1 Lineaariset inversio–ongelmat

Tässä luvussa tarkastellaan yleisesti lineaarisia inversio–ongelmia. Lähtökohtana on, että esimerkiksi mittaamalla on saatu dataa, joka riippuu lineaarisesti suureesta, josta ollaan kiinnostuneita. Mikäli ongelma on täysin diskretoitu, merkitsee inversio–ongelman ratkaiseminen lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisemista. Yleisemmin voimme olettaa selvitettävän ja mitattavan suureen välille lineaarisen operaattorin (yleensä integraalioperaattorin), joka tulee kääntää. Kuten johdannossa mainittiin, ongelma on käytännössä usein vaikea ratkaista johtuen sen häiriöalttiudesta sekä mitatun datan kohinaisuudesta.

Tässä luvussa käytetään seuraavia merkintöjä. Reaaliset vektorit tulkitaan pystyvektoreiksi,

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Vastaavaa vaakavektoria merkitään transpoosilla, siis esimerkiksi

$$x^T = (x_1, x_2, \ldots, x_n).$$

Vektoreiden pistetulolle käytetään matriisimerkintää, siis

$$x^T y = \sum_{i=1}^{n} x_n y_n, \quad x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Vektorin normi $\|x\|$ tarkoittaa tavallista euklidista normia, siis $\|x\| = (x^T x)^{1/2}$. Matriiseja merkitään isoilla kirjaimilla, esimerkiksi A, B. Niiden transpoosia merkitään A^T, B^T. Merkintä $\mathbf{1}_n$ tarkoittaa $n \times n$–yksikkömatriisia. Vastaavasti $\mathbf{0}_{m\times n}$ tarkoittaa $m \times n$–nollamatriisia.

1.1 Huonosti asetetut matriisiyhtälöt

Tarkastellaan aluksi äärellisulotteisia inversio–ongelmia. Tavoitteena on yksinkertaisesti ratkaista yhtälö

$$Ax = y, \tag{1}$$

missä $x \in \mathbb{R}^n$ on tuntematon vektori, $y \in \mathbb{R}^m$ on mahdollisesti mittausvirhettä sisältävä datavektori, ja $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ on tunnetuksi oletettu matriisi. Tyyppiä (1) olevien yhtälöiden ratkaisemisessa kohdataan kolmentyyppisiä vaikeuksia, joiden yhteydessä ongelmaa kutsutaan *huonosti asetetuksi (engl. ill–posed)*:

1. Vektori y ei kuulu A:n kuvajoukkoon, $y \notin \mathrm{Im}(A)$, jolloin yhtälön (1) tarkasti toteuttavaa vektoria x ei voi olla olemassa.

2. Matriisilla A on epätriviaali nolla–avaruus, $\mathrm{Ker}(A) \neq \{0\}$, jolloin mahdollinen ratkaisu x ei ole yksikäsitteinen.

3. Matriisilla A on hyvin suuri häiriöalttius, jolloin pienetkin virheet datassa y saattavat välittyä suunnattomina virheinä mahdolliseen ratkaisuun x.

Ongelmat 1 ja 2 voidaan yleensä kiertää etsimällä tarkan ratkaisun sijasta ns. *yleistettyä eli pseudoratkaisua.* Ongelman 3 ratkaisemiseksi matriisi A joudutaan *regularisoimaan.*

Käydään aluksi läpi yleistettyjen ratkaisujen periaate ilman regularisointia, joka liitetään analyysiin mukaan myöhemmin. Annetaan seuraava yksinkertainen määritelmä.

Määritelmä 1.1 *Olkoot $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ ja $y \in \mathbb{R}^m$. Vektoria $x \in \mathbb{R}^n$ kutsutaan yhtälön $Ax = y$* pienimmän neliösumman ratkaisuksi, *mikäli*

$$\|Ax - y\| = \inf\{\|Az - y\| \mid z \in \mathbb{R}^n\}.$$

Pienimmän neliösumman ratkaisua x sanotaan puolestaan miniminormiratkaisuksi, *mikäli*

$$\|x\| = \inf\{\|z\| \mid z \text{ on pienimmän neliösumman ratkaisu}\}.$$

Pienimmän neliösumman ratkaisu on siis vektori, jotka approksimoi datavektoria normin mielessä mahdollisimman hyvin. Miniminormiratkaisu on näistä se, joka on normiltaan pienin.

Johdetaan nyt laskennallinen lauseke miniminormiratkaisulle käyttämällä matriisin A *singulaariarvohajotelmaa.* Liitteeseen 1 on kerätty perusasioita matriisilaskennasta, ja mm. singulaariarvohajotelman olemassaolo on siellä todistettu. Peruslähtökohtana on matriisin A esitys tulomuodossa

$$A = UDV^T,$$

missä $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ja $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ovat ortogonaalisia matriiseja, s.o.,

$$UU^T = U^TU = \mathbf{1}_m, \quad VV^T = V^TV = \mathbf{1}_n,$$

ja matriisi $D \in \mathbb{R}^{m\times n}$ on diagonaalinen. Mikäli $m \geq n$, on D siis muotoa

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & \dots & d_n \\ & & & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{diag}(d_1, \dots, d_n) \\ \mathbf{0}_{(m-n)\times n} \end{pmatrix},$$

kun taas tapauksessa $m < n$ on

$$D = (\mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_m), \mathbf{0}_{m\times(n-m)}).$$

Diagonaalielementit d_j ovat ei–negatiivisia, ja oletamme niiden olevan järjestetty laskevaan järjestykseen,

$$d_1 \geq d_2 \geq \ldots \geq d_{\min(m,n)} \geq 0.$$

Olkoon r suurin indeksi, jolla vastaava singulaariarvo on positiivinen,

$$r = \max\{j \mid 1 \leq j \leq \min(m,n),\ d_j > 0\}. \tag{2}$$

Todistetaan seuraava perustulos.

Lause 1.1 *Yhtälön $Ax = y$ miniminormiratkaisu saadaan kaavalla*

$$A^+ y = V D^+ U^T y,$$

missä matriisi D^+ määritellään kaavalla

$$D^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{d_1} & 0 & \ldots & 0 & & \ldots & 0 \\ 0 & \frac{1}{d_2} & & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & & & \\ & & & \frac{1}{d_r} & & & \\ & & & & 0 & & \\ \vdots & & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & & & & \ldots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times m}.$$

Matriisia A^+ sanotaan A:n *pseudoinverssiksi* tai *Moore–Penrose–inverssiksi.*

Todistus: Olkoon $x \in \mathbb{R}^n$ mielivaltainen. Koska matriisi V on ortogonaalinen, muodostavat sen sarakkeet $\mathbb{R}^n$:n ortonormaalin kannan. Merkitään näitä sarakkeita $v^{(1)}, \ldots, v^{(n)}$. Voimme nyt kirjoittaa

$$x = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j v^{(j)}, \quad \alpha_j \in \mathbb{R}, \tag{3}$$

tai lyhyemmin matriisinotaatiolla

$$x = V\alpha.$$

Tarkastellaan lauseketta $\|Ax - y\|$. Sijoittamalla A:n singulaariarvohajotelma sekä käyttämällä tietoa, että ortogonaalimatriisi säilyttää normin (todistus harjoitustehtävä), pätee

$$\|Ax - y\| = \|UDV^T x - y\| = \|U(DV^T x - U^T y)\| = \|DV^T x - y'\|,$$

missä $y' = U^T y = (y'_1, \ldots, y'_m)^T$. Sijoittamalla edelleen x:n esitys (3) kannassa $\{v^{(j)}\}$ todetaan, että

$$\begin{aligned}\|DV^T x - y'\|^2 &= \sum_{j=1}^{\min(m,n)} (d_j \alpha_j - y'_j)^2 + \sum_{\min(m,n)+1}^{m} {y'_j}^2 \\ &= \sum_{j=1}^{r} (d_j \alpha_j - y'_j)^2 + \sum_{j=r+1}^{m} {y'_j}^2.\end{aligned}$$

Tämä lauseke saavuttaa miniminsä, kun

$$d_j \alpha_j - y'_j = 0, \quad 1 \le j \le r.$$

Siis pienimmän neliösumman ratkaisut ovat muotoa

$$x = \sum_{j=1}^{r} \frac{y'_j}{d_j} v^{(j)} + \sum_{j=r+1}^{n} \alpha_j v^{(j)}.$$

Edelleen vektoreiden $v^{(j)}$ ortonormaalisuudesta seuraa, että pienimmän neliösumman ratkaisuille on voimassa

$$\|x\|^2 = \sum_{j=1}^{r} \left(\frac{y'_j}{d_j}\right)^2 + \sum_{j=r+1}^{n} \alpha_j^2.$$

Siis miniminormiratkaisu on se x, jolle $\alpha_j = 0$, $r+1 \le j \le n$. Kirjoittamalla x matriisimuotoon saadaan

$$x = \sum_{j=1}^{r} \frac{y'_j}{d_j} v^{(j)} = V \begin{pmatrix} \frac{y'_1}{d_1} \\ \frac{y'_2}{d_2} \\ \vdots \\ \frac{y'_r}{d_r} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = VD^+ y' = VD^+ U^T y,$$

kuten väitettiin. □

Edellisen lauseen todistuksesta näemme, että pienimmän neliösumman ratkaisu on yksikäsitteinen täsmälleen silloin, kun $n \le r$. Erityisesti siis yhtälöryhmä $Ax = y$ ei saa olla alimäärätty, eli on oltava $m \ge n$. Lisäksi matriisin A kuvajoukon dimension on oltava n, s.o. $\operatorname{rank}(A) = n$. Tämä on ekvivalenttia sen kanssa, että A:n sarakkeet ovat lineaarisesti riippumattomia. Näiden seikkojen päätteleminen on jätetty harjoitustehtäväksi.

Mainitaan lopuksi, että singulaariarvohajotelmaa käyttäen voidaan osoittaa pseudoinverssin A^+ toteuttavan ns. Moore–Penrose–yhtälöt:

$$\begin{aligned} A^+AA^+ &= A^+, \\ AA^+A &= A, \\ (A^+A)^T &= A^+A, \\ (AA^+)^T &= AA^+. \end{aligned} \tag{4}$$

Nämä yhtälöt karakterisoivat matriisin A^+ täysin. Mainitaan vielä, että matriiseilla A^+A ja AA^+ on selkeä geometrinen tulkinta ortogonaalisina projektioina,

$$\begin{aligned} A^+A : \mathbb{R}^n &\to \mathrm{Ker}(A)^\perp, \\ AA^+ : \mathbb{R}^m &\to \mathrm{Im}(A). \end{aligned} \tag{5}$$

Tässä merkintä $\mathrm{Ker}(A)^\perp$ tarkoittaa A:n ytimen kohtisuoraa komplementtia. Näiden ominaisuuksien toteaminen jätetään niinikään harjoitustehtäväksi.

Siirrytään nyt tarkastelemaan kysymystä psudoinverssimatriisin stabiilisuudesta. Tätä kysymystä on helpoin valottaa esimerkillä.

Esimerkki Olkoon f välillä $[0, \infty)$ määritelty funktio. Funktion f *Laplace–muunnos* $\mathcal{L}f$ määritellään integraalina

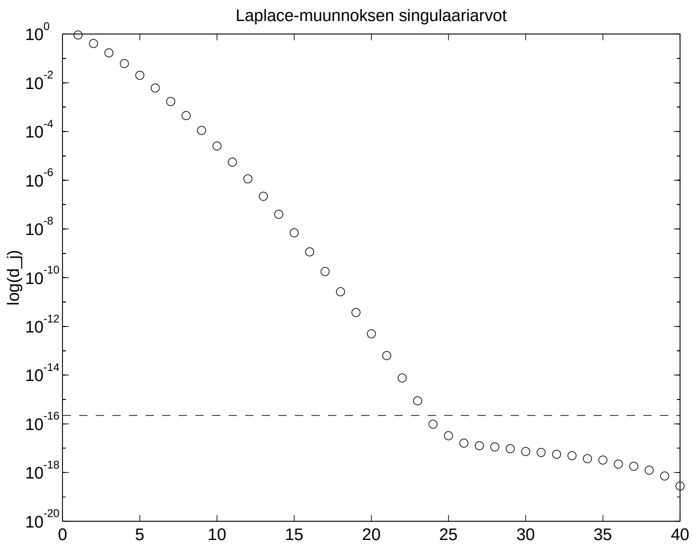
$$\mathcal{L}f(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt,$$

olettaen, että kyseinen integraali suppenee. Oletetaan, että funktiota f halutaan estimoida, kun sen Laplace–muunnoksen arvo on tunnettu näytepisteissä s_j, $0 < s_1 < \ldots < s_n$. Tätä varten approksimoidaan integraalia diskreetillä summalla,

$$\int_0^\infty e^{-s_j t} f(t) dt \approx \sum_{k=1}^m w_k e^{-s_j t_k} f(t_k).$$

Tässä approksimaatiossa painot w_k ja diskretointipisteet t_k voivat olla valittu millä tahansa kvadratuurimenetelmällä (Gaussin kvadratuuri, Simpsonin sääntö, trapetsoidisääntö, ...). Merkitään nyt $x_k = f(t_k)$, $y_j = \mathcal{L}f(s_j)$ ja $a_{j,k} = w_k e^{-s_j t_k}$, jolloin diskreetti approksimaatio on muotoa (1). Lasketaan matriisin A singulaariarvot. Tätä varten valitaan pisteet s_j, $1 \leq j \leq 50$ tasavälisesti 0.2:n välein väliltä $[0.2, 10]$. Pisteet t_k, $1 \leq k \leq 40$ valitaan väliltä $(0, 5)$ käyttämällä Gaussin kvadratuurisääntöä. Matriisi A on siten 50×40–matriisi. Kuvassa 1 on esitetty matriisin A singulaariarvot.

Kuvaan on merkitty katkoviivalla koneen laskentatarkkuus, joten on selvää, että tämän rajan alittavat luvut ovat pelkkää numeerista kohinaa. Tämä näkyy



Kuva 1. Matriisin $a_{j,k} = w_k e^{-s_j t_k}$ singulaariarvot. Katkoviiva merkitsee koneen laskentatarkkuutta.

laskettaessa matriisin A pseudoinverssiä. Lasketaan A^+ aluksi katsomatta singulaariarvojen suuruutta, s.o. tulkitaan kaikki singulaariarvot positiivisiksi. Sovelletaan sitten pseudoinverssiä funktion f Laplace–muunnokseen, kun

$$f(t) = \begin{cases} t, & \text{kun } 0 \leq t < 1, \\ -\frac{1}{2}t + \frac{3}{2}, & \text{kun } 1 \leq t < 3, \\ 0, & \text{kun } 3 \leq t, \end{cases}$$

jolloin Laplace–muunnos voidaan laskea analyyttisesti. Kuvassa 2 on mainittu funktio sekä sen analyyttisesti laskettu Laplace–muunnos.

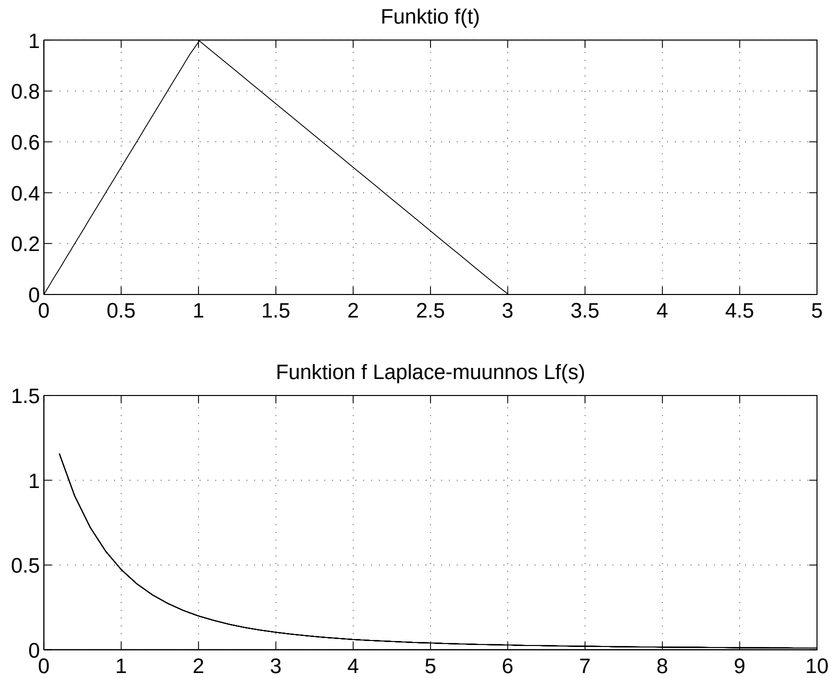
Kuvan 3 ylemmässä ruudussa on esitetty inversio, joka saadaan pseudoinverssin sokealla soveltamisella. Tulos on ilmiselvästi pelkkää numeerista kohinaa.

Otetaan seuraavaksi koneen laskentatarkkuus huomioon, ja päätetään, että singulaariarvot alle koneen laskentatarkkuuden tulkitaan nolliksi. Lasketaan uudelleen pseudoinverssi, ja sovelletaan taas dataan, jolloin saadaan kuvan 3 alemmassa ruudussa esitetty rekonstruktio.

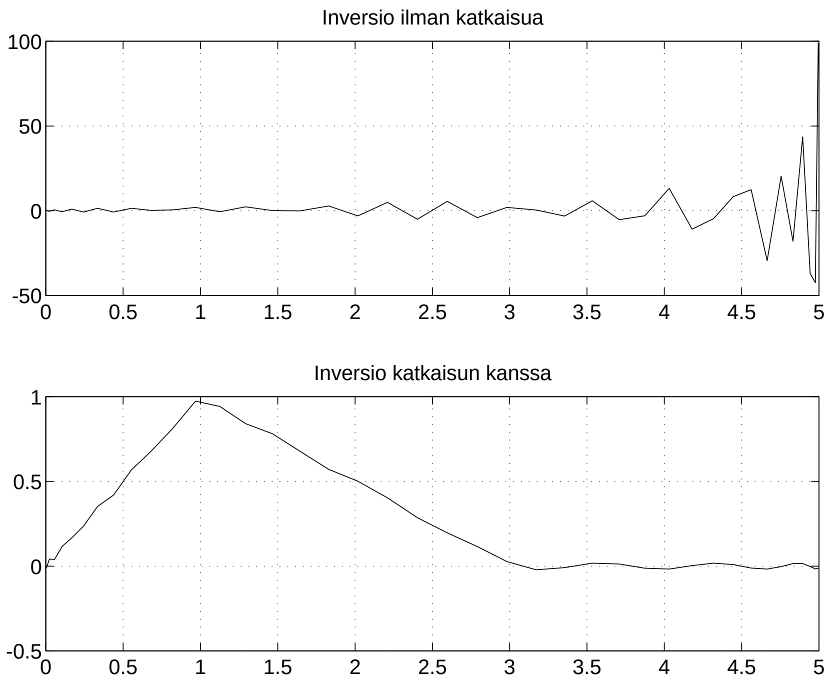
Edellä esitetystä esimerkistä käy selvästi ilmi, mistä matriisin häiriöalttiudessa on kysymys. Miniminormiratkaisun todettin olevan muotoa

$$x = \sum_{j=1}^{r} \frac{y'_j}{d_j} v^{(j)},$$

mistä nähdään, että datassa olevat numeeriset tai mittauksesta aiheutuvat virheet tulevat jaetuksi hyvin pienillä luvuilla. Edellisen esimerkin hengessä annetaan nyt



Kuva 2. Alkuperäinen funktio ja sen analyyttisesti laskettu Laplace–muunnos.



Kuva 3. Pseudoinverssillä laskettu käänteismuunnos ilman singulaariarvokatkaisua (ylempi kuva) ja sen kanssa (alempi kuva).

seuraava määritelmä.

Määritelmä 1.2 *Yhtälön (1)* singulaariarvokatkaisulla regularisoitu miniminormiratkaisu x_δ *määritellään kaavalla*

$$x_\delta = \sum_{j=1}^{p(\delta)} \frac{y'_j}{d_j} v^{(j)},$$

missä indeksi $p(\delta) \in \mathbb{N}$, $p(\delta) \leq r$, *määritellään*

$$p(\delta) = \max\{j \mid 1 \leq j \leq \min(m,n),\ d_j > \delta\}. \tag{6}$$

Parametria $\delta > 0$ *sanotaan menetelmän regularisaatioparametriksi.*

Edellisessä esimerkissä regularisaatioparametriksi valittiin koneen laskentatarkkuus. Yleisesti voidaan kysyä, mikä on sopiva kriteeri tämän parametrin suuruudelle. Mitään yksiselitteistä valintaperustetta ei ole, vaan valinta on jossain määrin tapauskohtainen. Erästä valintakriteeriä käsitellään harjoitustehtävissä.

Esitetään vielä toinen regularisaatiomenetelmä, jota yleensä kutsutaan *Tihonovin regularisaatioksi.* Siinä lähtökohtana on havainto, että häiriöalttiille matriiseille miniminormiratkaisun $x = A^+y$ normi pyrkii tyypillisesti kasvamaan, sillä

$$\|x\|^2 = \sum_{j=1}^{r} \left(\frac{y'_j}{d_j}\right)^2.$$

Ideana onkin hakea ratkaisu, joka samalla rajoittaa normin kasvua.

Määritelmä 1.3 *Yhtälön (1)* Tihonovin regularisoitu miniminormiratkaisu x_δ *on vektori* $x_\delta \in \mathbb{R}^n$, *joka minimoi lausekkeen*

$$\|Ax - y\|^2 + \delta\|x\|^2,$$

missä $\delta > 0$ *on menetelmään liittyvä regularisaationparametri.*

Jälleen on todettava, että regularisaatioparametrin valinta on jossain määrin tapauskohtainen. Tuonnempana esitetään eräs mahdollinen valintakriteeri tälle parametrille. Sitä ennen todistetaan kuitenkin seuraava esityslause.

Lause 1.2 *Tihonovin regularisoitu miniminormiratkaisu yhtälölle (1) saadaan matriisin* A *singulaariarvohajotelman* $A = UDV^T$ *avulla kaavasta*

$$x_\delta = A_\delta^+ y = V D_\delta^+ U^T y,$$

missä matriisi $D_\delta^+ \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *on*

$$D_\delta^+ = \operatorname{diag}\left(\frac{d_1}{d_1^2+\delta}, \ldots, \frac{d_{\min(m,n)}}{d_{\min(m,n)}^2+\delta}\right).$$

Todistus: Kirjoittamalla $\mathbb{R}^n$:n vektori x matriisin V sarakkeiden lineaarikombinaationa, $x = \sum_{j=1}^n \alpha_j v^{(j)} = V\alpha$, saadaan suoralla sijoituksella

$$\begin{aligned}\|Ax - y\|^2 + \delta\|x\|^2 &= \sum_{j=1}^r (d_j\alpha_j - y'_j)^2 + \sum_{j=r+1}^m y'^2_j + \delta\sum_{j=1}^n \alpha_j^2 \\ &= \sum_{j=1}^r (d_j^2 + \delta)\left(\alpha_j^2 - 2\frac{d_j y'_j}{d_j^2+\delta}\alpha_j\right) + \delta\sum_{j=r+1}^n \alpha_j^2 + \sum_{j=1}^m y'^2_j.\end{aligned}$$

Täydentämällä ensimmäisessä summalausekkeessa termit α_j:n suhteen neliöksi saadaan edelleen kaava

$$\|Ax-y\|^2+\delta\|x\|^2 = \sum_{j=1}^r (d_j^2+\delta)\left(\alpha_j - \frac{d_j y'_j}{d_j^2+\delta}\right)^2 + \delta\sum_{j=r+1}^n \alpha_j^2 - \sum_{j=1}^r \frac{(d_j y'_j)^2}{d_j^2+\delta} + \sum_{j=1}^m y'^2_j.$$

Tämä lauseke saavuttaa miniminsä, kun

$$\alpha_j = \begin{cases} \dfrac{d_j}{d_j^2+\delta} y'_j, & 1 \le j \le r, \\ 0, & r+1 \le j \le n, \end{cases}$$

eli lyhyesti

$$\alpha = D_\delta^+ y'.$$

Koska $x = V\alpha$ ja $y' = U^T y$, on lause siten todistettu. □

Palataan nyt kysymykseen regularisaatioparametrin $\delta > 0$ valinnasta. Oletetaan, että datavektorin y numeerisesta tai mitatusta virhetasosta on olemassa estimaatti. Tällöin mikä tahansa sellainen ratkaisu, joka tyydyttää datan annetun tarkkuuden puitteissa, on katsottava periaatteessa hyväksyttäväksi. Jos yksinkertaisuuden vuoksi oletetaan, että mittaus- tai laskentatarkkuutta karakterisoi yksi luku $\varepsilon > 0$, niin hyväksyttäville ratkaisuille on voimassa ehto

$$\|Ax - y\| \le \varepsilon.$$

Periaatetta, jossa Tihonovin regularisaatioparametri δ valitaan ehdosta

$$\|Ax_\delta - y\| = \varepsilon,$$

kutsutaan *Morozovin diskrepanssiperiaatteeksi.* Seuraava lause antaa ehdon, milloin Morozovin diskrepanssiperiaatetta voidaan soveltaa, sekä itse asiassa algoritmin sen toteuttamiseksi.

Lause 1.3 *Morosovin diskrepanssiperiaatteella löydetään yksikäsitteinen parametrin δ arvo täsmälleen silloin, kun ε täyttää ehdon*

$$\|Py\| \le \varepsilon \le \|y\|,$$

missä P on ortogonaalinen projektio matriisin A kuva–avaruuden ortogonaaliselle komplementille $(\mathrm{Im}(A))^\perp$.

Todistus: Edellisen lauseen todistuksesta seuraa yhtälö

$$Ax_\delta = (UDV^T)(VD_\delta^+U^T)y = UDD_\delta^+y',$$

joten

$$\|Ax_\delta - y\|^2 = \|DD_\delta^+y' - y'\|^2 = \sum_{j=1}^{\min(m,n)} \left(\frac{d_j^2}{d_j^2+\delta} - 1\right)^2 y_j'^2 + \sum_{j=\min(m,n)+1}^{m} y_j'^2$$

$$= \sum_{j=1}^{r} \left(\frac{\delta}{d_j^2+\delta}\right)^2 y_j'^2 + \sum_{j=r+1}^{m} y_j'^2.$$

Tästä lausekkeesta nähdään, että funktio $\delta \mapsto \|Ax_\delta - y\|^2$ on aidosti kasvava funktio, ja siis

$$\sum_{j=r+1}^{m} y_j'^2 = \|Ax_0 - y\|^2 \leq \|Ax_\delta - y\|^2 \leq \lim_{\delta\to\infty} \|Ax_\delta - y\|^2 = \sum_{j=1}^{m} y_j'^2,$$

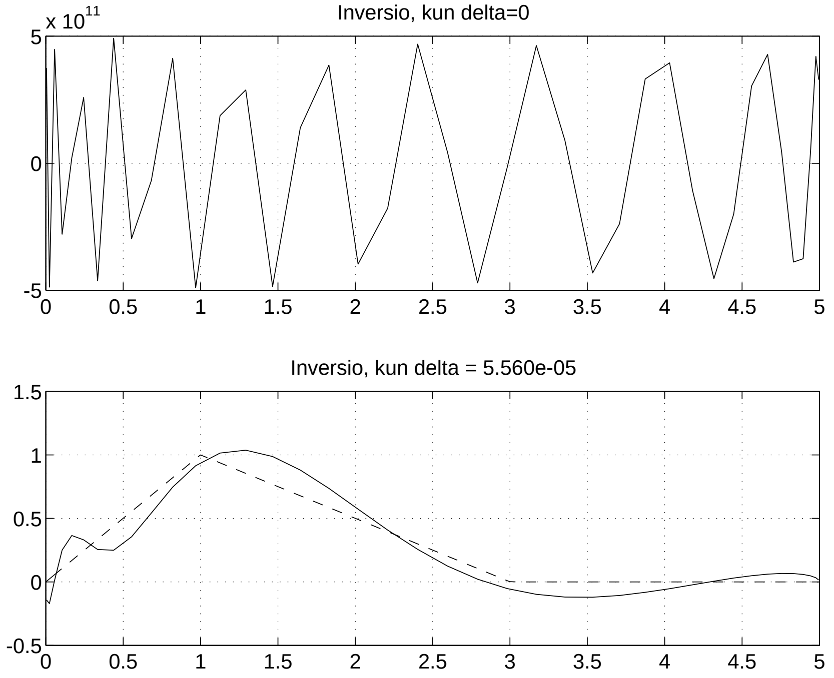
mistä lause seuraa matriisin U ortogonaalisuuden nojalla. □

Morozovin diskrepanssialgoritmi on nyt helppo toteuttaa numeerisesti soveltamalla esimerkiksi Newtonin algoritmia funktion

$$f(\delta) = \sum_{j=1}^{r} \left(\frac{\delta}{d_j^2+\delta}\right)^2 y_j'^2 + \sum_{j=r+1}^{m} y_j'^2 - \varepsilon^2$$

nollakohtien hakuun, kun ε on valittu edellisen lauseen antamien ylä– ja alarajojen välistä.

Esimerkki Jatketaan aikaisempaa esimerkkiä Laplace–muunoksen inversion laskemiseksi. Tällä kertaa lisätään analyyttisesti laskettuun funktion f Laplace–muunnokseen keinotekoista kohinaa. Häiriön oletetaan olevan nollakeskistä normaalijakautunutta kohinaa, jonka varianssiksi valitaan $\sigma = 0.01$. Lasketaan sitten edellisen esimerkin tapaan inversio käyttämällä singulaariarvokatkaisuun perustuvaa regularisaatiota, missä katkaisuparametri δ on koneen laskentatarkkuuden suuruinen. Lopputulos, joka on taas pelkkää kohinaa, on esitetty kuvan 4 ylemmässä ruudussa. Lasketaan tämän jälkeen Tihonovin miniminormiratkaisu. Regularisaatioparametri haetaan Morozovin diskrepanssiperiaatteella, ja diskrepanssiparametri ε valitaan kohinatasoa vastaavaksi, $\varepsilon = \sqrt{m}\sigma$, missä m on datapisteiden lukumäärä. Kuvan 4 alemmassa ruudussa on piirretty alkuperäinen funktio sekä laskettu inversio.



Kuva 4. Ilman regularisaatiota laskettu kohinaisen datan inversio (ylempi kuva) ja Tihonovin regularisaatiota käyttäen saatu ratkaisu (alempi kuva). Regularisaatioparametrin koko on ilmoitettu kuvassa.

Harjoitustehtäviä:

1. Todista, että jos matriisin A rivit tai sarakkeet ovat lineaarisesti riippumattomat, niin singulaariarvot ovat positiivisia. Näytä, että pienimmän neliösumman ratkaisu yhtälölle $Ax = y$ on yksikäsitteinen, jos A:n sarakket ovat lineaarisesti riippumattomat. Esitä esimerkki, jossa pienimmän neliösumman ratkaisu ei ole yksikäsitteinen.

2. Todista Moore–Penrose–yhtälöt (4) matriisin A pseudoinverssille A^+. Osoita projektio–ominaisuudet (5).

3. Tarkastellaan singulaariarvolla regularisoitua pseudoratkaisua yhtälölle $Ax = y$. Olkoon $p(\delta)$ katkaisuindeksi. Osoita, että tällöin diskrepanssiehto $\|Ax_\delta - y\| \leq \varepsilon$ voidaan kirjoittaa muotoon $\sum_{j=p(\delta)+1}^{m} {y'}_j^2 \leq \varepsilon^2$. Tästä kaavasta saadaan Morozovin diskrepanssikriteerin vastine singulaariarvokatkaisulla regluarisoidulle ratkaisulle.

1.2 Huonosti asetetut integraaliyhtälöt

Edellisessä luvussa tarkasteltiin esimerkkinä huonosti asetettusta matriisiyhtälöstä diskretoidun Laplace–muunnoksen kääntämistä. Tässä luvussa on tarkoitus käsitellä erästä toisentyyppistä lähestymistapaa, joka on kehitetty erityisesti integraaliyhtälöiden ratkaisemiseen ilman, että yhtälöä tarvitsee aluksi diskretoida. Menetelmä, joka tunnetaan nimellä *Backus–Gilbert–menetelmä*, on kehitetty alunperin geofysiikan tarpeisiin.

Tarkastellaan integraaliyhtälöä

$$g(x) = \int_I K(x,y) f(y) dy,$$

missä $I \in \mathbb{R}$ on (äärellinen tai ääretön) väli. Oletetaan, että funktiosta g on otettu äärellinen määrä kohinaisia näytteitä, ja tästä datasta tulee estimoida funktiota f aluksi yhdessä annetussa pisteessä välillä I. Jos näytepisteet ovat $y_1, y_2, \ldots, y_n$, niin merkitsemme

$$\begin{aligned} \mu_\ell = g(y_\ell) &= \int_I K(y_\ell, x) f(x) dx + \varepsilon_\ell \\ &= \int_I \psi_\ell(x) f(x) dx + \varepsilon_\ell, \ 1 \le \ell \le n \end{aligned}$$

missä siis ε_ℓ on satunnainen virhe. Olkoon $x_0 \in I$ piste, jossa f halutaan estimoida.

Backus–Gilbert–menetelmässä pyritään etsimään lineaarinen estimaatti $f(x_0)$:lle. Jos merkitään $f^*(x_0)$:lla tätä estimaattia, niin voimme kirjoittaa

$$f(x_0) \approx f^*(x_0) = \sum_{\ell=1}^{n} \varphi_\ell(x_0) \mu_\ell. \tag{7}$$

Ongelmana on löytää sopivassa mielessä optimaaliset ja f:stä riippumattomat kertoimet $\varphi_\ell(x_0)$. Toistamalla prosessi eri x_0:n arvoilla saadaan aikaan lineaarinen filtteri, jolla funktiota f voidaan estimoida koko välillä I. Sopivan kriteerin löytämiseksi tehdään seuraava tarkastelu. Merkitään E:llä odotusarvo–operaattoria, s.o. jos ξ on satunnaismuuttuja, niin $\mathrm{E}\xi$ tarkoittaa ξ:n odotusarvoa. Oletetaan, että mittausvirhevektori $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n)^T$ on nollakeskinen satunnaisvektori, jonka kovarianssimatriisi on tunnettu matriisi C,

$$\mathrm{E}\varepsilon = 0 \in \mathbb{R}^n,$$

$$\mathrm{E}\varepsilon\varepsilon^T = C \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Matriisi C on tällöin positiivisemidefiniitti (harjoitustehtävä). Lasketaan nyt mielivaltaisen muotoa (7) olevan estimaatin *neliöllinen keskipoikkeama (engl. Mean Square Deviation, MSD)* f:n todellisesta arvosta x_0:ssa. Määritelmän mukaan

$$MSD(x_0) = \mathrm{E}(f^*(x_0) - f(x_0))^2.$$

Sijoittamalla lauseke (7) tähän kaavaan saadaan

$$MSD(x_0) = B(x_0)^2 + V(x_0), \tag{8}$$

missä lausekkeet $B(x_0)$ ja $V(x_0)$ on määritelty kaavoilla

$$B(x_0) = |f(x_0) - \int_I f(x) \sum_{\ell=1}^{n} \varphi_\ell(x_0)\psi_\ell(x)dx|,$$

$$V(x_0) = \sum_{k,\ell=1}^{n} \varphi_k(x_0)C_{k,\ell}\varphi_\ell(x_0).$$

Yhtälön (8) johto jätetään harjoitustehtäväksi. Termiä $B(x_0)$ sanotaan estimaatin *harhaksi (engl. bias)*, termiä $V(x_0)$ estimaatin varianssiksi. Selvästi harha ilmaisee estimaatin systemaattisen kohinasta riippumattoman poikkeaman oikeasta arvosta, kun taas varianssi ilmaisee kohinan tuoman poikkeaman suuruuden.

Etsitään nyt sopiva kriteeri kerrointen $\varphi_\ell(x_0)$ määräämiseksi. Tätä varten tarkastellaan ensin harhatermiä $B(x_0)$, jonka lausekkeesta nähdään, että harhatermi on sitä pienempi mitä paremmin ydin

$$A(x_0, x) = \sum_{\ell=1}^{n} \varphi(x_0)\psi_\ell(x)$$

appriksimoi deltadistribuutiota pisteessä x_0. Backus–Gilbert–menetelmän ideana onkin valita kertoimet $\varphi_\ell(x_0)$ siten, että *approksimoiva ydin* $A(x_0, x)$ olisi mahdollisimman voimakkaasti keskittynyt x_0:n ympäristöön.

Kiinnitetään nyt oletukset koskien rekonstruoitavaa funktiota f ja ytimiä ψ_ℓ. Funktio f oletetaan rajoitetuksi, $f \in L^\infty(I)$, sekä Lipschitz–jatkuvaksi pisteessä x_0, s.o., x_0:lla on ympäristö $U \subset I$ siten, että kun $x \in U$, pätee

$$|f(x) - f(x_0)| \leq C|x - x_0|^\alpha,$$

missä $C > 0$ ja $0 < \alpha \leq 1$. Ytimistä ψ_ℓ oletetaan, että ne ovat integroituvia, $\psi_\ell \in L^1(I)$ ja että

$$\int_I |\psi_\ell(x)|^2 |x - x_0|^{1+2\beta} dx < \infty,$$

missä $0 < \beta < \alpha$. Haetaan nyt sopiva yläraja harhalle $B(x_0)$. Oletetaan aluksi, että kertoimet $\varphi_\ell(x_0)$ on rajoitettu $\mathbb{R}^n$:n aliavaruuteen, jossa

$$\int_I A(x_0, x)dx = \sum_{\ell=1}^{n} \varphi_\ell(x_0) \int_I \psi_\ell(x)dx = 1,$$

eli lyhyesti matriisimuodossa

$$\varphi(x_0)^T g = 1, \tag{9}$$

missä $\varphi(x_0) = (\varphi_1(x_0), \dots, \varphi_n(x_0))^T$, ja $g = (g_1, \dots, g_n)^T$,

$$g_\ell = \int_I \psi_\ell(x)dx.$$

Tällöin pätee

$$B(x_0) = |\int_I A(x_0, x)f(x)dx - f(x_0)| = |\int_I A(x_0, x)(f(x) - f(x_0))dx|.$$

Kertomalla ja jakamalla integrandi termillä $|x - x_0|^{1/2+\beta}$ sekä soveltamalla Schwarzin epäyhtälöä pätee edelleen

$$B(x_0) \le \left(\int_I \frac{|f(x) - f(x_0)|^2}{|x - x_0|^{1+2\beta}} dx \right)^{1/2} \left(\int_I |A(x_0, x)|^2 |x - x_0|^{1+2\beta} dx \right)^{1/2}.$$

Funktioita ψ_ℓ tehdyn oletuksen nojalla jälkimmäinen tekijä on äärellinen. Edellisessä tekijässä jaetaan integroimisalue kahteen osaan ja hyödynnetään f:n ominaisuuksia. Saadaan arvio

$$\int_I \frac{|f(x) - f(x_0)|^2}{|x - x_0|^{1+2\beta}} dx = \left(\int_{I \setminus U} + \int_U \right) \frac{|f(x) - f(x_0)|^2}{|x - x_0|^{1+2\beta}} dx$$

$$\le 2\|f\|_\infty \int_{I \setminus U} \frac{1}{|x - x_0|^{1+2\beta}} dx + C^2 \int_U \frac{1}{|x - x_0|^{1+2(\beta-\alpha)}} dx < \infty.$$

Saadusta arviosta nähdään nyt, että harhan $B(x_0)$ minimoimiseksi f:stä riippumattomalla tavalla on tarkoituksenmukaista minimoida lauseketta

$$\mathcal{S}(\varphi(x_0)) = \int_I A(x_0, x)^2 |x - x_0|^{1+2\beta} dx.$$

Sijoittamalla tähän lausekkeeseen approksimaoivan ytimen A esitys funktioden ψ_ℓ avulla saadaan matriisimuodossa

$$\mathcal{S}(\varphi(x_0)) = \varphi(x_0)^T S \varphi(x_0), \tag{10}$$

missä matriisin S elementit lasketaan kaavalla

$$S_{i,j} = \int_I \psi_i(x)\psi_j(x)|x - x_0|^{1+2\beta} dx, \quad 1 \le i, j \le n.$$

Matriisi S on positiivisemidefiniitti (harjoitustehtävä).

Ennen varsinaisen Backus–Gilbert–kriteerin muotoilemista tarkastellaan vielä varianssitermiä. Huonosti asetetuista matriisiyhtälöistä oppineena on odotettavissa, että jos mittaus on kohinaista, niin minimoimalla ainoastaan estimaattorin harhaa päädytään käyttökelvottomaan algoritmiin. Asetetaan siksi algoritmille rajoitusehto, ja vaaditaan, että varianssi pysyy ennalta annetun rajan alapuolella, s.o., jollekin $\gamma^2 > 0$ pätee

$$\mathcal{C}(\varphi(x_0)) = \varphi(x_0)^T C \varphi(x_0) \leq \gamma^2. \tag{11}$$

Kerätään nyt yhteen ehdot (9) ja (11) ja määritellään Backus–Gilbert–menetelmän kriteeriksi lausekkeen (10) minimointi näillä rajoitusehdoilla.

Jatkossa oletetaan, että matriisit S ja C ovat positiividefiniittejä. Edelleen, jätetään $\varphi(x_0)$:ssä merkitsemättä vektorin riippuvuus pisteestä x_0, eli kirjoitetaan lyhyesti $\varphi = \varphi(x_0)$. Tarkasteltavana on siis seuraava kvadraattinen minimointiprobleema:

Ongelma 1.1 *Etsi sellainen $\varphi \in \mathbb{R}^n$, joka minmoi lausekkeen*

$$\mathcal{S}(\varphi) = \varphi^T S \varphi$$

rajoitusehdoilla

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(\varphi) = \varphi^T C \varphi &\leq \gamma^2, \\ \varphi^T g &= 1, \end{aligned} \tag{12}$$

missä $S \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ja $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ovat positiividefiniittejä matriiseja sekä $g \in \mathbb{R}^n$, $g \neq 0$.

Muunnetaan aluksi minimointiprobleeman standardimuotoon. Ensimmäisenä askeleena hankkiudutaan eroon lineaarisesta rajoitusehdosta (12). Tämä tapahtuu *Householderin projektiolla*, jota on käsitelty tarkemmin Liitteessä 1. Olkoon $\nu \in \mathbb{R}^n$, $\nu \neq 0$. Vektoria ν vastaava Householderin projektio P_ν on matriisi

$$P_\nu = \mathbf{1}_{n\times n} - \frac{2}{\|\nu\|^2}\nu\nu^T.$$

Valitaan nyt vektorin ν siten, että pätee

$$P_\nu g = -\mathrm{sign}(g_n)\|g\|e_n, \tag{13}$$

missä $e_n = (0, 0, \ldots, 0, 1)^T \in \mathbb{R}^n$. Mikäli $g_n = 0$, tulkitaan $\mathrm{sign}(g_n) = 1$. Kaavassa (13) esiintyvä tekijä $\mathrm{sign}(g_n)$ on valittu numeerisen stabiilisuuden takaamiseksi. Ehto (13) saadaan toteutumaan, kun valitaan

$$\nu = g + \mathrm{sign}(g_n)\|g\|e_n.$$

Merkitään nyt

$$\tilde{\varphi} = P_\nu \varphi, \quad \tilde{S} = P_\nu S P_\nu, \quad \tilde{C} = P_\nu C P_\nu.$$

Matriisin P_ν ominaisuuksista seuraa nyt välittömästi, että ehto (12) saa yksinkertaisen muodon

$$1 = \varphi^T g = (P_\nu \varphi)^T (P_\nu g) = -\mathrm{sign}(g_n) \|g\| \tilde{\varphi}^T e_n,$$

eli vektorin $\tilde{\varphi}$ n:s komponentti tulee määrätyksi,

$$\tilde{\varphi}_n = -\frac{\mathrm{sign}(g_n)}{\|g\|}.$$

Edelleen, minimoitava lauseke $\mathcal{S}(\varphi)$ voidaan kirjoittaa muotoon

$$\mathcal{S}(\varphi) = \tilde{\varphi}^T \tilde{S} \tilde{\varphi},$$

ja vastaavasti kvadraattinen rajoitusehto muotoon

$$\mathcal{C}(\varphi) = \tilde{\varphi}^T \tilde{C} \tilde{\varphi} \leq \gamma^2.$$

Kirjoitetaan matriisit $\tilde{S}$ ja $\tilde{C}$ lohkomuotoon seuraavasti:

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} A & w \\ w^T & \sigma \end{pmatrix}, \quad \tilde{C} = \begin{pmatrix} B & v \\ v^T & \tau \end{pmatrix},$$

missä A, $B \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ ovat positiividefiniittejä matriiseja, w, $v \in \mathbb{R}^{n-1}$, ja $\sigma > 0$, $\tau > 0$. Sijoittamalla nämä lohkomuodot takaisin lausekkeisiin $\mathcal{S}(\varphi)$ ja $\mathcal{C}(\varphi)$ saadaan lausekkeet

$$\mathcal{S}(\varphi) = \tilde{\varphi}^T \tilde{S} \tilde{\varphi} = x^T A x + 2\tilde{\varphi}_n x^T w + \tilde{\varphi}_n^2 \sigma,$$

ja

$$\mathcal{C}(\varphi) = \tilde{\varphi}^T \tilde{C} \tilde{\varphi} = x^T B x + 2\tilde{\varphi}_n x^T v + \tilde{\varphi}_n^2 \tau.$$

Alkuperäinen probleema on nyt saatu kirjoitettua seuraavaan standardimuotoon:

Ongelma 1.2 *Etsi sellainen $x \in \mathbb{R}^{n-1}$, joka minimoi lausekkeen*

$$F(x) = x^T A x + 2\tilde{\varphi}_n x^T w + \tilde{\varphi}_n^2 \sigma$$

rajoitusehdolla

$$G(x) = x^T B x + 2\tilde{\varphi}_n x^T v + \tilde{\varphi}_n^2 \tau \leq \gamma^2.$$

Ongelman 1.2 ratkaisu haetaan käyttäen *Lagrangen normaaliyhtälöitä*. Käydään kertauksen vuoksi läpi Lagrangen normaaliyhtälöiden perusajatus, joka sisältyy seuraavaan lemmaan.

Lemma 1.1 *Olkoot $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ja $G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ jatkuvasti differentioituvia kuvauksia, ja olkoon $a \in \mathbb{R}^n$ funktion F ääriarvo joukossa $A = \{x \in \mathbb{R}^n \mid G(x) = 0\}$. Jos $\nabla G(a) \neq 0$, niin a toteuttaa Lagrangen normaaliyhtälöt*

$$\nabla F(x) + \mu \nabla G(x) = 0, \tag{14}$$

$$G(x) = 0.$$

Lukua $\mu \in \mathbb{R}$ sanotaan ongelman Lagrangen kertojaksi.

Todistus: Voidaan olettaa, että esimerkiksi $D_n G(a) \neq 0$. Merkitään $a = (a'; a_n)$, missä $a' \in \mathbb{R}^{n-1}$. Implisiittifunktiolause takaa tällöin, että pisteellä a' on ympäristö $U \subset \mathbb{R}^{n-1}$ ja U:ssa määritelty jatkuvasti diffentioituva kuvaus $\phi : U \to \mathbb{R}$ siten, että yhtälöllä $G(x) = 0$ on yksikäsitteinen ratkaisu $x_n = \phi(x')$, ja siis erityisesti $a_n = \phi(a')$. Tarkastellaan nyt funktiota

$$\tilde{F} : U \to \mathbb{R}, \quad x' \mapsto F(x'; \phi(x')).$$

Koska a on F:n ääriarvo joukossa A, pätee siten kaikilla j, $1 \leq j \leq n-1$,

$$D_j \tilde{F}(x')\big|_{x'=a'} = (D_j F(x'; \phi(x')) + D_n F(x', \phi(x')) D_j \phi(x'))\big|_{x'=a'} = 0.$$

Toisaalta koska kuvaus $\tilde{G} : U \to \mathbb{R}$, $x' \mapsto G(x', \phi(x'))$ on identtisesti nolla, pätee

$$D_j \tilde{G}(x') = D_j G(x'; \phi(x')) + D_n G(x', \phi(x')) D_j \phi(x') = 0,$$

mistä ratkaisemalla $D_j \phi(a')$ ja sijoittamalla edelliseen lausekkeeseen saamme

$$D_j F(a) - \frac{D_n F(a)}{D_n G(a)} D_j G(a) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, n-1.$$

Valitsemalla $\mu = -D_n F(a)/D_n G(a)$ on yhtälö (14) voimassakaikilla j, $1 \leq j \leq n-1$, ja triviaalisti myös kun $j = n$. $\square$

Sovelletaan tätä aputulosta $\mathbb{R}^{n-1}$:ssä määriteltyihin funktioihin

$$F(x) = x^T A x + 2\tilde{\varphi}_n x^T w + \tilde{\varphi}_n^2 \sigma,$$

$$G(x) - t = x^T B x + 2\tilde{\varphi}_n x^T v + \tilde{\varphi}_n^2 \tau - t,$$

missä $t > 0$ on aluksi mielivaltainen. Differentioimalla lausekkeet nähdään, että Lagrangen normaaliyhtälöt ovat muotoa

$$(A + \mu B)x = -\tilde{\varphi}_n (w + \mu v), \tag{15}$$

$$x^T B x + 2\tilde{\varphi}_n x^T v + \tilde{\varphi}_n^2 \tau = t. \tag{16}$$

Käytännössä yhtälöparin (15)–(16) ratkaiseminen tapahtuu nyt seuraavasti: Oletuksen mukaan matriisit A ja B ovat positiividefiniittejä, joten $A + \mu B$ on kääntyvä. Merkitään

$$x_\mu = -\tilde{\varphi}_n (A + \mu B)^{-1}(w + \mu v),$$

ja edelleen

$$\Psi(\mu) = x_\mu^T B x_\mu + 2\tilde{\varphi}_n x_\mu^T v + \tilde{\varphi}_n^2 \tau.$$

Tulee siis hakea sellainen parametrin μ arvo, että yhtälö $\Psi(\mu) = t$ toteutuu. Tämän tavoitten toteuttamiseksi todistetaan vielä eräs aputulos.

Lemma 1.2 *Funktiolle Ψ on voimassa arviot*

$$\Psi_{\min} \leq \Psi(\mu) \leq \Psi_{\max},$$

missä

$$\Psi_{\min} = \tilde{\varphi}_n^2(\tau - v^T B^{-1} v),$$

ja

$$\Psi_{\max} = \tilde{\varphi}_n^2((A^{-1}w - B^{-1}v)^T B (A^{-1}w - B^{-1}v) + \tau - v^T B^{-1} v).$$

Lisäksi Ψ on jatkuva, derivoituva sekä aidosti vähenevä kaikilla $\mu > 0$, joilla $\Psi(\mu) > \Psi_{\min}$.

Todistus: Alarajan todistamiseksi kirjoitetaan $\Psi(\mu)$ neliömuotoon,

$$\begin{aligned}\Psi(\mu) &= x_\mu^T B x_\mu - 2\tilde{\varphi}_n x_\mu^T v + \tilde{\varphi}_n^2 v^T B^{-1} v + \tilde{\varphi}_n^2(\tau - v^T B^{-1} v) \\ &= (Bx_\mu + \tilde{\varphi}_n v)^T B^{-1}(Bx_\mu + \tilde{\varphi}_n v) + \tilde{\varphi}_n^2(\tau - v^T B^{-1} v).\end{aligned}$$

Koska matriisi B^{-1} on positiividefiniitti, niin edellisestä muodosta saadaan haluttu alaraja.

Funktion Ψ derivoituvuus seuraa vektoriarvoisen funktion $\mu \mapsto x_\mu$ derivoituvuudesta, joka on helppo todeta normaaliyhtälöstä (15). Funktion Ψ vähenevyyden toteamiseksi lasketaan derivaatta. Derivoidaan yhtälö (15) puolittain μ:n suhteen. Merkitsemällä x'_μ:lla funktion $\mu \mapsto x_\mu$ derivaattaa saadaan yhtälö

$$Bx_\mu + (A + \mu B)x'_\mu = -\tilde{\varphi}_n v,$$

eli

$$x'_\mu = -(A + \mu B)^{-1}(\tilde{\varphi}_n v + Bx_\mu). \tag{17}$$

Toisaalta funktion Ψ derivaatta on muotoa

$$\Psi'(\mu) = 2(x_\mu^T B + \tilde{\varphi}_n v^T)x'_\mu.$$

Sijoittamalla x'_μ kaavasta (17) tähän lausekkeeseen sekä merkitsemällä lyhyesti $z_\mu = \tilde{\varphi}_n v + Bx_\mu$ saadaan

$$\Psi'(\mu) = -2z_\mu^T (A + \mu B)^{-1} z_\mu \leq 0,$$

ja yhtäsuuruus pätee vain, kun $z_\mu = 0$, mikä on yhtäpitävää ehdon $\Psi(\mu) = \tilde{\varphi}_n^2(\tau - v^T B^{-1} v)$ kanssa.

Funktion Ψ ylärajaksi positiivisilla μ:n arvoilla saadaan edelläsanotun nojalla

$$\Psi(\mu) \leq \Psi(0) = \tilde{\varphi}_n^2(w^T A^{-1} B a^{-1} w - 2w^T A^{-1} v + \tau),$$

mikä nelöön täydentämällä antaa juuri väitetyn tuloksen. □

Huomautus: Jos määrittelemme toisen funktion,

$$\Phi(\mu) = F(x_\mu) = x_\mu^T A x_\mu + 2\tilde{\varphi}_n x_\mu^T w + \tilde{\varphi}_n^2 \sigma,$$

niin siirtymällä muuttujaan $\eta = 1/\mu$ ja soveltamalla edellisen lemman todistusta nähdään, että funktio Φ on puolestaan aidosti kasvava funktio μ:n suhteen.

Saatuja tuloksia käyttäen voidaan nyt esittää tutkittavan probleeman ratkaisun olemassaololauseen.

Lause 1.4 *Olkoot*

$$\gamma_1^2 = \tilde{\varphi}_n^2(\tau - v^T B^{-1} v)$$

ja

$$\gamma_2^2 = \gamma_1^2 + \tilde{\varphi}_n^2(A^{-1}w - B^{-1}v)^T B (A^{-1}w - B^{-1}v).$$

1. *Jos $\gamma < \gamma_1^2$, niin mimimointiongelmalla 1.2 ei ole ratkaisua.*

2. *Jos $\gamma_1^2 \leq \gamma^2 < \gamma_2^2$, niin mimimointiongelmalla 1.2 on yksikäsitteinen ratkaisu, joka löydetään normaaliyhtälöryhmän*

$$(A + \mu B)x = -\tilde{\varphi}^2(w + \mu v),$$
$$x^T B x + 2\tilde{\varphi}_n x^T v + \tilde{\varphi}_n^2 \tau = \gamma^2$$

positiivisia Lagrangen kertoimia μ vastaavana yksikäsitteisenä ratkaisuna.

3. *Jos $\gamma^2 \geq \gamma_2^2$, on mimimointiongelman 1.2 yksikäsitteinen ratkaisu*

$$x = \tilde{\varphi}_n A^{-1} w.$$

Todistus: Kohta 1 seuraa suoraan edellisestä lemmasta. Kohdan 3 todistamiseksi todetaan, että

$$F(x) = (Ax + \tilde{\varphi}_n w)^T A^{-1}(Ax + \tilde{\varphi}_n w) + \tilde{\varphi}_n^2(\sigma - w^T A^{-1} w) \geq \tilde{\varphi}_n^2(\sigma - w^T A^{-1} w),$$

joten funktionaalin F minimi saavutetaan pisteessä $x = -\tilde{\varphi}_n A^{-1} w$. Lisäksi tämä minimipiste toteuttaa rajoitusehdon $G(x) = \gamma_2^2 < \gamma^2$. Tässä tapauksessa sanotaan, että rajoitusehto ei ole aktiivinen.

Oletetaan siis, että $\gamma_1^2 \leq \gamma^2 < \gamma_2^2$. Lemmasta 1.4 seuraa, että tällöin normaaliyhtälöillä on yksikäsitteinen ratkaisu. Näytettäväksi jää ainoastaan, miksi minimi joukossa $\{x \in \mathbb{R}^{n-1} \mid G(x) \leq \gamma^2\}$ saavutetaan joukon reunalla, s.o. epäyhtälörajoitus voidaan korvata yhtälörajoitteella $G(x) = \gamma^2$. Tämä nähdään tarkastelemalla normaaliyhtälöitä

$$(A + \mu B)x = -\tilde{\varphi}^2 (w + \mu v),$$

$$x^T B x + 2\tilde{\varphi}_n x^T v + \tilde{\varphi}_n^2 \tau = t$$

missä $\gamma_1^2 < t \leq \gamma^2$. Tarkastelemalla parametriä t muuttujana saamme tästä ratkaistua Lagrangen parametrin μ t:n funktiona. Lemmasta 1.4 seuraa, että funktio $t \mapsto \mu(t)$ on aidosti vähenevä funktio. Mutta tällöin Lemmaa seuranneen huomautuksen nojalla kuvaus $t \mapsto \Phi(\mu(t))$ on myös aidosti vähenevä kuvaus. Siten funktionaalin $F(x_\mu)$ minimiarvo saavutetaan mahdollisimman suurella t:n arvolla, eli kun $t = \gamma^2$. $\square$

Edellinen lause antaa suoraan numeerisen algoritmin vektorin x ratkaisemiseksi. Parametrin $\mu > 0$ se arvo, jolla toinen normaaliyhtälö toteutuu, voidaan etsiä iteratiivisesti esimerkiksi Newtonin menetelmällä. Tähän tarvitaan funktion $\Psi(\mu)$ derivaatan lauseke, joka löydetään edellisen lemman todistuksesta. Kun vektori x on ratkaistu, saadaan vektori $\varphi(x_0)$ kaavalla

$$\varphi(x_0) = P_\nu \begin{pmatrix} x \\ \tilde{\varphi}_n(x_0) \end{pmatrix}.$$

Seuraavassa esimerkissä sovelletaan Backus–gilbert–menetelmää jo tuttuun Laplace–muunnoksen invertoimiseen. Harjoitustehtäväksi jätetään menetelmän soveltaminen numeeriseen derivointiin.

Esimerkki Tarkastellaan funktion Laplace–muunnosta, joka oletetaan tunnetuksi pisteissä $s_1, \ldots, s_n$. Tällöin mittausdatana on

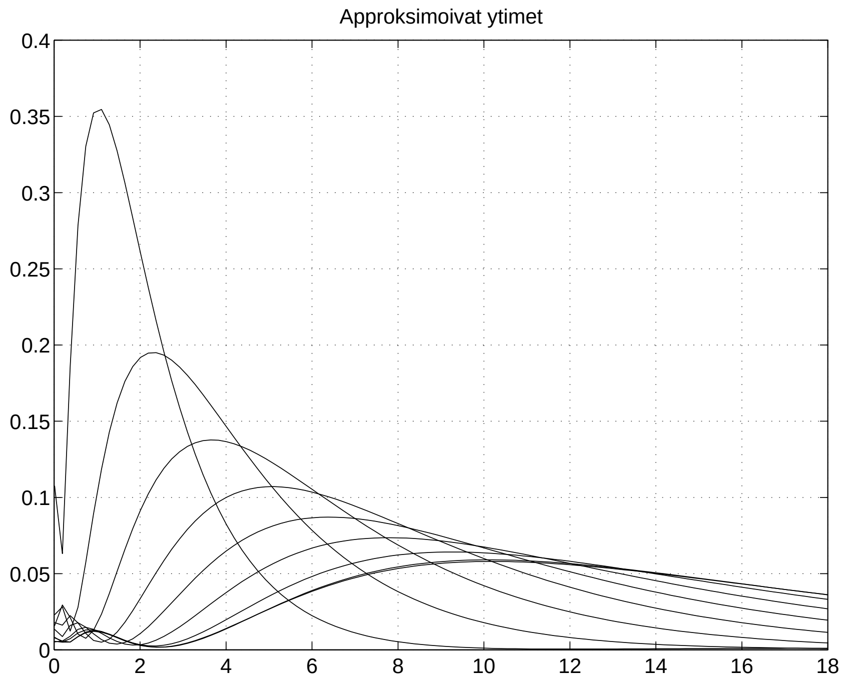
$$\mu_\ell = \int_0^\infty \psi_\ell(t) f(t) dt + \varepsilon_\ell, \quad 1 \leq \ell \leq n,$$

missä

$$\psi_\ell(t) = e^{-s_\ell t}.$$

Valitaan datapisteet logaritmisesti tasavälisesti:

$$\log(s_\ell) = \alpha + \frac{\beta - \alpha}{n - 1}(\ell - 1),$$



Kuva 5. Laplace–muunnoksen inversiota vastaavat approksimoivat ytimet, kun $\gamma^2 = 0.001$.

missä $n = 20$, $\alpha = -2$ ja $\beta = 3$. Kohinan ε_ℓ oletetaan olevan nollakeskistä normaalijakautunutta kohinaa. Oletetaan lisäksi, että satunnaismuuttujat ε_ℓ ovat keskenään riippumattomia. Jos jokaisen mittauslisteen kohinan varianssi on sama σ^2, niin matriisi C on yksinkertaisesti

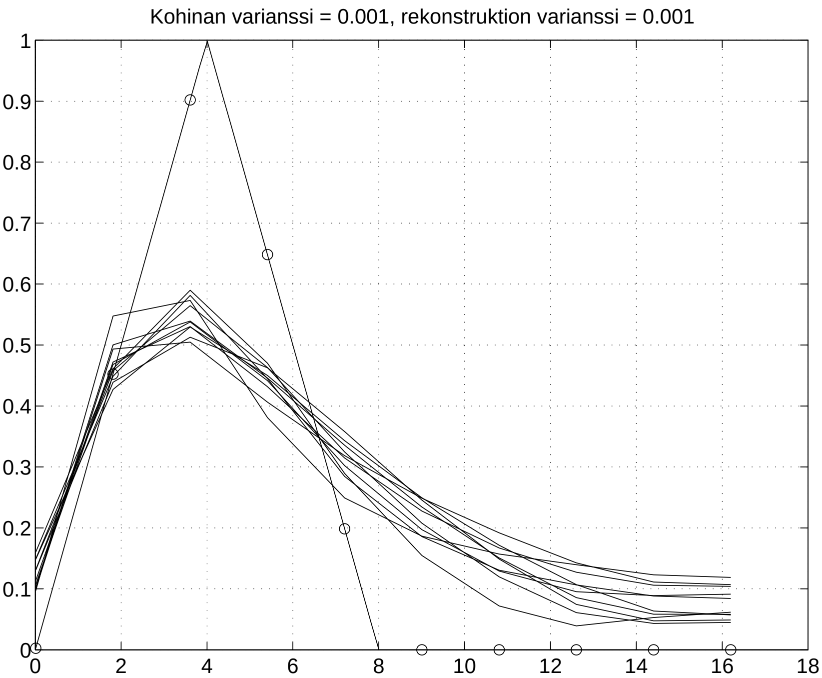
$$C = \sigma^2 \mathbf{1}_n.$$

Oletetaan, että $\sigma^2 = 0.001$. Halutaan rekonstruoida Laplace–muunnettu funktio pisteissä t_m, $1 \leq m \leq 10$, jotka on valittu tasavälisesti väliltä $0.01 \ldots 18$. matriisin S laskemiseksi tarvittavaksi painofunktioksi valitaan $(t - t_m)^2$, eli matriisielemetit ovat

$$S(t_m)_{i,j} = \int_0^\infty \psi_i(t)\psi_j(t)(t - t_m)^2 dt = \int_0^\infty e^{-(s_i+s_j)t}(t - t_m)^2 dt.$$

Nämä matriisielemetit voidaan integroida analyyttisesti. Ratkaisun varianssin γ^2 arvoksi valitaan ensin $\gamma^2 = 0.001$. Kuvassa 5 on esitetty tällä varianssin arvolla saadut approksimoivat ytimet.

Kuva paljastaa erään piirteen Laplace–muunnoksesta: Mitä pidemmällä origosta rekonstruktiota yritetään tehdä, sitä huonompi on resoluutio. Lopulta resoluutio menetetään lähes täysin.



Kuva 6. Kohinaisesta datasta laskettu kymmenen rekonstruktiota, kun $\gamma^2 = 0.001$.

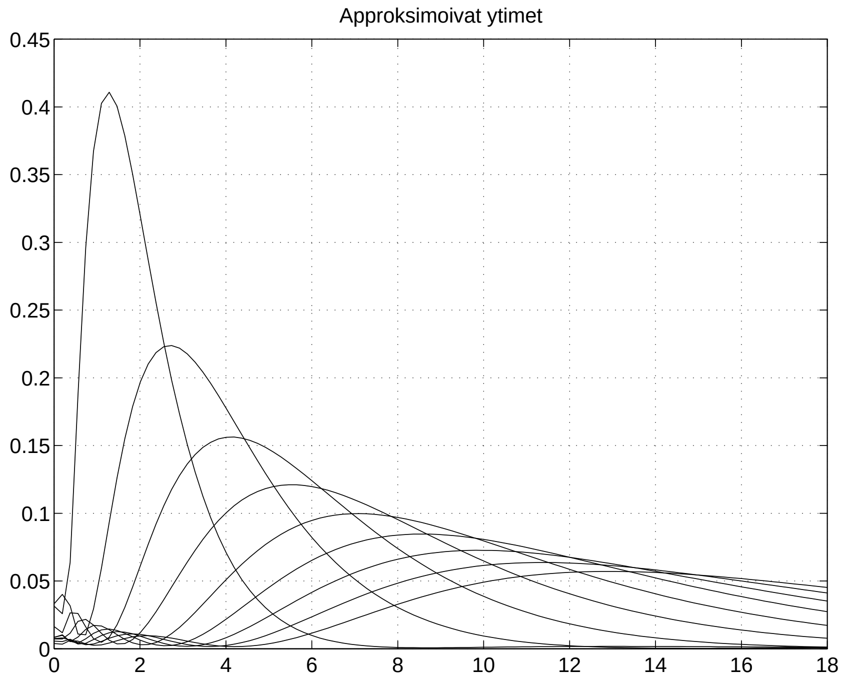
katsotaan, miltä rekonstruktio näyttää, kun sitä sovelletaan annettuun funktioon. Testifunktioksi valitaan paloittain lineaarinen funktio

$$f(t) = \begin{cases} \frac{t}{4}, & \text{kun } 0 \leq t < 4, \\ -\frac{t}{4} + 2, & \text{kun } 4 < t \leq 8, \\ 0, & \text{kun } 8 < t, \end{cases}$$

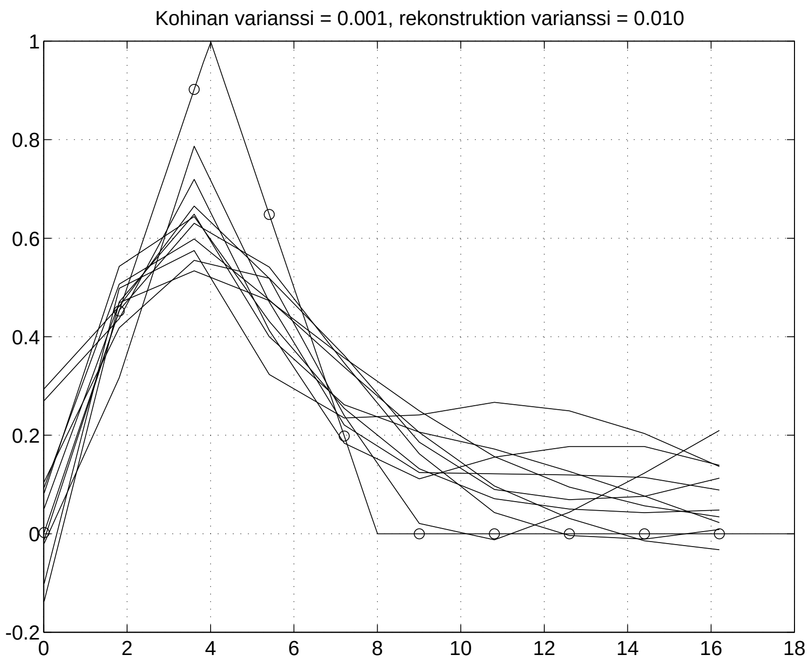
jonka Laplace–muunnos osataan laskea analyyttisesti. Lisätään näin saatuun virheettömään dataan synteettistä kohinaa, joka täyttää tehdyt oletukset. Kuvassa 6 on esitetty alkuperäinen funktio sekä kymmenen peräkkäistä ajoa sovellettuna satunnaisvirheellä häirittyyn dataan. Nähdään, että ratkaisut pysyvät kapeahkossa käytävässä, muuta tämä käytävä on systemaattisesti siirtynyt pois oikean funktion ympäriltä. Tämä systemaattinen siirtymä on juuri menetelmän harhaisuuden tulos.

Vertailun vuoksi tehdään sama ajo, mutta tällä kertaa annetaan ratkaisun varianssin olla suurempi, ja valitaan $\gamma^2 = 0.01$. Kuvat 7 ja 8 esittävät vastaavia tuloksia tällä varianssin arvolla.

Kuvista nähdään selvästi, miten rekonstruktion kohina lisääntyi. Toisaalta suuremmalla γ^2:n arvolla menetelmän harhaisuus pieneni: Rekonstruktiot ovat keskimäärin lähempänä oikeaa funktiota. Tämä on inversio–ongelmille tyypillinen piirre: Suuremmalla varianssilla voidaan ostaa parempi resoluutio ja päinvastoin. Optimaalinen kriteeri riippuu usein sovelluksesta.



Kuva 7. Laplace–muunnoksen inversiota vastaavat approksimoivat ytimet, kun $\gamma^2 = 0.01$.



Kuva 8. Kohinaisesta datasta laskettu kymmenen rekonstruktiota, kun $\gamma^2 = 0.01$.

Harjoitustehtäviä:

1. Osoita, että satunnaisvektorin kovarianssimatriisi on positiivisemidefiniitti. Samoin näytä, että Backus–Gilbert–menetelmässä esiintyvä matriisi S on positiivisemidefiniitti. Millä ehdoilla nämä matriisit ovat positiividefiniittejä?

2. Johda neliöllisen keskipoikkeaman esitys (8).

3. Tarkastellaan seuraavaa huonosti asetettua ongelmaa. On otettu kohinaisia näytteitä funktiosta $f : [0, \infty) \to \mathbb{R}$, jolle tiedetään olevan voimassa $f(0) = 0$. Halutaan estimoida f:n derivaattaa pisteessä $x_0 > 0$. Esitä, miten Backus–Gilbert–algoritmia voidaan soveltaa tämän ongelman ratkaisemiseksi.