

Στην περίπτωση μας έχουμε  $p = 1$  περιορισμό της μορφής :

$$d' = m_1 + m_2 z' \quad (3.47)$$

που γράφεται ως :

$$\mathbf{Fm} = [1 \quad z'] \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix} = [d'] = h. \quad (3.48)$$

Η εξίσωση 3.46 στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιώντας τους πίνακες που είδαμε στην παράγραφο 3.4.1 γράφεται ως :

$$\begin{bmatrix} N & \Sigma z_i & 1 \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 & z' \\ 1 & z' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \\ d' \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

και ο υπολογισμός των παραμέτρων και του μοναδικού συντελεστού Lagrange δίδεται από τη σχέση :

$$\begin{bmatrix} m_1^{est} \\ m_2^{est} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \Sigma z_i & 1 \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 & z' \\ 1 & z' & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \\ d' \end{bmatrix} \quad (3.50)$$

### 3.9 Πίνακας συνδιακύμανσης των παραμέτρων

Όταν είναι γνωστά τα στατιστικά χαρακτηριστικά των μετρήσεων, μπορούμε να εκτιμήσουμε ανάλογα χαρακτηριστικά των παραμέτρων παρατηρώντας ότι οι σχέσεις που συνδέουν παραμέτρους και μετρήσεις είναι γραμμικές, της μορφής

$$\mathbf{m}^{est} = \mathbf{M}\mathbf{d} + \mathbf{v} \quad , \quad (3.51)$$

με  $\mathbf{M}$  κάποιο πίνακα και  $\mathbf{v}$  ένα διάνυσμα. Εάν υποθέσουμε λοιπόν ότι τα δεδομένα έχουν μία κατανομή που χαρακτηρίζεται από ένα πίνακα συνδιακύμανσης  $[\text{cov } \mathbf{d}]$  οι εκτιμήσεις των παραμέτρων θα έχουν ένα πίνακα συνδιακύμανσης

$$[\text{cov } \mathbf{m}] = \mathbf{M}[\text{cov } \mathbf{d}]\mathbf{M}^T \quad (3.52)$$

και συνεπώς ανάλογα με την περίπτωση να υπολογίσουμε την συνδιακύμανση των παραμέτρων με άμεσο τρόπο. Η απλούστερη περίπτωση είναι εκείνη για την οποία τα δεδομένα είναι ασυσχέτιστα και έχουν όλα την ίδια διακύμανση  $\sigma_d^2$ . Τότε  $[\text{cov } \mathbf{d}] = \sigma_d^2 \mathbf{I}$  και ανάλογα με την περίπτωση υπολογίζουμε τους πίνακες

συνδιακύμανσης. Θα αναφερθούμε στη συνέχεια ως παραδείγματα σε δύο περιπτώσεις :

Λύση ελαχίστων τετραγώνων :

Ισχύει :  $\mathbf{m}^{est} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d}$  συνεπώς  $\mathbf{M} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T$  και από την 3.52 παίρνουμε :

$$[\text{cov } \mathbf{m}] = [[\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T] \sigma_d^2 \mathbf{I} [[\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T]^T = \sigma_d^2 [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \quad (3.53)$$

Λύση ελαχίστου μήκους :

Ισχύει :  $\mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{d}$  συνεπώς  $\mathbf{M} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1}$  και από την 3.52 παίρνουμε :

$$[\text{cov } \mathbf{m}] = [\mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1}] \sigma_d^2 \mathbf{I} [\mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1}]^T = \sigma_d^2 \mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{G} \quad (3.54)$$

## 4. ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΟΙ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΙ ΠΙΝΑΚΕΣ

Μέχρι τώρα, ασχοληθήκαμε με λύσεις γραμμικών αντιστρόφων προβλημάτων που εκφράζονται με σχέσεις της μορφής :  $\mathbf{m}^{est} = \mathbf{M}\mathbf{d} + \mathbf{v}$  . Ο πίνακας  $\mathbf{M}$  και το διάνυσμα  $\mathbf{v}$  δεν εξαρτώνται από τα δεδομένα. Ειδικά για τον πίνακα  $\mathbf{M}$  μπορούμε να πούμε ότι λειτουργεί ως πίνακας-τελεστής που πολλαπλασιάζει τα δεδομένα για να προκύψουν οι προς ανάκτηση παράμετροι. Με αυτή την έννοια μπορεί να ονομαστεί *γενικευμένος αντίστροφος* (*generalized inverse*) καθώς λειτουργεί με ανάλογο τρόπο που σε ένα καλώς τεθειμένο γραμμικό πρόβλημα της μορφής  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{d}$  πολλαπλασιάζει ο  $\mathbf{A}^{-1}$  το διάνυσμα των δεδομένων για να προκύψει το  $\mathbf{x}$  :  $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{d}$  . Ο συμβολισμός του είναι  $\mathbf{M} = \mathbf{G}^{-g}$  αφού αναφέρεται στο γενικό αντίστροφο πρόβλημα  $\mathbf{G}\mathbf{m} = \mathbf{d}$  . Η μορφή του γενικευμένου αντιστρόφου όμως εξαρτάται από την λύση που έχουμε επιλέξει. Ως εφαρμογές αναφερόμαστε στις περιπτώσεις ελαχίστων τετραγώνων και ελαχίστου μήκους που είδαμε στο ακριβώς προηγούμενο Κεφάλαιο, απλά για να εισαγάγουμε τον συμβολισμό του γενικευμένου αντιστρόφου στον πίνακα  $\mathbf{M}$ .

Λύση ελαχίστων τετραγώνων :

$$\text{Ισχύει : } \mathbf{m}^{est} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} \text{ συνεπώς } \mathbf{G}^{-g} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T = \mathbf{M}$$

Λύση ελαχίστου μήκους :

$$\text{Ισχύει } \mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G}\mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{d} \text{ συνεπώς } \mathbf{G}^{-g} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G}\mathbf{G}^T]^{-1} = \mathbf{M}$$

Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι ο γενικευμένος αντίστροφος δεν είναι τετραγωνικός πίνακας (με την εξαίρεση ενός καλώς τεθειμένου προβλήματος) και φυσικά δεν διαθέτει τις ιδιότητες ενός αντίστροφου πίνακα.

### 4.1 Πίνακας ανάλυσης δεδομένων

Ας υποθέσουμε ότι σε κάποιο γραμμικό αντίστροφο πρόβλημα της μορφής  $\mathbf{G}\mathbf{m} = \mathbf{d}$  έχουμε ορίσει ένα γενικευμένο αντίστροφο πίνακα  $\mathbf{G}^{-g}$  οπότε οι προς ανάκτηση παράμετροι υπολογίζονται από τη σχέση :  $\mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}^{-g}\mathbf{d}$  . Εάν χρησιμοποιήσουμε το διάνυσμα αυτό στην εξίσωση ορισμού του αντιστρόφου προβλήματος θα πάρουμε ένα διάνυσμα  $\mathbf{d}$  το οποίο όπως έχουμε δει το συμβολίζουμε με  $\mathbf{d}^{pre}$  και είναι διαφορετικό από το διάνυσμα των μετρήσεων για το οποίο χρησιμοποιούμε το συμβολισμό  $\mathbf{d}^{obs}$  . Τα στοιχεία του  $\mathbf{d}$  θα τα χαρακτηρίσουμε «προβλέψεις» (*predictions*) των μετρήσεων. Το διάνυσμα των προβλέψεων λοιπόν με βάση τα παραπάνω θα δίδεται από τη σχέση :

$$\mathbf{d}^{pre} = \mathbf{G}\mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}[\mathbf{G}^{-g}\mathbf{d}^{obs}] = [\mathbf{G}\mathbf{G}^{-g}]\mathbf{d}^{obs} = \mathbf{N}\mathbf{d}^{obs} \quad (4.1)$$

Ο πίνακας  $\mathbf{N} = \mathbf{G}\mathbf{G}^{-g}$  είναι τετραγωνικός πίνακας  $N \times N$  και ονομάζεται «πίνακας ανάλυσης δεδομένων» (*data resolution matrix*). Ο πίνακας αυτός περιγράφει το πόσο καλά οι παράμετροι που ανακτήθηκαν δίδουν προβλέψεις μετρήσεων που προσεγγίζουν τις πραγματικές μετρήσεις. Προφανώς όταν  $\mathbf{N} = \mathbf{I}$  τότε και  $\mathbf{d}^{pre} = \mathbf{d}^{obs}$ , και το λάθος πρόβλεψης είναι μηδενικό.

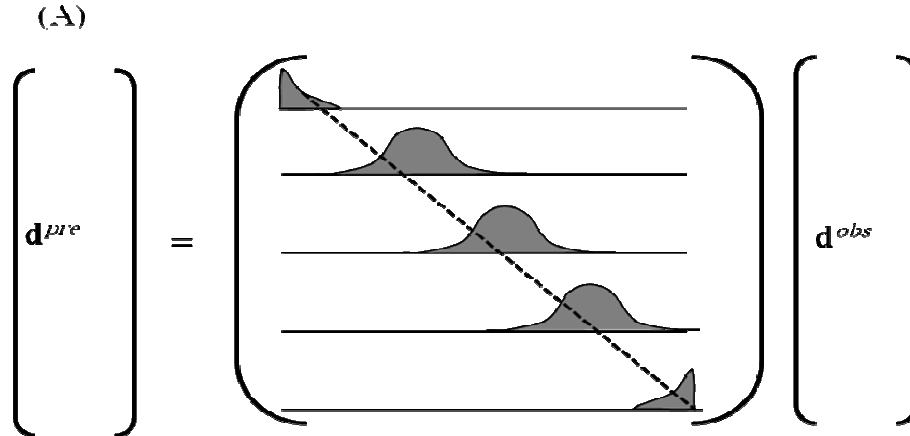
Τα στοιχεία του πίνακα ανάλυσης δεδομένων μας δίδουν σημαντική πληροφορία σχετικά με τη σημασία «γειτονικών» μετρήσεων σε σχέση με την ανάκτησή τους μέσω του διανύσματος των εκτιμηθέντων παραμέτρων. Εάν για παράδειγμα για κάποια μέτρηση με δείκτη  $i$  έχουμε το στοιχείο του πίνακα  $N_{ii} = 1$ , τότε η μέτρηση ανακτάται ακριβώς από τις εκτιμηθείσες παραμέτρους. Σε διαφορετική περίπτωση θα ισχύσει μία σχέση της μορφής :

$$d_i^{pre} = \sum_{j=1}^N N_{ij} d_j^{obs} \quad (4.2)$$

και η εκτίμηση της μέτρησης  $i$  θα προκύψει ως ζυγισμένη μέση τιμή όλων των μετρήσεων. Ιδανικά ο πίνακας  $\mathbf{N}$  στην περίπτωση που οι μετρήσεις αφορούν διαδοχικές φυσικές μεταβλητές (όπως π.χ. στην περίπτωση του υπολογισμού της εξίσωσης ευθείας όταν οι μετρήσεις γίνονται σε διαδοχικές τετμημένες,) είναι λωριδωτός με κυριαρχική διαγώνιο και μειούμενες τιμές εκτός διαγωνίου (δείτε σχήμα 4.1) οι μετρήσεις ανακτώνται ικανοποιητικά και η ανάλυση θεωρείται καλή. Εάν όμως υπάρχει μεγάλη διασπορά γύρω από την διαγώνιο, η ανάκτηση των μετρήσεων δεν θεωρείται ικανοποιητική.

Μερικές φορές το διάνυσμα της διαγωνίου του πίνακα  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{d} = \text{diag}(\mathbf{N})$  χαρακτηρίζεται ως *σημαντικότητα* (*importance*) των δεδομένων.

Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι ο πίνακας ανάλυσης δεδομένων δεν σχετίζεται με τις πραγματικές τιμές των μετρήσεων, αλλά μόνο με το μοντέλο του προβλήματος, δηλαδή με τον πίνακα  $\mathbf{G}$  καθώς και με κάθε περιορισμό η εκ προοιμίου πληροφορία διαθέτουμε για τη λύση του αντιστρόφου προβλήματος. Υπολογίζεται συνεπώς πριν γίνουν οι μετρήσεις και μπορεί να αποδειχθεί ιδιαίτερα χρήσιμος στο σχεδιασμό ενός πειράματος, όπως θα δούμε με ένα παράδειγμα στη συνέχεια.



Σχήμα 4.1 Σχηματική διάταξη των στοιχείων του πίνακα ανάλυσης δεδομένων. Η διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στη διαγώνιο του πίνακα. (Σχήμα από παραδόσεις του Menke).

## 4.2 Πίνακας ανάλυσης παραμέτρων

Εντελώς ανάλογα μπορούμε να δούμε την ποιότητα των εκτιμηθέντων παραμέτρων ως προς τις «πραγματικές» παραμέτρους ενός προβλήματος. Οι πραγματικές παράμετροι σε ένα ντετερμινιστικό φυσικό πρόβλημα ασφαλώς υπάρχουν αλλά δεν μπορούμε να είμαστε σίγουροι ότι ανακτώνται επακριβώς μέσω της επίλυσης ενός αντιστρόφου προβλήματος για το οποίο έχουμε πει ότι γενικά δεν είναι καλώς τεθειμένο. Έχει λοιπόν σημασία να δούμε εκ προοιμίου εάν η ανάκτηση που επιχειρούμε μπορεί να μας δώσει πληροφορία για την ποιότητά της. Με άλλα λόγια να δούμε εάν οι διακριτές παράμετροι ενός αντίστροφου προβλήματος μπορούν να ανακτηθούν επακριβώς.

Η λογική είναι αντίστοιχη με εκείνη που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Θα ξεκινήσουμε θεωρώντας ότι υπάρχει ένα διάνυσμα  $\mathbf{m}^{true}$  πραγματικών παραμέτρων που πρέπει να λύνουν το πρόβλημα  $\mathbf{G}\mathbf{m}^{true} = \mathbf{d}^{obs}$ . Δεδομένου ότι η λύση του αντίστροφου προβλήματος δίδει εκτιμήσεις των παραμέτρων  $\mathbf{m}^{est}$  με κάποιο τρόπο που έχουμε επιλέξει, έχει ενδιαφέρον να δούμε την εκτιμώμενη διαφορά ανάμεσα στις πραγματικές και τις εκτιμώμενες παραμέτρους.

Ακολουθώντας τη λογική που μας οδήγησε στην 4.1 έχουμε :

$$\mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}^{-g} \mathbf{d}^{obs} = \mathbf{G}^{-g} [\mathbf{G}\mathbf{m}^{true}] = [\mathbf{G}^{-g}\mathbf{G}]\mathbf{m}^{true} = \mathbf{R}\mathbf{m}^{true} \quad (4.3)$$

Τώρα έχουμε ορίσει ένα πίνακα διαστάσεων  $M \times M$  που χαρακτηρίζεται ως «πίνακας ανάλυσης παραμέτρων» (*model resolution matrix*). Εάν  $\mathbf{R}=\mathbf{I}$  κάθε παράμετρος υπολογίζεται μονοσήμαντα. Εάν ο  $\mathbf{R}$  είναι ένας πυκνός πίνακας, τότε οι μεμονωμένες παράμετροι δεν μπορούν να υπολογιστούν μονοσήμαντα. Τέλος, εάν οι παράμετροι έχουν κατά σειρά κάποια φυσική σημασία (π.χ. εάν πρόκειται για διακριτές τιμές μιας φυσικής παραμέτρου που εκφράζεται ως συνεχής συνάρτηση), διαγράμματα που παριστούν τις μεταβολές τιμών των σειρών του πίνακα  $\mathbf{R}$ , υποδηλώνουν τη δυνατότητα αξιόπιστης ανάκτησης της τιμής κάποιας παραμέτρου αλλά και τη σχέση της με τις γειτονικές τιμές. Έτσι μπορούμε να φανταστούμε κάποιο σχήμα ανάλογο του 4.1 με τα διανύσματα να αντιστοιχούν στις παραμέτρους.

Επισημαίνουμε ότι και στην παρούσα περίπτωση, ο πίνακας ανάλυσης παραμέτρων δεν εξαρτάται από τις μετρήσεις.

### 4.3 Ο Μοναδιαίος πίνακας συνδιακύμανσης

Εάν εισάγουμε πιθανοθεωρητικούς όρους στο πρόβλημά μας, έχει νόημα να συσχετίσουμε στατιστικά χαρακτηριστικά των μετρήσεων (παρατηρήσεων) με εκείνα των προς ανάκτηση παραμέτρων. Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να εκτιμήσουμε το πώς μεταφέρονται λάθη ή αβεβαιότητες στις τιμές των μετρήσεων στις τιμές των προς ανάκτηση παραμέτρων.

Θυμίζουμε τα αναφερθέντα στο κεφάλαιο 2.3 σε ό,τι αφορά τον υπολογισμό του πίνακα συνδιακύμανσης : Όταν παράμετροι και δεδομένα σχετίζονται με γραμμικές σχέσεις της μορφής  $\mathbf{m} = \mathbf{M}\mathbf{d} + \mathbf{v}$ , ο πίνακας συνδιακύμανσης των παραμέτρων παίρνει τη μορφή :  $[\text{cov}\mathbf{m}] = \mathbf{M}[\text{cov}\mathbf{d}]\mathbf{M}^T$ . Επιλύοντας ένα γραμμικό αντίστροφο πρόβλημα και χρησιμοποιώντας την έννοια του ψευδοαντίστροφου πίνακα, έχουμε μια σχέση της μορφής  $\mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}^{-g}\mathbf{d}$  και συνεπώς μπορούμε να εκφράσουμε τον πίνακα συνδιακύμανσης των παραμέτρων από τη σχέση  $[\text{cov}\mathbf{m}] = \mathbf{G}^{-g}[\text{cov}\mathbf{d}]\mathbf{G}^{-gT}$ . Στην πραγματικότητα «κανονικοποιούμε» τον πίνακα αυτό και ορίζουμε τον «μοναδιαίο πίνακα συνδιακύμανσης» διαιρώντας με την διασπορά των μετρήσεων την οποία θεωρούμε ίση για όλες τις μετρήσεις με  $\sigma^2$  και τις μετρήσεις ασυσχέτιστες μεταξύ τους. Έτσι προκύπτει η σχέση :

$$[\text{cov}_u\mathbf{m}] = \sigma^{-2}\mathbf{G}^{-g}[\text{cov}\mathbf{d}]\mathbf{G}^{-gT} = \mathbf{G}^{-g}\mathbf{G}^{-gT} \quad (4.4)$$

που ορίζει τον μοναδιαίο πίνακα συνδιακύμανσης. Εάν οι μετρήσεις μας παρουσιάζουν συσχέτιση, μπορεί να οριστεί αντίστοιχα ένας μοναδιαίος πίνακας συνδιακύμανσης μετρήσεων (*unit data covariance matrix*)  $[\text{cov}_u\mathbf{d}]$  και να ορίσουμε τον μοναδιαίο πίνακα συνδιακύμανσης παραμέτρων από τη σχέση :

$$[\text{cov}_u \mathbf{m}] = \mathbf{G}^{-g} [\text{cov}_u \mathbf{d}] \mathbf{G}^{-gT} \quad (4.5)$$

Ο μοναδιαίος πίνακας συνδιακύμανσης παραμέτρων, δεν εξαρτάται φυσικά από τις μετρήσεις αυτές καθ' εαυτές αλλά μόνο από τον γενικευμένο αντίστροφο πίνακα και από τα στατιστικά χαρακτηριστικά των μετρήσεων.

#### 4.4 Ανάλυση και συνδιακύμανση για ορισμένες περιπτώσεις γενικευμένων αντιστροφών

Θα δώσουμε τώρα τη μορφή των πινάκων ανάλυσης και συνδιακύμανσης για τις δύο βασικές λύσης του γραμμικού αντίστροφου προβλήματος που είναι η των ελαχίστων τετραγώνων για προβλήματα καθαρά υπερ-ορισμένα και ελαχίστου μήκους για προβλήματα καθαρά υπο-ορισμένα. Θα υποθέσουμε για λόγους απλότητας ότι  $[\text{cov}_u \mathbf{d}] = \mathbf{I}$

Λύση ελαχίστων τετραγώνων :

$$\mathbf{G}^{-g} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T$$

$$\mathbf{N} = \mathbf{G} \mathbf{G}^{-g} = \mathbf{G} [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{G}^{-g} \mathbf{G} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{G} = \mathbf{I}$$

$$[\text{cov}_u \mathbf{m}] = \mathbf{G}^{-g} \mathbf{G}^{-gT} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{G} [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1}$$

Λύση ελαχίστου μήκους

$$\mathbf{G}^{-g} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1}$$

$$\mathbf{N} = \mathbf{G} \mathbf{G}^{-g} = \mathbf{G} \mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{G}^{-g} \mathbf{G} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{G}$$

$$[\text{cov}_u \mathbf{m}] = \mathbf{G}^{-g} \mathbf{G}^{-gT} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1} [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{G} = \mathbf{G}^T \left( [\mathbf{G} \mathbf{G}^T]^{-1} \right)^2 \mathbf{G}$$

Παρατηρούμε τη συμμετρία ανάμεσα στις δύο περιπτώσεις με τη λύση ελαχίστων τετραγώνων να μας δίνει μοναδιαίο πίνακα ανάλυσης παραμέτρων ( η εκτίμηση των παραμέτρων γίνεται με τέλεια ανάλυση – αυτό δεν σημαίνει πάντως ότι ανακτήθηκαν

με ακρίβεια οι παράμετροι), ενώ η λύση ελαχίστου μήκους δίνει μοναδιαίο πίνακα ανάλυσης δεδομένων. Ενδιάμεσες περιπτώσεις ασφαλώς θα δίδουν και ενδιάμεσους πίνακες ανάλυσης δεδομένων και παραμέτρων.

#### 4.5 Μετρήσεις ποιότητας της ανάλυσης και της συνδιακύμανσης.

Έχοντας δώσει τους ορισμούς των πινάκων ανάλυσης και συνδιακύμανσης, έχει νόημα να δούμε εάν μπορούμε να τους χαρακτηρίσουμε ως προς την ποιότητά τους σε σχέση με αυτό που εκφράζουν. Ασφαλώς η ποιότητα θεωρείται άριστη όταν οι πίνακες είναι μοναδιαίοι. Κάθε απόκλιση από τους μοναδιαίους θεωρείται ότι εκφράζει μείωση της ποιότητας επίλυσης του αντιστρόφου προβλήματος. Η ποιότητα λοιπόν εκφράζεται μέσω της διαφοράς των στοιχείων από τα αντίστοιχα στοιχεία του μοναδιαίου πίνακα και μας οδηγεί στον ορισμό του «εύρους» του πίνακα ανάλυσης δεδομένων και μετρήσεων που εκφράζεται από την ευκλείδεια νόρμα :

$$\text{spread}(\mathbf{N}) = \|\mathbf{N} - \mathbf{I}\|_2^2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [N_{ij} - I_{ij}]^2 \quad (4.6)$$

$$\text{spread}(\mathbf{R}) = \|\mathbf{R} - \mathbf{I}\|_2^2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [R_{ij} - I_{ij}]^2 \quad (4.7)$$

Επίσης ορίζεται το μέγεθος του μοναδιαίου πίνακα συνδιακύμανσης από τη σχέση

$$\text{size}([\text{cov}_u \mathbf{m}]) = \|\text{[var}_u \mathbf{m}]\|_2^2 = \sum_{i=1}^M [\text{cov}_u \mathbf{m}]_{ii} \quad (4.8)$$

η οποία δεν λαμβάνει υπ' όψιν της τα στοιχεία εκτός διαγωνίου.

#### 4.6 Μία εφαρμογή: Ανάκτηση της εξίσωσης ευθείας

Ως εφαρμογή των ανωτέρω, ας δούμε ένα απλό παράδειγμα υπολογισμού της ποιότητας της ανάκτησης δεδομένων και παραμέτρων όταν έχουμε ένα καθαρά υπερπροσδιορισμένο πρόβλημα, όπως αυτό της ανάκτησης της εξίσωσης ευθείας από μετρήσεις. Θα υποθέσουμε ότι οι μετρήσεις έχουν ίση διασπορά και ότι είναι ασυσχέτιστες μεταξύ τους.

Έστω ότι οι μετρήσεις γίνονται σε μια πρώτη περίπτωση στις τετμημένες 1,2,3 ( $N=3$ ) και σε μία δεύτερη περίπτωση στις τετμημένες 1, 2, 4 ( $N=3$ ). Πρόκειται ουσιαστικά για δύο διαφορετικά πειράματα για την εκτίμηση των δύο παραμέτρων που περιγράφουν την ευθεία και θα προσπαθήσουμε να δούμε ποιοτικές διαφορές μεταξύ τους, χωρίς να αναφερθούμε καθόλου σε μεγέθη μετρήσεων.



Το πρόβλημα είναι καθαρά υπερορισμένο και γνωρίζουμε ήδη ότι η λύση ελαχίστων τετραγώνων στη γενική περίπτωση είναι

$$\mathbf{m}^{est} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} = \begin{bmatrix} N & \Sigma z_i \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ z_1 & z_2 & \dots & z_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ d_N \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

$$\text{Ο γενικευμένος αντίστροφος είναι } \mathbf{G}^{-g} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \quad (4.10)$$

Εξειδικεύοντας τα παραπάνω στην περίπτωση των τριών μετρήσεων, έχουμε :

$$\mathbf{m}^{est} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} = \begin{bmatrix} 3 & \Sigma z_i \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ z_1 & z_2 & z_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

και

$$\mathbf{G}^{-g} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T = \frac{1}{3\Sigma z_i^2 - (\Sigma z_i)^2} \begin{bmatrix} \Sigma z_i^2 & -\Sigma z_i \\ -\Sigma z_i & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ z_1 & z_2 & z_3 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

Θα αναλύσουμε την πρώτη περίπτωση :

Έχουμε :  $\Sigma z_i = 6$ ,  $\Sigma z_i^2 = 14$ ,  $(\Sigma z_i)^2 = 36$ , επομένως

$$\mathbf{G}^{-g} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 14 & -6 \\ -6 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 8 & 2 & -4 \\ -3 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Ο πίνακας ανάλυσης δεδομένων είναι :

$$\mathbf{N} = \mathbf{G} \mathbf{G}^{-g} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 8 & 2 & -4 \\ -3 & 0 & 3 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 5 & 2 & -1 \\ 2 & 2 & 2 \\ -1 & 2 & 5 \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

και ο πίνακας ανάλυσης μετρήσεων :

$$\mathbf{R} = \mathbf{G}^{-g} \mathbf{G} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 8 & 2 & -4 \\ -3 & 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I} \quad (4.15)$$

Από τον πίνακα ανάλυσης δεδομένων, βλέπουμε ότι η πρώτη και η τρίτη μέτρηση είναι πιο σημαντικές αφού αυτές ουσιαστικά καθορίζουν το αποτέλεσμα. Από τον πίνακα ανάλυσης παραμέτρων βλέπουμε ότι οι δύο άγνωστες παράμετροι ανακτώνται ανεξάρτητα η μία της άλλης.

Υπολογίζοντας τον μοναδιαίο πίνακα συνδιακύμανσης έχουμε ότι

$$[\text{cov}_u \mathbf{m}] = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 14 & -6 \\ -6 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14/6 & -1 \\ -1 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

και

$$\text{size}([\text{cov}_u \mathbf{m}]) = \sum_{i=1}^M [\text{cov}_u \mathbf{m}]_{ii} = \frac{17}{6} \quad (4.17)$$

Αναλύοντας την δεύτερη περίπτωση έχουμε αντίστοιχα :

$$\Sigma z_i = 7, \Sigma z_i^2 = 21, (\Sigma z_i)^2 = 49, \text{επομένως}$$

$$\mathbf{G}^{-g} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 21 & -7 \\ -7 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 14 & 7 & -7 \\ -4 & -1 & 5 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Ο πίνακας ανάλυσης δεδομένων είναι :

$$\mathbf{N} = \mathbf{G} \mathbf{G}^{-g} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 14 & 7 & -7 \\ -4 & -1 & 5 \end{bmatrix} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 10 & 6 & -2 \\ 6 & 5 & 3 \\ -2 & 3 & 13 \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

και ο πίνακας ανάλυσης μετρήσεων :

$$\mathbf{R} = \mathbf{G}^{-g} \mathbf{G} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 14 & 7 & -7 \\ -4 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 14 & 0 \\ 0 & 14 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I} \quad (4.15)$$

Από τον πίνακα ανάλυσης δεδομένων, βλέπουμε ότι η πρώτη και η τρίτη μέτρηση είναι επίσης οι πιο σημαντικές και ουσιαστικά καθορίζουν το αποτέλεσμα. Ωστόσο, σε σχέση με την προηγούμενη περίπτωση, η τρίτη μέτρηση που είναι πιο απομακρυσμένη από τις άλλες είναι πιο σημαντική, αφού τώρα  $N_{3,3} = 13/14 > 5/6$

ενώ τα άλλα δύο στοιχεία της 3<sup>ης</sup> γραμμής του πίνακα είναι μικρότερα έναντι της προηγούμενης περίπτωσης. Από τον πίνακα ανάλυσης παραμέτρων βλέπουμε ότι οι δύο άγνωστες παράμετροι ανακτώνται ανεξάρτητα η μία της άλλης όπως άλλωστε αναμενόταν.

Υπολογίζοντας τον μοναδιαίο πίνακα συνδιακύμανσης έχουμε ότι

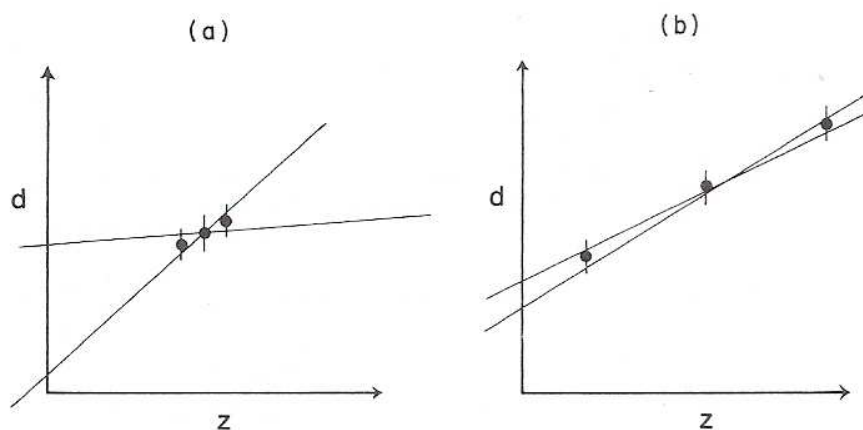
$$[\text{cov}_u \mathbf{m}] = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 21 & -7 \\ -7 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21/14 & -(7/14) \\ -(7/14) & 3/14 \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

και

$$\text{size}([\text{cov}_u \mathbf{m}]) = \sum_{i=1}^M [\text{cov}_u \mathbf{m}]_{ii} = \frac{24}{14} < \frac{17}{6} \quad (4.17)$$

που σημαίνει ουσιαστικά μικρότερο εύρος διακύμανσης των προς εκτίμηση παραμέτρων σε περίπτωση που υπάρχει κάποιο λάθος στις μετρήσεις. Δηλαδή το λάθος στις μετρήσεις όταν οι μετρήσεις είναι σχετικά απομακρυσμένες μεταξύ τους, δίνει μικρότερη πιθανή διακύμανση παραμέτρων υπολογισμού της ευθείας.

Τα παραπάνω αποτυπώνονται σχηματικά στο Σχήμα 4.2 όπου φαίνονται οι ακραίες ευθείες που μπορεί να σχεδιαστούν με λύση ελαχίστων τετραγώνων, όταν οι μετρήσεις έχουν γίνει με ίδια διασπορά αλλά σε τετμημένες που στην μία περίπτωση είναι κοντά μεταξύ τους ενώ στην δεύτερη απέχουν περισσότερο. Η διασπορά των επαγόμενων παραμέτρων στην δεύτερη περίπτωση είναι αισθητά μικρότερη.



Σχήμα 4.2. Σχεδιασμός ευθείας με βάση τρεις μετρήσεις που έχουν γίνει σε διαφορετικά σημεία. Στην περίπτωση (α) οι μετρήσεις έγιναν σε κοντινά σημεία και η διασπορά των παραμέτρων που ορίζουν τις ευθείες είναι μεγάλη, ενώ στην περίπτωση (β) η αντίστοιχη διασπορά είναι μικρή.