

Εφαρμογή Αλγορίθμου για τον Προσδιορισμό των Μικροφυσικών  
Ιδιοτήτων των Σωματιδίων με Χρήση Μαθηματικών Τεχνικών  
Αντίστροφης Σκέδασης

Στέφανος Σ. Σαμαράς

*Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών  
«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»*

*Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών  
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο*

*Επιβλέπων Καθηγητής  
Αναπ. Καθ. Αλέξανδρος Παπαγιάννης  
Τομέας Φυσικής*

2012



*«Περίμενε να κουραστείς για να δεις πως δεν κουράστηκες..»*

Άγνωστος



# Περίληψη

Τα σωματίδια των αερολυμάτων στη γήινη ατμόσφαιρα έχουν ευρεία επιρροή στις κλιματικές συνθήκες σε τοπικό και παγκόσμιο επίπεδο. Είναι σημαντικά για να κατανοήσουμε τις χημικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στην τροπόσφαιρα και τη στρατόσφαιρα, ενώ στα άμεσα ή έμμεσα φαινόμενα των αερολυμάτων οφείλεται η ολική αβεβαιότητά μας στην κατακράτηση ακτινοβολίας, η οποία περιγράφει τη διαφορά μεταξύ εισερχόμενης και εξερχόμενης ενέργειας στην τροπόσφαιρα. Συνεπώς η μελέτη των σωματιδίων των αερολυμάτων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την έρευνα πάνω στην παγκόσμια κλιματική αλλαγή.

Μεταξύ των διαφόρων μεθόδων μέτρησης της συγκέντρωσης και των ιδιοτήτων των σωματιδίων των αερολυμάτων, διακρίνουμε την μέθοδο οπτικής τηλεπισκόπησης lidar, κατά την οποία φωτίζεται ο στόχος με παλμούς laser και η οπισθοσχεδαζόμενη ακτινοβολία καταγράφεται και αναλύεται. Στην παρούσα εργασία μελετώνται αλγόριθμοι για την εξαγωγή πληροφορίας για την κατανομή των σωματιδίων, και κατόπιν άλλων μικροφυσικών παραμέτρων, με δεδομένους τους συντελεστές οπισθοσκέδασης και εξασθένησης από συσκευή lidar πολλών μηκών κύματος. Αυτό συνιστά ένα μη καλώς τοποθετημένο αντίστροφο πρόβλημα που εκφράζεται μέσω μίας ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm  $\alpha'$  είδους.

Το μεγαλύτερο μέρος της εργασίας αφιερώνεται στην κατανόηση της ιδιομορφίας αυτών των προβλημάτων, η οποία προκαλεί μεγάλη αστάθεια στις λύσεις μας, παρουσία θορύβου στα δεδομένα, που είναι και η συνήθης περίπτωση κατά τη μέτρηση. Τέτοια προβλήματα δεν εγγυώνται το μονοσήμαντο ούτε καν την ύπαρξη της λύσης, γι' αυτό και πρέπει να αναζητηθούν λύσεις από το αντίστοιχο πρόβλημα ελαχίστης νόρμας. Ακόμα όμως και σ' αυτή την περίπτωση οι λύσεις είναι συχνά ασταθείς και θα πρέπει να εφαρμόσουμε μεθόδους κανονικοποίησης ώστε να πάρουμε λύσεις με νόημα.

Πιο συγκεκριμένα, παρουσιάζουμε απλούστερα προβλήματα ελέγχου μικρής κλίμακας, τα οποία αρχικά διακριτοποιούνται είτε με μεθόδους τετραγωνισμού είτε μεθόδους Galerkin. Σύμμαχος στο διακριτό αντίστροφο πρόβλημα αλλά και σε όλη τη διαδικασία παραγωγής ευσταθών λύσεων είναι η παραγοντοποίηση SVD, μέσω της οποίας παίρνουμε τη μέγιστη δυνατή πληροφορία για την «κατάσταση» του προβλήματός μας. Κατόπιν, εφαρμόζονται οι μέθοδοι κανονικοποίησης TSVD, SSVD και Tikhonov, και το πρόβλημα ανάγεται στη σωστή επιλογή παραμέτρου κανονικοποίησης, το οποίο είναι επίσης θέμα υπο μελέτη του παρόντος. Μελετώνται οι βασικές τεχνικές επιλογής παραμέτρου κανονικοποίησης, αρχή της ασυμφωνίας, το κριτήριο της καμπύλης  $L$  και η γενικευμένη μέθοδος διασταυρωμένης επικύρωσης.

Οπλισμένοι με την νόηση αυτών των μεθόδων, προχωρούμε στην εφαρμογή στο πρόβλημα ανάκτησης μικροφυσικών παραμέτρων μέσω ενός ευσταθούς αλγορίθμου των Müller, Veselofski, Griaznov και Kologitin. Στη διάρκεια της εφαρμογής, παρατηρούμε πόσο σημαντικός είναι ο περιορισμός του παραγόμενου χώρου λύσεων από συνοριακές συνθήκες που επιβάλλουμε κατά την μετεπεξεργασία των κανονικοποιημένων λύσεων, για την παραγωγή λογικών αποτελεσμάτων.



# Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στον Καθηγητή Αλέξανδρο Παπαγιάννη για τη ενεργή συμμετοχή και καθοδήγησή του στο σχεδιασμό της παρούσας διπλωματικής εργασίας, την προθυμία του καθώς και την ενθάρρυνση που μου παρείχε κατά τη διάρκειά της.

Επίσης, απευθύνω θερμές ευχαριστίες στον υποψήφιο διδάκτορα κ. Παναγιώτη Κόκκαλη, για την πολύτιμη βοήθειά του στην εφαρμογή του κώδικα αντίστροφης σκέδασης.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες απευθύνω προς την οικογένεια μου για τη συνεχή υποστήριξή τους καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

Ένα τεράστιο ευχαριστώ, είναι η ελάχιστη τιμή που μπορώ να αποδώσω στην κοπέλα μου Έφη, για την ατελείωτη συμπαράσταση της όσον αφορά το παρόν πόνημα και τα ακαδημαϊκά μου βήματα.





*Η παρούσα εργασία αφιερώνεται στην Έφη Κούσουλα*



# Περιεχόμενα

Περίληψη	v
Ευχαριστίες	vii
Κατάλογος Σχημάτων	xiii
Κατάλογος Πινάκων	xv
Εισαγωγή και Κίνητρα	xvii
<b>1 Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή</b>	<b>1</b>
1.1 Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή: Ρύποι, Θέρμανση της Γης και Επισκόπηση Μέσω ενός Απλού Μοντέλου . . . . .	1
1.2 Κατακράτηση Ακτινοβολίας . . . . .	2
1.3 Κατακόρυφη και Οριζόντια Κατανομή Αερίων, Εντοπισμός Αιωρούμενων Σωματιδίων στην Ατμόσφαιρα, Επίδραση στην Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή . . . . .	4
1.4 Τεχνική Lidar: Αρχή Λειτουργίας και Είδη Μετρήσεων . . . . .	4
1.5 Επίλυση της Βασικής Εξίσωσης Lidar . . . . .	7
1.6 Αντίστροφο Πρόβλημα . . . . .	9
<b>2 Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους.</b>	<b>11</b>
2.1 Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους: Ιδιότητες . . . . .	11
2.2 Ανάπτυγμα Ιδιάζουσων Τιμών (SVE) και Συνθήκη Picard . . . . .	13
2.3 Αμφισημεία στη Λύση . . . . .	17
2.4 Φασματικές Ιδιότητες Ιδιάζουσων Συναρτήσεων . . . . .	19
<b>3 Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων</b>	<b>23</b>
3.1 Μέθοδος Τετραγωνισμού . . . . .	23
3.2 Μέθοδος Αναπτυγμάτων . . . . .	24
3.3 Κατάλληλη Επιλογή Μεθόδου . . . . .	26
3.4 Η παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών SVD . . . . .	28
3.5 Ανάλυση της παραγοντοποίησης SVD . . . . .	30
3.6 Θόρυβος στα Δεδομένα και Διακριτή Συνθήκη Picard . . . . .	35
<b>4 Υπολογιστική διάσταση : Μέθοδοι κανονικοποίησης</b>	<b>41</b>
4.1 Ανάγκη για Κανονικοποίηση των Διακριτών Αντίστροφων Προβλημάτων . . . . .	41
4.2 Η μέθοδος της Αποκομμένης SVD (TSVD) . . . . .	42
4.3 Η μέθοδος της Επιλεκτικής SVD (SSVD) . . . . .	45
4.4 Μέθοδος Κανονικοποίησης Tikhonov . . . . .	48
4.5 Θεωρία Διαταραχών . . . . .	53
4.6 Η καμπύλη L . . . . .	54

<b>5</b>	<b>Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης</b>	<b>59</b>
5.1	Σφάλματα Κανονικοποίησης και Σφάλματα Διαταραχών . . . . .	59
5.2	Η Αρχή της Ασυμφωνίας . . . . .	62
5.3	Το Κριτήριο της Καμπύλης L . . . . .	65
5.4	Η Γενικευμένη Μέθοδος Διασταυρωμένης Επικύρωσης . . . . .	70
<b>6</b>	<b>Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μη- κών Κύματος</b>	<b>75</b>
6.1	Το Μη Καλώς Τοποθετημένο Πρόβλημα Ανάκτησης Μικροφυσικών Παραμέτρων . . . . .	75
6.2	Λεπτομέρειες στην Εφαρμογή στο Πρόβλημα Ανάκτησης Μικροφυσικών Παραμέτρων . . . . .	77
6.3	Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων . . . . .	80
6.3.1	Ανάλυση Αποτελεσμάτων από Θεωρητικά Δεδομένα με τη Μέθοδο Discrepancy Principle . . . . .	81
6.3.2	Ανάλυση Αποτελεσμάτων από Θεωρητικά Δεδομένα με τη Μέθοδο GCV . . . . .	88
6.3.3	Ανάλυση Αποτελεσμάτων από Πειραματικά Δεδομένα . . . . .	90
	<b>Βιβλιογραφία - Αναφορές</b>	<b>103</b>

# Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Συγκέντρωση του $CO_2$ (ppmv) - Αστεροσκοπείο Mauna Loa, 1958-2009 (ppmv) . . . . .	2
1.2	Η μέση κατακράτηση ακτινοβολίας ( $Wm^{-2}$ ) από βασικά αέρια, σύγκριση 1750-2000 . . . . .	3
1.3	Ημερήσια μεταβολή της κατακόρυφης κατανομής του συντελεστή οπισθοσκέδασης - Η δορυφορική εικόνα του αισθητήρα TOMS της NASA . . . . .	5
1.4	Εικονογράφηση της βασικής αρχής της μεθόδου lidar . . . . .	5
2.1	Εικονογράφηση της ομαλοποίησης στοιχείων της πηγής του μοντέλου επισκόπησης της βαρύτητας . . . . .	13
2.2	Απεικόνιση του λήμματος Riemann - Lebesgue με τη συνάρτηση $f_\nu(t) = \sin(\nu\pi t)$ . . . . .	13
2.3	Ο αριθμός των ταλαντώσεων ή μηδενισμών των ιδιάζουσων συναρτήσεων $u_i, v_i$ . . . . .	15
2.4	Απεικόνιση της συνθήκης Picard . . . . .	16
2.5	Πρόβλημα Ursell . . . . .	18
3.1	Τρεις τρόποι γραφικής αναπαράστασης για τη λύση του προβλήματος ελέγχου shaw με χρήση μεθόδων τετραγωνισμού . . . . .	27
3.2	Τρεις τρόποι γραφικής αναπαράστασης για τη λύση του προβλήματος ελέγχου baart με χρήση . . . . .	28
3.3	Οι ιδιάζουσες τιμές $\sigma_i$ πινάκων δύο προβλημάτων ελέγχου, επισκόπησης της βαρύτητας και της δεύτερης παραγώγου . . . . .	32
3.4	Πολλαπλό γραφήμα αριστερών ιδιάζουσων συναρτήσεων για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας . . . . .	33
3.5	Το γράφημα Picard για το διακριτοποιημένο πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας, όπου δεν υπεισέρχεται θόρυβος στο δεξί μέλος. . . . .	34
3.6	Το γράφημα Picard για τη διακριτή έκδοση του προβλήματος του Ursell. . . . .	34
3.7	Τρία γραφήματα Picard για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας, όπου υπεισέρχεται θόρυβος στο δεξί μέλος. . . . .	36
3.8	Γραφήματα Picard για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου χωρίς θόρυβο, και δύο γραφήματα Picard όπου υπεισέρχεται θόρυβος στο δεξί μέλος. . . . .	37
3.9	Γραφήματα Picard για το αυστηρώς μη καλώς τοποθετημένο τεχνητό πρόβλημα των L. Fox και E. T Goodwin χωρίς θόρυβο στο δεξί μέλος . . . . .	38
4.1	Ακριβείς λύσεις στο ίδιο γράφημα με «αφελείς» λύσεις για το πρόβλημα το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου και το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. . . . .	42
4.2	Γραφήματα λύσεων TSVD για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. . . . .	45
4.3	Γραφήματα λύσεων SSVD για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου που παράγει πριονοειδείς λύσεις. . . . .	48
4.4	Γραφήματα λύσεων TSVD για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου που παράγει πριονοειδείς λύσεις. . . . .	49
4.5	Γραφήμα Picard για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου που παράγει πριονοειδείς λύσεις . . . . .	50
4.6	Γράφημα των παραγόντων φίλτρου $\phi_i^{[\lambda]}$ για τη μέθοδο κανονικοποίησης Tikhonov ως προς τις ιδιάζουσες τιμές $\sigma_i$ . . . . .	51
4.7	Λύσεις Tikhonov $x_\lambda$ για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας, για εννιά διαφορετικές τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης $\lambda$ . . . . .	52
4.8	Τρισδιάστατη απεικόνιση λύσεων TSVD και Tikhonov για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. . . . .	52

4.9	Δύο παραδείγματα καμπύλων L για τη κανονικοποίηση Tikhonov των προβλημάτων ελέγχου deriv2 και shaw . . . . .	57
5.1	Κοινό γράφημα των σφαλμάτων κανονικοποίησης και διαταραχών ως συναρτήσεις της παραμέτρου αποκοπής $k$ για το πρόβλημα ελέγχου shaw. . . . .	60
5.2	Γράφημα Picard για το πρόβλημα ελέγχου shaw, όπου έχει σημειωθεί το επίπεδο του θορύβου του δεξιού μέλους και δύο γραφήματα για εκτιμήσεις της νόρμας της λύσης TSVD και της αντίστοιχης νόρμας υπολοίπου. . . . .	62
5.3	Τρισδιάστατο γράφημα λύσεων TSVD για το πρόβλημα ελέγχου shaw . . . . .	63
5.4	Εικονογράφιση της αρχής της ασυμφωνίας (discrepancy principle) για το πρόβλημα ελέγχου shaw. . . . .	63
5.5	Γράφημα λύσεων για την επίδειξη της ευαισθησίας της αρχής της ασυμφωνίας για το πρόβλημα ελέγχου shaw, όπου έχει θεωρηθεί $\ Ax_\lambda - b\ _2 = \eta n^{1/2}$ ή $\ Ax_k - b\ _2 = \ e\ _2$ . . . . .	64
5.6	Γράφημα λύσεων για την επίδειξη της ευαισθησίας της αρχής της ασυμφωνίας για το πρόβλημα ελέγχου shaw, όπου έχει θεωρηθεί $\ Ax_\lambda - b\ _2 = \eta n^{1/2}$ με παράγοντα ασφάλειας $\beta_{dp} = 2$ . . . . .	65
5.7	Παράλληλη διεξαγωγή του αριθμητικού πειράματος των εικόνων 5.5 και 5.6), για το ίδιο $\ e\ _2$ . . . . .	66
5.8	Η καμπύλη L και η αντίστοιχη καμπυλότητα για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. . . . .	69
5.9	Γραφήματα της συνάρτησης της μεθόδου generalized cross validation για την κανονικοποίηση Tikhonov για το πρόβλημα ελέγχου shaw και gravity . . . . .	72
5.10	Γραφήματα της συνάρτησης της μεθόδου generalized cross validation για την κανονικοποίηση Tikhonov για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. . . . .	72
5.11	Γραφήματα της συνάρτησης της μεθόδου generalized cross validation για την κανονικοποίηση TSVD για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. . . . .	73
6.1	Η κατανομή όγκου μεγέθους (volume distribution) για $r_{min} = 0.04$ και m.d. διαδοχικά ίσο με 40, 30, 20 και 10%. . . . .	83
6.2	Η κατανομή όγκου μεγέθους για m.d.=20% για διαφορετικά inversion windows. . . . .	83
6.3	Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για $l.r_{min} = 0.04$ και m.d. ίσο με 40, 30, 20 και 10%. . . . .	84
6.4	Η κατανομή όγκου μεγέθους για $l.r_{min} = 0.07$ , και m.d. ίσο με 10% ή 20% μετά την εφαρμογή της συνοριακής συνθήκης m.l.r.e. για 10% και 20%. . . . .	86
6.5	Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για $l.r_{min} = 0.13$ , m.d.=20%, χωρίς και με m.l.r.e.=20%. . . . .	87
6.6	Η κατανομή όγκου μεγέθους για m.d.=10% και m.l.r.e.=20% για διαφορετικά inversion windows. . . . .	87
6.7	Εξάρτηση των μικροφυσικών παραμέτρων που υπολογίζονται από το left $r_{min}$ για το run 1. . . . .	92
6.8	Η κατανομή όγκου μεγέθους για m.d.=30% με τη μέθοδο discrepancy principle (run 1) και για m.d.=40% με τη μέθοδο GCV (run 2) χωρίς και με m.l.r.e.=10%. . . . .	93
6.9	Η κατανομή όγκου μεγέθους για $r_{min} = 0.07$ m.d.=20% για τα run 1, 2 και για $r_{min} = 0.17$ και για $r_{min} = 0.17$ , m.d.=10% και m.l.r.e.=10% . . . . .	94
6.10	Εξάρτηση των μικροφυσικών παραμέτρων που υπολογίζονται από το left $r_{min}$ για το run 2. . . . .	95
6.11	Στοιχεία μέτρησης από Raman lidar του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου. . . . .	96
6.12	Range corrected σήμα καθ' ύψος από μέτρηση Raman lidar του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου. . . . .	96
6.13	Η κατανομή όγκου μεγέθους για $l.r_{min} = 0.04$ και m.d. ίσο με 30, 20, 12 και 5%. . . . .	98
6.14	Η κατανομή του αριθμού των σωματιδίων ως προς $r$ για $l.r_{min} = 0.04$ και m.d. ίσο με 30, 20, 12 και 5%. . . . .	98
6.15	Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για $l.r_{min} = 0.04$ , m.d.=5% και m.l.r.e.=10%. . . . .	99
6.16	Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για $l.r_{min} = 0.07$ , m.d.=12% και m.l.r.e.=10%. . . . .	100
6.17	Η κατανομή όγκου μεγέθους για m.d.=12% και m.l.r.e.=10% μεταβάλλοντας το $l.r_{min}$ σε 0.04, 0.07, 0.13, και 0.17. . . . .	100
6.18	Η κατανομή όγκου μεγέθους και η κατανομή του αριθμού των σωματιδίων για $l.r_{min}$ ίσο με 0.04 και 0.07 με m.d.=5% και m.l.r.e.=10%. . . . .	101
6.19	Εξάρτηση των μικροφυσικών παραμέτρων που υπολογίζονται από το left $r_{min}$ για το run 3. . . . .	102

# Κατάλογος Πινάκων

1.1	Ανιχνευόμενοι ρυπαντές ή συστατικά της ατμόσφαιρας και η αντίστοιχη διεργασία (αλληλεπίδραση ακτινοβολίας - ρυπαντή) . . . . .	7
6.1	Παράμετροι για το run 1. . . . .	81
6.2	Αποτελέσματα για το run 1: θεωρητικά δεδομένα (βλ. πίν. 6.1), μέθοδος discrepancy principle. . . . .	85
6.3	Αποτελέσματα για το run 2: θεωρητικά δεδομένα (βλ. πίν. 6.1), μέθοδος GCV . . . . .	89
6.4	Παράμετροι για τα run 2. . . . .	90
6.5	Αποτελέσματα για το run 3: πειραματικά δεδομένα (βλ. πίν. 6.4), μέθοδος discrep. principle. . . . .	97





# Εισαγωγή και Κίνητρα

Τα αιωρούμενα σωματίδια (aerosols particles) προέρχονται από φυσικές πηγές (θαλασσιο άλας, σκόνη ερήμου, ηφαιστειακά αερολύματα) ή ανθρωπογενείς πηγές (ρύπανση εκπεμπόμενη από την οδική κυκλοφορία, τη βιομηχανία, δραστηριότητες καύσης της βιομάζας, κλπ. Ως αερόλυμα (aerosol) χαρακτηρίζεται οποιοδήποτε μετασταθές αιώρημα ενός πληθυσμού σωματιδίων εγκλεισμένων στον όγκο ενός αέριου μέσου (π.χ. ατμοσφαιρικός αέρας)\*. Τα σωματίδια των αερολυμάτων επηρεάζουν σε ένα ευρύ φάσμα το γήινο κλίμα και τις καιρικές συνθήκες σε τοπικό και παγκόσμιο επίπεδο, όπως τα σύννεφα και τα υδατώδη ατμοσφαιρικά κατακρημνίσματα† Είναι σημαντικά για την κατανόηση χημικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στην τροπόσφαιρα και τη στρατόσφαιρα. Επιδρούν είτε άμεσα στην ακτινοβολητική ισορροπία (ενεργειακό ισοζύγιο) της γης, μέσω απορρόφησης και σκέδασης της εισερχόμενης ηλιακής ακτινοβολίας και απορρόφησης και επανεκπομπής εξερχόμενης ακτινοβολίας μεγάλου μήκους κύματος‡, είτε μέσω έμμεσων -ή μη έμμεσων- τρόπων μεταβάλλοντας ιδιότητες των συννέφων. Οι άμεσες ή έμμεσες επιδράσεις των αερολυμάτων συνεισφέρουν στην ολική αβεβαιότητά μας για την κατακράτηση ακτινοβολίας (radiative forcing) § που σε μέσες άκρες περιγράφει τη διαφορά μεταξύ εισερχόμενης και εξερχόμενης ενέργειας στην τροπόπαυση και συνδράμει στην παγκόσμια κλιματική αλλαγή.

Η παρούσα γνώση για την ποσότητα και κατανομή των αιωρούμενων σωματιδίων στην ατμόσφαιρα είναι ανεπαρκής για το υπολογισμό της επίρρειάς τους στις παγκόσμιες ή τοπικές περιβαλλοντικές συνθήκες. Η μεγάλη ανομοιογένεια των πηγών των αερολυμάτων οδηγεί σε μεγάλη χωρική και χρονική ποικιλία χημικών, οπτικών, και φυσικών ιδιοτήτων των αερολυμάτων, το οποίο δυσχεραίνει τη μελέτη και το χαρακτηρισμό των τελευταίων. Το κενό αυτό στις παρατηρήσεις μας καλείται να καλύψει η προηγμένη χρήση laser τηλεπισκόπησης (advanced laser remote sensing). Υπάρχουν αρκετές μέθοδοι μέτρησης της συγκέντρωσης και των ιδιοτήτων των αιωρούμενων σωματιδίων, όπως είναι ο συντελεστής διάθλασης για τον υπολογισμό της λευκότητας μεμονωμένης σκέδασης ¶ (single scattering albedo), ή για παράδειγμα το μέγεθος των αερολυμάτων. Μία τέτοια μέθοδος είναι η μέθοδος lidar, η οποία σε συνδυασμό με την έλλειψη επαρκούς πληροφορίας στην κατακόρυφη κατανομή, καθίσταται το πλέον κατάλληλο εργαλείο συλλογής πληροφοριών για το σκοπό αυτό. Η μέθοδος lidar έχει πλούσιο φάσμα εφαρμογών, όπως π.χ. εγκατάσταση συσκευών lidar σε αεροπλάνα για τη συγκέντρωση τοπολογικών πληροφοριών για τη μοντελοποίηση του εδάφους, κ.α, ωστόσο εδώ αναφερόμαστε κυρίως σε επίγεια lidar που χρησιμοποιούνται για τη μελέτη των οπτικών και μικροφυσικών ιδιοτήτων των ατμοσφαιρικών αερολυμάτων.

Το EARLINET (European Aerosol Research Lidar Network) είναι το πρώτο δίκτυο μελέτης αερολυμάτων με χρήση συστημάτων lidar με σκοπό να παράξει μία κατανοητή, ποσοτική και στατιστικά αξιολογη βάση δεδομένων σε ηπειρωτικό επίπεδο περιλαμβάνοντας περισσότερα από 20000 κατακόρυφες κατανομές αερολυμάτων, αναφορικά με τις παραμέτρους εξασθένησης και οπισθοσκέδασης και λόγους lidar, όπου οι τελευταίες ανακτώνται από διαδοχικές ανεξάρτητες lidar μετρήσεις των δύο προηγούμενων. Ο κύριος στόχος του δικτύου EARLINET είναι τα ακριβή, καλώς ορισμένα και εύκολα προσβάσιμα δεδομένα για χρήση

\*Οι εκφράσεις «αιωρούμενα σωματίδια» ή «σωματίδια των αερολυμάτων» είναι ταυτόσημες και εναλλάσσονται στο κείμενο. Όταν δε δημιουργείται σύγχυση μπορεί να αναφέρονται απλά και ως «αερολύματα». Ο όρος «μετασταθές» έρχεται να περιγράψει τον δυναμικό ακόμη χαρακτήρα (μακριά από θερμοδυναμική ισορροπία) των ποιοτικών χαρακτηριστικών του. Βλ. [HW99].

†Ο όρος αναφέρεται στη βιβλιογραφία και ως Υετός και αφορά κάθε πτώση ή εναπόθεση στο έδαφος προϊόντων του ύδατος (σε υγρή ή στερεά μορφή, επιμερισμένη) τα οποία προέρχονται από συμπύκνωση των υδρατμών της ατμόσφαιρας, όπως Βροχή, Χιονόνερο ή Χιονόβροχο ή Χιονόλυτο, Ψεκάδες, Χαλάζι, Χιόνι, Χιονόκοκκοι, Παγοβελόνες, Παγόκοκκοι και ο Υαλοπάγος που δημιουργείται όμως στο έδαφος.

‡Αναφέρεται σε μέρος του φάσματος ραδιοκυμάτων με σχετικά μεγάλα μήκη κύματος.

§Μεταβολή της ολικής ισχύος της ακτινοβολίας μεταξύ στρωμάτων της ατμόσφαιρας. Μετριέται σε  $\text{Watt/m}^2$  και ποσοτικοποιείται κυρίως στην τροπόπαυση.

¶Λευκότητα μεμονωμένης σκέδασης ορίζεται ως το ηλίκο,  $\omega = \frac{C_{scatt}}{C_{scatt} + C_{abs}}$ , όπου  $C_{scatt}$  και  $C_{abs}$ , η ενεργός διατομή σκέδασης και απορρόφησης από τα αερολύματα αντίστοιχα. Βλ. [PA10].

στην επιστήμη και στις περιβαλλοντικές υπηρεσίες.

Ειδικότερα, τα δεδομένα που συλλέγονται, μοντελοποιούνται και ικανοποιούν μία ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm α' είδους,

$$\Gamma(\lambda) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} \pi r^2 Q_{\pi/ext}(r, \lambda, m) n(r) dr$$

η οποία περιέχει ως γνωστές ποσότητες τους πυρήνες  $Q$  για σκέδαση Mie σφαιρικών σωματιδίων (δηλ. περιέχει την πληροφορία του μηχανισμού σκέδασης), και τους συντελεστές εξασθένησης ( $ext$ ) (extinction coefficients) ή συντελεστές οπισθοσκέδασης ( $\pi$ ) (backscatter coefficients),  $\Gamma(\lambda)$ , όπου  $\lambda$  το μήκος κύματος. Δεδομένα επίσης θεωρούνται και κάποια λογικά άνω και κάτω φράγματα,  $r_{max}$ ,  $r_{min}$  αντίστοιχα που αφορούν το μέγεθος των σωματιδίων των αερολυμάτων. Από αυτή την εξίσωση καλούμαστε να εξάγουμε πληροφορίες για μικροφυσικές παραμέτρους, όπως είναι η κατανομή αριθμού των σωματιδίων  $n(r)$  (ή η κατανομή όγκου), η ενεργός ακτίνα, ο μιγαδικός δείκτης διάθλασης  $m$  και η συγχέντρωση ολικού όγκου. Είναι ήδη εμφανές ότι απαιτείται η αντιστροφή της παραπάνω εξίσωσης, διότι δεν βρίσκεται σε λελυμένη μορφή ως προς την επιθυμητή ποσότητα  $n(r)$ . Τότε όμως, όπως θα δούμε, το πρόβλημα μας μετατρέπεται σε μη γραμμικό και μη καλώς τοποθετημένο, θέτοντας σε κίνδυνο όχι μόνο την μοναδικότητα της λύσης αλλά ακόμα και την ύπαρξη, υπό τις συνθήκες που περιορίζουμε να υπακούει ο χώρος των λύσεων. Αξιοσημείωτο είναι δε, ότι λόγω κάποιων έμφυτων ιδιοτήτων των ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm α' είδους, ακόμα και στην περίπτωση που υπάρχουν λύσεις, δεν εξυπακούεται ότι οι υπολογιστικοί αλγόριθμοι που θα αναπτυχθούν στην πορεία, θα παράξουν λύσεις με νόημα.

Προβλήματα αξιοπιστίας των δεδομένων και κατάλληλης αξιοποίησής τους (μοντελοποίησης) που να ελαχιστοποιεί την αβεβαιότητά μας επάγοντας βέβαια κάποιες παραδοχές, είναι υπαρκτά και αποτελούν ερευνητικό ζήτημα. Ακολουθούνται, βεβαίως, αρκετά ικανοποιητικές μέθοδοι και υποθέσεις όπως η (χρήση σκέδασης Raman) που ξεπερνά αυτά τα εμπόδια σε κάποιο βαθμό, αλλά και πάλι το κύρος των αποτελεσμάτων αφορά μόνο σφαιρικά σωματίδια<sup>||</sup>. Ωστόσο, εδώ δε θα μας απασχολήσουν τρόποι βελτιστοποίησης του τρόπου συλλογής των δεδομένων και αποτελεσματικής μοντελοποίησης τους. Αντικείμενο του παρόντος είναι οι μέθοδοι αριθμητικής επίλυσης του αντίστροφου προβλήματος, ενώ ο κύριος στόχος μας είναι τεχνικές κανονικοποίησης του, ώστε να μετριάσουμε την έμφυτη ιδιότητά του ως μη καλώς ορισμένο πρόβλημα.

Υποθέτοντας ότι ο δείκτης διάθλασης είναι άγνωστος, δηλ. μία μεταβλητή της εξίσωσης, το πρόβλημά μας είναι ένα μη γραμμικό και μη καλώς τοποθετημένο. Εδώ ακολουθούμε τη γραμμή ότι ο δείκτης διάθλασης αποτελεί μέρος των δεδομένων. Σε περιπτώσεις που δε γνωρίζουμε το δείκτη διάθλαση των σωματιδίων, είναι δυνατό να θεωρήσουμε το γραμμικό πρόβλημα, κρατώντας σταθερό τον δείκτη διάθλασης (που είναι εξαρτώμενος από το μήκος κύματος  $\lambda$ ) για κάθε σημείο σε ένα προκαθορισμένο πλέγμα δεικτών διάθλασης που περιέχει όλες τις εφικτές (λογικές) τιμές τους.

Με την ευκαιρία του ορισμού των ολοκληρωτικών εξισώσεων α' είδους, θα εξετάσουμε διάφορα ενδιαφέροντα γραμμικά αντιστροφα μη καλώς τοποθετημένα προβλήματα. Η μελέτη αυτών των απλούστερων προβλημάτων θα αποτελέσει βάση της κατανόησής μας. Πρωταρχικό βήμα στην αριθμητική (και μοναδική) αντιμετώπιση των αντίστροφων μη καλώς τοποθετημένων προβλημάτων είναι διακριτοποίησή τους μέσω κάποιων μεθόδων, η οποία μας απαλλάσσει μεν από το ολοκλήρωμα, αλλά εισάγει αμέσως το σφάλμα σε ότι ακολουθεί. Όταν αυτό ξεπεραστεί, το πρόβλημά μας παίρνει την πολύ πιο ευέλικτη μορφή ενός γραμμικού συστήματος εξισώσεων, το οποίο μπορεί κανείς ορμώμενος από την απλούστευση να νομίσει ότι μπορεί να εξάγει χρήσιμες λύσεις, χρησιμοποιώντας μία απλή μέθοδο. Δυστυχώς, οι λύσεις που παράγονται με τις πάγιες μεθόδους: αντιστροφή του πίνακα του συστήματος για τετραγωνικούς πίνακες, ή λύση του αντίστοιχου προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων για μη τετραγωνικούς πίνακες, είναι ιδιαίτερα αφελής αντιμετώπιση. Η εμπειρία έχει δείξει ότι τέτοιες λύσεις απέχουν πολύ από τις ακριβείς λύσεις (όταν υπάρχει κάποια ή ολική (αναλυτική) γνώση για αυτές).

Επομένως, η επόμενη φάση της αντιμετώπισης αυτών των προβλημάτων, είναι να προσπαθήσουμε να μετριάσουμε αν όχι να εξαλείψουμε, τον παράγοντα θόρυβο που επηρεάζει σημαντικά την «αφελή» λύση μας, διαδικασία που είναι γνωστή ως κανονικοποίηση. Οι μέθοδοι κανονικοποίησης που παρουσιάζονται, αν και είναι ισχυρά όπλα καταπολέμησης του θορύβου, απαιτούν τον υπολογισμό κάποιων παραμέτρων, που με τη σειρά του απαιτεί κάποια περαιτέρω γνώση του προβλήματος, στην οποία συχνά δεν έχουμε πρόσβαση. Η κατάλληλη επιλογή αυτών των παραμέτρων είναι πολύ σημαντική διότι οδηγεί σε λύσεις που αντιστοιχούν καλύτερα στην πραγματικότητα και αφιερώνεται ένα κεφάλαιο (5) σε αυτό. Πρέπει να αναφερθεί ότι μόνιμος σύμμαχος και συνοδός σε όλες τις μεθόδους μας είναι η παραγοντοποίηση SVD ενός πίνακα, που αποτελεί

<sup>||</sup> Για μη σφαιρικά σωματίδια (όπως η σκόνη από τη Sahara) η θεωρητική πλευρά της σκέδασης του φωτός δεν έχει αναπτυχθεί ιδιαίτερα ακόμα, οπότε δεν είναι δυνατή η αντιστροφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm α' είδους.

την «ακτινογραφία» του πίνακα και μέσω αυτής εξάγουμε όλα τα χρήσιμα συμπεράσματα που βρίσκονται στην καρδιά της εκάστοτε εφαρμογής.

Επιδιώκουμε να κατανοήσουμε εις βάθος το διακριτό αντίστροφο πρόβλημα που αντιστοιχεί σε κάθε ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm  $\alpha'$  είδους μέσω των προβλημάτων ελέγχου που παραθέτουμε καθώς και τη συμπεριφορά τους μετά την εφαρμογή των παραπάνω μεθόδων. Απώτερος σκοπός μας είναι βέβαια η εφαρμογή αυτών των μεθόδων για το πρόβλημα ανάκτησης των μικροφυσικών παραμέτρων των σωματιδίων. Η εφαρμογή στο κεντρικό μας πρόβλημα θα γίνει αυτοματοποιημένα μέσω ενός προγράμματος του Detlef Müller, το οποίο έχει τη δυνατότητα να τρέξει ταυτόχρονα για πολλές δεδομένες εισόδους από οπτικές παραμέτρους (συντελεστές εξασθένησης και οπισθοσκέδασης) και να δημιουργήσει ένα μέσο όρο λύσεων.

Η δομή της εργασίας περιλαμβάνει παρουσίαση μεθόδων διακριτοποίησης, μεθόδων κανονικοποίησης και τεχνικών εύρεσης κατάλληλων παραμέτρων κανονικοποίησης, οι οποίες εφαρμόζονται σε διάφορα προβλήματα ελέγχου. Η υλοποίηση σχεδόν όλων των μεθόδων και τεχνικών οφείλεται σε ρουτίνες ή παραλλαγές ρουτινών από το προγραμματιστικό πακέτο **”Regularization Tools”** του Matlab, τις οποίες έχουμε τρέξει στο *Octave*. Αυτό το πακέτο οφείλεται στον Christian Hansen, βλ. [HC94] και είναι διαθέσιμο (ελεύθερα) από το Netlib στη σελίδα <http://www.netlib.org/numeralgo>.

Προτού διεισδύσουμε στις μαθηματικές τεχνικές για την αριθμητική επίλυση του προβλήματος αντίστροφης της εξίσωσης Fredholm  $\alpha'$  είδους, είναι αναγκαίο να παρουσιάσουμε, χωρίς να επεκταθούμε, καποια στοιχεία Ατμοσφαιρικής Φυσικής, στα οποία εκτίθενται ζητήματα που θίγονται στην εισαγωγή μας πιο αναλυτικά, παρατίθεται η εξίσωση *lidar* και αναδεικνύονται ακόμα περισσότερο τα κίνητρά μας.



# Κεφάλαιο 1

## Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή

### 1.1 Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή: Ρύποι, Θέρμανση της Γης και Επισκόπηση Μέσω ενός Απλού Μοντέλου

Η γήινη ατμόσφαιρα, όπως πιστεύεται σήμερα, δημιουργήθηκε πριν από περίπου 4.6 δισεκατομμύρια χρόνια, με αρχική σύνθεση το διοξείδιο του άνθρακα ( $CO_2$ ), το άζωτο ( $N_2$ ), τους υδρατμούς ( $H_2O$ ) και το υδρογόνο ( $H_2$ ). Έστερα από μακροχρόνιες διεργασίες μεταξύ της ξηράς, των ωκεανών και των αερίων της ατμόσφαιρας, η σύσταση της γήινης ατμόσφαιρας σταθεροποιήθηκε, όπως πιστεύεται, πριν από περίπου 400 εκατομμύρια χρόνια. Η σύσταση της ατμόσφαιρας παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στη διαμόρφωση του κλίματος και στις διάφορες φυσικο-χημικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα σ'αυτήν. Έτσι, η επιβάρυνση του ατμοσφαιρικού περιβάλλοντος με πολυάριθμους ανθρωπογενείς ρύπους παίζει πλέον ενεργό ρόλο στην Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή.

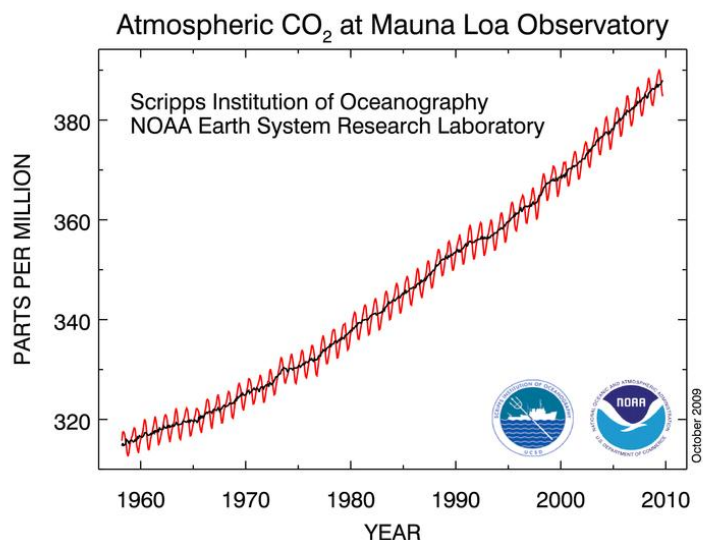
Η Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή (ΠΚΑ) ορίζεται ως η αργή και σταθερή μεταβολή του γήινου κλίματος, τόσο μέσω των φυσικών, όσο και των ανθρωπογενών επιδράσεων. Η αυξανόμενη συγκέντρωση των αερίων του θερμοκηπίου, η επέκταση της «τρύπας του όζοντος», η συστηματική καταστροφή των τροπικών δασών και άλλοι παράγοντες συντελούν στην ΠΚΑ. Οι ανθρωπογενείς και οι φυσικές (έκρηξη ηφαιστείων) διεργασίες είναι ικανές να επηρεάσουν, μακροπρόθεσμα, σε σημαντικό βαθμό τη σύσταση της γήινης ατμόσφαιρας, όσον αφορά τις συγκεντρώσεις των αερίων ιχνηθετών (trace gases:  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $O_3$ ,  $N_2O$ ,  $NO_x$ , κλπ.). Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι οι εκπομπές του  $CO_2$  από την καύση ορυκτών καυσίμων – άνθρακα/πετρέλαιο, καύση τροπικών δασών, κλπ., υπερβαίνει τα 6 δις τόνους το χρόνο.

Οι κύριοι μηχανισμοί ανταλλαγής του άνθρακα στην ατμόσφαιρα αποτελούν η φωτοσύνθεση (κατακράτηση  $CO_2$ ) και η διαπνοή (απόδοση  $CO_2$  στο περιβάλλον). Και οι δύο αυτοί μηχανισμοί ανταλλαγής άνθρακα στην φύση είναι πολύ σημαντικοί και εκτιμάται ότι είναι περίπου μια τάξη μεγέθους πιο σημαντικοί από την εκπομπή  $CO_2$  ανθρωπογενούς προέλευσης. Ο δασικός πλούτος της γης έχει τη μοναδική ικανότητα να αποθηκεύει τεράστιες ποσότητες  $CO_2$ , τις οποίες και αποδεδμεύει όταν καταστραφεί. Σημαντικό όμως ρόλο παίζουν στο γήινο ισοζύγιο του  $CO_2$  και οι ωκεανοί που είναι επίσης ικανοί να κατακρατούν τεράστιες ποσότητες  $CO_2$ . Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι ο Νότιος ωκεανός γύρω από την Ανταρκτική πιστεύεται ότι κατακρατά περίπου το 40-50% του  $CO_2$  που εκπέμπεται από ανθρωπογενείς δραστηριότητες, βλ. [SG02]. Αξιοσημείωτο είναι το γεγονός της έντονης αυξητικής τάσης της μετρούμενης συγκέντρωσης του  $CO_2$  με ρυθμό περίπου 0.35% το χρόνο, που είναι άμεσο αποτέλεσμα της ανθρώπινης δραστηριότητας, όπως καταγράφεται στο Αστεροσκοπείο Mauna Loa στην Χαβάη των Η.Π.Α, κατά τη χρονική περίοδο 1958-2009 (Robert Simmon, από δεδομένα της NOAA Climate Monitoring & Diagnostics Laboratory) όπως φαίνονται στην εικόνα 1.1.

Θέλοντας να σχηματίσουμε το ενεργειακό ισοζύγιο της γης σε συνδυασμό με την παγκόσμια κλιματική αλλαγή μπορούμε να θεωρήσουμε ένα απλό μοντέλο. Σε αυτό, θεωρούμε ότι το ισοζύγιο ακτινοβολίας διαταράσσεται ενώ απαιτούμε το ισοζύγιο ενέργειας να είναι σταθερό, το δε μοντέλο για τη μέση ένταση ηλιακής ακτινοβολίας,  $F$  που απορροφάται από την ατμόσφαιρα και τους ωκεανούς, υποτίθεται ως εξής

$$F = (1 - R)F_s/4,$$

όπου  $R$  η ανακλαστικότητα ή λευκότητα (albedo), δηλ. το πηλίκο της έντασης της ανακλώμενης δέσμης προς την ολική ένταση, και  $F_s = 1370 W m^{-2}$  ηλιακή σταθερά (προσπίπτουσα ισχύς ηλιακής ακτινοβολίας



Εικόνα 1.1: Συγκέντρωση του  $CO_2$  (σε ppmv) όπως καταγράφεται στο Αστεροσκοπείο Mauna Loa στην Χαβάη των Η.Π.Α, κατά τη χρονική περίοδο 1958-2009 (Robert Simmon, από δεδομένα της NOAA Climate Monitoring & Diagnostics Laboratory).

προς τη γη). Η εκπεμπόμενη μέση ένταση ακτινοβολίας από τη γη,  $F_T$ , (η γη θεωρείται εδώ σαν φαιό σώμα) μοντελοποιείται σαν μία «διόρθωση» του νόμου Stefan – Boltzmann,  $F_T = \alpha T_s^4$ , όπου  $\alpha < 1$  και  $T_s$  η θερμοκρασία της γήινης επιφάνειας. Με αυτές τις παραδοχές, για μία αύξηση του ατμοσφαιρικού  $CO_2$  κατά  $0.3K(Wm^{-2})^{-1}$ , η αναμενόμενη αύξηση στη θερμοκρασία της γης βρίσκουμε ότι είναι περίπου  $1.4K$ . Σύμφωνα δε με τα τελευταία επιστημονικά δεδομένα η επίδραση των αερολυμάτων στην Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή στην περιοχή της Μεσογείου είναι αρκετά σημαντική και μπορεί να συνοψισθεί ως εξής:

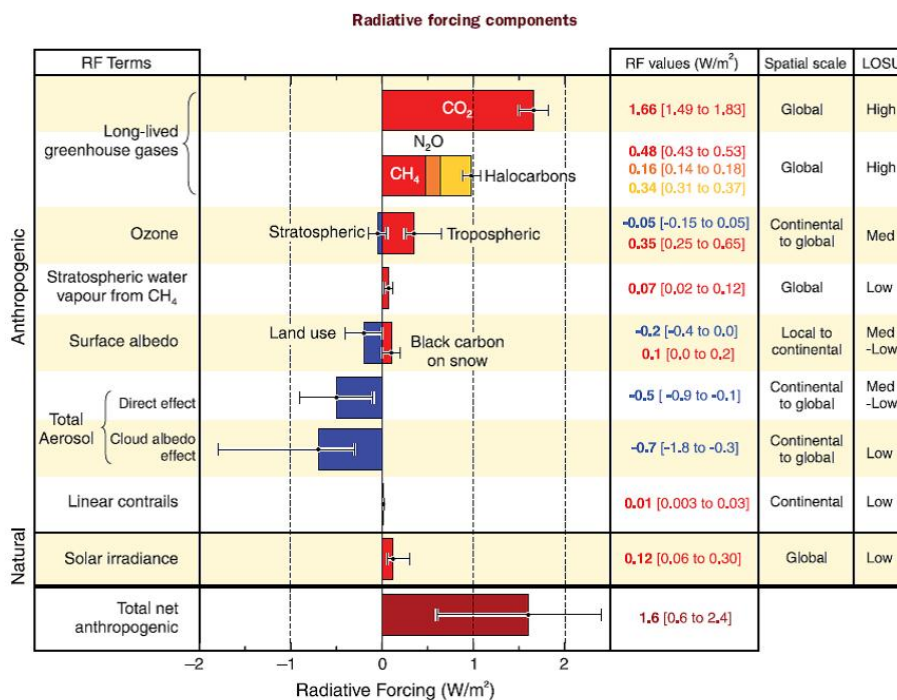
- Τα έντονα επεισόδια μεταφοράς σκόνης από την έρημο της Σαχάρα, καθώς και οι δασικές πυρκαγιές στη Μεσόγειο προκαλούν κυρίως τοπική αύξηση της θερμοκρασίας καθ' ύψος στην περιοχή της κατώτερης τροπόσφαιρας (1 – 5 km),
- Τα αιωρούμενα σωματίδια ανθρωπογενούς προέλευσης (βιομηχανία, κυκλοφοριακό, δασικές πυρκαγιές) επηρεάζουν τις βροχοπτώσεις στις μεγάλες αστικές περιοχές και προκαλούν τοπική θέρμανση ή τοπική ψύξη (ανάλογα με τη χημική τους σύσταση) σε διάφορες περιοχές της κατώτερης τροπόσφαιρας. Επιπλέον, επιδρούν σημαντικά στον σχηματισμό των νεφών (μέσω μεταβολής της λευκότητας τους) με άμεση επίδραση στη μεταβολή της ατμοσφαιρικής σχετικής υγρασίας. [PA10]

## 1.2 Κατακράτηση Ακτινοβολίας

Η **κατακράτηση ακτινοβολίας** (radiative forcing), που προκαλείται λόγω διαταραχής της συγκέντρωσης ενός αερίου ιχνηθέτη, ορίζεται από την καθαρή μεταβολή της ροής ακτινοβολίας στην τροπόπαυση, εάν όλα τα άλλα αέρια ιχνηθέτες παραμείνουν σε σταθερή συγκέντρωση (WMO, 2003). Η μεταβολή αυτή υπολογίζεται από ένα μονο-διάστατο μοντέλο διάδοσης της ακτινοβολίας στην ατμόσφαιρα, και μπορεί να είναι είτε θετική (positive radiative forcing) είτε αρνητική (negative radiative forcing), ενώ αφορά μόνο το σύστημα επιφάνεια γης - τροπόσφαιρα.

Εκτός από το  $CO_2$  και άλλα αέρια, όπως τα  $CH_4$ ,  $O_3$ ,  $N_2O$ ,  $NO_x$ ,  $H_2O$ , αλλά και τα αιωρούμενα σωματίδια παίζουν σημαντικό ρόλο στην ΠΚΑ. Τα αιωρούμενα σωματίδια επηρεάζουν το ενεργειακό ισοζύγιο της γης, 1ον) μέσω της σκέδασης και της απορρόφησης της προσπίπτουσας ηλιακής και της εκπεμπόμενης γήινης ακτινοβολίας (βλ. [AC92, KT02]), κάτι που εξαρτάται από τη χημική τους σύσταση (φαινόμενο που στη διεθνή βιβλιογραφία αναφέρεται ως *άμεσο φαινόμενο των αερολυμάτων* "direct aerosol effect", και 2ον) ενεργούν σαν πυρήνες συμπύκνωσης (cloud condensation nuclei: CCN) των υδρατμών και επομένως, καθορίζουν τη συγκέντρωση των υδροσταγονιδίων, επηρεάζουν τις βροχοπτώσεις και το χρόνο ζωής των θερμών

## 1.2. Κατακράτηση Ακτινοβολίας (Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή)



Εικόνα 1.2: Η μέση κατακράτηση ακτινοβολίας (σε  $Wm^{-2}$ ) που προκαλείται από τα βασικότερα αέρια του φαινομένου του θερμοκηπίου ( $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $O_3$ ,  $N_2O$ ,  $NO_x$ , αιωρούμενα σωματίδια, κλπ.), με βάση το έτος αναφοράς 1750 (πριν την βιομηχανική επανάσταση) και σύγκριση με το έτος 2000 (IPCC, 2007).

νεφών (βλ. [LF01]), (φαινόμενο που στη διεθνή βιβλιογραφία αναφέρεται ως *έμμεσο φαινόμενο των αερολυμάτων* "indirect aerosol effect"). Έτσι, τα σύννεφα που εμφανίζονται «λευκά» αποτελούνται από μικρά υδροσταγονίδια και παρουσιάζουν μεγάλη λευκότητα και επομένως, σκεδιάζουν έντονα την προσπίπτουσα σε αυτά ηλιακή ακτινοβολία. Αντίθετα, τα «σκούρα» σύννεφα αποτελούνται από μεγάλα υδροσταγονίδια και παρουσιάζουν έντονη απορρόφηση της προσπίπτουσας σε αυτά ηλιακής ακτινοβολίας.

Η ταξινόμηση των αιωρούμενων σωματιδίων, αναφορικά με τη χημική τους σύσταση, περιλαμβάνει τα σωματίδια που περιέχουν θειϊκά, νιτρικά, αμμωνιούχα άλατα καθώς και ενώσεις με βάση τον άνθρακα. Τα τελευταία, διαχωρίζονται σε αυτά που περιέχουν οργανικό άνθρακα (organic carbon: OC) και αυτά που περιέχουν κυρίως ανθράκη (black carbon: BC). Τα σωματίδια OC προέρχονται από χημικές διαδικασίες καύσης, ενώ τα BC προέρχονται από καύση βιομάζας και καύση ορυκτών καυσίμων.

Τα OC σωματίδια και αυτά που περιέχουν θειϊκά άλατα προκαλούν έντονη σκεδάση της ηλιακής ακτινοβολίας και επομένως προκαλούν τοπική ψύξη της ατμόσφαιρας (φαινόμενο που στη διεθνή βιβλιογραφία αναφέρεται ως *άμεσο φαινόμενο ψύξης* "direct cooling effect"). Αντίθετα, τα σωματίδια BC και αυτά που περιέχουν άλατα πυριτίου και σιδήρου (mineral dust) απορροφούν έντονα την ηλιακή και τη γήινη υπέρυθη ακτινοβολία, με αποτέλεσμα να προκαλούν τοπική θέρμανση της ατμόσφαιρας (φαινόμενο που στη διεθνή βιβλιογραφία αναφέρεται ως *άμεσο φαινόμενο θέρμανσης* "direct warming effect").

Στην εικόνα 1.2 παρουσιάζεται η μέση κατακράτηση ακτινοβολίας (σε  $Wm^{-2}$ ) που προκαλείται από τα βασικότερα αέρια του φαινομένου του θερμοκηπίου ( $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $O_3$ ,  $N_2O$ ,  $NO_x$ , αιωρούμενα σωματίδια, κλπ.), με βάση το έτος αναφοράς 1750 (πριν την βιομηχανική επανάσταση) και σύγκριση με το έτος 2000, με βάση ένα κλιματικό μοντέλο. Τα στοιχεία αυτά παραχωρήθηκαν από την Διακυβερνητική Επιτροπή για την Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή (IPCC: Intergovernmental Panel on Climate Change) και υποβλήθηκαν στην παγκόσμια κοινότητα με στόχο την ενημέρωση και την ευαισθητοποίησή της σε θέματα που αφορούν το φαινόμενο του θερμοκηπίου. Στην εικόνα βλέπουμε επίσης και τις φυσικές μεταβολές της ηλιακής σταθεράς από το έτος 1850 έως σήμερα. Σε όλες τις περιπτώσεις παρουσιάζεται και η αβεβαιότητα υπολογισμού της μέσης κατακράτηση ακτινοβολίας (error bars). Από την εικόνα αυτή είναι προφανές ότι το  $CO_2$  προκαλεί τη μεγαλύτερη θετική κατακράτηση ακτινοβολίας ( $+1.4 Wm^{-2}$ ), και ακολουθούν το  $CH_4$  ( $+0.5 Wm^{-2}$ ), το τροποσφαιρικό  $O_3$  ( $+0.4 Wm^{-2}$ ) και τα αιωρούμενα σωματίδια BC, από καύση ορυκτών καυσίμων ( $+0.35 Wm^{-2}$ ). Αντίθετα, η ελάττωση του στρατοσφαιρικού όζοντος προκαλεί τοπική ψύξη, δηλ. αρνητική

κατακράτηση ακτινοβολίας ( $-0.2 \text{ Wm}^{-2}$ ), όπως και τα OC σωματίδια και αυτά που περιέχουν θειικά άλατα ( $-0.1 \text{ Wm}^{-2}$  και  $-0.4 \text{ Wm}^{-2}$ , αντίστοιχα). Επίσης, και το έμμεσο φαινόμενο "indirect aerosol effect" από τα σωματίδια προκαλεί έντονη αρνητική κατακράτηση ακτινοβολίας (με αρκετά μεγάλη αβεβαιότητα  $-2 \text{ Wm}^{-2}$ ) (Houghton, et al., 2001)

Διάφορα κλιματικά μοντέλα προβλέπουν μια αύξηση της μέσης θερμοκρασίας κατά  $1.5-4.5^\circ\text{C}$  εντός του 21ου αιώνα (αύξηση κατά  $0.1^\circ\text{C}$  έως  $0.4^\circ\text{C}$  /δεκαετία). Η αύξηση της μέσης θερμοκρασίας (σε  $^\circ\text{C}$ ) του πλανήτη το έτος 2070 σύμφωνα με το Κλιματικό Μοντέλο του Max Planck Institut für Meteorologie, Hamburg, Γερμανίας), προβλέπει αύξηση της τάξης των  $4-5^\circ\text{C}$  στην περιοχή του Β. Πόλου, με καταστροφικές επιπτώσεις στην τήξη των πάγων και βίαιη αλλοίωση της βιόσφαιρας\*.

### 1.3 Κατακόρυφη και Οριζόντια Κατανομή Αερίων, Εντοπισμός Αιωρούμενων Σωματιδίων στην Ατμόσφαιρα, Επίδραση στην Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή

Ο χρόνος παραμονής των αερίων στη γήινη ατμόσφαιρα είναι ενδεικτικό του βαθμού ομοιογένειάς τους. Τα αέρια που παρουσιάζουν μεγάλους (ή σχετικά μεγάλους) χρόνους παραμονής στην ατμόσφαιρα (της τάξης εκατοντάδων ετών / δεκάδων μηνών αντ.), έχουν σταθερή (σχετικά σταθερή αντ.) κατανομή όγκου στην ατμόσφαιρα όπως είναι τα  $N_2$ ,  $CFC$  ( $CO_2$ ,  $CH_4$  αντ.). Αντιθέτως για αέρια όπως  $O_3$  και  $CO$  με μέσους (ή μικρούς) χρόνους παραμονής (τάξης μηνών / ημερών) παρουσιάζουν μέτριες (ή μεγάλες) ανομοιογένειες. Επιπλέον οι χρόνοι μεταφοράς συσχετίζονται άμεσα με τις κατακόρυφες και οριζόντιες κινήσεις των αερίων μαζών στην ατμόσφαιρα.

Ο εντοπισμός των αιωρούμενων σωματιδίων στην ατμόσφαιρα πραγματοποιείται με την βοήθεια τόσο των δορυφορικών μετρήσεων όσο και των επίγειων σταθμών μέτρησης. Οι δορυφορικές παρατηρήσεις στηρίζονται κυρίως σε φασματοσκοπικές ανιχνευτικές τεχνικές οι οποίες χρησιμοποιούνται στον εντοπισμό των πηγών και τον καθορισμό της χημικής σύστασης των αιωρούμενων σωματιδίων. Οι επίγειοι σταθμοί μέτρησης στηρίζονται στα δίκτυα lidar (Ευρώπη, Ασία) για την καταγραφή της κατακόρυφης κατανομής των οπτικών ιδιοτήτων των αερολυμάτων, στο δίκτυο AERONET (ηλιακά φωτόμετρα) για τη μέτρηση της ολικής στήλης (οπτικό βάθος) των αερολυμάτων και στα διάφορα δίκτυα σταθμών δειγματοληψίας για τη χημική ανάλυση δειγμάτων των αερολυμάτων. Στο πλαίσιο του ερευνητικού ευρωπαϊκού προγράμματος EARLINET (βλ. [Bo03]) δημιουργήθηκε ένα δίκτυο επίγειων σταθμών lidar, στόχος του οποίου ήταν η δημιουργία μιας στατιστικής βάσης δεδομένων για την οριζόντια και κατακόρυφη κατανομή των αερολυμάτων στην ευρωπαϊκή ήπειρο με την τεχνική της τηλεπισκόπησης lidar για την περίοδο 2000-2003 και καταγράφηκαν περισσότερα από 60 περιστατικά μεταφοράς σκόνης από την έρημο της Σαχάρα στην ευρωπαϊκή ήπειρο μέσω των συνεργαζόμενων 22 σταθμών lidar του δικτύου (Ansmann et al., 2003, Papayannis et al., 2004a, Papayannis et al., 2005).

Στην εικόνα 1.3 (αριστερά) παρουσιάζεται η ημερήσια μεταβολή της κατακόρυφης κατανομής του συντελεστή οπισθοσκέδασης  $\dagger \beta_{aer}$ , ( $\text{km}^{-1}\text{sr}^{-1}$ ) από τα 400 m έως τα 8000 m πάνω από τη μέση στάθμη της θάλασσας στο Λεκανοπέδιο Αθηνών, στις 30/08/2003, από τις 11:52 έως τις 16:00 UT, μέσω της τεχνικής lidar (Papayannis et al., 2004b). Η αντίστοιχη δορυφορική εικόνα του αισθητήρα TOMS της NASA, που απεικονίζει τον δείκτη των αιωρούμενων σωματιδίων  $\ddagger$  (aerosol index), φαίνεται στην εικόνα 1.3 (δεξιά) για την ίδια ημέρα στις 12:00 UT.

### 1.4 Τεχνική Lidar: Αρχή Λειτουργίας και Είδη Μετρήσεων

Η τεχνική lidar, (LIght Detection And Ranging).π είναι μία τεχνολογία οπτικής τηλεπισκόπησης που πραγματοποιεί μετρήσεις απόστασης ή άλλων ιδιοτήτων «φωτίζοντας» το στόχο κυρίως με παλμούς laser με εφαρμογές στη γεωπληροφορική, αρχαιολογία, γεωγραφία, σεισμολογία, γεωμορφολογία, δασολογία, και βέβαια στην τηλεπισκόπηση (remote sensing) και την ατμοσφαιρική φυσική. Βασίζεται στην εκπομπή

---

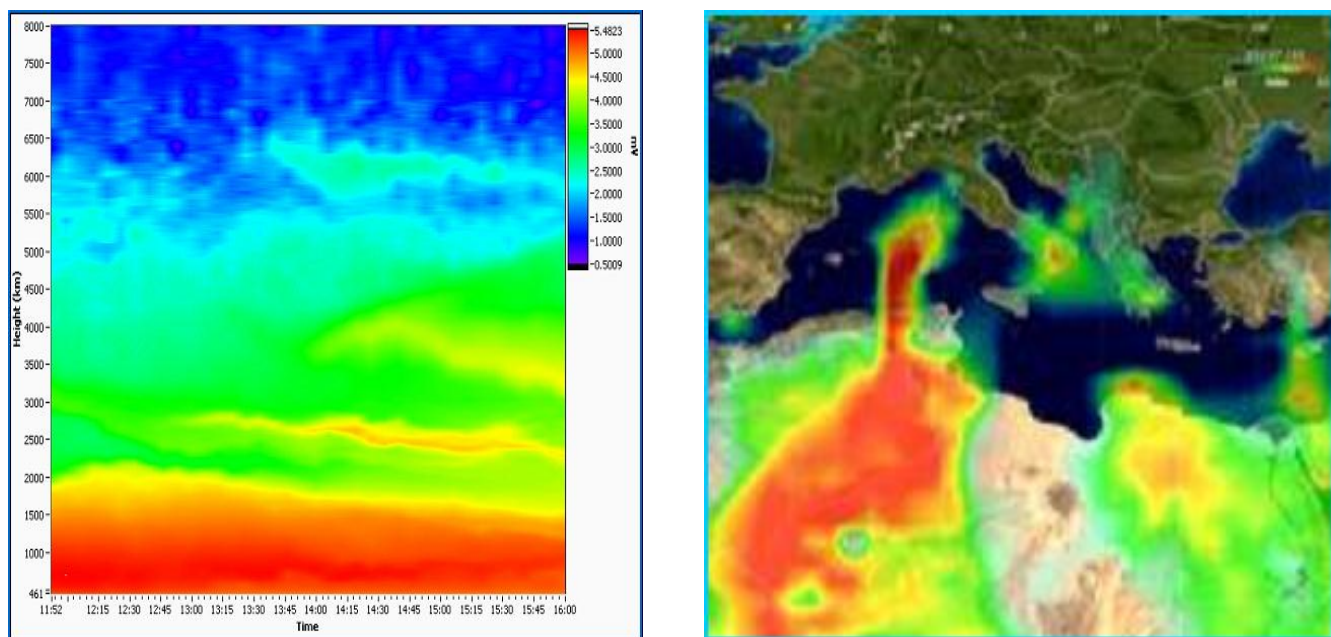
\*Η βιόσφαιρα καλείται το εξωτερικό περιβάλλον του πλανήτη. Περιλαμβάνει τον αέρα, το έδαφος, το οικολογικό σύστημα που ενσωματώνει όλους τους ζωντανούς οργανισμούς και τις μεταξύ τους σχέσεις, περιλαμβανόμενης της αλληλεπίδρασης τους με τα στοιχεία της λιθόσφαιρας (πετρώματα), της υδρόσφαιρας (νερό), και της ατμόσφαιρας (αέρας), [CE04].

$\dagger$  Συντελεστής οπισθοσκέδασης (σκέδασης σε γωνία  $\theta = \pi$ ) όγκου  $\beta_R$  volume backscattering coefficient δίνεται προσεγγιστικά από τη σχέση,  $\beta_R = N\sigma_R(\theta = \pi)$ , όπου  $\sigma_R$  η ενεργός διατομή σκέδασης (Rayleigh) και  $N = 2.55 \cdot 10^{19} \text{ mol/cm}^3$ .

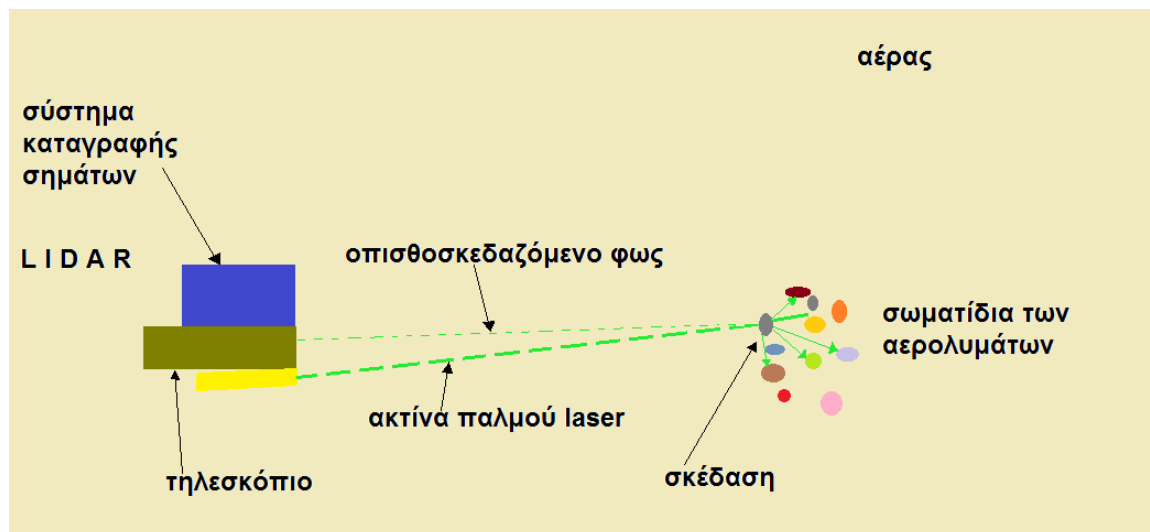
$\ddagger$  Ο δείκτης αιωρούμενων σωματιδίων είναι ένας δείκτης που ανιχνεύει την παρουσία UV απορροφητικών αερολυμάτων, όπως σκόνη και αιθάλη, [NASA, GES DISC (Goddard Earth Sciences Data and Information Services Center)].



#### 1.4. Τεχνική Lidar: Αρχή Λειτουργίας και Είδη Μετρήσεων (Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή)



Εικόνα 1.3: Εικόνα αριστερά: Ημερήσια μεταβολή της κατακόρυφης κατανομής του συντελεστή οπισθοσκέδασης  $\beta_{aer}$ , ( $km^{-1}sr^{-1}$ ) στις 30/08/2003, από τις 11:52 έως τις 16:00 UT. Εικόνα δεξιά: Η δορυφορική εικόνα του αισθητήρα TOMS της NASA, που απεικονίζει τον δείκτη των αιωρούμενων σωματιδίων (aerosol index) για την ίδια ημέρα στις 12:00 UT.



Εικόνα 1.4: Εικονογράφηση της βασικής αρχής της μεθόδου lidar: Πηγή laser εκπέμπει στενούς (τάξεις ns) γραμμικά πολωμένους παλμούς laser, ένα τηλεσκόπιο συλλέγει το οπισθοσκεδαζόμενο φως και οδηγείται στο σύστημα λήψης και καταγραφής σημάτων lidar.

παλμικής ακτινοβολίας laser στην ατμόσφαιρα και ακολούθως, στην καταγραφή της οπισθοσκεδαζόμενης ακτινοβολίας laser. Η εικόνα 1.4 σκιαγραφεί τη βασική αρχή της μεθόδου lidar. Η ατμόσφαιρα αποτελούμενη από άτομα, μόρια, αιωρούμενα σωματίδια, κλπ. προκαλεί εξασθένηση της διερχόμενης ακτινοβολίας laser. Η σκεδαζόμενη ακτινοβολία συλλέγεται από ένα οπτικό τηλεσκόπιο και οδηγείται στο σύστημα λήψης και καταγραφής των σημάτων lidar. Η τεχνική lidar, αναλύοντας τα οπισθοσκεδαζόμενα σήματα που προέρχονται από την αλληλεπίδραση των συστατικών της ατμόσφαιρας με την ακτινοβολία laser, είναι ικανή να καθορίσει την κατακόρυφη κατανομή των κυριότερων ρύπων και συστατικών της ατμόσφαιρας με μεγάλη χωρική ( $\sim 3 - 7 \mu m$ ) και χρονική ακρίβεια (από 10 - 30 s έως μερικά min.). Η τεχνική lidar, έναντι των

συμβατικών τεχνικών μέτρησης ατμοσφαιρικών ρύπων, έχει τα ακόλουθα πλεονεκτήματα:

- Έλλειψη επίδρασης στις μετρήσεις αέριων ρύπων και ατμοσφαιρικών παραμέτρων. Καταλληλότητα σε μετρήσεις «εξ αποστάσεως» στην περίπτωση καταγραφής βιομηχανικών εκπομπών (έλεγχος τήρησης περιβαλλοντικών διατάξεων) και εντοπισμού εστιών ρύπανσης (π.χ. εστίες καύσης) σε αστικές και ημιαστικές περιοχές.
- Λήψη μετρήσεων και καταγραφής ατμοσφαιρικής ρύπανσης με πολύ μεγάλη χωρική (5-1000 m) και χρονική ακρίβεια (1-10 s).
- Μέτρηση σε πολύ μεγάλες αποστάσεις (από μερικά m έως 100-120 km).
- Μέτρηση σε πραγματικό χρόνο και λήψη μετρήσεων σε 1-2-3 διαστάσεις στο χώρο.
- Ικανότητα μέτρησης πολλαπλών ρυπαντών ταυτόχρονα.

Η εξίσωση lidar δίνεται από την ακόλουθη εξίσωση:

$$N(\lambda, r) = N_e(\lambda) \cdot \frac{ct}{2} \cdot \beta(\lambda, r) \cdot A \cdot \eta(\lambda) \cdot \xi(\lambda) \cdot O(r) \cdot r^{-2} \cdot e^{-2\tau(\lambda, 0, r)}, \quad (1.4.1)$$

όπου,  $N(\lambda, r)$  είναι ο αριθμός των ανιχνεύμενων φωτονίων στο μήκος κύματος  $\lambda$  και από απόσταση  $r$ ,  $N_e(\lambda)$  είναι ο αριθμός των εκπεμπόμενων φωτονίων στο μήκος κύματος  $\lambda$ ,  $A$  η επιφάνεια λήψης του οπτικού τηλεσκοπίου,  $\eta(\lambda)$  είναι ο συντελεστής οπτο-ηλεκτρονικής απόδοσης του συστήματος lidar,  $c$  η ταχύτητα του φωτός στο κενό,  $t$  η διάρκεια παλμού του συστήματος laser,  $\xi(\lambda)$  ο συντελεστής ανακλαστικότητας του οπτικού τηλεσκοπίου,  $O(r)$  ο γεωμετρικός συντελεστής επικάλυψης του συστήματος lidar στην απόσταση  $r^{\S}$ ,  $\beta(\lambda, r)$  ο συντελεστής οπισθοσκέδασης της ατμόσφαιρας και  $\tau(\lambda, 0, r)$  το οπτικό πάχος  $\P$  της ατμόσφαιρας από τα αιωρούμενα σωματίδια (*aer*), τα μόρια (*mol*) ή άλλα συστατικά (*c*) της ατμόσφαιρας:

$$\beta(\lambda, r) = \beta_{aer}(\lambda, r) + \beta_{mol}(\lambda, r),$$

$$\tau(\lambda, 0, r) = \int_0^r [\alpha_{mol}(\lambda, r') + \alpha_{aer}(\lambda, r') + \alpha_c(\lambda, r')] dr',$$

όπου  $\alpha(r', \lambda)$  είναι ο συντελεστής εξασθένησης (extinction coefficient) της ατμόσφαιρας. Τέλος,  $\Delta r = ct/2$  είναι η χωρική ακρίβεια μέτρησης του συστήματος lidar.

Η εξασθένηση της ακτινοβολίας μίας δέσμης laser κατά τη διάδοσή της στην ατμόσφαιρα έγκειται σε ελαστική ή μη ελαστική σκέδαση ατόμων, μορίων και αερολυμάτων της ατμόσφαιρας. Η περίπτωση της ελαστικής σκέδασης περιγράφεται από τις θεωρίες σκέδασης *Rayleigh* και *Mie*, αν οι σχεδιαστές (αιωρούμενα σωματίδια) έχουν πολύ μικρότερο ή μεγαλύτερο (- συγκρίσιμο)  $\parallel$  συντελεστή οπισθοσκέδασης ( $\beta_{aer}$ ) αντίστοιχα σε σχέση με το μήκος κύματος, το οποίο παραμένει ίδιο και μετά τη σκέδαση. Αντίθετα η θεωρία σκέδασης *Raman* μελετά την περίπτωση μη ελαστικής σκέδασης, κατά την οποία η δέσμη μεταπηδά σε μία «εικονική» στάθμη  $**$  και κατόπιν αποδιεγείρεται σε μία ανώτερη (*Raman - Stokes*) ή κατώτερη (*Raman - anti-Stokes*) κατάσταση και παρατηρείται μεταβολή του μήκους κύματος της οπισθοσκεδαζόμενης ακτινοβολίας. Το φαινόμενο της σκέδασης Raman επάγει την τεχνική διαφορικής απορρόφησης *DIAL* (Differential Absorption Lidar) για τη μέτρηση της κατακόρυφης κατανομής συγκέντρωσης διαφόρων ατμοσφαιρικών ρυπαντών. Η τελευταία πραγματοποιείται υπολογίζοντας το λόγο δύο σημάτων lidar που προέρχεται από την επιλογή δύο κατάλληλων μηκών κύματος, όπου για το ένα ο σχεδιαστής επιδεικνύει έντονη απορρόφηση, και για το άλλο πολύ ασθενέστερη σχετικά απορρόφηση. Στον πίνακα 1.1 παρουσιάζονται οι ανιχνεύσιμοι ρυπαντές ή συστατικά της ατμόσφαιρας και η αντίστοιχη διεργασία (αλληλεπίδραση ακτινοβολίας - ρυπαντή) σκέδασης ή απορρόφησης (ελαστική, μη-ελαστική, διαφορική απορρόφηση, κλπ.).

$\S$  Ο συντελεστής αυτός εκφράζει την πιθανότητα το πεδίο της εκπεμπόμενης δέσμης laser να βρίσκεται μέσα στο οπτικό πεδίο του τηλεσκοπίου λήψης για σήμα lidar που προέρχεται από απόσταση  $r$ . Τυπικά τα σήματα lidar που χρησιμοποιούνται είναι για  $O(r) = 1$  (full overlap).

$\P$  Το οπτικό πάχος ορίζεται από τη σχέση  $\tau(0, r) = \int_0^r \alpha(\lambda, r') dr'$ .

$\parallel$  Η θεωρία σκέδασης που αναπτύχθηκε από τον Gustav Mie δίνει την αναλυτική λύση για σκεδαζόμενη ακτινοβολία για τυχαίες τιμές του μήκους κύματος, της ακτίνας της σφαίρας και του μιγαδικού συντελεστή διάθλασης. Εντούτοις, στο παρόν, θα διατηρήσουμε αυτό τον «παραπλανητικό» ορισμό που χρησιμοποιείται στη βιβλιογραφία. Βλ. [WE04, Mi08].

$**$  Αναφέρεται σε μη παρατηρήσιμες κβαντικές καταστάσεις μικρού χρόνου ζωής ή σε πραγματικούς αλλά μη ευσταθείς καταστάσεις, βλ. [GL53], σελ. 61. Υπάρχει μηδενική πιθανότητα να βρεθεί το σύστημά μας, κατόπιν μέτρησης, σε αυτή την «εικονική» κατάσταση, απλά μέσω αυτής παρέχεται η απαραίτητη σύζευξη μεταξύ αρχικών και τελικών καταστάσεων, βλ. [WD99], σελ. 22.

## 1.5. Επίλυση της Βασικής Εξίσωσης Lidar (Παγκόσμια Κλιματική Αλλαγή)

Πίνακας 1.1: Ανιχνευόμενοι ρυπαντές ή συστατικά της ατμόσφαιρας και η αντίστοιχη διεργασία (αλληλεπίδραση ακτινοβολίας - ρυπαντή).

Κατηγορία αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας - ρυπαντή	Μετρούμενος ρυπαντής - συστατικό της ατμόσφαιρας
Ελαστική σκέδαση $\lambda_1 = \lambda_2$	Αιωρούμενα σωματίδια, ανίχνευση νεφών, δομή της ατμόσφαιρας, πυκνότητα της ατμόσφαιρας, θερμοκρασία
Μη ελαστική σκέδαση (σκέδαση Raman) $\lambda_1 = \lambda_2 + \Delta\lambda_R$	Υδρατμίς, O <sub>3</sub> , θερμοκρασία, αερολύματα.
Διαφορική απορρόφηση DIAL $\lambda_1, \lambda_2$	SO <sub>2</sub> , O <sub>3</sub> , NO <sub>2</sub> , NO, CO <sub>2</sub> , Hg, HCl, NH <sub>3</sub> , HCs, CO, H <sub>2</sub> O
Σκέδαση Συντονισμού	K, Na, Li, Ca, Fe
Τεχνική επαγόμενου φθορισμού (LIF)	OH <sup>-</sup>

## 1.5 Επίλυση της Βασικής Εξίσωσης Lidar

Για τη κατανόηση της συνάφειας lidar και φαινομένων πολλαπλών σκεδάσεων (multiple scattering), είναι αναγκαίο να μελετηθεί αρχικά η εξιδανικευμένη περίπτωση μεμονωμένης σκέδασης single scattering. Προς αυτό, αναζητούμε λύσεις της βασικής<sup>††</sup> εξίσωσης lidar (1.4.1), σε απλούστερη έκδοση:

$$P_{ss}(r) = \frac{K(r)}{r^2} \beta(r) e^{-2\tau(r)}, \quad (1.5.1)$$

όπου το  $P_{ss}(r)$  είναι η ισχύς της οπισθοσκεδαζόμενης ακτινοβολίας, ο δείκτης  $ss$  αφορά το φαινόμενο μεμονωμένης σκέδασης, και  $K(r)$  είναι δοθείσα συνάρτηση που συμπυκνώνει την πληροφορία από τις επιμέρους συναρτήσεις που ορίστηκαν στην 1.4.1.

Θέτοντας  $S(r) = \ln \left( P_{ss}(r) \frac{r^2}{K(r)} \right)^{\dagger\dagger}$  και διαφορίζοντας ως προς  $r$ , παίρνουμε την ακόλουθη μη γραμμική διαφορική εξίσωση

$$\frac{dS(r)}{dr} = \frac{1}{\beta(r)} \frac{d\beta(r)}{dr} - 2\alpha(r), \quad (1.5.2)$$

η οποία δε μπορεί να παράξει λύση αν δε γίνει περαιτέρω υπόθεση για κάποια επιπλέον σχέση για τις  $\alpha(r), \beta(r)$ .

Υποθέτοντας ότι έχουμε ομογενή μέσα, δηλ.  $\frac{d\beta(r)}{dr} = 0$ , καταλήγουμε σε μία απλή εξίσωση για την  $\alpha(r)$

$$\alpha(r) = -\frac{1}{2} \frac{dS(r)}{dr} \Rightarrow \alpha(r) = -\frac{1}{2} S(r) + a_0.$$

Αν δεν έχουμε ομογενή μέσα, έχει προτάθει από τον J. D. Klett σε δύο βασικές δημοσιεύσεις (1981 και 1985, βλ. [Kl81]) μία σχέση της μορφής:

$$\beta(r) = C\alpha^u(r), \quad (1.5.3)$$

όπου  $C, u$  σταθερές. Παρά το ότι δεν υπάρχουν ισχυρά επιχειρήματα που να δικαιολογούν την 1.5.3, δεν αποτελεί ιδιαίτερα περιοριστική συνθήκη στην πράξη για πολλές ατμοσφαιρικές καταστάσεις. Ειδικά για  $u = 1$ , το  $C = \frac{\beta(r)}{\alpha(r)}$  καλείται λόγος lidar (lidar ratio). Αντικαθιστώντας την εξ. 1.5.3 στην εξ. 1.5.2, παίρνουμε

$$\frac{dS(r)}{dr} = \frac{u}{\alpha(r)} \frac{d\alpha(r)}{dr} - 2\alpha(r). \quad (1.5.4)$$

Η τελευταία ανήκει στη γενική μορφή των ομογενών διαφορικών εξισώσεων Riccati (ή εξισώσεων Bernoulli) και η λύση της είναι

$$\alpha(r) = \frac{\exp\left(\frac{S(r)u - S(r_m)}{u}\right)}{\frac{1}{\alpha(r_m)} + \frac{2}{u} \int_r^{r_m} \exp\left(\frac{S(r') - S(r_m)}{u}\right) dr'}, \quad (1.5.5)$$

<sup>††</sup> Αφορά φαινόμενα μεμονωμένης σκέδασης.

<sup>‡‡</sup> Στην πραγματικότητα εισάγεται η έννοια του διορθωμένου σήματος lidar  $P'(\lambda, r)$ , από το οποίο έχει αφαιρεθεί ο θόρυβος υποβάθρου (background noise).

όπου  $r_m$  είναι ένα ύψος αναφοράς (π.χ. 8-10 km), όπου η ατμόσφαιρα θεωρείται απολύτως μοριακή (απουσία αερολυμάτων).

Το κυριότερο πρόβλημα αυτής της λύσης είναι ότι δεν υπάρχει εγγύηση για την ευστάθειά της σε μία διαταραχή της συνοριακής συνθήκης ( $\alpha_0$ ) το οποίο σε συνδυασμό με την αβεβαιότητα χρήσης της 1.5.3, την καθιστά μικρής πρακτικής σημασίας. Για την επίλυση της εξίσωσης, φαίνεται, ότι πρέπει να αναπτυχθούν διευρυμένες τεχνικές μέτρησης που παρέχουν ανεξάρτητα δεδομένα lidar για τα  $\alpha, \beta$ .

Σχετικά με αυτές τις μετρήσεις έχουν σχηματιστεί δύο ομάδες που προτείνουν διεξόδους. Η ομάδα του Πανεπιστημίου του Wisconsin (βλ. [WE04] κεφ. 5, [ST83]) έχει αναπτύξει έναν πομποδέκτη lidar υψηλής φασματικής ανάλυσης που επιτρέπει τη διάκριση μεταξύ των οπισθοσκέδασεων Rayleigh και Mie. Αυτή η τεχνολογία στηρίζεται στην αρχή ότι στην οπισθοσκέδαση Rayleigh διευρύνονται σημαντικά οι φασματικές γραμμές από τις μεγάλες θερμικές ταχύτητες των μορίων του αέρα λόγω φαινομένου Doppler, ενώ το περιεχόμενο των συχνοτήτων της οπισθοσκέδασης Mie μένει σχεδόν ανεπηρέαστο από τις μικρές ταχύτητες των σωματιδίων. Αναφέρουμε συνοπτικά, ότι για το διαχωρισμό των δύο φασμάτων απαιτείται φίλτρο υψηλής απορριπτικής ισχύος (high rejection power notch filter) κεντραρισμένο στο φάσμα Mie, μέσω του οποίου καταλήγουμε σε ακόμη μία εξίσωση για τη μοριακή οπισθοσκέδαση, οπότε μαζί με την εξ. 1.5.1, οδηγούμαστε στο καθορισμό των  $\alpha, \beta$  αμφιμονοσήμαντα. (βλ. [WE04, AW92]). Αυτή η μέθοδος συναντά τεχνικές δυσκολίες, διότι υπάρχει κίνδυνος «μόλυνσης» του μοριακού σήματος από την οπισθοσκέδαση σωματιδίων, οπότε είναι αναγκαίο η απορριπτική ισχύς του φίλτρου να είναι πολύ υψηλή. Στο ίδιο πνεύμα οι Ansmann, Wandinger, Riebesell, κ.α (βλ. [AW92]) πρότειναν να γίνεται μέτρηση, επιπλέον της ελαστικής, και της μη ελαστικής σκέδασης Raman των μορίων αζώτου της ατμόσφαιρας, με τη χρήση ενός φίλτρου κεντραρισμένου στη μετατόπιση Raman του φάσματος της δέσμης laser (από τα μόρια του αζώτου). Η μέθοδος δίνει την επιπλέον εξίσωση που υπόκειται στην προσέγγιση μεμονωμένης σκέδασης

$$P_{ss}(r, \lambda_R) = \frac{K(r)}{r^2} N_{N_2}(r) \frac{d\sigma_m^R(\pi, \lambda, r)}{d\Omega} e^{-[\tau(r, \lambda_0) + \tau(r, \lambda_R)]}, \quad (1.5.6)$$

όπου  $\lambda_0$  και  $\lambda_R$  είναι τα μήκη κύματος της δέσμης laser και της  $N_2$  - Raman μετατοπισμένης δέσμης αντίστοιχα,  $N_{N_2}(r)$  είναι η μοριακή πυκνότητα του αζώτου και  $d\sigma_m^R(\pi, \lambda, r)/d\Omega$  είναι η διαφορική  $N_2$  - Raman διατομή σκέδασης στην αντίθετη κατεύθυνση ( $\theta = \pi$ ). Η μοριακή πυκνότητα του αζώτου υπολογίζεται εύκολα από την κατακόρυφη κατανομή της θερμοκρασίας και της πίεσης και οι μοριακές συνεισφορές στις  $\alpha(r, \lambda_0)$  και  $\alpha(r, \lambda_R)$  (είναι αντίστοιχα τα  $\alpha_{mol}(r, \lambda_0)$  και  $\alpha_{mol}(r, \lambda_R)$  που υπάρχουν στον ορισμό του οπτικού πάχους  $\tau$ ) από μία απλή σχέση (βλ. [AW92]) ενώ είναι ορθώς καθορισμένα διότι τα  $\lambda_0$  και  $\lambda_R$  είναι τώρα κοντινές ποσότητες, όμως επαρκώς «μακρινές» για εύκολο διαχωρισμό μέσω μέτρησης υψηλής ακρίβειας\*. Μοναδικός άγνωστος στην εξ. 1.5.6 παραμένει το  $\alpha_{aer}(r, \lambda_0)$ , οπότε ο συνδυασμός των εξ. 1.4.1 και 1.5.6 καθορίζει και πάλι αμφιμονοσήμαντα τα προφίλ των  $\alpha(r, \lambda_0)$ ,  $\alpha(r, \lambda_R)$  και  $\beta(r, \lambda_0)$ .

Έως τώρα έχουμε παράθεσει τεχνικές που στηρίζονται στην προσέγγιση μεμονωμένης σκέδασης. Ωστόσο φαινόμενα πολλαπλής σκέδασης στα lidar είναι ήδη ευρέως γνωστά με αρκετές πειραματικές αποδείξεις (βλ. [MA72, AB73]). Η εκδήλωση της πολλαπλής σκέδασης στα lidar συνοψίζεται στην αύξηση της έντασης του λαμβανόμενου σήματος και τη μεταβολή της κατάστασης πόλωσης του<sup>†</sup>. Η μοντελοποίηση της πολλαπλής σκέδασης στα lidar σαν ένα πρόβλημα μεταφοράς ακτινοβολίας<sup>‡</sup> ή αναλυτικά μετράει αρκετές τεχνικές (π.χ. Monte Carlo Methods, Stochastic and Phenomenological Methods, κ.α), όμως η επικρατέστερη, λόγω αισθητής οικονομίας στους υπολογισμούς, βασίζεται στο *θεώρημα ενεργού μέσου* (effective medium theorem) του Katsev και την προσέγγιση *Σχεδόν Μικρής Γωνίας* (Quasi Small Angle) (βλ. [KZ97]).

Η εισχώρηση της πολλαπλής σκέδασης στη θεώρησή μας υπήρξε αρχικά τροχοπέδη για τις μεθόδους ανάκτησης παραμέτρων που στηρίζονται στη μεμονωμένη σκέδαση. Εντούτοις τα αποτελέσματα μοντελοποίησης έδειξαν ότι η συνεισφορά της πολλαπλής σκέδασης περιέχει πληροφορίες για το μέγεθος των σωματιδίων που δεν είναι διαθέσιμες με τις εκφράσεις με την προσέγγιση της μεμονωμένης σκέδασης. Κλείνουμε αναφέροντας ότι το ευθύ πρόβλημα υπολογισμού δεδομένων lidar πολλαπλής σκέδασης έχει κατανοηθεί και υπάρχει ποικιλία από ικανοποιητικές τεχνικές για την επίλυσή του. Περισσότερα για πειραματικά δεδομένα και την πρόοδο που έχει γίνει για την κατανόηση του μοντέλου και τη χρήση δεδομένων βλ. [MA72, AB73, B73, C75, PC73, Ch50, ZI91, I78].

\*Εδώ είναι επιτακτική ανάγκη μετρήσεων υψηλής ακρίβειας, διότι το σήμα Raman είναι τάξεις μεγέθους μικρότερο από το σήμα των αερολυμάτων. Για σύγκριση, η  $N_2$  Raman διατομή είναι μικρότερη από την ατμοσφαιρική Rayleigh διατομή κατά ένα παράγοντα  $\sim 1000$ .

<sup>†</sup> Η σκέδαση σε γωνία ακριβώς  $180^\circ$  της ακτινοβολίας από σφαιρικά σωματίδια διατηρεί τη γραμμική πόλωση της πηγής δέσμης laser.

<sup>‡</sup> Φυσικό φαινόμενο μεταφοράς ενέργειας σε μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

## 1.6 Αντίστροφο Πρόβλημα

Όπως είδαμε, το ευθύ πρόβλημα εύρεσης οπτικών παραμέτρων (συντελεστές απορρόφησης και οπισθοσκέδασης<sup>§</sup>) lidar από μεμονωμένη ή πολλαπλή σκέδαση έχει λυθεί σε ικανοποιητικό βαθμό. Στρέφουμε τώρα το ενδιαφέρον μας στις πρόσφατες προσπάθειες που έχουν γίνει για την ανάκτηση των μικροφυσικών παραμέτρων που συνιστά το αντίστροφο πρόβλημα. Πιο συγκεκριμένα, αναζητούμε εκτιμήσεις για τη κατανομή μεγέθους των σωματιδίων (και κατόπιν της ενεργού ακτίνας) και του δείκτη διάθλασης έχοντας ως «έτοιμη» την πληροφορία για τους συντελεστές εξασθένησης και οπισθοσκέδασης από ανεξάρτητες μετρήσεις που επιστρέφουν συστήματα Raman lidar πολλαπλών μηκών κύματος. Η μαθηματική εικόνα έχει ως εξής: Αναζητείται η κανονικοποιημένη αντιστροφή των παρακάτω εξισώσεων για Raman lidar πολλαπλών μηκών κύματος. Το μοντέλο που ικανοποιούν οπτικές και μικροφυσικές παράμετροι ικανοποιεί τις ακόλουθες σχέσεις

$$\alpha(\lambda) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} \pi r^2 Q_{ext}(r, \lambda; m) n(r) dr, \quad \beta(\lambda) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} \pi r^2 Q_{\pi}(r, \lambda; m) n(r) dr, \quad (1.6.1)$$

όπου  $n(r)$ ,  $m$  είναι οι επιθυμητές ποσότητες δηλ. η κατανομή μεγέθους των σωματιδίων και ο μιγαδικός δείκτης διάθλασης αντίστοιχα,  $r_{min}$  και  $r_{max}$  είναι κατάλληλα άνω και κάτω φράγματα για ρεαλιστικές τιμές ακτίνων, ενώ οι ποσότητες  $Q_{ext}/\pi$  είναι οι πυρήνες Mie σφαιρικών σωματιδίων<sup>¶</sup>. Οι τελευταίες αντιπροσωπεύουν γενικώς το μέγεθος, το σχήμα και την (υλική) σύνθεση των σωματιδίων και δίνονται από τις σχέσεις (βλ. [BH83])

$$\begin{cases} K_{\pi}^{(m)} = \pi r^2 Q_{\pi}(r, \lambda, m) = \frac{\pi}{\nu^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(-1)^n (a_n - b_n)^2 \right|, \\ K_{ext}^{(m)} = \pi r^2 Q_{ext}(r, \lambda, m) = \frac{\pi}{\nu^2} \Re \left[ \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(a_n + b_n) \right], \end{cases} \quad (1.6.2)$$

όπου  $\nu$  είναι ο κυματάρηθος που ορίζεται από τη σχέση  $\nu = 2\pi/\lambda$  και τα  $a_n, b_n$  ( $n \geq 1$ ) στην περίπτωση ομογενών σφαιρών εκφράζονται από:

$$\begin{cases} a_n = a_n(x; m) = \frac{m\psi_n(mx)\psi'_n(x) - \psi_n(x)\psi'_n(mx)}{m\psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\psi'_n(mx)}, \\ b_n = b_n(x; m) = \frac{\psi_n(mx)\psi'_n(x) - m\psi_n(x)\psi'_n(mx)}{\psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\psi'_n(mx)}, \end{cases} \quad (1.6.3)$$

όπου,  $\psi_n(t) = \sqrt{\frac{\pi t}{2}} J_{n+\frac{1}{2}}(t)$ ,  $\chi_n(t) = -\sqrt{\frac{\pi t}{2}} Y_{n+\frac{1}{2}}(t)$ ,  $\xi_n(t) = \psi_n(t) - \chi_n(t)$ , όπου  $J_n, Y_n$  είναι οι συναρτήσεις Bessel και  $\omega = \nu r$ . Σημειωτέον, οι παρονομαστές δε μηδενίζονται στο πεδίο ορισμού των πυρήνων.

Η συνήθης και απλούστερη διάταξη lidar, τόσο από τεχνικής άποψης όσο και από θέμα κόστους εγκατάστασης εξελιγμένων Raman lidar διατάξεων πολλαπλών μηκών κύματος αφορά το σύνολο  $3\beta+2\alpha$  δεδομένων, δηλ. συλλογή από τιμές συντελεστών οπισθοσκέδασης από τρία μήκη κύματος (355, 532 και 1064 nm) και τιμές συντελεστών εξασθένησης από 2 μήκη κύματος (355, 532 nm). Πράγματι τα αριθμητικά πειράματα έδειξαν ότι αυτή η διάταξη δίνει αποτελέσματα συγκρίσιμης ακρίβειας για την ανάκτηση μικροφυσικών παραμέτρων με τη διάταξη  $6\beta+2\alpha$  δηλ. 3 επιπλέον τιμών για τις παραμέτρους οπισθοσκέδασης με την προϋπόθεση ότι το σφάλμα στη μετρήσης διατηρείται μικρό. Η επιρροή του σφάλματος στην εξαγωγή των αποτελεσμάτων στην διάταξη  $3+2$  είναι μεγαλύτερη από την αντίστοιχη για τη διάταξη  $6+2$ , ωστόσο δεν έχει εξακριβωθεί αν η άυξηση στις τιμές των  $\beta$  βελτιώνει τα αποτελέσματα της αντιστροφής. Σημειώνουμε ότι εδώ θα γίνει χρήση δεδομένων από τη συνήθη διάταξη  $3+2$  που απαντάται στην ομάδα EARLINET που είναι και η ελάχιστη δυνατή ώστε να εξάγονται λογικά αποτελέσματα.

Μέσα από την εισαγωγή στο φλέγον θέμα της παγκόσμιας κλιματικής αλλαγής, είδαμε τεχνικές που ακολουθούνται για την παρατήρηση και μελέτη των αερολυμάτων που είναι παράγοντες επιρροής της ΠΚΑ, με επίκεντρο την τεχνική lidar. Στο υπόλοιπο της παρούσας εργασίας εμβαθύνουμε στο υπολογιστικό κομμάτι, αναλύοντας μαθηματικές τεχνικές για την επίλυση του αντίστροφου προβλήματος 1.6.1. Εμφανώς, το εν λόγω πρόβλημα είναι *μη καλώς τοποθετημένο* αλλά και *μη γραμμικό*. Για να αποφύγουμε τη μη γραμμικότητα θα υποθέσουμε ότι γνωρίζουμε το σωστό συντελεστή διάθλασης, ενώ στις περιπτώσεις που δεν είναι εφικτό, μπορούμε να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα ως γραμμικό σταθεροποιώντας το συντελεστή διάθλασης για κάθε σημείο έχοντας προκαθορίσει ένα διάστημα που θα περιέχει όλες τις βιώσιμες τιμές του.

<sup>§</sup> Οπτικές παράμετροι θεωρούνται επίσης και το οπτικό πάχος ( $\tau$ ) και η συνάρτηση φάσης ( $p$ ).

<sup>¶</sup> Κυρίως θεωρούμε σφαιρικά σωματίδια, δηλ. οπτικά δεδομένα lidar με μικρούς λόγους εκπόλωσης (depolarization ratios).



## Κεφάλαιο 2

# Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους.

### 2.1 Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους: Ιδιότητες

Οι εξισώσεις 1.6.1 ανήκουν στην κατηγορία ολοκληρωτικών εξισώσεων *Fredholm α' είδους* της γενικής μορφής

$$\mathcal{K}f = \int_0^1 K(s,t)f(t)dt = g(s), \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (2.1.1)$$

Εδώ, αμφότερα ο πυρήνας  $K$  και το δεξί μέλος  $g$  είναι γνωστές συναρτήσεις, ενώ η  $f$  είναι άγνωστη συνάρτηση. Αυτή η εξίσωση ορίζει μία γραμμική σχέση μεταξύ των δύο συναρτήσεων  $f$  και  $g$  και ο πυρήνας  $K$  περιγράφει την ακριβή σχέση μεταξύ των δύο ποσοτήτων και εκφράζεται μέσω του τελεστή  $\mathcal{K}$ . Με άλλα λόγια ο πυρήνας  $K$  είναι ο μηχανισμός και παράλληλα περιγράφει το μοντέλο. Σημειώνουμε ότι κάθε διάστημα ολοκλήρωσης  $[a, b]$  μπορεί να αντικατασταθεί με το  $[0, 1]$ , χωρίς βλάβη της γενικότητας, διότι υπάρχει ένα προς ένα και επί απεικόνιση από το ένα στο άλλο, π.χ.  $l : [0, 1] \mapsto [a, b]$ , όπου  $l(t) = (b-a)t + a$ .

Αν τα  $f$  και  $K$  είναι γνωστά, τότε μπορούμε να υπολογίσουμε την  $g$  και αυτό συνιστά το **ευθύ πρόβλημα**. Το **αντίστροφο πρόβλημα** στοχεύει στον υπολογισμό της  $f$ , δεδομένων του πυρήνα και του δεξιού μέλους.

Ας θεωρήσουμε έναν τελεστή  $F$  μεταξύ των τοπολογικών χώρων  $X, Y$ . Το πρόβλημα επίλυσης της εξίσωσης  $F(x) = y$  ως προς  $x$  καλείται **καλώς τοποθετημένο** κατά Hadamard αν ισχύουν τα ακόλουθα:

1. Υπάρχει λύση  $x \in X, \forall y \in Y$ ,
2. είναι μοναδική, και επιπλέον
3. εξαρτάται συνεχώς από τα δεδομένα,

αλλιώς καλείται **μη καλώς τοποθετημένο**. Όταν το πρόβλημα διέπεται επιπλέον από μη γραμμικότητα, ο ορισμός εστιάζει μόνο στο (3), καθώς η συνθήκες (1) και (2) παραβιάζονται πολύ συχνά.

Αν έχουμε μία μικρή διαταραχή (θόρυβος), ώστε τα διαταραγμένα δεδομένα να εκφράζονται από το  $g_\delta$ , δηλ.  $\|g - g_\delta\| \leq \delta$ , με  $g \rightarrow g_\delta$  όταν  $\delta \rightarrow 0$ , τότε δεν υπάρχει καμία εγγύηση ότι και η λύση που υπολογίζουμε θα παρεκκλίνει «λίγο» από την ακριβή λύση. Αυτή είναι συμπεριφορά ρουτίνας για μη καλώς τοποθετημένα προβλήματα, όπου το  $f_\delta$ , που ορίζεται από τη σχέση  $\mathcal{K}(f_\delta) = g_\delta$ , δε συγκλίνει στο  $f$  εν γένει, το οποίο σημαίνει ότι το  $f_\delta$  είναι κακή προσέγγιση του  $f$ . Η αντιμετώπιση της παθολογίας αυτών προβλημάτων κυρίως λόγω μη τήρησης της συνθήκης (3) είναι το αντικείμενο της παρούσας εργασίας.

Γενικώς, η απαίτηση των συνθηκών περί ύπαρξης ή/και μοναδικότητας λύσεων, παρότι φαντάζει στοιχειώδης για την επίλυση ενός προβλήματος, παραβιάζεται συχνά διότι το πρόβλημά μας είναι **υπερκαθορισμένο** είτε **υποκαθορισμένο**\*. Έτσι, οι ελπίδες μας στρέφονται στη λύση του αντίστοιχου προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων, που όμως δεν εγγυάται την ευστάθεια της παραγόμενης λύσης. Ένα απλό παράδειγμα είναι

\*Ένα πρόβλημα καλείται **υπερκαθορισμένο** αν οι εξισώσεις του είναι περισσότερες από τους αγνώστους, ενώ καλείται **υποκαθορισμένο** αν οι άγνωστοι είναι περισσότεροι από τις εξισώσεις.

## 2.1. Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους: Ιδιότητες (Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους. )

απόλυτα διευκρινιστικό. Θεωρούμε το υπερκαθορισμένο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων,  $\min_x \|Ax - b\|_2$ , όπου

$$A = \begin{pmatrix} 0.16 & 0.10 \\ 0.17 & 0.11 \\ 2.02 & 1.29 \end{pmatrix}, \quad b = A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.01 \\ -0.03 \\ 0.02 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.27 \\ 0.25 \\ 3.33 \end{pmatrix}$$

Εύκολα παρατηρούμε ότι η λύση χωρίς τη μικρή διαταραχή  $(0.01, -0.03, 0.02)^T$  στο  $b$  είναι το  $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ , ενώ για το παρόν διαταραγμένο πρόβλημα δεν υπάρχει λύση τ.ω  $Ax = b$ . Το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων δίνει ως λύση  $x_{LS} = \begin{pmatrix} 7.01 \\ -8.40 \end{pmatrix}$  η οποία απέχει δραματικά από την ακριβή λύση. Το χάσμα που υπάρχει μεταξύ ακριβούς και διαταραγμένης λύσης είναι ενδεικτικό της παρουσίας μεγάλου δείκτη κατάστασης του  $A$ . Βλέπουμε, λοιπόν, ότι η ανάγκη χρήσης τεχνικών *κανονικοποίησης* είναι ήδη έκδηλη, ακόμα και σε πολύ απλά προβλήματα.

Αναζητώντας τα αίτια της μη ευστάθειας του αντίστροφου προβλήματος 2.1.1, παρατηρείται μέσω αριθμητικών πειραμάτων ότι κατά τη μετάβαση (απεικόνιση) από την «πηγή»  $f(t)$  στα δεδομένα  $g(s)$  πραγματοποιείται ομαλοποίηση. Το φαινόμενο της ομαλοποίησης είναι γενικό στις ολοκληρωτικές εξισώσεις. Στην απεικόνιση του  $f$  στο  $g$  μέσω του ολοκληρωτικού τελεστή  $A$ , αποσβένονται οι υψηλές συχνότητες του  $f$  σε σχέση με άλλες χαμηλότερες. Οπότε, η ολοκλήρωση με τον πυρήνα  $K(s, t)$  έχει λειαντική δράση στην  $f$ , έτσι ώστε η συνάρτηση  $g$  να εμφανίζεται ομαλότερη από ότι η  $f$ .

Το **λήμμα Riemann - Lebesgue** είναι η ακριβής μαθηματική έκφραση της παραπάνω παρατήρησης. Ορίζοντας  $f_\nu(t) = \sin(2\pi\nu t)$ ,  $\nu = 1, 2, \dots$ , τότε για «τυχόντες» πυρήνες έχουμε

$$g_\nu(s) = \int_0^1 K(s, t) f_\nu(t) dt \rightarrow 0, \quad \text{όταν } \nu \rightarrow \infty. \quad (2.1.2)$$

Η σχέση (2.1.2) μεταφράζεται ως εξής: όσο αυξάνει η συχνότητα της  $f$  (μετρούμενη από τον ακέραιο  $\nu$ ) τόσο το πλάτος της  $g$  μειώνεται.

Η ισχύς των παραπάνω ισχυρισμών θα φανεί καλύτερα μέσω ενός απλού παραδείγματος, που προέρχεται από την γεωφυσική και είναι γνωστό ως μοντέλο *επισκόπησης της βαρύτητας* (gravity surveying model). Το τελευταίο ανήκει σε μία σημαντική ειδική περίπτωση της ολοκληρωτικής εξίσωσης 2.1.1, όταν ο πυρήνας  $K$  είναι συνάρτηση της διαφοράς των  $s$  και  $t$ , δηλ  $K(s, t) = h(s - t)$ , όπου  $h$  είναι τυχαία συνάρτηση. Αυτή η έκδοση της ολοκληρωτικής εξίσωσης καλείται *πρόβλημα αποσυνέλιξης* (deconvolution problem) και παίρνει τη μορφή

$$\int_0^1 h(s - t) f(t) dt = g(s), \quad 0 \leq s \leq 1, \quad (2.1.3)$$

και επεκτείνεται ομοίως και σε περισσότερες διαστάσεις. Το μοντέλο επισκόπησης της βαρύτητας περιγράφεται από τον πυρήνα  $K(s, t) = \frac{d}{[d^2 + (s - t)^2]^{3/2}}$ . Η παράμετρος  $d$  καθορίζει το βάθος της άγνωστης κατανομής μάζας με πυκνότητα  $f(t)$ , κάτω από μία επιφάνεια από 0 έως 1 στον  $t$  άξονα. Υποθέτουμε ότι δεν υπάρχει μάζα εκτός από αυτή την πηγή, η οποία παράγει βαρυτικό πεδίο παντού. Στην επιφάνεια, κατά μήκος του  $s$  άξονα από 0 έως 1, μετράμε την κάθετη συνιστώσα του βαρυτικού πεδίου, την οποία καλούμε  $g(s)$ . Φορμαλιστικά, το μοντέλο μας έχει ως εξής,

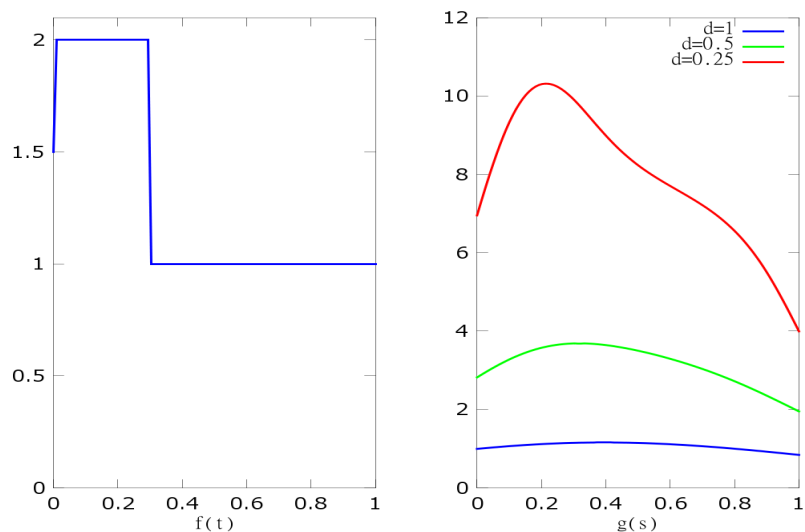
$$g(s) = \int_0^1 \frac{d}{[d^2 + (s - t)^2]^{3/2}} f(t) dt, \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (2.1.4)$$

Επιπλέον, εδώ, θα θεωρήσουμε ότι  $f(t) = H(t) + H(0.3 - t)$ , όπου  $H(t)$  η συνάρτηση βήματος (Heaviside). Παρά το ότι πρόκειται για μία ασυνεχή συνάρτηση, παρατηρούμε στην εικόνα 2.1 την ομαλοποίησή της, δίνοντας 3 διαφορετικές τιμές στην παράμετρο  $d$ .

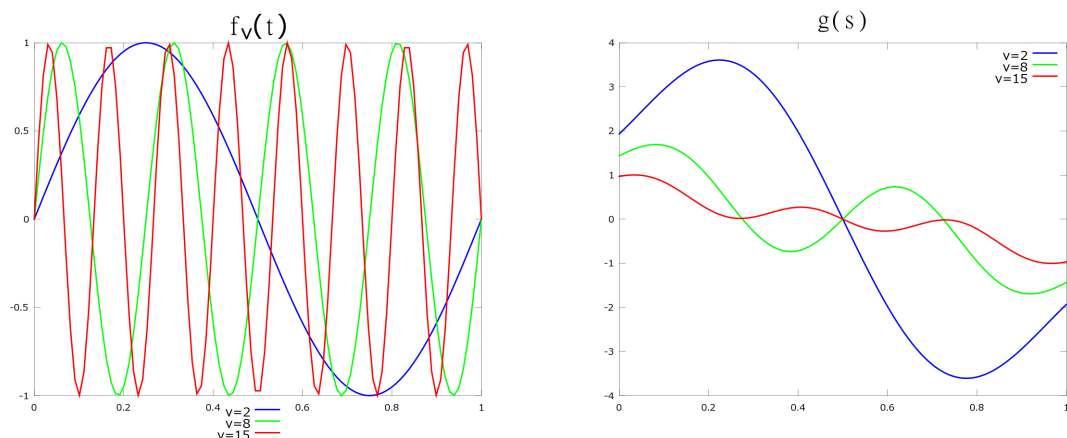
Θέλοντας να δώσουμε ακόμα μία ένδειξη του ισχυρισμού ότι οι υψηλότερες συχνότητες της  $f(t)$  «καταστέλλονται» μετά την εφαρμογή του ολοκληρωτικού τελεστή  $\mathcal{K}$ , μπορούμε να εικονογραφήσουμε το (λήμμα Riemann - Lebesgue. Προς αυτό, θέτουμε  $f(t) = \sin 2\pi\nu t$  και παίρνουμε διάφορες τιμές του  $\nu = 1, 2, \dots$ , ώστε να παρατηρήσουμε πως μεταβάλλονται οι αντίστοιχες ταλαντώσεις (συχνότητες) των συναρτήσεων  $g$ . Τα αποτελέσματα φαίνονται στην εικόνα 2.2, και είναι πράγματι χαρακτηριστικά αυτής της συμπεριφοράς. Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι το αντίστροφο πρόβλημα, δηλ. ο υπολογισμός της  $f_\nu(t)$  από την  $g(s)$  είναι μία διαδικασία που μεγενθύνει τις υψηλές συχνότητες, και μάλιστα τόσο περισσότερο όσο υψηλότερες είναι οι



## 2.2. Ανάπτυγμα Ιδιάζουσων Τιμών (SVE) και Συνθήκη Picard (Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm $\alpha$ Είδους. )



Εικόνα 2.1: Εικονογράφηση της ομαλοποίησης στοιχείων της πηγής του μοντέλου επισκόπησης της βαρύτητας. Η εικόνα αριστερά δείχνει τη συνάρτηση  $f(t)$  (κατανομή πυκνότητας μάζας) και η εικόνα δεξιά, το μετρούμενο σήμα  $g(s)$  (βαρυτικό πεδίο) για 3 τιμές της παραμέτρου  $d$ .



Εικόνα 2.2: Απεικόνιση του λήμματος Riemann - Lebesgue με τη συνάρτηση  $f_\nu(t) = \sin(\nu\pi t)$ . Είναι φανερό ότι το πλάτος της  $g_\nu$  μικραίνει όταν η συχνότητα  $\nu$  αυξάνεται.

συχνότητες. Είναι φανερό ότι ακόμα και μία μικρή διαταραχή της  $g$  μπορεί να αποτελέσει πολύ μεγάλη διαταραχή της  $f$ , αν η διαταραχή περιείχε συνιστώσα υψηλής συχνότητας. Στην πραγματικότητα, ανεξάρτητα από το μέγεθος της διαταραχής της  $g$ , η διαταραχή της  $f$  μπορεί να είναι αυθαίρετα μεγάλη, κάτι το οποίο είναι συνυφασμένο με τη φύση των τέτοιων αντίστροφων προβλημάτων.

## 2.2 Ανάπτυγμα Ιδιάζουσων Τιμών (SVE) και Συνθήκη Picard

Το ανάπτυγμα ιδιάζουσων τιμών είναι ένα σημαντικό εργαλείο για τη μελέτη αντίστροφων προβλημάτων. Αρχικά, θα πρέπει να εισάγουμε τον απαιτούμενο συμβολισμό. Αν και στα επεξηγηματικά παραδείγματά μας, προσεχώς, θα χρησιμοποιούμε πραγματικούς πυρήνες, ωστόσο θα θεωρήσουμε τη γενικότερη περίπτωση στην οποία ο πυρήνας είναι μιγαδική συνάρτηση πραγματικών μεταβλητών. Εξάλλου, το κεντρικό πρόβλημα που θα ασχοληθούμε μετά από το πέρας όλης αυτής της ανάλυσης θα είναι η ανάκτηση

## 2.2. Ανάπτυγμα Ιδιάζουσων Τιμών (SVE) και Συνθήκη Picard (Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α΄ Είδους. )

μικροφυσικών παραμέτρων από δεδομένα lidar, που όπως έχουμε δει, η μοντελοποίηση του μέσω της Fredholm ολοκληρωτικής εξίσωσης οδηγεί στους μιγαδικούς πυρήνες των εξ. 1.6.2. Συνεπώς, οι ορισμοί και ο συμβολισμός, σε πρώτη φάση, θα αφορούν τη γενικότερη περίπτωση. Ωστόσο, στα παραδείγματα που θα ακολουθήσουν η απλούστευση θα επισημαίνεται όπου δεν είναι φανερή.

Παρακάτω, υποθέτουμε κάποια εξοικείωση με τις πράξεις σε χώρους εσωτερικού γινομένου, στοιχειώδους ανάλυσης και γραμμικής άλγεβρας. Όπου συναντούμε την άνω γραμμή  $\bar{a}$  θα εννοείται ο μιγαδικός συζυγής της κάτωτι ποσότητας ( $a$ ), ενώ με αστερίσκο  $\mathcal{K}^*$  συμβολίζουμε το συζυγή τελεστή του  $\mathcal{K}$  (adjoint operator) που ορίζεται μέσω του εσωτερικού γινομένου όπως ακολουθεί:

$\forall x \in X$  και  $\forall y \in Y$ , όπου  $X, Y$  χώροι Hilbert

$$\langle \mathcal{K}x, y \rangle = \langle x, \mathcal{K}^*y \rangle.$$

Ειδικότερα, η δράση του συζυγούς Fredholm ολοκληρωτικού τελεστή  $\mathcal{K}^*$  πάνω σε μία συνάρτηση  $\phi(s)$  ορίζεται και ως εξής

$$[\mathcal{K}^*\phi](s) = \int_0^1 \overline{K(s,t)}\phi(t) dt.$$

Στην ειδική περίπτωση που ο τελεστής είναι ένας (μιγαδικός εν γένει) πίνακας, ο συμβολισμός  $A^*$  θα εννοεί τον ανάστροφο και μιγαδικό συζυγή του  $A$ .

Δοθέντων δύο συναρτήσεων,  $\phi, \psi$  με σύνολο τιμών, το  $[0, 1]^\dagger$ , το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ως εξής

$$\langle \phi, \psi \rangle \equiv \int_0^1 \phi(t)\overline{\psi(t)}dt,$$

ενώ η 2-νόρμα ορίζεται από τη σχέση

$$\|\phi\|_2 \equiv \langle \phi, \phi \rangle^{1/2} = \int_0^1 \phi(t)^2 dt$$

Ο πυρήνας  $K$ , στη γενική ολοκληρωτική εξίσωση 2.1.1, είναι **τετραγωνικά ολοκληρώσιμος**, αν το ολοκλήρωμα  $\int_0^1 \int_0^1 [K(s,t)]^2 dsdt$  είναι πεπερασμένο. Για κάθε τετραγωνικά ολοκληρώσιμο πυρήνα  $K$  το **ανάπτυγμα ιδιάζουσων τιμών** (SVE, Singular Value Expansion) παίρνει τη μορφή

$$K(s,t) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i v_i(s)\overline{v_i(t)}. \quad (2.2.1)$$

Οι  $v_i$  και  $\nu_i$  καλούνται **αριστερές** και **δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις** αντίστοιχα και ισχύουν οι σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\langle v_i, v_j \rangle = \langle \nu_i, \nu_j \rangle = \delta_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots$$

Οι ιδιάζουσες συναρτήσεις  $v_i$  και  $\nu_i$  αποτελούν (δύο) βάσεις του χώρου  $L_2[0, 1]$ , συνεπώς μπορούμε να αναπτύξουμε τις  $f(t), g(s)$  σαν γραμμικό συνδυασμό τους

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \nu_i, f \rangle \nu_i(t) \quad \text{και} \quad g(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle v_i, g \rangle v_i(s) \quad (2.2.2)$$

Επιπλέον, ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις τον ολοκληρωτικό τελεστή  $\mathcal{K}$

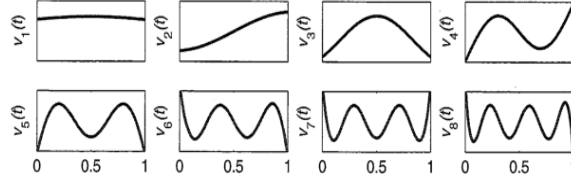
$$\mathcal{K}\nu_i = \mu_i v_i, \quad (2.2.3)$$

$$\mathcal{K}^*v_i = \mu_i \nu_i, \quad (2.2.4)$$

$$\mathcal{K}x = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i \langle x, \nu_i \rangle v_i, \quad (x \in X) \quad \text{και} \quad (2.2.5)$$

$$\mathcal{K}^*x = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i \langle x, v_i \rangle \nu_i, \quad (y \in Y). \quad (2.2.6)$$

<sup>†</sup> Το διάστημα  $[0, 1]$  εισάγεται για ευκολία όπως και προηγούμενα, ενώ θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε το γενικότερο  $[a, b]$ , βλ. και 2.1 1η παρ.



Εικόνα 2.3: Ο αριθμός των ταλαντώσεων ή μηδενισμών των ιδιάζουσων συναρτήσεων  $v_i, \nu_i$ , αυξάνεται με το  $i$  (όσο μειώνονται οι αντίστοιχες ιδιάζουσες τιμές). Η εικόνα είναι παρμένη από το βιβλίο του C. Hansen (βλ. [HC10]) και αφορά το μοντέλο επισκόπησης της βαρύτητας.

Οι ποσότητες  $\mu_i$  καλούνται **ιδιάζουσες τιμές** και σχηματίζουν μία μη αύξουσα ακολουθία,

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3 \geq \dots \geq 0$$

Οι ιδιάζουσες τιμές φθίνουν πάντα προς το 0 και μάλιστα όσο πιο ομαλός είναι ο πυρήνας τόσο ταχύτερη η σύγκλιση. Ειδικότερα αν υπάρχουν έως και η  $q$  τάξης παράγωγοι του  $K$  και είναι συνεχείς, οι ιδιάζουσες τιμές,  $\mu_i$  φθίνουν προσεγγιστικά σαν  $\mathcal{O}(i^{-q-1/2})$ , ενώ σε περίπτωση που ο  $K$  είναι άπειρες φορές παραγωγίσιμη συνάρτηση τότε οι ιδιάζουσες τιμές φθίνουν εκθετικά.

Εισάγουμε έτσι το **βαθμό μη καλώς τοποθετημένου προβλήματος** (degree of ill-posedness) ως μία θετική παράμετρο  $a$  τέτοια ώστε  $\mu_i = \mathcal{O}(i^{-a})$  τότε το πρόβλημα είναι:

- (i) *ηπίως μη καλώς τοποθετημένο* (mildly ill posed), αν  $0 \leq pa \leq 1$
- (ii) *μετρίως μη καλώς τοποθετημένο* (moderately ill-posed), αν  $a > 1$ , και
- (iii) *αυστηρώς μη καλώς τοποθετημένο* (severely ill-posed), αν  $\mu_i = \mathcal{O}(e^{-ai})$ .

Επιπλέον όσο μικρότερες είναι οι ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$ , τόσο περισσότερες οι ταλαντώσεις (μηδενισμοί) των αντίστοιχων ιδιάζουσων συναρτήσεων  $v_i, \nu_i$ . Το τελευταίο φαίνεται και από την εικόνα 2.3.

Στην περίπτωση που έχουμε πεπερασμένο αριθμό μη μηδενικών ιδιάζουσων τιμών ο πυρήνας καλείται *εκφυλισμένος*. Υπάρχουν αρκετές σχέσεις που ικανοποιούν οι παραπάνω ποσότητες, αλλά η πιο σημαντική είναι η «θεμελιώδης» εξίσωση

$$\mathcal{K}\nu_i = \mu_i \nu_i \Rightarrow \int_0^1 K(s, t) \nu_i(t) dt = \mu_i \nu_i(s), \quad i = 1, 2, \dots \ddagger \quad (2.2.7)$$

Αξιοσημείωτο είναι ότι παρά το γεγονός ότι εξασφαλίζουμε την ύπαρξη του αναπτύγματος SVE για κάθε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση, ωστόσο σπάνια είμαστε σε θέση να καθορίζουμε την αναλυτική του έκφραση.

Οι συντελεστές των  $f$  και  $g$  στα αναπτύγματα 2.2.2 δεν είναι ανεξάρτητοι<sup>§</sup>. Αντικαθιστώντας στην εξ. 2.1.1 την πρώτη από τις εξ. 2.2.2 και κατόπιν κάνοντας χρήση της θεμελιώδους εξ. 2.2.7, έχουμε

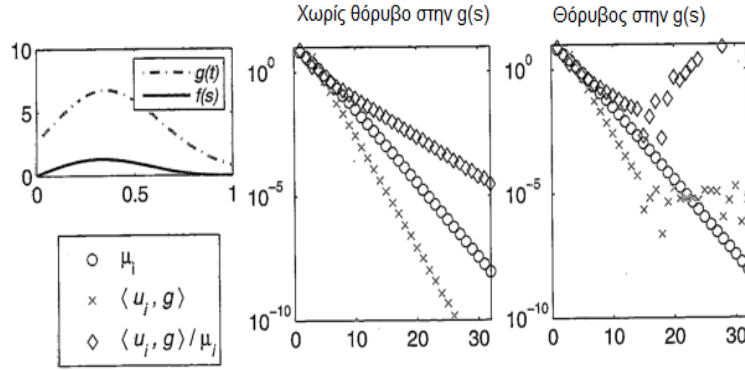
$$\begin{aligned} g(s) &= \int_0^1 K(s, t) \sum_{i=1}^{\infty} \langle \nu_i, f \rangle \nu_i(t) dt \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle \nu_i, f \rangle \int_0^1 K(s, t) \nu_i(t) dt \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i \langle \nu_i, f \rangle \nu_i(s), \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

όπου η εναλλαγή αθροίσματος και ολοκληρώματος στη δεύτερη ισότητα οφείλεται στο θεώρημα κυριαρχημένης σύγκλισης του Lebesgue.

<sup>‡</sup> «Εξίσου» θεμελιώδης είναι και η εξίσωση

$$\mathcal{K}^* \nu_i = \mu_i \nu_i \Rightarrow \int_0^1 \overline{K(s, t)} \nu_i(t) dt = \mu_i \nu_i.$$

<sup>§</sup> Αυτό είναι αναμενόμενο, αφού οι  $v_i, \nu_i$  αποτελούν βάσεις του ίδιου χώρου ( $L_2[0, 1]$ ).



Εικόνα 2.4: Απεικόνιση της συνθήκης Picard. Αριστερά, η εικόνα δείχνει τις συναρτήσεις που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτό το παράδειγμα. Στη μέση, η εικόνα δείχνει τις ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$  και τους συντελεστές από του αναπτύγματος SVE,  $\langle v_i, g \rangle$  και  $\langle v_i, g \rangle / \mu_i$  για τις  $g$  και  $f$  αντίστοιχα για ένα πρόβλημα χωρίς θόρυβο στα δεδομένα. Δεξιά, η εικόνα δείχνει πως αλλάζουν αυτοί οι συντελεστές όταν υπεισέλθει θόρυβος στο δεξί μέλος,  $g$ , βλ. [HC10].

Εστιάζοντας στην πρώτη από τις εξ. 2.2.2 και στην 2.2.8, παρατηρούμε ότι ότι το  $v_i$  απεικονίζεται στο  $\mu_i v_i$  και έτσι εξηγείται γιατί οι μεγαλύτερες συχνότητες αποσβένονται περισσότερο από ότι οι μικρότερες στο ευθύ πρόβλημα. Λίγο αργότερα, στο τέλος αυτού του κεφαλαίου θα δούμε λεπτομερέστερα πώς σχετίζονται οι ιδιάζουσες τιμές και οι αντίστοιχες ιδιάζουσες συναρτήσεις με τις συχνότητες συναρτήσεων Fourier.

Πηγαίνουμε ένα βήμα παρακάτω και συγκρίνουμε τη δεύτερη από τις εξ. 2.2.2 με την εξ. 2.2.8 και υποθέτοντας ότι  $\mu_i \neq 0$ , οδηγούμαστε στη σχέση  $\langle v_i, f \rangle = \langle v_i, g \rangle / \mu_i$ . Απαιτώντας, τώρα, η λύση του αντίστροφου προβλήματος,  $f(t)$  να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και αξιοποιώντας την τελευταία εξίσωση, καταλήγουμε στην μεγάλης θεωρητικής σημασίας για την ύπαρξη λύσης, **συνθήκη Picard**

$$\begin{aligned} \|f\|_2^2 &= \int_0^1 [f(t)]^2 dt = \int_0^1 \left( \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\langle v_i, g \rangle}{\mu_i} v_i(t) \right)^2 dt = \sum_{i=1}^{\infty} \left( \frac{\langle v_i, g \rangle}{\mu_i} \right)^2 \int_0^1 v_i^2(t) dt \\ &\Rightarrow \sum_{i=1}^{\infty} \left( \frac{\langle v_i, g \rangle}{\mu_i} \right)^2 < \infty \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Η τελευταία ισότητα ισχύει διότι αναπτύσσοντας τετράγωνο του αθροίσματος επιζούν μόνο οι τετραγωνικοί όροι,  $v_i^2$ , αφού  $\langle v_i, v_j \rangle = \int_0^1 v_i v_j dt = \delta_{ij}$ . Η συνθήκη Picard εκφράζει ότι οι συντελεστές  $\langle v_i, g \rangle$  που αφορούν τα δεδομένα, πρέπει να φθίνουν προς το 0 ταχύτερα από ότι οι ιδιάζουσες τιμές  $\mu_i$ , δηλ.  $\exists N$  τέτοιο ώστε  $\forall i > N$  το  $\frac{\langle v_i, g \rangle}{\mu_i} \rightarrow 0$ . Το πρόβλημα παρουσιάζεται όταν προσθέσουμε θόρυβο στα δεδομένα, διότι τότε παραβιάζεται η συνθήκη και η νόρμα της ζητούμενης λύσης δεν είναι πλέον φραγμένη. Στην εικόνα 2.4 σκιαγραφείται αυτή η ιδιομορφία του προβλήματός μας. Η παραβίαση της συνθήκης Picard είναι παράγοντας αστάθειας του αντίστροφου γραμμικού προβλήματος στη μορφή των εξ. Fredholm  $\alpha$  είδους, και συνεπώς αυτό που χρειαζόμαστε είναι φιλτράρισμα του θορύβου στους συντελεστές του SVE.

Ακολούθως, παραθέτουμε ένα παράδειγμα, όπου υπάρχει η αναλυτική έκφραση του αναπτύγματος SVE, γνωστό ως το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου. Θεωρούμε την Fredholm ολοκληρωτική εξίσωση  $\alpha$  είδους  $\int_0^1 K(s, t) f(t) dt = g(s)$ ,  $0 \leq s \leq 1$  με πυρήνα,

$$K(s, t) = \begin{cases} s(t-1), & s < t, \\ t(s-1), & s \geq t. \end{cases} \quad (2.2.10)$$

Αυτή η εξίσωση συνδέεται με τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου μίας συνάρτησης: δεδομένης μίας συνάρτησης  $g$ , η λύση  $f$  είναι η δεύτερη παράγωγος της  $g$ , δηλ.  $f(t) = g''(t)$ , για  $0 \leq t \leq 1$ . Μία εναλλακτική έκφραση του πυρήνα δίνεται από

$$K(s, t) = -\frac{2}{\pi^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sin(i\pi s) \sin(i\pi t)}{i^2} \quad (2.2.11)$$

### 2.3. Αμφισημεία στη Λύση (Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους. )

Χρησιμοποιώντας την τελευταία μπορούμε να επαληθεύσουμε ότι οι ζητούμενες αναλυτικές εκφράσεις για τις ιδιάζουσες τιμές και ιδιάζουσες συναρτήσεις είναι

$$\mu_i = \frac{1}{(i\pi)^2}, \quad v_i(s) = \sqrt{2} \sin(i\pi s), \quad v_i(t) = -\sqrt{2} \sin(i\pi t), \quad i = 1, 2, \dots \quad (2.2.12)$$

Δίνουμε ένα παράδειγμα από μία ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm α' είδους που δεν έχει τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση, δηλ. δεν υπάρχει λύση, της οποίας η 2-νορμα να είναι πεπερασμένη. Το παράδειγμα αυτό εισήχθη από τον Βρετανό Μαθηματικό F. Ursell<sup>[UF74]</sup> και παίρνει τη μορφή

$$\int_0^1 \frac{1}{s+t+1} f(t) dt = 1, \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (2.2.13)$$

Επομένως ο πυρήνας είναι  $K(s, t) = (s+t+1)^{-1}$  και το δεξί μέλος είναι  $g(t) = 1$ . Θεωρούμε προσεγγίσεις του δεξιού μέλους χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα SVE,

$$g_k(s) = \sum_{i=1}^k \langle v_i, g \rangle v_i(s). \quad (2.2.14)$$

Το γράφημα πάνω αριστερά στην εικόνα 2.5 δείχνει ότι το σφάλμα στις προσεγγίσεις  $g_k$  μειώνεται καθώς αυξάνουμε το  $k$  και συγκεκριμένα,

$$\|g - g_k\|_2 \rightarrow 0 \quad \text{για} \quad k \rightarrow \infty.$$

Ταυτόχρονα, όμως παίρνοντας τις «ακριβείς» λύσεις απο την εξ.  $\int_0^1 (s+t+1)^{-1} f_k(t) dt = g_k(s)$ ,

$$f_k(t) = \sum_{i=1}^k \frac{\langle v_i, g \rangle}{\mu_i} v_i(t), \quad (2.2.15)$$

παρατηρούμε, μέσω του πάνω δεξιά γραφήματος στην εικόνα 2.5, ότι ενώ η  $\|f_k\|_2$  είναι πεπερασμένη για κάθε  $k$ , ωστόσο αυξάνεται με το  $k$  και τελικά  $\|f_k\|_2 \rightarrow \infty$  για  $k \rightarrow \infty$ . Συνεπώς αυτές οι συναρτήσεις δε φαίνεται να συγκλίνουν σε κάποια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση.

Τέλος, θα πρέπει να δωθεί έμφαση στην απαίτηση, ότι για την ύπαρξη του αναπτύγματος SVE θα πρέπει να έχουμε τετραγωνικά ολοκληρώσιμο πυρήνα. Ένα κλασικό παράδειγμα μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμου πυρήνα είναι ο πυρήνας της διάσημης ολοκληρωτικής εξίσωσης γνωστής ως *μετασχηματισμός Laplace*, η οποία χρησιμοποιείται στα δυναμικά συστήματα. Σε αυτή την περίπτωση, ο μετασχηματισμός Laplace μίας τοπικά ολοκληρώσιμης συνάρτησης<sup>¶</sup> δίνεται από

$$\mathcal{L}[f(t)] = g(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt, \quad s \geq 0. \quad (2.2.16)$$

Ο πυρήνας εδώ είναι  $K(s, t) = e^{-st}$ . Παρατηρούμε όμως, ότι

$$\int_0^a (e^{-st})^2 ds = \int_0^a e^{-2st} ds = \frac{1 - e^{-2ta}}{2t} \rightarrow \frac{1}{2t}, \quad \text{για} \quad a \rightarrow \infty, \quad (2.2.17)$$

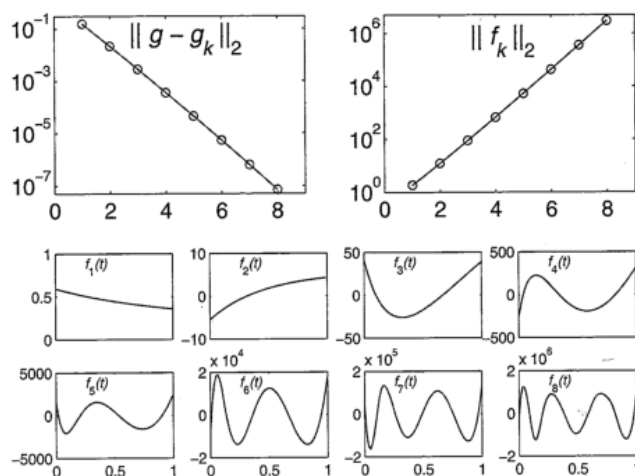
και επιπλέον το ολοκλήρωμα  $\int_0^\infty \frac{1}{t} dt$  αποκλίνει. Συνεπώς συμπεραίνουμε ότι το  $\int_0^\infty \int_0^\infty (e^{-st})^2 ds dt$  είναι απειρο. Βλέπουμε λοιπόν ότι η αναζήτηση του αναπτύγματος SVE για αυτό τον πυρήνα είναι απαγορευτική.

## 2.3 Αμφισημεία στη Λύση

Έχουμε πλέον δει μέσα από παραδείγματα ότι οι ολοκληρωτικές εξισώσεις Fredholm α' είδους συνιστούν μη καλώς τοποθετημένα προβλήματα. Έως τώρα διαπραγματευτήκαμε την ευαισθησία της λύσης σε διαταραχές του δεξιού μέλους  $g$ , που αφορά θέματα ευστάθειας του προβλήματος όπως επίσης και τη μη ύπαρξη λύσης. Ωστόσο θα πρέπει να μας απασχολήσει επιπλέον και η ελλειψη μοναδικότητας στη λύση, που

<sup>¶</sup>Τοπικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση (locally integrable function) καλείται η συνάρτηση που είναι ολοκληρώσιμη σε κάθε συμπαγές υποσύνολο του πεδίου ορισμού της.

### 2.3. Αμφισημεία στη Λύση (Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους. )



Εικόνα 2.5: Πρόβλημα Urshell. Πάνω αριστερά: Η 2-νόρμα του σφάλματος  $g - g_k$  στην προσέγγιση (2.2.14) για το δεξί μέλος. Πάνω δεξιά: Η 2-νόρμα της «ακριβούς» λύσης  $f_k$  (2.2.15). Κάτω: «Ακριβείς» λύσεις  $f_k$ , για  $k = 1, \dots, 8$ . Βλ. και [UF74].

είναι η 2η προϋπόθεση στο ορισμό του Hadamard, διότι απαντάται επίσης στις ολοκληρωτικές εξισώσεις και αναφέρεται εναλλακτικά και ως **αμφισημεία**.

**Αμφισημεία μηδενόχωρου** (nullspace ambiguity) παρουσιάζεται όταν ο ολοκληρωτικός τελεστής έχει μη τετριμμένο μηδενόχωρο, δηλ. υπάρχουν συναρτήσεις  $f_{null} \neq 0$  τέτοιες ώστε

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

Είναι φανερό ότι αν η συνάρτηση  $f_{null}$  ικανοποιεί την τελευταία, το ίδιο ισχύει και για την  $af_{null}$  όπου  $a$  αυθαίρετη μη μηδενική σταθερά. Αυτές οι συναρτήσεις καλούνται **εκμηδενιστές**, και το σύνολο όλων των εκμηδενιστών παράγει τον μηδενόχωρο που συνδέεται με τον πυρήνα  $K(s, t)$ . Οι εκμηδενιστές δεν είναι επιθυμητοί, διότι αν δεν είμαστε προσεκτικοί δε θα μπορούσαμε να ελέγξουμε τη συνεισφορά τους στην υπολογιστική λύση μας. Η περίπτωση που ο μηδενόχωρος παράγεται μόνο από τη συνάρτηση  $f_{null}$  δεν είναι ανησυχητική, διότι η αντιμετώπιση είναι όμοια με αυτή των γραμμικών εξισώσεων με αντιστρέψιμο πίνακα. Χρησιμοποιώντας τη θεμελιώδη εξ. 2.2.7, βλέπουμε ότι ο μηδενόχωρος  $null(K) = span\{\nu_i | \mu_i = 0\}$ . Συνεπώς, αν ο πυρήνας είναι εκφυλισμένος, δηλ. υπάρχουν πεπερασμένες θετικές ιδιάζουσες τιμές ( $\mu_i > 0$ ), τότε ο μηδενόχωρος είναι μη τετριμμένος και απειροδιάστατος. Το παρακάτω παράδειγμα με πυρήνα  $K(s, t) = s + 2t$  και εκμηδενιστή  $f_{null} = 3t^2 - 1$ , όπου

$$\int_{-1}^1 (s + 2t)(3t^2 - 1) dt = 0, \quad -1 \leq s \leq 1$$

είναι η περίπτωση απειροδιάστατου μηδενόχωρου και μάλιστα παράγεται από τα πολώνυμα Legendre βαθμού  $\geq 2$ .

Η ανίχνευση και ο αριθμητικός υπολογισμός των εκμηδενιστών μπορεί να είναι περιστασιακά δύσκολη υπόθεση. Τα σφάλματα διακριτοποίησης, που χρησιμοποιούμε για να μετατρέψουμε το ολοκληρωτική εξίσωση σε γραμμικό πρόβλημα με πίνακες, όπως επίσης και στα σφάλματα στρογγύλευσης της μηχανής δυσχεραίνουν την κατάσταση και γενικώς δεν θα ασχοληθούμε πέρα από την παρούσα αναφορά.

Επιπλέον, από άποψη πληρότητας, αναφέρουμε ότι υπάρχει και ένα άλλο είδος αμφισημείας, αναφερόμενη ως **αμφισημεία διατύπωσης** (formulation ambiguity). Αυτό το είδος αμφισημείας αφορά τη εκάστοτε μοντελοποίηση και συμβαίνει όταν δύο ολοκληρωτικές εξισώσεις με διαφορετικούς πυρήνες, οδηγούν στην ίδια συνάρτηση του δεξιού μέλους που συνδέεται με μία φυσική ποσότητα. Η αντιμετώπιση και εδώ είναι ζήτημα μοντελοποίησης και όχι υπολογιστικό.

## 2.4 Φασματικές Ιδιότητες Ιδιάζουσων Συναρτήσεων

Αυτό το εδάφιο έχει σκοπό να παρέξει το φασματικό χαρακτηρισμό των ιδιάζουσων συναρτήσεων και των συναρτήσεων Fourier  $e^{iks}/\sqrt{2\pi}$ , όπου  $i$  η φανταστική μονάδα, για τον οποίο έγινε νύξη νωρίτερα και είναι σημαντικό τόσο για την ανάλυσή μας όσο και για τους αλγόριθμους που θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια.

Ορίζουμε τον ολοκληρωτικό τελεστή  $\mathcal{K}$  ως εξής

$$[\mathcal{K}f](s) = \int_{-\pi}^{\pi} K(s,t)f(t) dt.$$

Επιπλέον υποθέτουμε τα ακόλουθα:

1. Ο πυρήνας  $K$  είναι πραγματικός (συνεπώς  $\mathcal{K} = \mathcal{K}^*$ ) και μη εκφυλισμένος ενώ ανήκει στο  $C^1([-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi])$ . Αυτή υπόθεση μπορεί να γίνει και ασθενέστερη θεωρώντας τον  $K$  κατά τμήματα συνεχή με την επόμενη υπόθεση (2.) να ισχύει σε κάθε τμήμα.
2. Για απλότητα υποθέτουμε ακόμα ότι  $\|K(\pi, t) - K(-\pi, t)\|_2 = 0$ . Ασθενέστερη υπόθεση είναι να θεωρήσουμε ότι η τελευταία ποσότητα είναι της τάξεως της μεγαλύτερης ιδιάζουσας τιμής,  $O(\mu_1)$ .

Εφόσον ο τελεστής  $\mathcal{K}$  είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμος, έχει αριστερές και δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις  $v_j(x)$  και  $\nu_j(x)$  και ιδιάζουσες τιμές  $\mu_j > 0$  τέτοιες ώστε να ισχύουν οι θεμελιώδεις σχέσεις

$$[\mathcal{K}\nu_j](s) = \mu_j v_j(s), \quad [\mathcal{K}^*v_j](s) = \mu_j \nu_j(s), \quad j = 1, 2, \dots$$

Ορίζουμε τον απειροδιάστατο πίνακα  $B$ , όπου ο δείκτης των γραμμών είναι  $k = -\infty, \dots, \infty$ , οι δείκτες των στηλών είναι  $j = 1, 2, \dots, \infty$  και τα στοιχεία του δίνονται από

$$B_{kj} = \left\langle v_j, \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle.$$

Με την ευκαιρία, σημειώνουμε ότι οι συναρτήσεις  $e^{iks}/2\pi$  αποτελούν ορθοκανονική βάση του χώρου  $L_2([-\pi, \pi])$ , όπως και οι  $v_j \in L_2([-\pi, \pi])$ . Η επιλογή αυτού του πίνακα δεν είναι τυχαία. Παρατηρούμε ότι κατά μήκος μίας στήλης του  $B$ , π.χ. για  $j = a$ , οι ποσότητες  $\dots, \langle v_a, \frac{e^{-ias}}{\sqrt{2\pi}} \rangle, \dots, \langle v_a, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \rangle, \dots, \langle v_a, \frac{e^{ias}}{\sqrt{2\pi}} \rangle, \dots$  είναι οι προβολές του  $v_a$  στα στοιχεία της βάσης των  $e^{iks}/2\pi$ ,  $k = -\infty, \dots, \infty$ . Με αυτό τον τρόπο θα είμαστε σε θέση να μελετήσουμε τις ταλαντώσεις των ιδιάζουσων συναρτήσεων  $v_j$  βάσει των συχνοτήτων  $k$ .

Αποδεικνύεται ότι τα μεγαλύτερα στοιχεία του πίνακα  $B$  έχουν το γενικό σχήμα  $\boxed{\leq}$ , δηλ. ενός πλαγιασμένου «V», όπου η κορυφή του V αντιστοιχεί στους δείκτες  $k = 0, j = 1$ . Ακολουθώντας, θα σχηματίσουμε τα κύρια σημεία που οδηγούν σε αυτή τη διαπίστωση. Για περισσότερες λεπτομέρειες, βλ. ([HK06]), ενώ για το μαθηματικό υπόβαθρο σε συναρτησιακή ανάλυση και θεωρία τελεστών βλ. π.χ. ([AG80, KS09]). Από τον τρόπο ορισμού του πίνακα  $B$  είναι φανερό ότι μπορούμε να κάνουμε όμοια ανάλυση και για τις δεξιές ιδιάζουσες συναρτήσεις  $\nu_j$ .

Αρχικά παρατηρούμε ότι η ανισότητα Cauchy-Schwarz επιβάλλει,

$$B_{kj} = \|v_j\|_2 \left\| \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\|_2 \Rightarrow B_{kj} \leq 1$$

Ισχύουν όμως εξίσου περιοριστικές σχέσεις για το άθροισμα των τετραγώνων στοιχείων σε μία γραμμή ή στήλη του πίνακα  $B$ , τα οποία, όπως άμεσα θα δούμε, είναι πεπερασμένες ποσότητες. Από την ταυτότητα του Parseval γνωρίζουμε ότι, αν  $H$  είναι ένας χώρος Hilbert με εσωτερικό γινόμενο  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  και  $e_n$  μία ορθοκανονική βάση του  $H$ , η γραμμική θήκη  $\|$  της οποίας είναι πυκνή στον  $H$  (πληρότητα βάσης), τότε  $\forall x \in H$

$$\sum_n |\langle x, e_n \rangle|^2 = \|x\|^2 \tag{2.4.1}$$

$\|$  Γραμμική θήκη ή περίβλημα (linear span) καλείται το σύνολο όλων των γραμμικών συνδυασμών των  $e_n$ .

2.4. Φασματικές Ιδιότητες Ιδιάζουσων Συναρτήσεων (Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους. )

Οπότε για  $H = L^2([-\pi, \pi])$ ,  $x = u_j$ , και  $e_k = e^{iks}/\sqrt{2\pi}$ , έχουμε ότι

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} B_{kj}^2 = 1 \quad (2.4.2)$$

Επιπλέον η ανισότητα Bessel είναι γενικότερη έκφραση της ταυτότητας Parseval στην περίπτωση που δεν εξασφαλίζεται η πληρότητα της βάσης  $e_n$ , όπου το « $\Rightarrow$ » της εξ. (2.4.1) αντικαθίσταται από « $\leq$ ». Θέτοντας  $x = e^{iks}/\sqrt{2\pi}$  και  $e_j = u_j$ , λαμβάνουμε

$$\sum_{j=1}^{\infty} B_{kj}^2 \leq 1 \quad (2.4.3)$$

Πράγματι, λοιπόν, από τις (2.4.2) και (2.4.3) βλέπουμε ότι το άθροισμα των τετραγώνων των στοιχείων κατά μήκος οποιασδήποτε γραμμής ή στήλης είναι πεπερασμένο. Μπορούμε να κάνουμε περαιτέρω εκτιμήσεις για τα στοιχεία του  $B$ . Για κάθε  $k \neq 0$ ,

$$\begin{aligned} \left\langle u_j, \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle &= \left\langle \frac{1}{\mu_j} \mathcal{K}u_j, \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\mu_j} \left\langle u_j, \mathcal{K}^* \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \nu_j(t) \int_{-\pi}^{\pi} K(s, t) \frac{e^{-iks}}{\sqrt{2\pi}} ds dt. \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

Συνεχίζουμε κάνοντας παραγοντική ολοκλήρωση στο δευτερο ολοκλήρωμα, οπότε λαμβάνουμε

$$\int_{-\pi}^{\pi} K(s, t) \frac{e^{-iks}}{\sqrt{2\pi}} ds = \frac{1}{-ik} \left\{ \left[ K(-\pi, t) - K(\pi, t) \right] \frac{(-1)^k}{\sqrt{2\pi}} - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\partial K}{\partial s} \frac{e^{-iks}}{\sqrt{2\pi}} ds \right\}, \quad (2.4.5)$$

όπου έγινε χρήση της σχέσης  $e^{-k\pi i} = e^{k\pi i} = \cos(k\pi) = (-1)^k$ . Λόγω της υπόθεσης (2.) ο 1ος όρος από την παραγοντική ολοκλήρωση μηδενίζεται, οπότε παίρνοντας μέτρα σε αμφότερα μέλη της εξ. (2.4.4) και κατόπιν χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz, έχουμε

$$\left| \left\langle u_j, \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle \right| = \frac{1}{|k|\mu_j} \left| \left\langle u_j, \frac{\partial K}{\partial s} \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle \right| \Rightarrow B_{kj} \leq \frac{1}{k\mu_j} \left\| \frac{\partial K}{\partial s} \frac{e^{iks}}{\sqrt{2\pi}} \right\|_2 \quad (2.4.6)$$

Αξιοποιώντας τον ορισμό της επαγόμενης νόρμας τελεστών, έχουμε ότι

$$\mu_1 = \max_{\|f\|_2=1} \|\mathcal{K}f\|_2.$$

Ειδικότερα για  $f = \frac{e^{\pm is}}{\sqrt{2\pi}}$  ( $k = \pm 1$ ), λαμβάνουμε

$$\mu_1 \geq \left\| \mathcal{K} \frac{e^{\pm is}}{\sqrt{2\pi}} \right\|_2 = \left\| \frac{\partial K}{\partial s} \frac{e^{\pm is}}{\sqrt{2\pi}} \right\|_2,$$

όπου και πάλι χρησιμοποιήσαμε παραγοντική ολοκλήρωση όπως στην εξ. (2.4.5).

Από το λήμμα Riemann-Lebesgue προκύπτει ότι για  $k \rightarrow \infty$ , έχουμε  $\left\| \frac{\partial K}{\partial s} \frac{e^{\pm is}}{\sqrt{2\pi}} \right\|_2 \rightarrow 0$ . Οπότε αναμένουμε ότι για  $|k| > 1$

$$\mu_1 \gtrsim \left\| \frac{\partial K}{\partial s} \frac{e^{\pm is}}{\sqrt{2\pi}} \right\|_2,$$

επομένως η ανίσωση 2.4.6 γίνεται

$$B_{kj} \lesssim \frac{\mu_1}{k\mu_j}. \quad (2.4.7)$$

Ο χαρακτηρισμός του πίνακα  $B$  είναι απόρροια των σχέσεων (2.4.6),(2.4.7), (2.4.2) και (2.4.3) και αιτιολογείται με επαγωγή ως προς  $j$ .



#### 2.4. Φασματικές Ιδιότητες Ιδιάζουσων Συναρτήσεων (Ολοκληρωτική Εξίσωση Fredholm α' Είδους. )

---

Η ερμηνεία του σχήματος  $\square$  ως μοτίβο που ακολουθούν τα μεγαλύτερα στοιχεία του πίνακα B, είναι ότι η συνάρτηση  $v_1$  αναπαρίσταται επαρκώς από τις μικρότερες τιμές του  $k$ , με άλλα λόγια έχει τις χαμηλότερες συχνότητες. Επιπρόσθετα, για μεγαλύτερες τιμές του  $j$ , η  $v_j$  αναπαρίσταται επαρκώς από ένα μικρό αριθμό συναρτήσεων Fourier  $\frac{e^{ik_s}}{\sqrt{2\pi}}$  για κάποιο  $|k|$  σε ένα εύρος γειτονικών ακεραίων που εξαρτώνται από το  $j$ . Καταλήγουμε, με αυτό τον τρόπο, στο φασματικό χαρακτηρισμό των ιδιάζουσων συναρτήσεων : Οι ιδιάζουσες συναρτήσεις είναι όμοιες με τις συναρτήσεις Fourier με την έννοια ότι οι μεγάλες ιδιάζουσες τιμές (για μικρό  $j$ ) και οι αντίστοιχες σε αυτές ιδιάζουσες συναρτήσεις αντιστοιχούν σε χαμηλές συχνότητες, ενώ οι μικρές ιδιάζουσες τιμές (για μεγαλύτερο  $j$ ) αντιστοιχούν σε υψηλές συχνότητες.



## Κεφάλαιο 3

# Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων

Το ανάπτυγμα SVE είναι πολύ χρήσιμο από θεωρητική σκοπιά, αντενδείκνυται δε από υπολογιστική, λόγω απουσίας αναλυτικών εκφράσεων. Ο τρόπος αντιμετώπισης αντίστροφων προβλημάτων με ολοκληρωτικές εξισώσεις επιβάλλει χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή. Για το σκοπό αυτό, θα πρέπει να αντικαταστήσουμε το πρόβλημά μας με ένα διακριτό, πεπερασμένης διάστασης πρόβλημα, το οποίο είναι δυνατόν να χειριστεί ο υπολογιστής. Η ολοκληρωτική εξίσωση θα μετατραπεί σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων, στο οποίο θα αναφερόμαστε ως το **διακριτό αντίστροφο πρόβλημα**. Προτού εισάγουμε την πιο ευέλικτη «έκδοση σε πίνακες» του SVE, γνωστή ως **παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών, SVD** (singular value decomposition), είναι λοιπόν απαραίτητο αρχικά να μελετήσουμε μεθόδους **διακριτοποίησης** του γραμμικού αντίστροφου προβλήματος, οι οποίες συνοψίζονται στις **μεθόδους τετραγωνισμού και αναπτυγμάτων**.

### 3.1 Μέθοδος Τετραγωνισμού

Αυτή η μέθοδος υπολογίζει τις προσεγγίσεις  $\tilde{f}_j$  των λύσεων  $f$  μόνο σε συγκεκριμένες τεμνημένες  $t_1, t_2, \dots, t_n$ , δηλ.,

$$\tilde{f}_j = f(t_j), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι υπολογίζουμε δείγμα από τιμές κάποιας συνάρτησης  $\tilde{f}_j$  που δίνει εκτίμηση της πραγματικής λύσης  $f$ , αλλά δε βρίσκουμε δείγματα της ίδιας της συνάρτησης  $f$ , εκτός βέβαια και αν η τελευταία τύχει να περιγράφεται από την απλή συνάρτηση που χρησιμοποιείται στις μεθόδους τετραγωνισμού. Ο γενικός κανόνας που διέπει τις **μεθόδους τετραγωνισμού ή αριθμητικής ολοκλήρωσης**, (quadrature methods, γνωστές και ως μέθοδοι Nyström) βασίζεται στο γενική σχέση της μορφής:

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

όπου  $\phi$  είναι η συνάρτηση της οποίας ζητείται να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα,  $E_n$  είναι το σφάλμα τετραγωνισμού,  $t_1, t_2, \dots, t_n$  είναι οι τεμνημένες για τον κανόνα τετραγωνισμού και  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$  είναι τα αντίστοιχα βάρη. Για παράδειγμα, για τον **κανόνα του μέσου** (midpoint rule) στο διάστημα  $[0, 1]$  έχουμε

$$t_j = \frac{j - \frac{1}{2}}{n}, \quad \omega_j = \frac{1}{n}, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.1.1)$$

Το κρίσιμο βήμα στη χρήση του κανόνα του μέσου είναι να τον εφαρμόσουμε **φορμαλιστικά** στην ολοκληρωτική εξίσωση, προσποιούμενοι ότι ξέρουμε τις (άγνωστες) τιμές  $f(t_j)$ . Σημειώνουμε ότι το αποτέλεσμα θα παραμείνει συνάρτηση του  $s$ :

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

### 3.2. Μέθοδος Αναπτυγμάτων (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)

όπου εδώ ο όρος σφάλματος είναι συνάρτηση του  $s$ . Τώρα, επιβάλλουμε την *απαίτηση ταξιδεσίας* (collocation requirement), ότι η συνάρτηση  $g$  θα πρέπει να συμφωνεί με το δεξί μέλος  $g$  σε  $m$  επιλεγμένα σημεία:

$$\psi(s_i) = g(s_i), \quad s = 1, 2, \dots, m.$$

Αυτό μας οδηγεί στο ακόλουθο σύστημα εξισώσεων:

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

Σημειώνουμε ότι  $m \geq n$  και τότε το σύστημά μας είναι ανάλογα υπερκαθορισμένο ή υποκαθορισμένο. Για ευκολία, από εδώ και πέρα θα υποθέτουμε ότι  $m = n$ . Τέλος, πρέπει να αγνοήσουμε τον άγνωστο όρο σφάλματος  $E_n(s_i)$  σε κάθε σχέση, κι έτσι εισάγουμε το σφάλμα στον υπολογισμό της λύσης. Η ολοκληρωτική σχέση γίνεται

$$\sum_{j=1}^n \omega_j K(s_i, t_j) \tilde{f}_j = g(s_i), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.1.2)$$

Όπως είναι φανερό, προκύπτει το παρακάτω  $n \times n$  γραμμικό σύστημα με αγνώστους τα  $\tilde{f}_j = \tilde{f}(t_j)$

$$\begin{bmatrix} \omega_1 K(s_1, t_1) & \omega_2 K(s_1, t_2) & \cdots & \omega_n K(s_1, t_n) \\ \omega_1 K(s_2, t_1) & \omega_2 K(s_2, t_2) & \cdots & \omega_n K(s_2, t_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \omega_1 K(s_n, t_1) & \omega_2 K(s_n, t_2) & \cdots & \omega_n K(s_n, t_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{f}_1 \\ \tilde{f}_2 \\ \vdots \\ \tilde{f}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(s_1) \\ g(s_2) \\ \vdots \\ g(s_n) \end{bmatrix}, \quad (3.1.3)$$

ή  $Ax = b$ , όπου  $A$  είναι ένας  $n \times n$  πίνακας, με στοιχεία τα  $a_{ij} = \omega_j K(s_i, t_j)$ ,  $b = g(s_i)$  είναι το δεξί μέλος και  $x = \tilde{f}(t_j)$  είναι το διάνυσμα-λύση του συστήματος,  $i, j = 1, \dots, n$ .

### 3.2 Μέθοδος Αναπτυγμάτων

Αυτές οι μέθοδοι υπολογίζουν μία προσέγγιση της μορφής

$$f^{(n)}(t) = \sum_{j=1}^n \zeta_j \phi_j(t), \quad (3.2.1)$$

όπου τα  $\phi_1(t), \dots, \phi_n(t)$  είναι οι συναρτήσεις αναπτύγματος ή *συναρτήσεις βάσης* που επιλέγονται από το χρήστη. Οι τελευταίες οφείλουν να δίνονται με τέτοιο τρόπο, ώστε να παράσχουν μία καλή περιγραφή για τη λύση. Ωστόσο, όπως αναμένεται, όσο καλύτερα επιλεγμένες και να είναι, οι  $f^{(n)}$  εξακολουθούν να είναι προσεγγίσεις που παράγονται από αυτές.

Οι μέθοδοι αναπτυγμάτων είναι πολύ διαδεδομένες και συνιστούν ευρεία γκάμα στην αντιμετώπιση προβλημάτων διακριτοποίησης. Εδώ θα εστιάσουμε στη **μέθοδο Galerkin** ή **Petrov-Galerkin**, όπου περιορίζουμε το συναρτησιακό χώρο ώστε να περιγράφεται από ένα πεπερασμένο σύνολο συναρτήσεων βάσης και μετατρέπουμε την εξίσωση στην *ασθενή διατύπωσή* της. Συγκεκριμένα, επιλέγουμε αρχικά, δύο σύνολα συναρτήσεων βάσης  $\phi_i$  και  $\psi_j$  για τη λύση και το δεξί μέλος αντίστοιχα, οπότε μπορούμε να γράψουμε

$$f(t) = f^{(n)}(t) + E_f(t), \quad f^{(n)}(t) \in \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_n\}, \quad (3.2.2)$$

$$g(s) = g^{(n)}(s) + E_g(t), \quad g^{(n)}(s) \in \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}. \quad (3.2.3)$$

Τα  $E_f, E_g$  είναι τα σφάλματα αναπτυγμάτων λόγω της χρήσης πεπερασμένα διανυσμάτων βάσης. Σκοπός μας είναι να υπολογίσουμε τους συντελεστές  $\zeta_j$  του αναπτύγματος (3.2.1), ώστε η  $f^{(n)}$  να είναι προσεγγιστική λύση της ολοκληρωτικής μας εξίσωσης. Προς αυτό, εισάγουμε τη συνάρτηση

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

και όμοια με τις  $f, g$  γράφουμε αυτή τη συνάρτηση στη μορφή

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

Το ζήτημα που παρουσιάζεται άμεσα είναι το πώς θα επιλέξουμε τις συναρτήσεις  $\phi_i$  και  $\psi_j$ . Αυτές οι συναρτήσεις πρέπει να αντικατοπτρίζουν τη γνώση που πιθανόν να έχουμε για τη λύση, όσον αφορά λειότητα, μονοτονία, περιοδικότητα, κλπ και αντίστοιχα τις κύριες πληροφορίες για το δεξί μέλος. Ωστόσο, συχνά τα δύο αυτά σύνολα συναρτήσεων επιλέγονται να είναι ίδια.

Φτάνοντας στην καρδιά της μεθόδου Galerkin θα πρέπει να συνειδητοποιήσουμε ότι οι συναρτήσεις  $\theta$  δεν είναι ταυτόσημη με την  $g$  και ούτε κείται στον υπόχωρο  $\text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ , στον οποίο κείται η  $g^{(n)}$ , οδηγώντας στο σφάλμα  $E_g$ . Για να εξασφαλίσουμε τη μοναδικότητα, υποθέτουμε ότι οι  $\theta^{(n)}$  και  $g^{(n)}$  είναι οι προβολές των  $\theta$  και  $g$  στον υπόχωρο  $\text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ , το οποίο σημαίνει ότι τα  $E_\theta, E_g$  είναι ορθογώνια στον υπόχωρο  $\text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ , δηλ.  $\langle E_\theta, \psi_i \rangle = 0$  και  $\langle E_g, \psi_i \rangle = 0$ , για κάθε  $i = 1, \dots, n$ .

Η μέθοδος Galerkin στηρίζεται στην εύρεση των συντελεστών  $\zeta_j$ , τέτοιων ώστε, οι συναρτήσεις οι  $\theta^{(n)}$  και  $g^{(n)}$  να είναι ταυτοτικές:

$$\theta^{(n)} = g^{(n)} \Leftrightarrow \theta(s) - g(s) = E_\theta(s) - E_g(s).$$

Οπότε χρησιμοποιώντας την ορθογωνιότητα των  $E_\theta, E_g$  στον υπόχωρο  $\text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ , η **συνθήκη Galerkin** επιβάλλει

$$\langle \psi_i, \theta - g \rangle = 0 \quad \text{ή} \quad \langle \psi_i, \theta \rangle = \langle \psi_i, g \rangle \quad \text{για} \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.2.4)$$

Η εξ. 3.2.4 συνιστά το ασθενές πρόβλημα που θα αντικαταστήσει το πραγματικό πρόβλημα ως διακριτοποίησή του. Το πρόβλημα διακριτοποίησης έγκειται λοιπόν στην επιλογή κατάλληλου υπόχωρου  $H_n = \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\} \subset H$  και επίλυσης του προβλεπόμενου προβλήματος.

Αντικαθιστώντας τις  $f^{(n)}$  από την εξ. 3.2.1 στη συνθήκη Galerkin 3.2.4, και ενθυμούμενοι τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου, λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} \langle \psi_i, g \rangle &= \left\langle \psi_i, \int_0^1 K(s, t) f^{(n)}(t) dt \right\rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \zeta_j \left\langle \psi_i, \int_0^1 K(s, t) \phi_j(t) dt \right\rangle, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

Οι εξισώσεις 3.2.5 δείχνουν ότι ανάγαγαμε την ολοκληρωτική εξίσωση στο  $n \times n$  γραμμικό σύστημα  $Ax = b$ , όπου οι λύσεις - συνιστώσες του διανύματος  $x$  είναι οι άγνωστοι συντελεστές του αναπτύγματος 3.2.1,  $x_i = \zeta_i$ , ενώ τα στοιχεία των  $A$  και  $b$  δίνονται από

$$a_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \psi_i(s) K(s, t) \phi_j(t) ds dt \quad (3.2.6)$$

$$b_i = \int_0^1 \psi_i(s) g(s) ds. \quad (3.2.7)$$

Αν αυτά τα ολοκληρώματα είναι περίπλοκα ώστε να εκφραστούν σε κλειστή μορφή, θα πρέπει να καταφύγουμε και πάλι σε αριθμητική ολοκλήρωση μέσω κάποιας μεθόδου τετραγωνισμού. Σημειώνουμε, ότι στην ειδική περίπτωση που ο πυρήνας  $K$  είναι συμμετρικός ( $K(s, t) = K(t, s)$ ) και  $\psi_i = \phi_i$ , τότε ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός και η μέθοδος καλείται **Rayleigh-Ritz**.

Για ένα παράδειγμα εφαρμογής της μεθόδου Galerkin, θα θεωρήσουμε μία πολύ απλή επιλογή ορθοκανονικών συναρτήσεων βάσης (top hat functions / scaled indicator functions) σε ισαπέχοντα διαστήματα με κενά μήκους  $h = 1/n$

$$\chi_i(t) = \begin{cases} h^{-1/2}, & t \in [(i-1)h, ih] \\ 0 & \text{αλλιώς,} \end{cases} \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.2.8)$$

Είναι φανερό ότι αυτές οι συναρτήσεις είναι εκ κατασκευής ορθογώνιες, αφού οι φορείς τους δεν αλληλοεπικαλύπτονται, και επιπλέον είναι κανονικοποιημένες ( $\|\chi_i\|_2 = 1$ ). Συνεπώς μπορούμε να επιλέξουμε τις συναρτήσεις

$$\phi_i(t) = \chi_i(t) \quad \text{και} \quad \psi_i(t) = \chi_i(t) \quad \text{για} \quad i = 1, \dots, n.$$

### 3.3. Κατάλληλη Επιλογή Μεθόδου (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)

για τα δύο σύνολα συναρτήσεων που χρειαζόμαστε για τη μέθοδο Galerkin. Σύμφωνα με τα προηγούμενα, τα στοιχεία του πίνακα  $A$  και το δεξί μέλος  $b$  δίνονται από τις σχέσεις

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

$$b_i = h^{-1/2} \int_{(i-1)h}^{ih} g(s) ds.$$

Και πάλι ενδέχεται να είναι αναγκαία η χρήση μεθόδων τετραγωνισμού για τον υπολογισμό αυτών των ολοκληρωμάτων.

### 3.3 Κατάλληλη Επιλογή Μεθόδου

Μετά την παρουσίαση των δύο βασικών μεθόδων διακριτοποίησης, επάγεται φυσιολογικά το ερώτημα για το ποια μέθοδος πρέπει ακολουθήσουμε σε ένα δεδομένο πρόβλημα. Η απάντησή μας εξαρτάται από τα δεδομένα του προβλήματος, τις μεταβλητές και βέβαια το τι δύναται να υπολογιστεί.

Οι μέθοδοι τετραγωνισμού είναι απλούστεροι στη χρήση και στην υλοποίηση από ότι οι μέθοδοι αναπτυγμάτων διότι τα στοιχεία του πίνακα,  $a_{ij}$ , προέρχονται μόνο από κάποια δείγματα του πυρήνα  $K$  σε διακεκριμένα σημεία. Επιπλέον, η μέθοδος τετραγωνισμού μπορεί να επιλεγθεί έτσι ώστε να εκφράζει ιδιότητες των συναρτήσεων  $K$  και  $f$ , π.χ. να λαμβάνει υπόψη της το αν ο  $K$  είναι ιδιάζων (singular) \* . Ακόμα και στην περίπτωση που το διάστημα ολοκλήρωσης είναι απειρο σε ένα πεπερασμένο, υπάρχει τρόπος χρήσης τετραγωνικής μεθόδου †. Περισσότερα για μεθόδους αντιμετώπισης τέτοιων περιπτώσεων, βλ. ([WT92, AS64]). Πρέπει, όμως, να θυμόμαστε ότι η πληροφορία για την υπολογιστική λύση μας στηρίζεται στις προσεγγίσεις  $f_j$  στα σημεία τετραγωνισμού  $t_j$ . Συνεπώς, θα μπορούσε να πει κανείς ότι το γράφημα της λύσης μας θα έπρεπε να είναι όπως το αριστερό ή το μεσαίο στην εικόνα 3.1 και όχι όπως το δεξί. Εδώ χρησιμοποιήσαμε το πρόβλημα ελέγχου shaw από το προγραμματιστικό πακέτο Regularization Tools (RT) για  $n = 24$ , το οποίο θα συστήσουμε ευθύς αμέσως. Ωστόσο, όσο το  $n$  αυξάνει η διαφορά ανάμεσα στα γραφήματα είναι αμελητέα. Το μοντέλο για το πρόβλημα ελέγχου shaw είναι γνωστό και ως μονοδιάστατο μοντέλο ανάκτησης εικόνας. Ο πυρήνας και η λύση δίνονται αντίστοιχα από τις σχέσεις

$$K(s, t) = [\cos(s) + \cos(t)] \left[ \frac{\sin(u)}{u} \right]^2, \quad \text{όπου } u = \pi [\sin(s) + \sin(t)] \quad \text{και} \quad (3.3.1)$$

$$f(t) = a_1 e^{-c_1(t-t_1)^2} + a_2 e^{-c_2(t-t_2)^2}, \quad \text{με } -\frac{\pi}{2} \leq s, t \leq \frac{\pi}{2}. \quad (3.3.2)$$

Σε αυτό το παράδειγμα οι σταθερές τίθενται  $a_1 = 2, c_1 = 6, t_1 = 0.8, a_2 = 1, c_2 = 2$ , και  $t_2 = -0.5$ . Η διακριτοποίηση με απλή τετραγωνική μέθοδο παράγει τον πίνακα  $A$  και τη λύση  $x$ . Κατόπιν υπολογίζεται το διακριτό δεξί μέλος από την εξ.  $b = Ax$ .

Οι μέθοδοι αναπτυγμάτων είναι πιο δύσχρηστοι στην εξαγωγή και την υλοποίησή τους, λόγω του ότι εμπλέκουν διπλά ολοκληρώματα που τελικά πιθανόν να χρειαστεί και πάλι η χρήση τετραγωνικών μεθόδων.

\* Δίνουμε ενδεικτικά δύο συχνές εκφάνσεις ιδιάζοντος πυρήνα. (i) Ανώμαλα σημεία (singularities) του πυρήνα που είναι συχνά αντιμετώπισιμα με αλλαγή μεταβλητής. Π.χ. αν υπάρχει ιδιομορφία του  $K(s, t) \sim t^{-1/2}$  στο  $t = 0$ , αίρεται θέτοντας  $z = t^{1/2}$ . (ii) Ιδιομορφία κατά μήκος της διαγωνίου  $s = t$  (βλ. π.χ πρόβλημα δεύτερης παραγώγου και εξ. 2.2.10). Ένας τρόπος να ξεπεραστεί (ο απλούστερος, ίσως όχι ο καλύτερος) είναι με *αφαίρεση της ιδιομορφίας* ως εξής,

$$\int_0^1 K(s, t) f(t) dt = \int_0^1 K(s, t) [f(t) - f(s)] dt + f(s) \int_0^1 K(s, t) dt$$

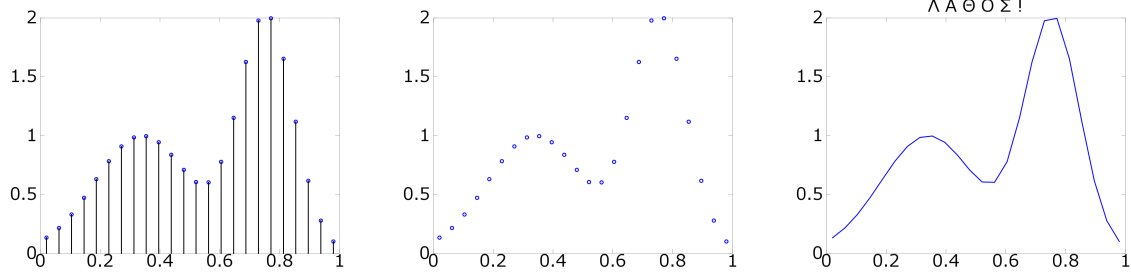
Και στις δύο περιπτώσεις διακριτοποιούμε κατόπιν με μεθόδους τετραγωνισμού, πιθανόν με την επιπλέον χρήση διορθωτικής παραμέτρου. Παρατηρούμε ότι μελετάμε την ανώμαλη συμπεριφορά του  $K$ , ενώ θα έπρεπε να δούμε τη συνολική ολοκληρωτέα ποσότητα  $K(s, t) f(t)$ . Κατά γενικό κανόνα, όμως, ένας ιδιάζων πυρήνας δεν παράγει ιδιάζουσα λύση  $f(t)$ . Βπλ. ενότ. 2.1 ή θεωρήστε για παράδειγμα  $K(s, t) = \delta(s - t)$  που είναι απλά ο ταυτοτικός τελεστής,  $\mathcal{K} = \hat{I}$ , δηλ.  $\mathcal{K}f = f$ .

† Αποκόπτοντας το άπειρο εύρος ενός διαστήματος ολοκλήρωσης σε μία πεπερασμένη τιμή εύρους θα πρέπει να είναι η ύστατη λύση αντιμετώπισης. Αντ' αυτού μετασχηματίζουμε το διάστημα ολοκλήρωσης, συνήθως στο διάστημα  $[-1, 1]$ . Π.χ. οι μετασχηματισμοί  $t = \frac{z}{1-z^2}$  ή  $t = a + \frac{z}{1-z}$  ή  $t = a - \frac{1-z}{z}$  απεικονίζουν τα διαστήματα  $[-\infty, \infty]$ ,  $[a, \infty]$  και  $[-\infty, a]$  στο  $[-1, 1]$  αντίστοιχα. Ενδεικτικά, π.χ. για την πρώτη περίπτωση, θα έχουμε

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(s, t) f(t) dt = \int_{-1}^1 K(s, \frac{z}{1-z^2}) f(\frac{z}{1-z^2}) \frac{1+z^2}{1-z^2} dz$$

Κατόπιν χρησιμοποιούμε κάποια τετραγωνική μέθοδο, πιθανόν εισάγοντας κάποια παράμετρο βελτίωσης.

### 3.3. Κατάλληλη Επιλογή Μεθόδου (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.1: Τρεις τρόποι γραφικής αναπαράστασης για τη λύση του προβλήματος ελέγχου shaw από το προγραμματιστικό πακέτο RT<sup>[HC10]</sup> με χρήση μεθόδων τετραγωνισμού. Κατά κανόνα, μόνο το αριστερό και το μεσαίο γράφημα είναι σωστά.

Εντούτοις, έχουν το σημαντικό πλεονέκτημα, ότι αν οι συναρτήσεις βάσης είναι ορθοκανονικές, τότε υπάρχει σύνδεση μεταξύ του αναπτύγματος SVE και της παραγοντοποίησης SVD του πίνακα που προκύπτει μετά την εφαρμογή της μεθόδου, την οποία γνωρίζουμε πολύ καλά. Επιπλέον, η μέθοδοι αναπτυγμάτων μας δίνουν την ευκαιρία κατασκευής αυτών των βάσεων στα μέτρα της εκάστοτε εφαρμογής (π.χ. χρήση συναρτήσεων spline, thin plate smoothing, κλπ).

Οι μέθοδοι αναπτυγμάτων παράγουν μία προσεγγιστική λύση που είναι γνωστή παντού στο διάστημα  $t$ , διότι η  $f^{(n)}$  είναι εκπερασμένη ως προς τη βάση των  $\phi_j(t)$ , επομένως μπορεί να πει κανείς ότι το γράφημα της λύσης θα πρέπει να αντικατοπτρίζει αυτό το γεγονός. Αυτό αποσαφηνίζεται στην εικόνα 3.2 μέσω ενός παραδείγματος (το πρόβλημα ελέγχου baart που θα συστήσουμε παρακάτω), όπου έχει γίνει χρήση των συναρτήσεων  $\chi_i$  όπως ορίστηκαν στη σχέση (3.2.8). Ωστόσο, το πιο σημαντικό είναι ότι οποιαδήποτε αλλαγή κλίμακας (scaling) έχει γίνει στις συναρτήσεις βάσης, το ίδιο θα πρέπει να ενσωματωθεί και στο γράφημα της λύσης. Και πάλι, με την αύξηση του  $n$ , η διαφορά είναι αμελητέα. Στο τελευταίο παράδειγμα, έγινε χρήση του προβλήματος ελέγχου baart από το προγραμματιστικό πακέτο RT για  $n = 40$ , το οποίο έχει πυρήνα, δεξί μέλος και (αναλυτική) λύση αντίστοιχα

$$K(s, t) = e^{s \cos(t)}, \quad g(s) = 2 \frac{\sinh(s)}{s} \quad \text{και} \quad f(t) = \sin(t),$$

με διαστήματα ολοκλήρωσης  $t \in [0, \pi]$  και  $s \in [0, \frac{\pi}{2}]$ . Η διακριτοποίηση έγινε μέσω της μεθόδου Galerkin με χρήση των συναρτήσεων «κουτί»<sup>‡</sup> (box functions). Το πρώτο από τα ολοκληρώματα που προκύπτει για τον πίνακα  $A$  υπολογίζεται επακριβώς, ενώ ακολούθως το δεύτερο απαιτεί μία τετραγωνική μέθοδο. Το ίδιο απαιτεί και η κατασκευή του διακριτού δεξιού μέλους  $b$ . Και για τα τις δύο περιπτώσεις χρησιμοποιήθηκε ο κανόνας του Simpson.

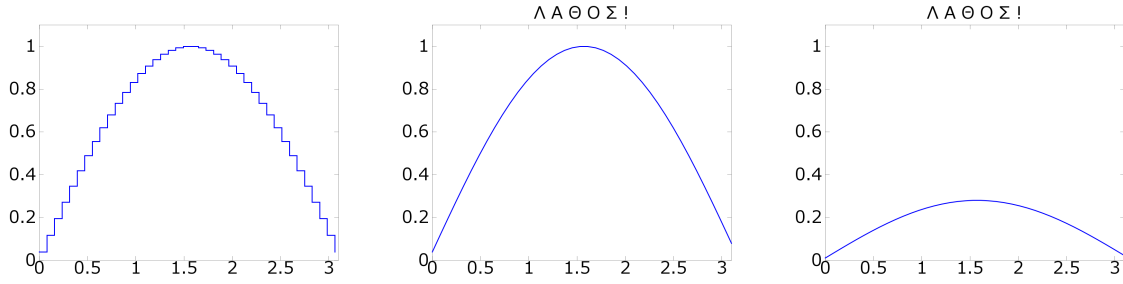
Γενικώς, στις εφαρμογές, η πληροφορία για το δεξί μέλος είναι σχεδόν πάντα διαθέσιμη μόνο σε μορφή δειμάτων  $b_i = g(s_i)$  αυτής της συνάρτησης και μάλιστα δεν πρέπει να παραλείψουμε την παρουσία θορύβου. Αυτό ταιριάζει απόλυτα με τις μεθόδους τετραγωνισμού, χρησιμοποιώντας ταξινόμηση στα δειγματικά σημεία  $s_i$ . Για τις μεθόδους Galerkin υπάρχουν δύο φυσικές επιλογές για τις συναρτήσεις βάσης  $\psi_i$  για το δεξί μέλος. Η πρώτη επιλογή είναι αυτή που ήδη υποδείξαμε στα παραδείγματά μας,  $\psi_i(s) = \chi_i(s)$  (βλ. εξ.(3.2.8)), και μάλιστα αντιστοιχεί στο πώς συλλέγονται τα πραγματικά δεδομένα, δηλ. ολοκληρώνοντας ένα σήμα πάνω σε ένα μικρό διάστημα. Εναλλακτικά, υπάρχει και η επιλογή των συναρτήσεων δέλτα,  $\psi_i(s) = \delta(s - s_i)$  που είναι εντοπισμένη στα δειγματικά σημεία  $s_i$  και βέβαια αποτελεί άψογο δειγματισμό της  $g$ , αφού εξ ορισμού ισχύει

$$\int_0^1 \delta(s - s_1) g(s) ds = g(s_1).$$

<sup>‡</sup>Εναλλακτική ονομασία των συναρτήσεων που ορίστηκαν στην εξ. 3.2.8. Συναρτήσεις box ορίζονται και μέσω της συνάρτησης βήματος heaviside

$$u_{ab}(t) = H(t - a) - H(t - b) = \begin{cases} 0, & \text{αν } t < a \\ 1, & \text{αν } a \leq t \leq b \\ 0, & \text{αν } a > t \end{cases}$$

### 3.4. Η παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών SVD (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.2: Τρεις τρόποι γραφικής αναπαράστασης για τη λύση του προβλήματος ελέγχου baart από το προγραμματιστικό πακέτο  $\text{RT}^{\text{HC10}}$  με χρήση μεθόδων αναπτυγμάτων και τις συναρτήσεις βάσης  $\chi_i$  όπως ορίστηκαν στη σχέση (3.2.8). Κατά κανόνα, μόνο το αριστερό γράφημα είναι σωστό. Όπως παρατηρούμε, το δεξί γράφημα είναι «τελείως» λάθος, διότι η αλλαγή κλίμακας  $h^{-1/2}$  δεν έχει ενσωματωθεί.

### 3.4 Η παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών SVD

Στις προηγούμενες παραγράφους έγινε φανερό ότι το ανάπτυγμα SVE είναι ένα ισχυρό εργαλείο για την κατανόηση των ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm α' είδους. Εντούτοις, είδαμε ότι σε μία πρώτη προσπάθεια προς την εύρεση λύσης απαιτείται το διακριτό ανάλογο του μοντέλου μας, των δεδομένων και των μεταβλητών μας. Για τη συνέχεια, θα εισάγουμε ένα εξίσου δυναμικό εργαλείο που χειρίζεται πεπερασμένους πίνακες και καλείται παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών (Singular Value Decomposition).

Ενώ οι πίνακες που συναντήσαμε έως τώρα ήταν τετραγωνικοί χάριν ευκολίας, είναι φανερό ότι η γενικότερη περίπτωση είναι αυτή των μη τετραγωνικών πινάκων, η οποία θα εξεταστεί και εδώ. Συγκεκριμένα, υποθέτουμε ότι ο πίνακας είτε είναι τετραγωνικός είτε έχει περισσότερες γραμμές από ότι στήλες. Τότε, για κάθε μιγαδικό πίνακα  $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$  με  $m \geq n$  υπάρχει η **παραγοντοποίηση SVD** που ορίζεται από τις εξισώσεις

$$A = U \Sigma V^* = \sum_{i=1}^n v_i \sigma_i v_i^*. \quad (3.4.1)$$

Εδώ, ο πίνακας  $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$  είναι διαγώνιος με τις **ιδιάζουσες τιμές**  $\sigma_i$  να ικανοποιούν

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

Δύο σημαντικές νόρμες εκφράζονται εύκολα ως προς τις ιδιάζουσες τιμές:

$$\|A\|_F \equiv \left( \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2} = (\text{trace}(A^* A))^{1/2} = (\text{trace}(V \Sigma^2 V^*))^{1/2} \quad (\text{νόρμα Frobenius})$$

$$= (\text{trace}(\Sigma^2))^{1/2} = \left( \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 \right)^{1/2}$$

$$\|A\|_2 \equiv \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_1. \quad (2\text{-νόρμα πίνακα})$$

Οι πίνακες  $U \in \mathbb{C}^{m \times n}$  και  $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$  έχουν ως στήλες τους τα αριστερά και δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα αντίστοιχα

$$U = [v_1, \dots, v_n], \quad V = [\nu_1, \dots, \nu_n],$$

οι οποίες είναι επιπλέον ορθοκανονικές, δηλ.

$$v_i^* v_i = \nu_i^* \nu_i = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

ή αλλιώς

$$U^* U = V^* V = I.$$

Άμεσα, έχουμε ότι για τον αντίστροφο του  $A$  (αν υπάρχει), ισχύει

$$A^{-1} = V \Sigma^{-1} U^* \quad (3.4.2)$$



### 3.4. Η παραγοντοποίηση ιδιάζουσων τιμών SVD (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)

Επομένως, έχουμε και ότι  $\|A^{-1}\|_2 = \sigma_n^{-1}$ , ενώ ο δείκτης κατάστασης ως προς τη 2-νόρμα είναι

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

Η ίδια σχέση ισχύει και για τους μη τετραγωνικούς πίνακες με  $m \geq n$ , όμως στη θέση του  $A^{-1}$  μπαίνει ο ψευδοαντίστροφος Moore-Penrose (Moore-Penrose pseudoinverse),  $A^\dagger = (A^*A)^{-1}A^*$ .

Από τις σχέσεις

$$AA^* = U\Sigma^2U^*, \quad A^*A = V\Sigma^2V^*, \quad (3.4.3)$$

συμπεραίνουμε ότι

1. Οι μη μηδενικές ιδιάζουσες τιμές του  $A$  είναι οι τετραγωνικές ρίζες των μη μηδενικών ιδιοτιμών των (θετικά ημιορισμένων) ερμιτιανών πινάκων  $AA^*$  και  $A^*A$ .
2. Τα αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα του  $A$  είναι τα ιδιοδιανύσματα του  $AA^*$ .
3. Τα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα του  $A$  είναι τα ιδιοδιανύσματα του  $A^*A$ .

Αυτό μας δίνει έναν αλγόριθμο υπολογισμού της SVD μέσω του ιδιοπροβλήματος των  $AA^*$  και  $A^*A$ , που όμως δεν είναι ο καλύτερος δυνατός. Οι G. H. Golub και W. Kahan μας έχουν παρέξει έναν πολύ πιο ευσταθή αλγόριθμο μέσω της παραγοντοποίησης Q-R. Για περισσότερα, βλ. [GK65].

Οι ιδιάζουσες τιμές ικανοποιούν, επίσης, και σχέσεις όμοιες με αυτές του αναπτύγματος SVE, οι σημαντικότερες των οποίων είναι,

$$Av_i = \sigma_i v_i, \quad \|Av_i\|_2 = \sigma_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.4.4)$$

Στην περίπτωση δε τετραγωνικού και αντιστρέψιμου  $A$  ισχύουν

$$A^{-1}v_i = \sigma_i^{-1}v_i, \quad \|A^{-1}v_i\|_2 = \sigma_i^{-1} \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.4.5)$$

Με χρήση αυτών των σχέσεων μπορούμε να οδηγηθούμε σε μία έκφραση της λύσης  $x = A^{-1}b$ . Αρχικά παρατηρούμε ότι λόγω της ορθοκανονικότητας των  $U, V$  τα  $x, b$  μπορούν να γραφτούν στη μορφή

$$x = VV^*x = V \begin{bmatrix} \nu_i^* x \\ \vdots \\ \nu_n^* x \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n (\nu_i^* x) \nu_i, \quad \text{και όμοια} \quad (3.4.6)$$

$$b = \sum_{i=1}^n (\nu_i^* b) \nu_i. \quad (3.4.7)$$

Συνδυάζοντας την εξ. (3.4.6) με την πρώτη από τις εξ. (3.4.4), η ποσότητα  $Ax$  γράφεται

$$Ax = \sum_{i=1}^n Av_i (\nu_i^* b) = \sum_{i=1}^n \sigma_i (\nu_i^* x) \nu_i. \quad (3.4.8)$$

Εξισώνουμε τις εκφράσεις για τα  $Ax$  και  $b$  από τις εξ. (3.4.7) και (3.4.8) και παίρνουμε

$$\sigma_i (\nu_i^* x) = \nu_i^* b. \quad (3.4.9)$$

Υποθέτοντας ότι η λύση γράφεται σαν γραμμικός συνδυασμός των  $\nu_j$ , δηλ.

$$x = \sum_{j=1}^n c_j \nu_j, \quad (3.4.10)$$

και χρησιμοποιώντας την εξ. 3.4.9 για  $\sigma_i \neq 0$  (δηλ.  $\exists A^{-1}$ ), υπολογίζονται οι συντελεστές  $c_j$

$$\begin{aligned} \sigma_i \nu_i^* \sum_{j=1}^n c_j \nu_j &= \nu_i^* b \Rightarrow \sigma_i \sum_{j=1}^n c_j \delta_{ij} = \nu_i^* b \\ &\Rightarrow c_i = \frac{\nu_i^* b}{\sigma_i}. \end{aligned} \quad (3.4.11)$$

Οπότε τώρα από τις εξ. (3.4.10) και (3.4.11) εξάγεται αυτό που ονομάζουμε «αφελής λύση»

$$x = \sum_{i=1}^n \frac{v_i^* b}{\sigma_i} v_i. \quad (3.4.12)$$

Η τελευταία εξίσωση μπορούσε να εξαχθεί άμεσα και από τη σχέση (3.4.5) για τον αντίστροφο, αλλά επιλέχθηκε αυτό ο τρόπος για λόγους παραλληλισμού με την ανάλυση που παρουσιάστηκε για το ανάπτυγμα SVE. Το «αφελές» της λύσης οφείλεται στο ότι οι μικρές ιδιάζουσες τιμές και τα στοιχεία  $v_i^* b$  στα οποία υπεισέρχεται θόρυβος την καθιστούν ακατάλληλη λύση από διακριτοποίηση μη καλώς τοποθετημένων προβλημάτων.

Στην περίπτωση όπου  $m > n$ , η έκφραση (3.4.1) καλείται λεπτή ή ανηγμένη παραγοντοποίηση SVD (thin/reduced SVD) λόγω του μη τετραγωνικού πίνακα  $U$ . Σημειώνουμε μία εναλλακτική έκφραση της SVD στην περίπτωση όπου  $m > n$ , γνωστή ως πλήρης παραγοντοποίηση SVD (full SVD). Η επόμενη έκφραση «επιτρέπει» στον αριστερό ιδιάζοντα πίνακα  $U$  να είναι τετραγωνικός, χωρίς να χάνει την ιδιότητα του ορθομοναδιαίου (δηλ.  $U^*U = I$ ), επεκτείνοντας τον  $U$  σε μία ορθοκανονική βάση στον  $\mathbb{C}^{m \times m}$ , απλά προσθέτοντας κατάλληλες ορθόγωνιες στήλες στον  $U$ , που τις συμβολίζουμε περιληπτικά με τον πίνακα  $U_{\perp}$ . Αυτή η παρέμβαση βέβαια αλλάζει τη «φυσιολογία» του πίνακα  $\Sigma$ , όχι όμως κατ' ουσίαν:

$$\begin{aligned} A &= \tilde{U} \tilde{\Sigma} V^* \\ &= [U \quad U_{\perp}] \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^T, \end{aligned}$$

όπου  $\tilde{U}$  είναι ένας  $m \times m$  ορθομοναδιαίος πίνακας και  $\tilde{\Sigma}$  είναι ο ψευδοδιαγώνιος  $m \times n$  πίνακας. Στην περίπτωση όπου ο  $A$  έχει λιγότερες γραμμές από ότι στήλες (δηλ.  $m < n$ ), η παραγοντοποίηση SVD διαμορφώνεται ως εξής

$$A = U S V^* = \sum_{i=1}^m v_i \sigma_i v_i^*,$$

όπου  $U \in \mathbb{C}^{m \times m}$ ,  $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$  και  $\Sigma = \text{diag}\{\sigma_1, \dots, \sigma_m\} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ . Επιπλέον,  $\text{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_m}$ .

Σημειώνουμε ότι σε όλα τα επόμενα παραδείγματα, χρησιμοποιούμε για την υλοποίηση της SVD τη συνάρτηση *csvd* από το προγραμματιστικό πακέτο **RT**, η οποία υπολογίζει την ανηγμένη παραγοντοποίηση SVD (αντί της πλήρους) σε συμπαγή μορφή<sup>¶</sup> (CSVD, compact SVD) και την επιστρέφει σε ένα διάνυσμα  $[U, \text{diag}(S), V]$ . Η συμπαγής μορφή εδώ υπονοεί ότι, π.χ. για έναν  $m \times n$  πίνακα με  $m \geq n$  υπολογίζονται μόνο  $n$  πρώτες στήλες του αριστερού ιδιάζοντα πίνακα ( $U$ ).

Η παραγοντοποίηση SVD είναι πολύ διαδεδομένη και περιέχεται σε όλες τις σύγχρονες προγραμματιστικές βιβλιοθήκες με πολυπλοκότητα του SVD αλγορίθμου  $\mathcal{O}(mn^2)$ <sup>||</sup> (για  $m \geq n$ ) πράξεις κινητής υποδιαστολής ανά δευτερόλεπτο (flops). Ιστορικά αναφέρουμε ότι ενώ η παραγοντοποίηση SVD αποτελεί βασικό εργαλείο στις εφαρμογές σε πολλά πεδία των εφαρμοσμένων μαθηματικών, αναπτύχθηκε, ωστόσο, πολύ αργότερα από το ανάπτυγμα SVE.

### 3.5 Ανάλυση της παραγοντοποίησης SVD

Η στενή σχέση που παρατηρείται μεταξύ του αναπτύγματος SVE και της παραγοντοποίησης SVD επιτρέπει μέσω της μεθόδου διακριτοποίησης Galerkin να υπολογίσουμε προσεγγίσεις του SVE. Συγκεκριμένα, αν υπολογίσουμε τον πίνακα  $A$  σύμφωνα με την εξ. 3.2.6, τότε οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  του  $A$  είναι προσεγγίσεις των ιδιάζουσων τιμών  $\mu_i$  του πυρήνα  $K$ . Ακριβέστερα, αν οι βάσεις Galerkin είναι ορθοκανονικές, ορίζοντας τη θετική ποσότητα  $\Delta_n$  έτσι ώστε

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

<sup>§</sup> Όλα τα εκτός διαγώνιου στοιχεία είναι 0, αλλά ο πίνακας είναι μη τετραγωνικός.

<sup>¶</sup> Γενικότερα, ως συμπαγής παραγοντοποίηση SVD νοείται η γραφή

$$M = U_r \Sigma_r V_r^*,$$

όπου  $r = \text{rank}(A)$  ( $r \leq \min(m, n)$ ) και οι πίνακες  $U_r, \Sigma_r$  και  $V_r$  είναι αντίστοιχα οι  $r$  πρώτες στήλες των πινάκων  $U, \Sigma$  και  $V$ .

<sup>||</sup> Η παραγοντοποίηση SVD υπολογίζεται σε 2 βήματα. Αρχικά μετατρέπεται ο πίνακας σε διδιαγώνιο (μέθοδος Golub-Kahan-Lanczos), το οποίο κοστίζει  $\mathcal{O}(mn^2)$  flops και κατόπιν υπολογίζεται η *p*-SVD του διδιαγώνιου πίνακα με χρήση επαναληπτικών μεθόδων και κόστος  $\mathcal{O}(n)$  flops. Άρα συνολικά το κόστος ανέρχεται σε  $\mathcal{O}(mn^2)$  flops.

### 3.5. Ανάλυση της παραγοντοποίησης SVD (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)

και συμβολίζοντας με  $\sigma_i^{(n)}$  τις ιδιάζουσες τιμές του  $n \times n$  πίνακα, τότε μπορεί να δειχθεί ότι

$$0 \leq \mu_i - \sigma_i^{(n)} \leq \Delta_n, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.5.1)$$

$$\sigma_i^{(n)} \leq \sigma_i^{(n+1)} \leq \mu_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.5.2)$$

Αυτό σημαίνει, ότι οι ιδιάζουσες τιμές του  $A$  είναι ολοένα καλύτερες προσεγγίσεις των ιδιάζουσων τιμών του  $K$  και το σφάλμα φράσσεται από από την ποσότητα  $\Delta_n$ . Επιπλέον, μπορούν αν υπολογιστούν προσεγγίσεις των ιδιάζουσων συναρτήσεων μέσω της SVD. Ορίζουμε τις συναρτήσεις

$$v_j^{(n)}(s) = \sum_{i=1}^n v_{ij} \psi_i(s), \quad \nu_j^{(n)}(t) = \sum_{i=1}^n \nu_{ij} \phi_i(t). \quad (3.5.3)$$

Τότε, αποδεικνύεται ότι αυτές οι συναρτήσεις συγκλίνουν στις ιδιάζουσες συναρτήσεις, δηλ.

$$v_j^{(n)}(s) \rightarrow v_j(s) \quad \text{και} \quad \nu_j^{(n)}(t) \rightarrow \nu_j(t), \quad \text{όταν} \quad n \rightarrow \infty. \quad (3.5.4)$$

Για παράδειγμα, προκύπτει το εξής αποτέλεσμα

$$\max\{\|v_1 - v_1^{(n)}\|_2, \|\nu_1 - \nu_1^{(n)}\|_2\} \leq \left( \frac{2\Delta_n}{\mu_1 - \mu_2} \right)^{1/2}.$$

Το φράγμα αυτό εξαρτάται από το πόσο απέχουν οι δύο πρώτες ιδιάζουσες τιμές. Όμοια, αλλά πιο περίπλοκα φράγματα υπάρχουν και για τις άλλες ιδιάζουσες συναρτήσεις.

Στα επόμενα, έχουμε περιοριστεί στο σώμα  $\mathbb{R}$  αντί για το  $\mathbb{C}$  των ορισμών. Κατά ευτυχή σύμπτωση, απόρροια της 3.5.4, είναι ότι οι SVD ποσότητες  $v_i^T b$  είναι προσεγγίσεις των αντίστοιχων εσωτερικών γινομένων  $\langle v_i, g \rangle$  στη βάση του SVE. Αρχικά παρατηρούμε ότι οι συναρτήσεις  $g^{(n)}$  να είναι ολοένα καλύτερες προσεγγίσεις της  $g$  με την αύξηση του  $n$ , δηλ.  $g^{(n)} \rightarrow g$  για  $n \rightarrow \infty$ , και υπάρχουν  $c_i$  τέτοια ώστε  $g = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i$  οπότε η σχέση 3.2.7 επιβάλλει

$$c_i = \langle \psi_i, g \rangle = \int_0^1 \psi_i(s) g(s) ds = b_i, \quad (3.5.5)$$

όποτε εφόσον η  $g^{(n)}$  κατοικεί στον υπόχωρο που παράγει η γραμμική θήκη των  $\psi_i$  (βλ. σχέση 3.2.3) μπορεί πλέον να εκφραστεί ως εξής

$$g^{(n)}(s) = \sum_{k=1}^n b_k \psi_k(s). \quad (3.5.6)$$

Επιπλέον, τα εσωτερικά γινόμενα  $\langle v_j^{(n)}, g^{(n)} \rangle$  είναι και αυτά ολοένα καλύτερες προσεγγίσεις των  $\langle v_j, g \rangle$ , δηλ.

$$\langle v_j^{(n)}, g^{(n)} \rangle \rightarrow \langle v_j, g \rangle, \quad \text{για} \quad n \rightarrow \infty. \quad (3.5.7)$$

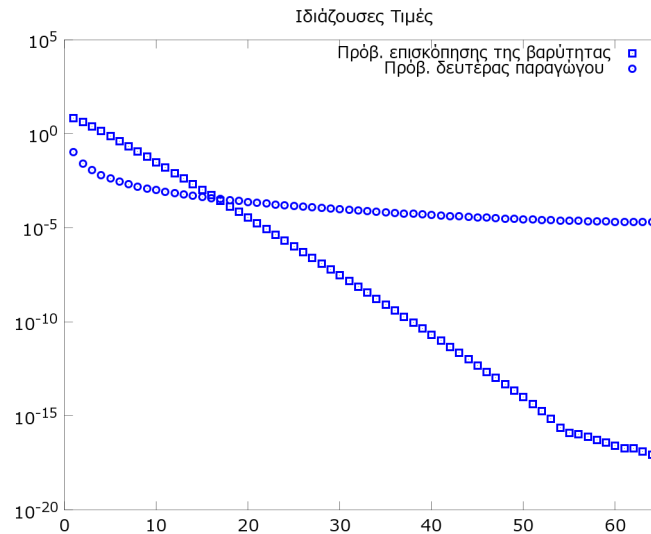
Χρησιμοποιώντας τώρα την πρώτη από τις εξ. (3.5.3), και την εξ. (3.5.6) βρίσκουμε

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

Αυτό το σημαντικό αποτέλεσμα απλοποιεί πολύ τη μελέτη μας. Μπορούμε να εξετάσουμε όλες τις σημαντικές σχέσεις του ανατύγματος SVE υπολογίζοντας την παραγοντοποίηση SVD του πίνακα  $A$  και ειδικότερα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις αριθμητικές ποσότητες για ελέγξουμε αν η συνθήκη Picard φαίνεται να ικανοποιείται.

Για να αποκτήσουμε μία εικόνα των χαρακτηριστικών των διακριτών αντίστροφων προβλημάτων, θεωρούμε τη διακριτοποίηση του μοντέλου επισκόπησης της βαρύτητας μέσω του κανόνα του μέσου (μέθοδος τετραγωνισμού). Για να παράξουμε ένα πρόβλημα με  $n$  σημεία δεδομένων και  $n$  αγνώστων και παίρνοντας

### 3.5. Ανάλυση της παραγοντοποίησης SVD (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.3: Οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  δύο  $64 \times 64$  πινάκων που προκύπτουν από διακριτοποίηση του προβλήματος επισκόπησης της βαρύτητας (τετράγωνο) και του προβλήματος δεύτερης παραγώγου (κύκλοι).

$s_i = t_i$  ως σημεία ταξινόμησης, τα στοιχεία του πίνακα  $A$  της διακριτοποίησης είναι φανερό ότι δίνονται από τη σχέση (βλ. εξ. 2.1.4, 3.1.1, 3.1.2, 3.1.3)

$$a_{ij} = \frac{d}{n} \left[ d^2 + \left( \frac{i-j}{n} \right)^2 \right]^{-3/2}, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

και επιπλέον ο  $A$  είναι συμμετρικός. Για την υλοποίηση χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση gravity από το προγραμματιστικό πακέτο RT, στην οποία έχουμε θεωρήσει  $n = 64, d = 0.25, s \in [0, 1]$  και ως λύση έχουμε θεωρήσει τη συνάρτηση  $f(t) = \sin \pi t + 0.5 \sin(2\pi t)$ . Η συνάρτηση gravity παράγει ένα  $64 \times 64$  πίνακα, του οποίου υπολογίζουμε κατόπιν την παραγοντοποίηση SVD. Όπως φαίνεται στην εικόνα 3.3 οι ιδιάζουσες τιμές φθίνουν χωρίς κενά παντού στο φάσμα. Για  $i \geq 55$  υπάρχει μία τάση σταθεροποίησης, για την οποία ευθύνεται η αριθμητική πεπερασμένης ακρίβειας (οι συγκεκριμένες ιδιάζουσες τιμές είναι μικρότερες από την ακρίβεια της μηχανής και δεν είναι αξιόπιστες). Ο δείκτης κατάστασης ανέρχεται στην υπέρροχη τιμή του  $2.3288 \cdot 10^{18}$ , και θεωρείται πρακτικά άπειρος.

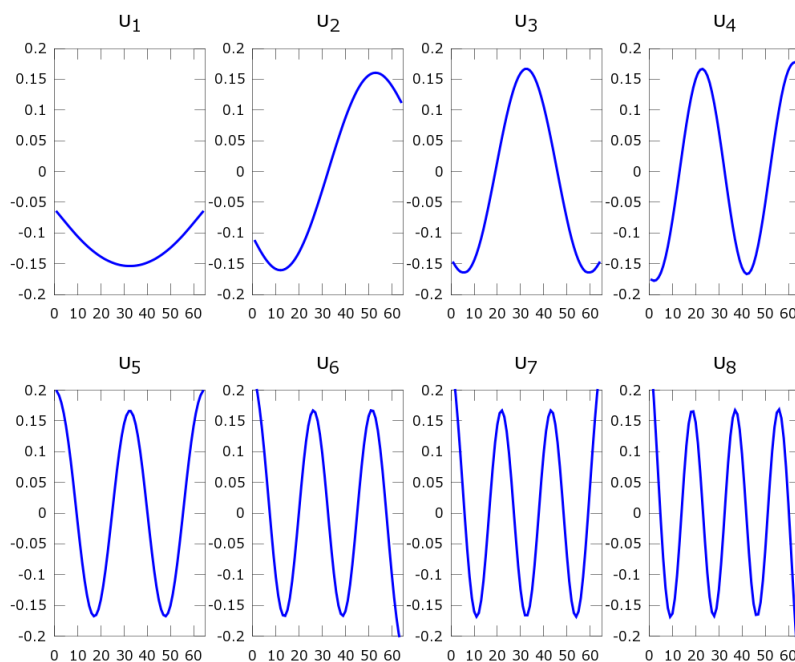
Η εικόνα 3.3 δίνει επίσης μία σύγκριση μεταξύ των ιδιάζουσων τιμών του προηγούμενου προβλήματος και του προβλήματος της δεύτερης παραγώγου, το οποίο παρουσιάσαμε νωρίτερα. Περιγράφεται από τις εξ. (2.2.10), (2.2.11) και (2.2.12). Η μη διαφορισμότητα του πυρήνα κατά μήκος της διαγωνίου, (βλ. εξ. 2.2.10) καθιστά τον πυρήνα του μοντέλου της δεύτερης παραγώγου λιγότερο λείο από ότι ο πυρήνας του μοντέλου επισκόπησης της βαρύτητας. Παρατηρούμε λοιπόν ότι το διπλό γράφημα της εικόνα 3.3 των δύο μοντέλων βρίσκεται σε συμφωνία με τη θεωρία του προηγούμενου κεφαλαίου. Πράγματι, οι ιδιάζουσες τιμές του πιο λείου πυρήνα φθίνουν ταχύτερα. Και για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου έγινε χρήση της συνάρτησης deriv2 για  $n = 64$  από το προγραμματιστικό πακέτο RT, όπου επιπλέον θεωρήσαμε  $f(t) = t$  που είναι η (αναλυτική) λύση για δεξί μέλος τη συνάρτηση  $g(s) = \frac{s^3-s}{6}$ . Η συνάρτηση deriv2 παράγει ένα  $64 \times 64$  πίνακα, του οποίου υπολογίζουμε κατόπιν την παραγοντοποίηση SVD.

Η εικόνα 3.4 δείχνει τα πρώτα οκτώ ιδιάζοντα διανύσματα που προκύπτουν από την SVD του ίδιου πίνακα για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. Τα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα είναι ακριβώς τα ίδια διότι, όπως είδαμε, ο πίνακας είναι συμμετρικός\*\*. Παρατηρούμε ότι οι ταλαντώσεις των ιδιάζόντων διανυσμάτων γίνονται περισσότερες με την αύξηση του του δείκτη  $i$ , δηλ. όσο μειώνονται οι αντίστοιχες ιδιάζουσες

\*\*Έχουμε διαδοχικά

$$\begin{aligned} A &= A^T \Rightarrow U \Sigma V^T = V \Sigma U^T \\ \Rightarrow \Sigma &= (U^T V) \Sigma (U^T V) \Rightarrow U^T V = I \Rightarrow U = V. \end{aligned}$$

### 3.5. Ανάλυση της παραγοντοποίησης SVD (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.4: Τα πρώτα οκτώ αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα από για τον πίνακα που χρησιμοποιήθηκε για το γράφημα 3.3

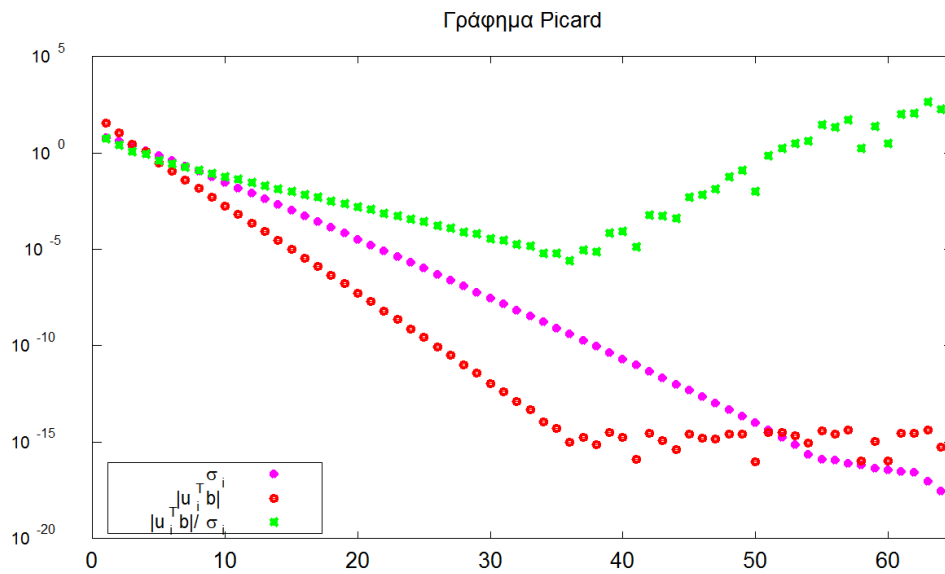
τιμές  $\sigma_i$ . Μπορούμε με ασφάλεια να συμπεράνουμε ότι οι ιδιάζουσες συναρτήσεις συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο. Αν και όλα τα ιδιάζοντα διανύσματα (64) είναι ορθοκανονικά εκ κατασκευής, δε θα έπρεπε να εμπιστευτούμε τη διαθέσιμη πληροφορία από τα τελευταία 10, λόγω των πολύ μικρών ιδιάζουσων τιμών.

Τέλος, θα θέλαμε να εξετάσουμε τη συμπεριφορά των SVD ποσοτήτων  $v_i^T b$  (δεξί μέλος) και  $\frac{v_i^T b}{\sigma_i}$  (λύση). Το κοινό γράφημα των τελευταίων ποσοτήτων μαζί με τις ιδιάζουσες τιμές αναφέρεται συχνά σαν το **γράφημα Picard** (Picard plot), είναι δε πολύ διαφωτιστικό. Χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση *picard* από το προγραμματιστικό πακέτο RT, η οποία εκτελεί το γράφημα Picard των απολυτων τιμών αυτών των ποσοτήτων για τα προβλήματα ελέγχου μας. Επιπλέον δύναται να υπολογίσει μία πιο λεία λύση υπο την έννοια του γεωμετρικού μέσου  $2d + 1$  σημείων με κέντρο το σημείο  $i$ , όπου η παράμετρος  $d$  προσδιορίζεται από το χρήστη. Σαν συνέχεια της προηγούμενης ανάλυσης και των γραφημάτων (3.3) και 3.4, έχουμε θεωρήσει ως είσοδο της συνάρτησης *picard* τα στοιχεία  $U, \Sigma, V$  της παραγοντοποίησης SVD για τον  $64 \times 64$  πίνακα της διακριτοποίησης για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας καθώς και το διακριτοποιημένο δεξί μέλος (b) απουσία θορύβου, ενώ δεν επιβάλαμε λείανση της λύσης (δηλ.  $d = 0$ ). Το αποτέλεσμα φαίνεται στην εικόνα 3.5. Άμεση παρατήρηση είναι ότι οι ποσότητες  $|v_i^T b|$  φθίνουν ταχύτερα από ότι οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  μέχρι κατάπαυσης της πτωτικής τάσης για  $i \geq 35$  και σταθεροποίησής τους σε ένα επίπεδο που καθορίζεται από την ακρίβεια της μηχανής. Οι λύσεις  $\frac{v_i^T b}{\sigma_i}$  φθίνουν, επίσης, για  $i < 35$ , αλλά για  $i \geq 35$  αρχίζουν να αυξάνονται πάλι, όπως αναμενόταν, λόγω της ανακρίβειας των τιμών  $v_i^T b$ .

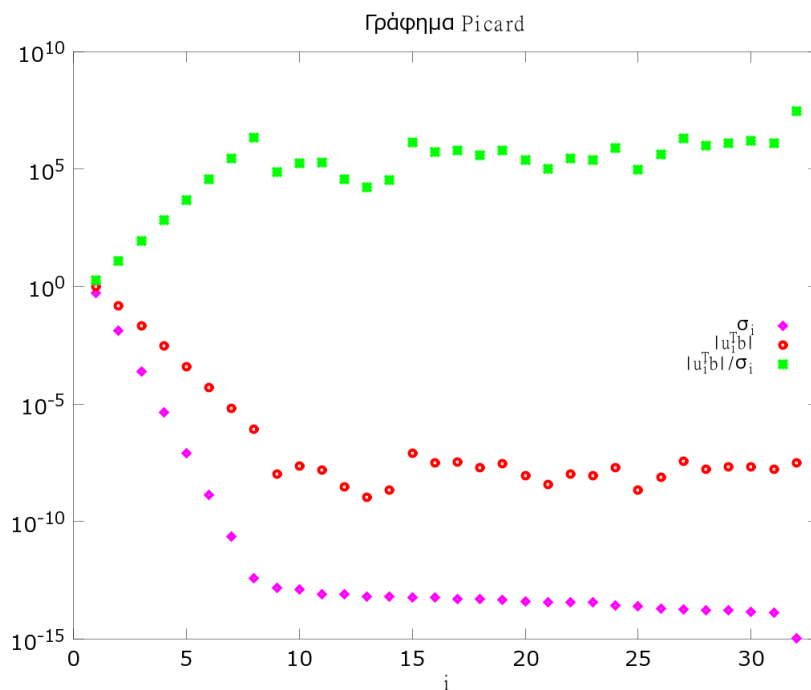
Αυτό δείχνει ξεκάθαρα ότι ακόμα και χωρίς σφάλματα μετρήσεων στα δεδομένα, δεν πρέπει πάντα να περιμένουμε ότι θα βρούμε λύσεις με νόημα στο διακριτό αντίστροφο πρόβλημα. Η επιρροή των σφαλμάτων στρογγύλευσης από τον υπολογισμό της SVD είναι αρκετή για να καταστρέψει τη υπολογιστική μας λύση. Προς αποφυγή παρεξηγήσεων, σημειώνουμε ότι το ίδιο ισχύει ακόμα και αν η λύση υπολογιστεί από την εξ.  $x = A^{-1}b$  με απαλοιφή Gauss, η μόνη διαφορά είναι ότι τα σφάλματα στρογγύλευσης οδηγούν σε διαφορετική, αλλά και πάλι, λάθος λύση.

Πριν εισάγουμε το θόρυβο στη θεώρησή μας ας δούμε πως μοιάζει το γράφημα Picard και τι πληροφορία αντλούμε στην περίπτωση που δεν υπάρχει τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση για το πρόβλημά μας. Προς αυτό, θεωρούμε το πρόβλημα ελέγχου του Ursell που συστήσαμε νωρίτερα (βλ. εξ. 2.2.13). Χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση *ursell* από το προγραμματιστικό πακέτο RL για να διακριτοποιήσουμε το πρόβλημα με τη μέθοδο Galerkin και τις συναρτήσεις βάσεις «κουτί» (3.2.8) και για  $n = 14$ . Στην εικόνα 3.6 φαίνεται ότι

### 3.5. Ανάλυση της παραγοντοποίησης SVD (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.5: Το γράφημα Picard για το διακριτοποιημένο πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας, όπου δεν υπεισέρχεται θόρυβος στο δεξί μέλος.



Εικόνα 3.6: Το γράφημα Picard για τη διακριτή έκδοση του προβλήματος του Ursell, το οποίο έχει μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμο πυρήνα. Είναι φανερό ότι παραβιάζεται το μοτίβο (διακριτή συνθήκη picard) που υπήρχε στην εικόνα 3.5.

δεν ακολουθείται το επιθυμητό μοτίβο της εικόνας 3.5. Αντ' αυτού παρατηρούμε ότι οι ιδιάζουσες τιμές φθίνουν αρκετά ταχύτερα των ποσοτήτων  $u_i^T b$  το οποίο είναι μία ισχυρή ένδειξη ότι κάπου υπάρχει πρόβλημα. Παρόλο που το γράφημα ακολουθεί τη διαίσθηση μας λόγω του ότι ήδη γνωρίζουμε ότι στο πρόβλημα του Ursell δεν υπάρχει τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση, θα πρέπει να τονίσουμε ότι στη γενική περίπτωση, μία τέτοια ανάλυση μεμονωμένα δεν είναι ικανή να δείξει αν το πρόβλημα προέρχεται από την ολοκληρωτική εξίσωση, τη διακριτοποίηση ή άλλες πηγές.

### 3.6 Θόρυβος στα Δεδομένα και Διακριτή Συνθήκη Picard

Ας δούμε τώρα τι συνεπάγεται αν θεωρήσουμε «θορυβώδη» δεξιά μέλη ώστε το πρόβλημά μας να γίνει πιο ρεαλιστικό. Κατ' αρχήν θα πρέπει να γίνουμε πιο συγκεκριμένοι με το τι εννοούμε με τον όρο «θόρυβος». Θόρυβος είναι γενικώς το σύνολο των ανεπιθύμητων πληροφοριών, οι οποίες συνοδεύουν το σήμα<sup>††</sup> και υποβαθμίζουν την ορθότητα και την ακρίβεια της μέτρησης. Στη φυσική και τα μαθηματικά, ο όρος «διαταραχή» χρησιμοποιείται για να δηλώσει μια δευτερεύουσα επιρροή σε ένα σύστημα που το αναγκάζει να παρεκκλίνει από την αναμενόμενη συμπεριφορά του. Αν αλλάξουμε το δεξί μέλος στην ολοκληρωτική εξίσωση 2.1.1 από  $g(s)$  σε  $\tilde{g}(s) = g(s) + \delta g(s)$ , τότε η συνάρτηση  $\delta g(s)$  είναι η εν λόγω διαταραχή που προκαλεί την απόκλιση την λύσης  $f(t)$ .

Όταν χειριζόμαστε ένα διακριτό πρόβλημα της μορφής  $Ax = b$  και πραγματικά δεδομένα, η διαταραχή στο δεξί μέλος παίρνει τη μορφή «θορύβου», δηλ. τυχαίες διακυμάνσεις που προκαλούνται από σφάλματα μετρήσεων. Μέλημά μας είναι να δούμε πως επηρεάζεται η λύση και πώς μπορούμε να μειώσουμε κατά το δυνατόν αυτή την επιρροή μέσω μεθόδων κανονικοποίησης.

Περιοριζόμαστε στην περίπτωση όπου τα σφάλματα υπάρχουν μόνο στο δεξί μέλος  $b$ . Είναι εμφανές ότι αυτό είναι μία υπεραπλούστευση. Συχνά ο πίνακας  $A$  περιέχει σφάλματα μοντελοποίησης και βέβαια σφάλματα από τις μεθόδους τετραγωνισμού για τον υπολογισμό των στοιχείων του. Ωστόσο, αυτά τα σφάλματα είναι πιο συστηματικά στη φύση από ότι αυτά του δεξιού μέλους και η ανάλυση τους ενέχει μεγαλύτερη πολυπλοκότητα. Παρολ' αυτά η ανάλυσή μας, αν μη τι άλλο, εμπλουτίζει τη διαίσθησή μας για τις πρακτικές λύσεις μη καλώς τοποθετημένων προβλημάτων.

Ας υποθέσουμε, λοιπόν, ότι υπάρχουν η ακριβής λύση  $x^{exact}$ , και το αντίστοιχο δεξί μέλος που δίνεται από  $b^{exact} = Ax^{exact}$ . Στην πραγματικότητα, αυτή η απαίτηση δεν ικανοποιείται απαραίτητα αν τα  $A$ ,  $b^{exact}$  και  $x^{exact}$  είναι προϊόντα διακριτοποίησης των  $K$ ,  $g$  και  $f$  αντίστοιχα στη ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm (λόγω των σφαλμάτων της μεθόδου τετραγωνισμού και σφαλμάτων αποκοπής), είναι όμως μία βολική υπόθεση. Συνεπώς, το μοντέλο μας έχει ως εξής

$$b = b^{exact} + e, \quad \text{όπου} \quad b^{exact} = Ax^{exact}. \quad (3.6.1)$$

Το διάνυσμα  $e$  αντιπροσωπεύει το θόρυβο στα δεδομένα. Ο θόρυβος αναφέρεται τυπικά από την παρέμβαση της ίδιας της μέτρησης καθώς και από ανακρίβειες του μέσου (συστήματος) μέτρησης.

Περιορίζουμε τη μελέτη μας σε σφάλματά που προέρχονται από Γκαουσιανό λευκό θόρυβο<sup>‡‡</sup> (Gaussian white noise), δηλ. ότι όλα τα στοιχεία του  $e \in \mathbb{R}^m$  προέρχονται από την ίδια Γκαουσιανή κατανομή\* με μηδενική μέση τιμή ( $\epsilon$  ή  $\bar{\epsilon}_i$  ή  $E[e_i] = 0$ ) και τυπική απόκλιση  $\eta$ <sup>†</sup>. Αυτά τα προκαταρκτικά στοιχεία είναι αρκετά για να παρουσιάσουμε κάποια παραδείγματα που θα φωτίσουν την επιρροή του θορύβου στη διακριτοποίηση. Η ανάλυση του θορύβου θα συνεχιστεί αφού εξάγουμε ένα σημαντικό συμπέρασμα που μας βοηθάει να «διαβάζουμε» σωστά τα γραφήματά μας και αποτελεί διακριτό ανάλογο της συνθήκης Picard.

Η ενσωματωμένη συνάρτηση `randn` του Octave είναι ακριβώς αυτό που χρειαζόμαστε. Η συνάρτηση `randn` δημιουργεί ψευδο-τυχαία διανύσματα (ή πίνακες), τα στοιχεία των οποίων σχηματίζουν Γκαουσιανή κατανομή με μέση τιμή 0 και διασπορά 1. Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να δημιουργήσουμε λευκό θόρυβο κατά παραγγελία ως προς την τυπική απόκλιση ως εξής. Αρχικά φτιάχνουμε το τυχαίο διάνυσμά μας δίνοντας επιλέγοντας τη διάστασή του  $m$ , δηλ. `randn(m,1)` (για ευκολία μπορεί να χρησιμοποιηθεί `m=size(b_exact)`<sup>‡</sup>). Κατόπιν το πολλαπλασιάζουμε με την παράμετρο  $\eta$  ώστε να πάρουμε την επιθυμητή τυπική απόκλιση, που ουσιαστικά είναι ένα μέτρο της διαταραχής-θορύβου που εισάγουμε, δηλ. συνολικά θα έχουμε

<sup>††</sup> Ως σήμα θεωρείται ο φορέας που κωδικοποιείται η ζητούμενη πληροφορία κατά τη διαδικασία μιας μέτρησης.

<sup>‡‡</sup> Ο λευκός θόρυβος, πήρε το όνομά του κατ' αναλογία με το λευκό φως. Είναι ο συνδυασμός των ήχων όλων των διαφορετικών συχνοτήτων, ή αλλιώς είναι ένα τυχαίο σήμα με επίπεδη πυκνότητα φασματικής ισχύος (flat power spectral density). Στη στατιστική, λευκός θόρυβος είναι μία ακολουθία μη συσχετιζόμενων τυχαίων μεταβλητών με μηδενική μέση τιμή και πεπερασμένη διασπορά.

\* Γκαουσιανή ή κανονική κατανομή (Gaussian or normal distribution) καλείται η συνεχής κατανομή πιθανότητας που έχει συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (Γκαουσιανή συνάρτηση) σε σχήμα «καμπάνας» και δίνεται από

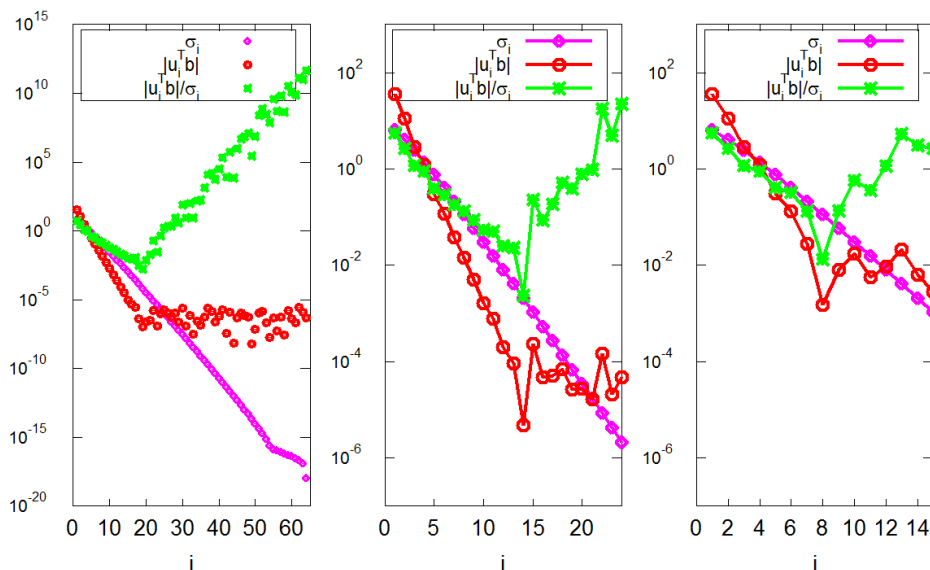
$$f(x; \epsilon, \eta^2) = \frac{1}{\eta\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\epsilon}{\eta}\right)^2},$$

όπου  $\epsilon$  είναι η μέση τιμή και  $\eta$  η τυπική απόκλιση.

<sup>†</sup> Εδώ χρησιμοποιείται ο συμβολισμός  $\eta$  για την τυπική απόκλιση και  $\epsilon$  για την μέση τιμή αντί για τον συνήθη συμβολισμό  $\sigma$  και  $\mu$  αντίστοιχα, για αποφύγουμε τη σύγχυση με τις ιδιόζυγες τιμές.

<sup>‡</sup> Αν δεν κάνουμε την επιλογή `m=size(b_exact)` θα πρέπει να πολλαπλασιάσουμε από αριστερά με έναν μη τετραγωνικό μοναδιαίο πίνακα  $I_{m \times n}$ , όπου `n=size(b_exact)` ώστε να γίνει ίδιας διάστασης με το `b_exact`. Και στις δύο περιπτώσεις ( $m \leq b\_exact$ ) η εντολή στο Octave είναι, `ones(size(b_exact),m)*randn(m,1)`. Το  $m$  είναι στην ευχέρεια του χρήστη. Αν επιλέξουμε  $m < size(b\_exact)$  εισάγουμε θόρυβο μόνο στις  $m$  πρώτες συνιστώσες του `b_exact`.

### 3.6. Θόρυβος στα Δεδομένα και Διακριτή Συνθήκη Picard (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.7: Τρία γραφήματα Picard για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας, στα οποία προσθέτουμε θόρυβο στο δεξί μέλος, αυξάνοντάς τον από το αριστερότερο προς το δεξιότερο γράφημα. Αριστερο γράφημα:  $\|e\|_2 \sim 10^{-6}$ . Μεσαίο γράφημα:  $\|e\|_2 \sim 10^{-4}$ . Δεξί γράφημα:  $\|e\|_2 \sim 10^{-2}$ .

$\text{eta} * \text{randn}(m)$ . Επιπλέον μπορούμε να δημιουργήσουμε ένα θορυβώδες δεξί μέλος με ένα δεδομένο συντελεστή σχετικού με το δεξί μέλος θορύβου (relative noise level),  $rnl = \frac{\|b - b_{exact}\|_2}{\|b_{exact}\|_2} = \frac{\|e\|_2}{\|b_{exact}\|_2}$ . Αυτό γίνεται με τις παρακάτω Octave ή Matlab εντολές

```
e = randn(m, 1);
e = e/norm(e);
e = rnl * norm(b_exact) * e;
b = b_exact + e;
```

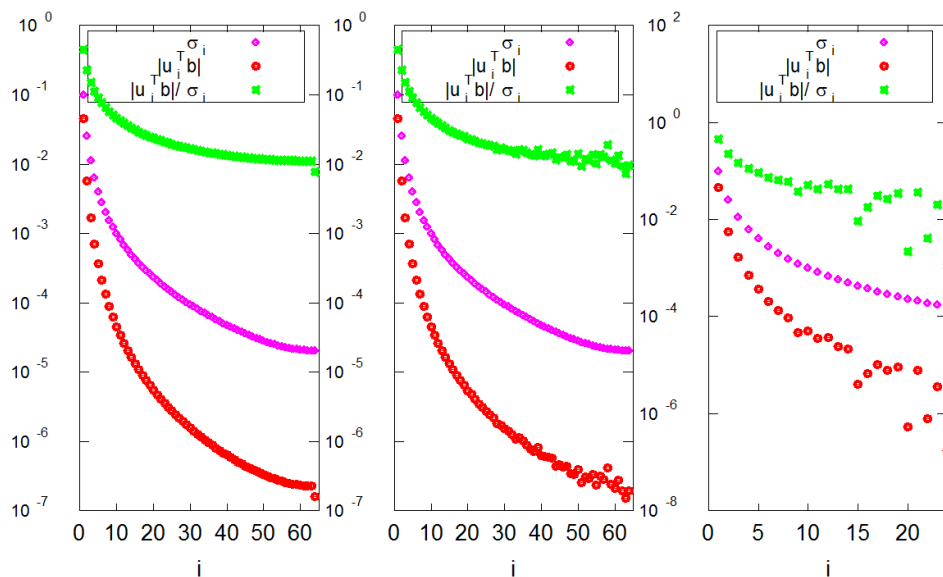
Βασισμένοι στα προηγούμενα και την ανάλυση της υποευστηότητας 3.5 χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση picard με εισόδους που έχουν θόρυβο μόνο ως προς τα δεξιά μέλη  $b$ . Σαν συνέχεια των προηγούμενων παραδειγμάτων χρησιμοποιούμε και εδώ τα προβλήματα ελέγχου που διακριτοποιούνται από τις συναρτήσεις gravity και deriv2 με  $n = 64$ , και ελέγχουμε την ευστάθεια της λύσης για διάφορα επίπεδα θορύβου.

Στην εικόνα 3.7, βλέπουμε πώς μεταβάλλονται τα γραφήματα Picard για τρεις διαφορετικές τιμές της παραμέτρου eta (τυπικής απόκλισης). Δημιουργήσαμε από αριστερά προς δεξιά (τρία) αυξανόμενα επίπεδα θορύβου για το διακριτοποιημένο δεξί μέλος του προβλήματος επισκόπησης της βαρύτητας για  $n = 64$ . Συγκρίνουμε, αρχικά, το πρώτο γράφημα αριστερά στην εικόνα 3.7 το «μη θορυβώδες» γράφημα στην εικόνα 3.5. Παρατηρούμε, ότι διαταράσσοντας ελαφρώς το δεξί μέλος με  $\|e\|_2 \sim 10^{-6}$  και  $\|e\|_2 / \|b_{exact}\|_2 \sim 10^{-7}$  ότι ποσότητες Fourier  $|u_i^T b|$  συνεχίζουν μεν να φθίνουν με πιο αργό ρυθμό από ότι οι ιδιαίζουσες τιμές, αλλά η αυστηρά πτωτική τους πορεία παύει για  $i \geq 20$ , το οποίο φαίνεται να είναι το επίπεδο που επιβάλλει το μέγεθος του θορύβου. Οι λύσεις έχουν επίσης καθοδική τάση για  $i < 20$ , αλλά αμέσως μετά αρχίζουν να αυξάνονται οι τιμές τους. Η σύγκριση με τα λοιπά γραφήματα της εικόνας 3.7 δείχνει ότι η ανταπόκριση των γραφημάτων Picard σε ολοένα και μεγαλύτερο θόρυβο στο δεξί μέλος είναι μετατόπιση του επιπέδου που «χαλαίει» την πτωτική τάση των ποσοτήτων  $|u_i^T b|$  ακόμα πιο αριστερά στον άξονα των  $i$ .

Στην εικόνα 3.8 κάναμε την ίδια μελέτη για το πρόβλημα της δεύτερης παραγωγού, με χρήση των συναρτήσεων deriv2 για  $n = 64$  και picard για δύο διαφορετικά επίπεδα θορύβου του δεξιού μέλους. Αριστερά στην εικόνα 3.8 είναι το γράφημα Picard του προβλήματος της δεύτερης παραγωγού χωρίς θόρυβο στο δεξί μέλος, ενώ στα δύο επόμενα δεξιά του υπεισέρχεται αυξανόμενα ο θόρυβος. Εδώ καλυπτούμε τη δεύτερη από τις περιπτώσεις παραγωγής θορύβου που αφορά το συντελεστή σχετικού θορύβου rnl. Το πρόβλημα της δεύτερης παραγωγού είναι ηπίως μη καλώς τοποθετημένο και σε μία διαταραχή με συντελεστή σχετικού θορύβου  $rnl = 10^{-5}$ , η οποία περιγράφεται από το μεσαίο γράφημα, παρατηρούμε ότι χονδρικά το γράφημα Picard έχει υποστεί μικρές και μάλιστα μη ουσιώδεις αλλαγές, αν αναλογιστεί κανείς ότι η αξιοπιστία



### 3.6. Θόρυβος στα Δεδομένα και Διακριτή Συνθήκη Picard (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.8: Αριστερά: Γράφημα Picard για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας χωρίς θόρυβο. Μέση και δεξιά: δύο γραφήματα Picard όπου υπεισέρχεται θόρυβος στο δεξί μέλος με τη μορφή συντελεστή σχετικού θορύβου  $rnl = 10^{-5}$  και  $rnl = 10^{-3}$  αντίστοιχα.

κυρίως χάνεται στις πολύ μικρές ιδιάζουσες τιμές ( $i \geq 50$ ) που είναι κάτι αναμενόμενο. Επιπλέον η λύση ταλαντώνεται δειλά και σε πολύ ανεχτά επίπεδα ενώ παραμένει πτωτική γενικώς. Πράγματι, το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου καταφέρνει να «ανασυγκροτηθεί» σε τέτοιο μέγεθος θορύβου. Επιβάλλοντας όμως  $rnl = 10^{-3}$ , η απόκριση του συστήματός μας αλλάζει. Και σε αυτό το γράφημα πληρείται, και μάλιστα ολοκληρωτικά, η ταχύτερη απόσβεση των ποσοτήτων  $|u_i^T b|$  έναντι των ιδιάζουσων τιμών. Ωστόσο, όπως φαίνεται οι λύσεις μάς δεν πρέπει να χαίρουν της εμπιστοσύνης μας για  $i \geq 15$ , όπου παρατηρείται η ανοδική τους πορεία.

Από τα παραπάνω είναι εμφανές ότι οι υπολογιστικές λύσεις μας κυριαρχούνται από τους όρους της SVD. Αυτού του είδους η ανάλυση των συνιστωσών της SVD μαζί με μία καλή γνώση της σύνδεσής τους με τους όρους του SVE, οδηγεί στην εισαγωγή μίας διακριτής έκδοσης της συνθήκης Picard. Ενώ η λύση ενώ προβλήματος πεπερασμένης διάστασης δε μπορεί να είναι μη φραγμένη, η νόρμα της μπορεί να γίνει τόσο μεγάλη που είναι ουσιαστικά άχρηστη. Η **διακριτή συνθήκη Picard** διατυπώνεται ως εξής:

*Έστω  $\tau$  το επίπεδο στο οποίο οι υπολογιστικές ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  σταθεροποιούνται λόγω σφαλμάτων στρογγύλευσης της μηχανής. Η διακριτή συνθήκη Picard ικανοποιείται, αν για όλες τις ιδιάζουσες τιμές που είναι πάνω από το  $\tau$ , οι αντίστοιχες ποσότητες  $|u_i^T b|$  κατά μέσο όρο φθίνουν ταχύτερα από τις  $\sigma_i$ .*

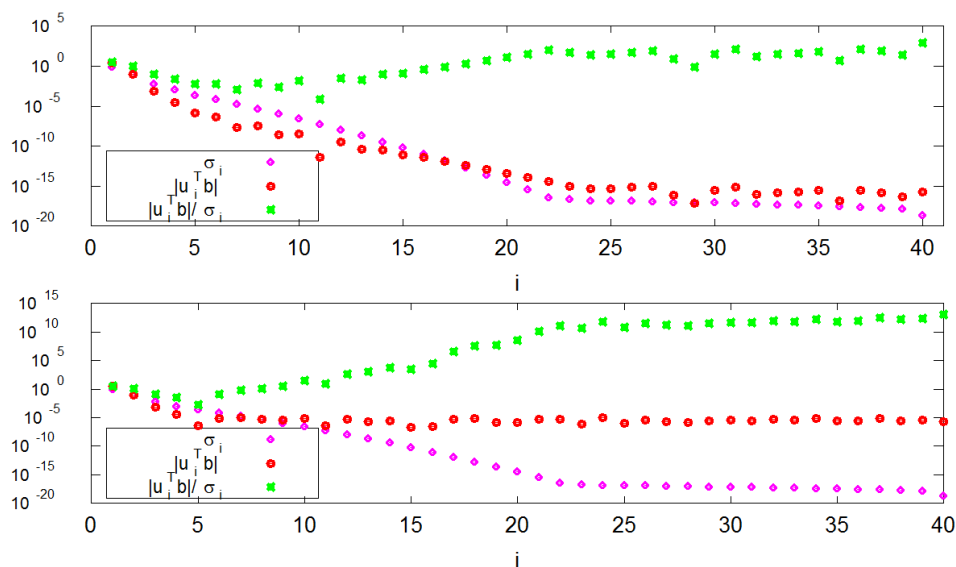
Για παράδειγμα, στην εικόνα 3.7, βλέπουμε ότι  $|u_i^T b| > \sigma_i$  για  $i = 1, 2, 3, 4$ , αλλά η διακριτή συνθήκη Picard συνεχίζει να ικανοποιείται για  $i = 1, \dots, 20$ . Θα πρέπει κανείς να αγνοεί το μέρος του γραφήματος που αντιστοιχεί σε μικροσκοπικές ιδιάζουσες τιμές κοντά στην ακρίβεια της μηχανής και παρουσία θορύβου στο δεξί μέλος θα πρέπει επιπλέον να αγνοείται και η επιρροή των ποσοτήτων  $|u_i^T b|$  στο επίπεδο το οποίο σταθεροποιούνται και καθορίζεται από το θόρυβο.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα μη τήρησης της διακριτής συνθήκης Picard είναι το πρόβλημα του Urshell, όπως ήδη δείξαμε στην εικόνα 3.6, στο οποίο γνωρίζαμε εξ αρχής ότι δεν υπάρχει τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση. Θα συνεχίσουμε δίνοντας ένα τεχνητό παράδειγμα που οφείλεται στους L. Fox και E. T. Goodwin το οποίο είναι αυστηρώς μη καλώς τοποθετημένο. Ο πυρήνας, το δεξί μέλος και λύση δίνονται αντίστοιχα από

$$K(s, t) = (s^2 + t^2)^{1/2}, \quad g(s) = \frac{1}{3} \left( (1 + s^2)^{3/2} - s^3 \right) f(t) = t. \quad (3.6.2)$$

Η συνάρτηση *foxgood* από το προγραμματιστικό πακέτο RT δίνει μία διακριτοποίηση αυτού του προβλήματος με χρήση του κανόνα του μέσου. Στην εικόνα 3.9 δίνονται δύο γραφήματα Picard για  $n = 40$  για το πρόβλημα που περιγράφεται από την ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm α' είδους με στοιχεία που δίνονται από τις εξ. 3.6.2. Το άνω γράφημα είναι τυπική περίπτωση αυστηρώς μη καλώς τοποθετημένου προβλήματος. Η

### 3.6. Θόρυβος στα Δεδομένα και Διακριτή Συνθήκη Picard (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)



Εικόνα 3.9: Γράφηματα Picard για το ασυρως μη καλως τοποθετημενο τεχνητο προβλημα των L. Fox και E. T Goodwin με και χωρις θορυβο στο δεξι μελος. Άνω: Γράφημα Picard χωρις θορυβο. Κάτω: Γράφημα Picard με συντελεστή σχετικού θορύβου  $rnl = 10^{-5}$ . Φανερά, δεν ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard.

διακριτή συνθήκη Picard παραβιάζεται ήδη από  $i = 18$  καθώς βλέπουμε ότι  $|u_i^T b| < \sigma_i$  για  $i = 18, \dots, 40$ . Όμως αυτό είναι πλασματικό διότι βλέπουμε ότι η λύση αρχίζει να κινείται ανοδικά ήδη από το  $i = 8$  διότι οι ιδιάζουσες τιμές μαστιζονται από τα σφάλματα ακρίβειας της μηχανής. Το κάτω γράφημα δείχνει πως ασθάνεται το σύστημα για ένα σχετικό θόρυβο  $\|e\|_2 / \|b^{exact}\|_2 = 10^{-5}$ . Εδώ, είναι φανερή η παντελής αναξιπιστία της υπολογιστικής λύσης μας ήδη από το  $i = 6$ .

Για να εξάγουμε τα επόμενα συμπεράσματα είναι απαραίτητες κάποιες στοιχειώδεις γνώσεις στατιστικής και πιθανοτήτων. Ας δούμε κάποιες απόρροιας της χρήσης του μοντέλου Γκαουσιανός λευκός θόρυβος. Το ότι έχουμε λευκό θόρυβο είναι ισοδύναμο με το ότι ο πίνακας συνδιασποράς (covariance matrix) για το  $e$  είναι ο ταυτοτικός επί μία σταθερά. Ειδικότερα

$$Cov(e) \equiv \mathcal{E} \left[ (e - \mathcal{E}[e]) (e - \mathcal{E}[e])^T \right] = \mathcal{E}(ee^T) = \eta^2 I,$$

όπου  $\mathcal{E}[\cdot]$  η μέση τιμή και  $\eta^2$  είναι η διασπορά. Επιπλέον για το Γκαουσιανό λευκό θόρυβο σχύουν οι σχέσεις

$$\mathcal{E}[e_i] = 0 \quad \mathcal{E}[e_i^2] = \eta^2 \quad \mathcal{E}[|e_i|] = \eta\sqrt{2} \approx 0.8 \cdot \eta, \quad (3.6.3)$$

§ενώ για το διάνυσμα θορύβου  $e \in \mathbb{R}^m$  ισχύουν

$$\mathcal{E}[e] = 0, \quad \mathcal{E}[\|e\|_2^2] = \eta^2 m, \quad \mathcal{E}[\|e\|_2] = \eta \frac{\sqrt{2}\Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})}, \quad (3.6.4)$$

όπου  $\Gamma$  είναι η συνάρτηση Γάμμα. Ο παράγοντας  $\frac{\sqrt{2}\Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})}$  συγκλίνει ταχύτατα στο  $\sqrt{m}$ , π.χ για  $m = 100$  ο παράγοντας παίρνει την τιμή 9,975.

Παρακάτω υποθέτουμε ότι τα  $b^{exact}$  και  $e$  είναι ασυσχετίστα, που σημαίνει ότι  $\mathcal{E}[b] = \mathcal{E}[b^{exact}]$ . Επιπλέον για τον πίνακα συνδιασποράς του δεξιού μέλους  $b$  ισχύει

$$Cov(b) \equiv \mathcal{E}[(b - \mathcal{E}[b])(b - \mathcal{E}[b])^T] = \mathcal{E}[ee^T] = \eta^2 I. \quad (3.6.5)$$

§ Για την Γκαουσιανή κατανομή ισχύει κάτι πιο ισχυρο:

$$\mathcal{E}[|X - e|^p] = \eta^p (p-1)!! \cdot \begin{cases} \sqrt{2/\pi}, & \text{αν ο } p \text{ είναι περιττός} \\ 1, & \text{αν ο } p \text{ είναι άρτιος} \end{cases} \quad \eta$$

$$\mathcal{E}[|X - e|^p] = \eta^p \frac{2^p \Gamma(\frac{p+1}{2})}{\sqrt{\pi}},$$

όπου  $X$  η τυχαία μεταβλητή,  $\Gamma(\cdot)$  η συνάρτηση Γάμμα και το διπλό παραγοντικό  $n!!$  συμβολίζει το γινόμενο όλων των περιττών από το 1 έως το  $n$ . Η δεύτερη σχέση ισχύει για κάθε (μη ακέραιο)  $p > -1$ .

### 3.6. Θόρυβος στα Δεδομένα και Διακριτή Συνθήκη Picard (Διακριτοποίηση Γραμμικών Αντίστροφων Προβλημάτων)

Στην πολυμεταβλητή στατιστική (multivariate statistics) ισχύει για τον αντιστρέψιμο πίνακα  $M$  και το συμβιβαστό διάνυσμα  $r$  η ταυτότητα

$$\text{Cov}(Mr) = M\text{Cov}(r)M^T. \quad (3.6.6)$$

Η τελευταία εξίσωση επιβάλλει στην «αφελή» λύση ευαισθησία ως προς σφάλματα. Συγκεκριμένα,

$$x = A^{-1}b = A^{-1}(b^{\text{exact}} + e) = x^{\text{exact}} + A^{-1}e, \quad (3.6.7)$$

όποτε λόγω της ταυτότητας 3.6.6, ο πίνακας συνδιασποράς του  $x$  είναι

$$\text{Cov}(x) = A^{-1}\text{Cov}(b)A^{-T} = \eta^2(A^T A)^{-1},$$

και η νόρμα αυτού του πίνακα είναι

$$\|\text{Cov}(x)\|_2 = \frac{\eta^2}{\sigma_n^2}. \quad (3.6.8)$$

Όπου  $\sigma_n$  είναι η μικρότερη ιδιάζουσα τιμή του πίνακα  $A$ . Αν ο  $A$  είναι πολύ μεγάλο δείκτη κατάστασης (δηλ.  $\text{cond}(A) \gg 1$ ) τότε ο πίνακας συνδιασποράς είναι πιθανό να έχει πολύ μεγάλα στοιχεία, το οποίο αποτελεί ένδειξη ότι η λύση  $x = A^{-1}b$  είναι πολύ ευαίσθητη σε σφάλματα στα δεδομένα.

Ας μελετήσουμε τώρα την επιρροή του θορύβου στους όρους της SVD, δηλ. τα στοιχεία του διανύσματος  $U^T b = U^T b^{\text{exact}} + U^T e$  που δίνονται από

$$v_i^T b = v_i^T b^{\text{exact}} + v_i^T e, \quad i = 1, \dots, n.$$

Από την ταυτότητα 3.6.6 παίρνουμε ότι

$$\text{Cov}(U^T e) = U^T \text{Cov}(e)U = \eta^2 U^T U = \eta^2 I, \quad (3.6.9)$$

το οποίο δείχνει ότι και το μετασχηματισμένο διάνυσμα  $U^T e$  συμπεριφέρεται σαν Γκαουσιανός λευκός θόρυβος, επομένως οι σχέσεις 3.6.3 και 3.6.4 εφαρμόζονται και για το  $U^T e$ .

Υποθέτουμε ότι το ακριβές δεξί μέλος  $b^{\text{exact}}$  ικανοποιεί τη διακριτή συνθήκη Picard, δηλ. οι ποσότητες  $v_i^T b^{\text{exact}}$  φθίνουν ταχύτερα από τις ιδιάζουσες τιμές. Επιπλέον έχουμε τη λογική απαίτηση η νόρμα της διαταραχής  $e$  να είναι μικρότερη της νόρμας του  $b^{\text{exact}}$ , αλλιώς χάνουμε όλη την πληροφορία για το  $b^{\text{exact}}$  στο  $b$ . Από αυτές τις υποθέσεις προκύπτει ότι κάποιες από τις ποσότητες  $v_i^T b^{\text{exact}}$  πρέπει να είναι μεγαλύτερες από τις «θορυβώδεις» ποσότητες  $v_i^T e$  και άλλες μπορεί να είναι μικρότερες. Με άλλα λόγια οι ποσότητες  $v_i^T b$  ικανοποιούν

$$v_i^T b = v_i^T b^{\text{exact}} + v_i^T e \approx \begin{cases} v_i^T b^{\text{exact}}, & \text{αν } |v_i^T b^{\text{exact}}| > |v_i^T e| \\ v_i^T e, & \text{αν } |v_i^T b^{\text{exact}}| < |v_i^T e|. \end{cases} \quad (3.6.10)$$

Το συμπέρασμα είναι ότι υπάρχουν δύο ειδών συνιστώσες του δεξιού μέλους. Αφενώς υπάρχουν αξιόπιστες συνιστώσες του δεξιού μέλους που χαρακτηρίζονται από  $|v_i^T b| \gg \eta$ , μεταφέρουν κυρίως πληροφορία για τα ακριβή δεδομένα  $b^{\text{exact}}$  και λόγω της διακριτής συνθήκης Picard αντιστοιχούν σε μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ . Αφετέρου υπάρχουν όροι της SVD που κυριαρχούνται από το θόρυβο, ισχύει  $|v_i^T b^{\text{exact}}| < \eta$  δηλ. έχουμε  $|v_i^T b| \approx \eta$ , ενώ αντιστοιχούν σε μικρότερες ιδιάζουσες τιμές και πάλι λόγω της διακριτής συνθήκης Picard. Επομένως εξηγήθηκε πλήρως η συνολική συμπεριφορά του γραφήματος Picard.

Σημειώνουμε ότι πο θόρυβος στα δεδομένα δεν ακολουθεί κατά ανάγκη Γκαουσιανή κατανομή και βέβαια ούτε είναι απαραίτητα λευκός θόρυβος. Αναφορικά, τα αποτελέσματά μας θα ήταν όμοια αν αντί της Γκαουσιανής κατανομής θεωρούσαμε ότι οι συνιστώσες του  $e$  είναι ασυσχέτιστες και ακολουθούν την ίδια ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $[-\sqrt{3}\eta, \sqrt{3}\eta]$ . Επιπλέον ο λευκός θόρυβος είναι μία αφηρημένη έννοια στα μαθηματικά η οποία διευκολύνει την ανάλυση και τους αλγόριθμους μας. Εντούτοις, για να είμαστε δίκαιοι σε πολλές εφαρμογές ο λευκός θόρυβος είναι πολύ καλή προσέγγιση της αλήθειας. Αναφορικά σημειώνουμε ότι υπάρχουν και άλλα μοντέλα (μη λευκού) θορύβου, όπως ο *συσχετισμένος με το σήμα θόρυβος* (signal correlated noise), ο *θόρυβος Poisson* (Poisson noise), *θόρυβος ευρείας ζώνης* (broad-band coloured noise) κ.α.

Τέλος, μπορούμε να επανεξετάσουμε της διακριτή συνθήκη Picard με χρήση του μοντέλου  $v_i^T b^{\text{exact}} = \sigma^a$ ,  $i = 1, \dots, n$  όπου  $a > 0$  μία παράμετρος υπό μελέτη, η οποία χρειάζεται διερεύνηση και ουσιαστικά θα μας δώσει το πόσο πιο «ασθενής»-υποθετικά- μπορεί να γίνει αυτή η συνθήκη. Αποδεικνύεται ότι αφενώς είναι αναγκαίο να έχουμε  $a > 1$  και επιπλέον ότι όσο πιο γρήγορα φθίνουν οι όροι  $v_i^T b$  ως προς τις ιδιάζουσες τιμές τόσο καλύτερα αποτελέσματα δίνουν οι μέθοδοι κανονικοποίησης που θα εξετάσουμε αργότερα.



## Κεφάλαιο 4

# Υπολογιστική διάσταση : Μέθοδοι κανονικοποίησης

Μετά από την προσεκτική ανάλυση στα προηγούμενα κεφάλαια, έχουμε εμπλουτίσει την νόησή μας με τις δυσκολίες που συνδέονται με τα διακριτά μη καλώς τοποθετημένα προβλήματα και τους λόγους που η «αφελής» λύση αναμένεται να μην έχει πρακτικά νόημα. Σε αυτό το κεφάλαιο χρησιμοποιούμε την κεκτημένη διορατικότητά μας για την κατασκευή μεθόδων με σκοπό οι προσεγγιστικές υπολογιστικές μας λύσεις να είναι λιγότερο ευαίσθητες σε διαταραχές από ότι η «αφελής» λύση.

Οι μέθοδοι αυτοί καλούνται **μέθοδοι κανονικοποίησης** (regularization methods) γιατί επιβάλλουν κανονικότητα στην υπολογιστική μας λύση, δηλ. κάποιου είδους ομαλοποίηση. Ενεργοποιώντας αυτή την κανονικότητα καταστέλλουμε κάποιους ανεπιθύμητους όρους και οδηγούμαστε σε πιο ευσταθή αποτελέσματα. Όλες οι μέθοδοι κανονικοποίησης που θα ασχοληθούμε στο παρόν κεφάλαιο παράγουν λύσεις, οι οποίες μπορούν να εκφραστούν σαν φιλτραρισμένα αναπτύγματα από όρους της SVD της μορφής

$$x_{reg} = \sum_{i=1}^n \phi_i \frac{v_i^T b}{\sigma_i},$$

όπου  $\phi_i$  είναι οι συντελεστές φίλτρου που συνδέονται με τη μέθοδο. Συχνά αναφέρονται και ως φασματικές μέθοδοι φιλτραρίσματος spectral filtering methods, διότι όπως είδαμε στην υποενότητα 2.4, η βάση της SVD μπορεί θεωρηθεί φασματική βάση. Σε αυτό το κεφάλαιο εισάγονται τρεις σημαντικές φασματικές μέθοδοι φίλτρου: η αποκομμένη SVD, η επιλεκτική SVD και η μέθοδος Tikhonov. Όπως είδαμε, ο πίνακας διακριτοποίησης επιτρέπεται να είναι μη τετραγωνικός, δηλ.  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  με  $m \geq n$ , όμως δεν υπάρχει ουσιαστικός λόγος διάκρισης των περιπτώσεων «>» ή «=», διότι και στις δύο η αφελής λύση έχει την ίδια έκφραση,  $x = \sum_{i=1}^n \frac{v_i^T b}{\sigma_i}$ , το ίδιο και ο δείκτης κατάστασης,  $cond(A) = \sigma_1/\sigma_n$ .

### 4.1 Ανάγκη για Κανονικοποίηση των Διακριτών Αντίστροφων Προβλημάτων

Έχουμε δει, ότι τα διακριτά μη καλώς τοποθετημένα προβλήματα χαρακτηρίζονται από πολύ μεγάλο δείκτη κατάστασης. Αυτό σημαίνει ότι όσο μικρή και να είναι η διαταραχή, είναι πιθανό η λύση που βρίσκουμε να απέχει πολύ από την ακριβή. Ειδικότερα, αν υποθέσουμε ότι η ακριβής και η διαταραγμένη λύση  $x^{exact}$  και  $x$  ικανοποιούν

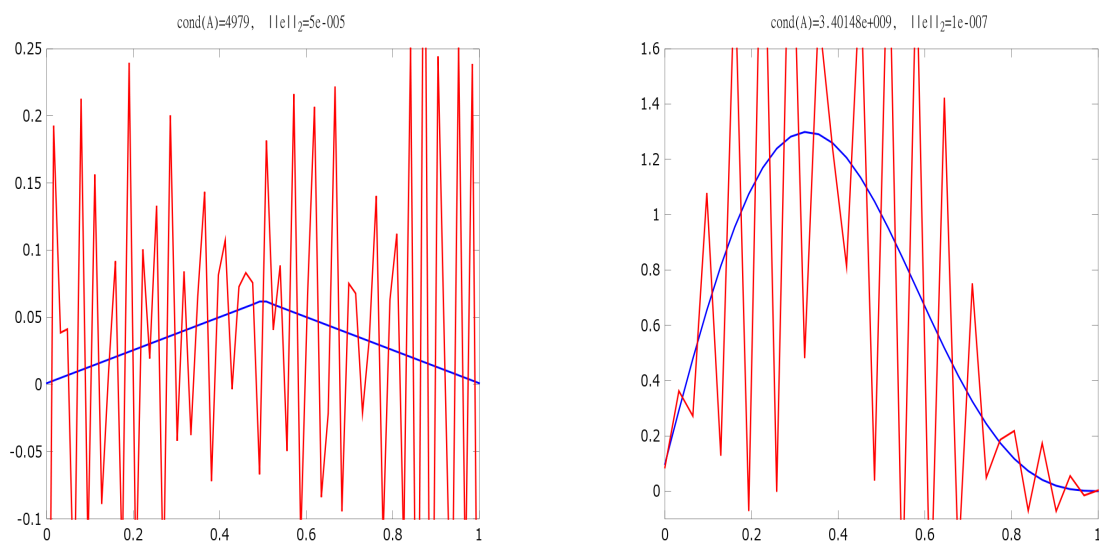
$$Ax^{exact} = b^{exact}, \quad Ax = b = b^{exact} + e,$$

τότε από την κλασική θεωρία της αριθμητικής ανάλυσης, λαμβάνουμε το φράγμα

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

Αυτό σημαίνει ότι, άσχετα με το αν η διαταραχή είναι μικρή  $\|e\|_2 \ll \|b\|_2$ , η λύση μπορεί να απέχει παρασάγγας από την πραγματική αν ο δείκτης κατάστασης είναι πολύ μεγάλος. Γι' αυτό χρειαζόμαστε μεθόδους που να αντισταθμίζουν την ευαισθησία της λύσης.

## 4.2. Η μέθοδος της Αποκομμένης SVD (TSVD) (Υπολογιστική διάσταση : Μέθοδοι κανονικοποίησης)



Εικόνα 4.1: Ακριβείς λύσεις (λείες γραμμές) στο ίδιο γράφημα με «αφελείς» λύσεις (πριονωτές γραμμές) για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου (αριστερά) για  $n = 64$  και το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας (δεξιά) για  $n = 32$ . Λόγω του πολύ μεγάλου δείκτη κατάστασης (ειδικά για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας), μικρές διαταραχές οδηγούν σε λύσεις που απέχουν πολύ από την ακριβή.

Τα γραφήματα στις εικόνες 4.1 είναι χαρακτηριστικά της καταστροφής της λύσης που περιγράψαμε στα προηγούμενα. Στην εικόνα 4.1 (αριστερά) χρησιμοποιήσαμε το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου με

$$g(s) = \begin{cases} (4s^3 - 3s)/24, & s < \frac{1}{2} \\ (-4s^3 + 12s^2 - 9s + 1)/24, & s \geq \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.1.1)$$

και λύση

$$f(t) = \begin{cases} t, & t < \frac{1}{2} \\ 1 - t, & t \geq \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.1.2)$$

για  $n = 64$  (υλοποίηση διακριτοποίησης μέσω `deriv2(64,3)*`) για να κάνουμε το γράφημα της ακριβούς λύσης μαζί με το γράφημα της «αφελούς» με  $\|e\|_2 = 5 \cdot 10^{-5}$ . Με αυτό το επίπεδο θορύβου, παρατηρούμε ότι δε μπορούμε να εξάγουμε καμία πληροφορία της  $x^{exact}$  από την αφελή λύση. Χειρότερη τύχη έχουμε για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας, για το οποίο έχουμε επίσης παραστήσει ταυτόχρονα στην εικόνα 4.1 (δεξιά) ακριβή και αφελή λύση. Εδώ χρησιμοποιήσαμε  $n = 32$  (υλοποίηση διακριτοποίησης μέσω `gravity(32)`) με πολύ μικρότερο επίπεδο θορύβου  $\|e\|_2 = 10^{-7}$ , όμως ο πολύ μεγαλύτερος δείκτης κατάστασης (τάξης  $\sim 10^9$ ) παράγει μία παντελώς άχρηστη λύση. Μπορούμε να επαναλάβουμε τα αριθμητικά πειράματα για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας για μεγαλύτερο  $n$  μόνο για να διαπιστώσουμε ότι ακόμα και με διαταραχή όπου  $\|e\|_2 = 0$ , π.χ. για  $n = 53$  η λύση και πάλι ουδεμία σχέση έχει με την πραγματικότητα. Η ανάγκη για κανονικοποίηση με σκοπό να παράγουμε λύσεις με νόημα είναι έκδηλη. Οι μέθοδοι κανονικοποίησης που θα αναπτυχθούν παρακάτω παράγουν προσεγγίσεις της  $x^{exact}$ , οι οποίες είναι πολύ πιο ευσταθείς σε διαταραχές του δεξιού μέλους. Ειδικότερα, παρακάτω θα ασχοληθούμε με την κανονικοποίηση των λύσεων συγκεκριμένα για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας.

## 4.2 Η μέθοδος της Αποκομμένης SVD (TSVD)

Από την ανάλυση των δύο προηγούμενων κεφαλαίων, έγινε αντιληπτό ότι τα πολύ μεγάλα σφάλματα στην αφελή λύση προέρχονται από τους θορυβώδεις όρους που συνδέονται με τις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές.

\* Η συνάρτηση `deriv2` από το προγραμματιστικό πακέτο `Regularization Tools` μπορεί να υλοποιηθεί για τρία παραδείγματα. Βάζουμε τον αύξοντα αριθμό τους ως το όρισμα που ακολουθεί αυτό της διάστασης του πίνακα διακριτοποίησης που επιλέγουμε. Ήδη έχουμε χρησιμοποιήσει το παράδειγμα (1) προηγούμενα, όπου  $f(t) = t$ , και εδώ χρησιμοποιείται το παράδειγμα (3).

Τα συμπεράσματα των εξ. 3.6.10 δείχνουν ότι η αφελής λύση κυριαρχείται από όρους της SVD της μορφής  $v_i^T b / \sigma_i \approx v_i^T e / \sigma_i$  (όπου  $e$  η διαταραχή στο δεξί μέλος  $b$ ) που αντιστοιχούν στις μικρότερες ιδιάζουσες τιμές, βλ. εικ. 3.7. Υπάρχουν και αξιόπιστοι όροι της μορφής  $v_i^T b / \sigma_i \approx v_i^T b^{exact} / \sigma_i$  (όπου  $b^{exact} = Ax^{exact}$  είναι το ακριβές δεξί μέλος), που αντιστοιχούν στις μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές, και είναι σαφώς πκαλά νέα. Αυτό μας δίνει ελπίδα ότι θα μπορούμε να ανακτήσουμε ένα μέρος της πληροφορίας για τη λύση. Επιπλέον, μπορεί να υποτεθεί ότι το ακριβές δεξί μέλος ικανοποιεί τη διακριτή συνθήκη Picard, διότι αλλιώς δεν έχει νόημα η προσπάθεια λύσης του διακριτού προβλήματος μη καλώς τοποθετημένου προβλήματος. Αυτό έχει ως συνέπεια ότι οι μεγαλύτεροι όροι της SVD της ακριβούς λύσης είναι ακριβώς αυτές οι οποίες προσεγγίζονται καλά σε λογικά πλαίσια, διότι για μικρό  $i$  (μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές) έχουμε

$$\frac{v_i^T b}{\sigma_i} \approx \frac{v_i^T b^{exact}}{\sigma_i} = v_i^T x^{exact}.$$

Τα παραπάνω συνηγορούν στο ότι είναι καλή ιδέα να εξαναγκάσουμε «βίαια» τη λύση να δεχτεί πληροφορία μόνο από τις «καλούς» όρους της SVD. Η μέθοδος κανονικοποίησης που επάγεται, προτείνει να αποκόψουμε από την SVD τους όρους που κυριαρχούνται από το θόρυβο. Επομένως, ορίζουμε την κανονικοποιημένη λύση  $x_k$  της **αποκομμένης SVD** (TSVD, truncated SVD) ως τη λύση που προκύπτει κρατώντας μόνο τους  $k$  πρώτους όρους της αφελούς λύσης

$$x_k = \sum_{i=1}^k \frac{v_i^T b}{\sigma_i} v_i. \quad (4.2.1)$$

Για συντομία, θα αναφερόμαστε στη λύση που δίνεται από την εξ. 4.2.1 και ως λύση *TSVD*. Η *παράμετρος αποκοπής*  $k$  πρέπει να επιλεγθεί, έτσι ώστε όλες οι όροι που έχουν καταληφθεί από το θόρυβο να απομονώνονται. Κατάλληλη τιμή του  $k$  μπορεί να βρεθεί μετά από μελέτη του γραφήματος Picard. Για παράδειγμα, στην εικόνα 3.7 θα επιλέγαμε από αριστερά προς δεξιά  $k = 20, k = 12$  και  $k = 8$  αντίστοιχα.

Υπάρχει μία εναλλακτική διατύπωση της TSVD που είναι σημαντική. Ενώ ο ορισμός της  $x_k$  γίνεται μέσω της εξ. 4.2.1, μπορούμε να αναζητήσουμε μια κανονικοποιημένη λύση σε ένα τροποποιημένο πρόβλημα καλύτερης κατάστασης. Προς αυτό, εισάγουμε τον πίνακα *TSVD*  $A_k$  ως τον πίνακα με τάξης  $r$  ( $rank(A) = r$ ) που ορίζεται ως εξής

$$A_k = [ v_1 \quad \dots \quad v_k ] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{bmatrix} [ v_1 \quad \dots \quad v_k ]^T = \sum_{i=1}^k v_i \sigma_i v_i^T. \quad (4.2.2)$$

Εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι  $cond(A_k) = \sigma_1 / \sigma_k$  που είναι τυπικά πολύ μικρότερος δείκτης κατάστασης απο ότι ο  $cond(A) = \sigma_1 / \sigma_n$  του αρχικού προβλήματος. Φαίνεται λογικό, λοιπόν, να αντικαταστήσουμε το αρχικό πρόβλημα  $Ax = b$  ή  $min \|Ax - b\|_2$  με το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων  $min \|A_k x - b\|_2$ . Στο τελευταίο, είναι απαραίτητη η διατύπωση των ελαχίστων τετραγώνων, διότι δεν περιμένουμε πλέον να βρούμε λύση στο πρόβλημα  $A_k x = b$ . Ωστόσο, ο πίνακας  $A_k$  είναι τάξης  $r < n$  επομένως το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων διέπεται από απειρία λύσεων<sup>†</sup>. Συνεπώς για να επιτύχουμε μία μοναδική λύση θα πρέπει να θέσουμε επιπλέον περιορισμούς στο πρόβλημα. Μία φυσική συνθήκη είναι να απαιτήσουμε ότι η λύση θα πρέπει επιπλέον να έχει ελάχιστη 2-νόρμα, δηλ. συνολικά

$$min \|x\|_2 \quad \text{υποκείμενο στο} \quad \|A_k x - b\|_2 = min. \quad (4.2.3)$$

Αποδεικνύεται ότι η λύση του προβλήματος 4.2.3 είναι ακριβώς η λύση TSVD που δίνεται από την εξ. 4.2.1, οπότε αποτελεί πράγματι ένα εναλλακτικό ορισμό της μεθόδου της αποκομμένης SVD, όπου μάλιστα η απαίτηση κανονικότητας της λύσης  $x$  μέσω της ελαχιστοποίησης της νόρμας της είναι άμεση.

Από τον παραπάνω ορισμό του  $x_k$ , έπεται ότι μπορούμε να γράψουμε την λύση TSVD στη μορφή

$$x_k = [ v_1 \quad \dots \quad v_k ] \begin{bmatrix} \sigma_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k^{-1} \end{bmatrix} [ v_1 \quad \dots \quad v_k ]^T b = \left( \sum_{i=1}^k v_i \sigma_i v_i^T \right) b \quad (4.2.4)$$

<sup>†</sup> Αποδεικνύεται ότι η γενική λύση έχει τη μορφή

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

για αυθαίρετο  $\zeta_i$ .

ή αλλιώς με το συμβολισμό του ψευδοαντίστροφου  $A_k^\dagger$  του  $A_k$

$$x = A_k^\dagger b,$$

όπου  $A_k^\dagger = \sum_{i=1}^k \nu_i \sigma_i^{-1} \nu_i^T$ . Μπορούμε ακόμα να ορίσουμε τους πίνακες

$$V_k = [ \nu_1 \quad \dots \quad \nu_k ], \quad U_k = [ v_1 \quad \dots \quad v_k ], \quad \text{και} \quad \Sigma_k = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{bmatrix}$$

ώστε να μπορούμε να γράψουμε σε συμπαγή μορφή

$$A_k = U_k \Sigma_k V_k^T A_k^\dagger = V_k \Sigma_k^{-1} U_k^T$$

Είναι φανερό ότι ισχύουν οι σχέσεις ορθοκανονικότητας  $U_k^T U = V_k^T V = I$ .

Αν τώρα το  $e$  είναι διάνυσμα που ικανοποιεί το μοντέλο του Γκαουσιανού λευκού θορύβου με  $Cov(e) = \eta^2 I$ , τότε ο πίνακας συνδιασποράς της λύσης TSVD είναι

$$Cov(x_k) = A_k^\dagger Cov(b) (A_k^\dagger)^T = \eta^2 \sum_{i=1}^k \sigma_i^{-2} \nu_i \nu_i^T, \quad (4.2.5)$$

στην οποία χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα από τη στατιστική 3.6.6, την εξ. 3.6.5 και το γεγονός ότι  $A_k^\dagger (A_k^\dagger)^T = V_k (\Sigma^{-1})^2 V_k^T$ .

Τότε όμως η νόρμα αυτού του πίνακα είναι

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

και εφόσον η  $\sigma_k$  είναι πάντα μεγαλύτερη (και συχνά πολύ μεγαλύτερη) από τη  $\sigma_n$ , συμπεραίνουμε ότι τα στοιχεία του πίνακα  $Cov(x_k)$  είναι γενικώς μικρότερα (και συχνά πολύ μικρότερα) από ότι αυτά του πίνακα  $Cov(x)$  για την αφελή λύση.

Το τίμημα για τη μείωση της διασποράς στη  $x_k$ , συγκρίνοντας με την αφελή λύση  $x = A^{-1}b$  είναι η μεροληψία (bias). Το  $A^{-1}b$  είναι αμερόληπτο<sup>‡</sup> διότι λόγω της εξ. 3.6.7, και της πρώτης από τις εξ. 3.6.4

$$\mathcal{E}[x] = \mathcal{E}[x^{exact}] + \mathcal{E}[A^{-1}e] = x^{exact},$$

όπου έγινε χρήση της ταυτότητας από τη στατιστική  $\mathcal{E}[MX] = M\mathcal{E}[X]$  για  $M$  (σταθερό) πίνακα  $m \times n$  και  $X$  διάνυσμα  $n \times k$  τυχαίας μεταβλητής.

Όμως, η λύση TSVD έχει μη μηδενική μεροληψία:

$$\mathcal{E}[x_k] = \mathcal{E} \left[ x - \sum_{i=k+1}^n \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \nu_i \right] = x^{exact} - \sum_{i=k+1}^n \nu_i^T x^{exact} \nu_i. \quad (4.2.6)$$

Η τελευταία ισχύει διότι

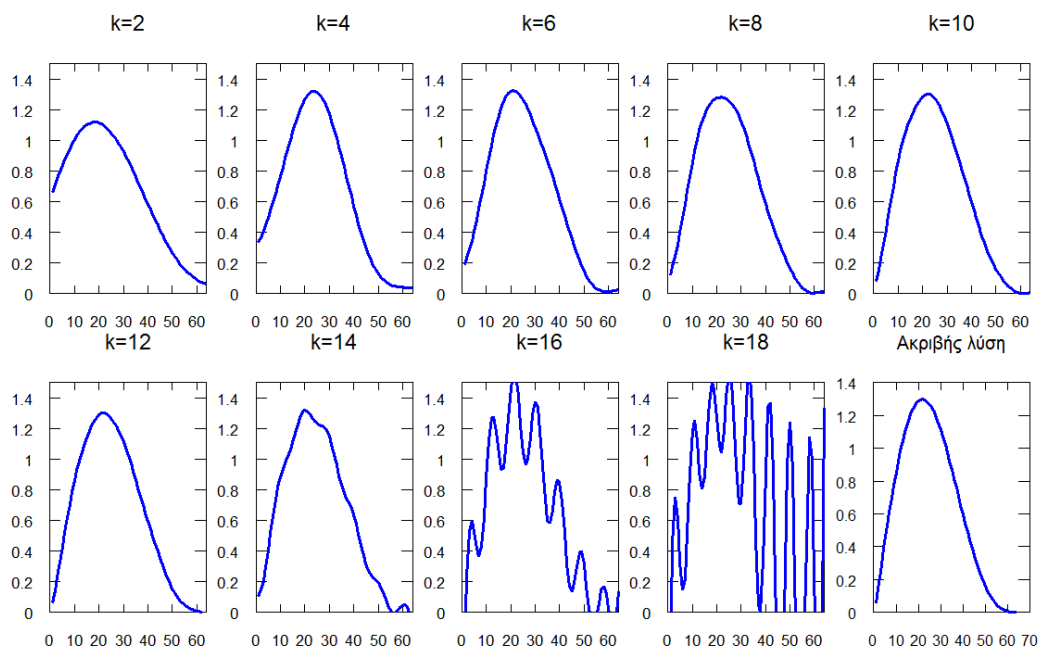
$$\begin{aligned} x &= A^\dagger b = V \Sigma^{-1} U^T b \\ \Rightarrow V^T x &= \Sigma^{-1} U^T b \\ \Rightarrow \nu_i^T x &= \frac{v_i^T b}{\sigma_i}, \end{aligned}$$

επομένως

$$\mathcal{E} \left[ \sum_{i=k+1}^n \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \nu_i \right] = \mathcal{E} \left[ \sum_{i=k+1}^n (\nu_i^T x) \nu_i \right] = \sum_{i=k+1}^n (\nu_i^T x^{exact}) \nu_i.$$

<sup>‡</sup>Στη στατιστική, μεροληψία bias ενός εκτιμητή (κανόνας υπολογισμού μίας δεδομένης ποσότητας βασισμένος σε δεδομένα παρατήρησης) ορίζεται ως η διαφορά της μέσης τιμής και της πραγματικής τιμής της μεταβλητής προς εκτίμηση. Η μεροληψία είναι ένα είδος «σφάλματος» που δε διορθώνεται επαναλαμβάνοντας το πείραμα και παίρνοντας το μέσο όρο των αποτελεσμάτων.





Εικόνα 4.2: Γραφήματα λύσεων TSVD για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας για εννιά διαφορετικές τιμές του  $k$ , σε σύγκριση με το γράφημα της ακριβούς λύσης (δεξιά κάτω).

Ωστόσο, λόγω της διακριτής συνθήκης Picard, οι συνιστώσες  $|\nu_i^T x^{exact}|$  στη μεροληψία (όρος με το άθροισμα στην εξ. 4.2.6) και επίσης η νόρμα αυτής

$$\left\| \sum_{i=k+1}^n (\nu_i^T x^{exact}) \nu_i \right\|_2 = \left[ \sum_{i=k+1}^n (\nu_i^T x^{exact})^2 \right]^{1/2}$$

είναι τυπικά μικρές ποσότητες, συγκρινόμενες με το  $\|x^{exact}\|_2 = \left[ \sum_{i=1}^n (\nu_i^T x^{exact})^2 \right]^{1/2}$ .

Στην εικόνα 4.2 δείχνουμε γραφήματα λύσεων TSVD για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας ( $n = 64$ ) για εννιά διαφορετικές τιμές της παραμέτρου  $k$ , ταυτόχρονα με το γράφημα της ακριβούς λύσης (δεξιά κάτω). Μία καλή προσέγγιση επιτυγχάνεται για  $k = 10$ , ενώ ο θορυβος (εδώ  $\|e\|_2 = 0.01$ ) είναι ορατός για τις τιμές  $k = 14, 16$  και  $18$ . Η υλοποίηση της μεθόδου κανονικοποίησης TSVD έγινε με χρήση της συνάρτησης *tsvd* από το προγραμματιστικό πακέτο RT.

Ένα σύνθηρες αλλά ατυχές λάθος σχετικά με την εφαρμογή της TSVD είναι να βασίζουμε την επιλογή της παραμέτρου αποκοπής  $k$  στο μέγεθος των ιδιάζουσων τιμών  $\sigma_i$ . Η σύγχυση αυτή φαίνεται να πηγάζει από το γεγονός ότι η αριθμητική τάξη <sup>§</sup> ενός πίνακα με θόρυβο συνδέεται με το μέγεθος των ιδιάζουσων τιμών του και τη νόρμα του πίνακα διαταραχής, βλ. [HC98]. Επιπλέον, αν οι όροι  $|\nu_i^T b|$  φθίνουν ελαφρώς ταχύτερα από τις αντίστοιχες ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ , και υπάρχει κλιμακοποίηση (scaling) τέτοια ώστε  $|\nu_i^T b| \approx \sigma_i$ , ενδέχεται να μην προσέξει κανείς τη διαφορά. Θα πρέπει να θυμόμαστε ότι, για όσο περιορίζουμε τη μελέτη μας στο θόρυβο του δεξιού μέλους, η παράμετρος αποκοπής πρέπει να οριοθετεί το φίλτρο μας, δηλ. μέχρι ποιους όρους της SVD κρατάμε και ποιους «πετάμε». Η επιλογή τους λοιπόν καθορίζεται από τη συμπεριφορά των θορυβωδών όρων  $\nu_i^T b$ .

### 4.3 Η μέθοδος της Επιλεκτικής SVD (SSVD)

Η βασική ιδέα στην μέθοδο TSVD είναι να συμπεριλάβουμε όλους τους όρους της SVD που αντιστοιχούν στις μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές. Η λογική στην οποία στηρίζεται αυτή και άλλες μέθοδοι κανονικο-

<sup>§</sup> Η τάξη ενός πίνακα καθορίζεται από τον αριθμό των μη μηδενικών ιδιάζουσων τιμών. Ωστόσο όταν αυτές είναι πολύ κοντά στην ακρίβεια της μηχανής θα πρέπει να τίθεται ένα όριο για το ποιες να θεωρεί μηδέν ο υπολογιστής, ορίζοντας έτσι την αριθμητική τάξη ενός πίνακα. Το όριο αυτό εξαρτάται από τη μηχανή και είναι  $\max(m, n) * \text{eps}(\text{norm}(A)) \approx 2.2 \cdot 10^{-16} \text{eps}(\text{norm}(A))$ , για έναν  $m \times n$  πίνακα  $A$ . Η αριθμητική τάξη διαφέρει από την «πραγματική» τάξη του  $A$  όταν αυτός έχει πολύ μεγάλο δείκτη κατάστασης και  $\text{rank}(A) < \max(m, n)$ .

ποίησης είναι ότι το πρόβλημά μας ικανοποιεί την διακριτή συνθήκη Picard. Επομένως, όπως έγινε αντιληπτό από τις προηγούμενες υποενότητες, εξασφαλίσουμε ότι οι κανονικοποιημένες λύσεις μας θα φέρουν όλους τους σημαντικούς όρους της ακριβούς λύσης. Θα θέλαμε να θιξουμε τώρα, αν είναι πράγματι αναγκαίο να κρατάμε όλους αυτούς τους όρους. Η απάντηση είναι αρνητική. Για παράδειγμα, είναι εύκολο να φανταστεί κανείς ένα πρόβλημα, στο οποίο κάθε δεύτερος όρος της SVD ( $\nu_2^T x^{exact} = \nu_4^T x^{exact} = \nu_6^T x^{exact} = \dots = 0$ ). Προφανώς, δεν είναι αναγκαίο να λάβουμε υπόψη μας αυτούς τους όρους.

Μία παραλλαγή της μεθόδου TSVD προτάθηκε από τον B. Rust (βλ. [BR98]), στην οποία θα αναφερόμαστε ως τη μέθοδο της **επιλεκτικής SVD** (SSVD, selective SVD). Αυτή η μέθοδος έχει αυτονομηθεί και είναι ενδιαφέρουσα από μόνη της, ενώ είναι σημαντική και επειδή συνδέεται με κάποιες επαναληπτικές μεθόδους. Στη μέθοδο SSVD επιλέγουμε μόνο τους όρους που έχουν σημαντικές συνεισφορές στην κανονικοποιημένη λύση. Ειδικότερα, δοθέντος ενός κατωφλίου  $\tau$  για όρους της SVD του δεξιού μέλους, η λύση SSVD  $x_\tau$  ορίζεται ως

$$x_\tau = \sum_{|v_i^T b| > \tau} \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \nu_i. \quad (4.3.1)$$

Αυτό σημαίνει ότι αθροίζουμε μόνο όρους της SVD  $v_i^T b / \sigma_i$  για τους οποίους η απόλυτη τιμή  $|v_i^T b|$  είναι πάνω από το κατώφλι  $\tau$ . Συνεπώς οι παράγοντες φίλτρου εδώ είναι

$$\phi_i^{[\tau]} = \begin{cases} 1, & \text{αν } |v_i^T b| > \tau, \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Επόμενο είναι να επιδιώξουμε η επιλογή του κατωφλίου  $\tau$  να γίνει έτσι ώστε τα φίλτρα SSVD να εξαφανίζουν όρους  $v_i^T b$  κάτω από το επίπεδο του θορύβου. Από την ανάλυση της υποενότητας 3.6 γνωρίζουμε ότι τουλάχιστον για την περίπτωση του Γκαουσιανού λευκού θορύβου στο δεξί μέλος μεμονωμένα, τότε οι θορυβώδεις όροι  $v_i^T b$  ακολουθούν το ίδιο μοντέλο θορύβου (βλ. εξ. 3.6.9) και κατά συνέπεια την ίδια στατιστική (βλ. εξ. 3.6.3 και 3.6.4). Επομένως, μπορούμε να επιλέξουμε

$$\tau = \xi_s \eta,$$

όπου  $\xi_s$  είναι «παράγοντας ασφαλείας», ο οποίος μπορεί να τεθεί 3 ή 5, έτσι ώστε να αποφευχθούν οι όροι κατώτεροι του επιπέδου του θορύβου.

Για την υλοποίηση της μεθόδου SSVD προτείνεται ο παρακάτω αλγόριθμος Octave (ή Matlab) για την κατασκευή της συνάρτησης την οποία καλούμε *ssvd*. Η συνάρτηση *ssvd* παίρνει ως ορίσματα την έξοδο της συνάρτησης *csvd* (με είσοδο τον πίνακα της διακριτοποίησης  $A$ ), το διαταραγμένο διάνυσμα  $b$  ( $b = b_{exact} + e$ ) και την παράμετρο κανονικοποίησης  $\tau$  (tau) και επιστρέφει τη λύση SSVD  $x_\tau$  (x\_tau) και προαιρετικά τις νόρμες υπολοίπων (residual norms)  $eta = \|x_\tau\|_2$  και  $rho = \|Ax_\tau - b\|_2$ . Σημειώνουμε ότι αυτά τα υπόλοιπα δείχνουν πόσο καλά προσεγγίζουν οι κανονικοποιημένες λύσεις, τα θορυβώδη  $b$  και  $x$  και διαφέρουν εν γένει από τα  $\|Ax_\tau - b^{exact}\|_2$  και  $\|x^{exact} - x^\tau\|_2$ .

```
function [x_tau,rho,eta,g]¶ = ssvd(U,s,V,b,tau)
% SSVD Selective SVD
% [x_tau,rho,eta,g] = ssvd(U,s,V,b,tau)
% Υπολογίζει κανονικοποιημένη λύση με τη μέθοδο της επιλεκτικής SVD
% Αν το tau είναι διάνυσμα τότε x_tau είναι πίνακας
%τέτοιος ώστε x_tau = [ x_tau(1), x_tau(2), ... ] .

% Αρχικοποίηση
[n,p] = size(V); ltau = length(tau);
if (min(tau)<0 | max(tau)>norm(b))
error('Μη συμβατή παράμετρος κανονικοποίησης')
endif
x_tau = zeros(n,ltau);
eta = zeros(ltau,1); rho = zeros(ltau,1);r=zeros(ltau,1);
beta = U(:,1:p)*b;
```

<sup>¶</sup>Επιπλέον (προαιρετικά) μπορεί να υπολογιστεί και ένα διάνυσμα  $g$  που έχει σαν στοιχεία τους δείκτες των όρων που συνεισφέρουν στη λύση. Αν δοθεί διάνυσμα tau για ταυτόχρονο έλεγχο πολλών κανονικοποιημένων λύσεων, τότε το  $g$  είναι πίνακας με στήλες τα διανύσματα όπως προηγουμένως.

#### 4.3. Η μέθοδος της Επιλεκτικής SVD (SSVD) (Υπολογιστική διάσταση : Μέθοδοι κανονικοποίησης)

```
xi = beta./s;

% Μεταχειριζόμαστε κάθε τιμή του tau ξεχωριστά
for j=1:ltau
for i=1:p
if (abs(beta(i))>=tau(j) & tau(j)>0)    % Έλεγχος συνθήκης SSVD
x_tau(:,j) = x_tau(:,j)+V(:,i)*xi(i);
m(i,j)=xi(i);
if nargout==4
g(i,j)=i;    % αποθηκεύει τα i για τα οποία ισχύει η συνθήκη SSVD
endif
else
r(i,j)=beta(i);
endif
endfor
rho(j)=norm(r);    % νόρμα υπολοίπου  $\|Ax_\tau - b\|_2$ 
eta(j) = norm(m);    % νόρμα υπολοίπου  $\|x_\tau\|_2$ 
endfor

if (nargout > 1 & size(U,1) > p)
rho = sqrt(rho.^ 2 + norm(b - U(:,1:p)*beta)^2);
endif

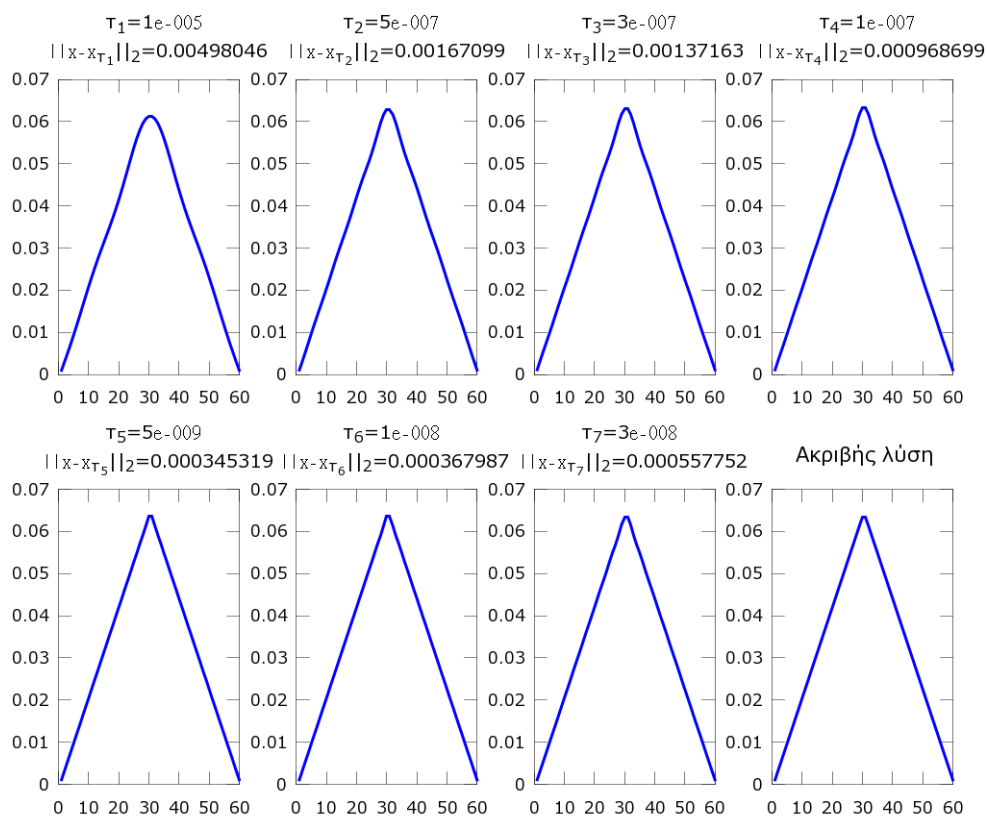
endfunction
```

Παρά το ότι η μέθοδος SSVD μπορεί να χρησιμοποιηθεί γενικώς για την παραγωγή κανονικοποιημένων λύσεων, ή πραγματική της αξία φαίνεται κυρίως μέσω προβλημάτων στα οποία αρκετοί μη θορυβώδεις όροι ( $v_i^T b^{exact}$ ) είναι μηδενικοί ή πάρα πολύ μικροί, οπότε οι όροι  $v_i^T e$  έχουν σημαντική συνεισφορά στη λύση και πρέπει να εξαλειφθούν. Όπως έχει αναφερθεί, δεν είναι δύσκολο να φτιάξουμε ένα πρόβλημα όπου για παράδειγμα, μόνο ανά 2 ή 4 κλπ οι όροι της SVD να είναι μη μηδενικοί. Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε το προτεινόμενο παράδειγμα (3) για το πρόβλημα της δεύτερης παραγωγού με τη συνάρτηση διακριτοποίησης  $deriv2$  με δεξί μελος και με παραγόμενες «πριονοειδείς» λύσεις (sawtooth functions) που δίνονται αντίστοιχα από τις εξ. 4.1.1 και 4.1.2. Θεωρήσαμε  $n = 60$  και  $\|e\|_2 = 10^{-8}$ . Υπολογίζοντας το  $U^T b^{exact}$  διαπιστώνουμε ότι ανά 2 οι όροι είναι πολύ μικροί, της τάξεως  $\sim 10^{-16}$  και μικρότεροι. Αυτοί οι όροι δεν πρέπει να συμμετέχουν στην παραγωγή της λύσης.

Στην εικόνα 4.3 δείχνουμε τα γραφήματα που έχουν προκύψει μετά την εφαρμογή του προτεινόμενου αλγορίθμου (συνάρτηση `ssvd`) για την παραγωγή κανονικοποιημένων SSVD λύσεων, όπου δώσαμε 7 διαφορετικές τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\tau$ . Η κανονικοποιημένη λύση για  $\tau = 10^{-5}$  είναι ήδη πολύ κοντά στην πραγματική λύση με σφάλμα 0.00498046 ενώ χρησιμοποιήθηκαν 4 όροι του αθροίσματος (1, 3, 5, 7). Η βέλτιστη λύση είναι για  $\tau = 5 \cdot 10^{-9} = 0.5 \cdot 10^{-8}$  με σφάλμα 0.000345319 και συμμετείχαν 23 όροι (από τον 1ο έως τον 45ο ανά 2).

Για σύγκριση, παραθέτουμε επίσης τα αποτελέσματα χρήσης της μεθόδου TSVD στο ίδιο πρόβλημα και τα αποτελέσματα φαίνονται στην εικόνα 4.4. Ήδη από τον 10ο όρο η μέθοδος TSVD παράγει μία ικανοποιητική προσέγγιστική λύση με σφάλμα 0.00353939. Η βέλτιστη λύση επιτυγχάνεται για  $k = 56$  με σφάλμα 0,000396772, που σαφώς δεν είναι αναγκαία και ουσιαστικά είναι κακή χρήση της μεθόδου TSVD (λήφθηκαν υπ'οψη 56 από τους 60 όρους). Παρατηρούμε λοιπόν ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση η μέθοδος SSVD παράγει καλύτερα αποτελέσματα από την TSVD και αυτό συμβαίνει όσες φορές επαναλάβουμε το ίδιο αριθμητικό πείραμα.

Το γράφημα Picard για αυτό το πρόβλημα συνηγορεί στη χρήση της μεθόδου SSVD, όπως φαίνεται στην εικόνα 4.5. Παρατηρούμε ότι λόγω της αμελητέας συνεισφοράς πολλών όρων, αυτοί θα πρέπει να παραληφθούν. Θα πρέπει να σημειωθεί, ωστόσο, ότι δε θα πρέπει να περιμένουμε σημαντική διαφορά στις λύσεις TSVD και SSVD όταν όλοι οι όροι  $v_i^T b^{exact}$  φθίνουν.



Εικόνα 4.3: Γραφήματα λύσεων SSVD για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου που παράγει πριονοειδείς λύσεις (παράδειγμα (3)) για 7 διαφορετικές τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\tau$ , ταυτόχρονα με το γράφημα της της ακριβούς λύσης (δεξιά κάτω). Φανερά η βέλτιστη λύση είναι για  $\tau = 0.5\eta = 0.5 \cdot 10^{-8}$ . Εδώ όπου  $x = x^{exact}$ .

## 4.4 Μέθοδος Κανονικοποίησης Tikhonov

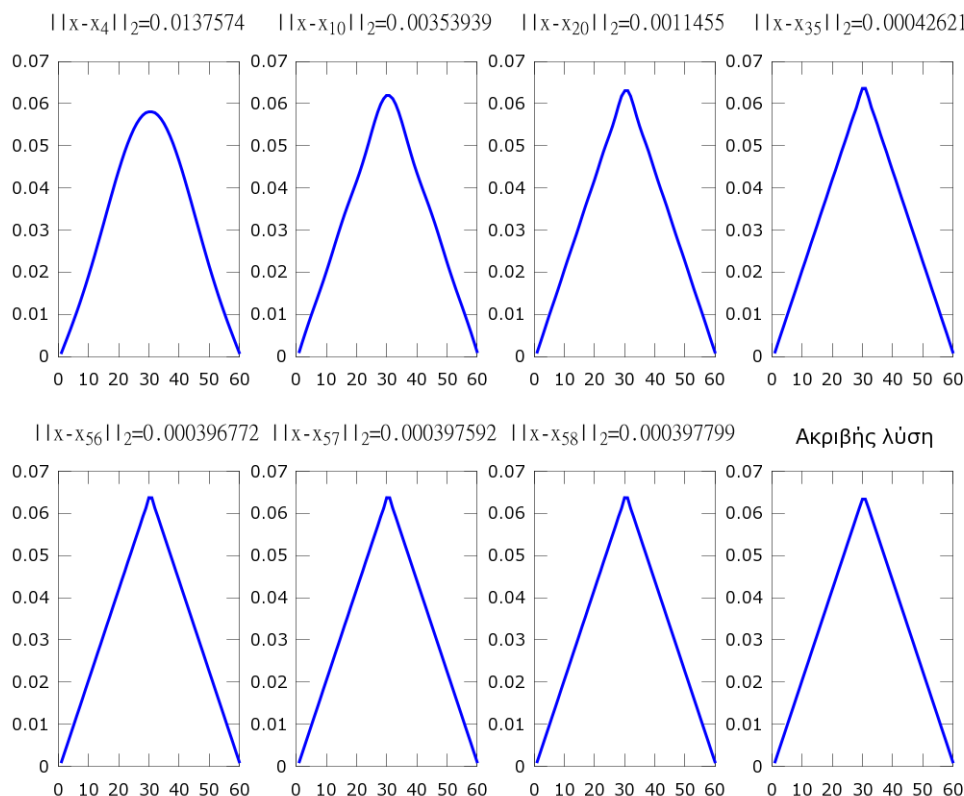
Η μέθοδος TSVD έχει το πλεονέκτημα ότι είναι διαισθητική και εύκολη στον υπολογισμό λύσεων TSVD λύσεων  $x_k$  για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου αποκοπής  $k$ , αφού αρχικά υπολογίσουμε την παραγοντοποίηση SVD. Εντούτοις, μειονεκτεί στο ότι χρειάζεται τον υπολογισμό της SVD σε λευμμένη μορφή, ή τουλάχιστον τις  $k$  κύριες ιδιάζουσες τιμές και τα αντίστοιχα ιδιάζοντα διανύσματα. Αυτό το υπολογιστικό θέμα μπορεί να έχει συντριπτικό κόστος για προβλήματα μεγάλης κλίμακας και γι' αυτό υπάρχει ανάγκη για μία μέθοδο κανονικοποίησης που να ταιριάζει καλύτερα σε αυτά.

Πιθανόν η πιο επιτυχημένη μέθοδος κανονικοποίησης είναι η **κανονικοποίηση Tikhonov**. Αυτή η μέθοδος έχει εφευρεθεί πολλάκις στο παρελθόν, όμως η θεμελιώδης συνεισφορά στην νόησή της οφείλεται στον Andrey Tikhonov και γι' αυτό έχει συνδεθεί άμεσα με το όνομά του. Η μέθοδος Tikhonov είναι άμεση και ενσωματώνει την συνθήκη κανονικοποίησης στην (επανα-)διατύπωση του προβλήματος. Ειδικότερα, η **λύση Tikhonov**  $x_\lambda$  ορίζεται ως η λύση του προβλήματος

$$\min_x \{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2 \} \quad (4.4.1)$$

- Ο πρώτος όρος  $\|Ax - b\|_2^2$  μετρά πόσο καλά «προβλέπει» η λύση τα (θορυβώδη) δεδομένα (δεξιά μέλος  $b$ ). Είναι φανερό, ότι αν αυτός ο όρος είναι μεγάλος, η λύση  $x$  δε μπορεί να θεωρηθεί καλή, διότι απλά δε «λύνει» το πρόβλημα. Από την άλλη μεριά, διαισθητικά, το υπόλοιπο αυτό δε πρέπει να γίνει μικρότερο από το μέσο μέγεθος του σφάλματος στο  $b$ , διότι, όπως και στα προβλήματα προσαρμογής δεδομένων (data fitting problems), δε θέλουμε να προσαρμόσουμε το θόρυβο στα δεδομένα μας.
- Ο δεύτερος όρος  $\|x\|_2^2$  είναι ένα μέτρο κανονικότητας της λύσης. Η ενσωμάτωση αυτού του όρου βασίζεται στη γνώση ότι η αφελής λύση κυριαρχείται από τους όρους υψηλών συχνοτήτων μεγάλου

#### 4.4. Μέθοδος Κανονικοποίησης Tikhonov (Υπολογιστική διάσταση : Μέθοδοι κανονικοποίησης)



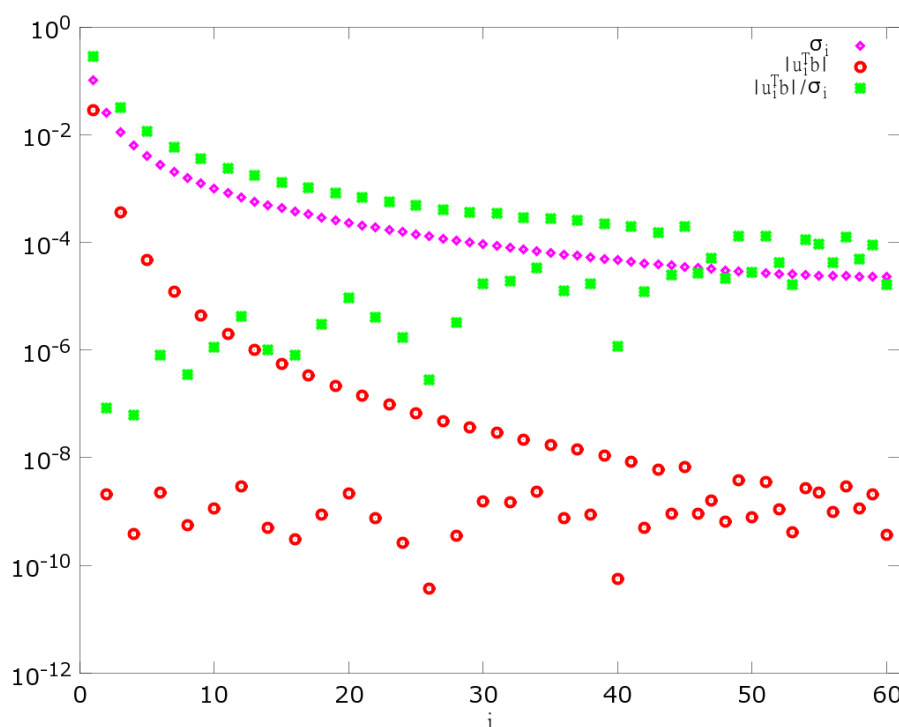
Εικόνα 4.4: Γραφήματα λύσεων TSVN για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου που παράγει πριονοειδείς λύσεις (παράδειγμα (3)) για 7 διαφορετικές τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\tau$ , ταυτόχρονα με το γράφημα της της ακριβούς λύσης (δεξιά κάτω). Μία ικανοποιητική λύση επιτυγχάνεται για  $k = 10$ , ενώ η βέλτιστη λύση είναι για  $k = 54$ . Συγκριτικά με τη μέθοδο SSVD, η TSVN να μεν παράγει πολύ καλές προσεγγίσεις αλλά το ελάχιστο σφάλμα της (για 54/60 όρους!) είναι μεγαλύτερο από το ελάχιστο της SSVD. Εδώ όπου  $x = x^{exact}$ .

πλάτους. Επομένως, ελπίζουμε ότι ελέγχοντας τη νόρμα του  $x$ , θα μπορέσουμε να καταστείουμε όσο το δυνατόν περισσότερο την επιρροή των υψηλών συχνοτήτων.

- Η ισορροπία μεταξύ των δύο όρων καθορίζεται από τον παράγοντα  $\lambda^2$ . Όσο μεγαλύτερο είναι το  $\lambda$ , τόσο περισσότερο βάρος δίνεται στην ελαχιστοποίηση της νόρμας της λύσης  $\|x\|_2$  και άρα στην κανονικότητα της λύσης (σημειώνεται ότι  $x \rightarrow 0$  όταν  $\lambda \rightarrow \infty$ ). Αντιθέτως, όσο μικρότερο είναι το  $\lambda$ , τόσο περισσότερο δίνεται βάρος στην προσαρμογή των δεδομένων με θόρυβο. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα ότι οι λύσεις στερούνται κανονικότητας ολοένα και πιο πολύ. Για πολύ μεγάλο  $\lambda$  έχουμε υπερεξομάλυνση (oversmoothing), ενώ για πολύ μικρό έχουμε υποεξομάλυνση (undersmoothing) της λύσης. Σημειώνεται ότι για  $\lambda = 0$  λαμβάνουμε την αφελή λύση.

Σκόπος μας είναι να βρεθεί μία καλή ισορροπία μεταξύ των δύο όρων με κατάλληλη επιλογή του  $\lambda$ , ώστε η κανονικοποιημένη λύση  $x_\lambda$  να έχει επαρκή κανονικότητα, ταυτόχρονα να προσαρμόζεται ικανοποιητικά στα δεδομένα και βέβαια να αποτελεί πράγματι προσέγγιση της ακριβούς λύσης. Η διατύπωση του προβλήματος ελαχιστοποίησης 4.4.1 γράφεται εναλλακτικά

$$\begin{aligned} \min_x \{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2 \} &= \min_x \{ (Ax - b)^T (Ax - b) + (\lambda x)^T \lambda x \} \\ &= \min_x \left\{ \left[ \begin{array}{c} Ax - b \\ \lambda x \end{array} \right]^T \left[ \begin{array}{c} Ax - b \\ \lambda x \end{array} \right] \right\} = \min_x \left\{ \left\| \left[ \begin{array}{c} A \\ \lambda I \end{array} \right] x - \left[ \begin{array}{c} b \\ 0 \end{array} \right] \right\|_2 \right\}, \end{aligned} \quad (4.4.2)$$



Εικόνα 4.5: Γραφήμα Picard για το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου που παράγει πριονοειδείς λύσεις (παράδειγμα (3)). Μόνο κάθε δεύτερος όρος έχει σημαντική συνεισφορά στη λύση.

το οποίο είναι προφανώς ένα (επαυξημένο) πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων. Οι κανονικές εξισώσεις παίρνουν τη μορφή

$$\begin{bmatrix} A \\ \lambda I \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} A \\ \lambda I \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} A \\ \lambda I \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

ή αλλιώς

$$(A^T A + \lambda^2 I)x = A^T b \quad \Rightarrow \quad x_\lambda = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T b. \quad (4.4.3)$$

Η τελευταία έκφραση είναι επίσης συχνά απαντώμενη στη βιβλιογραφία ως ορισμός της λύσης Tikhonov. Ωστόσο για λόγους υπολογιστικής αποδοτικότητας και αριθμητικής ευστάθειας οι αλγόριθμοι για τις λύσεις Tikhonov θα πρέπει να στηρίζονται στην διατύπωση 4.4.2.

Ας δούμε τώρα τι προκύπτει από τη χρήση της SVD στην λύση Tikhonov  $x_\lambda$ . Θεωρούμε την παραγοντοποίηση SVD του πίνακα  $A$ ,  $A = U\Sigma V^T$  και ενθυμούμενοι ότι  $I = VV^T$ , οι κανονικές εξισώσεις 4.4.3 γίνονται

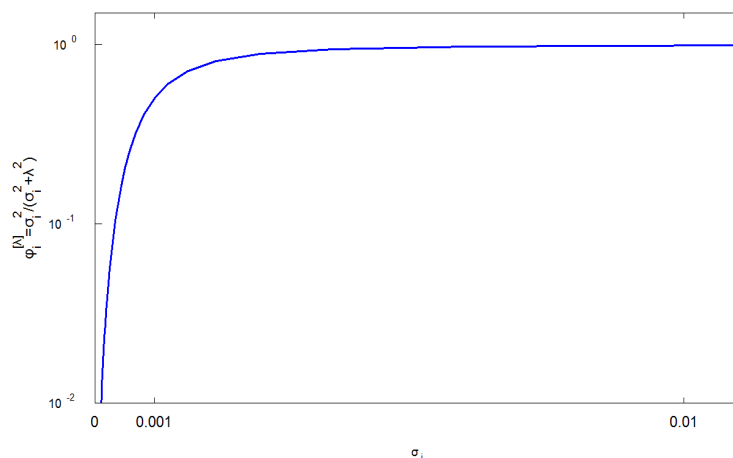
$$\begin{aligned} x_\lambda &= (V\Sigma^2 V^T + \lambda^2 VV^T)^{-1} V\Sigma U^T b \\ &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} V^T V\Sigma U^T b \\ &= V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b. \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Οπότε αντικαθιστώντας τις ιδιάζουσες τιμές και τα ιδιάζοντα διανύσματα, λαμβάνουμε

$$x_\lambda = \sum_{i=1}^n \phi_i^{[\lambda]} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} \nu_i, \quad (4.4.5)$$

όπου οι παράγοντες φίλτρου  $\phi_i^{[\lambda]}$  για  $i = 1, \dots, n$  ικανοποιούν

$$\phi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \approx \begin{cases} 1, & \text{αν } \sigma_i \gg \lambda \\ \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}, & \text{αν } \sigma_i \ll \lambda. \end{cases} \quad (4.4.6)$$



Εικόνα 4.6: Γράφημα των παραγόντων φίλτρου  $\phi_i^{[\lambda]}$  για τη μέθοδο κανονικοποίησης Tikhonov ως προς τις ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ .

Στην εικόνα 4.6 σκιαγραφείται αυτό το γεγονός. Έχουμε χρησιμοποιήσει  $\lambda = 0.001$  για να κάνουμε το γράφημα των παραγόντων φίλτρου  $\phi_i^{[\lambda]}$  ως προς τις ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$ . Στον άξονα των  $\sigma_i$  έχουν σημειωθεί μόνο οι τιμές για  $\sigma_i = \lambda$  και  $\sigma_i = 10\lambda$ . Από τη μία μεριά παρατηρούμε ότι για τις ιδιάζουσες τιμές που είναι μεγαλύτερες από το  $\lambda$ , οι παράγοντες φίλτρου είναι κοντά στη μονάδα (1), οπότε οι αντίστοιχοι όροι SVD συνεισφέρουν κατά κράτος. Από την άλλη, για τις ιδιάζουσες τιμές που είναι πολύ μικρότερες από το  $\lambda$ , οι παράγοντες φίλτρου  $\phi_i$  είναι μικροί και επομένως οι αντίστοιχοι όροι SVD φιλτράρονται. Στην τελευταία περίπτωση, οι παράγοντες φίλτρου  $\phi_i^{[\lambda]}$  είναι ανάλογοι του  $\sigma_i^2$ , οπότε φθίνουν αρκετά γρήγορα ώστε να επιτύχουν την «εκκαθάριση» των αυξανόμενων παραγόντων  $u_i^T b / \sigma_i \approx u_i^T e / \sigma_i$ .

Συμπερασματικά, θα λέγαμε, ότι η λύση Tikhonov είναι μία λύση φιλτραρίσματος της αφελούς λύσης, χονδρικά όπως η λύση TSVD. Η παράμετρος  $\lambda$  μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον έλεγχο του φιλτραρίσματος, όπως ακριβώς και η παράμετρος αποκοπής  $k$ . Ακολούθως, δίνουμε ένα παράδειγμα χρήσης της μεθόδου Tikhonov στο πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας προς σύγκριση με την μέθοδο TSVD. Η υλοποίηση της μεθόδου Tikhonov έγινε με την ομώνυμη συνάρτηση *tikhonov* από το προγραμματιστικό πακέτο RT που έχει όμοια χρήση με την *tsvd*. Η εικόνα 4.7 δίνει τα αποτελέσματα της μεθόδου Tikhonov σε αυτό πρόβλημα (*gravity*,  $n = 64$  και  $\|e\|_2 = 0.01$ ), τα οποία είναι φανερά όμοια με αυτά από την εικόνα 4.2 για τη μέθοδο TSVD. Για τη μέθοδο Tikhonov χρησιμοποιήσαμε 9 τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\lambda$  που ισαπέχουν λογαριθμικά από  $10^{-3}$  έως το 10 (εντολή Octave ή Matlab: *logspace(1,-3,9)*). Ωστόσο η μετάβαση από τους όρους που κρατάμε σε αυτούς που φιλτράρονται είναι ομαλότερη και επιπλέον το φιλτράρισμα μπορεί να επιτευχθεί χωρίς αναλυτικό υπολογισμό της SVD. Πράγματι, το μόνο που χρειάζεται είναι να λυθεί το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων 4.4.2.

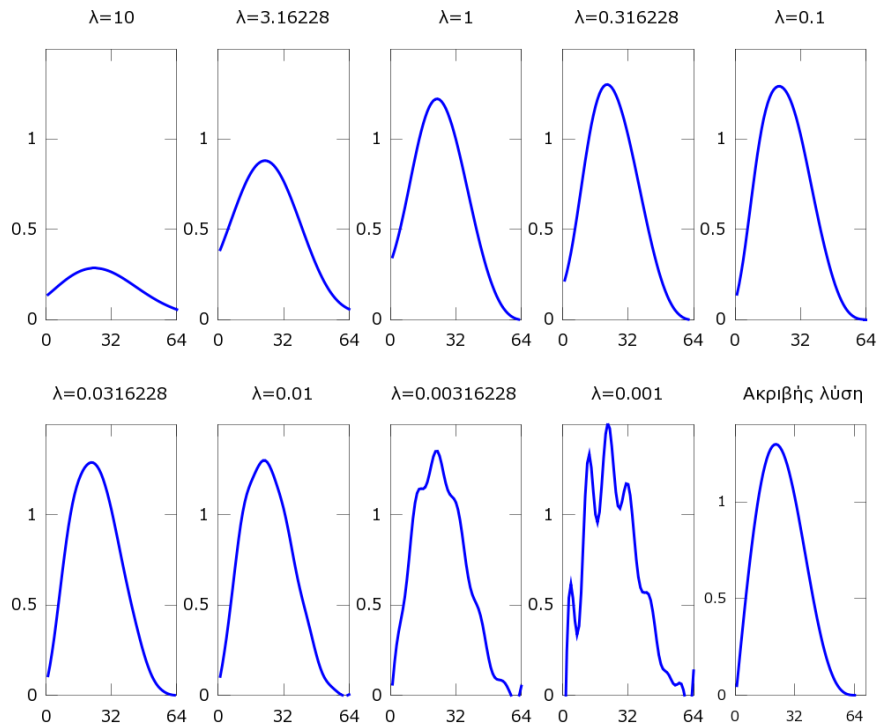
Ίσως ο πιο βολικός τρόπος να φανεί η εξάρτηση των λύσεων από τις παραμέτρους κανονικοποίησης είναι με τη τρισδιάστατη απεικόνιση πολλών (ή όλων) των λύσεων, για την οποία χρησιμοποιήσαμε τη συνάρτηση του Octave ή Matlab *surf*. Η εικόνα 4.8 δείχνει την τρισδιάστατη απεικόνιση όλων (9) των λύσεων TSVD (αριστερά) και Tikhonov (δεξιά) και φαίνονται καθαρά οι ιδιότητες που περιγράψαμε προηγουμένως και ταυτόχρονα η άμεση σύγκριση των δύο μεθόδων. Στην εικόνα 4.8 φαίνεται επίσης και η «συγγένεια» αυτών των μεθόδων TSVD και Tikhonov που αγνοφαινόταν διαισθητικά συγκρίνοντας τους παραγόντες φίλτρου τους: για κάθε  $k$  υπάρχει  $\lambda$  τέτοιο ώστε  $x_k \approx x_\lambda$ . Η σημαντική αυτή παρατήρηση είναι αποδεδειγμένη αλλά η περαιτέρω ανάλυσή της ξεφεύγει από τα όρια αυτής της εργασίας. Για περισσότερα, βλ. π.χ. [HC86].

Και πάλι υπάρχουν εναλλακτικές διατυπώσεις που είναι ισοδύναμες με τη μέθοδο Tikhonov. Οι επόμενες δύο διατυπώσεις οφείλονται στην ελαχιστοποίηση με περιορισμό ή μέθοδο των πολλαπλασιαστών Lagrange. Για παράδειγμα, μπορούμε να δώσουμε ένα άνω φράγμα  $\delta$  στην νόρμα της λύσης και λύσουμε το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων

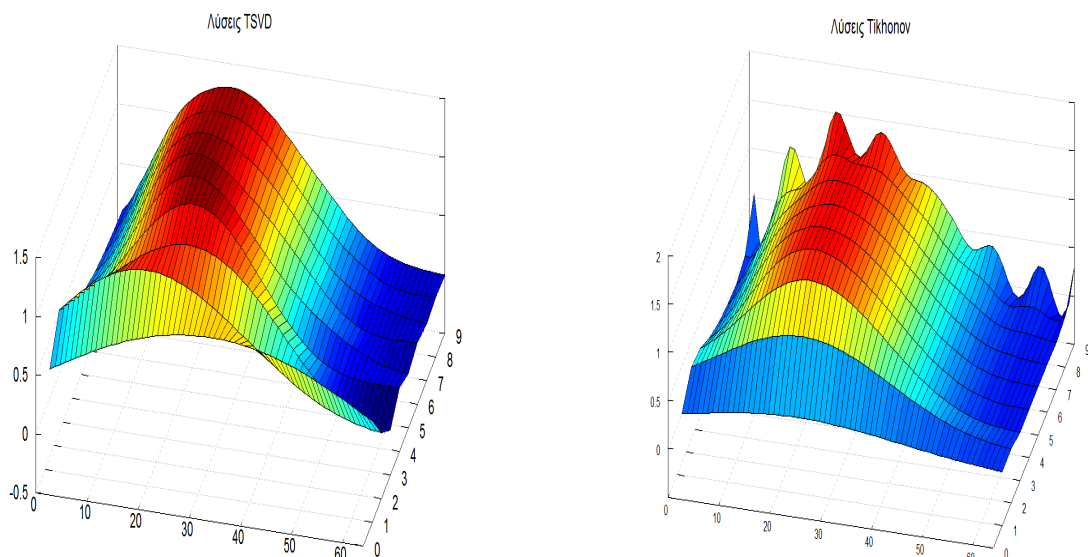
$$\min_x \|Ax - b\|_2^2 \quad \text{υπο τον περιορισμό} \quad \|x\|_2^2 \leq \delta^2. \quad (4.4.7)$$

Ο περιορισμός είναι ενεργός μόνο στην περίπτωση που το  $\delta$  είναι μικρότερο από τη νόρμα  $\|A^{-1}b\|_2$  της αφελούς λύσης, ειδάλλως δεν νοείται κανονικοποιημένη λύση στο πρόβλημα. Όμοια, μπορούμε να ελαχιστο-

4.4. Μέθοδος Κανονικοποίησης Tikhonov (Υπολογιστική διάσταση : Μέθοδοι κανονικοποίησης)



Εικόνα 4.7: Λύσεις Tikhonov  $x_\lambda$  για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας, για εννιά διαφορετικές τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\lambda$ , σε σύγκριση με την ακριβή λύση (δεξιά κάτω). Οι τιμές  $\lambda = 0.00316228$  και  $\lambda = 0.001$  είναι πολύ μικρές και παράγουν λύσεις με θορυβώδεις όρους της SVD.



Εικόνα 4.8: Τρισδιάστατη απεικόνιση λύσεων TSVD (αριστερά) και Tikhonov (δεξιά) για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας.

ποιήσουμε τη νόρμα της λύσης (καταστολή όρων υψηλών συχνοτήτων μεγάλου πλάτους) με το περιορισμό



της νόρμας υπολοίπου από κάποιο άνω φράγμα  $\epsilon$

$$\min_x \|x\|_2^2 \quad \text{υπο τον περιορισμό} \quad \|Ax - b\|_2^2 \leq \epsilon^2. \quad (4.4.8)$$

Απλή χρήση της μεθόδου των πολλαπλασιαστών Lagrange οδηγεί πράγματι στη λύση Tikhonov και για τις δύο διατυπώσεις.

Όπως και στη λύση TSVD θα θέλαμε να έχουμε και μία στατιστική διαίσθηση της λύσης Tikhonov. Μέσω της σχέσης  $x_\lambda = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T b$  και θεωρώντας πάλι  $Cov(e) = \eta^2 I$ , μπορούμε να δείξουμε (όμοια με το λογισμό για την εξ. 4.2.5) ότι ο πίνακας συνδιασποράς για τη λύση Tikhonov είναι

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

και η νόρμα του φράσσεται από

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

Είναι φανερό ότι αν το  $\lambda$  επιλεγθεί έτσι ώστε να είναι ελαφρώς μεγαλύτερο από τη μικρότερη ιδιάζουσα τιμή  $\sigma_n$ , επιτυγχάνουμε μείωση της διασποράς της λύσης Tikhonov, συγκριτικά με την αφελή λύση (βλ. και 3.6.8). Και εδώ, αυτή η επιτυχία έχει το τίμημα της μεροληψίας στη λύση

$$E[x_\lambda] = \sum_{i=1}^n \phi_i^{[\lambda]} (\nu_i^T x^{exact}) \nu_i = x^{exact} - \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]}) (\nu_i^T x^{exact}) \nu_i.$$

Εφόσον  $1 - \phi_i[\lambda] = \lambda^2 / (\sigma_i^2 + \lambda^2)$  και υποθέτοντας πάντα ότι ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard, αναμένεται μικρός ο όρος μεροληψίας συγκρινόμενος με τη νόρμα  $\|x^{exact}\|_2$ .

## 4.5 Θεωρία Διαταραχών

Οι μέθοδοι κανονικοποίησης είναι εκ κατασκευής φίλτρα που περιορίζουν την επιρροή του θορύβου, έτσι ώστε η λύση να κυριαρχείται λιγότερο από αυτόν, με την προϋπόθεση ότι θα διαλέξουμε κατάλληλα τις παραμέτρους κανονικοποίησης. Προκύπτει φυσιολογικά το ερώτημα πόσο ευαίσθητη είναι η κανονικοποιημένη λύση σε διαταραχές και πως εξαρτάται η ευαισθησία από την παράμετρο κανονικοποίησης. Η θεωρία διαταραχών ξεφεύγει από τα όρια του παρόντος. Ωστόσο, μπορούμε να σκιαγραφήσουμε την ευαισθησία των λύσεων μέσω κάποιων φραγμάτων που είναι διαφωτιστικά. Μελετούμε δύο σχετικά προβλήματα

$$Ax = b \quad \text{και} \quad \tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b},$$

όπου  $\tilde{A}$  και  $\tilde{b}$  είναι οι διαταραγμένες εκδόσεις των  $A$  και  $b$ ,

$$\tilde{A} = A + \Delta A \quad \tilde{b} = b + \Delta b,$$

δηλ. ο πίνακας  $\Delta A$  είναι η διαταραχή του  $A$ , και το διάνυσμα είναι η διαταραχή του  $b$ . Εν ολίγοις, τα δύο αυτά προβλήματα είναι δύο θορυβώδεις εκφάνσεις του ακριβούς προβλήματος  $Ax^{exact} = b^{exact}$ . Τα διανύσματα  $x$  και  $\tilde{x}$  είναι οι λύσεις αυτών των προβλημάτων και ενδιαφερόμαστε για φράγματα της σχετικής κατά νόρμα διαφοράς  $\|\tilde{x} - x\|_2 / \|x\|_2$ . Αυτά τα φράγματα είναι ανεξάρτητα περιγράφουν πόσο ευαίσθητη είναι η λύση σε μεταβολές του θορύβου.

**Αφελείς λύσεις.** Το φράγμα διαταραχής για τις αφελείς λύσεις  $x = A^{-1}b$  και  $\tilde{x} = \tilde{A}^{-1}\tilde{b}$  (όταν ο  $A$  είναι τετραγωνικός και αντιστρέψιμος) μπορεί να βρεθεί σε πολλά βιβλία αριθμητικής ανάλυσης. Αν για τον πίνακα διαταραχής ισχύει  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n$ , τότε

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

όπου

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

Απαιτείται  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n \Leftrightarrow \gamma < 1$ , έτσι ώστε να εξασφαλίζουμε ότι ο πίνακας παραμένει αντιστρέψιμος. Η διαταραχή κυριαρχείται από το δείκτη κατάστασης του  $A$ ,  $cond(A) = \sigma_1/\sigma_n$ .

Λύσεις ελαχίστων τετραγώνων. Το φράγμα διαταραχής για τις λύσεις ελαχίστων τετραγώνων στα προβλήματα  $\min \|Ax - b\|_2$  και  $\min \|\tilde{A}\tilde{x} - \tilde{b}\|_2$  (όταν  $m > n$  και  $rank(A) = n$ ) μπορεί επίσης να βρεθεί ευρέως στη βιβλιογραφία που αφορά τα προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων. Αν ο πίνακας διαταραχής ικανοποιεί την ανισότητα  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_n$ , που εξασφαλίζει ότι ο πίνακας έχει τάξη  $n$ , τότε

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

όπου  $b_n = Ax$  και  $\gamma = \|\Delta A\|_2/\sigma_n$ . Και πάλι, η ο δείκτης κατάστασης  $cond(A) = \sigma_1/\sigma_n$  κυβερνά τη διαταραχή.

Λύσεις TSVD. (Βλ. [HC90].) Έστω  $x_k$  και  $\tilde{x}_k$  οι λύσεις TSVD για την ίδια παράμετρο αποκοπής  $k$ , και επιπλέον υποθέτουμε ότι για τον πίνακα διαταραχής ισχύει  $\|\Delta A\|_2 < \sigma_k - \sigma_{k+1}$ . Τότε, το φράγμα διαταραχής παίρνει τη μορφή

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

όπου

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

Το αποτέλεσμα αυτό δείχνει ότι ο δείκτης κατάστασης για την λύση TSVD είναι  $\kappa_k = \sigma_1/\sigma_k$  που μπορεί να γίνει πολύ μικρότερος από το δείκτη κατάστασης του  $A$ .

Λύσεις Tikhonov. (Βλ. [HC89]) Έστω  $x_\lambda$  και  $\tilde{x}_\lambda$  οι λύσεις Tikhonov για την ίδια παράμετρο κανονικοποίησης  $\lambda$ . Επιπλέον, υποθέτουμε ότι ο πίνακας διαταραχής ικανοποιεί την ανισότητα  $\|\Delta A\|_2 < \lambda$ . Τότε, αποδεικνύεται ότι

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

όπου

$$b_\lambda = Ax_\lambda, \quad \kappa_\lambda = \frac{\sigma_1}{\lambda} = \frac{\|A\|_2}{\lambda} \quad \text{και} \quad \gamma_\lambda = \frac{\|\Delta A\|_2}{\sigma_\lambda}.$$

Οπότε ο δείκτης κατάστασης για τις λύσεις Tikhonov είναι  $\kappa_\lambda = \sigma_1/\lambda$  και όπως και οι λύσεις TSVD, μπορεί να είναι πολύ μικρότερος από το δείκτη κατάστασης του  $A$ .

Δεν είναι έκπληξη ότι τα φράγματα για τις λύσεις TSVD και Tikhonov μοιάζουν αρκετά. Και στις δύο περιπτώσεις, ο δείκτης κατάστασης εξαρτάται από την επιλογή της παραμέτρου κανονικοποίησης, και μάλιστα είναι τόσο μικρότερος όσο περισσότερο φιλτράρουμε την αφελή λύση. Επιπρόσθετα, και για τις δύο το φράγμα περιέχει τις νόρμες των υπολοίπων  $b - b_k = b - Ax_k$  και  $b - b_\lambda = b - Ax_\lambda$ . Επίσης και για τις δύο υποτίθεται ένα άνω φράγμα για το πίνακα διαταραχής  $\Delta A$  που εξασφαλίζει ότι η διαταραγμένη και μη SVD σχετίζονται. Η ουσιώδης διαφορά των δύο φραγμάτων διαταραχής είναι ο όρος  $\tilde{\gamma}_k = \sigma_{k+1}/\sigma_k$  που εμφανίζεται στη λύση TSVD, ο οποίος μετρά την απόσταση μεταξύ της μικρότερης ιδιάζουσας τιμής που κρατάμε και της μεγαλύτερης που φιλτράρεται και μένει εκτός. Αν το  $\tilde{\gamma}_k$  είναι κοντά στη μονάδα (1) τότε το  $1 - \tilde{\gamma}_k$  είναι μικρό και επιτρέπονται μόνο μικρές διαταραχές στον πίνακα. Το τελευταίο σημαίνει ότι θα πρέπει κανείς να αποφεύγει να αποκόπτει τη λύση εντός μίας συστάδας<sup>||</sup> (cluster) ιδιάζουσων τιμών. Αυτή η δυσκολία δεν υπάρχει στη λύση Tikhonov, διότι αν τύχει και επιλέξουμε ένα  $\lambda$  εντός μίας συστάδας ιδιάζουσων τιμών, τότε όλοι όροι της SVD παίρνουν μέρος αφού οι παράγοντες φίλτρου  $\phi_i^{[\lambda]} = \sigma_i^2/(\sigma_i^2 + \lambda^2)$  έχουν όλοι το ίδιο μέγεθος. Αξίζει να αναφερθεί ότι περαιτέρω χρήση θεωρίας διαταραχών δείχνει ότι η ευαιθησία της λύσης Tikhonov μειώνεται με την αύξηση του  $\lambda$ , δηλ. όσο περισσότερο φιλτράρουμε τη λύση.

## 4.6 Η καμπύλη L

$\sum$  τις προηγούμενες υποενότητες χρησιμοποιήσαμε εκτεταμένα την SVD για τον ορισμό και τη μελέτη δύο σημαντικών μεθόδων κανονικοποίησης. Η SVD είναι ένα πολύτιμο εργαλείο ανάλυσης στην

<sup>||</sup>Συστάδα (cluster) ιδιάζουσων τιμών καλείται ένα υποσύνολο των ιδιάζουσων τιμών που είναι πολύ κοντά ή μία στη άλλη και είναι απομονωμένες από τις υπόλοιπες.

αντιμετώπιση διακριτών αντιστροφών προβλημάτων και η χρήση δε σταματά εδώ. Αντιθέτως, μέσω της SVD θα μελετήσουμε ενδελεχώς την νόρμα της λύσης και την αντίστοιχη νόρμα υπολοίπου. Αυτές οι νόρμες παίζουν κρίσιμο ρόλο στην πρακτική αντιμετώπιση των διακριτών αντιστροφών προβλημάτων, διότι άσχετα με την περίπτωση, μπορούν πάντα να υπολογιστούν και μάλιστα χωρίς την επέμβαση στην SVD ή άλλης παραγοντοποίησης του πίνακα.

Η νόρμα της λύσης TSVD και η νόρμα υπολοίπου που συνδέεται με αυτή μεταβάλλονται μονότονα, όπως φαίνεται από τις εκφράσεις

$$\|x_k\|_2^2 = \sum_{i=1}^k \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \leq \|x_{k+1}\|_2^2 \quad (4.6.1)$$

$$\|Ax_k - b\|_2^2 = \sum_{i=k+1}^n (v_i^T b)^2 + \epsilon_{\perp}^2 \geq \|Ax_{k+1} - b\|_2^2, \quad (4.6.2)$$

όπου  $\epsilon_{\perp} = \|(I - UU^T)b\|_2$  είναι η νόρμα της συνιστώσας του  $b$  που δεν ανήκει στο χώρο στηλών του  $A$ . Όμοια, η νόρμα της λύσης Tikhonov και το αντίστοιχο υπόλοιπό της δίνονται από

$$\|x_{\lambda}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left( \phi_i^{[\lambda]} \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \quad (4.6.3)$$

$$\|Ax_{\lambda} - b\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left( (1 - \phi_i^{[\lambda]}) v_i^T b \right)^2 + \epsilon_{\perp}^2 \quad (4.6.4)$$

Για την απόδειξη ότι και αυτές οι νόρμες μεταβάλλονται μονότονα, εισάγουμε τον παρακάτω συμβολισμό

$$\xi = \|x_{\lambda}\|_2^2 \quad \text{και} \quad \rho = \|Ax_{\lambda} - b\|_2^2.$$

Βρίσκουμε την παράγωγο του  $\phi_i^{[\lambda]}$  ως προς  $\lambda$ ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} (\phi_i^{[\lambda]}) &= \frac{-2\lambda\sigma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda^2)^2} = -\frac{2}{\lambda} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \frac{\lambda^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \\ &= -\frac{2}{\lambda} \phi_i^{[\lambda]} (1 - \phi_i^{[\lambda]}), \end{aligned}$$

και τότε η παράγωγος του  $(\phi_i^{[\lambda]})^2$  είναι

$$\frac{d}{d\lambda} [(\phi_i^{[\lambda]})^2] = 2\phi_i^{[\lambda]} \frac{d}{d\lambda} (\phi_i^{[\lambda]}) = -\frac{4}{\lambda} (\phi_i^{[\lambda]})^2 (1 - \phi_i^{[\lambda]}).$$

Οπότε έχουμε

$$\xi' \equiv \frac{d\xi}{d\lambda} = -\frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n [(\phi_i^{[\lambda]})^2] (1 - \phi_i^{[\lambda]}) \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 < 0 \quad \forall \lambda, \quad (4.6.5)$$

και

$$\rho' \equiv \frac{d\rho}{d\lambda} = \frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]})^2 \phi_i^{[\lambda]} (v_i^T b)^2 > 0, \quad \forall \lambda. \quad (4.6.6)$$

Ακόμη, παρατηρούμε ότι οι παράγωγοι  $\xi'$  και  $\rho'$  συνδέονται με μία απλή σχέση

$$\begin{aligned} \rho' &= \frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]}) \lambda^2 \frac{1}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \phi_i^{[\lambda]} \sigma_i^2 \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \\ &= \lambda^2 \frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]}) (\phi_i^{[\lambda]})^2 \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \\ \Rightarrow \rho' &= -\lambda^2 \xi'. \end{aligned} \quad (4.6.7)$$

Οι σχέσεις (4.6.5) και (4.6.6) επιβεβαιώνουν την μονοτονία των νορμών. Επιπλέον η εξίσωση  $\rho' = -\lambda^2 \xi'$  οδηγεί στην  $\frac{d\xi}{d\rho} = -\lambda^2$ , δείχνοντας ότι η τετραγωνισμένη νόρμα της λύσης  $\|x_\lambda\|_2^2$  είναι φθίνουσα συνάρτηση της τετραγωνισμένης νόρμας υπολοίπου  $\|Ax_\lambda - b\|_2^2$ . Εφόσον όμως και συνάρτηση τετραγωνική ρίζα είναι μονότονη, το ίδιο ισχύει και για τις ίδιες τις νόρμες. Επιπρόσθετα, υπάρχει και μία απλή σχέση που συνδέει τις δεύτερες παραγώγους των  $\xi$  και  $\rho$

$$\rho'' \equiv \frac{d^2\rho}{d\lambda^2} = \frac{d}{d\lambda}(-\lambda^2 \xi') = -2\lambda \xi' - \lambda^2 \xi'', \quad (4.6.8)$$

όπου  $\xi'' \equiv \frac{d^2\xi}{d\lambda^2}$ . Θεωρούμε τώρα την καμπύλη που λαμβάνουμε κάνοντας το γράφημα του  $\xi$  ως προς  $\rho$  με το  $\lambda$  να παίζει το ρόλο παραμέτρου στην καμπύλη  $(\rho, \xi)$ . Η καμπύλη αυτή είναι υψηλού ενδιαφέροντος διότι δείχνει πως μεταβάλλεται η κανονικοποιημένη λύση όταν μεταβάλλουμε την παράμετρο κανονικοποίησης  $\lambda$ . Η καμπυλότητα  $c_\lambda$  αυτής της καμπύλης, ως συνάρτηση του  $\lambda$  (βλ. οποιοδήποτε βιβλίο αναλυτικής γεωμετρίας για το ορισμό του), δίνεται από

$$c_\lambda = \frac{\rho' \xi'' - \rho'' \xi'}{[(\rho')^2 + (\xi')^2]^{3/2}} = \frac{2\lambda(\xi')^2}{[(\rho')^2 + (\xi')^2]^{3/2}},$$

όπου αντικαταστήσαμε την παραπάνω σχέση για το  $\rho''$ . Επομένως,  $c_\lambda > 0$  για κάθε  $\lambda$  και άρα η καμπύλη  $(\rho, \xi)$  είναι κυρτή.

Υπάρχουν αρκετές ιδιότητες αυτής της καμπύλης, για παράδειγμα εύκολα μπορεί κανείς να δείξει ότι

$$0 \leq \|x_\lambda\|_2 \leq \|A^{-1}b\|_2 \quad \text{και} \quad 0 \leq \|Ax_\lambda - b\|_2 \leq \|b\|_2.$$

Η πρώτη σχέση είναι σχεδόν προφανής και είναι αναμενόμενη, αλλιώς η λύση δεν διέπεται από κανονικότητα. Η δεύτερη προκύπτει από τη σχέση 4.4.4 όπως ακολουθεί

$$\begin{aligned} Ax_\lambda &= U\Sigma V^T V(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b \\ &= U\Sigma^2(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} U^T b \end{aligned} \quad (4.6.9)$$

$$= \sum_{i=1}^n \phi_i^{[\lambda]} (v_i^T b) v_i, \quad (4.6.10)$$

οπότε για την ποσότητα  $\|Ax_\lambda\|_2^2$  προκύπτει

$$\begin{aligned} \|Ax_\lambda\|_2^2 &= \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]})^2 (v_i^T b)^2 \leq \sum_{i=1}^n (v_i^T b)^2 = \|Ax\|_2^2 = \|b\|_2^2 \quad \eta \\ \|Ax_\lambda\|_2^2 &\leq \|b\|_2^2 \end{aligned}$$

οπότε έχουμε  $\|b - Ax_\lambda\|_2 \leq \|b\|_2$ . Σημειώνουμε ότι από τη σχέση 4.6.9 προκύπτει άλλη μία χρήσιμη σχέση, που δίνει έναν αλγόριθμο υπολογισμού του διανύσματος υπολοίπου  $\|Ax_\lambda - b\|_2$ :

$$Ax_\lambda - b = U\Sigma^2(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} U^T b - U U^T b = U(\Sigma^2(\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} - I) U^T b = \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]} - 1) (v_i^T b) v_i, \quad (4.6.11)$$

οπότε η νόρμα του είναι

$$\|Ax_\lambda - b\|_2 = \left[ \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]})^2 (v_i^T b)^2 \right]^{1/2}. \quad (4.6.12)$$

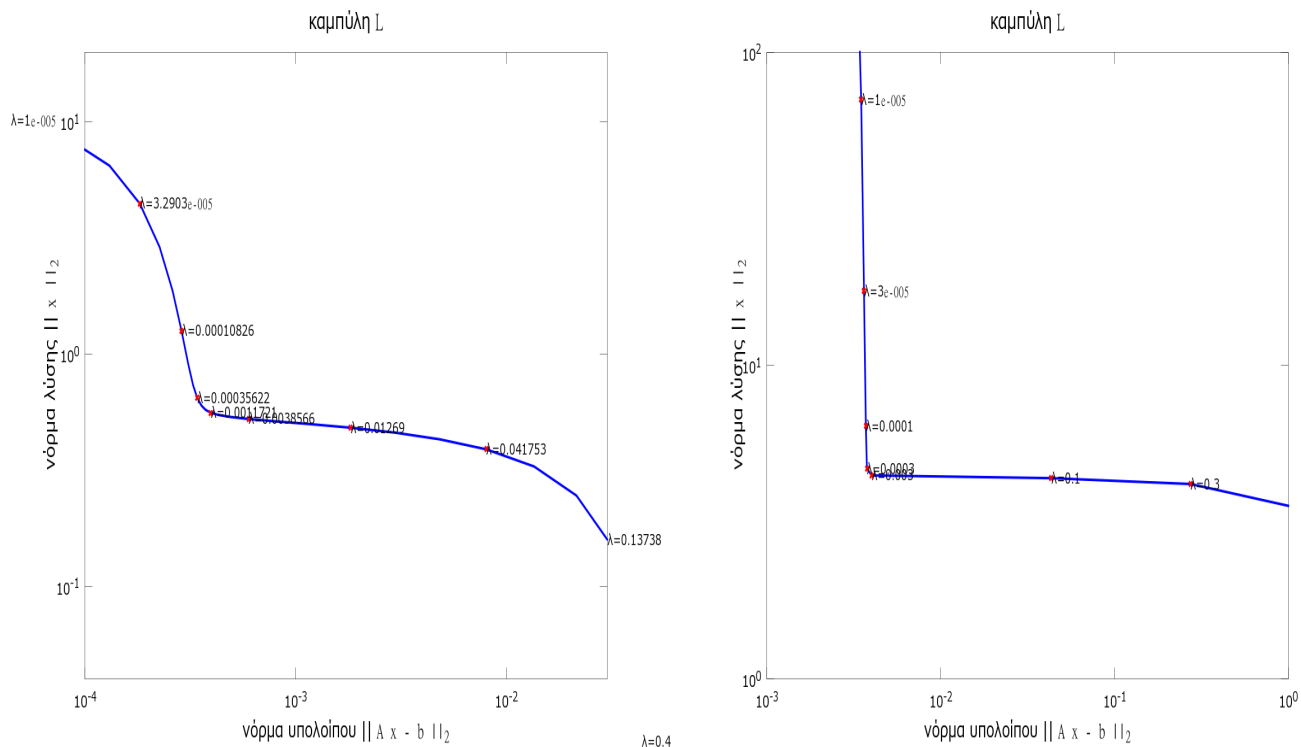
Η τελευταία, σαφώς, ισχύει για την περίπτωση που ο πίνακας  $U$  είναι τετραγωνικός, οπότε και  $UU^T = I_n$ . Στη γενική περίπτωση  $UU^T \neq I$ , και απλώς προσθαφαιρούμε τον όρο  $UU^T b$  και καταλήγουμε στην εξ. 4.6.4.

Επιπλέον, τώρα, αφού κάθε σημείο  $\rho, \xi$  της καμπύλης είναι λύση του προβλήματος

$$\min \|Ax - b\|_2^2 \quad \text{υπό τον περιορισμό} \quad \|x\|_2^2 \leq \xi,$$

(βλ. εναλλακτική διατύπωση 4.4.2), έπεται ότι η καμπύλη ορίζει ένα σύνορο μεταξύ δύο περιοχών. Η περιοχή κάτω από την καμπύλη είναι απαγορευτική για το διάνυσμα  $x$ . Αυτό σημαίνει ότι για όλα τα πιθανά

#### 4.6. Η καμπύλη L (Υπολογιστική διάσταση : Μέθοδοι κανονικοποίησης)



Εικόνα 4.9: Δύο παραδείγματα καμπύλων L για τη κανονικοποίηση Tikhonov. Γράφηματα σε διπλή λογαριθμική κλίμακα της νόρμας της λύσης  $\|x\|_2$  ως προς την νόρμα υπολοίπου  $\|Ax - b\|_2$  με το  $\lambda$  ως παράμετρο. Εδώ έγινε χρήση των προβλημάτων ελέγχου deriv2 (αριστερά) και shaw (δεξιά). Παρατηρούμε ότι τα «κατακόρυφα» και «οριζόντια» μέρη των γραφήματων αντιστοιχούν σε λύσεις με υποεξομάλυνση και υπερεξομάλυνση αντίστοιχα.

διανύσματα  $x$  το σημείο  $(\|Ax - b\|_2, \|x\|_2)$  κείται εντός ή άνωθεν της καμπύλης. Αν επιχειρήσουμε να κανονουμε το γράφημα αυτής της καμπύλης χωρίς κλιμακοποίηση η παρατήρηση μας θα είναι φτωχή λόγω των μεγάλων τιμών που παίρνουν οι δύο νόρμες.

Κατάλληλη επισκόπηση για τους ελέγχους μας δύναται να δοθεί από ένα γράφημα σε διπλή λογαριθμική κλίμακα (εντολή Octave ή Matlab: loglog). Έτσι, αντί για αυτή τη καμπύλη θεωρούμε τα σημεία της *συνδεόμενης καμπύλης*

$$\left(\frac{1}{2} \log \rho, \frac{1}{2} \log \xi\right) = (\log \|Ax_\lambda - b\|_2, \log \|x_\lambda\|_2),$$

γνωστή ως **καμπύλη L** για την κανονικοποίηση Tikhonov. Η καμπύλη L παίζει κεντρικό ρόλο στην ανάλυση διακριτών αντίστροφων προβλημάτων και το όνομά της προδίδει το σύννηδες σχήμα της.

Η εικόνα 4.9 δείχνει δύο τυπικά παραδείγματα καμπύλης L για διαφορετικά προβλήματα. Εδώ έγινε χρήση της συνάρτησης tikhonov για τον υπολογισμό των ποσοτήτων  $\|Ax_\lambda - b\|_2$  και  $\|x_\lambda\|_2$  και κατόπιν για τα γραφήματα χρήση της ενσωματωμένης συνάρτησης loglog. Στο γράφημα αριστερά, χρησιμοποιήθηκε το πρόβλημα της δεύτερης παραγώγου (παράδειγμα (1)) με  $n = 64$  και σχετικό θόρυβο  $\|e\|_2 / \|b^{exact}\|_2 = 0.01$  και για 30 τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\lambda$  που ισαπέχουν λογαριθμικά από  $10^{-5}$  έως το 1. Στη δεύτερη περίπτωση (γράφημα δεξιά) έχουμε χρησιμοποιήσει το πρόβλημα ελέγχου shaw για  $n = 20$ , τυπική απόκλιση  $\eta = 0.001$  και για 8 διαφορετικές τιμές της παραμέτρου  $\lambda = [1, 3e-1, 1e-2, 3e-3, 3e-4, 1e-4, 3e-5, 1e-5]$ . Βλέπουμε το χαρακτηριστικό σχήμα μορφής L που έχουν τα δύο γραφήματα, ενώ στο γράφημα αριστερά παρατηρείται περισσότερη ομαλότητα (και στο γράφημα δεξιά η γωνία είναι πολύ «αιχμηρή»), για την οποία πρέπει να τονίσουμε ότι δεν οφείλεται στο πλήθος των τιμών του  $\lambda$ . Ταυτόχρονα, από μερικές τιμές της παραμέτρου  $\lambda$  που έχουμε σημειώσει πάνω στην καμπύλη, παρατηρούμε ότι στα «κατακόρυφα» και «οριζόντια» μέρη του γραφήματος έχουμε υποεξομάλυνση και υπερεξομάλυνση της λύσης αντίστοιχα.

Έχουμε ήδη δει ότι οι λύσεις Tikhonov συμπεριφέρονται ποσοτικώς διαφορετικά για μικρές και μεγάλες τιμές της παραμέτρου  $\lambda$ . Το ίδιο απαντάται και για διαφορετικά μέρη της καμπύλης L. Όταν το  $\lambda$  είναι

μεγάλο η  $x_\lambda$  καταλαμβάνεται από όρους της SVD που έχουν κυρίως συνεισφορές από το ακριβές δεξί μέλος  $b^{exact}$  και τότε η λύση έχει περίσσεια ομαλότητας. Μετά από προσεκτική ανάλυση (θα επανέλθουμε σε αυτά τα συμπεράσματα στο κεφ. 5, για περαιτέρω λεπτομέρειες βλ. [HC01]) αποδεικνύεται ότι για μεγάλα  $\lambda$  έχουμε ότι

$$\|x_\lambda\|_2 \approx \|x^{exact}\|_2 \quad (\text{σταθερά}) \quad \text{και} \quad \|Ax_\lambda - b\|_2 \quad \text{αυξάνει με το } \lambda$$

Για τις μικρές τιμές του  $\lambda$  δε, η λύση Tikhonov κυριαρχείται από σφάλματα διαταραχών που έχουν καταγωγή από τον ανεστραμμένο θόρυβο, και έχει υποστεί υποεξομάλυνση. Τότε η κατάσταση αποδεκνύεται ότι έχει ως εξής

$$\|x_\lambda\|_2 \quad \text{αυξάνει με το } \lambda^{-1} \quad \text{και} \quad \|Ax_\lambda - b\|_2 \approx \|e\|_2 \quad (\text{σταθερά}).$$

Το συμπέρασμα είναι ότι η καμπύλη L έχει δύο διακριτά μέρη, δηλ. ένα μέρος το οποίο είναι περίπου οριζόντιο και ένα μέρος που είναι περίπου κατακόρυφο.

Η «γωνία» που χωρίζει το οριζόντιο από το κατακόρυφο μέρος βρίσκεται περίπου στο σημείο

$$(\log \|e\|_2, \log \|x^{exact}\|_2)$$

Προς τα δεξιά, και για  $\lambda \rightarrow \infty$  η καμπύλη L κάμπτεται προς τα κάτω διότι η ολοένα και μεγαλύτερη κανονικοποίηση ωθεί τη νόρμα της λύσης στο 0. Όμοια, προς τα αριστερά και πάνω από το κατακόρυφο μέρος η καμπύλη L θα γίνει τελικά λιγότερο απότομη καθώς  $\lambda \rightarrow 0$  και  $\|x_\lambda\|_2 \rightarrow \|A^{-1}b\|_2$  (στην εικόνα φαίνεται μία τάση ίσως όμως δεν είναι πλήρως διακριτό).

Αξίζει να αναφέρουμε επιγραμματικά τα εξής επιπρόσθετα συμπεράσματα:

1. Η καμπύλη L μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για τη εύρεση κατάλληλη τιμής της παραμέτρου κανονικοποίησης και μάλιστα όχι μόνο για τη μέθοδο Tikhonov, όπως ίσως αφέθηκε να εννοηθεί.
2. Μέσω της καμπύλης L μπορεί να υπολογιστεί το επίπεδο του θορύβου (για λευκό θόρυβο) και η νόρμα της ακριβούς λύσης.

Η καμπύλη L είναι αντικείμενο μελέτης και εργαλείο κανονικοποίησης σε πολλά βιβλία και papers, ίσως για αρχή προτείνεται το πρωτοποριακό βιβλίο των Lawson και Hanson, [LH95].

## Κεφάλαιο 5

# Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης

Σε αυτό το σημείο έχουμε στη διάθεσή μας αρκετές μεθόδους κανονικοποίησης, οι οποίες βασίζονται στο φίλτράρισμα όρων της SVD. Έχουμε δει ότι για ορισμένα προβλήματα μικρής κλίμακας είναι δυνατόν να πάρουμε σχεδόν άμεσα μία καλή λύση TSVD από το γράφημα Picard μετά από προσεκτική παρατήρησή του. Το πρόβλημα όμως είναι ακόμα υπαρκτό: δεν διατίθεται μη αυτοματοποιημένη τεχνική επιλογής της παραμέτρου κανονικοποίησης. Πιο συγκεκριμένα, θα θέλαμε μία αξιόπιστη τεχνική, η οποία δεν απαιτεί τον υπολογισμό της SVD (που είναι ανέφικτη για προβλήματα μεγάλης κλίμακας) και ούτε στηρίζεται στην παρατήρησή μας. Μία τέτοια τεχνική, δυστυχώς δεν έχει βρεθεί ακόμα. Ένας αλγόριθμος - «συνταγή» γενικής χρήσης, ο οποίος παράγει κανονικοποιημένες λύσεις πλησίον της μη προσβάσιμης ακριβούς λύσης είναι ακόμα ανοιχτό ερευνητικό ζήτημα. Αυτό που βρίσκεται στην κατοχή μας, είναι μία συλλογή από διάφορες τεχνικές για αυτό το σκοπό, οι οποίες κάτω από κάποιες υποθέσεις τείνουν να δουλεύουν καλά χωρίς ωστόσο να μπορούμε να αποκλείσουμε την περιστασιακή αποτυχία τους.

Οι τεχνικές επιλογή παραμέτρου που έχουν αναπτύχθει τα προηγούμενα χρόνια συνιστά ευρεία γκάμα. Αν κανείς αναλογιστεί δε τις παραλλαγές, τα τεχνάσματα κλπ σε αυτές τις τεχνικές, οι οικογένειά τους συνεχώς μεγαλώνει και δεν σκοπεύουμε στην αναφορά όλων αυτών. Αρχικά πραγματευόμαστε τα σφάλματα κανονικοποίησης, κάτι που δίνει κίνητρο και μας οδηγεί με φυσικό τρόπο στις δύο πρώτες τεχνικές επιλογής παραμέτρου που θα παρουσιάσουμε, το *κριτήριο της καμπύλης L* και την *αρχή της ασυμφωνίας* (discrepancy principle). Κατόπιν, περιγράφεται η *γενικευμένη μέθοδος διασταυρωμένης επικύρωσης* (generalized cross validation method), η οποία έχει ρίζες από τη στατιστική. Σημειώνουμε ότι στο παρόν δεν ενδιαφερόμαστε για την ασυμπτωτική συμπεριφορά των τεχνικών ή των λύσεων όταν οι διαστάσεις του προβλήματος τείνουν στο άπειρο (και τα σφάλματα διακριτοποίησης στο 0).

### 5.1 Σφάλματα Κανονικοποίησης και Σφάλματα Διαταραχών

Κάθε τεχνική επιλογής παραμέτρου κανονικοποίησης θα πρέπει να προσπαθεί να ελαχιστοποιήσει τα σφάλματα στην κανονικοποιημένη λύση και γι' αυτό θα χρειαστεί να εστιάσουμε σε αυτά τα σφάλματα. Στη συνέχεια θα συζητήσουμε για τη λύση Tikhonov, ενώ συχνά θα παρεμβάλλουμε και τη λύση TSVD. Ορίζουμε το διαγώνιο πίνακα φίλτρου  $\Phi^{[\lambda]}$  που περιέχει τους παράγοντες φίλτρου Tikhonov,

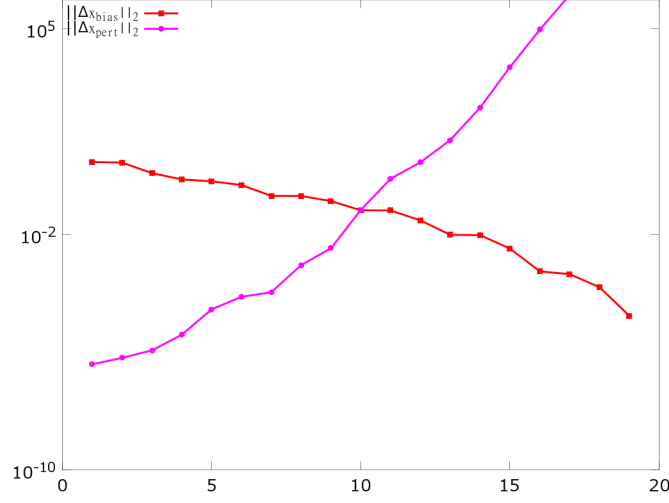
$$\begin{bmatrix} \phi_1^{[\lambda]} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \phi_n^{[\lambda]} \end{bmatrix},$$

όπου  $\phi_i^{[\lambda]} = \sigma_i^2 / (\sigma_i^2 + \lambda^2)$  (για την TSVD αυτός ο πίνακας έχει διαγώνια στοιχεία 0 ή 1). Τότε η λύση μπορεί να γραφτεί ως εξής

$$x_\lambda = V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T b. \quad (5.1.1)$$

Όμοια έκφραση υπάρχει και για την λύση TSVD, όπου ο πίνακας  $\Phi^{[\lambda]}$  αντικαθίσταται από τον πίνακα φίλτρου  $\Phi^{[k]} = \text{diag}[1, \dots, 1, 0, \dots, 0]$ .

## 5.1. Σφάλματα Κανονικοποίησης και Σφάλματα Διαταραχών (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)



Εικόνα 5.1: Κοινό γράφημα των σφαλμάτων κανονικοποίησης και διαταραχών ως συναρτήσεις της παραμέτρου αποκοπής  $k$  για το πρόβλημα ελέγχου shaw με  $n = 20$  και  $\eta = 10^{-6}$ . Τα δύο σφάλματα ισορροπούν περίπου για  $k = 10$ .

Τώρα, ενθυμούμενοι ότι το δεξί μέλος αποτελείται από το ακριβές «σήμα» συν τον επιπρόσθετο θόρυβο:  $b = Ax^{exact} + e$ . Οπότε για το σφάλμα στην κανονικοποιημένη λύση Tikhonov έπεται ότι

$$\begin{aligned} x^{exact} - x_\lambda &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^Tb \\ &= x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T Ax^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^Te \\ &= (I - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^T U\Sigma V^T)x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^Te \\ &= V(I - \Phi^{[\lambda]})V^T x^{exact} - V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^Te. \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

Ο πρώτος όρος στην παραπάνω έκφραση είναι το *σφάλμα κανονικοποίησης* προερχόμενο από το φιλτράρισμα της κανονικοποίησης:

$$\Delta x_{bias} = V(I - \Phi^{[\lambda]})V^T x^{exact} = \sum_{i=1}^n (1 - \phi_i^{[\lambda]})(\nu_i^T x^{exact})\nu_i, \quad (5.1.3)$$

και το αναγνωρίζουμε ως τον (μείον) όρο μεροληψίας, ο οποίος εισήχθη στο προηγούμενο κεφάλαιο. Εκφράζει την απόκλιση από την προσδοκώμενη (μέση) τιμή της  $x_\lambda$  από την ακριβή λύση.

Ο δεύτερος σφαλματικός όρος είναι το *σφάλμα διαταραχών* προερχόμενο από την αντιστροφή και το φιλτράρισμα των θορυβωδών συνιστωσών των δεδομένων:

$$\Delta x_{pert} = V\Phi^{[\lambda]}\Sigma^{-1}U^Te. \quad (5.1.4)$$

Ο κύριος σκοπός της κανονικοποίησης μέσω φασματικού φίλτρου, στην παρουσία του πίνακα φίλτρου  $\Phi^{[\lambda]}$ , είναι να εμποδίσει το σφάλμα διαταραχής να καταστρέψει τη λύση λόγω έκρηξης του μεγέθους του.

Για τις λύσεις TSVD, τα σφάλματα κανονικοποίησης και διαταραχών παίρνουν τη μορφή

$$\Delta x_{bias} = \sum_{i=k+1}^n (\nu_i^T x^{exact})\nu_i, \quad \Delta x_{pert} = \sum_{i=1}^k \frac{\nu_i^T e}{\sigma_i} \nu_i.$$

Παρατηρούμε ότι μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την παράμετρο αποκοπής  $k$  για να εμποδίσουμε την έκρηξη του σφάλματος διαταραχών, λόγω διαίρεσης με μικροσκοπικές ιδιάζουσες τιμές, με το κόστος της εισαγωγής της μεροληψίας στην κανονικοποιημένη λύση. Και τα δύο είδη σφαλμάτων είναι παρόντα στην κανονικοποιημένη λύση και το μέγεθος τους καθορίζεται από την επιλογή της παραμέτρου  $k$ . Αν το  $k$  είναι



κοντά στο  $n$ , τότε συμπεριλαμβάνουμε σχεδόν όλους τους όρους της SVD και η μεροληψία είναι μικρή, αλλά το σφάλμα διαταραχών είναι μεγάλο διότι εφαρμόζουμε πολύ λίγο φιλτράρισμα. Από την άλλη μεριά, αν το  $k$  είναι μικρό, πολλοί όροι της SVD αφήνονται εκτός, οπότε το σφάλμα διαταραχών είναι επίσης μικρό, αλλά ταυτόχρονα σφάλμα κανονικοποίησης υπερμεγεθυνύεται. Είναι φανερό, λοιπόν, ότι ο σκοπός μας είναι να βρούμε τη «χρυσή τομή» ώστε να υπάρξει ισορροπία μεταξύ των όρων  $\Delta x_{bias}$  και  $\Delta x_{pert}$ , όπως φαίνεται στην εικόνα 5.1. Εδώ έχουμε χρησιμοποιήσει το πρόβλημα ελέγχου shaw (βλ. 3.3.1) με  $n = 20$  και  $\eta = 10^{-6}$  για να κάνουμε το κοινό γράφημα των σφαλμάτων κανονικοποίησης και διαταραχών ως συναρτήσεις του  $k$ . Η ισορροπία φαίνεται να αποκαθίσταται για  $k = 10$ .

Ακριβώς το ίδιο ισχύει για την επιλογή της παραμέτρου κανονικοποίησης Tikhonov  $\lambda$ . Αν το  $\lambda$  είναι πολύ μικρό τότε όλοι οι παράγοντες  $\phi_i^{[\lambda]}$  είναι κοντά στο 1 (ή ο πίνακας φίλτρου  $\Phi^{[\lambda]}$  είναι κοντά στον  $I$ ) και το σφάλμα κανονικοποίησης είναι μικρό, ενώ το σφάλμα διαταραχής είναι μεγάλο. Το αντίθετο συμβαίνει αν το  $\lambda$  είναι μεγάλο, διότι τότε το μεγάλο φιλτράρισμα επιτρέπει στο σφάλμα διαταραχής να είναι μικρό αλλά το σφάλμα κανονικοποίησης μεγάλο.

Ας αναλύσουμε περαιτέρω τη συμπεριφορά της κανονικοποιημένης λύσης καθώς αλλάζει η παράμετρος κανονικοποίησης. Για απλότητα θα περιοριστούμε στις λύσεις TSVD, όπου έχουμε ήδη δει ότι όσο το  $k$  αυξάνεται, η λύση οδηγείται από υπερεξομάλυνση σε υποεξομάλυνση. Θα δούμε ότι αυτή η συμπεριφορά, όπως διαισθητικά περιμέναμε, είναι στενά συνδεδεμένη με τη συμπεριφορά των σφαλμάτων κανονικοποίησης και διαταραχών.

Ως συνήθως, υποθέτουμε ότι ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard, οπότε οι ποσότητες  $v_i^T b$  φθίνουν σε μέγεθος, κατά μέσο όρο, έως ότου φτάσουν σε ένα επίπεδο, στο οποίο σταθεροποιούνται και καθορίζεται από την τυπική απόκλιση  $\eta$  του θορύβου (βλ. και εξ. 3.6.10). Έστω  $k_\eta$  ο δείκτης που διακρίνει τη μετάβαση μεταξύ φθίνοντων και σταθερών όρων  $|v_i^T b|$ . Λόγω της διακριτής συνθήκης Picard, οι όροι  $\frac{|v_i^T b|}{\sigma_i}$  φθίνουν επίσης, κατά μέσο όρο,  $\forall i < k_n$ .

Χρησιμοποιούμε, τώρα, αυτή τη συμπεριφορά στην ανάλυση της νόρμας της λύσης και τη σχέση 4.6.1 για να επιτύχουμε τις παρακάτω (χονδρικές) εκτιμήσεις. Πρέπει να διακρίνουμε τις περιπτώσεις για  $k < k_\eta$  και  $k > k_\eta$

$$k < k_\eta : \|x_k\|_2^2 \approx \sum_{i=1}^k \left( \frac{v_i^T b^{exact}}{\sigma_i} \right)^2,$$

$$k > k_\eta : \|x_k\|_2^2 \approx \sum_{i=1}^{k_\eta} \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 + \sum_{i=k_\eta+1}^k \left( \frac{\eta}{\sigma_i} \right)^2 \approx \|x^{exact}\|_2^2 + \eta^2 \sum_{i=k_\eta+1}^k \sigma_i^{-2}.$$

Ο δείκτης  $k = k_\eta$  σηματοδοτεί τη μετάβαση από το ένα είδος συμπεριφοράς στο άλλο.

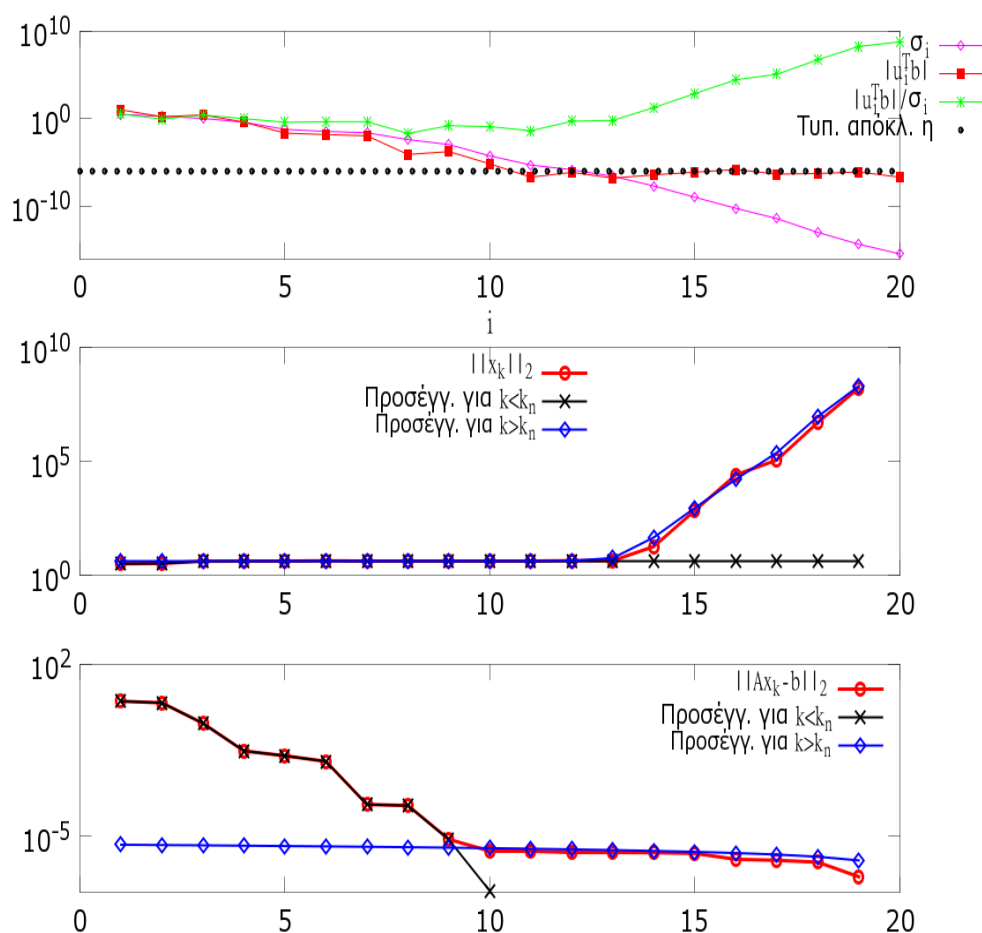
Με παρόμοιο τρόπο και χρήση της 4.6.2 παίρνουμε εκτιμήσεις για τη νόρμα υπολοίπου, διακρίνοντας πάλι περιπτώσεις για το  $k$

$$k < k_\eta \quad \|Ax_k - b\|_2^2 \approx \sum_{k+1}^{k_\eta} (v_i^T b)^2 + (n - k_\eta)\eta^2 \approx \sum_{k+1}^{k_\eta} (v_i^T b^{exact})^2$$

$$k > k_\eta : \|Ax_k - b\|_2^2 \approx (n - k)\eta^2.$$

Συμπεραίνουμε ότι για  $k < k_\eta$  (υπερεξομάλυνση), η νόρμα υπολοίπου μειώνεται σταθερά, ενώ για  $k > k_\eta$  (υποεξομάλυνση) μειώνεται με πολύ πιο αργό ρυθμό. Και πάλι η μετάβαση από το ένα είδος συμπεριφοράς στο άλλο σημειώνεται στο  $k = k_\eta$  όταν το σφάλματα κανονικοποίησης και διαταραχών βρίσκονται σε ισορροπία. Η εικόνα 5.2 δείχνει την ποιότητα αυτών των εκτιμήσεων για το πρόβλημα ελέγχου shaw ( $n = 64$ ,  $\eta = 10^{-6}$ ). Πάνω δεξιά γράφημα βρίσκεται το γράφημα Picard για αυτό το πρόβλημα όπου έχει σημειωθεί το επίπεδο του θορύβου (τυπική απόκλιση  $\eta$ ). Στα γραφήματα στη μέση και κάτω εικονογραφούνται οι πρωτόστερες εκτιμήσεις για  $k < k_\eta$  και  $k > k_\eta$  ταυτόχρονα με τα γραφήματα της νόρμας λύσης και της νόρμας υπολοίπου. Επιπλέον, μία εποπτεία των πρώτων 13 λύσεων TSVD δίνεται από το γράφημα στην εικόνα 5.3.

Είναι φανερό ότι μία καλή τιμή της παραμέτρου της παραμέτρου αποκοπής είναι  $k = k_\eta$ , για την οποία εξάγουμε όλους τους όρους της SVD για τους οποίους το «σήμα» επικρατεί έναντι του θορύβου, δηλ.  $|v_i^T b| > \eta$ . Επομένως για το υπολογισμό μίας προσέγγισης του  $k_\eta$ , θα πρέπει να εντοπίσουμε το σημείο μετάβασης στην νόρμα της λύσης και στην νόρμα υπολοίπου. Δυστυχώς, η αυτοματοποιημένη εύρεση ενός τέτοιου σημείου δεν είναι εύκολη υπόθεση, διότι θα πρέπει να ληφθούν υπόψη πολλοί παράγοντες, όπως η κλιμακοποίηση και ο πραγματικός ρυθμός απόσβεσης των ιδιάζουσων τιμών και των όρων  $v_i^T b$ . Για τον ίδιο λόγο, είναι αδύνατο να σχεδιαστεί μια εκ των προτέρων τεχνική επιλογής της παραμέτρου κανονικοποίησης.



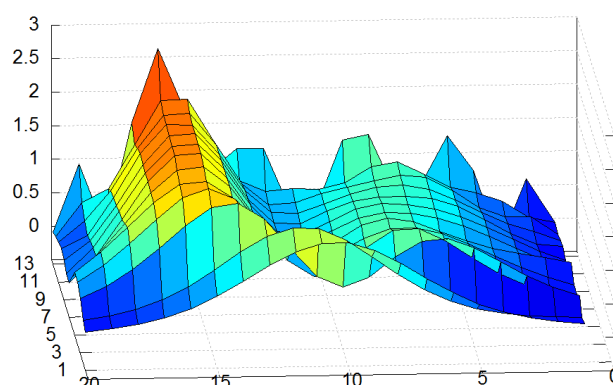
Εικόνα 5.2: Πάνω: Γράφημα Picard για το πρόβλημα ελέγχου shaw ( $n = 20$ ), όπου έχει σημειωθεί το επίπεδο του θορύβου ( $\eta = 10^{-6}$ ). Μέση: Η νόρμα της λύσης TSVD  $\|x_k\|_2$  και δύο εκτιμήσεις της για  $k < k_\eta$  και  $k > k_\eta$ . Κάτω: Η αντίστοιχη νόρμα υπολοίπου  $\|Ax_k - b\|_2$  και οι εκτιμήσεις της.

## 5.2 Η Αρχή της Ασυμφωνίας

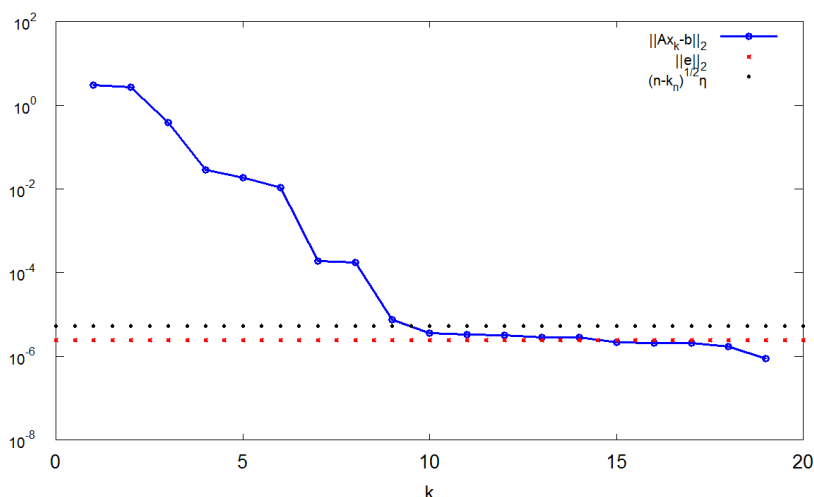
Αντί για τον εντοπισμό της παραμέτρου  $k = k_\eta$  μέσω μελέτης των όρων SVD - δεξιού μέλους, μπορούμε να επιλέξουμε τη νόρμα υπολοίπου έτσι ώστε να ισούται με  $(n - k_\eta)^{1/2}\eta$ , το οποίο στην ιδανική περίπτωση συμβαίνει για  $k = k_\eta$ . Ωστόσο, υπάρχουν δύο μειονεκτήματα: το  $k_\eta$  εμφανίζεται αναλυτικά στον τύπο και ακόμα και στην περίπτωση που συμβεί να έχουμε μία εκτίμησή του  $(n - k_\eta)^{1/2}\eta$ , τότε αυτό το κριτήριο επιλογής του  $k$  είναι πολύ ευαίσθητο στην ποιότητα της εκτίμησης. Αντ' αυτού μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μία ελαφρώς μεγαλύτερη ποσότητα που είναι πιο εύκολα προσβάσιμη, δηλ. την μέση τιμή της νόρμα διαταραχής  $\mathcal{E}[\|e\|_2] = n^{1/2}\eta$  (βλ. 2η από τις εξ. 3.6.4). Η εικόνα 5.4 δείχνει αυτές τις δύο επιλογές. Μία ακόμα ασφαλέστερη επιλογή είναι να συμπεριλάβουμε ένα «παράγοντα ασφάλειας»  $\beta_{dp}$  π.χ. ίσο με 2 και να ορίσουμε το κατώφλι  $\beta_{dp}\|e\|_2$  για τη νόρμα υπολοίπου.

Αυτή η μέθοδος καλείται **αρχή της ασυμφωνίας**. Το όνομά της οφείλεται στο ότι υποδεικνύει να επιλέξουμε την παράμετρο  $k$  έτσι ώστε η νόρμα υπολοίπου να ισούται με την «ασυμφωνία» στα δεδομένα, μετρούμενη από την ποσότητα  $\beta_{dp}\|e\|_2$ . Σπανίως μπορεί να ικανοποιηθεί η ισότητα, οπότε αντ' αυτού επιλέγουμε το μεγαλύτερο  $k$  τέτοιο ώστε  $\|Ax_k - b\|_2 \geq \beta_{dp}\|e\|_2$ :

$$\text{Επίλεξε } k = k_{dp} \text{ τέτοιο ώστε } \|Ax_k - b\|_2 \geq \beta_{dp}\|e\|_2 \geq \|Ax_{k+1} - b\|_2. \quad (5.2.1)$$



Εικόνα 5.3: Τρισδιάστατο γράφημα των πρώτων 13 λύσεων TSVD για το πρόβλημα ελέγχου shaw. Είναι φανερό ότι συμπεριλαμβάνοντας και το 13ο όρο στη λύση η λύση οδηγείται σε υποεξομάλυνση (το  $\Delta x_{pert}$  μεγαλώνει και καταστρέφει τη λύση.)



Εικόνα 5.4: Εικονογράφηση της αρχής της ασυμφωνίας. Η επιλογή  $\|Ax_k - b\|_2 \approx (n - k_n)^{1/2}\eta$  οδηγεί σε μεγάλη τιμή της παραμέτρου αποκοπής  $k$ , ενώ η πιο συντηρητική επιλογή  $\|Ax_k - b\|_2 \approx \|e\|_2$  οδηγεί σε καλύτερη τιμή του  $k$ .

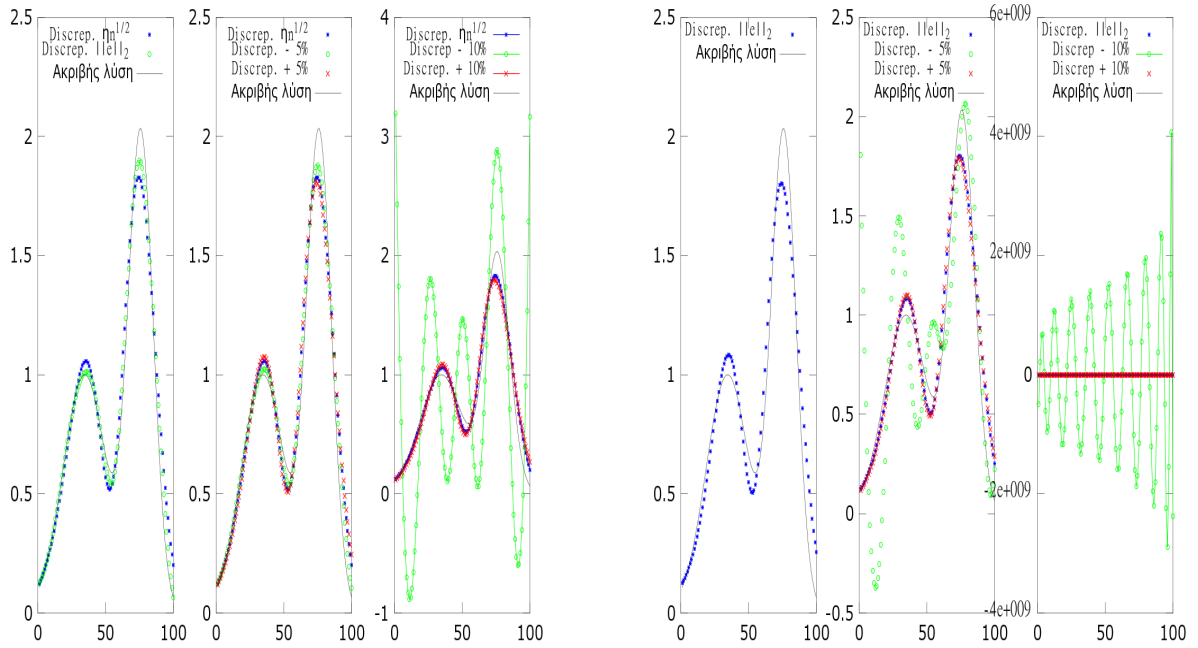
Η ίδια στρατηγική ακολουθείται, βεβαίως, και τις λύσεις Tikhonov, όπου τη θέση του  $x_k$  παίρνει το  $x_\lambda$  και εδώ μπορεί να επιτευχθεί η ισότητα:

$$\text{Επιλέξε } \lambda = \lambda_{dp} \text{ τέτοιο ώστε } \|Ax_\lambda - b\|_2 = \beta_{dp}\|e\|_2. \quad (5.2.2)$$

Και στις δύο περιπτώσεις υπάρχει μοναδική λύση διότι η νόρμα υπολοίπου είναι μονότονη συνάρτηση του  $k$  ή  $\lambda$ .

Λόγω της απλότητάς της, η αρχή της ασυμφωνίας είναι μία προσφιλή τεχνική επιλογής παραμέτρου σε θεωρητικές μελέτες μεθόδων κανονικοποίησης, όπως για παράδειγμα για να δειχθεί ότι η κανονικοποιημένη λύση συγκλίνει στην ακριβή λύση όταν  $\|e\|_2 \rightarrow 0$ . Επιπλέον το μεγάλο υπολογιστικό ατού αυτής της τεχνικής είναι ότι χρειάζεται μόνο έναν αποτελεσματικό αλγόριθμο για την εύρεση ρίζας για το πρόβλημα 5.2.2 (π.χ. μέθοδος Newton-Raphson). Για την κανονικοποίηση Tikhonov, η παράγωγος του  $\|Ax_\lambda - b\|_2$  ως προς  $\lambda$  μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση  $\rho' = -\lambda^2 \xi'$  (βλ. εξ. 4.6.6) και με χρήση μίας τεχνικής υπολογισμού της παραγώγου  $\xi'$  που θα περιγράψουμε στην επόμενη υποενότητα.

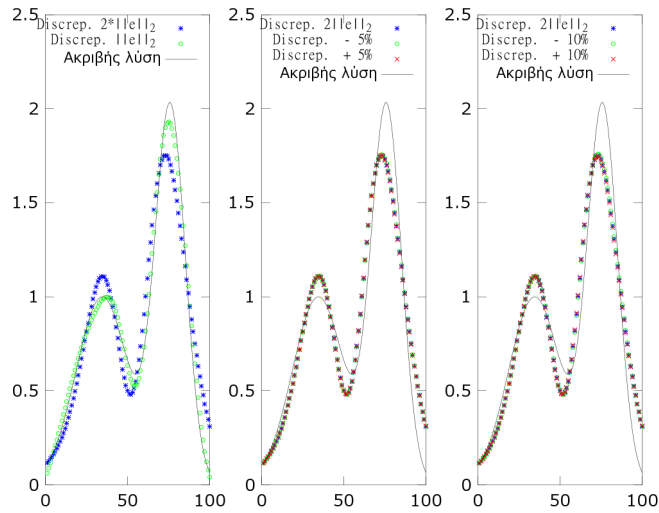
## 5.2. Η Αρχή της Ασυμφωνίας (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)



Εικόνα 5.5: Αριστερή τριάδα γραφημάτων: Επίδειξη της ευαισθησίας της αρχής της ασυμφωνίας για το πρόβλημα ελέγχου shaw, όπου έχει θεωρηθεί  $\|Ax_k - b\|_2 = \eta n^{1/2}$ . Η ανοχή που παρατηρείται, κατά μέσο όρο για  $\eta n^{1/2} \pm 5\%$  δεν είναι εγγυημένη επαναλαμβάνοντας το αριθμητικό πείραμα και σπανίζει για  $\eta n^{1/2} \pm 10\%$ . Δεξιά τριάδα γραφημάτων: Επίδειξη της ευαισθησίας της αρχής της ασυμφωνίας για το ίδιο πρόβλημα, όπου έχει θεωρηθεί  $\|Ax_k - b\|_2 = \|e\|_2$ . Αυτό γράφημα είναι επεικλής αποτύπωση της αλήθειας, διότι πολύ συχνά η λύση, κυρίως για μία υποεκτίμηση (ακόμα και κατά 5%) του  $\|e\|_2$ , καταστρέφεται τελείως.

Το πιο βασικό μειονέκτημα στην αρχή της ασυμφωνίας είναι ότι συχνά δε γνωρίζουμε το  $\|e\|_2$  (ή το  $\eta$ ) επακριβώς και πρέπει να χρησιμοποιούμε εκτιμήσεις του(ς). Δυστυχώς, όμως, η ποιότητα της υπολογιστικής κανονικοποιημένης παραμέτρου  $k_{dp}$  ή  $\lambda_{dp}$  είναι πολύ ευαίσθητη στην ακρίβεια του  $\|e\|_2$  και μάλιστα μία πολύ μικρή εκτίμηση μπορεί να οδηγήσει σε δραματική υποεξομάλυνση της λύσης (μεγάλο  $k$  ή μικρό  $\lambda$ ). Επιπλέον, η παράμετρος κανονικοποίησης  $\lambda_{dp}$ , που επιλέγεται από την αρχή της ασυμφωνίας, αντιστοιχεί στο σημείο, όπου η καμπύλη  $L$  τέμνει την κατακόρυφη ευθεία που βρίσκεται στο  $\|Ax_\lambda - b\|_2 = \beta_{dp} \|e\|_2$ . Ας θυμηθούμε, όμως ότι το «σχεδόν κατακόρυφο» μέρος της βρίσκεται στο  $\|Ax_\lambda - b\|_2 \approx \|e\|_2$ . Αυτό σημαίνει ότι μία υποεκτίμηση της νόρμας του σφάλματος στην αρχή της ασυμφωνίας θα οδηγήσει την τομή της καμπύλης  $L$  με την κατακόρυφη ευθεία σε ένα σημείο με μεγάλη νόρμα λύσης (δηλ. λύση με υποεξομάλυνση). Ακόμα και μία μικρή υποεκτίμηση της νόρμας του σφάλματος μπορεί να έχει μεγάλη επίδραση στην κανονικοποιημένη λύση, καθιστώντας την αρχή της ασυμφωνίας σχετικά επικίνδυνη τεχνική για πραγματικά δεδομένα.

Η εικόνα 5.5 είναι μία προσομοίωση της κατάστασης, όπου μόνο μία χονδρική εκτίμηση του σφάλματος είναι διαθέσιμη. Συγκεκριμένα χρησιμοποιούμε ως παράγοντα ασφάλειας  $\beta_{dp} = 1$  και κάνουμε τα γραφήματα των λύσεων ταυτόχρονα με την ακριβή λύση για το πρόβλημα ελέγχου shaw με  $n = 100$  και  $\eta = 10^{-2}$ . Ειδικότερα στην αριστερή τριάδα γραφημάτων φαίνονται οι λύσεις όπου το δεξί μέλος της εξ. 5.2.2 είναι τη μία φορά το  $\|e\|_2$  και την άλλη το  $\eta n^{1/2}$ , στο μεσαίο και δεξί γράφημα βλέπουμε τις λύσεις που προκύπτουν όταν αυξομειώνουμε κατά  $\pm 5\%$  και  $\pm 10\%$  το  $\eta n^{1/2}$  αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι στην αυξομείωση  $\pm 5\%$  (μέση), η λύσεις μένουν ανεπηρέαστες, κάτι το οποίο δε συμβαίνει για αυξομείωση  $\pm 10\%$ , όπου η λύσεις απέχουν πολύ από τις προηγούμενες. Επανάληψη του ίδιου αριθμητικού πειράματος (βλ και εικ. 5.7), με διαφορετική νόρμα σφάλματος  $\|e\|_2$  (αλλά ίδιο  $\eta$ ) έχει δείξει ότι η ανοχή που δείχνει το γράφημα ακόμα και στο μεσαίο γράφημα είναι φαινομενική (περίπου στο 50% των πειραμάτων οι λύσεις απέχουν δραματικά ειδικά στην περίπτωση που έχουμε υποεκτίμηση). Η υπερεκτίμηση της νόρμας σφάλματος φαίνεται να μην δημιουργεί πρόβλημα. Σημειώνουμε ότι η βέλτιστη περίπτωση (όπου και τα 2 γραφήματα απορροφούν τις αυξομειώσεις) απαντάται μόνο για  $\|e\|_2 \lesssim 0.089$ .



Εικόνα 5.6: Επίδειξη της ευαισθησίας της αρχής της ασυμφωνίας για το πρόβλημα ελέγχου shaw, όπου έχει θεωρηθεί  $\|Ax_\lambda - b\|_2 = \eta n^{1/2}$  με παράγοντα ασφάλειας  $\beta_{dp} = 2$ . Μετά από επαναλήψεις του πειράματος για διαφορετικά  $\|e\|_2$  παρατηρείται ότι αυτό το γράφημα είναι ενδεικτικό της συμπεριφοράς που εικονίζεται: Υπάρχει σχετική «απορρόφηση» των διαταραχών του σφάλματος στις διακυμάνσεις κατά  $\pm 5\%$  ή  $\pm 10\%$ .

Ακριβώς όμοια, στη δεξιά τριάδα γραφημάτων στην εικόνα 5.5 εικονίζονται οι λύσεις με αυξομείωση  $\pm 5\%$  και  $\pm 10\%$  του  $\|e\|_2$  αυτή τη φορά, όπου εδώ έχουμε χρησιμοποιήσει διαφορετική τιμή της νόρμας σφάλματος. Παρατηρούμε ότι στο μεσαίο γράφημα υπάρχει περιστασιακά κάποια ανοχή η οποία όμως δε διατηρείται γενικώς ούτε στην περίπτωση της «μικρής» υποεκτίμησης του σφάλματος κατά 5%. Επαναλαμβάνοντας για διαφορετικές τιμές του  $\|e\|_2$  παρατηρούμε ότι, όπως πράγματι φαίνεται συγκρίνοντας τα μεσαία γραφήματα των δύο τριάδων στην εικόνα 5.5, στην περίπτωση που το «δεξί μέλος» της 5.2.2 είναι  $\eta n^{1/2}$ , οι λύσεις δείχνουν περίπου 2 φορές καλύτερη ανοχή στην αυξομείωση κατά  $\pm 5\%$  από ότι για δεξί μέλος τη νόρμα  $\|e\|_2$ . Ωστόσο και τις δύο περιπτώσεις, στην περαιτέρω διαταραχή του σφάλματος  $> 5\%$  η λύσεις δεν έχουν καλή τύχη, κάτι το οποίο είναι ενδεικτική συμπεριφορά της μεγάλης ευαισθησίας της αρχής της ασυμφωνίας.

Ας δούμε τώρα πως συμπεριφέρεται το γράφημα αν εξοπλιστούμε με έναν παράγοντα ασφάλειας. Χρησιμοποιώντας παράγοντα ασφάλειας  $\beta_{dp} = 2$  παρατηρούμε στην εικόνα 5.6 ότι οι λύσεις μένουν «ανέπαφες» μετά την εφαρμογή υποεκτίμησης ή υπερεκτίμησης της νόρμας σφάλματος κατά 5% ή 10%. Επιπλέον τα σχήματα της εικόνας 5.7 δείχνουν παράλληλη εφαρμογή όλου του πειράματος της εικόνας 5.5, για κοινό  $\|e\|_2$  (αλλά διαφορετικό πιθανόν από αυτά που χρησιμοποιήθηκαν στην εικόνα 5.5): Η άνω τριάδα και η μεσαία τριάδα αφορούν την αυξομείωση του  $\eta n^{1/2}$  και  $\|e\|_2$  αντίστοιχα με παράγοντα ασφάλειας 1 και η τρίτη αφορά την αυξομείωση του  $\|e\|_2$  με  $\beta_{dp} = 2$ .

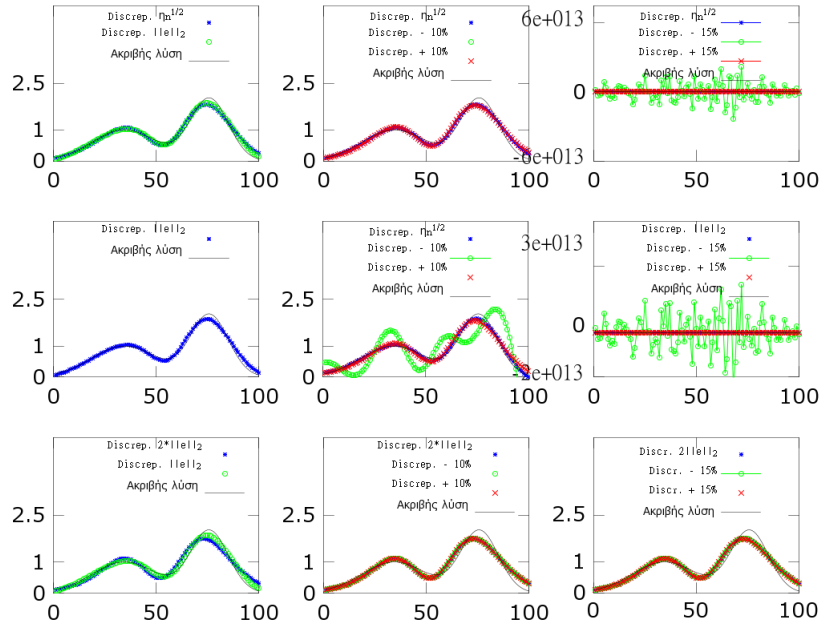
Για την εύρεση λύσεων μέσω του κριτηρίου της αρχής της ασυμφωνίας χρησιμοποιήθηκε η συνάρτηση *discrep* από το προγραμματιστικό πακέτο *RT*. Αυτή η συνάρτηση παίρνει ως ορίσματα την SVD ( $U, \Sigma, V$ ), το (θορυβώδες) δεξί μέλος  $b$  και τον όρο ασυμφωνίας ( $\delta$ ) (προαιρετικά και μια αρχική εκτίμηση της λύσης  $x_0$ ) και δίνει μία προσεγγίση της λύσης  $x_\delta$  και την κατάλληλη παράμετρο κανονικοποίησης  $\lambda$ . Για τη επίλυση της εξίσωσης  $\|b - Ax\|^2 - \delta^2 = 0$  χρησιμοποιεί τη μέθοδο Newton-Raphson.

### 5.3 Το Κριτήριο της Καμπύλης L

Η συνολική συμπεριφορά της καμπύλης L από την υποενότητα 4.6 είναι στενά συνδεδεμένη με το μέγεθος των σφαλμάτων κανονικοποίησης και διαταραχών,  $\Delta x_{bias}$  και  $\Delta x_{pert}$  αντίστοιχα. Επομένως, μπορούμε εξάγουμε πληροφορίες για την εξάρτηση της λύσης από την παράμετρο κανονικοποίησης μελετώντας την καμπύλη L. Για απλότητα, θεωρούμε εδώ την μέθοδο TSVD και θυμόμαστε ότι το  $k_\eta$  καταγράφει τη μετάβαση μεταξύ φθίνοντων και σταθερών όρων  $|u_i^T b|$ .

- Όταν το  $k$  είναι μικρότερο από το  $k_\eta$ , τότε το σφάλμα κανονικοποίησης επικρατεί στη λύση  $x_k$  και

### 5.3. Το Κριτήριο της Καμπύλης L (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)



Εικόνα 5.7: Παράλληλη εφαρμογή όλου του αριθμητικού πειράματος (εικόνες 5.5 και 5.6), για το ίδιο  $\|e\|_2$ : Η άνω τριάδα και η μεσαία τριάδα αφορούν την αυξομείωση του  $\eta^{1/2}$  και  $\|e\|_2$  αντίστοιχα με παράγοντα ασφάλειας 1 και η τρίτη αφορά την αυξομείωση του  $\|e\|_2$  με  $\beta_{dp} = 2$ . Κατά μέσο, παρατηρούμε ότι όταν το δεξί μέλος της 5.2.2 είναι το  $\eta^{1/2}$ , τότε υπάρχει μικρότερη ευαισθησία σε μικρές ή μεγαλύτερες υπερ/υποτιμήσεις από ότι το  $\|e\|_2$ . Γενικώς, ευστάθεια υπάρχει στις υπερτιμήσεις κατά 5% ή 10% για παράγοντα ασφάλειας 1 ή 2.

άρα η συνολική συμπεριφορά της νόρμας του καθορίζεται ως επί το πλείστον από το πόσους όρους SVD έχουμε συμπεριλάβει. Όσο λιγότερους όρους κρατάμε, τόσο μικρότερη είναι η νόρμα της λύσης  $\|x_k\|_2$  και τόσο μεγαλύτερο είναι η νόρμα υπολοίπου  $\|Ax_k - b\|_2$ . Χρησιμοποιώντας την ανάλυση της προηγούμενης υποενοτήτας (βλ. και εικ. 5.2), συμπεραίνουμε ότι αυτές οι νόρμες εξαρτώνται από το  $k$  κατά προσέγγιση όπως ακολουθεί:

- Η νόρμα της λύσης  $\|x_k\|_2$  είναι σχεδόν σταθερά που δίνεται από το  $\|x_{exact}\|_2$ , εκτός αν το  $k$  είναι πολύ μικρό, όπου το  $\|x_k\|_2$  γίνεται μικρότερο καθώς  $k \rightarrow 0$ .
- Η νόρμα υπολοίπου  $\|Ax_k - b\|_2$  αυξάνεται καθώς  $k \rightarrow 0$ , έως ότου πάρει τη μέγιστη τιμή του  $\|b\|_2$  για  $k = 0$ .
- Όταν το  $k$  είναι μεγαλύτερο από το  $k_\eta$ , τότε το σφάλμα διαταραχών επικρατεί στη λύση  $x_k$  και η συνολική συμπεριφορά της νόρμας του καθορίζεται από αυτό το  $k$ . Τώρα, οι νόρμες έχουν την ακόλουθη εξάρτηση από το  $k$ :
  - Η νόρμα της λύσης  $\|x_k\|_2$  αυξάνει (ενίοτε δραματικά) όσο αυξάνει το  $k$ , διότι ολόένα και συμπεριλαμβάνονται περισσότεροι και μεγαλύτερου σφάλματος όροι.
  - Η νόρμα υπολοίπου  $\|Ax_k - b\|_2$ , από την άλλη μεριά, μένει σχεδόν σταθερή στην προσεγγιστική τιμή  $\|e\|_2$ , εκτός από την περίπτωση που  $k \approx n$ .

Όπως έχουμε ήδη τονίσει, και φαίνεται από τα παραπάνω, η καμπύλη L πρέπει να έχει 2 διαφορετικά διακριτά μέρη, ένα σχεδόν κατακόρυφο και ένα σχεδόν οριζόντιο, τα οποία φαίνονται καλύτερα όταν και οι δύο άξονες τεθούν υπό λογαριθμική κλίμακα. Μία σημαντική παρατήρηση είναι ότι η καμπύλη L θα πρέπει να περιέχει και το σημείο μετάβασης μεταξύ των δύο διακριτών μερών της. Πολύ συχνά, η μετάβαση αυτή συμβαίνει σε μία μικρή περιοχή, και η καμπύλη L έχει μία ευδιάκριτη γωνία μεταξύ των δύο μερών.

### 5.3. Το Κριτήριο της Καμπύλης L (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)

Επιπρόσθετα, η μεταβατική περιοχή συνδέεται με τις τιμές του  $\lambda$  ή  $k$ , όπου το επικρατόν σφάλμα αλλάζει από σφαλμά κανονικοποίησης σε σφάλμα διαταραχών, ή αντίστροφα.

Το κλειδί στην ιδέα του **κριτηρίου της καμπύλης L** είναι να διαλέξουμε την παράμετρο  $\lambda$ , έτσι ώστε να αντιστοιχεί στη γωνία της καμπύλης L, με την ελπίδα ότι αυτή η τιμή θα μας παρέξει μία καλή ισορροπία των σφαλμάτων κανονικοποίησης και διαταραχών. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η γραμμή επιχειρημάτων που ακολουθείται είναι εντελώς εμπειρική, παρά το ότι υποστηρίζεται με αρκετή ανάλυση. Αυτός είναι ο λόγος που αυτή η τεχνική χαρακτηρίζεται «δαισθητική».

Χρειαζόμαστε αρχικά ένα χρηστικό ορισμό της γωνίας ώστε να εντοπίζουμε αυτοματοποιημένα τη γωνία της καμπύλης L. Όσον αφορά την κανονικοποίηση Tikhonov, ένα φυσιολογικός ορισμός της γωνίας είναι το σημείο της καμπύλης L με τη μεγαλύτερη καμπυλότητα\*. Πρέπει να τονίσουμε ότι αυτό το μέγιστο θα πρέπει να βρεθεί στη διπλή λογαριθμική κλίμακα, δηλ. πρέπει να υπολογιστεί η καμπυλότητα  $\hat{c}$  της καμπύλης  $(\log(\|Ax_\lambda - b\|_2), \log\|x_\lambda\|_2)$ .

Σε αυτό το σημείο είναι προτιμότερο να θεωρήσουμε την καμπύλη L για τη μέθοδο Tikhonov. Συνεχίζοντας την ανάλυση από την υποενότητα 4.6, εισάγουμε τις ποσότητες

$$\hat{\xi} = \log\|x_\lambda\|_2^2 \quad \text{και} \quad \hat{\rho} = \log\|Ax_\lambda - b\|_2^2, \quad (5.3.1)$$

έτσι ώστε η καμπύλη L να δίνεται από  $(\frac{1}{2}\hat{\rho}, \frac{1}{2}\hat{\xi})$ . Αν ο τόνος (') χαρακτηρίζει την παράγωγο ως προς  $\lambda$  τότε έχουμε για τις πρώτες παραγώγους

$$\hat{\xi}' = \frac{\xi'}{\xi} \quad \text{και} \quad \hat{\rho}' = \frac{\rho'}{\rho}, \quad (5.3.2)$$

και για τις δεύτερες παραγώγους

$$\hat{\xi}'' = \frac{\xi''\xi - (\xi')^2}{\xi^2} \quad \text{και} \quad \hat{\rho}'' = \frac{\rho''\rho - (\rho')^2}{\rho^2}. \quad (5.3.3)$$

Αντικαθιστώντας αυτές τις σχέσεις στον ορισμό της καμπυλότητας,

$$\hat{c}_\lambda = 2 \frac{\hat{\rho}'\hat{\xi}'' - \hat{\rho}''\hat{\xi}'}{[(\hat{\rho}')^2 + (\hat{\xi}')^2]^{3/2}},$$

όπου το «2» προέκυψε από το ορισμό της καμπύλης L μέσω των  $\hat{\rho}$  και  $\hat{\xi}$ . Όπως προκύπτει με αντικατάσταση των σχέσεων 5.3.1, 5.3.3, και (4.6.6), (4.6.8) και πράξεις, η καμπυλότητα της καμπύλης L σε διπλή λογαριθμική κλίμακα μπορεί να εκφραστεί ως προς τις ποσότητες  $\xi$ ,  $\rho$  και  $\xi'$ :

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

Οι ποσότητες  $\xi = \|x_\lambda\|_2^2$  και  $\rho = \|Ax_\lambda - b\|_2^2$  είναι συχνά εύκολο να υπολογιστούν, άρα μένει να υποδειχθεί πώς να υπολογίσουμε το  $\xi'$ . Ακολουθώντας, χρησιμοποιούμε την SVD για να δείξουμε ότι αυτή η ποσότητα δίνεται από

$$\xi' = \frac{4}{\lambda} x_\lambda^T z_\lambda, \quad (5.3.4)$$

όπου το διάνυσμα  $z_\lambda$  δίνεται από

$$z_\lambda = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T (Ax_\lambda - b).$$

Επανονομάζουμε κάποιες ποσότητες χάριν απλότητας

$$K = A^T A = V \Sigma^2 V^T \quad \text{και} \quad M = A^T A + \lambda^2 I.$$

\* Η καμπυλότητα μίας παραμετρικής καμπύλης στην αναλυτική γεωμετρία εκφράζει το ρυθμό μεταβολή της κατεύθυνσης του (μοναδιαίου) εφαπτόμενου διανύσματος της καμπύλης. Τυχόντες μηδενισμοί της καμπυλότητας διαχωρίζουν τα κυρτά από τα κοίλα μέρη της καμπύλης, ενώ τα ακρότατα αντιπροσωπεύουν τις γωνίες της καμπύλης.

### 5.3. Το Κριτήριο της Καμπύλης L (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)

Αρχικά παρατηρούμε ότι η ποσότητα  $x_\lambda z_\lambda$  γράφεται ως εξής

$$x_\lambda^T z_\lambda = x_\lambda^T M^{-1} K x_\lambda - \|x_\lambda\|_2^2, \quad (5.3.5)$$

όπου έγινε χρήση της εξ. 4.4.3. Παρατηρούμε, τώρα ότι η σχέση 4.6.5 για την παράγωγο του  $\xi$  μπορεί να γραφτεί και ως εξής

$$\begin{aligned} \xi' &= \frac{4}{\lambda} \left[ \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]})^3 \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 - \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]})^2 \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 \right] \\ &= \frac{4}{\lambda} \left[ \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]})^3 \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2 - \|x_\lambda\|_2^2 \right], \end{aligned} \quad (5.3.6)$$

όπου αναγνωρίσαμε το δεύτερο άθροισμα στην αγκύλη ως το τετράγωνο της νόρμας του  $x_\lambda$  από την εξ. 4.6.3. Οπότε συγκρίνοντας τις σχέσεις (5.3.5) και (5.3.6), είναι φανερό ότι αρκεί να δειχθεί ότι

$$x_\lambda^T M^{-1} K x_\lambda = \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]})^3 \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2. \quad (5.3.7)$$

Η ποσότητα στο αριστερό μέλος της τελευταίας είναι μία τετραγωνική μορφή με πίνακα

$$\begin{aligned} M^{-1} K &= [I + \lambda^2 (A^T A)]^{-1} \\ &= [V \Sigma^{-2} \Sigma^2 V^T + \lambda^2 V \Sigma^{-2} V^T]^{-1} \\ &= V^T \Sigma^{-2} (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} V = V^T \Phi^{[\lambda]} V, \end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τον ορισμό του πίνακα  $\Phi^{[\lambda]}$  φίλτρου καθώς και τη σχέση  $(A^T A)^{-1} = (V \Sigma^2 V^T)^{-1} = V \Sigma^{-2} V^T$ . Οπότε τώρα η τετραγωνική μορφή γίνεται

$$x_\lambda^T M^{-1} K x_\lambda = (V^T x_\lambda)^T \Phi^{[\lambda]} V^T x_\lambda, \quad (5.3.8)$$

που είναι επίσης μία τετραγωνική μορφή με διαγώνιο πίνακα ( $\Phi^{[\lambda]}$ ).

Είναι γνωστό, ότι μία τετραγωνική μορφή  $y^T D y$  με διαγώνιο πίνακα  $D$  (διαγώνια στοιχεία  $d_k$ ,  $k = 1, \dots, n$ ) έχει την απλή έκφραση

$$y^T D y = \sum_{k=1}^n d_k y_k^2.$$

Επομένως, εφαρμόζοντας την τελευταία για  $y = V^T x_\lambda$  λαμβάνουμε διαδοχικά

$$\begin{aligned} (V^T x_\lambda)^T \Phi^{[\lambda]} V^T x_\lambda &= \sum_{k=1}^n \phi_k^{[\lambda]} [(V^T x_\lambda)_{(k)}]^2 && ((i): \text{η } i \text{ συνιστώσα του διανύσματος } V^T x_\lambda) \\ &= \sum_{k=1}^n \phi_k^{[\lambda]} (\nu_k^T \cdot x_\lambda)^2 \\ &= \sum_{k=1}^n \phi_k^{[\lambda]} \left[ \nu_k^T \sum_{j=1}^n \phi_j^{[\lambda]} \frac{v_j^T b}{\sigma_j} \nu_j^T \right]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (\phi_i^{[\lambda]})^3 \left( \frac{v_i^T b}{\sigma_i} \right)^2, \end{aligned}$$

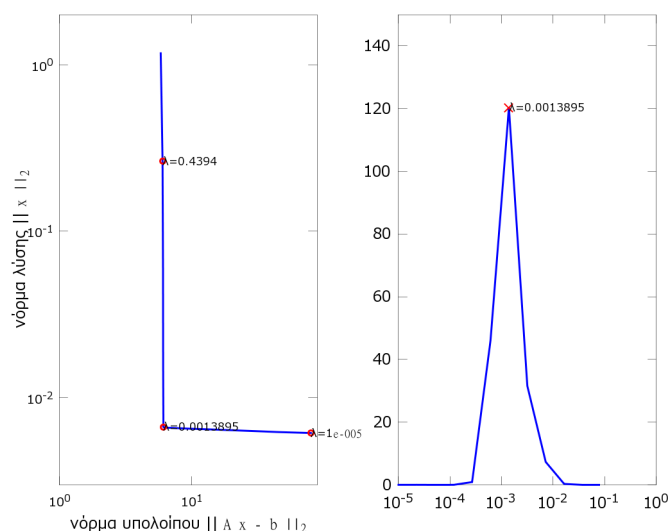
άρα πράγματι το  $\xi'$  μπορεί να πάρει τη μορφή 5.3.4.

Ανακαλώντας την εναλλακτική διατύπωση 4.4.2 του προβλήματος Tikhonov από την υποενότητα 4.4, βλέπουμε άμεσα ότι το  $z_\lambda$  είναι λύση του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων Tikhonov

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



### 5.3. Το Κριτήριο της Καμπύλης L (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)



Εικόνα 5.8: Η καμπύλη L και η αντίστοιχη καμπυλότητα για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. Η γωνία, που αντιστοιχεί στο σημείο μεγίστου της καμπυλότητας, έχει σημειωθεί με ένα κύκλο ( $\lambda = 0.0013895$ ).

Επομένως, το  $z_\lambda$  μπορεί να υπολογιστεί λύνοντας ένα νέο πρόβλημα Tikhonov με τον ίδιο πίνακα αλλά με δεξί μέλος το διάνυσμα υπολοίπου  $Ax_\lambda - b$ .

Το συμπέρασμα αυτής της ανάλυσης είναι ότι για κάθε  $\lambda$  μπορούμε να υπολογίσουμε την καμπυλότητα  $\hat{c}$ , έχοντας ένα μικρό παράπλευρο υπολογιστικό κόστος, και κατόπιν χρησιμοποιήσουμε την πιο προσφιλή μας ρουτίνα βελτιστοποίησης για να βρούμε την τιμή  $\lambda_L$  που μεγιστοποιεί την  $\hat{c}$ :

$$\text{Επίλεξε } \lambda = \lambda_L \text{ τέτοιο ώστε η καμπυλότητα } \hat{c}_\lambda \text{ να είναι μέγιστη.} \quad (5.3.9)$$

Στην εικόνα 5.8 φαίνεται μία καμπύλη L (αριστερά) και η αντίστοιχη καμπυλότητα (δεξιά) ως συνάρτηση του  $\lambda$ . Για τα γραφήματα έχουμε χρησιμοποιήσει το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας για  $n = 60$ ,  $\eta = 10^{-3}$ , και κανονικοποίηση Tikhonov για 15 παραμέτρους  $\lambda$  που ισαπέχουν λογαριθμικά από  $10^{-5}$  έως 10. Η γωνία της καμπύλης L που αντιστοιχεί στο σημείο μεγίστου της καμπυλότητας, έχει σημειωθεί με ένα κύκλο ( $\lambda = 0.0013895$ ). Το γράφημα της καμπυλότητας έγινε με τη βοηθητική συνάρτηση `lcfun` από το προγραμματιστικό πακέτο `RT`<sup>†</sup>.

Η παραπάνω ανάλυση δεν είναι άμεσα ισχύουσα για τη μέθοδο TSVD, διότι αυτή η μέθοδος παράγει ένα πεπερασμένο (μικρό) σύνολο λύσεων για  $k = 1, 2, \dots$  και κατά συνέπεια η αντίστοιχη «καμπύλη» L απαρτίζεται από πεπερασμένο (μικρό) αριθμό σημείων. Ωστόσο η ανάλυση και τα επιχειρήματά μας μεταφέρονται και σε αυτή τη περίπτωση και συχνά είναι λογικό να εντοπίζουμε την λύση TSVD στη «συνολική γωνία» της διακριτής καμπύλης L:

$$\text{Επίλεξε } k = k_L \text{ στη συνολική γωνία της διακριτής καμπύλης } L. \quad (5.3.10)$$

Είναι εύκολο να υπολογίσει κανείς τις γωνίες μεταξύ ευθύγραμμων τμημάτων μέσω μιας τριάδας σημείων της καμπύλης L και να ξεχωρίσουμε αυτή που είναι πιο κοντά στη γωνία  $\pi/2$ . Ωστόσο αυτή η απλή προσέγγιση του προβλήματος δεν αποτελεί εγγύηση ότι θα φέρει το επιθυμητό αποτέλεσμα στην πράξη, διότι οι διακριτές καμπύλες L έχουν συχνά πολλές μικρές γωνίες τοπικά που περιστασιακά συνδέονται με συστάδες σημείων της καμπύλης L. Αυτό είναι το κίνητρο για το οποίο το κριτήριο της καμπύλης L πρέπει να ειδικωθεί από τη οπτική γωνία της συνολικής γωνίας της καμπύλης L, ώστε να παρακαμφθούν οι τοπικές γωνίες. Ο τρόπος υπολογισμού αυτής τη γωνία δεν είναι τόσο άμεσος όσο φαίνεται. Ο αναγνώστης παραπέμπεται στα [CG02, HC01] για πρόσφατους αλγόριθμους.

Ολοκληρώσουμε αυτήν την υποενότητα για την καμπύλη L αναφέροντας κάποια πράγματα που πρέπει να προσέξουμε. Το εν λόγω κριτήριο είναι μία (καλή) εμπειρική τακτική και δεν υπάρχει εγγύηση

<sup>†</sup> Στην πραγματικότητα αυτή η συνάρτηση χρησιμοποιεί ως ορίσματα ένα διάνυσμα με τις παραμέτρους κανονικοποίησης, την αφελη λύση, τους όρους  $v_i^T b$  και τις ιδιάζουσες τιμές για να υπολογίσει την αρνητική καμπυλότητα ( $-\hat{c}$ ).

ότι οι λύσεις, που παράγουμε με τη χρήση του, θα είναι θα αποτελούν προϊόν καλού ισοζυγίου μεταξύ του σφαλμάτων κανονικοποίησης και διαταραχών. Ένα παράδειγμα, όπου το κριτήριο της καμπύλης  $L$  είναι πιθανό να αποτύχει είναι, όταν οι SVD όροι  $\nu_i^T x^{exact}$  της ακριβούς λύσης αποσβένουν πολύ γρήγορα προς το 0. Σε αυτή την περίπτωση, η ακριβής λύση  $x^{exact}$  θα παρουσιαστεί πολύ ομαλή, διότι επικρατούν τα πρώτα λίγα (και ομαλά) δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα  $\nu_i$ . Η γωνία της καμπύλης  $L$  βρίσκεται εκεί, όπου η νόρμα της λύσης αρχίζει να κυριαρχείται από τους θορυβώδεις όρους SVD και συχνά αυτό είναι ακριβώς το σημείο όπου αυτοί οι όροι μεγενθύνονται δραματικά. Όμως, για πολύ ομαλές λύσεις, αυτό συμβαίνει για μεγαλύτερο  $k$  όταν έχουμε συμπεριλάβει πολλούς θορυβώδεις όρους, και επομένως το  $\lambda_L$  οδηγεί σε μία λύση με υποεξομάλυνση.

Ένα άλλο παράδειγμα πιθανής αποτυχίας του κριτηρίου της καμπύλης εν $\Lambda$  όταν η αλλαγή από τη νόρμα υπολοίπου στη νόρμα λύσης είναι μικρή για δύο διαδοχικές τιμές του  $k$ . Και πάλι σε αυτή την περίπτωση, απαιτείται να συμπεριλάβουμε στη λύση πολλούς θορυβώδεις όρους, πρώτου η νόρμα της λύσης να αυξηθεί τόσο ώστε να φανεί η γωνία στην καμπύλη  $L$ . Δυστυχώς αυτή η συμπεριφορά είναι συνήθης σε προβλήματα μεγάλης κλίμακας.

## 5.4 Η Γενικευμένη Μέθοδος Διασταυρωμένης Επικύρωσης

Η τρίτη μέθοδος αντιπροσωπεύει μία διαφορετική προσέγγιση στην αναζήτηση της παραμέτρου κανονικοποίησης. Ο σκοπός εδώ είναι να βρούμε μία τιμή του  $\lambda$  ή του  $k$  τέτοια ώστε το  $Ax_\lambda$  ή το  $Ax_k$  να προβλέπει όσο το δυνατόν καλύτερα τα ακριβή δεδομένα  $b^{exact}$ . Είναι πιο εύκολη η εξαγωγή αποτελεσμάτων για την TSVD, ο πίνακας φίλτρου της οποίας θυμίζουμε ότι είναι

$$\Phi^{[k]} = \text{diag}[\underbrace{1, \dots, 1}_k, 0, \dots, 0] = \begin{bmatrix} I_k & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Τώρα, θεωρούμε τη διαφορά μεταξύ του  $b^{exact}$  και του  $Ax_k$ :

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

Συνεπώς, χρησιμοποιώντας ξανά την ανάλυση μέσω της SVD, η νόρμα του σφάλματος πρόβλεψης ικανοποιεί

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

Ας διακρίνουμε τις δύο περιπτώσεις για το  $k$ , ενθυμούμενοι ότι  $|v_i^T b^{exact}| < \eta$  για  $i > k_\eta$ :

$$\begin{aligned} k < k_\eta : \|Ax_k - b^{exact}\|_2^2 &\approx k\eta^2 + \sum_{i=k+1}^{k_\eta} (v_i^T b^{exact})^2 \\ k > k_\eta : \|Ax_k - b^{exact}\|_2^2 &\approx k\eta^2. \end{aligned}$$

Αυτή η ανάλυση δείχνει ότι για  $k < k_\eta$  η νόρμα της πρόβλεψης μειώνεται με την αύξηση του  $k$ , διότι, πηγαίνοντας από το  $k$  στο  $k+1$ , αντικαθιστούμε τον όρο  $v_k^T b^{exact}$  με το  $\eta$  (που είναι μικρότερο), ενώ για  $k > k_\eta$  η νόρμα αυξάνει με την αύξηση του  $k$ . Το ελάχιστο παρουσιάζεται κοντά στη μετάβαση, δηλ.  $k \approx k_\eta$ . Από τα παραπάνω διαφαίνεται ότι είναι λογικό να αναζητήσουμε για μία παράμετρο κανονικοποίησης που ελαχιστοποιεί το σφάλμα πρόβλεψης.

Βασικό ζήτημα που προκύπτει είναι το πώς να εκτιμήσουμε αυτή την παράμετρο για ένα πρόβλημα, όπου το  $b^{exact}$  δεν είναι διαθέσιμο. Η **διασταυρωμένη επικύρωση** (cross validation) είναι μία μέθοδος της στατιστικής, η οποία εδώ είναι μεγάλης χρηστικής αξίας. Στην cross validation, χωρίζουμε τα δεδομένα (εδώ το δεξί μέλος) σε δύο σύνολα και χρησιμοποιούμε το ένα από αυτά για το υπολογισμό λύσης, η οποία κατόπιν χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη στοιχείων του άλλου συνόλου. Για παράδειγμα, μπορούμε

να «παραλείψουμε» προσωρινά το  $i$ -οστό στοιχείο του  $b$  και να υπολογίσουμε τη λύση Tikhonov για το «μειωμένο» πρόβλημα

$$x_\lambda^{(i)} = \left( (A^{(i)})^T A^{(i)} + \lambda^2 I_{n-1} \right)^{-1} (A^{(i)})^T b^{(i)}, \quad (5.4.1)$$

όπου  $A^{(i)}$  και  $b^{(i)}$  είναι οι «συντομότερες» εκδόσεις των  $A$  και  $b$ , στις οποίες έχει παραληφθεί η  $i$  γραμμή και το  $i$  στοιχείο αντίστοιχα. Μετά την επίλυση του προβλήματος 5.4.1, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το  $x_\lambda$  για να προβλέψουμε το στοιχείο  $b_i$  που αφέρθηκε εκτός (μέσω της απουσίας του από τις γραμμές του  $A$ ), από την έκφραση  $A(i, :)x_\lambda^{(i)}$ . Τότε, ο απώτερος σκοπός είναι να βρεθεί παράμετρος κανονικοποίησης  $\lambda$  τέτοια ώστε να ελαχιστοποιεί τα σφάλματα πρόβλεψης για όλα τα δεδομένα:

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

Αυτή η διαδικασία μοιάζει πολύ επίπονη υπολογιστικά, όμως όπως μπορεί να αποδειχθεί (εδώ αποφεύγονται οι τεχνικές λεπτομέρειες), το παραπάνω πρόβλημα ελαχιστοποίησης μπορεί να αντικατασταθεί από

$$\min_\lambda \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left( \frac{A(i, :)x_\lambda - b_i}{1 - h_{ii}} \right)^2, \quad (5.4.2)$$

όπου  $x_\lambda$  είναι η λύση Tikhonov, και  $h_{ii}$  είναι τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα  $A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T$ .

Το πρόβλημα ελαχιστοποίησης 5.4.2 είναι πολύ πιο εύκολο στη χρήση, διότι εμπλέκεται μόνο ένα πρόβλημα πρόβλημα Tikhonov. Υπάρχει βεβαίως ένα μειονέκτημα: τα διαγώνια στοιχεία  $h_{ii}$  αλλάζουν αν εναλλάζουμε τις γραμμές του  $A$ , επομένως η λύση εξαρτάται από τη σειρά που έχουν τοποθετηθεί τα δεδομένα, ενώ στην πραγματικότητα δεν υπάρχει φυσικός λόγος που να επιβάλλει τη συγκεκριμένη διάταξη που έχει επιλεχθεί.

Αυτό το μειονέκτημα έρχεται να παρακάμψει η **γενικευμένη μέθοδος διασταυρωμένης επιχώρωσης** (GCV, generalized cross validation) που αντικαθιστά κάθε διαγώνιο στοιχείο  $h_{ii}$  με το μέσο όρο των διαγώνιων στοιχείων. Οπότε, το απλουστευμένο πρόβλημα 5.4.2 παίρνει τη μορφή

$$\min_\lambda \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left( \frac{A(i, :)x_\lambda - b_i}{1 - \text{trace}(A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T)/m} \right)^2. \quad (5.4.3)$$

Αναγνωρίζουμε το άνωτι άθροισμα σαν την τετραγωνισμένη νόρμα υπολοίπου  $\|Ax_\lambda - b\|_2^2$  διηρημένη με  $(1 - \text{trace}(A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T)/m)^2$ . Εισάγοντας την SVD του  $A$ , ο όρος του ίχνους γίνεται

$$\begin{aligned} \text{trace}(A(A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T) &= \text{trace}(U \Sigma V^T (V \Sigma^2 V^T + V V^T \lambda^2)^{-1} V \Sigma U^T) \\ &= \text{trace}(U \Sigma^2 (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} U^T) = \text{trace}(U \Phi^{[\lambda]} U^T) \\ &= \text{trace}(\Phi^{[\lambda]}) = \sum_{i=1}^m \phi_i^{[\lambda]}. \end{aligned}$$

Οπότε αμελώντας έναν παράγοντα  $m$ , η μέθοδος επιλογής παραμέτρου GCV παίρνει την ακόλουθη μορφή:

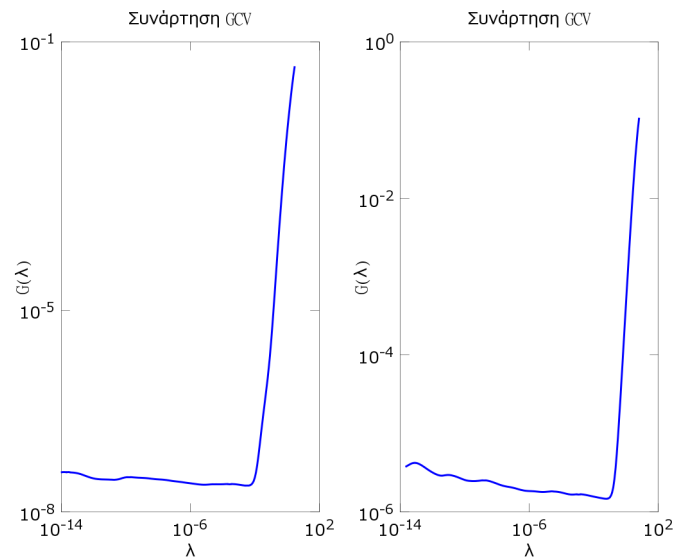
$$\text{Επίλεξε } \lambda = \lambda_{GCV} \text{ σαν ελαχιστοποιητή του } G(\lambda) = \frac{\|Ax_\lambda - b\|_2^2}{\left(m - \sum_{i=1}^n \phi_i^{[\lambda]}\right)^2}. \quad (5.4.4)$$

Για τη μέθοδο TSVD, ο όρος του ίχνους είναι πολύ πιο εύκολος,  $\text{trace}(\Phi^{[k]}) = k$ , και η μέθοδος GCV συνοψίζεται στο εξής

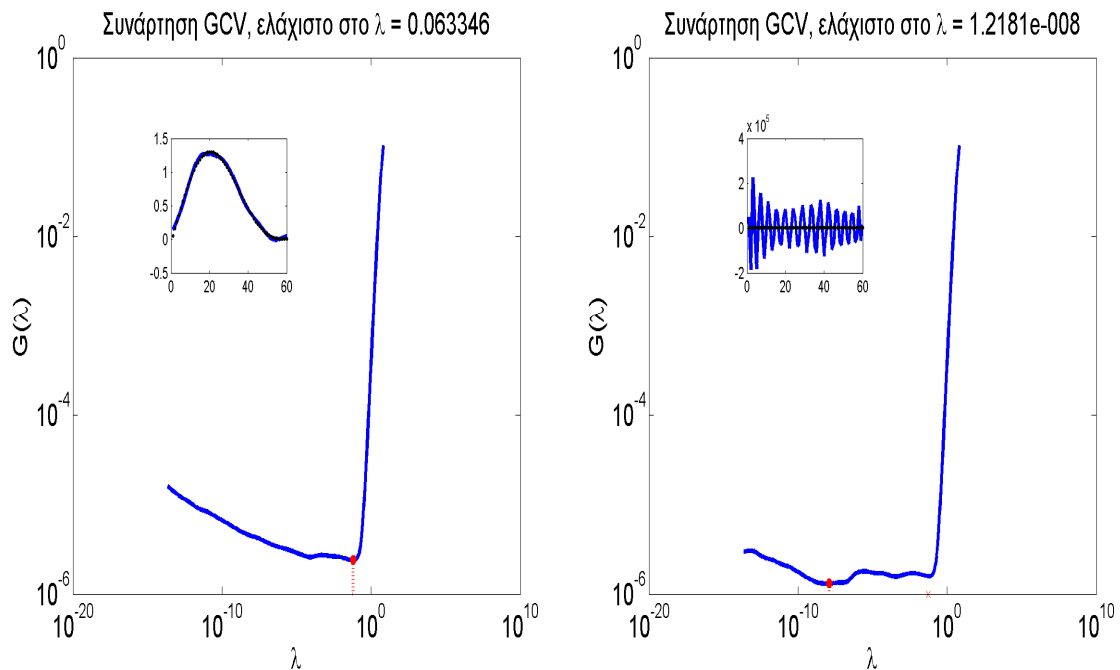
$$\text{Επίλεξε } k = k_{GCV} \text{ σαν ελαχιστοποιητή του } G(\lambda) = \frac{\|Ax_k - b\|_2^2}{(m - k)^2}. \quad (5.4.5)$$

Η εμπειρία έχει δείξει ότι η μέθοδος GCV είναι δυναμική και ακριβής, αν περιοριστούμε σε λευκό θόρυβο, διότι αυτή η υπόθεση διέπει την εξαγωγή της συνάρτησης GCV. Η εικόνες 5.10 και 5.11 δείχνουν δύο παραδείγματα της συνάρτησης GCV για την κανονικοποίηση με τις μεθόδους Tikhonov και TSVD, αντίστοιχα. Και στις δύο εικόνες προκύπτουν όμοια συμπεράσματα. Το αριστερό γράφημα, στην εικόνα

#### 5.4. Η Γενικευμένη Μέθοδος Διασταυρωμένης Επιχύρωσης (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)

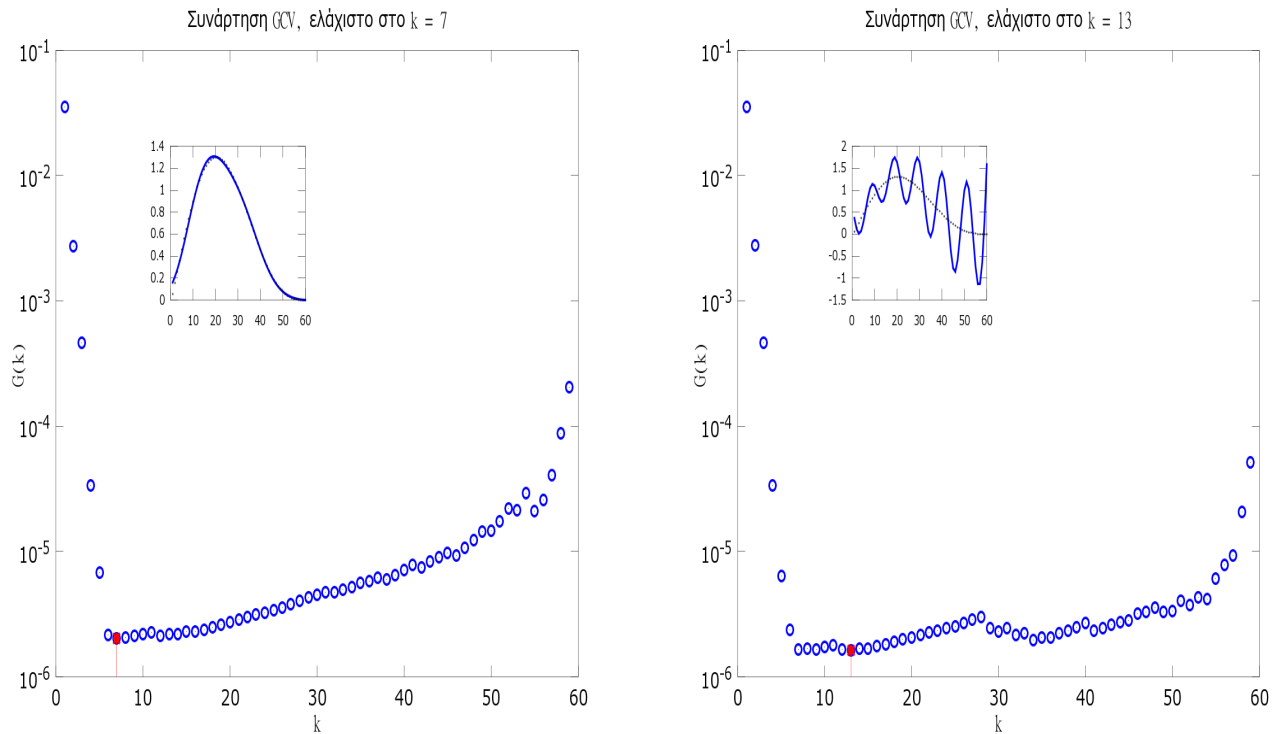


Εικόνα 5.9: Η συνάρτηση της μεθόδου generalized cross validation για την κανονικοποίηση Tikhonov για δύο προβλήματα ελέγχου. Αριστερά: Πρόβ. shaw με  $n = 40$ ,  $\eta = 0.01$ . Δεξιά: Πρόβ. gravity με  $n = 64$  και  $\eta = 0.001$ .



Εικόνα 5.10: Η συνάρτηση της μεθόδου generalized cross validation για την κανονικοποίηση Tikhonov για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. Οι αστερίσκοι δείχνουν την παράμετρο  $\lambda_{GCV}$  σαν το ελάχιστο της συνάρτησης GCV. Αριστερά: Η τυπική συμπεριφορά της συνάρτησης GCV, όταν η μέθοδος λειτουργεί καλά και βρίσκει την παράμετρο κανονικοποίησης  $\lambda$  που βρίσκεται στο ελάχιστο του γραφήματος της  $G(\lambda)$ , το οποίο κείται κοντά στο σημείο μετάβασης μεταξύ του «απότομου» και πιο «επίπεδου» μέρους του γραφήματος. Δεξιά: Το ελάχιστο του γραφήματος είναι λανθασμένα εντοπισμένο στο «επίπεδο» μέρος της καμπύλης και πιο μακριά από ότι το «απότομο» μέρος της, οδηγώντας σε μία παράμετρο πολύ μικρότερη από ότι η βέλτιστη (σημειώνεται με 'x' στο γράφημα δεξιά).

#### 5.4. Η Γενικευμένη Μέθοδος Διασταυρωμένης Επιχύρωσης (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)



Εικόνα 5.11: Η συνάρτηση της μεθόδου generalized cross validation για την κανονικοποίηση TSVD για το πρόβλημα επισκόπησης της βαρύτητας. Οι αστερίσκοι δείχνουν την παράμετρο  $k_{GCV}$  σαν το ελάχιστο της συνάρτησης GCV. Αριστερά: Η τυπική συμπεριφορά της συνάρτησης GCV, όταν η μέθοδος λειτουργεί καλά και βρίσκει την παράμετρο κανονικοποίησης  $k$  που βρίσκεται στο ελάχιστο του γραφήματος της  $G(k)$ , το οποίο κείται κοντά στο σημείο μετάβασης μεταξύ του «απότομου» και πιο «επίπεδου» μέρους του γραφήματος. Δεξιά: Το ελάχιστο του γραφήματος είναι λανθασμένα εντοπισμένο στο «επίπεδο» μέρος της καμπύλης και πιο μακριά από ότι το «απότομο» μέρος της, οδηγώντας σε μία παράμετρο αρκετά μεγαλύτερη από ότι η βέλτιστη.

5.10, δείχνει την τυπική συμπεριφορά της συνάρτησης GCV, όταν η μέθοδος λειτουργεί καλά και βρίσκει την παράμετρο κανονικοποίησης  $\lambda$  που βρίσκεται στο ελάχιστο του γραφήματος της  $G(k)$  (το οποίο κείται κοντά στο σημείο μετάβασης μεταξύ του «απότομου» και πιο «επίπεδου» μέρους του γραφήματος). Το δεξί γράφημα είναι ένα παράδειγμα, όπου η GCV αποτυγχάνει, κάτι το οποίο συμβαίνει πάντα όταν το ελάχιστο της  $G(k)$  βρίσκεται κάπου στο «επίπεδο» μέρος της καμπύλης και πιο μακριά από ότι το «απότομο» μέρος της. Εδώ χρησιμοποιήσαμε το πρόβλημα ελέγχου gravity με  $n = 60$  και  $\eta = 0.01$ . Για την υλοποίηση της μεθόδου GCV έγινε χρήση της συνάρτησης `gen` από το προγραμματιστικό πακέτο RT. Η τελευταία παίρνει ορίσματα τα  $U, \Sigma$  της SVD και την επιθυμητή μέθοδο κανονικοποίησης ('tikhonov' σε αυτό το παράδειγμα): υπάρχει ακόμα η επιλογή 'tsvd' για την TSVD<sup>‡</sup>). Πραγματοποιώντας αριθμητικά πείραματα και για τη μέθοδο TSVD παρατηρούμε ακριβώς την ίδια συμπεριφορά, βλ. εικ. 5.11: Η συνήθης (επιθυμητή) εικόνα της συνάρτησης GCV είναι να παίρνει το ελάχιστό της κοντά στο μεταβατικό σημείο της καμπύλης GCV (η συνάρτηση διακρίνεται και πάλι από ένα «επίπεδο» και ένα «απότομο» μέρος, βλ. εικόνα 5.9), ενώ αποτυγχάνει όταν εντοπίζει το ελάχιστο στο επίπεδο μέρος της καμπύλης σε μία τιμή του  $\lambda$  αρκετά μικρότερη από ότι η βέλτιστη. Η περιστασιακή αποτυχία της GCV έχει κατανοηθεί εις βάθος και συχνά αποκαλύπτεται από τις εκτός πραγματικότητας παραγόμενες λύσεις με υποεξομάλυνση.

Σημειώνουμε ότι έχει προταθεί η εισαγωγή ενός παράγοντα βάρους στη συνάρτηση GCV για την κανο-

<sup>‡</sup>Υπάρχει και τρίτη επιλογή μεθόδου με το αναγνωριστικό 'dsvd', όπως και σε προηγούμενες συναρτήσεις που έχουμε δει ως τώρα. Αφορά τη μέθοδο της γενικευμένης SVD ενός ζεύγους πινάκων  $A, L$ , η οποία ξεφεύγει από τα όρια του παρόντος.

#### 5.4. Η Γενικευμένη Μέθοδος Διασταυρωμένης Επικύρωσης (Επιλογή Παραμέτρου Κανονικοποίησης)

---

νικοποίηση Tikhonov, όπου η  $G(\lambda)$  στην 5.4.4 αντικαθίσταται από τη συνάρτηση

$$G_w(\lambda) = \frac{\|Ax_\lambda - b\|_2^2}{\left(m - w \sum_{i=1}^n \phi_i^{[\lambda]}\right)^2}, \quad \text{όπου } w \text{ βάρος που καθορίζεται από το χρήστη.}$$

Ενώ η ιδέα φαίνεται να υποστηρίζεται τελείως εμπειρικά, μπορεί συχνά να χρησιμοποιηθεί για να βελτιωθεί η μέθοδος GCV.

Οι στατιστικές και ασυμπτωτικές συμπεριφορές της μεθόδου GCV έχουν κατανοηθεί σε μεγάλο βαθμό λόγω εκτενούς μελέτης σε αυτή την περιοχή του Grace Wahba, το βιβλίο του οποίου [WG75] προτείνεται για τις λεπτομέρειες πάνω σε αυτή τη μέθοδο.

## Κεφάλαιο 6

# Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος

Η μακροσκελής ανάλυση των βασικών μεθόδων αντιμετώπισης αντίστροφων μη καλώς τοποθετημένων προβλημάτων, που παίρνουν τη μορφή των ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm, βοήθησε να κατανοήσουμε εις βάθος τις δυσκολίες και τις ιδιαιτερότητες που τα διέπει. Είναι σαφές ότι οι μέθοδοι αυτοί δεν είναι παρά μόνο η αρχή για να εισέλθει κανείς στην περιοχή των διακριτών αντίστροφων προβλημάτων. Μέσω απλών προβλημάτων ελέγχου που χρησιμοποιήθηκαν, ελέγξαμε την αποτελεσματικότητα των μεθόδων που αναπτύχθηκαν, και κυρίως πειστήκαμε ότι δεν είναι δυνατόν να γνωρίζουμε εκ των προτέρων ποιες από αυτές λειτουργούν καλά στο εκάστοτε πρόβλημα. Επιπλέον, είναι σύνηθες να χρησιμοποιούνται νέες τεχνικές που ταιριάζουν καλύτερα και λαμβάνουν υπόψη τους τις ιδιαιτερότητες του κάθε προβλήματος. Είναι αδύνατον να παρουσιαστούν οι διάφορες μέθοδοι που έχουν αναπτυχθεί κατά καιρούς, γι' αυτό επιλέξαμε να δώσουμε τον κύριο άξονα γύρω από τον οποίο κινούνται όλα τα προβλήματα αυτού του είδους.

Αυτή είναι και η περίπτωση για το πρόβλημα ανάκτησης μικροφυσικών παραμέτρων, στο οποίο καλούμαστε να εφαρμόσουμε την αντιστροφή έχοντας δεδομένα από lidar πολλαπλών μηκών κύματος. Για τις αναγκές της παρουσίασης αξιολογών αποτελεσμάτων, επιλέξαμε στην αυτοματοποιημένη εφαρμογή σε αυτό το πρόβλημα, μέσω του προγράμματος *Retrieval of Aerosol Parameters (RAP)* που οφείλεται στους Detlef Müller, Igor Veselowski, Vadum Griaznov και Alexei Kolgotin (βλ. [KM08, MW99, LH02, BK06]). Στα επόμενα, θα γνωρίσουμε καλύτερα το πρόβλημά μας και τις εγγενείς του ιδιομορφίες, αφού το ορίσουμε επακριβώς. Σημειώνεται ότι οι μέθοδοι και οι αλγόριθμοι που έχουν χρησιμοποιηθεί σε πρόγραμμα από τα όρια του παρόντος και θα γίνει επιλεκτική αναφορά όπου είναι αναγκαίο. Σκοπός μας είναι να παρουσιάσουμε μία γενική εικόνα αυτού του χώρου και η ανασκόπηση σύγχρονων αποτελεσμάτων και συμπερασμάτων.

### 6.1 Το Μη Καλώς Τοποθετημένο Πρόβλημα Ανάκτησης Μικροφυσικών Παραμέτρων

Το μαθηματικό μοντέλο που σχετίζει τις οπτικές με τις μικροφυσικές παραμέτρους συνίσταται από ένα σύστημα δύο ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm α' είδους για τους συντελεστές οπισθοσκέδασης και εξασθένησης,

$$\Gamma(\lambda) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_{\pi/ext}^n(\lambda, r; m, s)n(r) dr, \quad (6.1.1)$$

όπου  $r$  είναι η ακτίνα του σωματιδίου,  $m$  είναι ο μιγαδικός δείκτης διάθλασης, που υποτίθεται γνωστός,  $s$  είναι το σχήμα των σωματιδίων,  $r_{max}$  και  $r_{min}$  είναι λογικά άνω και κάτω φράγματα, αντίστοιχα, ρεαλιστικών ακτίνων,  $\lambda$  είναι το μήκος κύματος της μέτρησης,  $n$  είναι η κατανομή του αριθμού των σωματιδίων,  $K_{\pi}$  είναι ο πυρήνας οπισθοσκέδασης και  $K_{ext}$  ο πυρήνας εξασθένησης (ο εκθέτης  $n$  θυμίζει ότι αφορά πυρήνες που αντιστοιχούν στην κατανομή του αριθμού των σωματιδίων). Η μελέτη και τα ικανοποιητικά αποτελέσματα που προκύπτουν, περιορίζονται, έως τώρα, σε ομογενή σφαιρικά σωματίδια, όπου εφαρμόζεται η θεωρία σκέδασης *Mie*. Σε αυτή την περίπτωση, γίνεται η υπόθεση ότι τα μικρά σωματίδια συμπεριφέρονται σε

## 6.1. Το Μη Καλώς Τοποθετημένο Πρόβλημα Ανάκτησης Μικροφυσικών Παραμέτρων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

πρώτη προσέγγιση σαν σφαιρικοί σχεδιαστές. Τότε, οι πυρήνες δίνονται από τους τύπους 1.6.2. Το  $\Gamma$  είναι συντομογραφία για το συντελεστή οπισθοσκέδασης  $\beta$  και/ή το συντελεστή εξασθένησης  $\alpha$  αντίστοιχα, που εξαρτάται από τις μετρήσεις των δεδομένων.

Θεωρούμε την εξίσωση του γραμμικού τελεστή  $\mathcal{K}$  της μορφής

$$\mathcal{K}x = y,$$

όπου ο  $\mathcal{K} : X \rightarrow Y$  είναι ένας συμπαγής γραμμικός τελεστής\* μεταξύ των διαχωρίσιμων χώρων<sup>†</sup> Hilbert  $X, Y$ . Η γενική θεωρία των συμπαγών τελεστών εξελίχθηκε από τη θεωρία των ολοκληρωτικών τελεστών

$$y(t) = \int_c^d K(t, s)x(s) ds, \quad t \in [a, b],$$

η οποία είναι και η περίπτωση που χαρακτηρίζει την τηλεπισκόπηση lidar. Οι μεταβλητές  $t, s, c, d$  και οι συναρτήσεις  $x, y, K$  αντιπροσωπεύουν τα  $\lambda, r, r_{min}, r_{max}$  και τα  $n, \Gamma, K_{\pi/ext}$ , αντίστοιχα.

Υποθέτουμε ότι οι χώροι  $X = L^2[a, b]$ ,  $Y = L^2[c, d]$  και ο πυρήνας  $K$  είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση στο  $[a, b] \times [c, d]$ . Τότε ο συμπαγής γραμμικός τελεστής  $\mathcal{K} \in L^2([a, b] \times [c, d])$ , όπου  $L^2[a, b]$  συμβολίζει το χώρο τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων στο διάστημα  $[a, b]$ . Στην περίπτωση που ο τελεστής  $\mathcal{K}$  έχει μη τετριμμένο μηδενόχωρο, η συνάρτηση  $x$  δεν είναι απαραίτητα μονοσήμαντα ορισμένη. Γενικώς, το σύνθημα με αυτούς τους τελεστές είναι να παράγουν μη καλώς τοποθετημένα προβλήματα παραβιάζοντας και τις τρεις απαιτήσεις του ορισμού κατά *Hadamard*. Γι' αυτό, αναζητούμε ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης για το πρόβλημα

$$x^\dagger = \mathcal{K}^\dagger y$$

με ελάχιστη νόρμα (του  $x$ ), η λύση του οποίου είναι ισοδύναμη με αυτή του προβλήματος ελάχιστης νόρμας των κανονικών εξισώσεων ,

$$\mathcal{K}^* \mathcal{K} x = \mathcal{K}^* y,$$

όπου  $\mathcal{K}^*$  είναι ο συζυγής τελεστής του  $\mathcal{K}$  και  $\mathcal{K}^\dagger$  είναι γενικευμένος αντίστροφος τελεστής *Moore–Penrose*. Από την τελευταία ορίζεται μία λύση της μορφής

$$x = (\mathcal{K}^* \mathcal{K})^{-1} \mathcal{K}^* y = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\langle y, v_j \rangle}{\mu_j} v_j(t)^\ddagger,$$

όπου η τριάδα  $\{\mu_j, v_j, \nu_j\}$  είναι το *ιδιάζον σύστημα* του τελεστή  $\mathcal{K}$  (βλ. υποενότ. 2.2, και εξ. 2.2.3 - 2.2.6).

Ο παραγοντας που παρουσιάζει αστάθεια είναι ότι οι ιδιάζουσες τιμές  $\mu_j$  συγκεντρώνονται κοντά στο μηδέν και μεγενθύνουν τις υψηλές συχνότητες που είναι συνήθως παρούσες στα θορυβώδη δεδομένα. Όπως αναμένεται, οι μετρήσεις γίνονται με πεπερασμένη ακρίβεια, συνεπώς στην πράξη, μόνο ένα «θορυβώδες» δεξί μέλος  $y_\delta$  είναι διαθέσιμο, για το οποίο υποθέτουμε ότι  $\|y - y_\delta\|_2 \leq \delta$ . Ενώ ο τελεστής  $\mathcal{K}$  είναι φραγμένος μεταξύ των χώρων Hilbert  $X$  και  $Y$ , ο τελεστής  $\mathcal{K}^\dagger$  είναι συχνά μη φραγμένος αν ο χώρος  $X$  δεν είναι συμπαγής, το οποίο όντως συμβαίνει στη γενική περίπτωση. Αυτό σημαίνει ότι ακόμα και μικρά λάθη των μετρήσεων μπορεί να προκαλέσουν μεγάλη αβεβαιότητα στην λύση  $x$  που αναζητούμε. Όπως αναλύσαμε στα προηγούμενα κεφάλαια, η μόνη ελπίδα για μία λύση με νόημα, είναι η χρήση μεθόδων κανονικοποίησης, παράλληλα με τη χρήση δεδομένων Raman lidar πολλών μηκών κύματος.

Παρόλα τα εντυπωσιακά αποτελέσματα που προκύπτουν από την αντιστροφή με χρήση Raman lidar πολλών μηκών κύματος, υπάρχει ακόμα αρκετή αβεβαιότητα. Αυτή προκαλείται από το γεγονός ότι στις

\* Συμπαγής τελεστής είναι ένας γραμμικός τελεστής από ένα χώρο Banach  $X$  σε έναν άλλο  $Y$ , τέτοιος ώστε η απεικόνιση οποιουδήποτε φραγμένου υποσυνόλου του  $X$  είναι η συμπαγής κλειστότητα ενός υποσυνόλου του  $Y$ . Ειδικότερα: Έστω  $K$  ένας φραγμένος, γραμμικός τελεστής σε ένα χώρο Hilbert  $H$ . Έστω ακόμα  $f_n$  μία άπειρη ομοιόμορφα φραγμένη ακολουθία δηλ.  $\exists M > 0$ , τ.ω  $\|f_n\| \leq M, \forall n$ . Ο  $A$  καλείται *συμπαγής τελεστής* αν υπάρχει υπακολουθία  $\{A f_{n_k}\}$  της  $\{A f_n\}$ , η οποία είναι ακολουθία Cauchy, βλ. και [HH73].

<sup>†</sup> Διαχωρίσιμος καλείται ένας τοπολογικός χώρος αν περιέχει ένα αριθμήσιμο πυκνό υποσύνολο δηλ. ένα υποσύνολο με αριθμήσιμο πλήθος στοιχείων του οποίου η κλειστότητα είναι όλος ο χώρος. Η Διαχωρισιμότητα είναι σημαντική έννοια για την Αριθμητική Ανάλυση διότι πολλά θεωρήματα χρησιμοποιούν κατασκευαστικές αποδείξεις μόνο για διαχωρίσιμους χώρους, οι οποίες μπορούν να μετατραπούν σε αλγόριθμους.

<sup>‡</sup> Γενικώς, κάθε συνάρτηση της μορφής

$$x = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\langle y, v_j \rangle}{\mu_j} v_j(t) + q,$$

όπου  $q \in \text{null}(\mathcal{K})$ , είναι πιθανή λύση.



εξομοιώσεις, κυρίως τα οπτικά δεδομένα, τα οποία χρησιμοποιούνται για το χαρακτηρισμό των σωματιδίων, προέρχονται από συνθετικές κατανομές μεγέθους των σωματιδίων. Οι απλουστεύσεις και οι πολύ χρονοβόρες εξομοιώσεις αφήνουν ακόμα ανοιχτά ερωτήματα.

Αρχικά, το ενδιαφέρον είχε στραφεί προς την εύρεση ενός ελάχιστου συνόλου δεδομένων που θα επιτρέψει την εξαγωγή λογικών αποτελεσμάτων και συμπερασμάτων. Το σύνολο οπτικών παραμέτρων  $3\beta + 2\alpha$  αποτελούμενο από συντελεστές οπισθοσκέδασης ( $\beta$ ) σε 3 μήκη κύματος και επιπλέον από 2 συντελεστές εξασθένησης ( $\alpha$ ) σε 2 μήχη κύματος, έχει εξακριβωθεί ότι είναι το ελάχιστο δυνατό. Είναι ισόδυναμο σε ακρίβεια με το σύνολο  $6\beta + 2\alpha$ , όσο περιορίζεται το σφάλμα μέτρησης. Ωστόσο, τα αποτελέσματα έχουν μεγαλύτερη ευαισθησία στα σφάλματα στους συντελεστές οπισθοσκέδασης του συνόλου  $3 + 2$  από ότι τα αντίστοιχα σφάλματα για οποιοδήποτε από τους (6) συντελεστές οπισθοσκέδασης του συνόλου  $6 + 2$ . Επιπλέον, αμφιβολία υπάρχει στο αν τα αποτελέσματα μας θα είναι καλύτερα, αυξάνοντας τον αριθμό των δεδομένων συντελεστών οπισθοσκέδασης ή εξασθένησης. Επιπρόσθετη αβεβαιότητα υπάρχει και για τα κατάλληλα εύρη των μικροφυσικών παραμέτρων της *ενεργού ακτίνας* (effective radius) και του μιγαδικού μέρους του συντελεστή διάθλασης, με μικρή ή μηδαμινή γνώση εκ των προτέρων.

## 6.2 Λεπτομέρειες στην Εφαρμογή στο Πρόβλημα Ανάκτησης Μικροφυσικών Παραμέτρων

Το μαθηματικό μοντέλο της εξ. 6.1.1 για ομογενή σφαιρικά σωματίδια χρησιμοποιώντας τη κατανομή όγκου σωματιδίων ( $v(r)$ ) αντί για την κατανομή του αριθμού των σωματιδίων  $n(r)$  μπορεί να επαναδιατυπωθεί για λόγους ευστάθειας ως εξής

$$\begin{aligned} \Gamma(\lambda) &= \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_{\pi/ext}^v(\lambda, r; m) v(r) dr \\ &= \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{3}{4r} Q_{\pi/ext}(\lambda, r; m) v(r) dr, \end{aligned} \quad (6.2.1)$$

όπου  $v(r) = \frac{4\pi r^3}{3} n(r)$ . Μιλώντας πολύ χονδρικά, με τη διαίσθηση, το πρόβλημά μας είναι «περισσότερο» μη καλώς τοποθετημένο αν η επιφάνεια που ορίζει ο πυρήνας είναι πιο λεία. Στα διαστήματα ενδιαφέροντος για τα μήχη κύματος μεταξύ 300 και 1100 nm και για τις ακτίνες των σωματιδίων από 0.1 έως 2  $\mu\text{m}$  ο πυρήνας  $K_{\pi/ext}^v$  δεν είναι τόσο ομαλός όσο ο πυρήνας  $K_{\pi/ext}^n$ , γι' αυτό και προτιμάται η αντιστροφή της 6.2.1 έναντι της 6.1.1. Προφανώς, και αυτή η έκφραση είναι συμβατή με όσα είπαμε στην προηγούμενη υποενότητα μόνο που εδώ τα  $K_{\pi/ext}^v$  παίζουν το ρόλο του πυρήνα  $K$  και το  $v(r)$  είναι στη θέση του  $x(s)$ .

Χρησιμοποιώντας σύστημα lidar τριών μήκους κύματος με δύο κανάλια Raman, λαμβάνουμε πληροφορία για τους συντελεστές οπισθοσκέδασης σε τρία μήχη κύματος και τους συντελεστές εξασθένησης σε δύο μήχη κύματος (περίπτωση  $3+2$ ), δηλ.  $\beta^{Aer}$  (355 nm),  $\beta^{Aer}$  (532 nm),  $\beta^{Aer}$  (1064 nm) και  $\alpha^{Aer}$  (355 nm),  $\alpha^{Aer}$  (532 nm). Επιπλέον χρησιμοποιείται *μονοκόρυφη ή πολυκόρυφη λογαριθμική κανονική κατανομή*<sup>§</sup> (mono-/multimodal logarithmic-normal distribution) ( $M = 1$  ή  $M \geq 2$ , αντίστοιχα) για την περιγραφή της κατανομής του αριθμού των σωματιδίων  $n(r)$

$$n(r) = \sum_{j=1}^M \frac{n_{t,j}}{r \sqrt{2\pi \ln \bar{\sigma}_j}} \exp\left(\frac{(\ln r - \ln r_{med,j})^2}{-2 \ln^2 \bar{\sigma}_j}\right), \quad (6.2.2)$$

όπου  $n_{t,j}$  είναι ο συνολικός αριθμός συγκεντρώσης,  $\bar{\sigma}_j$  είναι η γεωμετρική τυπική απόκλιση και  $r_{med,j}$  είναι η διάμεσος των ακτίνων της  $j$  κορυφής. Σημειώνεται ότι δεν υπάρχει πραγματικός θεωρητικός λόγος, για τον οποίο η κατανομή αυτή ταιριάζει καλύτερα στην κατανομή του αριθμού των σωματιδίων και επομένως είναι ένας εμπειρικός κανόνας που πράγματι αποτελεί καλή προσέγγιση της πραγματικότητας.

<sup>§</sup>Μερικές πληροφορίες για τη *λογαριθμική κανονική κατανομή* ή κατανομή Galton/McAlister, Gibrat/Cobb-Douglas.

Στη θεωρία πιθανοτήτων, η κατανομή log-normal είναι μία συνεχής κατανομή πιθανότητας μιας τυχαίας μεταβλητής (τ.μ.), της οποίας ο λογάριθμος έχει κανονική κατανομή. Αν η τ.μ.  $X$  έχει κανονική κατανομή, τότε η τ.μ.  $Y = e^X$  έχει κατανομή log-normal. Όμοια, αν η τ.μ.  $Y$  έχει κατανομή log-normal τότε η τ.μ.  $X = \log Y$  έχει κανονική κατανομή. Μία τ.μ. μπορεί να μοντελοποιηθεί ώστε να έχει κατανομή log-normal αν είναι γινόμενο πολλών ανεξάρτητων τ.μ., η καθένα από τις οποίες είναι θετική. Σε μία κατανομή log-normal οι παράμετροι  $\mu$  και  $\sigma$  είναι αντίστοιχα ο μέσος και η τυπική απόκλιση του λογαρίθμου της τ.μ.. Σε αυτές τις κατανομές χρησιμοποιείται περισσότερο ο *γεωμετρικός μέσος* ( $e^\mu$ ) και η *γεωμετρική τυπική απόκλιση* ( $e^\sigma$ ), αντί για τον αριθμητικό μέσο και την τυπική απόκλιση.

Η διακριτοποίηση εδώ επιτυγχάνεται με αρκετούς τρόπους, όπως οι γνωστοί μέθοδοι τετραγωνισμού και μέθοδοι Galerkin. Λόγω του ότι το δεξί μέλος  $y$  είναι γνωστό μόνο σε μερικά σημεία των μετρήσεων (3+2), προτείνεται η χρήση της **μεθόδου ταξινόθεσίας** (collocation method) με διάφορες συναρτήσεις βάσης, όπως π.χ. οι συναρτήσεις B-spline τάξης  $p$  (η τάξη επαφίεται στην επιλογή του χρήστη), βλ [BK06]. Ένας επιπλέον λόγος που προτιμούνται αυτές οι μέθοδοι είναι ο μειωμένος χρόνος υπολογισμών σε σχέση με τη μέθοδο Galerkin.

Το κύριο έργο για την εξαγωγή ευσταθών λύσεων είναι να εφαρμοστούν στα δεδομένα εισόδου μία σειρά από μαθηματικούς και φυσικούς περιορισμούς τόσο κατά τη διάρκεια της αντιστροφής, όσο και κατόπιν αυτής. Σε πρώτη φάση, αποκτούμε το μαθηματικό χώρο λύσεων από την αντιστροφή των δεδομένων και κατόπιν θα πρέπει να αναγνωρίσουμε το φυσικό χώρο λύσεων μέσω μετεπεξεργασίας (postprocessing) των δεδομένων. Με άλλα λόγια, μιλάμε για *εκ των προτέρων* (a priori) ή *εκ των υστέρων* (a posteriori) περιορισμούς.

Ένας σημαντικός περιορισμός είναι η ομαλότητα της κατανομής μεγέθους υπο εξέταση, δηλ. ταλαντώσεις που παράγουν τεχνητές κορυφές στην κατανομή μεγέθους των σωματιδίων, καταστέλλονται. Επιπλέον οι οπτικές ιδιότητες υπολογίζονται εκ νέου από τις υπολογισθείσες κατανομές μεγέθους και συγκρίνονται με τα δεδομένα-εισόδους, όπου απαιτείται συμφωνία εντός ενός ορίου αβεβαιότητας, το οποίο συχνά τίθεται κοντά στο σφάλμα μέτρησης. Ωστόσο μπορεί να δειχθεί από πρώτες αρχές ότι είναι αδύνατο να αναπαραγάγουμε επακριβώς τα οπτικά δεδομένα από τα αποτελέσματα της αντιστροφής. Εκ νέου υπολογίζεται και η φασματική κλίση (spectral slope) των συντελεστών οπισθοσκέδασης και εξασθένησης στα αντίστοιχα μήκη κύματος της μέτρησης και λαμβάνεται υπόψη η απόκλιση από τις μετρούμενες τιμές για την μετεπεξεργασία του χώρου λύσεων. Επιπρόσθετα, μαθηματικές παράμετροι όπως το *εύρος της ασυμφωνίας* (discrepancy range), προκύπτουν στην διαδικασία αντιστροφής, και διαμορφώνουν το χώρο λύσεων των μικροφυσικών παραμέτρων. Ακόμα, επιπρόσθετοι περιορισμοί εμφανίζονται από την ανάλυση των άνω και κάτω ορίων των ανακτηθέντων κατανομών μεγέθους των σωματιδίων και από την παρατήρηση χαρακτηριστικών μοτίβων. Τελικά, ο χώρος των λύσεων θα πρέπει να συνίσταται από κατανομές μεγέθους θετικών αριθμών συγκεντρώσεως, κάτι το οποίο από μαθηματικής πλευράς δεν είναι απλό ζήτημα.

Επανερχόμαστε στο φορμαλισμό για να υπογραμμίσουμε κάποιες λεπτομέρειες στις οποίες στηρίζεται ο αλγόριθμος του προγράμματος που θα χρησιμοποιήσουμε. Η κατανομή όγκου διακριτοποιείται μέσω των συναρτήσεων βάσης  $B_j$  και των παραγόντων βάρους  $w_j$ :

$$v(r) = \sum_{j=1}^{N_B} w_j B_j(r) + \epsilon(r)^{math}.$$

Ο όρος  $\epsilon^{math}(r)$  είναι το μαθηματικό σφάλμα υπολοίπου που εισάγεται λόγω διακριτοποίησης.

Έχει αποδειχθεί θεωρητικά αλλά και από αποτελέσματα εξομοιώσεων με συναρτήσεις βάσης B-spline μηδενικής τάξης (στήλες ιστογράμματος), B-spline πρώτης τάξης (τριγωνικές συναρτήσεις), και B-spline δεύτερης τάξης (κυβικές συναρτήσεις), ότι ο αλγόριθμος αντιστροφής λειτουργεί καλύτερα με χρήση των τριγωνικών συναρτήσεων σε λογαριθμικά ισαπέχουσα κλίμακα. Επιπλέον, αριθμός των συναρτήσεων βάσης ορίζεται  $N_B = 8$ . Από τη μια μεριά, με αυτό τον τρόπο είναι δυνατή η ανακατασκευή μονοκόρυφων ή δικόρυφων κατανομών, διότι η ικανή αναπαράσταση κάθε κορυφής απαιτεί τουλάχιστο τρεις συναρτήσεις βάσης, ενώ χρειάζονται δύο συναρτήσεις βάσης για να καθοριστούν όρια  $r_{min}$  και  $r_{max}$ . Από την άλλη το πρόβλημα αντιστροφής παραμένει ασταθές αν χρησιμοποιηθούν πολλές συναρτήσεις βάσης. Η μαθηματική διατύπωση αυτών των συναρτήσεων είναι

$$B_1 = \begin{cases} 0 & r < r_1 \\ 1 - \frac{r-r_1}{r_2-r_1} & r_1 \leq r \leq r_2 \\ 0 & r > r_2 \end{cases}$$

$$B_j = \begin{cases} 0 & r < r_{j-1} \\ 1 - \frac{r_j-r}{r_j-r_{j-1}} & r_{j-1} < r \leq r_j \\ 1 - \frac{r-r_j}{r_{j+1}-r_j} & r_j < r < r_{j+1} \\ 0 & r > r_{j+1} \end{cases} \quad j = 2, \dots, 7$$

$$B_8 = \begin{cases} 0 & r < r_7 \\ 1 - \frac{r_8-r}{r_8-r_7} & r_7 \leq r \leq r_8 \\ 0 & r > r_8 \end{cases}$$

## 6.2. Λεπτομέρειες στην Εφαρμογή στο Πρόβλημα Ανάκτησης Μικροφυσικών Παραμέτρων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

Τα  $r_1$  και  $r_8$ , που αντιστοιχούν στα  $r_{min}$  και  $r_{max}$  περιορίζουν το παράθυρο αντιστροφής (inversion window) και δε μπορούν να καθοριστούν εκ των προτέρων. Γι' αυτό χρησιμοποιείται παράθυρο αντιστροφής με μεταβλητό εύρος.

Για την περιγραφή του διακριτού προβλήματος, είναι πιο βολικό να αλλάξουμε συμβολισμό ως εξής. Έστω η συντομότερη έκφραση  $p = (i, \lambda)$ , με  $i = \pi$  για το συντελεστή οπισθοσκέδασης και  $i = ext$  για το συντελεστή εξασθένησης, των δεικτών  $\pi/ext$  και του ορίσματος  $\lambda$ , και έστω  $g$  τα δεδομένα, δηλ.  $g_p = \Gamma(\lambda)$ , τότε το διακριτό πρόβλημα παίρνει τη μορφή

$$g_p = \sum_j A_{pj}(m)B_j + \epsilon_p, \quad (6.2.3)$$

όπου  $\epsilon_p$  είναι ο αντίστοιχος όρος σφάλματος και τα στοιχεία πίνακα  $A_{pj}(m)$  υπολογίζονται με μεθόδους τετραγωνισμού από τη σχέση

$$A_{pj}(m) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_{\pi/ext} B_j dr,$$

ή σε μορφή πινάκων, ορίζοντας τον πίνακα  $A = [A_{pj}]$ , και τα διανύσματα  $g = [g_p]$ ,  $w = [w_j]$ , και  $\epsilon = [\epsilon_p]$

$$g = Aw + \epsilon. \quad (6.2.4)$$

Ο χώρος λύσεων της ανεστραμμένης εξίσωσης  $w = A^{-1}g + \epsilon'$ , όπου  $\epsilon' = -A^{-1}\epsilon$ , όπως έχουμε πει, περιέχει μη ευσταθείς λύσεις, παρά το ότι τα οπτικά δεδομένα μπορούν να αναπαραχθούν με σφάλμα  $\epsilon$ . Η κανονικοποίηση εισάγεται με τη μορφή του προβλήματος ελαχιστοποίησης

$$e^2 \geq \|Aw - g\|_2^2 + \gamma\Lambda(v), \quad (6.2.5)$$

όπου  $\Lambda(v)$  είναι ένα μη αρνητικό βαθμωτό μέτρο της απόκλισης της ανεστραμμένης κατανομής όγκου  $v(r)$  από την απαιτούμενη ομαλότητα και  $\gamma$  είναι ο πολλαπλασιαστής Lagrange στο ρόλο της έντασης της ομαλότητας που επιβάλλεται εκ των προτέρων, και θα πρέπει να ζυγίσει το πως πρέπει αυτοί οι δύο όροι του αθροίσματος να συνεισφέρουν ισορροπημένα. Η ομαλότητα  $\Lambda(v)$  ορίζεται από την παρακάτω τετραγωνική μορφή

$$\Lambda(v) = w^T H w,$$

όπου  $H$  είναι ο πίνακας ζώνης με εύρος ζώνης 1. Στην περίπτωση των οκτώ συναρτήσεων βάσης, αυτός ο πίνακας είναι

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 5 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -4 & 5 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Αυτή η μέθοδος κανονικοποίησης μιμείται φορμαλιστικά τη μέθοδο Tikhonov και εύκολα μπορεί κανείς να δείξει ότι κανονικοποιημένη λύση ικανοποιεί

$$w = (A^T A + \gamma H)^{-1} A^T g. \quad (6.2.6)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι εδώ χρησιμοποιείται η πρόσφατα εισαχθείσα (βλ. [KM08]) τροποποιημένη ασυμφωνία στα δεδομένα που ορίζεται από τη σχέση

$$\delta = \|A|w| - g\|,$$

έναντι της συνήθους ασυμφωνίας  $\delta^* = \|Aw - g\|$ . Το σύμβολο  $|\cdot|$  σημαίνει ότι παίρνουμε την απόλυτη τιμή των στοιχείων του διανύσματος  $w$ . Τότε ως βέλτιστη παράμετρος κανονικοποίησης  $\gamma_{opt}$  είναι η τιμή αυτή, για την οποία η λύση του προβλήματος 6.2.6 ελαχιστοποιεί το όρο  $\delta$ .

Παρά τον δυναμισμό των περιορισμών που τίθενται, συχνά βρισκόμαστε ενώπιον θεμελιωδών προβλημάτων που αφορούν την ευστάθεια του αλγορίθμου αντιστροφής. Για παράδειγμα, τα σφάλματα μετρήσεων μπορεί να είναι υπεύθυνα για την απαράδεκτα μεγάλη διακύμανση των μικροφυσικών παραμέτρων. Τέτοια διακύμανση παρατηρείται ακόμα εντός διαστρώσεων των σωματιδίων (particle layers), όπου αναμενόταν να κατέχουν όμοιες ιδιότητες (π.χ. ενεργός ακτίνα  $r_{eff}$ , μιγαδικό μέρος του συντελεστή διάθλασης  $m$ ) σε διαδοχικά εύρη υψών (height bins)<sup>¶</sup>. Κάνοντας αυτή την υπόθεση της αναλλοιωτότητας των ιδιοτήτων σε

<sup>¶</sup>Υψομετρικές υποδιαίρεσεις για το ίδιο layer.

διαδοχικές υψομετρικές διαστρώσεις, οδηγούμαστε σε μία εκ των υστέρων περαιτέρω κανονικοποίηση των λύσεων. Επανααναλύουμε τους χώρους λύσεων σε διαφορετικά εύρη υψών, έτσι ώστε οι δύο επόμενες αντίρροπες επιρροές να έρθουν σε σχετική ισορροπία. Από τη μία μεριά οι μικροφυσικές παράμετροι  $r_{eff}$  και  $m$  δε θα πρέπει να μεταβάλλονται πολύ στα διάφορα ύψη της ίδιας διάστρωσης. Από την άλλη μεριά, χρησιμοποιούμε συγκεκριμένα υποσύνολα και μαθηματικές παραμέτρους στην επιλογή των προλεχθέντων περιορισμών (π.χ. εύρος ασυμφωνίας ή/και συμπεριφορά των κατανομών μεγέθους ως προς άνω και κάτω όρια του μεγέθους των σωματιδίων). Αρχικά καθορίζεται ο ο μαθηματικός χώρος λύσεων ως η πρώτη εκτίμηση του φυσικού χώρου λύσεων. Κατόπιν επανααναλύουμε το φυσικό χώρο λύσεων στη βάση επιπρόσθετων περιορισμών περιορίζοντας τον περαιτέρω. Σε αυτή την ανάλυση οι φυσικές και μαθηματικές παράμετροι θα πρέπει να παραμείνουν εντός των ορίων που επιλέχθηκαν για κάθε εύρος υψών. Αυτή η προσέγγιση καλείται μέθοδος *κλασική μονοδιάστατη κανονικοποίηση* (classical one-dimensional regularization), διότι επαναλαμβάνουμε αυτή τη μελέτη ξεχωριστά για κάθε διάστρωση.

Σαν αποτέλεσμα της εκ των υστέρων προσέγγισης, πρέπει αναφέρουμε δύο βασικά μειονεκτήματα. Αφενώς, η διαδικασία της μετεπεξεργασίας του χώρου λύσεων των μικροφυσικών παραμέτρων είναι συχνά εξαιρετικά χρονοβόρα, αφετέρου αυτή ανάλυση και βελτιστοποίηση ενός πολυδιάστατου χώρου μαθηματικών και φυσικών παραγόντων επαφίεται στην εμπειρία του χρήστη, κάτι το οποίο είναι υποκειμενικό. Αντ' αυτού, πρόσφατες έρευνες έχουν ξεπεράσει σε κάποιο βαθμό το πρόβλημα της χρονοβόρας εκ των υστέρων ανάλυσης, ενσωματώνοντας έναν εκ των προτέρων περιορισμό στην κατακόρυφη διάσταση. Ο περιορισμός αυτός προβλέπει την ομαλή μετάβαση των ιδιοτήτων μεταξύ των υψομετρικών ευρών της ίδιας διάστρωσης και μπορεί να εκφραστεί μέσω της συσχέτισης μεταξύ των διαδοχικών διαστρώσεων. Η προσέγγιση αυτή είναι αφορά δύο νέες μεθόδους, την *επαναδιατυπωμένη μονοδιάστατη κανονικοποίηση* (reformulated one-dimensional regularization) και τη *διδιάστατη κανονικοποίηση* (two-dimensional regularization), όπου εξελίσσουν την κλασική μέθοδο λύνοντας το αντίστροφο πρόβλημα ταυτόχρονα για περισσότερες διαστρώσεις και εισάγουν νέους τρόπους βελτιστοποίησης των μαθηματικών παραμέτρων της κανονικοποίησης. Για περισσότερα πάνω σε αυτές τις τεχνολογίες, βλ. [KM08].

### 6.3 Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων

Ακολούθως θα γίνει παρουσίαση αποτελεσμάτων από εκτελέσεις της εφαρμογής RAP, με θεωρητικά δεδομένα-εισόδους και πραγματικά δεδομένα-εισόδους που προήλθαν από νυχτερινή μέτρηση συστήματος lidar του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου. Πιο συγκεκριμένα, θα δίνουμε τα εύρη με συγκεκριμένο βήμα των παραμέτρων  $r_{min}, r_{max}$  και του πραγματικού και μιγαδικού μέρους του δείκτη διάθλασης  $mR$  και  $mI$  αντίστοιχα και θα εκτελέσουμε την εφαρμογή με τις μεθόδους επιλογής παραμέτρου κανονικοποίησης discrepancy principle και generalized cross validation, (GCV). Το πρόγραμμα RAP υπολογίζει σαν λύση την κατανομή του αριθμού των σωματιδίων  $n(r)$  ή την κατανομή όγκου  $v(r)$  από τον μέσο όρο όλων των λύσεων που προκύπτουν και ταυτόχρονα δίνει την τυπική απόκλιση ( $\pm\sigma$ ) όλων των λύσεων από την λύση του μέσου όρου. Επιπλέον υπολογίζονται οι παράμετροι number concentration  $n_t$ , effective radius  $r_{eff}$ , surface-area concentration  $s_t$ , volume concentration  $v_t$  και complex refractive index. Επίσης υπολογίζονται οι παράμετροι mean radius και mean width, οι οποίες χρησιμοποιούνται για την κατασκευή της κατανομής lognormal για σύγκριση με τις προσεγγιστικές λύσεις που προκύπτουν. Ωστόσο εδώ δε θα ασχοληθούμε με τις τελευταίες. Κατόπιν τα οπτικά δεδομένα επαναυπολογίζονται για κάθε λύση και μπορούμε να έχουμε μία εικόνα για το πόσο καλή προσέγγιση είναι η λύση του μέσου όρου που βρέθηκε, αν και όπως θα δούμε, ακόμα και αν έχουμε έντονη ασυμφωνία από τα δεδομένα εισόδου, οι μικροφυσικές παράμετροι υπολογίζονται με ικανοποιητική ακρίβεια. Από το χώρο των κανονικοποιημένων λύσεων που προκύπτει θα πρέπει να περιορίσουμε τις λύσεις μειώνοντας με μία διαδικασία μετεπεξεργασίας των λύσεων. Κατά τη μετεπεξεργασία των λύσεων μεταβάλλουμε (αυξομειώνουμε) το % εύρος της ασυμφωνίας από τα αρχικά οπτικά δεδομένα, ή/και περιορίζουμε τα εύρη των  $r_{min}, r_{max}$ , ή/και επιπλέον μεταβάλλουμε το σφάλμα στο λόγο lidar (l.r.).

|| Οι παράμετροι number concentration  $n_t$ , volume concentration  $v_t$ , surface-area concentration και effective radius δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις

$$n_t = \int n(r) dr, \quad v_t = \int v(r) dr, \quad s_t = 3 \int \frac{v(r)}{r} dr, \quad \text{και} \quad r_{eff} = 3 \frac{v_t}{s_t}.$$

Πίνακας 6.1: Παράμετροι για το run 1.

Παράμετρος	Layer 1 (simulation)
$\alpha(355) (m^{-1})$	$7.1 \cdot 10^{-7}$
$\alpha(532) (m^{-1})$	$4.9 \cdot 10^{-7}$
$\beta(355) (msr)^{-1}$	$5.8 \cdot 10^{-9}$
$\beta(532) (msr)^{-1}$	$4.2 \cdot 10^{-9}$
$\beta(1064) ((msr)^{-1})$	$1.3 \cdot 10^{-9}$
$r_{min} (\mu m)$	0.01 έως 0.2 με βήμα 0.03
$r_{max} (\mu m)$	0.5 έως 5 με βήμα 0.5
$mR$	1.325 έως 1.8 με βήμα 0.025
$mI$	0 έως 0.1 με βήμα 0.003

Μεταβάλλοντας τα εύρη των  $r_{min}$  και  $r_{max}$  μεγαλώνουμε ή περιορίζουμε το εύρος της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων. Από φυσική σκοπιά, αυτό είναι χρήσιμο, διότι όσον αφορά τη θεωρία σκέδασης Mie, μόνο σωματίδια με συγκεκριμένες διαμέτρους σχετίζονται με τη διαδικασία της σκέδασης. Συνεπώς, πολύ μικρά σωματίδια δε μπορούν να συνεισφέρουν στη σκέδαση, οπότε ο αλγόριθμος αντιστροφής μπορεί να παράξει τεχνητά μεγάλους αριθμούς από αυτά, αφού δεν επηρεάζουν τις οπτικές ιδιότητες. Για αυτό το λόγο θα πρέπει να περιοριστεί ο χώρος λύσεων. Όσον αφορά το  $r_{min}$ , αποκόπτουμε την «αριστερή πλευρά» της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων αυξάνοντας την τιμή του. Όπως θα δούμε, με αυτό τον τρόπο αυξάνεται ο αριθμός των λύσεων. Όμως, αν αποκόψουμε υπέρ του δέοντος, η λύση του μέσου όρου που παράγεται δε θα είναι σωστή, διότι ταυτόχρονα αποκόπτουμε σωματίδια που αλληλεπιδρούν με το φως. Αυτό θα είναι εμφανές όταν η κατανομή μεγέθους γίνει πολύ απότομη από την αριστερή πλευρά της. Είναι σαφές, ότι περισσότερο αντικειμενικό κριτήριο είναι να συγκρίνουμε τις οπτικές παραμέτρους που επαναυπολογίζονται με τις εισόδους, όμως αυτή η σύγκριση πρέπει να γίνει προσεκτικά καθώς πολύ σπάνια μιλάμε για μία και μόνο λύση. Επιπλέον, έχει παρατηρηθεί ότι όσο πιο πολύ «κβόσουμε» την κατανομή από αριστερά (αύξηση του  $r_{min}$ , μείωση του αριθμού των μικρών σωματιδίων) υπάρχει περίπτωση να εμφανιστεί δεύτερη κορυφή η οποία συχνά δε λαμβάνεται υπόψη ως λιγότερο πιθανή\*\*.

Τα παρακάτω αποτελέσματα προήλθαν από εφαρμογή του προγράμματος RAP σε PC Samsung με επεξεργαστή 2.40GHz και μνήμη RAM 3.50GB. Η εκτελέσεις του προγράμματος για το κύριο μέρος της αντιστροφής και την παραγωγή του μαθηματικού χώρου λύσεων είχαν διάρκεια της τάξης των 2 ωρών. Ήδη βλέπουμε ότι χρονικό κόστος είναι απαγορευτικό για να την εξαγωγή μίας καλής στατιστικής αριθμητικών πειραμάτων. Πραγματοποιήσαμε > 10 διαφορετικά κύρια runs του προγράμματος RAP, και θα παρουσιάζουμε 3 από αυτά στη συνέχεια. Σημειώνεται ότι από εδώ και πέρα προτιμάται η συνήθης αγγλική ορολογία που συναντά κανείς στα σύγχρονα άρθρα έναντι της ελληνικής που σε πολλά σημεία είναι αδόκιμη.

### 6.3.1 Ανάλυση Αποτελεσμάτων από Θεωρητικά Δεδομένα με τη Μέθοδο Discrepancy Principle

Η πρώτη εκτέλεση (run 1) πραγματοποιείται με δεδομένα εισόδου που προκύπτουν από προσομοίωση της κατανομής  $n(r)$  από κατανομή lognormal με στρωγγύλευση 2 σημαντικών ψηφίων των οπτικών δεδομένων:  $\alpha(355) = 7.1 \cdot 10^{-7} m^{-1}$ ,  $\alpha(532) = 4.9 \cdot 10^{-7} m^{-1}$  και  $\beta(355) = 5.8 \cdot 10^{-9} (msr)^{-1}$ ,  $\beta(532) = 4.2 \cdot 10^{-9} (msr)^{-1}$ ,  $\beta(1064) = 1.3e^{-9} (msr)^{-1}$ , οι οποίες προσομοιώνουν τα οπτικά δεδομένα σε υψομετρικό εύρος από 0 έως 1100 m. Η μέθοδος επιλογής παραμέτρου κανονικοποίησης που επιλέχθηκε για αυτό το αριθμητικό πείραμα είναι η discrepancy principle. Τα εύρη για τα άκρα ολοκλήρωσης είναι για το  $r_{min}$  σε  $\mu m$  (μικρόμετρα) από 0.01 έως 0.2 με βήμα 0.03 και για το  $r_{max}$  από 0.5 έως 5 με βήμα 0.5 και τα εύρη των  $mR$ ,  $mI$  είναι αντίστοιχα από 1.325 έως 1.8 με βήμα 0.025 και από 0 έως 0.1 με βήμα 0.003 (βλ. πίνακα 6.1).

Το πρόγραμμα παράγει συνολικά 35700 λύσεις, οι οποίες παρουσιάζουν εύρος ασυμφωνίας<sup>††</sup> (discrepancy range, d.r.) από 3.757 έως  $6.4330 \cdot 10^4\%$ . Είναι φανερό ότι όλες αυτές οι λύσεις συνιστούν το μαθηματικό

\*\*Κριτήριο απόρριψης/αποδοχής της δεύτερης κορυφής είναι ο λόγος fine mode effective radius προς total effective radius να είναι πάνω από 0.9, ωστόσο όμως είναι υποκειμενικό.

†† Δεν πρέπει να δημιουργείται σύγχυση με την ασυμφωνία από την αρχή της ασυμφωνίας. Εδώ υπονοείται ένα είδος σχετικής % ασυμφωνίας με τα αρχικά δεδομένα. Ο έλεγχος και περιορισμός των λύσεων μέσω του discrepancy range δεν έχει να κάνει με το ότι χρησιμοποιείται η μέθοδος επιλογής παραμέτρου κανονικοποίησης discrepancy principle. Παρακάτω θα δούμε εφαρμογή της ίδιας συνοριακής συνθήκης (m.d.) και με τη μέθοδο GCV.

### 6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

χώρο λύσεων που πρέπει να περιοριστεί διότι στερείται φυσικού νοήματος και καλών προσεγγίσεων. Οι συννοριακές συνθήκες που επιβάλλουμε μετά από το «κύριο μέρος» της αντιστροφής είναι η μέγιστη ασυμφωνία (maximum discrepancy, m.d.) και το μέγιστο σφάλμα του λόγου lidar.

Είναι φανερό ότι, ακόμα και το ελάχιστο discrepancy ίσο με 3.757%, ότι είναι ήδη αρκετή απόκλιση από τα δεδομένα. Επιπλέον, δε μπορεί κανείς να αγνοήσει, το τεράστιο ποσοστό ασυμφωνίας που υπάρχει αν συμπεριλάβουμε όλες τις λύσεις. Αυτά είναι ενδεικτικά της ποιότητας των λύσεων που έχουμε λάβει, πριν ακόμα αρχίσουμε τη μετεπεξεργασία του χώρου λύσεων. Ωστόσο, θα πρέπει να αναφερθεί, ότι η ασυμφωνία με τα δεδομένα είναι ένα κριτήριο για το πως δουλεύει ένας αλγόριθμος, δεν αποτελεί όμως το μοναδικό κριτήριο, και θα πρέπει να συνδυαστεί με περαιτέρω πληροφορίες.

Αρχικά δοκιμάζουμε m.d.=40% και αριστερό άκρο του  $r_{min}$  (left  $r_{min}$  ή  $l.r_{min}$ ) ίσο με 0.04 και οι λύσεις μειώνονται σε 29158 (βλ. πίν. 6.2). Συνεχίζουμε εκτελώντας διαδοχικά για m.d. ίσο με, 40, 30, 20, 10% και για  $l.r_{min}$  ίσο με 0.04, 0.07, 0.13 και 0.17<sup>‡‡</sup> για κάθε ένα από τα m.d. ξεχωριστά. Όσο μειώνουμε το m.d. για το ίδιο  $l.r_{min}$  παρατηρούμε μείωση των λύσεων, που είναι αναμενόμενο, διότι ολοένα απαλλασσόμαστε από λύσεις που απέχουν περισσότερο από τα αρχικά δεδομένα και μένουν οι πιο «εκλεκτές». Δυστυχώς, όπως φαίνεται από τον πίνακα 6.2, για να πάρουμε κάποιες «αξιοπρεπείς λύσεις» που έχουν d.r. έως 20% ή 10% π.χ. για  $l.r_{min} = 0.04$ , το πλήθος των λύσεων είναι 264 ή 48 αντίστοιχα. Αυτό σημαίνει, π.χ. για την περίπτωση m.d.=20%, ότι μόνο το 0.74% των λύσεων περίπου έχει ασυμφωνία έως 20% με τα δεδομένα.

Αυτή η μάλλον κακή κατάσταση δεν είναι τόσο απελπιστική όσο φαίνεται, διότι πράγματι δε πρέπει να δεχτούμε πάρα πολλές λύσεις. Για να ποσοτικοποιήσουμε, μιας και μιλάμε για πρακτικά παραδείγματα, οι λύσεις μας δεν πρέπει να ξεπερνούν τις 500, διότι η εμπειρία έχει δείξει ότι καταστρέφονται από το υπερβολικό averaging, όπως αναφέρει ο Müller στο εγχειρίδιο του προγράμματος RAP. Ταυτόχρονα, οι λύσεις δε θα πρέπει να είναι λιγότερες από 20-30 διότι τότε εισάγονται και πάλι υποκειμενικά κριτήρια για την ανάλυσή τους.

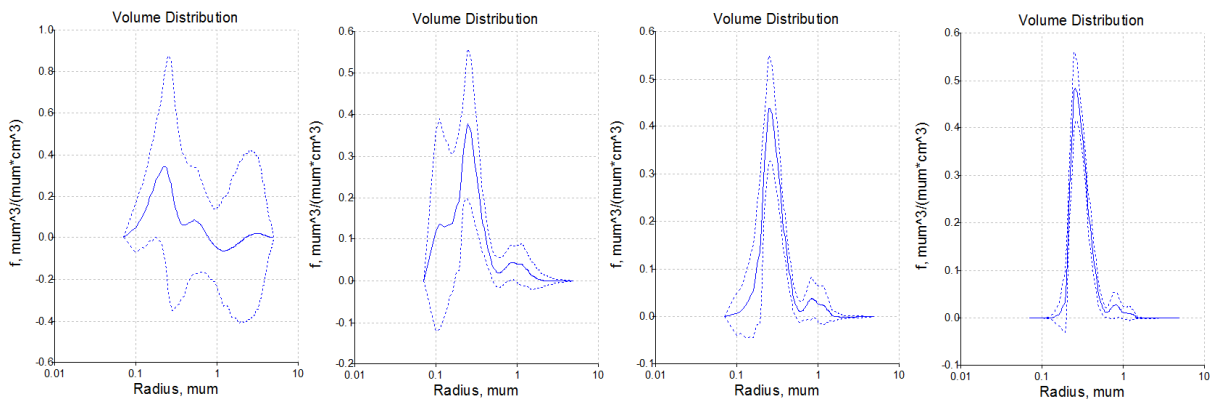
Στα επόμενα γραφήματα όπου υπάρχει διακεκομμένη γραμμή υπονοείται η (τυπική) απόκλιση των λύσεων από τη λύση του μέσου όρου που υπολογίζεται, ενώ με σταυρό (+) σημειώνονται τις τιμές των αρχικών δεδομένων (εισόδοι). Στην εικόνα 6.1 βλέπουμε πώς μεταβάλλονται οι λύσεις του μέσου όρου για τη κατανομή όγκου μεγέθους ως προς  $r$ , καθώς μειώνουμε το m.d. από 40 έως 10% για  $l.r_{min} = 0.04$ . Παρατηρείται αισθητή καταστολή των «επιπλέον» αρχικών κορυφών αλλά και των ανεπιθύμητων αρνητικών τιμών της κατανομής. Επιπλέον, στην εικόνα 6.3 βρίσκονται οι επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για κάθε m.d. για σύγκριση με τα αρχικά δεδομένα. Γενικώς, για μικρά m.d., όπως φαίνεται και από την εικόνα, επιτυγχάνονται καλές προσεγγίσεις των (αρχικών) οπτικών δεδομένων  $\alpha$  και  $\beta$ , κάτι το οποίο είναι χαρακτηριστική επιτυχία του αλγορίθμου του προγράμματος. Όσο αφορά το lidar ratio, περαιτέρω βελτίωση της ανάκτησής του σημειώνεται με την εφαρμογή της συνοριακής συνθήκης m.l.r.e., όπως θα δούμε στη συνέχεια (βλ. εικ. 6.5). Στην εικόνα 6.2 φαίνονται τα γραφήματα της κατανομής όγκου μεγέθους για m.d.=20% καθώς μεταβάλλουμε το  $l.r_{min}$ . Η ομοιότητα των λύσεων είναι για  $l.r_{min}$  ίσο με 0.04 και 0.07 είναι φανερή, όπως θα δούμε και παρακάτω στην ανάλυσή μας.

Συνεχίζουμε με επιπλέον εκτελέσεις, όπου τώρα για κάθε ένα από τα  $l.r_{min}$  και για κάθε m.d. επιβάλλουμε την συνοριακή συνθήκη maximum lidar ratio error % (m.l.r.e.) διαδοχικά για 10% και κατόπιν για 20%. Όλα τα αποτελέσματα βρίσκονται συγκεντρωτικά στον πίνακα 6.2 σε σύγκριση με τα θεωρητικά δεδομένα (κορυφή του πίνακα).

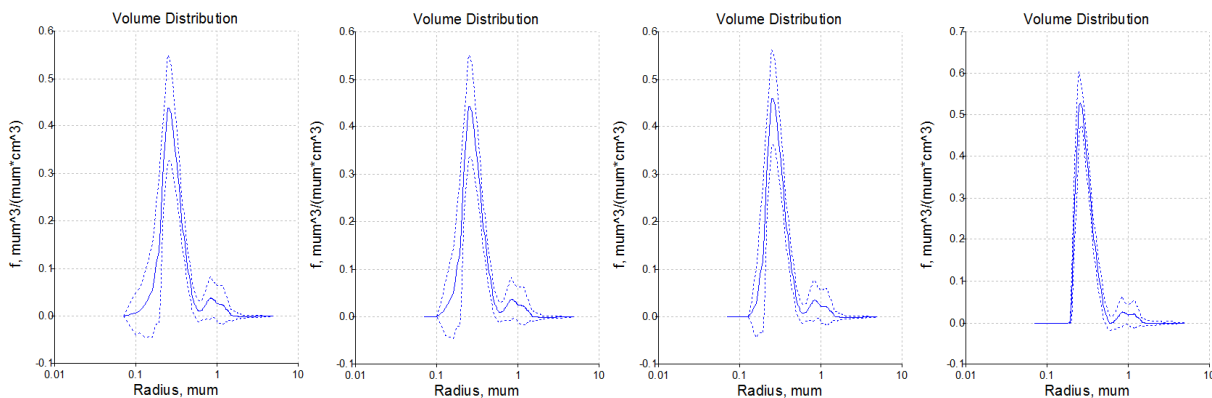
Γενικώς, με μια γρήγορη ματιά φαίνεται ότι χονδρικά οι μέσοι όροι των τιμών στον πίνακα δεν μεταβάλλονται πολύ σημαντικά, αλλά σε λογικά πλαίσια. Ας δώσουμε έμφαση αρχικά στις παραμέτρους effective radius, mR και mI που υπολογίζονται σε κάθε εκτέλεση. Με μία πιο προσεκτική ματιά παρατηρούμε ότι για  $l.r_{min} = 0.04$  και 0.7 τα αποτελέσματα είναι σχετικά ευσταθή (βλ. εικ. 6.2). Για παράδειγμα, για m.d.=20% έχουμε (για  $l.r_{min} = 0.04$  και 0.07),  $r_{eff} = 0.32 \pm 0.047$ , mR ίσο με  $1.34 \pm 0.0191$  και  $1.341 \pm 0.0192$  και  $mI = 0.009 \pm 0.00656$  και  $0.00655$ , αντίστοιχα. Ακόμα, για τα ίδια m.d. και  $l.r_{min}$ , αλλά επιπλέον με m.l.r.e.=20% έχουμε  $r_{eff} = 0.31 \pm 0.04$  και στα δύο,  $mR = 1.341 \pm 0.0190$  και  $mR = 1.341 \pm 0.0191$ ,  $mI = 0.007 \pm 0.00554$  και  $mI = 0.007 \pm 0.00552$ , αντίστοιχα. Οι λύσεις για  $l.r_{min} = 0.13$  είναι επίσης κοντά σε αυτές για 0.04 και 0.07, ενώ μεγαλύτερη μεταβολή στις παραγόμενες λύσεις εμφανίζεται για  $l.r_{min} = 0.17$ . Στην τελευταία περίπτωση παράγονται γενικώς λύσεις που αποκλίνουν λιγότερο από τη λύση του μέσου όρου, που είναι αναμενόμενο αφού οι λύσεις μειώνονται σημαντικά στη μετάβαση από 0.13 σε

<sup>‡‡</sup>Στην πραγματικότητα εκτελέσαμε περισσότερα runs, επιπλέον για τα σημεία για  $r_{min} = 0.01$  και  $r_{min} = 0.1$  για κάθε d.r. και για κάθε max. lidar ratio error (μετέπειτα συνοριακή συνθήκη). Ωστόσο τα αποτελέσματα έδειξαν ότι σε όλες τις περιπτώσεις και τα παραδειγματά μας οι λύσεις για 0.01 και 0.1 συνέπιπταν με αυτές για 0.04 και 0.13 αντίστοιχα. Αυτό σημαίνει ότι για το συγκεκριμένο discrepancy κάθε φορά, δεν υπήρχαν λύσεις για  $r_{min} \in [0.01, 0.04]$  ή  $r_{min} \in [0.1, 0.13]$ , δηλ. αποκλείονται τα σωματίδια με τα εν λόγω μεγέθη. Πράγματι, πραγματοποιώντας runs για π.χ.  $l.r_{min} = 0.01$  και right  $r_{min} = 0.04$  (για οποιοδήποτε m.d.), βρήκαμε 0 λύσεις.

### 6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηνών Κύματος)



Εικόνα 6.1: Η κατανομή όγκου μεγέθους (volume distribution) για  $r_{min} = 0.04$  και m.d. διαδοχικά ίσο με 40, 30, 20 και 10% (αριστερά προς δεξιά.)



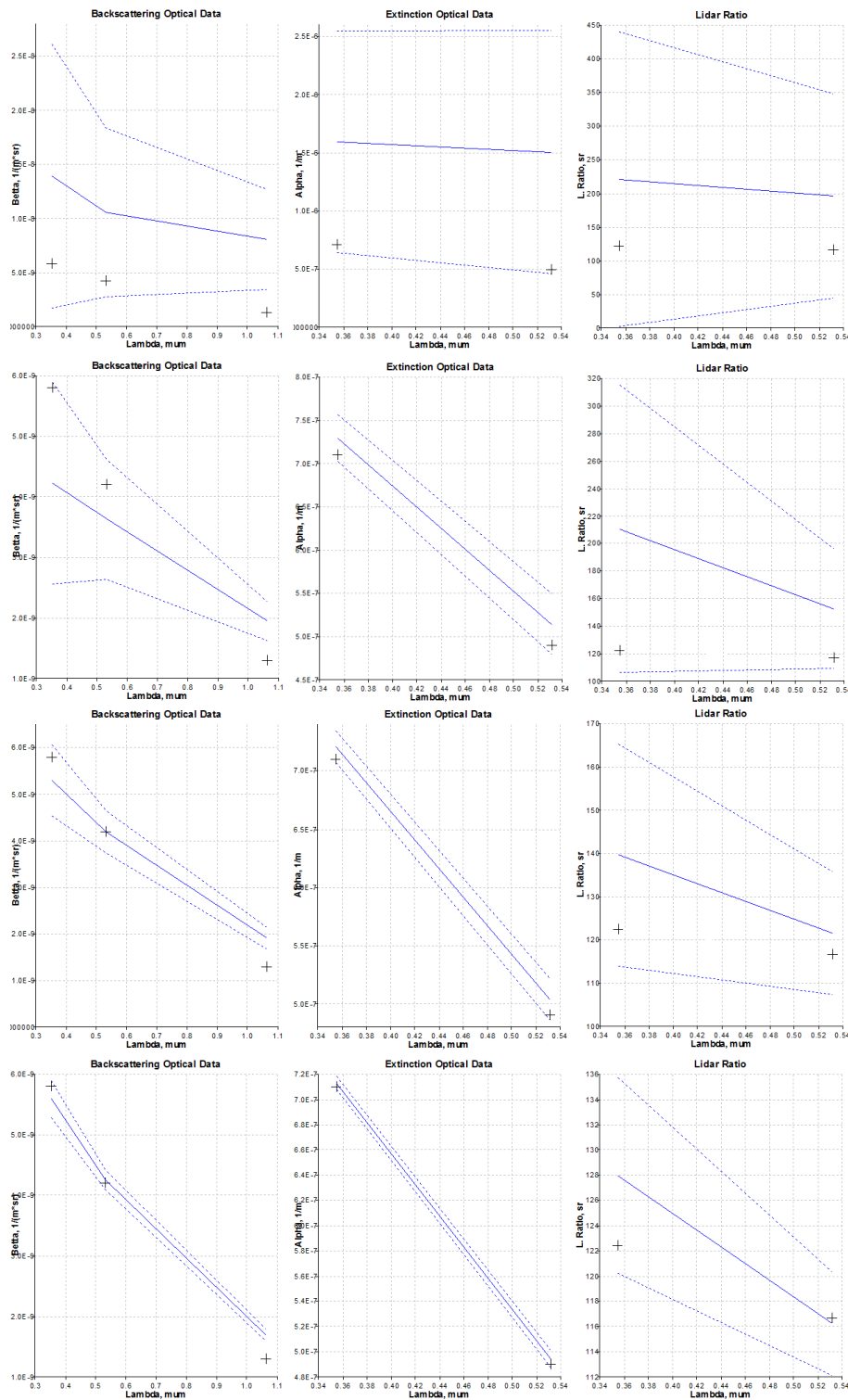
Εικόνα 6.2: Η κατανομή όγκου μεγέθους για m.d.=20% για διαφορετικά inversion windows. Από αριστερά προς δεξιά μεταβάλλουμε το left  $r_{min}$  σε 0.04, 0.07, 0.13 και 0.17.

0.17. Εδώ πρέπει να αναφερθεί ότι ο Müller προτείνει στο εγχειρίδιο του προγράμματος RAP ότι είναι καλύτερο να αναζητηθούν λύσεις για  $l.r_{min} = 0.07$ . Εμφανής είναι η αύξηση των λύσεων στη μετάβαση από m.l.r.e.=10% σε 20% και παρατηρούμε ότι προσθέτοντας αυτή τη συνοριακή συνθήκη, τα αποτελέσματα αλλάζουν και όχι πάντοτε προς το καλύτερο. Η λογική της συνθήκης m.l.r.e είναι όπως και για τη συνθήκη m.d. μία προσπάθεια να πάρουμε - ίσως - πιο ποιοτικές λύσεις, διαλέγοντας αυτές για τις οποίες ο επαναυπολογισμός των δεδομένων θα δώσει μικρότερη απόκλιση από το αρχικό lidar ratio. Η επιλογή της εφαρμογής του m.l.r.e. στη μετεπεξεργασία των δεδομένων δε μας παραξενεύει, καθώς το lidar ratio σχετίζεται άμεσα με τα οπτικά δεδομένα, απαιτώντας μικρότερη γνώση του σφάλματος στα δεδομένα (χρησιμοποιούμε μόνο μία παράμετρο για το σφάλμα αντί για δύο για τα  $\alpha$  και  $\beta$ ). Συνεπώς, είναι εύλογη η χρήση της m.l.r.e. σε συνδυασμό με την m.d..

Στην εικόνα 6.4 βρίσκονται τα γραφήματα της κατανομής όγκου ως προς  $r$  για  $l.r_{min} = 0.07$ , m.d.=10% (πάνω) και για m.d.=20% (κάτω) για m.l.r.e. ίσο με 10 και 20%, σε σύγκριση με τα αντίστοιχα γραφήματα χωρίς την εφαρμογή της συνοριακής συνθήκης m.l.r.e. Στην εικόνα 6.5 φαίνονται οι επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για m.d.=20%,  $r_{min} = 0.13$ , χωρίς και με τη συνθήκη m.l.r.e.=20% (πάνω και κάτω γραφήματα αντίστοιχα) σε σύγκριση με τα δεδομένα-εισόδους. Η προσέγγιση του lidar ratio είναι βελτιωμένη μετά την εφαρμογή της συνθήκης m.l.r.e., όπως αναμενόταν. Η εικόνα 6.6 δίνει τις υπολογιστικές λύσεις για τη κατανομή όγκου για m.d.=10%, και m.l.r.e.=20% για καθένα από τα  $l.r_{min}$  0.04, 0.07, 0.13 και 0.17. Εδώ οι λύσεις ταυτίζονται για  $r_{min} = 0.04$  και 0.07.

Ο αλγόριθμος καταφέρνει να προσεγγίσει αρκετά καλά τη θεωρητική τιμή της surface-area concentration  $s_t$  (καλύτερα από όλες τις άλλες παραμέτρους, αν και δευτερεύουσας σημασίας παράμετρος), μάλιστα ο μέσος όρος όλων των λύσεων για το  $s_t$  (0.89) είναι πολύ κοντά στη θεωρητική τιμή (0.85). Επιπλέον

### 6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηνών Κύματος)



Εικόνα 6.3: Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για  $l.r_{min} = 0.04$  και m.d. διαδοχικά ίσο με 40, 30, 20, 10% (από πάνω προς τα κάτω). Για κάθε ποσοστό του m.d. επαναυπολογίζονται οι συντελεστές εξασθένησης και οπισθοσκέδασης και το πηλίχό τους (lidar ratio) και συγκρίνονται με τις εισόδους της κύριας αντιστροφής (+).

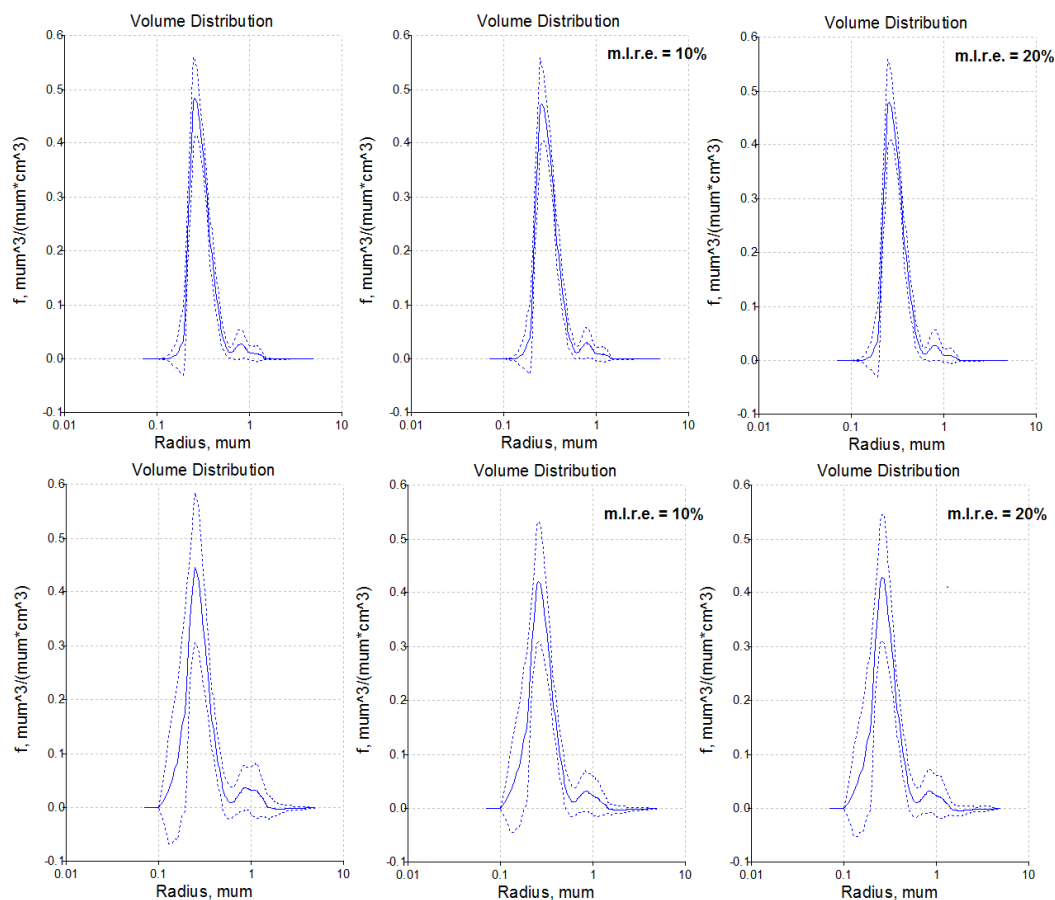


6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

Πίνακας 6.2: Αποτελέσματα για το run 1: θεωρητικά δεδομένα (βλ. πίν. 6.1), μέθοδος discrepancy principle.

Αριθ. εκτέλεσης.	Discrep. range 3.757 έως %	Left $r_{min}$ ( $\mu m$ )	Max. lidar ratio error %	$n_t$ , ( $1/cm^3$ )	$r_{eff}$ , ( $\mu m$ )	$s_t$ , ( $\mu m^2/cm^3$ )	$v_t$ , ( $\mu m^3/cm^3$ )	$mR$	$mI$	Αριθ. λύσεων
Θεωρ. τιμές	-	-	-	1	0.28	0.85	0.078	1.35	0.005	-
1	6.4330e3	0.01	-	$1.8 \pm 1.9$	$2.1 \pm 1.6$	$0.89 \pm 0.42$	$0.16 \pm 0.91$	1.563 ± 0.1442	0.050 ± 0.0302	35700
2	40	0.04	-	$2.1 \pm 1.8$	$2.4 \pm 1.5$	$0.86 \pm 0.37$	$0.06 \pm 0.8$	1.535 ± 0.1387	0.055 ± 0.02957	29158
3	30	0.04	-	$2.6 \pm 2.7$	$0.3 \pm 0.055$	$1.1 \pm 0.34$	$0.11 \pm 0.041$	1.345 ± 0.0223	0.028 ± 0.02815	793
4	30	0.07	-	$1.2 \pm 0.56$	$0.31 \pm 0.057$	$0.94 \pm 0.14$	$0.097 \pm 0.03$	1.346 ± 0.0227	0.017 ± 0.01228	626
5	30	0.13	-	$1.3 \pm 0.3$	$0.3 \pm 0.055$	$0.9 \pm 0.097$	0.093 ± 0.025	1.346 ± 0.0231	0.017 ± 0.01241	553
6	30	0.17	-	$0.87 \pm 0.088$	$0.3 \pm 0.049$	$0.85 \pm 0.054$	0.085 ± 0.018	1.345 ± 0.0222	0.015 ± 0.01177	305
7	30	0.04	10	$1.3 \pm 0.75$	$0.3 \pm 0.046$	$0.92 \pm 0.14$	0.093 ± 0.023	1.343 ± 0.0214	0.007 ± 0.00523	190
8	30	0.07	10	$1.2 \pm 0.46$	$0.3 \pm 0.046$	$0.91 \pm 0.12$	0.092 ± 0.023	1.344 ± 0.0216	0.007 ± 0.00520	180
9	30	0.13	10	$0.99 \pm 0.24$	$0.3 \pm 0.043$	$0.87 \pm 0.078$	0.087 ± 0.018	1.345 ± 0.0222	0.007 ± 0.00498	148
10	30	0.17	10	$0.82 \pm 0.057$	$0.3 \pm 0.038$	$0.82 \pm 0.034$	0.082 ± 0.013	1.346 ± 0.0212	0.006 ± 0.00454	79
11	30	0.04	20	$1.2 \pm 0.74$	$0.29 \pm 0.048$	$0.92 \pm 0.14$	0.091 ± 0.024	1.345 ± 0.0217	0.008 ± 0.00607	316
12	30	0.07	20	$1.1 \pm 0.48$	$0.3 \pm 0.048$	$0.9 \pm 0.12$	0.09 ± 0.024	1.346 ± 0.0220	0.008 ± 0.00609	302
13	30	0.13	20	$0.99 \pm 0.25$	$0.29 \pm 0.045$	$0.87 \pm 0.079$	0.085 ± 0.019	1.346 ± 0.0224	0.007 ± 0.00574	258
14	30	0.17	20	$0.82 \pm 0.06$	$0.29 \pm 0.04$	$0.82 \pm 0.035$	0.079 ± 0.014	1.346 ± 0.0218	0.006 ± 0.00513	146
15	20	0.04	-	$1.1 \pm 0.63$	$0.32 \pm 0.047$	$0.91 \pm 0.12$	0.098 ± 0.023	1.34 ± 0.0191	0.009 ± 0.00656	264
16	20	0.07	-	$1.1 \pm 0.37$	$0.32 \pm 0.047$	$0.9 \pm 0.093$	0.097 ± 0.022	1.341 ± 0.0192	0.009 ± 0.00655	256
17	20	0.13	-	$0.97 \pm 0.22$	$0.32 \pm 0.046$	$0.88 \pm 0.07$	0.095 ± 0.02	1.341 ± 0.0193	0.009 ± 0.00667	229
18	20	0.17	-	$0.83 \pm 0.062$	$0.32 \pm 0.042$	$0.85 \pm 0.038$	0.091 ± 0.016	1.338 ± 0.0165	0.008 ± 0.00657	137
19	20	0.04	10	$1.3 \pm 0.67$	$0.32 \pm 0.039$	$0.94 \pm 0.13$	0.099 ± 0.023	1.339 ± 0.0177	0.007 ± 0.00522	138
20	20	0.07	10	$1.2 \pm 0.46$	$0.32 \pm 0.04$	$0.92 \pm 0.11$	0.098 ± 0.022	1.34 ± 0.0179	0.007 ± 0.00516	131
21	20	0.13	10	$1 \pm 0.25$	$0.32 \pm 0.035$	$0.89 \pm 0.076$	0.094 ± 0.016	1.34 ± 0.0178	0.006 ± 0.00476	104
22	20	0.17	10	$0.81 \pm 0.056$	$0.32 \pm 0.028$	$0.83 \pm 0.028$	0.088 ± 0.01	1.339 ± 0.0173	0.004 ± 0.00399	51
23	20	0.04	20	$1.2 \pm 0.6$	$0.31 \pm 0.04$	$0.92 \pm 0.12$	0.096 ± 0.022	1.341 ± 0.0190	0.007 ± 0.00554	192
24	20	0.07	20	$1.1 \pm 0.41$	$0.31 \pm 0.04$	$0.91 \pm 0.1$	0.095 ± 0.021	1.341 ± 0.0191	0.007 ± 0.00552	185
25	20	0.13	20	$0.99 \pm 0.24$	$0.31 \pm 0.037$	$0.88 \pm 0.074$	0.092 ± 0.017	1.341 ± 0.0192	0.007 ± 0.00538	158
26	20	0.17	20	$0.81 \pm 0.057$	$0.31 \pm 0.03$	$0.83 \pm 0.029$	0.086 ± 0.011	1.338 ± 0.0175	0.004 ± 0.00421	83
27	10	0.04/0.07	-	$0.84 \pm 0.085$	$0.33 \pm 0.022$	$0.85 \pm 0.029$	0.093 ± 0.0082	1.331 ± 0.0108	0.004 ± 0.00333	48
28	10	0.13	-	$0.83 \pm 0.067$	$0.33 \pm 0.022$	$0.85 \pm 0.026$	0.093 ± 0.0083	1.331 ± 0.0109	0.004 ± 0.00336	47
29	10	0.17	-	$0.81 \pm 0.042$	$0.33 \pm 0.023$	$0.85 \pm 0.023$	0.093 ± 0.0087	1.332 ± 0.0113	0.004 ± 0.00355	38
30	10	0.04/0.07	10	$0.85 \pm 0.09$	$0.32 \pm 0.022$	$0.85 \pm 0.031$	0.093 ± 0.0082	1.333 ± 0.0114	0.003 ± 0.00342	40
31	10	0.13	10	$0.84 \pm 0.071$	$0.33 \pm 0.022$	$0.85 \pm 0.027$	0.092 ± 0.0082	1.333 ± 0.0115	0.003 ± 0.00346	39
32	10	0.17	10	$0.82 \pm 0.044$	$0.33 \pm 0.024$	$0.84 \pm 0.022$	0.092 ± 0.0087	1.334 ± 0.0120	0.004 ± 0.00374	30
33	10	0.04/0.07	20	$0.84 \pm 0.086$	$0.33 \pm 0.021$	$0.85 \pm 0.03$	0.093 ± 0.0079	1.332 ± 0.0110	0.003 ± 0.00326	45
34	10	0.13	20	$0.84 \pm 0.068$	$0.33 \pm 0.021$	$0.85 \pm 0.027$	0.093 ± 0.008	1.332 ± 0.0111	0.003 ± 0.00329	44
35	10	0.17	20	$0.81 \pm 0.043$	$0.33 \pm 0.022$	$0.85 \pm 0.022$	0.092 ± 0.0084	1.333 ± 0.0116	0.004 ± 0.00350	35

### 6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

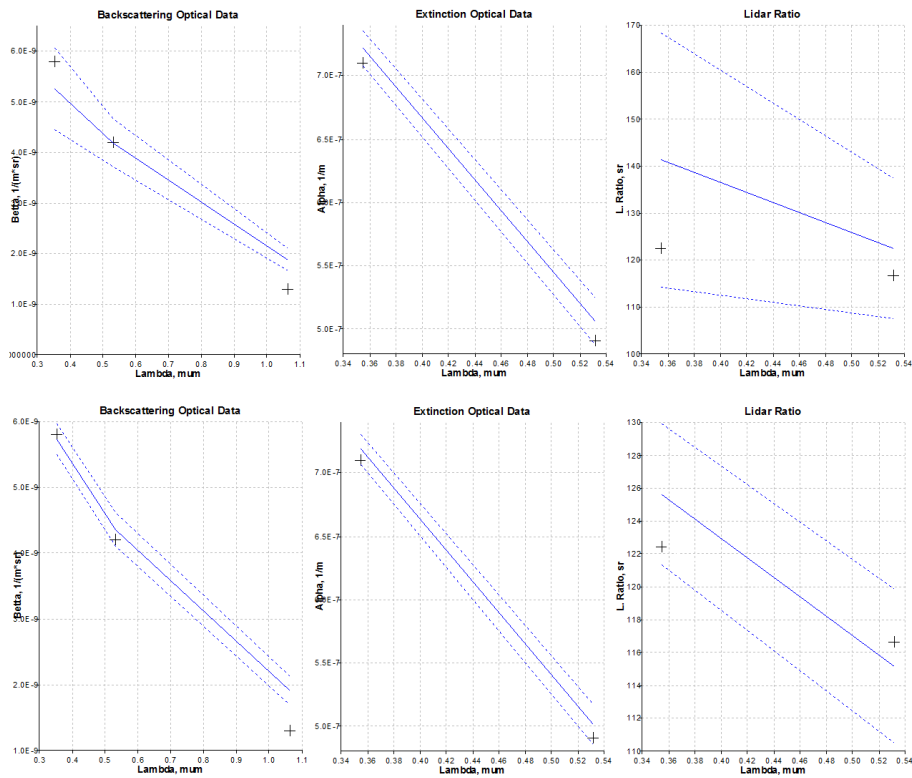


Εικόνα 6.4: Η κατανομή όγκου μεγέθους για  $l.r_{min} = 0.07$ , και m.d. ίσο με 10%(πάνω) ή 20% (κάτω) μετά την εφαρμογή της συνοριακής συνθήκης m.l.r.e. για 10% και 20%.

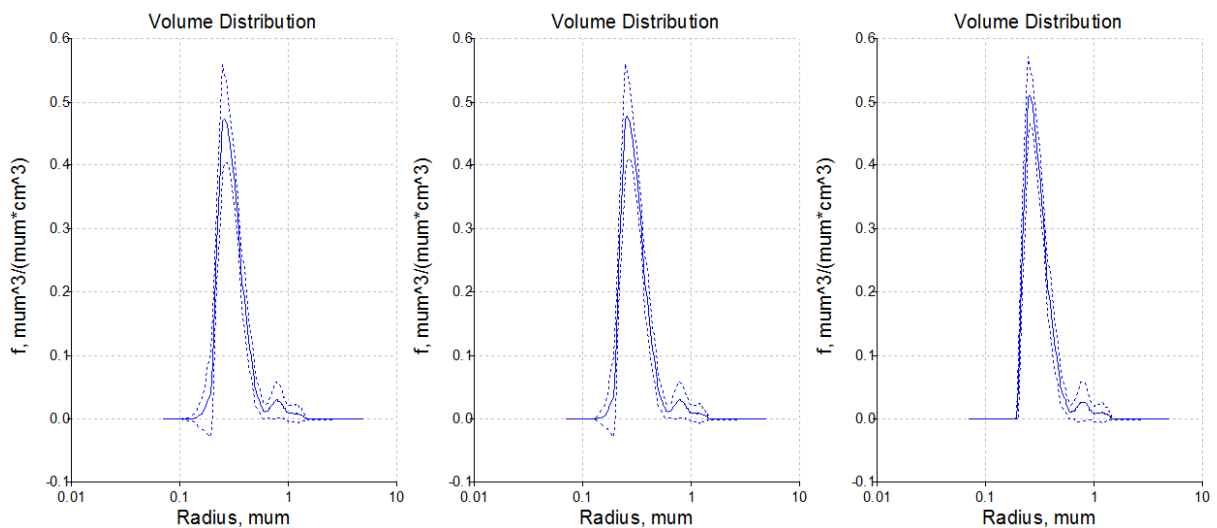
μειώνοντας διαδοχικά το m.d. παρατηρούμε ότι συστηματική μείωση στις μικροφυσικές παραμέτρους number concentration  $n_t$  και των mR, mI. Ταυτόχρονα βλέπουμε ότι ο αλγόριθμος τείνει να υπερεκτιμήσει βαθμιαία το  $r_{eff}$ , π.χ. για m.d.=10% και  $l.r_{min} = 0.07$  η λύση του μέσου όρου  $r_{eff} = 0.33$  απέχει από τη θεωρητική τιμή 0.28 πιο πολύ από ότι για μεγαλύτερα m.d., επιπλέον όμως έχει και τη μικρότερη τυπική απόκλιση από όλα τα αντίστοιχα runs. Το ίδιο συμβαίνει και για το mR το οποίο υποεκτιμάται στη μικρότερη τιμή που εμφανίζεται στον πίνακα (1.332). Παρά το ότι οι παράμετροι  $r_{eff}$  και mR ξεφεύγουν λίγο από τις θεωρητικές τιμές αντίστοιχα, ταυτόχρονα, διατηρούν την τάξη, και οι αποκλίσεις από το μέσο όρο ιδιαίτερα για m.d. ≤ 20% είναι μικρότερης τάξης και σε σχετικά ανεκτά επίπεδα. Αυτό δε συμβαίνει με το mI, το οποίο έχει ίδιας τάξης απόκλιση (που ενίοτε είναι μεγαλύτερη) από τη λύση του μέσου όρου που υπολογίζεται. Π.χ. στην περίπτωση m.d.=10%,  $l.r_{min} = 0.07$  και m.l.r.e.=10% έχουμε  $mI = 0.003 \pm 0.00326$ .

Τέλος, είναι συχνή μέθοδος να αναζητούνται μοτίβα τα οποία να συνδέουν με κάποιο τρόπο τις παραμέτρους που υπολογίζονται και που ίσως δεν είναι άμεσα ορατά ή δεν έχουν εξηγηθεί θεωρητικά ώστε να αναμένουμε κάποια συμπεριφορά που ιδίως αποκαλυφθεί. Για να γίνουμε πιο συγκεκριμένοι, προς αυτό το σκοπό, παρατίθενται τα γραφήματα όλων των παραμέτρων ξεχωριστά ως προς το  $l.r_{min}$ , στην εικ. 6.7. Παρόλο που δεν αναγνωρίζουμε κάποιο μοτίβο, αναφέρουμε για την πληρότητα ότι ο Müller στο εγχειρίδιο του προγράμματος, ακολουθώντας της ίδια τεχνική με το παρόν (με διαφορετικά δεδομένα), βρήκε ότι υπάρχει ελάχιστο στο γράφημα του volume concentration ως προς το  $l.r_{min}$ . Βεβαίως, αυτή η παρατήρηση θα πρέπει να διερευνηθεί περαιτέρω για το αν είναι σύμπτωση ή αντικειμενικό κριτήριο.

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηνών Κύματος)



Εικόνα 6.5: Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για  $l.r_{min} = 0.13$ ,  $m.d.=20\%$ , χωρίς (πάνω) και με τη συνθήκη  $m.l.r.e.=20\%$  (κάτω).



Εικόνα 6.6: Η κατανομή όγκου μεγέθους (volume distribution) για  $m.d.=10\%$  και  $m.l.r.e.=20\%$  για διαφορετικά inversion windows. Από αριστερά προς δεξιά μεταβάλλουμε το left  $r_{min}$  σε 0.04, 0.07, 0.13 και 0.17. Εμφανίζονται 3 γραφήματα διότι οι λύσεις για  $l.r_{min} = 0.04$  και 0.07 ταυτίζονται.

### 6.3.2 Ανάλυση Αποτελεσμάτων από Θεωρητικά Δεδομένα με τη Μέθοδο GCV

Για τη δεύτερη εκτέλεση (run 2), χρησιμοποιούμε τα ίδια δεδομένα εισόδου (βλ. πίν. 6.1) για να εκτελέσουμε το πρόγραμμα, τώρα όμως, χρησιμοποιώντας την μέθοδο επιλογής παραμέτρου κανονικοποίησης GCV. Τα αποτελέσματα φαίνονται συγκεντρωτικά στο πίνακα 6.3.

Σε πρώτη φάση, φιλτράρουμε τις λύσεις της κύριας αντιστροφής, χρησιμοποιώντας τη συννοριακή συνθήκη  $m.d.$  και μειώνοντας διαδοχικά σε 40, 30, 20 και 10%. Κατ'αρχήν, εύκολα βλέπουμε ότι οι ποσότητα των πιο ποιοτικών λύσεων έχει μειωθεί κατά πολύ. Εδώ συμπεριλάβαμε στη μελέτη μας και την περίπτωση του  $m.d. = 40\%$ . Αν και είναι μεγάλο ποσοστό ασυμφωνίας με τα αρχικά δεδομένα, παίζει το ρόλο του  $m.d. = 30\%$  του προηγούμενου παραδείγματος με τη μέθοδο discrepancy principle από άποψη πλήθους των λύσεων, όπως διαπιστώνει κανείς με μία γρήγορη ματιά στα δεδομένα των πινάκων 6.2 και 6.3. Ωστόσο οι λύσεις διαφέρουν ποιοτικά. Στην εικόνα 6.8 συγκρίνουμε τις λύσεις του μέσου όρου για τη κατανομή όγκου με τη μέθοδο discrepancy principle για  $l.r_{min} = 0.07$  και  $m.d.=30\%$  (αριστερά πάνω) με τις λύσεις για  $m.d.=40\%$  με τη μέθοδο GCV (δεξιά πάνω). Επίσης, συγκρίνονται οι λύσεις όπου επιπλέον επιβάλλαμε  $m.l.r.e.=10\%$  (αριστερά κάτω: μέθ. d.p. και  $m.d.=30\%$  και δεξιά κάτω: μέθ. GCV  $m.d.=30\%$ ). Πέραν της σύγκρισης, δεν εμπιστευόμαστε ιδιαίτερες τις εν λόγω λύσεις, λόγω του μεγάλου  $m.d.$ .

Όπως μπορεί κανείς να δει, δεν είναι μόνο η ποσότητα των ποιοτικών λύσεων περιορισμένη αλλά και η ίδια η ποιότητα. Το ελάχιστο discrepancy έχει αυξηθεί σε 5.743% ενώ και το μέγιστο discrepancy διαφέρει μία τάξη μεγέθους προς τα πάνω από το ήδη τεράστιο ποσοστό του προηγούμενου παραδείγματος. Το πιο ακραίο παράδειγμα σε σύγκριση με το προηγούμενο παράδειγμα είναι ότι για  $m.d.=40\%$  και  $r_{min} = 0.04$  εδώ έχουμε μόλις 579 λύσεις, αντί των 29158 λύσεων του προηγούμενου παραδείγματος. Ένα ακόμα παράδειγμα θα μας πείσει: για  $m.d.=20\%$  και  $l.r_{min} = 0.13$  και  $m.l.r.e. = 20\%$  πήραμε 86 λύσεις αντί 158 λύσεων του προηγούμενου παραδείγματος. Βέβαια, όσο μειώνουμε το  $m.d.$  τόσο μειώνεται η διαφορά στο πλήθος των λύσεων για τις δύο μεθόδους. Παρατηρούμε επίσης ότι για  $m.d. = 10\%$  και  $l.r_{min} = 0.17$ , το d.r. έχει περιορίσει τόσο το χώρο λύσεων (20) που η συνθήκη για  $m.l.r.e.$  ίσο με 10 ή 20% είναι ήδη ενεργοποιημένη. Στην εικόνα 6.9 συγκρίναμε τις λύσεις των δύο μεθόδων από τα runs 1 και 2 για  $r_{min} = 0.07$   $m.d.=20\%$  (πάνω αριστερά και δεξιά για τα run 1 και 2 αντίστοιχα) και για  $r_{min} = 0.17$  και για  $r_{min} = 0.17$ ,  $m.d.=10\%$  και  $m.l.r.e.=10\%$  (κάτω αριστερά και δεξιά για τα run 1 και 2 αντίστοιχα). Ειδικά για την τελευταία περίπτωση (όπου εφαρμόζεται η συνθήκη ελέγχου του lidar ratio) οι λύσεις και για τις δύο περιπτώσεις είναι λιγότερες (για την d.p 30 και για τη GCV 20), και θα πρέπει να γίνει πιο προσεκτική σύγκριση.

Βλέποντας αναλυτικά τις μικροφυσικές παραμέτρους που υπολογίζονται και με τη μέθοδο GCV, οι παρατηρήσεις μας είναι παρόμοιες. Η σταθερότητα στις τιμές των παραμέτρων για  $r_{min}$  ίσο με 0.04 και 0.07 υπάρχει και εδώ, ενώ και αυτή τη μέθοδο αποτυγχάνουμε να πλησιάσουμε το  $mI$  με μικρή τυπική απόκλιση. Αν συγκρίνουμε τις δύο μεθόδους για ένα κοινό run, παρατηρούμε σχετική ομοιότητα των λύσεων του μέσου όρου για τις μεθόδους GCV και discrepancy principle, όταν μειώνεται το  $m.d.$  και σχετική απόκλιση όταν αυξάνεται το  $m.d.$ . Για παράδειγμα για  $m.d. = 20\%$ ,  $l.r_{min} = 0.07$  και  $m.l.r.e.=20\%$  οι παράμετροι για τις μεθόδους GCV και discrepancy principle αντίστοιχα, με τη σειρά που εμφανίζονται στον πίνακα είναι

GCV:	$1 \pm 0.44,$	$0.32 \pm 0.044,$	$0.9 \pm 0.11,$	$0.098 \pm 0.019,$	$1.336 \pm 0.0153,$	$0.007 \pm 0.00439,$
Discrep. pr.:	$1.1 \pm 0.41,$	$0.31 \pm 0.04,$	$0.91 \pm 0.1,$	$0.095 \pm 0.021,$	$1.341 \pm 0.0191,$	$0.007 \pm 0.00552.$

Ενώ για  $m.d.=30\%$  και  $l.r_{min} = 0.07$  οι τιμές στους δύο πίνακες είναι

GCV:	$0.82 \pm 0.064,$	$0.31 \pm 0.054$	$0.84 \pm 0.046$	$0.088 \pm 0.02$	$1.343 \pm 0.0216$	$0.008 \pm 0.00702,$
Discrep. pr.:	$0.87 \pm 0.088$	$0.3 \pm 0.049$	$0.85 \pm 0.054$	$0.085 \pm 0.018$	$1.345 \pm 0.0222$	$0.015 \pm 0.01177$

Η εξάρτηση των μικροφυσικών παραμέτρων από το  $l.r_{min}$  φαίνεται στην εικόνα 6.10.

Για αυτό το παράδειγμα, η μέθοδος GCV φαίνεται να παράγει καλύτερες λύσεις για μεγάλα  $m.d.$  ( $> 30\%$ ) (βλ. εικ. 6.8), ενώ η μέθοδος discrepancy principle για μικρότερα  $m.d.$ . Αυτό συμβαίνει διότι για μεγάλα d.r ο χώρος λύσεων για τη μέθοδο discrepancy principle είναι αρκετά πιο πλούσιος σε λύσεις (όχι κατα ανάγκη καλές) οπότε ο μέσος όρος δίνει φτωχότερα αποτελέσματα. Είναι λογικό ότι η προσπάθεια που γίνεται, είναι στα πλαίσια της μείωσης του  $m.d.$  όσο το δυνατόν περισσότερο. Συνεπώς για το επόμενο αριθμητικό μας πείραμα, όπου έχουμε εισόδους πειραματικά δεδομένα, έχει προτιμηθεί η μέθοδος discrepancy principle.

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

Πίνακας 6.3: Αποτελέσματα για το run 2: θεωρητικά δεδομένα (βλ. πίν. 6.1), μέθοδος GCV

Αριθ. εκτέλεσης.	Discrep. range 5.743 έως %	Left $r_{min}$ , ( $\mu m$ )	Max. lidar ratio error %	$n_t$ , ( $1/cm^3$ )	$r_{eff}$ , ( $\mu m$ )	$s_t$ , ( $\mu m^2/cm^3$ )	$v_t$ , ( $\mu m^3/cm^3$ )	$mR$	$mI$	Αριθ. λύσεων
Θεωρ. τιμές	-	-	-	1	0.28	0.85	0.078	1.35	0.005	-
1	5.1195e4	0.01	-	$2.1 \pm 2.6$	$2.6 \pm 2.6$	$0.83 \pm 0.71$	$0.77 \pm 1.7$	$1.563 \pm 0.1442$	$0.050 \pm 0.0302$	35700
2	40	0.04	-	$1.8 \pm 1.7$	$0.28 \pm 0.082$	$1 \pm 0.23$	$0.093 \pm 0.36$	$1.348 \pm 0.0225$	$0.018 \pm 0.01898$	579
3	40	0.07	-	$1.3 \pm 0.63$	$0.29 \pm 0.08$	$0.94 \pm 0.14$	$0.09 \pm 0.033$	$1.347 \pm 0.0230$	$0.015 \pm 0.01487$	512
4	40	0.13	-	$1.1 \pm 0.35$	$0.29 \pm 0.079$	$0.91 \pm 0.11$	$0.088 \pm 0.03$	$1.347 \pm 0.0232$	$0.014 \pm 0.01437$	458
5	40	0.17	-	$0.84 \pm 0.082$	$0.3 \pm 0.072$	$0.84 \pm 0.055$	$0.085 \pm 0.025$	$1.35 \pm 0.0260$	$0.011 \pm 0.01088$	241
6	40	0.04	10	$1.2 \pm 0.71$	$0.27 \pm 0.07$	$0.9 \pm 0.13$	$0.08 \pm 0.021$	$1.346 \pm 0.0223$	$0.008 \pm 0.00427$	150
7	40	0.07	10	$1.1 \pm 0.44$	$0.27 \pm 0.07$	$0.89 \pm 0.1$	$0.079 \pm 0.021$	$1.346 \pm 0.0224$	$0.008 \pm 0.00430$	147
8	40	0.13	10	$0.99 \pm 0.27$	$0.27 \pm 0.071$	$0.87 \pm 0.08$	$0.079 \pm 0.021$	$1.346 \pm 0.0227$	$0.008 \pm 0.00435$	139
9	40	0.17	10	$0.84 \pm 0.049$	$0.3 \pm 0.054$	$0.83 \pm 0.045$	$0.084 \pm 0.018$	$1.35 \pm 0.0235$	$0.009 \pm 0.00443$	81
10	40	0.04	20	$1.2 \pm 0.87$	$0.27 \pm 0.066$	$0.91 \pm 0.15$	$0.083 \pm 0.022$	$1.346 \pm 0.0223$	$0.008 \pm 0.00535$	317
11	40	0.07	20	$1.1 \pm 0.5$	$0.28 \pm 0.066$	$0.89 \pm 0.11$	$0.083 \pm 0.022$	$1.346 \pm 0.0224$	$0.008 \pm 0.00537$	306
12	40	0.13	20	$0.99 \pm 0.27$	$0.28 \pm 0.067$	$0.87 \pm 0.08$	$0.081 \pm 0.022$	$1.346 \pm 0.0228$	$0.008 \pm 0.00536$	283
13	40	0.17	20	$0.83 \pm 0.057$	$0.3 \pm 0.055$	$0.83 \pm 0.045$	$0.084 \pm 0.02$	$1.349 \pm 0.0241$	$0.008 \pm 0.00565$	171
14	30	0.04	-	$1.6 \pm 1.5$	$0.31 \pm 0.061$	$0.99 \pm 0.22$	$0.1 \pm 0.031$	$1.341 \pm 0.0195$	$0.013 \pm 0.01411$	294
15	30	0.07	-	$1.2 \pm 0.6$	$0.31 \pm 0.059$	$0.94 \pm 0.14$	$0.099 \pm 0.028$	$1.341 \pm 0.0197$	$0.010 \pm 0.00823$	272
16	30	0.13	-	$1 \pm 0.32$	$0.31 \pm 0.058$	$0.9 \pm 0.099$	$0.095 \pm 0.025$	$1.342 \pm 0.0202$	$0.010 \pm 0.00820$	244
17	30	0.17	-	$0.82 \pm 0.064$	$0.31 \pm 0.054$	$0.84 \pm 0.046$	$0.088 \pm 0.02$	$1.343 \pm 0.0216$	$0.008 \pm 0.00702$	150
18	30	0.04	10	$1.1 \pm 0.61$	$0.3 \pm 0.045$	$0.89 \pm 0.11$	$0.09 \pm 0.015$	$1.342 \pm 0.0193$	$0.007 \pm 0.00421$	89
19	30	0.07	10	$1 \pm 0.43$	$0.3 \pm 0.045$	$0.89 \pm 0.097$	$0.09 \pm 0.015$	$1.342 \pm 0.0194$	$0.007 \pm 0.00423$	88
20	30	0.13	10	$0.96 \pm 0.26$	$0.31 \pm 0.044$	$0.87 \pm 0.074$	$0.089 \pm 0.015$	$1.342 \pm 0.0196$	$0.007 \pm 0.00427$	84
21	30	0.17	10	$0.84 \pm 0.044$	$0.32 \pm 0.043$	$0.84 \pm 0.042$	$0.09 \pm 0.016$	$1.345 \pm 0.02$	$0.008 \pm 0.00413$	63
22	30	0.04	20	$1.2 \pm 0.72$	$0.3 \pm 0.05$	$0.91 \pm 0.14$	$0.092 \pm 0.019$	$1.34 \pm 0.0189$	$0.007 \pm 0.00516$	196
23	30	0.07	20	$1.1 \pm 0.53$	$0.3 \pm 0.049$	$0.91 \pm 0.12$	$0.091 \pm 0.019$	$1.34 \pm 0.0190$	$0.007 \pm 0.00516$	193
24	30	0.13	20	$0.97 \pm 0.28$	$0.31 \pm 0.049$	$0.88 \pm 0.08$	$0.09 \pm 0.018$	$1.341 \pm 0.0194$	$0.007 \pm 0.00510$	177
25	30	0.17	20	$0.82 \pm 0.054$	$0.31 \pm 0.05$	$0.84 \pm 0.042$	$0.088 \pm 0.018$	$1.343 \pm 0.0203$	$0.007 \pm 0.00510$	127
26	20	0.04/0.07	-	$1.1 \pm 0.42$	$0.33 \pm 0.047$	$0.91 \pm 0.11$	$0.1 \pm 0.021$	$1.337 \pm 0.0162$	$0.008 \pm 0.00538$	104
27	20	0.13	-	$0.99 \pm 0.27$	$0.33 \pm 0.047$	$0.9 \pm 0.087$	$0.099 \pm 0.021$	$1.337 \pm 0.0163$	$0.008 \pm 0.00543$	100
28	20	0.17	-	$0.83 \pm 0.056$	$0.33 \pm 0.046$	$0.85 \pm 0.041$	$0.094 \pm 0.018$	$1.338 \pm 0.0164$	$0.006 \pm 0.00444$	66
29	20	0.04-0.13	10	$0.92 \pm 0.21$	$0.33 \pm 0.039$	$0.87 \pm 0.066$	$0.095 \pm 0.014$	$1.34 \pm 0.0177$	$0.006 \pm 0.00413$	46
30	20	0.17	10	$0.85 \pm 0.043$	$0.33 \pm 0.039$	$0.85 \pm 0.038$	$0.094 \pm 0.015$	$1.342 \pm 0.0182$	$0.007 \pm 0.00422$	39
31	20	0.04/0.07	20	$1 \pm 0.44$	$0.32 \pm 0.044$	$0.9 \pm 0.11$	$0.098 \pm 0.019$	$1.336 \pm 0.0153$	$0.007 \pm 0.00439$	90
32	20	0.13	20	$0.95 \pm 0.26$	$0.33 \pm 0.044$	$0.89 \pm 0.08$	$0.096 \pm 0.018$	$1.336 \pm 0.0155$	$0.006 \pm 0.00437$	86
33	20	0.17	20	$0.82 \pm 0.054$	$0.33 \pm 0.046$	$0.85 \pm 0.039$	$0.093 \pm 0.017$	$1.338 \pm 0.0164$	$0.006 \pm 0.00435$	65
34	10	0.04-0.17	-/10/20	$0.84 \pm 0.041$	$0.32 \pm 0.022$	$0.85 \pm 0.024$	$0.092 \pm 0.0083$	$1.336 \pm 0.0124$	$0.004 \pm 0.00320$	20

Πίνακας 6.4: Παράμετροι για τα run 2.

Παράμετρος	run 2 (experimental)
$\alpha(355) (m^{-1})$	$2.8123070 \cdot 10^{-4}$
$\alpha(532) (m^{-1})$	$1.5756182 \cdot 10^{-4}$
$\beta(355) (msr)^{-1}$	$3.9280328 \cdot 10^{-6}$
$\beta(532) (msr)^{-1}$	$2.4091790 \cdot 10^{-6}$
$\beta(1064) ((msr)^{-1})$	$9.4212427 \cdot 10^{-7}$
$r_{min} (\mu m)$	0.01 έως 0.2 με βήμα 0.03
$r_{max} (\mu m)$	0.5 έως 5 με βήμα 0.5
$mR$	1.325 έως 1.8 με βήμα 0.025
$mI$	0 έως 0.1 με βήμα 0.003

### 6.3.3 Ανάλυση Αποτελεσμάτων από Πειραματικά Δεδομένα

Για αυτό το αριθμητικό πείραμα χρησιμοποιούμε οπτικά δεδομένα από μία νυχτερινή μέτρηση που έλαβε χώρα την 21η Ιουλίου 2009, 01:00-2:42 UTC στην Αθήνα, από ένα range-corrected σήμα συστήματος Raman lidar (βλ. εικ. 6.12) του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου. Παρατηρήθηκε έντονο layer σε (κατακόρυφη) απόσταση 1.5-3.5km στην ελεύθερη τροπόσφαιρα (βλ. εικ. 6.11 και 6.12)· οι κατανομές των οπτικών παραμέτρων μετά από averaging μας έδωσαν τα παρακάτω 3+2 οπτικά δεδομένα:  $\beta(355) = 3.9280328 \cdot 10^{-6} (msr)^{-1}$ ,  $\beta(532) = 2.4091790 \cdot 10^{-6} (msr)^{-1}$ ,  $\beta(1064) = 9.4212427 \cdot 10^{-7} (msr)^{-1}$ , και  $\alpha(355) = 2.812307 \cdot 10^{-4} m^{-1}$ ,  $\alpha(532) = 1.5756182 \cdot 10^{-4} m^{-1}$ . Η μέθοδος επιλογής παραμέτρου κανονικοποίησης που επιλέχθηκε για αυτό το αριθμητικό πείραμα είναι η discrepancy principle. Τα εύρη για τα άκρα ολοκλήρωσης είναι τα ίδια με αυτά των προηγούμενων runs, βλ. συγκεντρωτικό πίνακα 6.4.

Η μεθοδολογία που ακολουθούμε είναι ακριβώς η ίδια με αυτή των υποενοτήτων 6.3.1, και 6.3.2 με τη μόνη διαφορά ότι εδώ επιτρέπονται και μικρότερες τιμές του m.d. διότι ότι το εύρος ασυμφωνίας d.r είναι πιο ελπιδοφόρο. Πράγματι, βρίσκουμε ελάχιστο discrepancy ίσο με  $5.085 \cdot 10^{-6} \%$  (βλ. πίνακα 6.5), το οποίο δείχνει ότι υπάρχουν λύσεις που αναπαριστούν πολύ καλά τα αρχικά δεδομένα, αν και ήδη γνωρίζουμε ότι αυτό δεν αποτελεί εγγύηση για καλές προσεγγιστικές λύσεις. Και εδώ, χάριν επίδειξης της λειτουργικότητας του αλγορίθμου ξεκινάμε με το σχετικά μεγάλο m.d.=30%, και μειώνουμε σταδιακά σε 20, 12 και 5%, και κατόπιν εφαρμόζουμε και τη συνοριακή συνθήκη m.l.r.e. για 10 και 20% σε κάθε run. Τα 49 runs συνολικά (1 run της κύριας αντιστροφής + 48 «εσωτερικά» runs για το postprocessing) βρίσκονται συγκεντρωτικά στον πίνακα 6.5.

Η πρώτη γενική εικόνα που έχουμε για τα αποτελέσματα είναι βεβαίως οι πολύ μεγάλες υπερεκτιμήσεις των ποσοτήτων  $n_t$ ,  $s_t$  και  $v_t$ , οι οποίες δεν δείχνουν να θεραπεύονται, όσο και αν περιορίσουμε το χώρο λύσεων. Οι συστηματικές υπερεκτιμήσεις αυτών των παραμέτρων έχει αντιμετωπιστεί σε κάποιο βαθμό με πιο εξελιγμένους αλγόριθμους που στηρίζονται στην τεχνολογία της two-dimensional regularization.

Οι μικροφυσικές παράμετροι  $r_{eff}$ , mR και mI διατηρούν φυσιολογικές τιμές και έχουν πιο πλούσια εύρη από αυτά των προηγούμενων παραδειγμάτων. Δυστυχώς όμως δεν επιδεικνύουν σταθερότητα μεταξύ των runs για τις τιμές 0.04, 0.07, 0.13, 0.17 του  $l.r_{min}$ . Για παράδειγμα, παρατηρούμε ότι για m.d.=12% οι τιμές του μέσου όρου για το mR είναι αντίστοιχα 1.411, 1.366, 1.35 και 1.34, ενώ οι τιμές για το  $r_{eff}$  είναι 0.21, 0.26, 0.28 και 0.36. Επιπλέον, και το πλήθος των λύσεων παρουσιάζει μεγάλες διαφορές από το ένα run στο επόμενο. Ενδεικτικά, για το τελευταίο παράδειγμα, το πλήθος των λύσεων είναι αντίστοιχα 288, 129, 50, και 3. Από όλα τα runs βλέπουμε ότι οι τιμές του του μέσου όρου για το  $r_{eff}$  κυμαίνεται από 0.17 (πίν. 6.5 αριθμός εκτέλεσης (αρ.εκτ.) 11) έως  $0.36 \mu m$  (αρ.εκτ. 26, 30), για το mR είναι από 1.329 (αρ.εκτ. 26) έως 1.486 (αρ.εκτ. 11) και για το mI από 0 (αρ.εκτ. 9, 20, 21, 22 25, 29, 30, 32, 33, 37, 38) έως 0.13 (αρ.εκτ. 2).

Εδώ πρέπει να παρατηρήσουμε ότι οι τιμές για το πραγματικό μέρος του δείκτη διάθλασης mR προσεγγίζουν μεν την επιθυμητή τάξη μεγέθους, υπάρχει όμως αρκετή αβεβαιότητα στην ακριβή τιμή μεταξύ δύο διαδοχικών runs. Πράγματι, αν σκεφτεί κανείς ότι τα λογικά όρια που θέσαμε είναι από 1.325 έως 1.8 με βήμα 0.025, δηλ. η μία τιμή απέχει από την επόμενη πιθανή 2.5%, βλέποντας π.χ. τα runs με αρ.εκτ. 23-26 (m.d.=20% και m.l.r.e.=20%) οι τιμές απέχουν κατ' ελάχιστο 1.7% και κατά μέγιστο 12.5%, την ίδια στιγμή που οι τιμές για το πρώτο αριθμητικό παράδειγμα (simulation με τη μέθοδο discrepancy principle) με τις ίδιες συνοριακές συνθήκες απείχαν από 0% έως 0.3%. Μετά από προσεκτική παρατήρηση, φαίνεται ότι

### 6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

οι μεγαλύτερες μεταβάσεις συμβαίνουν στα runs με  $l.r_{min} = 0.04$  και οι σχετικά «ομαλότερες» μεταβολές μεταξύ των runs από 0.07 σε 0.13, ωστόσο δεν μιλάμε για ευστάθεια ακόμα και σε αυτές τιμές.

Στην εικόνα 6.13 βλέπουμε τις προσεγγιστικές λύσεις του μέσου όρου για τη κατανομή όγκου μεγέθους για  $l.r_{min} = 0.04$  καθώς μειώνουμε το m.d. σε 30, 20, 12 και 5% (γραφήματα από αριστερά προς τα δεξιά). Παρατηρούμε ότι η κορυφή της κατανομής συνεχώς μεγαλώνει με τη μείωση του m.d. ενώ η τυπική απόκλιση «ανεβαίνει» σταδιακά πάνω από το 0. Παρόμοια πληροφορία παίρνουμε και από την εικόνα 6.13, όπου εικονίζονται τα γραφήματα της κατανομής του αριθμού των σωματιδίων για τις ίδιες συνοριακές συνθήκες. Ο χώρος λύσεων περιορίζεται σημαντικά με αποκρόπτοντας όλο και περισσότερο από το αριστερό άκρο της κατανομής. Χαρακτηριστικό είναι ότι στη μετάβαση από  $l.r_{min} = 0.04$  σε 0.07 ή από 0.07 σε 0.13 το πλήθος των λύσεων (για το ίδιο m.d.) πέφτει περίπου στο μισό ή κάτω από το μισό, ενώ η μετάβαση σε  $l.r_{min} = 0.17$  ρίχνει κατακόρυφα το πλήθος των λύσεων, τόσο ώστε για m.d.=5% δεν βρίσκουμε καμία λύση.

Περισσότερο δυσοίωνη είναι η κατάσταση για το μιγαδικό μέρος του δείκτη διάθλασης mI, για το οποίο αρχικά παρατηρούμε ότι η τάξη μεγέθους επιτυγχάνεται από τις λύσεις του μέσου όρου, αλλά υπάρχει συστηματική υποεκτίμηση καθώς μειώνουμε το m.d., φτάνοντας στο 0 σε αρκετά runs. Ακόμα όμως και στις εκτελέσεις, όπου η λύση του μέσου όρου υπολογίζεται από ικανοποιητικό αριθμό λύσεων και για όχι πολύ μικρό m.d. (π.χ. αρ.εκτ. 28: m.d.=12%,  $l.r_{min} = 0.07$ , 129 λύσεις,  $mR = 0.002 \pm 0.00255$ ) η τυπική απόκλιση είναι ίδιας τάξης μεγέθους και σχεδόν πάντα μεγαλύτερη από την ίδια την τιμή του μέσου όρου. Η τιμή του mI είναι φανερά εξαρτώμενη από το  $l.r_{min}$  με τις μεγαλύτερες αποκλίσεις να συμβαίνουν για  $l.r_{min} = 0.04$ .

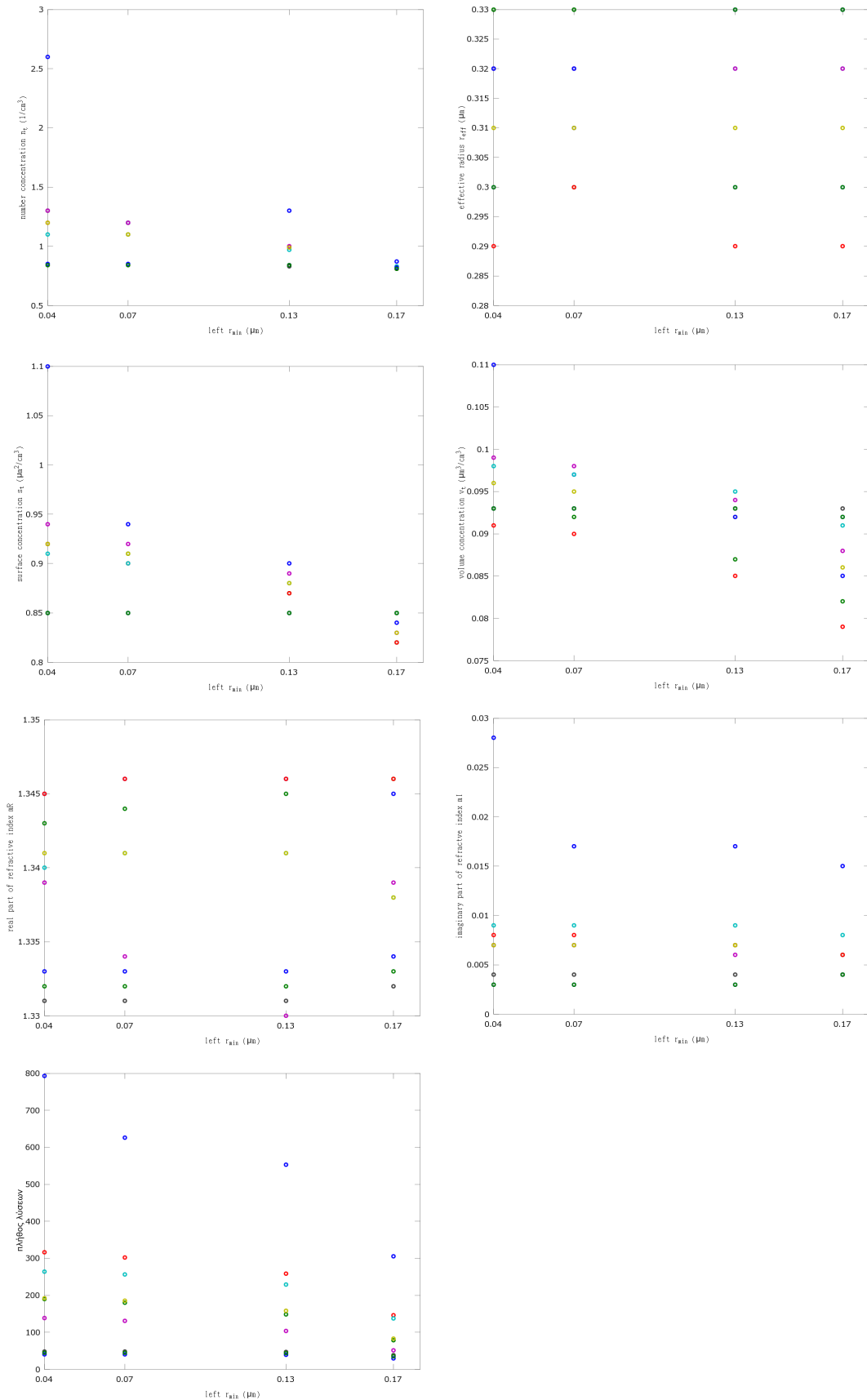
Εδώ πρέπει να σημειωθεί ότι δεν είναι τυχαία η ευαισθησία στο χώρο λύσεων που παρατηρείται για το μιγαδικό μέρος έναντι αυτής του πραγματικού μέρους του δείκτη διάθλασης. Αυτή η ευαισθησία οφείλεται στο ότι, όσον αφορά το mI παρατηρούνται συχνά δύο μέγιστα, το ένα εκ των οποίων είναι το 0, και καταλήγουμε σε μία σχεδόν δικόρυφη (quasi-bimodal) κατανομή, από την οποία επιλέγεται πιθανολογικά η τιμή του mI.

Σημαντική μείωση στο χώρο λύσεων, επιφέρει και η συνοριακή συνθήκη που ελέγχει το σφάλμα για το lidar ratio. Η ιδιαίτερα ευνοϊκή συγκυρία, που αναφέραμε στην αρχή, για το ότι το ελάχιστο discrepancy είναι μικρό και επιτρέπει την ύπαρξη λύσεων με μικρή ασυμφωνία, βρίσκεται εδώ απήχηση. Πράγματι, επιβάλλοντας ένα σχετικά μικρό m.d.=5% οι λύσεις για  $r_{min} = 0.04$  έχουν ήδη ενσωματωμένο m.l.r.e.=20% ενώ οι λύσεις για  $r_{min}$  ίσο με 0.07 ή 0.13 έχουν ακόμα μικρότερο σφάλμα στο lidar ratio ( $\leq 10\%$ ). Στην εικόνα 6.15, παρατηρούμε τη χαρακτηριστική ομοιότητα από τα γραφήματα των επαναυπολογισμένων οπτικών παραμέτρων για  $l.r_{min} = 0.04$ , m.d.=5% χωρίς (πάνω) και με τη συνθήκη m.l.r.e.=10% (κάτω). Δυστυχώς, το μικρό ποσοστό ασυμφωνίας εγγυάται την ύπαρξη τέτοιων λύσεων όχι όμως και τον ικανοποιητικό αριθμό των λύσεων. Γι' αυτό όπως βλέπουμε στον πίνακα 6.5 αυτές οι λύσεις σπανίζουν, π.χ. οι λύσεις για  $l.r_{min} = 0.07$  είναι μόλις 26. Στην εικόνα 6.16, υπάρχει ακόμα ένα παράδειγμα επαναυπολογισμού των οπτικών παραμέτρων για την περίπτωση με  $l.r_{min} = 0.07$ , m.d.=12% χωρίς και με τη συνθήκη m.l.r.e.=10%.

Στην εικόνα 6.17 βλέπουμε πως μεταβάλλονται οι λύσεις για m.d.=12% και m.l.r.e.=10%, αλλάζοντας διαδοχικά το  $l.r_{min}$  με τις γνωστές τιμές. Η κατανομή έχει διαρκώς ψηλότερη (κύρια) κορυφή και μειώνει σταδιακά την απόκλιση από το μέσο όρο. Στην εικόνα 6.18 δίνονται οι λύσεις του μέσου όρου για την κατανομή όγκου και την κατανομή του αριθμού των σωματιδίων για  $l.r_{min}$  ίσο με 0.04 και 0.07 με συνοριακές συνθήκες m.d.=5% και m.l.r.e.=10%. Παρατηρούμε ότι οι κατανομές όγκου παρουσιάζουν κάποια ομοιότητα ως προς το ύψος της κύριας κορυφής και την τυπική απόκλιση. Η κατανομή όγκου με το μικρότερο inversion window (δεξιά) έχει ελαφρώς λιγότερο διακεκριμένη κορυφή και μικρότερη τυπική απόκλιση, ωστόσο παράγεται μόνο από 26 λύσεις. Σε αντιπαράθεση, οι αντίστοιχες κατανομές του αριθμού των σωματιδίων δεν έχουν αυτή τη σχετική ομοιότητα.

Τέλος, σχεδιάσαμε και για αυτό το run τα γραφήματα όλων των παραμέτρων που υπολογίστηκαν σε συνάρτηση με το  $l.r_{min}$  που βρίσκονται συγκεντρωτικά στην εικόνα 6.19.

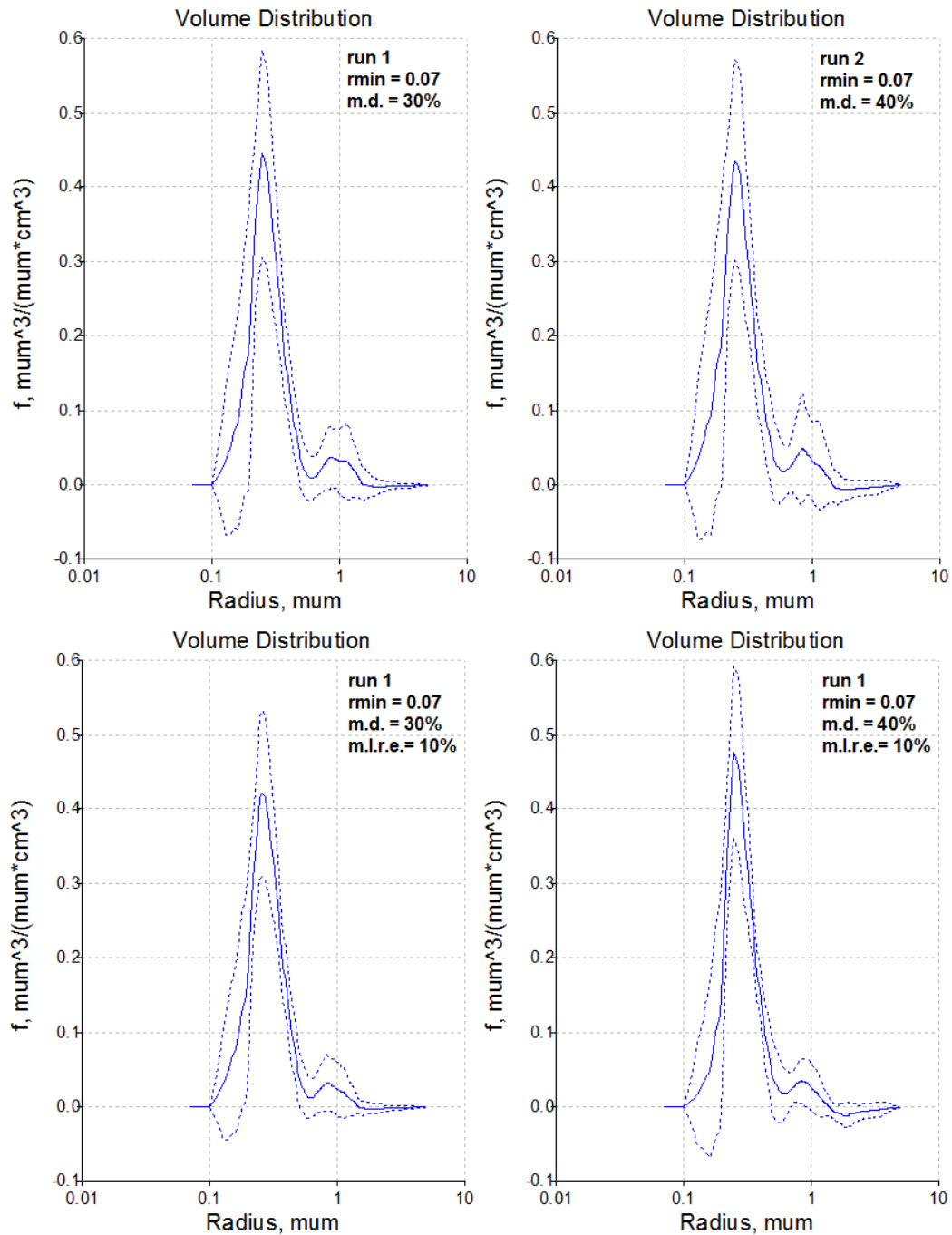
### 6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)



Εικόνα 6.7: Εξάρτηση των μικροφυσικών παραμέτρων που υπολογίζονται από το left  $r_{min}$  για το run 1.

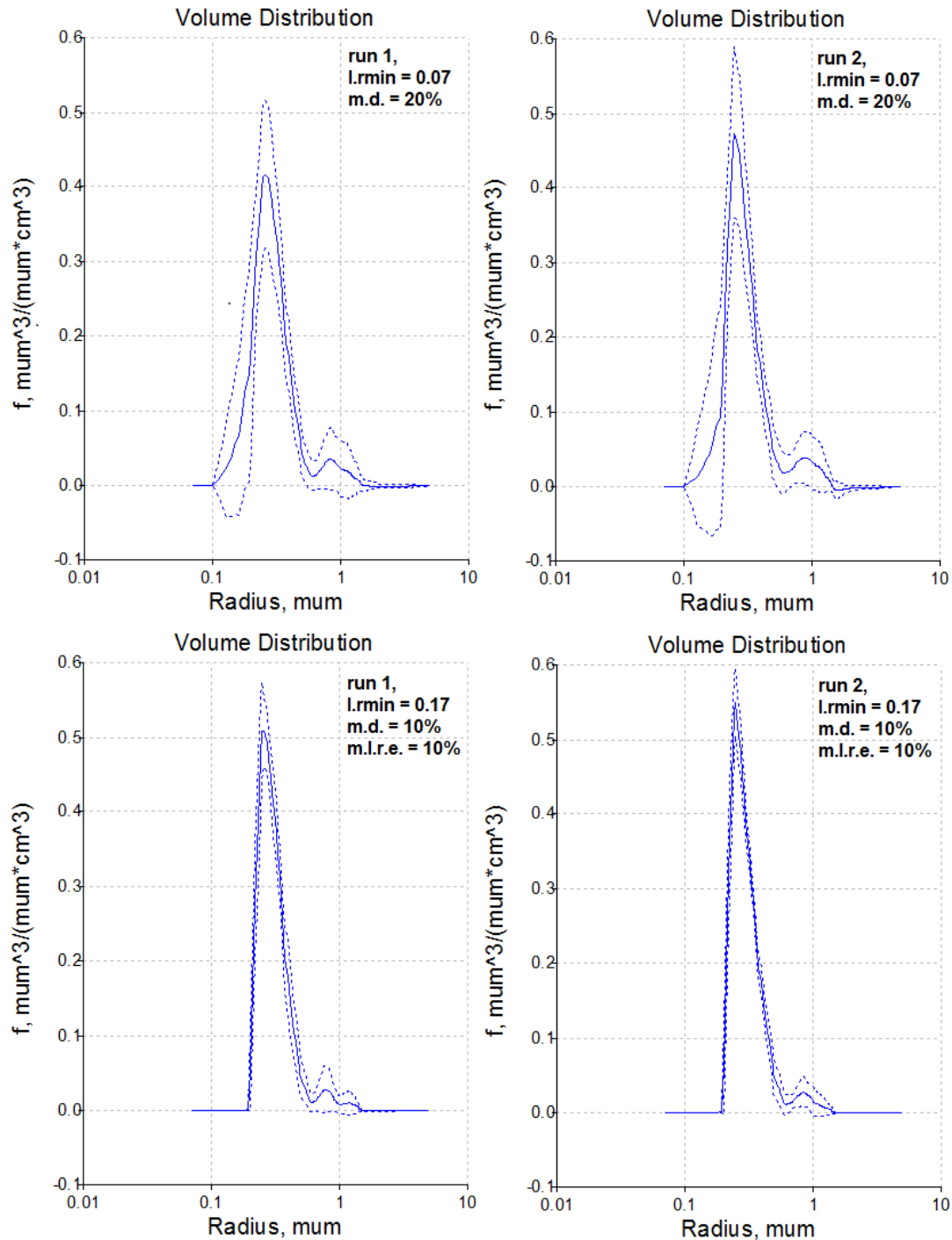


6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)



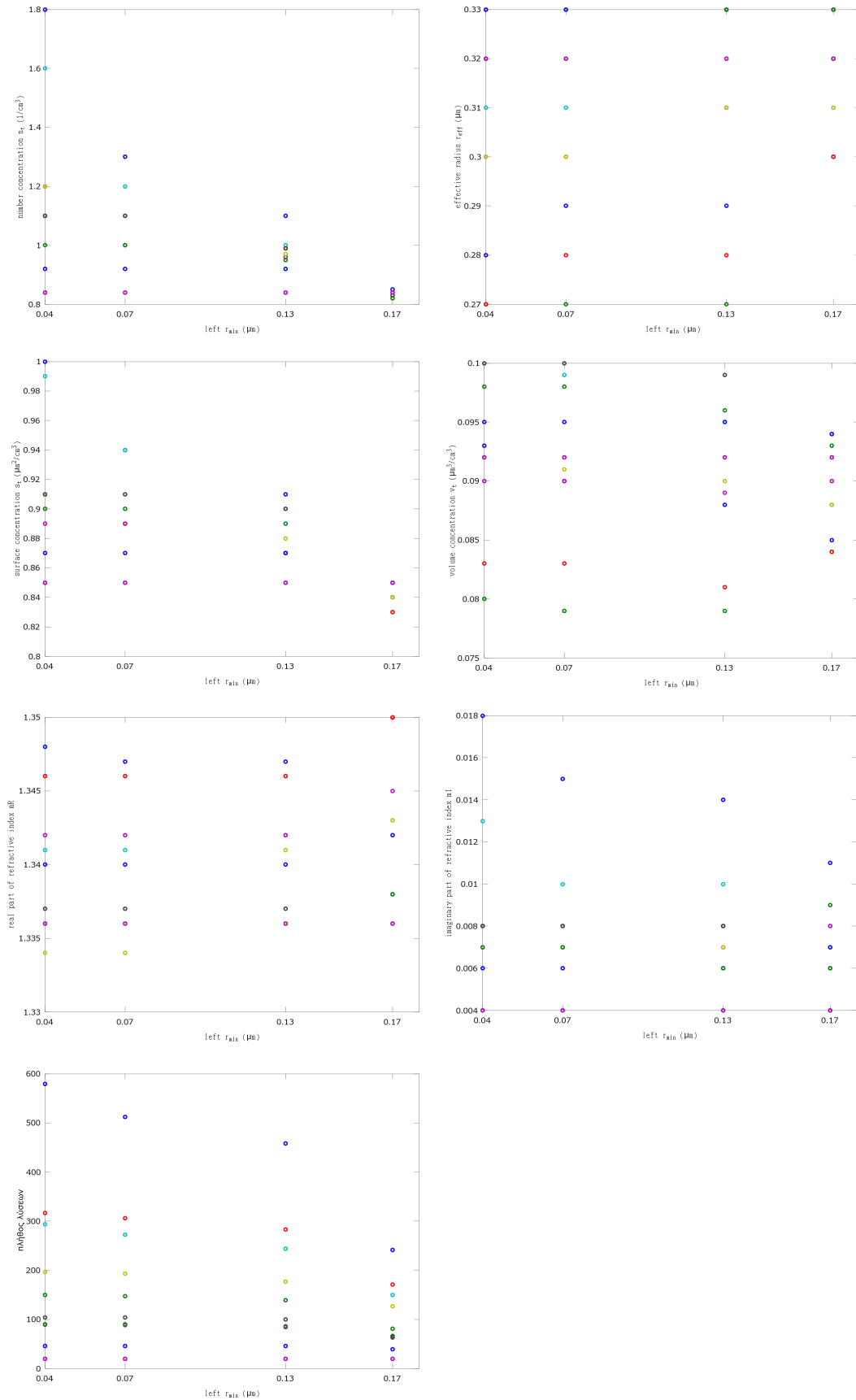
Εικόνα 6.8: Η κατανομή όγκου μεγέθους για  $m.d.=30\%$  με τη μέθοδο discrepancy principle (run 1) (αριστερά) και για  $m.d.=40\%$  με τη μέθοδο GCV (run 2) χωρίς (πάνω) και με  $m.l.r.e.=10\%$  (κάτω).

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)



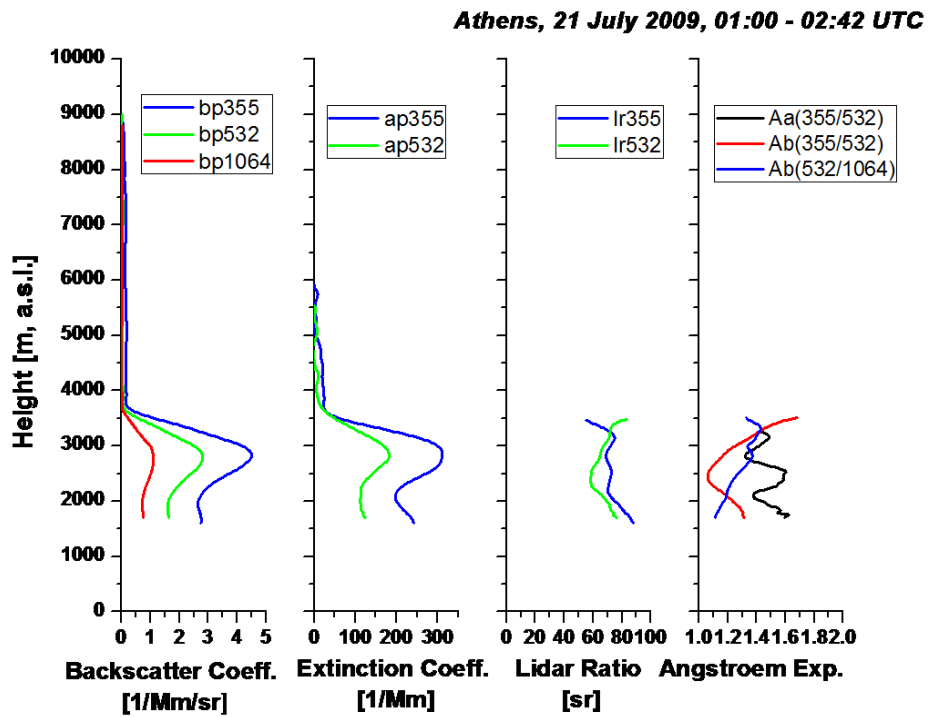
Εικόνα 6.9: Οι λύσεις του μέσου όρου για την κατανομή όγκου μεγέθους των δύο μεθόδων από τα run 1, 2 για  $r_{min} = 0.07$ , m.d.=20% (πάνω αριστερά και δεξιά για τα run 1 και 2 αντίστοιχα) για  $r_{min} = 0.17$ , m.d.=10% και m.l.r.e.=10% (κάτω αριστερά και δεξιά για τα run 1 και 2 αντίστοιχα).

### 6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

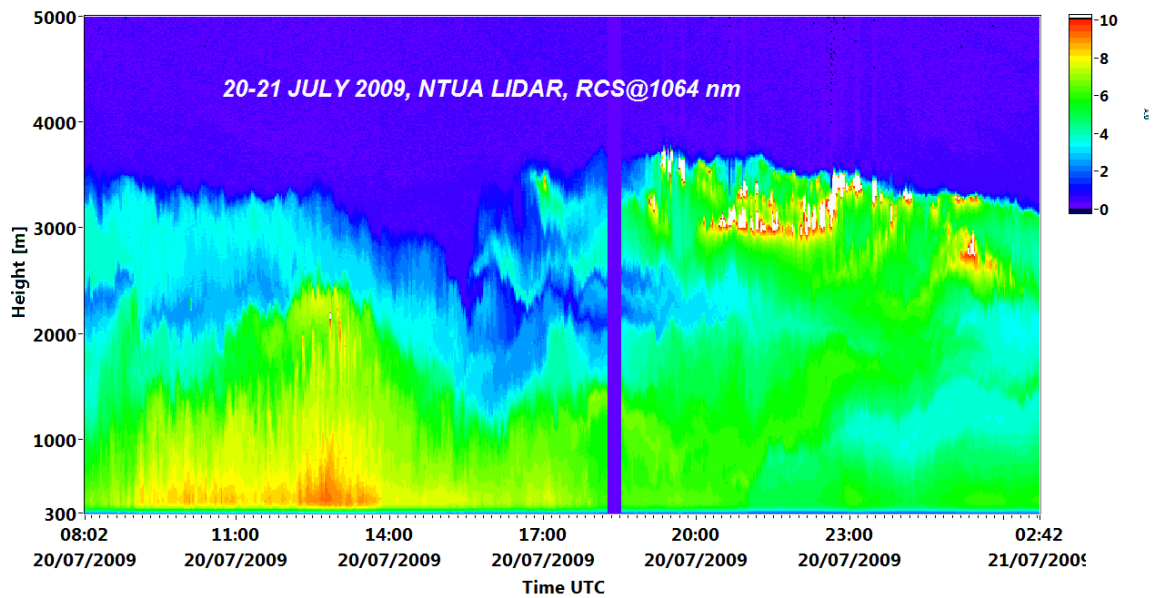


Εικόνα 6.10: Εξάρτηση των μικροφυσικών παραμέτρων που υπολογίζονται από το left  $r_{min}$  για το run 2.

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)



Εικόνα 6.11: Στοιχεία μέτρησης από Raman lidar του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου.



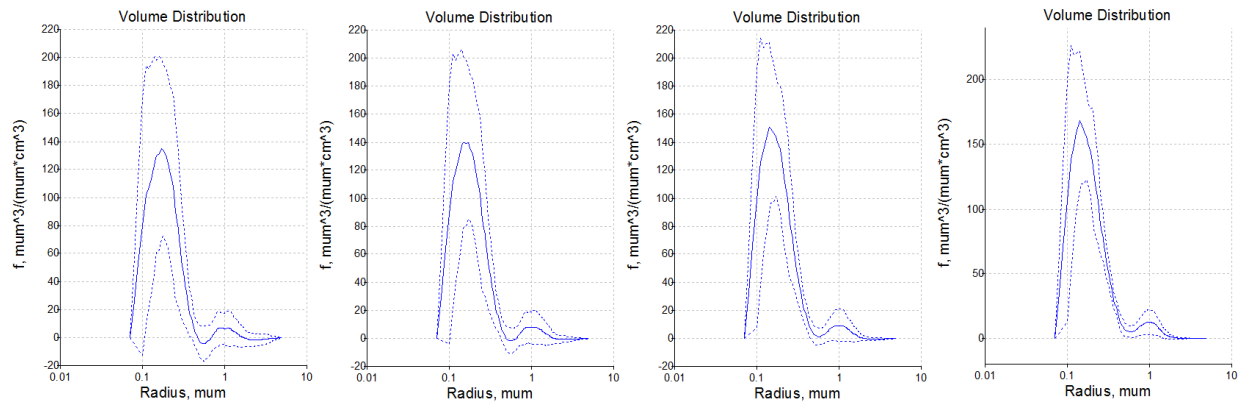
Εικόνα 6.12: Range corrected σήμα καθ' ύψος από μέτρηση Raman lidar του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου.

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

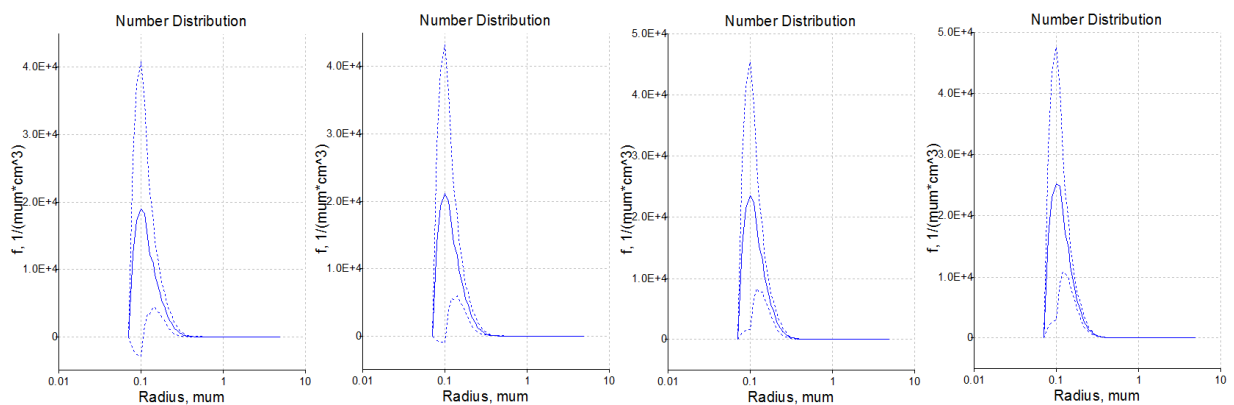
Πίνακας 6.5: Αποτελέσματα για το run 3: πειραματικά δεδομένα (βλ. πίν. 6.4), μέθοδος discrep. principle.

Αριθ. εκτέ- λεσης.	Discrep. range 5.085e-6 έως %	Left. $r_{min}$ , ( $\mu m$ )	Max. li- dar ratio er- ror %	$n_t$ , ( $1/cm^3$ )	$r_{eff}$ , ( $\mu m$ )	$s_t$ , ( $\mu m^2/cm^3$ )	$v_t$ , ( $\mu m^3/cm^3$ )	$mR$	$mI$	Αριθ. λύ- σεων
1	3.4883e3	0.01	-	9.4e2±1.1e3	13 ± 2.1e3	3.1e2±2.4e2	2.2e2 ± 3e2	1.563 ± 0.1442	0.050 ± 0.0302	35700
2	30	0.04	-	1.6e3±8.7e2	0.19 ± 0.086	4.4e2±1.1e2	27 ± 14	1.445 ± 0.1205	0.013 ± 0.0108	1335
4	30	0.07	-	9.2e2±3.6e2	0.23 ± 0.071	4.1e2 ± 71	32 ± 11	1.38 ± 0.0525	0.009 ± 0.00868	732
5	30	0.13	-	6.6e2±1.8e2	0.26 ± 0.069	3.7e2 ± 46	32 ± 9.7	1.366 ± 0.0403	0.009 ± 0.00797	435
6	30	0.17	-	3.8e2 ± 35	0.31 ± 0.084	3.3e2 ± 22	34 ± 9.4	1.343 ± 0.0234	0.005 ± 0.00409	71
7	30	0.04	10	1.8e3±7.6e2	0.18 ± 0.076	4.5e2 ± 94	28 ± 13	1.465 ± 0.1221	0.010 ± 0.01159	296
8	30	0.07	10	9.4e2±3.3e2	0.26 ± 0.048	4.2e2 ± 68	37 ± 8.6	1.373 ± 0.0490	0.001 ± 0.00358	109
9	30	0.13	10	6.5e2±1.3e2	0.29 ± 0.039	3.8e2 ± 40	36 ± 6.9	1.366 ± 0.0408	0.001 ± 0.00233	59
10	30	0.17	10	4e2 ± 26	0.34 ± 0.032	3.4e2 ± 26	39 ± 6.3	1.34 ± 0.02	0.000 ± 0.0012	5
11	30	0.04	20	1.8e3±7.2e2	0.17 ± 0.081	4.4e2 ± 90	25 ± 13	1.486 ± 0.1236	0.011 ± 0.01201	563
12	30	0.07	20	9.4e2±3.3e2	0.25 ± 0.058	4.1e2 ± 66	34 ± 9.8	1.39 ± 0.0551	0.002 ± 0.00363	197
13	30	0.13	20	6.6e2±1.8e2	0.26 ± 0.069	3.7e2 ± 46	32 ± 9.7	1.366 ± 0.0403	0.009 ± 0.00797	435
14	30	0.17	20	3.8e2 ± 28	0.35 ± 0.026	3.4e2 ± 20	39 ± 4.7	1.34 ± 0.0156	0.001 ± 0.00146	13
15	20	0.04	-	1.7e3±8.5e2	0.2 ± 0.069	4.7e2±1.1e2	32 ± 13	1.429 ± 0.1047	0.009 ± 0.00887	673
16	20	0.07	-	9.9e2±3.4e2	0.25 ± 0.054	4.3e2 ± 65	36 ± 10	1.374 ± 0.0471	0.005 ± 0.00473	341
17	20	0.13	-	6.7e2±1.6e2	0.28 ± 0.047	3.9e2 ± 42	36 ± 8.3	1.356 ± 0.0329	0.004 ± 0.00381	166
18	20	0.17	-	3.9e2 ± 26	0.31 ± 0.043	3.4e2 ± 20	35 ± 6.5	1.337 ± 0.0165	0.002 ± 0.00213	21
19	20	0.04	10	1.9e3±7.3e2	0.19 ± 0.068	4.7e2 ± 87	30 ± 12	1.447 ± 0.1025	0.008 ± 0.0101	237
20	20	0.07	10	1e3 ± 3.3e2	0.27 ± 0.034	4.5e2 ± 62	40 ± 6.3	1.356 ± 0.0303	0.000 ± 0.00150	79
21	20	0.13	10	6.6e2±1.3e2	0.3 ± 0.033	4e2 ± 37	39 ± 5.7	1.349 ± 0.0301	0.000 ± 0.00130	37
22	20	0.17	10	4.1e2 ± 28	0.35 ± 0.026	3.5e2 ± 18	42 ± 4.7	1.331 ± 0.0108	0.000 ± 0.00129	4
23	20	0.04	20	1.9e3 ± 7e2	0.18 ± 0.067	4.6e2 ± 87	28 ± 12	1.462 ± 0.1082	0.009 ± 0.01049	383
24	20	0.07	20	1e3 ± 3.1e2	0.25 ± 0.048	4.3e2 ± 63	37 ± 9.1	1.337 ± 0.0489	0.001 ± 0.00239	131
25	20	0.13	20	6.6e2±1.3e2	0.29 ± 0.041	3.9e2 ± 37	38 ± 6.6	1.354 ± 0.0315	0.000 ± 0.00148	49
26	20	0.17	20	3.9e2 ± 28	0.36 ± 0.024	3.5e2 ± 15	42 ± 4.1	1.329 ± 0.0093	0.001 ± 0.00141	6
27	12	0.04	-	1.9e3±8.2e2	0.21 ± 0.059	5e2 ± 1e2	35 ± 12	1.411 ± 0.0860	0.005 ± 0.00741	288
28	12	0.07	-	1.1e3±3.1e2	0.26 ± 0.042	4.5e2 ± 61	39 ± 9	1.366 ± 0.0406	0.002 ± 0.00255	129
29	12	0.13	-	7e2 ± 1.2e2	0.28 ± 0.038	4e2 ± 37	38 ± 7.2	1.35 ± 0.0266	0.000 ± 0.00152	50
30	12	0.17	-/10/20	4.5e2 ± 27	0.36 ± 0.024	3.5e2 ± 18	39 ± 6.7	1.34 ± 0.0260	0.000 ± 0.00122	3
31	12	0.04	10	1.9e3±7.5e2	0.2 ± 0.063	4.9e2 ± 89	32 ± 11	1.428 ± 0.0943	0.006 ± 0.00884	169
32	12	0.07	10/20	1e3 ± 3.3e2	0.27 ± 0.033	4.6e2 ± 57	41 ± 5.7	1.351 ± 0.0253	0.000 ± 0.00122	61
33	12	0.13	10	6.7e2±1.3e2	0.3 ± 0.026	4.1e2 ± 32	41 ± 4.4	1.339 ± 0.0157	0.000 ± 0.00057	26
34	12	0.04	20	1.9e3±7.4e2	0.2 ± 0.06	4.9e2 ± 92	33 ± 11	1.425 ± 0.0912	0.006 ± 0.00827	222
35	12	0.13	20	1.1e3±3.1e2	0.26 ± 0.039	4.5e2 ± 60	39 ± 8.2	1.365 ± 0.0389	0.001 ± 0.00201	88
36	5	0.04	-/20	2.1e3±8.2e2	0.22 ± 0.044	5.6e2 ± 89	41 ± 8	1.364 ± 0.0421	0.001 ± 0.00256	61
37	5	0.07	-/10/20	1.2e3±2.8e2	0.27 ± 0.023	4.9e2 ± 47	43 ± 5.1	1.343 ± 0.0190	0.000 ± 0.00118	26
38	5	0.13	-/10/20	7.3e2±1.1e2	0.31 ± 0.021	4.1e2 ± 37	43 ± 4.1	1.337 ± 0.0165	0.000 ± 0.00023	7
39	5	0.17	-							0
40	5	0.04	10	2e3 ± 8.2e2	0.23 ± 0.045	5.5e2 ± 87	41 ± 8	1.365 ± 0.0433	0.001 ± 0.00265	55

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

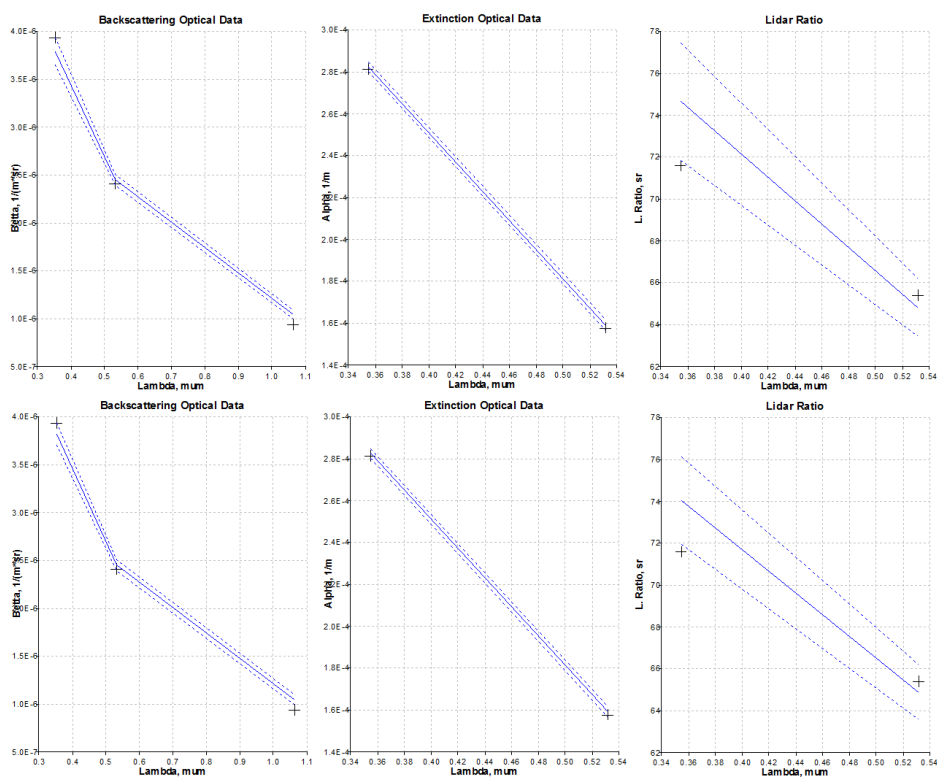


Εικόνα 6.13: Η κατανομή όγκου μεγέθους για το  $l.r_{min} = 0.04$  και m.d. ίσο με 30, 20, 12 και 5% διαδοχικά από αριστερά προς δεξιά.



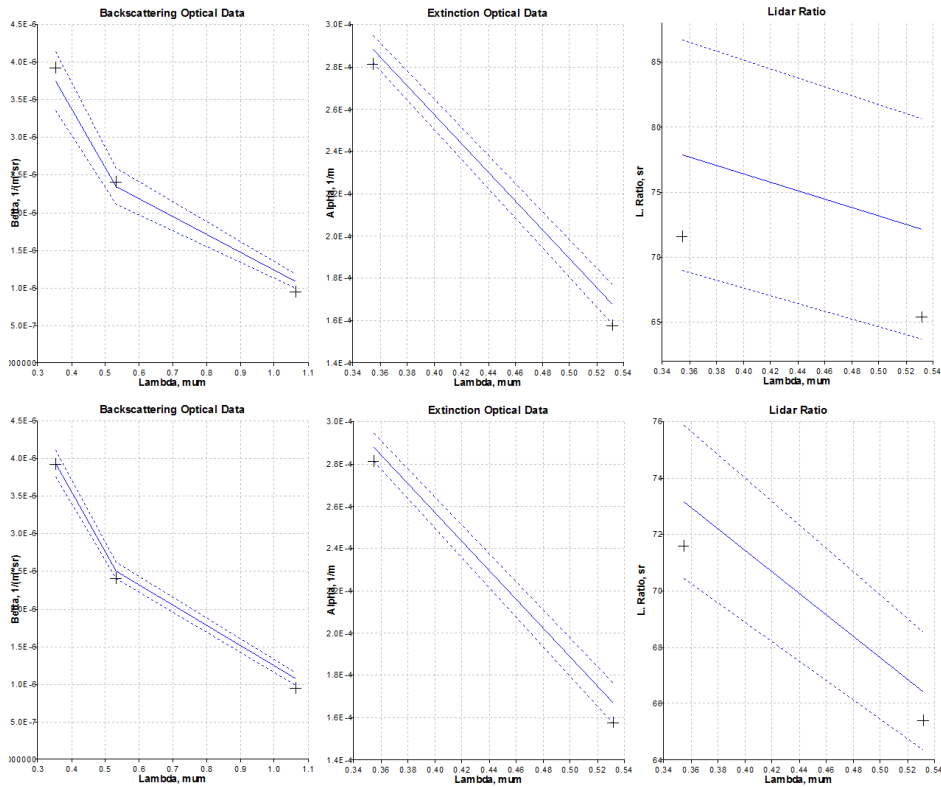
Εικόνα 6.14: Η κατανομή του αριθμού των σωματιδίων ως προς  $r$  για το  $l.r_{min} = 0.04$  και m.d. ίσο με 30, 20, 12 και 5% διαδοχικά από αριστερά προς δεξιά.

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)

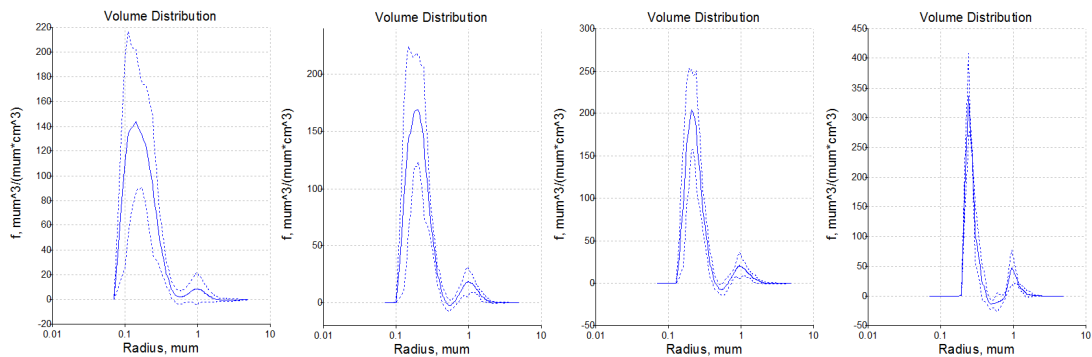


Εικόνα 6.15: Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για  $l.r_{min} = 0.04$ ,  $m.d.=5\%$  χωρίς (πάνω) και με τη συνθήκη  $m.l.r.e.=10\%$  (κάτω).

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)



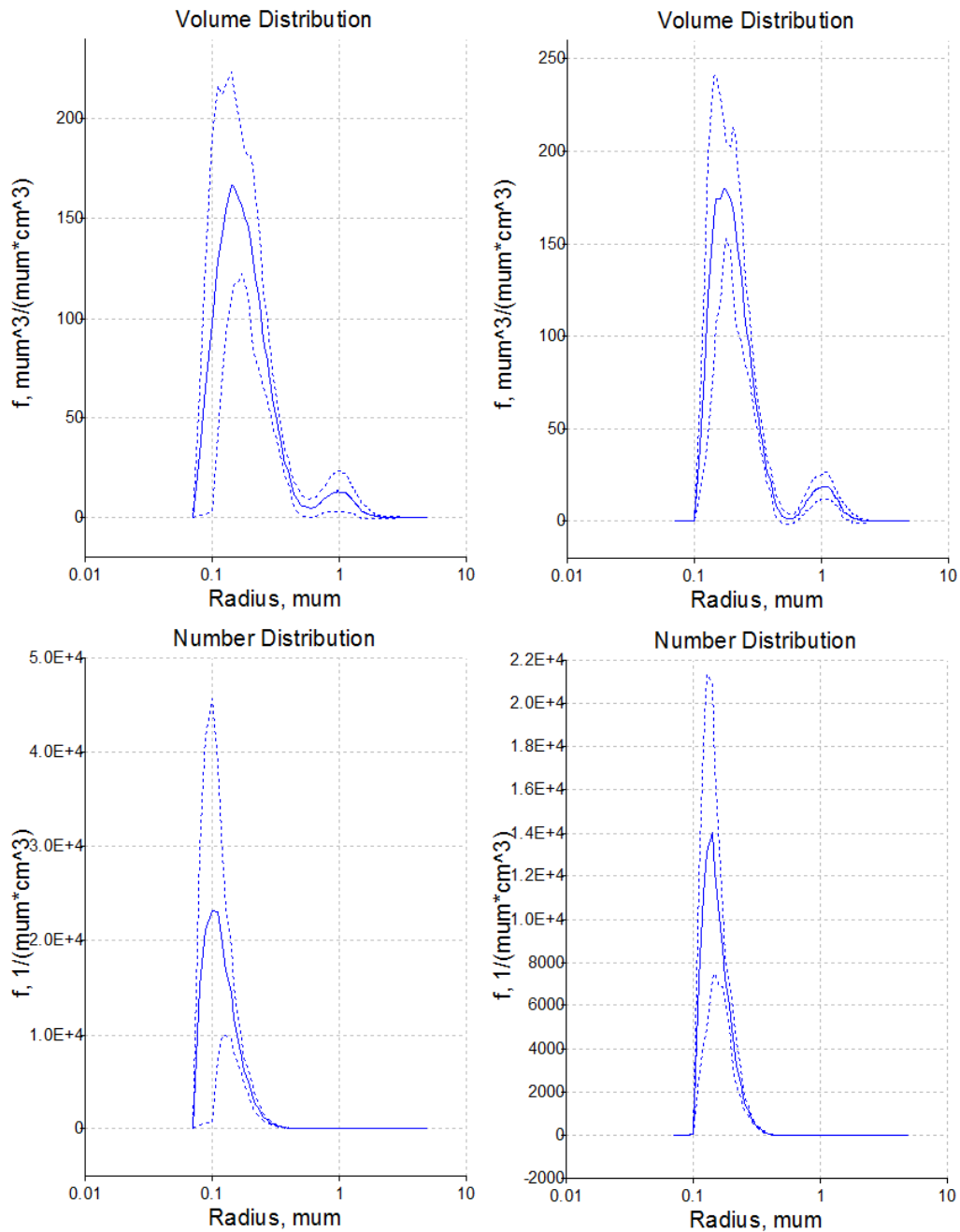
Εικόνα 6.16: Επαναυπολογισμένες οπτικές παράμετροι για  $l.r_{min} = 0.07$ ,  $m.d.=12\%$  χωρίς (πάνω) και με τη συνθήκη  $m.l.r.e.=10\%$  (κάτω).



Εικόνα 6.17: Η κατανομή όγκου μεγέθους για  $m.d.=12\%$  και  $m.l.r.e.=10\%$  μεταβάλλοντας το  $l.r_{min}$  διαδοχικά σε 0.04, 0.07, 0.13, και 0.17 (γραφήματα από αριστερά προς δεξιά).

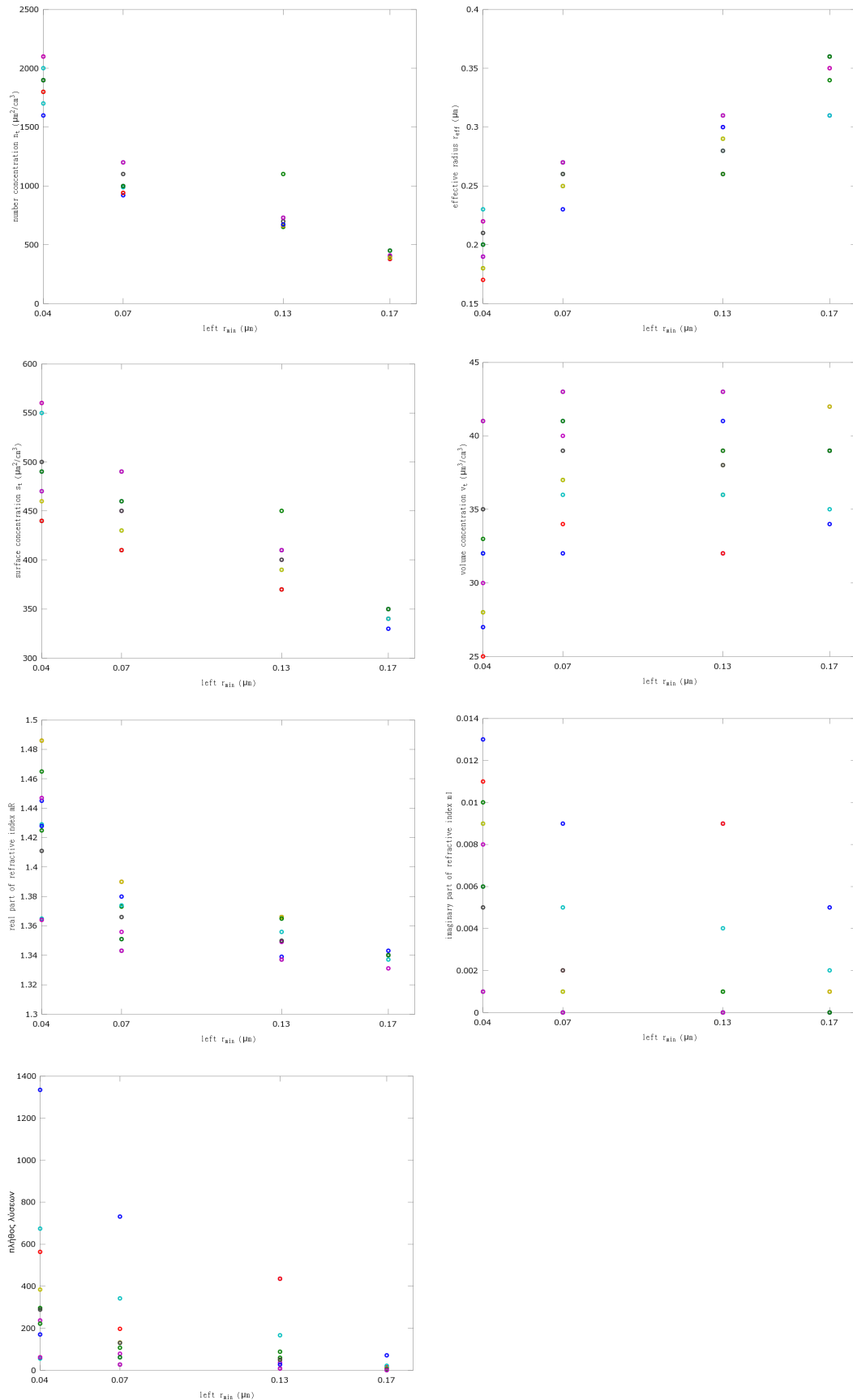


6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)



Εικόνα 6.18: Η κατανομή όγκου μεγέθους (πάνω) και η κατανομή του αριθμού των σωματιδίων (κάτω) για  $l.r.min$  ίσο με 0.04 (αριστερά) και 0.07 (δεξιά) με συνοριακές συνθήκες  $m.d.=5\%$  και  $m.l.r.e.=10\%$ .

6.3. Εκτελέσεις του Προγράμματος RAP και Μεθοδολογία Μετεπεξεργασίας των λύσεων (Ανάκτηση Μικροφυσικών Παραμέτρων από Δεδομένα Lidar Πολλαπλών Μηκών Κύματος)



Εικόνα 6.19: Εξάρτηση των μικροφυσικών παραμέτρων που υπολογίζονται από το left  $r_{min}$  για το run 3.

# Βιβλιογραφία

- [HC10] C. Hansen, *Discrete Inverse Problems. Insight and Algorithms*, 2010.
- [HC94] C. Hansen, *Regularization Tools: A MATLAB package for analysis and solution of discrete ill-posed problems*, *Numer. Algorithms* 6 , pp. 1-35, 1994.
- [HW99] Hinds, William C. *Aerosol Technology*. Wiley - Interscience. 1999.
- [OS09] L. Osterloh, C. Perez, D. Böhmec, J. M. Baldasanob, C. Böckmann, L. Schneidenbachd, D. Vicent. *Parallel software for retrieval of aerosol distribution from lidar data in the framework of EARLINET-ASOS*. 2009.
- [OS11] L. Osterloh, C. Böckmann, R.E. Mamouri and A. Papayannis. *An Adaptive Base Point Algorithm for the Retrieval of Aerosol Microphysical Properties*. 2011.
- [PA10] Α. Παπαγιάννης, *Φυσική Περιβάλλοντος*, 2010.
- [PA09] Α. Παπαγιάννης, *Lasers και Εφαρμογές τους στη Βιοϊατρική και το Περιβάλλον*. 2009.
- [WT92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77 : The Art of Scientific Computing*, 2nd ed., Cambridge University Press, 1992.
- [AS64] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions, Applied Mathematics Series, Volume 55 (Washington: National Bureau of Standards; reprinted 1968 by Dover Publications, New York), 1964*.
- [KS09] Σ. Καρανάσιος, *Θεωρία Τελεστών και Εφαρμογές*, 2009.
- [HK06] C. Hansen, M. Kilmer, R. H Kjedsen. *Exploiting Residual Information in the Parameter Choice, for Discrete Ill-posed Problems*, pp 41-59, 2006.
- [CE04] *The Columbia Encyclopedia*, Columbia University Press, Sixth Edition, 2004.
- [CAHL] Cracknell, P. Arthur; Hayes, Ladson . *Introduction to Remote Sensing (2 ed.)*. London: Taylor and Francis, 2007 [1991].
- [YY07] A. Yariv, P Yeh. *Photonics. Optical Electronics in Modern Communications (6th ed.)*, New York, Oxford, Univercity Press, 2007.
- [WE04] C. Weitkamp. *Lidar. Range-Resolved Optical Remote Sensing of the Atmosphere*, 2004.
- [ST83] S. T. Shipley, D. H. Tracy, E. W. Eloranta et al., *Applied Optics* 22, 3716, 1983.
- [WD99] David Alan Wardle. *Raman Scattering in Optical Fibres*, thesis Doctor of Philosophy in Physics The University of Auckland, 1999.
- [GL53] *A glossary of terms in nuclear science and technology: a series of nine sections By National Research Council (U.S.). Conference on Glossary of Terms in Nuclear S American Society of Mechanical Engineers, 1953*
- [Mi08] G. Mie, *Annalen der Physik, Vierte Folge* 25, 377, 1908.
- [Kl81] J.D. Klett: *Applied Optics* 20, 211, 1981.

- [AW92] A. Ansmann, U. Wandinger, M. Riebesell, et al.. *Applied Optics* 31, 7113, 1992.
- [MA72] J.E. Milton, R.C. Anderson, E.V. Browell. *Applied Optics* 11, 697, 1972.
- [B73] B.J. Brinkworth. *Applied Optics* 12, 427, 1973.
- [LC97] C. Levoni, M. Cervino, R. Guzzi, F. Torricella. *Applied Optics* 36, 1997.
- [AB73] R.C. Anderson, E.V. Browell, J.E. Milton. *Applied Optics* 12, 428, 1973.
- [PC73] S.R. Pal, A.I. Carswell. *Applied Optics* 12, 1530, 1973.
- [C75] A. Cohen. *Applied Optics* 14, 2873, 1975.
- [Ch50] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*, Oxford University Press, London, 1950 (reprinted by Dover, New York, 1960).
- [I78] A. Ishimaru: *Wave Propagation and Scattering in Random Media*, vols 1 and 2, Academic Press, New York, 1978.
- [ZI91] E.P. Zege, A.P. Ivanov, I.L. Katsev: *Image Transfer through a Scattering Medium* (Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [KZ97] I.L. Katsev, E.P. Zege, A.S. Prikhach, et al.: *J. Opt. Soc. Am. A* 14, 1338, 1997.
- [SG02] J. Sarmiento, K. Gruber, "Sinks for anthropogenic carbon", *Physics Today*, 55, 30-36, 2002.
- [BH83] C.F. Bohren, D.R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*; Wiley: New York, USA, 1983.
- [RR04] R. Ramlau. *Regularization of Nonlinear Ill-Posed Operator Equations: Methods and Applications*, 2004.
- [AC92] F.A. Ackerman, H. Chung. *Radiative effects of airborne dust and regional energy budget at the top of the atmosphere*, *J. Appl. Meteorol.*, 31, 223-323, 1992.
- [KT02] Y Kaufman, D. Tanré, O. Boucher. *A satellite view of aerosols in the climate system*, *Nature*, 419, 215-223, 2002.
- [LF01] U. Lohmann, J. Feichter. *Can the direct and the semi-direct aerosol effect compete with the indirect effect on a global scale*, *Geophys. Res. Lett.*, 28, 159-161, 2001.
- [Bo03] J. Bösenberg et al.. *A European aerosol research lidar network to establish an aerosol Éclimatology*, MPI-Report 317, Max-Planck Inst. für Meteorology, Hamburg, Germany, 2003
- [HH73] H. Hochstadt. *Integral Equations*. J. Wiley, 1973.
- [KR99] R. Kress. *Linear Integral Equations*, 2nd ed., Springer, Heidelberg, 1999.
- [TB97] L.N. Trefethen, D. Bau. *Numerical Linear Algebra*, Siam, 1997.
- [UF74] F. Ursell, *Introduction to the theory of linear integral equations*, in *Numerical Solution of Integral Equations*, L. M. Delves and J. Walsh, eds., pp. 2-11, Clarendon Press, Oxford, 1974.
- [AG80] N. Akhiezer, I. Glasman, *Theory of linear Operators in Hilbert Space*, Vol. I, II. Pitman Advanced Programm, 1980.
- [AB96] A. Bjorck, *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [GK65] G. H. Golub, W. Kahan, *Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix*, *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 2, pp. 205-224, 1965.
- [HC98] C. Hansen, *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems: Numerical Aspects of Linear Inversion*, SIAM, Philadelphia, 1998.

- [BR98] B. W. Rust, *Truncating the Singular Value Decomposition for III-Posed Problems*, Report NIST-TIR 6131, Mathematical and Computational Sciences Division, NIST, 1998.
- [HC90] C. Hansen, *Truncated singular value decomposition solutions to discrete ill-posed problems with ill-determined numerical rank*, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* 11, pp. 503-518, 1990.
- [HC89] C. Hansen, *Perturbation bounds for discrete Tikhonov regularization*, *Inverse Problems*, p 5, pp. L41-L44, 1989.
- [HC01] C. Hansen, *The L-curve and its use in the numerical treatment of inverse problems*, invited chapter in *Computational Inverse Problems in Electrocardiology*, P. Johnston, ed., WIT Press, Southampton, pp. 119-142, 2001.
- [HC86] C. Hansen, *The truncated SVD as a method for regularization*, *Numerical Analysis Project Manuscript NA-86-36*, Computer Science Department, Stanford University, 1986.
- [LH95] C. L. Lawson and R. J. Hanson, *Solving Least Squares Problems*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1974; reprinted by SIAM, Philadelphia, 1995.
- [CG02] J. L. Castellanos, S. Gomez, and V. Guerra, *The triangle method for finding the corner of the L-curve*, *Appl. Numer. Math.*, 43, pp. 359-373, 2002.
- [WG75] G. Wahba, *Spline Models for Observational Data*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics 59, SIAM, Philadelphia, 1990.
- [BK06] C. Böckmann, A. Kirsche, *Iterative regularization method for lidar remote sensing*, *Computer Physics Communications* 174, 607-615, 2006.
- [KM08] A. Kolgotin, D. Müller, *Theory of inversion with two-dimensional regularization: profiles of microphysical particle properties derived from multiwavelength lidar measurements*, *Leibniz Institute for Tropospheric Research*, 2008.
- [MW99] D. Müller, U. Wandinger, A. Ansmann, *Microphysical particle parameters from extinction and backscatter lidar data by inversion with regularization: theory*, *Optical Society of America*, 1999.
- [LH02] T. Lindström, U. Holst, P. Weibring, H. Edner, *Analysis of lidar measurements using nonparametric kernel regression methods*, *Applied Physics B*, 2002.
- [PM12] A. Papayannis, R. E. Mamouri, E. Remoundaki, A. Bourliva, G. Tsaknakis, V. Amiridis, P. Kokkalis, I. Veselovskii, S. Kazadzis, A. Kolgotin, A. Nenes, and C. Fountoukis, *Optical-microphysical properties and chemical characterization of Saharan dust aerosols using a multi-wavelength Raman lidar, in situ sensors and modelling*, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12, 4011-4032, 2012.