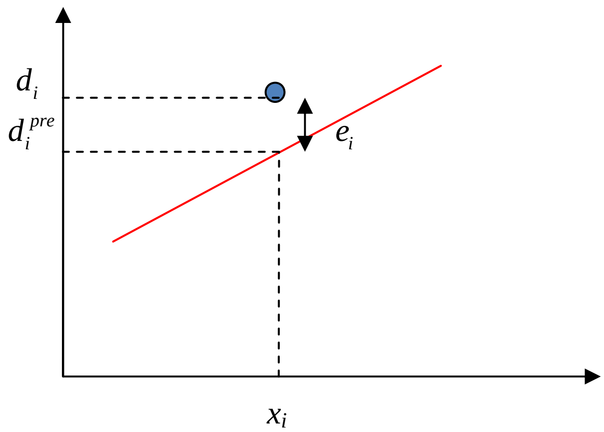
3. ΕΠΙΛΥΣΗ ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΜΗΚΩΝ

3.1 Διαφορά μετρήσεων από εκτιμήσεις μετρήσεων.

Όταν επιλύομε ένα αντίστροφο πρόβλημα υπολογίζομε ένα διάνυσμα παραμέτρων $\mathbf{m}^{est}$ το οποίο αντιπροσωπεύει μία *εκτίμηση* της λύσης του αντίστροφου προβλήματος. Στην περίπτωση του γραμμικού αντίστροφου προβλήματος που παράμετροι και δεδομένα συσχετίζονται μέσω της σχέσης $\mathbf{d} = \mathbf{Gm}$, η αντικατάσταση της λύσης $\mathbf{m}^{est}$ στην προηγούμενη σχέση, δεν είναι απαραίτητο ότι θα μας δώσει ξανά το διάνυσμα $\mathbf{d}$ των παρατηρήσεων, αλλά ένα άλλο διάνυσμα $\mathbf{d}^{pre}$ το οποίο μπορεί να διαφέρει ως προς τα στοιχεία του από το $\mathbf{d}$. Το διάνυσμα των διαφορών (misfit) ανάμεσα στις μετρήσεις και στις εκτιμήσεις των μετρήσεων συμβολίζεται με $\mathbf{e}$ και έχει διάσταση Ν. Φυσικά $e_i = d_i - d_i^{pre}$.

Στο Σχήμα 3.1 φαίνεται η σχέση μέτρησης και εκτίμησης μέτρησης για την περίπτωση του υπολογισμού των παραμέτρων μιας ευθείας. Για την τυχούσα μέτρηση στο σημείο z_i η ευθεία που χαράζουμε μας δίνει την τιμή d_i^{pre} ενώ η μετρηθείσα τιμή είναι d_i. Η αντίστοιχη διαφορά (misfit) είναι e_i.



Σχήμα 3.1 Διαφορά μέτρησης και εκτίμησης μέτρησης

Στόχος γενικά της διαδικασίας επίλυσης ενός αντίστροφου προβλήματος είναι να ελαχιστοποιήσει τις διαφορές με κάποιο ορθολογικό τρόπο, ώστε το αποτέλεσμα των εκτιμήσεων να είναι πολύ κοντά στην πραγματικότητα, δηλαδή στις πραγματικές μετρήσεις. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε την έννοια της νόρμας διανυσμάτων για να έχομε ένα μέγεθος προς βελτιστοποίηση.

3.2 Νόρμες διανυσμάτων

Γνωρίζομε ότι η έννοια της νόρμας $\|x\|$ είναι συνυφασμένη με τις εξής ιδιότητες :

$$\|x\| > 0 \tag{3.1α}$$

$$\|ax\| = |a|\|x\| \tag{3.1β}$$

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \tag{3.1γ}$$

Εάν *x* και *y* είναι διανύσματα ισχύουν ακριβώς οι ίδιες σχέσεις.

Στην περίπτωση των διανυσμάτων ορίζομε τις παρακάτω νόρμες που είναι οι διακριτές ανάλογες των νορμών των συνεχών μεταβλητών :

$$L_1 \text{ νόρμα : } \|\mathbf{x}\|_1 = \left[\sum_i |x_1|^1 \right] \tag{3.2α}$$

$$L_2 \text{ νόρμα : } \|\mathbf{x}\|_2 = \left[\sum_i |x_1|^2 \right]^{1/2} \tag{3.2β}$$

.

.

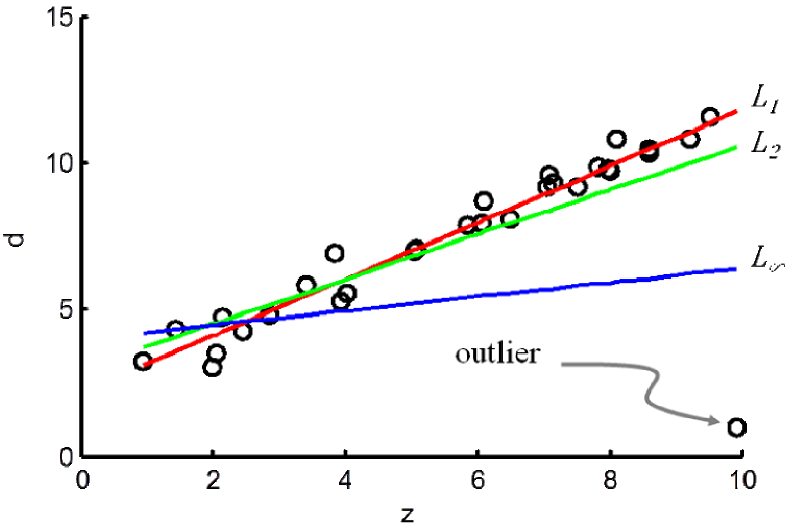
$$L_n \text{ νόρμα : } \|\mathbf{x}\|_n = \left[\sum_i |x_n|^{1/n} \right] \tag{3.2γ}$$

Επίσης ορίζεται η νόρμα μεγίστου από τη σχέση

$$L_\infty \text{ νόρμα : } \|\mathbf{x}\|_\infty = \max_i |x_i| \tag{3.2δ}$$

3.3 Η νόρμα της διαφοράς μετρήσεων και εκτιμήσεων

Εάν στη θέση του διανύσματος **x** βάλομε το διάνυσμα **e** οι νόρμες που ορίσαμε παραπάνω μας δίνουν μία μέτρηση «μήκους» ως προς την διαφορά μετρήσεων και εκτιμήσεων. Ελαχιστοποιώντας μία νόρμα αυτής της μορφής, ελαχιστοποιούμε λοιπόν και μία ποσότητα που σχετίζεται διαφορές μετρήσεων και εκτιμήσεων. Ασφαλώς η ελαχιστοποίηση μιας συγκεκριμένης νόρμας ως προς τις παραμέτρους που προκαλούν τη διαφορά, δεν δίδει το ίδιο αποτέλεσμα με την ελαχιστοποίηση κάποιας άλλης.



Σχήμα 3.2 Πέρασμα ευθείας από σημεία μετρήσεων που περιλαμβάνουν και μία ακραία μέτρηση (outlier)

Έχει λοιπόν ιδιαίτερο ενδιαφέρον να δούμε τη σημασία κάθε νόρμας ως προς τα χαρακτηριστικά των στοιχείων που την αποτελούν.

Ας δούμε το Σχήμα 3.2. Αναφέρεται στο πρόβλημα του υπολογισμού παραμέτρων ευθείας όταν υπάρχουν N μετρήσεις σε διάφορα σημεία του άξονα z που συμβολίζονται με μικρούς κύκλους. Το πρόβλημα αυτό το είδαμε στο εδάφιο 1.3.1. Στο σχήμα έχομε υποθέσει ότι υπάρχει μία μέτρηση (outlier) που διαφέρει πολύ από τις υπόλοιπες. Στόχος μας είναι να ελαχιστοποιήσομε τις διαφορές μετρήσεων και εκτιμήσεων μετρήσεων και για το σκοπό αυτό υπολογίζομε τις παραμέτρους της ευθείας ελαχιστοποιώντας κάποια νόρμα. Το πώς θα γίνει αυτό θα το δούμε σε άλλο εδάφιο.

Εάν χρησιμοποιήσομε την διακριτή L_1 νόρμα, παίρνομε την κόκκινη γραμμή. Εάν χρησιμοποιήσομε την διακριτή L_2 νόρμα, παίρνομε την πράσινη γραμμή και εάν χρησιμοποιήσομε την L_∞ νόρμα παίρνομε την μπλε γραμμή. Βλέπομε ότι η μπλε γραμμή είναι πιο κοντά στην ακραία μέτρηση, άρα της δίδει ιδιαίτερη σημασία. Γενικά η νόρμα μεγαλύτερης τάξης δίνει μεγαλύτερη σημασία σε ακραίες τιμές μετρήσεων. Αντίθετα η νόρμα μικρής τάξης δίνει μικρή αξία σε ακραίες τιμές μετρήσεων. Εάν έχομε λοιπόν λόγους να πιστεύουμε ότι ακραίες τιμές είναι σημαντικές και αξιόπιστες, πρέπει να χρησιμοποιούμε νόρμες μεγαλύτερης τάξης. Εάν όμως από την άλλη μεριά θεωρήσομε ότι οι μετρήσεις είναι τυχαίες μεταβλητές που ακολουθούν **κανονική κατανομή** τότε μία νόρμα που δίνει καλά αποτελέσματα είναι η διακριτή L_2 νόρμα που καλείται και *Ευκλείδεια Νόρμα*. Για μετρήσεις που ακολουθούν κανονική κατανομή, είναι απίθανο να έχομε καταστάσεις όπως αυτή του σχήματος 3.2 με την ακραία μέτρηση, αλλά ακόμη και εάν αυτή υπάρχει, μπορούμε να θεωρήσομε ότι πρόκειται για τυχαίο λάθος μέτρησης.

Εάν λοιπόν χρησιμοποιήσομε την L_2 νόρμα, μπορούμε να δούμε ότι για το διάνυσμα $\mathbf{e}$, αυτή είναι ίση με το γινόμενο

$$E = \mathbf{e}^{\mathbf{T}}\mathbf{e} = \sum_{i=1}^{N} e_i^2 \quad , \tag{3.3}$$

που χαρακτηρίζεται και ως *ολικό λάθος* (overall error).

Ελαχιστοποιώντας λοιπόν το ολικό λάθος ως προς μία προς μία τις παραμέτρους του γραμμικού αντίστροφου προβλήματος, μπορούμε να πάρομε εκτιμήσεις της λύσης του που έχουν προκύψει από την αρχή των *ελαχίστων τετραγώνων*.

3.3 Η λύση ελαχίστων τετραγώνων για το γενικό γραμμικό αντίστροφο πρόβλημα.

3.3.1 Αναλυτικός υπολογισμός των παραμέτρων

Ας θεωρήσομε το γραμμικό αντίστροφο πρόβλημα που ορίζεται από τη σχέση :

$$\mathbf{d} = \mathbf{Gm} \quad . \tag{3.4}$$

Εάν λύσουμε το πρόβλημα και πάρομε λύσεις $\mathbf{m}^{est}$ η ανωτέρω σχέση δίνει :

$$\mathbf{d}^{obs} = \mathbf{Gm}^{est} \tag{3.5}$$

και το ολικό λάθος E είναι :

$$\begin{aligned} E &= \mathbf{e}^{\mathbf{T}}\mathbf{e} = (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{obs})^T(\mathbf{d} - \mathbf{d}^{obs}) = (\mathbf{d} - \mathbf{Gm}^{est})^T(\mathbf{d} - \mathbf{Gm}^{est}) = \\ &= \sum_{i=1}^{N}\left[d_i - \sum_{j=1}^{M} G_{ij} m_j^{est}\right]\left[d_i - \sum_{k=1}^{M} G_{ik} m_k^{est}\right] \quad . \end{aligned} \tag{3.6}$$

Παίρνοντας παράγωγο ως προς κάθε παράμετρο προς υπολογισμό $m_q, q = 1, ...M$ μπορούμε μετά από πράξεις (άσκηση) να καταλήξομε στο σύστημα :

$$\mathbf{G}^T\mathbf{Gm}^{est} - \mathbf{G}^T\mathbf{d} = 0 \quad . \tag{3.7}$$

Ο πίνακας $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ είναι ένας τετραγωνικός πίνακας M x M. Εάν ο πίνακας αυτός αντιστρέφεται, τότε μπορούμε να πάρομε τη λύση :

$$\mathbf{m}^{est} = \left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{d} \quad , \tag{3.8}$$

που χαρακτηρίζεται ως λύση *ελαχίστων τετραγώνων* για το διακριτό αντίστροφο πρόβλημα (3.4).

3.3.2 Η λύση ελαχίστων τετραγώνων από την πλευρά της Γραμμικής Άλγεβρας.

Θα δούμε τώρα πως μπορούμε να καταλήξομε στο ίδιο αποτέλεσμα για την λύση ελαχίστων τετραγώνων χρησιμοποιώντας έννοιες της Γραμμικής Άλγεβρας.

Ας θεωρήσομε πάλι το γραμμικό πρόβλημα που ορίζεται από τη σχέση :

$$\mathbf{d} = \mathbf{Gm} \tag{3.4}$$

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας **G** είναι παραλληλόγραμμος με διαστάσεις NxM. Το πρόβλημα αυτό γνωρίζομε πολύ καλά ότι γενικά δεν έχει λύση. Εάν έχομε N>M, και πάρομε ένα νέο διάνυσμα **d’** το οποίο να ανήκει στο χώρο των στηλών του **G,** τότε το αντίστοιχο πρόβλημα έχει λύση. Ποιο όμως θα είναι αυτό το διάνυσμα ; Ασφαλώς με βάση αυτά που έχομε πει μέχρι τώρα, θέλομε το **d’** να είναι κατά το δυνατόν πλησιέστερο στο **d**. Γνωρίζομε ότι αυτό είναι η ορθογώνια προβολή του **d** στο χώρο των στηλών του **G**, και θα ισχύει :

$$\mathbf{d}' = \mathbf{Gm}^{est} \tag{3.9}$$

Τότε όμως το διάνυσμα της διαφοράς $\mathbf{d} - \mathbf{d}' = \mathbf{d} - \mathbf{Gm}^{est}$ θα είναι ορθογώνιο στο χώρο των στηλών του **G** και επομένως θα ανήκει στον αριστερό μηδενόχωρο του **G.** Επομένως θα ισχύει η σχέση :

$$\mathbf{G}^T(\mathbf{d} - \mathbf{d}') = 0 \Rightarrow \mathbf{G}^T(\mathbf{d} - \mathbf{Gm}^{est}) = 0 \Rightarrow \mathbf{G}^T\mathbf{d} = \mathbf{G}^T\mathbf{Gm}^{est} \tag{3.10}$$

Ανακτήσαμε συνεπώς τη σχέση 3.7.

Ξέρομε τώρα από την Γραμμική Άλγεβρα ότι για να αντιστρέφεται ο πίνακας $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ **θα πρέπει ο G να έχει γραμμικά ανεξάρτητες στήλες**. Αυτό σημαίνει ότι οι μετρήσεις πρέπει να γίνονται με κατάλληλο τρόπο ώστε να εξασφαλίζεται η εν λόγω προϋπόθεση.

3.4 Παραδείγματα επίλυσης γραμμικών αντιστρόφων προβλημάτων με την αρχή των ελαχίστων τετραγώνων.

3.4.1 Υπολογισμός ευθείας γραμμής

Επανερχόμαστε στο πρόβλημα του υπολογισμού των παραμέτρων μιας ευθείας γραμμής από N μετρήσεις. Είδαμε στην εξίσωση 1.9 το μοντέλο του προβλήματος που εδώ θα το γράψομε στη μορφή:

$$d_i = m_1 + m_2 z_i \tag{3.11}$$

και στη μορφή της Γραμμικής Εξίσωσης **Gm = d** παίρνει το σχήμα :

$$\begin{bmatrix} 1 & z_1 \\ 1 & z_2 \\ . & . \\ . & . \\ . & . \\ 1 & z_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ . \\ . \\ . \\ d_N \end{bmatrix} \tag{3.12}$$

οπότε

$$\mathbf{G}^T\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & . & . & . & 1 \\ z_1 & z_2 & . & . & . & z_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & z_1 \\ 1 & z_2 \\ . & . \\ . & . \\ . & . \\ 1 & z_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \Sigma z_i \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 \end{bmatrix} \tag{3.13}$$

και

$$\mathbf{G}^T\mathbf{d} = \ldots = \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \end{bmatrix} \tag{3.14}$$

οπότε η λύση ελαχίστων τετραγώνων είναι :

$$\mathbf{m}^{est} = \left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1} \mathbf{G}^T\mathbf{d} = \begin{bmatrix} N & \Sigma z_i \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \end{bmatrix} \tag{3.15}$$

Εάν η ορίζουσα του πίνακα $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ είναι 0, προφανώς ο πίνακας δεν αντιστρέφεται και δεν έχομε λύση ελαχίστων τετραγώνων. Από την Γραμμική Άλγεβρα ξέρομε πάντως ότι όταν οι στήλες του πίνακα $\mathbf{G}$, είναι γραμμικά ανεξάρτητες, τότε ο πίνακας $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ αντιστρέφεται. Απλή παρατήρηση στην 3.12 μας υποδηλώνει ότι ειδικά για το συγκεκριμένο πρόβλημα αρκεί οι μετρήσεις να μην έχουν όλες γίνει στο ίδιο σημείο προκειμένου να υπάρχει λύση.

3.4.2 Υπολογισμός παραβολής

Θεωρούμε τώρα το πρόβλημα του υπολογισμού των παραμέτρων μιας παραβολής από N μετρήσεις όπως ακριβώς και στο προηγούμενο πρόβλημα. Εδώ το μοντέλο μας είναι

$$d_i = m_1 + m_2 z_i + m_3 z_i^2 \tag{3.16}$$

και στη μορφή της Γραμμικής Εξίσωσης **Gm = d** παίρνει το σχήμα :

$$\begin{bmatrix} 1 & z_1 & z_1^2 \\ 1 & z_2 & z_2^2 \\ . & . & . \\ . & . & . \\ . & . & . \\ 1 & z_N & z_N^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ . \\ . \\ . \\ d_N \end{bmatrix} \tag{3.17}$$

Οπότε για το γινόμενο $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ παίρνομε :

$$\mathbf{G}^T\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & . & . & . & 1 \\ z_1 & z_2 & . & . & . & z_N \\ z_1^2 & z_2^2 & . & . & . & z_N^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & z_1 & z_1^2 \\ 1 & z_2 & z_1^2 \\ . & . & . \\ . & . & . \\ . & . & . \\ 1 & z_N & z_N^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 & \Sigma z_i^3 \\ \Sigma z_i^2 & \Sigma z_i^3 & \Sigma z_i^4 \end{bmatrix} \tag{3.18}$$

και για τον όρο $\mathbf{G}^T\mathbf{d}$

$$\mathbf{G}^T\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & . & . & . & 1 \\ z_1 & z_2 & . & . & . & z_N \\ z_1^2 & z_2^2 & . & . & . & z_N^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ . \\ . \\ . \\ d_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \\ \Sigma z_i^2 d_i \end{bmatrix} \tag{3.19}$$

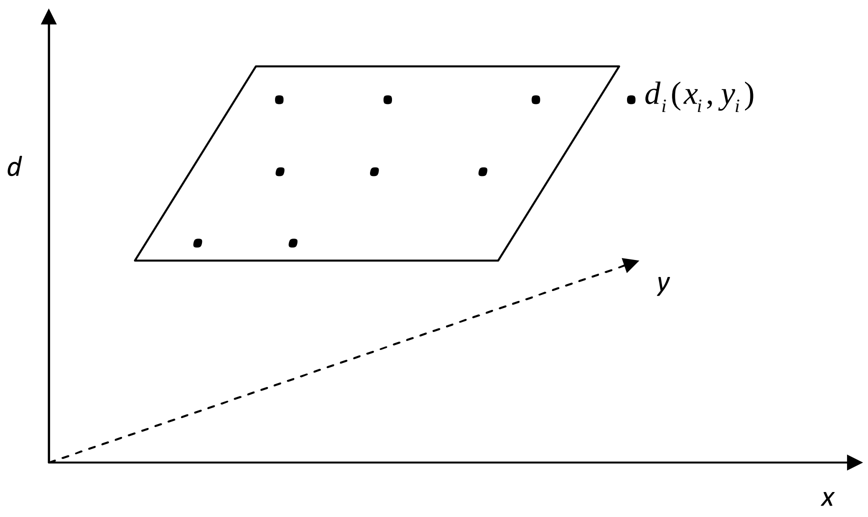
Έτσι η λύση ελαχίστων τετραγώνων είναι η :

$$\mathbf{m}^{est} = \left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{d} = \begin{bmatrix} N & \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 & \Sigma z_i^3 \\ \Sigma z_i^2 & \Sigma z_i^3 & \Sigma z_i^4 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \\ \Sigma z_i^2 d_i \end{bmatrix} \tag{3.20}$$

Ως προς την επιλυσιμότητα του συστήματος 3.19 και την ύπαρξη της λύσης 3.20, ισχύουν τα αναφερθέντα και στο προηγούμενο παράδειγμα σχετικά με τις ιδιότητες του πίνακα $\mathbf{G}$.

3.4.3 Υπολογισμός εξίσωσης επιπέδου στο χώρο.

Ας δούμε ένα ακόμη παράδειγμα επίλυσης αντιστρόφου προβλήματος με την αρχή των ελαχίστων τετραγώνων. Θέλομε να υπολογίσομε τις παραμέτρους της εξίσωσης που παριστάνει ένα επίπεδο στο χώρο.



Σχήμα 3.3 Υπολογίζοντας τις παραμέτρους της εξίσωσης επιπέδου

Με αναφορά στο σχήμα 3.3 θα πρέπει να υπολογίσομε τις παραμέτρους $\mathbf{m} = [m_1, m_2, m_3]^T$ μια και το επίπεδο έχει εξίσωση :

$$d_i = m_1 + m_2 x + m_3 y \tag{3.21}$$

Η εξίσωση **Gm = d** παίρνει τη μορφή :

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ . & . & . \\ . & . & . \\ . & . & . \\ 1 & x_N & y_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ . \\ . \\ . \\ d_N \end{bmatrix} \tag{3.22}$$

Αντίστοιχα έχομε για το γινόμενο $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$:

$$\mathbf{G}^T\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & . & . & . & 1 \\ x_1 & x_2 & . & . & . & x_N \\ y_1 & y_2 & . & . & . & y_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_1 \\ . & . & . \\ . & . & . \\ . & . & . \\ 1 & x_N & y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \Sigma x_i & \Sigma y_i \\ \Sigma x_i & \Sigma x_i^2 & \Sigma x_i y_i \\ \Sigma y_i & \Sigma x_i y_i & \Sigma y_i^2 \end{bmatrix} \tag{3.23}$$

και για τον όρο $\mathbf{G}^T\mathbf{d}$

$$\mathbf{G}^T\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & . & . & . & 1 \\ x_1 & x_2 & . & . & . & x_N \\ y_1 & y_2 & . & . & . & y_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ . \\ . \\ . \\ d_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma x_i d_i \\ \Sigma y_i d_i \end{bmatrix} \tag{3.24}$$

που δίνουν τη λύση ελαχίστων τετραγώνων :

$$\mathbf{m}^{est} = \left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{d} = \begin{bmatrix} N & \Sigma x_i & \Sigma y_i \\ \Sigma x_i & \Sigma x_i^2 & \Sigma x_i y_i \\ \Sigma y_i & \Sigma x_i y_i & \Sigma y_i^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma x_i d_i \\ \Sigma y_i d_i \end{bmatrix} . \tag{3.25}$$

Επισημαίνεται για μία ακόμη φορά ότι ο αντίστροφος του πίνακα $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ υπάρχει όταν οι στήλες του $\mathbf{G}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Δεν μπορεί για παράδειγμα οι μετρήσεις να γίνονται στο ίδιο σημείο, αλλά ούτε και να γίνονται με τρόπο που $x_i = \kappa y_i$ για όλα τα *i*.

3.5 Υπο-ορισμένα προβλήματα

Η λύση ελαχίστων τετραγώνων που είδαμε στο προηγούμενο εδάφιο, αναφέρεται σε προβλήματα που έχουν περισσότερη πληροφορία απ’ ό,τι χρειάζεται για να δοθεί μοναδική λύση. Τα προβλήματα αυτά αναφέρονται ως *υπερ-ορισμένα (overdetermined).* Με την έννοια της Γραμμικής Άλγεβρας αναφερόμαστε σε γραμμικά προβλήματα που ανάγονται σε συστήματα *N* εξισώσεων με *M* αγνώστους με $N > M$. Με την ίδια λογική, προβλήματα που έχουν λιγότερες εξισώσεις απ΄ότι αγνώστους χαρακτηρίζονται *υπο-ορισμένα (underdetermined).*

Στη θεωρία πάντως των αντιστρόφων προβλημάτων, ο χαρακτηρισμός σε υπο-ορισμένα ή υπερ-ορισμένα προβλήματα σχετίζεται και με τη διαδικασία λήψης των μετρήσεων, καθώς υπάρχουν προβλήματα στα οποία ανεξάρτητα από τον αριθμό των μετρήσεων και των παραμέτρων, υπάρχει περισσότερη πληροφορία απ΄ ό,τι χρειάζεται για ορισμένες παραμέτρους και λιγότερη για κάποιες άλλες. Τα προβλήματα αυτά χαρακτηρίζονται γενικά ως *μεικτά.*

Υπάρχει πάντως μία κατηγορία γραμμικών αντιστρόφων προβλημάτων για τα οποία ισχύει $N < M$ και επί πλέον οι εξισώσεις είναι συνεπείς (consistent). Τα προβλήματα αυτά χαρακτηρίζονται ως *καθαρά υπο-ορισμένα προβλήματα.* Για παράδειγμα θεωρείστε το γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned} x + y + z &= 6 \\ 2x + y - z &= 1 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Το πρόβλημα υπολογισμού των αγνώστων είναι καθαρά υπο-ορισμένο. Υπάρχουν περισσότερες από μία λύσεις (στην πραγματικότητα άπειρες) που όλες τους ικανοποιούν τια παραπάνω εξισώσεις και δίνουν μηδενικό ολικό λάθος. Δοκιμάστε τις λύσεις $[1,2,3]^T$ και $[-3,8,1]^T$. Και οι δύο ικανοποιούν την 3.26 ακριβώς. Εάν οι λύσεις αυτές αφορούσαν ένα αντίστροφο πρόβλημα, θα είχαμε κάποια δυνατότητα να αποφασίσουμε ποια είναι η καλύτερη ; Με άλλα λόγια, σε ένα καθαρά υπο-ορισμένο πρόβλημα έχομε κάποιο μηχανισμό για να μας δώσει μία *βέλτιστη* λύση ;

Η απάντηση είναι ότι υπάρχουν διάφορα κριτήρια που μας δίδουν τη δυνατότητα να επιλέξουμε από τις δυνατές λύσεις του γραμμικού συστήματος στο οποίο ανάγεται το αντίστροφο πρόβλημα εκείνη που είναι πιο κοντά στην αναμενόμενη πραγματικότητα. Τα κριτήρια αυτά συνοψίζονται στον όρο *εκ προοιμίου* ή *αρχική πληροφορία (a-priori information)* που μπορεί να διατυπώνεται με εναλλακτικούς τρόπους. Για παράδειγμα, ας υποθέσομε ότι μελετάμε ένα αντίστροφο πρόβλημα που έχει ως στόχο τον υπολογισμό της πυκνότητας υλικών. Η πυκνότητα γνωρίζομε ότι είναι ένα μέγεθος που εκφράζεται με θετικό αριθμό. Συνεπώς αποκλείονται από τις δυνατές λύσεις εκείνες που μπορεί να δίνουν αρνητικές πυκνότητες. Στο παράδειγμα του συστήματος 3.26 εάν οι άγνωστοι πρέπει να είναι θετικές ποσότητες, θα πρέπει να αποκλείσουμε την δεύτερη από τις αναφερθείσες λύσεις αφού μας δίνει $x < 0$

Ένας περιορισμός που μπορεί σε ορισμένες περιπτώσεις να χρησιμοποιηθεί σε αντίστροφα προβλήματα από φυσικές επιστήμες είναι εκείνος που αναφέρεται στο *ελάχιστο μήκος* της λύσης. Δηλαδή ζητάμε λύσεις που να έχουν όσο το δυνατόν χαμηλές αριθμητικά τιμές. Αυτό μπορεί να εκφραστεί μέσω της ευκλείδειας νόρμας της λύσης που είναι :

$$L = \mathbf{m}^T\mathbf{m} = \sum_{j=1}^{\mathrm{M}} m_j^2 \tag{3.27}$$

Θα δούμε στη συνέχεια περισσότερο σύνθετες περιπτώσεις όπου το μήκος της λύσης συνδυάζεται με άλλα κριτήρια για να μας δώσει βέλτιστη λύση στο αντίστροφο πρόβλημα.

Στην απλή περίπτωση που χρησιμοποιηθεί ο περιορισμός του ελάχιστου μήκους, μπορούμε να διατυπώσουμε ένα γραμμικό αντίστροφο πρόβλημα ως εξής :

- Υπολογίστε το διάνυσμα $\mathbf{m}^{est}$ που ελαχιστοποιεί τη νόρμα $L = \mathbf{m}^T\mathbf{m}$, όταν ισχύει επίσης $\mathbf{e} = \mathbf{d} - \mathbf{Gm} = 0$.

Στην ανωτέρω διατύπωση υπονοούμε ότι έχομε ένα πρόβλημα καθαρά υπο-ορισμένο και γι αυτό οι λύσεις του προβλήματος ικανοποιούν ακριβώς το γραμμικό σύστημα $\mathbf{d} = \mathbf{Gm}$ που ορίζει το αντίστροφο πρόβλημα.

Ένα πρόβλημα αυτής της μορφής λύνεται με τη χρήση των πολλαπλασιαστών Lagrange. Το πρόβλημα ανάγεται στην ελαχιστοποίηση μιας κατάλληλης *αντικειμενικής συνάρτησης* που στην περίπτωσή μας ορίζεται ως :

$$\Phi(m) = L + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i e_i = \sum_{j=1}^{M} m_j^2 + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \left[d_i - \sum_{j=1}^{M} G_{ij} m_j \right] \tag{3.28}$$

Παραγωγίζοντας τη συνάρτηση ως προς τις παραμέτρους m και ζητώντας την παράγωγο να είναι 0, παίρνομε ένα σύστημα ως προς τους πολλαπλασιαστές που επιλυόμενο μας δίνει ένα νέο σύστημα ως προς τις βέλτιστες λύσεις $\mathbf{m}^{est}$.

Ας δούμε την πορεία αυτή :

1. Παραγώγιση ως προς όλα τα m

$$\frac{\partial \Phi}{\partial m_q} = \sum_{j=1}^{M} 2\frac{\partial m_j}{\partial m_q} m_j - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \sum_{j=1}^{M} G_{ij} \frac{\partial m_j}{\partial m_q} = 2m_q - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i G_{iq} = 0 \tag{3.29}$$

2. Γράφομε τις ανωτέρω σχέσεις για $q = 1,...M$ σε διανυσματική μορφή :

$$2\mathbf{m} = \mathbf{G}^T \boldsymbol{\lambda} \tag{3.30}$$

3. Επειδή ισχύει παράλληλα και $\mathbf{d} = \mathbf{Gm}$, αντικαθιστώντας το $\mathbf{m}$ από την 3.30 στην αρχική εξίσωση παίρνομε :

$$\mathbf{d} = \mathbf{G}\left[\mathbf{G}^T \boldsymbol{\lambda} / 2\right] \tag{3.31}$$

4. Εάν ο πίνακας $\mathbf{GG}^T$ που έχει διαστάσεις M x M αντιστρέφεται, μπορούμε να εκφράσομε μέσω αυτού τους πολλαπλασιαστές Lagrange.

$$\boldsymbol{\lambda} = 2\left[\mathbf{GG}^T\right]^{-1} \mathbf{d} \tag{3.32}$$

5. Με αντικατάσταση της 3.32 στην 3.30 παίρνομε τη λύση (ελαχίστου μήκους)

$$\mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}^T \left[\mathbf{GG}^T\right]^{-1} \mathbf{d} \tag{3.33}$$

Ως προς την αντιστρεψιμότητα του πίνακα $\mathbf{GG}^T$, από τη Γραμμική Άλγεβρα γνωρίζομε ότι αρκεί οι γραμμές του $\mathbf{G}$ να είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Αυτό όμως εξασφαλίζεται από την υπόθεση για ένα καθαρά υπο-ορισμένο αντίστροφο πρόβλημα χωρίς ασυνέπειες.

<u>ΑΣΚΗΣΗ</u> Επιλύστε το πρόβλημα 3.26 με την αρχή του ελαχίστου μήκους.