



Κωνσταντία Ράμμου

Αριθμητικές Μέθοδοι σε Γραμμικά Συστήματα Κακής Κατάστασης

Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Τμήμα Μαθηματικό

Διπλωματική Εργασία για το

Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης στην κατεύθυνση

Εφαρμοσμένα Μαθηματικά

Αθήνα 2012

Πρόλογος

Η διπλωματική αυτή εργασία έχει θέμα τη μελέτη των αριθμητικών μεθόδων σε γραμμικά συστήματα κακής κατάστασης. Στο κεφάλαιο πρώτο παρουσιάζονται αναλυτικά κάποια μαθηματικά εργαλεία που χρησιμοποιήσαμε. Όπως την ορθογωνιότητα, τους θεμελιώδεις υπόχωρους - ορθογώνιες προβολές, της διανυσματικές νόρμες και τις νόρμες πινάκων κ.τ.λ.

Στο δεύτερο κεφάλαιο αρχικά δίνεται ο ορισμός του γραμμικού συστήματος ελαχίστων τετραγώνων καθώς και η γεωμετρική ερμηνεία του. Σ' αυτό το κεφάλαιο αποδείξαμε την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης ελαχίστων τετραγώνων σε *overdetermined* και *underdetermined* συστήματα. Στη συνέχεια κάνουμε μια αναφορά στην ευαισθησία της λύσης στις διαταραχές των δεδομένων, δηλαδή ότι η λύση αλλάζει κάνοντας διαταραχές στο διάνυσμα b και στο πίνακα A . Στη συνέχεια παρουσιάζονται δυο προβλήματα όπου εφαρμόζεται η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων.

Στο τρίτο κεφάλαιο κάνουμε μια πλήρη αναφορά στις αριθμητικές μεθόδους επίλυσης του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων. Αναλυτικά για τα γραμμικά συστήματα *overdetermined* μελετήσαμε τη μέθοδο των κανονικών εξισώσεων, τη μέθοδο της *QR* παραγοντοποίησης, τη μέθοδο *Householder* καθώς και τη μέθοδο *MGS*, με τους αντίστοιχους αλγόριθμους και την πολυπλοκότητα τους. Επίσης για τα γραμμικά συστήματα *underdetermined* μελετήσαμε τη μέθοδο της *QR* παραγοντοποίησης και τα επαναληπτικά συστήματα, με τους αντίστοιχους αλγόριθμους και τη πολυπλοκότητα. Το κεφάλαιο αυτό τελειώνει με την παρουσίαση των αριθμητικών αποτελεσμάτων σε πίνακες καλής και κακής κατάστασης.

Στο τέταρτο κεφάλαιο αρχικά δίνεται μια πλήρη παρουσίαση και επεξήγηση της κανονικοποίησης των γραμμικών συστημάτων κακής κατάστασης. Σημαντικό ρόλο στη κανονικοποίηση παίζει η εύρεση της παραμέτρου λ και η ανάλυση ιδιάζουσων τιμών. Σ' αυτό το κεφάλαιο μελετήσαμε και αναπτύξαμε την μέθοδο της παρεκβολής καθώς και το αλγόριθμο. Στο τέλος του κεφαλαίου παρουσιάζονται ενδεικτικά κάποια συγκρητικά αριθμητικά αποτελέσματα όλων των αλγορίθμων που μελετήσαμε.

Ακολουθεί το παράρτημα Α στο οποίο ύστερα από μια εξήγηση παρουσιάζονται γραμμένα στον κώδικα του λογισμικού πακέτου *Matlab* τα προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν. Καθώς και το παράρτημα Β όπου παρουσιάζονται οι πίνακες που χρησιμοποιήθηκαν.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά , την επιβλέπουσα Επίκουρη Καθηγήτρια του Μαθηματικού Τμήματος του Πανεπιστημίου Αθηνών κα. Μ. Μητρούλη ,η οποία με την καθοδήγηση της, την συμπαράσταση της και τις παρατηρήσεις της με βοήθησε να φέρω εις πέρας την παρούσα διπλώματική εργασία .Επίσης θεωρώ υποχρέωση μου να ευχαριστήσω τα μέλη της εξεταστικής επιτροπής , τον Καθηγητή του Μαθηματικού Τμήματος του Πανεπιστημίου Αθηνών κ. Β. Δουγαλή και τον Επίκουρο Καθηγητή του Μαθηματικού Τμήματος του Πανεπιστημίου Αθηνών κ. Μ. Δρακόπουλο για τις εποικοδομητικές παρατηρήσεις τους.

Επιπροσθέτως θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα το συνάδελφο κ.Β Νούτση για την απλόχερη παροχή γνώσεων του και την ουσιαστική παρέμβαση του, κυρίως σε υπολογιστικά και αλγοριθμικά θέματα. Τέλος ευχαριστώ τον Δρ. Δ. Τριανταφύλλου για τις εύστοχες παρατηρήσεις του και τις υποδείξεις του.

Ράμμου Κωνσταντία

2012

Περιεχόμενα

1	Μαθηματικά Εργαλεία	1
1.1	Ορθογωνιότητα	1
1.2	Θεμελιώδεις Υπόχωροι-Ορθογώνιες Προβολές	1
1.3	Η τάξη του πίνακα	3
1.4	Μοναδιαίοι και Ορθογώνιοι πίνακες	4
1.5	Συμμετρικοί και Ερμιτιανοί πίνακες	4
1.6	Διανυσματικές νόρμες και νόρμες πινάκων	5
1.7	Δείκτης κατάστασης	6
1.8	Ανάλυση Ιδιάζουσων Τιμών	7
2	Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων και Εφαρμογές	9
2.1	Εισαγωγή	9
2.2	Γεωμετρική Ερμηνεία του Προβλήματος Ελαχίστων Τετραγώνων . . .	10
2.3	Ύπαρξη και Μοναδικότητα	10
2.4	Εφαρμογές του Γραμμικού Προβλήματος Ελαχίστων Τετραγώνων . . .	14
2.5	Ψευδοαντίστροφος πίνακας	18
2.6	Η ευαισθησία του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων	19
3	Αριθμητικές Μέθοδοι Επίλυσης του Προβλήματος Ελαχίστων Τετραγώνων	25
3.1	Μέθοδος των Κανονικών Εξισώσεων για <i>Overdetermined</i> Προβλήματα	25
3.2	Μέθοδος της <i>QR</i> Παραγοντοποίησης για <i>Overdetermined</i> Προβλήματα	28
3.3	Η Μέθοδος <i>Householder</i> για <i>Overdetermined</i> προβλήματα	30
3.4	Η Μέθοδος <i>MGS</i> για <i>Overdetermined</i> Προβλήματα	31
3.5	Μέθοδος της <i>QR</i> Παραγοντοποίησης για <i>Underdetermined</i> Προβλήματα	33
3.6	Επαναληπτικά Γραμμικά Συστήματα	34
3.7	Αριθμητικά Αποτελέσματα	38
4	Κανονικοποίηση Γραμμικών Συστημάτων Κακής Κατάστασης	43
4.1	Εισαγωγή	43
4.2	Ανάλυση των Κανονικοποιημένων Λύσεων	47
4.3	Η περίπτωση του συμμετρικού και θετικά ορισμένου πίνακα	52
4.4	Ρητές Μέθοδοι Παρεκβολής (<i>Rational extrapolation procedures</i>)	52
4.4.1	Ειδική περιορισμένη περίπτωση	53
4.4.2	Πλήρης περίπτωση	59
4.5	Αλγόριθμος Παρεκβολής	60

4.6	Αριθμητικά Αποτελέσματα	62
5	Παράρτημα Α΄	65
6	Παράρτημα Β΄	69
7	Βιβλιογραφία	71

Κατάλογος Πινάκων

1	<i>QR</i> παραγοντοποίηση σ' ένα τυχαίο πίνακα καλής κατάστασης	38
2	<i>QR</i> παραγοντοποίηση σε πίνακα καλής κατάστασης όπου $A = \text{gallery}('orthog', n, 1)$ 39	
3	<i>QR</i> παραγοντοποίηση σε πίνακα καλής κατάστασης όπου $A = \text{gallery}('orthog', n, 2)$ 39	
4	<i>QR</i> παραγοντοποίηση σε πίνακα κακής κατάστασης όπου $A = \text{hilb}(n)$. .	40
5	<i>QR</i> παραγοντοποίηση με το υπολογισμό $x = R^{-1}y$ σε πίνακα κακής κατά- στασης όπου $A = \text{hilb}(n)$	40
6	<i>QR</i> παραγοντοποίηση σε πίνακα κακής κατάστασης όπου $A = \text{gallery}('chebspec', n, 0)$ 41	
7	Διαταραχή στο διάνυσμα b	41
8	Εφαρμογή <i>Tikhonov</i> και <i>Extrapolation</i> σε πίνακα κακής κατάστασης $A =$ $\text{hilb}(n)$	62
9	Εφαρμογή <i>Tikhonov</i> και <i>Extrapolation</i> σε πίνακα κακής κατάστασης $A =$ $\text{hilb}(n)$	63
10	Εφαρμογή <i>Tikhonov</i> και <i>Extrapolation</i> σε πίνακα κακής κατάστασης $[A, x, b] =$ $\text{shaw}(n)$	63
11	Εφαρμογή <i>Tikhonov</i> και <i>Extrapolation</i> σε πίνακα κακής κατάστασης $A =$ $\text{gallery}('lotkin', n)$	64

Κατάλογος Σχημάτων

1	<i>L – curve Tikhonov</i>	44
2	<i>gcv</i>	45
3	<i>L – curve TSVD</i>	45
4	<i>L – curve Tikhonov</i>	46
5	<i>gcv</i>	46
6	<i>L – curve TSVD</i>	47

Κεφάλαιο 1ο

1 Μαθηματικά Εργαλεία

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζουμε συνοπτικά βασικούς οροσμούς και ιδιότητες από την θεωρία πινάκων.

1.1 Ορθογωνιότητα

Η γωνία θ που σχηματίζεται μεταξύ δυο διανυσμάτων u, v είναι

$$\cos(\theta) = \frac{u^T v}{\|u\| \|v\|}.$$

Τα διανύσματα u, v είναι ορθογώνια, $u \perp v$, αν $\theta = 90^\circ$ και $u^T v = 0$.

Έστω S είναι ένα σύνολο από διανύσματα στο $\mathbb{R}^n$. Το S είναι υπόχωρος του $\mathbb{R}^n$ εάν τα διανύσματα $s_1, s_2 \in S$ γράφονται ως $c_1 s_1 + c_2 s_2 \in S$ όπου c_1, c_2 είναι βαθμωτά.

Ορισμός: Ορθογωνιότητα δυο υπόχωρων

Δυο υπόχωροι S_1, S_2 του $\mathbb{R}^n$ ονομάζονται ορθογώνιοι, $S_1 \perp S_2$, αν $s_1^T s_2 = 0$ για κάθε $s_1 \in S_1$ και $s_2 \in S_2$.

1.2 Θεμελιώδεις Υπόχωροι-Ορθογώνιες Προβολές

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Ο πίνακας A είναι μια γραμμική απεικόνιση $A : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Οι παρακάτω υπόχωροι μπορούν να ορισθούν:

1. $R(A) = \{b \in \mathbb{R}^m : b = Ax, x \in \mathbb{R}^n\}$ ονομάζεται χώρος στηλών του A (*col-space* A) *range* A .
2. $R(A^T) = \{b \in \mathbb{R}^n : b = Ax, x \in \mathbb{R}^m\}$ ονομάζεται χώρος των γραμμών του A *row-space* A .
3. $N(A) = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\}$ ονομάζεται ο πυρήνας του A , *null space*.
4. $S^\perp = \{y \in \mathbb{R}^m : y^T x = 0, \forall x \in S\}$ είναι το ορθογώνιο συμπλήρωμα του S .

Ορισμός:

Έστω πίνακας $P_S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ονομάζεται πίνακας προβολής στον υπόχωρο S του $\mathbb{R}^n$ αν και μόνο αν ισχύουν τα παρακάτω:

1. $R(P_S) = S$, ο χώρος στηλών του P είναι S

2. $P_S^T = P_S$, ο P_S είναι συμμετρικός

3. $P_S^2 = P_S$, ο P_S είναι αυτοδύναμος.

Έστω υπόχωρος $S \subseteq \mathbb{R}^n$ και $V = (v_1, v_2, \dots, v_k)$, όπου $v_1, v_2, \dots, v_k$ είναι μια ορθογώνια βάση του S . Τότε:

$$P_S = VV^T$$

είναι η ορθογώνια προβολή πάνω στο SS .

Όταν ο υπόχωρος S είναι $R(A)$ ή $N(A^T)$ δηλαδή συνδέετε με τον πίνακα A τότε ορίζουμε μοναδικές ορθογώνιες προβολές P_A και P_N αντίστοιχα. Έστω πίνακας A , $m \times n (m \geq n)$ είναι *fullrank*, τότε οι προβολές P_A και P_N ορίζονται ως εξής:

1. $P_A = A(A^T A)^{-1} A^T$

2. $P_N = I - A(A^T A)^{-1} A^T$

Προβολή διανυσμάτων στο χώρο στηλών και τον πυρήνα ενός πίνακα

Κάθε διάνυσμα b μπορεί να γραφτεί ως:

$$b = b_S + b_{S^\perp},$$

όπου $b_S \in \mathcal{R}S$ και $b_{S^\perp} \in \mathcal{R}S^\perp$. Εάν $s = \text{rank } R(A)$ τότε $b_S \in R(A)$ και $b_{S^\perp} \in N(A^T)$ οπότε ορίζουμε b_R αντί του b_S και b_N στη θέση $b_{S^\perp}$. Τα διανύσματα b_R και b_N είναι οι προβολές του b στο $R(A)$ και στο $N(A^T)$ αντίστοιχα, με:

$$b_R = P_A b \text{ και } b_N = P_N b$$

$$b_R^T b_N = 0.$$

Πόρισμα:

Αν $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, τότε ισχύουν:

1. $N(A) = R(A^T)^\perp$

2. $R(A)^\perp = N(A^T)$

1.3 Η τάξη του πίνακα

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Η τάξη $\text{rank}(A)$ είναι οι γραμμικά ανεξάρτητες στήλες του πίνακα A . Στην περίπτωση που ο πίνακας είναι τετραγωνικός δηλαδή, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ονομάζεται αντιστρέψιμος (*nonsingular*) εάν $\text{rank}(A) = n$.

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Ονομάζεται πλήρης τάξης (*full rank*) αν είτε οι στήλες είτε οι γραμμές του είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Διαφορετικά υπολείπεται σε τάξη (*rank deficient*)

Παράδειγμα:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix}$$

παρατηρούμε ότι $\text{rank}(A) = 2$. Όπότε είναι *full rank*.

Παράδειγμα:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

παρατηρούμε ότι $\text{rank}(A) = 1$. Όπότε είναι *full deficient*.

Πρόταση:

Έστω πίνακες $A, B, C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ πίνακας τότε ισχύουν τα παρακάτω:

1. $\text{rank}(A) = \text{rank}(A^T)$.
2. $\text{rank}(A) + N(A) = n$.
3. $\text{rank}(AB) \geq \text{rank}(A) + \text{rank}(B) - n$, όπου B είναι $n \times p$.
4. $\text{rank}(BA) = \text{rank}(A) = \text{rank}(AC)$.
5. $\text{rank}(AB) \leq \min \{ \text{rank}(A), \text{rank}(B) \}$.
6. $\text{rank}(A + B) \leq \text{rank}(A) + \text{rank}(B)$.

1.4 Μοναδιαίοι και Ορθογώνιοι πίνακες

Ένας τετραγωνικός πίνακας U λέγεται μοναδιαίος αν ισχύει:

$$U^*U = UU^* = I,$$

όπου $U^* = (\bar{U})^T$, με $\bar{U}$ είναι ο συζυγής του U .

Ένας πίνακας U λέγεται ορθογώνιος αν είναι πραγματικός και ισχύει

$$U^T U = U U^T = I.$$

Θεώρημα:

1. Ο αντίστροφος ενός ορθογώνιου πίνακα O είναι ο ανάστροφος του: $O^{-1} = O^T$.
2. Ο πολλαπλασιασμός δύο ορθογώνιων πινάκων είναι ορθογώνιος.

1.5 Συμμετρικοί και Ερμιτιανοί πίνακες

Ένας τετραγωνικός A πίνακας ονομάζεται Ερμιτιανός αν ισχύει

$$A^* = A.$$

Ένας τετραγωνικός πίνακας A ονομάζεται Συμμετρικός αν ισχύει

$$A^T = A.$$

Θεώρημα:

Έστω A είναι ένας πραγματικός συμμετρικός πίνακας. Τότε υπάρχει ένας ορθογώνιος πίνακας O τέτοιος ώστε

$$O^T A O = D,$$

όπου $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$. Οι αριθμοί $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ είναι οι ιδιότητες του A .

Θεώρημα:

Έστω A ένας ερμιτιανός πίνακας. Τότε υπάρχει μοναδιαίος πίνακας U τέτοιος ώστε

$$U^* A U = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n),$$

όπου $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ είναι οι ιδιοτιμές του A .

1.6 Διανυσματικές νόρμες και νόρμες πινάκων

Ορισμός:

Η διανυσματική νόρμα πάνω στο $\mathbb{R}^n$ είναι μια συνάρτηση $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ η οποία ικανοποιεί τα ακόλουθα:

1. $\|\cdot\| > 0 \ \forall x$ και $\|\cdot\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, \forall x \in \mathbb{R}^n$ και για όλα τα βαθμωτά
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \forall x, y \in \mathbb{R}^n$ (τριγωνική ιδιότητα)

Σημείωση:

$$\|-x\| = \|x\|,$$

$$\|x\| - \|y\| \leq \|(x - y)\|.$$

Διανυσματικές νόρμες

Έστω $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$. Τότε

1. $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n|$ ονομάζεται αθροιστική νόρμα,
2. $\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$ ονομάζεται ευκλείδεια νόρμα, (*euklidean norm*)
3. $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ ονομάζεται νόρμα μεγίστου.

Γενικά εάν p είναι πραγματικός αριθμός ίσος ή μικρότερος του 1 τότε

$$\|x\|_p = (|x_1|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}$$

ονομάζεται p -norm ή *Holder norm*.

Ανισότητα *Cauchy – Schwarz*:

$$|x^T y| \leq \|x\|_2 \|y\|_2.$$

Ορισμός:

Έστω A $m \times n$ πίνακας. Τότε ανάλογα με την διανυσματική νόρμα η νόρμα του πίνακα $\|A\|$ που ικανοποιεί τα παρακάτω

1. $\|A\| > 0$ και $\|A\| = 0$ αν και μόνο αν $A = 0$.

2. $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$, $\forall \alpha$.

3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$.

Επαγόμενες νόρμες πινάκων (*Subordinate matrix norm*)

Δοθέντος πίνακα A και μιας διανυσματικής νόρμας $\|\cdot\|_p$

$$\|A\|_p = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}.$$

Η $\|A\|_p$ ικανοποιεί όλες τις υποθέσεις μιας νόρμας πίνακα και ονομάζεται επαγόμενη νόρμα (*Subordinate norm*).

Σημείωση:

Ισχύει:

$$\|I\|_p = 1$$

$$\|Ax\|_p \leq \|A\|_p \|x\|_p.$$

Νόρμες πινάκων

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Τότε

1. $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$ ονομάζεται μέγιστη αθροιστική νόρμα στηλών.
2. $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ ονομάζεται μέγιστη αθροιστική νόρμα γραμμών.
3. $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$ ονομάζεται ευκλείδεια νόρμα.
4. $\|A\|_F = \left[\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m |a_{ij}|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$ ονομάζεται *Frobenius norm*.

1.7 Δείκτης κατάστασης

Για την μελέτη ευαισθησίας του γραμμικού προβλήματος $Ax = b$ θα χρειαστούμε τον δείκτη κατάστασης (*condition number*) που ορίζεται :

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^T\|.$$

Ένα γραμμικό σύστημα ονομάζεται κακής κατάστασης (*ill condition*) αν $\text{cond}(A) \gg 1$, ενώ αν $\text{cond}(A) \ll 1$ το γραμμικό σύστημα ονομάζεται καλής κατάστασης (*well condition*).

1.8 Ανάλυση Ιδιάζουσων Τιμών

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Τότε υπάρχουν δυο ορθογώνιοι πίνακες $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ και $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ τέτοιοι ώστε

$$A = U \Sigma V^T,$$

όπου $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $p = \min(m, n)$ και $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_p \geq 0$. Αυτή η παραγοντοποίηση ονομάζεται Ανάλυση Ιδιάζουσων τιμών, (*singular value decomposition (SVD)*).

Σημείωση:

Ισχύουν οι ακόλουθες ιδιότητες:

1. $\text{rank}(A) = \text{πλήθος μη μηδενικών ιδιάζουσων τιμών}$.
2. $\|A\|_2 = \sigma_1 = \sigma_{\max}$.
3. $\|A^{-1}\|_2 = \frac{1}{\sigma_n}$ αν A είναι $n \times n$.
4. $\|A\|_F = \left(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_n^2\right)^{\frac{1}{2}}$ αν ο A είναι $m \times n$, $m \geq n$.

Κεφάλαιο 2ο

2 Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων και Εφαρμογές

2.1 Εισαγωγή

Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι για την επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$Ax = b, \quad (1)$$

εάν ο πίνακας A είναι τετραγώνικος και μη ιδιάζων. Ωστόσο, στις περισσότερες εφαρμογές όπως αυτές που προέρχονται από την Στατιστική, τη Γεωμετρική μοντελοποίηση και την Επεξεργασία σήματος χρειάζεται η επίλυση ενός συστήματος όπου ο πίνακας A δεν είναι τετραγωνικός και ενδεχόμενα ιδιάζων. Σ' αυτές τις περιπτώσεις οι λύσεις μπορεί να μην υπάρχουν ή και αν υπάρχουν μπορεί να είναι άπειρες. Για παράδειγμα, όταν ο A είναι $m \times n$, $m > n$, έχουμε ένα *overdetermined* σύστημα (στο οποίο ο αριθμός των εξισώσεων είναι μεγαλύτερος από τον αριθμό των αγνώστων) το οποίο τυπικά δεν έχει λύση. Αντίθετα ένα *underdetermined* σύστημα με $m < n$ τυπικά έχει άπειρο αριθμό από λύσεις.

Σ' αυτές τις περιπτώσεις το καλύτερο που μπορεί να συμβεί είναι να βρούμε ένα διάνυσμα x το οποίο κάνει το Ax να βρίσκεται όσο πιο κοντά στο b . Με άλλα λόγια αναζητούμε ένα x τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η ποσότητα $r(x) = \|Ax - b\|$. Όταν χρησιμοποιείται η Ευκλείδεια νόρμα $\|\cdot\|_2$ η λύση αυτή αναφέρεται σε λύση Ελαχίστων τετραγώνων για το σύστημα (1). Το πρόβλημα της εύρεσης λύσεις ελαχίστων τετραγώνων για το γραμμικό σύστημα (1) ονομάζεται **Γραμμικό Πρόβλημα Ελαχίστων Τετραγώνων** (*Linear Least – Squares Problem LSP*) και ορίζεται ως εξής:

Γραμμικό Πρόβλημα Ελαχίστων Τετραγώνων

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με $\text{rank}(A) \leq \min(m, n)$ και b αναζητούμε ένα διάνυσμα x έτσι ώστε η συνάρτηση $r(x) = \|Ax - b\|_2$ να ελαχιστοποιείται.

Εάν το πρόβλημα έχει περισσότερες από μία λύση αυτή που έχει την ελάχιστη Ευκλείδεια νόρμα ονομάζεται λύση ελαχίστου μήκους ή λύση ελάχιστης νόρμας.

2.2 Γεωμετρική Ερμηνεία του Προβλήματος Ελαχίστων Τετραγώνων

Έστω $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ και $R(A)$ υπόχωρος του $\mathbb{R}^m$. Κάθε διάνυσμα $u \in R(A)$ μπορεί να γραφεί ως $u = Ax$, $x \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$. Λόγω της Ευκλείδειας νόρμας $\|b - Ax\|$ γίνεται φανερό ότι η απόσταση ελαχιστοποιείται αν και μόνο αν $b - Ax$ είναι κάθετο στο $R(A)$. Δηλαδή $b - Ax$ είναι ορθογώνιο στο $R(A)$ και κάθε διάνυσμα στο $R(A)$ είναι γραμμικός συνδυασμός των στηλών του A , οπότε το διάνυσμα $b - Ax$ είναι και αυτό ορθογώνιο σε κάθε στήλη του A . Όπότε:

$$A^T(b - Ax) = 0$$

Κατά συνέπεια

$$A^T Ax = A^T b.$$

Ορισμός Για κάθε $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ Το σύστημα των n εξισώσεων που ικανοποιούν το εξής

$$A^T Ax = A^T b.$$

ονομάζονται **κανονικές εξισώσεις**.

2.3 Ύπαρξη και Μοναδικότητα

Σύμφωνα με την Γεωμετρική Ερμηνεία παρατηρούμε ότι η λύση Ελαχίστων τετραγώνων πάντοτε υπάρχει και ικανοποιεί τις κανονικές εξισώσεις. Ας δούμε τώρα αναλυτικά τις αποδείξεις για την ύπαρξη και την μοναδικότητα της λύσης των ελαχίστων τετραγώνων. Πρώτα θα υποθέσουμε ότι το σύστημα $Ax = b$ είναι *overdetermined*, δηλαδή ο A είναι $m \times n$, $m > n$

1η Περίπτωση: Γραμμικό Σύστημα *overdetermined*

Λήμμα :

1. Έστω $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ και $b \in \mathbb{R}^m$, το $x \in \mathbb{R}^n$ είναι λύση ελαχίστων τετραγώνων του συστήματος $Ax = b$ αν και μόνο αν ικανοποιεί τις κανονικές εξισώσεις

$$A^T Ax = A^T b.$$

2. Η λύση ελαχίστων τετραγώνων όταν υπάρχει είναι μοναδική αν και μόνο αν $\text{rank} A = n$ δηλαδή ο A είναι *fullrank*

Απόδειξη

Υπαρξη

Έστω $r(x) = b - Ax$ και $y \in \mathbb{R}^n$ τότε

$$r(y) = b - Ay = r(x) + Ax - Ay = r(x) + A(x - y).$$

Οπότε

$$\begin{aligned} \|r(y)\|_2^2 &= (r(x) + A(x - y))^T (r(x) + A(x - y)) \\ &= \|r(x)\|_2^2 + 2(x - y)^T A^T r(x) + \|A(x - y)\|_2^2 \end{aligned}$$

Αρχικά υποθέσαμε ότι το x ικανοποιεί το σύστημα $A^T A x = A^T b$ έτσι ώστε

$$A^T r(x) = 0.$$

Τότε έχουμε

$$\|r(y)\|_2^2 = \|r(x)\|_2^2 + \|A(x - y)\|_2^2 \geq \|r(x)\|_2^2$$

Επομένως το x είναι λύση ελαχίστων τετραγώνων.

Στην συνέχεια υποθέτουμε ότι $A^T r(x) \neq 0$.

Θέτουμε $A^T r(x) = z \neq 0$.

Ορίζουμε ένα νέο διάνυσμα y τέτοιο ώστε $y = x + mz$.

Τότε

$$r(y) = r(x) + A(x - y) = r(x) - mAz$$

$$\begin{aligned} \|r(y)\|_2^2 &= \|r(x)\|_2^2 + m^2 \|Az\|_2^2 - 2mA^T r(x) z^T \\ &= \|r(x)\|_2^2 + m^2 \|Az\|_2^2 - 2m \|z\|_2^2 < \|r(x)\|_2^2. \end{aligned}$$

Για $\forall m > 0$ αν $Az = 0$ και για $0 < m < \frac{2\|z\|_2^2}{\|Az\|_2^2}$ εάν $Az \neq 0$.

Αυτό συνεπάγεται ότι $\underline{x}$ δεν είναι λύση ελαχίστων τετραγώνων.

Μοναδικότητα

Για να αποδείξουμε την μοναδικότητα θα χρειαστούμε να δείξουμε ότι ο πίνακας $A^T A$ είναι μη ιδιάζων, όταν A είναι *full rank* και ότι ο $A^T A$ είναι τετραγωνικός. Με την εις άτοπο επαγωγή, υποθέτουμε ότι ο A είναι *full rank*, $A^T A$ είναι μη ιδιάζων. Τότε $A^T A x = 0$ για κάποιο μη μηδενικό διάνυσμα x , $x^T A^T A = 0$ Άρα $A x = 0$ που είναι άτοπο γιατί ο πίνακας A είναι *rank deficient*. Δηλαδή υποθέσαμε ότι ο A είναι *rank deficient* αλλά $A^T A$ είναι μη ιδιάζων. Οπότε υπάρχει μη μηδενικό x τέτοιο ώστε $A^T A x = 0$. Αυτό συνεπάγεται ότι $A^T A$ είναι ιδιάζων, το οποίο είναι και αυτό αντίφαση.

ΘΕΩΡΗΜΑ Ελαχίστων Τετραγώνων- Ορθογώνια Προβολή:

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, και είναι *full rank*, $b \in \mathbb{R}^m$, x είναι μια λύση του γραμμικού προβλήματος τετραγώνων. Τότε το x ικανοποιεί

$$Ax = P_A b$$

όπου P_A είναι ο πίνακας ορθογώνιας προβολής του A στο $R(A)$.

Απόδειξη:

Αφού το x είναι μια λύση ελαχίστων τετραγώνων θα πρέπει να ικανοποιεί

$$A^T A x = A^T b.$$

Επίσης ο $A^T A$ είναι μη ιδιάζων, γιατί ο A έχει *full rank*. Οπότε

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b$$

$$Ax = A (A^T A)^{-1} A^T b = P_A b.$$

Όπου $P_A = A (A^T A)^{-1} A^T$.

ΘΕΩΡΗΜΑ:

Έστω $r = b - Ax$ είναι το υπόλοιπο, τότε $A^T r = 0$ αν και μόνο αν το x είναι μια λύση ελαχίστων τετραγώνων.

Απόδειξη:

Έστω x είναι μια λύση ελαχίστων τετραγώνων. Τότε:

$$A^T r = A^T (b - Ax) = A^T b - A^T A x = A^T b - A^T b = 0.$$

Παράδειγμα:

Έστω πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 9 \end{pmatrix}$$

1. Χρησιμοποιώ τις κανονικές εξισώσεις:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 21 & 28 \\ 28 & 38 \end{pmatrix}, A^T \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 49 \\ 66 \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

2. Χρησιμοποιώντας τον πίνακα ορθογώνιας προβολής

$$P_A = \begin{pmatrix} 0.7145 & 0.4286 & -0.1429 \\ 0.4286 & 0.3571 & 0.2143 \\ -0.1429 & 0.2143 & 0.9286 \end{pmatrix}$$

$$P_A \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 9 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Συνοψίζοντας τα παραπάνω καταλήγουμε στις εξής εκφράσεις:

Το διάνυσμα x είναι λύση του $Ax = b$, όπου $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, m \geq n$ αν και μόνο αν

1. $A^T Ax = A^T b$, δηλαδή έχουμε κανονικές εξισώσεις. Και η λύση είναι μοναδική αν και μόνο αν ο A είναι *full rank*
2. $Ax = P_A b$ όπου P_A είναι η ορθογώνια προβολή πάνω στο RA .
3. $A^T r = 0$ όπου $r = b - Ax$

2η Περίπτωση: Γραμμικό Σύστημα *Underdetermined*

Έστω πίνακας A $m \times n$ και $m < n$. Το σύστημα $Ax = b$ έχει περισσότερες εξισώσεις από τους αγνώστους, είναι δηλαδή *underdetermined*. Το σύστημα αυτό είτε δεν έχει καθόλου λύσεις είτε έχει άπειρες. Στην περίπτωση που ο πίνακας A είναι *full rank* υπάρχουν λύσεις, δηλαδή:

$$x = A^T (AA^T)^{-1} b + \left(I - A^T (AA^T)^{-1} A \right) y$$

όπου y είναι ένας αυθαίρετος αριθμός. Αν $y = 0$ τότε έχουμε την ελαχιστοποίηση της νόρμα :

$$x = A^T (AA^T)^{-1} b.$$

2.4 Εφαρμογές του Γραμμικού Προβλήματος Ελαχίστων Τετραγώνων

Σε αυτή την παράγραφο θα ασχοληθούμε με δύο πολύ γνωστά προβλήματα όπου εφαρμόζεται η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων.

Πολυωνυμική ανάλυση των πειραματικών δεδομένων

Ένα καλό παράδειγμα για να δείξουμε πώς οι κανονικές εξισώσεις εμφανίζονται στις πρακτικές εφαρμογές είναι να τις μετατρέψουμε σε πολυωνυμικές με πειραματικά δεδομένα, ώστε να χρησιμοποιηθούν για την λήψη αποφάσεων στο μέλλον.

Έστω $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ είναι ένα σύνολο από τις αντίστοιχες παρατηρήσεις. Υποθέτουμε ότι $m \leq n$ είναι ο βαθμός πολυωνύμου και

$$y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m$$

είναι η "καλύτερη απεικόνιση" των δεδομένων. Για να το επιτύχουμε αυτό ελαχιστοποιούμε το άθροισμα των τετραγώνων του υπολοίπου

$$E = \sum_{i=1}^n \left(y_i - a_0 - a_1x - a_2x^2 - \dots - a_mx^m \right)^2$$

θα πρέπει τότε να έχουμε

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0, i = 1, \dots, m.$$

Εφαρμόζοντας τα παραπάνω καταλήγουμε

$$\sum x_i^k = S_k, k = 0, 1, \dots, 2m$$

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & \dots & S_m \\ S_1 & S_2 & \dots & S_{m+1} \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ S_m & S_{m+1} & \dots & S_{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}.$$

Αυτό είναι ένα σύστημα $(m+1)$ εξισώσεων με $(m+1)$ αγνώστους. Το οποίο είναι ένα σύστημα με κανονικές εξισώσεις. Υποθέτουμε

$$\mathcal{V} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^m \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^m \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^m \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Τότε το σύστημα γίνεται ίσο με

$$V^T V a = V^T y = b,$$

όπου $a = (a_0, a_1, \dots, a_m)^T$, $b = (b_0, b_1, \dots, b_m)^T$. Αν οι x_i είναι διακριτές τότε ο πίνακας V είναι *full rank*. Ο πίνακας V είναι γνωστός ως πίνακας *Vandermonde*.

Παράδειγμα:

Έστω ότι ένας ηλεκτρολόγος συγκέντρωσε τα ακόλουθα πειραματικά δεδομένα που αποτελούν μετρήσεις της πορείας του ηλεκτρικού σε ένα σύρμα για διάφορα βόλτ

$x = \text{voltage}$	0	2	5	7	9	13	24
$y = \text{curent}$	0	6	7.9	8.5	12	21.5	35

θα βρούμε τις κανονικές εξισώσεις οι οποίες αντιστοιχούν στην καλύτερη ανάλυση των δεδομένων σε

- α' βάθμια εξίσωση
- β' βάθμια εξίσωση

κάθως και την σύγκριση των προβλεπόμενων αποτελεσμάτων με τα πραγματικά αποτελέσματα όταν το $x = 5$.

1η Περίπτωση: Για $m = 1$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \\ 1 & 5 \\ 1 & 7 \\ 1 & 9 \\ 1 & 13 \\ 1 & 24 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \\ 7.9 \\ 8.5 \\ 12.0 \\ 21.5 \\ 35.0 \end{pmatrix}.$$

Οι κανονικές εξισώσεις $V^T V a = V^T y = b$ είναι

$$\begin{pmatrix} 7 & 60 \\ 60 & 904 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = 10^3 \begin{pmatrix} 0.0906 \\ 1.3385 \end{pmatrix}$$

η λύση για αυτή την εξίσωση είναι: $a_0 = 0.6831, a_1 = 1.4353$.

Η αξία του $a_0 + a_1 x$ για $x = 5$ είναι $0.6831 + 1.4345 \times 5 = 7.8596$.

2η Περίπτωση: Για $m = 2$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 5 & 25 \\ 1 & 7 & 49 \\ 1 & 9 & 81 \\ 1 & 13 & 169 \\ 1 & 24 & 576 \end{pmatrix}.$$

Οι κανονικές εξισώσεις $V^T V a = V^T y = b$ είναι

$$\begin{pmatrix} 7 & 60 & 904 \\ 60 & 904 & 17226 \\ 904 & 17226 & 369940 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 10^4 \begin{pmatrix} 0.0091 \\ 0.1338 \\ 2.5404 \end{pmatrix}$$

η λύση για αυτή την εξίσωση είναι: $a_0 = 0.6831, a_1 = 1.4353, a_2 = 0.0027$.

Η αξία του $a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ για $x = 5$ είναι 7.8127.

Μελλοντικές προβλέψεις για τις πωλήσεις

Υποθέτουμε ότι ο αριθμός των b_i είναι τα προϊόντα που πωλούνται από μια εταιρία στην περιοχή i τα οποία εξαρτώνται από το πληθυσμό της περιοχής a_{i1} σε χιλιάδες και το κεφαλήν εισόδημα a_{i2} σε χιλιάδες δολάρια όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα για 5 περιοχές

περιοχή i	πωλήσεις b_i	πληθυσμός a_{i1}	κατακεφαλήν εισόδημα a_{i2}
1	162	274	2450
2	120	180	3254
3	223	375	3802
4	131	205	2838
5	67	86	2347

Υποθέτουμε ότι η εταιρία θέλει να χρησιμοποιήσει το παραπάνω πίνακα για τις μελλοντικές πωλήσεις και πιστεύει ότι ισχύει η παρακάτω σχέση

$$b_i = x_1 + a_{i1}x_2 + a_{i2}x_3.$$

Οπότε

$$162 = x_1 + 274x_2 + 2450x_3$$

$$120 = x_1 + 180x_2 + 3254x_3$$

$$223 = x_1 + 375x_2 + 3802x_3$$

$$131 = x_1 + 205x_2 + 2838x_3$$

$$67 = x_1 + 86x_2 + 2347x_3.$$

Άρα ικανοποιεί την σχέση $Ax = b$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 274 & 2450 \\ 1 & 180 & 3254 \\ 1 & 375 & 3802 \\ 1 & 205 & 2838 \\ 1 & 86 & 2347 \end{pmatrix},$$

$$b = \begin{pmatrix} 162 \\ 120 \\ 223 \\ 131 \\ 67 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}.$$

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι το σύστημα είναι *overdetermined* με 5 εξισώσεις και 3 αγνώστους.

2.5 Ψευδοαντίστροφος πίνακας

Ορισμός:

Ο πίνακας

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$$

$m \times n$, ($m \geq n$), $rank(A) = n$ ονομάζεται **ψευδοαντίστροφος** του A (ή *pseudoinverse* ή *Moore – Penrose*.)

Οπότε η λύση ελαχίστων τετραγώνων για το *overdetermined* σύστημα δίνεται :

$$x = A^+ b.$$

Επομένως ο ορισμός του ψευδοαντίστροφου γενικεύει τον συνήθη ορισμό του αντιστρόφου ενός τετραγωνικού πίνακα. Σημειώνουμε ότι όταν ο πίνακας A είναι τετραγωνικός και αντίστροφος τότε:

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T = A^{-1} (A^T)^{-1} A^T = A^{-1}.$$

Ορισμός:

Έστω A $m \times n$ πίνακας και $rank(A) = n$ τότε ο δείκτης κατάστασης

$$cond(A) = \|A\| \cdot \|A^+\|.$$

Παράδειγμα:

Έστω πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 9 \end{pmatrix}.$$

Ο πίνακας A είναι *fullrank*, $rank(A) = 2$

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T = \begin{pmatrix} -1.2857 & -0.5714 & 0.8571 \\ 1 & 0.5000 & -0.5000 \end{pmatrix}$$

$$cond_2(A) = \|A\|_2 \|A^+\|_2 = 7.6656 \times 2.0487 = 157047.$$

Οπότε η μοναδική λύση ελαχίστων τετραγώνων είναι

$$x = A^+ b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

2.6 Η ευαισθησία του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων

Σε αυτή την παράγραφο θα ασχοληθούμε με την ευαισθησία *sensitivity* της λύσης ελαχίστων τετραγώνων στις διαταραχές των δεδομένων, δηλαδή το πώς η λύση ελαχίστων τετραγώνων αλλάζει σε σχέση με μια μικρή αλλαγή των δεδομένων. Διακρίνουμε δυο περιπτώσεις στη πρώτη έχουμε διαταραχή στο διάνυσμα b και στη δεύτερη έχουμε διαταραχή στον πίνακα A .

1η Περίπτωση: Διαταραχή στο διάνυσμα b

Υποθέτουμε ότι το b διαταράσσεται και γίνεται $\hat{b} = b + \delta b$ αλλά ο A παραμένει ο ίδιος.

Θεώρημα Δεξιάς Διαταραχής

(*Least – Squares Right Perturbation Theorem*) :

Έστω $x, \hat{x}$ αντίστοιχα είναι οι μοναδικές λύσεις ελαχίστων τετραγώνων στο κανονικό και στο πρόβλημα διαταραχής. Τότε εάν $\|b_R\| \neq 0$

$$RelativeError = \frac{\|\hat{x} - x\|}{\|x\|} \leq cond(A) \frac{\|\delta b_R\|}{\|b_R\|}.$$

Εδώ

$$Cond(A) = \|A\| \|A^+\|,$$

το $b_R, \delta b$ είναι οι προβολές του $b, \delta b$ πάνω στο $R(A)$.

Απόδειξη:

Επειδή οι $x, \hat{x}$ είναι οι μοναδικές λύσεις ελαχίστων τετραγώνων στο κανονικό και στο πρόβλημα διαταραχής, έχουμε

$$x = A^+ b,$$

$$\hat{x} = A^+ (b + \delta b)$$

και τα αφαιρούμε κατά μέλη

$$\hat{x} - x = A^+ b + A^+ \delta b - A^+ b = A^+ \delta b.$$

Θέτουμε δb_N να είναι η προβολή του δb στο ορθογώνιο συμπλήρωμα του $R(A)$,

$$\delta b = \delta b_R + \delta b_N.$$

Αφού το δb_N ανήκει στο ορθογώνιο συμπλήρωμα του $R(A) = N(A^T)$, έχουμε

$$A^T(\delta b_N) = 0.$$

Οπότε

$$\begin{aligned}\hat{x} - x &= A^+ \delta b = A^+ (\delta b_R + \delta b_N) \\ &= A^+ (\delta b_R) + A^+ (\delta b_N) \\ &= A^+ \delta b_R + (A^T A)^{-1} A^T \delta b_N = A^+ \delta b_R.\end{aligned}$$

Και πάλι επειδή το x είναι η μοναδική λύση ελαχίστων τετραγώνων, έχουμε

$$Ax = b_R$$

από το οποίο αν πάρουμε νόρμες και από τις δύο πλευρές έχουμε:

$$\|x\| \geq \frac{\|b_R\|}{\|A\|}.$$

Συνδιάζοντας τα παραπάνω προκύπτει το ζητούμενο.

Ερμηνεία του θεωρήματος:

Αν διαταράξουμε το διάνυσμα b τότε αν $Cond(A) = \|A\| \|A^+\|$ είναι μεγάλος αριθμός ακόμης και το μικρό σχετικό σφάλμα της προβολής του b στο $R(A)$ θα έχει δραστικές αλλαγές στην λύση των ελαχίστων τετραγώνων. Αν αυτός ο αριθμός είναι μικρός και το σχετικό σφάλμα της προβολής του b στο $R(A)$ είναι μικρό τότε η λύση των ελαχίστων τετραγώνων δεν θα έχει πολλές αλλαγές.

Παράδειγμα: Πρόβλημα Ελαχίστων Τετραγώνων χωρίς μεγάλη διαταραχή

Έστω πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\delta b = 10^{-4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$b_R = P_A b = \begin{pmatrix} 0.8333 & 0.3333 & 0.1667 \\ 0.3333 & 0.3333 & -0.3333 \\ 0.1667 & -0.3333 & 0.8333 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.3333 \\ 0.3333 \\ 0.6667 \end{pmatrix}$$

$$\delta b_R = P_A \delta b = 10^{-3} \begin{pmatrix} 0.13333 \\ 0.03333 \\ 0.06667 \end{pmatrix}.$$

Το άνω φράγμα του σχετικού σφάλματος είναι:

$$\frac{\|\delta b_R\|}{\|b_R\|} \text{Cond}(A) = 10^{-4} \times 2.4495.$$

Ωστόσο περιμέναμε ότι η λύση ελαχίστων τετραγώνων δεν θα διαταρασόταν αρκετά. Αυτό φαίνεται και παρακάτω

$$x = A^+ b = \begin{pmatrix} 0.6667 \\ 0.3333 \end{pmatrix}$$

$$\hat{x} = A^+ (b + \delta b) = \begin{pmatrix} 0.6667 \\ 0.3334 \end{pmatrix}.$$

Οπότε το σχετικό σφάλμα είναι της τάξης:

$$\frac{\|\hat{x} - x\|}{\|x\|} = 2.4495 \times 10^{-4}.$$

Παράδειγμα: Πρόβλημα Ελαχίστων Τετραγώνων με μεγάλη διαταραχή

Έστω πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-4} & 0 \\ 0 & 10^{-4} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 2 \\ 10^{-4} \\ 10^{-4} \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Υποθέτουμε ότι

$$\delta b = 10^{-3} \begin{pmatrix} 1 \\ 0.1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Τότε

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} 1.5005 \\ 0.5005 \end{pmatrix}.$$

Οπότε

$$\text{Cond}(A) \cdot \frac{\|\delta b_R\|}{\|b_R\|} = 7.088.$$

Άρα έγινε μια ουσιαστική αλλαγή στην λύση μας και το ανώτερο όριο για το σχετικό σφάλμα είναι 7.0888. Το σχετικό σφάλμα σε αυτή την λύση είναι 0.5000 από την άλλη πλευρά το σχετικό σφάλμα στο b είναι 5.0249×10^{-4} .

2η Περίπτωση: Διαταραχή στο πίνακα A

Έστω E μια μικρή διαταραχή του πίνακα

$$\text{rank}(A) = \text{rank}(A + E).$$

Έστω $x, \hat{x}$ αντίστοιχα είναι οι μοναδικές λύσεις ελαχίστων τετραγώνων στο κανονικό και στο πρόβλημα διαταραχής. Και έστω E_A, E_N αντίστοιχα είναι οι προβολές του E στο $R(A)$ και στο ορθογώνιο συμπλήρωμα του $R(A)$. Τότε εάν $b_R \neq 0$ έχουμε το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα Αριστερής Διαταραχής

(Least – Squares Left Perturbation Theorem) :

Έστω $x, \hat{x}$ αντίστοιχα είναι οι μοναδικές λύσεις των

$$Ax = b,$$

$$(A + E)\hat{x} = b$$

και

$$\text{rank}(A + E) = \text{rank}(A).$$

Τότε

$$\frac{\|\hat{x} - x\|}{\|x\|} < 2\text{Cond}(A) \frac{\|E_A\|}{\|A\|} + 4\left(\text{Cond}(A)^2\right) \frac{\|E_N\|}{\|A\|} \frac{\|b_N\|}{\|b_R\|} + O\left(\frac{\|E_N\|}{\|A\|}\right)^2.$$

Ερμηνεία του θεωρήματος:

Στην περίπτωση όπου μόνο ο πίνακας A διαταράσσεται η μοναδική λύση ελαχίστων τετραγώνων γενικά εξαρτάται από το $\text{Cond}(A)$. Ωστόσο εάν $\|E_N\|$ ή $\|b_N\|$ είναι μηδενικό ή μικρό τότε η ευαισθησία εξαρτάται μόνο από $\text{Cond}(A)$. Σημειώνουμε ότι το υπόλοιπο $r = b - Ax$ είναι μηδενικό εάν $b_N = 0$.

3η Περίπτωση: Ευαισθησία στο υπόλοιπο των ελαχίστων τετραγώνων

Σε αυτή την παράγραφο θα ασχοληθούμε με την ευαισθησία του υπολοίπου εξαρτάται από τον δείκτη κατάστασης του πίνακα A .

Θεώρημα Ευαισθησία στο υπόλοιπο

(*Least – Squares Residual Sensitivity Theorem*) :

Έστω r και $\hat{r}$ αντίστοιχα είναι τα υπόλοιπα όπου παραμένει η ευαισθησία στο κανονικό και στο πρόβλημα διαταραχής τα οποία είναι,

$$r = b - Ax,$$

$$\hat{r} = b - (A + E)(\hat{x}).$$

Τότε

$$\frac{\|\hat{r}-r\|}{\|b\|} \leq \frac{\|E_N\|}{\|A\|} + 2\text{Cond}(A) \frac{\|E_N\|}{\|A\|} + O\left(\frac{\|E_N\|}{\|A\|}\right)^2.$$

Ερμηνεία του θεώρηματος:

Από τα παραπάνω φαίνεται ότι το να παραμένει η ευαισθησία εξαρτάται κατά κύριο λόγο από τον δείκτη κατάστασης του πίνακα A . Από την άλλη πλευρά είδαμε ότι το μη μηδενικό πρόβλημα είναι τετράγωνο στον δείκτη κατάστασης το οποίο μετρά την ευαισθησία.

4η Περίπτωση: Ευαισθησία ψευδοαντίστροφου πίνακα

Θεώρημα Ευαισθησίας ψευδοαντίστροφου πίνακα

(*Pseudoinverse Sensitivity Theorem*) :

Έστω A είναι $m \times n, m \geq n$. Επίσης $A^+, \tilde{A}^+$ είναι αντίστοιχα οι ψευδοαντίστροφοι των $A, \tilde{A} = A + E$. Τότε ορίζουμε ότι $\text{rank}(A) = \text{rank}(\tilde{A})$ και έχουμε

$$\frac{\|\tilde{A}^+ - A^+\|}{\|\tilde{A}^+\|} \leq \sqrt{2}\text{Cond}(A) \frac{\|E\|}{\|A\|}.$$

Παράδειγμα:

Έστω πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix},$$

$$E = 10^{-4}A = \begin{pmatrix} 0.0010 & 0.0020 \\ 0.0020 & 0.0030 \\ 0.0040 & 0.0050 \end{pmatrix},$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} -1.2857 & -0.5714 & 0.8571 \\ 1 & 0.5000 & -0.5000 \end{pmatrix},$$

$$A + E = \tilde{A} = \begin{pmatrix} 1.001 & 2.002 \\ 2.002 & 3.003 \\ 4.004 & 5.005 \end{pmatrix},$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} -1.2844 & -0.5709 & 0.8563 \\ 0.9990 & 0.499995 & -0.4995 \end{pmatrix}.$$

Οπότε

$$\frac{\|\tilde{A}^2 - A^+\|}{\|\tilde{A}^+\|} = 10^{-4} \approx \frac{\|E\|}{\|A\|}.$$

Επίσης

$$\text{Cond}(A) = 15.7047.$$

Κεφάλαιο 3ο

3 Αριθμητικές Μέθοδοι Επίλυσης του Προβλήματος Ελαχίστων Τετραγώνων

3.1 Μέθοδος των Κανονικών Εξισώσεων για *Overdetermined* Προβλήματα

Όπως έχουμε δει όταν ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, και έχει *full rank* η μοναδική λύση ελαχίστων τετραγώνων x ικανοποιεί τις κανονικές εξισώσεις $A^T A x = A^T b$. Αφού ο A είναι *full - rank* ο πίνακας $A^T A$ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος μπορούμε να πάρουμε την ανάλυση *Cholesky* : $A^T A = H H^T$ Επομένως οι κανονικές εξισώσεις προσεγγίζουν την λύση ελαχίστων τετραγώνων όπως φαίνεται παρακάτω:

Αλγόριθμος της λύσης ελαχίστων τετραγώνων με την χρήση των κανονικών εξισώσεων Είσοδος :

1. Έστω ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, m > n$ και έχει *full rank*
2. και ένα διάνυσμα $b \in \mathbb{R}^m$

Έξοδος : Μια μοναδική λύση ελαχίστων τετραγώνων x .

Βήμα 1 : Για $c = A^T b$

Βήμα 2 : Υπολόγισε τον παράγοντα *Cholesky* $A^T A = H H^T$.

Βήμα 3 :Επιλίστε τα τριγωνικά συστήματα : $H y = c, H^T x = y$

Πολυπλοκότητα:

Η παραπάνω μέθοδος για την επίλυση του *full rank* προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων απαιτεί περίπου $mn^2 + \frac{n^3}{3} flops$. Πιο συγκεκριμένα για τον υπολογισμό των ποσοτήτων $A^T A$ και $A^T b$ απαιτούνται $mn^2 flops$ ενώ για τον υπολογισμό της ανάλυσης *Cholesky* απαιτούνται $\frac{n^3}{3} flops$, και $n^2 flops$ για τον υπολογισμό των δυο τριγωνικών συστημάτων.

Παράδειγμα:(Εύρεση λύσης με την βοήθεια των κανονικών εξισώσεων στο πρόβλημα των μελλοντικών πωλήσεων)

Βήμα 1 : Για

$$c = A^T b = \begin{pmatrix} 703 \\ 182230 \\ 2164253 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 2 : Για

$$A^T A = \begin{pmatrix} 5 & 1120 & 14691 \\ 1120 & 297522 & 3466402 \\ 214691 & 3466402 & 44608873 \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{pmatrix} 0.0022 & 0 & 0 \\ 0.5009 & 0.2160 & 0 \\ 6.5700 & 0.8132 & 0.8846 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 3 : Επιλύουμε τα δυο τριγωνικά συστήματα:

$$y = \begin{pmatrix} 3143912 \\ 1146376 \\ 61934 \end{pmatrix},$$

$$x = \begin{pmatrix} 70325 \\ 0.5044 \\ 0.0070 \end{pmatrix}.$$

Ο ακόλουθος πίνακας συγκρίνει τις προβλέψεις των πωλήσεων σε κάθε περιοχή με την πραγματική αξία. Οι προβλέψεις υπολογίζονται ως $a_i^T \underline{x}$ όπου a_i^T είναι οι γραμμές του πίνακα $A, i = 1, 2, 3, 4$. :

περιοχή	πρόβλεψη πωλήσεων	πραγματική αξία
1	162.4043	162
2	120.6153	120
3	222.8193	223
4	130.3140	131
5	166.847	67

Οπότε η καλύτερη πρόβλεψη είναι

$$\begin{pmatrix} 1 & 220 & 2500 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 70325 \\ 0.5044 \\ 0.0070 \end{pmatrix} = 135.5005.$$

Αριθμητικές Δυσκολίες στην μέθοδο Κανονικών εξισώσεων

Παρ'όλου που η μέθοδος των κανονικών εξισώσεων είναι εύκολη στο να την καταλάβουμε όμως στο να την εφαρμόσουμε σε ορισμένες καταστάσεις έχει πολλές αριθμητικές δυσκολίες.

Πρώτον,

Χάνουμε κάποια σημαντικά ψηφία κατά την διάρκεια του μετασχηματισμού και υπολογισμού του $A^T A$ καθώς μπορεί να μην είναι θετικά ορισμένος. Πράγματι όπως φαίνεται από τον *Stewart* (1973 pp.225 – 226) εκτός ότι $Cond(A)$ είναι λιγότερο από $10^{\frac{t}{2}}$ όπου υποθέσαμε ότι $A^T A$ υπολογίστηκε ακριβώς και στρογγυλοποιήθηκε στο t οπότε ο πίνακας μπορεί να απορρίφθηκε από θετικά ορισμένος ή μπορεί να μην είναι μοναδικός.

Παράδειγμα:

Υποθέτουμε ότι ο πίνακας ο A είναι από προηγούμενο παράδειγμα για $t = 9$ με της στήλες να είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Οπότε:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 + 10^{-8} & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-8} \end{pmatrix}.$$

Για $t = 9$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

ο οποίος είναι και μοναδικός. Και:

$$Cond(A) 1.4142 \times 10^4 > 10^{\frac{t}{2}} = 10^4.$$

Δεύτερον,

Οι κανονικές εξισώσεις σε ορισμένες περιπτώσεις εισάγουν περισσότερα σφάλματα από αυτά που κανονικά έχει το πρόβλημα. Από την ανάλυση της διαταραχής είδαμε ότι εάν το $\hat{x}$ είναι λύση της μεθόδου των κανονικών εξισώσεων τότε:

$$\frac{\|\hat{x} - x\|}{\|x\|} \approx \mu Cond(A^T A) = (Cond(A))^2.$$

Τοιουτοτρόπως, η ακρίβεια της λύσης των ελαχίστων τετραγώνων εξαρτάται από τον δείκτη κατάστασης του πίνακα A . Ωστόσο σε τέτοιες περιπτώσεις η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων παράγει περισσότερα σφάλματα στην λύση από ότι θα δικαιολογούσαν τα δεδομένα.

3.2 Μέθοδος της QR Παραγοντοποίησης για *Overdetermined* Προβλήματα

Σ' αυτή την παράγραφο θα ασχοληθούμε με το πως η $A = QR$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί στο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων.

Ιδέα: Μετατρέπουμε το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων για έναν πλήρη πίνακα A σε ένα πρόβλημα με άνω τριγωνικό σύστημα χρησιμοποιώντας την QR παραγοντοποίηση στον A .

Η λύση x ελαχίστων τετραγώνων ικανοποιεί

$$Ax = P_A b.$$

Ας $Q_1 R_1 = A$ είναι η μετατροπή της QR παραγοντοποίησης του A . Τότε

$$P_A = Q_1 Q_1^T.$$

Λοιπόν

$$Ax = P_A b = Q_1 Q_1^T b$$

πολλαπλασιάζοντας κάθε μέλος με Q_1^T έχουμε

$$Q_1^T A x = Q_1^T b$$

$$R_1 x = Q_1^T b = c.$$

Η λύση Ελαχίστων Τετραγώνων χρησιμοποιώντας την QR παραγοντοποίηση

1. Βρίσκω την QR παραγοντοποίηση του A : $A = Q_1 R_1$.
2. Υπολογίζω το $c = Q_1^T b$.
3. Λύνουμε τον άνω τριγωνικό σύστημα: $R_1 x = c$.

Μια Εναλλακτική Παραλαγή της λύσης Ελαχίστων Τετραγώνων και Εκφράσεις Υπολοίπου

Έστω $A = QR$ είναι μια *full rank* QR παραγοντοποίηση του A δηλαδή,

$$Q^T A = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}_{m-n}^n, \quad Q^T b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}_{m-n}^n.$$

Τότε

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|Q^T Ax - Q^T b\|_2^2 = \|R_1 x - c\|^2 + \|d\|^2.$$

Αφού το $\hat{x}$ είναι λύση των ελαχίστων τετραγώνων ικανοποιεί $R_1 x = c$.

Οπότε εάν $Q = (Q_1, Q_2)$ τότε έχουμε $R_1 = Q_1^T A, c = Q_1^T b$.

Το υπόλοιπο $\|Ax - b\|_2 = \|d\|_2$ όπου $d = Q_2^T b$. Έχουμε

Η Νόρμα του Υπολοίπου Ελαχίστων Τετραγώνων με QR

Έστω $A = QR = (Q_1, Q_2)R$. Το υπόλοιπο ελαχίστων τετραγώνων δίνεται:

$$\|r\|_2 = \|Ax - b\|_2 = \|Q_2^T b\|_2.$$

Παράδειγμα:

Έστω πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-4} & 0 \\ 0 & 10^{-4} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 2 \\ 10^{-4} \\ 10^{-4} \end{pmatrix}$$

Βήμα 1 :

$$A = QR \quad Q = (Q_1, Q_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0.0001 & \vdots & -0.0001 \\ -0.0001 & -0.7071 & \vdots & 0.7071 \\ 0 & 0.7071 & \vdots & 0.7071 \end{pmatrix}$$

$$R = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0.0001 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 2 :

$$c = Q_1^T b = \begin{pmatrix} -2 \\ 0.0001 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 3 : Η λύση του συστήματος $R_1 x = c$ είναι $x = (1, 1)^T$ η οποία είναι μοναδική.

Βήμα 4 : Το υπόλοιπο $\|r\|_2 = \|d\|_2 = \|Q_2^T b\|_2 = 0$.

3.3 Η Μέθοδος *Householder* για *Overdetermined* προβλήματα

Εαν η μέθοδος *Householder* χρησιμοποιείται για την *QR* παραγοντοποίηση του A τότε το διάνυσμα

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = Q^T b$$

μπορεί να υπολογιστεί:

Για $k = 1, 2, \dots, n$ κάνε

$$b = H_k b$$

όπου $H^k, k = 1, \dots, n$ είναι ο *Householder* πίνακας, δηλαδή $Q^T = H_n H_{n-1} \dots H_2 H_1$.

Η ιδέα του μετασχηματισμού είναι:

Αλγόριθμος της μεθόδου *Householder* για *full rank* πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων

Είσοδος :

1. Ο πίνακας $A, m \times n, m > n, \text{full-rank}(\text{rank}(A) = n)$
2. Διάνυσμα b διάστασης n

Έξοδος :

1. Μια μοναδική λύση ελαχίστων τετραγώνων $x : Ax = b$.
2. Η νόρμα του υπολοίπου.

Βήμα 1 : Εφαρμόζουμε *Householder QR* παραγοντοποίηση στον πίνακα A . Προσδιορίζουμε R_1 και *Householder* πίνακες $H_n H_{n-1} \dots H_2 H_1$.

Βήμα 2 : Διαμορφώνουμε την ποσότητα

$$H_n H_{n-1} \dots H_2 H_1 b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = Q^T b$$

Βήμα 3 : Επιλύστε το τριγωνικό σύστημα : $R_1 x = c$.

Βήμα 4 : Η νόρμα του υπολοίπου: $\|d\|_2$.

Παράδειγμα

Βήμα 1 :

$$R_1 = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0.0001 \end{pmatrix}$$

Βήμα 2 :

$$H_2 H_2 b = \begin{pmatrix} -2 \\ 0.0001 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$c = \begin{pmatrix} -2 \\ 0.0001 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 3 : Λύνουμε $R_1 x = c \Rightarrow$

$$x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Βήμα 4 : Το υπόλοιπο είναι ίσο 0.

Πολυπλοκότητα:

Η παραπάνω μέθοδος για την εύρεση *full rank* λύσης ελαχίστων τετραγώνων με την χρήση της μεθόδου *HouseholderQR* απαιτούνται περίπου $2n^2 \left(m - \frac{n}{3}\right) flops$. Έχει περίπου διπλάσια πολυπλοκότητα από τις κανονικές μεθόδους.

3.4 Η Μέθοδος *MGS* για *Overdetermined* Προβλήματα

Η μέθοδος *MGS* αν και δεν είναι τόσο ικανοποιητική όσο η *QR* παραγοντοποίηση, οστόσο έχει αποδειχθεί ότι είναι αριθμητικά πιο αποτελεσματική για την λύση ελαχίστων τετραγώνων. Εάν

$$(A, B) = (Q_1, q_{n-1}) \begin{pmatrix} R_1 & z \\ 0 & r \end{pmatrix}$$

τότε

$$Ax - b = (A, b) \begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} = (Q_1, q_{n-1}) \begin{pmatrix} R_1 & z \\ 0 & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} = Q_1 (R_1 x - z) - \rho q_{n+1}.$$

Εάν q_{n+1} είναι ορθογώνιο στο Q_1 τότε $\|AX - b\|_2$ θα ελαχιστοποιηθεί όταν $R_1x = z$.

Το υπόλοιπο δίνεται από την σχέση $r = \rho q_{n+1}$.

Αλγόριθμος της MGS για την λύση ελαχίστων τετραγώνων

Είσοδος:

1. Έστω ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ και έχει *full-rank* ($\text{rank}(A) = n$)
2. και ένα διάνυσμα $b \in \mathbb{R}^m$

Έξοδος : Μια μοναδική λύση ελαχίστων τετραγώνων x .

1. Εφαρμόζω MGS στο A και έχουμε $Q_1 = (q_1, \dots, q_n)$ και R_1 .
2. Για $k = 1, \dots, n$
 $\delta_k = q_k^T b$
 $b = b - \delta_k q_k$.
3. Υπολογίζω $R_1 = (\delta_1, \dots, \delta_n)^T$.

Παράδειγμα:

Από το προηγούμενο παράδειγμα της QR εφαρμόζουμε την μέθοδο MGS

$$Q_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0.0001 \\ 0.0001 & -0.7071 \\ 0 & 0.7071 \end{pmatrix}, R_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 \end{pmatrix}.$$

Από $c = Q_1^T b$, $R_1 x = c$ έχουμε

$$x = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix},$$

Από τον παραπάνω αλγόριθμο έχουμε $(d_1, d_2) = (2, 0.0001)$ και η λύση είναι

$$x \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Πολυπλοκότητα:

Η παραπάνω μέθοδος είναι λίγο πιο πολύπλοκη από τον *Householder* δηλαδή χρειάζεται $2mn^2$.

3.5 Μέθοδος της QR Παραγοντοποίησης για *Underdetermined* Προβλήματα

Αντικαθιστώντας το A με A^T στην QR παραγοντοποίηση,

$$Q^T A^T = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix},$$

και το σύστημα γίνεται

$$(R^T, 0^T) Q^T = \begin{pmatrix} y_R \\ y_N \end{pmatrix} = b$$

όπου

$$y = Q^T x = \begin{pmatrix} y_R \\ y_N \end{pmatrix} = b$$

Η μοναδική λύση που ελαχιστοποιεί την νόρμα των ελαχίστων τετραγώνων είναι $y_N = 0$.

Αλγόριθμός ελάχιστης νόρμας της λύσης για *full rank underdetermined* πρόβλημα με την χρήση της QR

Είσοδος :

1. Έστω ο πίνακας $A \ m \times n, m < n, full\ rank\ (rank(A) = m)$
2. και ένα διάνυσμα b

Έξοδος : Δυο νόρμες ελάχιστης λύσης του $Ax = b$

Βήμα 1 : Εφαρμόζω QR παραγοντοποίηση στο A^T

$$Q^T A^T = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$R_1 \in R^{m \times n}.$$

Βήμα 2: $Q = (Q_1, Q_2), Q_1 \in R^{n \times m}$

Βήμα 3: Επιλύστε για $y_R : R_1^T y_R = b$.

Βήμα 4: Η νόρμα της ελάχιστης λύσης $x = Q_1 y_R$.

Πολυπλοκότητα:

Ο παραπάνω αλγόριθμος χρησιμοποιεί περίπου $2m^2n - 2\frac{m^3}{3}$.

Παράδειγμα:

Θεωρούμε το *underdetermined* σύστημα:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 6 \\ 9 \end{pmatrix},$$

Βήμα 1:

$$Q_1 = \begin{pmatrix} -.26731 & -.8729 \\ -.5345 & .2182 \\ -.8018 & -.4364 \end{pmatrix},$$

$$R_1 = \begin{pmatrix} -3.7417 & -5.3452 \\ 0 & 0.6547 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 2:

$$y_R = \begin{pmatrix} -1.6036 \\ 0.6547 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 3: Η λύση είναι

$$x = Q_1 y_R = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.6 Επαναληπτικά Γραμμικά Συστήματα

Σ' αυτή την περίπτωση θα ασχοληθούμε με κατ' επανάληψη υπολογισμό της λύσεις ελαχίστων τετραγώνων που την ανέλυσαν ο *Golub* και *Wilkinson*. Η μέθοδος αυτή βασίζεται στην παρατήρηση που έκανε *Golub* πάνω στη λύση ελαχίστων τετραγώνων και στο υπόλοιπο που ικανοποιούν το γραμμικό σύστημα:

$$\begin{pmatrix} I_m & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}, A \in R^{m \times n}, b \in R^m.$$

Αλγόριθμος για την επαναληπτική μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων

Βήμα 1: Για $r^0 = 0, x^0 = 0$.

Βήμα 2: Για $k = 1, 2, \dots$ **Βήμα 2.1:** Υπολόγισε

$$\begin{pmatrix} r_1^k \\ r_2^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r^k \\ x^k \end{pmatrix}$$

Βήμα 2.2: Λύνω το σύστημα

$$\begin{pmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^k \\ c_2^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^k \\ x^k \end{pmatrix}$$

Βήμα 2.3: Ενημέρωση της λύσης και του υπολοίπου:

$$\begin{pmatrix} r^{k+1} \\ x^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^k \\ x^k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_1^k \\ c_2^k \end{pmatrix}.$$

Πολυπλοκότητα:

Ο παραπάνω αλγόριθμος χρησιμοποιεί περίπου $8mn - 2n^2 flops$.

Παράδειγμα:

Έστω πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 9 \end{pmatrix},$$

$$r^0 = 0, x^0 = 0, k = 0.$$

Βήμα 1:

$$\begin{pmatrix} r_1^0 \\ r_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 9 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 2: Λύνουμε το σύστημα:

$$\begin{pmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^0 \\ c_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1^0 \\ x_2^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^0 \\ c_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.3333 \\ -0.6667 \\ 0.3333 \\ 3.3333 \\ -0.3333 \end{pmatrix}$$

Βήμα 3: Ενημερώνουμε την λύση και το υπόλοιπο:

$$\begin{pmatrix} r^1 \\ x^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^0 \\ x^0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_1^0 \\ c_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.3333 \\ -0.6667 \\ 0.3333 \\ 3.3333 \\ -0.3333 \end{pmatrix}$$

Οι υπολογισμοί των c_1^0, c_2^0 :

$$r_1^0 = b$$

$$r_2^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} r_1' \\ r_2' \end{pmatrix} = Q^T b = \begin{pmatrix} -10.6904 \\ -0.2182 \\ 0.8165 \end{pmatrix}$$

Άρα

$$r_1' = \begin{pmatrix} -10.6904 \\ -0.2182 \end{pmatrix},$$

$$r_2' = \begin{pmatrix} 0.8165 \end{pmatrix},$$

$$c_2' = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, c_2^0 = \begin{pmatrix} 3.3333 \\ -0.3333 \end{pmatrix}, c_1^0 = \begin{pmatrix} 0.3333 \\ -0.6667 \\ 3.3333 \end{pmatrix}.$$

Σύνοψη

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζουμε τις πολυπλοκότητες κάθε μια από τις μεθόδους που αναπτύξαμε παραπάνω. Οι μέθοδοι εφαρμόζονται σε πίνακα A , $m \times n$.

Πρόβλημα	Μέθοδος	Πολυπλοκότητα
<i>Overdetermined Full – Rank</i>	Κανονικές Εξισώσεις	$mn^2 + \frac{n^3}{3}$
<i>Overdetermined Full – Rank</i>	<i>Householder – QR</i>	$2mn^2 - 2\frac{n^3}{3}$
<i>Overdetermined Full – Rank</i>	<i>MGS – QR</i>	$2mn^2$
<i>Overdetermined Rank – Deficient</i>	<i>Householder – QR</i> κατά στήλες	$2mr - r^2(m + n) + \frac{2r^3}{3}$
<i>Underdetermined Full – Rank</i>	Κανονικές Εξισώσεις	$mn^2 + \frac{n^3}{3}$
<i>Underdetermined Full – Rank</i>	<i>Householder – QR</i>	$2mn^2 - 2\frac{n^3}{3}$

3.7 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Μελετήσαμε την επίλυση του γραμμικού προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο QR παραγοντοποίηση. Μερικά απο τα παραδείγματα αυτά ακολουθούν.

Παράδειγμα 1: Τριδιαγώνιος Πίνακας

Έστω πίνακας A διάστασης 5×5 καλής κατάστασης

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

με $\text{cond}(A) = 2.5274$. Και τυχαίο διάνυσμα b , διάστασης 5×1 .

Χρησιμοποιώντας την QR παραγοντοποίηση και με την λύση του άνω τριγωνικού συστήματος προκύπτει ότι το σφάλμα $Ax - b$ είναι πολύ μικρό. Όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα:

n	$\text{Cond}(A)$	QR
5	$2.527e + 000$	$1.360e - 016$
15	$2.925e + 000$	$7.087e - 016$
30	$2.980e + 000$	$8.886e - 016$
50	$2.992e + 000$	$7.788e - 016$
100	$2.998e + 000$	$1.213e - 015$
200	$3.000e + 000$	$1.725e - 015$

Πίνακας 1: QR παραγοντοποίηση σ' ένα τυχαίο πίνακα καλής κατάστασης

Παράδειγμα 2: Ορθογώνιος Πίνακας

Σε αυτό το παράδειγμα χρησιμοποιήσαμε την *gallery* της *Matlab*.

Έστω πίνακας $A = \text{gallery}('orthog', n, k)$, όταν το $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6$, ο πίνακας αυτός είναι ορθογώνιος και καλής κατάστασης. Και τυχαίο διάνυσμα b , διάστασης $n \times 1$

Χρησιμοποιώντας την *QR* παραγοντοποίηση με την λύση του τριγωνικού συστήματος προκύπτει ότι το σφάλμα $Ax - b$ είναι πολύ μικρό.

Στον πρώτο πίνακα εφαρμόζουμε $k=1$ οπότε για $\forall i, j$ έχουμε $A(i, j) = \sqrt{\frac{2}{n+1}} * \sin(\frac{i*j*\pi}{n+1})$ όπου ο A είναι συμμετρικός. Όπως φαίνεται παρακάτω:

n	$Cond(A)$	QR
20	1.0000000000000002	$1.240e - 015$
50	1.0000000000000004	$4.326e - 015$
100	1.0000000000000013	$4.447e - 015$
200	1.0000000000000006	$7.953e - 015$

Πίνακας 2: *QR* παραγοντοποίηση σε πίνακα καλής κατάστασης όπου $A = \text{gallery}('orthog', n, 1)$

Για $k=2$ και για $\forall i, j$ έχουμε $A(i, j) = \frac{2}{\sqrt{2*n+1}} * \sin(\frac{2*i*j*\pi}{2n+1})$ όπου A είναι συμμετρικός. Όπως φαίνεται παρακάτω:

n	$Cond(A)$	QR
20	1.0000	$2.153e - 015$
50	1.0000	$2.113e - 015$
100	1.0000	$4.819e - 015$
200	1.0000	$1.044e - 014$

Πίνακας 3: *QR* παραγοντοποίηση σε πίνακα καλής κατάστασης όπου $A = \text{gallery}('orthog', n, 2)$

Παράδειγμα 3: Πίνακας *Hilbert*

Ξερσιποιούμε την *gallery* της *Matlab*. Έστω πίνακας κακής κατάστασης $A = \text{hilb}(n)$, τα στοιχεία του πίνακα αυτού υπολογίζονται από $A(i, j) = \frac{1}{i+j-1}$.

Χρησιμοποιώντας την *QR* παραγοντοποίηση και με την λύση του άνω τριγωνικού συστήματος προκύπτει ότι το σφάλμα $Ax - b$ είναι μεγάλο.

n	$\text{cond}(A)$	QR
20	$2.0493e + 018$	$5.660e + 000$
50	$5.1081e + 019$	$8.025e + 001$
100	$3.6451e + 019$	$8.196e + 001$
200	$4.7838e + 020$	$5.857e + 002$

Πίνακας 4: *QR* παραγοντοποίηση σε πίνακα κακής κατάστασης όπου $A = \text{hilb}(n)$

Σχόλιο:Εαν επιλύσουμε το σύστημα χρησιμοποιώντας την *QR* παραγοντοποίηση του A και υπολογίσουμε $x = R^{-1}y$ προκύπτουν τα παρακάτω.Έστω πίνακας κακής κατάστασης

$$A = \text{hilb}(n).$$

n	QR
20	$1.495e + 005$
50	$6.577e + 008$
100	$4.230e + 011$
200	$6.168e + 012$

Πίνακας 5: *QR* παραγοντοποίηση με το υπολογισμό $x = R^{-1}y$ σε πίνακα κακής κατάστασης όπου $A = \text{hilb}(n)$

Παράδειγμα 4: Πίνακας Κακής Κατάστασης

Χρησιμοποιούμε την *gallery* της *Matlab*. Έστω πίνακας κακής κατάστασης $A = \text{gallery}('chebspec', n, 0)$. Χρησιμοποιώντας την *QR* παραγοντοποίηση με την λύση του άνω τριγωνικού συστήματος προκύπτει ότι το σφάλμα $Ax - b$ είναι μεγάλο.

n	$\text{cond}(A)$	QR
20	$5.0158e + 015$	$6.962e - 003$
50	$1.0598e + 016$	$4.914e - 001$
100	$7.3033e + 014$	$9.227e - 003$
200	$3.6453e + 015$	$5.284e - 002$

Πίνακας 6: *QR* παραγοντοποίηση σε πίνακα κακής κατάστασης όπου $A = \text{gallery}('chebspec', n, 0)$

Παράδειγμα 5: Ευαισθησία Δεδομένων

Έστω πίνακας κακής κατάστασης

$A = \text{hilb}(n)$ και b ένα τυχαίο διάνυσμα. Αν διαταράξουμε το διάνυσμα b τότε έχουμε. Παρατηρούμε ότι μια μικρή διαταραχή στο διάνυσμα b οδηγεί σε μεγάλο σχετικό σφάλμα.

n	$\text{cond}(A)$	$\text{Rel}(b)$	$\text{Rel}(x)$
50	$5.1081e + 019$	0.25	223.5228
100	$3.6451e + 019$	0.25	500.0195

Πίνακας 7: Διαταραχή στο διάνυσμα b

Κεφάλαιο 4ο

4 Κανονικοποίηση Γραμμικών Συστημάτων Κακής Κατάστασης

4.1 Εισαγωγή

Έστω ένα $p \times p$ γραμμικό σύστημα εξισώσεων

$$Ax = b. \quad (1)$$

Εαν ο πίνακας A είναι κακής κατάστασης μια πιο αποτελεσματική διαδικασία είναι η κανονικοποίηση του συστήματος

$$J(\lambda, x) = \|Ax - b\|^2 + \lambda \|Hx\|^2 \quad (2)$$

όπου $\lambda \geq 0$ είναι μια παράμετρος, H ένας δοσμένος πίνακας $p \times p$ και $\|\cdot\|$ είναι η ευκλείδεια νόρμα.

Η κανονικοποίηση υπολογίζει το διάνυσμα x_λ

$$x_\lambda = \min_x J(\lambda, x).$$

Το διάνυσμα x_λ θα είναι επίσης λύση του συστήματος

$$(C + \lambda E)x_\lambda = A^T b$$

όπου $C = A^T$ και $E = H^T H$

Προσδιορισμός τιμών για την παράμετρο κανονικοποίησης λ

Αν το λ είναι πολύ κοντά στο μηδέν, εξαιτίας της κακής κατάστασης του πίνακα, τότε το διάνυσμα x_λ δεν υπολογίζεται αποτελεσματικά ενώ στη αντίθετη περίπτωση το διάνυσμα x_λ υπολογίζεται καλά αλλά το σφάλμα $x - x_\lambda$ είναι μεγάλο. Η καλή επιλογή του λ είναι ένα δύσκολο πρόβλημα και γι' αυτό προτάθηκαν πολλές μέθοδοι. Για παράδειγμα αν η νόρμα του σφάλματος e πάνω στο b είναι γνωστή τότε το λ υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\lambda \cong \|e\|^2 / \|Hx\|^2.$$

Όμως σε αυτή τη σχέση θα πρέπει το σφάλμα του b να είναι πολύ κοντά στο σφάλμα που παράγεται από την κανονικοποίηση. Ωστόσο καθε λύση z που ικανοποιεί $\|b - Az\| \leq \|e\|$ είναι αποδεκτή και δίνει ένα άνω φράγμα για τη βέλτιστη τιμή του λ .

Η καμπύλη - $L(L - curve)$

Ένας κατάλληλος τρόπος άντλησης πληροφορίας για το κανονικοποιημένο x_λ σε συνάρτηση της παραμέτρου κανονικοποίησης λ , είναι η χρήση της καμπύλης $-L$. Η νόρμα $\|Hx_\lambda\|$ εκτυπώνεται γραφικά ως προς τη νόρμα του υπολοίπου $\|Ax_\lambda - b\|$ και έχουμε μια εικόνα της σχέσης αυτών των δύο ποσοτήτων. Η πρακτική χρήση αυτού προτάθηκε από τους *Lawson* και *Hanson* [] και πιο πρόσφατα *Hansen*[]. Εάν η διαταραχή στο διάνυσμα b είναι "λευκός" θόρυβος και η απόκλιση είναι γνωστή μια καλή επιλογή του λ μπορεί να γίνει από την αρχή της απόκλισης του *Morozov*. Στην περίπτωση που έχουμε τις ίδιες υποθέσεις ακόμη και αν η τυπική απόκλιση είναι άγνωστη ο πιο συνηθισμένος τρόπος είναι με την μέθοδο "generalized cross validation (GCV)". Άλλη μια μέθοδος η οποία μπορεί να θεωρηθεί ως μια μέθοδος κανονικοποίησής είναι *Truncated singular value decomposition (TSVD)*.

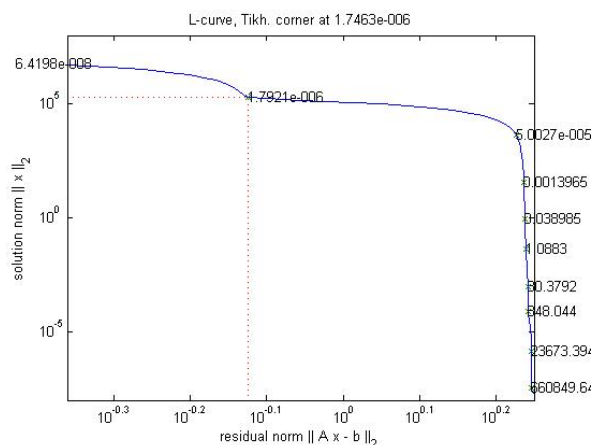
Παράδειγμα 1:

Χρησιμοποιούμε την *gallery* της *Matlab*.

Έστω πίνακας κακής κατάστασης $A = \text{gallery}('invl', n)$.

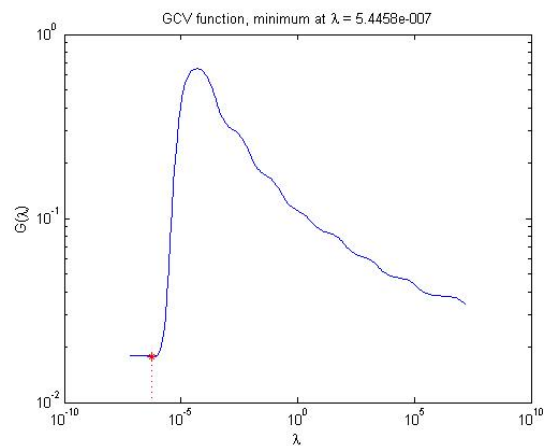
Χρησιμοποιώντας την $L - curve$ υπολογίζουμε την παράμετρο λ .

Η παρακάτω γραφική παράσταση υπολογίζει το λ με τη μέθοδο του *Tikhonov*.



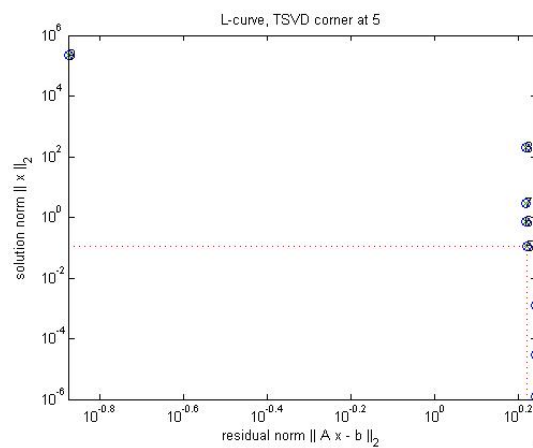
Σχήμα 1: $L - curve$ Tikhonov

Η επόμενη γραφική παράσταση υπολογίζει το λ με τη μέθοδο του *gcv*



Σχήμα 2: *gcv*

Η επόμενη γραφική παράσταση υπολογίζει το λ για το παραπάνω πίνακα με τη μέθοδο του *TSVD*.



Σχήμα 3: *L – curve TSVD*

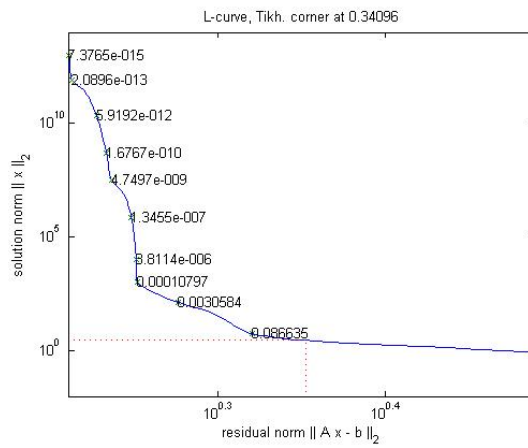
Παράδειγμα 2:

Χρησιμοποιούμε την *gallery* της *Matlab*.

Έστω πίνακας κακής κατάστασης $A = A = \text{hilb}(n)$.

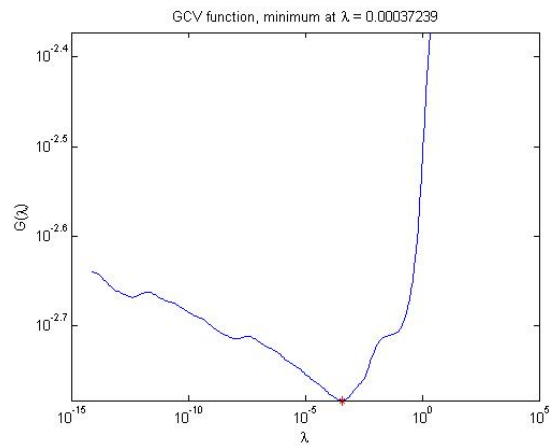
Χρησιμοποιώντας την *L – curve* υπολογίζουμε την παράμετρο λ .

Η παρακάτω γραφική παράσταση υπολογίζει το λ με τη μέθοδο του *Tikhonov* .



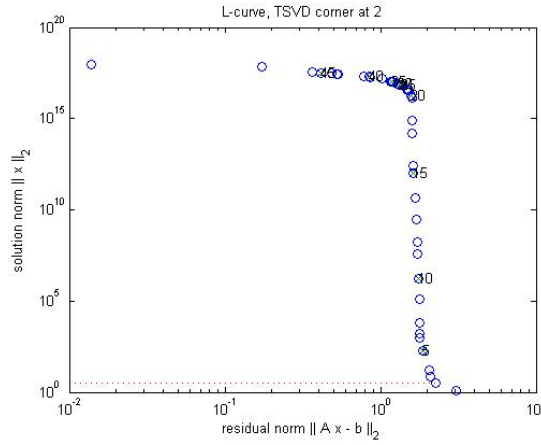
Σχήμα 4: *L – curve Tikhonov*

Η επόμενη γραφική παράσταση υπολογίζει το λ με τη μέθοδο του *gcv*



Σχήμα 5: *gcv*

Η επόμενη γραφική παράσταση υπολογίζει το λ για το παραπάνω πίνακα με τη μέθοδο του *TSVD*.



Σχήμα 6: *L - curve TSVD*

Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε μεθόδους ρητής παρεκβολής *nationalextrapolation* για τον υπολογισμό του x_λ . Συγκεκριμένα θα υπολογίσουμε το x_λ και θα παρεκβάλουμε για $\lambda=0$. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζουμε επεκτείνονται για την περίπτωση επίλυσης γραμμικού συστήματος ελαχίστων τετραγώνων διάστασης $q \times p$ ($q \leq p$).

4.2 Ανάλυση των Κανονικοποιημένων Λύσεων

Έστω ότι ο πίνακας H είναι ένας $p \times p$ ιδιάζων πίνακας και ισχύει $y = Hx$. Οπότε έχουμε

$$J(\lambda, x) = \|Ax - b\|^2 + \lambda \|Hx\|^2$$

και αν αντικαταστήσουμε όπου $x = H^{-1}y$ προκύπτει

$$J(\lambda, x) = \|AH^{-1}y - b\|^2 + \lambda \|y\|^2.$$

Από την ανάλυση ιδιάζουσων τιμών του πίνακα AH^{-1} (*singular value decomposition (SVD)*) υπάρχουν δύο ορθογώνιοι πίνακες U, V και ένας διαγώνιος πίνακας D έτσι ώστε

$$U^T (AH^{-1}) V = D = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)$$

δηλαδή $AH^{-1} = UDV^T$. Τα στοιχεία του διαγώνιου πίνακα είναι

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_p > 0.$$

Με αντικατάσταση στην παραπάνω έχουμε:

$$\begin{aligned}\|AH^{-1}y - b\| &= \|UDV^T y - UU^T b\| = \|U(DV^T y - U^T b)\| \\ &= \|U\| \|DV^T y - U^T b\| = \|DV^T y - U^T b\|\end{aligned}$$

όπου $\|U\| = 1$ και $\|y\| = \|V^T y\|$.

Έτσι θέτουμε

$$\beta = V^T y = V^T Hx \text{ και } \gamma = U^T b.$$

Οπότε

$$\|Ax - b\| = \|D\beta - \gamma\| \text{ και } \|Hx\| = \|y\| = \|b\|$$

και

$$J(\lambda, x) = \|D\beta - \gamma\|^2 + \lambda \|\beta\|^2 = J(\lambda, \beta).$$

Πρόταση

Το διάνυσμα β_λ που ελαχιστοποιεί το $J(\lambda, \beta)$ είναι η λύση του συστήματος

$$(D^2 + \lambda I)\beta_\lambda = D\gamma.$$

Απόδειξη

$$(D\beta_\lambda - \gamma)^2 + \lambda\beta_\lambda^2 = 0 \Leftrightarrow D^2\beta_\lambda^2 - 2D\beta_\lambda\gamma + \gamma^2 + \lambda\beta_\lambda^2 = 0 \Leftrightarrow$$

$$(D^2 + \lambda I)\beta_\lambda^2 = 2D\beta_\lambda\gamma - \gamma^2 \Leftrightarrow (D^2 + \lambda I)\beta_\lambda^2 = D\beta_\lambda\gamma \Leftrightarrow$$

$$(D^2 + \lambda I)\beta_\lambda = D\gamma$$

όπου

$$\gamma^2 = U^T b\gamma = U^T Ax\gamma = U^T AH^{-1}y\gamma$$

$$= U^T U D V^T y\gamma = D V^T y\gamma = D\beta\gamma.$$

Αν αντικαταστήσουμε το β_λ με β_i και γ με γ_i έχουμε

$$(\sigma_i^2 + \lambda)\beta_i = \sigma_i\gamma_i \Leftrightarrow \beta_i = \sigma_i\gamma_i / (\sigma_i^2 + \lambda)$$

και τελικά προκύπτει:

Η λύση του του (2) δίνεται από

$$y_\lambda = V\beta_\lambda = \sum_{i=1}^p \frac{\sigma_i \gamma_i}{\sigma_i^2 + \lambda} v_i$$

και

$$x_\lambda = H^{-1} y_\lambda.$$

(3)

Πρόταση

Εάν στη συνέχεια υποθέσουμε ότι $\gamma_i = (u_i, b)$, σύμφωνα με τα παραπάνω αποδεικνύεται ότι:

$$\begin{aligned} J(\lambda, x) &= J(\lambda, x_\lambda) = \|D\beta_\lambda - \gamma\|^2 + \lambda \|\beta_\lambda\|^2 \\ &= \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda)}. \end{aligned}$$

Απόδειξη

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|^2 &= \|Ax_\lambda - b\|^2 = \|D\beta_\lambda - \gamma\|^2 \\ &= \left(\sum_{i=1}^p \sigma_i \frac{\sigma_i \gamma_i}{(\sigma_i^2 + \lambda)} - \sum_{i=1}^p \gamma_i \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^p \left[\frac{\sigma_i^2 \gamma_i}{(\sigma_i^2 + \lambda)} - \gamma_i \right] \right)^2 \\ &= \left(\sum_{i=1}^p \frac{\sigma_i^2 \gamma_i - \sigma_i^2 \gamma_i - \lambda \gamma_i}{(\sigma_i^2 + \lambda)} \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^p \frac{-\lambda \gamma_i}{(\sigma_i^2 + \lambda)} \right)^2 = \lambda^2 \sum_{i=1}^p \left(\frac{\gamma_i}{\sigma_i^2 + \lambda} \right)^2 \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} J(\lambda, x) &= J(\lambda, x_\lambda) = \|D\beta_\lambda - \gamma\|^2 + \lambda \|\beta_\lambda\|^2 \\ &= \lambda^2 \sum_{i=1}^p \left(\frac{\gamma_i}{\sigma_i^2 + \lambda} \right)^2 + \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\sigma_i^2 \gamma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda)^2} \\ &= \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\lambda \gamma_i^2 + \sigma_i^2 \gamma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda)^2} = \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2 (\lambda + \sigma_i^2)}{(\sigma_i^2 + \lambda)^2} \\ &= \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2}{(\sigma_i^2 + \lambda)} \end{aligned}$$

Στην περίπτωση όπου ο πίνακας H έχει λιγότερες γραμμές από τις στήλες τότε τον μετατρέπουμε σε τετραγωνικό πίνακα προσθέτοντας μηδενικά. Η γενική ανάλυση ιδιάζουσων τιμών ($GSVD$) μπορεί να εφαρμοστεί και στους δύο πίνακες A, H , δηλαδή να υπάρχουν δυο ορθογώνιοι πίνακες U, V και ένας μη-ιδιάζων πίνακας Z έτσι ώστε

$$U^T A Z = D_A \text{ και } V^T H Z = D_H$$

όπου D_A, D_H είναι οι διαγώνιοι πίνακες χωρίς αρνητικά στοιχεία. Θέτουμε $\beta = Z^T x$ και $\gamma = U^T b$ έχουμε

$$J(\lambda, x) = \|Ax - b\|^2 + \lambda \|Hx\|^2.$$

Με αντικατάσταση στην παραπάνω έχουμε:

$$\begin{aligned} \|Ax - b\| &= \|UD_A Z^T x - U U^T b\| = \|U(D_A Z^T x - U^T b)\| \\ &= \|U\| \|D_A Z^T x - U^T b\| = \|D_A \beta - \gamma\| \end{aligned}$$

όπου

$$\|U\| = 1$$

και

$$\|Hx\| = \|VD_H Z^T x\| = \|D_H \beta\|.$$

Οπότε

$$J(\lambda, \beta) = \|D_A \beta - \gamma\|^2 + \lambda \|D_H \beta\|^2$$

Το διάνυσμα β_λ ελαχιστοποιεί το $J(\lambda, \beta)$ και είναι η λύση του συστήματος

$$(D_A^2 + \lambda D_H^2) \beta_\lambda = D_A \gamma$$

δηλαδή

$$(D_A \beta_\lambda - \gamma)^2 + \lambda (D_H^2 \beta_\lambda)^2 = 0 \Leftrightarrow D_A^2 \beta_\lambda^2 - 2D_A \beta_\lambda \gamma + \gamma^2 + \lambda D_H^2 \beta_\lambda^2 = 0 \Leftrightarrow$$

$$(D_A^2 + \lambda D_H^2) \beta_\lambda^2 = 2D_A \beta_\lambda \gamma - \gamma^2 \Leftrightarrow (D_A^2 + \lambda D_H^2) \beta_\lambda^2 = D_A \beta_\lambda \gamma \Leftrightarrow$$

$$(D_A^2 + \lambda D_H^2) \beta_\lambda = D_A \gamma$$

όπου

$$\gamma^2 = U^T b \gamma = U^T A x \gamma = U^T U D_A Z^T x \gamma = D Z^T x \gamma = D_A \beta_\lambda \gamma.$$

Αν αντικαταστήσουμε το β_λ με β_i και γ με γ_i καθώς

$$D_A = \text{diag}(d_1, \dots, d_p), D_H = \text{diag}(h_1, \dots, h_p)$$

έχουμε

$$(d_i^2 + \lambda h_i^2) \beta_i = d_i \gamma_i \Leftrightarrow \beta_i = \frac{d_i \gamma_i}{d_i^2 + \lambda h_i^2}$$

και τελικά προκύπτει:

Η λύση του κανονικοποιημένου συστήματος (2) δίνεται επίσης από:

$$x_\lambda = \sum_{i=1}^p \frac{d_i \gamma_i}{d_i^2 + \lambda h_i^2} z_i.$$

(4)

Πρόταση

Σύμφωνα με τα παραπάνω αποδεικνύουμε:

$$\begin{aligned} J(\lambda, x) &= J(\lambda, x_\lambda) = \|D_A \beta_\lambda - \gamma\|^2 + \lambda \|D_H \beta_\lambda\|^2 \\ &= \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2 h_i^2}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)} \end{aligned}$$

Απόδειξη

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|^2 &= \|Ax_\lambda - b\|^2 = \|D_A \beta_\lambda - \gamma\|^2 \\ &= \left(\sum_{i=1}^p d_i \frac{d_i \gamma_i}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)} - \sum_{i=1}^p \gamma_i \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^p \frac{d_i^2 \gamma_i - d_i^2 \gamma_i - \lambda h_i^2 \gamma_i}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)} \right)^2 \\ &= \left(\sum_{i=1}^p \frac{-\lambda h_i^2 \gamma_i}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)} \right)^2 = \lambda^2 \sum_{i=1}^p \left(\frac{h_i^2 \gamma_i}{d_i^2 + \lambda h_i^2} \right)^2 \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} J(\lambda, x) &= J(\lambda, x_\lambda) = \|D_A \beta_\lambda - \gamma\|^2 + \lambda \|D_H \beta_\lambda\|^2 \\ &= \lambda^2 \sum_{i=1}^p \frac{h_i^4 \gamma_i^2}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)^2} + \lambda \sum_{i=1}^p \frac{h_i^2 d_i^2 \gamma_i^2}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)^2} \\ &= \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\lambda \gamma_i^2 h_i^4 + h_i^2 \gamma_i^2 d_i^2}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)^2} = \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2 h_i^2 (\lambda h_i^2 + d_i^2)}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)^2} \\ &= \lambda \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2 h_i^2}{(d_i^2 + \lambda h_i^2)} \end{aligned}$$

4.3 Η περίπτωση του συμμετρικού και θετικά ορισμένου πίνακα

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε έναν πίνακα A που είναι συμμετρικός, θετικά ορισμένος και ένα διάνυσμα b . Αντί για την λύση της $Ax = b$, μπορούμε να υποθέσουμε το κανονικοποιημένο σύστημα $(A + \lambda E)x_\lambda = b$ όπου E είναι ένας συμμετρικός πίνακας θετικά ορισμένος. Θέτουμε $y_\lambda = Ex_\lambda$ και το σύστημα γίνεται

$$(AE^{-1} + \lambda I)Ex_\lambda = b \Leftrightarrow (AE^{-1} + \lambda I)y_\lambda = b.$$

Έστω από την ανάλυση ιδιάζουσων τιμών (SVD) έχουμε ότι υπάρχει ορθογώνιος πίνακας U και διαγώνιος πίνακας D έτσι ώστε

$$U^T AE^{-1}U = D \Leftrightarrow AE^{-1} = UDU^T$$

έχουμε σύμφωνα με τα παραπάνω

$$(UDU^T + \lambda IUU^T)y_\lambda = U(D + \lambda I)U^T y_\lambda = b.$$

Αν $\gamma = U^T b$ και $\beta_\lambda = U^T y_\lambda$ τότε αν πολλαπλασιάσουμε με U^T έχουμε

$$U^T U(D + \lambda I)U^T y_\lambda = U^T b \Leftrightarrow (D + \lambda I)\beta_\lambda = \gamma.$$

Οπότε αντικαθιστούμε το β_λ με β_i και όπου $D = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)$ καθώς και το γ με γ_i όπου $\gamma_i = (u_i, b)$ έχουμε

$$(\sigma_i + \lambda)\beta_i = \gamma_i \Leftrightarrow \beta_i = \frac{\gamma_i}{\sigma_i + \lambda} y_\lambda = U\beta_i = \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i}{\sigma_i + \lambda} u_i.$$

Προφανώς αν το $\lambda=0$ τότε η λύση x του συστήματος θα είναι:

Η λύση του κανονικοποιημένου συστήματος (2) για συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα δίνεται από:

$$x = \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i}{\sigma_i} u_i.$$

4.4 Ρητές Μέθοδοι Παρεκβολής (*Rational extrapolation procedures*)

Από τις (3) και (4) παρατηρούμε ότι το x_λ εκφράζεται σε μια ρητή συνάρτηση της παραμέτρου λ . Στην πρώτη περίπτωση το διάνυσμα v_i που εμφανίζεται είναι γνωστό και ορθοκανονικό ενώ στην δεύτερη περίπτωση το διάνυσμα z_i είναι γνωστό αλλά δεν είναι ορθοκανονικό. Αν το x_λ μπορεί να λυθεί από οποιαδήποτε μέθοδο με την βοήθεια του (3) τότε v_i είναι άγνωστο. Και στις δυο περιπτώσεις μπορούμε να εφαρμόσουμε την μέθοδο της ρητής παρεκβολής (*extrapolation procedure*).

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε μεθόδους (*extrapolation procedure*) που θα οδηγήσουν στο προσδιορισμό της λύσης του συστήματος.

4.4.1 Ειδική περιορισμένη περίπτωση

Έστω x_n είναι μια δοθείσα ακολουθία από διανύσματα στο R^p και λ_n μια βαθμωτή ακολουθία. θεωρούμε μια ρητή συνάρτηση

$$R_k(\lambda) = \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{b_i + \lambda} v_i$$

όπου τα a_i, b_i είναι άγνωστα βαθμωτά και το v_i είναι γνωστά διανύσματα στο R^p και γραμμικά ανεξάρτητα.

Οι $2k$ άγνωστοι $a_1, \dots, a_k$ και $b_1, \dots, b_k$ μπορούν να προσδιοριστούν από συνθήκες παρεμβολής

$$x_n = R_k(\lambda_n)$$

για κάποιες τιμές του n .

Παραεκβάλλοντας στο μηδέν υπολογίζουμε

$$R_k(0) = \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{b_i} v_i.$$

Έστω ότι ισχύουν οι συνθήκες παρεμβολής

$$x_n = \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{b_i + \lambda_n} v_i$$

$$x_{n+1} = \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{b_i + \lambda_{n+1}} v_i$$

και ότι τα διανύσματα $w_1, \dots, w_k$ όπου $(v_i, w_j) = \delta_{ij} = 1, i=j, 0, i \neq j$ είναι γνωστά.

Τότε πολλαπλασιάζοντας τις παραπάνω με w_j για $j = 1, \dots, k$ και έχουμε

$$(x_n, w_j) = \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{b_i + \lambda_n} (v_i, w_j) = \frac{a_j}{b_j + \lambda_n}$$

$$(x_{n+1}, w_j) = \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{b_i + \lambda_{n+1}} (v_i, w_j) = \frac{a_j}{b_j + \lambda_{n+1}}.$$

Λύνοντας τις παραπάνω ως προς a_j και εξισώνοντας τις έχουμε

$$a_j = (b_j + \lambda_n)(x_n, w_j),$$

$$a_j = (b_j + \lambda_{n+1})(x_{n+1}, w_j),$$

δηλαδή ,

$$(b_j + \lambda_n)(x_n, w_j) = (b_j + \lambda_{n+1})(x_{n+1}, w_j) \Leftrightarrow$$

$$(x_n, w_j)b_j + (x_n, w_j)\lambda_n = (x_{n+1}, w_j)b_j + (x_{n+1}, w_j)\lambda_{n+1} \Leftrightarrow$$

$$b_j \{ (x_n, w_j) - (x_{n+1}, w_j) \} = (x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} - (x_n, w_j) \lambda_n \Leftrightarrow$$

$$b_j = - \frac{(x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} - (x_n, w_j) \lambda_n}{(x_{n+1}, w_j) - (x_n, w_j)}.$$

Με αντικατάσταση στην

$$a_j = (b_j + \lambda_n) (x_n, w_j) = (b_j + \lambda_{n+1}) (x_{n+1}, w_j)$$

το παραπάνω έχουμε

$$a_j = (x_n, w_j) \left(\lambda_n - \frac{(x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} - (x_n, w_j) \lambda_n}{(x_{n+1}, w_j) - (x_n, w_j)} \right)$$

$$= (x_n, w_j) \left(\frac{\lambda_n (x_{n+1}, w_j) - \lambda_n (x_n, w_j) - (x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} + (x_n, w_j) \lambda_n}{(x_{n+1}, w_j) - (x_n, w_j)} \right)$$

$$= \frac{(x_n, w_j)}{(x_{n+1}, w_j) - (x_n, w_j)} (x_{n+1}, w_j) (\lambda_n - \lambda_{n+1}).$$

Οπότε

$$\frac{a_j}{b_j} = \frac{\frac{(x_n, w_j)}{(x_{n+1}, w_j) - (x_n, w_j)} (x_{n+1}, w_j) (\lambda_n - \lambda_{n+1})}{-\frac{(x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} - (x_n, w_j) \lambda_n}{(x_{n+1}, w_j) - (x_n, w_j)}}$$

$$= (x_n, w_j) (x_{n+1}, w_j) \frac{(\lambda_{n+1} - \lambda_n)}{(x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} - (x_n, w_j) \lambda_n}.$$

Προφανώς το $R_k(0)$ εξαρτάται από το n, k οπότε θέτουμε $y_k^n = R_k(0)$ άρα

$$y_k^n = \sum_{i=1}^k (x_n, w_j) (x_{n+1}, w_j) \frac{(\lambda_{n+1} - \lambda_n)}{(x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} - (x_n, w_j) \lambda_n} v_j$$

Θεώρημα 1

Έαν $(v_i, w_j) = \delta_{ij}$ για $i, j = 1, \dots, k \leq p$ και αν $\forall n$ τα διανύσματα (x_n) ικανοποιούν $x_n = R_k(\lambda_n)$ τότε για κάθε n :

$$y_j^n = \sum_{i=1}^j \frac{a_i}{b_i} n_i, \quad j = 1, \dots, k.$$

Προφανώς με τις προηγούμενες υποθέσεις το διάνυσμα y_j^n εξαρτάται από λ_n και λ_{n+1} . Στην περίπτωση που το διάνυσμα w_j δεν εξαρτάται από το k τότε αυξανοντας τις τιμές του k για συγκεκριμένο n στη σχέση

$$y_{k+1}^n = y_k^n + \frac{a_{k+1}}{b_{k+1}} v_{k+1}, \quad k = 0, 1, \dots, p-1 \text{ με } y_0^n = 0.$$

Αυτό είναι αληθές στην περίπτωση που το διάνυσμα v_j είναι ορθογώνιο και εάν ισχύει $w_j = v_j, \forall j$.

Παρεκβολή για τον προσδιορισμό της λύσης του κανονικοποιημένου συστήματος

Πρόταση

Έαν εφαρμόσουμε παρεκβολή στο διάνυσμα $x_n = x_{\lambda_n}$ με $H = I$, A ένας μη ιδιάζων πίνακας και $k \leq p$. Αν αντικαταστήσουμε τα x_n και x_{n+1} από τα παραπάνω έχουμε:

$$\frac{a_j}{b_j} = \frac{\gamma_j}{\sigma_j} .$$

Απόδειξη:

$$\begin{aligned} \frac{a_j}{b_j} &= (x_n, w_j) (x_{n+1}, w_j) \frac{(\lambda_{n+1} - \lambda_n)}{(x_{n+1}, w_j) \lambda_{n+1} - (x_n, w_j) \lambda_n} \\ &= \frac{\sigma_j \gamma_j}{\sigma_j^2 + \lambda_n} \frac{\sigma_j \gamma_j}{\sigma_j^2 + \lambda_{n+1}} \frac{(\lambda_{n+1} - \lambda_n)}{\lambda_{n+1} \frac{\sigma_j \gamma_j}{\sigma_j^2 + \lambda_{n+1}} - \lambda_n \frac{\sigma_j \gamma_j}{\sigma_j^2 + \lambda_n}} \\ &= \frac{\sigma_j^2 \gamma_j^2}{(\sigma_j^2 + \lambda_n)(\sigma_j^2 + \lambda_{n+1})} \frac{(\lambda_{n+1} - \lambda_n)}{\sigma_j \gamma_j \left(\frac{\lambda_{n+1} \sigma_j^2 + \lambda_{n+1} \lambda_n - \lambda_n \sigma_j^2 - \lambda_{n+1} \lambda_n}{(\sigma_j^2 + \lambda_{n+1})(\sigma_j^2 + \lambda_n)} \right)} \\ &= \frac{\sigma_j \gamma_j}{(\sigma_j^2 + \lambda_n)(\sigma_j^2 + \lambda_{n+1})} \frac{(\lambda_{n+1} - \lambda_n)(\sigma_j^2 + \lambda_{n+1})(\sigma_j^2 + \lambda_n)}{\sigma_j^2 (\lambda_{n+1} - \lambda_n)} \\ &= \frac{\gamma_j}{\sigma_j} . \end{aligned}$$

Θεώρημα 2:

Έαν $(v_i, v_j) = \delta_{ij}$ για $i, j = 1, \dots, k \leq p$ και εάν εφαρμόσουμε την παραπάνω διαδικασία παρεκβολής με $w_j = v_j$, $j = 1, 2, \dots$, στα διανύσματα x_λ που δίνονται από τη (3) τότε για κάθε n

$$y_k^{(n)} = \sum_{i=1}^k \frac{\gamma_i}{\sigma_i} v_i, \quad k = 1, \dots, p.$$

Παρατήρηση:

Η διαδικασία της παρεκβολής είναι ισοδύναμη με την *truncated singular value decomposition* (TSVD) όπως αυτή αναφέρεται από το *Hansen*.

Μελέτη των σφαλμάτων

Θέτουμε

$$\begin{aligned} e_k &= x - y_k \\ r_k &= b - Ay_k. \end{aligned}$$

Θεώρημα 3:

Για $k = 0, 1, \dots$, έχουμε

$$\|e_{k+1}\|^2 = \|e_k\|^2 - \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2}$$

$$\|r_{k+1}\|^2 = \|r_k\|^2 - \gamma_{k+1}^2$$

με $e_0 = x, \|e_0\|^2 = \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2}{\sigma_i^2}$ και $r_0 = b, \|r_0\|^2 = \sum_{i=1}^p \gamma_i^2$.

Απόδειξη

Από το θεώρημα 2 έχουμε

$$e_{k+1} = e_k - 2 \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}^2} v_{k+1}.$$

Άρα

$$\begin{aligned} \|e_{k+1}\|^2 &= \left(e_k - \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}^2} v_{k+1} \right)^2 \\ &= \|e_k\|^2 - 2 \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}^2} (e_k, v_{k+1}) + \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} \\ &= \|e_k\|^2 - 2 \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} + \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} \\ &= \|e_k\|^2 - \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} \end{aligned}$$

όπου

$$e_k = \sum_{i=k+1}^p \frac{\gamma_i}{\sigma_i} v_i \quad (e_k, v_{k+1}) = \sum_{i=k+1}^p \frac{\gamma_i}{\sigma_i} (v_i, v_{k+1}) = \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}}.$$

Επίσης έχουμε από τα παραπάνω

$$e_k = x - y_k \Leftrightarrow y_k = x - e_k$$

και με αντικατάσταση

$$r_k = b - Ay_k = b - A(x - e_k) = b - Ax - Ae_k = b - b - Ae_k$$

άρα

$$r_k = Ae_k$$

και

$$\|r_{k+1}\|^2 = \|r_k\|^2 - \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}} Av_{k+1}.$$

Άρα

$$\begin{aligned} \|r_{k+1}\|^2 &= \left(r_k - \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}} Av_{k+1} \right)^2 \\ &= \|r_k\|^2 - 2 \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}} (r_k, Av_{k+1}) + \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} \|Av_{k+1}\|^2 \\ &= \|r_k\|^2 - \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} \|Av_{k+1}\|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \|r_k\|^2 - \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} \sigma_{k+1}^2 \\
&= \|r_k\|^2 - \gamma_{k+1}^2
\end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned}
r_k &= \sum_{i=k+1}^p \frac{\gamma_i}{\sigma_i} A v_i (r_k, A v_{k+1}) \\
&= \sum_{i=k+1}^p \frac{\gamma_i}{\sigma_i} (A v_i, v_{k+1}) = \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}} (A v_{k+1}, v_{k+1}) \\
&= \frac{\gamma_{k+1}}{\sigma_{k+1}} \|A v_{k+1}\|^2.
\end{aligned}$$

Θεώρημα 4:

Για κάθε k έχουμε

$$\begin{aligned}
\|y_k\|^2 &= \sum_{i=1}^k \frac{\gamma_i^2}{\sigma_i^2} \\
\|y_{k+1}\|^2 &= \|y_k\|^2 + \frac{\gamma_{k+1}^2}{\sigma_{k+1}^2} \\
\|e_k\|^2 &= \sum_{i=k+1}^p \frac{\gamma_i^2}{\sigma_i^2} \\
(y_k, e_k) &= (e_{k-1} - e_k, e_k) = 0 \\
\|x\|^2 &= \|y_k\|^2 + \|e_k\|^2 \\
\|r_k\|^2 &= \sum_{i=k+1}^p \gamma_i^2.
\end{aligned}$$

Ας υποθέσουμε την περίπτωση ο H να είναι ένας ορθογώνιος πίνακας. Λοιπόν παίρνουμε τα διανύσματα $w_1, \dots, w_p$ που είναι ορθοκανονικά στα $z_1, \dots, z_p$. Αν η διαδικασία της παρεκβολής εφαρμόζεται στα διανύσματα

$$x_n = x_{\lambda_n}$$

τότε

$$\frac{a_j}{b_j} = \frac{\gamma_j}{d_j}$$

και το v_i αντικαταστάται από z_i .

Θεώρημα 5:

Αν η διαδικασία της παρεκβολής που ορίστηκε παραπάνω (χρησιμοποιώντας τα z_i αντί για v_i) εφαρμοστεί στα διανύσματα x_λ που δίνονται από τη (4) τότε $\forall n$

$$y_k^{(n)} = \sum_{i=1}^k \frac{\gamma_i}{d_i} z_i.$$

Οπότε έχουμε

$$x = Za \text{ με } a = (\gamma_1/d_1, \dots, \gamma_p/d_p)^T$$

$$y_k = Za_k \text{ με } a_k = (\gamma_1/d_1, \dots, \gamma_p/d_p, 0, \dots, 0)^T$$

$$e_k = x - y_k = Z(a - a_k)$$

$$r_k = Ae_k = AZ(a - a_k) = UD_A(a - a_k).$$

Άρα :

$$y_{k+1} = y_k + \frac{\gamma_{k+1}}{d_{k+1}} z_{k+1}$$

$$e_{k+1} = e_k - \frac{\gamma_{k+1}}{d_{k+1}} z_{k+1}$$

$$r_k = \sum_{i=k+1}^p \gamma_i u_i$$

$$r_{k+1} = r_k - \gamma_{k+1} u_{k+1}.$$

οπότε προκύπτει το παρακάτω.

Θεώρημα 6:

$$\|Z^{-1}e_{k+1}\|^2 = \|Z^{-1}e_k\|^2 - \frac{\gamma_{k+1}^2}{d_{k+1}^2}$$

$$\|r_{k+1}\|^2 = \|r_k\|^2 - \gamma_{k+1}^2.$$

$$\text{με } \|Z^{-1}e_0\|^2 = \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2}{d_i^2} \text{ και } \|r_0\|^2 = \sum_{i=1}^p \gamma_i^2.$$

Θεώρημα 7:

$$\|Z^{-1}y_k\|^2 = \sum_{i=1}^k \frac{\gamma_i^2}{d_i^2}$$

$$\|Z^{-1}y_{k+1}\|^2 = \|Z^{-1}y_k\|^2 + \frac{\gamma_{k+1}^2}{d_{k+1}^2}$$

$$\|Z^{-1}e_k\|^2 = \sum_{i=k+1}^p \frac{\gamma_i^2}{d_i^2}$$

$$\|Z^{-1}e_{k+1}\|^2 = \|Z^{-1}e_k\|^2 - \frac{\gamma_{k+1}^2}{d_{k+1}^2}$$

$$\|Z^{-1}x\|^2 = \|Z^{-1}y_k\|^2 + \|Z^{-1}e_k\|^2$$

$$\|r_k\|^2 = \sum_{i=k+1}^p \gamma_i^2.$$

Έχουμε $HZ = VD_H$:

$$Hy_k = VD_H a_k \text{ και } He_k = VD_H (a - a_k)$$

$$Hy_k = \sum_{i=1}^k h_i \frac{\gamma_i}{d_i} v_i$$

$$He_k = \sum_{i=k+1}^p h_i \frac{\gamma_i}{d_i} v_i$$

$$\acute{\eta} Hy_{k+1} = Hy_k + h_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{d_{k+1}} v_{k+1}$$

$$He_{k+1} = He_k - h_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{d_{k+1}} v_{k+1}$$

Από την ορθογωνιότητα του V θα έχουμε :

$$\|Hy_k\|^2 = \sum_{i=1}^k h_i^2 \frac{\gamma_i^2}{d_i^2}$$

$$\|He_k\|^2 = \sum_{i=k+1}^p h_i^2 \frac{\gamma_i^2}{d_i^2}$$

$$\|Hy_{k+1}\|^2 = \|Hy_k\|^2 + h_{k+1}^2 \frac{\gamma_{k+1}^2}{d_{k+1}^2}$$

$$\|He_{k+1}\|^2 = \|He_k\|^2 - h_{k+1}^2 \frac{\gamma_{k+1}^2}{d_{k+1}^2}$$

$$\|Hx\|^2 = \|Hy_k\|^2 + \|He_k\|^2.$$

4.4.2 Πλήρης περίπτωση

Μπορούμε τώρα να υποθέσουμε ότι τα διανύσματα v_i είναι άγνωστα και ότι τα x_λ μπορούν να υπολογιστούν από την λύση του συστήματος (1) ή από την ελαχιστοποίηση του (2) από μια αυθαίρετη μέθοδο. Όταν $H = I$ τα διανύσματα x_λ ικανοποιούν την (4) ανεξαρτήτως από την μέθοδο που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό, οπότε θεωρούμε την διαδικασία της παρεκβολής

$$R_k(\lambda) = \sum_{i=1}^k \frac{1}{b_i + \lambda} w_i, k \leq p$$

όπου τα b_i είναι άγνωστα βαθμωτά διανύσματα και τα w_i είναι επίσης άγνωστα διανύσματα.

Αυτά τα άγνωστα διανύσματα μπορούν να καθοριστούν από την επιβολή του $x_n = R_k(\lambda_n)$ για κάποιες τιμές του n , ώστε να μπορούμε να παρεκβάλουμε στο μηδέν και να υπολογίσουμε

$$y_k = R_k(0) = \sum_{i=1}^k \frac{1}{b_i} w_i.$$

Αν περιορίσουμε το άθροισμα με τον ίδιο παρανομαστή τότε έχουμε:

$$R_K(\lambda) = P_{k-1}(\lambda) / Q_k(\lambda)$$

με

$$Q_k(\lambda) = \prod_{i=1}^k (b_i + \lambda) = \beta_0 + \dots + \beta_{k-1}\lambda^{k-1} + \lambda^k, \beta_i \in \mathfrak{R}$$

$$P_{k-1}(\lambda) = a_0 + \dots + a_{k-1}\lambda^{k-1}, a_i \in \mathfrak{R}.$$

Προφανώς τα διανύσματα b_i, w_i, a_i, β_i εξαρτώνται από το k αλλά αυτή η εξάρτηση δεν είναι αναγκαία.

4.5 Αλγόριθμος Παρεκβολής

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε έναν αλγόριθμο παρεκβολής, ο οποίος ανήκει στην κατηγορία των μετασχηματισμών ακόλουθων διανυσμάτων (*vector sequence transformation*). Ο αλγόριθμος αυτός χρειάζεται τη γνώση των $x_0, \dots, x_{2k-1}$ και υπολογίζει την ποσότητα $\frac{\alpha_0}{\beta_0}$ και επομένως επιλύειτο (2.)

Βήμα 1 :

Να επιλυθεί το πρόβλημα παρεμβολής:

$$x_i Q_k(\lambda_i) = P_{k-1}(\lambda_i), \quad i = 0, \dots, k-1.$$

Q_k, P_{k-1} πολυώνυμα που υπολογίζονται από την μέθοδο του *Lagrange*.

$$Q_k(\lambda_i) = \sum_{i=0}^k L_i(\lambda) Q_k(\lambda_i)$$

$$P_{k-1}(\lambda) = \sum_{i=0}^{k-1} L_i^*(\lambda) P_{k-1}(\lambda_i) = \sum_{i=0}^{k-1} L_i^*(\lambda) Q_k(\lambda_i) x_i$$

με

$$L_i(\lambda) = \prod_{j=0, j \neq i}^k \frac{\lambda - \lambda_j}{\lambda_i - \lambda_j}$$

$$L_i^*(\lambda) = \prod_{j=0, j \neq i}^{k-1} \frac{\lambda - \lambda_j}{\lambda_i - \lambda_j}.$$

Έστω $\lambda_k \neq \lambda_j$ για $j = 0, \dots, k-1$. Έχουμε

$$\sum_{i=0}^{k-1} L_i^*(\lambda_k) Q_k(\lambda_i) x_i = Q_k(\lambda_k) x_k.$$

Βήμα 2 :

Έστω $s_1, \dots, s_p$ γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα. Θέτουμε

$$c_i = Q_k(\lambda_i) / Q_k(\lambda_k)$$

και πολλαπλασιάζονατας βαθμωτά τις προηγούμενες εξισώσεις με το s_j , για $j = 1, \dots, p$ προκύπτει το ακόλουθο σύστημα

$$\sum_{i=0}^{k-1} L_i^*(\lambda_k) (x_i, s_j) c_i = (x_k, s_j), \quad j = 1, \dots, p.$$

Βήμα 3 :

Επιλύοντας το παραπάνω σύστημα με την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων έχουμε $c_0, \dots, c_{k-1}$.

Αφού το πολυώνυμο Q_k είναι μονικό και $c_k = 1$ ισχύει

$$Q_k(\lambda_k) \sum_{i=0}^k \frac{c_i}{\prod_{j=0, j \neq i}^k (\lambda_i - \lambda_j)} = 1$$

$$\beta_0 = Q_k(0) = \sum_{i=0}^k L_i(0) Q_k(\lambda_i)$$

και προκύπτει

61

$$y_k = R_k(0) = \frac{P_{k-1}(0)}{Q_k(0)} = \frac{1}{\beta(0)} \alpha(0).$$

4.6 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Στην παράγραφο αυτή θα μελετήσουμε την επίλυση του γραμμικού συστήματος ελαχίστων τετραγώνων με την εφαρμογή του αλγορίθμου *Tikhonov* και του αλγόριθμου της παρεκβολής σε πίνακες κακής κατάστασης.

Παράδειγμα 1:

Ξηρσιποιούμε την *gallery* της *Matlab*. Έστω πίνακας κακής κατάστασης $A = \text{hilb}(n)$ και διάνυσμα $x_t = \text{ones}(n)$. Στο παρακάτω παράδειγμα εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο *Tikhonov* ,για την επίλυση της σχέσης (3) με την βοήθεια της καμπύλης $L - \text{curve}$,και *Extrapolation* και υπολογίζουμε τη νόρμα $\|x - t - x_{out}\|$, όπου x_{out} είναι η λύση του συστήματος.

n	QR	$Tikhonov- L - \text{curve}$	$Extrapolation$
20	$1.137e + 002$	$1.093e - 002$	$1.245e - 005$
50	$8.164e + 002$	$2.814e - 002$	$1.866e - 005$
100	$3.922e + 003$	$7.725e - 002$	$4.554e - 003$
200	$5.474e + 003$	$2.365e - 001$	$2.722e - 001$

Πίνακας 8: Εφαρμογή *Tikhonov* και *Extrapolation* σε πίνακα κακής κατάστασης $A = \text{hilb}(n)$

Έστω διάνυσμα $x_t = \text{lin}$. Στο παρακάτω παράδειγμα εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο *Tikhonov* ,για την επίλυση της σχέσης (3) με την βοήθεια της καμπύλης $L - \text{curve}$,και *Extrapolation* και υπολογίζουμε τη νόρμα $\|x_t - x_{out}\|$, όπου x_{out} είναι η λύση του συστήματος.

n	QR	$Tikhonov- L - curve$	$Extrapolation$
20	$1.597e + 003$	$6.696e - 002$	$2.656e - 004$
50	$3.045e + 004$	$9.438e - 002$	$1.717e - 003$
100	$1.359e + 005$	$2.072e + 000$	$2.531e + 000$

Πίνακας 9: Εφαρμογή *Tikhonov* και *Extrapolation* σε πίνακα κακής κατάστασης $A = \text{hilb}(n)$

Παράδειγμα 2:

Πάλι χρoισιποιούμε την *gallery* της *Matlab*. Έστω πίνακας κακής κατάστασης $[A, x, b] = \text{shaw}(n)$ και διάνυσμα $x_t = \text{ones}(n)$. Στο παρακάτω παράδειγμα εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο *Tikhonov* ,για την επίλυση της σχέσης (3) με την βοήθεια της καμπύλης *L - curve* ,και *Extrapolation* και υπολογίζουμε τη νόρμα $\|x_t - x_{out}\|$, όπου x_{out} είναι η λύση του συστήματος.

n	QR	$Tikhonov- L - curve$	$Extrapolation$
20	$4.067e - 001$	$2.432e - 002$	$5.162e - 006$
50	$1.539e + 002$	$9.463e - 003$	$3.320e - 005$
100	$1.916e + 003$	$3.072e - 002$	$4.075e - 003$

Πίνακας 10: Εφαρμογή *Tikhonov* και *Extrapolation* σε πίνακα κακής κατάστασης $[A, x, b] = \text{shaw}(n)$

Παράδειγμα 3:

Πάλι χρησιμοποιούμε την *gallery* της *Matlab*. Έστω πίνακας κακής κατάστασης $A = \text{gallery('lotkin', } n)$ όπου επιστρέφει τον πίνακα *Hilbert* με την πρώτη γραμμή να είναι όλα 1. Ο πίνακας αυτός δεν είναι συμμετρικός και έχει πολλές αρνητικές ιδιοτιμές. Στο παρακάτω παράδειγμα εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο του *Tikhonov* για την επίλυση της σχέσης (3) με την βοήθεια της καμπύλης *L – curve*, και *Extrapolation* και υπολογίζουμε τη νόρμα $\|x_t - x_{out}\|$, όπου x_{out} είναι η λύση του συστήματος.

n	QR	<i>Tikhonov- L – curve</i>	<i>Extrapolation</i>
20	$3.526e + 001$	$1.666e - 003$	$4.483e - 008$
50	$7.585e + 002$	$6.994e - 003$	$9.616e - 008$
100	$3.093e + 003$	$7.575e - 002$	$9.876e - 006$
200	$1.448e + 004$	$2.015e - 002$	$2.026e - 002$

Πίνακας 11: Εφαρμογή *Tikhonov* και *Extrapolation* σε πίνακα κακής κατάστασης $A = \text{gallery('lotkin', } n)$

5 Παράρτημα Α΄

Κώδικας *Matlab*

Στο παράρτημα Α΄ παρουσιάζονται σε *Matlab* τα παραγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν για την υλοποίηση των αλγορίθμων της *QRTikhonovExtrapolation* διάφοροι πίνακες κακής κατάστασης.

Πρόγραμμα *QR* παραγοντοποίησης

Χρησιμοποιήσαμε το παρακάτω αλγόριθμο για να επιλύσουμε το άνω τριγωνικό σύστημα της *QR* παραγοντοποίησης:

```
function[norm] = (n)A = πίνακας(n)
```

```
for i = 1 : 20
```

```
xbest(i) = 1;
```

```
end
```

```
bnew = A * xbest';
```

```
b = bnew;
```

Q R

```
μέσω της εντολής Matlab c = Q' * b;
```

```
x(n) = c(n)/R(n, n);
```

```
for i = n - 1 : -1 : 1
```

```
s = R(i, i + 1 : n) * x(i + 1 : n)';
```

```
x(i) = (c(i) - s)/R(i, i);
```

```
end
```

```
norm = norm(xbest - x)
```

Πρόγραμμα *Extrapolation*

Ο παρακάτω αλγόριθμος είναι ο αλγόριθμος παρεκβολής που εφαρμόζουμε στο γραμμικό σύστημα ελαχίστων τετραγώνων και αναφέρθηκε στην παράγραφο 4.5. Για τον υπολογισμό της παραμέτρου λ πήραμε το διάστημα $10e - 25$ έως 1.

```
function[xout, norm] = (n)
```

```
A = πίνακας(n)
```

```
k = length(A);
```

```
for i = 1 : 20
```

```

 $x_{best}(i) = 1;$ 
end
 $b_{new} = A * x_{best}';$ 
 $b = b_{new};$ 
υ τα βρίσκουμε μέσω της εντολής της svd της Matlab
for  $i = 1 : k$ 
 $I(i, i) = 1$ 
end
 $lmd1 = 1e - 25; lmd2 = 1;$  εδώ χρησιμοποιούμε την CalcGold για τον υπολογισμό των  $\lambda$ 
 $yl = [];$ 
 $m = u' * b;$ 
for  $j = 1 : k$ 
for  $i = 1 : k$ 
 $y = y + (s(i) * m(i) / (s(i)^2 + l(j))) * v(:, i);$ 
end
 $yl = [yl \ y];$ 
end
 $xl = I' * yl;$ 
 $nl = k;$ 
for  $i = 1 : nl$ 
 $L(i) = 1;$ 
for  $j = 1 : nl - 1$ 
if  $j \neq i$ 
 $L(i) = L(i) * (Lamdak - La(j)) / (La(i) - La(j));$ 
end
end
end
 $st = v;$ 
for  $j = 1 : k$ 
for  $i = 1 : nl$ 
 $EM(j, i) = L(i) * xl(:, i)' * st(j, :)';$ 
end
 $delta(j) = xk' * st(:, j);$ 
end
 $Q \ R = qr(EM);$ 

```

```

c = Q * delta';
C(nl) = c(nl)/R(nl,nl);
s = 0;
for i = nl - 1 : -1 : 1
    s = R(i, i + 1 : nl) * C(i + 1 : nl)';
    C(i) = (c(i) - s)/R(i, i);
end
a = 0;
for i = 1 : nl
    h = 1;
    for j = 1 : i
        if j = i
            h = h * (La(i) - La(j));
        end
    end
    a = a + C(i)/h;
    Qlk = 1/a;
end
bl = [];
for i = 1 : nl
    bb = L(i) * xl(:, i);
    p = Qlk * xl(:, nl)';
    bl = [bl bb];
end
Q R = qr(bl);
f = Q * p';
QL(nl) = c(nl)/R(nl, nl);
s = 0;
for i = nl - 1 : -1 : 1
    s = R(i, i + 1 : nl) * QL(i + 1 : nl)';
    QL(i) = (f(i) - s)/R(i, i);
end
P = 0;
for i = 1 : nl
    P = P + L(i) * QL(i) * xl(:, i);
end

```

```

end
QLK = 0;
for i = 1 : nl
    QLK = QLK + L(i) * QL;
end
Lamdak = 0;
for i = 1 : nl
    Le(i) = 1; Lee(i) = 1;
    for j = 1 : nl
        if j = i
            Le(i) = Le(i) * (0 - La(j))/(La(i) - La(j));
            if j < k Lee(i) = Lee(i) * (0 - La(j))/(La(i) - La(j)); end
        end
    end
end
BO = 0;
for i = 1 : nl
    BO = BO + Le(i) * QL(i);
end
AO = 0;
for i = 1 : nl - 1
    AO = AO + Lee(i) * QL(i) * xl(:, i);
end
xout = AO./BO;
norm = norm(xbest - xout);

```

6 Παράρτημα Β'

Στο παράρτημα Β παρουσιάζονται οι πίνακες που χρησιμοποιήθηκαν για την εκτέλεση και την σύγκριση των παραπάνω αλγορίθμων.

Εσωτερικοί Πίνακες $m - files$

Πίνακας *Hilbert*

Ο πίνακας *Hilbert* είναι πίνακας κακής κατάστασης, με τα στοιχεία του πίνακα αυτού υπολογίζονται από $A(i, j) = \frac{1}{i+j-1}$.

Πίνακας *Shaw*

Ο πίνακας *Shaw* είναι πίνακας κακής κατάστασης πειραματικών δεδομένων.

Gallery της Matlab

Πίνακας *orthog*

Ο πίνακας $A = \text{gallery}('orthog', n, k)$ με $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6$, είναι ορθογώνιος και καλής κατάστασης.

Για $k=1$ και για $\forall i, j$ έχουμε $A(i, j) = \sqrt{\frac{2}{n+1}} * \sin(\frac{i*j*\pi}{n+1})$ όπου ο A είναι συμμετρικός.

Για $k=2$ και για $\forall i, j$ έχουμε $A(i, j) = \frac{2}{\sqrt{2*n+1}} * \sin(\frac{2*i*j*\pi}{2n+1})$ όπου A είναι συμμετρικός.

Πίνακας *chebspec*

Ο πίνακας $A = \text{gallery}('chebspec', n, \text{switch})$ με $\text{switch} = 0$ δηλαδή χωρίς αρχικές συνθήκες είναι κακής κατάστασης. Ο A μοιάζει με τον πίνακα *Jordan* στο μέγεθος με μηδενικές ιδιοτιμές.

Πίνακας *lotkin*

Ο πίνακας $A = \text{gallery}('lotkin', n)$ είναι κακής κατάστασης όπου επιστρέφει τον πίνακα *Hilbert* με την πρώτη γραμμή να είναι όλα 1. Ο πίνακας αυτός δεν είναι συμμετρικός και έχει πολλές αρνητικές ιδιοτιμές.

7 Βιβλιογραφία

Αναφορές

- [1] *Biswa Noth Datta, "Numerical Linear Algebra and Applications", SIAM, 2010.*
- [2] *C.Brezinski, M. Redivo – Zaglia, G.Rodriguez, S.Seatzu, "Extrapolation Techniques for ill Conditioned Linear Systems", Numer Math, 81, p : 1 – 29, 1998.*
- [3] *C.Brezinski, M. Redivo – Zaglia, M.(1991) : "Extrapolation Methods. Theory and Practice", North – Holland ,Amsterdam.*
- [4] *C.Brezinski – G. Rodriguez – S.Seatzu, 2008, "Error estimates for the regularization of least squares problem", Oct2008, Numer. Algor. (2009) 51 : 61 – 76, DOI10.1007/s11075 – 008 – 9243 – 2*
- [5] *Hansen P.C. (1979) : "The turncated SVD as a method for regulaization", BIT 27 : 534 – 553.*
- [6] *P.C.Hansen, "Analysis of discrete ill – posed problems by means of the L – Curve" , SIAM Rev., 34 (1992), pp.561 – 580*
- [7] *A.N. Tikhonov, V. Y. Arsenin, 1977, "Solutions of Ill – Posed Problems", Wiley, New York, 1977*
- [8] Γ.Ακρίβης, Β. Δουγαλής , " Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση" , Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2004.
- [9] Γ.Ακρίβης, Β. Δουγαλής , " Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση" , Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2004.
- [10] Β. Δουγαλής , "Αριθμητική Ανάλυση " , Σημειώσεις μεταπτυχιακού μαθήματος ,Αθήνα 1995
- [11] Μ. Μητρούλη , " Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα " , Σημειώσεις παραδόσεων,Αθήνα 2001.
- [12] "Μελέτη του κανονικοποιημένου προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων με υπό συνθήκη λύση και εφαρμογή του στη Βαρυτική μέθοδο", Νούτσης Βασίλειος 2010.

