

# SVD i obcięte SVD

Grzegorz Mika

5 listopada 2017

## 1 Wstęp

Niech  $H, G$  będą przestrzeniami Hilberta,  $A: H \rightarrow G$  niech będzie liniowym i ograniczonym operatorem między tymi przestrzeniami. Naszym zadaniem jest, mając dany  $g \in G$ , znaleźć taki  $f \in H$ , że

$$Af = g.$$

Problem nazwiemy dobrze postawionym (well- posed) wg Hadamarda, gdy:

- dla dowolnego  $g \in G$  istnieje  $f \in H$  spełniający zadane równanie,
- rozwiązanie jest jedyne,
- rozwiązanie jest stabilne, czyli zależy w sposób ciągły od prawej strony równania.

Jeżeli choć jeden z warunków nie jest spełniony problem nazywamy źle postawionym (ill- posed). W przypadku braku stabilności, operator odwrotny  $A^{-1}$  jest nieograniczony, co może prowadzić do eksplozji rozwiązania nawet w przypadku niewielkiego zaburzenia wartości  $g$ , czyli rozpatrując lekko zaburzoną wersję  $g$  oznaczoną jako  $g_\epsilon$ , dostajemy, że  $f_\epsilon = A^{-1}g_\epsilon$  może być bardzo odległe od prawdziwej wartości  $f$ .

W przypadku stochastycznych problemów odwrotnych możemy rozpatrzyć następujący problem

$$Y = Af + \epsilon\xi,$$

gdzie  $\epsilon$  jest pewną liczbą determinującą poziom szumu, natomiast  $\xi$  jest losowym zaburzeniem mierzonej wartości. Podsumowując, przy rozwiązywaniu stochastycznych problemów odwrotnych spotykamy następujące problemy:

- jak poradzić sobie z losowym szumem w obserwacji?
- w jaki sposób "delikatnie" odwrócić operator  $A$ ?
- jak wydajnie zaimplementować numeryczne rozwiązanie?

## 2 Teoria operatorów

Rozważmy liniowy operator ograniczony  $A$  między dwoma przestrzeniami Hilberta  $H, G$ . Załóżymy, że  $D(A) = \{f \in H : \exists_{g \in G} Af = g\} = H$ .

Operatorem sprzężonym do operatora  $A$  nazywamy operator  $A^*$  taki, że  $\forall_{f \in H} \forall_{g \in G} \langle Af, g \rangle = \langle f, A^*g \rangle$ .

Operator  $A$  nazwiemy samosprzężonym, jeżeli  $A = A^*$ .

Operator  $A: H \rightarrow H$  jest nieujemny, gdy  $\forall_{f \in H} \langle Af, f \rangle \geq 0$  (odpowiednio dodatni).

**Twierdzenie 1.** *Niech  $A \in L(H, G)$ . Wtedy*

- $\text{Ker} A = (\text{Range} A^*)^\perp$  oraz  $\overline{\text{Range} A} = (\text{Ker} A^*)^\perp$ ,
- jeśli  $A$  jest iniektywny, to  $A^*A$  też,
- $A^*A \in L(H)$  oraz  $A^*A$  jest dodatni i samosprzężony.

*Dowód.* Zauważmy, że  $\text{Range} A^\perp = \{g \in G : \langle Ag, g \rangle = 0 \ \forall f \in H\}$ .

Wtedy dla dowolnych  $f \in \text{Ker} A$  i  $g \in G$  mamy, że  $0 = \langle Af, g \rangle = \langle f, A^*g \rangle$  a stąd  $\text{Ker} A = (\text{Range} A^*)^\perp$ . Zamieniając  $A$  z  $A^*$  otrzymujemy, że  $(\text{Ker} A^*)^\perp = \text{Range} A^\perp$ , czyli  $(\text{Ker} A^*)^\perp = (\text{Range} A^\perp)^\perp = \overline{\text{Range} A}$ , jako że rozpatrujemy przestrzeń Hilberta.

Korzystając z równości  $\langle A^*Af, f \rangle = \langle Af, Af \rangle = \|Af\|^2$ , widzimy, że  $\text{Ker} A = \text{Ker} A^*A$ .

Analogicznie otrzymujemy, że  $\langle A^*Af, f \rangle = \langle Af, Af \rangle = \langle f, A^*Af \rangle$  oraz  $\langle A^*Af, f \rangle = \|Af\|^2 \geq 0$ , zatem operator  $A^*A$  jest samosprzężony i dodatni.  $\square$

**Wniosek 1.** •  $H = \text{Ker} A \oplus \text{Ker} A^\perp = \text{Ker} A \oplus \overline{\text{Range} A^*}$ ,

- $G = \overline{\text{Range} A} \oplus \text{Range} A^\perp = \overline{\text{Range} A} \oplus \text{Ker} A^*$ .

### 3 Operatory zwarte

**Definicja 1.** Operator  $A: H \rightarrow G$  nazywamy *zwartym (compact)*, jeżeli dla każdego ograniczonego zbioru w  $H$ , jego obraz przez operator  $A$  jest względnie zwarty w  $G$ , czyli jego domknięcie jest zwarte w  $G$ . Przez  $K(H, G)$  będziemy oznaczać zbiór operatorów zwartych między przestrzeniami  $H$  i  $G$ .

**Uwaga 1.** Jeżeli  $A \in K(H, G)$  oraz  $\dim H = \infty$  to operator  $A^{-1}$  jest nieograniczony.

**Twierdzenie 2** (Reprezentacja spektralna). Niech  $A$  będzie samosprężonym operatorem zwartym na przestrzeni Hilberta  $H$ . Wtedy istnieje zupełny układ funkcji własnych  $E = \{f_j, j \in I\} \subset H$ . Niech  $J = \{j \in I: \lambda_j \neq 0\}$  oznacza zbiór tych indeksów dla których odpowiednie wartości własne są niezerowe, wtedy zbiór  $J$  jest przeliczalny oraz

$$\forall_{f \in H} Af = \sum_{j \in J} \lambda_j \langle f, f_j \rangle f_j.$$

Ponadto dla każdego  $\delta > 0$  zbiór  $J_\delta = \{j \in I: |\lambda_j| \geq \delta\}$  jest skończony a jedynym możliwym punktem skupienia zbioru wartości własnych jest zero.

*Dowód.* Bez dowodu. □

Powyższe twierdzenie można stosować tylko do przypadku operatorów samosprężonych i zwartych. O ile w dalszym ciągu będziemy zakładać zwartość operatora  $A$ , o tyle warunek samosprężenia zostanie usunięty dzięki zamienieniu reprezentacji spektralnej na reprezentację singularną.

**Twierdzenie 3.** Niech  $A: H \rightarrow G$  będzie operatorem zwartym na przestrzeniach Hilberta  $H, G$ . Wtedy istnieją skończony lub zbieżny do zera ciąg liczb dodatnich  $\{b_n\}_{n \in I}$  oraz układy ortonormalne  $\{v_n\}_{n \in I} \subset H$ ,  $\{u_n\}_{n \in I} \subset G$  takie, że

- $\text{Ker} A^\perp = \overline{\text{span}\{v_n, n \in I\}},$
- $\text{Range} A = \overline{\text{span}\{u_n, n \in I\}},$
- $Af = \sum_n b_n \langle f, v_n \rangle u_n$  oraz  $A^*g = \sum_n b_n \langle g, u_n \rangle v_n.$

Ponadto  $g \in \text{Range} A$  wtedy i tylko wtedy, gdy spełniony jest tzw. warunek Picarda

$$\sum_n b_n^{-2} |\langle g, u_n \rangle|^2 < \infty \text{ oraz } g = \sum_n \langle g, u_n \rangle u_n$$

Wtedy rozwiązania równania  $Af = g$  mają postać

$$f = f_0 + \sum_n b_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n$$

przy czym  $f_0 \in \text{Ker} A$  jest dowolne.

Układ  $(u_n, v_n, b_n)$  nazywamy układem singlarnym operatora  $A$  a jego reprezentację w postaci  $Af = \sum_n \lambda_n \langle f, v_n \rangle u_n$  nazywamy dekompozycją według wartości osobliwych (singular value decomposition– SVD) operatora  $A$ .

*Dowód.* Dowód twierdzenia opiera się na wykorzystaniu twierdzenia spektralnego do operatora  $A^*A$ .

Operator  $A^*A$  jest samosprężony, zwarty i dodatni, a zatem istnieją liczby  $b_1^2 \geq b_2^2 \geq \dots \geq 0$  oraz funkcje ortonormalne  $v_n$  takie, że  $A^*Av_n = b_n^2 v_n$ . Niech  $I = \{n: b_n > 0\}$  oraz przez  $u_n$  oznaczmy znormalizowane obrazy wektorów  $v_n$ , czyli  $u_n = b_n^{-1}Av_n$  dla  $n \in I$ . Zauważmy, że  $\langle u_k, u_l \rangle = b_k^{-1}b_l^{-1}\langle Av_k, Av_l \rangle = b_k^{-1}b_l^{-1}\langle v_k, A^*Av_l \rangle = b_k^{-1}b_l^{-1}\langle v_k, b_l^2 v_l \rangle = \delta_{kl}$ .

Korzystając w wykazanego wcześniej twierdzenia dostajemy, że  $\text{Ker} A^\perp = (\text{Ker} A^*A)^\perp = \overline{\text{Range} A^*A} = \overline{\text{span}\{u_n, n \in I\}}$ .

Analogicznie rozpatrując operator  $AA^*$  z rozkładem spektralnym  $AA^*u_n = b_n^2 u_n$  dostajemy, że  $\overline{\text{Range} A} = \overline{\text{span}\{u_n, n \in I\}}$ .

Tożsamości  $Af = \sum_n b_n \langle f, v_n \rangle u_n$  oraz  $A^*g = \sum_n b_n \langle g, u_n \rangle v_n$  otrzymujemy, zauważając, że  $Af = \sum_n \langle Af, u_n \rangle u_n = \sum_n \langle Af, b_n^{-1}Av_n \rangle u_n = \sum_n \langle f, b_n^{-1}A^*Av_n \rangle u_n = \sum_n \langle f, b_n^{-1}b_n^2 v_n \rangle u_n = \sum_n b_n \langle f, v_n \rangle u_n$  oraz drugą analogicznie.

Z nierówności Bessela dostajemy, że  $\sum_n |\langle f, v_n \rangle|^2 < \infty$ , bo  $f \in H$  a stąd  $\sum_n |\langle f, v_n \rangle|^2 = \sum_n b_n^{-4} |\langle f, b_n^2 v_n \rangle|^2 = \sum_n b_n^{-4} |\langle f, A^*Av_n \rangle|^2 = \sum_n b_n^{-4} |\langle Af, Av_n \rangle|^2 = \sum_n b_n^{-2} |\langle g, b_n^{-1}Av_n \rangle|^2 = \sum_n b_n^{-2} |\langle g, u_n \rangle|^2 < \infty$ . W drugą stronę wnioskujemy, że jeśli spełniony jest warunek Picarda to możemy wypisać jawny wzór na rozwiązanie, gdyż odpowiedni szereg norm współczynników jest zbieżny i  $g$  jest sumą swojego szeregu Fouriera..

Ostatecznie możemy wnioskować, że  $f = f_0 + \sum_n b_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n$ , gdzie  $f_0 \in \text{Ker} A$ .  $\square$

Udało nam się zaprezentować działanie zwartego operatora w postaci jego rozwinięcia według wartości osobliwych w postaci  $Af = \sum_n b_n \langle f, v_n \rangle u_n$  oraz

uzyskać postać szukanych rozwiązań w postaci  $f = f_0 + \sum_n b_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n$ . Jednak takie rozwiązanie sytuacji stawia przed nami nowe problemy. Po pierwsze zauważmy, że jeżeli tylko  $g$  posiada niezerowe składowe w przestrzeni ortogonalnej do domknięcia obrazu operatora  $A$  równanie  $Af = g$  nie może być spełnione dokładnie. Niech  $P: G \rightarrow \overline{\text{Range } A}$  będzie rzutem ortogonalnym, czyli  $\forall_{g \in G} Pg = \sum_n \langle g, u_n \rangle u_n$ . Wtedy dla dowolnego elementu  $f \in H$  mamy, że  $\|Af - g\|^2 = \|Af - Pg\|^2 + \|(1 - P)g\|^2 \geq \|(1 - P)g\|^2$ .

Drugi problem związany jest ze zbieżnością szeregu w warunku Picarda. Z twierdzenia o reprezentacji spektralnej operatora zwartego samosprzężonego wiemy, że liczby  $b_n \rightarrow 0$  gdy  $n \rightarrow \infty$  a zatem liczby  $b_n^{-2} \rightarrow \infty$  gdy  $n \rightarrow \infty$  a nie mamy żadnej gwarancji, że liczby  $\langle g, u_n \rangle$  zbiegają do zera odpowiednio szybko by zrównoważyć ten przyrost szczególnie w przypadku zaburzonej wartości  $y$ .

## 4 Przykłady

**Przykład 1.** *Należy zauważyć i nie mylić wartości własnych operatora zwartego, które mogą nie istnieć, z jego wartościami osobliwymi. Rozważmy następujący przykład. Niech  $H = G$  i niech  $\{e_n\}$  będzie zupełnym układem ortonormalnym w tej przestrzeni oraz rozważmy operator zadany następująco  $Af = \sum_k \frac{1}{k} \langle f, e_k \rangle e_{k+1}$ . Pokażemy teraz, że operator ten nie ma wartości własnych. Gdyby miał musiałoby być spełnione dla pewnych  $\lambda, f$  równanie  $Af = \lambda f$ . Korzystając z zupełności układu  $\{e_n\}$  możemy prawą stronę równania zapisać jako  $\lambda \sum_{k=1}^{\infty} \langle f, e_k \rangle e_k$  i porównując odpowiednie współczynniki dostajemy, że  $\forall_k \frac{1}{k} \langle f, e_k \rangle = \lambda \langle f, e_{k+1} \rangle$ . Jeżeli  $\lambda = 0$  to  $f = 0$ , jeżeli natomiast  $\lambda \neq 0$ , to dostajemy, że  $\forall_k \langle f, e_{k+1} \rangle = \frac{1}{k! \lambda^k} \langle f, e_1 \rangle$  i pozostaje zagadnienie znalezienia wartości  $\langle f, e_1 \rangle$ . Licząc iloczyn skalarny  $\langle Af, e_1 \rangle = 0 = \langle \lambda f, e_1 \rangle$ , czyli  $\langle f, e_1 \rangle$  musi być zerem, czyli  $f = 0$ , czyli operator  $A$  nie może mieć wartości własnych. Widać jednak od razu, że układ  $(\frac{1}{k}, e_k, e_{k+1})$  tworzy jego układ singularny.*

## 5 Stochastyczny problem odwrotny

Powróćmy do sformułowania problemu z zaburzonymi pomiarami wyrażonymi w języku stochastyki, czyli niech  $A: H \rightarrow G$  będzie zwartym operatorem między dwoma przestrzeniami Hilberta. Obserwując pewną zaburzoną

informację  $Y$  naszym zadaniem jest poznać  $f \in H$  według modelu

$$Y = Af + \epsilon \xi$$

gdzie  $\epsilon$  oznacza wielkość szumu.

Podamy teraz założenia jakie będzie musiał spełniać losowy szum.

**Definicja 2.** Stochastycznym błędem  $\xi$  nazwiemy Hilbert–space process, czyli ograniczony liniowy operator  $\xi: G \rightarrow L^2(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$  taki, że dla dowolnych elementów  $g_1, g_2 \in G$  mamy zdefiniowane zmienne losowe  $\langle \xi, g_i \rangle$  takie, że  $\mathbb{E}\langle \xi, g_i \rangle = 0$  oraz możemy zdefiniować kowariancję  $\text{Cov}_\xi$  jako ograniczony liniowy operator ( $\|\text{Cov}_\xi\| \leq 1$ ) z przestrzeni  $G$  w przestrzeń  $G$  taki, że  $\langle \text{Cov}_\xi g_1, g_2 \rangle = \text{Cov}(\langle \xi, g_1 \rangle, \langle \xi, g_2 \rangle)$ .

Często wykorzystywanym modelem będącym idealizacją pewnych innych modeli jest model białego szumu.

**Definicja 3.** Powiemy, że losowy błąd  $\xi$  jest białym szumem, jeśli  $\text{Cov}_\xi = I$  oraz indukowane zmienne losowe są gaussowskie, czyli dla dowolnych elementów  $g_1, g_2 \in G$  mamy, że  $\langle \xi, g_i \rangle \sim \mathcal{N}(0, \|g_i\|^2)$  oraz  $\text{Cov}(\langle \xi, g_1 \rangle, \langle \xi, g_2 \rangle) = \langle g_1, g_2 \rangle$ .

**Lemat 1.** Niech  $\xi$  będzie białym szumem w przestrzeni  $G$  oraz niech  $\{u_n\}$  będzie ortonormalną bazą tej przestrzeni. Oznaczając  $\xi_k = \langle \xi, u_k \rangle$  dostajemy, że  $\{\xi_n\}$  niezależnymi zmiennymi losowymi o tym samym standardowym rozkładzie gaussowskim.

*Dowód.* Z definicji  $\xi_k = \langle \xi, u_k \rangle \sim \mathcal{N}(0, \|u_k\|^2) = \mathcal{N}(0, 1)$  oraz  $\text{Cov}(\langle \xi, u_n \rangle, \langle \xi, u_k \rangle) = \langle u_n, u_k \rangle = \delta_{nk}$ .  $\square$

Zauważmy, że gdy  $\xi$  jest białym szumem,  $Y$  nie jest elementem przestrzeni  $G$  a staje się operatorem działającym na przestrzeni  $G$  w następujący sposób

$$\forall_{g \in G} \langle Y, g \rangle = \langle Af, u_n \rangle + \epsilon \langle \xi, g \rangle$$

gdzie  $\langle \xi, g \rangle \sim \mathcal{N}(0, \|g\|^2)$ .

Rozważmy teraz układ singularny  $(u_n, v_n, b_n)$  operatora zwartego  $A$  oraz niech  $\xi$  będzie białym szumem. Możemy wtedy zapisać rozpatrując projekcję  $Y$  na układ  $\{u_n\}$ , że

$$\langle Y, u_n \rangle = \langle Af, u_n \rangle + \epsilon \langle \xi, u_n \rangle = \langle Af, b_n^{-1} A v_n \rangle + \epsilon \xi_n = b_n^{-1} \langle A^* A f, v_n \rangle + \epsilon \xi_n =$$

$$b_n^{-1} \left\langle \sum_k b_k^2 \langle f, v_k \rangle v_k, v_n \right\rangle + \epsilon \xi_n = b_n \theta_n + \epsilon \xi_n$$

gdzie  $\theta_n = \langle f, v_n \rangle$  są współczynnikami w rozwinięciu Fouriera funkcji  $f$  w bazie  $\{v_n\}$ .

Oznaczając przez  $y_n = \langle Y, u_n \rangle$  możemy wyjściowy problem  $Y = Af + \epsilon \xi$  zapisać w równoważnej postaci sequence space model jako

$$y_n = b_n \theta_n + \epsilon \xi_n, \quad n = 1, 2, \dots$$

W tej postaci widać dokładnie trudności związane ze stochastycznymi problemami odwrotnymi. Jako że  $b_n$  są wartościami osobliwymi operatora zwartego mamy, że  $b_n \rightarrow 0$  gdy  $n \rightarrow \infty$ , czyli widać, że wraz ze wzrostem  $n$  sygnał  $b_n \theta_n$  staje się coraz słabszy i coraz trudniej estymować  $\theta_n$ . Dodatkową trudnością jest fakt, że naszym celem jest estymacja współczynników  $\theta_n$  a nie współczynników  $b_n \theta_n$ , dlatego możemy zapisać równoważną postać problemu

$$x_n = \theta_n + \epsilon \sigma_n \xi_n, \quad n = 1, 2, \dots$$

gdzie  $x_n = y_n/b_n$  oraz  $\sigma_n = b_n^{-1}$ , czyli  $\sigma_n \rightarrow \infty$  gdy  $n \rightarrow \infty$ . Widzimy zatem, że wraz ze wzrostem  $n$  szum zaczyna dominować nad sygnałem czyniąc estymację  $\theta_n$  trudną.

Zależnie od szybkości ucieczki wartości  $b_n$  do nieskończoności można podzielić problemy odwrotne na pewne kategorie

- direct, gdy  $\sigma_n \asymp 1$ ,
- mildly ill-posed, gdy  $\sigma_n \asymp n^\beta$ ,
- severely ill-posed, gdy  $\sigma_n \asymp \exp(\beta n)$ .

Poszczególne kategorie problemów charakteryzują się coraz większą trudnością z uwagi na tempo "gubienia" sygnału pośród szumu.

## 6 Przykłady 2

**Przykład 2.** *Rozważmy problem estymacji  $l$ -tej pochodnej funkcji.*

*Niech  $H = G = \mathcal{L}^2([0, 1])$ ,  $f \in C^k([0, 1])$  będzie 1-periodyczną funkcją i zdefiniujmy model  $Y = f + \epsilon \xi$ , gdzie  $\xi$  jest białym szumem a naszym celem jest estymacja  $f^{(l)} = D^l f$ . Używając bazy trygonometrycznej  $\{\phi_k = e^{2\pi i k x}\}$*

możemy zapisać współczynniki funkcji  $f$  w tej bazie jako  $\theta$ . Jest znane, że wtedy  $f^{(l)} = \sum_{-\infty}^{\infty} (2\pi i k)^l \theta_k \phi_k$ . Problem ten jest równoważny następującemu modelowi:

Obserwujemy  $y_k = \theta_k + \epsilon \xi_k$  i próbujemy estymować współczynniki  $\nu_k (2\pi i k)^l \theta$  co jest równoważne modelowi  $y_k = (2\pi i k)^{-l} \nu_k + \epsilon \xi_k$  i próbie estymacji współczynników  $\theta_k$ . Widać zatem, że problem ten jest mildly ill-posed.

**Przykład 3.** Rozważmy problem dekonwolucji. Niech  $H = G = \mathbb{L}^2(\mathbb{R})$  oraz niech operator  $A: H \rightarrow H$  będzie zdefiniowany następująco

$$(Af)(x) = \phi * f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x-y)f(y)dy.$$

Rozwiązanie tego problemu możemy znaleźć stosując transformatę Fouriera. Przypomnijmy, że dla całkowalnej funkcji  $f$  jej transformata Fouriera wyraża się wzorem  $\hat{f}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-ixt)dx$ . Stosując ją do naszego operatora otrzymujemy, że  $\mathcal{F}(Af)(t) = \hat{\phi}(t)\hat{f}(t)$  a stąd rozwiązaniem jest funkcja  $f(x) = \mathcal{F}^{-1}(\hat{\phi}^{-1}g)(x)$  jednak mamy problem ze zbieżnością tego rozwiązania! Jako, że transformata Fouriera jądra gaussowskiego wyraża się wzorem  $\hat{\phi}(t) = e^{-t^2/2}$  jej odwrotność rośnie w tempie wykładniczym.

## 7 Obcięte SVD

Na początek rozważmy problem estymacji w nieparametrycznym modelu regresji

$$y_n = f(x_n) + \sigma \epsilon_n.$$

Naszym celem jest znalezienie funkcji  $f$ . W tym celu możemy posłużyć się metodą rzutowania na pewną bazę, na przykład trygonometryczną lub falkową. Funkcję  $f$  możemy wtedy zapisać w postaci szeregu  $f = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n$  i wtedy zadanie estymacji sprowadzi się do znalezienia współczynników rozwinięcia  $a_n$ . W przypadku obserwowania skończonej liczby pomiarów ciężko oczekiwać by udało się wyestymować nieskończoną liczbę parametrów (ciężko oczekiwać zbieżności tak otrzymanego szeregu), dlatego możemy zastosować następującą metodę: pierwsze  $N$  współczynników oszacujemy na podstawie posiadanych danych natomiast pozostałe współczynniki oszacujemy przez 0. Metoda ta znajduje swoje uzasadnienie w tym, że w przypadku gładkich funkcji  $f$  o jej kształcie decydują początkowe współczynniki, natomiast pozostałe stają się zaniedbywalne. Metoda ta posiada także pewne swoje modyfikacje (hard thresholding, soft thresholding) polegające na zastąpieniu przez



zero współczynników w pewnym sensie małych, szczególnie dobrze sprawujące się w przypadku funkcji posiadających sparse przedstawienie w pewnej bazie falkowej.

Podobną metodologię możemy spróbować zastosować w przypadku stochastycznych problemów odwrotnych z operatorami zwartymi posiadającymi dekompozycję według wartości osobliwych.

Rozważmy problem w postaci

$$x_n = \theta_n + \epsilon \sigma_n \xi_n, \quad n = 1, 2, \dots$$

Wtedy możemy zaproponować następujący estymator dla współczynników  $\theta_n$

$$\hat{\theta}(N) = \begin{cases} x_k, & k \leq N \\ 0, & k > N \end{cases}.$$

Wtedy estymatorem elementu  $f$  staje się  $\hat{f} = \sum_{k=1}^N x_k v_k$ .

Liczbę  $N$  nazywamy bandwidth.

Na tak zaproponowaną metodę estymacji możemy również spojrzeć w następujący sposób. Niech  $P_k: G \rightarrow \text{span}\{u_1, u_2, \dots, u_k\}$  będzie skończone wymiarową projekcją ortogonalną  $P_k g = \sum_{n=1}^k \langle g, u_n \rangle u_n$ . Jako że  $P_k$  jest skończenie wymiarowe  $P_k g \in \text{Range} A$  dla dowolnego  $k$  oraz  $P_k g \rightarrow P g$  gdy  $k \rightarrow \infty$ , gdzie  $P$  oznacza projekcję ortogonalną na  $\overline{\text{Range} A}$  (czyli to, co w zasadzie rozwiązujemy rozpatrując dekompozycję operatora według wartości osobliwych). Możemy wtedy rozpatrywać następującą modyfikację problemu

$$A f = P_k g, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Równanie to zawsze posiada rozwiązanie oraz biorąc iloczyn skalarny z wektorami  $u_n$  otrzymujemy, że

$$b_n \langle f, v_n \rangle = \begin{cases} \langle g, u_n \rangle, & n \leq k \\ 0, & n > k \end{cases}.$$

A zatem poszukiwane rozwiązanie możemy zapisać w postaci

$$f_k = f_0 + \sum_{n=1}^k b_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n$$

dla pewnego  $f_0 \in \text{Ker} A$ . Zauważmy również, że  $\|A f_k - P g\|^2 = \|(P - P_k)g\|^2 \rightarrow 0$  gdy  $k \rightarrow \infty$ , czyli błąd popełniany przy zastąpieniu  $P$  przez  $P_k$  może być dowolnie mały.

Wybierając  $f_0 = 0$  możemy zapisać następującą definicję

**Definicja 4.** Niech  $A: H \rightarrow G$  będzie zwartym operatorem liniowym z rozkładem według wartości osobliwych  $(v_n, u_n, b_n)$ . Aproksymacją przez obcięcie SVD (TSVD) problemu  $Af = g$  nazwiemy problem znalezienia takiego  $f \in H$ , że

$$Af = P_k g, \quad f \perp \text{Ker} A$$

dla pewnego  $k \in \mathbb{N}$ .

Tak postawiony problem posiada jedyne rozwiązanie w postaci obcięcia reprezentacji według wartości osobliwych (TSVD) w postaci

$$f_k = \sum_{n=1}^k b_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n.$$

Problemem jaki pozostał jest dobranie odpowiedniego poziomu obcięcia  $k$ .

W celu oceny jakości estymatora posłużymy się błędem średniokwadratowym, czyli  $R(f, \hat{f}) = \mathbb{E}(\|f - \hat{f}\|^2)$ . Mając do dyspozycji układ wartości osobliwych możemy zapisać estymator uzyskany metodą TSVD w postaci  $\hat{f} = \sum_{n=1}^k x_n v_n$ . Dzięki temu możemy zauważyć, że jest to estymator liniowy z wektorem wag posiadających jedynki na pierwszych  $k$  pozycjach i zerach na pozostałych. Ryzyko estymatora możemy wtedy zapisać jako  $R(f, \hat{f}) = \mathbb{E}(\|f - \hat{f}\|^2) = \mathbb{E}(\sum_n (\hat{f}_k - f_k)^2) = \sum_{n=k+1}^{\infty} \theta_n^2 + \sum_{n=1}^k \epsilon^2 \sigma_n^2$ , czyli ryzyko estymatora TSVD wyraża się w bardzo prosty sposób.

Możemy teraz zastanowić się jak wybór  $k$  będzie wpływał na ryzyko estymatora TSVD

$$R(f, \hat{f}) = \sum_{n=k+1}^{\infty} \theta_n^2 + \sum_{n=1}^k \epsilon \sigma_n.$$

Z uzyskanego wzoru widzimy, że wraz ze wzrostem  $k$  zmniejsza się obciążenie estymatora (ubywa pominiętych współrzędnych), ale rośnie wariancja, odwrotny skutek obserwujemy zmniejszając  $k$ - rośnie obciążenie, ale maleje wariancja. Optymalny wybór  $k$  powinien prowadzić do zbalansowania tych dwóch przeciwstawnych tendencji. Ogólnie wiadomo jednak, że wybór optymalnego poziomu odcięcia wymaga znajomości pewnych parametrów poszukiwanej funkcji (gładkość).

## 8 Przykłady 3

**Przykład 4.** W następującym przykładzie prześledzimy problemy związane z odwracaniem operatorów (nawet skończenie wymiarowych), poziomem obciążenia i występowaniem szumu.

Rozważmy transformację Laplace’a funkcji zdefiniowanej na odcinku  $[0, \infty)$  zadanej jako

$$(\mathcal{L}f)(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt.$$

Uprościmy sytuację rozważając pewną dyskretną aproksymację tej transformaty zadaną na siatce  $0 < s_1 < s_2 < \dots < s_n < \infty$ , wyrażającą się wzorem

$$(\mathcal{L}_d f)(s_j) = \sum_{k=1}^n w_k e^{-s_j t_k} f(t_k),$$

gdzie  $w_k, t_k$  są wybrane według jakiejś metody przybliżonego całkowania.

W przykładzie z [2] zastosowano logarytmicznie rozłożone punkty siatki i 40 punktową kwadraturę Gaussa- Legendre’a obciętą do przedziału  $(0, 5)$ .

Niech funkcja  $f$  będzie zadana wzorem

$$f(t) = t \mathbf{1}_{[0,1)} + \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}t\right) \mathbf{1}_{[1,3)},$$

której transformatę można wyrazić jawnym wzorem

$$(\mathcal{L}f)(s) = \frac{1}{2s^2} (2 - 3e^{-s} + e^{-3s}).$$

Zadaniem jest teraz odtworzenie funkcji  $f$  na podstawie wartości jej transformaty w punktach  $s_j$ .

Bezpośrednia próba rozwiązania tego zagadnienia nawet pomijając jakikolwiek błąd addytywny prowadzi do katastrofalnych wyników z powodu fatalnego uwarunkowania tego zadania co wyraża się przez wskaźnik uwarunkowania tego zadania zdefiniowany w tym przypadku jako

$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \approx 8,5 \cdot 10^{20}.$$

Stąd nawet zaokrąglenia numeryczne prowadzą do poważnych zaburzeń wyniku.

W przypadku gdy pojawia się problem z odwróceniem macierzy możemy skorzystać z pseudoodwrotności Penrosa- Moora. Każdą macierz  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$

można zdekomponować według wartości osobliwych  $A = U\Lambda V^T$ , gdzie  $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$  i  $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  są macierzami ortogonalnymi, a  $\Lambda \in \mathbb{R}^{m \times n}$  macierzą diagonalną z elementami  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{(m,n)}$ . Wtedy rozwiązanie zagadnienia  $Af = g$  ma rozwiązanie w postaci  $f = f_0 + A^\dagger g$ , gdzie  $A^\dagger$  jest właśnie pseudoodwrotnością Penrosa–Moora, zdefiniowaną jako  $A^\dagger = V\Lambda^\dagger U^T$ , gdzie  $\Lambda^\dagger \in \mathbb{R}^{n \times m}$  jest macierzą diagonalną złożoną z odwrotności wartości singularnych macierzy  $A$ . Zauważmy, że gdy któraś z wartości singularnych wyjściowej macierzy jest bardzo mała jej odwrotność bardzo mocno rośnie, co może powodować, że zastosowanie wprost pseudoodwrotności  $P$ – $M$  może skutkować niestabilnością wyniku i nawet błędy zaokrągleń mogą powodować eksplozję wyniku. Stąd potrzebne jest obcięcie pewnych najmniejszych wartości singularnych. W tym przypadku można zastosować discrepancy principle. Niech  $y$  będzie zaburzoną wersją 'czystego'  $y_0$  i  $\|g - g_0\| \approx \epsilon$  i wtedy wybieramy poziom obcięcia  $k$  jako największy indeks spełniający  $\|g - Af_k\| = \|g - P_k g\| \geq \epsilon$ .

## Literatura

- [1] L. Cavalier, *Inverse Problems in Statistics* in P. Alquier et al., *Inverse problems and high- dimensional estimation*, Springer, 2011,
- [2] J. Kaipio, E. Somersalo, *Statistical and computational inverse problems*, Springer, 2004,
- [3] Z. Szkutnik, *Statystyczne problemy odwrotne*, notatki do wykładu,
- [4] L. Wasserman, *All of nonparametric statistics*, Springer, 2006.