

Ανδρέας Τζάνης, Αναπληρωτής Καθηγητής



ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΓΕΩΛΟΓΙΑΣ
ΤΟΜΕΑΣ ΓΕΩΦΥΣΙΚΗΣ – ΓΕΩΘΕΡΜΙΑΣ

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ
ΓΙΑ
ΓΕΩΕΠΙΣΤΗΜΕΣ

από τον

Ανδρέα Τζάνη, PhD.
Αναπληρωτή Καθηγητή

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1 Σύνθεση και Ανάλυση Fourier	4
1.1 Σύνθεση σημάτων από ημιτονικές συνιστώσες (Σύνθεση Fourier)	4
1.2. Μιγαδική Εκθετική Μορφή Ημιτονικών Σημάτων.....	6
1.3. Μετασχηματισμός Fourier	9
1.3.1 Το Ολοκληρωτικό Θεώρημα Fourier	9
1.3.2.Μετασχηματισμός Fourier	9
1.3.3. Το θεώρημα της συνέλιξης.....	10
1.3.3. Ταυτότητα του Parseval	10
1.3.4. Ημιτονικός και Συνημιτονικός Μετασχηματισμός Fourier	11
1.4. Πραγματικά Δεδομένα και Μετασχηματισμοί-Z.....	11
1.4.1. Η συχνότητα Nyquist	12
1.4.2. Ο Μοναδιαίος Κύκλος	12
1.5. Ανάλυση Fourier.....	13
1.5.1 Τονική επιλογή	13
1.5.2 Πεπερασμένος Μετασχηματισμός Fourier	16
1.5.3 fftgui.....	17
1.5.4 Ηλιακές Κηλίδες.....	21
1.5.5 Περιοδικές Χρονοσειρές	24
1.5.6 Ταχύς Πεπερασμένος Μετασχηματισμός Fourier	25
1.5.7. Ασκήσεις	27
1.7 Πίνακας Μετασχηματισμών Fourier κοινών συναρτήσεων	29
Κεφάλαιο 2 Γραμμικές εξισώσεις	33
2.1 Επίλυση γραμμικών συστημάτων.....	33
2.2 Ο τελεστής backslash.....	33
2.3 Ένα παράδειγμα 3-by-3.....	34
2.4 Πίνακες Αντιμετάθεσης και Τριγωνικοί Πίνακες.....	35
2.5 Παραγοντοποίηση LU.....	36
2.6 Η αναγκαιότητα του Pivoting.....	38
2.7. lutz, bslashx, luguí.	39
2.8. Η επίδραση των σφαλμάτων στρογγύλευσης.....	42
2.9 Νόρμες και Αριθμοί Συνθήκης.....	44
2.10 Περαιτέρω μελέτη και βιβλιογραφία	49
2.11 Ασκήσεις	49
Κεφάλαιο 3 Ιδιοτιμές και Ιδιάζουσες Τιμές	54
3.1. Ανάλυση (αποσύνθεση) Ιδιοτιμών και Ιδιαζουσών Τιμών.	54
3.2 Ένα παράδειγμα.....	56
3.3. Το πρόγραμμα επίδειξης eigshow.....	58

3.4. Το Χαρακτηριστικό Πολύωνυμο	59
3.5. Συμμετρικοί και Ερμιτιανοί Πίνακες	60
3.6. Τανυστής τάσης, κύριες τάσεις και ελλειψοειδές τάσεων.....	61
3.7. Ανάλυση κυρίων συνιστωσών.....	66
3.8. Άσκηση	70
Κεφάλαιο 4 Προσομοίωση Δεδομένων και Φυσικών Διεργασιών	74
4.1. Εισαγωγή.....	74
4.2 Τα Ελάχιστα Τετράγωνα ως εκτιμήτρια Μέγιστης Πιθανοφάνειας.....	75
4.3. Προσαρμογή χ^2	77
4.4. Προσαρμογή ευθείας γραμμής	78
4.5. Γενικά Ελάχιστα Τετράγωνα.....	80
4.5.1 Επίλυση με χρήση Κανονικών Εξισώσεων.....	81
4.5.2. Επίλυση με χρήση Αποσύνθεσης Ιδιαζουσών Τιμών.	82
5.3. Πολυδιάστατα Προσομοιώματα	84
4.6 Μη-Γραμμικά Ελάχιστα Τετράγωνα: Εισαγωγή στην Αντιστροφή Γεωφυσικών Δεδομένων. ..	86
4.6.1. Η Μαγνητοτελλουρική Μέθοδος σε στρωματοειδείς δομές	86
4.6.2. Κατασκευή λύσεων.....	88

Κεφάλαιο 1

Σύνθεση και Ανάλυση Fourier

1.1 Σύνθεση σημάτων από ημιτονικές συνιστώσες (Σύνθεση Fourier)

Θεωρήστε ένα σήμα συνεχούς χρόνου το οποίο είναι άθροισμα συνημιτονικών όρων της μορφής

$$x(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + A_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2) + \dots + A_N \cos(\omega_N t + \varphi_N), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

όπου

$A_i \geq 0$: το **πλάτος** του συνημιτονικού όρου $A_i \cos(\omega_i t + \varphi_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$
 $\omega_i \geq 0$: η **κυκλική συχνότητα** του συνημιτονικού όρου $A_i \cos(\omega_i t + \varphi_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$
 $\varphi_i \geq 0$: η **φάση** του συνημιτονικού όρου $A_i \cos(\omega_i t + \varphi_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$

προσδιορίζουν πλήρως το σήμα $x(t)$

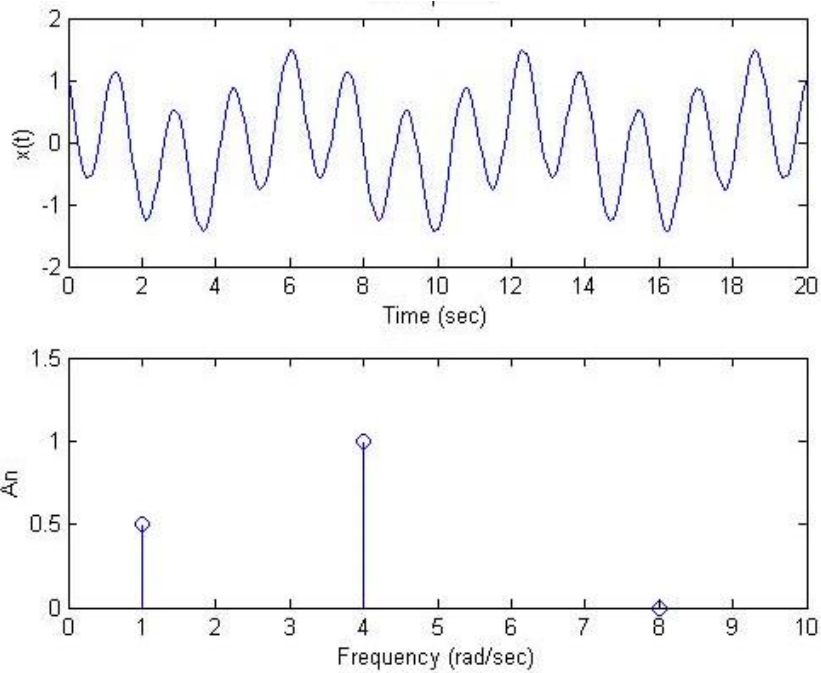
Με το MATLAB script

```
% Fourier Synthesis Example
% Frequency representation of a sinusoidal system
t = 0:20/400:20;
w1 = 1;
w2 = 4;
w3 = 8;
A1 = input('Input the amplitude A1 for w1 = 1: ');
A2 = input('Input the amplitude A2 for w2 = 4: ');
A3 = input('Input the amplitude A3 for w3 = 8: ');
x = A1*cos(w1*t)+A2*cos(w2*t+pi/3)+A3*cos(w3*t+pi/2);
clf
subplot(211)
plot(t,x)
title('Fourier Synthesis Example')
ylabel('x(t)')
xlabel('Time (sec)')
subplot(212),stem([w1 w2 w3],[A1 A2 A3])
v = [0 10 0 1.5*max([A1,A2,A3])];
axis(v);
ylabel('Amplitude')
xlabel('Frequency (rad/sec)')
axis;
subplot(111)
```

λαμβάνομε

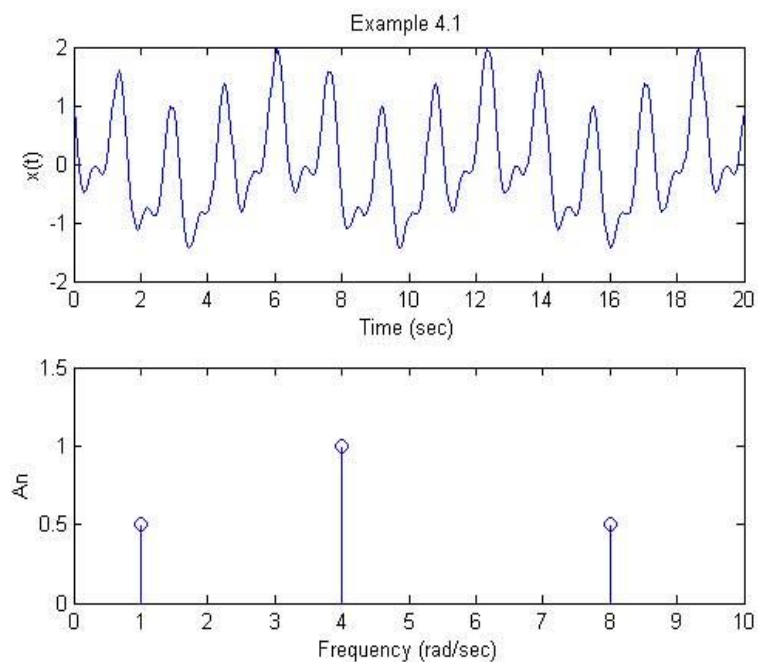
Για $A_1 = 0.5$, $A_2 = 1$, $A_3 = 0$, οπότε

$$x(t) = 0.5 \cos(t) + \cos\left(4t + \frac{\pi}{3}\right), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$



Για $A_1 = 0.5$, $A_2 = 1$, $A_3 = 0.5$, οπότε

$$x(t) = 0.5 \cos(t) + \cos\left(4t + \frac{\pi}{3}\right) + 0.5 \cos\left(8t + \frac{\pi}{2}\right), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

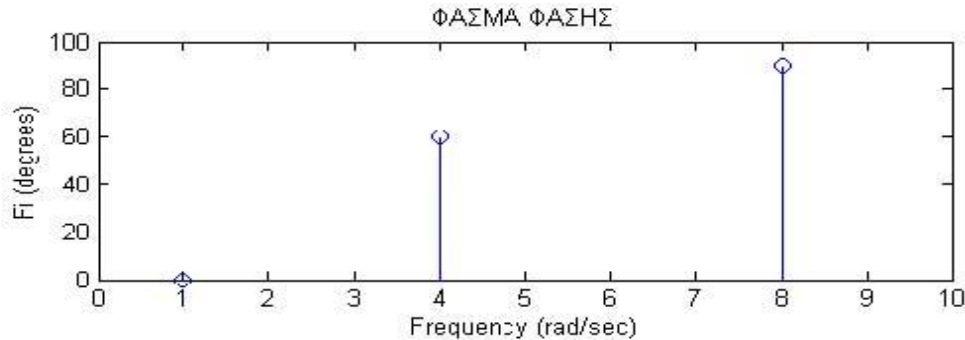


Άσκηση: Δοκιμάστε το πρόγραμμα για διαφορετικούς συνδυασμούς A_1 , A_2 και A_3 και σημειώσατε τις παρατηρήσεις σας.

Το **φάσμα των φάσεων** της

$$x(t) = A_1 0.5 \cos(t) + A_2 \cos\left(4t + \frac{\pi}{3}\right) + A_3 \cos\left(8t + \frac{\pi}{2}\right), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

είναι



Άσκηση: Κατασκευάσατε MATLAB script με το οποίο εικονίζεται το φάσμα φάσης του $x(t)$.

ΠΟΡΙΣΜΑ:

Κάθε σήμα ημιτονικής ή συνημιτονικής μορφής :

$$x(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + A_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2) + \dots + A_N \cos(\omega_N t + \varphi_N), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

χαρακτηρίζεται από τα **φάσματα των πλατών και φάσεων**

- **Φάσμα των πλατών** είναι η κατανομή των πλατών A_i των ημιτονικών/συνημιτονικών όρων του σήματος $x(t)$ συναρτήσει των κυκλικών συχνοτήτων $\omega_i \quad i = 1, 2, \dots, N$
- **Φάσμα των φάσεων** είναι η κατανομή των φάσεων φ_i των ημιτονικών/συνημιτονικών όρων του σήματος $x(t)$ συναρτήσει των κυκλικών συχνοτήτων $\omega_i \quad i = 1, 2, \dots, N$

1.2. Μιγαδική Εκθετική Μορφή Ημιτονικών Σημάτων

Το σήμα

$$x(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + A_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2) + \dots + A_N \cos(\omega_N t + \varphi_N), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

μπορεί να εκφραστεί σε **μιγαδική εκθετική μορφή**

Θεωρείστε το σήμα $A_i e^{j(\omega_i t + \varphi_i)}$ το οποίο γράφεται

$$A_i e^{j(\omega_i t + \varphi_i)} = A_i \cos(\omega_i t + \varphi_i) + j A_i \sin(\omega_i t + \varphi_i)$$

Ο όρος $A_i \cos(\omega_i t + \varphi_i)$ γράφεται ως

$$A_i \cos(\omega_i t + \varphi_i) = \text{Re} \left[A_i e^{j(\omega_i t + \varphi_i)} \right]$$

και το σήμα

$$x(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + A_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2) + \dots + A_N \cos(\omega_N t + \varphi_N), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

γράφεται σαν άθροισμα πραγματικών μερών μιγαδικών εκθετικών σημάτων

$$x(t) = \sum_{i=1}^N \operatorname{Re} \left[A_i e^{j(\omega_i t + \varphi_i)} \right]$$

Θεωρώντας τον συζυγή $A_i e^{-j(\omega_i t + \varphi_i)}$ και επειδή όταν

$$s = a + jb, \quad s^* = a - jb \quad \Rightarrow \quad a = \frac{s + s^*}{2},$$

έχομε

$$x(t) = \sum_{i=1}^N \operatorname{Re} \left[A_i e^{j(\omega_i t + \varphi_i)} \right] = \sum_{i=1}^N \left[\frac{A_i}{2} e^{j(\omega_i t + \varphi_i)} + \frac{A_i}{2} e^{-j(\omega_i t + \varphi_i)} \right]$$

Ορίζοντας:

$$c_i = \frac{A_i}{2} e^{j\varphi_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$c_{-i} = \frac{A_i}{2} e^{-j\varphi_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

λαμβάνομε

$$x(t) = \sum_{i=1}^N \left[c_i e^{j\omega_i t} + c_{-i} e^{-j\omega_i t} \right] = \sum_{i=1}^N \left[c_i e^{j\omega_i t} + c_{-i} e^{j(-\omega_i)t} \right] = \sum_{i=1}^N \left[c_i e^{j\omega_i t} \right] + \sum_{i=-N}^{-1} \left[c_i e^{j\omega_i t} \right]$$

Αυτή είναι η **μυγαδική εκθετική μορφή** της

$$x(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + A_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2) + \dots + A_N \cos(\omega_N t + \varphi_N), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

όπου οι συντελεστές

$$c_i = \frac{A_i}{2} e^{j\varphi_i} = \frac{A_i}{2} [\cos \varphi_i + j \sin \varphi_i], \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$c_{-i} = \frac{A_i}{2} e^{-j\varphi_i} = \frac{A_i}{2} [\cos \varphi_i - j \sin \varphi_i], \quad i = 1, 2, \dots, N$$

γενικώς είναι μυγαδικοί αριθμοί και $c_i \in \mathfrak{R}$.

Δεδομένου ότι

$$|c_i| = |c_{-i}| = |A_i|, \quad i = 1, 2, \dots$$

το φάσμα των πλατών είναι *συμμετρικό* ως προς $\omega_i = 0$. Επίσης λόγω της

$$\varphi_{-i} = -\varphi_i$$

το φάσμα των φάσεων είναι *συνάρτηση περιττή* προς $\omega_i = 0$.

Παράδειγμα

Έστω το σήμα

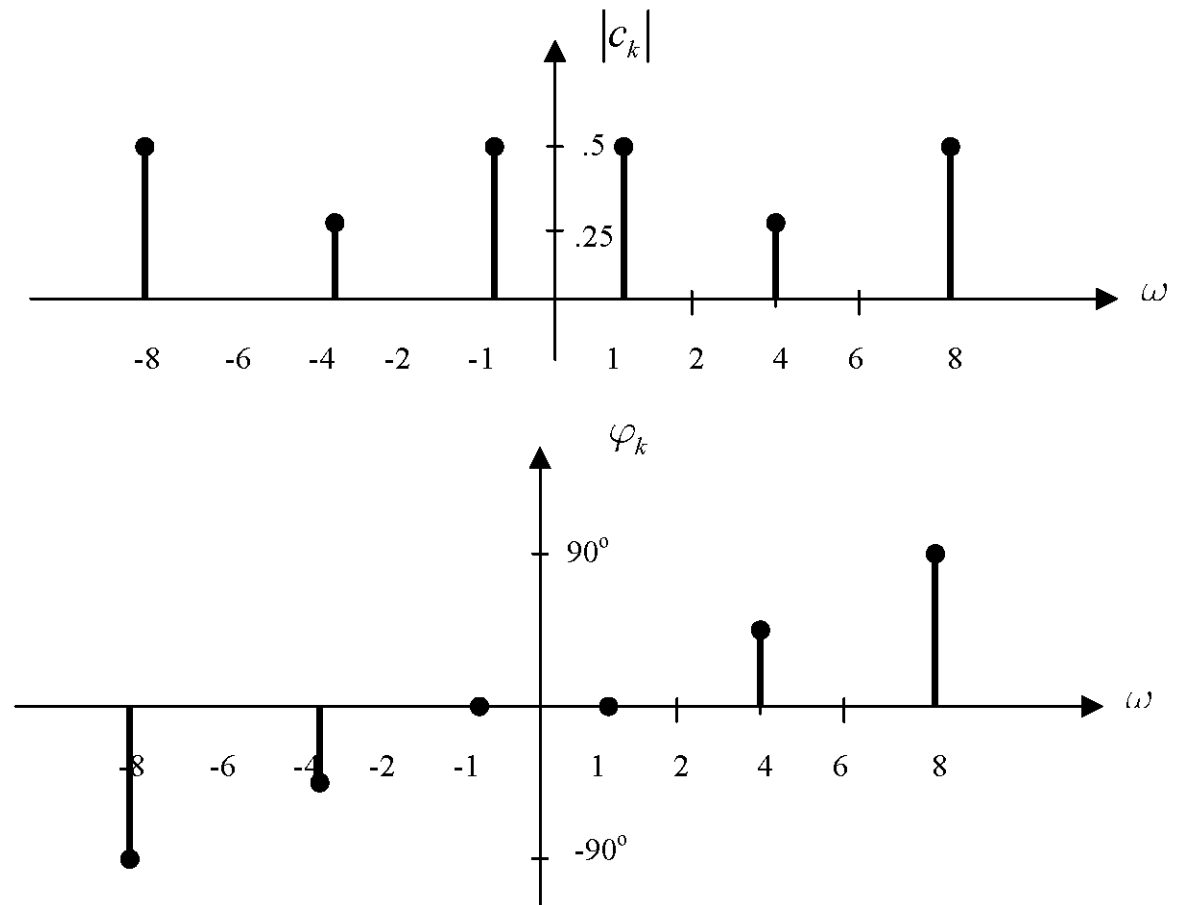
$$x(t) = \cos(t) + 0.5 \cos\left(4t + \frac{\pi}{3}\right) + \cos\left(8t + \frac{\pi}{2}\right), \quad -\infty \leq t \leq \infty$$

Οι συντελεστές c στην προκειμένη περίπτωση είναι:

$$c_1 = \frac{1}{2} = 0.5, \quad c_2 = \frac{0.5}{2} e^{j\frac{\pi}{3}} = 0.25 (\angle 60^\circ), \quad c_3 = \frac{1}{2} e^{j\frac{\pi}{2}} = 0.5 (\angle 90^\circ)$$

$$c_{-1} = \frac{1}{2} = 0.5, \quad c_{-2} = \frac{0.5}{2} e^{-j\frac{\pi}{3}} = 0.25 (\angle -60^\circ), \quad c_{-3} = \frac{1}{2} e^{-j\frac{\pi}{2}} = 0.5 (\angle -90^\circ)$$

Και οι γραφικές παραστάσεις των φασμάτων πλάτους και φάσης:



1.3. Μετασχηματισμός Fourier

1.3.1 Το Ολοκληρωτικό Θεώρημα Fourier

Αν:

- (i) οι συναρτήσεις $f(t)$ και $f'(t)$ είναι τμηματικά συνεχείς σε κάθε πεπερασμένο διάστημα $-L < t < L$,
- (ii) το ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)| dt$ συγκλίνει, και
- (iii) η $f(t)$ ισούται με $\frac{1}{2} \{f(t+0) + f(t-0)\}$ σε κάθε σημείο ασυνέχειας, τότε

$$f(t) = \int_0^{\infty} [A(\omega) \cos(\omega t) + B(\omega) \sin(\omega t)] d\omega$$

όπου

$$\begin{cases} A(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \cos(\omega u) du \\ B(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \sin(\omega u) du \end{cases}$$

Δύο άλλες μορφές του θεωρήματος Fourier είναι η

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\omega=-\infty}^{\infty} \int_{u=-\infty}^{\infty} f(u) \cos(\omega(u-t)) du d\omega$$

και η

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-j\omega t} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{j\omega u} du \right] d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{j\omega(u-t)} du d\omega$$

Αν η $f(t)$ είναι περιττή συνάρτηση [δηλ. $f(-t) = -f(t)$], τότε

$$f(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\int_0^{\infty} f(u) \sin(\omega u) du \right] \sin(\omega t) d\omega$$

Αν η $f(t)$ είναι άρτια συνάρτηση [δηλ. $f(-t) = f(t)$], τότε

$$f(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\int_0^{\infty} f(u) \cos(\omega u) du \right] \cos(\omega t) d\omega$$

Ουσιαστικά, όλα τα προηγούμενα συνοψίζονται στο εξής: Όλη η πληροφορία που υπάρχει στο χώρο t , [δηλ. στην $f(t)$] μπορεί με μια ολοκλήρωση (ως προς u) να μεταφερθεί στο χώρο ω και μετά, με μια δεύτερη ολοκλήρωση, πίσω στο χώρο t .

1.3.2. Μετασχηματισμός Fourier

Ο μετασχηματισμός Fourier της $f(t)$ ορίζεται με τη σχέση

$$F(\omega) = \mathbb{F}\{f(t)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{j\omega t} dt$$

και ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier της $F(\omega)$ ορίζεται με τη σχέση

$$f(t) = \mathbb{F}^{-1}\{F(\omega)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{-j\omega t} d\omega$$

Οι $f(t)$ και $F(\omega)$ καλούνται ζεύγος μετασχηματισμών Fourier. Η $f(t)$ αντιπροσωπεύει την πληροφορία στο χώρο του χρόνου και η $F(\omega)$ στο χώρο των συχνοτήτων (συνήθως το t παριστάνει χρόνο και το ω συχνότητα).

Ιδιότητες:

Αν $F(\omega) = \mathbb{F}\{f(t)\}$ και $G(\omega) = \mathbb{F}\{g(t)\}$, τότε με a και b σταθερές έχουμε

- $\mathbb{F}\{af(t) + bg(t)\} = aF(\omega) + bG(\omega)$ Γραμμικότητα
- $\mathbb{F}\{f(at)\} = a^{-1} F(\omega/a)$ Αλλαγή κλίμακας
- $\mathbb{F}\{f(t+a)\} = e^{-ja\omega} F(\omega)$ Μετατόπιση
- $\mathbb{F}\{t^n f(t)\} = (-j)^n \frac{d^n F(\omega)}{d\omega^n}$ Πολλαπλασιασμός επί δύναμη
- $\mathbb{F}\{f(t)e^{jat}\} = F(\omega-a)$ Πολλαπλασιασμός επί e^{iat}
- Αν $\lim_{a \rightarrow 0} \mathbb{F}\{f(t,a)\} = \mathbb{F}\{f(t)\}$, τότε $\lim_{a \rightarrow 0} f(t,a) = f(t)$ όπου η $f(t)$ είναι συνεχής.
- Αν επιπλέον
 - (i) υπάρχουν οι παράγωγοι $f^{(r)}(t)$ μέχρι και τάξης n της $f(t)$ για κάθε t και
 - (ii) $f^{(r)}(t) \rightarrow 0$ για $|t| \rightarrow \infty$ και κάθε $r < n$, τότε

$$\mathbb{F}\{f^{(n)}(t)\} = (-j\omega)^n F(\omega)$$

1.3.3. Το θεώρημα της συνέλιξης

Αν

$$f * g = \int_{-\infty}^{\infty} f(u)g(t-u)du$$

είναι η συνέλιξη δύο συναρτήσεων $f(t)$ και $g(t)$, τότε

$$\mathbb{F}\{f * g\} = \mathbb{F}\{f(t)\} \mathbb{F}\{g(t)\}$$

δηλ. ο μετασχηματισμός της συνέλιξης ισούται με το γινόμενο των μετασχηματισμών. Η σχέση αυτή χρησιμοποιείται και με την μορφή

$$f * g = \mathbb{F}^{-1}[F(\omega)G(\omega)].$$

1.3.3. Ταυτότητα του Parseval

Αν $F(\omega) = \mathbb{F}\{f(t)\}$ και $G(\omega) = \mathbb{F}\{g(t)\}$, τότε

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)g^*(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)G^*(\omega)d\omega$$

όπου ο αστερίσκος σαν άνω δείκτης σημαίνει τον συζυγή μιγαδικό. Ειδικότερα

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega$$

1.3.4. Ημιτονικός και Συνημιτονικός Μετασχηματισμός Fourier

Ο ημιτονικός μετασχηματισμός Fourier της $f(t)$ είναι

$$F_s(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt$$

Ο αντίστροφος ημιτονικός μετασχηματισμός Fourier της $F_s(\omega)$ είναι

$$f(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} F_s(\omega) \sin(\omega t) dt$$

Ο συνημιτονικός μετασχηματισμός Fourier της $f(t)$ είναι

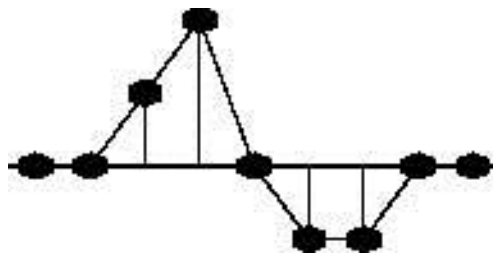
$$F_c(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt$$

Ο αντίστροφος συνημιτονικός μετασχηματισμός Fourier της $F_c(\omega)$

$$f(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} F_c(\omega) \cos(\omega t) dt$$

1.4. Πραγματικά Δεδομένα και Μετασχηματισμοί-Z

Θεωρούμε το ακόλουθο απλό σήμα:



Για να αναλύσουμε πρακτικά ένα τέτοιο σήμα είναι απαραίτητο να κατασκευάσουμε μία προσεγγιστική αναπαράστασή του με μία σειρά αριθμών. Συνήθως *δειγματίζουμε* το σήμα σε σταθερά βήματα κατά μήκος της ανεξάρτητης μεταβλητής (π.χ. χρόνος). Μία προκύπτουσα *διακριτή* προσέγγιση του ανωτέρω παραδείγματος είναι η

$$y_i = (\dots, 0, 0, 1, 2, 0, -1, -1, 0, 0, \dots)$$

Όσο πυκνότερος είναι ο ρυθμός δειγματοληψίας, τόσο ακριβέστερη είναι η προσέγγιση του σήματος! Σε κάθε περίπτωση όμως, η μεταβλητή του χρόνου καθίσταται *διακριτή*. Το βήμα δειγματοληψίας γενικά συμβολίζεται με Δt .

Το *άθροισμα Fourier* που ορίζει τον πεπερασμένο μετασχηματισμό Fourier του σήματος y_i γίνεται

$$Y(\omega) = Y_\omega = \sum_{k=1}^N y_k e^{j\omega t_k} = \sum_{k=1}^N y_k e^{j\omega k \Delta t}.$$

Ορίζοντας $Z = e^{j\omega \Delta t}$, το άθροισμα Fourier γίνεται:

$$Y_\omega = \sum_{k=1}^N y_k Z^k = y_0 + y_1 Z + y_2 Z^2 + y_3 Z^3 + \dots + y_N Z^N$$

- Ο μετασχηματισμός- Z είναι μία προσέγγιση του πεπερασμένου μετασχηματισμού Fourier που κάνει τα αθροίσματα Fourier να μοιάζουν με **πολυώνυμα**, τα οποία μπορούμε να χειριστούμε και αναλύσουμε με τυπική άλγεβρα πολυωνύμων και μιγαδική ανάλυση!

1.4.1. Η συχνότητα Nyquist

Στον κόσμο της πραγματικής ανάλυσης σήματος, ο χρόνος γενικά έχει την μορφή

$$t_k = k\Delta t, \quad k = 1, 2, \dots, N.$$

Τούτου δοθέντος, η *υψηλότερη δυνατή συχνότητα* απολήψιμη για δεδομένο ρυθμό δειγματοληψίας μπορεί να εκφραστεί ως:

$$(\dots +1, -1, +1, -1, +1, -1, \dots),$$

και αντιστοιχεί σε $e^{j\pi k}$. Θέτοντας

$$e^{j\omega_{\max} t} = e^{j\pi k},$$

βλέπουμε ότι η μέγιστη ανιχνεύσιμη συχνότητα είναι:

$$\omega_{\max} = \frac{\pi}{\Delta t}$$

Ο χρόνος δίδεται είτε σε δευτερόλεπτα, είτε σε μονάδες δειγματοληψίας, πράγμα που είναι το ίδιο όταν $\Delta t = 1$.

- Όταν ο χρόνος δίδεται σε μονάδες δειγματοληψίας, η μέγιστη συχνότητα έχει όνομα και λέγεται **συχνότητα Nyquist**, είναι δε π ακτίνια ή $\frac{1}{2}$ κύκλος ανά δείγμα!

1.4.2. Ο Μοναδιαίος Κύκλος

Εάν η συχνότητα ω είναι *πραγματική μεταβλητή*, τότε η

$$Z = e^{j\omega \Delta t} = \cos(\omega \Delta t) + j\sin(\omega \Delta t)$$

είναι μιγαδική και έχει μοναδιαίο πλάτος διότι $\sin^2 + \cos^2 = 1$.

- Καθώς η ω μεταβάλλεται στον πραγματικό άξονα, η Z διαγράφει *κυκλικό* γεωμετρικό τόπο με ακτίνα $|Z| = 1$. Αυτός είναι ο **μοναδιαίος κύκλος**!
- Δεδομένου ότι ο μετασχηματισμός- Z ανάγει τα πραγματικά σήματα σε **πολυώνυμα** της Z , τότε κάθε *εξελισσόμενο φαινόμενο* μπορεί τελικά να περιγραφεί πλήρως μέσω των ριζών του αντιστοίχου πολυωνύμου και να αναλυθεί με μιγαδική άλγεβρα επί του μοναδιαίου κύκλου.

1.5. Ανάλυση Fourier¹

Η ανάλυση Fourier χρησιμοποιείται καθημερινά, έστω και αν οι περισσότεροι από εμάς δεν το ξέρουν ή δεν το αντιλαμβάνονται. Πέρα από την επιστημονική ανάλυση, τα κινητά τηλέφωνα, οι οδηγοί (κάθε είδους) δίσκων, τα DVD και οι εικόνες JPEG όλα περιλαμβάνουν ταχείς πεπερασμένους μετασχηματισμούς Fourier. Στις επόμενες παραγράφους θα ερμηνευθεί ο μετασχηματισμός Fourier και θα συζητηθεί ο αριθμητικός υπολογισμός του.

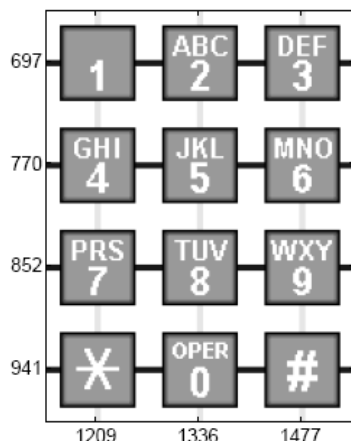
1.5.1 Τονική επιλογή

Η τονική επιλογή τηλεφωνικών αριθμών είναι παράδειγμα καθημερινής χρήσης της ανάλυσης Fourier. Η βάση της τεχνολογίας αυτής είναι το Διτονικό Πολύ-Συχνотικό σύστημα (Dual Tone Multi-Frequency ή DTMF). Το πρόγραμμα *touchtone.m* δείχνει πως παράγονται και αποκωδικοποιούνται οι τόνοι DTMF. Το πληκτρολόγιο των τηλεφώνων λειτουργεί ως πίνακας 4×3, κάθε γραμμή και στήλη του οποίου σχετίζεται με μία συχνότητα. Οι βασικές συχνότητες είναι

```
fr = [697 770 852 941];
fc = [1209 1336 1477];
```

Εάν *s* είναι μία αλφαριθμητική μεταβλητή που παριστά ένα από τα πλήκτρα του πληκτρολογίου, οι αντίστοιχοι δείκτες γραμμής *k* και στήλης *j* μπορούν να βρεθούν ως εξής:

```
switch s
case '*',
    k = 4; j = 1;
case '0',
    k = 4; j = 2;
case '#',
    k = 4; j = 3;
otherwise,
    d = s-'0';
    j = mod(d-1,3)+1;
    k = (d-j)/3+1;
end
```



¹ Το Μέρος 1.5 των παρουσιών σημειώσεων έχει βασισθεί στο Κεφάλαιο 8 (Fourier Analysis) του βιβλίου «*Numerical Computing with Matlab*», από τον Cleve Moller, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2004.

Μία θεμελιώδης παράμετρος στην κατασκευή και ανάλυση ψηφιακών χρονοσειρών είναι ο ρυθμός δειγματοληψίας.

$F_s = 32768$

Το διακριτό άνυσμα του χρόνου που μεταβάλλεται από την στιγμή 0 στην στιγμή 0.25 εντός του διαστήματος $0 \leq t \leq 0.25$ με αυτό το ρυθμό δειγματοληψίας είναι

$t = 0:1/F_s:0.25;$

Ο τόνος που αντιστοιχεί στο πλήκτρο της θέσης (k, j) παράγεται με την υπέρθεση δύο στοιχειωδών τόνων με συχνότητες $f_r(k)$ και $f_c(j)$.

$y_1 = \sin(2\pi \cdot f_r(k) \cdot t);$

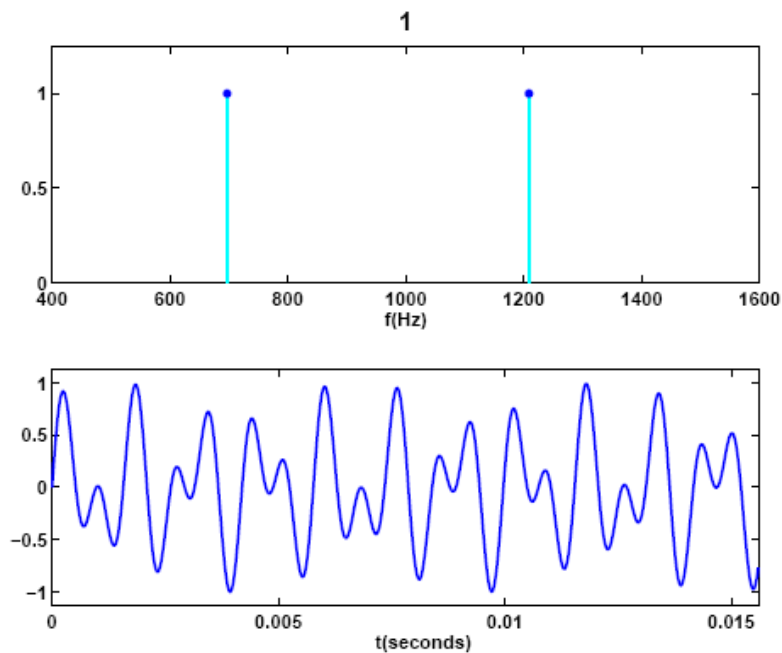
$y_2 = \sin(2\pi \cdot f_c(j) \cdot t);$

$y = (y_1 + y_2)/2;$

Σε υπολογιστές εξοπλισμένους με κάρτα ήχου, η εντολή

`sound(y, Fs)`

αναπαράγει αυτό τον τόνο. Η Εικόνα 1.5.1 είναι γραφική απεικόνιση του τόνου που αντιστοιχεί στο πλήκτρο «1». Το άνω διάγραμμα εικονίζει τις δύο συχνότητες και το κάτω διάγραμμα ένα μέρος του σήματος που προκύπτει από την υπέρθεση των ημιτονοειδών αυτών των συχνοτήτων.



Εικόνα 1.5.1. Ο τόνος που παράγεται από το πλήκτρο «1»

Το αρχείο δεδομένων *touchtone.mat* περιέχει μία καταγραφή επιλεγόμενου τηλεφωνικού αριθμού. Είναι δυνατός ο προσδιορισμός του αριθμού ακούγοντας το παραγόμενο σήμα; Η εντολή

`load touchtone`

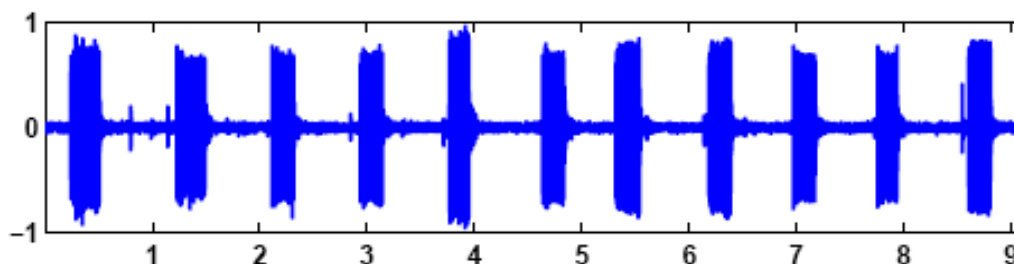
φορτώνει ένα σήμα y και τον ρυθμό δειγματοληψίας του σήματος F_s στην μνήμη του Matlab. Προκειμένου να μικρύνει το μέγεθος του αρχείου, το άνυσμα y έχει σωθεί με 8-bit ακέραια στοιχεία που κυμαίνονται στο εύρος τιμών $-127 \leq y_k \leq 127$. Η εντολή

$y = \text{double}(y)/128;$

κανονικοποιεί το άνυσμα και μετατρέπει τα στοιχεία του σε διπλής ακριβείας για μετέπειτα χρήση. Οι εντολές

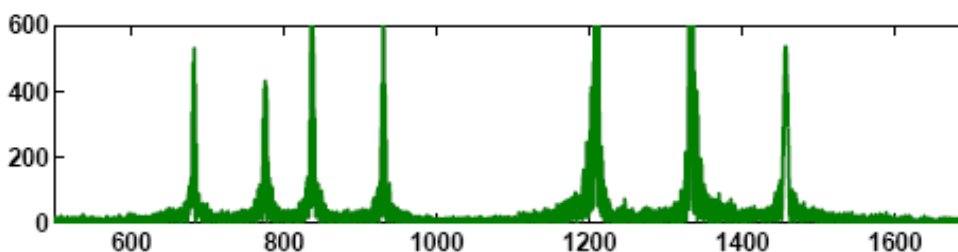
```
n = length(y);
t = (0:n-1)/Fs
```

αναπαράγουν τους χρόνους δειγματοληψίας της καταγραφής. Το τελευταίο στοιχείο του άνυσματος t είναι 9.1309, και δείχνει ότι η καταγραφή διήρκεσε λίγο περισσότερο των εννέα δευτερολέπτων. Η Εικόνα 1.5.2 αποτελεί γραφική παράσταση ολοκλήρου του σήματος



Εικόνα 1.5.2. Καταγραφή ενός ενδεκαψήφιου τηλεφωνικού αριθμού

Το σήμα της Εικ. 1.5.2 περιέχει θόρυβο! Για παράδειγμα, είναι ορατοί δια γυμνού οφθαλμού, οι μικροί παλμοί που εμφανίζονται την στιγμή που πλήττονται τα πλήκτρα (παροδικά κλεισίματος). Όπως φαίνεται, έχουν χρησιμοποιηθεί 11 πλήκτρα, αλλά στην κλίμακα του γραφήματος είναι αδύνατον να προσδιορισθεί η ακριβής ακολουθία ψηφίων. Η Εικόνα 1.5.3 δείχνει το πλάτος του μετασχηματισμού Fourier του σήματος, υπολογισμένο με τεχνική πεπερασμένου μετασχηματισμού *Fourier*, μέσω της οποίας μπορούν να προσδιορισθούν τα επιλεγθέντα πλήκτρα.

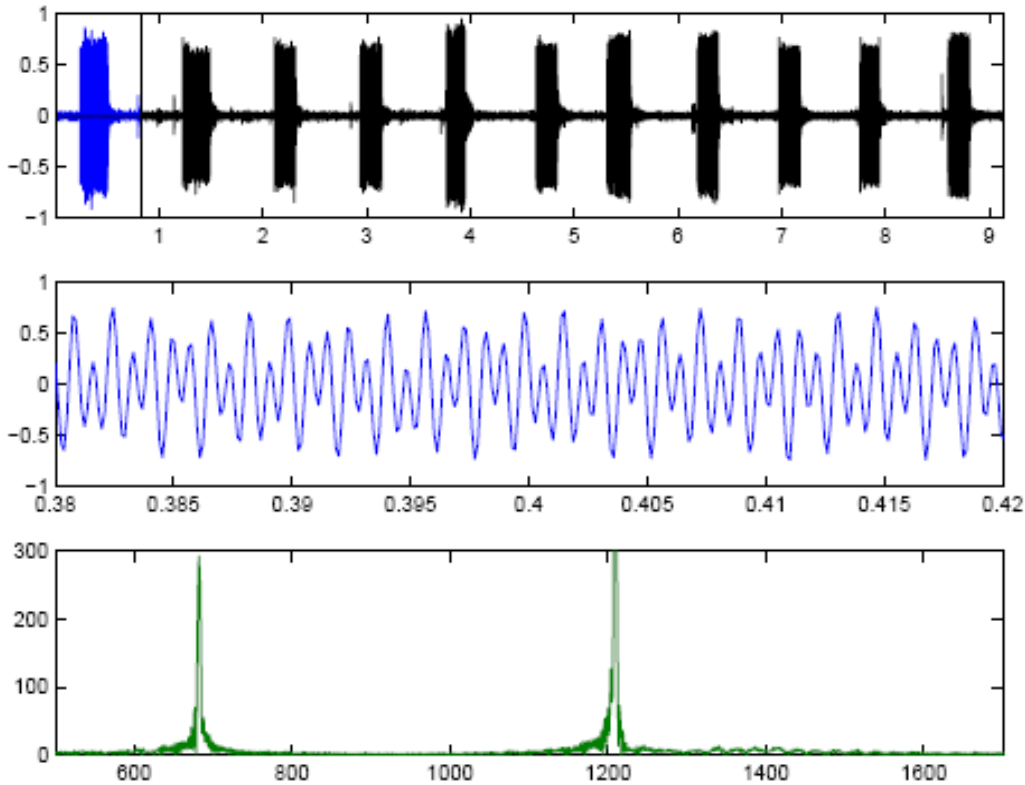


Εικόνα 1.5.3. Μετασχηματισμένη Fourier του σήματος της Εικ. 1.5.2.

Το Γράφημα 1.5.3 κατασκευάστηκε με τις εντολές

```
p = abs(fft(y));
f = (0:n-1)*(Fs/n);
plot(f,p);
axis([500 1700 0 600])
```

Ο άξονας- x αντιπροσωπεύει την συχνότητα και τα όριά του περιορίζουν το γράφημα αυστηρά στα όρια των συχνοτήτων DTMF. Διακρίνονται επτά φασματικές κορυφές, οι οποίες αντιστοιχούν στις επτά θεμελιώδεις συχνότητες. Ο συγκεκριμένος μετασχηματισμός Fourier φανερώνει ότι και οι επτά συχνότητες είναι παρούσες κάπου στο σήμα, αλλά δεν βοηθά στον προσδιορισμό της ακριβούς ακολουθίας ψηφίων! Το πρόγραμμα *touchtone.m* επιτρέπει την αποσύνθεση του σήματος σε ένδεκα ίσα τεμάχια και την ανάλυση εκάστου τεμαχίου ξεχωριστά. Η Εικόνα 1.5.4 παρουσιάζει το πρώτο από αυτά τα τεμάχια.



Εικόνα 1.5.4. Το πρώτο ψηφίο του τηλεφωνικού αριθμού και η μετασχηματισμένη Fourier του.

Το τεμάχιο αυτό περιέχει μόνο δύο φασματικές κορυφές, πράγμα που φανερώνει ότι περιέχει μόνο δύο από τις θεμελιώδεις συχνότητες, οι οποίες συμβαίνει να αντιστοιχούν στο πλήκτρο «1». Είναι επίσης προφανές ότι η *κυματομορφή* του πρώτου τεμαχίου ομοιάζει με την κυματομορφή που συντέθηκε για το πλήκτρο «1» (Εικ. 1.5.1). Έτσι, είμαστε σε θέση να συμπεράνουμε ότι το πρώτο πλήκτρο που επιλέχθηκε αντιστοιχεί στον αριθμό 1.

Άσκηση: Συνεχίσατε την ανάλυση και αναγνωρίσατε τον αριθμό που αντιπροσωπεύει το σήμα της Εικ. 1.5.2.

1.5.2 Πεπερασμένος Μετασχηματισμός Fourier

Στην παρούσα ανάλυση ο μαθηματισμός συμβολισμός εφαρμόζει την σύμβαση προσήμου που ακολουθείται στην επιστήμη ανάλυσης σήματος² και $j = \sqrt{-1}$ η μιγαδική μονάδα. Κατά την σύμβαση αυτή, ο *πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier* (*Finite Fourier Transform* ή *FFT*) ενός μιγαδικού άνυσματος y με N στοιχεία καταλήγει σε ένα άλλο μιγαδικό άνυσμα Y επίσης με N στοιχεία, της μορφής

$$Y_k = \sum_{i=1}^{N-1} y_i e^{-j2\pi ki/N} .$$

Η αντιστοιχία της ανωτέρω διατύπωσης με την συμβολισμό που χρησιμοποιήθηκε στα Μέρη 1.2 – 1.4 είναι προφανής εάν κανείς δει ότι $t = i/N$ (*διακριτός χρόνος*) και $\omega = 2\pi k$ (*διακριτή γωνιακή συχνότητα*). Έτσι, οι δείκτες i και k που διατρέχουν το διάστημα $[0, N-1]$ αντιπροσωπεύουν, ο μεν πρώτος το χρόνο που αυξάνεται κατά διάστημα $1/N$, ο δε δεύτερος την συ-

² Αριστερόστροφο σύστημα μιγαδικών συντεταγμένων.

χρότητα. Τέλος, σημειώνεται ότι $e^{-j2\pi/N}$ είναι η N -στη μιγαδική ρίζα της μιγαδικής μονάδας. Ο ούτω διατυπωμένος μετασχηματισμός Fourier μπορεί να εκφρασθεί με την μορφή συστήματος εξισώσεων με την μορφή

$$\mathbf{Y} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{y},$$

όπου η *μήτρα* \mathbf{F} του μετασχηματισμού, ή *μετασχηματίζουσα Fourier*, έχει στοιχεία

$$f_{kj} = e^{-j2\pi ki/N}.$$

Η μήτρα \mathbf{F} είναι σχεδόν *αυταντίστροφη*! Ειδικότερα, εάν \mathbf{F}^H , είναι η *μιγαδική συζυγής* της \mathbf{F} ,

$$\mathbf{F}^H \mathbf{F} = \mathbf{N} \mathbf{I},$$

ώστε

$$\mathbf{F}^{-1} = \frac{1}{N} \mathbf{F}^H$$

Αυτό επιτρέπει την αντιστροφή του FFT ως εξής:

$$\mathbf{y} = \frac{1}{N} \mathbf{F}^H \mathbf{Y}$$

από όπου

$$y_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} Y_k e^{-j2\pi ki/N}$$

Στο Matlab, η μετασχηματίζουσα Fourier μπορεί να δημιουργηθεί για κάθε N με τις εντολές

```
omega = exp(-2*pi*i/N);
j = 0:N-1;
k = j';
F = omega.^(k*j);
```

Το μέγεθος $k*j$ είναι ένα *εξωτερικό γινόμενο*, ένας πίνακας $N \times N$, του οποίου τα στοιχεία είναι γινόμενα των στοιχείων δύο ανυσμάτων. Ακόμη πιο εύκολα, η συνάρτηση `fft` παράγει τον FFT εκάστης στήλης ενός πίνακα-ορίσματος, οπότε η μετασχηματίζουσα \mathbf{F} μπορεί να κατασκευασθεί ταχύτερα με την πράξη

$$\mathbf{F} = \text{fft}(\text{eye}(N))$$

Η συνάρτηση `fft` εφαρμόζει ένα *ταχύ αλγόριθμο* υπολογισμού του FFT, οπότε το αρχικό «F» μπορεί εναλλακτικά να σημαίνει «fast» ή «finite». Πιθανόν να ήταν ακριβέστερη η χρήση του όρου FFFT, αλλά μέχρι τώρα κανείς δεν τον έχει υιοθετήσει. Σε εύθετο χρόνο θα συζητηθεί και η τεχνική επιτάχυνσης του μετασχηματισμού.

1.5.3 fftgui

Η *γραφική διεπαφή* (*graphical user interface – GUI*) που κατασκευάζεται με το πρόγραμμα `fftgui.m` επιτρέπει την διερεύνηση των ιδιοτήτων του πεπερασμένου μετασχηματισμού Fourier. Εάν \mathbf{y} είναι ένα άνυσμα περιέχον μερικές δεκάδες στοιχεία, τότε η πράξη

```
fftgui(y)
```

κατασκευάζει τέσσερα διαγράμματα:

```
real(y)           imag(y)
real(fft(y))     imag(fft(y))
```

Ο χρήστης μπορεί να χρησιμοποιήσει τον δρομέα (ποντίκι) για να μετακινήσει οιοδήποτε σημείο του σήματος ή της μετασχηματισμένης σε οιοδήποτε γράφημα, και τα σημεία όλων των άλλων γραφημάτων αποκρίνονται αυτόματα στις μεταβολές.

Ως άσκηση, εκτελέσατε το `fftgui` και δοκιμάσατε τη ανάλυση των ακόλουθων παραδειγμάτων, ένα εκ τω οποίων επιδεικνύει μία ιδιότητα του μετασχηματισμού Fourier. Εάν η εκτέλεση γίνει χωρίς όρισμα,

```
fftgui
```

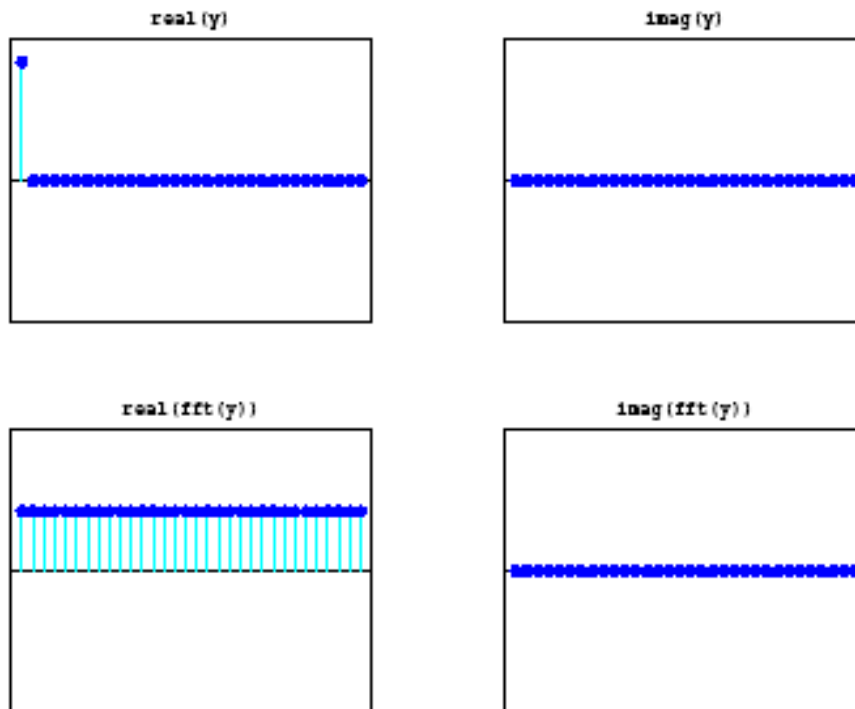
και τα τέσσερα γραφήματα κατασκευάζονται με βάση την κυματομορφή `zeros(1,32)`, δηλαδή χωρίς σήμα. Πιέσατε το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού με τον δρομέα πλησίον της άνω-αριστερής γωνίας του άνω-αριστερού γραφήματος. Με τον τρόπο αυτό υπολογίζετε τον FFT *ακαριαίου παλμού* στον χρόνο μηδέν, ο οποίος παρίσταται με τιμή «1» στο το πρώτο σημείο και «0» σ' όλα τα υπόλοιπα. Η πράξη αυτή θα παράξει την Εικόνα 1.5.5. Το πραγματικό μέρος του μετασχηματισμού είναι *σταθερό* και το φανταστικό μέρους μηδέν. Αυτό προκύπτει και από τον ορισμό

$$Y_k = \sum_{i=1}^{N-1} y_i e^{-j2\pi ki/N}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1,$$

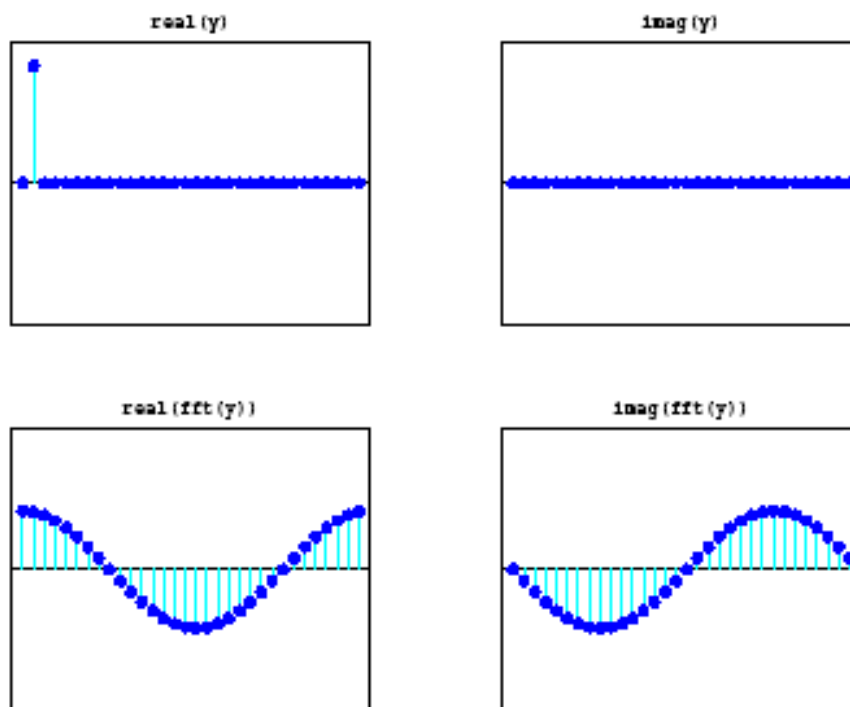
εάν $y_0 = 1$ and $y_1 = y_2 = \dots = y_{N-1} = 0$. Το αποτέλεσμα είναι

$$Y_k = 1 \cdot e^{-j2\pi k/N} + 0 + \dots + 0 = 1 \text{ για κάθε } k.$$

Τώρα ξαναπιέσατε το αριστερό πλήκτρο στο y_0 , κρατήσατέ το κάτω (πατημένο) και μετακινήσατε τον δρομέα κατακορύφως. Θα διαπιστώσετε ότι το σταθερό πλάτος του πραγματικού μέρους της μετασχηματισμένης προσαρμόζεται καταλλήλως.



Εικόνα 1.5.5. Η μετασχηματισμένη Fourier του ακαριαίου παλμού στον χρόνο μηδέν είναι σταθερά.



Εικόνα 1.5.6. Η μετασχηματισμένη Fourier του ακαριαίου παλμού στον χρόνο 1 είναι ένα καθαρό ημιτονοειδές.

Τώρα δοκιμάσατε να μετασχηματίσετε τον ακαριαίο παλμό στον χρόνο 1: χρησιμοποιήσατε το ποντίκι για να θέσετε $y_0 = 0$ και $y_1 = 1$. Αυτό θα οδηγήσει στην Εικόνα 1.5.6, στην οποία βλέπετε ένα διάγραμμα της μετασχηματισμένης

$$Y_k = 0 + 1 \cdot e^{-j2\pi k/N} + 0 + \dots + 0.$$

Η N -στη ρίζα της μονάδας μπορεί επίσης να γραφεί ως $\cos\delta \pm j\sin\delta$, όπου $\delta = 2\pi/N$. Συνακολούθως, για $k = 0, 1, \dots, N-1$,

$$\operatorname{Re}(Y_k) = \cos k\delta, \quad \operatorname{Im}(Y_k) = -\sin k\delta.$$

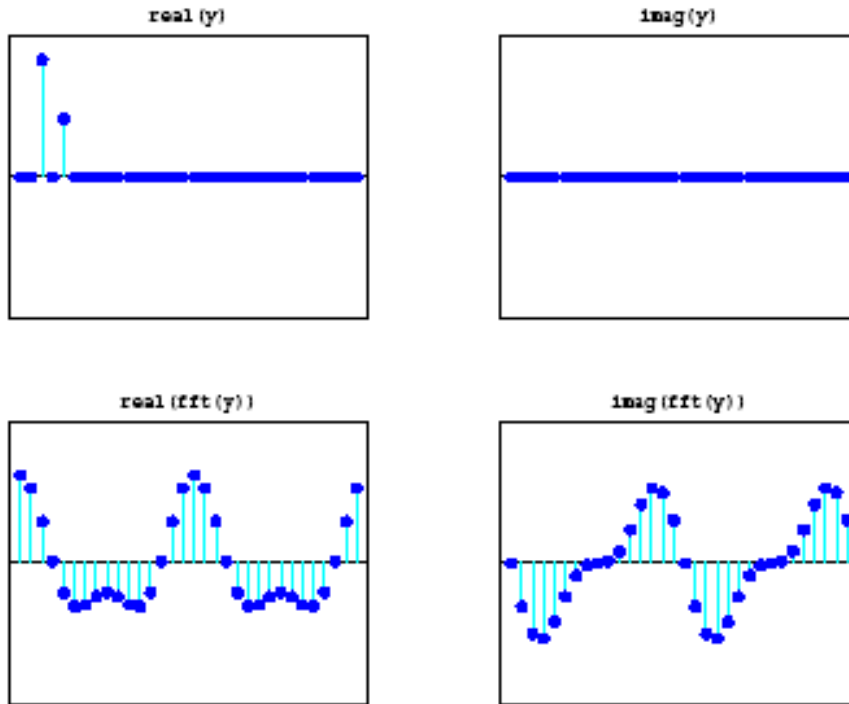
Με τον τρόπο αυτό «υπολογίσαμε» δύο ημιτονοειδείς τριγωνομετρικές συναρτήσεις σε N ισαπέχουσες αποστάσεις εντός του διαστήματος $0 \leq x < 2\pi$. Το πρώτο δείγμα αυτών των συναρτήσεων βρίσκεται στο σημείο $x = 0$ και το τελευταίο στο σημείο $x = 2\pi - \delta$.

Τώρα, θέσατε $y_2 = 1$ και μεταβάλλατε το y_4 με το ποντίκι. Ένα στιγμιότυπο αυτής της άσκησης παρουσιάζεται στην Εικόνα 1.5.7 στην οποία έχει δημιουργηθεί γράφημα των

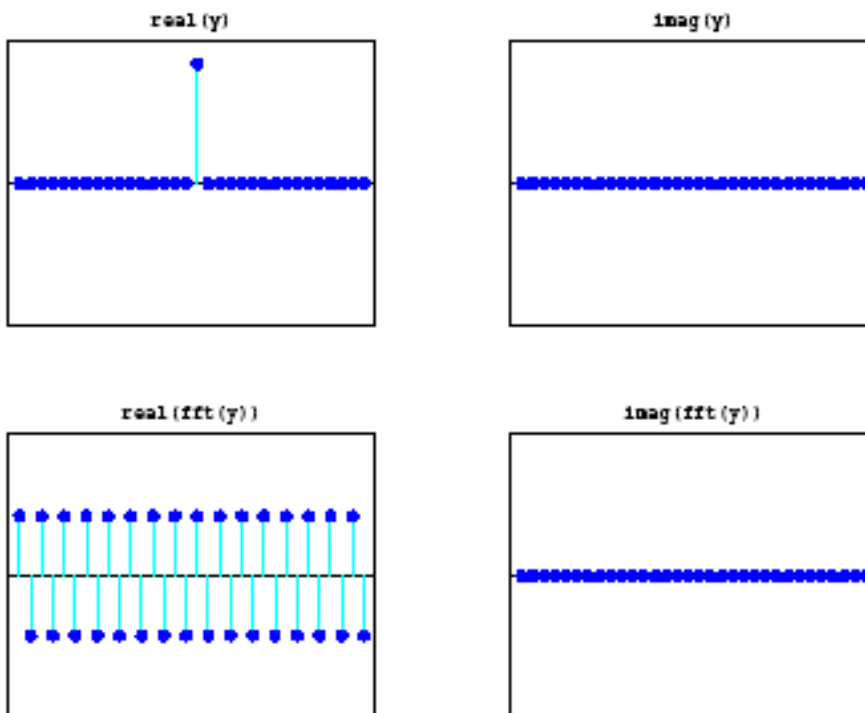
$$\cos 2k\delta + m \cos 4k\delta \quad \text{και} \quad -\sin 2k\delta - m \sin 4k\delta$$

για δεδομένο $m = y_4$.

Το σημείο ακριβώς αριστερά από το μέσο του άξονα- x είναι ιδιαίτερα σημαντικό και είναι γνωστό με τον όρο *σημείο Nyquist*. Με αρίθμηση από 0 έως $N-1$, για άρτιο N , αυτό αντιπροσωπεύει το σημείο με δείκτη $N/2$. Εάν $N = 32$, τότε αυτή είναι η συχνότητα υπ' αριθμό 16. Η Εικόνα 1.5.8 δείχνει ότι ο FFT ενός μοναδιαίου ανύσματος στο σημείο Nyquist αποτελείται από μία ακολουθία εναλλασσομένων +1 and -1. Εφόσον ο FFT παράγει ημιτονοειδείς συναρτήσεις (αρμονικές), προκύπτει ότι το σημείο Nyquist αντιπροσωπεύει την μεγαλύτερη δυνατή αρμονική (συχνότητα) που περιέχεται στην κυματομορφή y .



Εικόνα 1.5.7. Η μετασχηματισμένη Fourier είναι το άθροισμα δύο ημιτονοειδών



Εικόνα 1.5.8. Το σημείο (συχνότητα) Nyquist

Η ενασχόληση με το `fftgui` θα κλείσει με την μελέτη των συμμετριών του FFT. Κάνετε αρκετά τυχαία κλικ στο διάγραμμα `real (y)`. Αφήστε το διάγραμμα `imag (y)` σταθερό στο μηδέν για όλα τα σημεία. Η Εικόνα 1.5.9 δείχνει ένα παράδειγμα αυτής της άσκησης. Παρατηρήσατε προσεκτικά τα δύο διαγράμματα του FFT. Αγνοώντας το πρώτο σημείο σε κάθε διάγραμμα, το γράφημα του πραγματικού μέρους του FFT είναι *συμμετρικό* εκατέρωθεν του ση-

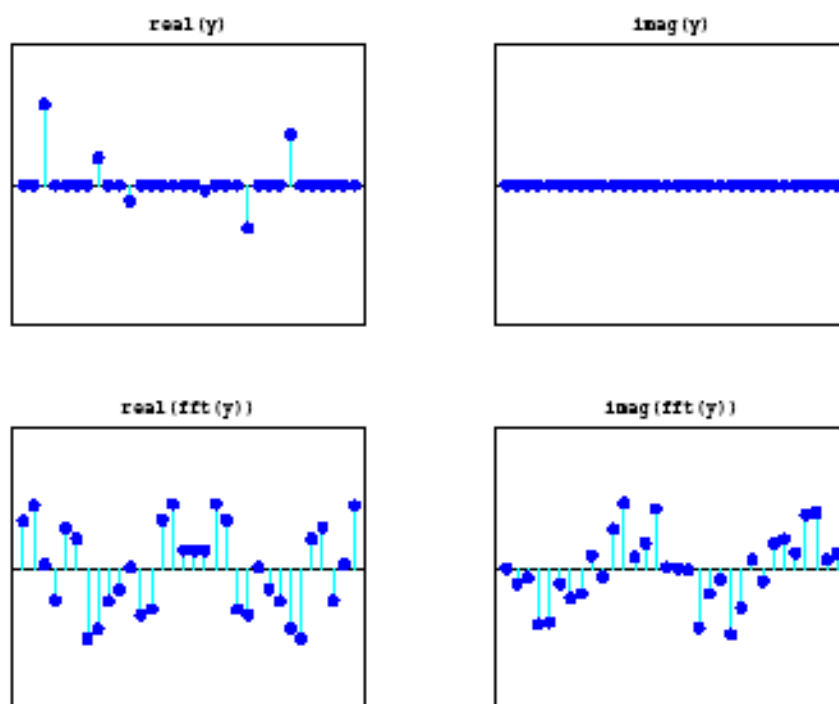
μείου Nyquist και το γράφημα του φανταστικού μέρους είναι *αντισυμμετρικό*. Ακριβέστερα, εάν y είναι οιοδήποτε πραγματικό άνυσμα μήκους N , δηλ. εάν τα στοιχεία του αποτελούνται από πραγματικούς αριθμούς, και $Y = \text{fft}(y)$, τότε

$$\text{Re}(Y_0) = \sum y_i$$

$$\text{Im}(Y_0) = 0$$

$$\text{Re}(Y_i) = \text{Re}(Y_{N-i}), \quad i = 1, 2, \dots, N/2$$

$$\text{Im}(Y_i) = -\text{Im}(Y_{N-i}), \quad i = 1, 2, \dots, N/2$$



Εικόνα 1.5.9. Συμμετρία εκατέρωθεν της συχνότητας Nyquist.

1.5.4 Ηλιακές Κηλίδες

Έχει επισημανθεί από πολύ παλαιούς χρόνους, ότι η επιφάνεια του Ηλίου δεν είναι σταθερή ούτε ομοιόμορφη, αλλά ότι συχνά εμφανίζονται σκοτεινότερες ζώνες (κηλίδες) σε τυχαίες θέσεις αλλά με σαφή περιοδικότητα. Η δραστηριότητα αυτή συσχετίζεται με μετεωρολογικά (καιρός) και άλλα φυσικά φαινόμενα που έχουν και οικονομικό ενδιαφέρον. Το 1848, ο Rudolf Wolfer πρότεινε έναν κανόνα με τον οποίο συνδύαζε τον αριθμό και το μέγεθος των κηλίδων σε ένα μοναδικό δείκτη ηλιακής δραστηριότητας. Ερευνώντας αρχαιακά δεδομένα, οι σύγχρονοι αστρονόμοι κατόρθωσαν να εφαρμόσουν το κανόνα του Wolfer προκειμένου να εκτιμήσουν τον δείκτη ηλιακής δραστηριότητας μέχρι το έτος 1700. Σήμερα ο δείκτης ηλιακών κηλίδων μετράται από πολλούς αστροφυσικούς ανά τον κόσμο και η (παγκόσμια) διαχείριση και διανομή των δεδομένων συντονίζεται από το Κέντρο Δεδομένων Ηλιακών Επιδράσεων (Solar Influences Data Center) στο Βασιλικό Παρατηρητήριο του Βελγίου³.

³ Solar Influences Data Center, <http://sidc.oma.be>.

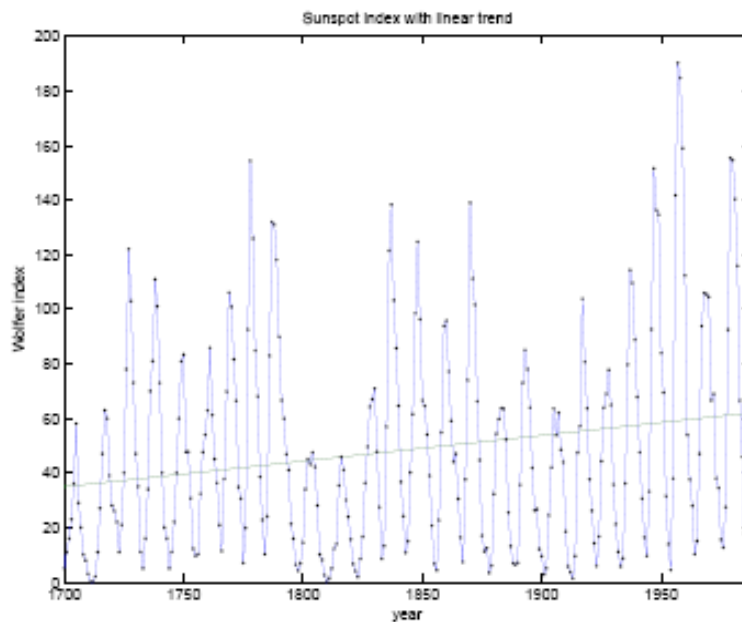
Το αρχείο (ASCII) *sunspot.dat* περιλαμβάνει δύο στήλες: η πρώτη στήλη αφορά στα έτη από το 1700 ως το 1987 και η δεύτερη στον μέσο ετήσιο αριθμό (δείκτη) Wolfer. Τα δεδομένα εισάγονται στο Matlab με τις εντολές:

```
load sunspot.dat
t = sunspot(:,1)';
wolfer = sunspot(:,2)';
n = length(wolfer);
```

Τα δεδομένα εμφανίζουν μία σαφή μακροπρόθεσμη (άρα πολύ αργή) αυξητική τάση. Αυτή μπορεί να προσδιορισθεί μέσω της προσαρμογής μίας ευθείας γραμμής με την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων (η οποία θα συζητηθεί αργότερα):

```
c = polyfit(t,wolfer,1);
trend = polyval(c,t);
plot(t,[wolfer; trend],'-',t,wolfer,'k.')
xlabel('year')
ylabel('Wolfer index')
title('Sunspot index with linear trend')
```

Το αποτέλεσμα φαίνεται στην Εικόνα 1.5.10. Η κυκλική (περιοδική) φύση του φαινομένου είναι σαφέστατη: οι κορυφές και κοιλάδες της μεταβολής του δείκτη απέχουν μεταξύ τους λίγο περισσότερο από 10 έτη.



Εικόνα 1.5.10. Ο δείκτης ηλιακών κηλίδων (ηλιακής δραστηριότητας)

Αφαιρούμε την γραμμική τάση και υπολογίζουμε τον πεπερασμένο μετασχηματισμό Fourier:

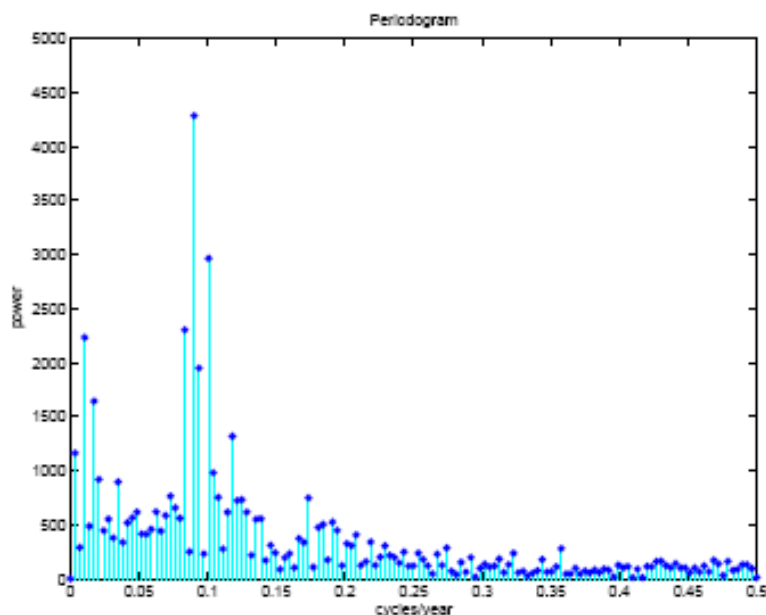
```
y = wolfer - trend;
Y = fft(y);
```

Το άνυσμα $|Y|^2$ παριστά την *ενέργεια* που περιέχεται στο σήμα. Η γραφική παράσταση της ενέργειας συναρτήσει της συχνότητας ονομάζεται *περιοδογράφημα*. Σε γενικές γραμμές, και εάν δεν υπάρχουν ειδικότεροι λόγοι, προτιμάται η κατασκευή γραφικών παραστάσεων του $|Y|^2$ αντί του $|Y|$, κυρίως διότι η κλίμακα του άξονα- y είναι ευκολότερα διαχειρίσιμη. Ο ρυθμός δειγματοληψίας της συγκεκριμένης χρονοσειράς είναι μία παρατήρηση ετησίως, οπότε η *συχνότητα* έχει μονάδες *κύκλων/έτος*.

```

Fs = 1; % Sample rate
f = (0:n/2)*Fs/n;
pow = abs(Y(1:n/2+1));
pmax = 5000;
plot([f; f],[0*pow; pow],'c-', f,pow,'b.', ...
      'linewidth',2,'markersize',16)
axis([0 .5 0 pmax])
xlabel('cycles/year')
ylabel('power')
title('Periodogram')

```



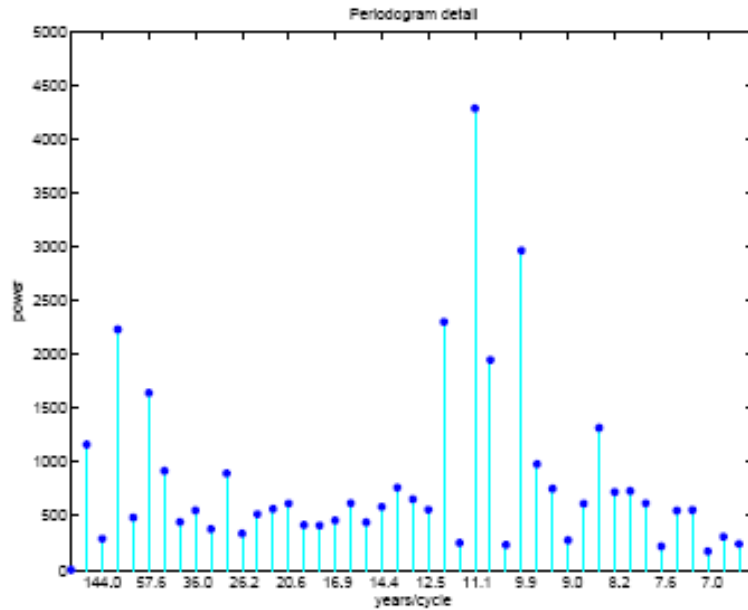
Εικόνα 1.5.11. Περιοδογράφημα του δείκτη ηλιακών κηλίδων

Το μέγιστο της ενέργειας εντοπίζεται στην συχνότητα 0.09 κύκλων/έτος. Η περίοδος (σε έτη/κύκλο) του μεγίστου λαμβάνεται αντιστρέφοντας την συχνότητα. Για να μελετήσουμε καλύτερα το αποτέλεσμα, θα μεγεθύνουμε το πρώτο μέρος του γραφήματος της Εικ. 1.5.11 και θα χρησιμοποιήσουμε την *αντίστροφη συχνότητα* ως ανεξάρτητη μεταβλητή (άξονας- x):

```

k = 0:44;
f = k/n;
pow = pow(k+1);
plot([f; f],[0*pow; pow],'c-',f,pow,'b.', ...
      'linewidth',2,'markersize',16)
axis([0 max(f) 0 pmax])
k = 2:3:41;
f = k/n;
period = 1./f;
periods = sprintf('%5.1f|',period);
set(gca,'xtick',f)
set(gca,'xticklabel',periods)
xlabel('years/cycle')
ylabel('power')
title('Periodogram detail')

```



Εικόνα 1.5.12. Λεπτομέρεια του περιοδογραφήματος της Εικ. 1.5.11 που δείχνει τον ενδεκαετή ηλιακό κύκλο.

Το αποτέλεσμα (Εικ. 1.5.12), όπως αναμενόταν, εμφανίζει ένα κύριο κύκλο (περίοδο) με μήκος περί τα 11.1 έτη. Αυτό σημαίνει ότι σ' ολόκληρη την χρονοσειρά των τελευταίων 300 ετών, η περίοδος του ηλιακού κύκλου (δραστηριότητας) είναι κάτι περισσότερο από 11 έτη.

1.5.5 Περιοδικές Χρονοσειρές

Οι τόνοι που παράγονται από ένα τονικό τηλέφωνο και ο δείκτης ηλιακής δραστηριότητας του Wolfer αποτελούν δύο παραδείγματα περιοδικών χρονοσειρών, ήτοι συναρτήσεων του χρόνου που εμφανίζουν περιοδική συμπεριφορά και επαναλαμβάνονται στο διηνεκές, τουλάχιστον κατά προσέγγιση. Η ανάλυση Fourier επιτρέπει την εκτίμηση της περιόδου ενός κυκλικού φαινομένου με βάση μία σειρά διακριτών παρατηρήσεων του φαινομένου, δειγματοσιμένων με σταθερό ρυθμό. Ο ακόλουθος πίνακας δείχνει την σχέση μεταξύ των μεγεθών που περιλαμβάνονται στην ανάλυση.

Y	Δεδομένα
F_s	Αριθμός δειγμάτων ανά μονάδα χρόνου
$n = \text{length}(y)$	Ολικός αριθμός δειγμάτων
$t = (0:n-1)/F_s$	Ολική διάρκεια δειγματοληψίας
$dt = 1/F_s$	Χρονική απόσταση μεταξύ δειγμάτων
$Y = \text{fft}(y)$	Πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier
$\text{abs}(Y)$	Πλάτος φασματικού (συχνοτικού) περιεχομένου
$\text{abs}(Y) .^2$	Ενέργεια φασματικού (συχνοτικού) περιεχομένου
$f = (0:n-1) * (F_s/n)$	Συχνότητα (κύκλοι/μονάδα χρόνου)
$(n/2) * (F_s/n) = F_s/2$	Συχνότητα Nyquist
$p = 1./f$	Περίοδος, μονάδα χρόνου/κύκλο φαινομένου.

Το περιοδογράφημα είναι η γραφική παράσταση του πλάτους της μετασχηματισμένης Fourier $|Y|$ ή $\text{abs}(Y)$, ή της ενέργειας $|Y|^2$ ή $\text{abs}(Y) .^2$, συναρτήσεως της συχνότητας f . Συνήθως αναπαρίσταται μόνο το πρώτο μισό της μετασχηματισμένης (θετικές συχνότητες) διότι το

δεύτερο μισό (αρνητικές συχνότητες) δεν είναι παρά μία ανάκλαση του πρώτου μισού ως προς την συχνότητα Nyquist.

1.5.6 Ταχύς Πεπερασμένος Μετασχηματισμός Fourier

Με τα δεδομένα της σύγχρονης επιστήμης και τεχνολογίας, οι μετασχηματισμοί μονοδιάστατων χρονοσειρών (ανυσμάτων) με μήκος μερικών εκατομμυρίων δειγμάτων ή διδιάστατων πινάκων της τάξης των δεκάδων χιλιάδων επί δεκάδες χιλιάδων δειγμάτων αποτελούν εργασίες ρουτίνας. Κατά συνέπεια, η επιτυχής επεξεργασία σήματος και εικόνας βασίζεται στην δυνατότητα εκτέλεσης των μετασχηματισμών με υψηλή ταχύτητα και ακρίβεια.

Η άμεση εφαρμογή του ορισμού του FFT

$$Y_k = \sum_{i=1}^{N-1} y_i e^{-j2\pi ki/N}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

απαιτεί N πολλαπλασιασμούς και N προσθέσεις για κάθε μία από τις N συνιστώσες του Y και συνολικά $2N^2$ πράξεις κινητής υποδιαστολής. Ο αριθμός αυτός δεν περιλαμβάνει την διαδικασία υπολογισμού των δυνάμεων $(e^{-2\pi j/N})^{ik}$. Όπως είναι προφανές, το πλήθος των αριθμητικών πράξεων είναι τέτοιο, ώστε εάν δεν υπάρξει τρόπος επιτάχυνσης των υπολογισμών, η εφαρμογή του FFT τους σε πραγματικό χρόνο θα είναι πολύ δύσκολη άνευ μαζικής υπολογιστικής ισχύος.

Σε απάντηση αυτού του προβλήματος, πολλοί (ανεξάρτητοι) ερευνητές εφηύραν αλγορίθμους ταχέος FFT και πολλοί περισσότεροι συνέβαλλαν στην περαιτέρω ανάπτυξη και επέκτασή τους. Ο πλέον εύχρηστος αυτών των αλγορίθμων προτάθηκε το 1965 από τους John Tukey (Πανεπιστήμιο Princeton) και John Cooley (IBM Research) και γενικά θεωρείται ορόσημο για την γενικευμένη εφαρμογή του FFT.

Οι σύγχρονοι αλγόριθμοι ταχέος FFT προσφέρουν υπολογιστική περιπλοκότητα της τάξης $O(N \cdot \log 2N)$ αντί για $O(n^2)$ που αναφέρθηκε παραπάνω. Εάν N είναι δύναμη του 2, ένας μονοδιάστατος ταχύς FFT μήκους N απαιτεί λιγότερες από $3N \cdot \log 2N$ πράξεις κινητής υποδιαστολής. Για $N = 2^{20}$, ο μετασχηματισμός γίνεται 35000 φορές ταχύτερος από $2N^2$. Ακόμη και όταν $N = 1024 = 2^{10}$, ο παράγοντας επιτάχυνσης είναι περίπου 70. Το Matlab χρησιμοποιεί τους αλγορίθμους του πακέτου FFTW (*The Fastest Fourier Transform in the West*), που κατασκευάστηκαν στο MIT από τους Matteo Frigo και Steven G. Johnson⁴.

Η επιτάχυνση του FFT βασίζεται στο γεγονός ότι το τετράγωνο της $2N$ -στης ρίζας της μονάδας είναι η N -στη ρίζα της μονάδας. Χρησιμοποιώντας το μιγαδικό συμβολισμό

$$s = s_N = e^{-j2\pi/N}$$

έχουμε

$$s_{2N}^2 = s_N$$

Η κατασκευή του ταχέος αλγορίθμου αρχίζει με τον ορισμό του πεπερασμένου μετασχηματισμού Fourier

⁴ M. Frigo and S. G. Johnson, 1998. *FFTW: An adaptive software architecture for the FFT*, Proc. 1998 IEEE Intl. Conf. Acoustics Speech and Signal Processing, 3, pp. 1381-1384. <http://www.fftw.org>.

$$Y_k = \sum_{i=1}^{N-1} s^{ki} y_i, \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

Θεωρούμε ότι ο N είναι άρτιος και ότι $k \leq \frac{N}{2} - 1$. Χωρίζοντας το άθροισμα σε άρτιους και περιττούς όρους (δηλ. όρους με άρτιους και περιττούς δείκτες),

$$\begin{aligned} Y_k &= \sum_{\text{αρτιο } i} s^{ki} y_i + \sum_{\text{περιττό } i} s^{ki} y_i \\ &= \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} s^{2ki} y_{2i} + s^k \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} s^{2ki} y_{2i+1} \end{aligned}$$

Τα δύο αθροίσματα είναι βασικά FFT μήκους $N/2$, των μερισμάτων του σήματος y με άρτιους και περιττούς δείκτες. Για να πάρουμε ολόκληρο το μετασχηματισμό μήκους N , πρέπει να υπολογίσουμε δύο FFT μεγέθους $N/2$, να πολλαπλασιάσουμε έναν από αυτούς με δυνάμεις του s και να ενώσουμε τα αποτελέσματα. Η σχέση μεταξύ ενός FFT μήκους N και δύο FFT μήκους $N/2$ μπορεί να εκφραστεί με συμπαγή τρόπο στο Malab. Εάν $n = \text{length}(y)$ είναι άρτιος,

```
omega = exp(-2*pi*i/n);
k = (0:n/2-1)';
w = omega .^ k;
u = fft(y(1:2:n-1));
v = w.*fft(y(2:2:n));
```

οπότε

```
fft(y) = [u+v; u-v];
```

Τώρα, εάν ο N δεν είναι απλώς άρτιος αλλά και δύναμη του 2, η διαδικασία μπορεί να επαναληφθεί πολλές φορές. Ένας FFT μήκους N αναλύεται σε δύο FFT μήκους $N/2$, κατόπιν σε τέσσερες FFT μήκους $N/4$, μετά σε οκτώ FFT μήκους $N/8$ και ούτω καθεξής, μέχρι να φθάσουμε σε N FFT μήκους «ένα». Ο μετασχηματισμός ενός αριθμού (μήκους 1) δεν είναι παρά ο ίδιος ο αριθμός. Εάν $N = 2^p$, ο αριθμός των απαιτούμενων βημάτων είναι p . Δεδομένου ότι υπάρχει όγκος εργασίας $O(N)$ σε κάθε βήμα, ο συνολικός όγκος εργασίας θα είναι $O(Np) = O(N \log 2N)$.

Εάν N δεν είναι δύναμη του 2, είναι ακόμη δυνατόν να αναλύσουμε τον μετασχηματισμό μήκους N σε σειρά βραχύτερων μετασχηματισμών. Έτσι, ένας FFT μήκους 100 γίνεται δύο FFT μήκους 50 και τέσσερες FFT μήκους 25. Ο μετασχηματισμός μήκους 25 μπορεί να αναλυθεί σε πέντε FFT μήκους 5. Εάν ο N δεν είναι πρώτος αριθμός, ο πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier μπορεί να αναλυθεί σε FFT το μήκος των οποίων είναι παράγοντας του N . Ακόμη και όταν ο N είναι πρώτος, είναι δυνατόν να ενσωματώσουμε τον μετασχηματισμό σε έναν άλλο, το μήκος του οποίου μπορεί να παραγοντοποιηθεί. Τέτοιες λεπτομέρειες δεν θα συζητηθούν περαιτέρω.

Το ακόλουθο πρόγραμμα `ffttx.m` συνδυάζει τις δύο βασικές διαδικασίες που συζητήθηκαν μέχρι τώρα. Εάν N είναι δύναμη του 2, το πρόγραμμα χρησιμοποιεί τον $O(N \log 2N)$ ταχύ αλγόριθμο κάνοντας αναδρομική κλήση του εαυτού του. Εάν N είναι περιττός, χρησιμοποιεί τον ταχύ αναδρομικό αλγόριθμο μέχρι να φθάσει σε περιττό μήκος και μετά την ανυσματική υλοποίηση του FFT που προκύπτει από τον ορισμό του και συζητήθηκε στο Μέρος 1.5.2.

```
function y = ffttx(x)
%FFTTX Ταχύς Πεπερασμένος Μετασχηματισμός Fourier.
% Η συνάρτηση FFTTX(X) υπολογίζει τον ίδιο πεπερασμένο
% μετασχηματισμό με την FFT(X). Ο κώδικας εφαρμόζει ένα
% αναδρομικό «διαίρει και βασίλευσε» αλγόριθμο για άρτιο
```

```

% μήκος και πολλαπλασιασμό πινάκων για περιττό μήκος. Εάν
% length(X) είναι m*p όπου m περιττός και p δύναμη του 2,
% η υπολογιστική περιπλοκότητα αυτής της προσέγγισης είναι
% O(m^2)*O(p*log2(p)).

x = x(:);
n = length(x);
omega = exp(-2*pi*i/n);

if rem(n,2) == 0
    % Αναδρομική εφαρμογή ffttx
    k = (0:n/2-1)';
    w = omega .^ k;
    u = ffttx(x(1:2:n-1));
    v = w.*ffttx(x(2:2:n));
    y = [u+v; u-v];
else
    % Πίνακας Fourier.
    j = 0:n-1;
    k = j';
    F = omega .^ (k*j);
    y = F*x;
end

```

1.5.7. Ασκήσεις

1. Τροποποιήσατε το πρόγραμμα *touchtone.m* έτσι ώστε να μπορεί να καλεί έναν αριθμό ο οποίος εισάγεται ως όρισμα, π.χ. `touchtone('0030-210-727485')`.
2. Το κλιματολογικό φαινόμενο γνωστό ως *el Niño* προκύπτει από αλλαγές στην ατμοσφαιρική πίεση στον νότιο Ειρηνικό Ωκεανό. Ο δείκτης νότιας ταλάντωσης «*Southern Oscillation Index*» κατασκευάζεται με βάση την διαφορά πίεσης μεταξύ της Νήσου του Πάσχα και του Darwin στην Αυστραλία, όπως μετράται στην επιφάνεια της θάλασσας και κατά την αυτή χρονική στιγμή. Το ASCII αρχείο *elnino.dat* περιέχει μέσες μηνιαίες τιμές αυτού του δείκτη για την περίοδο 1962 – 1975 (14 έτη). Επιχειρήσατε να αναλύσετε τα δεδομένα του δείκτη νότιας ταλάντωσης ακολουθώντας μεθοδολογία όμοια με αυτή του παραδείγματος ηλιακών κηλίδων. Προσέξατε ότι στην προκειμένη περίπτωση η μονάδα χρόνου είναι ένας μήνας και όχι ένας χρόνος. Κατά συνέπεια πρέπει να αναμένετε ότι θα βρείτε ένα κύριο κύκλο με περίοδο 12 μηνών και ένα δεύτερο με μακρύτερη περίοδο. Αυτός ο δεύτερος κύκλος εμφανίζεται σε τρεις περίπου συντελεστές Fourier, έτσι ώστε να είναι δύσκολη η μέτρηση της διάρκειάς του. Παρ' όλα αυτά επιχειρήσατε μία εκτίμηση.
3. Το τραίνο σφυρά: Το Matlab προσφέρεται με παραδείγματα δεδομένων διαφόρων τύπων, μεταξύ των οποίων και αρκετά δείγματα ήχων. Ένα από αυτά είναι και ο συριγμός ατμοκίνητου τραίνου. Η εντολή `load train` θα φορτώσει αυτό το αρχείο στον χώρο εργασίας και περιέχει ένα μακρύ άνυσμα με την ηχογράφηση και ένα αριθμό F_s του οποίου η τιμή αντιπροσωπεύει τον αριθμό δειγμάτων ανά δευτερόλεπτο. Ο χρόνος δειγματοληψίας είναι $1/F_s$ δευτερόλεπτα. Μπορείτε να ακούσετε αυτό το σήμα με την εντολή `sound(y, Fs)`. Τα δεδομένα δεν παρουσιάζουν σημαντική γραμμική τάση. Ο συριγμός αποτελείται από δύο παλμούς με παρόμοιο συχνοτικό περιεχόμενο.
 - i. Κατασκευάσατε γραφική παράσταση των δεδομένων συναρτήσεως του χρόνου σε δευτερόλεπτα.

- ii. Κατασκευάσατε περιοδογράφημα με τον άξονα της συχνότητας σε κύκλους/ δευτερόλεπτο (Hz).
 - iii. Εντοπίστε τις συχνότητες των έξι φασματικών κορυφών στο περιοδογράφημα. Θα πρέπει να βρείτε ότι οι λόγοι μεταξύ αυτών των έξι συχνοτήτων προσεγγίζουν τους λόγους μεταξύ μικρών ακεραίων αριθμών. Για παράδειγμα, μία από τις συχνότητες είναι 5/3 φορές μίας άλλης. Οι συχνότητες που δεν αποτελούν ακέραια πολλαπλάσια άλλων συχνοτήτων είναι συνήθως χαμηλότερες και αποκαλούνται *θεμελιώδεις*. Οι συχνότητες που αποτελούν ακέραια πολλαπλάσια άλλων συχνοτήτων αποκαλούνται *αρμονικές* (*harmonics* ή *overtones*). Πόσες από τις φασματικές κορυφές που αναγνωρίσατε είναι *θεμελιώδεις* και πόσες και ποιές είναι *αρμονικές*;
4. Τιτιβίσματα πτηνών (chirps). Αναλύσατε τον ήχο τιτιβίσματος που περιέχεται στο παραδείγματα του Matlab. Αγνοώντας ένα βραχύ τμήμα του τέλους του σήματος, εξετάσατε κατά πόσο είναι δυνατόν να μερίσετε το σήμα σε οκτώ μέρη ίσου μήκους, έκαστο των οποίων να περιέχει ένα τιτιβίσμα (chirp). Απεικονίσατε γραφικές παραστάσεις του πλάτους του FFT εκάστου μέρους, χρησιμοποιώντας την συνάρτηση `subplot(4, 2, k)` για $k = 1 : 8$ και την *ίδια* κλίμακα αξόνων σε *όλα* τα γραφήματα. Οι συχνότητες κυμαίνονται από περίπου 400Hz μέχρι περίπου 800Hz. Θα πρέπει να παρατηρήσετε ότι ένα ή δύο από τα τιτιβίσματα έχουν πολύ χαρακτηριστικά γραφήματα. Εάν ακούσετε προσεκτικά, θα πρέπει να μπορέσετε να αναγνωρίσετε τους διαφορετικούς ήχους που αντιστοιχούν σ' αυτά.

1.7 Πίνακας Μετασχηματισμών Fourier κοινών συναρτήσεων

Στα επόμενα δίνονται σε κάθε περίπτωση

1. η (πραγματική) συνάρτηση $f(t)$ και
2. ο αντίστοιχος μετασχηματισμός Fourier $F(\omega)$.

Επίσης δίνονται οι γραφικές παραστάσεις

3. της $f(t)$ με πράσινο χρώμα,
4. της $\text{Re}\{F(\omega)\}$ με κόκκινο,
5. της $\text{Im}\{F(\omega)\}$ με ιώδες.

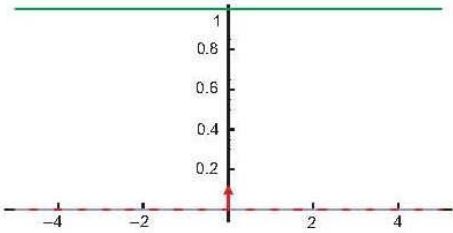
Στον οριζόντιο άξονα δίδονται οι τιμές των t και ω συγχρόνως. Στον κατακόρυφο άξονα δίδονται οι τιμές των $f(t)$ και $F(\omega)$ συγχρόνως. Έτσι φαίνονται η μορφή της $f(t)$ και η κατανομή της $F(\omega)$.

- Για μερικές $f(t)$ το $\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)| dt$ δεν υπάρχει, αλλά η $F(\omega)$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε τυπικούς (όχι αυστηρούς) υπολογισμούς.

$$f(t) = 1$$

$$F(\omega) = \sqrt{2\pi} \delta(\omega)$$

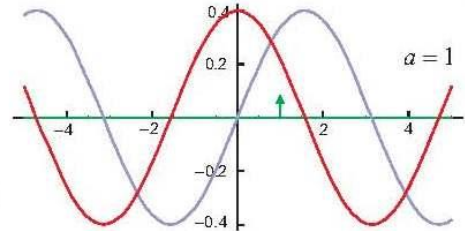
Σχ. 20-1



$$f(t) = \delta(t - a)$$

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ia\omega}$$

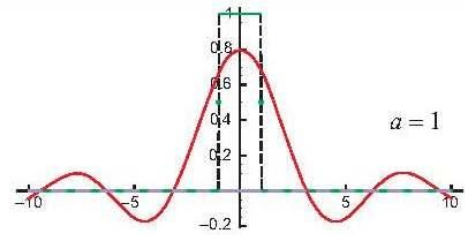
Σχ. 20-2



$$f(t) = \begin{cases} 1, & |t| < a \\ 0, & |t| > a \end{cases} \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin a\omega}{\omega}$$

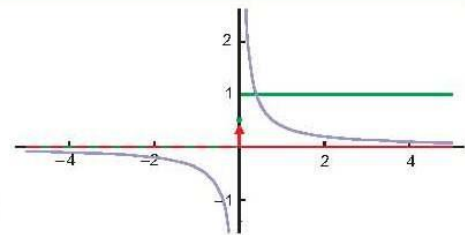
Σχ. 20-3



$$f(t) = \frac{1}{2} [1 + \text{sign}(t)]$$

$$F(\omega) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \delta(\omega) + \frac{i}{\sqrt{2\pi} \omega}$$

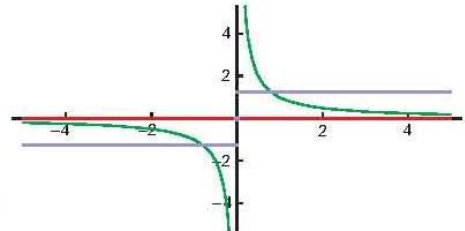
Σχ. 20-4



$$f(t) = \frac{1}{t}$$

$$F(\omega) = i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \text{sign}(\omega)$$

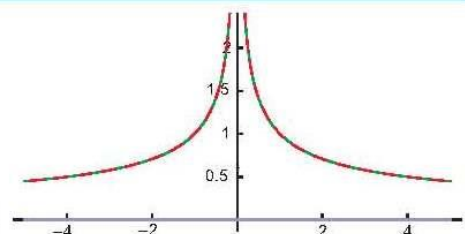
Σχ. 20-5



$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{|t|}}$$

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{|\omega|}}$$

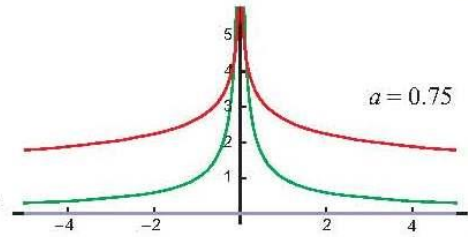
Σχ. 20-6



$$f(t) = \frac{1}{|t|^a}, \quad 0 < a < 1$$

$$F(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} |\omega|^{a-1} \Gamma(1-a) \sin\left(\frac{a\pi}{2}\right)$$

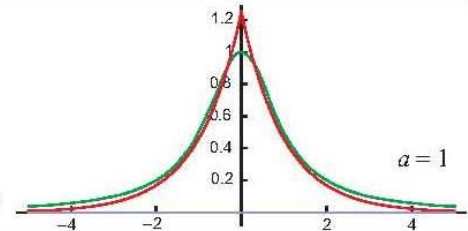
Σχ. 20-7



$$f(t) = \frac{1}{t^2 + a^2}, \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-a|\omega|}}{a}$$

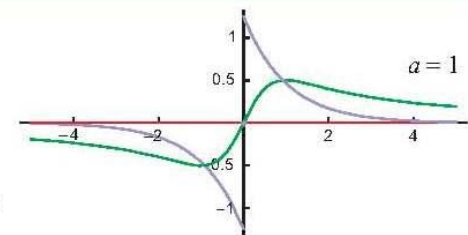
Σχ. 20-8



$$f(t) = \frac{t}{t^2 + a^2}, \quad a > 0$$

$$F(\omega) = i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \text{sign}(\omega) e^{-a|\omega|}$$

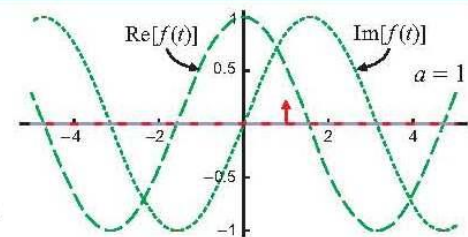
Σχ. 20-9



$$f(t) = e^{iat}$$

$$F(\omega) = \sqrt{2\pi} \delta(\omega + a)$$

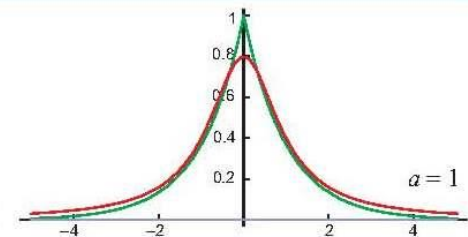
Σχ. 20-10



$$f(t) = e^{-a|t|}, \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{\omega^2 + a^2}$$

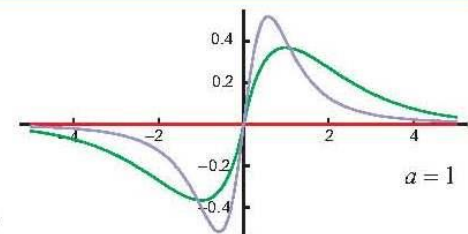
Σχ. 20-11



$$f(t) = te^{-a|t|}, \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2a\omega i}{(\omega^2 + a^2)^2}$$

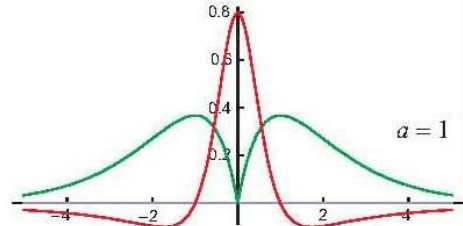
Σχ. 20-12



$$f(t) = |t|e^{-a|t|}, \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a^2 - \omega^2}{(\omega^2 + a^2)^2}$$

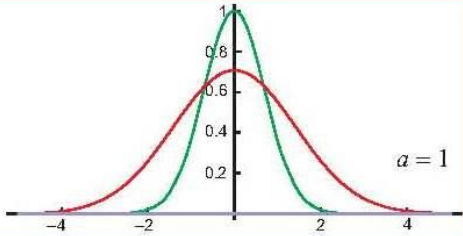
Σχ. 20-13



$$f(t) = \exp(-at^2), \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \exp\left(-\frac{\omega^2}{4a}\right)$$

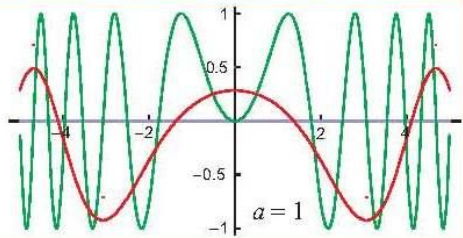
Σχ. 20-14



$$f(t) = \sin(at^2), \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \cos\left(\frac{\omega^2}{4a} + \frac{\pi}{4}\right)$$

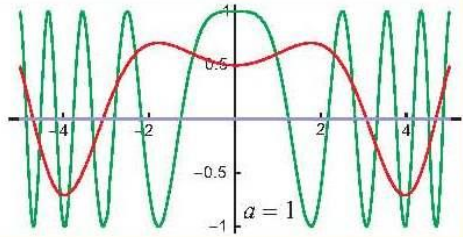
Σχ. 20-15



$$f(t) = \cos(at^2)$$

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2|a|}} \cos\left(\frac{\omega^2}{4|a|} - \frac{\pi}{4}\right)$$

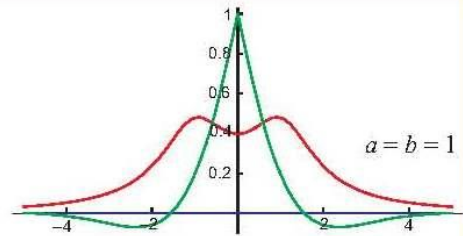
Σχ. 20-16



$$f(t) = e^{-a|t|} \cos bt, \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{(\omega+b)^2 + a^2} + \frac{1}{(\omega-b)^2 + a^2} \right]$$

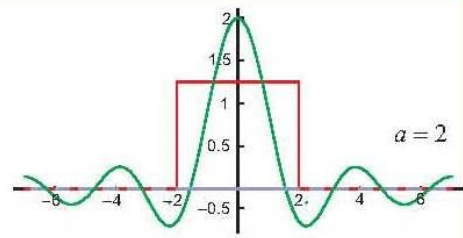
Σχ. 20-17



$$f(t) = t^{-1} \sin at, \quad a > 0$$

$$F(\omega) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} [1 + \text{sign}(a - |\omega|)]$$

Σχ. 20-18



Κεφάλαιο 2⁵

Γραμμικές εξισώσεις

Ένα από τα προβλήματα που απαντώνται συχνότερα σε επιστημονικούς υπολογισμούς είναι η επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων. Στο παρόν κεφάλαιο θα συζητηθεί η μέθοδος επίλυσης με Γκαουσιανή απαλοιφή και η ευαισθησία της λύσης ως προς τα σφάλματα των δεδομένων και τα αναπόφευκτα σφάλματα στρογγύλευσης που υπεισέρχονται κατά την διάρκεια των υπολογισμών.

2.1 Επίλυση γραμμικών συστημάτων

Ένα σύστημα ταυτόχρονων γραμμικών εξισώσεων γράφεται, χρησιμοποιώντας τυπικό συμβολισμό,

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

Στη συχνότερη περίπτωση όταν υπάρχουν τόσες εξισώσεις όσες και άγνωστοι, η \mathbf{A} είναι μια δεδομένη τετραγωνική μήτρα τάξης n , το \mathbf{b} είναι ένα δεδομένο κατακόρυφο άνυσμα n στοιχείων και το \mathbf{x} είναι ένα άγνωστο κατακόρυφο διάνυσμα n στοιχείων. Οι σπουδάζοντες γραμμική άλγεβρα μαθαίνουν ότι η λύση του $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ μπορεί να γραφεί ως $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$, όπου η \mathbf{A}^{-1} είναι η αντίστροφη της \mathbf{A} . Εντούτοις, στη μεγάλη πλειοψηφία πρακτικών υπολογιστικών προβλημάτων, ο υπολογισμός της \mathbf{A}^{-1} είναι περιττός και συνήθως αποφευκταίος. Ως ακραίο αλλά επεξηγηματικό παράδειγμα, θεωρούμε ένα σύστημα που αποτελείται από μόνο μια εξίσωση,

$$7x = 21$$

Ο καλύτερος τρόπος να λυθεί ένα τέτοιο σύστημα είναι με διαίρεση

$$x = \frac{21}{7} \Rightarrow x = 3$$

Η χρήση αντιστροφής θα έδιδε

$$x = 7^{-1} \times 21 = 0.142857 \times 21 = 2.99997$$

Η αντιστροφή απαιτεί περισσότερη αριθμητική —μία διαίρεση και ένα πολλαπλασιασμό αντί για μία μόνο διαίρεση— και παράγει μια λιγότερο ακριβή απάντηση. Παρόμοιες συνθήκες ισχύουν για συστήματα περισσότερων της μίας εξισώσεων. Αυτό ισχύει ακόμα και στην κοινότατη περίπτωση όπου υπάρχουν διαφορετικά συστήματα εξισώσεων με την ίδια μήτρα \mathbf{A} αλλά διαφορετικά δεξιά σκέλη \mathbf{b} . Για τον λόγο αυτό, στα επόμενα θα επικεντρωθούμε στην παρουσίαση μεθόδων άμεσης επίλυσης των συστημάτων και όχι στην αντιστροφή μητρών.

2.2 Ο τελεστής backslash

Για να καταστεί σαφής η διάκριση μεταξύ της επίλυσης γραμμικών εξισώσεων και αντιστροφής, η γλώσσα MATLAB έχει εισαγάγει μη-καθιερωμένο παραστατικό συμβολισμό, χρησιμοποιώντας ως τελεστές την οπισθοκλίνη γραμμή «\» (backslash) και την εμπροσθοκλίνη γραμμή «/» (slash). Εάν \mathbf{A} είναι μια μήτρα οιοδήποτε μεγέθους και μορφής και \mathbf{B} είναι μια

⁵ Το Κεφάλαιο 2 έχει βασισθεί και αποτελεί απόδοση του Κεφαλαίου 2 (Linear Equations) του βιβλίου «*Numerical Computing with Matlab*», από τον Cleve Moller, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2004.

μήτρα με τόσες σειρές όσες η \mathbf{A} , τότε η λύση του συστήματος εξισώσεων

$$\mathbf{AX} = \mathbf{B}$$

δηλώνεται με

$$\mathbf{X} = \mathbf{A} \setminus \mathbf{B}$$

Αυτό αναλογεί με διαίρεση αμφοτέρων των πλευρών των εξισώσεων με την μήτρα συντελεστών \mathbf{A} . Επειδή ο πολλαπλασιασμός μητρών δεν είναι αντιμεταθετικός και η \mathbf{A} εμφανίζεται στο αριστερό σκέλος του αρχικού συστήματος, αυτό ισοδυναμεί με *αριστερή διαίρεση*. Ομοίως, η λύση σε ένα σύστημα με την \mathbf{A} δεξιά και την \mathbf{B} να έχει τόσες στήλες όσες και η \mathbf{A} γράφεται,

$$\mathbf{X} \mathbf{A} = \mathbf{B}$$

και λαμβάνεται με την *δεξιά διαίρεση*,

$$\mathbf{X} = \mathbf{B}/\mathbf{A}$$

Ο συμβολισμός αυτός ισχύει ακόμη και όταν η \mathbf{A} δεν είναι τετραγωνική, ώστε ο αριθμός των εξισώσεων να μην είναι ο ίδιος με τον αριθμό των αγνώστων.

2.3 Ένα παράδειγμα 3-by-3

Προκειμένου να γίνει ευκολότερα κατανοητή η λειτουργία του αλγορίθμου επίλυσης συστημάτων γραμμικών εξισώσεων, θεωρούμε το εξής παράδειγμα τρίτης τάξης:

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Αυτό φυσικά, αντιπροσωπεύει το σύστημα

$$10x_1 - 7x_2 = 7$$

$$-3x_1 + 2x_2 + 6x_3 = 4$$

$$5x_1 - x_2 + 5x_3 = 6$$

Το πρώτο βήμα του αλγορίθμου επίλυσης χρησιμοποιεί την πρώτη εξίσωση για να απαλείψει τον άγνωστο x_1 από τις άλλες εξισώσεις. Αυτό επιτυγχάνεται προσθέτοντας 0.3 φορές την πρώτη εξίσωση στην δεύτερη εξίσωση και αφαιρώντας 0.5 φορές την πρώτη από την τρίτη εξίσωση. Ο συντελεστής 10 του x_1 στην πρώτη εξίσωση είναι το πρώτο *οδηγούν στοιχείο (pivot)* και οι ποσότητες -0.3 και 0.5, που λαμβάνονται διαιρώντας τους συντελεστές του x_1 στις άλλες εξισώσεις με το οδηγούν στοιχείο ονομάζονται *πολλαπλασιαστές*. Το πρώτο βήμα αλλάζει τις εξισώσεις ως:

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -0.1 & 6 \\ 0 & 2.5 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 6.1 \\ 2.5 \end{pmatrix}$$

Το δεύτερο βήμα θα μπορούσε να χρησιμοποιήσει τη δεύτερη εξίσωση για να απαλείψει τον x_2 από την τρίτη εξίσωση. Εντούτοις, το δεύτερο οδηγούν στοιχείο, το οποίο είναι ο συντελεστής του x_2 στη δεύτερη εξίσωση, θα ήταν -0.1, μικρότερο από τους άλλους συντελεστές. Συνεπώς, οι τελευταίες δύο εξισώσεις εναλλάσσονται. Αυτό καλείται *pivoting*. Στο παρόν παράδειγμα η πράξη αυτή δεν είναι απαραίτητη διότι δεν υπάρχουν σφάλματα στρογγύλευσης, αλλά στην γενική περίπτωση είναι σπουδαία και κρίσιμη.

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & -0.1 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.1 \end{pmatrix}$$

Τώρα, το δεύτερο οδηγούν στοιχείο είναι 2.5 και η δεύτερη εξίσωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να απαλειφθεί ο x_2 από την τρίτη. Αυτό επιτυγχάνεται προσθέτοντας 0.04 φορές την δεύτερη εξίσωση στην τρίτη εξίσωση.

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & 0 & 6.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.2 \end{pmatrix}$$

Η τελευταία εξίσωση είναι τώρα

$$6.2 x_3 = 6.2$$

από όπου $x_3 = 1$. Αντικαθιστώντας στην δεύτερη εξίσωση:

$$2.5x_2 + (5)(1) = 2.5.$$

από όπου $x_2 = -1$. Τέλος, οι τιμές των x_2 και x_3 αντικαθίστανται στην πρώτη εξίσωση:

$$10x_1 + (-7)(-1) = 7$$

εξ ου $x_1 = 0$. Η λύση είναι

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

και μπορεί εύκολα να ελεγχθεί με αντικατάσταση στο επιλυθέν σύστημα. Ολόκληρος ο αλγόριθμος μπορεί να εκφραστεί συμπαγώς –για το παρόν παράδειγμα έστω

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ -0.3 & -0.04 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & 0 & 6.2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Η μήτρα \mathbf{L} περιέχει τους πολλαπλασιαστές που χρησιμοποιήθηκαν για την απαλοιφή, η μήτρα \mathbf{U} είναι η τελική μήτρα συντελεστών και η μήτρα \mathbf{P} περιγράφει το pivoting. Με αυτές τις τρεις μήτρες, έχουμε

$$\mathbf{LU} = \mathbf{PA}$$

Με άλλα λόγια, η αρχική μήτρα συντελεστών μπορεί να εκφρασθεί υπό μορφή γινομένων μητρών με απλούστερη δομή.

2.4 Πίνακες Αντιμετάθεσης και Τριγωνικοί Πίνακες

Ένας πίνακας αντιμετάθεσης δεν είναι παρά ένας ταυτοτικός πίνακας με εναλλαγμένες γραμμές και στήλες. Για παράδειγμα, ο

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Αριστερός πολλαπλασιασμός ενός πίνακα \mathbf{A} με ένα πίνακα αντιμετάθεσης (\mathbf{PA}) αντιμεταθέτει τις γραμμές του \mathbf{A} . Ο δεξιός πολλαπλασιασμός (\mathbf{AP}) αντιμεταθέτει τις στήλες του \mathbf{A} .

Η λύση γραμμικών εξισώσεων που περιλαμβάνουν πίνακες αντιμετάθεσης είναι *τετριμμένη*. Για παράδειγμα, η λύση του συστήματος

$$\mathbf{P} \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

αποτελεί απλή αναδιάταξη των στοιχείων του \mathbf{b} ,

$$\mathbf{x} = \mathbf{P}^T \mathbf{b}$$

Ένας άνω τριγωνικός πίνακας έχει όλα τα μη μηδενικά στοιχεία του επάνω από την κύρια δι-

αγώνιο, π.χ.

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 5 & 6 & 7 \\ 0 & 0 & 8 & 9 \\ 0 & 0 & 0 & 10 \end{pmatrix}$$

Ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας έχει μονάδες (1) επί της κυράς διαγωνίου και όλα τα υπόλοιπα μη-μηδενικά στοιχεία του κάτω από την κύρια διαγώνιο, για παράδειγμα

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 5 & 1 & 0 \\ 4 & 6 & 7 & 1 \end{pmatrix}$$

Οι γραμμικές εξισώσεις που περιλαμβάνουν τριγωνικούς πίνακες, είναι επίσης εύκολο να λυθούν. Υπάρχουν δύο παραλλαγές του αλγορίθμου επίλυσης του άνω τριγωνικού συστήματος $\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Αμφότεροι αρχίζουν λύνοντας την τελευταία εξίσωση για τη τελευταία μεταβλητή, την προτελευταία εξίσωση για την προτελευταία μεταβλητή κ.ο.κ. Ο πρώτος αλγόριθμος αφαιρεί πολλαπλάσια των στηλών του \mathbf{U} από το \mathbf{b} :

```
x = zeros(n,1);
for k = n:-1:1
    x(k) = b(k)/U(k,k);
    i = (1:k-1)';
    b(i) = b(i) - x(k)*U(i,k);
end
```

Ο άλλος χρησιμοποιεί εσωτερικά γινόμενα μεταξύ των γραμμών του \mathbf{U} και τμημάτων της αναδυόμενης λύσης \mathbf{x} .

```
x = zeros(n,1);
for k = n:-1:1
    j = k+1:n;
    x(k) = (b(k) - U(k,j)*x(j))/U(k,k);
end
```

2.5 Παραγοντοποίηση LU

Ο περισσότερο χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος επίλυσης γραμμικών συστημάτων είναι ταυτόχρονα και μία από τις αρχαιότερες αριθμητικές μεθόδους: πρόκειται για την μέθοδο της συστηματικής απαλοιφής που αποδίδεται στον C. F. Gauss. Παρά την ηλικία της μεθόδου, σχετικά πρόσφατη έρευνα (1955 – 1965) αποκάλυψε την σημασία δύο χαρακτηριστικών της, η οποία δεν είχε αποσαφηνιστεί προηγουμένως: την επιλογή οδηγών στοιχείων και την ορθή ερμηνεία των σφαλμάτων στρογγύλευσης.

Σε γενικές γραμμές, η Γκαουσιανή απαλοιφή εφαρμόζεται σε δύο στάδια: την κυρίως απαλοιφή και την αντικατάσταση. Το πρώτο στάδιο (απαλοιφής) αποτελείται από $n-1$ βήματα. Στο k -στο βήμα, πολλαπλάσια της k -στης εξίσωσης αφαιρούνται από τις υπόλοιπες εξισώσεις προκειμένου να απαλειφθεί η k -στη μεταβλητή. Εάν ο συντελεστής x_k είναι «μικρός» ενδεικνύεται η αντιμετάθεση εξισώσεων πριν τελεσθεί η αφαίρεση. Κατά το στάδιο αντικατάστα-

σης λύνεται η τελευταία εξίσωση για την μεταβλητή x_n · κατόπιν, με αντικατάσταση της x_n λύνεται η προτελευταία για την x_{n-1} κοκ, έως ευρεθεί και η x_1 από την πρώτη εξίσωση.

Έστω \mathbf{P}_k , $k = 1, \dots, n - 1$, οι πίνακες αντιμετάθεσης που προκύπτουν εναλλάσσοντας τις γραμμές ταυτοτικού πίνακα με τον ίδιο τρόπο κατά τον οποίο εναλλάσσονται οι γραμμές του \mathbf{A} στο k -στο βήμα της διαδικασίας απαλοιφής. Έστω \mathbf{M}_k ο μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας που προκύπτει εισάγοντας τα αρνητικά των πολλαπλασιαστών που χρησιμοποιήθηκαν κατά το k -στο βήμα, κάτω από την διαγώνιο του στην k -στη στήλη του ταυτοτικού πίνακα. Τέλος, έστω \mathbf{U} ο τελικός άνω τριγωνικός πίνακας που προκύπτει μετά από τα $n - 1$ βήματα. Ολόκληρη η διαδικασία απαλοιφής μπορεί να περιγραφεί με μόνο μία εξίσωση πινάκων,

$$\mathbf{U} = \mathbf{M}_{n-1} \mathbf{P}_{n-1} \cdots \mathbf{M}_2 \mathbf{P}_2 \mathbf{M}_1 \mathbf{P}_1 \mathbf{A}$$

Η εξίσωση αυτή μπορεί να ξαναγραφτεί με την μορφή

$$\mathbf{L}_1 \mathbf{L}_2 \cdots \mathbf{L}_{n-1} \mathbf{U} = \mathbf{P}_{n-1} \cdots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \mathbf{A}$$

όπου ο \mathbf{L}_k λαμβάνεται από τους \mathbf{M}_k αντιμεταθέτοντας και αλλάζοντας τα πρόσημα των πολλαπλασιαστών κάτω από την διαγώνιο. Έτσι, εάν

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \mathbf{L}_1 \mathbf{L}_2 \cdots \mathbf{L}_{n-1} \\ \mathbf{P} &= \mathbf{P}_{n-1} \cdots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \end{aligned}$$

έχομε

$$\mathbf{LU} = \mathbf{PA}$$

Ο μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας \mathbf{L} περιέχει όλους τους πολλαπλασιαστές που χρησιμοποιήθηκαν κατά τη απαλοιφή και ο πίνακας αντιμετάθεσης \mathbf{P} καταχωρεί όλες τις εναλλαγές γραμμών.

Στο παραπάνω παράδειγμα,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix}$$

οι πίνακες που προκύπτουν κατά την διάρκεια της απαλοιφής είναι

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \mathbf{M}_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.3 & 1 & 0 \\ -0.5 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{P}_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{M}_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0.04 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

Και οι αντίστοιχοι \mathbf{L} είναι

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ -0.3 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -0.04 & 1 \end{pmatrix}$$

Η εξίσωση $\mathbf{LU} = \mathbf{PA}$ αποκαλείται *παραγοντοποίηση LU* ή *τριγωνική αποσύνθεση* του \mathbf{A} και δεν είναι παρά η διαδικασία της Γκαουσιανής απαλοιφής εκπεφρασμένη με πίνακες. Με την μέθοδο αυτή ένα γενικευμένο σύστημα εξισώσεων

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

μετατρέπεται στο ζεύγος τριγωνικών συστημάτων

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{Pb}$$

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$$

2.6 Η αναγκαιότητα του Pivoting

Τα διαγώνια στοιχεία του \mathbf{U} ονομάζονται *οδηγά* (pivots). Το k -στο οδηγούν είναι ο συντελεστής της k -στης μεταβλητής στην k -στη εξίσωση του k -στου βήματος της απαλοιφής. Στο 3-by-3 παράδειγμα, τα οδηγά στοιχεία είναι 10, 2.5, and 6.2. Οι υπολογισμοί, τόσο των πολλαπλασιαστών, όσο και κατά την αντικατάσταση, απαιτούν διαιρέσεις με οδηγά στοιχεία. Κατά συνέπεια, εάν κάποιο από τα οδηγά στοιχεία είναι μηδέν, η διαδικασία καταρρέει. Το αυτό θα συμβεί και όταν ο διαιρέτης είναι πολύ μικρός αριθμός, κοντά στο μηδέν. Για να δούμε πως, θα κάνουμε μερικές μικρές αλλαγές στο παράδειγμα,

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2.099 & 6 \\ 5 & 1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 3.90 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Το στοιχείο (2,2) του πίνακα άλλαξε από 2 σε 2.099 και το δεξί σκέλος επίσης άλλαξε έτσι, ώστε το αποτέλεσμα να είναι πάλι $(0, -1, 1)^T$. Ας υποθέσουμε ότι η λύση θα πρέπει να υπολογισθεί σε μία υποθετική μηχανή που κάνει αριθμητική κινητής υποδιαστολής με 5 σημαντικά ψηφία. Το πρώτο βήμα της διαδικασίας απαλοιφής παράγει

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -0.001 & 6 \\ 0 & 2.5 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 6.001 \\ 2.5 \end{pmatrix}$$

Το στοιχείο (2,2) είναι τώρα αρκετά μικρό σε σύγκριση με τα άλλα στοιχεία του πίνακα. Εάν συνεχίσαμε την διαδικασία απαλοιφής χωρίς αντιμεταθέσεις, το επόμενο βήμα θα απαιτούσε να προσθέσουμε 2.5×10^3 φορές την δεύτερη εξίσωση στην τρίτη:

$$(5 + (2.5 \times 10^3)(6))x_3 = (2.5 + (2.5 \times 10^3)(6.001))$$

Στο δεξί σκέλος, ο πολλαπλασιασμός $6.001 \times 2.5 \times 10^3 = 1.50025 \times 10^4$ δεν μπορεί να αναπαρασταθεί στην υποθετική μηχανή μας, οπότε πρέπει να *στρογγυλευτεί* σε 1.5002×10^4 . Τα αποτελέσματα κατόπιν προστίθεται στο 2.5 και ξανα-στρογγυλεύεται. Με άλλα λόγια, αμφότερα τα υπογραμμισμένα 5 στη εξίσωση

$$(5 + 1.5000 \times 10^4)x_3 = (2.\underline{5} + 1.5002\underline{5} \times 10^4)$$

χάνονται ως σφάλματα στρογγύλευσης. Σ' αυτή την υποθετική μηχανή λοιπόν η τελευταία εξίσωση γίνεται

$$1.5005 \times 10^4 x_3 = 1.5004 \times 10^4.$$

Η αντικατάσταση τώρα, ξεκινά με

$$x_3 = \frac{1.5004 \times 10^4}{1.5005 \times 10^4} = 0.99993$$

Επειδή το ακριβές αποτέλεσμα είναι $x_3 = 1$, το πρόβλημα στρογγύλευσης δεν φαίνεται και τόσο σοβαρό. Δυστυχώς όμως, η x_2 πρέπει να υπολογισθεί από την εξίσωση

$$-0.001x_2 + (6)(0.99993) = 6.001$$

Η οποία δίδει

$$x_2 = \frac{1.5 \times 10^{-3}}{-1 \times 10^{-3}} = -1.5$$

Τέλος η x_1 προσδιορίζεται από την πρώτη εξίσωση

$$10x_1 + (-7)(-1.5) = 7$$

που δίδει

$$x_1 = -0.35$$

Έτσι, αντί για $(0, -1, 1)^T$ υπολογίσαμε $(-0.35, -1.5, 0.99993)^T$.

Που χάλασε λοιπόν η δουλειά, δεδομένου ότι δεν έγινε και κάποιος μεγάλος αριθμός πράξεων που να «συσσωρεύσει» σφάλματα στρογγύλευσης και ο πίνακάς μας δεν ήταν ιδιάζων; Το πρόβλημα προέκυψε από τη επιλογή του δεύτερου οδηγού στοιχείου κατά το δεύτερο στάδιο της απαλοιφής. Σαν αποτέλεσμα, ο πολλαπλασιαστής γίνεται 2.5×10^3 και η τελευταία εξίσωση περιλαμβάνει συντελεστές που είναι 10^3 φορές μεγαλύτεροι αυτών του αρχικού προβλήματος. Τα σφάλματα στρογγύλευσης που είναι πολύ μικρά σε σύγκριση με τόσο μεγάλους συντελεστές καθίστανται απaráδεκτα υψηλά σε σχέση με την πραγματική λύση του συστήματος.

Εάν η δεύτερη και η τρίτη εξίσωση αντιμετωπίθοντο, τότε δεν θα υπήρχε ανάγκη μεγάλων πολλαπλασιαστών το τελικό αποτέλεσμα θα ήταν ακριβές (ο αναγνώστης ας προσπαθήσει να πιστοποιήσει το γεγονός). Στην γενική περίπτωση, εάν οι πολλαπλασιαστές έχουν μέγεθος μικρότερο ή ίσο της μονάδας, τότε η υπολογιζόμενη λύση προκύπτει ικανοποιητικά ακριβής. Η διαδικασία τήρησης των πολλαπλασιαστών σε απόλυτο μέγεθος μικρότερο της μονάδας ονομάζεται *μερικό pivoting*. Κατά το k -στο βήμα της απαλοιφής, το οδηγούν στοιχείο επιλέγεται να είναι το απόλυτα μεγαλύτερο στοιχείο του μη-ανηγμένου μέρους της k -στης στήλης. Η γραμμή που περιέχει αυτό το στοιχείο εναλλάσσεται με την k -στη γραμμή για να φέρει αυτό το στοιχείο στην θέση (k, k) . Οι ίδιες εναλλαγές πρέπει να γίνονται και με τα στοιχεία του δεξιού σκέλους \mathbf{b} . Οι άγνωστοι \mathbf{x} δεν αναδιατάσσονται διότι οι στήλες του \mathbf{A} δεν αλλάζουν.

2.7. lutx, bslashtx, lugui.

Στο υλικό του Κεφαλαίου 2 περιλαμβάνονται τρεις συναρτήσεις περιγράφουσες τους ανωτέρω συζητηθέντες αλγόριθμους. Η πρώτη συνάρτηση είναι η `lutx.m`, που στην πραγματικότητα αποτελεί αναγνώσιμη έκδοση της ενσωματωμένης στο MATLAB συνάρτησης `lu`. Η

συνάρτηση περιλαμβάνει ένα εξωτερικό βρόχο-for επί της μεταβλητής k ο οποίος μετρά τα βήματα (επαναλήψεις) απαλοιφής αλλά κατά τα άλλα είναι προγραμματισμένη με συμπαγή και αποδοτικό τρόπο.

```
function [L,U,p] = lutx(A)
%LU Triangular factorization
% [L,U,p] = lutx(A) produces a unit lower triangular
% matrix L, an upper triangular matrix U, and a
% permutation vector p, so that L*U = A(p,:).

[n,n] = size(A);
p = (1:n)';
for k = 1:n-1
% Find largest element below diagonal in k-th column
[r,m] = max(abs(A(k:n,k)));
m = m+k-1;
% Skip elimination if column is zero
if (A(m,k) ~= 0)
% Swap pivot row
if (m ~= k)
A([k m],:) = A([m k],:);
p([k m]) = p([m k]);
end
% Compute multipliers
i = k+1:n;
A(i,k) = A(i,k)/A(k,k);
% Update the remainder of the matrix
j = k+1:n;
A(i,j) = A(i,j) - A(i,k)*A(k,j);
end
end
% Separate result
L = tril(A,-1) + eye(n,n);
U = triu(A);
```

Προσεκτική μελέτη της συνάρτησης δείχνει ότι η αριθμητικά πλέον δαπανηρή πράξη είναι η

$$A(i,j) = A(i,j) - A(i,k)*A(k,j);$$

Στο k -στο βήμα της απαλοιφής, τα i και j είναι ανύσματα δεικτών με μήκος $n-k$. Η πράξη $A(i,k)*A(k,j)$ πολλαπλασιάζει μία στήλη επί μία γραμμή, προκειμένου να κατασκευάσει ένα τετράγωνο πίνακα βαθμού ένα και τάξης $n-k$. Ο πίνακας αυτός κατόπιν αφαιρείται από τον «υποπίνακα» (μέρισμα) ιδίου μεγέθους που καταλαμβάνει την κάτω αριστερή γωνία του \mathbf{A} . Σε μία γλώσσα προγραμματισμού χωρίς δυνατότητα ανυσματικών πράξεων, η πράξη αυτή (επικαιροποίηση ενός μερίσματος του \mathbf{A}) θα γινόταν με ζεύγος ένθετων διπλών βρόχων επί των i και j και πολύ μεγαλύτερη, αντίστοιχα, δαπάνη χρόνου.

Η δεύτερη συνάρτηση είναι η `bslashtx.m`, η οποία αποτελεί απλοποιημένη έκδοση του τελεστή `backslash`. Ξεκινά ελέγχοντας για τρεις σπουδαίες ειδικές περιπτώσεις μορφών στις οποίες μπορεί να εμπίπτει ο \mathbf{A} , την κάτω τριγωνική, άνω τριγωνική και συμμετρική θετική ορισμένη⁶ Γραμμικά συστήματα με τέτοιες μορφές μπορούν να λυθούν πολύ ταχύτερα από την γενική περίπτωση.

```
function x = bslashtx(A,b)
% BSLASHTX Solve linear system (backslash)
% x = bslashtx(A,b) solves A*x = b

[n,n] = size(A);
```

⁶ Βλ. Άσκηση 2.3 για περαιτέρω ορισμούς και διευκρινίσεις.


```

if isequal(triu(A,1), zeros(n,n))
    % Lower triangular
    x = forward(A,b);
    return
elseif isequal(tril(A,-1), zeros(n,n))
    % Upper triangular
    x = backsubs(A,b);
    return
elseif isequal(A,A')
    [R, fail] = chol(A);
    if ~fail
        % Positive definite
        y = forward(R',b);
        x = backsubs(R,y);
    return
end
end
end

```

Εάν καμία από τις ειδικές περιπτώσεις δεν αναγνωρισθεί, η `bslashtx` καλεί την `lutx` προκειμένου να εκτελέσει την παραγοντοποίηση LU και την `backsubs` για να ολοκληρώσει την επίλυση του συστήματος.

```

% Triangular factorization
[L,U,p] = lutx(A);
% Permutation and forward elimination
y = forward(L,b(p));

% Back substitution
x = backsubs(U,y);

```

Η συνάρτηση `bslashtx` χρησιμοποιεί δύο έτερες συναρτήσεις για να επιλύσει κάτω και άνω τριγωνικά συστήματα:

```

function x = forward(L,x)
% FORWARD. Forward elimination.
% For lower triangular L, x = forward(L,b) solves L*x = b.

[n,n] = size(L);
for k = 1:n
    j = 1:k-1;
    x(k) = (x(k) - L(k,j)*x(j))/L(k,k);
end

function x = backsubs(U,x)
% BACKSUBS. Back substitution.
% For upper triangular U, x = backsubs(U,b) solves U*x = b.
[n,n] = size(U);
for k = n:-1:1
    j = k+1:n;
    x(k) = (x(k) - U(k,j)*x(j))/U(k,k);
end

```

Η Τρίτη συνάρτηση, `lugu1.m`, 'παρέχει οπτική επίδειξη τω βημάτων της παραγοντοποίησης LU με Γκαουσουσιανή απαλοιφή. Είναι μία ακόμη έκδοση της `lutx` που επιτρέπει στον χρήστη πειραματισμούς με διαφορετικές στρατηγικές επιλογής οδηγών στοιχείων. Στο k -στο βήμα της απαλοιφής, το μεγαλύτερο στοιχείο του μη επεξεργασμένου μερίσματος (υπολοίπου) του πίνακα A στην k -στη στήλη εμφανίζεται με πορφυρό χρώμα. Αυτό είναι το στοιχείο που στην περίπτωση του μερικού pivoting θα επιλεγόταν ως οδηγών στοιχείο. Ο χρήστης μπορεί να επιλέξει και μελετήσει διαφορετικές στρατηγικές pivoting, μεταξύ των:

- Χειροκίνητη επιλογή (pick a pivot). Το οδηγό στοιχείο επιλέγεται με τον δρομέα (αριστε-

ρό κλίκ). Μπορεί να είναι το πορφυρό στοιχείο, ή οιοδήποτε άλλο.

- Διαγώνιο pivoting (diagonal pivoting). Επιλογή του επόμενου μεγαλύτερου στοιχείου επί της διαγώνιου του πίνακα με τον δρομέα.
- Μερικό Pivoting (partial pivoting). Η ίδια στρατηγική όπως στην `lutx`.
- Πλήρες pivoting (complete pivoting). Χρήση του μεγαλύτερου στοιχείου του ανεπεξέργαστου μερίσματος (υποπίνακα) του \mathbf{A} ως οδηγό στοιχείο. Το επιλεγμένο οδηγό στοιχείο εμφανίζεται με ερυθρό χρώμα και εκτελείται το σχετικό βήμα απαλοιφής. Κατά την εξέλιξη της διαδικασίας, οι προκύπτουσες στήλες του \mathbf{L} εμφανίζονται με πράσινο χρώμα και οι στήλες του \mathbf{U} με κυανό.

2.8. Η επίδραση των σφαλμάτων στρογγύλευσης

Τα σφάλματα στρογγύλευσης που εισάγονται κατά την επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων, σχεδόν πάντοτε προκαλούν διαφορές μεταξύ της υπολογισθείσας (εκτιμηθείσας) λύσης – που στο εξής θα δηλώνεται με \mathbf{x}^* – και της θεωρητικής λύσης $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$. Στην πραγματικότητα, εάν τα στοιχεία του \mathbf{x} δεν είναι αριθμοί κινητής υποδιαστολής, τότε το \mathbf{x}^* δεν μπορεί να ισούται με το \mathbf{x} . Υπάρχουν δύο κοινά μέτρα της απόκλισης του \mathbf{x}^* , ήτοι το *σφάλμα*

$$\mathbf{e} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^*$$

και το *υπόλοιπο*

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^*$$

Η γραμμική άλγεβρα διδάσκει ότι επειδή ο \mathbf{A} δεν είναι ιδιάζων, τότε εάν ένα από αυτά είναι μηδέν, τότε και το άλλο οφείλει να είναι μηδέν. Από την άλλη μεριά, δεν οφείλουν *αμφότερα* να είναι «μικρά» ταυτοχρόνως. Ας δοθεί ένα παράδειγμα:

$$\begin{pmatrix} 0.780 & 0.563 \\ 0.913 & 0.659 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.217 \\ 0.254 \end{pmatrix}$$

Τι συμβαίνει όταν επιχειρηθεί Γκαουσσισιανή απαλοιφή με μερικό pivoting σε ένα υποθετικό υπολογιστή τριών σημαντικών ψηφίων; Κατ' αρχάς, οι δύο γραμμές εναλλάσσονται έτσι, ώστε το 0.913 να γίνει οδηγό. Μετά υπολογίζεται ο πολλαπλασιαστής

$$\frac{0.780}{0.913} = 0.854$$

(τρία δεκαδικά ψηφία). Στη συνέχεια αφαιρούνται 0.854 φορές η νέα πρώτη γραμμή από τη δεύτερη γραμμή για να δώσει το σύστημα

$$\begin{pmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0 & 0.001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.254 \\ 0.001 \end{pmatrix}$$

Τέλος επιχειρείται η αντικατάσταση

$$x_2 = \frac{0.001}{0.001} = 1$$

$$x_1 = \frac{0.254 - 0.659x_2}{0.913} = -0.443$$

Για να αποτιμηθεί η ακρίβεια χωρίς προηγούμενη γνώση της ακριβούς θεωρητικής απάντησης, υπολογίζουμε τα υπόλοιπα:

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_* = \begin{pmatrix} 0.217 - ((0.780)(-0.443) + (0.563)(1.00)) \\ 0.254 - ((0.913)(-0.443) + (0.659)(1.00)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.000460 \\ -0.000541 \end{pmatrix}$$

Τα υπόλοιπα είναι μικρότερα του 10^{-3} , και για μία μηχανή τριών ψηφίων δεν θα μπορούσε να είναι καλύτερα! Δυστυχώς, βλέπουμε εύκολα ότι η σωστή λύση για αυτό το σύστημα είναι

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1.000 \\ -1.000 \end{pmatrix}$$

Τα στοιχεία της λύσης μας έχουν και λάθος πρόσημο, με το σφάλμα να καθίσταται συνολικά μεγαλύτερο της ίδιας της ορθής λύσης. Ήταν λοιπόν τα μικρά υπόλοιπα ζήτημα τύχης, ή κάτι συστηματικότερο;

Για να διερευνήσουμε το πρόβλημα, ας επαναλάβουμε την Γκαουσιανή απαλοιφή σε μία άλλη υποθετική μηχανή με έξι ή περισσότερα σημαντικά ψηφία. Τότε, η απαλοιφή παράγει ένα σύστημα της μορφής

$$\begin{pmatrix} 0.913000 & 0.659000 \\ 0 & 0.000001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.254000 \\ -0.000001 \end{pmatrix}.$$

Παρατηρήστε την διαφορά στο πρόσημο του στοιχείου του b_2 . Τώρα η αντικατάσταση δίνει

$$x_2 = \frac{-0.000001}{0.000001} = -1.00000$$

$$x_1 = \frac{0.254 - 0.659x_2}{0.913} = 1.00000$$

Δηλαδή την ακριβή απάντηση. Στην τριψήφια μηχανή, το στοιχείο x_2 υπολογίσθηκε διαιρώντας δύο αριθμούς που αμφότεροι ήταν της τάξης των σφαλμάτων στρογγύλευσης και ο ένας εκ των οποίων δεν είχε καν το σωστό πρόσημο. Έτσι, η x_2 θα μπορούσε να είναι σχεδόν οτιδήποτε! Η x_1 προέκυψε με χρήση αυτής της λανθασμένης τιμής. Παρ' όλα αυτά, το υπόλοιπο της πρώτης εξίσωσης είναι μικρό – η x_1 υπολογίσθηκε με τέτοιο τρόπο, ώστε αυτό να είναι βέβαιο. Ιδού λοιπόν ένα λεπτό αλλά κύριο ζήτημα: Το υπόλοιπο της δεύτερης εξίσωσης θα είναι επίσης μικρό, διότι ο πίνακάς μας είναι περίπου ιδιάζων. Οι δύο εξισώσεις του είναι περίπου πολλαπλάσια η μία της άλλης, ώστε κάθε ζεύγος (x_1, x_2) που προσεγγιστικά ικανοποιεί την μία, προσεγγιστικά θα ικανοποιεί και την άλλη. Εάν ο πίνακας ήταν ακριβώς ιδιάζων, δεν θα χρειαζόμασταν την δεύτερη εξίσωση καθόλου – οιαδήποτε λύση της πρώτης, αυτόματα θα ικανοποιούσε και τη δεύτερη.

Αν και το παράδειγμα αυτό είναι εσκεμμένο και μη τυπικό, το συμπέρασμα που εξήχθη από αυτό είναι μέγα και ισχυρό και αποτελεί το σημαντικότερο ίσως εξαγόμενο της εφαρμοσμένης γραμμικής άλγεβρας από την εποχή της εφεύρεσης των H/Y:

- Η Γκαουσιανή απαλοιφή με μερικό pivoting εγγυημένα παράγει μικρά υπόλοιπα.

Στο σημείο αυτό καλό είναι να γίνουν ορισμένες διευκρινιστικές παρατηρήσεις. Με το όρο «εγγυημένα» εννοείται ότι είναι δυνατή η απόδειξη ενός ακριβούς θεωρήματος που υποθέτει συγκεκριμένες τεχνικές λεπτομέρειες περί του πως λειτουργεί το αριθμητικό σύστημα κινητής υποδιαστολής, και το οποίο αποδεικνύει την ισχύ συγκεκριμένων ανισοτήτων τις οποίες πρέπει να ικανοποιούν τα υπόλοιπα. Εάν η αριθμητική γίνεται με κάποιο άλλο τρόπο, ή εάν υπάρχει ένα προγραμματιστικό σφάλμα (bug) σε ένα συγκεκριμένο πρόγραμμα, τότε η «εγγύηση» καταπίπτει. Επιπλέον, ο όρος «μικρά» σημαίνει «στο επίπεδο του σφάλματος στρογγύλευσης» σε σχέση με τρεις ποσότητες: α) το μέγεθος των στοιχείων στον αρχικό πίνακα συντελεστών, β) το μέγεθος των στοιχείων του πίνακα συντελεστών σε ενδιάμεσα βήματα, και, γ) το μέγεθος των στοιχείων της υπολογισθείσας λύσης. Εάν οιαδήποτε από αυτά είναι «μεγάλο», τότε το υπόλοιπο δεν θα είναι απαραίτητα μικρό κατ' απόλυτη έννοια. Τέλος, α-

κόμη και όταν το υπόλοιπο είναι μικρό, δεν υπάρχουν εγγυήσεις ότι το σφάλμα θα είναι μικρό. Η σχέση μεταξύ του μεγέθους των υπολοίπων και του μεγέθους του σφάλματος μερικά προσδιορίζεται από μία παράμετρο γνωστή ως *αριθμός συνθήκης* ενός πίνακα, πράγμα που θα αποτελέσει αντικείμενο το επομένου χωρίου.

2.9 Νόρμες και Αριθμοί Συνθήκης

Οι συντελεστές στην μήτρα και το δεξί σκέλος ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων σπάνιων είναι γνωστοί με ακρίβεια. Μερικά συστήματα προκύπτουν από πειράματα και οι συντελεστές τους υπόκεινται σε σφάλματα παρατήρησης. Άλλα συστήματα έχουν συντελεστές που παρέχονται από αριθμητική αποτίμηση μαθηματικών εκφράσεων (τύπων) και υπόκεινται σε σφάλματα στρογγύλευσης. Ακόμη και όταν το σύστημα εισάγεται με ακρίβεια στον Η/Υ, τα σφάλματα στρογγύλευσης είναι σχεδόν αναπόφευκτα κατά την επίλυσή του. Μπορεί να αποδειχθεί ότι τα σφάλματα στρογγύλευσης έχουν την ίδια επίδραση στην Γκαουσιανή απαλοιφή, όπως και τα σφάλματα των συντελεστών. Κατά συνέπεια, οδηγούμεθα στο εξής θεμελιώδες ερώτημα: Εάν υπεισέλθουν διαταραχές στους συντελεστές ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων, πόσο πολύ αλλοιώνεται η λύση του; Με άλλα λόγια, εάν $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, πως μπορούμε να μετρήσουμε την *ευαισθησία* του \mathbf{x} στις μεταβολές της \mathbf{A} και του \mathbf{b} ;

Για να απαντηθεί αυτό το ερώτημα, πρέπει πρώτα να αποσαφηνισθεί η έννοια του «*σχεδόν ιδιάζοντος*» πίνακα. Εάν ο \mathbf{A} είναι ιδιάζων, τότε για ορισμένα \mathbf{b} δεν θα υπάρχει λύση \mathbf{x} , ενώ για άλλα \mathbf{b} η λύση δεν θα είναι μοναδική. Έτσι, εάν ο \mathbf{A} είναι *σχεδόν ιδιάζων*, μπορούμε να περιμένουμε ότι *μικρές* μεταβολές σε \mathbf{A} και \mathbf{b} θα προκαλούν *μεγάλες* μεταβολές στην \mathbf{x} . Στο απέναντι άκρο, εάν ο \mathbf{A} είναι ταυτοτικός, τότε οι \mathbf{b} και \mathbf{x} θα είναι το *ίδιο* διάνυσμα. Έτσι, εάν ο \mathbf{A} είναι *σχεδόν ταυτοτικός*, μικρές μεταβολές σε \mathbf{A} και \mathbf{b} θα επιφέρουν αντίστοιχα μικρές μεταβολές στην \mathbf{x} .

Σε πρώτη ανάγνωση, μπορεί να φαίνεται ότι υπάρχει μία σχέση μεταξύ του μεγέθους των οδηγών στοιχείων και της αστάθειας της Γκαουσιανής απαλοιφής με μερικό pivoting (εγγύτητα σε ιδιάζουσα μορφή), διότι εάν η αριθμητική μπορούσε να γίνει ακριβώς, όλα τα οδηγά στοιχεία θα ήταν μη-μηδενικά εάν και μόνο εάν ο πίνακας (μήτρα) είναι μη-ιδιάζων. Όταν όμως υπεισέρχονται σφάλματα στρογγύλευσης αυτό παύει να είναι πλέον αληθές: ένας πίνακας θα μπορούσε να είναι *σχεδόν ιδιάζων*, ακόμη και όταν κανένα από τα οδηγά στοιχεία του δεν είναι μικρό. Μέχρις ενός σημείου επίσης αληθεύει ότι εάν τα οδηγά στοιχεία είναι μικρά, τότε ο πίνακας προσεγγίζει την ιδιάζουσα μορφή.

Για να πάρουμε ένα ακριβέστερο και αξιοπιστότερο μέτρο της εγγύτητας εγγύτητας ενός πίνακα προς την ιδιάζουσα μορφή από το μέγεθος των οδηγών στοιχείων, πρέπει να εισάγουμε την έννοια της *νόρμας* ενός ανύσματος. Η νόρμα είναι ένας αριθμός που μετρά το γενικό μέγεθος των στοιχείων ενός ανύσματος. Το σύνολο των ανυσματικών νορμών γνωστό ως l_p εξαρτάται από την παράμετρο p που κυμαίνεται ως $1 \leq p \leq \infty$:

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

Σχεδόν πάντοτε χρησιμοποιούμε $p = 1$, $p = 2$ or $\lim p \rightarrow \infty$, οπότε

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$$

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max(x_i)$$

Η νόρμα l_1 είναι επίσης γνωστή και ως «νόρμα Manhattan» διότι αντιστοιχεί στη απόσταση που διανύεται στο οδικό δίκτυο μίας πόλης. Η νόρμα l_2 είναι η οικεία μας *Ευκλείδεια* νόρμα (Ευκλείδειο μήκος). Τέλος, η νόρμα l_∞ είναι επίσης γνωστή ως «νόρμα Chebyshev». Γενικά η νόρμα του ανύσματος \mathbf{x} συμβολίζεται ως $\|\mathbf{x}\|$. Όλες οι ανυσματικές νόρμες έχουν τις ακόλουθες βασικές ιδιότητες, σχετιζόμενες με την έννοια της απόστασης:

$$\|\mathbf{x}\| > 0 \quad \text{εάν} \quad \mathbf{x} \neq 0$$

$$\|\mathbf{0}\| = 0$$

$$\|c\mathbf{x}\| = |c| \|\mathbf{x}\| \quad \forall c$$

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\| \quad (\text{ανισότητα Schwarz})$$

Στο MATLAB, η νόρμα $\|\mathbf{x}\|_p$ υπολογίζεται με την συνάρτηση `norm(x,p)`, ενώ `norm(x)` είναι το ίδιο με `norm(x,2)`. Για παράδειγμα:

```
x = (1:4)/5
norm1 = norm(x,1)
norm2 = norm(x)
norminf = norm(x,inf)
```

δίδει

```
x =
0.2000    0.4000    0.6000    0.8000

norm1 =
2.0000

norm2 =
1.0954

norminf =
0.8000
```

Ο πολλαπλασιασμός ενός ανύσματος \mathbf{x} με ένα πίνακα \mathbf{A} δίδει ένα νέο άνυσμα \mathbf{Ax} το οποίο μπορεί να είναι πολύ διαφορετικό από το \mathbf{x} . Η συνεπαγόμενη μεταβολή της νόρμας είναι άμεσα συσχετισμένη με την ευαισθησία την οποία επιθυμούμε να μετρήσουμε. Το εύρος διακύμανσης της μεταβολής μπορεί να εκφρασθεί με δύο αριθμούς,

$$M = \max \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

$$m = \min \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

Η μέγιστη (max) και ελάχιστη (min) τιμές λαμβάνονται για όλα τα δυνατά μη-μηδενικά ανύσματα \mathbf{x} . Σημειωτέον ότι εάν ο \mathbf{A} είναι ιδιάζων, τότε $m = 0$. Ο λόγος M/m ονομάζεται *αριθμός συνθήκης* του \mathbf{A} ,

$$\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\max \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}}{\min \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}}.$$

Η αριθμητική τιμή του $\kappa(\mathbf{A})$ εξαρτάται από την χρησιμοποιούμενη ανυσματική νόρμα, αλλά δεδομένου ότι συνήθως ενδιαφερόμαστε για εκτίμηση της τάξης μεγέθους του αριθμού συνθήκης, το είδος της νόρμας δεν έχει συνήθως ιδιαίτερη σημασία.

Θεωρούμε τώρα το σύστημα

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

και ένα δεύτερο σύστημα που προκύπτει αλλοιώνοντας το δεξί σκέλος

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

Θεωρούμε την διαταραχή $\delta\mathbf{b}$ ως το σφάλμα του \mathbf{b} και την μεταβολή $\delta\mathbf{x}$ ως το προκύπτον σφάλμα της λύσης \mathbf{x} , χωρίς να κάνουμε οιαδήποτε υπόθεση για το μέγεθος αμφοτέρων των σφαλμάτων. Επειδή $\mathbf{A}(\delta\mathbf{x}) = \delta\mathbf{b}$, οι ορισμοί των M και m οδηγούς στις

$$\|\mathbf{b}\| \geq M \|\mathbf{x}\|$$

and

$$\|\delta\mathbf{b}\| \geq m \|\delta\mathbf{x}\|$$

Κατά συνέπεια, εάν $m \neq 0$,

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \kappa(\mathbf{A}) \frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

Το μέγεθος $\|\delta\mathbf{b}\|/\|\mathbf{b}\|$ είναι η σχετική μεταβολή στο δεξί σκέλος και το μέγεθος $\|\delta\mathbf{x}\|/\|\mathbf{x}\|$ το σχετικό σφάλμα το προκαλούμενο από αυτή την μεταβολή. Το πλεονέκτημα της χρήσης σχετικών μεταβολών έγκειται στο ότι αυτές είναι αδιάστατες, δηλαδή δεν επηρεάζονται από αλλαγές κλίμακας. Από τα ανωτέρω προκύπτει ότι ο αριθμός συνθήκης είναι ένας παράγων μεγέθυνσης του σχετικού σφάλματος. Οιοσδήποτε μεταβολές (σφάλματα) στο δεξί σκέλος, προκαλούν μεταβολές $\kappa(\mathbf{A})$ φορές μεγαλύτερες στην λύση. Μπορεί να αποδειχθεί ότι το αυτό ισχύει και για μεταβολές (σφάλματα) στον ίδιο τον πίνακα συντελεστών.

Ο αριθμός συνθήκης είναι επίσης μέτρο της εγγύτητας στην ιδιάζουσα μορφή. Χωρίς μαθηματική απόδειξη, αναφέρουμε απλά ότι ο αριθμός συνθήκης μπορεί να ερμηνευθεί ως ο αντίστροφος της σχετικής απόστασης από τον εν χρήσει πίνακα, προς το σύνολο των ιδιάζόντων πινάκων. Έτσι, εάν ο $\kappa(\mathbf{A})$ είναι μεγάλος, τότε ο \mathbf{A} είναι σχεδόν ιδιάζων.

Ορισμένες χρήσιμες ιδιότητες του αριθμού συνθήκης είναι οι εξής:

1. Δεδομένου ότι $M \geq m$, $\kappa(\mathbf{A}) \geq 1$
2. Εάν \mathbf{P} είναι ένας πίνακας αντιμετάθεσης, τότε τα στοιχεία του γινομένου $\mathbf{P}\mathbf{x}$ είναι απλά μία αναδιάταξη των στοιχείων του \mathbf{x} . Αυτό σημαίνει ότι $\|\mathbf{P}\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\| \forall \mathbf{x}$ και έτσι, $\kappa(\mathbf{P}) = 1$. Ειδικότερα, $\kappa(\mathbf{I}) = 1$.
3. Εάν ο \mathbf{A} πολλαπλασιασθεί με ένα μονότιμο μέγεθος c , τότε οι M και m αμφοτέροι πολλαπλασιάζονται με τον ίδιο μέγεθος, ώστε $\kappa(c\mathbf{A}) = \kappa(\mathbf{A})$
4. Εάν ο \mathbf{D} είναι διαγώνιος πίνακας,

$$\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\max |d_{ii}|}{\min |d_{ii}|}$$

Οι δύο τελευταίες ιδιότητες είναι και ο λόγος για τον οποίο ο $\kappa(\mathbf{A})$ είναι καλύτερο μέτρο της εγγύτητας στην ιδιάζουσα μορφή από την ορίζουσα του \mathbf{A} . Ως ακραίο παράδειγμα, θεωρήσατε ένα διαγώνιο πίνακα 100×100 με στοιχεία 0.1 επί της διαγωνίου. Τότε, $\det(\mathbf{A}) = 10^{-100}$, ένας πολύ μικρός αριθμός, αλλά $\kappa(\mathbf{A}) = 1$, και τα στοιχεία του \mathbf{Ax} είναι απλά 0.1 φορές τα αντίστοιχα στοιχεία του \mathbf{x} . Σε ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων, ο πίνακας αυτός συμπεριφέρεται περισσότερο ως ταυτοτικός, παρά ως ιδιάζων.

Το ακόλουθο παράδειγμα χρησιμοποιεί την νόρμα l_1 .

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 4.1 & 2.8 \\ 9.7 & 6.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4.1 \\ 9.7 \end{pmatrix}$$

Προφανώς,
 $\|\mathbf{b}\| = 13.8$, $\|\mathbf{x}\| = 1$.

Εάν το δεξί σκέλος αλλάξει σε

$$\tilde{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} 4.11 \\ 9.70 \end{pmatrix}$$

Η λύση γίνεται

$$\tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0.34 \\ 0.97 \end{pmatrix}$$

Έστω $\delta\mathbf{b} = \mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}$ και $\delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}$. Τότε,

$$\|\delta\mathbf{b}\| = 0.01$$

$$\|\delta\mathbf{x}\| = 1.63$$

Η σχετικά μικρή μεταβολή στο \mathbf{b} έχει αλλάξει άρδην την λύση \mathbf{x} . Στην πραγματικότητα, οι σχετικές μεταβολές είναι

$$\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|} = 0.0007246$$

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} = 1.63$$

Επειδή ο $\kappa(\mathbf{A})$ είναι ο μέγιστος παράγων μεγέθυνσης,

$$\kappa(\mathbf{A}) \geq \frac{1.63}{0.0007246} = 2249.4$$

Οφείλει να σημειωθεί ότι το παράδειγμα αυτό ασχολείται με τις ακριβείς λύσεις δύο ελαφρά διαφορετικών συστημάτων και ότι η μέθοδος που επιλέχθηκε για να βρεθούν αυτές οι λύσεις δεν έχει σημασία. Το παράδειγμα κατασκευάστηκε να έχει ένα αρκετά υψηλό αριθμό συνθήκης, ώστε το αποτέλεσμα των μεταβολών να είναι ευκρινές και σημαντικό, αλλά παρόμοια συμπεριφορά οφείλει να αναμένεται από όλα τα φυσικά προβλήματα με μεγάλο αριθμό συνθήκης.

Ο αριθμός συνθήκης έχει επίσης θεμελιώδη ρόλο στην ανάλυση των σφαλμάτων στρογγύλευσης που υπεισέρχονται κατά την διάρκεια της επίλυσης με Γκαουσιανή απαλοιφή. Έστω ότι τα \mathbf{A} και \mathbf{b} έχουν στοιχεία που είναι ακριβείς αριθμοί κινητής υποδιαστολής, have elements that are exact floating-point numbers, και έστω \mathbf{x}_* το άνωμα των αριθμών κινητής υποδιαστολής που λαμβάνεται από την επίλυση με κάποιο υπολογιστικό πρόγραμμα. Έστω επίσης ότι ο πίνακας δεν είναι ακριβώς ιδιάζων και ότι δεν υπάρχει κορεσμός (overflow) ή εκκένωση (underflow) των αριθμητικών καταχωρητών στην κύρια μνήμη του Η/Υ. Τότε είναι

δυνατό να κατασκευασθούν οι ακόλουθες ανισότητες:

$$\frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_*\|}{\|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}_*\|} \leq \rho\varepsilon,$$

$$\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_*\|}{\|\mathbf{x}_*\|} \leq \rho\kappa(\mathbf{A})\varepsilon$$

Εδώ ε είναι η σχετική ακρίβεια της μηχανής eps και ο ρ θα ορισθεί λεπτομερέστερα κατωτέρω, αλλά συνήθως έχει τιμή όχι μεγαλύτερη του 10. Η πρώτη ανισότητα λέει ότι το σχετικό υπόλοιπο μπορεί να αναμένεται να έχει περίπου το ίδιο μέγεθος με το σφάλμα στρογγύλευσης, *άσχετα* με την το πόσο κακή είναι η συνθήκη του πίνακα. Η δεύτερη ανισότητα απαιτεί ο \mathbf{A} να είναι μη-ιδιάζων και περιλαμβάνει την ακριβή λύση \mathbf{x} . Παράγεται απ' ευθείας από την πρώτη ανισότητα και τον ορισμό του $\kappa(\mathbf{A})$ και λέει ότι το σχετικό σφάλμα θα είναι μικρό εάν ο $\kappa(\mathbf{A})$ είναι μικρός, αλλά μπορεί και να είναι αρκετά μεγάλο εάν ο πίνακας είναι σχεδόν ιδιάζων.

Για να δοθεί ακριβέστερος ορισμός της παραμέτρου ρ , είναι απαραίτητο να εισαχθεί η έννοια της *νόρμας πινάκων* και να κατασκευασθούν ορισμένες ακόμα ανισότητες. Η παράμετρος M που ορίστηκε προηγουμένως είναι γνωστή ως *νόρμα πινάκων*. Ο συμβολισμός της νόρμας πινάκων είναι ο ίδιος με τον συμβολισμό της ανυσματικής νόρμας,

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\mathbf{x}} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

Δεν είναι δύσκολο να δούμε ότι $\|\mathbf{A}^{-1}\| = 1/m$, ώστε ένας ισοδύναμος ορισμός για τον αριθμό συνθήκης να είναι

$$\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|.$$

Ο υπολογισμός της νόρμας πίνακα που αντιστοιχεί στις ανυσματικές νόρμες l_1 and l_∞ είναι σχετικά εύκολος και καταλήγει στις εκφράσεις:

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|$$

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}|$$

Ο υπολογισμός της νόρμας που αντιστοιχεί στη ανυσματική νόρμα l_2 απαιτεί *αποσύνθεση ιδιοαξουσών τιμών* (Singular Value Decomposition) πίνακα και θα συζητηθεί σε άλλο κεφάλαιο. Το MATLAB υπολογίζει την νόρμα πίνακα με την συνάρτηση $\text{norm}(\mathbf{A}, p)$ για $p = 1, 2$, ή inf .

Το βασικό συμπέρασμα από την μελέτη της επίδρασης των σφαλμάτων στρογγύλευσης στην Γκαουσσική απαλοιφή οφείλεται στον J. H. Wilkinson, ο οποίος απέδειξε ότι η υπολογιζόμενη λύση \mathbf{x}_* ικανοποιεί ακριβώς την εξίσωση

$$(\mathbf{A} + \mathbf{E})\mathbf{x}_* = \mathbf{b}$$

όπου \mathbf{E} είναι ένα πίνακας του οποίου τα στοιχεία έχουν μέγεθος της τάξης των σφαλμάτων στρογγύλευσης στα στοιχεία του \mathbf{A} . Σε γενικές γραμμές, εάν η παράμετρος ρ ορίζεται από την σχέση

$$\frac{\|\mathbf{E}\|}{\|\mathbf{A}\|} = \rho\varepsilon$$

τότε η ρ σπάνια θα είναι μεγαλύτερη του 10. Με βάση αυτό το βασικό συμπέρασμα, παράγο-

νται ανισότητες που περιλαμβάνουν τα υπόλοιπα και το σφάλμα της λύσης. Τα υπόλοιπα δίδονται από την εξίσωση

$$\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_* = \mathbf{Ex}_*$$

από όπου

$$\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_*\| = \|\mathbf{Ex}_*\| = \|\mathbf{E}\| \cdot \|\mathbf{x}_*\|$$

Το σχετικό υπόλοιπο συγκρίνει τις νόρμες της $\mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ με τις νόρμες του \mathbf{A} και του \mathbf{x}_* μέσω της ανισότητας

$$\frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_*\|}{\|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}_*\|} \leq \rho \varepsilon$$

Εάν ο \mathbf{A} είναι μη-ιδιάζων, το σφάλμα μπορεί να εκφραστεί με χρήση του αντιστρόφου του \mathbf{A} ως:

$$\mathbf{x} - \mathbf{x}_* = \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_*)$$

και έτσι,

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_*\| = \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\mathbf{E}\| \cdot \|\mathbf{x}_*\|$$

Η σύγκριση της νόρμας του σφάλματος με την νόρμα της υπολογισθείσας λύσης είναι απλούστερη. Το σχετικό σφάλμα ικανοποιεί την ανισότητα

$$\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_*\|}{\|\mathbf{x}_*\|} \leq \rho \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}\|^{-1} \varepsilon$$

από όπου

$$\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_*\|}{\|\mathbf{x}_*\|} \leq \rho \kappa(\mathbf{A}) \varepsilon$$

2.10 Περαιτέρω μελέτη και βιβλιογραφία

J. W. Demmel, Applied Numerical Linear Algebra, SIAM, 1997, 419 pages.

G. H. Golub and C. F. Van Loan, Matrix Computations, 2nd Edition, The John Hopkins University Press, Baltimore, 1989.

G. W. Stewart, Introduction to Matrix Computations, Academic Press, New York, 1973.

G. W. Stewart Matrix Algorithms: Basic Decompositions, SIAM, 1998, 458 pages.

L. N. Trefethen and D. Bau, III, Numerical Linear Algebra, SIAM, 1997, 361 pages.

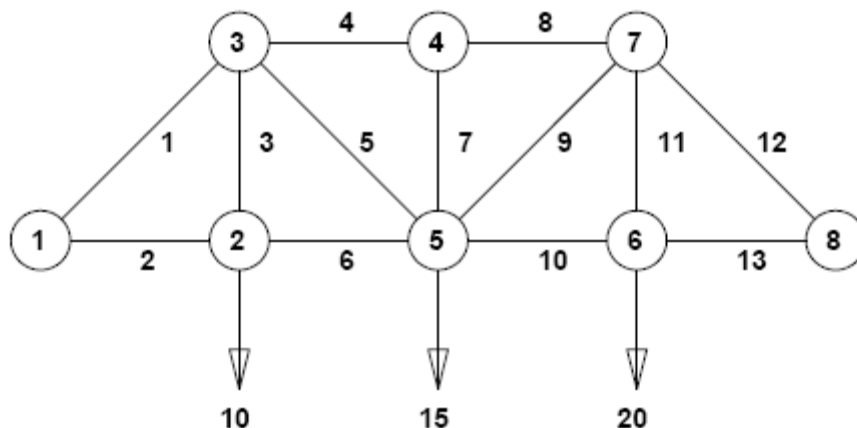
N. J. Higham, and F. Tisseur, A Block Algorithm for Matrix 1-Norm Estimation, SIAM J. on Matrix Analysis and Applications, 21 (2000), pp. 1185–1201.

2.11 Ασκήσεις

1. Η Θεοδώρα αγοράζει τρία αχλάδια, δώδεκα μήλα και μία κολοκύθα για €2,36. Ο Γρηγόρης αγοράζει δώδεκα αχλάδια και δύο κολοκύθες για €5,26. Η Αγγελική αγοράζει δύο

μήλα και τρεις κολοκύθες για €2.77. Ποία είναι η τιμή μονάδας εκάστου φρούτου χωριστά; and one cantaloupe for \$2.36.

2. Η Εικόνα 2.1 δείχνει ένα επίπεδο πλέγμα από 13 δοκούς (οι αριθμημένες γραμμές) που ενώνουν 8 αρμούς (αριθμημένοι κύκλοι). Επί των αρμών 2, 5 και 6 εφαρμόζονται τα εικονιζόμενα φορτία (σε μετρικούς τόνους). Θέλουμε να υπολογίζουμε την προκύπτουσα δύναμη σε κάθε δοκό του πλέγματος.



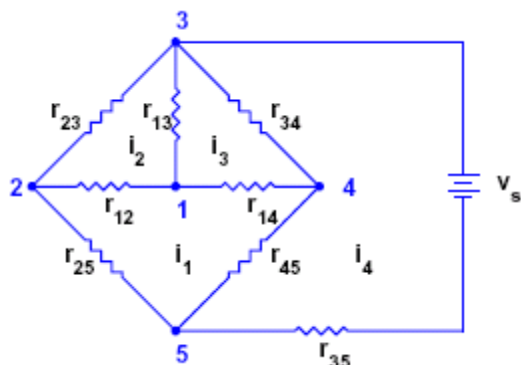
Εικόνα 2.1.

Για να βρίσκεται το πλέγμα σε στατική ισορροπία, πρέπει να μην υπάρχει συνιστάμενη οριζόντια ή κατακόρυφη δύναμη σε κάθε αρμό. Έτσι, μπορούμε να καθορίσουμε την δύναμη σε κάθε δοκό εξισώνοντας τις οριζόντιες δυνάμεις αριστερά και δεξιά κάθε αρμού, καθώς και τις κατακόρυφες δυνάμεις άνωθεν και κάτωθεν κάθε αρμού. Για 8 αρμούς, η μέθοδος αυτή θα δώσει 16 εξισώσεις, οι οποίες είναι περισσότερες από τους 13 άγνωστους παράγοντες που πρέπει να προσδιορισθούν. Για να είναι στατικά υλοποιήσιμο το πλέγμα, δηλ. για να υπάρχει μία μοναδική λύση, υποθέτουμε ότι ο αρμός 1 είναι άκαμπτα καθηλωμένος τόσο οριζόντια, όσο και κατακόρυφα, και ότι ο αρμός 8 είναι άκαμπτα καθηλωμένος κατακόρυφα. Αναλύοντας τις δυνάμεις f_i στις δοκούς σε οριζόντιες και κατακόρυφες συνιστώσες και ορίζοντας $a = 1/\sqrt{2}$, λαμβάνουμε το ακόλουθο σύστημα εξισώσεων:

$$\begin{aligned} \text{ΑΡΜΟΣ 2: } f_2 &= f_6 \\ f_3 &= 10 \\ \text{ΑΡΜΟΣ 3: } af_1 &= f_4 + af_5 \\ af_1 + f_3 + af_5 &= 0 \\ \text{ΑΡΜΟΣ 4: } f_4 &= f_8 \\ f_7 &= 0 \\ \text{ΑΡΜΟΣ 5 } af_5 + f_6 + af_9 &= f_{10} \\ af_5 + f_7 + af_9 &= 15 \\ \text{ΑΡΜΟΣ 6 } f_{10} &= f_{13} \\ f_{11} &= 20 \\ \text{ΑΡΜΟΣ 7 } f_8 + af_9 &= af_{12} \\ af_9 + f_{11} + af_{12} &= 0 \\ \text{ΑΡΜΟΣ 8 } f_{13} + af_{12} &= 0 \end{aligned}$$

Λύσατε το σύστημα εξισώσεων για τις δυνάμεις f_i επί των δοκών.

3. Η Εικόνα 2.2 παρουσιάζει ένα κύκλωμα που αποτελείται από μικρό δίκτυο αντιστάσεων. Υπάρχουν πέντε κόμβοι, οκτώ αντιστάσεις και μία πηγή σταθερού ρεύματος. Επιθυμούμε να υπολογίσουμε την πτώση τάσης μεταξύ των κόμβων του κυκλώματος και τα ρεύματα που ρέουν σε κάθε βρόχο του δικτύου. Το κύκλωμα αυτό μπορεί να περιγραφεί με διαφορετικά γραμμικά συστήματα. Έστω v_k , $k = 1, \dots, 4$ η τάση μεταξύ εκάστου εκ των τεσσάρων πρώτων κόμβων και του πέμπτου κόμβου. Έστω i_k , $k = 1, \dots, 4$ το (δεξιόστροφα ρέον) ρεύμα εντός εκάστου εκ των βρόχων του διαγράμματος.



Εικόνα 2.2. Δίκτυο αντιστάσεων.

Από τον νόμο του Ohm, η πτώση τάσης σε μία αντίσταση δίδεται από την αντίσταση επί το ρεύμα. Για παράδειγμα, ο κλάδος μεταξύ των κόμβων 1 και 2 δίδει

$$v_1 - v_2 = r_{12} (i_2 - i_1).$$

Με χρήση της *αγωγιμότητας*, η οποία είναι το αντίστροφο της αντίστασης, $g_{kj} = 1/r_{kj}$, ο νόμος του Ohm γίνεται

$$i_2 - i_1 = g_{12} (v_1 - v_2).$$

Η πηγή του ρεύματος περιλαμβάνεται στην εξίσωση

$$v_3 - v_5 = r_{35} i_4$$

Σύμφωνα με τον νόμο ισορροπίας τάσεων του Kirchhoff, το άθροισμα των διαφορών τάσης γύρω από κάθε βρόχο είναι μηδέν. Για παράδειγμα, γύρω από τον βρόχο 1 έχουμε

$$(v_1 - v_4) + (v_4 - v_5) + (v_5 - v_2) + (v_2 - v_1) = 0.$$

Συνδυάζοντας το νόμο Kirchhoff με τον νόμο του Ohm τελικά κατασκευάζουμε το σύστημα γραμμικών εξισώσεων που διέπει το κύκλωμα

$$\mathbf{R}\mathbf{i} = \mathbf{b},$$

όπου \mathbf{i} είναι το άνωσμα των ρευμάτων

$$\mathbf{i} = \begin{pmatrix} i_1 \\ i_2 \\ i_3 \\ i_4 \end{pmatrix}$$

\mathbf{b} είναι το άνωσμα της πηγής

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ V_s \end{pmatrix}$$

και \mathbf{R} ο πίνακας αντιστάσεων

$$\begin{pmatrix} r_{25} + r_{12} + r_{14} + r_{45} & -r_{12} & -r_{14} & -r_{45} \\ -r_{12} & r_{23} + r_{12} + r_{13} & -r_{13} & 0 \\ -r_{14} & -r_{13} & r_{14} + r_{13} + r_{34} & -r_{34} \\ -r_{45} & 0 & -r_{34} & r_{35} + r_{45} + r_{34} \end{pmatrix}.$$

Το σύστημα αυτό μπορεί να λυθεί ως προς τα ρεύματα και μετά, με χρήση του νόμου του Ohm να υπολογισθούν οι αντιστάσεις. Εναλλακτικά, σύμφωνα με τον νόμο ισορροπίας ρευμάτων του Kirchoff, άθροισμα των ρευμάτων σε κάθε κόμβο είναι μηδέν. Για παράδειγμα στον κόμβο 1 έχουμε:

$$(i_1 - i_2) + (i_2 - i_3) + (i_3 - i_1) = 0$$

Συνδυάζοντας τον νόμο Kirchoff με τον νόμο του Ohm (στην μορφή που γράφεται με αγωγιμότητα αντί για αντίσταση), λαμβάνομε το σύστημα

$$\mathbf{G}\mathbf{v} = \mathbf{c},$$

όπου \mathbf{v} είναι το άνωσμα τάσεων,

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix}$$

\mathbf{c} είναι το πηγαιό ρεύμα

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ g_{35}V_s \\ 0 \end{pmatrix}$$

Και \mathbf{G} είναι ο πίνακας αγωγιμότητας

$$\begin{pmatrix} g_{12} + g_{13} + g_{14} & -g_{12} & -g_{13} & -g_{14} \\ -g_{12} & g_{12} + g_{23} + g_{25} & -g_{23} & 0 \\ -g_{13} & -g_{23} & g_{13} + g_{23} + g_{34} + g_{35} & -g_{34} \\ -g_{14} & 0 & -g_{34} & g_{14} + g_{34} + g_{45} \end{pmatrix}.$$

- Το σύστημα αυτό μπορεί να λυθεί ως προς τις τάσεις και μετά, χρησιμοποιώντας τον νόμο του Ohm να υπολογισθούν τα ρεύματα.

Αποστολή σας είναι να πιστοποιήσετε ότι αμφότερες οι τεχνικές δίδουν τα ίδια αποτελέσματα. Μπορείτε να χρησιμοποιήσετε δικές σας τιμές πηγαιάς τάσης και αντιστάσεων.

4. Ο αλγόριθμος Cholesky παραγοντοποιεί μία σπουδαία κατηγορία μητρών (πινάκων) γνωστών με τον όρο *θετικοί ορισμένοι πίνακες*. Ο Andre-Louis Cholesky (1875-1918) ήταν Γάλλος αξιωματικός και ασχολήθηκε με την γεωδαισία και την τοπογραφία στην Κρήτη και Β. Αφρική λίγο προ του Α' Παγκοσμίου Πολέμου. Ανέπτυξε την ομώνυμή του για να υπολογίζει λύσεις σε συστήματα κανονικών εξισώσεων που προκύπτουν από ορισμένα γεωδαιτικά προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων μέθοδο (εξομοίωση δεδομένων). Ένας πραγματικός συμμετρικός πίνακας $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ είναι θετικός ορισμένος, όταν ισχύουν οι ακόλουθες ισοδύναμες συνθήκες:

- Η τετραγωνική (*quadratic*) μορφή $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ είναι θετική για όλα τα μη-μηδενικά ανύσματα \mathbf{x} .

- Όλες οι οριζούσες A_i που σχηματίζονται από υποπίνακες κάθε τάξης συμμετρικούς περί την διαγώνιο του A είναι θετικές.
- Όλες οι ιδιοτιμές $\lambda(A)$ είναι θετικές.
- Υπάρχει πραγματικός πίνακας R τέτοιος ώστε $A = R^T R$.

Το γεγονός είναι πως οι συνθήκες αυτές είναι δύσκολο, ή υπολογιστικά απαιτητικό να χρησιμοποιηθούν ως βάση για να πιστοποιηθεί εάν ένας πίνακας είναι θετικός ορισμένος. Στο MATLAB, ο καλύτερος τρόπος πιστοποίησης αυτής της ιδιότητας είναι η χρήση της συνάρτησης chol. Για λεπτομέρειες ανατρέξτε στην online βοήθεια του MATLAB ή δώσατε την εντολή help chol.

Ποία από τις ακόλουθες οικογένειες πινάκων είναι θετική ορισμένη;

$M = \text{magic}(n)$

$H = \text{hilb}(n)$

$P = \text{pascal}(n)$

$I = \text{eye}(n, n)$

$R = \text{randn}(n, n)$

$R = \text{randn}(n, n); A = R' * R$

$R = \text{randn}(n, n); A = R' + R$

$R = \text{randn}(n, n); I = \text{eye}(n, n); A = R' + R + n*I$

5. Έστω

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

- Δείξτε ότι το γραμμικό σύστημα $Ax = b$ έχει απείρως πολλές λύσεις. Περιγράψατε το σύνολο των πιθανών λύσεων.
- Υποθέσατε ότι για την λύση του συστήματος $Ax = b$ χρησιμοποιείται Γκαουσιανή απαλοιφή με ακριβή αριθμητική. Επειδή υπάρχουν απείρως πολλές λύσεις, είναι μάλλον παράλογο να αναμένει κανείς τον υπολογισμό μίας συγκεκριμένης λύσης. Τι συμβαίνει στην πραγματικότητα;
- Χρησιμοποιήσατε την συνάρτηση `bslashtx` για λύση της $Ax = b$ σε πραγματικό υπολογιστή με αριθμητική κινητής υποδιαστολής. Τι λύση λαμβάνετε; Γιατί; Κατά ποία έννοια είναι αυτή μία «καλή» λύση; Κατά ποία έννοια αποτελεί αυτή μία «κακή» λύση; to solve $Ax = b$ on an actual computer with floating-point arithmetic.
- Εξηγήσατε γιατί ο τελεστής `backslash (\)` $x=A \backslash b$ δίδει λύση διαφορετική από την $x = \text{bslashtx}(A,b)$.

Κεφάλαιο 3⁷

Ιδιοτιμές και Ιδιάζουσες Τιμές

3.1. Ανάλυση (αποσύνθεση) Ιδιοτιμών και Ιδιαζουσών Τιμών.

Μία *ιδιοτιμή* ή *χαρακτηριστική τιμή* (*eigenvalue*) και ένα *ιδιοδιάνυσμα* (*eigenvector*) ενός τετράγωνου πίνακα A είναι ένα μονότιμο μέγεθος λ και ένα μη-μηδενικό άνυσμα x τέτοια, ώστε

$$Ax = \lambda x \quad (3.1)$$

Μία *ιδιάζουσα τιμή* (*singular value*) και ένα *ζεύγος ιδιαζόντων ανυσμάτων* (*singular vectors*) ενός τετράγωνου ή ορθογώνιου A πίνακα είναι ένα μη-μηδενικό μονότιμο μέγεθος σ και δύο μη-μηδενικά ανύσματα u και v τέτοια, ώστε

$$Av = \sigma u \quad (3.2\alpha)$$

$$A^H u = \sigma v \quad (3.2\beta)$$

Ο «εκθέτης» στην A^H δηλώνει τον *Ερμιτιανό ανάστροφο* (*Hermitian transpose*), δηλαδή τον συζυγή ανάστροφο ενός μιγαδικού πίνακα. Εάν πίνακας είναι πραγματικός, τότε ο ανάστροφός του δηλώνεται ως A^T . Ο όρος *ιδιάζουσα τιμή* σχετίζεται με την «απόσταση» ενός πίνακα από το σύνολο των ιδιαζόντων πινάκων.

Οι ιδιοτιμές έχουν μεγάλη σημασία σε περιπτώσει όπου ένας πίνακας (μήτρα) περιγράφει *μετασχηματισμό* από ένα διανυσματικό χώρο επί του εαυτού του. Τα συστήματα γραμμικών κανονικών διαφορικών εξισώσεων αποτελούν σπουδαίο τέτοιο παράδειγμα. Οι τιμές της λ μπορεί να αντιστοιχούν σε συχνότητες ταλάντωσης, κρίσιμες τιμές παραμέτρων ευστάθειας, ενεργειακές στάθμες ατόμων κ.ο.κ. Οι ιδιάζουσες τιμές έχουν μεγάλη σημασία όταν ένας πίνακας περιγράφει μετασχηματισμό από ένα διανυσματικό χώρο σε ένα άλλο διανυσματικό χώρο, πιθανόν διαφορετικών διαστάσεων. Τα συστήματα με περισσότερους ή λιγότερους άγνωστους από εξισώσεις αλγεβρικών εξισώσεων αποτελούν τα αντίστοιχα σπουδαία παράδειγμα.

Οι ορισμοί των ιδιοδιανυσμάτων και των ιδιαζόντων ανυσμάτων δεν περιλαμβάνουν κανονικοποίηση. Ένα ιδιοδιάνυσμα x , ή ένα ζεύγος ιδιαζόντων ανυσμάτων u και v , μπορούν να πολλαπλασιασθούν (υποστούν μεταβολές κλίμακας) με οιονδήποτε μη-μηδενικό παράγοντα χωρίς αλλαγή καμίας από τις σημαντικές ιδιότητές τους. Τα ιδιοδιανύσματα συμμετρικών πινάκων είναι συνήθως κανονικοποιημένα ώστε να έχουν μοναδιαίο Ευκλείδειο μήκος, $\|x\|_2=1$. Αντιθέτως, τα ιδιοδιανύσματα μη-συμμετρικών πινάκων μπορούν να έχουν διαφορετικές κανονικοποιήσεις σε διαφορετικές περιπτώσεις. Τα ιδιάζοντα ανύσματα σχεδόν πάντοτε κανονικοποιούνται ώστε να έχουν Ευκλείδειο μήκος ίσο προς την μονάδα, $\|u\|_2 = \|v\|_2 = 1$.

Η εξίσωση ιδιοτιμών – ιδιοδιανυσμάτων ενός τετράγωνου πίνακα είναι

$$(A - \lambda I)x = 0, \quad x \neq 0 \quad (3.3)$$

Αυτό σημαίνει ότι ο $A - \lambda I$ είναι ιδιάζων και ότι

⁷ Τα Μέρη 3.1 – 3.5 και 3.7 των παρούσων σημειώσεων έχουν βασισθεί στο Κεφαλαίο 3 (Eigenvalues and Singular Values) του βιβλίου «*Numerical Computing with Matlab*», από τον Cleve Moller, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2004.

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad (3.4)$$

Η εξίσωση (3.4) ονομάζεται *χαρακτηριστική εξίσωση* ή *χαρακτηριστικό πολυώνυμο* του A . Ο βαθμός του πολυωνύμου είναι ο αυτός με τον βαθμό του πίνακα, πράγμα που σημαίνει ότι ένας πίνακας $n \times n$ έχει n ιδιοτιμές, συμπεριλαμβανομένων και των πολλαπλών (δηλ. των πολλαπλών ριζών του πολυωνύμου). Όπως η ορίζουσα, έτσι και το χαρακτηριστικό πολυώνυμο είναι πολύ χρήσιμο για θεωρητική εργασία, αλλά όχι για στιβαρούς και αξιόπιστους αριθμητικούς αλγορίθμους.

Έστω $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ οι ιδιοτιμές ενός πίνακα A , έστω x_1, x_2, \dots, x_n το σύνολο των αντιστοίχων ιδιοδιανυσμάτων, Λ ένας $n \times n$ διαγώνιος πίνακας με τα λ_j στην διαγώνιο και X ένας $n \times n$ πίνακας του οποίου η j -στη στήλη είναι x_j . Τότε,

$$AX = X\Lambda \quad (3.5)$$

Η τοποθέτηση του Λ στα δεξιά του X είναι απαραίτητη, ώστε εκάστη στήλη του X να πολλαπλασιάζεται με την αντίστοιχη ιδιοτιμή της. Ας κάνουμε τώρα την κρίσιμη παραδοχή – η οποία δεν αληθεύει για όλους τους πίνακες – ότι τα ιδιοδιανύσματα είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Τότε, υπάρχει ο αντίστροφος X^{-1} και

$$A = X\Lambda X^{-1} \quad (3.6)$$

Για μη-ιδιάζοντα X , η έκφραση αυτή είναι γνωστή ως *αποσύνθεση ή παραγοντοποίηση ιδιοτιμών* του πίνακα A . Εφόσον υπάρχει, μας επιτρέπει να διερευνήσουμε τις ιδιότητες του A αναλύοντας τον διαγώνιο πίνακα Λ . Για παράδειγμα, οι δυνάμεις του πίνακα μπορούν να εκφραστούν ως δυνάμεις μονοτίμων μεγεθών (των ιδιοτιμών) ως ακολούθως:

$$A^p = X\Lambda^p X^{-1} \quad (3.7)$$

Εάν τα ιδιοδιανύσματα του A δεν είναι γραμμικά ανεξάρτητα, τότε αυτή η αποσύνθεση δεν υπάρχει και οι δυνάμεις του A έχουν πιο σύνθετη συμπεριφορά.

Εάν T είναι οιοσδήποτε μη-ιδιάζων πίνακας, τότε το γινόμενο

$$B = T^{-1}AT \quad (3.8)$$

είναι γνωστό ως *μετασχηματισμός ομοιότητας* (*similarity transformation*) και οι A και B λέγεται ότι είναι *όμοιοι*. Εάν $Ax = \lambda x$ και $y = Tx$, τότε $By = \lambda y$. Με άλλα λόγια, ένας μετασχηματισμός ομοιότητας διατηρεί τις ιδιοτιμές αναλλοίωτες. Η αποσύνθεση ιδιοτιμών είναι μία προσπάθεια να ευρεθεί μετασχηματισμός ομοιότητας σε διαγώνια μορφή.

Οι εξισώσεις που ορίζουν τις ιδιάζουσες τιμές και διανύσματα είναι:

$$AV = U\Sigma \quad (3.9\alpha)$$

$$A^H U = V\Sigma^H \quad (3.9\beta)$$

Εδώ Σ είναι ένας πίνακας του αυτού μεγέθους με τον A , τα στοιχεία του οποίου είναι παντού μηδέν εκτός από τη κύρια διαγώνιο. Αποδεικνύεται ότι τα ιδιάζοντα ανύσματα μπορούν πάντοτε να επιλεγούν ώστε να είναι *αμοιβαία ορθογώνια*, οπότε οι πίνακες U και V , των οποίων οι στήλες είναι κανονικοποιημένα ιδιάζοντα ανύσματα ικανοποιούν τις συνθήκες $U^H U = I$ and $V^H V = I$. Με άλλα λόγια, οι U και V are *ορθογώνιοι* εφόσον είναι πραγματικοί, ή *μοναδιαίοι* εφόσον είναι μιγαδικοί. Συνακολούθως,

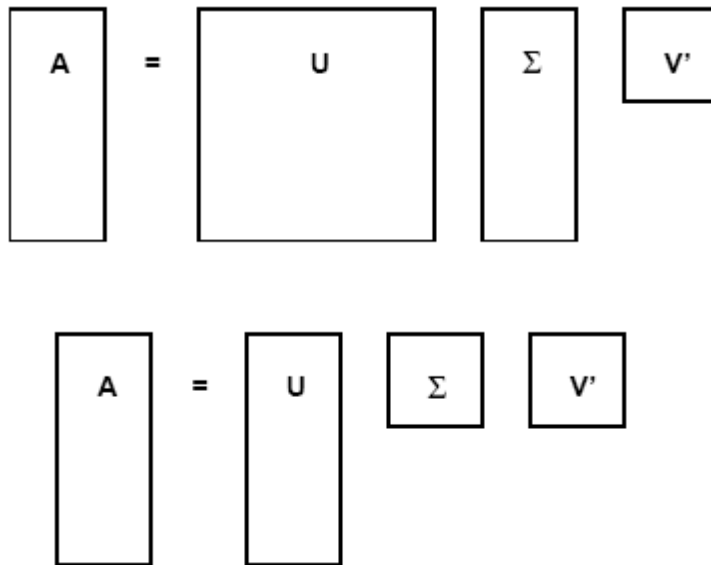
$$A = U\Sigma V^H \quad (3.10)$$

Με Σ διαγώνιο και ορθογώνιους ή μοναδιαικούς U και V . Η (3.10) είναι γνωστή ως *αποσύνθεση ή παραγοντοποίηση ιδιάζουσών τιμών* (*singular value decomposition*, ή *SVD*) του πίνακα

A.

Σε όρους γραμμικής άλγεβρας, η αποσύνθεση ιδιοτιμών ισχύει όταν ένας $n \times n$ τετράγωνος πίνακας A αντιπροσωπεύει απεικόνιση ενός n -διάστατου χώρου επί του εαυτού του. Στη περίπτωση αυτή προσπαθούμε να βρούμε την *ανυσματική βάση* (δηλ. το σύστημα συντεταγμένων) του χώρου, στο οποίο ώστε ο πίνακας γίνεται διαγώνιος. Η βάση αυτή μπορεί να είναι μιγαδική ακόμη και αν ο A είναι πραγματικός. Εάν τα ιδιοδιανύσματα δεν είναι γραμμικά ανεξάρτητα μεταξύ τους, τότε ένας τέτοιος ανυσματικός χώρος δεν υφίσταται καν.

Η αποσύνθεση ιδιαζουσών τιμών ισχύει εάν ένα δυνητικά ορθογώνιος $m \times n$ πίνακας A αντιπροσωπεύει απεικόνιση ενός n -χώρου (n -διάστατου χώρου) επί ενός m -χώρου. Στην περίπτωση αυτή προσπαθούμε να βρούμε μία αλλαγή ανυσματικής βάσης τέτοια, ώστε ο A να γίνεται διαγώνιος. Τέτοιες βάσεις υπάρχουν πάντοτε και είναι πάντα πραγματικές εάν ο A είναι πραγματικός. Οι πίνακες μετασχηματισμού είναι ορθογώνιοι ή μοναδιαίοι και πάντοτε διατηρούν τα μήκη και δεν μεγεθύνουν τα σφάλματα.



Εικόνα 3.1. Πλήρης και «οικονομική» SVD.

Εάν ο A είναι $m \times n$ με $m > n$, τότε στην πλήρη SVD, ο U είναι ένας μεγάλος τετράγωνος πίνακας $m \times m$, του οποίου οι τελευταίες $m - n$ στήλες είναι «πρόσθετες» με την έννοια ότι δεν απαιτούνται για την ανακατασκευή του A . Μία δεύτερη έκδοση της SVD που εξοικονομεί μνήμη όταν ο A είναι παραλληλόγραμμος, είναι γνωστή ως «SVD οικονομικού μεγέθους». Στην περίπτωση αυτή υπολογίζονται μόνο οι πρώτες n στήλες του U και οι πρώτες n γραμμές του Σ . Ο πίνακας V είναι πάντοτε $n \times n$ σ' αμφότερες τις περιπτώσεις. Η Εικόνα 3.1 δείχνει τις μορφές των σχετικών πινάκων στις δύο εκδόσεις, αμφότερες των οποίων μπορούν να γραφούν $A = U\Sigma V^H$, έστω και αν οι U and Σ της οικονομικής έκδοσης είναι υπο-πίνακες της πλήρους έκδοσης!

3.2 Ένα παράδειγμα

Παράδειγμα των αποσυνθέσεων ιδιοτιμών και ιδιαζουσών τιμών ενός μικρού τετράγωνου πίνακα δίδεται με ένα από τους δοκιμαστικούς πίνακες από την πινακοθήκη του MATLAB.

`A = gallery(3)`

Αυτός είναι

$$A = \begin{bmatrix} -149 & -50 & -154 \\ 537 & 180 & 546 \\ -27 & -9 & -25 \end{bmatrix}$$

και έχει κατασκευασθεί έτσι, ώστε το χαρακτηριστικό του πολυώνυμο να παραγοντοποιείται «όμορφα».

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = \lambda^3 - 6\lambda^2 + 11\lambda - 6 = (\lambda - 1)(\lambda - 2)(\lambda - 3)$$

Οι ιδιοτιμές λοιπόν είναι $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 2$, $\lambda_3 = 3$, και

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

Ο πίνακας ιδιοδιανυσμάτων μπορεί να κανονικοποιηθεί ώστε τα στοιχεία του να είναι όλα ακέραια:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & -4 & 7 \\ -3 & 9 & -49 \\ -3 & -1 & -3 \end{bmatrix}.$$

Ο αντίστροφος του X επίσης έχει ακέραια στοιχεία:

$$\mathbf{X}^{-1} = \begin{bmatrix} 130 & 43 & 133 \\ 27 & 9 & 28 \\ -3 & -1 & -3 \end{bmatrix}$$

Οι πίνακες αυτοί δίδουν την αποσύνθεση ιδιοτιμών:

$$A = X \mathbf{\Lambda} X^{-1}$$

Η αποσύνθεση ιδιαζουσών τιμών δεν μπορεί να εκφρασθεί το ίδιο καλά με μικρούς ακραίους. Οι ιδιάζουσες τιμές είναι οι θετικές ρίζες της εξίσωσης

$$\sigma^6 - 668737\sigma^4 + 4096316\sigma^2 - 36 = 0$$

η οποία δεν παραγοντοποιείται «όμορφα». Για τον λόγο αυτό καταφεύγουμε σε αριθμητική επίλυση:

$$[U, S, V] = \text{svd}(A)$$

η οποία δίδει

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} -0.2691 & -0.6798 & 0.6822 \\ 0.9620 & -0.1557 & 0.2243 \\ -0.0463 & 0.7167 & 0.6959 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 817.7597 & 0 & 0 \\ 0 & 2.4750 & 0 \\ 0 & 0 & 0.003 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 0.6823 & -0.6671 & 0.2990 \\ 0.2287 & -0.1937 & -0.9540 \\ 0.6944 & 0.7193 & 0.0204 \end{bmatrix}$$

Η έκφραση U^*S^*V' ανακατασκευάζει τον αρχικό πίνακα A εντός των σφαλμάτων στρογγύλευσης.

Για τον πίνακα `gallery(3)` υπάρχει μεγάλη διαφορά μεταξύ των ιδιοτιμών 1, 2 και 3, και

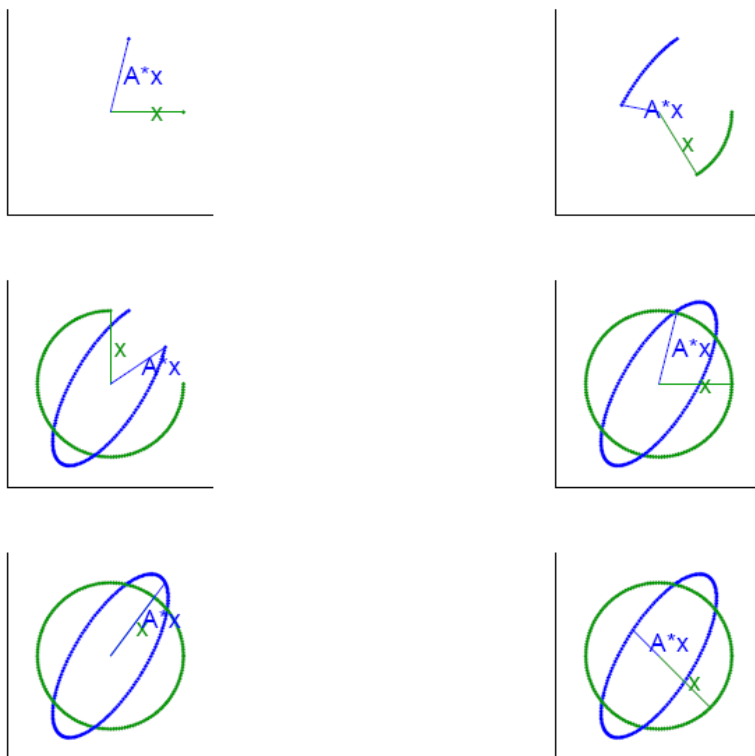
των ιδιάζουσών τιμών, 817, 2.47, και 003. Αυτό οφείλεται – και θα διευκρινισθεί αργότερα – στο γεγονός ότι ο πίνακας του παραδείγματος πόρω απέχει από του να είναι συμμετρικός.

3.3. Το πρόγραμμα επίδειξης eigshow

Η συνάρτηση eigshow διατίθεται μαζί με το πακέτο προγραμμάτων επίδειξης του MATLAB. Μπορεί να εκτελεσθεί χωρίς ορίσματα και κατά βάση αποτελεί πρόγραμμα-οδηγό ενός GUI που βοηθά στην εξοικείωση με την παραγοντοποίηση ιδιοτιμών – ιδιοδιανυσμάτων και ιδιάζουσών τιμών – ιδιάζόντων ανυσμάτων με ανάλυση πραγματικών 2×2 πινάκων. Οι πίνακες αυτοί μπορούν να επιλεγθούν από το drop-down μενού την κορυφή του GUI. Ο προεπιλεγμένος πίνακας είναι

$$A = \begin{bmatrix} 1/4 & 3/4 \\ 1 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Αρχικά, η eigshow εικονίζει το μοναδιαίο άνυσμα $x = [1, 0]^T$, καθώς και το άνυσμα Ax , το οποίο βασικά είναι η πρώτη στήλη του A . Το άνυσμα x εικονίζεται με πράσινο χρώμα και μπορεί να αλλάξει (περιστραφεί) γύρω από τον μοναδιαίο κύκλο με την βοήθεια του ποντικιού. Η μεταβολή του x , προκαλεί αντίστοιχη μεταβολή του Ax η οποία εικονίζεται με μπλέ χρώμα. Τα τέσσερα πρώτα γραφήματα της Εικόνας 3.2 παριστάνουν ενδιάμεσα βήματα καθώς το x διαγράφει έναν πράσινο μοναδιαίο κύκλο. Το σχήμα της προκύπτουσας μπλέ τροχιάς Ax είναι ελλειπτικό, όπως επίσης διδάσκει ένα σημαντικό θεώρημα και καθόλου τετριμμένο θεώρημα της Γραμμικής Άλγεβρας. Η eigshow παρέχει μία «γραφική απόδειξη» αυτού του θεωρήματος.



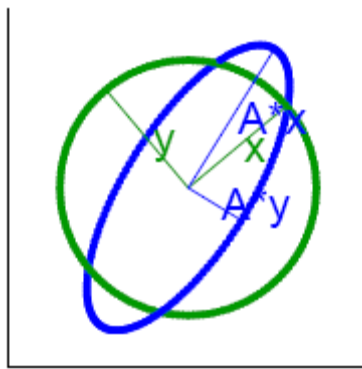
Εικόνα 3.2. Στιγμιότυπα από την εκτέλεση της eigshow.

Η eigshow προτρέπει: «*Make Ax parallel to x*». Εάν ακολουθήσετε την προτροπή θα διαπιστώσετε ότι στην διεύθυνση x στην οποία τα δύο ανύσματα γίνονται παράλληλα, ο τελεστής

A δεν είναι παρά ένας πολλαπλασιαστικός παράγοντας λ . Με άλλα λόγια, το άνυσμα x καθίσταται ιδιοδιάνυσμα και το μήκος του Ax είναι η αντιστοιχούσα ιδιοτιμή.

Τα δύο τελευταία γραφήματα της Εικόνας 3.2 δείχνουν τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του ανωτέρω πίνακα. Η πρώτη ιδιοτιμή είναι θετική, έτσι ώστε το γινόμενο Ax να είναι ομόροπο του ιδιοδιανύσματος x . Το μήκος του Ax είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή, που στην προκειμένη περίπτωση είναι $5/4$. Η δεύτερη ιδιοτιμή είναι αρνητική, ώστε το Ax να είναι παράλληλο μεν, αντίρροπο δε του x . Το μήκος Ax είναι $1/2$ και η αντίστοιχη ιδιοτιμή $-1/2$.

Είναι αξιοσημείωτο ότι τα δύο ιδιοδιανύσματα δεν ταυτίζονται με τον μεγάλο και μικρό άξονα της έλλειψης. Αυτό θα συνέβαινε εάν ο πίνακας ήταν συμμετρικός. Ο προεπιλεγμένος ανωτέρω πίνακας A είναι σχεδόν συμμετρικός, αλλά όχι ακριβώς. Υπάρχουν επίσης πίνακες για τους οποίους δεν είναι δυνατόν να βρεθεί πραγματικό x τέτοιο ώστε Ax να είναι παράλληλο στο x .



Εικόνα 3.3. Η eigshow σε τύπο εκτέλεσης SVD.

Οι άξονες της έλλειψης έχουν μεγάλη σημασία στην περίπτωση της αποσύνθεσης ιδιαζουσών τιμών. Τα αποτελέσματα της eigshow, όταν εκτελείται σε επιλογή svd, φαίνονται στην Εικόνα 3.3. Εδώ επίσης το ποντίκι μπορεί να μεταβάλλει το άνυσμα x γύρω από τον μοναδιαίο κύκλο, αλλά τώρα υπάρχει και ένα δεύτερο άνυσμα y που παρακολουθεί το x και παραμένει ορθογώνιο προς αυτό. Τα μήκη Ax και Ay διαγράφουν ελλείψεις αλλά συνήθως δεν είναι ορθογώνια μεταξύ τους. Όταν τα κάνετε ορθογώνια θα παρατηρήσετε ότι ταυτίζονται με τους άξονες της έλλειψης. Τα άνυσμα x και y είναι οι στήλες του U στην SVD, ενώ τα άνυσμα Ax και Ay είναι πολλαπλάσια των στηλών του V , και τα μήκη των αξόνων είναι οι ιδιάζουσες τιμές.

3.4. Το Χαρακτηριστικό Πολυώνυμο

Έστω A ο 20×20 διαγώνιος πίνακας με στοιχεία $1, 2, \dots, 20$ επί της διαγωνίου. Προφανώς, οι ιδιοτιμές του A είναι τα διαγώνια στοιχεία του. Το χαρακτηριστικό του πολυώνυμό του $\det(A - \lambda I)$, είναι

$$\begin{aligned} &\lambda^{20} - 210\lambda^{19} + 20615\lambda^{18} - 1256850\lambda^{17} + 53327946\lambda^{16} \\ &- 1672280820\lambda^{15} + 40171771630\lambda^{14} - 756111184500\lambda^{13} \\ &+ 11310276995381\lambda^{12} - 135585182899530\lambda^{11} \\ &+ 1307535010540395\lambda^{10} - 1014229986551145\lambda^9 \\ &+ 63030812099294896\lambda^8 - 31133364316139064\lambda^7 \\ &+ 1206647803780373360\lambda^6 - 3599979517947607200\lambda^5 \\ &+ 8037811822645051776\lambda^4 - 12870931245150988800\lambda^3 \\ &+ 13803759753640704000\lambda^2 - 8752948036761600000\lambda \\ &+ 2432902008176640000 \end{aligned}$$

Ο συντελεστής του $-\lambda^{19}$ είναι 210, αριθμός που αντιστοιχεί στο άθροισμα των ιδιοτιμών. Ο συντελεστής το όρου λ^0 είναι $20!$, το οποίο αντιστοιχεί στο γινόμενο των ιδιοτιμών. Οι λοιποί συντελεστές είναι διάφορα αθροίσματα και γινόμενα των ιδιοτιμών.

Οι συντελεστές του χαρακτηριστικού πολυωνύμου παρατέθηκαν σε όλη τους την μεγαλοπρέπεια, προκειμένου να καταστεί σαφές ότι εάν επιχειρηθούν με αυτούς αριθμητικοί υπολογισμοί κινητής υποδιαστολής, τι πιθανότερο είναι να προκληθούν σοβαρά σφάλματα στρογγύλευσης και/ή υπερχείλιση μνήμης (overflow). Η αναπαράστασή τους και μόνο ως αριθμών κινητής υποδιαστολής κατά το πρότυπο IEEE αλλάζει πέντε εξ αυτών: Για παράδειγμα, τα τρία τελευταία ψηφία του συντελεστή του λ^4 αλλάζουν από 776 σε 392. Με ακρίβεια 16 δεκαδικών ψηφίων, οι ρίζες του πολυωνύμου που εξάγονται με αναπαράσταση των συντελεστών ως αριθμών κινητής υποδιαστολής είναι

```

1.0000000000000000
2.0000000000000096
2.99999999986640
4.00000000495944
4.99999991473414
6.00000084571661
6.99999455544845
8.00002443256894
8.99992001186835
10.00019696490537
10.99962843024064
12.00054374363591
12.99938073455790
14.00054798867380
14.99962658217055
16.00019208303847
16.99992773461773
18.00001875170604
18.99999699774389
20.00000022354640
    
```

Βλέπουμε ότι αποθηκεύοντας και μόνο τους συντελεστές ως αριθμούς διπλής ακρίβειας αλλάζει τις υπολογιζόμενες τιμές ορισμένων ιδιοτιμών από το πέμπτο δεκαδικό ψηφίο. Τα χαρακτηριστικό πολυώνυμο δεν είναι ένας καλός τρόπος ανάλυσης των ιδιοτιμών του αντιστοιχούντος πίνακα!

3.5. Συμμετρικοί και Ερμιτιανοί Πίνακες.

Ένας πραγματικός πίνακας είναι συμμετρικός όταν είναι ίσος με τον ανάστροφό του, $A = A^T$. Ένας μιγαδικός πίνακας είναι συμμετρικός, όταν ισούται με τον μιγαδικό συζυγή ανάστροφό του, $A = A^H$. Οι ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα ενός πραγματικού συμμετρικού πίνακα είναι πραγματικές. Επιπλέον, ο πίνακας των ιδιοδιανυσμάτων μπορεί να επιλεγεί να είναι ορθογώνιος, οπότε εάν ο A είναι πραγματικός, και $A = A^T$, τότε η αποσύνθεση ιδιοτιμών του είναι

$$A = X\Lambda X^T \quad (3.11)$$

με $X^T X = I = X X^T$. Οι ιδιοτιμές ενός μιγαδικού Ερμιτιανού πίνακα είναι οπωσδήποτε πραγματικές, αν και τα ιδιοδιανύσματα οφείλουν να είναι μιγαδικά. Επιπλέον, τα ιδιοδιανύσματά του μπορεί να επιλεγούν να είναι μοναδιαία. Συνακολούθως, εάν ο A είναι μιγαδικός και $A = A^H$, τότε η αποσύνθεση ιδιοτιμών του είναι

$$A = X\Lambda X^H \quad (3.12)$$

με with Λ πραγματικό και $X^H X = I = X X^H$.

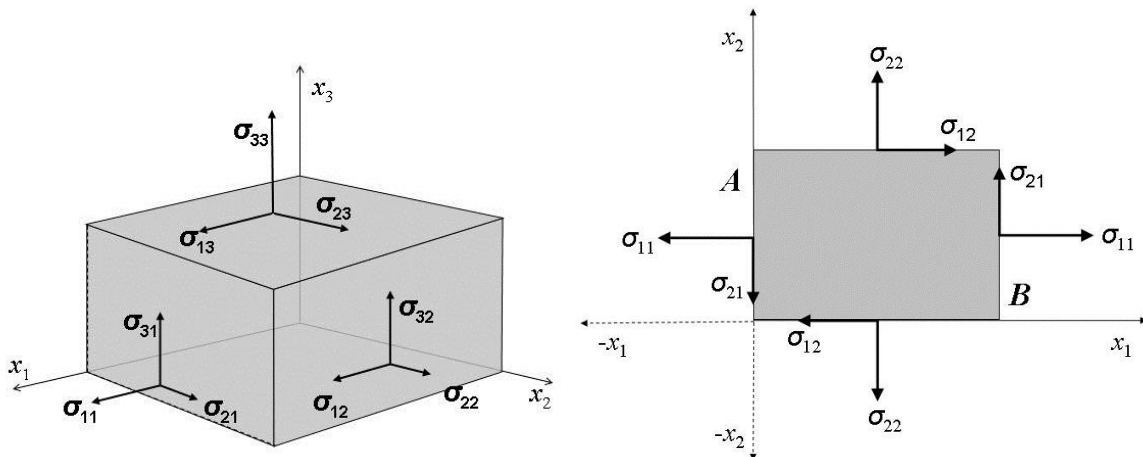
- Στους συμμετρικούς και Ερμιτιανούς πίνακες οι ιδιοτιμές και ιδιάζουσες τιμές είναι στενά συνδεδεμένες. Μία μη-μηδενική ιδιοτιμή $\lambda \geq 0$ είναι επίσης και ιδιάζουσα τιμή, $\sigma = \lambda$. Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα και ιδιάζοντα ανύσματα είναι μεταξύ τους ίσα, $u = v = x$. Μία αρνητική ιδιοτιμή $\lambda < 0$, πρέπει να αντιστρέψει το πρόσημό της προκειμένου να γίνει ιδιάζουσα τιμή, $\sigma = |\lambda|$. Στην περίπτωση αυτή, τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα και ιδιάζοντα ανύσματα είναι $u = -v = x$.

3.6. Τανυστής τάσης, κύριες τάσεις και ελλειψοειδές τάσεων.

Η Εικόνα 3.2 (αριστερά) αναπαριστά ένα παραλληλεπίπεδο διαφορικό (απειροστικό) όγκο με πλευρά επιφάνειας da . Υποθέτοντας ότι:

1. Οι τάσεις είναι ομογενείς σε όλο το υλικό που περιλαμβάνει τον θεωρούμενο διαφορικό όγκο·
2. Το υλικό ευρίσκεται σε κατάσταση στατικής ισορροπίας·
3. Δεν ασκούνται εσωτερικές δυνάμεις όπως η βαρύτητα επί της μάζας εντός του παραλληλεπίπεδου, και ροπές όπως εξωτερικό μαγνητικό πεδίο επί μαγνητικών διπόλων (π.χ. μαγνητικών ορυκτών)·

τότε η δύναμη που ασκείται επί της επιφάνειας da κατά την διεύθυνση x_i , λόγω της δύναμης η οποία ασκείται κατά την κάθετη διεύθυνση x_j , είναι $\sigma_{ij} da$. Για λόγους καθαρότητας εικονίζονται μόνο οι τάσεις επί των προσθίων εδρών, ενώ οι τάσεις επί των ομολόγων τους οπισθίων εδρών θα έχουν αντίθετο πρόσημο όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.2 (δεξιά). Για παράδειγμα, σ_{21} είναι η *διατμητική* τάση κατά την διεύθυνση x_2 που εφαρμόζεται επί της έδρας B . Εφόσον οι δυνάμεις είναι ομογενείς, η ομολόγος τάση που εφαρμόζεται από την πλευρά A προς το εξωτερικό του διαφορικού όγκου πρέπει να έχει το αυτό μέτρο. Για να διατηρηθεί στατική ισορροπία, η τάση που εφαρμόζεται από το εξωτερικό του διαφορικού όγκου επί της έδρας A πρέπει να έχει αντίθετη φορά (πρόσημο) κατά την διεύθυνση $-x_2$.



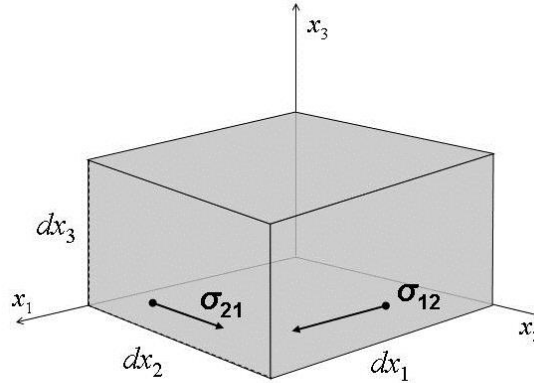
Εικόνα 3.2. *Αριστερά:* Παραλληλεπίπεδος διαφορικός όγκος με αναπαράσταση των κανονικών και διατμητικών τάσεων. *Δεξιά:* Αντιστροφή προσήμου στην περίπτωση ομογενών τάσεων.

Με βάση τα ανωτέρω, είναι δυνατόν να γίνουν αποσαφηνίσεις και να τεθούν περαιτέρω περιορισμοί στις ιδιότητες των σ_{ij} . Θεωρήσατε την καθαρή ροπή που ασκείται επί του παραλληλεπίπεδου των Σχημάτων 3.2 αριστερά και 3.3, γύρω από τον άξονα x_3 . Οι κανονικές τάσεις σ_{ii} δεν ασκούν ροπή. Οι διατμητικές τάσεις σ_{31} και σ_{32} επίσης δεν μπορούν να ασκήσουν ροπή γύρω από τον x_3 διότι δεν υπάρχει ο κατάλληλος βραχίονας. Οι διατμητικές τάσεις σ_{13} και σ_{23} αντισταθμίζονται από ίσες και αντίθετες δυνάμεις επί της κάτω έδρας του παραλληλεπίπεδου ($x_3=0$). Έτσι μένουν μόνο οι ροπές $\sigma_{21}(dx_2 \cdot dx_3) \cdot dx_1$ και $\sigma_{12}(dx_1 \cdot dx_3) \cdot dx_2$, οι οποίες πρέπει να

αντισταθμίζονται για υπάρξει στατική ισορροπία. Τελικά:

$$\sigma_{21}(dx_2 \cdot dx_3) \cdot dx_1 = \sigma_{12}(dx_1 \cdot dx_3) \cdot dx_2 \Rightarrow \sigma_{21} = \sigma_{12}.$$

Επαναλαμβάνοντας το επιχείρημα για την αντιστάθμιση ροπών γύρω από τους άξονες x_2 και x_1 τελικά διαπιστώνουμε ότι $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, δηλ. οι τάσεις είναι συμμετρικές. Η συμμετρία φυσικά αναφέρεται στο μέτρο των τάσεων και όχι στην φορά κατά την οποία ασκούνται και η οποία παριστάνεται με τον πρώτο δείκτη.



Εικόνα 3.3. Ομογενείς τάσεις – αντιστάθμιση ροπών.

Η προκύπτουσα διάταξη τάσεων μπορεί να αναπαρασταθεί με μία μήτρα ως εξής:

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

Η μήτρα $\bar{\sigma}$ είναι *τανυστής*, αν και επί του παρόντος δεν θα επιχειρηθεί η απόδειξη του διατί.

Η αποσύνθεση ιδιοτιμών – ιδιοδιανυσμάτων του τανυστή τάσης δίδεται από την εξίσωση (3.6):

$$\bar{\sigma} = R \cdot \Sigma \cdot R^{-1},$$

Οι ιδιοτιμές του τανυστή λαμβάνονται με επίλυση του χαρακτηριστικού πολυωνύμου

$$\begin{vmatrix} \sigma_{11} - \sigma & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} - \sigma & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} - \sigma \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \sigma^3 - I_1 \sigma^2 + I_2 \sigma - I_3 = 0,$$

όπου οι συντελεστές I_1 , I_2 και I_3 είναι *αμετάβλητοι* κάτω από ισομετρικούς μετασχηματισμούς (βλ. κατωτέρω), δηλ. η τιμή τους είναι ανεξάρτητη του συστήματος συντεταγμένων. Το φυσικό περιεχόμενο του τανυστή συμποσούται στις αμετάβλητες παραμέτρους του! Για παράδειγμα, η ολική τάση προς όλες τις διευθύνσεις, όπως στην περίπτωση της υδροστατικής ή λιθοστατικής πίεσης δίδεται από την αμετάβλητη I_1 . Οι τρεις αμετάβλητες του τανυστή τάσης είναι

$$I_1 = \sum_{i=1}^3 \sigma_{ii} = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}$$

το *ίχνος* του τανυστή,

$$I_2 = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{13} \\ \sigma_{31} & \sigma_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix} \quad \text{και} \quad I_3 = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix}$$

είναι η διακρίνουσα του τανυστή.

Οι τρεις λύσεις του χαρακτηριστικού πολυωνύμου σ_1, σ_2 και σ_3 ονομάζονται *κύριες κανονικές τάσεις* και όπως θα συζητηθεί κατωτέρω, παριστούν τα μέτρα τριών ανυσμάτων. Τα συνημίτονα διεύθυνσης των τριών ανυσμάτων αντιστοίχως είναι οι τρεις στήλες τη μήτρας R . Οι διπλοί δείκτες των κυρίων κανονικών τάσεων συγχωνεύονται σε έναν, αφού κατά μήκος αυτών των ανυσμάτων οι διατμητικές τάσεις γίνονται εξ' ορισμού μηδενικές. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο παραγοντοποιείται σύμφωνα με το θεμελιώδες θεώρημα της άλγεβρας:

$$(\sigma - \sigma_1) \cdot (\sigma - \sigma_2) \cdot (\sigma - \sigma_3) = 0$$

και οι αμετάβλητες του τανυστή γράφονται, συναρτήσκει των κυρίων κανονικών τάσεων με την μορφή:

$$I_1 = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$$

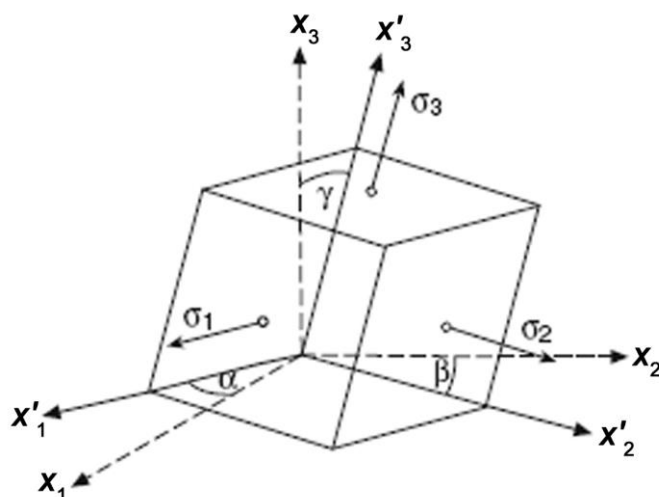
$$I_2 = \sigma_1\sigma_2 + \sigma_1\sigma_3 + \sigma_2\sigma_3$$

$$I_3 = \sigma_1\sigma_2\sigma_3$$

Μετά τον μετασχηματισμό ο τανυστής ανάγεται στην διαγώνιο μορφή

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

όπου οι κύριοι άξονες επιλέγονται έτσι ώστε να ισχύει $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$.



Εικόνα 3.4. Αναπαράσταση του τανυστή τάσης μετά την περιστροφή στο χαρακτηριστικό του σύστημα συντεταγμένων (x'_1, x'_2, x'_3)

Οι κύριες κανονικές τάσεις μπορούν να αναπαρασταθούν σε τρεις διαστάσεις με περιστροφή του διαφορικού όγκου του Σχήματος 3.2. Στο Σχήμα 3.4, οι διευθύνσεις των κυρίων τάσεων (x'_1, x'_2, x'_3) έχουν περιστραφεί σε σχέση με το σύστημα αναφοράς (x, y, z) . Στο σύστημα αναφοράς απαιτούνται έξι συνιστώσες κανονικών και διατμητικών τάσεων (λαμβάνοντας υπ' όψη και την συμμετρία του τανυστή), προκειμένου να καθορισθεί η εντατική κατάσταση του υλικού. Στο περιστρεφόμενο σύστημα (x'_1, x'_2, x'_3) απαιτούνται τρεις συνιστώσες κυρίων κανονικών τάσεων $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ και τρεις διευθύνσεις των αξόνων των κυρίων κανονικών τάσεων (α, β, γ) , ήτοι συνολικά έξι στοιχεία πληροφορίας ώστε να είναι η αντιστοιχία $(x, y, z) \rightarrow (x'_1, x'_2, x'_3)$ αμφιμονοσήμαντη και τοπολογικά πλήρης. Οι κύριες κανονικές τάσεις εφαρμόζονται καθέτως προ τις έδρες του απειροστικού παραλληλεπίπεδου, οι οποίες είναι ελεύθερες

διαμηθικών τάσεων.

Ας στρέψουμε τώρα την προσοχή μας στον αναλυτικό προσδιορισμό των ιδιοδιανυσμάτων του τανυστή τάσης, δηλ. του χαρακτηριστικού συστήματος συντεταγμένων. Μία μέθοδος που μπορεί άμεσα να εφαρμοσθεί για τον σκοπό αυτό είναι ο μετασχηματισμός ομοιότητας (εξίσωση 3.8) και, ειδικότερα, περιστροφές του συστήματος συντεταγμένων με τρόπο που να διατηρεί τα μήκη αναλλοίωτα (ισομετρικοί μετασχηματισμοί).

Χωρίς να υπεισέλθουμε σε πολλές λεπτομέρειες, είναι εύκολο να διαπιστωθεί ότι μία περιστροφή τριδιάστατου συστήματος ορθοκανονικών συντεταγμένων κατά γωνία α γύρω από τον άξονα x_3 (που συνήθως $\equiv z$) μπορεί να γίνει με τον τελεστή

$$R_{x_3}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Δεδομένου ότι ο R_{x_3} είναι ορθογώνιος, τότε ισχύει $R_{x_3}^T = R_{x_3}^{-1}$, είναι εύκολο να δειχθεί ότι η πράξη

$$A'(\alpha) = R_{x_3}^T(\alpha) \cdot A \cdot R_{x_3}(\alpha),$$

επιφέρει στροφή αντίθετη προς την φορά των δεικτών του ωρολογίου και διατηρεί τα μήκη αναλλοίωτα. Κατ' αντιστοιχία, περιστροφή τριδιάστατου συστήματος ορθοκανονικών συντεταγμένων κατά γωνία β γύρω από το άξονα x_2 (που συνήθως $\equiv y$) γίνεται με χρήση του τελεστή.

$$R_{x_2}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix}$$

και αντίστοιχης πράξης.

Άσκηση: Αποδείξτε ότι η περιστροφή κάθε ανύσματος $(x \ y \ z)^T$ γύρω από τον άξονα z αφήνει τα μήκη x και y αναλλοίωτα.

Μία πλήρης περιστροφή τριδιάστατου ορθοκανονικού (τρισορθογώνιου) συστήματος συντεταγμένων γίνεται με τρεις πράξεις: γνωστές ως *περιστροφές Euler*:

- a) Οι άξονες (x_1, x_2, x_3) περιστρέφονται γύρω από άξονα x_3 κατά γωνία α , αντίστροφα προς την φορά των δεικτών του ωρολογίου. Το νέο σύστημα συντεταγμένων $(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)$ είναι τέτοιο ώστε $x_3 \equiv \tilde{x}_3$.
- b) Οι άξονες $(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)$ περιστρέφονται γύρω από άξονα \tilde{x}_2 κατά γωνία β , αντίστροφα προς την φορά των δεικτών του ωρολογίου. Τα νέο σύστημα $(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_3)$ είναι τέτοιο ώστε $\tilde{x}_2 \equiv \underline{x}_2$.
- c) Οι άξονες $(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_3)$ περιστρέφονται γύρω από άξονα \underline{x}_3 κατά γωνία γ , αντίστροφα προς την φορά των δεικτών του ωρολογίου. Το νέο σύστημα (x'_1, x'_2, x'_3) είναι τέτοιο ώστε $x'_3 \equiv \underline{x}_3$.

Τρεις στροφές είναι απαραίτητες προκειμένου να ορισθεί πλήρως ένα νέο τρισορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων σε σχέση με το τρισορθογώνιο σύστημα αφοράς (τρεις παράμετροι). Οι τρεις περιστροφές εκτελούνται ταυτόχρονα μέσω του τελεστή

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{x_3}(\alpha) \cdot R_{x_2}(\beta) \cdot R_{x_3}(\gamma),$$

και της πράξης

$$\bar{\sigma}(\alpha, \beta, \gamma) = R^T(\alpha, \beta, \gamma) \cdot \bar{\sigma} \cdot R(\alpha, \beta, \gamma)$$

έως ότου

$$\bar{\sigma}(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \Sigma,$$

δηλ, έως ότου ο τανυστής τάσης *διαγωνιοποιηθεί*. Τότε,

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = R^T(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \cdot R(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$$

και επειδή

$$R^T = R^{-1} \quad \therefore \quad R^T R = 1,$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = R(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \cdot R^T(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$$

Τελικά, τα ιδιοδιανύσματα του τανυστή τάσης ταυτίζονται με τα τρία ανύσματα που ορίζουν οι στήλες του τελεστή περιστροφής $R(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$. Η περιστροφή του τανυστή καταλήγει σε αποσύνθεση ιδιοτιμών – ιδιοδιανυσμάτων, όταν το σύστημα συντεταγμένων καταλήξει να καθορίζεται από τις γωνίες $(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$. Στην προκειμένη περίπτωση, η αποσύνθεση ιδιοτιμών – ιδιοδιανυσμάτων *ταυτίζεται* με την αποσύνθεση ιδιαζουσών τιμών (SVD) διότι ο τανυστής τάσης είναι τετράγωνος και συμμετρικός. Κατά την διάρκεια της περιστροφής τα ανύσματα που καθορίζονται από τις στήλες του $\bar{\sigma}(\alpha, \beta, \gamma)$ περιγράφουν γεωμετρικό τόπο πού όπως εύκολα μπορεί να διαπιστωθεί έχει μορφή ελλειψοειδούς, το οποίο είναι γνωστό ως *ελλειψοειδές τάσεων*. Οι κύριοι άξονες του ελλειψοειδούς τάσεων έχουν μέτρα σ_1, σ_2 και σ_3 .

3.6.1 Παράδειγμα

Ο τανυστής τάσης στην περιοχή της Κρήτης και σε βάθη 40-100km (ανώτερο τμήμα της ζώνης Benioff) έχει εκτιμηθεί ότι είναι⁸:

$$\sigma = \begin{bmatrix} 0.34 & 0.29 & 0.44 \\ 0.29 & -0.77 & 0.31 \\ 0.44 & -0.31 & 0.43 \end{bmatrix} \cdot 5 \times 10^{11} \quad \text{dyn/cm}^2$$

sig = sig=[0.34 0.29 0.44; 0.29 -0.77 0.31; 0.44 0.31 0.43]

[v, e] = eigs(sig)

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} -0.6516 & -0.1686 & -0.7395 \\ -0.2418 & 0.9703 & -0.0082 \\ -0.7190 & -0.1735 & 0.6731 \end{bmatrix}$$

⁸ Πηγή: Kiratzi, A. and Papazachos, C.B., 1995. Active deformation of the shallow part of the subducting lithospheric slab in the southern Aegean, *J. Geodynamics*, 19, 65-78.

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} 0.9331 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8758 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0572 \end{bmatrix}$$

$$\text{phi} = \text{acosd}(v)$$

$$\phi = \begin{bmatrix} 130.7^\circ & 99.7^\circ & 137.7^\circ \\ 104^\circ & 14^\circ & 90^\circ \\ 136^\circ & 100^\circ & 48^\circ \end{bmatrix}$$

Βύθιση σ_1 είναι $(136^\circ - 90^\circ) = 46^\circ$

Αζιμούθιο σ_1 είναι

$$\text{theta1} = \text{atand}((\mathbf{e}(1,1) * \mathbf{v}(2,1)) / (\mathbf{e}(1,1) * \mathbf{v}(1,1)))$$

$$\theta_1 = 20^\circ$$

Βύθιση σ_3 είναι $(100^\circ - 90^\circ) = 10^\circ$

Αζιμούθιο σ_2 είναι

$$\text{theta2} = 90 + \text{atand}((\mathbf{e}(2,2) * \mathbf{v}(2,2)) / (\mathbf{e}(2,2) * \mathbf{v}(1,2)))$$

$$\theta_2 = -80^\circ$$

⇒ Πλαγιονάστροφα ρήγματα διεύθυνσης NW-SE

3.7. Ανάλυση κυρίων συνιστωσών.

Η *ανάλυση κυρίων συνιστωσών* (*principal component analysis* ή *PCA*), ανακατασκευάζει ένα πίνακα από το άθροισμα «απλών» πινάκων, των συνιστωσών του. Με το όρο «απλός» εννοείται πίνακας βαθμού 1, του οποίου όλες οι γραμμές είναι πολλαπλάσια μίας εκάστης, και όλες οι στήλες πολλαπλάσια μίας εκάστης. Έστω A ένας πραγματικός $m \times n$ πίνακας. Η (οικονομική) αποσύνθεση ιδιάζουσών τιμών του

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

μπορεί να γραφτεί επίσης ως

$$A = E_1 + E_2 + \dots + E_p \quad (3.13)$$

όπου $p = \min(m, n)$. Οι συνιστώντες πίνακες E_k είναι εξωτερικά γινόμενα βαθμού 1 της μορφής

$$E_k = \sigma_k \cdot u_k \cdot v_k^T. \quad (3.14)$$

Εκάστη στήλη του E_k είναι πολλαπλάσιο του u_k , δηλ. της k -στης στήλης του U , και κάθε γραμμή του είναι πολλαπλάσιο του v_k^T , δηλ. του αναστρέφου της k -στης στήλης του V . Οι συνιστώντες πίνακες είναι ορθογώνιοι προς αλλήλους, κατά την έννοια

$$E_j E_k^T = 0, \quad j \neq k \quad (3.15)$$

Η νόρμα εκάστου συνιστώντα πίνακα είναι η αντίστοιχη ιδιάζουσα τιμή,

$$\|E_k\| = \sigma_k. \quad (3.16)$$

Κατά συνέπεια, η συμβολή εκάστου E_k στην σύνθεση του A καθορίζεται από το μέγεθος της ιδιάζουσας τιμής σ_k .

Εάν το άθροισμα (13) τερματισθεί μετά από $r < p$ όρους,

$$A_r = E_1 + E_2 + \dots + E_r,$$

Το αποτέλεσμα είναι μία r -βάθμια προσέγγιση του αρχικού πίνακα A , η οποία ταυτόχρονα είναι και η καλύτερη δυνατή r -βάθμια αναπαράσταση του A . Η απόκλιση αυτής της προσέγγισης αποδεικνύεται ότι είναι

$$\|A - A_r\| = \sigma_{r+1}$$

Επειδή οι ιδιάζουσες τιμές ταξινομούνται κατά κατ'όχιον μέγεθος η ακρίβεια της προσέγγισης αυξάνεται συναρτήσει του βαθμού της.

Η ανάλυση κυρίων συνιστωσών χρησιμοποιείται σε μεγάλο εύρος εφαρμογών, συμπεριλαμβανομένων της στατιστικής, γεωεπιστημών και αρχαιολογίας. Ο κοινότερος ίσως τρόπος περιγραφής της, είναι με τις ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα του εξωτερικού γινομένου $A^T A$. Δεδομένου ότι

$$A^T A V = V \Sigma^2,$$

οι στήλες του V είναι τα ιδιοδιανύσματα του $A^T A$. Οι στήλες του U , πολλαπλασιασμένες επί τις ιδιάζουσες τιμές, μπορούν να ληφθούν από την

$$U \Sigma = A V.$$

Ο πίνακας δεδομένων A συχνά τυποποιείται αφαιρώντας από κάθε στήλη τον μέσο όρο της και διαιρώντας με την τυπική της απόκλιση. Εφόσον γίνει αυτό, το ανωτέρω εξωτερικό γινόμενο μετατρέπεται σε *πίνακα συσχέτισης*.

Η *παραγοντική ανάλυση (factor analysis)* είναι μία στενά σχετιζόμενη στατιστική μέθοδος, η οποία κάνει περαιτέρω παραδοχές για τα στοιχεία του A και τροποποιεί τα διαγώνια στοιχεία του $A^T A$ πριν υπολογίσει τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα.

Για να δοθεί ένα απλό παράδειγμα ανάλυσης κυρίων συνιστωσών, έστω ότι μετράμε το ύψος και βάρος έξι ομοειδών αντικειμένων και λαμβάνομε τα ακόλουθα δεδομένα, τα οποία στην Εικόνα 3.5 φαίνονται με κυανό χρώμα.

$$A = \begin{bmatrix} 47 & 15 \\ 93 & 35 \\ 53 & 15 \\ 45 & 10 \\ 67 & 27 \\ 42 & 10 \end{bmatrix}$$

Επειδή αναμένεται ότι το ύψος και το βάρος είναι θα άμεσα συσχετισμένα, υποψιαζόμαστε ότι ουσιαστικά θα υπάρχει μόνο μία υποκείμενη συνιστώσα, την οποία θα αποκαλέσουμε «μέγεθος», με βάση τη οποία θα μπορούν να προβλεφθούν αμφότερα το ύψος και το βάρος. Η εντολή

```
[U,S,V] = svd(A,0)
sigma = diag(S)
```

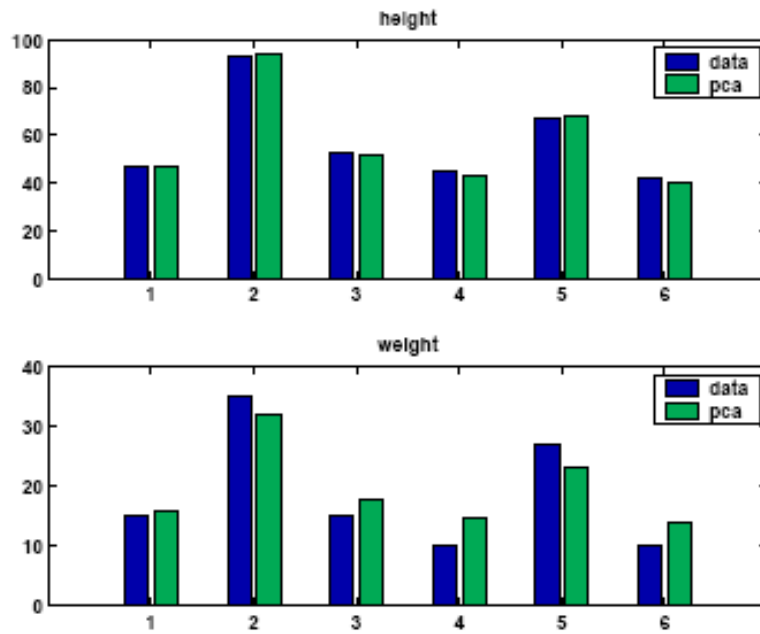
παράγει

$$U = \begin{bmatrix} 0.3153 & 0.1056 \\ 0.6349 & -0.3656 \\ 0.3516 & 0.3259 \\ 0.2929 & 0.5722 \\ 0.4611 & -0.4562 \\ 0.2748 & 0.4620 \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} 0.9468 & 0.3219 \\ 0.3219 & -0.9468 \end{bmatrix}$$

$$\text{sigma} = 156.4358$$

8.7658



Εικόνα 3.5. Παράδειγμα ανάλυσης κυρίων συνιστωσών.

Παρατηρούμε ότι η σ_1 είναι πολύ μεγαλύτερη από την σ_2 . Η πρωτοβάθμια προσέγγιση του A είναι

```
E1 = sigma(1)*U(:,1)*V(:,1)'  
E1 = 46.7021 15.8762  
94.0315 31.9657  
52.0806 17.7046  
43.3857 14.7488  
68.2871 23.2139  
40.6964 13.8346
```

Με άλλα λόγια, η μία υποκείμενη κύρια συνιστώσα είναι

```
size = sigma(1)*U(:,1)  
size = 49.3269  
99.3163  
55.0076  
45.8240  
72.1250  
42.9837
```

Οι δύο μετρηθείσες ποσότητες προσεγγίζονται αρκετά καλά ως

```
height ≈ size*V(1,1)  
weight ≈ size*V(2,1)
```

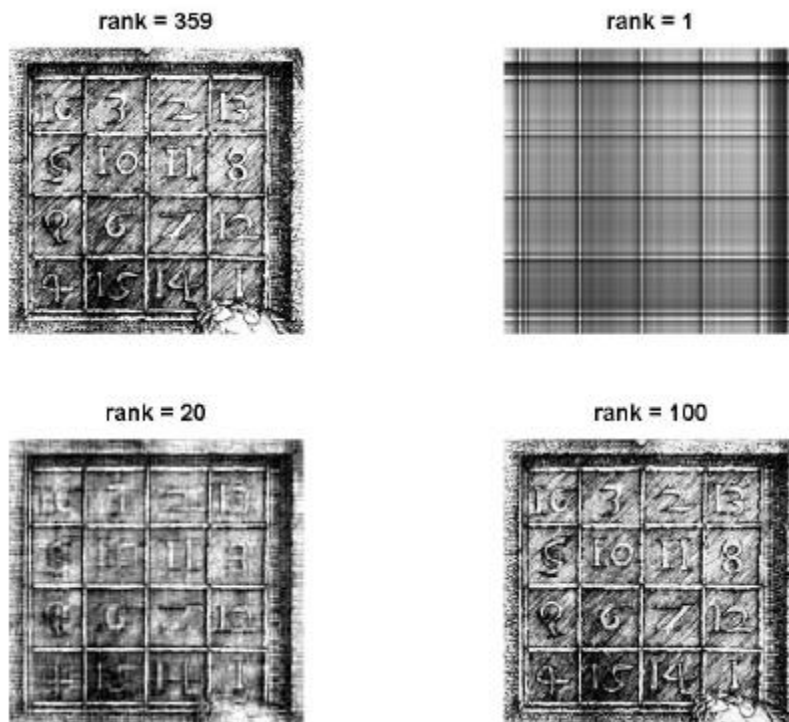
και φαίνονται στην Εικόνα 3.2 με πράσινο χρώμα.

Ένα μεγαλύτερο παράδειγμα περιλαμβάνει ψηφιακή επεξεργασία εικόνας. Οι εντολές

```
load detail; subplot(2,2,1); image(X);  
colormap(gray(64));  
axis image; axis off;  
r = rank(X);  
title(['rank = ' int2str(r)]);
```

παράγουν το άνω αριστερά γράφημα της Εικόνας 3.6. Ο πίνακας X που φορτώνεται με την εντολή `load` έχει διαστάσεις 359×371 και αριθμητικά είναι πλήρους βαθμού. Τα στοιχεία του κυμαίνονται μεταξύ 1 και 64 και χρησιμεύουν ως δείκτες της τεφρής (γκρίζας) χρωματι-

κής κλίμακας. Η Εικόνα 3.6 αποτελεί λεπτομέρεια του χαρακτηριστικού του Albrecht Durer «Μελαγχολία II» και δείχνει ένα 4×4 μαγικό τετράγωνο.



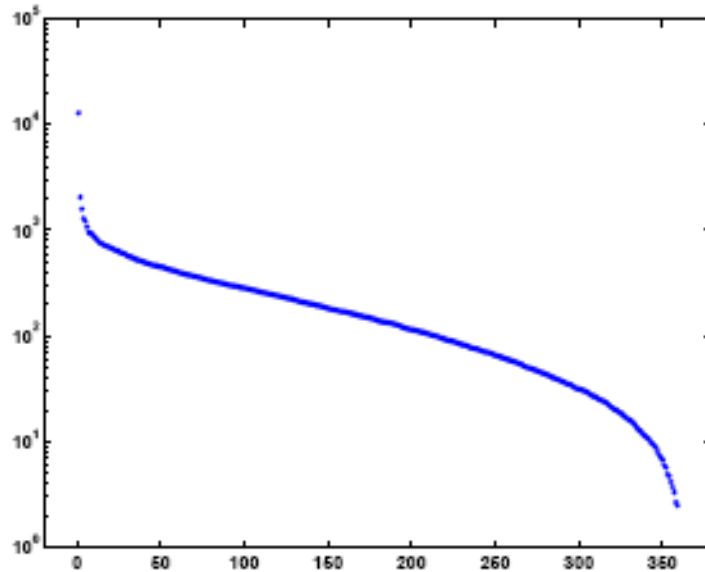
Εικόνα 3.6. Οι κύριες συνιστώσες του μαγικού τετραγώνου του Durer

Οι εντολές

```
[U, S, V] = svd(X, 0);
sigma = diag(S);
semilogy(sigma, '.')
```

παράγουν σε λογαριθμική κλίμακα, γράφημα των ιδιζουσών τιμών του X το οποίο φαίνεται στην Εικόνα 3.7. Είναι σαφές ότι οι ιδιάζουσες τιμές ελαττώνονται ταχύτατα: υπάρχει μόνο μία μεγαλύτερη του 10^4 και μόνο έξι μεγαλύτερες του 10^3 .

Τα υπόλοιπα τρία γραφήματα στην Εικόνα 3.6 δείχνουν τα είδωλα που λαμβάνονται με προσεγγίσεις κυρίων συνιστωσών του X για βαθμούς $r = 1$, $r = 20$, και $r = 100$. Η πρωτοβάθμια προσέγγιση δείχνει ότι οι οριζόντιες και κατακόρυφες γραμμές προκύπτουν από ένα και μόνο εξωτερικό γινόμενο $E_1 = \sigma_1 \cdot u_1 \cdot v_1^T$. Αυτή η ορθογώνια διάταξη είναι περίπου τυπική των χαμηλόβαθμων προσεγγίσεων κυρίων συνιστωσών ψηφιακών εικόνων. Οι αριθμοί του μαγικού τετραγώνου είναι αναγνωρίσιμοι στην προσέγγιση $r = 20$, ενώ δεν υπάρχουν ορατές διαφορές μεταξύ της εκατονταβάθμιας προσέγγισης και του πλήρους πίνακα.



Εικόνα 3.7. Οι ιδιάζουσες τιμές του μαγικού τετραγώνου από το χαρακτικό του Durer.

Αν και οι χαμηλόβαθμες αναπαραστάσεις εικόνων απαιτούν μικρότερη αποθηκευτική μνήμη και χρόνους μετάδοσης από τις εικόνες πλήρους βαθμού, υπάρχουν αρκετά αποτελεσματικότερες μέθοδοι συμπίεσης εικόνων. Η κύρια χρήση της ανάλυσης κυρίων συνιστωσών στην ψηφιακή επεξεργασία εικόνας αφορά την αναγνώριση μορφών και χαρακτηριστικών.

3.8. Άσκηση

Η παρούσα άσκηση πραγματεύεται τη αποσύνθεση/ ανασύνθεση ψηφιακών τοπογραφικών δεδομένων (Digital Elevation Model – DEM) και την μελέτη τους με Ανάλυση Κυρίων Συνιστωσών. Τα δεδομένα αφορούν Ανατολική Στερεά Ελλάδα, είναι προβεβλημένα στο σύστημα ΕΓΣΑ87 και είναι διαμορφωμένα σε πίνακα διαστάσεων 566×1036 με ανάλυση 100×100m, διατίθενται δε στο ASCII αρχείο `Cgt.dat`· μπορούν να εισαχθούν στο MATLAB με το πρόγραμμα

```
import_data
```

το οποίο επίσης υπολογίζει τους άξονες x (Easting) και y (Northing) και την SVD:

```
[u,s,v] = svd(c)
```

όπου c είναι ο πίνακας του DEM και s ο διαγώνιος πίνακας ιδιαζουσών τιμών.

Η ανάλυση πραγματοποιείται με το πρόγραμμα `toporca`. Κατ' αρχάς κατασκευάζεται γράφημα των ιδιαζουσών τιμών

```
figure(1)
set(gcf,'Name','DEM SINGULAR VALUES')
semilogy(diag(s));
xlabel('Singular Value Order')
ylabel('Singular Values')
```

Κατόπιν επιλέγεται από τον χρήστη φάσμα ιδιαζουσών τιμών (IT) επί των οποίων εστιασθεί η ανάλυση κυρίων συνιστωσών. Η επιλογή γίνεται γραφικά επί του διαγράμματος της Εικόνας «DEM SINGULAR VALUES» με την εντολή `ginput`:

```
[no,ss] = ginput(2);
```

```
s1 = min(ss);
su = max(ss);
```

s_1 και s_u είναι το κάτω και άνω όρια του επιλεγμένου φάσματος IT αντίστοιχα. Στην συνέχεια μηδενίζονται οι επιλεγμένες IT (ανάγεται ο μετρικός χώρος του DEM), ανασυντίθεται αναπαράσταση του DEM στον ανηγμένο μετρικό χώρο και λαμβάνεται ο συμπληρωματικός του, ήτοι λαμβάνεται ανηγμένη αναπαράσταση του DEM που βασίζεται αποκλειστικά και μόνο στις επιλεγμένες IT· αυτή φυλάσσεται στην μεταβλητή c_1 . Κατά την διαδικασία αυτή διαφυλάσσεται ο αρχικός πίνακας IT, c .

```
s1=s;
i0= s1>=s1 & s1<=su;
s1(i0)=0;
% Compute reduced SVD
c1 =  $\psi$  - (u*s1*v');
```

Σε επόμενο στάδιο κατασκευάζεται φωτιζόμενη αναπαράσταση των αρχικού και ανηγμένου DEM. Η διαδικασία είναι ταυτόσημη και στις δύο περιπτώσεις και για τον λόγο αυτό παρουσιάζεται μόνο σε ότι αφορά το αρχικό DEM. Εφόσον διατίθεται το Mapping Toolbox©, κατασκευάζεται αυτόματα και *ad hoc* τοπογραφική χρωματική κλίμακα με χρήση της συνάρτησης demcmap.

```
figure(2)
set(gcf, 'Name', 'DEM')
if exist('demcmap', 'file')
    cc = demcmap(c,128);
else
    cc = jet(128);
end
```

Η επιφάνεια λαμβάνει το χειριστήριο hc και κατασκευάζεται

```
hc = surf(x,y,c);
shading flat
colormap(cc)
```

και κατασκευάζεται με λόγο αξόνων 1:1:1

```
daspect([1 1 1]);
```

πλήρη κάλυψη της δραστηκής επιφάνειας σχεδιασμού

```
axis tight
```

και θεώρηση από επάνω.

```
view(0,90)
```

Κατόπιν ρυθμίζονται οι παράμετροι απόδοσης του φωτισμού, έντασης φωτός,

```
set(hc, 'facelighting', 'phong', 'facecolor', 'interp', ...
    'ambientstrength', 0.5)
```

και τύπου/ διεύθυνσης φωτισμού (παράλληλες ακτίνες από πηγή στο άπειρο).

```
lc=light('Style', 'infinite');
lightangle(lc, 80, 75)
```

Τέλος, δημιουργούνται μενού για την ρύθμιση της διεύθυνσης και έντασης του φωτισμού πό τον χρήστη. Το βασικό μενού επιγράφεται «LIGHT»

```
uimenu('label', 'LIGHT', 'tag', 'DEMlight1');
```

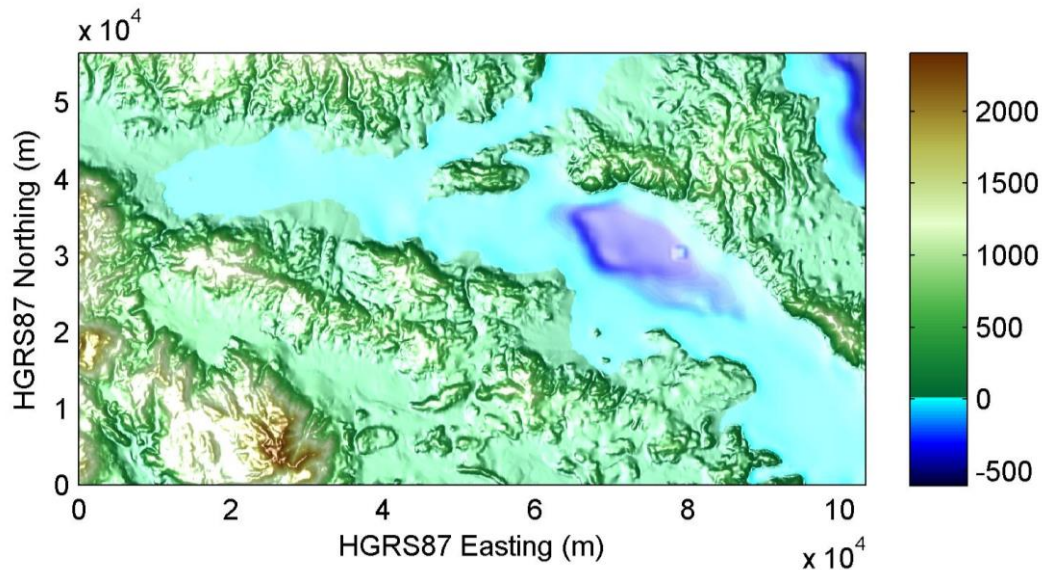
και περιλαμβάνει τα υπομενού «Source Position» και «Ambient Strength». Κάθε ένα από αυτά ορίζει μία συνάρτηση επιστροφής (*callback function*) η οποία εκτελείται μόλις γίνει

η επιλογή. Για παράδειγμα, στο μενού «Source Position» η συνάρτηση επιστροφής καθορίζεται μέσω μίας μακράς αλφαριθμητικής σταθεράς:

```
['[azl,ell] = lightangle(lc); ' ...
 'prompt = {'Source Azimuth', 'Source Elevation'}; '...
 'defAns = {num2str(azl), num2str(ell)}; '...
 'answer = inputdlg(prompt, 'Light Source Azimuth/ Eleva-
 tion',1,defAns);'...
 'if size(answer,1)==0, return, end; ' ...
 'azl = str2num(answer{1}); '...
 'ell = str2num(answer{2}); '...
 'lightangle(lc,azl,ell); '...
 'lightangle(l1,azl,ell); '...
 'clear prompt defAns answer azl ell']])
```

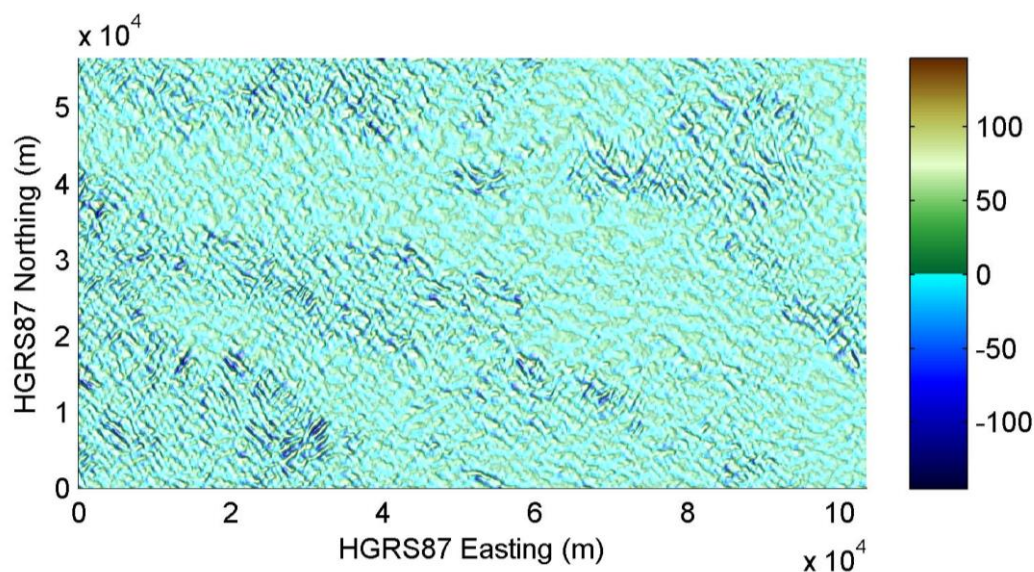
που από το MATLAB ερμηνεύεται με την σειρά εντολών:

```
[azl,ell] = lightangle(lc);
prompt = {'Source Azimuth', 'Source Elevation'};
defAns = {num2str(azl), num2str(ell)};
answer = inputdlg(prompt, 'Light Source Azimuth/ Elevation',1,defAns);
if size(answer,1)==0, return, end; '
azl = str2num(answer{1});
ell = str2num(answer{2});
lightangle(lc,azl,ell);
lightangle(l1,azl,ell);
clear prompt defAns answer azl ell
```



Εικόνα 3.8. DEM της Ανατολικής Στερεάς Ελλάδος με ανάλυση 100×100m, φωτισμένο από την θέση (-70°, 75°) σε σχέση με το σύστημα συντεταγμένων 0°-Ανατολή, 90°-Βορράς, 90°-Ανω και με ένταση περιβάλλοντος φωτισμού 0.25.

Το DEM της Ανατολικής Στερεάς Ελλάδος παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.8 και το αποτέλεσμα της ανασύστασής του από κύριες συνιστώσες (ιδιάζουσες τιμές) μεγέθους $1000 \leq s \leq 4000$ παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.9. Δεδομένου του ελέγχου της τεκτονικής επί του αναγλύφου της περιοχής μελέτης, οι γραμμώσεις που είναι εμφανείς στην Εικόνα 3.9 αποδίδονται σε τοπογραφικά ίχνη τεκτονικής δραστηριότητας (μορφοτεκτονικά στοιχεία).



Εικόνα 3.9. Το DEM της Εικόνας 3.8 ανασυσταθέν από τις κύριες συνιστώσες (ιδιάζουσες τιμές) $1000 \leq s \leq 4000$. Ο φωτισμός προέρχεται από την θέση $(-70^\circ, 75^\circ)$ σε σχέση με το σύστημα συντεταγμένων 0° -Ανατολή, 90° -Βορράς, 90° -Ανω και η ένταση του περιβάλλοντος φωτισμού είναι 0.05.

- ➔ Αποστολή σας είναι να πραγματοποιήσετε μία κατά το δυνατόν λεπτομερή ανάλυση και καταγραφή των μορφοτεκτονικών στοιχείων της Ανατολικής Στερεάς Ελλάδος με βάση την κλίμακα του τοπογραφικού τους ίχνους, επιλέγοντας διαφορετικά εύρη ιδιάζουσών τιμών με επαναληπτικές εκτελέσεις του προγράμματος *toporca* και κατάλληλες διευθύνσεις φωτισμού και έντασης φωτός. Στην άσκηση αυτή δεν υπάρχουν «κονσερβαρισμένες» απαντήσεις! Το πείραμα και η παρατήρηση οδηγεί σε καλύτερα ή χειρότερα αποτελέσματα. Όσο πληρέστερη και μεστότερη η εξαγόμενη πληροφορία, τόσο καλύτερο το αποτέλεσμα.
- ➔ Τι συμπεράσματα μπορείτε να εξάγετε συγκρίνοντας τα αποτελέσματά σας με τις υπάρχουσες γνώσεις σας για την τεκτονική της περιοχής;

Κεφάλαιο 4

Προσομοίωση Δεδομένων και Φυσικών Διεργασιών

4.1. Εισαγωγή

Σχεδόν τυπικό βήμα για τη ανάλυση και κατανόηση ενός συνόλου δεδομένων και μετρήσεων, είναι η συνοπτική περιγραφή τους με βάση φυσικούς ή εμπειρικούς «νόμους» που εξαρτώνται από πεπερασμένες μεταβλητές (παραμέτρους). Ο νόμος που περιγράφει τα δεδομένα, ή αν θέλετε ο νόμος στον οποίο «υπακούουν» τα δεδομένα ονομάζεται *προσομοίωμα* (*model*). Σε μερικές περιπτώσεις το προσομοίωμα δεν είναι παρά μία (βολική) μαθηματική συνάρτηση, για παράδειγμα μία πολυωνυμική, ή εκθετική, ή άλλη μεταβολή, οι παράμετροι της οποίας είναι ορισμένοι συντελεστές και εκθέτες. Σε άλλες περιπτώσεις οι παράμετροι του προσομοιώματος προέρχονται από κάποια βασική φυσική θεωρία, ή νόμο, ή συνθήκες που τα δεδομένα υποτίθεται πως οφείλουν να ικανοποιούν, για παράδειγμα τα πάχη και ειδικές αντιστάσεις μίας μονοδιάστατης γεωλεκτρικής δομής, ή τα τροχιακά στοιχεία ενός συστήματος δορυφόρων κ.ά.

Η βασική προσέγγιση είναι ίδια σε όλες τις περιπτώσεις: Επιλέγεται ή σχεδιάζεται μία κατάλληλη *συνάρτηση κόστους*⁹ (*loss function* ή *merit function*), η οποία μετρά την (α)συμφωνία μεταξύ των δεδομένων και ενός προσομοιώματος με συγκεκριμένη επιλογή παραμέτρων. Η συνάρτηση κόστους σχεδιάζεται με τέτοιο τρόπο, ώστε όταν αυτή λαμβάνει μικρές τιμές, τότε να υπάρχει μεγάλη συμφωνία μεταξύ των δεδομένων και του προσομοιώματος (ή εξομοιώματος). Οι παράμετροι μεταβάλλονται (προσαρμόζονται) προς τα δεδομένα και αυτές που επιτυγχάνουν την *ελάχιστη* τιμή της συνάρτησης κόστους (μέγιστη συμφωνία) είναι οι *παραμέτροι βέλτιστης προσαρμογής*, ή, για συντομία, *βέλτιστες παράμετροι*. Είναι λοιπόν σαφές ότι το πρόβλημα της προσομοίωσης δεδομένων ανάγεται σε πρόβλημα *ελαχιστοποίησης* της συνάρτησης κόστους σε πολλές διαστάσεις (παραμέτρους).

Φυσικά, τα πράγματα είναι λίγο πιο περίπλοκα από μία «απλή» άσκηση εύρεσης των βέλτιστων παραμέτρων. Σε γενικές γραμμές, τα δεδομένα δεν είναι ακριβή. Αντιθέτως, υπόκεινται σε *σφάλματα μέτρησης* (ή αλλιώς *θόρυβο*). Κατά συνέπεια, τα δεδομένα σχεδόν ποτέ δεν θα περιγραφούν *ακριβώς* με το χρησιμοποιούμενο προσομοίωμα, ακόμη και όταν αυτό είναι θεωρητικά ορθό και ακριβές για τα αναλυόμενα δεδομένα. Για τον λόγο αυτό απαιτείται και κάποιο μέτρο ελέγχου της *ποιότητας προσαρμογής* (*goodness of fit*) με βάση κάποια χρήσιμα στατιστικά κριτήρια. Επιπλέον, απαιτείται να γνωρίζουμε την ακρίβεια με την οποία προσδιορίζονται οι βέλτιστες παράμετροι, δηλαδή χρειάζεται να γνωρίζουμε τα πιθανά σφάλματα των βέλτιστων παραμέτρων.

Τέλος, δεν είναι ασύνηθες κατά την διάρκεια της προσομοίωσης να διαπιστώνουμε ότι η συνάρτηση κόστους έχει *περισσότερα* του ενός τοπικά ελάχιστα, στην οποία περίπτωση δεν είμαστε σε θέση να γνωρίζουμε που ευρίσκεται το *απόλυτο* (γενικό – *global*) ελάχιστο. Εάν το υπό μελέτη φαινόμενο προϋποθέτει τη λύση γενικών και όχι «τοπικών» προβλημάτων, η απορία μετατίθεται από την εύκολη «πόσο καλή είναι η προσομοίωση;» στην αγωνιώδη «πόσο σίγουροι είμαστε ότι δεν υπάρχουν *πολύ καλύτερες* λύσεις (προσομοιώματα) κάπου μέσα στον παραμετρικό χώρο;». Το τελευταίο πρόβλημα είναι γενικά, εξαιρετικά δύσκολο να απαντηθεί.

⁹ Ο όρος προέρχεται από την Στατιστική και τις Οικονομικές Επιστήμες.

Είναι σημαντικό να κατανοήσουμε ότι η προσομοίωση (παραμετρική προσαρμογή) δεν τελειώνει με την εύρεση των «βέλτιστων» παραμέτρων. Για να είναι πραγματικά χρήσιμη, η διαδικασία της προσομοίωσης πρέπει να προσφέρει: α) παραμέτρους, β) εκτίμηση του σφάλματος των παραμέτρων και, γ) ένα μέτρο της ποιότητας προσαρμογής. Όταν το τελευταίο μέτρο επισημαίνει ότι το προσομοίωμα δεν είναι καλό για τα δεδομένα, τότε οι παράμετροι και τα σφάλματά τους είναι μάλλον άσχετες και άχρηστες. Στην παρούσα εισαγωγή στα προβλήματα προσομοίωσης και εξομοίωσης δεδομένων θα ασχοληθούμε κυρίως με την μεθοδολογία εύρεσης των βέλτιστων παραμέτρων και την αποτίμηση της ποιότητας προσαρμογής, χωρίς επ' ουδενί να υποτιμούμε την αναγκαιότητα εκτίμησης του σφάλματος των παραμέτρων.

4.2 Τα Ελάχιστα Τετράγωνα ως εκτιμητήρια Μέγιστης Πιθανοφάνειας.

Έστω ότι θέλουμε να περιγράψουμε N δεδομένα $(x_i, y_i) \ i = 1, \dots, N$, με ένα προσομοίωμα M παραμέτρων $a_j, \ j = 1, \dots, M$. Το προσομοίωμα περιγράφει μία συναρτησιακή σχέση μεταξύ των μετρημένων ανεξαρτητών και εξαρτημένων μεταβλητών,

$$y(x) = y(x; a_1 \dots a_M) \quad (4.1)$$

όπου η εξάρτηση από τις παραμέτρους δηλώνεται ρητώς στο δεξί σκέλος της εξίσωσης. Για να προσδιορίσουμε τις παραμέτρους a_j μπορούμε να επιχειρήσουμε ελαχιστοποίηση της l_2 νόρμας που στην προκειμένη περίπτωση έχει την μορφή

$$\sum_{i=1}^N [y_i - y(x_i; a_1 \dots a_M)]^2. \quad (4.2)$$

Γιατί όμως μπορεί να γίνει αυτό και σε ποιες αρχές βασίζεται; Η απάντηση στο ερώτημα αυτό θα μας εισάγει στο σπουδαίο αντικείμενο της *εκτίμησης μέγιστης πιθανοφάνειας* (*maximum likelihood estimation*).

Δεδομένου ενός συνόλου δεδομένων x_i και y_i , είναι λογικό να υπάρχουν ορισμένα σύνολα παραμέτρων $a_1 \dots a_M$ που να είναι *απίθανα*, δηλ. τέτοια ώστε το προσομοίωμα της συνάρτησης $y(x)$ να μην έχει *καμία* σχέση με τα δεδομένα, ενώ υπάρχουν *άλλα* σύνολα *πιθανά*, δηλ. τέτοια ώστε το προσομοίωμα να ομοιάζει πολύ με τα δεδομένα. Τίθεται λοιπόν το ερώτημα: πως επιλέγουμε τις παραμέτρους που «κατά πάσα πιθανότητα» είναι σωστές να περιγράψουν τα δεδομένα; Το ερώτημα αυτό μπορεί να αντιστραφεί και να γίνει: Δεδομένου ενός συγκεκριμένου συνόλου παραμέτρων, ποια είναι η πιθανότητα να αναπαράγονται επαρκώς τα δεδομένα; Εάν η πιθανότητα αυτή είναι πολύ μικρή, τότε μπορούμε να συμπεράνουμε ότι οι εν λόγω παράμετροι πιθανότατα δεν είναι σωστές. Αντιθέτως, η πιστή αναπαραγωγή των δεδομένων δεν πρέπει να είναι *απίθανη* με το σωστό σύνολο παραμέτρων. Η πιθανότητα των δεδομένων δοθεισών των παραμέτρων, η οποία είναι εκτιμήσιμο μέγεθος, ορίζεται ως η *πιθανοφάνεια* των παραμέτρων δοθέντων των δεδομένων. Ο ορισμός αυτός είναι καθαρά εμπειρικός και δεν έχει επίσημη μαθηματική βάση. Από την στιγμή όμως που έχει δοθεί, είναι εύκολο να συμπεράνουμε ότι οι παράμετροι $a_1 \dots a_M$ μπορούν να προσδιορισθούν ακριβώς, *μεγιστοποιώντας* την πιθανοφάνειά τους. Αυτός ο τρόπος εκτίμησης παραμέτρων ονομάζεται *εκτίμηση μέγιστης πιθανοφάνειας* (*EMΠ*).

Ας δούμε τώρα πως σχετίζεται η ΕΜΠ με την εξίσωση (4.2). Υποθεθίσθω ότι κάθε ένα δεδομένο y_i σχετίζεται με σφάλμα μέτρησης το οποίο είναι ανεξάρτητα σποραδικό (τυχαίο) και κανονικά (Γκαουσιανά) κατανομημένο γύρω από την αληθή καμπύλη $y(x)$. Υποθεθίσθω επίσης ότι οι τυπικές αποκλίσεις σ αυτών των κανονικών κατανομών είναι οι ίδιες για όλες τις μετρήσεις. Τότε, η πιθανότητα των δεδομένων δίδεται από το γινόμενο των πιθανοτήτων κάθε μέτρησης,

$$P \propto \prod_{i=1}^N \left\{ \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma} \right)^2 \right] \Delta y \right\} \quad (4.3)$$

Παρατηρήσατε ότι υπάρχει ένας παράγων Δy σε κάθε όρο του γινομένου. Η μεγιστοποίηση της (4.3) είναι ισοδύναμη προς την μεγιστοποίηση του λογαρίθμου της, ή την ελαχιστοποίηση του αρνητικού λογαρίθμου της, δηλαδή

$$\left[\sum_{i=1}^N \frac{[y_i - y(x_i)]^2}{2\sigma^2} \right] - N \log \Delta y \quad (4.4)$$

Εφόσον οι N , σ και Δy είναι όλες σταθερές, η ελαχιστοποίηση της (4.4) είναι ισοδύναμη προς την ελαχιστοποίηση της (4.2).

Τελικά, η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων είναι εκτίμηση μέγιστης πιθανοφάνειας των προσδιοριζόμενων παραμέτρων, εάν τα σφάλματα μετρήσεων είναι ανεξάρτητα και κανονικά κατανεμημένα με σταθερή τυπική απόκλιση. Σημειώσατε επίσης ότι μέχρι τώρα δεν έχει γίνει καμία παραδοχή σχετικά με την γραμμικότητα ή μη, του προσομοιώματος $y(x; a_1 \dots a_M)$ ως προς τις παραμέτρους $a_1 \dots a_M$.

Οι υπόλοιπες παράγραφοι το παρόντος χωρίου θα αφιερωθούν σε μία συζήτηση επί της πολύ αυστηρής υπόθεσης περί κανονικής κατανομής των σφαλμάτων. Για περισσότερα από 100 χρόνια, οι μαθηματικοί στατιστικοί «έπαιζαν» με το γεγονός ότι η κατανομή πιθανότητας του αθροίσματος ενός πολύ μεγάλου αριθμού μικτών τυχαίων αποκλίσεων σχεδόν πάντα συγκλίνει προς μία κανονική κατανομή (το περίφημο *κεντρικό οριακό θεώρημα*). Αυτή η σχετική μονομέρεια τελικά υποβάθμισε το γεγονός ότι για πραγματικά δεδομένα, η κανονική κατανομή είναι μάλλον η μερική παρά η γενική περίπτωση. Γενικά διδασκόμαστε ότι οι μετρήσεις κυμαίνονται εντός $\pm\sigma$ της αληθούς τιμής στο 68% των περιπτώσεων, εντός $\pm 2\sigma$ στο 95% των περιπτώσεων και εντός $\pm 3\sigma$ στο 99.7%. Επεκτείνοντας, κανείς θα ανέμενε ότι μία μέτρηση θα μπορούσε να είναι εσφαλμένη κατά $\pm 20\sigma$ μόνο μία φορά στις 2×10^{88} . Όλοι όμως οι πειραματικοί επιστήμονες γνωρίζουν ότι αυτό δεν ευσταθεί και ότι οι μεγάλες αποκλίσεις είναι πολύ συχνότερες από αυτόν τον αριθμό!

Σε ορισμένες περιπτώσεις είναι εύκολο να κατανοηθούν και ποσοτικοποιηθούν οι αποκλίσεις από τη κανονική κατανομή. Σε άλλες περιπτώσεις αυτό δεν είναι δυνατό, ή τουλάχιστον είναι πολύ δύσκολο. Τα πειραματικά δεδομένα μερικές φορές παρουσιάζουν μεγάλα σφάλματα, τελεία και παύλα! Μία ή δύο μεγάλες αποκλίσεις ή *ξεπετάγματα* (*outliers*) μπορούν εύκολα να μετατρέψουν την προσομοίωση ελαχίστων τετραγώνων ενός κατά τα άλλα καλού συνόλου δεδομένων σε σκουπίδια... Η πιθανότητα εμφάνισής τους στην υποτιθέμενη Γκαουσιανή κατανομή είναι τόσο μικρή, ώστε η εκτιμήτρια μέγιστης πιθανοφάνειας «προτιμά» να παραμορφώσει ολόκληρο το προσομοίωμα από να τα διορθώσει.

Αντικείμενο της λεγόμενης *στιβαρής στατιστικής* (*robust statistics*) είναι η αντιμετώπιση περιπτώσεων στις οποίες η Γκαουσιανή κατανομή αποτελεί κακή προσέγγιση για την προσομοίωση των δεδομένων, ή σε περιπτώσεις που τα ξεπετάγματα είναι σημαντικά. Στιβαρές στατιστικές μέθοδοι θα συζητηθούν στο τέλος του παρόντος κεφαλαίου. Μέχρι το σημείο εκείνο, όλες οι συζητήσεις και περιγραφές που θα γίνουν, θα βασίζονται στην παραδοχή κανονικών (Γκαουσιανών) κατανομών για τις παραμέτρους του προσομοιώματος και τα σφάλματα των δεδομένων.

4.3. Προσαρμογή χ^2 .

Εάν κάθε ζεύγος δεδομένων (x_i, y_i) έχει την δική του τυπική απόκλιση σ_i , τότε η εξίσωση (3) τροποποιείται ελαφρά:

$$P \propto \prod_{i=1}^N \left\{ \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i} \right)^2 \right] \Delta y \right\}$$

Η τροποποίηση αυτή μεταφέρεται άμεσα και στην εξίσωση (4.4) έτσι, ώστε η εκτίμηση των παραμέτρων του προ προσομοιώματος να γίνεται με ελαχιστοποίηση της ποσότητας

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - y(x_i; a_1 \dots a_M)}{\sigma_i} \right)^2 \quad (4.5)$$

Παραγωγίζοντας την εξίσωση (4.5) ως προς τις παραμέτρους a_i , λαμβάνομε εξισώσεις που οφείλουν να ισχύουν στο σημείο $\min(\chi^2) = 0$:

$$0 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i^2} \right) \left(\frac{\partial y(x_i; \dots a_k \dots)}{\partial a_k} \right), \quad k = 1, \dots, M \quad (4.6)$$

Η εξίσωση (6) δίδει, σε γενικές γραμμές, ένα σύστημα M μη γραμμικών εξισώσεων για τις M άγνωστες παραμέτρους a_k . Οι διαδικασίες προσδιορισμού των βέλτιστων παραμέτρων που θα περιγραφούν στα επόμενα χωρία παράγονται από την (4.6) και τις εξειδικεύσεις της.

Στο μέτρο κατά το οποίο τα σφάλματα μέτρησης είναι κανονικά κατανομημένα, η χ^2 αντιστοιχεί στο άθροισμα N τετραγώνων κανονικά κατανομημένων μεγεθών, έκαστο κανονικοποιημένο προς μοναδιαία διακύμανση. Εάν οι παράμετροι $a_1 \dots a_M$ είναι βέλτιστες, τότε οι όροι του αθροίσματος δεν είναι καθόλου στατιστικά ανεξάρτητοι. Όμως, για προσομοιώματα γραμμικά ως προς τις παραμέτρους a , αποδεικνύεται ότι η κατανομή πιθανότητας της μεταβλητής χ^2 είναι η κατανομή- χ^2 για $N-M$ βαθμούς ελευθερίας. Συχνά θεωρείται, και συνήθως δεν είναι μεγάλο λάθος, ότι η κατανομή- χ^2 ισχύει ακόμη και για προσομοιώματα που δεν είναι αυστηρά γραμμικά ως προς τις παραμέτρους τους.

Έστω Q η πιθανότητα ότι η τιμή χ^2 θα ξεπεράσει μία συγκεκριμένη τιμή. Η πιθανότητα αυτή προσφέρει ένα ποσοτικό μέτρο της ποιότητας προσαρμογής! Εάν η Q είναι πολύ μικρή για κάποιο συγκεκριμένο σύνολο δεδομένων, τότε οι παρατηρούμενες αποκλίσεις μεταξύ δεδομένων και προσομοιώματος δεν μπορεί να είναι τυχαίες διακυμάνσεις. Είναι πολύ πιθανότερο, α) ότι το προσομοίωμα είναι εσφαλμένο (και μπορεί να απορριφθεί στατιστικά), ή, β) τα σφάλματα μέτρησης σ_i είναι κακοεκτιμημένα και στην πραγματικότητα μεγαλύτερα από την ονομαστική τους τιμή.

Ένα σημαντικό σημείο είναι ότι η πιθανότητα Q δεν αποτιμά άμεσα την αξιοπιστία της παραδοχής ότι τα σφάλματα μέτρησης είναι κανονικά κατανομημένα. Απλά θεωρεί ότι έτσι είναι. Σε πολλές όμως περιπτώσεις, τα μη-κανονικά κατανομημένα σφάλματα δημιουργούν σωρεία «ξεπεταγμάτων» τα οποία ελαττώνουν την πιθανότητα Q έτσι, ώστε να χρειασθεί να προσθέσουμε μία τρίτη περίπτωση στις προηγούμενες δύο: τα σφάλματα μέτρησης δεν είναι κανονικά κατανομημένα. Η περίπτωση αυτή είναι αρκετά κοινή, αν και αρκετά καλοήθης. Για τον λόγο αυτό αρκετοί πειραματικοί επιστήμονες είναι συχνά ανεκτικοί απέναντι σε χαμηλές πιθανότητες Q , μέχρι σημείου να γίνονται δεκτά προσομοιώματα με $Q > 0:001$. Η ανοχή αυτή δεν είναι και τόσο πολύ λανθασμένη... Τα πραγματικά κακά προσομοιώματα συνήθως απορρίπτονται με πολύ μικρότερες τιμές Q , της τάξης 10^{-18} για παράδειγμα.

Στο αντίθετο άκρο, συμβαίνει συχνά η τιμή της πιθανότητας Q να είναι πολύ μεγάλη, πολύ κοντά στην μονάδα (βεβαιότητα). Αυτό συνήθως είναι πολύ καλό για να είναι αληθινό και συνήθως δεν οφείλεται σε μη-κανονικά κατανομημένα σφάλματα μέτρησης. Τα αίτια των α-

νεξήγητα καλών προσαρμογών χ^2 συνήθως πρέπει να αναζητηθούν στον παρατηρητή ο οποίος, μέσα σε οίστρο επιστημονικού συντηρητισμού *υπερεκτίμησε* τα σφάλματα μέτρησης. Σε σπάνιες περιπτώσεις, οι απίθανα καλές τιμές χ^2 είναι ενδεικτικές *επιστημονικής απάτης*: τα δεδομένα «μαγειρεύτηκαν» για να ταιριάξουν στο προσομοίωμα που στην προκειμένη περίπτωση αντιπροσωπεύει συνήθως μία αμφιλεγόμενη θεωρία ή κάποιο πολιτικά/ οικονομικά υποδειχθέντα στόχο.

Ένας κοινά αποδεκτός γενικός κανόνας λέει ότι «τυπική» τιμή χ^2 για μία «μέτρια» καλή προσομοίωση είναι $\chi^2 \approx \nu = N - M$ (δηλ. περίπου ίση με τους βαθμούς ελευθερίας). Ακριβέστερη είναι η δήλωση ότι η χ^2 αναμενόμενη τιμή (μέσο όρο) ν , τυπική απόκλιση $(2\nu)^{1/2}$ και ασυμπτωτικά, για μεγάλο ν , προσεγγίζει την κανονική κατανομή.

4.4. Προσαρμογή ευθείας γραμμής.

Θεωρούμε το πρόβλημα της προσομοίωσης συνόλου N δεδομένων (x_i, y_i) με ευθεία γραμμή, κατά την έννοια:

$$y(x) = y(x; a, b) = a + bx \quad (4.7)$$

Το πρόβλημα αυτό ονομάζεται *γραμμική παλινδρόμηση (linear regression)*, όρος που προέρχεται από τις Οικονομικές Επιστήμες. Θεωρούμε ότι το σφάλμα σ_i που αντιστοιχεί στην μέτρηση y_i είναι γνωστό και ότι τα x_i (δηλ. οι τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής) είναι ακριβώς γνωστές. Η συνάρτηση κόστους χ^2 στην προκειμένη περίπτωση γίνεται

$$\chi^2(a, b) \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i} \right)^2 \quad (4.8)$$

Εάν τα σφάλματα μέτρησης είναι κανονικά κατανομημένα, τότε η συνάρτηση (4.5) θα αποφέρει εκτιμήτριες μέγιστης πιθανοφάνειας για τις παραμέτρους a και b . Εάν όχι, τότε οι εκτιμήτριες δεν θα είναι μέγιστα πιθανοφανείς, αλλά θα μπορούσαν να είναι πρακτικά χρήσιμες εάν αυτό επιτρέπεται από τους όρους και περιορισμούς του προσομοιούμενου προβλήματος. Η εξίσωση (4.8) ελαχιστοποιείται προκειμένου να προσδιορισθούν οι a και b . Για να επιτευχθεί το ελάχιστο, οι παράγωγοι της $\chi^2(a, b)$ ως προς a και b οφείλουν να μηδενίζονται, οπότε λαμβάνομε.

$$0 = \frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i^2} \quad (4.9)$$

$$0 = \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{x_i (y_i - a - bx_i)}{\sigma_i^2}$$

Οι εξισώσεις (4.9) μπορούν να ξαναγραφούν βολικότερα, εάν ορίσουμε τα αθροίσματα:

$$S = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \quad S_x = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2} \quad S_y = \sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\sigma_i^2} \quad S_{xx} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \quad (4.10)$$

Με χρήση των ορισμών (4.10) οι εξισώσεις (4.9) γίνονται:

$$\begin{aligned} aS + bS_x &= S_y \\ aS_x + bS_{xx} &= S_{xy} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Οι εξισώσεις (4.11) συνιστούν ένα σύστημα δύο εξισώσεων με δύο αγνώστους, το οποίο μπορεί να λυθεί με την κλασσική μέθοδο Γκαουσιανής απαλοιφής:

$$\Delta = SS_{xx} - S_x^2, \quad a = \frac{S_{xx}S_y - S_yS_{xy}}{\Delta}, \quad b = \frac{SS_{xy} - S_xS_y}{\Delta} \quad (4.12)$$

Οι εξισώσεις (12) προσφέρουν την λύση για τις βέλτιστες παραμέτρους a και b . Στην συνέχεια πρέπει να εκτιμήσουμε τα πιθανά σφάλματα (αβεβαιότητα προσδιορισμού) των εκτιμητριών a και b , δεδομένου ότι τα σφάλματα μέτρησης δεν γίνεται να επιτρέψουν ακριβή (ελεύθερο σφαλμάτων) προσδιορισμό των παραμέτρων. Εάν τα δεδομένα είναι στατιστικά ανεξάρτητα, τότε έκαστο εξ αυτών συνεισφέρει στην σώρευση αβεβαιότητας κατά την εκτίμηση των παραμέτρων. Η θεωρία της διάδοσης (propagation) σφαλμάτων δείχνει ότι η στατιστική διακύμανση (variance) σ_f^2 στην τιμή οιασδήποτε συνάρτησης είναι

$$\sigma_f^2 = \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y_i} \right)^2 \quad (4.13)$$

Στην περίπτωση της γραμμικής παλινδρόμησης, οι παράγωγοι των a και b ως προς τα δεδομένα y_i μπορούν να εκτιμηθούν άμεσα με χρήση των αθροισμάτων (4.10)

$$\frac{\partial a}{\partial y_i} = \frac{S_{xx} - S_x x_i}{\sigma_i^2 \Delta}, \quad \frac{\partial b}{\partial y_i} = \frac{S x_i - S_x}{\sigma_i^2 \Delta} \quad (4.14)$$

Εισάγοντας τις (14) στην (13) λαμβάνομε τις διακυμάνσεις των εκτιμητριών των παραμέτρων a και b αντίστοιχα:

$$\sigma_a^2 = S_{xx} / \Delta, \quad \sigma_b^2 = S / \Delta \quad (15)$$

Όπως θα διαπιστώσουμε παρακάτω, υπάρχει και ένα πρόσθετο μέτρο αποτίμησης της αβεβαιότητας προσδιορισμού των παραμέτρων, η ονομαζόμενη *συνδιακύμανση (covariance)* των a και b , η οποία, όπως θα δειχθεί, δίδεται από την σχέση

$$\text{Cov}(a, b) = -S_x / \Delta \quad (4.16)$$

Ο *συντελεστής συσχέτισης* μεταξύ της αβεβαιότητας των a και b είναι ένας δείκτης που κυμαίνεται μεταξύ -1 και 1 και παράγεται από την (4.16),

$$r_{ab} = \frac{-S_x}{\sqrt{SS_{xx}}} \quad (4.17)$$

Θετική τιμή του r_{ab} δείχνει ότι οι αβεβαιότητες των a και b είναι ομόσημες (συσχετίζονται), ενώ αρνητική τιμή σημαίνει ότι είναι ετερόσημες (αντισυσχετίζονται).

4.5. Γενικά Ελάχιστα Τετράγωνα

Άμεση γενίκευση της ανάλυσης του προηγούμενου Μέρους 4.4 είναι η προσομοίωση συνόλου δεδομένων (x_i, y_i) με γραμμικό συνδυασμό οιαδήποτε αριθμού M συναρτήσεων του x και όχι μόνο ένα γραμμικό συνδυασμό των 1 και x (δηλ. $a + bx$). Για παράδειγμα, οι συναρτήσεις αυτές θα μπορούσαν να είναι $1, x, x^2, \dots, x^{M-1}$, στην οποία περίπτωση ο γραμμικός συνδυασμός τους

$$y(x) = a_1 + a_2x + a_3x^2 + \dots + a_Mx^{M-1} \quad (4.18)$$

είναι πολυώνυμο βαθμού $M - 1$. Τονίζεται ότι αυτές οι συναρτήσεις του x θα μπορούσαν να είναι οτιδήποτε, όπως ημίτονα και συνιμήτονα στην οποία περίπτωση ο γραμμικός συνδυασμός τους αποτελεί αρμονική σειρά. Η γενική μορφή αυτού του τύπου προσομοιώματος είναι

$$y(x) = \sum_{k=1}^M a_k X_k(x) \quad (4.19)$$

όπου $X_1(x), \dots, X_M(x)$ είναι οι περί των x ο λόγος συναρτήσεις του x , και αποκαλούνται *συναρτήσεις βάσης* (*basis functions*). Σημειώσατε ότι οι συναρτήσεις $X_k(x)$ μπορούν να είναι μη-γραμμικές, όσο μη-γραμμικές επιθυμούν να είναι! Στην παρούσα συζήτηση ο όρος «γραμμικότητα» αναφέρεται *μόνο* στην εξάρτηση του προσομοιώματος από τις *παραμέτρους* a_k . Για τέτοιου είδους γραμμικά προσομοιώματα η (γενικευμένη) συνάρτηση κόστους είναι

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y_i - \sum_{k=1}^M a_k X_k(x_i)}{\sigma_i} \right]^2 \quad (4.20)$$

Όπως και προηγουμένως, σ_i είναι το σφάλμα μέτρησης (τυπική απόκλιση) του i -στού δεδομένου και θεωρείται γνωστό. Εάν τα σφάλματα δεν είναι γνωστά (όπως πολλάκις συμβαίνει), και προκειμένου να προχωρήσει η ανάλυση, μπορούν να θεωρηθούν σταθερά, $\sigma = 1$.

Υπάρχουν αρκετές διαφορετικές τεχνικές εύρεσης του συνόλου παραμέτρων που ελαχιστοποιεί την χ^2 , δύο εκ των οποίων είναι ιδιαίτερα χρήσιμες και θα συζητηθούν στο παρόν κεφάλαιο. Πριν τις παρουσιάσουμε, καλό είναι να δοθούν ορισμοί και να καθοριστούν οι συμβολισμοί με τους οποίους θα τις περιγράψουμε.

Έστω \mathbf{A} πίνακας με διαστάσεις $N \times M$, τα στοιχεία του οποίου δομούνται από τις M συναρτήσεις βάσης εκτιμημένες (υπολογισμένες) στα N σημεία x_i , και από N σφάλματα μέτρησης σ_i , σύμφωνα με την σχέση

$$A_{ij} = \frac{X_j(x_i)}{\sigma_i}. \quad (4.21)$$

Ο πίνακας \mathbf{A} ονομάζεται *πίνακας σχεδιασμού* του ανά χείρας προβλήματος. Σε γενικές γραμμές, ο \mathbf{A} έχει περισσότερες γραμμές από στήλες, $N \geq M$, εφόσον *οφείλουν* να υπάρχουν περισσότερα δεδομένα από τις παραμέτρους του προσομοιώματος προκειμένου να έχει νόημα η λύση. (Σκεφτείτε ότι μπορείτε να προσαρμόσετε μία ευθεία σε δύο μόνο σημεία δεδομένων, αλλά δεν έχει κανένα νόημα, στα ίδια δύο σημεία να προσπαθείτε να προσαρμόσετε πολυώνυμο 4^{ου} βαθμού). Η μορφή του πίνακα σχεδιασμού φαίνεται αναλυτικά στην (4.22). Τα στοιχεία του πίνακα περιλαμβάνουν τις συναρτήσεις βάσης υπολογισμένες σ' εκείνες τις τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής, στις οποίες έχουν γίνει μετρήσεις της εξαρτημένης μεταβλητής, καθώς και τις τυπικές αποκλίσεις των αντίστοιχων μετρήσεων της εξαρτημένης μεταβλητής. Οι μετρήσεις της εξαρτημένης μεταβλητής καθ' εαυτές, δεν εμφανίζονται στον πίνακα σχεδιασμού.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{X_1(x_1)}{\sigma_1} & \frac{X_2(x_1)}{\sigma_1} & \dots & \frac{X_M(x_1)}{\sigma_1} \\ \frac{X_1(x_2)}{\sigma_2} & \frac{X_2(x_2)}{\sigma_2} & \dots & \frac{X_M(x_2)}{\sigma_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{X_1(x_N)}{\sigma_N} & \frac{X_2(x_N)}{\sigma_N} & \dots & \frac{X_M(x_N)}{\sigma_N} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

Επιπλέον, ορίζομε το άνυσμα \mathbf{b} μήκους N με την σχέση

$$b_i = \frac{y_i}{\sigma_i} \quad (4.23)$$

και δηλώνομε το M -άνυσμα των προσδιοριστέων παραμέτρων a_1, \dots, a_M , με το σύμβολο \mathbf{a} .

4.5.1 Επίλυση με χρήση Κανονικών Εξισώσεων

Το ελάχιστο της (20) θα λαμβάνει χώρα εκεί όπου η παράγωγος της χ^2 ως προς όλες τις M παραμέτρους a_k εξαφανίζεται. Έτσι, εξειδικεύοντας την εξίσωση (4.6) στην περίπτωση του προσομοιώματος (4.19), λαμβάνομε τις ακόλουθες M εξισώσεις:

$$0 = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \left[y_i - \sum_{j=1}^M a_j X_j(x_i) \right] X_k(x_i), \quad k = 1, \dots, M \quad (4.24)$$

Εναλλάσσοντας την σειρά των αθροίσεων, η (4.24) μπορεί να γραφεί ως εξίσωση πινάκων

$$\sum_{j=1}^M A_{kj} \alpha_j = \beta_k \quad (4.25)$$

όπου

$$A_{kj} = \sum_{i=1}^N \frac{X_j(x_i) X_k(x_i)}{\sigma_i^2} \quad (4.26)$$

ή, ισοδύναμα, $[A] = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$, ένας $M \times M$ πίνακας, και

$$\beta_k = \sum_{i=1}^N \frac{y_i X_k(x_i)}{\sigma_i^2} \quad (4.27)$$

ή, ισοδύναμα, $[\beta] = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{b}$, ένα άνυσμα μήκους M .

Οι εξισώσεις (4.24) ή (4.25) ονομάζονται *κανονικές εξισώσεις (normal equations)* του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων και μπορούν να επιλυθούν ως προς το άνυσμα των παραμέτρων \mathbf{a} με τυπικές μεθόδους, π.χ. παραγοντοποίηση LU , παραγοντοποίηση Choleksy, ή απαλοιφή Gauss-Jordan. Χρησιμοποιώντας ανυσματικό συμβολισμό, οι κανονικές εξισώσεις μπορούν να γραφούν είτε με την μορφή

$$[A] \cdot \mathbf{a} = [\beta], \quad (4.28)$$

είτε με την μορφή

$$(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{a} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{b}$$

Ο αντίστροφος πίνακας $C_{jk} = [A]_{jk}^{-1}$ εξαρτάται άμεσα από τις αβεβαιότητες προσδιορισμού των εκτιμώμενων παραμέτρων \mathbf{a} . Προκειμένου να αποτιμήσομε αυτές τις αβεβαιότητες, θεω-

ρείστε ότι

$$a_j = \sum_{k=1}^M [A]_{jk}^{-1} \beta_k = \sum_{k=1}^M C_{jk} \left[\sum_{i=1}^N \frac{y_i X_k(x_i)}{\sigma_i^2} \right] \quad (4.29)$$

και ότι η διακύμανση της εκτιμήτριας a_j μπορεί να βρεθεί όπως στην περίπτωση της εξίσωσης (4.13) από την

$$\sigma^2(a_j) = \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \left(\frac{\partial a_j}{\partial y_i} \right)^2. \quad (4.30)$$

Δεδομένου ότι τα στοιχεία A_{jk} είναι ανεξάρτητα των y_i ,

$$\frac{\partial a_j}{\partial y_i} = \sum_{k=1}^M C_{jk} \frac{X_k(x_i)}{\sigma_i^2}. \quad (4.31)$$

Κατά συνέπεια, μετά από πράξεις,

$$\sigma^2(a_j) = \sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M C_{jk} C_{jl} \left[\sum_{i=1}^N \frac{X_k(x_i) X_l(x_i)}{\sigma_i^2} \right]. \quad (4.32)$$

Στην εξίσωση (4.32), ο όρος εντός των αγκυλών δεν είναι παρά ο πίνακας $[A]$. Δεδομένου ότι αυτός πολλαπλασιάζεται με τον αντίστροφό του $[C]$, η (4.32) ανάγεται αυτομάτως στη απλή σχέση

$$\sigma^2(a_j) = C_{jj}. \quad (4.33)$$

Με απλούστερα λόγια, τα διαγώνια στοιχεία του $[C]$ δεν είναι παρά οι διακυμάνσεις (τετραγωνισμένες αβεβαιότητες) των προσδιοριστέων παραμέτρων \mathbf{a} . Τούτου δοθέντος, δεν θα πρέπει να αποτελεί έκπληξη το γεγονός ότι τα εκτός διαγωνίου στοιχεία του C_{jk} είναι οι *συν-διακυμάνσεις* μεταξύ των παραμέτρων a_j and a_k .

Από πρακτική άποψη, δεδομένου ότι συνήθως επιθυμούμε να υπολογίσουμε όχι μόνο την λύση \mathbf{a} αλλά και τον πίνακα διακύμανσης $[C]$, είναι πολύ βολικό να χρησιμοποιήσουμε απαλοιφή Gauss-Jordan. Εάν δεν υπάρχει απαίτηση υπολογισμού του πίνακα συνδιακύμανσης, η ταχύτερη μέθοδος είναι η παραγοντοποίηση LU , χωρίς υπολογισμό του αντίστροφου πίνακα. Θεωρητικά, εφόσον ο $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ είναι θετικός ορισμένος, η αποσύνθεση (παραγοντοποίηση Cholesky) θα ήταν ο πλέον αποτελεσματικός τρόπος επίλυσης των κανονικών εξισώσεων. Στην πράξη όμως, η απαλοιφή Gauss-Jordan είναι επαρκής.

Τέλος, επισημαίνεται ότι η λύση των προβλημάτων ελαχίστων τετραγώνων απ' ευθείας από τις κανονικές εξισώσεις υπόκειται σε (σχετικά σημαντικά) σφάλματα στρογγύλευσης. Μία εναλλακτική μέθοδος, και συνήθως προτιμητέα, περιλαμβάνει παραγοντοποίηση QR του πίνακα σχεδιασμού \mathbf{A} . Στην συνέχεια αυτής της συζήτησης θα δούμε και ορισμένες άλλες δυσκολίες του προβλήματος των ελαχίστων τετραγώνων, η θεραπεία για τα οποία είναι η *αποσύνθεση ιδιζουσών τιμών* (*singular value decomposition SVD*). Όπως θα δούμε, η SVD θεραπεύει και το πρόβλημα των σφαλμάτων στρογγύλευσης, και για τον λόγο αυτό συνιστάται για όλα, εκτός από τα ευκολότερα φυσικά προβλήματα...

4.5.2. Επίλυση με χρήση Αποσύνθεσης Ιδιαζουσών Τιμών.

Σε αρκετές περιπτώσεις, οι κανονικές εξισώσεις αντιμετωπίζουν το πρόβλημα των ελαχίστων τετραγώνων με επάρκεια. Σε πολλές όμως περιπτώσεις, οι κανονικές εξισώσεις οδηγούν σε πίνακες σχεδόν ιδιάζοντες, οι οποίοι δεν μπορούν να αντιστραφούν (όταν κατά την διάρκεια της επίλυσης σχηματίζονται μηδενικά οδηγά στοιχεία), η αντιστρέφονται ασταθώς (όταν σχηματίζονται πολύ μικρά οδηγά στοιχεία). Στην δεύτερη και συνηθέστερη περίπτωση οι πα-

ράμετροι a_k εμφανίζουν αφύσικα μεγάλα μεγέθη που υπολογίζονται με τέτοιο τρόπο, ώστε να αλληλοεξουδετερώνονται κατά την αποτίμηση του προσομοιώματος.

Ο λόγος για τον οποίο συμβαίνει κάτι τέτοιο είναι διότι, συχνότερα από ότι ο μέσος αναλυτής θέλει να παραδεχθεί, τα δεδομένα δεν μπορούν να διακρίνουν μεταξύ δύο ή περισσότερων από τις συναρτήσεις βάσης. Απλούστερα, το προσομοίωμα δεν είναι ακριβώς κατάλληλο για τα δεδομένα. Εάν δύο τέτοιες συναρτήσεις βάσης, ή γραμμικοί συνδυασμοί συναρτήσεων βάσης συμβαίνει να περιγράφουν (προσαρμόζονται) στα δεδομένα εξ ίσου καλά (ή εξ ίσου κακά), τότε δύο ή περισσότερες εξισώσεις καθίστανται γραμμικά εξαρτημένες και ο πίνακας $[A]$ αυτοκτονεί καθιστάμενος ιδιάζων. Ίσως είναι (μαθηματικά) ειρωνικό το γεγονός ότι τα προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων μπορούν να είναι *ταυτόχρονα υπερκαθορισμένα* (*overdetermined* όπου ο αριθμός των δεδομένων ξεπερνά τον αριθμό των παραμέτρων) και *ατελώς ορισμένα* (*underdetermined* ικανοποιείται από διαφορετικούς συνδυασμούς παραμέτρων). Η δεύτερη περίπτωση (αβεβαιότητα ως προς βέλτιστες παραμέτρους) είναι *εξαιρετικά* δύσκολο να εντοπισθεί εκ των προτέρων σε σύνθετα και πολύπλοκα φυσικά προβλήματα.

Πολλά από τα ανωτέρω προβλήματα μπορούν να αντιμετωπισθούν με την Αποσύνθεση Ιδιοζουσών Τιμών (SVD), η οποία για τον πίνακα σχεδιασμού γράφεται

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{V}^T$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T = \mathbf{V} \cdot \text{diag}(1/s_i) \cdot \mathbf{U}^T$$

Το πρόβλημα προσδιορισμού των παραμέτρων \mathbf{a} μπορεί να διατυπωθεί ως εξής:

$$\text{Να ευρεθεί άνυσμα } \mathbf{a} \text{ που ελαχιστοποιεί την } \chi^2 = |\mathbf{A} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{b}|^2 \quad (4.34)$$

Εάν το άνυσμα $\mathbf{U}_{(i)}$, $i = 1, \dots, M$ δηλώνει τις *στήλες* τού πίνακα \mathbf{U} (εκάστη εκ των οποίων είναι άνυσμα μήκους N), και το άνυσμα $\mathbf{V}_{(i)}$, $i = 1, \dots, M$ δηλώνει τις *στήλες* του \mathbf{V} (εκάστη εκ των οποίων είναι άνυσμα μήκους M), τότε η λύση του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων (4.34) μπορεί να γραφτεί ως εξής,

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{V}_{(i)} \cdot \text{diag}\left(\frac{1}{s_i}\right) \cdot (\mathbf{U}_{(i)} \cdot \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^M \left(\frac{\mathbf{U}_{(i)} \cdot \mathbf{b}}{s_i} \right) \mathbf{V}_{(i)} \quad (4.35)$$

όπου s_i είναι οι ιδιάζουσες τιμές.

Στην περίπτωση ενός υπερκαθορισμένου συστήματος, η λύση (4.35) είναι βέλτιστη κατά την έννοια των ελαχίστων τετραγώνων. Στην περίπτωση ενός ατελώς ορισμένου συστήματος, η SVD προσφέρει μία λύση της οποίας οι τιμές (οι παράμετροι a_k) είναι οι μικρότερες δυνατές κατά την έννοια των ελαχίστων τετραγώνων· στην περίπτωση αυτή, όταν κάποιος συνδυασμός συναρτήσεων βάσης είναι άσχετος προς τα δεδομένα, τότε αυτός θα συμπεσθεί προς μία μικρή, μη αξιολογήσιμη ιδιάζουσα τιμή, αντί να φουσκώσει αφύσικα.

Η εξίσωση (4.35) λέει ότι οι παράμετροι \mathbf{a} είναι γραμμικοί συνδυασμοί των στηλών του \mathbf{V} , με συντελεστές προκύπτοντες από το εσωτερικό γινόμενο των στηλών του \mathbf{U} με το σταθμισμένο άνυσμα δεδομένων (4.23). Μπορεί επίσης να αποδειχθεί ότι τα τυπικά (πιθανά) σφάλματα των προσδιοριστέων παραμέτρων είναι επίσης γραμμικοί συνδυασμοί των στηλών του \mathbf{V} . Η εξίσωση (4.35) μπορεί να γραφεί με τρόπο που να δείχνει αυτά τα σφάλματα ως

$$\mathbf{a} = \left[\sum_{i=1}^M \left(\frac{\mathbf{U}_{(i)} \cdot \mathbf{b}}{s_i} \right) \mathbf{V}_{(i)} \right] \pm \frac{1}{s_1} \mathbf{V}_{(1)} \pm \dots \pm \frac{1}{s_M} \mathbf{V}_{(M)}. \quad (4.36)$$

Στην (4.36), κάθε \pm ακολουθείται από την τυπική απόκλιση της i -στης παραμέτρου. Οι τυπικές αποκλίσεις είναι όλες αμοιβαία ανεξάρτητες (ασυσχέτιστες). Αυτό συμβαίνει διότι τα ανύσματα $\mathbf{V}_{(i)}$ είναι ταυτοχρόνως και κύριοι άξονες του ελλειψοειδούς σφάλματος των παραμέτρων \mathbf{a} . Από την (4.36) προκύπτει ότι διακύμανση μίας παραμέτρου a_j δίδεται από την

$$\sigma^2(a_j) = \sum_{i=1}^M \frac{1}{s_i^2} [\mathbf{V}_{(i)}]_j^2 = \sum_{i=1}^M \left(\frac{V_{ji}}{s_i} \right)^2, \quad (4.37)$$

σχέση που είναι ταυτόσημη με την (4.32). Οι συνδιακυμάνσεις των παραμέτρων, κατ' αντιστοιχία προς τα ανωτέρω δίδονται από την σχέση

$$\text{Cov}(a_j, a_k) = \sum_{i=1}^M \left(\frac{V_{ji} V_{ki}}{s_i^2} \right). \quad (4.38)$$

Στην εισαγωγή του παρόντος χωρίου σημειώθηκε ότι επίλυση με κανονικές εξισώσεις μπορεί να αποτύχει λόγω κάποιου μηδενικού οδηγού στοιχείου. Τώρα θα εξηγήσουμε πως η SVD ξεπερνά αυτό το πρόβλημα. Εάν μία ιδιάζουσα τιμή s_i είναι μηδενική, η αντίστροφη της στην εξίσωση (4.36) μπορεί να αντικατασταθεί με μηδέν, αντί να αφεθεί να μεταπηδήσει στο άπειρο. Η πράξη αυτή ισοδυναμεί με το να αντικαταστήσουμε μία από τις προσδιοριστέες παραμέτρους \mathbf{a} με μηδέν, παρά να την αφήσουμε να εκφυλισθεί. Επιπλέον, εάν μία ιδιάζουσα τιμή s_i είναι μη-μηδενική αλλά πολύ μικρή, η αντίστροφη της μπορεί επίσης να αντικατασταθεί με μηδέν εφόσον η πολύ μικρή τιμή της δείχνει ότι είναι άσχετη με τα δεδομένα, πιθανώς τεχνητό αποτέλεσμα σφαλμάτων στρογγύλευσης και όχι κάποια αξιόλογη παράμετρος. Φυσικά, στην περίπτωση αυτή τίθεται το εύλογο ερώτημα: «πόσο μικρή είναι μία μικρή τιμή;» Μία λογική απάντηση είναι να αποκλείσουμε (μηδενίσουμε) όλες τις ιδιάζουσες τιμές των οποίων ο λόγος προς την μέγιστη (πρώτη) ιδιάζουσα τιμή είναι μικρότερος από N φορές την ακρίβεια της υπολογιστικής μηχανής ε , ή από \sqrt{N} .

Υπάρχει ένας ακόμη λόγος για να απαλείψουμε (μηδενίσουμε) πρόσθετες ιδιάζουσες τιμές, ακόμη και τόσο μεγάλες, ώστε το σφάλμα στρογγύλευσης να μην αποτελεί πρόβλημα. Η SVD έχει τέτοιες ιδιότητες οι οποίες μας επιτρέπουν να αναγνωρίζουμε γραμμικούς συνδυασμούς παραμέτρων που έχουν περιορισμένη, ή και καθόλου επιρροή στα δεδομένα και δεν συμβάλλουν στην ελάττωση της χ^2 (άσχετες ιδιάζουσες τιμές). Η απαλοιφή τέτοιων παραμέτρων μπορεί, μερικές φορές, να ελαττώσει σημαντικά το σφάλμα προσδιορισμού των παραμέτρων, την στιγμή που το ελάχιστο της χ^2 θα αυξηθεί ασήμαντα.

Σε γενικές γραμμές, η SVD είναι χρησιμότερη και ασφαλέστερη μέθοδος επίλυσης προβλημάτων ελαχίστων τετραγώνων από τις κανονικές εξισώσεις. Το μόνο σημαντικό μειονέκτημά της είναι ότι απαιτεί περισσότερη μνήμη και υπολογιστική προσπάθεια και είναι πολύ πι αργή από τις κανονικές εξισώσεις. Παρ' όλα αυτά, το μεγαλύτερο πλεονέκτημά της, ότι δηλαδή (θεωρητικά) δεν μπορεί να αστοχήσει, περισσότερο από αντισταθμίζει το μειονέκτημα της ταχύτητας.

5.3. Πολυδιάστατα Προσομοιώματα

Εάν η εξαρτημένη μεταβλητή y είναι συνάρτηση περισσότερων της μίας μεταβλητών, για παράδειγμα ενός ανύσματος μεταβλητών \mathbf{x} , τότε οι συναρτήσεις βάσης θα είναι συναρτήσεις του ανύσματος, $X_1(\mathbf{x}), \dots, X_M(\mathbf{x})$. Η συνάρτηση κόστους χ^2 θα είναι, στην περίπτωση αυτή,

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y_i - \sum_{k=1}^M a_k X_k(\mathbf{x}_i)}{\sigma_i} \right]^2$$

Όλη η προηγούμενη συζήτηση εξακολουθεί να ισχύει απαράλλακτη, με την μεταβλητή x να αντικαθίσταται από το \mathbf{x} .

ΠΕΡΑΙΤΕΡΩ ΜΕΛΕΤΗ

- Bevington, P.R. 1969, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences* (New York: McGraw-Hill).
- Brownlee, K.A. 1965, *Statistical Theory and Methodology*, 2nd ed. (New York: Wiley).
- Forsythe, G.E., Malcolm, M.A., and Moler, C.B. 1977, *Computer Methods for Mathematical Computations* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall).
- Korn, G.A., and Korn, T.M. 1968, *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers*, 2nd ed. (New York: McGraw-Hill), Chapters 18–19.
- Lawson, C.L., and Hanson, R. 1974, *Solving Least Squares Problems* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall).
- Martin, B.R. 1971, *Statistics for Physicists* (New York: Academic Press).

4.6 Μη-Γραμμικά Ελάχιστα Τετράγωνα: Εισαγωγή στην Αντιστροφή Γεωφυσικών Δεδομένων.

4.6.1. Η Μαγνητοτελλουρική Μέθοδος σε στρωματοειδείς δομές

Το αντίστροφο πρόβλημα, δηλαδή η κατασκευή φυσικώς αποδεκτών λύσεων της κατανομής των φυσικών παραμέτρων του στερεού φλοιού, οι οποίες ερμηνεύουν την παρατήρηση και υπακούουν δεδομένους φυσικούς περιορισμούς (αναλυτικούς ή εμπειρικούς), είναι ίσως το δυσκολότερο πρόβλημα της γεωφυσικής επιστήμης. Εις το παρόν θα επιχειρηθεί μία εισαγωγή στις έννοιες και την φιλοσοφία του αντίστροφου προβλήματος. Αν και θα συζητήσουμε το μαγνητοτελλουρικό αντίστροφο πρόβλημα, τα ακόλουθα ισχύουν, με τις κατάλληλες προσαρμογές, για όλες τις γεωφυσικές (και όχι μόνον) μεθόδους, οι οποίες απαιτούν την αντιμετώπιση παρομοίων προβλημάτων.

Το αντίστροφο πρόβλημα διατυπώνεται ως εξής. Δεδομένων:

- των φυσικών νόμων που περιγράφουν την συχνοτικά εξαρτώμενη διάδοση επιπέδων ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων εντός πεπερασμένων, πλευρικά ομογενών και κατακορύφως ανισοτροπικών αγωγών, και
- της παρατηρηθείσας, συχνοτικά εξαρτώμενης απόκρισης της Γης σε διέγερση δι' επιπέδων ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων,

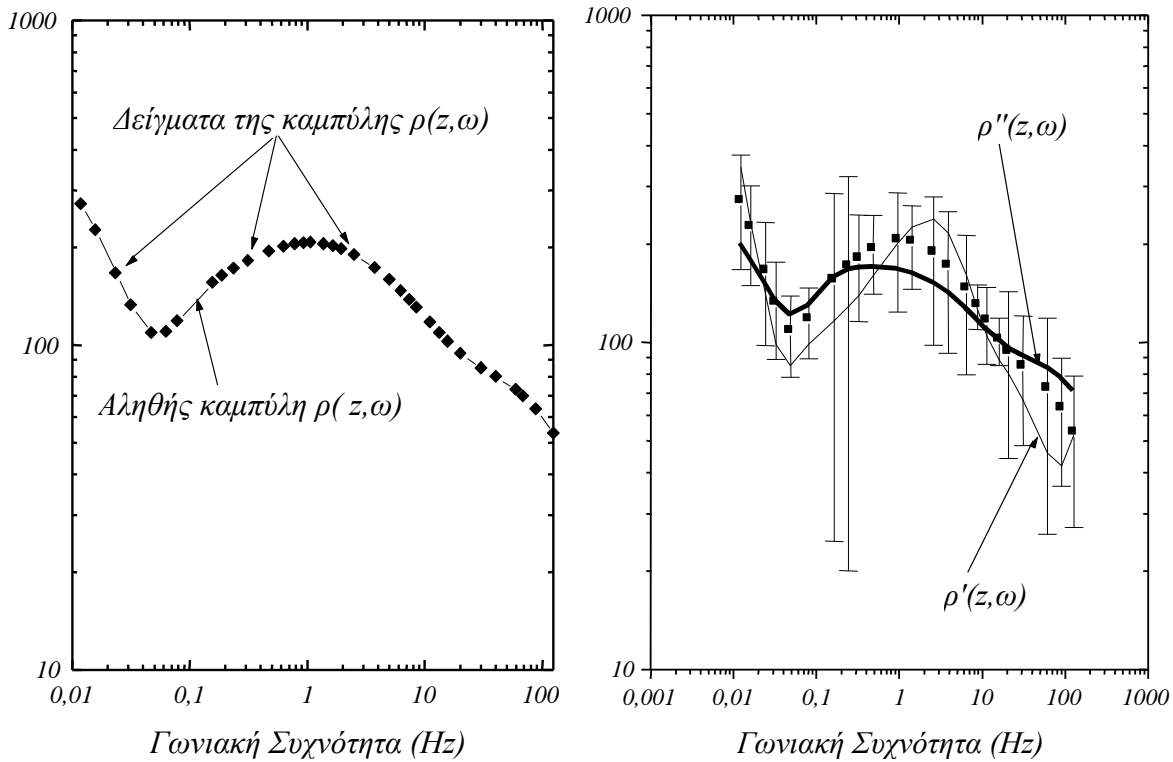
⇒ να κατασκευασθεί η στρωματοειδής δομή της Γης που αναπαράγει και ερμηνεύει την παρατήρηση.

Στο (μονοδιάστατο) MT πρόβλημα παρατήρηση είναι η φαινόμενη εμπέδηση $\check{Z}(\omega)$ και ζητείται να κατασκευασθεί η συνάρτηση $\sigma(z)$ ούτως, ώστε

$$F\{\sigma(z)\} \rightarrow \check{Z}(\omega)$$

όπου F είναι ο νόμος που διέπει την απεικόνιση της γεωηλεκτρικής δομής σε Μαγνητοτελλουρική εμπέδηση (στην προκειμένη περίπτωση οι εξισώσεις του Maxwell). Προς το παρόν θα υποθέσουμε ότι η λύση $\sigma(z)$ που ψάχνουμε υπάρχει¹⁰. Το επόμενο ερώτημα που οφείλει να απαντηθεί είναι:

¹⁰ Το πρόβλημα της ύπαρξης λύσεων συμποσούται στο ερώτημα "Δεδομένου του νόμου F και της παρατηρηθείσας απόκρισης $\check{Z}(\omega)$, υπάρχει φυσική γεωηλεκτρική δομή περιγράψιμη με συνάρτηση $\sigma(z)$, η οποία να παράγει την $Z(\omega)$;" Το πρόβλημα έχει τύχει πλήρους και ικανοποιητικής απάντησης, αφού η αναλυτική έκφραση της εμπέδησης επιτρέπει την κατασκευή συνθηκών αναγκαίων (Weidelt, 1972) και ικανών και αναγκαίων (Parker, 1980) για την ύπαρξη φυσικών λύσεων του αντιστρόφου προβλήματος. Δεδομένης της δυσκολίας του προβλήματος, δεν θα υπεισέλθουμε στην ανάλυση των συνθηκών ύπαρξης, σημειώνουμε όμως ότι το ενδεχόμενο ανυπαρξίας λύσεων είναι πραγματικό και επίσης συναρτάται από την ποιότητα εκτίμησης της $\check{Z}(\omega)$, δεδομένου ότι αυτή γίνεται σε καθεστώς θορύβου και θα υπάρχουν σφάλματα, (βλ. κατωτέρω), τα οποία, στην χειρότερη περίπτωση καθιστούν την φυσική συνάρτηση $\sigma(z)$ μη παρατηρήσιμη και/ή απολήψιμη. Ενδεχομένως, υπάρχουν παραμορφώσεις της απόκρισης λόγω ανθρωπογενών παρεμβολών, ιδίως πλησίον βιομηχανικών περιοχών, ασυμβίβαστες με φυσικώς αποδεκτές κατανομές της αγωγιμότητας. Στην περίπτωση ύπαρξης λύσεων σε περισσότερες της μιας διαστάσεις, οφείλουμε επεκτείνουμε της ερμηνευτική μας προσπάθεια πέραν της μονοδιάστατης αντιστροφής, χρησιμοποιώντας τεχνικές κατάλληλες για πολυδιάστατες δομές.



Εικόνα 4.1. Η σύγχρονη τεχνολογία παρέχει στον παρατηρητή την δυνατότητα παρατήρησης της πραγματικής συνάρτησης $\rho_a(z, \omega)$, υπό την μορφή διακριτών δειγμάτων, έκαστο των οποίων εκτιμάται με δεδομένη αβεβαιότητα. Η αληθής καμπύλη είναι συνεχής με την απόλυτη και μαθηματική έννοια του όρου και, ως εκ τούτου, μας είναι αδύνατον να την προσεγγίσουμε ακριβώς, με υλοποιήσιμες (εφικτές) φασματικές πυκνότητες δειγματοληψίας. Το μέγεθος της αβεβαιότητας στον υπολογισμό της παρατηρούμενης καμπύλης $\rho_a(z, \omega)$ επηρεάζει βαθύτατα την ερμηνεία. Όσο μεγαλύτερα είναι τα σφάλματα, τόσο περισσότερες οικογένειες λύσεων είναι δυνατόν να γίνουν αποδεκτές.

Μοναδικότητα λύσεων: Έστω ότι υπάρχει λύση $\sigma(z)$ του μονοδιάστατου αντίστροφου προβλήματος. Τότε προκύπτει το ερώτημα: Μήπως υπάρχουν πολλές εναλλακτικές συναρτήσεις $\sigma(z)$ οι οποίες αναπαράγουν εξ ίσου καλά την παρατήρηση;

Το ερώτημα αυτό έχει τύχει θεωρητικής απάντησης, η οποία είναι μάλλον απογοητευτική. Έχει δειχθεί ότι για αλάθητες παρατηρήσεις (ελεύθερες θορύβου και σφαλμάτων), καλύπτοντες όλες τις συχνότητες στο διάστημα $[0, \infty)$, η λύση $\sigma(z)$, αν υπάρχει, είναι μοναδική και ορίζει αμφιμονοσημάντως την πραγματική γεωηλεκτρική δομή. Το αυτό ισχύει και στην περίπτωση που υπάρχουν αλάθητες παρατηρήσεις για όλες τις συχνότητες $\omega \in [\omega_1, \omega_2]$, διότι η απόκριση $Z(\omega)$ είναι αναλυτική συνάρτηση της συχνότητας και συνεπώς, αν είναι γνωστή σε οποιοδήποτε πεπερασμένο διάστημα $[\omega_1, \omega_2]$, μπορεί να κατασκευασθεί αναλυτικά για οποιαδήποτε συχνότητα $\omega \in [0, \infty[$. Η πλήρης γνώση της εμπέδησης $Z(\omega)$ σε οποιοδήποτε πεπερασμένο διάστημα συχνοτήτων, συνεπάγεται και την μοναδικότητα του $\sigma(z)$.

Η θεωρητική αυτή απάντηση έχει μόνο ακαδημαϊκή αξία διότι, προφανώς, οι ανωτέρω συνθήκες είναι αδύνατο να υλοποιηθούν. Σε πραγματικές συνθήκες, δεν υπάρχει ποτέ μοναδική λύση σε ένα πρόβλημα ερμηνείας. Η MT μετρήσεις λαμβάνουν χώρα σε περιβάλλον φυσικού και ανθρωπογενούς θορύβου, ο οποίος σε καμία περίπτωση δεν επιτρέπει τον προσδιορισμό της πραγματικής τιμής της MT απόκρισης σε ένα τόπο και εισάγει μεροληψία και αβεβαιότητα (σφάλμα). Η μετρούμενη MT απόκριση υλοποιείται ως πεπερασμένη σειρά $\check{Z}(\omega_n)$, $n=1, \dots, N$ εκ διακριτών εκτιμητριών μέγιστης πιθανοφάνειας της πραγματικής φαινόμενης εμπέδησης $Z_a(\omega)$, εκάστη των οποίων υπάρχει με μεροληψία (bias) αγνώστου μεγέθους και

αβεβαιότητα θέσης $\Delta\check{Z}(\omega_n)$ γύρω από την $\check{Z}(\omega_n)$. Αυτές θέτουν μόνον $2N$ περιορισμούς στην άγνωστη συνάρτηση εμπέδησης $Z(\omega)$, ήτοι N περιορισμούς για το πραγματικό και N για το φανταστικό μέρος, ή, ισοδυνάμως, N περιορισμούς για την φαινόμενη ειδική αντίσταση, (π.χ. βλ. εικόνα 1 αριστερά) και N περιορισμούς για την φάση. Η ποιότητα της παρατήρησης είναι αντίστροφη συνάρτηση του μεγέθους του σφάλματος $\Delta\check{Z}(\omega_n)$. Λόγω της διακριτής φύσης της μέτρησης και της ύπαρξης σφαλμάτων, υπάρχουν άπειροι τρόποι παρεμβολής μεταξύ των εκτιμητριών της εμπέδησης (δειγμάτων), οι οποίοι, βεβαίως, θα οδηγήσουν σε άπειρες διαφορετικές συναρτήσεις κατανομής της αγωγιμότητας. Η μη μοναδικότητα της λύσης περαιτέρω εξασφαλίζεται όταν η ποιότητα της παρατήρησης είναι πτωχή, όπως φαίνεται στην εικόνα 1 (δεξιά), όπου οι δύο συναρτήσεις $\rho^{(1)}(\omega)$ και $\rho^{(2)}(\omega)$ είναι εξ ίσου αποδεκτές ερμηνείες εφόσον υπάρχουν εντός των ορίων αβεβαιότητας (είναι δηλαδή μικρότερες των σφαλμάτων). Αναγκάζομαστε λοιπόν να συμπεράνουμε ότι αν υπάρχει μία συνάρτηση $Z'(\omega_n)$ η οποία εξηγεί την παρατήρηση, θα υπάρχουν και άλλες, οι οποίες την εξηγούν εξ ίσου καλά. Στην χειρότερη περίπτωση, οι συναρτήσεις αυτές θα είναι τελείως διαφορετικές. Δεδομένων των ανωτέρω, η πρακτική αντιμετώπιση του προβλήματος της ερμηνείας σκοπό έχει την εξαγωγή κάθε χρήσιμης πληροφορίας και συμπεράσματος από την παρατήρηση, έστω και αν η προκρινόμενη λύση είναι μη μοναδική. Η μη μοναδικότητα της λύσης δεν σημαίνει με κανένα τρόπο την αδυναμία προσδιορισμού της γεωηλεκτρικής δομής, διότι σε κανονικές συνθήκες, η φασματική πυκνότητα της δειγματοληψίας είναι επαρκής, η μεροληψία κατέρχεται στα επίπεδα των τυχαίων σφαλμάτων και τα περιθώρια σφάλματος υπό έλεγχο, ούτως ώστε, οι δυνατές λύσεις να ανήκουν στην αυτή οικογένεια. Οφείλουμε όμως να αναγνωρίζουμε ότι η προκρινόμενη λύση θα είναι ένα ίνδαλμα, ένα προσομοίωμα που θα παρέχει την *πιθανοφανέστερη* εξήγηση της παρατήρησης, δηλαδή αυτή που θα ελαχιστοποιεί την απόκλιση μεταξύ των εκτιμητριών $\check{Z}(\omega_n)$ και της προτεινόμενης ερμηνευτικής απόκρισης $Z'(\omega_n)$.

4.6.2. Κατασκευή λύσεων.

Αυτή η συνιστώσα του αντίστροφου προβλήματος έχει συγκεντρώσει την μεγαλύτερη προσοχή και πλέον ενδελεχή διερεύνηση, αφού άλλωστε η κατασκευή ερμηνείας είναι το άλας και ο σκοπός κάθε γεωφυσικής και μη διασκόπησης. Η διατύπωση του προβλήματος είναι απλή: *"Δεδομένων N ακριβών ή ανακριβών εκτιμητριών $\check{Z}(\omega_n)$ της πραγματικής φαινόμενης ειδικής αντίστασης της Γης, να ευρεθεί η συνάρτηση (ή συναρτήσεις) $\sigma(z)$ η οποία επαρκώς αναπαράγει την $\check{Z}(\omega_n)$ ".*

Η απάντηση στο πρόβλημα της κατασκευής λύσεων είναι δύσκολη και έχει επιχειρηθεί από σημαντικό αριθμό ερευνητών, οι οποίοι παρήγαγαν σημαντικό αριθμό αλγορίθμων. Σε γενικές γραμμές, κάθε αλγόριθμος έχει την δυνατότητα να κατασκευάζει ένα συγκεκριμένο "τύπο" λύσεων και όλοι μαζί καλύπτουν ευρύτατο φάσμα φιλοσοφικών προσεγγίσεων και μαθηματικών μεθοδολογιών. Οι δυσκολότεροι, αλλά και πλέον αξιόπιστοι, είναι οι καθαρώς αναλυτικοί αλγόριθμοι, οι οποίοι υπακούουν όλους τους αναλυτικούς και φυσικούς περιορισμούς του διέποντος νόμου. Στο άλλο άκρο του φάσματος ανήκουν οι καθαρώς στατιστικοί αλγόριθμοι (π.χ. Monte Carlo), οι οποίοι ψάχνουν κυριολεκτικώς στην τύχη, να εύρουν τις οικογένειες συναρτήσεων $\sigma(z)$, οι οποίες ικανοποιούν την παρατήρηση. Ενδιάμεσως υπάρχουν διάφορες κατηγορίες απλοποιημένων αναλυτικών αλγορίθμων, καθώς και υβριδίων του είδους "δοκιμή και σφάλμα" (trial and error). Εδώ θα συζητήσουμε την κλασικότερη και ευρύτερα εφαρμοζόμενη μέθοδο κατασκευής λύσεων, αυτή της γενικευμένης γραμμικής αντιστροφής, η οποία επιλύει το φύσει μη-γραμμικό πρόβλημα με ακολουθία γραμμικών προσεγγίσεων -

διορθώσεων (γραμμικοποίηση). Θα επικεντρωθούμε στις βασικές αρχές της μεθόδου και την εφαρμογή τους στο 1Δ ΜΤ πρόβλημα, αλλά πρέπει να υπογραμμίσουμε ότι η μέθοδος, με τις κατάλληλες επεκτάσεις και προσαρμογές, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση αντιστρόφων προβλημάτων κάθε τύπου και ανωτέρων της μίας διαστάσεων.

Προκειμένου να παραμετροποιήσουμε την ηλεκτρική δομή του υπεδάφους, υποθέτουμε ένα ίνδαλμα (προσομοίωμα), μία αφηρημένη μαθηματική αναπαράσταση της Γης με K στρώματα πεπερασμένου πάχους. Αυτή αναγκαστικά αποτελείται από πεπερασμένο αριθμό παραμέτρων x_m , $m=1,2,\dots,M$, $M=2K+1$, οι οποίες αντιπροσωπεύουν τις ειδικές αντιστάσεις ($K+1$ παράμετροι) και τα πάχη (K παράμετροι) των στρωμάτων. Δηλώνουμε ένα τυχόν ίνδαλμα ως

$$M(x_1, x_2, \dots, x_M) = M(\mathbf{X})$$

και λέμε ότι τα στοιχεία x_m του ανύσματος \mathbf{X} συνιστούν M -διάστατο *παραμετρικό χώρο*. Επίσης, έστω $F\{\}$ ένας νόμος που απεικονίζει το ίνδαλμα σε κάποια θεωρητική φαινόμενη εμπέδηση

$$Z(\omega_v) = F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}.$$

Αντικειμενικός σκοπός της προσπάθειάς μας είναι να βρούμε ένα σύνολο παραμέτρων \mathbf{X} , οι οποίες να ελαχιστοποιούν με κάποιο τρόπο, τις διαφορές $|\check{Z}(\omega_v) - Z(\omega_v)|$ για όλες τις N παρατηρήσεις.

Για να τον επιτύχουμε, θεωρούμε ότι η μη-γραμμική συναρτησιακή απεικόνιση $F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}$ είναι συνεχής γύρω από εκάστη παράμετρο x_m και το κυριότερο, παραδεχόμαστε ότι μεταβάλλεται πολύ αργά συναρτήσει των παραμέτρων x_m ¹¹. Με την προϋπόθεση αυτή, έχουμε το δικαίωμα να μετατρέψουμε την μεταβολή της απεικόνισης $F\{\}$ σε απλή γραμμική σχέση, αναπτύσσοντάς την σε σειρά Taylor γύρω από την x_m , από την οποία κρατάμε μόνο τον πρώτο όρο:

$$F\{M(x_1, x_2, \dots, x_m + \Delta x_m, \dots, x_M) : \omega_v\} = F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\} + \frac{\partial F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}}{\partial x_m} \Delta x_m$$

Έτσι, η μεταβολή μίας $x_m \in \mathbf{X}$ θα επιφέρει (κατά προσέγγιση) μεταβολή

$$\frac{\partial F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}}{\partial x_m} \cong \frac{\Delta F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}}{\Delta x_m} = \frac{1}{\Delta x_m} F\{M(x_1, x_2, \dots, x_m + \Delta x_m, \dots, x_M) : \omega_v\}$$

Θεωρώντας ότι όλες οι $x_m \in \mathbf{X}$ μπορούν να μεταβληθούν, σε πρώτη προσέγγιση γράφομε

$$F\{M(\mathbf{X} + \Delta \mathbf{X}) : \omega_v\} = F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\} + \sum_{m=1}^M \frac{\partial F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}}{\partial x_m} \Delta x_m$$

Προκειμένου να ελαχιστοποιήσουμε τη διαφορά μεταξύ της παρατηρημένης και υπολογιζόμενης τιμής της εμπέδησης, απαιτούμε

$$\check{Z}(\omega_v) - F\{M(\mathbf{X} + \Delta \mathbf{X}) : \omega_v\} = 0,$$

από όπου καταλήγουμε ότι

$$\check{Z}(\omega_v) - F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\} = \sum_{m=1}^M \frac{\partial F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}}{\partial x_m} \Delta x_m,$$

¹¹ Αυτή είναι μία πολύ δραστική παραδοχή και ισχύει μόνο για δομές που δεν παρουσιάζουν έντονες αντιθέσεις αγωγιμότητας από στρώμα σε στρώμα (δηλαδή πολλών τάξεων μεγέθους). Στην αντίθετη περίπτωση, η διαδικασία αυτή οδηγεί σε προσεγγιστικές μόνο λύσεις του προβλήματος, αφού επιφέρει δραστική αναγκαστική εξομάλυνση της μεταβολής της συνάρτησης $Z(\omega_v)$.

που δεν είναι άλλη από

$$\tilde{Z}(\omega_v) - Z(\omega_v) = \sum_{m=1}^M \frac{\partial Z(\omega_v)}{\partial x_m} \Delta x_m = \frac{\partial Z(\omega_v)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \dots + \frac{\partial Z(\omega_v)}{\partial x_m} \Delta x_m + \dots + \frac{\partial Z(\omega_v)}{\partial x_M} \Delta x_M.$$

Επαναλαμβάνοντας αυτή τη διαδικασία γραμμικοποίησης N φορές, οδηγούμεθα σε ένα γραμμικό σύστημα $2N$ εξισώσεων με M αγνώστους, (N για το πραγματικό και N για το φανταστικό μέρος της εμπέδησης αντίστοιχα και M άγνωστες παραμέτρους της δομής). Αν υιοθετήσουμε τον συμβολισμό:

$$\Delta \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \operatorname{Re}\{\tilde{Z}(\omega_1) - Z(\omega_1)\} \\ \operatorname{Im}\{\tilde{Z}(\omega_1) - Z(\omega_1)\} \\ \vdots \\ \operatorname{Re}\{\tilde{Z}(\omega_N) - Z(\omega_N)\} \\ \operatorname{Im}\{\tilde{Z}(\omega_N) - Z(\omega_N)\} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \operatorname{Re}\left\{\frac{\partial Z(\omega_1)}{\partial x_1}\right\} & \operatorname{Re}\left\{\frac{\partial Z(\omega_1)}{\partial x_2}\right\} & \dots & \operatorname{Re}\left\{\frac{\partial Z(\omega_1)}{\partial x_M}\right\} \\ \operatorname{Im}\left\{\frac{\partial Z(\omega_1)}{\partial x_1}\right\} & \operatorname{Im}\left\{\frac{\partial Z(\omega_1)}{\partial x_2}\right\} & \dots & \operatorname{Im}\left\{\frac{\partial Z(\omega_1)}{\partial x_M}\right\} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \operatorname{Re}\left\{\frac{\partial Z(\omega_N)}{\partial x_1}\right\} & \operatorname{Re}\left\{\frac{\partial Z(\omega_N)}{\partial x_2}\right\} & \dots & \operatorname{Re}\left\{\frac{\partial Z(\omega_N)}{\partial x_M}\right\} \\ \operatorname{Im}\left\{\frac{\partial Z(\omega_N)}{\partial x_1}\right\} & \operatorname{Im}\left\{\frac{\partial Z(\omega_N)}{\partial x_2}\right\} & \dots & \operatorname{Im}\left\{\frac{\partial Z(\omega_1)}{\partial x_M}\right\} \end{bmatrix}, \quad \Delta \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \vdots \\ \Delta x_M \end{bmatrix},$$

γράφουμε

$$\Delta \mathbf{Z} = \mathbf{J} \cdot \Delta \mathbf{X}.$$

Ο πίνακας \mathbf{J} είναι η *Ιακωβιανή* (Jacobian) ή αλλιώς ο *πίνακας ευαισθησίας* της $F\{M(\mathbf{X}) : \omega_v\}$ ως προς τις παραμέτρους \mathbf{X} , εφόσον μετρά την μεταβολή της v -οστής θεωρητικής τιμής $Z(\omega_v)$ ως προς τις μεταβολές εκάστου εκ των x_m . $\Delta \mathbf{X}$ είναι οι *διορθώσεις* που πρέπει να επιφέρουμε στις παραμέτρους \mathbf{X} , προκειμένου να ελαττωθεί η διαφορά μεταξύ της παρατηρημένης και υπολογιζόμενης εμπέδησης. Αν η Ιακωβιανή είναι αντιστρέψιμη, τότε το σύστημα είναι επιλύσιμο, κατά κανόνα με ελάχιστα τετράγωνα, βρίσκοντας την

$$\min(\|\Delta \mathbf{Z} - \mathbf{J} \Delta \mathbf{X}\|) \Leftrightarrow \frac{\partial \sum_{v=1}^N (\tilde{Z}(\omega_v) - Z(\omega_v))^2}{\partial \Delta \mathbf{Z}(\omega_v)} = 0$$

Το άνυσμα των διορθώσεων $\Delta \mathbf{X}$ θα λαμβάνεται ως

$$\Delta \mathbf{X} = \mathbf{J}^{-1} \cdot \Delta \mathbf{Z}$$

Ακολουθώντας, αναθεωρούμε το ίνδαλμα $M(\mathbf{X})$ προς $M(\mathbf{X}_1) \equiv M(\mathbf{X} + \Delta \mathbf{X})$, υπολογίζουμε τα αναθεωρημένα ανύσματα $\Delta \mathbf{Z}_1$ και \mathbf{J}_1 και επιλύουμε το σύστημα

$$\Delta \mathbf{Z}_{\alpha 1} = \mathbf{J}_1 \cdot \Delta \mathbf{X}$$

προκειμένου να βελτιωθούν περαιτέρω οι παράμετροι $x_m \in \mathbf{X}$. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται όσες φορές χρειασθεί, με συνεχείς διορθώσεις και αναπροσαρμογές των παραμέτρων $x_m \in \mathbf{X}$, έως ότου οι διαφορές $\Delta \mathbf{Z}$ γίνουν πολύ μικρές, ή κάποιο προαποφασισμένο όριο ικανοποιηθεί.

Προσοχή οφείλεται στο γεγονός ότι η Ιακωβιανή είναι $2N \times M$ πίνακας και δεν αντιστρέφεται σύμφωνα με τους τυπικούς ορισμούς αντιστροφής πινάκων που ισχύουν για τετραγωνικούς $N \times N$ πίνακες (ορισμένους σε πλήρεις Ευκλείδειες ανυσματικές βάσεις). Έχει σημασία λοιπόν, να δούμε πως υπολογίζεται η \mathbf{J}^{-1} .

Σύμφωνα με το θεμελιώδες θεώρημα Lanczos περί αποσύνθεσης, η \mathbf{J} μπορεί να γραφεί υπό μορφή φασματικού αναπτύγματος ως

$$\mathbf{J} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{V}^+ = \sum_{m=1}^M s_m \mathbf{u}_m \mathbf{v}_m^+$$

όπου \mathbf{U} είναι $2N \times M$ ορθογώνιος και \mathbf{V} είναι $M \times M$ ορθογώνιος με το σύμβολο (+) να δηλώνει τον ανάστροφο. Ο \mathbf{S} είναι $M \times M$ διαγώνιος τέτοιος, ώστε $s_1 \geq s_2 \geq s_3 \geq \dots s_M \geq 0$. \mathbf{u}_m είναι η m -οστή στήλη του \mathbf{U} , \mathbf{v}_m είναι η m -οστή στήλη του \mathbf{V} και s_m το m -οστό στοιχείο του \mathbf{S} . Έκαστο των s_m αποτελεί λύση των προβλημάτων ιδιοτιμών - ιδιοδιανυσμάτων

$$\begin{aligned} \mathbf{J} \mathbf{v} &= \mathbf{s} \mathbf{u} \\ \mathbf{J}^+ \mathbf{u} &= \mathbf{s} \mathbf{v} \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \mathbf{J}^+ \mathbf{J} \mathbf{v} &= s^2 \mathbf{v} \\ \mathbf{J} \mathbf{J}^+ \mathbf{u} &= s^2 \mathbf{u} \end{aligned}$$

δηλαδή είναι η μη-αρνητική τετραγωνική των ιδιοτιμών του $\mathbf{J}^+ \mathbf{J}$ και ονομάζεται *ιδιάζουσα τιμή*¹² του \mathbf{J} . Αυτή είναι η περίφημη *αποσύνθεση ιδιάζουσών τιμών* (singular value decomposition - SVD) κατά Lanczos, η οποία αποτελεί γενίκευση του προβλήματος ιδιοτιμών - ιδιοδιανυσμάτων στην περίπτωση $N \times M$ πινάκων. Εφόσον η SVD της Ιακωβιανής υπάρχει¹³ και λόγω των ιδιοτήτων της, ο *ψευδαντίστροφος* του \mathbf{J} ορίζεται ως

$$\mathbf{J}^{-1} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^+$$

και αποτελεί τον γενικευμένο αντίστροφο πίνακα.

Τα πράγματα θα ήταν αρκετά απλά, αν η πληροφορία που περιέχεται στον \mathbf{J} ήταν πάντοτε πλήρης και τέλεια. Δυστυχώς όμως, και συνηθέστατα, τα πράγματα δεν είναι έτσι και ιδού τα δυνατά προβλήματα.

1. Έστω ότι η m -οστή στήλη της Ιακωβιανής είναι ακριβώς 0. Δηλαδή, η μεταβολή της m -οστης παραμέτρου δεν προκαλεί καμία μεταβολή στον υπολογισμό της θεωρητικής εμπέδησης $Z(\omega_v)$. Αυτό σημαίνει επίσης, ότι οσοδήποτε μεγάλη και αν είναι η μεταβολή του παραμετρικού χώρου, ουδόλως θα γίνει αντιληπτή από τα δεδομένα, πράγμα καθόλου καλό. Στην περίπτωση αυτή θα καλέσουμε την παράμετρο x_m *άσχετη* και ο βαθμός¹⁴ του \mathbf{J} θα είναι $P=M-1$, για δε a άσχετες παραμέτρους, $P=M-a$. Δεδομένου ότι η SVD ορίζεται και υπολογίζεται έτσι, ώστε τα διαγώνια στοιχεία του \mathbf{S} να είναι αυστηρώς κατιόντα και θετικά ($s_1 \geq s_2 \geq s_3 \geq \dots s_M \geq 0$), οι άσχετες ιδιάζουσες τιμές και τα αντίστοιχα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα θα κατατάσσονται τελευταίες και, συνεπώς, μπορούν εύκολα να αναγνωρισθούν και απομονωθούν. Τότε θα είναι

$$\mathbf{J} = \sum_{m=1}^M s_m \mathbf{u}_m \mathbf{v}_m^+ = \sum_{m=1}^P s_m \mathbf{u}_m \mathbf{v}_m^+ \quad \text{και ο ψευδαντίστροφος,} \quad \mathbf{J}^{-1} = \sum_{m=1}^P \frac{1}{s_m} \mathbf{v}_m \mathbf{u}_m^+$$

2. Έστω ότι η m -οστή ιδιάζουσα τιμή είναι πάρα πολύ μικρή. Τότε, προφανώς, η συμβολή της m -οστης παραμέτρου στην διαμόρφωση της $Z(\omega_v)$ είναι επίσης πάρα πολύ μικρή. Συνεπώς, η παράμετρος αυτή δεν συμβάλλει στην λύση του προβλήματος οπότε θα την αποκαλέσουμε *αμελητέα ή ασήμαντη*, αφού ουσιαστικά δεν χρειάζεται. Παρ' ότι ελάχιστα συμμετέχουν στην συγκρότηση του παραμετρικού χώρου, οι ασήμαντες παράμετροι προκαλούν αστάθεια στην επαναληπτική διαδικασία, αφού για πολύ μικρή αλλά όχι μηδενική s_m , η $1/s_m$ μπορεί να γίνει πολύ μεγάλη, καταστρέφοντας την \mathbf{J}^{-1} και αποσταθεροποιώντας την διόρθωση

¹² Παράβαλε με την έννοια των ιδιοτιμών ενός τετραγωνικού πίνακα.

¹³ Προφανώς, ο μόνος λόγος για να μην υπάρχει η SVD ενός $M \times N$ πίνακα είναι $\mathbf{S} = \mathbf{0}$.

¹⁴ Ως βαθμός ενός πίνακα, επισήμως ορίζεται ως η μέγιστη τάξη των διαφόρων του μηδενός ελασσόνων οριζουσών του. Στην περίπτωση συστήματος εξισώσεων, αυτό μεταφράζεται στον αριθμό των γραμμικά ανεξαρτήτων εξισώσεων (δηλ. των πραγματικών μεταβλητών του συστήματος), και τελικά στον πραγματικό αριθμό των Ευκλείδειων διαστάσεων που ορίζει ο πίνακας. Υπάρχουν αρκετοί τρόποι υπολογισμού του βαθμού, και ούτως ή άλλως συμπεριλαμβάνονται στους βασικούς αλγορίθμους SVD.

$\Delta\mathbf{X}=\mathbf{J}^{-1}\cdot\Delta\mathbf{Z}$. Αποτέλεσμα είναι η ανώμαλη διακοπή της ροής του αλγορίθμου και απροσδιοριστία των λύσεων. Ευτυχώς οι ιδιότητες της SVD και πάλι διευκολύνουν την κατάσταση!

Μία τεχνική αντιμετώπισης του προβλήματος είναι η *αποκοπή ιδιαζουσών τιμών*, δηλαδή η απόρριψη ιδιαζουσών τιμών κάτω από κάποιο κατώφλι μ . Γενικά μπορούμε να θέσουμε

$$s_m = \begin{cases} s_m & \forall m=1,\dots,L : s_m \geq \mu \\ 0 & \forall m=L+1,\dots,M : s_m < \mu \end{cases}$$

οπότε η διόρθωση γίνεται

$$\Delta\mathbf{X} = \left(\sum_{m=1}^L \frac{1}{s_m} \mathbf{v}_m \mathbf{u}_m^+ \right) \Delta\mathbf{Z}$$

και είναι σταθερή. Η τεχνική αυτή δεν βρίσκει ακριβώς την $\min(\|\Delta\mathbf{Z} - \mathbf{J}\Delta\mathbf{X}\|)$, αλλά έχει τη σπουδαία ιδιότητα ότι αφού εντοπίσει το σχετικό ελάχιστο, μόνο μεταβολές στις ασήμαντες παραμέτρους μπορούν προκαλέσουν περαιτέρω ελάττωση του σφάλματος (δηλαδή ασήμαντη περαιτέρω βελτίωση). Επίσης, μειονεκτεί στο ότι για διαφορετικά σημεία εκκίνησης, (διαφορετικά αρχικά μοντέλα), οι λύσεις επιτυγχάνονται με περιορισμό του παραμετρικού χώρου, δηλαδή με περιορισμό της ελευθερίας του αλγορίθμου να ερευνά όλες τις πιθανές διευθύνσεις ελαχιστοποίησης του σφάλματος εντός του παραμετρικού χώρου. Για τον λόγο αυτό, οι τελικές ομάδες λύσεων και συνεπώς η ποιότητα των αποτελεσμάτων, εξαρτώνται άμεσα από την καλή επιλογή του αρχικού μοντέλου.

Μία αποτελεσματικότερη και δημοφιλής τεχνική καταστολής των ασήμαντων παραμέτρων είναι η λεγόμενη μέθοδος *Leverberg - Marquardt*, η οποία λύνει το πρόβλημα των «αποσβεσμένων ελαχίστων τετραγώνων», δηλαδή επιχειρεί να ελαχιστοποιήσει την

$$\|\Delta\mathbf{Z} - \mathbf{J} \cdot \Delta\mathbf{X}\|^2 + \lambda^2 \|\Delta\mathbf{X}\|^2.$$

Η παράμετρος λ είναι ο *συντελεστής απόσβεσης Marquardt*, ο οποίος ελέγχει το μέγεθος και διεύθυνση του βήματος διόρθωσης $\Delta\mathbf{X}$. Στην ουσία, η μέθοδος *Leverberg - Marquardt*, ανάγει την αντιστροφή της Ιακωβιανής στην σταθμισμένη αντιστροφή

$$\mathbf{J}^* = \mathbf{V} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^+$$

όπου $\mathbf{\Lambda}$ είναι $M \times M$ διαγώνιος πίνακας με στοιχεία

$$\Lambda_m = \begin{cases} \lambda_m, & m=1,\dots,P \\ 0, & m > P \end{cases}$$

περιέχον τους συντελεστές απόσβεσης λ_m . Τελικά, το επαναληπτικό βήμα διόρθωσης γίνεται

$$\Delta\mathbf{X} = \left(\sum_{m=1}^P \frac{\lambda_m}{s_m} \mathbf{v}_m \mathbf{u}_m^+ \right) \Delta\mathbf{Z}$$

Διαφορετικές επιλογές της μορφής των συντελεστών απόσβεσης γεννούν διαφορετικές παραλλαγές της μεθόδου *Leverberg - Marquardt*, όλες όμως πάνω στο ίδιο θέμα. Μία επιτυχής επιλογή δίδεται από τους *Jupp and Vozoff*¹⁵, της μορφής

$$\lambda_m = \begin{cases} \frac{s_m^2}{s_m^2 + \lambda^2}, & m=1,\dots,P \\ 0, & m > P \end{cases}$$

Σε γενικές γραμμές, δεδομένου ενός μοντέλου $M\{\mathbf{X}\}$, η συνταγή *Marquardt* μαγειρεύεται ως

¹⁵ Jupp, D.L.B. and Vozoff, K., 1975. Stable iterative methods for the inversion of geophysical data, *Geophys. J. R. astr. Soc.*, 42, 957-976.

εξής:

1. Υπολογίζουμε τη σταθμισμένη 2-νόρμα (χ^2) ή κάποιο ανάλογο μέτρο δυσαρμονίας μεταξύ παρατηρημένης και θεωρητικής εμπέδησης.
2. Επιλέγουμε μία μέτρια τιμή της παραμέτρου λ , έστω $\lambda=0.001$.
3. Επιλύουμε το σύστημα $\Delta\mathbf{X} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^+ \cdot \Delta\mathbf{Z}$ και υπολογίζουμε τη $\chi^2(\mathbf{X}+\Delta\mathbf{X})$
4. Εάν $\chi^2(\mathbf{X}+\Delta\mathbf{X}) \geq \chi^2(\mathbf{X})$ αυξάνουμε το μέγεθος της λ κατά ικανό παράγοντα (π.χ. $\times 10$) και επαναλαμβάνουμε το στάδιο 3.
5. Εάν $\chi^2(\mathbf{X}+\Delta\mathbf{X}) < \chi^2(\mathbf{X})$ ελαττώνουμε το μέγεθος της λ κατά ικανό παράγοντα (π.χ. $\div 10$), αναθεωρούμε τη δοκιμαστική λύση $\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} + \Delta\mathbf{X}$ και επαναλαμβάνουμε το στάδιο 3.

Δεκτή γίνεται η σταθερή διόρθωση $\Delta\mathbf{X}$ που ελαττώνει το σφάλμα για τον μικρότερο συντελεστή απόσβεσης λ . Εάν η συνταγή επιτύχει, τότε στον παραμετρικό χώρο έχει βρεθεί ένα πλήρες ελάχιστο, δηλαδή ένα υποσύνολο που πλήρως ικανοποιεί την $\min(\|\Delta\mathbf{Z} - \mathbf{J}\Delta\mathbf{X}\|)$.

Ένα παράδειγμα της διαδικασίας αυτής δίδεται κατωτέρω

Θεωρούμε δομή 3 στρωμάτων, την εξής

	RO (I)	H (I)	DEPTH
1	.1000E+03		.0000E+00
2	.2000E+02	.5000E+03	.5000E+03
3	.2000E+03	.3000E+03	.8000E+03

η οποία παράγει τα δεδομένα (συχνότητα/ περίοδος, ειδική αντίσταση και φάση)

	F (I)	T (I)	AP.RES	PHASE
1	.9120E-02	.1096E+03	.1909E+03	-.4443E+02
2	.7586E+00	.1318E+01	.9529E+02	-.3541E+02
3	.6918E+01	.1445E+00	.5510E+02	-.4407E+02
4	.2089E+02	.4786E-01	.6292E+02	-.5614E+02
5	.6310E+02	.1585E-01	.9280E+02	-.5687E+02
6	.3311E+03	.3020E-02	.9955E+02	-.4623E+02

Τα δεδομένα αυτά αντιστρέφονται με αρχική δομή 3 στρωμάτων, την εξής:

	RO (I)	H (I)	DEPTH
1	.1000E+03		.0000E+00
2	.1000E+03	.1000E+03	.1000E+03
3	.1000E+03	.2000E+03	.3000E+03

Στην αρχή της πρώτης επανάληψης η Ιακωβιανή είναι

Iteration No	1	Initial	Jacobian		
	.63620	.30672	.17982	.10416	.03460
	.00379	.32109	.22641	.15064	.09398
	.03343	.00378	.42818	.46668	.32428
	.20064	.06888	.00759	-.22671	.08845
	.14995	.13145	.06000	.00748	-.06438
	.22660	.49590	.69520	.89652	.98862
	-.09439	-.31485	-.30058	-.22543	-.09342
	-.01126	.00000	.00000	.00000	.00000
	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000

INITIAL ERROR AND DAMPING FACTOR ARE .124E+01 .100E+00

στην οποία, προφανώς, όλα τα δεδομένα δεν είναι ευαίσθητα ως προς όλες τις παραμέτρους. Ο αλγόριθμος προχωρεί σε μία διορθωτική κίνηση που δίνει σταθερό αποτέλεσμα με αριθμό

Κεφάλαιο 4 - Προσομοίωση και Εξομοίωση Δεδομένων.

σχετικών παραμέτρων 3 (προσοχή οι τιμές του X είναι λογαριθμισμένες)

```
Iteration No 1 Jacobian take 1
1.49073      .30672      .17982      .10416      .03460
.00379      .32109      .22641      .15064      .09398
.03343      .00378      1.13012     .94867      .25840
.20761      .14495      .11460     -.44798     -.09662
.01615      .04355      .02718      .00368      .06282
1.78435     1.56011     .43823      .71962      .85046
.46937      -.19492     -.32263     -.28156     -.12819
-.01596      .00000      .00000      .00000      .00000
.00000      .00000      .00000      .00000      .00000
.00000      .00000      .00000      .00000      .00000
.00000      .00000      .00000      .00000      .00000
.00000      .00000      .00000      .00000      .00000
```

THE NUMBER OF RELEVANT VARIABLES IS 3

CURRENT X VALUES

.502E+01 .395E+01 .458E+01 .461E+01 .530E+01

Στην αρχή της δεύτερης επανάληψης τα πράγματα έχουν αλλάξει δραστικά και τα δεδομένα καθίστανται ευαίσθητα ως προς όλες τις παραμέτρους, αν και χρειάζονται δύο διορθωτικές παρεμβάσεις πριν υπάρξει σταθερή διόρθωση:

```
Iteration No 2 Jacobian take 2
.99632      .20920      .13015      .07795      .02643
.00291      .27376      .14893      .10078      .06560
.02473      .00289      1.40021     1.21014     .31961
.23230      .12349      .07036     -.60263     -.11300
.04451      .08078      .04800      .00646      .04871
1.35656     1.35199     .39809      .59806      .69030
.36819      -.17891     -.24977     -.20761     -.09146
-.01126      .41693     -.46744     1.79771     -.24233
.07439      .11674     -.16776      .01018     -.04459
-.06315     -.03778     -.00517     -.05781     -.21415
.37276      .12223      .01250      .00338      .00533
.00816      .00355     -.00029     -.00141     -.00024
```

THE NUMBER OF RELEVANT VARIABLES IS 5

CURRENT X VALUES

.509E+01 .394E+01 .466E+01 .489E+01 .551E+01

Στην 10η επανάληψη ο αλγόριθμος έχει συγκλίνει

```
Iteration No 10 Initial Jacobian
1.11215     .73157      .44387      .38042      .22090
.02976     -.01434      .44959      .23910      .13044
.12432      .02705     -.00885     -.08594      .22262
.68073      .56946      .07892      .00959     -.18077
-.46458     -.29296      .21369      .07025      .00002
-.01558     -.04507      .05768      .51006      .93593
-.00021      .00616     -.07154     -.21680     -.28865
-.05871     -.20344      .60787      .83739      .32189
-.07515     -.01538      .00721     -.61415      .17032
.43369      .08044     -.01179     -.00322      .13202
-.08021     -.55955     -.52569     -.07385      .00271
.06420      .42374      .32495     -.17919     -.06539
```

CONVERGENCE ON PREDICTED DECREASE

THE NUMBER OF RELEVANT VARIABLES IS 5

CURRENT X VALUES

.461E+01 .312E+01 .530E+01 .619E+01 .589E+01

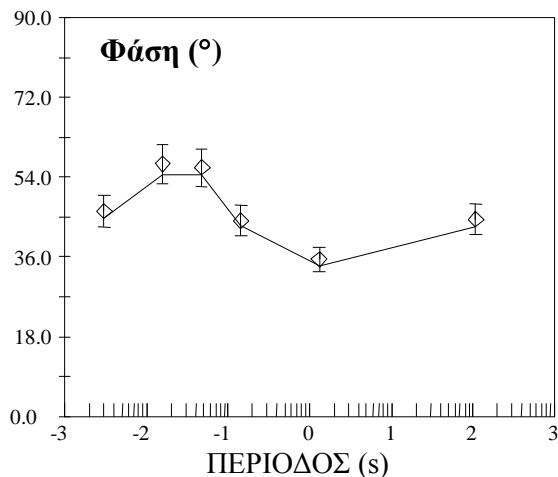
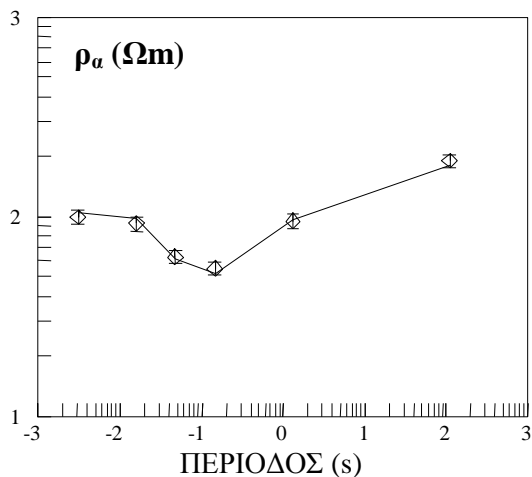
Και βρίσκει την τελική λύση

FINAL MODEL AFTER INVERSION

	RO (I)	H (I)	DEPTH
1	.1010E+03		.0000E+00

2	.2254E+02	.4879E+03	.4879E+03
3	.2002E+03	.3618E+03	.8497E+03

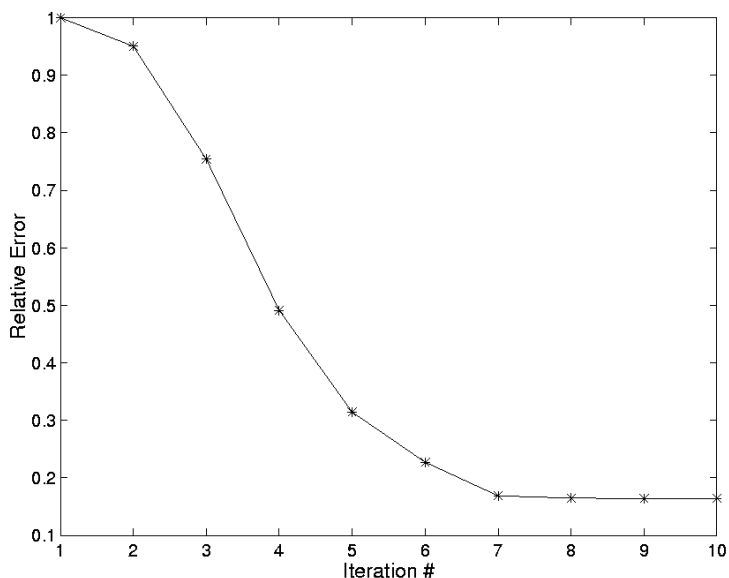
που παράγει τις κατωτέρω εικονιζόμενες ειδική αντίσταση και φάση (συνεχής γραμμή).



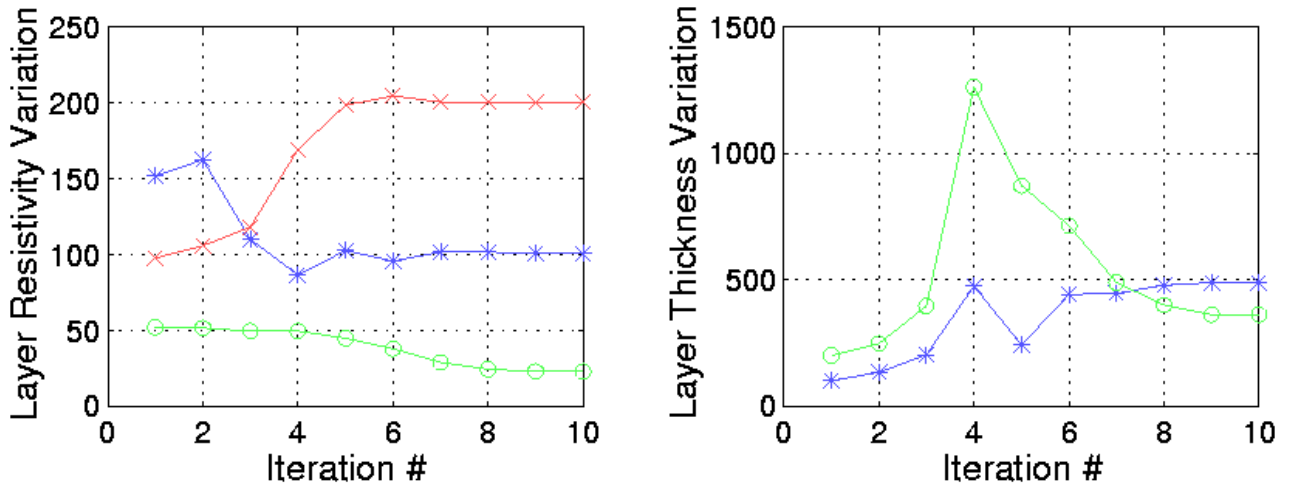
και δυσαρμονία

```
CHI**2 MISFIT :
CALCULATED : 3.0550770
EXPECTED : 12
```

Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η βελτίωση της δυσαρμονίας (απόκλισης) μεταξύ της παρατηρημένης και υπολογιζόμενης εμπέδησης,



και στο επόμενο σχήμα οι διορθώσεις του παραμετρικού χώρου από το αρχικό (επανάληψη 1) μέχρι το τελικό ίνδαγμα (επανάληψη 10). Τα στοιχεία του πρώτου στρώματος δίδονται με αστερίσκους, του δεύτερου με κύκλους και του τρίτου με σταυρούς αντίστοιχα.

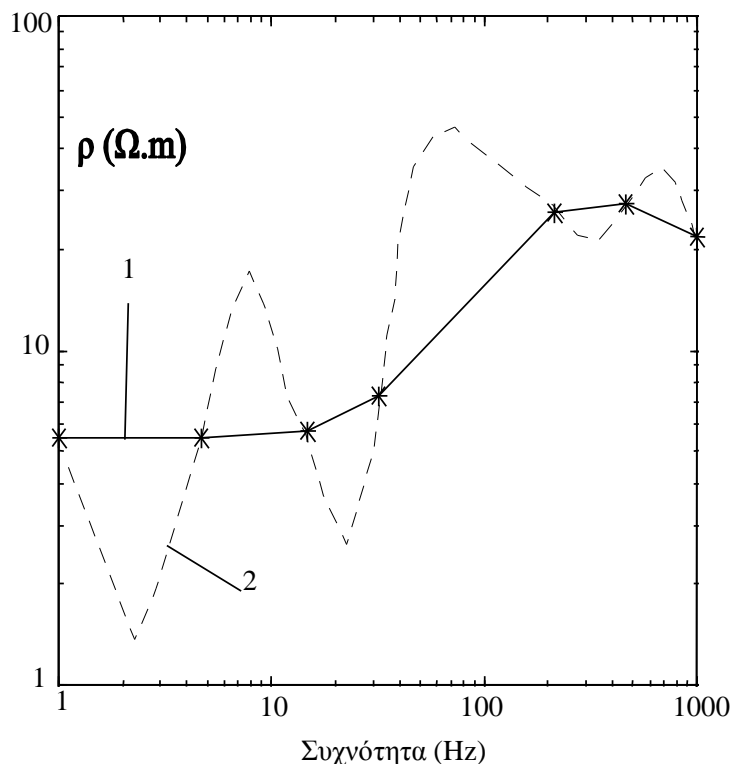


Είναι σαφές ότι από την 7η επανάληψη και μετά ο αλγόριθμος έχει ουσιαστικά καταλήξει, μεταξύ δε της 9ης και 10ης επανάληψης δεν υπάρχει καμία διαφορά και η εκτέλεση διακόπτεται. Η ειδική αντίσταση και το πάχος του πρώτου στρώματος, και η ειδική αντίσταση του τρίτου (ημιχώρος) απολαμβάνονται πολύ ικανοποιητικά, αλλά η ειδική αντίσταση και πάχος του δευτέρου απολαμβάνονται με μικρές αποκλίσεις, υπερεκτιμημένες κατά 12% και 20% αντιστοίχως. Αυτό εν πολλοίς οφείλεται στο ότι η αντιστροφή έγινε επί τη βάσει 6 μόνο εκτιμητριών της εμπέδησης, οι οποίες δεν παρέσχον επαρκείς περιορισμούς.

Από τα ανωτέρω οφείλει να διαφαίνεται ότι ο αλγόριθμος δεν κατασκευάζει παρά την πιθανοφανέστερη αντιπρόσωπο της πραγματικής συνάρτησης $\sigma(z)$, αλλά χωρίς να έχει τρόπο να αναγνωρίσει την πολυπλοκότητα της δομής (δηλ. τον σωστό αριθμό στρωμάτων). Το μόνο που μπορεί να κάνει, είναι να προσαρμόσει ένα *a priori* δεδομένο αριθμό στρωμάτων στην παρατηρηθείσα απόκριση, βρίσκοντας μία τάξη καλών λύσεων, αλλά και πάλι δεν έχει τρόπο να βεβαιώσει ότι οι λύσεις αυτές είναι οι άριστες δυνατές και ότι δεν υπάρχουν καλύτερες. Ο ανθρώπινος παράγων, δηλ. ο Γεωφυσικός - Ερμηνευτής καθορίζει τόσο το αρχικό μοντέλο, (η σωστή επιλογή του οποίου είναι όπως είδαμε σημαντική), όσο και την τελική αποδεκτή και προκρινόμενη λύση και, φυσικά, δεν αντικαθίσταται από τους αλγορίθμους αντιστροφής.

Σε γενικές γραμμές, ο Ερμηνευτής ξεκινά "προϊδεασμένος" με συγκεκριμένες απόψεις για τις αναμενόμενες ιδιότητες του στόχου, την αναμενόμενη μορφή γεωηλεκτρικής δομής, και τα όρια εντός των οποίων θα πρέπει αυτή να κυμαίνεται. Επίσης, οφείλει να γνωρίζει τις φυσικές δυνατότητες και περιορισμούς της, και την ικανότητα της να διακρίνει τις λεπτομέρειες αυτής της δομής. Έτσι, είναι σε θέση να απορρίψει ορισμένες μαθηματικώς αποδεκτές λύσεις υπέρ άλλων γεωφυσικώς αποδεκτών. Για παράδειγμα, είναι μάλλον απίθανη μία λύση που προβλέπει πάρα πολλά στρώματα και έντονες διακυμάνσεις αγωγιμότητας, όταν διασκοπούμε βαθιά γεωηλεκτρική δομή. Ωσαύτως, μία λύση που παρουσιάζει ακραίες μεταβολές αγωγιμότητας, (π.χ. πολλές τάξεις μεγέθους), πιθανόν να είναι μαθηματικώς αποδεκτή, συνήθως όμως είναι απορριπτέα ως ασύμβατη με την γήινη πραγματικότητα. Η σημαντικότερη ίσως ιδιότητα μίας αποδεκτής λύσης είναι η απλότητά της, ή αν θέλετε, η έλλειψη άχρηστης πολυπλοκότητας. Έχουμε ήδη αναφέρει ότι υπάρχουν άπειρες συναρτήσεις ικανές να ερμηνεύσουν την δεδομένη παρατήρηση. Ας υποθέσουμε τώρα ότι μεταξύ αυτών υπάρχει μία κατηγορία (ή κατηγορίες) γεωφυσικώς αποδεκτών λύσεων, συμφώνως προς τα προαναφερθέντα κριτήρια. Προκύπτει λοιπόν το ερώτημα: Ποιές από αυτές είναι ορθότερες και ποιές όχι; Τελικώς, ποιές προκρίνονται ως πιθανοφανέστερες αντιπρόσωποι της γεωηλεκτρικής δομής; Στο ερώτημα αυτό δεν υπάρχει μαθηματική απάντηση αλλά μάλλον φιλοσοφική, υπό την μορφή του εμπειρικού/κριτικού αξιώματος που είναι γνωστό σαν "ξυράφι του Occam" (Occam's razor), ε-

φαρμόζεται σε κάθε είδους πρόβλημα και διατυπώνεται περίπου ως εξής: "Από έναν αριθμό εναλλακτικών προτάσεων, η απλούστερη είναι συνήθως η φυσικότερη και αληθέστερη" ή αλλιώς, "μην κάνεις με πολλά ό τι γίνεται με λίγα". Από ότι φαίνεται, (και θα αποφύγουμε να αναλύσουμε γιατί), η φύση προτιμά τις απλούστερες δυνατές καταστάσεις και επιδέχεται τις απλούστερες δυνατές ερμηνείες. Αυτό ισχύει και για το αντίστροφο πρόβλημα, για το οποίο η καλύτερη δυνατή πρακτική είναι η υιοθέτηση του απλούστερου ινδάλματος $\sigma(z)$, τουλάχιστον για αρχή. Οι πολύπλοκες ερμηνείες απαιτούν οργιώδη φαντασία και συνήθως προϋποθέτουν αφύσικη γεωλογία. Στην εικόνα 2 δίδεται ένα ακραίο αλλά παραστατικό παράδειγμα. Υποθέτομε ότι η παρατηρούμενη φαινόμενη αντίσταση (συμβολιζόμενη με αστερίσκους) αντιστρέφεται με δύο διαφορετικούς αλγορίθμους του αυτού βαθμού αξιοπιστίας, ο πρώτος εκ των οποίων επιστρέφει την λύση (1) και ο δεύτερος την λύση (2). Επιπλέον υποθέτομε ότι, με βάση τα όσα είναι εκ των προτέρων γνωστά περί του στόχου, τόσο η ηλεκτρική στατικότητα της λύσης (1), όσο και η κινητικότητα της λύσης (2) είναι γεωφυσικώς αποδεκτές καταστάσεις. Τίθεται τότε το ερώτημα: Έστω και αν σκοπός μας είναι η ανακάλυψη ζωνών υψηλής (ή χαμηλής) αγωγιμότητας, θα αποτολμούσαμε να βασίσουμε την ερμηνεία μας στην λύση (2); Αν μη τι άλλο, η ύπαρξη της απλής λύσης (1) αποδεικνύει ότι η χαρακτηριστική αλλεπάλληλη διαδοχή ζωνών υψηλής και χαμηλής αντίστασης της λύσης (2), ούτε απαραίτητη για να εξηγήσει την παρατήρηση είναι, ούτε επιπλέον πληροφορία προσφέρει. Οπωσδήποτε, οι περισσότεροι ερμηνευτές θα είχαν σοβαρούς ενδοιασμούς να βασίσουν την ερμηνεία τους αποκλειστικώς στην λύση (2).



Εικόνα 4.2. Για μία μαθηματικώς και φυσικώς αποδεκτή λύση η (καμπύλη 2), πιθανόν να υπάρχει μία απλούστερη, φυσικώς και μαθηματικώς αποδεκτή (καμπύλη 1). Για πολλούς, η απλούστερη η λύση φαίνεται και η πιθανότερη. Δεν υπάρχει λογική βάση για να προκρίνομε (άνευ άλλων δεδομένων) την καμπύλη 2 όταν γνωρίζομε ότι υπάρχει η 1, διότι τα δεδομένα μας δεν παρέχουν καμία πληροφορία για την ύπαρξη της (2);