

HANKA LÁSZLÓ

GAMMA-SPEKTRUMOK KIÉRTÉKELÉSÉNEK MATEMATIKAI MÓDSZEREI II. REGULARIZÁCIÓS MÓDSZEREK

MATHEMATICAL METHODS OF GAMMA-SPECTRUM'S EVALUATION II. REGULATING METHODS

A tényleges és a méréssel kapott gamma-spektrum kapcsolatát egy lineáris egyenletrendszerrel írhatjuk le. Ennek az egyenletrendszernek a megoldása — amelyet dekonvolúciónak nevezünk —, egy összetett probléma, ugyanis a megoldás a mérési hibák következtében instabilis, a megoldás nagyon érzékeny a hibákra.. Matematikai szempontból a problémát a mátrix szingularitása, az együtthatómátrix kicsi sajátértékei jelentik. A mérési hibák létezése és a rendszer együtthatómátrixának szingularitása jelentős mértékben befolyásolja az alkalmazható dekonvolúciós módszerek hatékonyságát. A klasszikus egyenletrendszer megoldási módszerek nem eléggé hatékonyak, stabilis, a hibákra kevésbé érzékeny megoldás előállításához regularizációs módszereket kell alkalmazni. Ez azt jelenti, hogy az eredeti problémát illetve annak megoldását egy olyan problémával illetve annak megoldásával közelítjük, amely számottevően kevésbé érzékeny a hibákra. Ebben a dolgozatban néhány hatékony regularizációs módszert mutatunk be.

Gamma spektrum, dekonvolúció, „rosszul kitűzött” problémák, „rosszul kondicionált” problémák, általánosított inverz, szinguláris felbontás, regularizáció, paraméterváltási szabályok, csonkított szinguláris felbontás, Tyihonov-féle regularizáció.

The relationship between incident and observed spectrum can be described by a linear equation system. The solution of this system (called deconvolution), is generally a complex problem, because the solution is unstable with respect to the measurement error, the equation system is extremely sensitive to errors in the measured data. From mathematical point of view the main problem is the singularity of response matrix, the existence of very small eigenvalues. The existence of error and the singularity of the system-matrix affects the process of deconvolution, and can lead to difficulties in solving the equation system. Classical methods for solving

equation systems are not efficient enough, therefore, in order to find stable solution the method of regularization must be applied. This means, that the original problem is replaced by an approximate one, the solutions of which are significantly less sensitive to errors in the data. This work presents some effective regularisation techniques.

Gamma-ray spectra, deconvolution, „ill-posed” problems, „ill-conditioned” problems, generalized inverse, singular value decomposition, regularization, parameter choice rule, truncated singular value decomposition, Tikhonov-type regularization.

1. Egy egyszerű regularizációs eljárás

Egy gamma spektrum meghatározása a mérési adatok alapján lényegében egy lineáris egyenletrendszer megoldását jelenti. Ha $y \in \mathbb{R}^m$ az m-csatornás spektrométerrel mért spektrum, $x \in \mathbb{R}^n$ a valós spektrum, az $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mátrix pedig a detektor válaszfüggvénye (Response function), akkor a megoldandó probléma $y = Rx$ alakban írható fel [3]. Az egyenletrendszer $R = [R_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ együtthatómátrixának R_{ij} eleme annak az eseménynek a valószínűsége, hogy a j-edik energiatarományba eső γ -foton az i-edik csatornában lesz detektálva. Az alábbiakban az R mátrixot ismertnek tételezzük fel. Tegyük fel, ahogyan az a gyakorlatban teljesül, hogy $m > n$, ami azt jelenti, hogy egy túlhatározott egyenletrendszer megoldása szolgáltatja az x spektrumot, azaz nagyobb az egyenletek száma mint az ismeretleneké. Ebben a cikkben ezen egyenletrendszer megoldásának, az ún. dekonvolúciónak, regularizációs módszereivel foglalkozunk. Mivel ez a dolgozat az [1] cikk közvetlen folytatása, ezért erre a munkára a tárgyalás során többször is hivatkozunk majd.

Léteznek az [1]-ben részletesen elemzett klasszikus algoritmusoknál sokkal hatékonyabb módszerek. Ezeket az eljárásokat regularizációs módszereknek nevezzük. A klasszikus módszerek vizsgálata során kiderült, hogy a megoldás során a legtöbb problémát a kicsi, nullához közeli sajátértékek okozzák. A regularizáció során az A szimmetrikus pozitív szemidefinit mátrixot úgy közelítjük mátrixok seregével, hogy a közelítő mátrixok sajátértékei távol maradjanak a zérustól. A 4. pontban részletesebben és általánosabban vizsgáljuk majd a problémát. Most az alap gondolat megvilágításaként egy egyszerű esetet tárgyalunk. Legyen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, és $\alpha > 0$, valós szám. Defináljuk közelítő mátrixok A_α seregét az alábbi módon:

$A\alpha = A + \alpha \cdot E$, ahol $E \in \mathbb{R}^{n \times n}$ az egységmátrix. Ha $\alpha \rightarrow 0$, akkor nyilván teljesül, hogy $A\alpha \rightarrow A$. Ha az A mátrix sajátértékei a λ_i valós számok, akkor $A\alpha$ sajátértékei a $\lambda_i + \alpha$ valós értékek, ugyanis:

$$A\alpha u_i = (A + \alpha \cdot E)u_i = Au_i + \alpha \cdot E u_i = \lambda_i u_i + \alpha u_i = (\lambda_i + \alpha) u_i$$

Ebből a számításból az is kiderült, hogy $A\alpha$ sajátvektorai megegyeznek az A sajátvektoraival. Tegyük fel ismét, hogy A reguláris. Ekkor $x = A^{-1}y$ és $x_\alpha = A\alpha^{-1}y$. Így a közelítő megoldás és az elméleti pontos megoldás eltérése (az [1] dolgozatban részletesen tárgyalt és többször alkalmazott 2.1 összefüggés szerint):

$$(1.1)$$

$$x - x_\alpha = \sum_{i=1}^n \left(\lambda_i^{-1} - (\lambda_i + \alpha)^{-1} \right) u_i u_i^* y = \sum_{i=1}^n \frac{\alpha}{\lambda_i (\lambda_i + \alpha)} u_i u_i^* y$$

A sajátvektor rendszer ortogonalitása miatt, ha λ_{\min} a legkisebb sajátérték, akkor az eltérés normája:

$$\|x - x_\alpha\| \leq \frac{\alpha}{\lambda_{\min} (\lambda_{\min} + \alpha)} \|y\|$$

Ha $\alpha \rightarrow 0$ világos, hogy $\|x - x_\alpha\| \rightarrow 0$. Vegyük most figyelembe, hogy a mérési adatoknak van hibája, y^δ a mérés eredménye. Ebből meghatározva a megoldást az $x_\alpha^\delta = A\alpha^{-1}y^\delta$ összefüggést kapjuk. Mint korábban, most is

teljesül, hogy $\|y^\delta - y\| < \delta$.

Ugyancsak a (1.1) összefüggés felhasználásával, a hibás adatból kapott közelítő megoldás és az elméletileg pontos közelítő megoldás eltérése és az eltérés normája a következő:

$$x_\alpha^\delta - x_\alpha = \sum_{i=1}^n (\lambda_i + \alpha)^{-1} u_i u_i^* (y^\delta - y), \quad \text{valamint} \quad \|x_\alpha^\delta - x_\alpha\| \leq \frac{\delta}{\lambda_{\min} + \alpha}.$$

Becsüljük most meg a hibás adat alapján a közelítő mátrix segítségével meghatározott megoldás és az elméleti pontos megoldás eltérését! A háromszög egyenlőtlenség alkalmazásával adódik, hogy

$$\|x - x_\alpha^\delta\| \leq \|x - x_\alpha\| + \|x_\alpha - x_\alpha^\delta\| \leq \frac{\alpha}{\lambda_{\min}(\lambda_{\min} + \alpha)} \|y\| + \frac{\delta}{\lambda_{\min} + \alpha}$$

Mivel az y egzaktul nem ismert, ebben a formában a becslés nem használható. De az $\|y^\delta - y\| < \delta$ egyenlőtlenségből azonnal adódik, hogy $\|y\| \leq \|y^\delta\| + \delta$. Így arra az eredményre jutunk, hogy

$$\|x - x_\alpha^\delta\| \leq \frac{\alpha}{\lambda_{\min}(\lambda_{\min} + \alpha)} (\|y^\delta\| + \delta) + \frac{\delta}{\lambda_{\min} + \alpha}$$

Vegyük észre, hogy a két hibetag ellentétes módon viselkedik. Az 1. tag $\alpha \rightarrow 0$ esetén csökkenő módon tart a 0-hoz, a második tag azonban $\alpha \rightarrow 0$ esetén növekszik. Feladat megtalálni azt az α paramétert, amely minimalizálja a két hibetag összegét. Ezt az eljárást nevezzük paraméterválasztásnak. Mint látszik, az α paraméter két „változótól” függ. Egyrészt a δ hibakorlától (zajszinttől), másrészt az y^δ zajos adattól. Az α paraméter választására elméletileg három lehetőségünk van („parameter choice rule”):

1. a-priori paraméterválasztásról beszélünk, ha α csak a δ -tól függ: $\alpha = \alpha(\delta)$;
2. a-posteriori a paraméterezés, ha α minkét „változótól” függ: $\alpha = \alpha(\delta, y^\delta)$;
3. végül fennáll a lehetősége annak is, hogy α csak az y^δ függvénye legyen: $\alpha = \alpha(y^\delta)$.

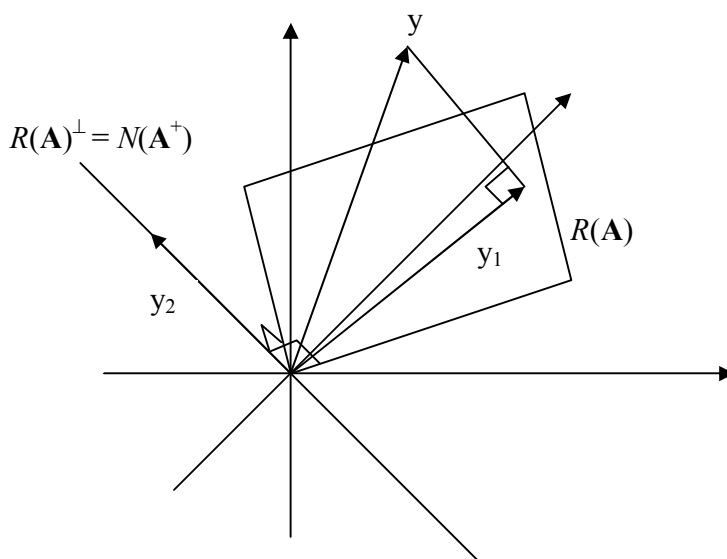
Kimutatható, hogy az általunk vizsgált „rosszul kitűzött” („ill-posed”) problémák megoldása csak az 1. vagy a 2. módszerrel hajtható végre, a 3. módszer ilyen esetekben nem vezet célra.

2. Általánosított inverz

Általánosítsuk most az $Ax = y$ egyenletrendszert téglalap alakú együtthatómátrixok esetére, tehát tegyük fel, hogy $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$. Megállapításaink szerint $m > n$, tehát az egyenletrendszer túlhatározott. Legyen $\rho = \text{rang}(A)$ az A mátrix rangja, és tegyük fel, hogy $\rho < n$. Célunk a reguláris mátrixok esetében megismert inverz-fogalom általánosítása.

A mondott feltevések mellett az $Ax = y$ egyenletrendszernek nincs megoldása tetszőleges $y \in \mathbb{R}^m$ esetén. Célszerű ezért a jelölést is módosíta-

ni. Használjuk mostantól az $Ax \cong y$ jelölést ezen tulajdonság hangsúlyozására! Mivel egzakt megoldás nem létezik tetszőleges jobboldal esetén, meg kell állapodnunk abban, hogy milyen értelemben keressük az egyenletrendszer megoldását. Ésszerűnek tűnik azt az $x \in \mathbb{R}^n$ megoldást megkeresni, amelyre az $Ax \in \mathbb{R}^m$ vektor az y -hoz a legközelebb van. Mivel a rangra tett feltevések miatt az A mátrix $N(A)$ magtere nem triviális, így a megoldás nem egyértelmű. Ennek fényében az is logikus követelmény lehet, hogy válasszuk ki ezek közül a minimális normájú megoldást.



1. ábra

Az $Ax \cong y$ egyenlet legjobban közelítő megoldásának nevezzük (legkisebb négyzetek feladata!) az $x \in \mathbb{R}^n$ vektort, ha (2.1) $\|Ax - y\| = \inf \{ \|Az - y\| \mid z \in \mathbb{R}^n \}$

Mivel a magtér nem triviális, általában végtelen sok olyan x van, amelyre Ax a legjobb közelítés. Az $x \in \mathbb{R}^n$ vektor minimális normájú megoldás, ha

$$(2.2) \quad \|x\| = \inf \{ \|z\| \mid z \in \mathbb{R}^n \text{ legjobban közelítő megoldás} \}$$

Ha a (2.1) értelemben létezik megoldás, akkor a (2.2) megoldás egyértelmű, hiszen egy szigorúan konvex, másodfokú függvény minimumhelye egy lineáris altéren.

Ha $y \in \mathbb{R}^m$ olyan vektor, hogy az $Ax \cong y$ egyenletrendszernek létezik megoldása a (2.2) értelemben, akkor ezt a Moore-Penrose-féle általánosított inverz („pszeudo inverz”) segítségével lehet előállítani. Ehhez a következő módon jutunk el [4].

Legyen $A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ lineáris transzformáció. Legyen $N(A)^\perp$ az A magterének ortogonális komplementere, és jelölje A_1 az A transzformáció leszűkítését az $N(A)^\perp$ altérre: $A_1: N(A)^\perp \rightarrow \mathbb{R}(A)$. Ez a leszűkítés reguláris, tehát invertálható, A_1^{-1} létezik. Ebben az esetben az általánosított inverz, aminek a jele A^+ , az A_1^{-1} kiterjesztése az $\mathbb{R}(A) \oplus \mathbb{R}(A)^\perp$ halmazra, ahol definíció szerint $\mathbb{R}(A)^\perp = N(A^+)$. Ezzel a definícióval valóban kiterjesztést határoztunk meg, ugyanis ha $y \in \mathbb{R}(A) \oplus \mathbb{R}(A)^\perp$, akkor az $y = y_1 + y_2$ felbontás egyértelmű és $A^+y = A^+y_1 + A^+y_2 = A_1^{-1}y_1 + 0 = A_1^{-1}y_1$. Az általánosított inverz nem teljesíti a reguláris mátrixokra igaz $A^+A = E$, $AA^+ = E$ összefüggéseket, ehelyett eleget tesz az ún. Moore-Penrose-féle egyenleteknek:

$$\begin{aligned} AA^+A &= A, \\ A^+AA^+ &= A^+, \\ A^+A &= E - P_1, \\ AA^+ &= P_2|_{\mathbb{R}(A) \oplus \mathbb{R}(A)^\perp} \end{aligned}$$

ahol $P_1: \mathbb{R}^n \rightarrow N(A)$, $P_2: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}(A)$ ortogonális projekciók. Az általánosított inverz segítségével azonnal előállítható az $Ax \cong y$ egyenlet minimális normájú megoldása. Igaz ugyanis, hogy tetszőleges $y \in \mathbb{R}(A) \oplus \mathbb{R}(A)^\perp$ esetén az $Ax \cong y$ egyenletnek egyértelműen létezik minimális normájú megoldása, és ezt az $x^+ = A^+y$ formula szolgáltatja (Ezt a 3. pontban bebizonyítjuk.) Az összes legjobban közelítő megoldást az $\{x^+\} + N(A)$ alakú összegvektorok szolgáltatják. Ha tehát $x^0 \in N(A)$ tetszőleges, akkor az $x = x^+ + x^0$ alakú vektorok mindannyian rendelkeznek azzal a tulajdonsággal, hogy az

$Ax = A(x^+ + x^0)$ a legközelebb van y -hoz. Ilyen értelemben végtelen sok megoldása létezik a legkisebb négyzetek feladatának. Ezek között minimális normájú az x^+ megoldás. Hangsúlyozzuk azonban, hogy az \mathbb{R}^m lineáris térben, adott y esetén $R(A)$ -ban egyértelműen létezik olyan y_1 , melyre az $\|y - y_1\|$ norma minimális. Szemléletesen ez az $y_1 \in R(A)$ nem más, mint az $y \in \mathbb{R}^m$ vektor $R(A)$ altérre vonatkozó ortogonális vetülete. Ebből következik az $y - y_1 \perp R(A)$, vagy másképpen az $y_2 = y - y_1 \in R(A)^\perp$ nyilvánvaló összefüggés (1. ábra).

Legyen most y_1 az y legjobb közelítése. Ekkor tetszőleges $z \in R(A)$ esetén teljesül, hogy $\langle z, y - y_1 \rangle = 0$. Mivel $z, y_1 \in R(A)$, ezért rendre létezik olyan $x, x^+ \in \mathbb{R}^n$, hogy $z = Ax, y_1 = Ax^+$. Ezért $\langle Ax, y - Ax^+ \rangle = 0$. Azt kapjuk tehát, hogy $\langle x, A^*y - A^*Ax^+ \rangle = 0$ tetszőleges $x \in \mathbb{R}^n$ esetén. Ez pedig pontosan azt jelenti, hogy adott $y \in R(A) \oplus R(A)^\perp$ esetén az $x^+ \in \mathbb{R}^n$ vektor akkor és csak akkor a legjobban közelítő megoldás, ha kielégíti az

$$A^*Ax = A^*y$$

Gauss-féle normálegyenleteket. Ha ezt az eredményt összevetjük a az [1] dolgozat (4.1) egyenletével, látható, hogy az általánosított inverz valóban az eredetileg kitűzött probléma megoldását adja általános feltételek mellett. Ha még teljesül az a feltétel is, hogy az A^*A mátrix reguláris (ez akkor igaz, ha $\rho = n$), akkor a Moore-Penrose-féle általánosított inverz az alábbi alakban írható fel:

$$2.3) A^+ = (A^*A)^{-1} A^*$$

3. Szinguláris felbontás (Singular Value Decomposition, SVD)

Az általánosított inverz fogalmát a 2. pontban elméletileg leírtuk. Az A^+ konkrét előállítás azonban csak abban az esetben adható meg az egyszerű (2.3) formulával, ha az A^*A mátrix reguláris, mint ahogyan azt már említettük. Ha azonban az $Ax \cong y$ egyenletet $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m > n$), $x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m, \rho = \text{rang}(A) < n$ feltételek mellett akarjuk megoldani, méghozzá a legjobban

közelítő értelemben, akkor szükséges az általánosított inverz előállítása ebben a legáltalánosabb esetben. Ehhez nélkülözhetetlen apparátus a mátrixok szinguláris értékekre történő felbontásának módszere. Rendkívüli elméleti és gyakorlati jelentősége miatt ezt a konstrukciót részletesebben tárgyaljuk [8].

Legyen $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m > n$). Ekkor léteznek olyan $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $S \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$, mátrixok, hogy az A mátrix előáll (3.1) $A = USV^*$ alakban az alábbiak szerint. Mivel $A^*A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pozitív szemidefinit, kvadratikus mátrix, létezik olyan $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonális mátrix, amellyel A^*A diagonalizálható. Vezessük be az $A^*A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix sajátértékeinek jelölésére a σ_i^2 szimbólumot ($i = 1, 2, \dots, n$).

Ekkor $V^*(A^*A)V = \langle \sigma_1^2, \sigma_2^2, \sigma_3^2, \dots, \sigma_n^2 \rangle$

A V oszlopvektorai köztudottan az A^*A mátrix sajátvektorai. Ha nem létezik n db lineárisan független sajátvektor, mert $\rho < n$, akkor Gram-Schmidt-féle ortogonalizációval kiegészítjük n db vektorból álló ortonormált rendszerré. Ezzel megkaptuk a $V = [v_1, v_2, v_3, \dots, v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonális mátrix előállítását, melyre emiatt teljesül a $V^*V = E \in \mathbb{R}^{n \times n}$ összefüggés, ugyanis az ortogonalitás miatt $V^{-1} = V^*$. Az általános $\rho < n$ esetet vizsgálva bontsuk fel V -t blokkokra az alábbi módon: $V = (V_1, V_2)$, $V_1 \in \mathbb{R}^{n \times \rho}$, $V_2 \in \mathbb{R}^{n \times (n-\rho)}$, ahol a V_2 mátrix oszlopai az A mátrix $N(A)$ magterének, a V_1 oszlopai pedig az $N(A)^\perp$ ortogonális komplementer ortonormált bázisát alkotják. A konstrukcióból adódóan V nem egyértelműen meghatározott. A bevezetett jelölésekkel (3.2) $V_1^*(A^*A)V_1 = \langle \sigma_1^2, \sigma_2^2, \sigma_3^2, \dots, \sigma_\rho^2 \rangle \in \mathbb{R}^{\rho \times \rho}$, másrészt $V_2^*(A^*A)V_2 = 0 \in \mathbb{R}^{(n-\rho) \times (n-\rho)}$, amiből következik, hogy $AV_2 = 0 \in \mathbb{R}^{m \times (n-\rho)}$. Ezekből már meg lehet konstruálni az $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ mátrixot is. Legyen $U_1 = AV_1 = \langle \sigma_1^{-1}, \sigma_2^{-1}, \sigma_3^{-1}, \dots, \sigma_\rho^{-1} \rangle \in \mathbb{R}^{m \times \rho}$, Ekkor (3.2) miatt $U_1^*U_1 = E \in \mathbb{R}^{\rho \times \rho}$, tehát U_1 is ortogonális mátrix. U_1 oszlopvektorai az A mátrix $R(A)$ képterének ortonormált bázisát alkotják. Egészítsük ki az $U_1 = [u_1, u_2, u_3, \dots, u_\rho] \in \mathbb{R}^{m \times \rho}$ mátrix ortonormált oszlopvektor rendszerét további $m - \rho$ db ortonormált oszloppal a Gram-Schmidt ortogonalizációs eljárást alkalmazva. Ha ezeket a vektorokat az U_2 mátrixban foglaljuk össze, ahol tehát U_2 oszlopai az $R(A)^\perp$ altér ortonormált bázisát alkotják, akkor kapjuk az U blokkokra történő $U = (U_1, U_2)$ felbontását. U a konstruk-

cióból adódóan szintén ortogonális: $U^*U = E \in \mathbb{R}^{m \times m}$. Mellesleg megemlítjük, hogy az U mátrix oszlopai az $AA^* \in \mathbb{R}^{m \times m}$ mátrix ortonormált sajátvektorai. A V -hez hasonlóan az U sem egyértelmű. A bevezetett jelölésekkel, felhasználva a fenti összefüggéseket, az alábbiakat kapjuk:

$$U^*AV = \begin{pmatrix} U_1^* \\ U_2^* \end{pmatrix} A(v_1 \ v_2) = \begin{pmatrix} U_1^*AV_1 & U_1^*AV_2 \\ U_2^*AV_1 & U_2^*AV_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1^*U_1\langle\sigma_i\rangle_\rho & 0 \\ U_2^*U_1\langle\sigma_i\rangle_\rho & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\sigma_1 \dots \sigma_\rho \ 0 \dots 0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}$$

Az egyenlet jobboldalát jelölje $S \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Ha az egyenletet rendezzük A -ra, épp a szinguláris felbontást kapjuk. A számításokból kiderült az S mátrix

konkrét formája is: S Blokkokra bontott alakja $S = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix}$, ahol $S_2 = 0 \in \mathbb{R}^{m-n \times n}$,

$S_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pedig olyan diagonális mátrix, melynek főátlójában a $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_\rho$ értékek, és $n - \rho$ db zérus található:

$$S_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & & 0 & 0 & & 0 \\ \dots & & \dots & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_\rho & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\ \dots & & & & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A σ_i valós számokat az A mátrix szinguláris értékeinek nevezzük. A szinguláris értékek a fentiek szerint épp az A^*A mátrix sajátértékeinek négyzetgyökei: $\{\sigma_i^2\} = \{\lambda_j(A^*A)\}$. Ha σ_1 a legnagyobb szinguláris érték, akkor Euklideszi norma esetén teljesül, hogy

$$\sigma_1 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^*A)} = \|A\|$$

Abban a különleges esetben, amikor A szimmetrikus, pozitív szemidefinit mátrix, a szinguláris értékek épp az A sajátértékei: $\sigma_i = \lambda_i(A)$.

A szinguláris felbontás nagyon hatékony elméleti eszköz rosszul kondicionált, rosszul kitűzött („ill-posed”) feladatok megoldása esetében. Megmutatjuk, hogy alkalmazásával a legkisebb négyzetek feladatának

megoldását, tehát az $Ax \cong y$ egyenlet legjobban közelítő, minimális normájú megoldását kapjuk. Tűzzük ki feladatként az $Ax = y$ egyenlet egzakt megoldását. Ha az A mátrix felbontása $A = USV^*$, akkor az $Ax = y$ egyenlet az $USV^*x = y$ alakot ölti. Ha bevezetjük a $V^*x = x'$ és az $U^*y = y'$ jelöléseket, akkor $USx' = y$, illetve $Sx' = U^*y = y'$, tehát végül az $Sx' = y'$ egyenlet adódik. Az S alakjára tekintve innen világos, hogy az $Ax = y$ pontosan akkor oldható meg, ha minden olyan i indexre, melyre $\sigma_i = 0$, teljesül hogy $y'_i = 0$, – ezekre az indexekre a x'_i komponensek tetszőlegesek –, továbbá $i > n$ esetén $y'_i = 0$.

Az $Ax \cong y$ egyenlet minimális normájú $x \in \mathbb{R}^n$ megoldásának meghatározása, a V ortogonalitása miatt egyenértékű a minimális normájú $V^*x = x'$ előállításával, hiszen ortogonális V mátrixra teljesül, hogy $\|x\| = \|Vx\|$. Alkalmazzuk a megoldás előállítására érdekében a következő definíciót:

$$s_{ij}^+ = \begin{cases} \sigma_i^{-1} & \text{ha } i = j \text{ és } \sigma_i \neq 0 \\ 0 & \text{különben} \end{cases}$$

és értelmezzük az $S^+ \in \mathbb{R}^{n \times m}$ mátrixot az $S^+ = (s_{ij}^+)$ módon, továbbá legyen $x' = S^+y'$, valamint $A^+ = VS^+U^*$. Ekkor (3.4) $x = A^+y = VS^+U^*y$ a keresett legkisebb normájú megoldás. Valóban, a bevezetett jelölésekkel:

$$\|Ax - y\|^2 = \|USV^*x - y\|^2 = \|SV^*x - U^*y\|^2 = \|Sx' - y'\|^2 = \sum_{i=1}^{\rho} (\sigma_i x'_i - y'_i)^2 + \sum_{i=\rho+1}^m y'_i{}^2$$

Egyenlőség akkor van, ha $x'_i = \frac{y'_i}{\sigma_i}$ ($i = 1, 2, \dots, \rho$). A többi x'_i tetszőleges. Ha $i > \rho$ estén $x'_i = 0$, akkor x normája minimális. Ekkor pedig az előbbiek szerint éppen $x' = S^+y'$, és ekkor a V ortogonalitása miatt minimális a (3.4) szerinti $x = Vx' = VS^+y' = VS^+U^*y$ normája is!

Könnyen ellenőrizhető, hogy a (3.3) összefüggéssel értelmezett $A^+ \in \mathbb{R}^{n \times m}$ mátrixra teljesülnek a Moore–Penrose-féle egyenletek, ami azt jelenti, hogy A^+ nem más, mint a Moore–Penrose-féle általánosított inverz a legáltalánosabb esetben. Az általánosított inverz előállításához szükség volt a szinguláris felbontásra. Összefoglalva a mondottakat: az $Ax \cong y$ egyenlet minimális normájú megoldását a $x = A^+y$ vektor szolgáltatja.

Vizsgáljuk meg, mit mondhatunk ebben az esetben a megoldás hibájáról! Mivel általában az $Ax = y$ egyenlet nem megoldható – a mondottak szerint

az általánosított inverz a legjobban közelítő megoldások közül a minimális normájút adja –, helyette az $Ax = y - y_2$ egyenletet tekintjük, ahol $y_2 = y - Ax$, az y legjobb közelítésének és y -nak az eltérése (itt a 2. pont jelöléseit alkalmaztuk). Most $x = A^+y$ és $x + \delta x = A^+(y + \delta y)$.

A [1] dolgozat (3.1) összefüggésének levezetésénél alkalmazott gondolatmenetet értelemszerű módosításokkal ismételve azt kapjuk, hogy az általános esetben a relatív hiba a következő egyenlőtlenséggel becsülhető:

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa \frac{\|\delta y\|}{\|y\| - \|y_2\|}$$

ahol $\kappa = \|A^+\| \cdot \|A\| = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}$ az $Ax \cong y$ feladat kondíciószáma. Mint látható az

általános esetben a sajátértékek szerepét átveszik a szinguláris értékek, de a tény, hogy a kondíciószám a legnagyobb és a legkisebb szinguláris érték hányadosa, továbbra is fennáll. A megoldás relatív hibája most a δy eltérés és az $\|y\| - \|y_2\|$ különbség által van meghatározva. A hiba nagysága itt tehát a kondíciószám mellett attól is függ, hogy mekkora az $\|y\| - \|y_2\|$ különbség. Minél nagyobb ez az eltérés, a megoldás annál pontosabb. Gondoljuk meg ismét, hogy Ax az $y \in \mathbb{R}^m$ ortogonális projekciója az $R(A)$ altérre, és y_2 ennek a két vektornak a különbsége. A hiba annál kisebb minél kisebb ez az eltérés. Minél jobban összemérhető y normája az y_2 vektor normájával, a helyzet annál rosszabb.

Az alkalmazások kedvéért felírjuk a szinguláris felbontást más alakban is:

$$Ax = USV^* x = (U)(S) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{pmatrix} x = (U)(S) \begin{pmatrix} v_{1x} \\ v_{2x} \\ \dots \\ v_{nx} \end{pmatrix} = (u_1 \ u_2 \ \dots \ u_m) \begin{pmatrix} \sigma_1 & . & 0 & 0 & 0 \\ . & . & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{1x} \\ v_{2x} \\ \dots \\ v_{nx} \end{pmatrix} =$$

$$= (\sigma_1 u_1 \quad \sigma_2 u_2 \quad \dots \quad \sigma_p u_p \quad 0 \quad \dots \quad 0) \begin{pmatrix} v_{1x} \\ v_{2x} \\ \dots \\ v_{nx} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^p \sigma_i \langle v_i, x \rangle u_i$$

Az A^+ inverz mátrixra, az előző gondolatmenet és a (3.4) összefüggés alkalmazásával, az

$$(3.5) \quad A^+ y = \sum_{i=1}^p \frac{1}{\sigma_i} \langle u_i, y \rangle v_i$$

előállítás adódik.

4. A regularizáció általános fogalma

Az 1. pontban már említettük, hogy a megoldás során a legtöbb problémát a kicsi, nullához közeli sajátértékek okozzák. A regularizáció során az A mátrixot úgy közelítjük mátrixok seregével, hogy a közelítő mátrixok sajátértékei távol maradjanak a zérustól. Az 1. pontban egy egyszerű szituációban vizsgáltuk ennek a módszernek a kivitelezhetőségét. Most általános formában írjuk le a módszer lényegét [3].

Az $I \subset \mathbb{R}$ intervallum legyen olyan tulajdonságú indexhalmaz, hogy létezik benne legalább egy olyan (α_n) ($n \in \mathbb{N}$) indexsorozat, amelyre teljesül, hogy $\lim(\alpha_n) = 0$. Adott $\alpha \in I$ regularizációs paraméter esetén legyen $R_\alpha : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ olyan lineáris operátor, amelytől megköveteljük, hogy $\alpha \rightarrow 0$ esetén, tetszőleges $y \in R(A) \oplus R(A)^\perp$ mellett teljesüljön az $R_\alpha y \rightarrow A^+ y$ konvergencia feltétel.

A hibáról a korábbiakkal összhangban feltesszük, hogy $\|y^\delta - y\| < \delta$. Az α regularizációs paraméter természetesen függ a δ zajszinttől (a-priori paraméterezés), de függhet az y^δ mérési adatoktól is (a-posteriori paraméterezés). Mindkét esetben megköveteljük azonban, hogy $\delta \rightarrow 0$ esetén is teljesüljön az $R_\alpha y \rightarrow A^+ y$ konvergenciafeltétel.

Folytonos lineáris operátorok egy $\{R_\alpha\}$ ($\alpha \in I$) halmazát az A^+ operátor regularizációjának nevezzük, ha tetszőleges $y \in R(A) \oplus R(A)^\perp$ esetén léte-

zik egy olyan $\alpha : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^m \rightarrow I$ paraméterfüggvény ($\alpha = \alpha(\delta, y^\delta)$, a-posteriori paraméterezés), hogy a

$$(4.1) \limsup_{\alpha \rightarrow 0} \left\{ \left\| R_\alpha y^\delta - A^+ y \right\| \mid y^\delta \in \mathbb{R}^m; \|y^\delta - y\| < \delta \right\} = 0$$

valamint a

$$(4.2) \limsup_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \alpha(\delta, y^\delta) \mid y^\delta \in \mathbb{R}^m; \|y^\delta - y\| < \delta \right\} = 0.$$

feltételek teljesülnek. Ha (4.1) és (4.2) egyaránt teljesül egy rögzített $y \in R(A) \oplus R(A)^\perp$ esetén, akkor az (R_α, α) rendezett párt az $Ax \cong y$ egyenlet konvergens regularizációjának nevezzük. Felmerül a kérdés, milyen szükséges illetve elégséges feltételek teljesülése esetén állíthatjuk bizonyos operátorokról, hogy azok serege az A^+ mátrixnak illetve az $Ax \cong y$ egyenletnek (konvergens) regularizációja. Az alábbiakban erre a kérdésre válaszolunk az egyszerűbb a-priori esetre vonatkozólag, egyben általános elvi alapokat adunk konkrét konvergens regularizáció előállítására.

Legyen $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $R_\alpha \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\alpha \in \mathbb{R}^+$, és tegyük fel, hogy $\alpha \rightarrow 0$ esetén $R_\alpha \rightarrow A^+$ teljesül pontonként az $R(A) \oplus R(A)^\perp$ lineáris térben. Ez azt jelenti, hogy tetszőlegesen rögzített $y \in R(A) \oplus R(A)^\perp$ és tetszőleges $\varepsilon > 0$ esetén létezik olyan $\beta(\varepsilon) > 0$, hogy ha $\alpha < \beta(\varepsilon)$, akkor $\|R_\alpha y - A^+ y\| < \varepsilon$. Ebben az esetben az $\{R_\alpha\}$ mátrixsereg az A^+ mátrix egy regularizációja.

Ilyen feltételekkel létezik a-priori $\alpha = \alpha(\delta)$ paraméterezés, amellyel (R_α, α) az $Ax \cong y$ egyenlet konvergens regularizációja. Egyszerűbben fogalmazva ez azt jelenti, hogy $\{R_\alpha\}$ mátrixok tetszőleges olyan serege, amely pontonként tart az A^+ általánosított inverz mátrixhoz, definiál egy konvergens regularizációt.

Megfordítva, (4.1) és (4.2) szerint teljesül, hogy $\lim R_\alpha y^\delta = A^+ y$ és így, ha $\alpha = \alpha(\delta)$ a δ -nak folytonos függvénye, $\delta \rightarrow 0$ azt kapjuk, hogy $\lim_{\delta \rightarrow 0} R_\alpha y^\delta = A^+ y$ tehát, ha az a-priori paraméterezést egy folytonos függvényvel adjuk meg, akkor a konvergens regularizáció biztosítja a regularizációs operátorok pontonkénti konvergenciáját.

Befejezésül, az a-priori paraméterezés jellemzésére megadjuk még az alábbi, nagyon jól használható szükséges és elégséges feltételt:

Legyen $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ adott mátrix, és $R_\alpha \in \mathbb{R}^{n \times m}$ regularizációs operátorok serege $\alpha = \alpha(\delta)$ a-priori paraméterezéssel. Ebben az esetben (R_α, α) akkor és csak akkor konvergens regularizáció, ha a

$$(4.3) \lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0 \quad \text{és} \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \cdot \|R_\alpha\| = 0$$

feltételek teljesülnek. Ez a tétel nagyon egyszerű és átlátható módon teszi lehetővé regularizációs operátorok definiálását. Ezt tesszük a következő pontban.

5. Konkrét regularizációs módszerek

A szinguláris felbontás tárgyalása során kiderült, hogy az $Ax \cong y$ egyenlet megoldása során a fő problémát a nagy κ kondíciószám, illetve a nagyon kicsi szinguláris értékek létezése okozza. Kézenfekvő tehát olyan regularizációs operátorokat definiálni, melyekkel módosítani tudjuk a legkisebb szinguláris értékeket [3, 9].

Felhasználva az általánosított inverzre a szinguláris felbontás alapján kapott (3.5)

$$A^+ y = \sum_{i=1}^p \frac{1}{\sigma_i} \langle u_i, y \rangle v_i$$

előállítást, az R_α regularizációs operátort

$$R_\alpha y = \sum_{i=1}^p f_\alpha(\sigma_i) \langle u_i, y \rangle v_i$$

alakban keressük, ahol $f_\alpha : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ olyan függvény, melyre tetszőleges $\sigma > 0$ és $\alpha \rightarrow 0$ esetén teljesül, hogy $f_\alpha(\sigma) \rightarrow \frac{1}{\sigma}$. Tegyük fel, hogy f_α korlátos is, azaz létezik olyan $K_\alpha \in \mathbb{R}^+$, hogy tetszőleges $\sigma \in \mathbb{R}^+$ esetén $f_\alpha(\sigma) \leq K_\alpha$. Ekkor ugyanis teljesül, hogy

$$\|R_\alpha y\|^2 = \sum_i (f_\alpha(\sigma_i))^2 \cdot |\langle u_i, y \rangle|^2 \leq K_\alpha^2 \cdot \sum_i |\langle u_i, y \rangle|^2 \leq K_\alpha^2 \cdot \|y\|^2$$

Ez pedig pontosan azt jelenti, hogy K_α az R_α normájának egy felső korlátja. Ebből következik, hogy (5.1) $\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \cdot K_\alpha = 0$ azaz $\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \cdot \|R_\alpha\| = 0$, tehát a

(4.3) feltételek teljesülnek. Ez pedig azt jelenti, hogy f_α konvergenciájából következik R_α pontonkénti konvergenciája A^+ -hoz, másképpen fogalmazva az említett feltételekkel konstruált (R_α, α) regularizáció az $Ax \cong y$ egyenlet konvergens regularizációja. Az f_α függvény konkrét alakjától függően számos lehetőség kínálkozik egy konvergens regularizáció definiálására. Az alábbiakban három konkrét példát mutatunk ennek megvalósítására.

5.1. Csonkított szinguláris felbontás (Truncated Singular Value Decomposition)

Induljunk ki ismét az A mátrix szinguláris felbontásából. A κ kondíciós szám csökkentésére a gyakorlatban a következő lehet tenni. Ha néhány σ_i szinguláris érték nagyon kicsi — a számítógép relatív pontosságának nagyságrendjébe esik —, akkor választunk egy $\alpha > 0$, pozitív számot és elhanyagoljuk mindazokat a szinguláris értékeket, amelyek α -nál nem nagyobbak [8]. Ez azért hasznos, mert a nagyon kicsi szinguláris értékeknek rosszabb hatása van a megoldásra, mint a 0 értékeknek. Ezzel a „csonkítási” eljárással, a feladat kondíciója jobb lesz. Legyen

$$s_{ij}^0 = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i} & \text{ha } i = j \text{ és } \alpha < \sigma_i \\ \sigma_i & \\ 0 & \text{különben} \end{cases}$$

és definiáljuk az S_0^+ mátrixot a következő módon: $S_0^+ = (s_{ij}^0)$.

$$\text{Ezzel a definícióval } A_0^+ = VS_0^+U^*, \text{ és } \kappa = \kappa(A_0^+) = \frac{\sigma_1}{\alpha}.$$

Ennek a módosításnak a hatása a legjobban közelítő megoldásra vonatkozólag a következő: Ha $\sigma_i \leq \alpha$, $i = k + 1, \dots, n$, $k \leq \rho$ esetén, akkor $y_i^0 = 0$, ha $i = k + 1, \dots, n$, $y^0 = S_0^+ y'$. Így a közelítő megoldás y -től való eltéréseinek normájára az

$$\|Ax - y\|^2 = \sum_{i=p+1}^m y_i'^2 \text{ egyenlőség helyett az } \|Ax^0 - y\|^2 = \sum_{i=k+1}^m y_i'^2 \text{ egyenlőség}$$

adódik. A norma tehát nem csökkenhet, rosszabb esetben növekszik. Ebben az esetben az A_0^+ megoldást kell elfogadnunk A^+ helyett. A kettő közötti eltérés jelentős mértékű is lehet. Ezért az eljárás ebben a helyzetben az, hogy több, különböző α paraméterrel megoldjuk az egyenletrendszert, és a kapott megoldások közül választjuk ki a legmegfelelőbbet.

Vegyük észre, hogy a csonkított szinguláris felbontás egy konvergens regularizáció. Módosítva ugyanis a fenti jelöléseket az 5. pontnak megfelelően, legyen

$$f_\alpha(\sigma) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma} & \text{ha } \alpha \leq \sigma \\ 0 & \text{ha } \sigma < \alpha \end{cases}$$

Világos, hogy ebben az esetben $K_\alpha = \frac{1}{\alpha}$ a felső korlát, és a módszer konvergens regularizációt szolgáltat, ha $\delta \xrightarrow{\alpha} 0$ esetén $\delta \cdot \frac{1}{\alpha} \rightarrow 0$ teljesül. A regularizált megoldás alakja tetszőleges $y \in \mathbb{R}^m$ esetén: α

$$x_\alpha = R_\alpha y = \sum_{\alpha < \sigma_i} \frac{1}{\sigma_i} \langle u_i, y \rangle v_i$$

5.2. Lavrentyev-féle regularizáció

A Lavrentyevtől származó módszer lényege az, hogy minden σ_i szinguláris értéket megnövelünk α -val. Ebben az esetben tehát a regularizációs függvény definíciója:

$$f_\alpha(\sigma) = \frac{1}{\sigma + \alpha}$$

Ekkor a regularizált megoldás alakja:

$$x_\alpha = R_\alpha y = \sum_i \frac{1}{\sigma_i + \alpha} \langle u_i, y \rangle v_i$$

Vegyük észre, hogy ez éppen az $(A + \alpha \cdot E) x_\alpha = y$ egyenlet megoldása. Ha visszatekintünk az 1. pontban mondottakra, akkor világos, hogy ott intuitív úton éppen a Lavrentyev-féle regularizációs eljárást elemeztük.

Mivel $\frac{1}{\sigma + \alpha} < \frac{1}{\alpha}$ ezért teljesül, hogy $K_\alpha = \frac{1}{\alpha}$ az $f_\alpha(\sigma)$ felső korlátja. Így

(5.1) alapján a konvergencia feltétele ismét az, hogy $\delta \rightarrow 0$ esetén $\delta \cdot \frac{1}{\alpha} \rightarrow 0$ teljesüljön.

5.3 Tyihonov-féle regularizáció

Definiáljuk a regularizációs függvényt a következő módon [3, 9]:

$$f_\alpha(\sigma) = \frac{\sigma}{\sigma^2 + \alpha}$$

Ekkor a regularizált megoldás a következő formában adható meg:

$$(5.3.1) \quad x_\alpha = R_\alpha y = \sum_i \frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \alpha} \langle u_i, y \rangle v_i$$

Tegyük fel, hogy a pozitív α regularizációs paraméter teljesíti az $\alpha \leq \sigma^2$ feltételt. Ezt megkövetelhetjük, hiszen $\alpha \rightarrow 0$ határátmenetet vizsgálunk. Mivel α és σ pozitívak ez egyenértékű a $\sqrt{\alpha} \leq \sigma$ illetve a $\sigma - \sqrt{\alpha} \geq 0$ egyenlőtlenséggel. Ez utóbbit négyzetre emelve és rendezve kapjuk a $2\sigma\sqrt{\alpha} \leq \sigma^2 + \alpha$ feltételt. Ebből ismételt rendezéssel adódik, hogy

$$\frac{\sigma}{\sigma^2 + \alpha} \leq \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}$$

Ez pedig azt jelenti, hogy $f_\alpha(\sigma) \leq \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} = K_\alpha$, tehát a regularizációs függvény felülről korlátos. A regularizáció konvergenciájának feltétele az, hogy $\delta \rightarrow 0$ esetén $\delta \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \rightarrow 0$ teljesüljön.

Könnyen látható, hogy a Tyihonov-féle regularizáció a Lavrentyev-féle regularizáció általánosítása. Az utóbbi, pozitív szemidefinit A mátrix esetén regularizálja az $Ax = y$ egyenletet. Ha mármost A tetszőleges mátrix, és alkalmazzuk a Lavrentyev-regulatizációt az $Ax = y$ helyett az $A^*Ax = A^*y$ Gauss-féle normálegyenletre, akkor az (5.3.2) $(A^*A + \alpha E) = A^*y$ regularizált alakot kapjuk. Az (5.3.1) formula éppen ennek a regularizált egyenletnek a megoldását szolgáltatja.

A Tyihonov-féle eljárás szoros rokonságban van az általánosított inverz által előállított legjobban közelítő megoldással. Megmutatjuk, hogy a Tyihonov-féle módszerrel kapott megoldás is rendelkezik extrémális tulajdonsággal. Ehhez, az eddigiekkel összhangban – Euklideszi norma alkalmazásával – vizsgáljuk meg az

$$(5.3.3) \quad \left\| Ax - y^\delta \right\|^2 + \alpha \cdot \|x\|^2 \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

optimalizálási problémát. Mivel a norma skaláris szorzatból származik, ez az összeg az alábbi formában is írható:

$$\langle Ax - y^\delta, Ax - y^\delta \rangle + \alpha \cdot \langle x, x \rangle = \langle Ax, Ax \rangle - 2 \cdot \langle Ax, y^\delta \rangle + \langle y^\delta, y^\delta \rangle + \alpha \cdot \langle x, x \rangle$$

A szélsőérték létezésének szükséges feltétele, hogy az x -változó szerinti első derivált zérus legyen. Elvégezve a deriválást, a következő adódik:

$$\langle 1, Ax \rangle + \langle Ax, 1 \rangle - 2 \cdot \langle 1, y^\delta \rangle + 2\alpha \cdot \langle 1, x \rangle = 2 \cdot \langle 1, Ax \rangle + 2\alpha \cdot \langle 1, x \rangle - 2 \cdot \langle 1, y^\delta \rangle = 0$$

ahol $1 \in \mathbb{R}^n$ jelenti azt a vektort, amelynek minden komponense az $1 \in \mathbb{R}$ valós szám.

Rendezve az egyenletet, azt kapjuk, hogy:

$$\langle 1, A^*Ax \rangle + \alpha \cdot \langle 1, x \rangle - \langle 1, A^*y^\delta \rangle = 0$$

Ez utóbbi egyenlet pedig egyenértékű az (5.3.2) egyenlettel. Mivel pedig a minimalizálandó (5.3.3) függvény szigorúan konvex, ezért a stacionárius megoldás egyben a szélsőérték probléma minimumát szolgáltatja.

Ez azt jelenti, hogy a Tyihonov-féle regularizáció által szolgáltatott megoldás, adott α regularizációs paraméter esetén, minimalizálja az Ax vektor y^δ -től való eltéréseinek és az x vektor α -val súlyozott normájának összegét. Mivel a regularizáció során $\alpha \rightarrow 0$, ezért látható, hogy a

regularizált megoldások végül is az általánosított inverz által adott megoldáshoz konvergálnak.

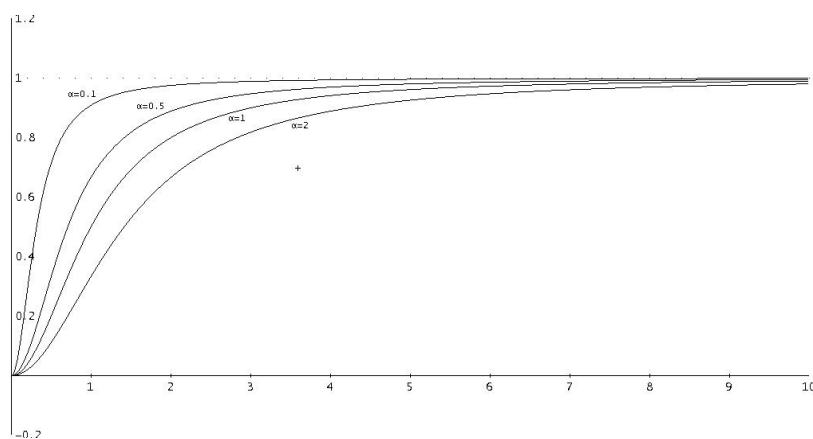
Annak érdekében, hogy érzékeltetni tudjuk a regularizáció hatását a (3.5) megoldásra, alakítsuk át a regularizált megoldás (5.3.1) alakját a következő módon:

$$x_\alpha = \sum_i \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha} \cdot \frac{1}{\sigma_i} \langle u_i, y \rangle v_i$$

Innen világosan látszik, hogy regularizáció a (3.5) megoldást az

$$r(\sigma_i) = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha}$$

faktorral módosítja, ez a függvény egyfajta szűrőként viselkedik. Nyilvánvaló, hogy ha $\alpha \rightarrow 0$, akkor $r(\sigma_i) \rightarrow 1$, tehát a hatás eltűnik. Rögzített α esetén a regularizálás hatása a 2. ábrán látható, ahol az $r(\sigma)$ függvényt ábrázoltuk σ függvényében, különböző, rögzített α paraméterek esetén:



2. ábra

A grafikon alapján nyilvánvaló, hogy az α -hoz képest kicsi σ_i értékeket a regularizáció kiszűri, az α -hoz képest nagy szinguláris értékekkel pedig gyakorlatilag nem történik változás, hiszen az $r(\sigma)$ függvény σ növekedésével 1-hez tart.

Felhasznált irodalom

1. Hanka L.–Vincze Á.: Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei I. A „klasszikus” van Cittert-féle és a Gold-féle iteráció. Bolyai Szemle, 2008/I.
2. L. Bouchet: A Comparative study of deconvolution methods for gamma-ray spectra. Astronomy & Astrophysics Supplement Series. Ser. 113, pp167-183.
3. M.Mandel, M. Morhac, J. Kilman, L. Krupa, V. Matousek, J.H. Hamilton, A.V. Ramayya: Decomposition of continuum gamma-ray spectra using synthesized response matrix. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 516 (2004) pp172-183.
4. M. Morhac: Deconvolution methods and their applications in the analysis of gamma-ray spectra. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 559 (2006) pp119-123.
5. P.H. Van Cittert, Z. Phys. 69 (1931) pp298.
6. Stoyan Gisbert – Takó Galina: Numerikus módszerek. Typotex, 2006
7. <http://www.samsi.info/talks/inverse/Inverse-Vogel.pdf>
8. <http://www.fizyka.umk.pl/nrbook/bookcpdf.html>
9. <http://www.math.auckland.ac.nz/~phy707/notes/>

