βαρύτητας : η συνάρτηση $f(t)$ είναι η πυκνότητα της μάζας και η $g(s)$ είναι η κάθετη συνιστώσα της βαρύτητας στο σημείο s της επιφάνειας.

Έστω μια γνωστή κατανομή μάζας γνωστής πυκνότητας $f(t)$ που εκτείνεται από το 0 έως το 1 στον t -άξονα και έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε την κάθετη συνιστώσα της βαρύτητας που προκαλεί σε ένα τυχαίο σημείο $S \in [0,1]$ κατά μήκος του άξονα- s μίας επιφάνειας που βρίσκεται σε ύψος d από τον t -άξονα (Ευθύ πρόβλημα).

Είναι γνωστό ότι το βαρυτικό πεδίο ενός απειροστού στοιχείου μάζας $f(t)dt/r^2$ του άξονα- t είναι ισοδύναμο με το βαρυτικό πεδίο μιας σημειακής μάζας $f(t)dt/r^2$ τοποθετημένης στην θέση t . Το βαρυτικό δυναμικό κατά μήκος του άξονα- s της σημειακής μάζας είναι $f(t)dt/r^2$, όπου $r = \sqrt{d^2 + (s-t)^2}$ η απόσταση ανάμεσα στην σημειακή μάζα και το σημείο S . Η κάθετη συνιστώσα του πεδίου της βαρύτητας στο S είναι

$$dg = \frac{\sin\theta}{r^2} f(t)dt, \quad (1.18)$$

όπου θ η γωνία ανάμεσα στο r και τον άξονα- t . Το δεύτερο μέλος της εξίσωσης (1.18) αν αντικαταστήσουμε $\sin\theta=d/r$ γίνεται

$$\frac{\sin\theta}{r^2} f(t)dt = \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{\frac{3}{2}}} f(t)dt, \quad (1.19)$$

επομένως

$$dg = \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{\frac{3}{2}}} f(t)dt. \quad (1.20)$$

Για να βρούμε την κάθετη συνιστώσα της βαρύτητας στο σημείο S που δημιουργείται από όλες τις σημειακές μάζες του άξονα- t , απλά ολοκληρώνουμε από 0 έως 1

$$g(s) = \int_0^1 dg = \int_0^1 \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{\frac{3}{2}}} f(t)dt. \quad (1.21)$$

Στο αντίστροφο πρόβλημα τα δεδομένα μας είναι οι μετρήσεις της κάθετης συνιστώσας της βαρύτητας $g(s)$ σε διάφορα σημεία του άξονα- s ανάμεσα στο μηδέν

και το ένα και ζητούμενο είναι να βρεθεί η πυκνότητα μάζας $f(t)$. Άρα στο αντίστροφο πρόβλημα έχουμε να λύσουμε την ολοκληρωτική εξίσωση

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

ως προς $f(t)$, όπου

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

το φυσικό μοντέλο (αυτό της σημειακής μάζας) που χρησιμοποιούμε.

Κοιτώντας τα προηγούμενα παραδείγματα, εύκολα μπορεί να παρατηρηθεί ότι στα αντίστροφα προβλήματα καταλήγουμε σε ολοκληρωτικές εξισώσεις της μορφής

$$\int_a^b K(s, t)f(t)dt = g(s), \quad a \leq s \leq b$$

όπου το $K(s, t)$ και το $g(s)$ είναι γνωστά, ενώ άγνωστο είναι το $f(t)$.

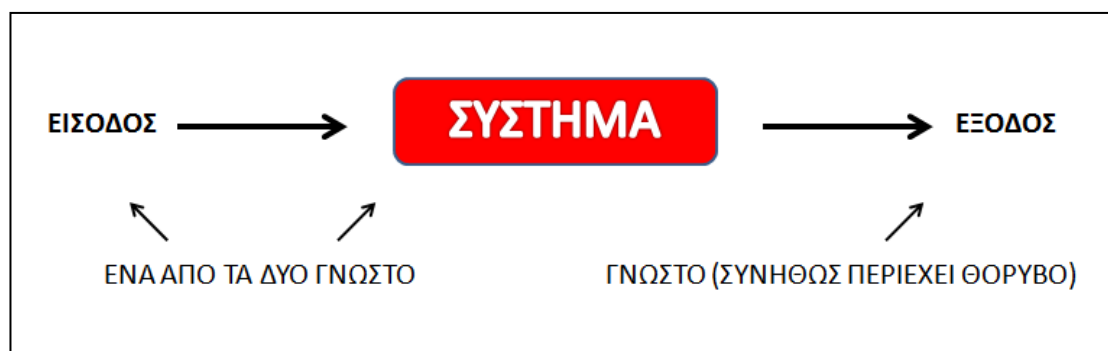
Αν δούμε την παραπάνω εξίσωση από την οπτική της θεωρίας συστημάτων, έχουμε ένα σύστημα

$$\hat{K}f = g$$

με τελεστή συστήματος

$$\hat{K} = \int_a^b K(s, t)f(t) dt$$

με είσοδο f και έξοδο g , όπου η έξοδος είναι γνωστή και η είσοδος άγνωστη. Στο αντίστροφο πρόβλημα υπάρχει ακόμα μία περίπτωση. Αυτή είναι να έχουμε γνωστά το f και το g , με τον τελεστή \hat{K} του συστήματος άγνωστο. Οι δύο αυτές περιπτώσεις σχηματοποιούνται ως εξής:



Σχήμα 1.4 Το ευθύ πρόβλημα σκοπό έχει τον υπολογισμό της εξόδου του συστήματος, όπου η είσοδος του συστήματος και ο τελεστής του συστήματος είναι γνωστά. Στο αντίστροφο πρόβλημα ζητούμενο είναι ο υπολογισμός είτε της εισόδου της οποίας την έξοδο γνωρίζουμε, είτε του τελεστή του συστήματος αν η είσοδος και η έξοδος του είναι γνωστά.

Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό των αντίστροφων προβλημάτων το οποίο δυσκολεύει την λύση τους είναι ότι δεν είναι καλά τοποθετημένα.

Ένα πρόβλημα είναι καλά τοποθετημένο κατά Hadamard αν :

- α) Υπάρχει λύση
- β) Η λύση είναι μοναδική
- γ) Η λύση εξαρτάται κατά συνεχή τρόπο από τα δεδομένα του προβλήματος (Ευστάθεια λύσης). Δηλαδή αν μεταβάλλουμε λίγο τα δεδομένα μας να μεταβάλλεται λίγο και η λύση.

Αν ένα πρόβλημα παραβιάζει τουλάχιστον έναν από τους κανόνες του Hadamard τότε δεν είναι καλά τοποθετημένο (ill posed problem). Τις περισσότερες φορές στα αντίστροφα προβλήματα παραβιάζεται ο τρίτος κανόνας για την ευστάθεια της λύσης (εγγενές χαρακτηριστικό των αντίστροφων προβλημάτων), ενώ δεν είναι λίγες οι περιπτώσεις που παραβιάζεται η ύπαρξη και η μοναδικότητα της λύσης. Αυτό αντιμετωπίζεται με τις μεθόδους ομαλοποίησης (π.χ. η μέθοδος Tikhonov), η λογική των οποίων είναι να αντικατασταθεί το μη καλά τοποθετημένο πρόβλημα με ένα καλά τοποθετημένο το οποίο είναι προσέγγιση του αρχικού προβλήματος. Επίσης δύο άλλοι παράγοντες που μπορούν να δυσκολέψουν την λύση ενός αντίστροφου προβλήματος είναι ότι τα δεδομένα μας μπορεί να είναι συμβατά με διαφορετικές τιμές των παραμέτρων του συστήματος που έχουμε προς διερεύνηση, και ότι πολλές φορές μπορεί να απαιτούνται πειραματικά δεδομένα μεγάλου εύρους τιμών για τον υπολογισμό των παραμέτρων του συστήματος.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Εξισώσεις Fredholm Α' Είδους

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζονται οι ιδιότητες των ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm Α' Είδους και εισάγεται το ανάπτυγμα SVE (Singular Value Evaluation – Εκτίμηση Ιδιαζουσών Τιμών), το οποίο αποτελεί ένα ισχυρό εργαλείο για την κατανόηση της εξίσωσης Fredholm Α' Είδους και κάποιων γενικών χαρακτηριστικών των αντίστροφων προβλημάτων.

2.1 Εξίσωση Fredholm Α' Είδους – Λήμμα Lebesgue [1]

Η εξίσωση Fredholm Α' Είδους έχει την μορφή

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

όπου $K(s, t)$ ο πυρήνας της ολοκληρωτικής εξίσωσης που περιγράφει την σχέση ανάμεσα στο f και το g . Ολοκληρωτικές εξισώσεις τέτοιας μορφής προκύπτουν τακτικά στην φυσική και σε τεχνολογικές εφαρμογές. Στην περίπτωση που ο πυρήνας έχει την μορφή $K(s, t) = h(s - t)$, είναι δηλαδή συνάρτηση της διαφοράς $s - t$, η ολοκληρωτική εξίσωση χαρακτηρίζεται ως πρόβλημα αποσυνέλιξης. Όταν η εξίσωση Fredholm Α' Είδους προκύπτει σε αντίστροφα προβλήματα, συνήθως ο πυρήνας K και η συνάρτηση $g(s)$ είναι γνωστά, ενώ το f άγνωστο. Ας δούμε τώρα ένα λήμμα (λήμμα Riemann-Lebesgue [1]) το οποίο θα μας βοηθήσει στην κατανόηση μίας πολύ σημαντικής ιδιότητας της παραπάνω εξίσωσης.

Λήμμα Riemann-Lebesgue : Έστω η συνάρτηση $f_p(t) = \sin(2\pi pt)$, $p = 1, 2, \dots$
Τότε για τυχαίο πυρήνα $K(s, t)$ ισχύει

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

Είναι γνωστό ότι κάθε συνάρτηση μπορεί να αναλυθεί σε σειρά Fourier περιοδικών συναρτήσεων διαφόρων συχνοτήτων, οι οποίες αποτελούν ορθοκανονική βάση. Οπότε και η συνάρτηση f της εξίσωσης Fredholm Α' Είδους μπορεί να αναλυθεί σε ένα άπειρο άθροισμα των συναρτήσεων f_p , $p = 1, 2, \dots$.

Σύμφωνα με το λήμμα Riemann-Lebesgue τα στοιχεία της f με μεγάλη συχνότητα ελαττώνουν περισσότερο την συνεισφορά τους κατά την απεικόνιση από το f στο g , σε σχέση με τα άλλα στοιχεία μικρότερης συχνότητας. Με άλλα λόγια η συνεισφορά ενός στοιχείου g_p μεγάλης συχνότητας p στο g είναι μικρότερη απ' ότι του αντίστοιχου f_p στην f . Επομένως η καμπύλη της συνάρτησης g είναι πιο ομαλή από την καμπύλη της f . Οπότε, συμπεραίνουμε ότι η δράση του πυρήνα $K(s, t)$ πάνω στην f τείνει να την ομαλοποιήσει κατά την απεικόνιση από την f στην g , έτσι ώστε η g να είναι πιο ομαλή από την f .

Με βάση τα παραπάνω είμαστε πλέον σε θέση να καταλάβουμε μια σοβαρή δυσκολία κατά την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων Fredholm Α' Είδους. Στο αντίστροφο πρόβλημα εν αντιθέσει με το ευθύ που πηγαίνουμε από το f (γνωστό) στο g (άγνωστο), ακολουθούμε την αντίθετη πορεία, πάμε από το g (γνωστό) στο f (άγνωστο) που ισοδυναμεί με ενίσχυση των στοιχείων της g με μεγάλη συχνότητα στην αντίστροφη απεικόνιση $g \xrightarrow{K^{-1}} f$.

Επομένως η παραμικρή διαταραχή μεγάλης συχνότητας δg_p του στοιχείου g_p της g , όσο μικρή και να είναι, προκαλεί μεγάλη διαταραχή στο στοιχείο f_p της f και κατά συνέπεια στην f . Όσο μεγαλύτερη είναι η συχνότητα p τόσο μεγαλύτερη είναι και η διαταραχή στην f . Έτσι εξηγείται η παραβίαση του τρίτου κανόνα Hadamard για την ευστάθεια της λύσης, που είναι εγγενές χαρακτηριστικό των αντιστρόφων προβλημάτων.

2.2 Εκτίμηση Ιδιαζουσών Τιμών (Singular Value Evaluation) [1]

Αν ο πυρήνας της εξίσωσης Fredholm Α' Είδους είναι συνεχής και τετραγωνικά ολοκληρώσιμος ($\int_0^1 \int_0^1 K(s,t)^2 ds dt < \infty$) μπορεί να αναλυθεί στο παρακάτω άθροισμα:

$$K(s,t) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i u_i(s) v_i(t). \quad (2.2)$$

Οι συναρτήσεις $u_i(s)$ και $v_i(t)$ ονομάζονται αριστερές και δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις αντίστοιχα. Όσο μεγαλύτερο είναι το i τόσο περισσότερες φορές οι συναρτήσεις $u_i(s)$ και $v_i(t)$ διασχίζουν τους άξονες s και t αντίστοιχα. Για αυτό το λόγο αναφέρουμε τον δείκτη i σαν συχνότητα. Τα σύνολα $\{u_i(s)\}_{i=1}^{\infty}$ και $\{v_i(t)\}_{i=1}^{\infty}$ αποτελούν σύνολα ορθογώνιων συναρτήσεων στις οποίες μπορούν να αναλυθούν οι συναρτήσεις f και g και ισχύει ότι

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.3)$$

Οι αριθμοί μ_i ονομάζονται ιδιάζουσες τιμές και ισχύει ότι

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3 \geq \dots \geq \mu_n \geq \dots \geq 0. \quad (2.4)$$

Αν το σύνολο των ιδιάζουσών τιμών που είναι $\mu_i \neq 0$ είναι πεπερασμένο τότε ο πυρήνας $K(s,t)$ ονομάζεται εκφυλισμένος. Οι αριστερές και οι δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις συνδέονται μέσω της θεμελιώδους εξίσωσης.

$$\int_0^1 K(s,t) v_i(t) dt = \mu_i u_i(s). \quad (2.5)$$

Όσο μεγαλύτερο είναι το i τόσο μικρότερη είναι η αντίστοιχη ιδιάζουσα τιμή μ_i , επομένως όσο μεγαλύτερο είναι το i τόσο περισσότερο φιλτράρεται η $u_i(t)$. Παρατηρώντας ότι $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3 \geq \dots \geq \mu_n \geq \dots \geq 0$ συνεπάγεται ότι

$$\int_0^1 K(s,t) v_i(t) dt = \mu_i u_i(s) \xrightarrow{i \rightarrow \infty} 0. \quad (2.6)$$

Δηλαδή καταλήγουμε στο ίδιο συμπέρασμα με το λήμμα Riemann-Lebesgue, χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα SVE αυτή τη φορά για να εξηγήσουμε το φιλτράρισμα που επιφέρει ο πυρήνας $K(s, t)$.

Ως προς την αντιστοιχία ιδιαιζουσών τιμών μ_i και των ιδιαιζουσών συναρτήσεων $u_i(s)$ και $v_i(t)$ ισχύει ότι:

- Αν το μ_i είναι διαφορετικό από τους γείτονες του τότε μπορούμε να αντικαταστήσουμε το u_i με $-u_i$ και το v_i με $-v_i$, διότι

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

Παρ' όλα αυτά είναι σαν να υπάρχει "1-1" αντιστοιχία ανάμεσα στις ιδιαιζουσες τιμές και τις ιδιαιζουσες συναρτήσεις.

- Αν το μ_i έχει πολλαπλότητα μεγαλύτερη του ενός, $\mu_{i-1} > \mu_i = \dots = \mu_{i+n} > \mu_{i+n+1}$, τότε δεν υπάρχει αντιστοιχία ένα προς ένα ανάμεσα στις ιδιαιζουσες τιμές μ_κ και τις αντίστοιχες v_κ και u_κ για $\kappa = i, i+1, \dots, i+n$, όμως το $\text{span}\{u_i, \dots, u_{i+n}\}$ και το $\text{span}\{v_i, \dots, v_{i+n}\}$ είναι μοναδικά. Για παράδειγμα αν $\mu_1 = \mu_2$ τότε ισχύει

$$\int_0^1 K(s, t)v_1(t)dt = \mu_1 u_1(s) = \mu_2 u_1(s)$$

ή

$$\int_0^1 K(s, t)v_2(t)dt = \mu_1 u_2(s) = \mu_2 u_2(s)$$

ή πιο γενικά

$$\int_0^1 K(s, t)(av_1(t) + bv_2(t))dt = \mu_1(au_1(s) + bu_2(s)).$$

Αν αναπτύξουμε τις συναρτήσεις f και g με την βοήθεια των v_i και u_i

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i | f \rangle v_i(t) \quad (2.7)$$

$$g(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i | g \rangle u_i(s) \quad (2.8)$$

και στην συνέχεια αντικαταστήσουμε στην εξίσωση Fredholm A' Είδους (2.1), χρησιμοποιώντας την θεμελιώδη εξίσωση (2.6) έχουμε ότι

$$\int_0^1 K(s, t)f(t)dt = g(s) \quad \Rightarrow$$

$$\int_0^1 K(s, t) \left(\sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i | f \rangle v_i(t) \right) dt = \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i | g \rangle u_i(s) \Rightarrow$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i | f \rangle \int_0^1 K(s, t)v_i(t)dt = \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i | g \rangle u_i(s) \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i | f \rangle \mu_i u_i(s) &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i | g \rangle u_i(s) && \xrightarrow{\mu_i \neq 0} \\
\mu_i \langle v_i | f \rangle &= \langle u_i | g \rangle && \Rightarrow \\
\langle v_i | f \rangle &= \frac{\langle u_i | g \rangle}{\mu_i} && (2.9)
\end{aligned}$$

Οπότε η $f(t)$ μπορεί να γραφεί ως

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i | f \rangle v_i(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\langle u_i | g \rangle}{\mu_i} v_i(t) \quad (2.10)$$

υποθέτοντας ότι $\mu_i \neq 0 \forall i \in \mathbb{N}$.

Σε πολλά φυσικά προβλήματα τα μεγέθη $\mathcal{L} \propto \langle x | x \rangle$ έχουν φυσική σημασία (υποθέτουμε ότι $x = x(t)$ είναι η λύση του φυσικού προβλήματος). Άρα θα πρέπει να υπάρχει το ολοκλήρωμα $\int x(\vec{t})^2 d\vec{t} = \langle x | x \rangle$ για να έχει κάποιο νόημα ο υπολογισμός του μεγέθους \mathcal{L} . Για να υπάρχει το παραπάνω ολοκλήρωμα η λύση x πρέπει να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη. Για παράδειγμα στην Ηλεκτροστατική αν \vec{E} (ηλεκτρικό πεδίο) είναι η λύση της εξίσωσης Gauss τότε η ενέργεια που είναι αποθηκευμένη στο ηλεκτρικό πεδίο είναι $W \propto \langle E | E \rangle$. Άρα δεν έχει νόημα να αναζητάμε λύση που δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη. Αν μπορούμε να βρούμε λύση στο πρόβλημα τότε αυτή θα είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη. Όλα τα παραπάνω συνοψίζονται στην συνθήκη του Picard.

2.3 Συνθήκη Picard

Η λύση είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη αν

$$\|f\|_2^2 = \int_0^1 f(t)^2 dt = \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i | f \rangle^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{\langle u_i | g \rangle}{\mu_i} \right)^2 < \infty. \quad (2.11)$$

Για να συγκλίνει η σειρά της συνθήκης Picard πρέπει οι σταθερές $\langle u_i | g \rangle$ να μειώνονται με πιο γρήγορο ρυθμό απ'ότι οι ιδιάζουσες τιμές μ_i . Η συνθήκη Picard συνήθως ικανοποιείται από δεδομένα καθαρά από θόρυβο, συνήθως όμως τα δεδομένα που παίρνουμε έχουν πάντα θόρυβο με συνέπεια η συνθήκη Picard να μην ικανοποιείται ακόμα και αν τα φιλτραρισμένα δεδομένα την ικανοποιούν. Στην τελευταία περίπτωση οι σταθερές $\langle u_i | g \rangle$ από ένα σημείο και έπειτα σταθεροποιούνται στο επίπεδο του θορύβου, έτσι ο λόγος $\langle u_i | g \rangle / \mu_i$ αρχίζει να αυξάνεται λόγω της συνεχούς μείωσης των ιδιάζουσών τιμών μ_i , επομένως η σειρά $\sum_{i=1}^{\infty} (\langle u_i | g \rangle / \mu_i)^2$ αυξάνεται πάρα πολύ και τιμή του $\|f\|_2^2$ γίνεται τόσο μεγάλη που πρακτικά καθιστά άχρηστη την λύση.

Η παραβίαση της συνθήκης Picard είναι η απλούστερη εξήγηση γιατί τα αντίστροφα προβλήματα δεν έχουν ευστάθεια λύσης.

2.4 Μη Μοναδικότητα της λύσης στα Αντίστροφα Προβλήματα

Όπως έχει αναφερθεί και πιο πριν κάποια αντίστροφα προβλήματα παραβιάζουν τον δεύτερο κανόνα του Hadamard, και δεν έχουν μοναδική λύση. Υπάρχουν δύο είδη παραβίασης της μοναδικότητας (ambiguity) :

α) Μη τετριμμένος πυρήνας (null space ambiguity)

Στην παραβίαση μοναδικότητας αυτού του είδους υπάρχουν συναρτήσεις $f_{null} \neq 0$ τέτοιες ώστε

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

Οι συναρτήσεις f_{null} αναφέρονται ως μηδενιστές (annihilators) και το σύνολο των γραμμικών συνδυασμών τους ως τετριμμένος χώρος (null space). Από την θεμελιώδη εξίσωση (2.6) ($\int_0^1 K(s,t)v_i(t)dt = \mu_i u_i(s)$) καταλαβαίνουμε ότι ο τετριμμένος χώρος αποτελείται από κάθε γραμμικό συνδυασμό των αριστερών ιδιάζουσών συναρτήσεων $v_i(t)$ που αντιστοιχούν στις ιδιάζουσες τιμές $\mu_i = 0$. Αφού περισσότερα του ενός μ_i έχουν την ίδια τιμή (μηδέν) τότε ο πυρήνας $K(s,t)$ είναι εκφυλισμένος. Οι μηδενιστές εμφανίζονται σε πολλές εφαρμογές της γεωφυσικής, της ακουστικής και του ηλεκτρομαγνητισμού, όπου μέσα από την διακριτοποίηση των προβλημάτων προσπαθούμε να τους εντοπίσουμε και να τους υπολογίσουμε ώστε να περιορίσουμε την συνεισφορά τους στην λύση.

β) Πρόβλημα με την διατύπωση (Formulation Ambiguity)

Αυτού του είδους την παραβίαση μοναδικότητας παρουσιάζεται όταν δύο διαφορετικές ολοκληρωτικές εξισώσεις, με διαφορετικούς πυρήνες οδηγούν στο ίδιο αποτέλεσμα (ίδιο $g(s)$). Για παράδειγμα, από την Ηλεκτροστατική γνωρίζουμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο σε ένα σημείο στο εξωτερικό μιας ομοιόμορφα φορτισμένης σφαίρας είναι ίδιο με το πεδίο που δημιουργεί ένα σημειακό φορτίο με φορτίο ίσο με αυτό της ομοιόμορφα φορτισμένης σφαίρας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Διακριτοποίηση Αντίστροφων Προβλημάτων

Για την επίλυση προβλημάτων κάνουμε χρήση ενός ηλεκτρονικού υπολογιστή. Ο ηλεκτρονικός υπολογιστής μας δεν είναι σε θέση να λύσει ένα συνεχές πρόβλημα, όπως την εξίσωση Fredholm Α' Είδους. Η μόνη δυνατότητα που έχουμε με την χρήση υπολογιστή είναι να λύνουμε συστήματα μεγάλων διαστάσεων. Επομένως για να λύσουμε την Εξίσωση Fredholm Α' Είδους ως προς $f(t)$ (συνεχές αντίστροφο πρόβλημα), θα πρέπει να το αντικαταστήσουμε με ένα σύστημα $Ax = b$ με άγνωστο το x (διακριτό αντίστροφο πρόβλημα). Είναι προφανές ότι με την διακριτοποίηση γίνεται μια προσέγγιση της συνεχούς περίπτωσης, και αναπόφευκτα αυτό εισάγει σφάλματα, τα οποία πρέπει να ελεγχθούν έτσι ώστε να έχουμε όσο το δυνατόν καλύτερη προσέγγιση, και κατ' επέκταση καλύτερη λύση. Αυτά είναι και τα θέματα που θα μας απασχολήσουν σε αυτό το κεφάλαιο. Οι μέθοδοι διακριτοποίησης των αντίστροφων προβλημάτων Fredholm Α' Είδους διακρίνονται σε δύο κατηγορίες. Στις Μεθόδους Αριθμητικής Ολοκλήρωσης και στις Μεθόδους Αναπτύγματος.

3.1 Μέθοδοι Αριθμητικής Ολοκλήρωσης ([1],[5])

Η διακριτοποίηση βασίζεται στον γενικό κανόνα προσέγγισης του ολοκληρώματος

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

όπου φ η συνάρτηση που έχουμε για ολοκλήρωση, t_j , $j = 1, 2, \dots, n$ επιλεγμένα σημεία από μηδέν έως ένα, ω_j το βάρος της συνεισφοράς του κάθε σημείου στην προσέγγιση του ολοκληρώματος και E_n το σφάλμα της προσέγγισης λόγω διακριτοποίησης. Με τον κανόνα της μέσης τιμής για παράδειγμα έχουμε

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

Πρέπει να σημειωθεί ότι με τις ολοκληρωτικές μεθόδους υπολογίζουμε προσεγγίσεις $\tilde{f}_j = \tilde{f}(t_j)$ της λύσης f στα επιλεγμένα σημεία t_j , $j = 1, 2, \dots, n$ του πεδίου ορισμού της f . Βάσει του παραπάνω κανόνα προσέγγισης του ολοκληρώματος το ολοκλήρωμα

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

προσεγγίζεται από το παρακάτω άθροισμα

$$\psi(s) = \int_0^1 K(s, t) f(t) dt = \sum_{j=1}^{\infty} \omega_j K(s, t_j) f(t_j) + E_n(s). \quad (3.3)$$

Στην συνέχεια απαιτούμε

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

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

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

Αντικαθιστώντας τις πραγματικές τιμές της συνάρτησης f στα σημεία t_j , $j = 1, 2, \dots, n$ με τις αντίστοιχες προσεγγιστικές \tilde{f}_j και αμελώντας το σφάλμα $E_n(s)$ καταλήγουμε στο σύστημα

$$\sum_{j=1}^{\infty} \omega_j K(s_i, t_j) \tilde{f}_j = g(s_i), \quad i = 1, 2, \dots, n \Leftrightarrow \quad (3.4)$$

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

που είναι ένα γραμμικό σύστημα $Ax = b$ με

$$\begin{cases} a_{ij} = \omega_j K(s_i, t_j) \\ x_j = \tilde{f}_j = \tilde{f}(t_j) \\ b_i = g(s_i) \end{cases} \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (3.5)$$

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

3.2 Μέθοδοι Αναπτύγματος ([1], [5])

Στις μεθόδους αναπτύγματος ζητούμενο είναι ο υπολογισμός μιας προσεγγιστικής λύσης $f(t)$ της μορφής

$$f^{(n)}(t) = \sum_{j=1}^n \zeta_j \varphi_j(t) \quad (3.6)$$

όπου $\varphi_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, n$ συναρτήσεις βάσης που επιλέγονται κατάλληλα ώστε να αποδίδουν κάποια γνωστά χαρακτηριστικά της λύσης (π.χ. μονοτονία).

Γενικά, γνωρίζουμε ότι κάθε συνάρτηση γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός συναρτήσεων που αποτελούν ορθοκανονική βάση. Επομένως μπορούμε να αναπτύξουμε τις συναρτήσεις f και g της εξίσωσης Fredholm σε άπειρα αθροίσματα των συναρτήσεων $\varphi_j(t)$ και $\psi_j(s)$, $j = 1, 2, \dots$ που αποτελούν βάσεις για τις συναρτήσεις f και g αντίστοιχα.

Άρα

$$f(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \zeta_j \varphi_j(t), \quad f \in \text{span}\{\varphi_1, \varphi_2, \dots\}$$

και

$$g(s) = \sum_{j=1}^{\infty} \xi_j \psi_j(s), \quad g \in \text{span}\{\psi_1, \psi_2, \dots\}.$$

Επομένως η f και g μπορούν να γραφούν σαν

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

και

$$g(s) = \sum_{j=1}^n \xi_j \psi_j(s) + \sum_{j=n+1}^{\infty} \xi_j \psi_j(s).$$

Θέτοντας

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

και

$$g^{(n)}(s) = \sum_{j=1}^n \xi_j \psi_j(s), \quad E_g(s) = \sum_{j=n+1}^{\infty} \xi_j \psi_j(s)$$

έχουμε ότι

$$f(t) = f^{(n)}(t) + E_f(t), \quad f^{(n)}(t) \in \text{span}\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$$

και

$$g(s) = g^{(n)}(s) + E_g(s), \quad g^{(n)}(s) \in \text{span}\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$$

οι οποίες μπορούν να θεωρηθούν προσεγγίσεις των συναρτήσεων f και g , ενώ $E_f(t)$ και $E_g(s)$ τα σφάλματα τους αντίστοιχα. Εδώ θα πρέπει να επισημανθεί ότι οι συναρτήσεις ψ_j , $j = 1, 2, \dots, n$ πρέπει να επιλέγονται έτσι ώστε να κρατάμε τις σημαντικότερες πληροφορίες από τα μετρήσιμα δεδομένα $g(s)$ (μια καλή επιλογή για αυτό τον σκοπό είναι να επιλέξουμε $\psi_j = \delta(s - s_j)$). Οι συναρτήσεις $\varphi_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, n$ είναι γνωστές, οπότε αυτό που μένει να υπολογίσουμε για να γνωρίζουμε την προσεγγιστική λύση $f^{(n)}(t)$ είναι οι συντελεστές ζ_j .

Αντικαθιστώντας την προσεγγιστική λύση $f^{(n)}(t)$ στο δεξί μέλος της εξίσωσης Fredholm έχουμε ότι

$$\theta(s) = \int_0^1 K(s, t) f^{(n)}(t) dt = \sum_{j=1}^n \zeta_j \int_0^1 K(s, t) \varphi_j(t) dt. \quad (3.7)$$

Με τον ίδιο τρόπο όπως με την f και την g μπορεί να θεωρηθεί ότι

$$\theta(s) = \theta^{(n)}(s) + E_\theta(s), \quad \theta^{(n)}(s) \in \text{span}\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$$

Στην συνέχεια απαιτούμε

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

Πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέλη με μια τυχαία συνάρτηση ψ_j , $j = 1, 2, \dots, n$ έχουμε ότι

$$\langle \psi_i | \theta(s) - g(s) \rangle = \langle \psi_i | E_\theta(s) - E_g(s) \rangle = 0 \quad (3.8)$$

διότι $E_\theta(s) - E_g(s) \in \text{span}\{\psi_{n+1}, \psi_{n+2}, \dots\}$ που είναι ορθογώνιο συμπλήρωμα του $\text{span}\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$ στο οποίο ανήκουν οι συναρτήσεις ψ_i . Επομένως το παραπάνω εσωτερικό γινόμενο είναι μηδέν. Αναλύοντας περαιτέρω έχουμε ότι

$$\begin{aligned}\langle \psi_i | \theta(s) - g(s) \rangle &= \langle \psi_i | E_\theta(s) - E_g(s) \rangle = 0 \Rightarrow \\ \langle \psi_i | \theta(s) - g(s) \rangle &= 0 \Rightarrow \\ \langle \psi_i | g(s) \rangle &= \langle \psi_i | \theta(s) \rangle \Rightarrow \\ \langle \psi_j | g(s) \rangle &= \left\langle \psi_i \left| \int_0^1 K(s, t) f^{(n)}(t) dt \right. \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_i \left| \sum_{j=1}^n \zeta_j \int_0^1 K(s, t) \varphi_j(t) dt \right. \right\rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \zeta_j \left\langle \psi_i \left| \int_0^1 K(s, t) \varphi_j(t) dt \right. \right\rangle \Rightarrow \\ \langle \psi_i | g(s) \rangle &= \sum_{j=1}^n \zeta_j \int_0^1 \int_0^1 \psi_i(s) K(s, t) \varphi_j(t) dt, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.9)\end{aligned}$$

το οποίο είναι ένα σύστημα $Ax = b$ με

$$\begin{cases} a_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \psi_i(s) K(s, t) \varphi_j(t) dt \\ x_j = \zeta_j \\ b_i = \langle \psi_i | g(s) \rangle = \int_0^1 \psi_i(s) g(s) ds \end{cases} \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.10)$$

Για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων που εμφανίζονται στους παράγοντες a_{ij} και b_i χρησιμοποιούμε μια από τις κλασσικές μεθόδους υπολογισμού ολοκληρωμάτων της Αριθμητικής Ανάλυσης. Η παραπάνω μέθοδος διακριτοποίησης αναφέρεται συχνά ως μέθοδος Galerkin. Επίσης έχουμε την δυνατότητα να διαλέξουμε την ίδια βάση για την f και την g .

Όπως είδαμε η κάθε μέθοδος έχει τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της. Οι ολοκληρωτικές μέθοδοι είναι πιο απλές στην εφαρμογή και την υλοποίηση τους. Το μόνο που χρειάζεται να γνωρίζουμε είναι οι τιμές της g και του πυρήνα K στα σημεία t_j , $j = 1, 2, \dots, n$. Παρ'όλα αυτά μας δίνουν προσεγγιστικές τιμές της

συνάρτησης f μόνο σε αυτά τα σημεία. Οι μέθοδοι αναπτύγματος μας δίνουν προσεγγιστικές τιμές της συνάρτησης f σε κάθε σημείο του $[0,1]$, αλλά είναι πιο δύσκολο να υλοποιηθούν και απαιτούν επιπλέον τον αριθμητική προσέγγιση των ολοκληρωμάτων που εμφανίζονται στα στοιχεία a_{ij} και b_i .

Επιλέγουμε ανάμεσα στις δύο μεθόδους ανάλογα με το τι δεδομένα έχουμε, τι ζητάμε να υπολογίσουμε και το κυριότερο, τι μπορεί να υπολογιστεί.

3.3 Υπολογισμός Ιδιαζουσών Τιμών (Singular Value Evaluation)[1]

Στο προηγούμενο κεφάλαιο αναλύσαμε την Εκτίμηση Ιδιαζουσών Τιμών (Singular Value Evaluation) για αντίστροφα προβλήματα μορφής Fredholm A' Είδους. Σε αυτό το εδάφιο θα αναλυθεί ο Υπολογισμός Ιδιαζουσών Τιμών (S.V.D), ένα ανάπτυγμα ανάλογο του S.V.E.. Για την ακρίβεια, αποτελεί προσέγγιση του S.V.E..

Στο διακριτοποιημένο πρόβλημα ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ που είναι το αντίστοιχο του τελεστή $\hat{K} = \int_{\alpha}^{\beta} dt K(s, t)$ του συνεχούς προβλήματος μπορεί να αναλυθεί σε ένα άθροισμα παρόμοιο με αυτό του πυρήνα $K(s, t)$. Ο πίνακας A μπορεί να γραφεί ως

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{j=1}^n u_j \sigma_j v_j^T, \quad (3.11)$$

όπου $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$, $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι ένας διαγώνιος πίνακας των ιδιαζουσών τιμών σ_i του πίνακα A , $U = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ο πίνακας των αριστερών ιδιαζουσών συναρτήσεων του A και $V = (v_1, v_2, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ο πίνακας των δεξιών ιδιαζουσών συναρτήσεων του A . Για τις προσεγγιστικές ιδιάζουσες τιμές σ_i ισχύει ότι $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$, όπως για τις ιδιάζουσες τιμές μ_i του αναπτύγματος SVE.

Το άθροισμα (3.12) είναι ο Υπολογισμός Ιδιαζουσών Τιμών (Singular Value Decomposition). Επίσης ισχύει

$$u_i^T u_i = v_i^T v_i = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n \quad (3.12)$$

$$\Leftrightarrow U^T U = V^T V = I.$$

Η ομοιότητα ανάμεσα στα αναπτύγματα SVE και SVD είναι προφανής. Με την βοήθεια του αναπτύγματος SVD (3.12) μπορούν να υπολογιστούν δύο νόρμες πινάκων που θα φανούν χρήσιμες παρακάτω. Αυτές είναι η νόρμα Frobenius του πίνακα A

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

και η νόρμα

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_1.$$

Αν ο αντίστροφος του πίνακα A υπάρχει τότε αυτός είναι ο $A^{-1} = V \Sigma^{-1} U^T$ με $\|A^{-1}\|_2 = 1/\sigma_n$, οπότε ο δείκτης κατάστασης του συστήματος είναι

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

Μια σημαντική σχέση ανάλογη της θεμελιώδους εξίσωσης (fundamental relation) της συνεχούς περίπτωσης είναι η

$$Av_i = \sigma_i u_i, \quad \|Av_i\|_2 = \sigma_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.13)$$

Αν $\det(A) \neq 0$ τότε

$$A^{-1}u_i = \sigma_i^{-1}v_i, \quad \|A^{-1}u_i\|_2 = \sigma_i^{-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.14)$$

Τώρα είμαστε σε θέση να βρούμε μια έκφραση για την λύση x του συστήματος. Σύμφωνα με τα παραπάνω μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} x &= VV^T x = V \begin{pmatrix} v_1^T x \\ v_2^T x \\ \vdots \\ v_n^T x \end{pmatrix} = V \begin{pmatrix} v_1^T x \\ v_2^T x \\ \vdots \\ v_n^T x \end{pmatrix} = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n) \begin{pmatrix} v_1^T x \\ v_2^T x \\ \vdots \\ v_n^T x \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^n v_i (v_i^T x) = \sum_{i=1}^n (v_i^T x) v_i. \end{aligned}$$

Με τον ίδιο τρόπο

$$\begin{aligned} b &= UU^T b = U \begin{pmatrix} u_1^T b \\ u_2^T b \\ \vdots \\ u_n^T b \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} u_1^T b \\ u_2^T b \\ \vdots \\ u_n^T b \end{pmatrix} = (u_1 \ u_2 \ \dots \ u_n) \begin{pmatrix} u_1^T b \\ u_2^T b \\ \vdots \\ u_n^T b \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^n u_i (u_i^T b) = \sum_{i=1}^n (u_i^T b) u_i. \end{aligned}$$

Από την εξίσωση $Ax = b$ και τις δύο παραπάνω εκφράσεις για το x και το b , χρησιμοποιώντας την θεμελιώδη εξίσωση για την διακριτή περίπτωση έχουμε

$$\begin{aligned} A \left(\sum_{i=1}^n (v_i^T x) v_i \right) &= \sum_{i=1}^n (u_i^T b) u_i \Rightarrow \\ \sum_{i=1}^n (v_i^T x) Av_i &= \sum_{i=1}^n (u_i^T b) u_i \Rightarrow \\ \sum_{i=1}^n (v_i^T x) \sigma_i u_i &= \sum_{i=1}^n (u_i^T b) u_i \Rightarrow \\ (v_i^T x) \sigma_i &= u_i^T b \stackrel{\sigma_i \neq 0}{\implies} v_i^T x = \frac{u_i^T b}{\sigma_i}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Στο ίδιο αποτέλεσμα θα καταλήγαμε και με αντικαταστάσεις στην εξίσωση $x = A^{-1}b$. Επομένως η λύση είναι

$$x = \sum_{i=1}^n (v_i^T x) v_i = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i. \quad (3.16)$$

Όπως το ανάπτυγμα SVE, το SVD έχει τα εξής χαρακτηριστικά :

- Αν σ_i διαφορετικό από τους “γείτονές” του τότε μπορούμε να αντικαταστήσουμε το u_i με $-u_i$ και το v_i με το $-v_i$, διότι

$$A(-v_i) = -Av_i = -\sigma_i u_i = \sigma_i (-u_i).$$

- Αν κάποια ιδιάζουσα τιμή σ_i παρουσιάζει πολλαπλότητα, δηλαδή αν $\sigma_i \geq \sigma_{i+1} = \dots = \sigma_{i+n} \geq \sigma_{i+n+1}$ τότε το $\text{span}\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ και το $\text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ είναι μοναδικά αλλά όχι και οι ιδιάζουσες συναρτήσεις που αντιστοιχούν σε κάθε σ_k , $k = i + 1, \dots, i + n$. Δεν υπάρχει “1-1” αντιστοιχία των ιδιάζουσών τιμών με τις αριστερές και δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις. Αν για παράδειγμα $\sigma_1 = \sigma_2$ τότε

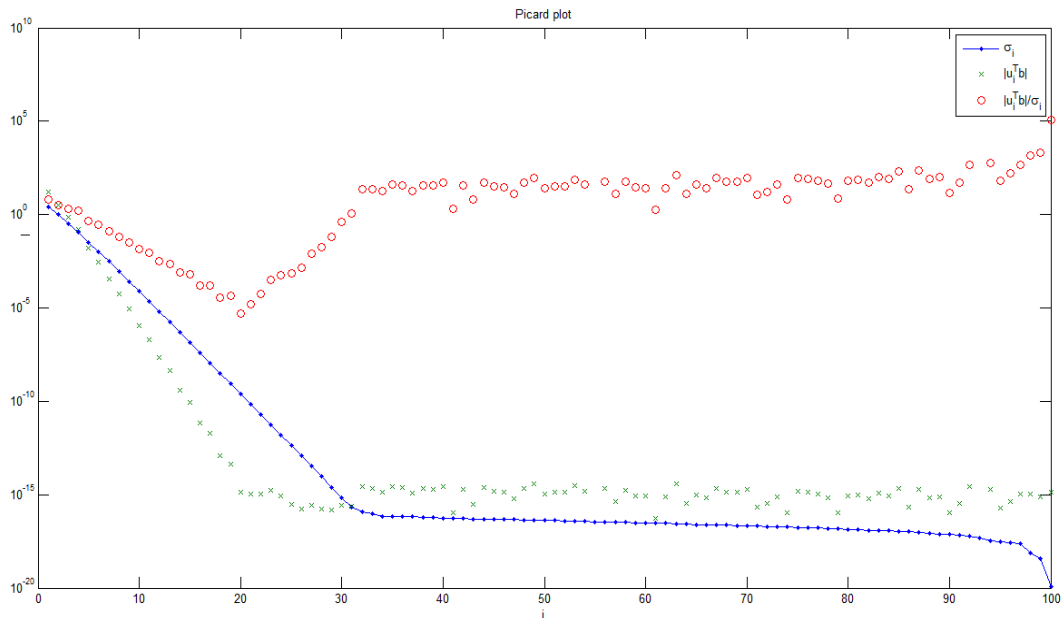
$$Av_1 = \sigma_1 u_1, \quad Av_2 = \sigma_2 u_1.$$

Όπως για την SVE διατυπώθηκε η συνθήκη Picard, με παρόμοιο τρόπο μπορεί να διατυπωθεί η συνθήκη Picard και για την διακριτή περίπτωση. Στην συνέχεια για ευκολία θεωρούμε ότι $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Τα ίδια συμπεράσματα ισχύουν και για $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

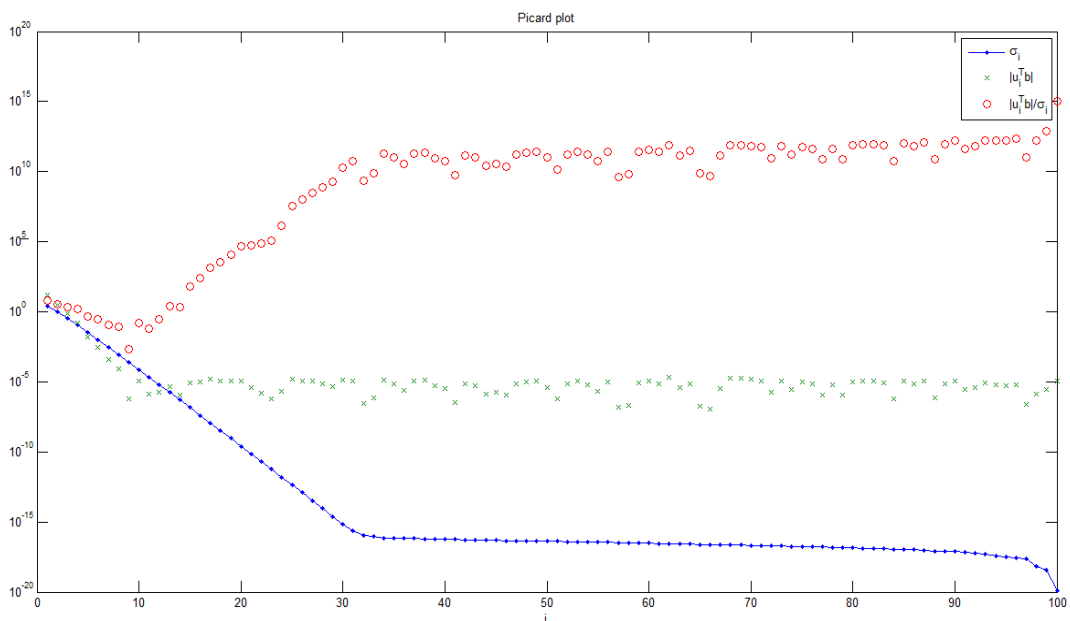
3.4 Συνθήκη Picard για Διακριτοποιημένα Προβλήματα [1]

Αν σχεδιάσουμε το διάγραμμα Picard $(i, [\sigma_i, |u_i^T b|, |u_i^T b| / \sigma_i])$ παρατηρούμε ότι υπάρχει μια τιμή τ για την οποία όλες οι ιδιάζουσες τιμές που είναι μεγαλύτερες από την τ σταθεροποιούνται στο επίπεδο του θορύβου, αν αυτό υπάρχει, ή σε περίπτωση που στα δεδομένα b δεν υπάρχει θόρυβος οι ιδιάζουσες τιμές που είναι μεγαλύτερες από τ σταθεροποιούνται στο επίπεδο της αριθμητικής ακρίβειας του υπολογιστή. Αν δεν λάβουμε υπόψη μας αυτές τις ιδιάζουσες τιμές, και τις σταθερές $|u_i^T b|$ που σταθεροποιούνται και αυτές στο επίπεδο του θορύβου, τότε, για να υπάρχει λύση για το διακριτό πρόβλημα πρέπει οι σταθερές $|u_i^T b|$ να φθίνουν πιο γρήγορα από τις ιδιάζουσες τιμές σ_i .

Στο Σχήμα 2.1 και Σχήμα 2.2 φαίνονται δύο ενδεικτικά διαγράμματα Picard για αυτές τις δύο περιπτώσεις. Το πρώτο για δεδομένα χωρίς θόρυβο και το δεύτερο για δεδομένα με θόρυβο.



Σχήμα 3.1 Διάγραμμα Picard για δεδομένα χωρίς θόρυβο ($b = b^{exact}$). Οι ιδιάζουσες τιμές σ_i και οι σταθερές SVD $|u_i^T b|$ σταθεροποιούνται από ένα σημείο και μετά λόγω της πεπερασμένης αριθμητικής ακρίβειας του υπολογιστή.



Σχήμα 3.2 Διάγραμμα Picard για δεδομένα με λευκό θόρυβο ($b = b^{exact} + e$). Οι ιδιάζουσες τιμές σ_i και οι σταθερές SVD $|u_i^T b|$ σταθεροποιούνται από ένα σημείο και μετά λόγω της πεπερασμένης αριθμητικής ακρίβειας του υπολογιστή.

Για ποιό λόγο στην συνθήκη Picard να μην λαμβάνονται υπόψη οι σταθερές $|u_i^T b|$ που αντιστοιχούν σε ιδιάζουσες τιμές $\sigma_i \simeq \tau$, και αυτές που σταθεροποιούνται στο επίπεδο του θόρυβου; Έστω ότι το σύστημα προς επίλυση είναι το

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

όπου e είναι λευκός θόρυβος, και $b^{exact} = Ax^{exact}$. Εφόσον ισχύει η συνθήκη Picard για διακριτοποιημένα προβλήματα τότε για τις σταθερές $u_i^T b$ ισχύει ότι

$$u_i^T b = u_i^T b^{exact} + u_i^T e \simeq \begin{cases} u_i^T b^{exact}, & \text{αν } |u_i^T b^{exact}| > |u_i^T e| \\ u_i^T e, & \text{αν } |u_i^T b^{exact}| < |u_i^T e| \end{cases} \quad (3.17)$$

Από το διάγραμμα Picard γίνεται αντιληπτό ότι οι σταθερές $|u_i^T e|$ αντιστοιχούν σε πολύ μικρές ιδιάζουσες τιμές $\sigma_i \simeq \tau$. Σε αυτές τις «αναξιόπιστες» σταθερές $u_i^T b$ η πραγματική πληροφορία $u_i^T b^{exact}$ χάνεται μέσα στον θόρυβο $|u_i^T e|$. Αυτός είναι και ο λόγος που τις αγνοούμε όταν θέλουμε να βγάλουμε συμπεράσματα για την λύση x (διακριτή συνθήκη Picard). Επομένως στα γραφήματα Picard εκτός από τα σ_i από ένα σημείο και μετά σταθεροποιούνται και οι σταθερές $u_i^T b$, όπως θα φανεί και από τις υπολογιστικές εφαρμογές. Για τον λόγο αυτό δεν λαμβάνονται υπόψη οι σταθερές SVD $u_i^T b \simeq u_i^T e$ στην εξακρίβωση της ισχύος της συνθήκης Picard.

Από τα παραπάνω εύκολα υπονιάζεται κανείς ότι το SVD δεν είναι τίποτα παραπάνω από μια προσέγγιση του αναπτύγματος SVE. Πόσο καλά όμως προσεγγίζονται τα μεγέθη του SVE από τα αντίστοιχα του SVD; Για να το δούμε αυτό ορίζουμε την ποσότητα Δ_n .

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

Με θεωρητικούς υπολογισμούς αποδεικνύεται ότι

$$0 \leq \mu_i - \sigma_i^{(n)} \leq \Delta_n, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.18)$$

όπου $\sigma_i^{(n)}$ οι ιδιάζουσες τιμές του πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, και

$$\sigma_i^{(n)} \leq \sigma_i^{(n+1)} \leq \mu_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.19)$$

Από τις δύο τελευταίες σχέσεις ότι το σφάλμα προσέγγισης της ιδιάζουσας τιμής μ_i από την $\sigma_i^{(n)}$ είναι άνω φραγμένο από την διαφορά Δ_n και ότι όσο μεγαλύτερη είναι η διάσταση του πίνακα A (που σημαίνει περισσότερα δεδομένα b_i) τόσο πιο καλά προσεγγίζουν οι ιδιάζουσες τιμές $\sigma_i^{(n)}$ του διακριτού προβλήματος τις ιδιάζουσες τιμές μ_i του συνεχούς προβλήματος. Ακόμη, μπορούμε να βρούμε προσεγγίσεις των αριστερών και δεξιών ιδιάζουσών συναρτήσεων του SVE :

$$u_j^{(n)} = \sum_{i=1}^n u_{ij} \psi_i(s), \quad v_j^{(n)} = \sum_{i=1}^n v_{ij} \varphi_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$u_j^{(n)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} u_j \quad \text{και} \quad v_j^{(n)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} v_j.$$

Με θεωρητικούς υπολογισμούς που δεν θα μας απασχολήσουν εδώ μπορούν να υπολογιστούν τα άνω φράγματα των $\|u_j^{(n)} - u_j\|_2$ και $\|v_j^{(n)} - v_j\|_2$ για $j = 1, 2, \dots, n$ τα οποία είναι πολύ πολύπλοκα για $i \geq 2$, παρόμοιας όμως μορφής με το άνω φράγμα για το $\|u_j^{(n)} - u_j\|_2$ και το $\|v_j^{(n)} - v_j\|_2$ που είναι

$$\max \left\{ \| u_j^{(n)} - u_j \|_2, \| v_j^{(n)} - v_j \|_2 \right\} \leq \left(\frac{2\Delta_n}{\mu_1 - \mu_2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.20)$$

Είναι αξιοσημείωτο ότι ο παρονομαστής του άνω φράγματος εξαρτάται μόνο από την διαφορά $\mu_1 - \mu_2$, το οποίο ισχύει και για τα άνω φράγματα των $\| u_j^{(n)} - u_j \|_2$, $\| v_j^{(n)} - v_j \|_2$ για $j = 2, \dots, n$. Τέλος με την βοήθεια των προσεγγιστικών δεξιών ιδιαιζουσών συναρτήσεων μπορούμε να υπολογίσουμε προσεγγίσεις του εσωτερικού γινομένου $\langle u_j | g(s) \rangle$ που εμφανίζεται στην συνθήκη Picard για το συνεχές πρόβλημα:

$$\begin{aligned} \langle u_j^{(n)} | g^{(n)}(s) \rangle &= \int_0^1 \sum_{i=1}^n u_{ij} \psi_i(s) \sum_{k=1}^n b_k \psi_k(s) ds \\ &= \sum_{i=1}^n u_{ij} \sum_{k=1}^n b_k \langle \psi_i(s) | \psi_k(s) \rangle = \sum_{i=1}^n u_{ij} b_i \\ &= u_j^T b. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι έχουμε την δυνατότητα χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα SVD να προσεγγίσουμε στοιχεία του SVE και να εξάγουμε συμπεράσματα για το συνεχές πρόβλημα (π.χ. μπορούμε να δούμε αν σε ένα συνεχές πρόβλημα ικανοποιείται η συνθήκη Picard εξετάζοντας αν ισχύει η διακριτή συνθήκη Picard για το διακριτό πρόβλημα).

3.5 Συμμετρίες του πίνακα A [1],[6]

Πολλές φορές τυχαίνει ο πυρήνας της συνεχούς περίπτωσης να έχει κάποια συμμετρία. Για μεγαλύτερη αξιοπιστία των αποτελεσμάτων μας θα πρέπει αυτή τη συμμετρία του πυρήνα να την μεταφέρουμε στον πίνακα του συστήματος της διακριτής περίπτωσης.

Ανάλογα με την συμμετρία που ικανοποιεί ο πυρήνας του συνεχούς προβλήματος, διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις συμμετρίας του πίνακα A του συστήματος του διακριτού προβλήματος:

- Ο πίνακας A είναι συμμετρικός

Σε αυτή την περίπτωση ισχύει ότι $A^T = A$. Οι συμμετρικοί πίνακες έχουν πραγματικές ιδιοτιμές και ορθογώνια ιδιοδιανύσματα.

$$\begin{aligned} AU &= U \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \Rightarrow \\ A &= U \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) U^T \end{aligned}$$

όπου U ο πίνακας των ιδιοδιανυσμάτων του πίνακα A. Από την Ανάλυση των Ιδιαιζουσών τιμών του πίνακα A έχουμε ότι

$$A = USV^T$$

και

$$\begin{aligned} A &= U \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) U^T \Leftrightarrow \\ A &= (u_1, u_2, \dots, u_n) \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) (u_1, u_2, \dots, u_n)^T \Leftrightarrow \end{aligned}$$

$$A = (u_1, u_2, \dots, u_n) \begin{pmatrix} \text{sign}(\lambda_1)|\lambda_1| & & \\ & \ddots & \\ & & \text{sign}(\lambda_n)|\lambda_n| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^T \\ u_2^T \\ \vdots \\ u_n^T \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$A = (u_1, \dots, u_n) \begin{pmatrix} \text{sign}(\lambda_1) & & \\ & \ddots & \\ & & \text{sign}(\lambda_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\lambda_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\lambda_n| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^T \\ u_2^T \\ \vdots \\ u_n^T \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$A = (u_1, \dots, u_n) \begin{pmatrix} |\lambda_1| & & \\ & |\lambda_1| & \\ & & \ddots \\ & & & |\lambda_n| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{sign}(\lambda_1)u_1^T \\ \text{sign}(\lambda_2)u_2^T \\ \vdots \\ \text{sign}(\lambda_n)u_n^T \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$A = (u_1, \dots, u_n) \begin{pmatrix} |\lambda_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\lambda_n| \end{pmatrix} (\text{sign}(\lambda_1)u_1, \dots, \text{sign}(\lambda_n)u_n)^T \Leftrightarrow$$

$$USV^T = (u_1, \dots, u_n) \begin{pmatrix} |\lambda_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\lambda_n| \end{pmatrix} (\text{sign}(\lambda_1)u_1, \dots, \text{sign}(\lambda_n)u_n)^T \Rightarrow$$

$$V = (\text{sign}(\lambda_1)u_1, \dots, \text{sign}(\lambda_n)u_n) \Leftrightarrow v_i = \text{sign}(\lambda_i)u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Από την παραπάνω ανάλυση προκύπτει ότι η συμμετρία του πίνακα A έχει σαν αποτέλεσμα μία ιδιότητα συμμετρίας των δεξιών και των αριστερών ιδιοζουσών συναρτήσεων. Για την ακρίβεια προκύπτει ότι οι αριστερές ιδιοζουσες συναρτήσεις είναι ακριβώς ίδιες με τις δεξιές με ενδεχομένως διαφορετικό πρόσημο.

- Ο πίνακας A είναι συμμετρικός ως προς την κύρια αντιδιαγώνιο (persymmetry).

Σε αυτή την περίπτωση ισχύει ότι

$$AJ = (AJ)^T \Leftrightarrow A = JA^T J \text{ όπου } J = \begin{pmatrix} & & 1 \\ & \ddots & \\ 1 & & \end{pmatrix}.$$

Επομένως με την ανάλυση ιδιοτιμών του πίνακα AJ ακολουθώντας την ίδια διαδικασία όπως παραπάνω έχουμε ότι

$$AJ = U\Gamma U^T \Leftrightarrow A = U\Gamma U^T J = U\Gamma(JU)^T \Rightarrow$$

$$A = (u_1 \dots u_n) \text{diag}(\gamma_1 \dots \gamma_n) (J(u_1 \dots u_n))^T \Leftrightarrow$$

$$A = (u_1 \dots u_n) \text{diag}(\gamma_1 \dots \gamma_n) (Ju_1 \dots Ju_n)^T \Leftrightarrow$$

$$A = (u_1 \dots u_n) \begin{pmatrix} \text{sign}(\gamma_1) & & \\ & \ddots & \\ & & \text{sign}(\gamma_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\gamma_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\gamma_n| \end{pmatrix} (Ju_1 \dots Ju_n)^T$$

$$\begin{aligned}
&= (u_1 \quad \dots \quad u_n) \begin{pmatrix} |\gamma_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\gamma_n| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{sign}(\gamma_1) & & \\ & \ddots & \\ & & \text{sign}(\gamma_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^T J \\ \vdots \\ u_n^T J \end{pmatrix} \\
&= (u_1 \quad \dots \quad u_n) \begin{pmatrix} |\gamma_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\gamma_n| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{sign}(\gamma_1) u_1^T J \\ \vdots \\ \text{sign}(\gamma_n) u_n^T J \end{pmatrix} \\
&= (u_1 \quad \dots \quad u_n) \begin{pmatrix} |\gamma_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\gamma_n| \end{pmatrix} (\text{sign}(\gamma_1) J u_1 \quad \dots \quad \text{sign}(\gamma_n) J u_n)^T \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$V = (\text{sign}(\gamma_1) J u_1 \quad \dots \quad \text{sign}(\gamma_n) J u_n) \Leftrightarrow v_i = \text{sign}(\gamma_i) J u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Από αυτή την εξίσωση βλέπουμε ότι οι δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις είναι ίδιες με τις αντίστοιχες αριστερές με τα στοιχεία του ενός διατεταγμένα ανάποδα ως προς το μεσαίο στοιχείο του άλλου, με ενδεχομένως διαφορετικά πρόσημα στα στοιχεία τους.

- Ο πίνακας A είναι συμμετρικός ως προς την κύρια διαγώνιο αντιδιαγώνιο.

Σε αυτή τη περίπτωση ισχύουν ταυτόχρονα:

$$\text{i) } v_i = \text{sign}(\lambda_i) u_i \Rightarrow u_i = \text{sign}(\lambda_i) v_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \text{ και}$$

$$\text{ii) } v_i = \text{sign}(\gamma_i) J u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

οπότε συνδυάζοντας και τις δύο έχουμε ότι

$$u_i = \text{sign}(\lambda_i) v_i = \text{sign}(\lambda_i) \text{sign}(\gamma_i) J u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Δηλαδή σε έναν πίνακα που είναι ταυτόχρονα συμμετρικός ως προς την κύρια διαγώνιο και την κύρια αντιδιαγώνιο οι δεξιές και αριστερές ιδιάζουσες συναρτήσεις είναι σχεδόν ίδιες, με την σειρά των στοιχείων να είναι συμμετρική ως προς το μεσαίο στοιχείο, με ενδεχομένως κάποιες διαφορές στα πρόσημα του κάθε στοιχείου.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Μέθοδοι Ομαλοποίησης

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε ότι ο δείκτης κατάστασης του πίνακα A είναι $cond(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \sigma_1/\sigma_n$. Επειδή το σ_n είναι πολύ μικρό ο δείκτης κατάστασης είναι πάρα πολύ μεγάλος. Από την θεωρία διαταραχών γνωρίζουμε ότι

$$\frac{\|x - x^{exact}\|_2}{\|x^{exact}\|_2} \leq cond(A) \frac{\|e\|_2}{\|b^{exact}\|_2}. \quad (4.1)$$

Δεδομένου του μεγάλου δείκτη κατάστασης του πίνακα A του διακριτοποιημένου αντίστροφου προβλήματος $Ax = b$ από την παραπάνω εξίσωση συμπεραίνουμε ότι το σχετικό σφάλμα προσέγγισης $\|x - x^{exact}\|_2 / \|x^{exact}\|_2$ είναι μεγάλο, και η λύση $x = A^{-1}b$ απέχει σημαντικά από την x^{exact} . Ακόμη μεγάλος δείκτης κατάστασης συνεπάγεται μικρή ευστάθεια (κάτι που χαρακτηρίζει όλα τα αντίστροφα προβλήματα), οπότε και η πιο μικρή διαταραχή του b^{exact} προκαλεί μεγάλη μεταβολή στη λύση x .

Για αυτό το λόγο καταφεύγουμε στις μεθόδους ομαλοποίησης, ώστε να πάρουμε μία «καλή λύση» που να είναι όσο πιο κοντά γίνεται στην x^{exact} και να είναι όσο πιο ευσταθής γίνεται. Υπάρχουν πολλές μέθοδοι ομαλοποίησης, και όλες σχεδόν δίνουν λύση της μορφής

$$x = \sum_{i=1}^n \varphi_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \quad (4.2)$$

όπου φ_i είναι οι παράγοντες φιλτραρίσματος της εκάστοτε μεθόδου ομαλοποίησης. Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιαστούν οι πιο ενδεικτικές από αυτές.

Αν κάποιος επιθυμεί να δει περισσότερα για τον δείκτη κατάστασης του πίνακα A και πώς μπορούμε να καταλήξουμε στην σχέση (4.1) μπορεί να κοιτάξει τους τίτλους [2],[4] και [6], που αναφέρονται στην βιβλιογραφία.

4.1 Truncated SVD ([1],[3])

Η μέθοδος του truncated SVD στηρίζεται στην απλή σκέψη να αφαιρέσουμε από την λύση $x = \sum_{i=1}^n u_i^T b / \sigma_i$ τους παράγοντες $u_i^T b$ η συνεισφορά των οποίων αυξάνουν δραματικά την νόρμα της λύσης $\|x\|_2$. Κρατάμε δηλαδή τους όρους της x που περιέχουν ακριβείς πληροφορίες της λύσης x^{exact} (κυρίως τους όρους που αντιστοιχούν σε μεγάλες ιδιάζουσες τιμές σ_i) του αδιατάραχτου διαφοροποιημένου προβλήματος διότι όπως αναφέρθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο για τις σταθερές SVD που αντιστοιχούν σε μεγάλες ιδιάζουσες τιμές σ_i ισχύει $u_i^T b \approx u_i^T b_{exact}$, αν $|u_i^T b_{exact}| > |u_i^T e|$. Οπότε καταλήγουμε σε μια λύση της μορφής

$$x_k = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (4.3)$$

που περιέχει μόνο τους όρους SVD του x που περιέχουν ακριβείς πληροφορίες. Την λύση x_k μπορούμε επίσης να την πάρουμε αντικαθιστώντας το πρόβλημα $Ax = b$ αν $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ή το πρόβλημα $\min_x \|Ax - b\|_2$ αν $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, m > n$, με το πρόβλημα $\min_x \|A_k x - b\|_2, A_k \in \mathbb{R}^{k \times n}, k < n$, όπου

$$A_k = (u_1 \dots u_k) \text{diag}(\sigma_1 \dots \sigma_k) (v_1 \dots v_k)^T \Leftrightarrow$$

$$A_k = \sum_{i=1}^k u_i \sigma_i v_i^T.$$

Αυτό το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων έχει άπειρες λύσεις της μορφής

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

Για να έχει το πρόβλημα μοναδική λύση θα πρέπει να βάλουμε έναν περιορισμό. Ένας περιορισμός είναι η νόρμα της λύσης να είναι η μικρότερη δυνατή. Επομένως το πρόβλημα

$$\begin{cases} \min_x \|Ax - b\|_2 \\ \|x\|_2 = \min \end{cases}$$

έχει μοναδική λύση. Απλά σκεπτόμενοι, για να ελαχιστοποιήσουμε την νόρμα της λύσης μπορούμε να αφαιρέσουμε από την γενική λύση το άθροισμα $\sum_{i=k+1}^n \zeta_i v_i$. Επομένως η μοναδική λύση που αναζητάμε είναι η

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

Πως όμως είμαστε σίγουροι ότι η λύση αυτή είναι πιο ευσταθής από την $x = A^{-1}b$; Επειδή $\sigma_n < \sigma_k$ έπεται ότι

$$\text{cond}(A_k) = \frac{\sigma_1}{\sigma_k} < \frac{\sigma_1}{\sigma_n} = \text{cond}(A) \quad (4.4)$$

που σημαίνει ότι η x_k είναι πιο ευσταθής από την x . Ακόμη, επειδή $b = b^{\text{exact}} + e$, η μέση τιμή του διανύσματος b είναι

$$\mathcal{E}(b) = \mathcal{E}(b^{\text{exact}} + e) = \mathcal{E}(b^{\text{exact}}) + \mathcal{E}(e) = b^{\text{exact}} + \mathcal{E}(e).$$

Υποθέτουμε ότι η διαταραχή e είναι λευκός θόρυβος (ακολουθεί την κατανομή Gauss με μέση τιμή $\mathcal{E}(e_i) = 0$ και τυπική απόκλιση $\mathcal{E}(e_i^2) = \eta^2$) που έχει το πλεονέκτημα ότι είναι απλός και ότι κάθε είδος θορύβου μπορεί με κατάλληλους μετασχηματισμούς να αναχθεί σε λευκό θόρυβο. Άρα $\mathcal{E}(e) = 0$. Επομένως

$$\mathcal{E}(b) = b^{\text{exact}}. \quad (4.5)$$

Ακόμη

$$\begin{aligned} \text{Cov}(b) &= \mathcal{E} \left((b - \mathcal{E}(b))(b - \mathcal{E}(b))^T \right) = \mathcal{E} \left((b - b^{\text{exact}})(b - b^{\text{exact}})^T \right) \\ &= \mathcal{E}(ee^T) = \begin{pmatrix} \mathcal{E}(e_1^2) & \mathcal{E}(e_1 e_2) & \dots & \mathcal{E}(e_1 e_n) \\ \mathcal{E}(e_2 e_1) & \mathcal{E}(e_2^2) & \dots & \mathcal{E}(e_2 e_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{E}(e_n e_1) & \mathcal{E}(e_n e_2) & \dots & \mathcal{E}(e_n^2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} \eta^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \eta^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \eta^2 \end{pmatrix} = \eta^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \eta^2 I. \quad (4.6)$$

Από τους παραπάνω υπολογισμούς συμπεραίνουμε ότι το b ακολουθεί και αυτό την κατανομή Gauss με μέση τιμή b^{exact} και τυπική απόκλιση η^2 . Για την τυπική λύση $x = A^{-1}b$ του προβλήματος ισχύει ότι

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

Χρησιμοποιώντας την γνωστή από την στατιστική σχέση

$$Cov(Ax + a) = ACov(X)A^T \quad (4.7)$$

όπου A και X πίνακες και a διάνυσμα, προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} Cov(x) &= Cov(x^{exact} + A^{-1}e) = Cov(x^{exact}) + Cov(A^{-1}e) \Rightarrow \\ Cov(x) &= 0 + Cov(A^{-1}e) = Cov(A^{-1}e) = A^{-1}Cov(e)(A^{-1})^T. \end{aligned}$$

Ο αντίστροφος του A είναι

$$A^{-1} = \left(\sum_{i=1}^n u_i \sigma_i v_i^T \right)^{-1} = \sum_{i=1}^n (u_i \sigma_i v_i^T)^{-1} = \sum_{i=1}^n (v_i)^{-T} \sigma_i^{-1} (u_i)^{-1}.$$

Από τις σχέσεις ορθογωνιότητας των αριστερών και των δεξιών ιδιαιζουσών συναρτήσεων έχουμε ότι

$$\begin{cases} u_i^T u_i = 1 \\ v_i^T v_i = 1 \end{cases}, \text{ ενώ από τον ορισμό του αντίστροφου πίνακα } \begin{cases} u_i^{-1} u_i = 1 \\ v_i^{-1} v_i = 1 \end{cases}.$$

Για να ισχύουν ταυτόχρονα και οι δύο σχέσεις πρέπει $u_i^{-1} = u_i^T$ και $v_i^{-1} = v_i^T$.

Άρα

$$\begin{aligned} A^{-1} &= \sum_{i=1}^n (v_i^T)^{-1} \sigma_i^{-1} (u_i)^{-1} = \sum_{i=1}^n (v_i^{-1})^T \sigma_i^{-1} (u_i)^{-1} = \sum_{i=1}^n (v_i^T)^T \sigma_i^{-1} u_i^T \Rightarrow \\ A^{-1} &= \sum_{i=1}^n v_i \sigma_i^{-1} u_i^T. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Επομένως

$$A^{-T} = (A^{-1})^T = \left(\sum_{i=1}^n v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \right)^T = \sum_{i=1}^n u_i \sigma_i^{-1} v_i^T. \quad (4.9)$$

Άρα ο πίνακας Συμμεταβλητότητας του x γίνεται

$$Cov(x) = A^{-1}Cov(e)(A^{-1})^T = \left(\sum_{i=1}^n v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \right) \eta^2 I \left(\sum_{j=1}^n u_j \sigma_j^{-1} v_j^T \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \eta^2 \left(\sum_{i=1}^n v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \right) \left(\sum_{j=1}^n u_j \sigma_j^{-1} v_j^T \right) \\
&= \eta^2 \sum_{i,j=1}^n v_i \sigma_i^{-1} (u_i^T u_j) \sigma_j^{-1} v_j^T = \eta^2 \sum_{i,j=1}^n v_i \sigma_i^{-1} \delta_{ij} \sigma_j^{-1} v_j^T \\
&= \eta^2 \sum_{i,j=1}^n \sigma_i^{-2} v_i v_i^T \tag{4.10}
\end{aligned}$$

με

$$\|Cov(x)\|_2 = \eta^2 / \sigma_n^2. \tag{4.11}$$

Με τον ίδιο τρόπο υπολογίζουμε και τον πίνακα Συμμεταβλητότητας του x_k γνωρίζοντας ότι ο αντίστροφος του πίνακα A_k είναι

$$A_k^\dagger = \left(\sum_{i=1}^k u_i \sigma_i v_i^T \right)^{-1} = \sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T. \tag{4.12}$$

Άρα

$$\begin{aligned}
Cov(x_k) &= Cov(A_k^\dagger b) = A_k^\dagger Cov(b) (A_k^\dagger)^T \Rightarrow \\
Cov(x_k) &= \eta^2 \left(\sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \right) \eta^2 I \left(\sum_{j=1}^k v_j \sigma_j^{-1} u_j^T \right)^T \Rightarrow \\
Cov(x_k) &= \eta^2 \left(\sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \right) \eta^2 I \left(\sum_{j=1}^k u_j \sigma_j^{-1} v_j^T \right) \Rightarrow \\
Cov(x_k) &= \eta^2 \left(\sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T \right) \left(\sum_{j=1}^k u_j \sigma_j^{-1} v_j^T \right) \Rightarrow \\
Cov(x_k) &= \eta^2 \sum_{i,j=1}^k (v_i \sigma_i^{-1} u_i^T) (u_j \sigma_j^{-1} v_j^T) \tag{4.13}
\end{aligned}$$

που λόγω της ορθογωνιότητας των αριστερών ιδιοζουσών συναρτήσεων u_i γίνεται

$$\begin{aligned}
Cov(x_k) &= \eta^2 \sum_{i,j=1}^k v_i \sigma_i^{-1} u_i^T u_j \sigma_j^{-1} v_j^T = \eta^2 \sum_{i,j=1}^k v_i \sigma_i^{-1} \delta_{ij} \sigma_j^{-1} v_j^T \Rightarrow \\
Cov(x_k) &= \eta^2 \sum_{i=1}^k v_i \sigma_i^{-2} v_i^T = \eta^2 \sum_{i=1}^k \sigma_i^{-2} v_i v_i^T. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Η δεύτερη νόρμα του $Cov(x_k)$ είναι $\|Cov(x_k)\|_2 = \eta^2 / \sigma_k^2$ που είναι πάντα μικρότερη από την $\|Cov(x)\|_2 = \eta^2 / \sigma_n^2$ της $x = A^{-1}b$, διότι $\sigma_k < \sigma_n$. Επομένως ένα ακόμα πλεονέκτημα της x_k έναντι της x είναι η μικρότερη διασπορά που

εμφανίζει η πρώτη. Παρ'όλα αυτά η x_k παρουσιάζει στατιστική απόκλιση από την x^{exact} ενώ η x όχι, διότι ενώ για την x ισχύει

$$\mathcal{E}(x) = \mathcal{E}(A^{-1}b) = x^{exact},$$

για την x_k ισχύει

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(x_k) &= \sum_{i=1}^k (v_i^T x^{exact}) v_i = x^{exact} - \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i \\ &= x^{exact} - \sum_{i=k+1}^n \frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} v_i. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Επειδή ισχύει η διακριτή συνθήκη Picard στο αδιατάρακτο πρόβλημα (αλλιώς δεν θα υπήρχε νόημα να λύσουμε το πρόβλημα με τον θόρυβο) οι σταθερές $u_i^T b^{exact} v_i / \sigma_i$ για $i \geq k + 1$ είναι μικρότερες από αυτές για $i < k + 1$ οπότε

$$\left\| \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i \right\|_2 \ll \|x^{exact}\|_2. \quad (4.16)$$

Δηλαδή, παρόλο που η x_k παρουσιάζει στατιστική απόκλιση, το μικρό της μέγεθος σε συνδυασμό με την μικρή διασπορά της x_k την καθιστούν μια «καλή» λύση (πιο ευσταθής και με μικρότερο σχετικό σφάλμα απόκλισης).

4.2 Selective SVD [1]

Η μέθοδος Selective SVD είναι μια παραλλαγή της TSVD. Στην SSVD θέτουμε ένα όριο τ και φροντίζουμε στο άθροισμα της λύσης να υπάρχουν μόνο οι όροι του αθροίσματος $x = \sum_{i=1}^n (u_i^T b / \sigma_i) v_i$ για τους οποίους ισχύει $|u_i^T b| > \tau$. Αυτό ισοδυναμεί με το να θέσουμε στην γενική σχέση των μεθόδων κανονικοποίησης

$$x_\tau = \sum_{i=1}^n \varphi_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \quad \varphi_i = \begin{cases} 1, & |u_i^T b| > \tau \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}. \quad (4.17)$$

Είναι προφανές ότι το όριο τ πρέπει να επιλεγεί κατάλληλα ώστε οι όροι του αθροίσματος με σταθερές SVD $u_i^T b_{exact} \approx u_i^T e$ να μηδενίζονται. Υποθέτοντας ότι η διαταραχή είναι λευκός θόρυβος μπορούμε να επιλέξουμε το όριο να είναι

$$\tau = v_s \eta$$

όπου v_s είναι ένας συντελεστής ασφαλείας που μπορεί να πάρει τιμές ≥ 2 . Το ποιά τιμή θα επιλέξουμε για τον συντελεστή ασφαλείας εξαρτάται από το πόσο σίγουροι θέλουμε να νιώθουμε ότι δεν συμπεριλάβαμε στο άθροισμα όρους που κυριαρχούνται από τον θόρυβο.

Οι μέθοδοι TSVD και SSVD δίνουν σχεδόν τα ίδια αποτελέσματα με απόλυτο σφάλμα της ίδιας τάξης μεγέθους. Επίσης θετικό και για τις δύο μεθόδους είναι το γεγονός ότι μπορούμε να διαλέξουμε το κατάλληλο k ή τ κοιτώντας το διάγραμμα Picard της λύσης $x = A^{-1}b$ καθορίζοντας το σημείο που οι σταθερές SVD $u_i^T b / \sigma_i$ της λύσης αρχίζουν να αποκλίνουν. Σε μεγάλα υπολογιστικά προβλήματα είναι πολλές φορές ασύμφορος ο υπολογισμός του αναπτύγματος SVD της λύσης

$x = A^{-1}b$ ώστε να πάρουμε το διάγραμμα Picard για αυτή, που έχει σαν συνέπεια οι μέθοδοι SSVD και TSVD να είναι δύσκολο να εφαρμοστούν.

Από τα παραπάνω γίνεται αντιληπτό ότι υπάρχει ανάγκη για μια μέθοδο κανονικοποίησης που να μην απαιτεί πολλές πράξεις και να μπορεί να εφαρμοστεί εύκολα σε μεγάλα υπολογιστικά προβλήματα. Η μέθοδος που αναζητάμε είναι η μέθοδος του Tikhonov.

4.3 Μέθοδος Ομαλοποίησης Tikhonov ([1],[3],[5])

Η μέθοδος Tikhonov έχει σαν βάση την επίλυση ενός προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων με έναν περιορισμό, όπως και η μέθοδος TSVD που εξετάστηκε προηγουμένα, το οποίο είναι το

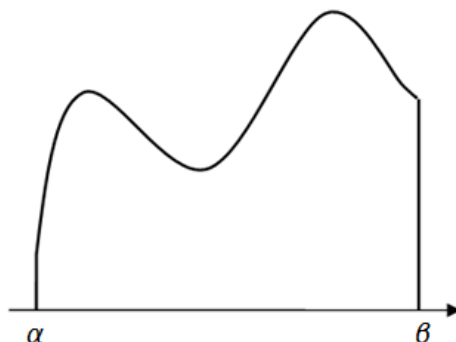
$$\begin{cases} \min_x \|Ax - b\|_2^2 \\ \|x\|_2^2 \leq \delta \end{cases} \quad (4.18)$$

Ο περιορισμός $\|x\|_2^2 \leq \delta$ σε αυτή την περίπτωση εισάγεται για την ομαλοποίηση της λύσης. Σε αυτό το σημείο εύλογα δημιουργείται το ερώτημα γιατί αυτός ο περιορισμός ομαλοποιεί την λύση.

Αυτό γίνεται εύκολα αντιληπτό αν κοιτάξουμε τον ορισμό της Ευκλείδειας νόρμας διανύσματος και με την γεωμετρική ερμηνεία του ολοκληρώματος. Γνωρίζουμε ότι

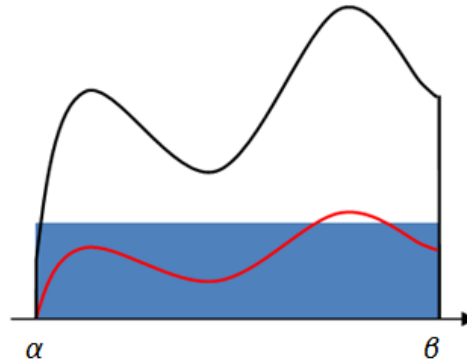
$$\|x\|_2^2 = \langle x|x \rangle = \int_a^b x^2 dx.$$

Το ολοκλήρωμα $\int_a^b x^2 dx$ είναι ίσο με το εμβαδόν της περιοχής ανάμεσα στην γραφική παράσταση της x^2 και των ευθειών $x = a$ και $x = b$. Υποθέτουμε ότι η γραφική παράσταση της x^2 είναι μια καμπύλη της μορφής που φαίνεται στο σχήμα 4.1.



Σχήμα 4.1 Χωρίο της συνάρτησης x^2 που σχηματίζεται ανάμεσα στα σημεία του a και b του οριζόντιου άξονα.

Έστω τώρα ότι θέλουμε $\int_a^b x^2 dx = \|x\|_2^2 \leq \delta^2$. Τότε για να μικρύνουμε το εμβαδόν του $\int_a^b x^2 dx$ ώστε να είναι μικρότερο ή ίσο του δ^2 (γαλάζια επιφάνεια) διατηρώντας παράλληλα την μορφή της καμπύλης x^2 θα πρέπει να κάνουμε την καμπύλη πιο λεία (κόκκινη γραμμή) όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 4.2 Χωρία που σχηματίζουν οι γραφικές παραστάσεις της x^2 (μαύρη γραμμή) και της ομαλοποιημένης x^2 (κόκκινη γραμμή) ανάμεσα στα σημεία του a και β του οριζόντιου άξονα. Το δ^2 είναι η γαλάζια περιοχή του γραφήματος και είναι η ανώτερη τιμή που θέλουμε να έχει η $\|x\|_2^2$ (το εμβαδό της ομαλοποιημένης x^2)

Ας επανέλθουμε στο αρχικό μας πρόβλημα

$$\begin{cases} \min_x \|Ax - b\|_2 \\ \|x\|_2^2 \leq \delta \end{cases}.$$

Από την θεωρία Βέλτιστου Ελέγχου είναι γνωστό ότι υπάρχει ένας πολλαπλασιαστικός παράγοντας γ τέτοιος ώστε ο περιορισμός $\|x\|_2 = \min$ να εισαχθεί μέσα στο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων. Δηλαδή υπάρχει γ τέτοιο ώστε

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

Με την παράγωγο ως προς x να είναι $A^T(Ax - b) + \gamma x$, απαιτώντας να είναι ίση με το μηδέν και θέτοντας $\gamma = \lambda^2$ καταλήγουμε στο ισοδύναμο πρόβλημα

$$\min_x \{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2 \}. \quad (4.19)$$

Η επίλυση αυτού του προβλήματος ονομάζεται μέθοδος Tikhonov.

Στην μέθοδο Tikhonov :

- Ο παράγοντας $\|Ax - b\|_2^2$ περιγράφει πόσο καλά προβλέπει η λύση x τα δεδομένα b (περιέχουν θόρυβο).
- Ο παράγοντας $\|x\|_2^2$ ομαλοποιεί την λύση.
- Ο παράγοντας λ ονομάζεται παράμετρος ομαλοποίησης των δεδομένων, και η επιλογή του καθορίζει αν θα δοθεί μεγαλύτερη βαρύτητα στην πρόβλεψη των δεδομένων από την λύση ή στην ομαλοποίηση της λύσης. Όσο μεγαλύτερο είναι το λ τόσο μεγαλύτερο βάρος δίνεται στην ομαλοποίηση της λύσης (στην μείωση

της ευκλείδειας νόρμας της). Είναι φανερό ότι στο όριο που $\lambda \rightarrow \infty$ το $x \rightarrow 0$, ενώ όταν $\lambda \rightarrow 0$, $x_\lambda \rightarrow A^{-1}b$.

Η λύση της μεθόδου Tikhonov μπορεί και αυτή να εκφραστεί με την βοήθεια του αναπτύγματος SVD αρκεί η μορφή $\min_x \{\|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2\}$ να αναχθεί με μαθηματικούς υπολογισμούς σε μια απλούστερη μορφή. Γνωρίζουμε ότι για δύο τυχαία διανύσματα y και z ισχύει ότι

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

Θέτοντας $y = Ax - b$ και $z = \lambda x$

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

Παρατηρώντας ότι το σύνολο $\mathcal{V} = \left\{ \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x : x \in \mathbb{R}^n \right\}$ είναι διανυσματικός υπόχωρος έχουμε ότι:

$$\begin{aligned} \min_x \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 &= \min \left\{ \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 : x \in \mathbb{R}^n \right\} &\Leftrightarrow \\ \min_x \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 &= \min \{ \|V - Y\|_2^2 : V \in \mathcal{V}, Y = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} \} \end{aligned}$$

και λαμβάνοντας υπόψη το θεώρημα της Γραμμικής Άλγεβρας ([2],[6]) που λέει ότι:

Αν \mathcal{V} διανυσματικός υπόχωρος του \mathbb{R}^n τότε για κάθε $X \in \mathcal{V}$ ισχύει $\|X - Y\|_2 \geq \|X - Proj_{\mathcal{V}}(X)\|_2$ με την ισότητα να ισχύει όταν $Y = Proj_{\mathcal{V}}(X)$.

τότε καταλήγουμε στην εξίσωση

$$Bx = Proj_{\mathcal{V}}(Y).$$

Αν x_0 είναι η λύση της $Bx = Proj_{\mathcal{V}}(Y)$, ισχύει

$$\begin{aligned} Y - Bx_0 &= Y - Proj_{\mathcal{V}}(Y) = Proj_{\mathcal{V}^\perp}(Y) \in \mathcal{V}^\perp \Rightarrow \\ \forall x \in \mathbb{R}^n, Bx \in \mathcal{V}, 0 &= (Bx) \cdot (Y - Bx_0) \Leftrightarrow \\ 0 &= (Bx)^T (Y - Bx_0) = x^T (B^T Y - B^T Bx_0) \Leftrightarrow \\ 0 &= x \cdot (B^T Y - B^T Bx_0), \end{aligned}$$

το οποίο για να αληθεύει για κάθε $x \in \mathbb{R}^n$ πρέπει

$$B^T Y - B^T Bx_0 = 0.$$

Αυτό συνεπάγεται ότι η x_0 είναι η λύση της εξίσωσης

$$(B^T B)x = B^T Y.$$

Αντικαθιστώντας $B = \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix}$ και $Y = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} x &= \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow (A^T A + \lambda^2 I)x = A^T b \Leftrightarrow \\ x_\lambda &= (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T b. \end{aligned} \tag{4.20}$$

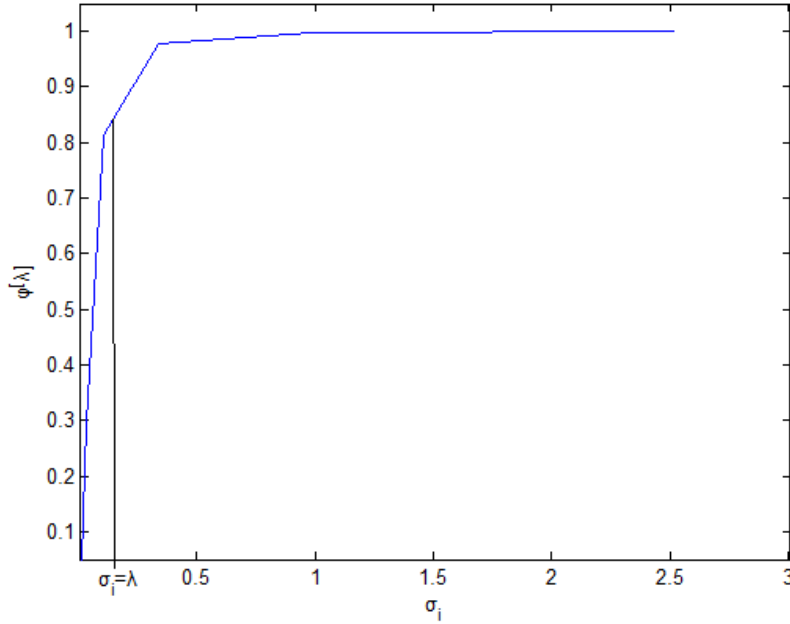
Σε αυτό το σημείο με την αντικατάσταση $I = VV^T$ και την αντικατάσταση του πίνακα A βάσει της σχέσης (3.11) έχουμε ότι

$$\begin{aligned}
x_\lambda &= (V\Sigma(U^T U)\Sigma V^T + \lambda^2 VV^T)^{-1} V\Sigma U^T b = (V(\Sigma I \Sigma + \lambda^2 I)V^T)^{-1} V\Sigma U^T b \\
&= (V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)V^T)^{-1} V\Sigma U^T b = (V^T)^{-1} (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} V^{-1} V\Sigma U^T b \\
&= (V^{-1})^T (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} (V^T V)\Sigma U^T b = (V^T)^T (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} I \Sigma U^T b \\
&= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b \\
&= V \left[\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \lambda^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda^2 \end{pmatrix} \right]^{-1} \Sigma U^T b \\
&= (v_1 \ \dots \ v_n) \begin{pmatrix} \sigma_1^2 + \lambda^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n^2 + \lambda^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^T b \\ \vdots \\ u_n^T b \end{pmatrix} \\
&= (v_1 \ \dots \ v_n) \begin{pmatrix} 1/\sigma_1 + \lambda^2 & & \\ & \ddots & \\ & & 1/\sigma_n^2 + \lambda^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^T b \\ \vdots \\ u_n^T b \end{pmatrix} \\
&= (v_1 \ \dots \ v_n) \begin{pmatrix} \sigma_1/(\sigma_1^2 + \lambda^2) & & \\ & \ddots & \\ & & 1/(\sigma_n^2 + \lambda^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^T b \\ \vdots \\ u_n^T b \end{pmatrix} \\
&= \sum_{i=1}^n v_i \frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \lambda^2} u_i^T b = \sum_{i=1}^n \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad \Rightarrow \\
x_\lambda &= \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \tag{4.21}
\end{aligned}$$

με παράγοντες φιλτραρίσματος

$$\varphi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} = \begin{cases} 1, & \sigma_i \gg \lambda \\ \sigma_i^2/\lambda^2, & \sigma_i \ll \lambda \end{cases} \tag{4.22}$$

Η συμπεριφορά αυτών των παραμέτρων φιλτραρίσματος φαίνεται στο σχήμα 4.3.



Σχήμα 4.3 Γραφική παράσταση των παραγόντων φιλτραρίσματος της μεθόδου Tikhonov συναρτήσει των ιδιζουσών τιμών σ_i . Για ιδιάζουσες τιμές σ_i μεγαλύτερες από λ οι παράγοντες φιλτραρίσματος παίρνουν τείνουν στο ένα. Οι παράγοντες φιλτραρίσματος ιδιζουσών τιμών που είναι μικρότερες από λ τείνουν στο μηδέν όσο μικραίνουν τα σ_i .

Από το διάγραμμα φαίνεται ότι για ιδιάζουσες τιμές σ_i μεγαλύτερες από λ οι παράγοντες φιλτραρίσματος παίρνουν τιμές κοντά στην μονάδα. Επομένως οι σταθερές SVD $u_i^T b$ που αντιστοιχούν σε μεγάλες ιδιάζουσες τιμές σ_i (για τις οποίες ισχύει $u_i^T b \approx u_i^T b^{exact}$) συνεισφέρει η κάθε μία σχεδόν 100% στην λύση Tikhonov. Αντίθετα για ιδιάζουσες τιμές μικρότερες από λ οι παράγοντες φιλτραρίσματος όσο μικραίνουν τα σ_i τείνουν στο μηδέν και η συνεισφορά των αντίστοιχων σταθερών SVD οι οποίες κυριαρχούνται από τον θόρυβο ($u_i^T e / \sigma_i$) μειώνεται δραστικά. Στην ενδιάμεση περιοχή όπου οι ιδιάζουσες τιμές είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με την σταθερά λ ($\sigma_i \sim \lambda$) οι συντελεστές $\phi_i^{[\lambda]}$ μειώνονται με ομαλό τρόπο καθώς μεταβαίνουμε από μεγαλύτερα σε μικρότερα σ_i . Αυτός είναι άλλος ένας τρόπος να καταλάβουμε πως η επιλογή του λ καθορίζει πόσο ομαλοποιημένη είναι η λύση μας.

Ας εξετάσουμε τώρα την λύση Tikhonov από στατιστική άποψη. Ας ξεκινήσουμε αναλύοντας την λύση Tikhonov. Γνωρίζουμε ότι

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

Οπότε ο πίνακας Συμμεταβλητότητας του x_λ είναι

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

$$\begin{aligned}
&= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T \text{Cov}(b^{exact}) (V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T)^T \\
&\quad + V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T \text{Cov}(e) (V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T)^T \\
&= 0 + V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T \text{Cov}(e) (V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T)^T \\
&= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T \eta^2 I (V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T)^T \\
&= \eta^2 V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma (U^T U) \Sigma^T (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-T} V^T \\
&= \eta^2 V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma I \Sigma^T (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-T} V^T \\
&= \eta^2 V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma^2 (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-T} V^T \Rightarrow \\
\text{Cov}(x_\lambda) &= \eta^2 (v_1 \quad \dots \quad v_n) \begin{pmatrix} 1/(\sigma_1^2 + \lambda^2) & & \\ & \ddots & \\ & & 1/(\sigma_n^2 + \lambda^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n^2 \end{pmatrix} \\
&\quad \times \begin{pmatrix} 1/(\sigma_1^2 + \lambda^2) & & \\ & \ddots & \\ & & 1/(\sigma_n^2 + \lambda^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix} \\
&= \eta^2 (v_i \quad \dots \quad v_n) \begin{pmatrix} \sigma_1^2 / (\sigma_1^2 + \lambda^2)^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n^2 / (\sigma_n^2 + \lambda^2)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix} \\
&= \eta^2 \sum_{i=1}^n v_i \frac{\sigma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda^2)^2} \sigma_i^{-2} v_i v_i^T = \eta^2 \sum_{i=1}^n v_i \left(\varphi_i^{[\lambda]} \right)^2 \sigma_i^{-2} v_i v_i^T. \quad (4.23)
\end{aligned}$$

Η νόρμα της συμμεταβλητότητας $\text{Cov}(x_\lambda)$ είναι άνω φραγμένη με νόρμα

$$\|\text{Cov}(x_\lambda)\|_2 \leq \frac{\eta^2}{(2\lambda^2)^2}. \quad (4.24)$$

Επιλέγοντας το λ να είναι λίγο μεγαλύτερο από την μικρότερη ιδιάζουσα τιμή σ_n τότε η λύση x_λ έχει μικρότερη διασπορά από την $x = A^{-1}b$. Και σε αυτή τη περίπτωση, μπορεί να κερδίζουμε σε διασπορά, αλλά χάνουμε λίγο σε ακρίβεια διότι

$$\mathcal{E}(x_\lambda) = \varphi_i^{[\lambda]} (v_i^T x^{exact}) v_i = x^{exact} - \sum_{i=k+1}^n (1 - \varphi_i^{[\lambda]}) (v_i^T x^{exact}) v_i. \quad (4.25)$$

Από την στιγμή όμως που $1 - \varphi_i^{[\lambda]} = \lambda^2 / \sigma_i^2 + \lambda^2$ και αφού ισχύει η συνθήκη Picard τότε

$$\left\| \sum_{i=k+1}^n (1 - \varphi_i^{[\lambda]}) (v_i^T x^{exact}) v_i \right\|_2 \ll \|x^{exact}\|_2. \quad (4.26)$$

4.4 Ευαισθησία Μεθόδων Ομαλοποίησης [1]

Σε αυτό το εδάφιο σκοπός μας είναι η μελέτη της ευαισθησίας των ομαλοποιημένων λύσεων στην επιλογή της παραμέτρου ομαλοποίησης και σε μικρές διαταραχές. Για τον σκοπό αυτό ας θεωρήσουμε δύο εκδοχές του προβλήματος δίχως θόρυβο και με θόρυβο.

Έστω

$$Ax = b \text{ και } \tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b} \quad (4.27)$$

οι δύο αυτές εκδοχές, όπου $\tilde{A} = A + \Delta A$ και $\tilde{b} = b + \Delta b$. Τα μεγέθη ΔA και Δb είναι διαταραχές του πίνακα A του συστήματος και του διανύσματος b αντίστοιχα. Για να διαπιστώσουμε την ευαισθησία των ομαλοποιημένων λύσεων θα μελετήσουμε τον λόγο $\|\tilde{x} - x\|_2 / \|x\|_2$.

Για να υπάρχει ένα μέτρο σύγκρισης ας δούμε την μορφή του λόγου για την «απλούστερη» λύση του προβλήματος που μπορούμε να σκεφτούμε, που δεν είναι άλλη από την $x = A^{-1}b$ ή την $\min_x \|Ax - b\|_2$, ανάλογα με το αν ο πίνακας A είναι τετραγωνικός ή όχι.

Λύση $x = A^{-1}b$

Με την προϋπόθεση ότι ο πίνακας A είναι τετραγωνικός και αντιστρέψιμος και $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n$ (για να είναι ο πίνακας $\det(\tilde{A}) \neq 0$), ο παραπάνω λόγος παίρνει την μορφή

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \gamma} \left(\frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} \right), \quad (4.28)$$

$$\gamma = \|\Delta A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_n}.$$

Από αυτές τις σχέσεις παρατηρούμε την εξάρτηση του λόγου της σχετικής διακύμανσης κυριαρχείται σχεδόν αποκλειστικά από τον δείκτη κατάστασης $\text{cond}(A) = \sigma_1 / \sigma_n$ ο οποίος είναι συνήθως πολύ μεγάλος.

Λύση Ελαχίστων Τετραγώνων

Με την προϋπόθεση ότι $m > n$ ώστε ο πίνακας A να είναι πλήρους βαθμού, και $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n$, η σχετική διακύμανση για τις λύσεις των προβλημάτων ελαχίστων τετραγώνων $\min_x \|Ax - b\|_2$ και $\min_{\tilde{x}} \|\tilde{A}\tilde{x} - \tilde{b}\|_2$ είναι

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \gamma} \left(\frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_n\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \gamma \frac{\|b - b_n\|_2}{\|b_n\|_2} \right) \quad (4.29)$$

όπου $b_n = Ax$ και $\|\Delta A\|_2 / \sigma_n$. Και σε αυτή τη περίπτωση όπως και στην προηγούμενη περίπτωση της λύσης $x = A^{-1}b$ βλέπουμε την ολοκληρωτική σχεδόν εξάρτηση του λόγου $\|\tilde{x} - x\|_2 / \|x\|_2$ από την δείκτη κατάστασης $\text{cond}(A)$.

Λύση TSVD

Αν $\|\Delta A\|_2 < \sigma_k - \sigma_{k+1}$ τότε

$$\frac{\|\tilde{x}_k - x_k\|_2}{\|x_k\|_2} \leq \frac{\kappa_k}{1 - \gamma_k} \left(\frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_k\|_2} + \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \frac{\gamma_k}{1 - \gamma_k - \hat{\gamma}_k} \frac{\|b - b_k\|_2}{\|b_k\|_2} \right) \quad (4.30)$$

όπου $\kappa_k = \text{cond}(A_k) = \sigma_1 / \sigma_k = \|A\|_2 / \sigma_k$, $b_k = Ax_k$, $\gamma_k = \|\Delta A\|_2 / \sigma_k$ και

$$\hat{\gamma}_k = \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k}. \quad (4.31)$$

Σ'αυτή τη περίπτωση παρατηρούμε ότι η σχετική διακύμανση των κανονικοποιημένων λύσεων \tilde{x}_k και x_k εξαρτάται εκτός από τον δείκτη κατάστασης κ_k και από τον παράγοντα $\hat{\gamma}_k = \sigma_{k+1} / \sigma_k$, δηλαδή από τον λόγο δύο ιδιαιζουσών τιμών. Της

τελευταίας του αθροίσματος TSVD και της πρώτης από τις ιδιάζουσες τιμές που δεν συμπεριλαμβάνονται σε αυτό. Εξάρτηση από τον λόγο σ_{k+1}/σ_k συνεπάγεται εξάρτηση από τον παράγοντα κανονικοποίησης k (που τον επιλέγουμε εμείς).

Επομένως η ευστάθεια εξαρτάται από τον δείκτη κατάστασης κ_k και την διαλογή του παράγοντα κανονικοποίησης k . Θα πρέπει να σημειωθεί ότι $\kappa_k = \sigma_1/\sigma_k < \sigma_1/\sigma_n = \text{cond}(A)$. Άρα, η σχετική διακύμανση ανάμεσα στις δύο λύσεις x_k και \tilde{x}_k για δεδομένα με θόρυβο είναι μικρότερη από τις δύο προηγούμενες περιπτώσεις.

Λύση Tikhonov

Αν υποθέσουμε ότι $\|\Delta A\|_2 < \lambda$ τότε

$$\frac{\|\tilde{x}_\lambda - x_\lambda\|_2}{\|x_\lambda\|_2} \leq \frac{\kappa_\lambda}{1 - \gamma_\lambda} \left(\frac{\|\Delta b\|_2}{\|b_\lambda\|_2} + 2 \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} + \gamma_\lambda \frac{\|b - b_\lambda\|_2}{\|b_\lambda\|_2} \right), \quad (4.32)$$

όπου $b_\lambda = Ax_\lambda$, $\gamma_\lambda = \|\Delta A\|_2/\lambda$ και $\kappa_\lambda = \sigma_1/\lambda = \|A\|_2/\lambda$ ο δείκτης κατάστασης του πίνακα A . Παρατηρούμε ότι και στην μέθοδο Tikhonov ο δείκτης κατάστασης, αν και μικρότερος απ' ό,τι στις δύο αρχικές περιπτώσεις, εξαρτάται από την παράμετρο ομαλοποίησης λ .

Αν κοιτάξουμε τις σχέσεις του λόγου της σχετικής διακύμανσης για την ομαλοποιημένη λύση Tikhonov (σχέση 4.31) και για την TSVD (σχέση 4.29) παρατηρούμε ότι έχουν σχεδόν την ίδια μορφή και εξαρτώνται άμεσα από την παράμετρο ομαλοποίησης.

Παρ' όλα αυτά υπάρχει μια διαφορά μεταξύ τους, και αυτή είναι η παρουσία του $\hat{\gamma}_k = \sigma_{k+1}/\sigma_k$. Το $\hat{\gamma}_k$ εξαρτάται από το σχετικό μέγεθος της τελευταίας ιδιάζουσας τιμής ως προς την αμέσως επόμενη που δεν συμπεριλαμβάνεται στο άθροισμα TSVD, επηρεάζοντας με αυτό το τρόπο την διακύμανση. Για να φανεί αυτό υποθέτουμε την περίπτωση που οι ιδιάζουσες τιμές σ_i της λύσης $x = A^{-1}b = \sum_{i=1}^n u_i^T b / \sigma_i$ από κάποιο σημείο και μετά φθίνουν με πολύ αργό ρυθμό και δεν απέχει σημαντικά η τιμή της μίας από την άλλη. Αν θελήσουμε να την «κόψουμε» την x σε κάποιο σημείο αυτής της περιοχής, το $\hat{\gamma}_k$ γίνεται σχεδόν ίσο με τη μονάδα και η διαφορά $1 - \hat{\gamma}_k$ γίνεται πολύ μικρή.

Επομένως μόνο πολύ μικρές διαταραχές ΔA είναι ανεκτές (δεν κάνουν τον λόγο διακύμανσης να αυξάνεται ανεξέλεγκτα). Αυτό δεν συμβαίνει με την διακύμανση των λύσεων Tikhonov όπου υπάρχει μεγαλύτερη ανοχή σε διαταραχές ΔA ακόμη και αν επιλέξουμε το λ να είναι ίσο με μία ιδιάζουσα τιμή της περιοχής που αυτές φθίνουν με πολύ αργό ρυθμό (σε αυτή την περίπτωση στην λύση Tikhonov συμπεριλαμβάνονται σχεδόν όλες οι ιδιάζουσες τιμές της περιοχής για τις οποίες ισχύει $\sigma_i \sim \lambda$).

4.5 Prewhitening [1]

Προηγουμένως σε αρκετά σημεία που χρειάστηκε να χρησιμοποιήσουμε διαταραχές, αυτές επιλέξαμε να είναι λευκός θόρυβος. Αυτό έγινε για δύο λόγους. Ο πρώτος είναι η απλή μορφή του που κάνει τις πράξεις πιο εύκολες. Ο δεύτερος και πιο σημαντικός λόγος είναι ότι αν στο πρόβλημα μας έχουμε ένα είδος θορύβου διαφορετικό από τον λευκό μπορούμε με κατάλληλες πράξεις πινάκων να πάμε σε ένα ισοδύναμο πρόβλημα στο οποίο ο θόρυβος να είναι λευκός. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται Prewhitening.

Ο λόγος που είναι προτιμότερο να επιλυθεί ένα πρόβλημα αφού έχει υποστεί Prewhitening παρά στην αρχική του μορφή δεν είναι άλλος από την ορθότερη εκλογή του παράγοντα ομαλοποίησης λ . Όταν ο θόρυβος είναι λευκός μπορούμε να ξεχωρίσουμε πιο εύκολα τις αξιόπιστες σταθερές SVD $u_i^T b / \sigma_i \simeq u_i^T b^{exact}$ από τις σταθερές $u_i^T b / \sigma_i \simeq u_i^T e$ που είναι υπεύθυνες για τον εκτροχιασμό της λύσης $x = A^{-1}b$.

Εν προκειμένω, έστω ότι έχουμε να λύσουμε το πρόβλημα $Ax = b = b^{exact} + e$ ή το $\min_x \|Ax - b\|_2$. Για να κάνουμε Prewhitening κάνουμε παραγοντοποίηση Cholesky στον πίνακα $Cov(e)$ της διαταραχής, δηλαδή

$$Cov(e) = C^T C, \quad C = \text{άνω τριγωνικός}. \quad (4.33)$$

Στην συνέχεια υπολογίζουμε τα τροποποιημένα δεδομένα

$$b^{pw} = (C^T)^{-1}b = (C^T)^{-1}b^{exact} + (C^T)^{-1}e. \quad (4.34)$$

Ο πίνακας Συμμεταβλητότητας του τροποποιημένου θορύβου $(C^T)^{-1}e$ είναι

$$\begin{aligned} Cov((C^T)^{-1}e) &= (C^T)^{-1}Cov(e)((C^T)^{-1})^T = (C^T)^{-1}Cov(e)((C^T)^T)^{-1} \\ &= (C^T)^{-1} C^T C C^{-1} = I. \end{aligned}$$

Συνεπώς ο όρος $(C^T)^{-1}e$ είναι λευκός θόρυβος. Επομένως, έχουμε να υπολογίσουμε το ισοδύναμο πρόβλημα

$$((C^T)^{-1}A)x = (C^T)^{-1}b \quad (4.35)$$

ή

$$\min_x \|((C^T)^{-1}A)x - (C^T)^{-1}b\|_2 \quad (4.36)$$

το οποίο περιέχει λευκό θόρυβο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

Μέθοδοι Εύρεσης Καταλληλότερων Παραμέτρων Ομαλοποίησης k και λ

Αντικείμενο αυτού του κεφαλαίου είναι η παρουσίαση κάποιων ενδεικτικών μεθόδων προσδιορισμού του βέλτιστου παράγοντα ομαλοποίησης k ή λ για τις μεθόδους TSVD και Tikhonov.

5.1 Σφάλματα Απόκλισης – Σφάλματα Διαταραχών [1]

Όπως αναφέρθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο σκοπός μας είναι να βρούμε μία λύση που να είναι όσο το δυνατόν κοντύτερα στην x^{exact} με την κατάλληλη επιλογή του παράγοντα k ή λ . Θεωρητικά, μέτρο του πόσο καλή είναι η προσεγγιστική λύση που υπολογίζουμε είναι η διαφορά $x - x^{exact}$. Παρόλο που η x^{exact} δεν είναι γνωστή στα «πραγματικά» προβλήματα η επεξεργασία της διαφοράς $x - x^{exact}$ μπορεί να μας οδηγήσει σε συμπεράσματα που θα μας επιτρέψουν να κατανοήσουμε την συμπεριφορά της λύσης και κατ' επέκταση να δούμε πως πρέπει να επιλέξουμε τον παράγοντα ομαλοποίησης ώστε η λύση μας να έχει την «επιθυμητή» συμπεριφορά. Οι μέθοδοι ομαλοποίησης TSVD και Tikhonov μας δίνουν λύσεις της μορφής

$$x_{k,\lambda} = V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T b \quad (b = b^{exact} + e) \quad (5.1)$$

όπου $\Phi^{[\lambda]} = \begin{pmatrix} \varphi_1^{[\lambda]} & & \\ & \ddots & \\ & & \varphi_n^{[\lambda]} \end{pmatrix}$ ο πίνακας των σταθερών φιλτραρίσματος που για την μέθοδο του Tikhonov είναι

$$\varphi_i^{[\lambda]} = \sigma_i^2 / (\sigma_i^2 + \lambda^2), \quad i = 1, \dots, n \quad (5.2)$$

ενώ για την TSVD

$$\varphi_i^{[k]} = \begin{cases} 1, & i \leq k \\ 0, & i > k \end{cases} \quad (5.3)$$

Επομένως

$$\begin{aligned} x^{exact} - x_\lambda &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T b \\ &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T (b^{exact} + e) \\ &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T (Ax^{exact} + e) \\ &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T Ax^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T e \\ &= V(I - \Phi^{[\lambda]})V^T x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T e. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Ο πρώτος παράγοντας ονομάζεται σφάλμα ομαλοποίησης (Δx_{bias}) και οφείλεται στην εισαγωγή των παραμέτρων φιλτραρίσματος στο ανάπτυγμα $x = \sum_{i=1}^n (u_i^T b / \sigma_i) v_i$, και ο δεύτερος παράγοντας ονομάζεται σφάλμα διαταραχής και οφείλεται στην αντιστροφή του θορύβου της δεξιάς πλευράς b (Δx_{per}). Ενδεικτικά, για την TSVD μέθοδο

$$\begin{cases} \Delta x_{bias} = \sum_{i=k+1}^n (v_i^T x^{exact}) v_i \\ \Delta x_{per} = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T e}{\sigma_i} v_i \end{cases} \quad (5.5)$$

Παρατηρούμε ότι αν το k είναι μεγάλο το σφάλμα ομαλοποίησης είναι μικρό, και το σφάλμα διαταραχής γίνεται πολύ μεγάλο. Αντίθετα αν το k είναι μικρό το σφάλμα διαταραχών είναι μικρό και το σφάλμα ομαλοποίησης είναι μεγάλο. Σε κάθε λύση θα υπάρχουν πάντα και τα δύο αυτά σφάλματα. Ζητούμενο είναι η λύση να μην απέχει πολύ από την x^{exact} και να μην τίθεται εκτός ελέγχου το σφάλμα διαταραχών. Για αυτό επιλέγουμε την μέση οδό. Διαλέγουμε τον παράγοντα ομαλοποίησης έτσι ώστε $\Delta x_{bias} \simeq \Delta x_{per}$.

Τα ίδια συμπεράσματα ισχύουν και για τα σφάλματα ομαλοποίησης και διαταραχών της μεθόδου Tikhonov. Όταν το λ είναι μικρό τα στοιχεία του πίνακα $\Phi^{[\lambda]}$ είναι κοντά στην μονάδα. Άρα δεν φιλτράρονται καθόλου οι σταθερές SVD που κυριαρχούνται από θόρυβο. Αυτό συνεπάγεται ότι το σφάλμα κανονικοποίησης είναι πολύ μικρό, αλλά το σφάλμα διαταραχών είναι μεγάλο. Αντιθέτως, αν το λ είναι μεγάλο οι παράγοντες φιλτραρίσματος του πίνακα $\Phi^{[\lambda]}$ τείνουν στο μηδέν με αποτέλεσμα να υπάρχει φιλτράρισμα του θορύβου αλλά το σφάλμα ομαλοποίησης να είναι μεγάλο ($x_\lambda \rightarrow A^{-1}b$). Έτσι, διαλέγουμε τον παράγοντα ομαλοποίησης λ έτσι ώστε $\Delta x_{bias} \simeq \Delta x_{per}$.

Μπορούμε να δούμε τα παραπάνω και από μία άλλη οπτική γωνία, όπου η ανάλυση μας θα στηρίζεται σε ποιό πρακτικά μεγέθη και δεν θα περιλαμβάνει μεγέθη που στα πραγματικά προβλήματα δεν μπορούν να υπολογιστούν (π.χ. η x^{exact}). Όπως είδαμε σε προηγούμενο κεφάλαιο η x_λ και η x_k μπορούν να θεωρηθούν ως λύσεις του γενικού προβλήματος

$$\begin{cases} \min_x \|Ax - b\|_2 \\ \|x\|_2 \leq \delta \end{cases} \quad .$$

Άρα δεν έχουμε παρά να εξετάσουμε την συμπεριφορά των μεγεθών $\|Ax - b\|_2$ και $\|x\|_2$ για να καταλάβουμε την συμπεριφορά της ομαλοποιημένης λύσης. Για μεγαλύτερη διευκόλυνση θα χρησιμοποιήσουμε την λύση της μεθόδου TSVD, όμως τα ίδια αποτελέσματα θα ισχύουν και για την μέθοδο Tikhonov.

Έστω k_η ο δείκτης k που στο διάγραμμα Picard οι σταθερές $u_i^T b / \sigma_i$ αρχίζουν να αυξάνονται.

Τότε για:

• $k < k_\eta$

$$\|x_k\|_2^2 \simeq \sum_{i=1}^k \left(\frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} \right)^2,$$

$$\|Ax_k - b\|_2^2 \simeq \sum_{i=k+1}^{k_\eta} (u_i^T b)^2 + (n - k_\eta) \eta^2 \simeq \sum_{i=k+1}^{k_\eta} (u_i^T b^{exact})^2.$$

• $k > k_\eta$

$$\|x_k\|_2^2 \simeq \sum_{i=1}^{k_\eta} \left(\frac{u_i^T b^{exact}}{\sigma_i} \right)^2 + \sum_{i=k_\eta+1}^k \left(\frac{\eta}{\sigma_i} \right)^2 \simeq \|x^{exact}\|_2^2 + \eta^2 \sum_{i=k_\eta+1}^k \sigma_i^{-2},$$

$$\|Ax_k - b\|_2^2 \simeq (n - k) \eta^2.$$

Παρατηρούμε ότι για $k < k_\eta$ όσο αυξάνεται το k η νόρμα της λύσης αυξάνεται ενώ η νόρμα $\|Ax_k - b\|_2^2$ μικραίνει με πιο αργό ρυθμό από όσο αυξάνεται το $\|x_k\|_2^2$. Για $k > k_\eta$ το $\|x_k\|_2^2$ αυξάνεται γρήγορα όσο αυξάνεται το k ενώ την ίδια στιγμή το $\|Ax_k - b\|_2^2$ μειώνεται αργά. Η μετάβαση από την μία κατάσταση στην άλλη γίνεται για την περιοχή των k για τα οποία $k \simeq k_\eta$. Σε αυτή την περιοχή και το $\|x_k\|_2^2$ και το $\|Ax_k - b\|_2^2$ μεταβάλλονται σχετικά αργά με την αύξηση του k και για $k = k_\eta$ πετυχαίνουμε $\Delta x_{bias} \simeq \Delta x_{per}$ (το $\|x_k\|_2^2$ συνδέεται με το σφάλμα διαταραχών αφού καθορίζει το πόσο ομαλοποιημένη θα είναι η λύση και το $\|Ax_k - b\|_2^2$ με το Δx_{bias}).

Για τον προσδιορισμό του k_η υπάρχουν διάφορες μέθοδοι με τρεις από τις οποίες θα ασχοληθούμε. Αυτές είναι :

- α) η Discrepancy Principle
- β) το κριτήριο L
- γ) η Generalized Cross Validation

5.2 Αρχή του χάσματος (Discrepancy Principle) [1]

Σύμφωνα με όσα έχουμε αναφέρει η σχέση $\|Ax_k - b\|_2 \simeq (n - k)^{1/2} \eta$ ισχύει για $k \simeq k_\eta$. Άρα το πιο βολικό είναι να διαλέξουμε το k έτσι ώστε $\|Ax_k - b\|_2 \simeq (n - k_\eta)^{1/2} \eta$. Αλλά πολλές φορές δεν μπορούμε να κάνουμε το διάγραμμα Picard του προβλήματος για να δούμε ποιο είναι το k_η (για ένα μεγάλο πρόβλημα είναι ασύμφορος ο υπολογισμός του SVD). Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούμε την νόρμα του e που είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με το $(n - k)^{1/2} \eta$. Για την ακρίβεια είναι $\|e\|_2 \simeq n^{1/2} \eta$.

Άρα θέλουμε $\|Ax_k - b\|_2 = \|e\|_2 \simeq n^{1/2} \eta$. Αρκετές φορές βάζουμε μπροστά από το $\|e\|_2$ και έναν παράγοντα ασφαλείας v_{dp} . Τελικά η Discrepancy Principle μας λέει ότι :

<p>Διαλέγουμε το μεγαλύτερο $k (= k_{dp})$ έτσι ώστε</p> $\ Ax_k - b\ _2 \geq v_{dp}\ e\ _2 > \ Ax_{k+1} - b\ _2$ <p>(χρησιμοποιούμε την ανισότητα γιατί σπάνια ικανοποιείται ακριβώς η ισότητα $\ Ax_k - b\ _2 = v_{dp}\ e\ _2$).</p>	(5.6)
--	-------

Για την μέθοδο Tikhonov η Αρχή του χάσματος (Discrepancy Principle) μας λέει ότι :

<p>Επιλέγουμε το $\lambda = \lambda_{dp}$ έτσι ώστε $\ Ax_\lambda - b\ _2 = v_{dp}\ e\ _2$.</p>	(5.7)
---	-------

Το πλεονέκτημα της Discrepancy Principle είναι ότι σαν μέθοδος είναι απλή και υλοποιείται εύκολα. Αρνητικό είναι ότι επηρεάζεται εύκολα και δραματικά από την ακρίβεια με την οποία μας είναι γνωστό το $\|e\|_2$. Ακόμη, υπάρχουν προβλήματα στα οποία αδυνατούμε να προσδιορίσουμε το επίπεδο του $\|e\|_2$.

5.3 Κριτήριο L [1]

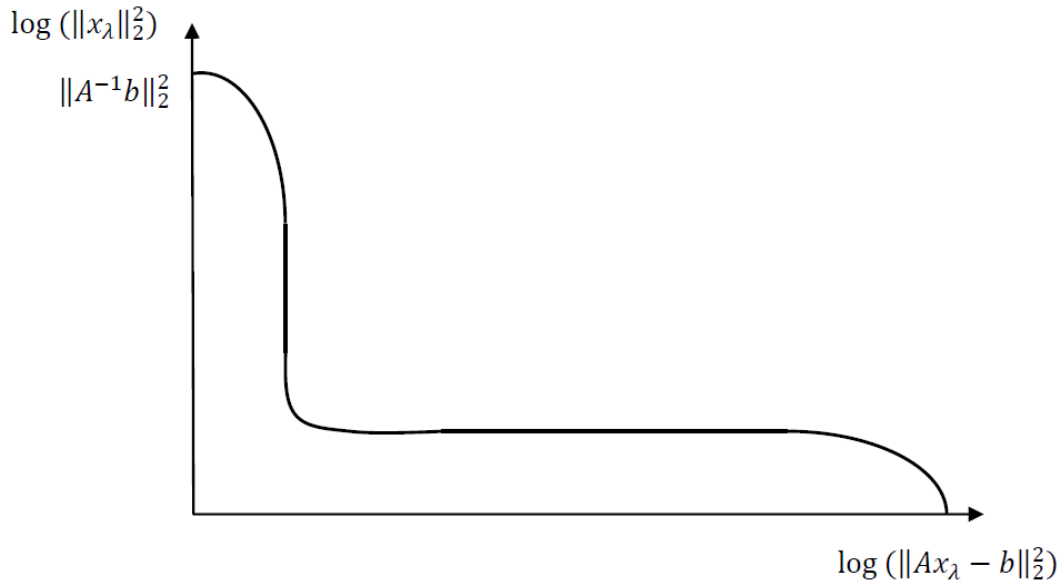
Προηγουμένως είδαμε ότι:

- i) Όταν ο παράγοντας ομαλοποίησης k είναι μικρός τότε το $\|x_k\|_2^2$ μεταβάλλεται πολύ αργά. Στο όριο που $k \rightarrow 0$, $x \rightarrow A^{-1}b$.
- ii) Όταν ο παράγοντας ομαλοποίησης k είναι μεγάλος τότε το $\|Ax_k - b\|_2^2$ μεταβάλλεται πολύ αργά. Στο όριο που $k \rightarrow \infty$, $x \rightarrow 0$.
- iii) Οι νόρμες $\|x_k\|_2^2$ και $\|Ax_k - b\|_2^2$ είναι μονότονες συναρτήσεις του k .

(Τα ίδια ισχύουν για τις δύο αυτές νόρμες και για την μέθοδο Tikhonov με παράμετρο ομαλοποίησης λ).

Αν σχεδιάσουμε την γραφική παράσταση των σημείων $(\log\|x_k\|_2, \log\|Ax_k - b\|_2)$ θα πάρουμε ένα σύνολο διακριτών σημείων για την μέθοδο TSVD και μια συνεχόμενη καμπύλη για την μέθοδο Tikhonov. Και στις δύο περιπτώσεις όμως διακρίνουμε δύο «σταθερές» περιοχές στην γραφική παράσταση.

Η πρώτη, παράλληλη στον οριζόντιο άξονα, οφείλεται στην αργή μεταβολή του $\|Ax_{k,\lambda} - b\|_2^2$ και η δεύτερη, παράλληλη στον κάθετο άξονα, οφείλεται στην αργή μεταβολή του $\|x_{k,\lambda}\|_2^2$. Η καμπύλη αυτή ονομάζεται καμπύλη-L (L-curve). Στο σχήμα 5.1 παρουσιάζεται μια ενδεικτική καμπύλη-L για την μέθοδο Tikhonov. Ο παράγοντας κανονικοποίησης μειώνεται αν διατρέξουμε την καμπύλη από τα δεξιά προς τα αριστερά. Στο σχήμα επίσης φαίνονται και οι δύο ακραίες περιπτώσεις για $\lambda \rightarrow 0$ και $\lambda \rightarrow \infty$.



Σχήμα 5.1 Καμπύλη-L της μεθόδου Tikhonov. Η καμπύλη-L είναι μια παραμετρική καμπύλη με βάση την παράμετρο ομαλοποίησης λ , η οποία μειώνεται αν διατρέξουμε την καμπύλη από τα αριστερά προς τα δεξιά. Υπάρχουν δύο σταθερές περιοχές στην καμπύλη-L. Στην πρώτη σταθερή περιοχή, η οποία είναι παράλληλη στον οριζόντιο άξονα, η νόρμα $\|x_\lambda\|_2^2$ της λύσης Tikhonov παραμένει σχεδόν σταθερή, ενώ η νόρμα $\|Ax_\lambda - b\|_2^2$ αυξάνεται με την αύξηση του λ . Στην δεύτερη σταθερή περιοχή, η οποία είναι παράλληλη στον κάθετο άξονα, η νόρμα $\|Ax_\lambda - b\|_2^2$ σταθεροποιείται στο επίπεδο του θορύβου ($\|Ax_\lambda - b\|_2^2 \approx \|e\|_2^2$), ενώ η νόρμα $\|x_\lambda\|_2^2$ αυξάνεται με την μείωση του λ .

Στο σχήμα παρατηρούμε ότι ανάμεσα στις δύο σταθερές περιοχές παρεμβάλλεται μια καμπύλη περιοχή. Σε αυτή τη περιοχή γίνεται η μετάβαση από την μία ακραία συμπεριφορά στην άλλη.

Διαισθητικά, το σημείο της μεταβατικής περιοχής με την μεγαλύτερη καμπυλότητα θα αντιστοιχεί στο λ που τα σφάλματα ομαλοποίησης και τα σφάλματα διαταραχής θα είναι περίπου ίσα (ισχύει και για την μέθοδο TSVD και για την Tikhonov). Ας επανέλθουμε στην μέθοδο Tikhonov. Θέτουμε

$$\begin{cases} \rho = \|Ax_\lambda - b\|_2^2 \\ \xi = \|x_\lambda\|_2^2 \end{cases} \text{ και } \begin{cases} \hat{\rho} = \log \|Ax_\lambda - b\|_2^2 \\ \hat{\xi} = \log \|x_\lambda\|_2^2 \end{cases}.$$

Παραγωγίζοντας το ρ και το ξ έχουμε

$$\xi' = \frac{d\xi}{d\lambda} = -\frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - \varphi_i^{[\lambda]}) (\varphi_i^{[\lambda]})^2 \frac{(u_i^T b)^2}{\sigma_i^2},$$

$$\rho' = \frac{d\rho}{d\lambda} = \frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - \varphi_i^{[\lambda]}) \varphi_i^{[\lambda]} (u_i^T b)^2 = -\lambda^2 \xi'.$$

Αν κάνουμε το ίδιο και για τα $\hat{\xi}$, $\hat{\rho}$ βρίσκουμε ότι

$$\hat{\xi}' = \frac{\xi'}{\xi} \text{ και } \hat{\rho}' = \frac{\rho'}{\rho},$$

ενώ

$$\hat{\xi}'' = \frac{\xi''\xi - (\xi')^2}{\xi^2} \text{ και } \hat{\rho}'' = \frac{\rho''\rho - (\rho')^2}{\rho^2}.$$

Είναι γνωστό από την διαφορική γεωμετρία ότι η καμπυλότητα της καμπύλης-L $(\frac{1}{2} \log \hat{\rho}, \frac{1}{2} \log \hat{\xi})$ είναι

$$\begin{aligned} \hat{c}_\lambda &= 2 \frac{\hat{\rho}'\hat{\xi}'' - \hat{\rho}''\hat{\xi}'}{((\hat{\rho}')^2 + (\hat{\xi}')^2)^{3/2}} \\ &= 2 \frac{\xi\rho\lambda^2\xi'\rho + 2\lambda\xi\rho + \lambda^4\xi\xi'}{\xi'(\lambda^2\xi^2 + \rho^2)^{3/2}}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Οι νόρμες $\rho = \|Ax_\lambda - b\|_2^2$ και $\xi = \|x_\lambda\|_2^2$ είναι εύκολο να υπολογιστούν ενώ το ξ' μπορεί να υπολογιστεί εύκολα αν παρατηρήσουμε ότι μπορεί να γραφεί ως $\frac{4}{\lambda} x_\lambda^T z_\lambda$, όπου $z_\lambda = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T (Ax_\lambda - b)$ η λύση Tikhonov του προβλήματος

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

Άρα για την εφαρμογή του κριτηρίου-L χρειάζεται ο υπολογισμός των λύσεων Tikhonov δύο προβλημάτων. Υπολογίζοντας την καμπυλότητα \hat{c}_λ για διάφορες τιμές του λ το κριτήριο-L υποστηρίζει ότι :

Διαλέγουμε το $\lambda = \lambda_L$ για το οποίο η καμπυλότητα \hat{c}_λ γίνεται μέγιστη.

 (5.9)

Αυτό ισχύει αν επιλέξουμε να λύσουμε το διακριτοποιημένο πρόβλημα με την μέθοδο Tikhonov.

Αν θέλουμε να λύσουμε το διακριτοποιημένο πρόβλημα με την μέθοδο TSVD το κριτήριο-L καθορίζει ότι :

Διαλέγουμε το $k = k_L$ του σημείου της καμπύλης-L με την μεγαλύτερη γωνία, η οποία αποτελείται από διακριτά σημεία.

 (5.10)

5.4 Διασταυρούμενη Επαλήθευση (Generalized Cross Validation) [1]

Σκοπός αυτής της μεθόδου είναι η εύρεση των παραγόντων κανονικοποίησης k και λ που οδηγούν στην καλύτερη πρόβλεψη του b^{exact} από το Ax_k και Ax_λ αντίστοιχα. Μέτρο του πόσο καλή είναι η πρόβλεψη του b^{exact} από το $Ax_{k,\lambda}$ είναι η δεύτερη νόρμα της διαφοράς τους $\|Ax_{k,\lambda} - b^{exact}\|_2^2$. Με την βοήθεια του αναπτύγματος SVD θα προσπαθήσουμε αρχικά να μελετήσουμε την συμπεριφορά αυτής της

νόρμας. Χάριν απλότητας θα περιοριστούμε στην μελέτη της μεθόδου TSVD. Τα ίδια συμπεράσματα θα ισχύουν και για την μέθοδο Tikhonov.

$$\begin{aligned} Ax_k - b^{exact} &= AV\Phi^{[k]}\Sigma^{-1}U^T(b^{exact} + e) - b^{exact} \\ &= U \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^T b^{exact} + U \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^T e - UU^T b^{exact} \\ &= U \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^T e - U \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n-k} \end{pmatrix} U^T b^{exact} \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\|Ax_k - b^{exact}\|_2^2 = \sum_{i=1}^k (u_i^T e)^2 + \sum_{i=k+1}^n (u_i^T b^{exact})^2 \simeq k\eta^2 + \sum_{i=k+1}^n (u_i^T b^{exact})^2$$

Έστω k_η το k για το οποίο $|u_i^T b^{exact}| < \eta \forall i > k_\eta$ (η ακριβής πληροφορία b^{exact} χάνεται μέσα στον θόρυβο). Τότε διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

- $k < k_\eta$

$$\|Ax_k - b^{exact}\|_2^2 \simeq k\eta^2 + \sum_{i=k+1}^{k_\eta} (u_i^T b^{exact})^2.$$

- $k > k_\eta$

$$\|Ax_k - b^{exact}\|_2^2 \simeq k\eta^2.$$

Για $k < k_\eta$ η νόρμα $\|Ax_k - b^{exact}\|_2^2$ μικραίνει καθώς αυξάνεται το k ενώ τείνει στο $k\eta^2$ καθώς $k \rightarrow k_\eta$, που σημαίνει ότι το σφάλμα της πρόβλεψης του b^{exact} από το Ax_k μικραίνει, ενώ για $k > k_\eta$ η νόρμα αυξάνεται με την αύξηση του k . Εύλογα θέλουμε το σφάλμα πρόβλεψης να είναι το μικρότερο δυνατό, και αυτό γίνεται όταν $k \simeq k_\eta$.

Ανυπέρβλητο εμπόδιο για αυτή την επιδίωξη μας φαίνεται να είναι η άγνοια μας για το b^{exact} . Την λύση σε αυτό το εμπόδιο μας την δίνει η Στατιστική με την Cross Validation.

Η Cross Validation μας υπαγορεύει να χωρίσουμε τα δεδομένα μας (το διάνυσμα b) στην μέση. Έπειτα υπολογίζουμε την λύση του προβλήματος με τα μισά δεδομένα, η οποία στην συνέχεια χρησιμοποιείται για να προβλέψουμε τα άλλα μισά δεδομένα. Για παράδειγμα, για την μέθοδο Tikhonov, μπορούμε να αφήσουμε εκτός το στοιχείο b_i και να υπολογίσουμε την λύση Tikhonov

$$x_\lambda^{(i)} = ((A^{(i)})^T A^{(i)} + \lambda^2 I_{n-1})^{-1} (A^{(i)})^T b^{(i)}$$

του μικρότερων διαστάσεων προβλήματος $A^{(i)}x^{(i)} = b^{(i)}$, όπου ο δείκτης (i) συμβολίζει την γραμμή του πίνακα ή του διανύσματος που λείπει. Έπειτα, χρησιμοποιώντας την γραμμή $A(i, :)$ του πίνακα A που αφήσαμε εκτός, προβλέπουμε το στοιχείο b_i από την σχέση $A(i, :)x_\lambda^{(i)}$. Επομένως μια καλή ιδέα προσδιορισμού του καταλληλότερου λ είναι να βρούμε για ποιο λ το σφάλμα πρόβλεψης κάθε στοιχείου του b να είναι ελάχιστο ή ισοδύναμα να λύσουμε το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων

$$\min_\lambda \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (A(i, :)x_\lambda^{(i)} - b_i)^2.$$

Είναι όμως αδύνατο να υπολογίσουμε λύσεις $x_\lambda^{(i)}$ για πίνακες A πολύ μεγάλων διαστάσεων που εμφανίζονται σε πραγματικά προβλήματα. Παρ'όλα αυτά μπορεί να αποδειχθεί ότι το παραπάνω πρόβλημα είναι ισοδύναμο με το

$$\min_{\lambda} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(\frac{(A(i, :)x_\lambda^{(i)} - b_i)}{1 - h_{ii}} \right)^2,$$

όπου h_{ii} τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα $A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T$, το οποίο χρειάζεται μόνο την λύση Tikhonov του προβλήματος με πίνακα συστήματος A .

Δυστυχώς, και σε αυτή τη περίπτωση παρουσιάζεται ένα σοβαρό πρόβλημα. Τα στοιχεία h_{ii} αλλάζουν με την αναδιάταξη των εξισώσεων του συστήματος $Ax = b$, οδηγώντας το παραπάνω πρόβλημα σε διαφορετική λύση από αυτή που παίρνουμε χωρίς αναδιάταξη των εξισώσεων. Αυτό είναι πολύ σημαντικό διότι πολλές φορές στα προβλήματα δεν υπάρχει κανένας λόγος να προτιμήσουμε μία διάταξη δεδομένων από μία άλλη.

Αυτή η δυσκολία ξεπερνιέται αν αντικαταστήσουμε κάθε στοιχείο h_{ii} με τον μέσο όρο των διαγώνιων στοιχείων του πίνακα $A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T$. Όποτε το πρόβλημα παίρνει την μορφή

$$\min_{\lambda} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(\frac{(A(i, :)x_\lambda^{(i)} - b_i)}{1 - \text{trace}(A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T)/m} \right)^2.$$

Το $\text{trace}(A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T)$ με την προσθήκη του αναπτύγματος SVD του πίνακα A γίνεται

$$\text{trace}(A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T) = \text{trace}(U\Phi^{[\lambda]}U^T) = \text{trace}(\Phi^{[\lambda]}) = \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]},$$

ενώ το $\sum_{i=1}^n (A(i, :)x_\lambda^{(i)} - b_i)^2$ μπορεί να γραφεί ως $\|Ax_\lambda - b\|_2^2$.

Δηλαδή, καταλήγουμε ότι για την μέθοδο Tikhonov

Διαλέγουμε το $\lambda = \lambda_{GCV}$ σύμφωνα με την μέθοδο της διασταυρούμενης επαλήθευσης για το οποίο η συνάρτηση

$$G(\lambda) = \frac{\|Ax_\lambda - b\|_2^2}{m - \sum_{i=1}^n \varphi_i^{[\lambda]}} \quad (5.11)$$

παίρνει την ελάχιστη τιμή της.

Για την μέθοδο TSVD η μέθοδος της Διασταυρούμενης Επαλήθευσης υποστηρίζει ότι :

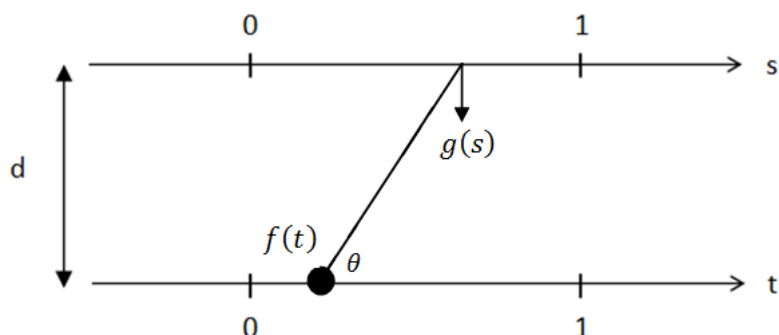
Πρέπει να διαλέξουμε το $k = k_{GCV}$ το οποίο ελαχιστοποιεί την ποσότητα

$$G(k) = \frac{\|Ax_k - b\|_2^2}{(m - k)^2}. \quad (5.12)$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

Υπολογιστικά Παραδείγματα

Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι να δούμε κάποια χαρακτηριστικά των αντίστροφων προβλημάτων στην πράξη. Για το σκοπό αυτό επιλέγουμε το πρόβλημα βαρύτητας (gravity surveying), το οποίο αναφέρθηκε στο πρώτο κεφάλαιο.



Σχήμα 6.1 Συνεχές αντίστροφο πρόβλημα της βαρύτητας. Μια κατανομή μάζας με άγνωστη πυκνότητα $f(t)$ του άξονα- t δημιουργεί βαρυτικό πεδίο με γνωστή κάθετη συνιστώσα $g(s)$ σε τυχαίο σημείο s του άξονα- s της επιφάνειας.

Το συνεχές αντίστροφο πρόβλημα σε αυτή τη περίπτωση συνίσταται στον προσδιορισμό της πυκνότητας $f(t)$ της μάζας που εκτείνεται από 0 έως 1 στον άξονα- t . Μετρώντας την κάθετη συνιστώσα του βαρυτικού πεδίου $g(s)$ σε διάφορα σημεία από μηδέν έως ένα του άξονα- s θα προσπαθήσουμε να προσδιορίσουμε την πυκνότητα της μάζας.

Βασικός μας στόχος είναι (χρησιμοποιώντας τον κώδικα για Matlab του Per Christian Hansen) να λύσουμε το διακριτοποιημένο αντίστροφο πρόβλημα της βαρύτητας με την μέθοδο Tikhonov χρησιμοποιώντας τις μεθόδους εύρεσης της βέλτιστης παραμέτρου ομαλοποίησης, γνωρίζοντας εκ των προτέρων την πυκνότητα της μάζας, ούτως ώστε να τη συγκρίνουμε με τα αποτελέσματα που θα μας δώσει η μέθοδος Tikhonov. Λόγω δυσκολίας στην λήψη αυθεντικών πειραματικών δεδομένων βαρύτητας, χρησιμοποιείται ο κώδικας του Per Christian Hansen για να δημιουργήσουμε «πειραματικά δεδομένα».

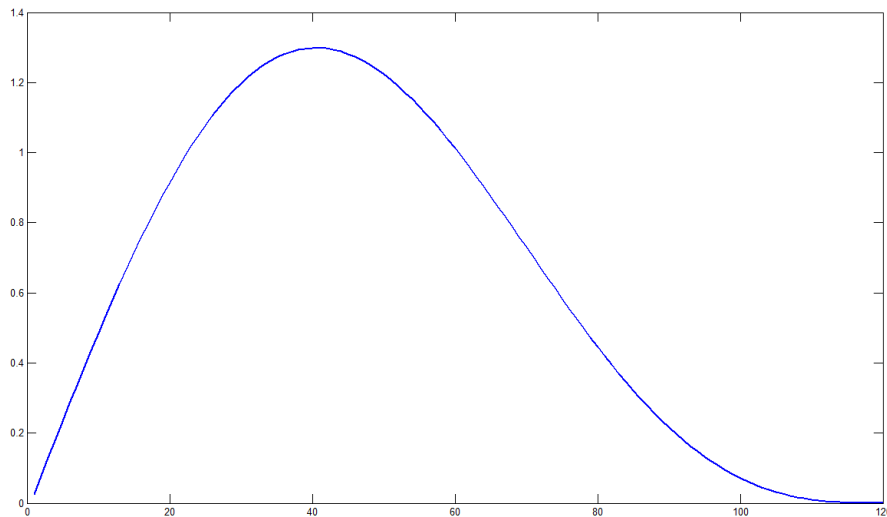
Έστω ότι η πυκνότητα της μάζας είναι $f(t) = \sin(\pi t) + (1/2)\sin(2\pi t)$. Το βάθος είναι γνωστό και είναι $d=0.5$ (αυθαίρετες μονάδες). Για να βρούμε την θεωρητικά άγνωστη κατανομή $f(t)$ διακριτοποιούμε (με την βοήθεια του κώδικα) την εξίσωση

$$\int_0^1 \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{3/2}} f(t) dt = g(s), \quad 0 \leq s \leq 1.$$

Ο κώδικας του Hansen διακριτοποιεί την ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm A' είδους με την μέθοδο ολοκλήρωσης χρησιμοποιώντας τον κανόνα της μέσης τιμής και 120 σημεία και δημιουργεί ένα γραμμικό σύστημα $Ax = b$

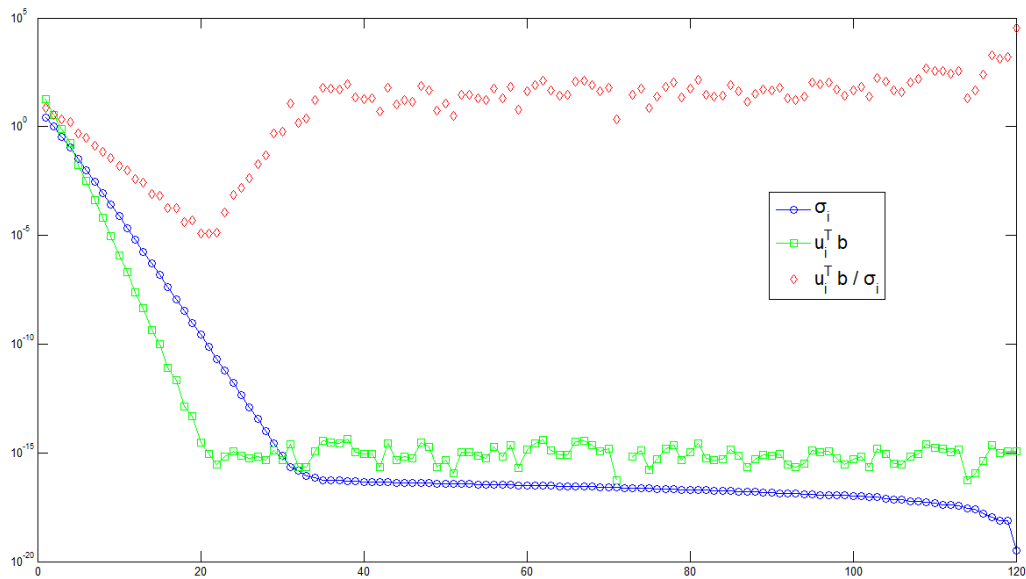
$$\sum_{j=1}^{\infty} \omega_j K(s_i, t_j) f_j = g(s_i), \quad i = 1, 2, \dots, 120.$$

Αρχικά το λύνουμε για δεδομένα που δεν περιέχουν θόρυβο. Αν κάνουμε την γραφική παράσταση των σημείων (t_i, x_i) όπου $x_i = f_i$ βλέπουμε ότι έχει την μορφή του σχήματος 6.2.



Σχήμα 6.2 Ακριβής λύση x^{exact} (πυκνότητα μάζας) του διακριτοποιημένου προβλήματος βαρύτητας χωρίς θόρυβο ($Ax^{exact} = b^{exact}$)

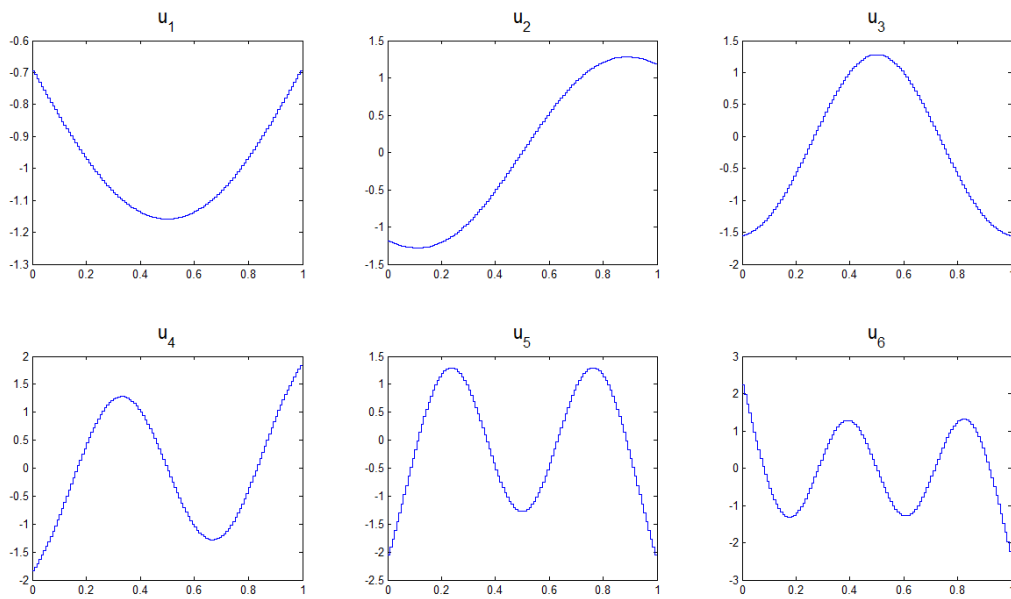
Το διάγραμμα Picard σε αυτή τη περίπτωση είναι



Σχήμα 6.3 Διάγραμμα Picard της λύσης x^{exact} του διακριτοποιημένου αδιατάρακτου προβλήματος βαρύτητας $Ax^{exact} = b^{exact}$. Οι ιδιάζουσες τιμές σ_i και οι σταθερές SVD $u_i^T b^{exact}$ σταθεροποιούνται από κάποιο σημείο και μετά εξαιτίας της πεπερασμένης αριθμητικής ακρίβειας του υπολογιστή.

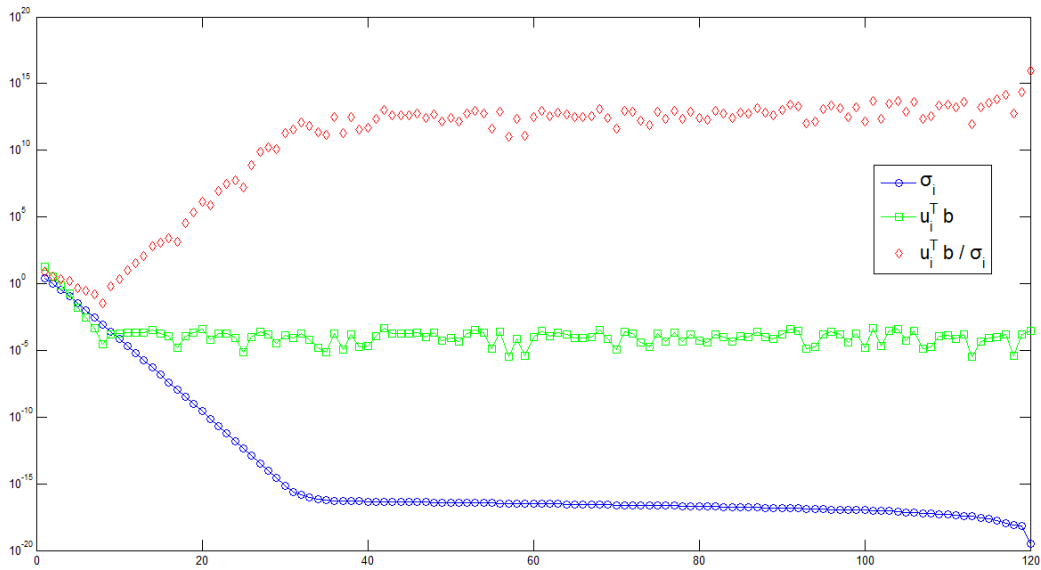
Από το διάγραμμα Picard της ακριβούς λύσης (πρόβλημα χωρίς θόρυβο) παρατηρούμε ότι οι σταθερές SVD $u_i^T b / \sigma_i$ φθίνουν περίπου μέχρι το $i = 21$. Παρατηρούμε επίσης ότι οι σταθερές $u_i^T b$ σταθεροποιούνται από ένα σημείο και μετά ($i = 21$) λόγω της πεπερασμένης ακρίβειας του υπολογιστή.

Ακόμη, έχουμε την δυνατότητα να σχεδιάσουμε τις προσεγγιστικές ιδιάζουσες συναρτήσεις u_i , οι οποίες εξαρτώνται αποκλειστικά από τον πίνακα A . Άρα θα είναι ίδιες και για εκδοχές του ίδιου προβλήματος (ίδιος πίνακας A) με θόρυβο (οποιοδήποτε είδους). Στο σχήμα 6.4 φαίνονται οι έξι πρώτες ιδιάζουσες συναρτήσεις. Λόγω της σχέσεως και της μικρής ακρίβειας των ιδιάζουσών τιμών με μεγάλο δείκτη i , οι αντίστοιχες ιδιάζουσες συναρτήσεις u_i και v_i είναι ανακριβείς.



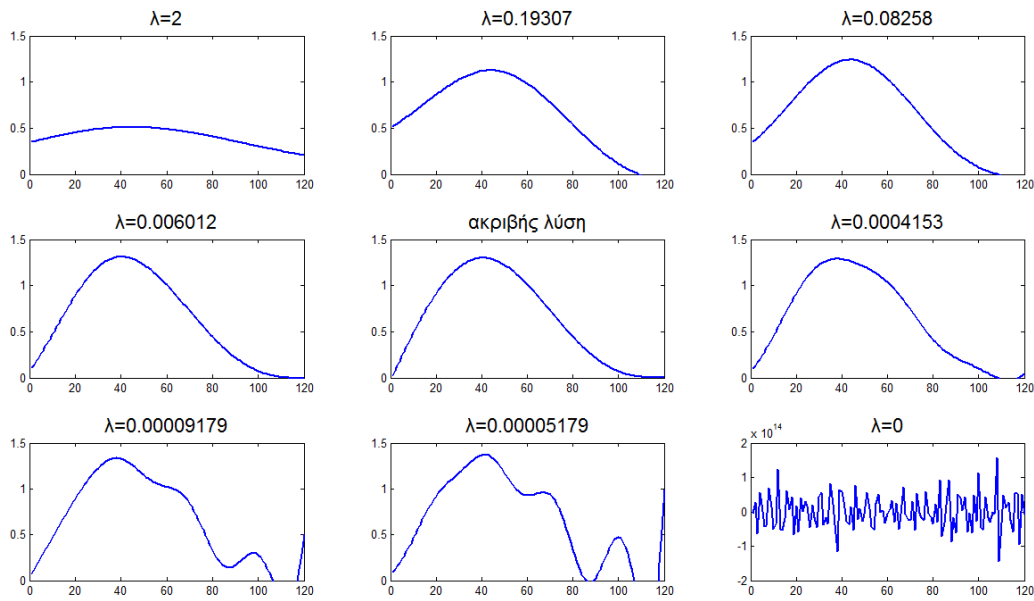
Σχήμα 6.4 Γραφικές παραστάσεις των πρώτων έξι αριστερών προσεγγιστικών ιδιοζουσών συναρτήσεων.

Ο δείκτης κατάστασης του πίνακα A είναι $cond(A) = 7.7075 \times 10^{19}$. Το μέγεθος του είναι πάρα πολύ μεγάλο. Το γεγονός αυτό μας εξηγεί ότι ο πίνακας A είναι μη καλά τοποθετημένος. Επομένως η προσθήκη θορύβου στην δεξιά πλευρά b όσο μικρός και να είναι, θα προκαλέσει σε μεγάλο βαθμό την αρχική λύση x^{exact} όπως θα φανεί πιο κάτω. Για να φανεί αυτό πιο καθαρά ας προσθέσουμε στην δεξιά πλευρά b λευκό θόρυβο e διασποράς $\eta = 10^{-4}$. Αν κάνουμε το διάγραμμα Picard παρατηρούμε ότι οι σταθερές $u_i^T b / \sigma_i$ σταματάνε την φθίνουσα πορεία τους νωρίτερα ($i \sim 10$) από τις αντίστοιχες σταθερές για b χωρίς λευκό θόρυβο.



Σχήμα 6.5 Διάγραμμα Picard της λύσης $x = A^{-1}b = u_i^T b / \sigma_i$ του διακριτοποιημένου αντίστροφου προβλήματος βαρύτητας. Οι ιδιάζουσες τιμές σ_i και οι σταθερές SVD $u_i^T b$ από ένα σημείο και μετά σταθεροποιούνται στο επίπεδο του λευκού θορύβου.

Η σύγκριση των δύο διαγραμμάτων Picard δείχνει ότι εξαιτίας του λευκού θορύβου χάνουμε τις ακριβείς σταθερές $u_i^T b^{exact} / \sigma_i$ για i από 10 έως 21 περίπου. Ας λύσουμε όμως το πρόβλημα με την μέθοδο Tikhonov για διάφορες τιμές της παραμέτρου λ , από δύο έως μηδέν. Η τιμή $\lambda = 0$ αντιστοιχεί στην λύση $x = A^{-1}b = \sum_{i=1}^n u_i^T b / \sigma_i$. Τα διαγράμματα των λύσεων που παίρνουμε για αυτές τις τιμές της παραμέτρου ομαλοποίησης λ παρουσιάζονται στο σχήμα 6.6.

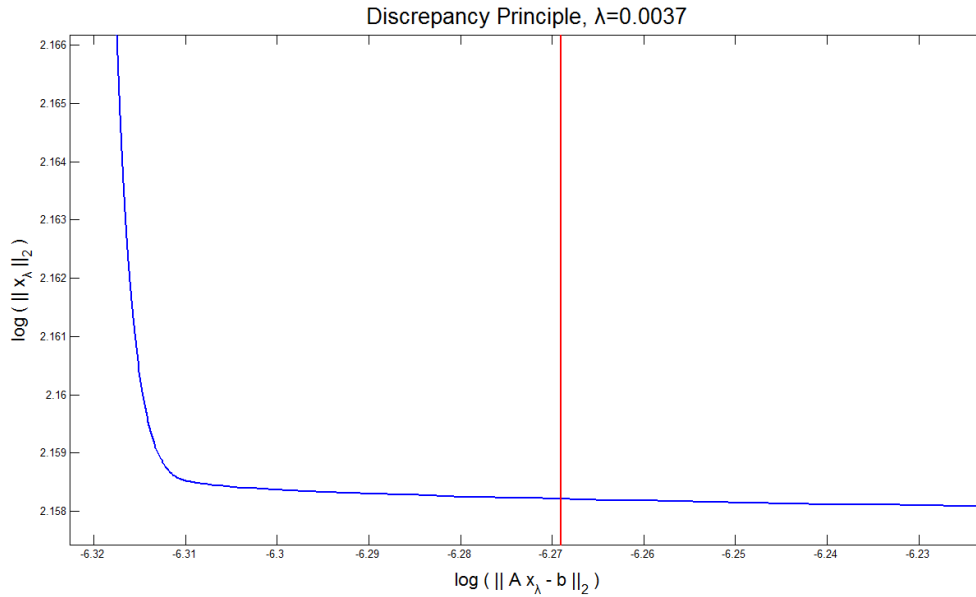


Σχήμα 6.6 Γραφικές παραστάσεις των λύσεων Tikhonov για διάφορες τιμές της παραμέτρου ομαλοποίησης λ . Με την μείωση της παραμέτρου λ η λύση Tikhonov του προβλήματος γίνεται όλο και λιγότερο ομαλή, διότι στην λύση περιλαμβάνονται όλο και περισσότερες σταθερές SVD $u_i^T b \approx u_i^T e$. Στο σχήμα φαίνονται επίσης η ακριβής λύση x^{exact} και οι δύο ακραίες περιπτώσεις, αυτή όπου έχουμε πολύ μεγάλη ομαλοποίηση ($\lambda = 2$) και αυτή για την οποία δεν έχουμε καθόλου ομαλοποίηση ($\lambda = 0$). Στην περίπτωση για $\lambda = 0$ στο άθροισμα SVD της λύσης περιλαμβάνονται όλοι οι όροι $u_i^T b \approx u_i^T e$, εξαιτίας των οποίων η λύση γίνεται ασταθής.

Από το διάγραμμα των λύσεων Tikhonov φαίνεται ότι καθώς η τιμή λ αυξάνεται τόσο πιο ομαλοποιημένη είναι η λύση. Παρατηρούμε υπερβολική ομαλοποίηση για $\lambda = 2$ και καθόλου ομαλοποίηση για $\lambda = 0$. Ακόμη παρατηρούμε ότι για $\lambda \approx 0.006012$ η λύση Tikhonov προσεγγίζει την ακριβή λύση x^{exact} .

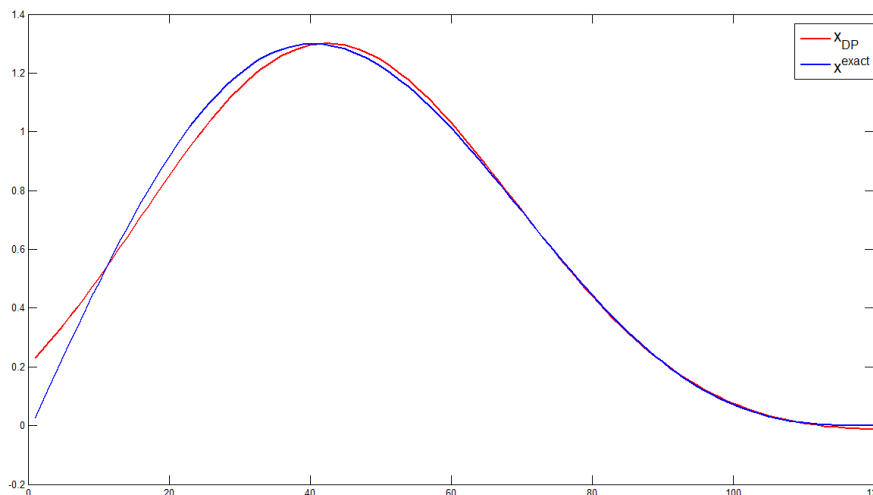
Στην συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε κάποια από τις γνωστές μεθόδους για την εύρεση του καταλληλότερου παράγοντα ομαλοποίησης διότι όπως έχει επισημανθεί και προηγουμένως στα «πραγματικά» προβλήματα δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων η ακριβής λύση τους, και δεν έχουμε την ευχέρεια να λύνουμε το πρόβλημα δοκιμάζοντας τυχαία διαφορετικές τιμές λ .

Αρχικά θα χρησιμοποιήσουμε την Discrepancy Principle για την εύρεση του βέλτιστου λ . Εκτελώντας αλγόριθμο της Discrepancy Principle παίρνουμε το διάγραμμα του σχήματος 6.7.



Σχήμα 6.7 *Discrepancy Principle*. Στο διάγραμμα φαίνεται η μεταβατική περιοχή της *L-curve* και η τομή της με την ευθεία $\log(\|Ax_\lambda - b\|_2) = \|e\|_2$. Η παράμετρος ομαλοποίησης του σημείου τομής τους είναι σύμφωνα με την μέθοδο η βέλτιστη παράμετρος ομαλοποίησης ($\lambda_{DP} = 0.0037$).

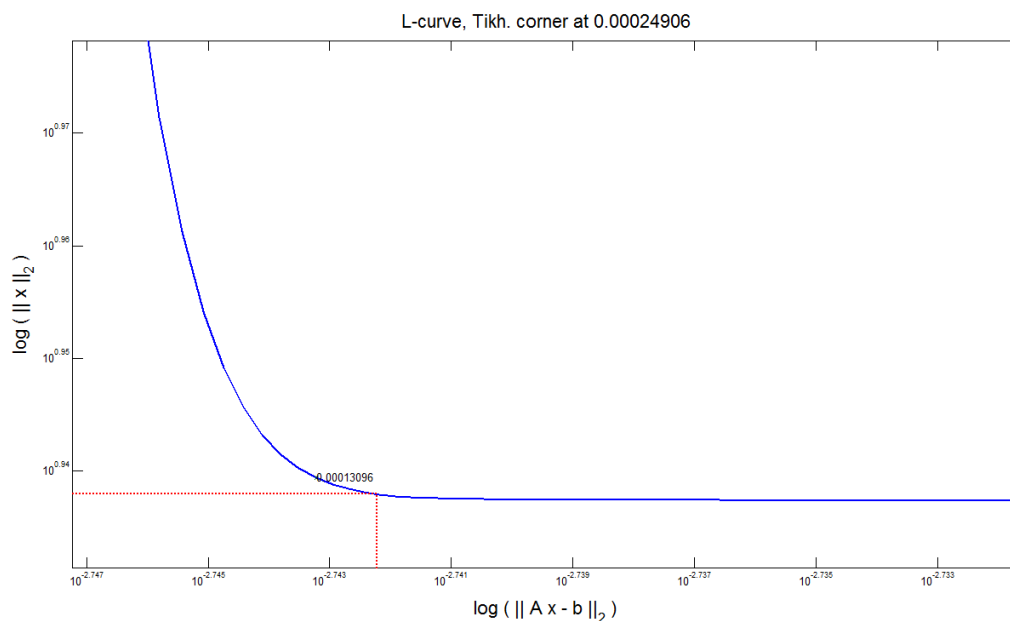
Λύνοντας το διακριτοποιημένο πρόβλημα της βαρύτητας με την μέθοδο Tikhonov για $\lambda_{DP} = 0.0037$ παίρνουμε την γραφική παράσταση της λύσης Tikhonov x_{DP} που φαίνεται στο σχήμα 6.8 (όπου φαίνεται και η ακριβής λύση με μπλέ χρώμα).



Σχήμα 6.8 Γραφική παράσταση της λύσης x^{exact} του αδιατάραχτου διακριτοποιημένου προβλήματος της βαρύτητας και της λύσης Tikhonov x_{DP} του διακριτοποιημένου προβλήματος με λευκό θόρυβο για $\lambda_{DP} = 0.0037$.

Βλέπουμε ότι η προσέγγισή μας είναι αρκετά ικανοποιητική. Ας προχωρήσουμε όμως και στον υπολογισμό με την μέθοδο Tikhonov της λύσης του προβλήματος της βαρύτητας με παραμέτρους κανονικοποίησης που προσδιορίζονται με την βοήθεια του κριτηρίου-L και της Generalized Cross Validation.

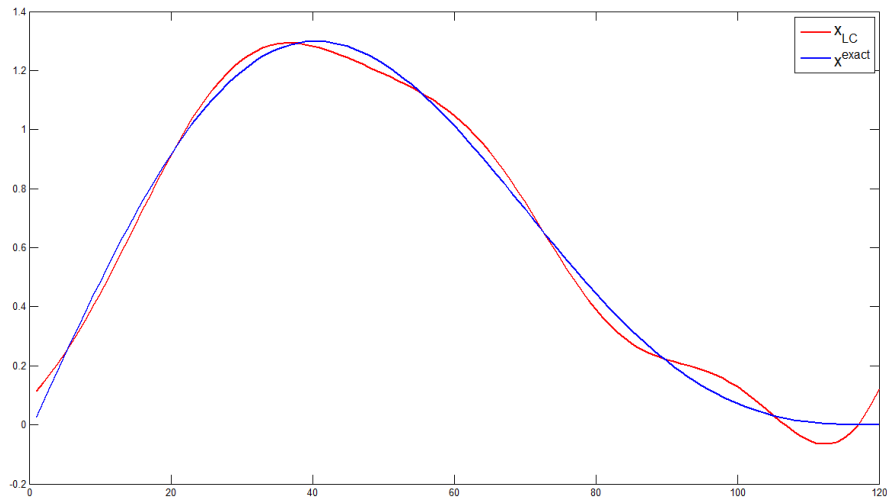
Εκτελώντας τον αλγόριθμο του κριτηρίου-L παίρνουμε $\lambda_L = 0.00024906$ και το διάγραμμα που φαίνεται στο σχήμα 6.8.



Σχήμα 6.8 Κριτήριο-L. Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο η βέλτιστη παράμετρος ομαλοποίησης είναι αυτή του σημείου της καμπύλης-L με την μεγαλύτερη καμπυλότητα ($\lambda_L = 0.00024906$).

Παρατηρούμε ότι σε αντίθεση με όσα είχαμε πει για την μέθοδο-L στο προηγούμενο κεφάλαιο το λ_L δεν αντιστοιχεί στο σημείο της καμπύλης-L με την μεγαλύτερη καμπυλότητα. Γενικά αυτή την μέθοδο αν την εκτελέσουμε διαδοχικά, μας δίνει διαφορετικά αποτελέσματα, συνήθως ίδιας τάξης μεγέθους, που δεν αντιστοιχούν τα περισσότερα στο σημείο της καμπύλης με την μεγαλύτερη καμπυλότητα. Παρουσιάζει στατιστικές διακυμάνσεις.

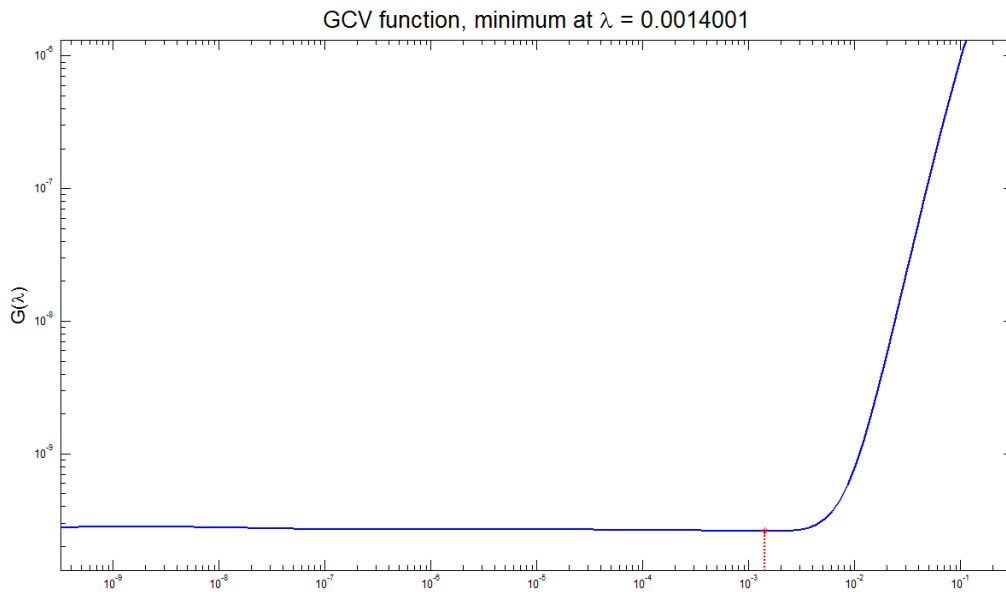
Λύνοντας το πρόβλημα με την μέθοδο Tikhonov για $\lambda = \lambda_L$ παίρνουμε την παρακάτω γραφική παράσταση (σχήμα 6.9).



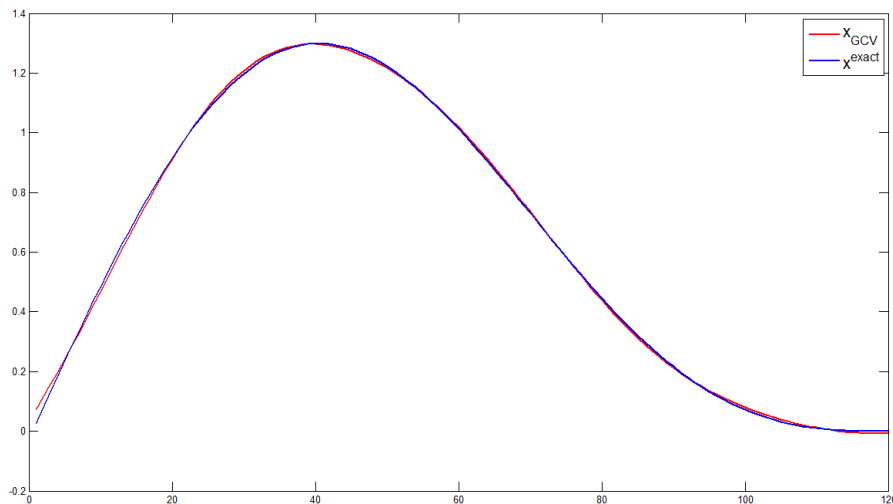
Σχήμα 6.9 Γραφική παράσταση της λύσης x^{exact} του αδιατάραχτου διακριτοποιημένου προβλήματος της βαρύτητας και της λύσης Tikhonov x_{LC} του διακριτοποιημένου προβλήματος με λευκό θόρυβο για $\lambda_L = 0.00024906$.

Βλέπουμε ότι η λύση $x_{L\ curve}$ που βρήκαμε (κόκκινο χρώμα) δεν προσεγγίζει πολύ ικανοποιητικά την ακριβή λύση x^{exact} .

Παρομοίως, λύνοντας το πρόβλημα με παράγοντα κανονικοποίησης που προκύπτει με την μέθοδο GCV παίρνουμε $\lambda_{GCV} = 0.0014001$ που αντιστοιχεί στο σημείο που φαίνεται στο διαγράμματα του σχήματος 6.9, ενώ οι γραφικές παραστάσεις της λύσης Tikhonov x_{GCV} για $\lambda = \lambda_{GCV}$ μαζί με αυτό της x^{exact} φαίνονται στο σχήμα 6.10.



Σχήμα 6.10 Μέθοδος GCV. Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο βέλτιστος παράγοντας ομαλοποίησης είναι αυτός για τον οποίο η συνάρτηση $G(\lambda)$ έχει ελάχιστο. Θεωρητικά το ελάχιστο πρέπει να αντιστοιχεί περίπου στο μέσον της μεταβατικής περιοχής.



Σχήμα 6.11 Γραφική παράσταση της λύσης x^{exact} του αδιατάραχτου διακριτοποιημένου προβλήματος της βαρύτητας και της λύσης Tikhonov x_{GCV} του διακριτοποιημένου προβλήματος με λευκό θόρυβο για $\lambda_{GCV} = 0.0014001$.

Από το πρώτο διάγραμμα φαίνεται ότι ο παράγοντας ομαλοποίησης λ_{GCV} δεν αντιστοιχεί ακριβώς στο μέσο της μεταβατικής περιοχής όπως υποθέσαμε θεωρητικά

στο πέμπτο κεφάλαιο, και εμφανίζει στατιστικές διακυμάνσεις σε διαδοχικές εκτελέσεις της μεθόδου GCV, όπως και η μέθοδος-L. Από το σχήμα 6.11 φαίνεται ότι με την μέθοδο GCV πετύχαμε την καλύτερη προσέγγιση της x^{exact} . Εξάλλου, αυτό φαίνεται αν συγκρίνουμε το σχετικό σφάλμα της λύσης Tikhonov που βρήκαμε με παράγοντα ομαλοποίησης με κάθε μία από τις Discrepancy Principle, L-Curve Method και GCV.

$$\begin{cases} \|x_{DP} - x^{exact}\|_2 / \|x^{exact}\|_2 = 0.0144 \\ \|x_L - x^{exact}\|_2 / \|x^{exact}\|_2 = 0.0501 \\ \|x_{GCV} - x^{exact}\|_2 / \|x^{exact}\|_2 = 0.0121 \end{cases}$$

Από τα παραπάνω σχετικά σφάλματα επιβεβαιώνεται ότι η μέθοδος Tikhonov με παράγοντα ομαλοποίησης $\lambda = \lambda_{GCV}$ μας έδωσε την καλύτερη λύση. Ακολουθεί με μικρή διαφορά η λύση Tikhonov με $\lambda = \lambda_{DP}$ και τελευταία η λύση Tikhonov με $\lambda = \lambda_L$.

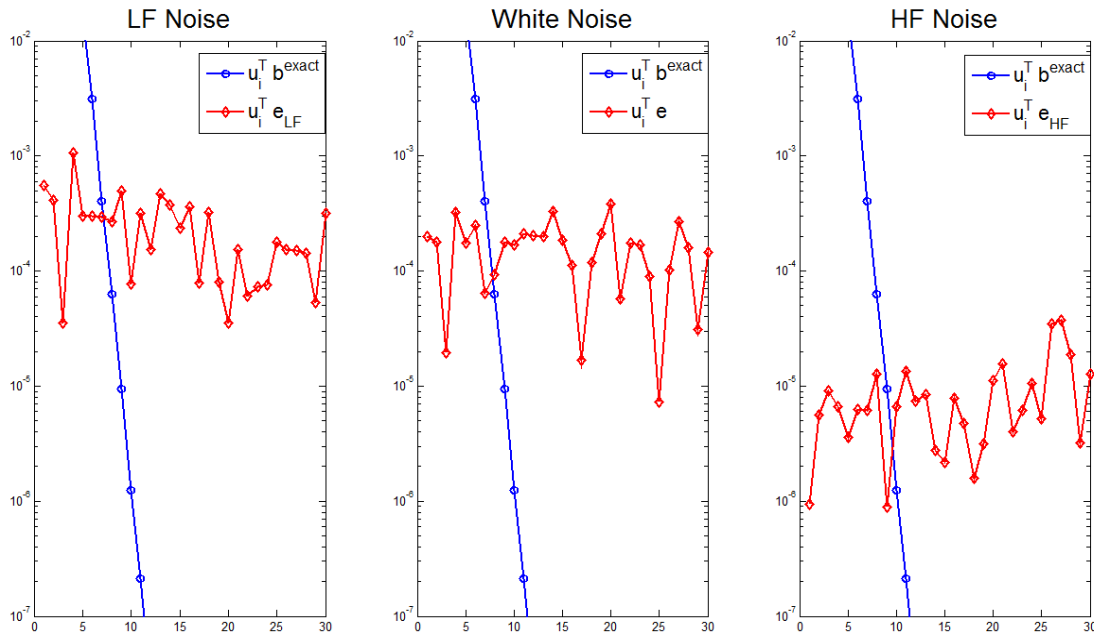
Το ότι η μέθοδος GCV μας έδωσε τον παράγοντα ομαλοποίησης που μας οδήγησε στην βέλτιστη λύση δεν σημαίνει ότι ισχύει για κάθε πρόβλημα. Σε κάποιο άλλο πρόβλημα μπορεί κάποια από τις υπόλοιπες δύο μεθόδους εύρεσης του βέλτιστου λ να μας οδηγήσει στην καλύτερη λύση. Αυτό εξαρτάται κάθε φορά από το πρόβλημα που έχουμε να αντιμετωπίσουμε.

Στα περισσότερα προβλήματα δεν είμαστε σίγουροι ποιά από τις τρεις μεθόδους θα μας δώσει τον καλύτερο παράγοντα ομαλοποίησης γιατί δεν γνωρίζουμε εκ των προτέρων το x^{exact} .

Επίσης θα πρέπει να επισημανθεί ότι στο παράδειγμα της βαρύτητας η Discrepancy Principle μας έδωσε ακριβή αποτελέσματα γιατί γνωρίζαμε εκ των προτέρων τα πάντα για τον λευκό θόρυβο (διασπορά και νόρμα του θορύβου). Αυτό στις περισσότερες εφαρμογές δεν συμβαίνει.

Μέχρι τώρα μελετήσαμε το πρόβλημα της βαρύτητας χωρίς θόρυβο και με λευκό θόρυβο. Όπως έχει αναφερθεί και σε προηγούμενο κεφάλαιο υπάρχουν και άλλα είδη θορύβου που μπορούμε να συναντήσουμε σε εφαρμογές. Δύο από αυτά είναι ο θόρυβος υψηλών συχνοτήτων (high frequency noise) και ο θόρυβος χαμηλών συχνοτήτων (low frequency noise).

Στον θόρυβο υψηλών συχνοτήτων ο θόρυβος αυξάνεται με την αύξηση του δείκτη i , ενώ στον θόρυβο χαμηλών συχνοτήτων ο θόρυβος αυξάνεται με την μείωση του i . Σε αυτό το σημείο εύκολα μπορεί να αναρωτηθεί κανείς αν τα διαφορετικά είδη θορύβου επηρεάζουν την λύση που παίρνουμε για το πρόβλημα. Σχεδιάζοντας το διάγραμμα $u_i^T b^{exact}$ του αδιατάραχτου προβλήματος βαρύτητας την προσθήκη σε αυτό τριών διαφορετικών ειδών θορύβου, λευκό θόρυβο, θόρυβο χαμηλών συχνοτήτων, και θόρυβο υψηλών συχνοτήτων, παρατηρούμε ότι όταν έχουμε θόρυβο υψηλών συχνοτήτων έχουμε περισσότερες σταθερές ακρίβειας $u_i^T b^{exact}$ σε σχέση με την περίπτωση του λευκού θορύβου, ενώ αντίθετα για θόρυβο χαμηλών συχνοτήτων έχουμε λιγότερες σταθερές που είναι πάνω από το επίπεδο του θορύβου.



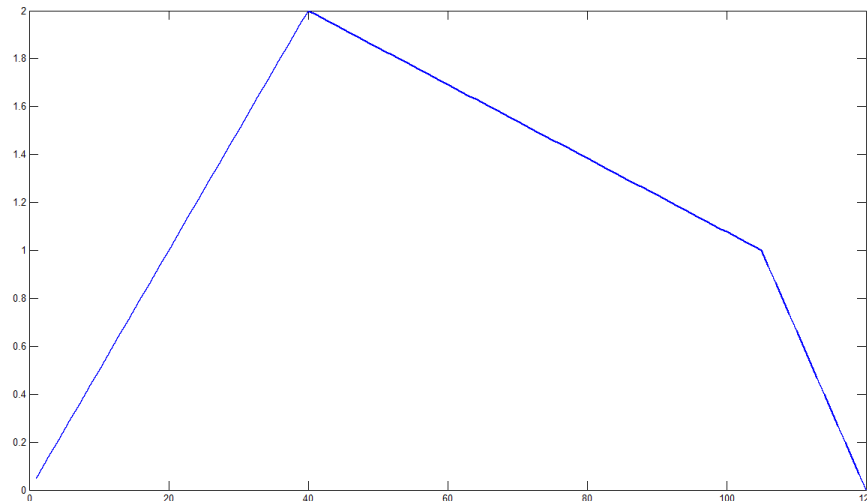
Σχήμα 6.12 Διαγράμματα σταθερών SVD $u_i^T b^{exact}$ της ακριβούς λύσης x^{exact} και των θορύβων για θόρυβο χαμηλών συχνοτήτων ($u_i^T e_{LF}$), λευκό θόρυβο ($u_i^T e$) και θόρυβο υψηλών συχνοτήτων ($u_i^T e_{HF}$) αντίστοιχα. Όταν υπάρχει θόρυβος χαμηλών συχνοτήτων στα δεδομένα «χάνουμε» περισσότερες ακριβείς σταθερές SVD $u_i^T b^{exact}$ σε σχέση με την περίπτωση του λευκού θορύβου. Αντίθετα όταν υπάρχει θόρυβος υψηλών συχνοτήτων «κερδίζουμε» περισσότερες ακριβείς σταθερές SVD $u_i^T b^{exact}$ σε σχέση με την περίπτωση του λευκού θορύβου και του θορύβου χαμηλών συχνοτήτων.

Αυτό έχει σαν συνέπεια να είναι δύσκολη και πολλές φορές αδύνατη η χρησιμοποίηση των μεθόδων ομαλοποίησης λόγω της δυσκολίας να ξεχωρίσουμε τον θόρυβο από το ακριβές «σήμα» $u_i^T b^{exact}$. Για παράδειγμα αν στο πρόβλημα μας έχουμε θόρυβο χαμηλών συχνοτήτων και θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο TSVD τότε το πιθανότερο είναι να πάρουμε παράγοντα ομαλοποίησης κ πολύ μικρότερο από όσο πρέπει με αποτέλεσμα να μην πάρουμε την σωστή λύση (που προσεγγίζει καλύτερα την x^{exact}). Πολλές φορές τυχαίνει οι σταθερές $u_i^T b^{exact}$ να είναι τόσο κοντά με τον LF θόρυβο που ενώ να νομίζουμε ότι δεν υπάρχει θόρυβος περιλαμβάνοντας πολλές $u_i^T b (= u_i^T b^{exact} + u_i^T e)$ σταθερές στην λύση TSVD, και ενώ περιμένουμε η λύση να είναι κοντά στην ακριβή λύση του προβλήματος, τελικά να πάρουμε μία λύση που να απέχει πάρα πολύ από αυτή.

Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούμε την τεχνική του Prewhitening, για να φτάσουμε σε ένα ισοδύναμο πρόβλημα που ο οποιοδήποτε είδος θορύβου θα έχει μετατραπεί σε λευκό, ώστε περισσότερες σταθερές $u_i^T b^{exact}$ να είναι διακριτές από

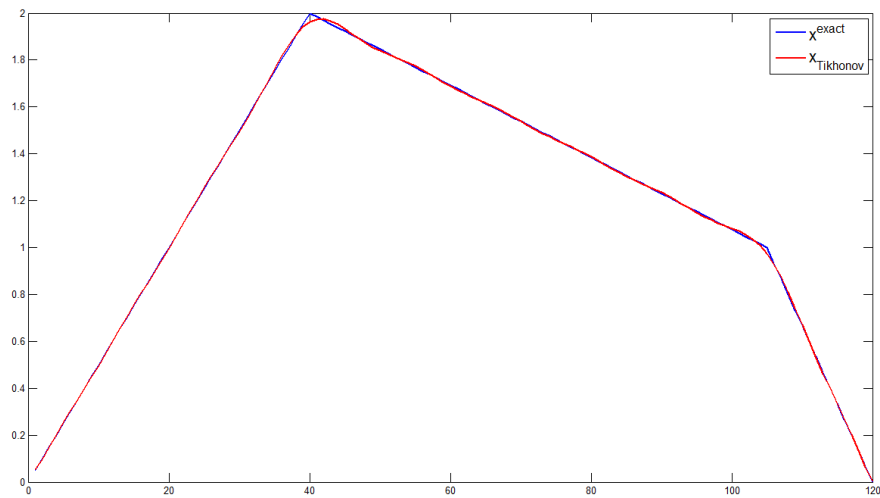
τον θόρυβο, με αποτέλεσμα να είναι ορθότερη η επιλογή του βέλτιστου παράγοντα ομαλοποίησης.

Τέλος ας θεωρήσουμε μια διαφορετική πυκνότητα μάζας, μία με καμπύλη που δεν είναι λεία, όπως αυτή του επόμενου σχήματος.



Σχήμα 6.13 Πυκνότητα μάζας του προβλήματος βαρύτητας με καμπύλη που δεν είναι λεία σε όλα τα σημεία.

Αν λύσουμε το πρόβλημα βαρύτητας με την μέθοδο Tikhonov προσθέτοντας λευκό θόρυβο e διασποράς $\eta = 10^{-5}$ στην δεξιά πλευρά b^{exact} , με σχετικό μέγεθος $\|e\|_2/\|b^{exact}\|_2 = 10^{-6}$, παίρνουμε λύση η οποία παρόλο που έχει μικρό σχετικό σφάλμα, δεν είναι δυνατόν να μας δώσει τις «γωνίες» της x^{exact} (σχήμα 6.14). Αυτό το μειονέκτημα το έχει και η μέθοδος TSVD και η SSVD. Αυτό ισχύει και για κάθε τιμή του λόγου $\|e\|_2/\|b^{exact}\|_2$ ακόμα και για την τιμή μηδέν (αδιατάραχτο πρόβλημα βαρύτητας).



Σχήμα 6.14 Γραφική παράσταση της ακριβούς λύσης x^{exact} και της λύσης Tikhonov που υπολογίστηκε με παράγοντα ομαλοποίησης που προέκυψε από την μέθοδο GCV, του διακριτοποιημένου προβλήματος βαρύτητας. Η λύση Tikhonov δεν αποτυπώνει με μεγάλη σαφήνεια τα σημεία της x^{exact} που αυτή δεν είναι λεία. Αυτό είναι ένα σοβαρό μειονέκτημα της μεθόδου Tikhonov, όπως και της μεθόδου TSVD.

Βιβλιογραφία

1. P. Hansen, *Discrete Inverse Problems-Insight and Algorithms*, SIAM
2. Ν.Καδιανάκης & Σ.Καρανάσιος, *Γραμμική Άλγεβρα και Εφαρμογές*, Τομέας Μαθηματικών ΣΕΜΦΕ
3. A.Kirsch, *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*, Springer-Verlag
4. Γ.Παπαγεωργίου, Χ.Τσίτουρας, *Αριθμητική Ανάλυση με εφαρμογές σε Matlab και Mathematica (4^η έκδοση)*, ΣΥΜΕΩΝ
5. R.Kress, *Linear Integral Equations (2nd edition)*, Springer
6. D. Wright, *Introduction to Linear Algebra*, McGraw-Hill