



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ  
Εθνικόν και Καποδιστριακόν  
Πανεπιστήμιον Αθηνών  
— ΙΔΡΥΘΕΝ ΤΟ 1837 —

Σχολή Θετικών Επιστημών  
Τμήμα Μαθηματικών

---

Μεθοδολογίες υπολογισμού  
διγγραμμικών μορφών και  
εφαρμογές

---

Διδακτορική Διατριβή

Παρασκευή Γ. Ρούπα

ΑΘΗΝΑ 2020

Το έργο συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Πρόγραμμα Χορήγησης Υποτροφιών για Μεταπτυχιακές Σπουδές Δευτέρου Κύκλου Σπουδών» (MIS-5003404), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ).



**Επιχειρησιακό Πρόγραμμα  
Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού,  
Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση**

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



## Τριμελής Συμβουλευτική Επιτροπή

**Μαριλένα Μητρούλη** (επιβλέπουσα)  
Καθηγήτρια Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

**Βασίλειος Δουγαλής**  
Ομότιμος Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

**Μιχαήλ Δρακόπουλος**  
Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

## Επταμελής Εξεταστική Επιτροπή

**Μαριλένα Μητρούλη**  
Καθηγήτρια Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

**Βασίλειος Δουγαλής**  
Ομότιμος Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

**Μιχαήλ Δρακόπουλος**  
Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

**Δημήτριος Θηλυκός**  
Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

**Σωτήριος Νοτάρης**  
Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών, ΕΚΠΑ

**Παναγιώτης Ψαρράκος**  
Καθηγητής ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ

**Ιωάννης Κολέτσος**  
Αναπληρωτής Καθηγητής ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ



# Περιεχόμενα

Περίληψη	v
Abstract	vii
Πρόλογος	ix
<b>1 Μαθηματικό υπόβαθρο</b>	<b>1</b>
1.1 Συμμετρικοί, θετικά ορισμένοι και ημιορισμένοι πίνακες . . . . .	2
1.1.1 Ευκλείδειοι και μοναδιαίοι χώροι . . . . .	2
1.1.2 Ορθογώνιοι, μοναδιαίοι πίνακες . . . . .	5
1.1.3 Θετικά ορισμένοι πίνακες . . . . .	7
1.2 Παραγοντοποιήσεις πινάκων . . . . .	10
1.3 Κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss . . . . .	17
1.4 Η μέθοδος Arnoldi και ο συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos . . . . .	21
1.5 Ο αλγόριθμος block Lanczos . . . . .	23
1.6 Ανισότητες Kantorovich και ροπές (moments) . . . . .	25
1.7 Πίνακες ειδικών μορφών . . . . .	31
<b>2 Εκτίμηση της διγραμμικής μορφής <math>x^T A^{-1} y</math></b>	<b>41</b>
2.1 Εκτιμήσεις για κάθε αντιστρέψιμο πίνακα $A$ . . . . .	41
2.1.1 Ανάλυση ιδιζουσών τιμών και ροπές . . . . .	42
2.1.2 Εκτιμήσεις ενός όρου (One-term estimates) . . . . .	44
2.1.3 Εκτιμήσεις δύο όρων (Two-term estimates) . . . . .	47
2.2 Εκτιμήσεις για συμμετρικούς πίνακες . . . . .	50
2.3 Εφαρμογή στην εκτίμηση στοιχείων του αντίστροφου πίνακα . . . . .	54
2.4 Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	60
<b>3 Εκτίμηση της διαγωνίου συναρτήσεων πινάκων</b>	<b>69</b>
3.1 Η μέθοδος της παρεμβολής στην εκτίμηση της διαγωνίου του πίνακα $f(A)$ . . . . .	70

3.2	Εκτιμήσεις μέσω των κανόνων αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss . . . . .	72
3.2.1	Αριθμητική ολοκλήρωση single Gauss . . . . .	72
3.2.2	Αριθμητική ολοκλήρωση block Gauss . . . . .	73
3.3	Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	74
<b>4</b>	<b>Εκτίμηση του γινομένου <math>f(A)\mathbf{b}</math></b>	<b>79</b>
4.1	Διανυσματικές εκτιμήσεις για το $f(A)\mathbf{b}$ . . . . .	79
4.1.1	Διανυσματικές εκτιμήσεις ενός όρου . . . . .	80
4.1.2	Διανυσματικές εκτιμήσεις δύο όρων . . . . .	84
4.1.3	Διανυσματικές εκτιμήσεις τριών όρων . . . . .	86
4.2	Διανυσματικές εκτιμήσεις για τη μορφή $X^T f(A)Y$ . . . . .	89
4.3	Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	90
<b>5</b>	<b>Εκτίμηση της γενικευμένης συνάρτησης διασταυρωμένης - επικύρωσης (GCV)</b>	<b>101</b>
5.1	Συνάρτηση GCV και διγραμμικές μορφές . . . . .	102
5.2	Εκτίμηση της συνάρτησης GCV . . . . .	103
5.2.1	Εκτίμηση των τετραγωνικών μορφών $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ , $q = 1, 2$ . . . . .	103
5.2.2	Εκτίμηση του ίχνους του αντιστρόφου . . . . .	111
5.2.3	Εκτίμηση της παραμέτρου κανονικοποίησης . . . . .	112
5.3	Διάστημα εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV . . . . .	114
5.3.1	Φράγματα για την τετραγωνική μορφή $\mathbf{b}^T B^{-2} \mathbf{b}$ . . . . .	114
5.3.2	Διάστημα εμπιστοσύνης για το $Tr(B^{-1})$ . . . . .	115
5.4	Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	116
5.4.1	Προσδιορισμός της παραμέτρου κανονικοποίησης . . . . .	116
5.4.2	Υπολογιστική πολυπλοκότητα . . . . .	117
5.4.3	Αριθμητικά παραδείγματα . . . . .	117
<b>6</b>	<b>Εφαρμογές</b>	<b>123</b>
6.1	Ανάλυση δικτύων . . . . .	123
6.1.1	Βασικές έννοιες . . . . .	123
6.1.2	Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	126
6.2	Διακριτά κακώς τοποθετημένα προβλήματα (discrete ill-posed problems) . . . . .	128
6.2.1	Θεωρητικό πλαίσιο . . . . .	128
6.2.2	Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	130
6.3	Στατιστική: Γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης . . . . .	134
6.3.1	Θεωρητικό πλαίσιο . . . . .	134
6.3.2	Μελέτη προσομοίωσης . . . . .	136

## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

---

Βιβλιογραφία	143
Κατάλογος Πινάκων	149
Κατάλογος Σχημάτων	153

## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

---



# Περίληψη

Ο υπολογισμός των διγραμμικών μορφών είναι ένα μαθηματικό πρόβλημα με πολλές εφαρμογές. Συγκεκριμένα, εμφανίζεται στην ανάλυση δικτύων για να προσδιοριστεί η σημαντικότητα των κόμβων και η ευκολία μετάβασης μεταξύ των κόμβων ενός γραφήματος. Επίσης εμφανίζεται στον υπολογισμό παραμέτρων σε κάποιες αριθμητικές μεθόδους για την επίλυση προβλημάτων ελαχίστων τετραγώνων και στην κανονικοποίηση Tikhonov για την επίλυση κακώς τοποθετημένων προβλημάτων (ill-posed problems). Επιπλέον, η δράση της συνάρτησης ενός πίνακα  $f(A)$  σε ένα διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ , δηλαδή το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ , εμφανίζεται συχνά σε εφαρμογές που προέρχονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις, σε υπολογισμούς της κβαντικής χρωμοδυναμικής στη χημεία και στη φυσική, στη δειγματοληψία από την κανονική κατανομή κ.α. Αν ο πίνακας  $A$  έχει πολύ μεγάλη διάσταση, ο απευθείας υπολογισμός δεν είναι εφικτός. Έτσι, είναι απαραίτητο να παράγουμε εκτιμήσεις για αυτές τις μορφές.

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή προκύπτουν εκτιμήσεις για τις διγραμμικές μορφές του τύπου  $\mathbf{x}^T f(A)\mathbf{y}$ , όπου  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  είναι ένας δοσμένος πίνακας,  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$  και  $f$  είναι μία ομαλή συνάρτηση ορισμένη στο φάσμα του πίνακα  $A$ . Η προτεινόμενη μέθοδος βασίζεται σε μία μέθοδο παρεκβολής (extrapolation). Συγκεκριμένα, δημιουργούμε εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1}\mathbf{y}$  και διανυσματικές εκτιμήσεις για την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$ .

Επιπροσθέτως, προσαρμόζουμε μερικές αριθμητικές μεθόδους που βασίζονται στη μέθοδο της παρεκβολής και στην αριθμητική ολοκλήρωση του Gauss για την εκτίμηση της διαγωνίου συναρτήσεων πινάκων, χωρίς να προσεγγίσουμε ολόκληρο τον πίνακα  $f(A)$ . Ασχολούμαστε επίσης με την εκτίμηση και ελαχιστοποίηση της γενικευμένης συνάρτησης διασταυρωμένης επικύρωσης (generalized cross-validation (GCV)) συνδυάζοντας τη μέθοδο της παρεκβολής και μία στατιστική προσέγγιση.

Τέλος, εφαρμόζουμε τις παραχθείσες εκτιμήσεις για τις προαναφερθείσες ποσότητες σε προβλήματα που πηγάζουν από την ανάλυση δικτύων, τη λύση διακριτών κακώς τοποθετημένων προβλημάτων και τον υπολογισμό της παραμέτρου παλινδρόμησης ενός στατιστικού μοντέλου.



# Abstract

The computation of bilinear forms is a mathematical problem with many applications. Specifically, they arise in network analysis in order to determine the importance of the nodes and the ease of travelling between the nodes of a graph. They also arise naturally for the computation of parameters in some numerical methods for solving least squares and in Tikhonov regularization for solving ill-posed problems, etc.

Moreover, the action of a matrix function  $f(A)$  on a vector  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ , i.e. the product  $f(A)\mathbf{b}$ , often appears in applications which are originated from partial differential equations, in lattice quantum chromodynamics computations in chemistry and physics, in sampling from a Gaussian process distribution, and so forth. If the matrix  $A$  is sufficiently large, the direct computation is not possible. Therefore, it is necessary to derive efficient estimates for these forms.

In the present PhD thesis, we derive estimates for the bilinear forms of the type  $\mathbf{x}^T f(A)\mathbf{y}$ , where  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  is a given matrix with specific structure,  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$  and  $f$  is a smooth function defined on the spectrum of the matrix  $A$ . The developed method based on an extrapolation procedure. Specifically, we generate estimates for the bilinear form  $\mathbf{x}^T A^{-1}\mathbf{y}$  and vector estimates for the quantity  $f(A)\mathbf{b}$ .

Furthermore, we adjust some numerical methods based on extrapolation and Gaussian quadrature rules for estimating the diagonal of matrix functions, without approximating the whole matrix  $f(A)$ . We are also concerned with the estimation and minimization of the generalized cross-validation (GCV) function by using a combination of an extrapolation procedure and a statistical approach.

Finally, we apply the generated estimates for the aforementioned quantities in problems which deal with network analysis, the solution of discrete ill-posed problems and the computation of the regression parameter of a statistical model.



# Πρόλογος

Στην σημερινή εποχή είναι απαραίτητη η διαχείριση δεδομένων μεγάλης διάστασης, γεγονός που απαιτεί την ανάπτυξη κατάλληλων μεθοδολογιών για αυτόν τον σκοπό. Ο υπολογισμός διγραμμικών μορφών και συναφών ποσοτήτων οδηγεί σε χρήσιμα συμπεράσματα και συχνά αποτελεί κριτήριο για ιδιότητες που σχετίζονται με την εκάστοτε εφαρμογή. Σχεδόν σε όλες τις επιστημονικές εφαρμογές όπως είναι η ανάλυση δικτύων, η πληροφορική, η στατιστική, η οικονομία κ.α., η επεξεργασία των δεδομένων και η εξαγωγή συμπερασμάτων απαιτεί τη διαχείριση πινάκων μεγάλης διάστασης. Στις εφαρμογές αυτές, συνήθως δεν είναι εφικτός ο απευθείας υπολογισμός των επιθυμητών διγραμμικών μορφών και έτσι απαιτείται η εκτίμησή τους. Παρακάτω παραθέτουμε αναλυτικά τους λόγους που μας ώθησαν να ασχοληθούμε με την εύρεση μεθοδολογιών για την εκτίμηση διγραμμικών μορφών και ποσοτήτων που σχετίζονται με αυτές.

## Κίνητρο του προβλήματος και ερευνητικοί στόχοι

Οι ερευνητικοί στόχοι της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι οι ακόλουθοι.

- *Εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ .*

Έστω ένας αντιστρέψιμος πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  και  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$  δοθέντα διανύσματα. Η διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  εμφανίζεται σε διάφορες εφαρμογές, όπως ανάλυση δικτύων, επεξεργασία σήματος, πυρηνική φυσική, κβαντική μηχανική, υπολογιστική ρευστότητα, κ.α. Αν τα διανύσματα  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  επιλεγθούν να είναι στήλες του ταυτοτικού πίνακα, μπορούν να προκύψουν εκτιμήσεις για τα στοιχεία του αντιστρόφου του δοσμένου πίνακα  $A$ . Στην ανάλυση δικτύων, είναι απαραίτητο να εκτιμηθούν τα στοιχεία του πίνακα resolvent,  $(I_p - aA)^{-1}$ , για κατάλληλα επιλεγμένη παράμετρο  $a$ , αφού ποσοτικοποιούν τη σημαντικότητα των κόμβων καθώς επίσης και την επικοινωνία μεταξύ των κόμβων.

Ο υπολογισμός των διαγώνιων στοιχείων του αντιστρόφου ενός πίνακα εμφανίζεται επίσης στη θεωρία γραφημάτων, στη μηχανική μάθηση, κ.α. Η ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας στην ανάλυση κινδύνου απαιτεί τα

διαγώνια στοιχεία των αντιστρόφων πινάκων συνδιακύμανσης (covariance matrices) για την αξιολόγηση του βαθμού εμπιστοσύνης στην ποιότητα των δεδομένων.

- *Εκτίμηση της διαγωνίου της συνάρτησης ενός πίνακα  $f(A)$ .*

Έστω ένα συμμετρικός πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  και  $f$  μία ομαλή συνάρτηση ορισμένη στο φάσμα του πίνακα  $A$ . Ο υπολογισμός της διαγωνίου του πίνακα  $f(A)$  εμφανίζεται σε πολλές εφαρμογές που πηγάζουν από τα πεδία των μαθηματικών, στατιστικής, μηχανικής, ανάλυσης δικτύων, μηχανικής μάθησης και φυσικής. Συγκεκριμένα, ο υπολογισμός της διαγωνίου του αντιστρόφου ενός πίνακα εμφανίζεται στη θεωρία γραφημάτων, στην ανάλυση χαρτοφυλακίου, στην ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας στην ανάλυση κινδύνου, κ.α.

Επιπλέον, στην ανάλυση δικτύων και στη θεωρία γραφημάτων η διαγώνιος του εκθετικού του πίνακα γειτνίασης  $A$ , ποσοτικοποιεί την κεντρικότητα  $f$ -υπογραφήματος (subgraph centrality) κάθε κόμβου, το οποίο είναι ένα μέτρο για τη σημαντικότητα ενός κόμβου. Επιπροσθέτως, η διαγώνιος της συνάρτησης “Green” που λύνει την εξίσωση Dyson είναι απαραίτητη στη θεωρία δυναμικού μέσου πεδίου και η διαγώνιος του πίνακα  $f(A)$ , για μία συγκεκριμένη συνάρτηση  $f$ , προκύπτει στη κβαντική μοντελοποίηση στη συναρτησιακή θεωρία πυκνότητας.

- *Εκτίμηση της δράσης της συνάρτησης ενός πίνακα  $f(A)$  σε ένα διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ .*

Έστω ένας διαγωνίσιμος (diagonalizable) πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ , ένα διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$  και  $f$  μία ομαλή συνάρτηση ορισμένη στο φάσμα του πίνακα  $A$ . Ο υπολογισμός της δράσης της συνάρτησης ενός πίνακα  $f(A)$  στο διάνυσμα  $\mathbf{b}$ , δηλαδή το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ , πηγάζει από την ύπαρξη εφαρμογών στις οποίες δεν είναι απαραίτητο να εκτιμηθεί ολόκληρος ο πίνακας  $f(A)$  ή δεν είναι εφικτός ο ακριβής υπολογισμός του  $f(A)$ , ειδικά όταν ο  $A$  είναι μεγάλης διάστασης.

Υπάρχουν συγκεκριμένες εφαρμογές στις οποίες απαιτείται η δράση του  $f(A)$  σε ένα διάνυσμα  $\mathbf{b}$ . Συγκεκριμένα, η ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  εμφανίζεται συχνά σε εφαρμογές που προέρχονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις. Επίσης, εμφανίζεται στους υπολογισμούς της κβαντικής χρωμοδυναμικής στη χημεία και τη φυσική. Σε αυτές τις εφαρμογές, η συνάρτηση προσήμου,  $\text{sign}(A)$ , χρησιμοποιείται και ο δοσμένος πίνακας  $A$  είναι πολύ μεγάλος, αραιός και εν γένει μιγαδικός ερμιτιανός.

Επιπλέον, είναι χρήσιμο να υπολογιστεί το γινόμενο  $A^{1/2}\mathbf{b}$  όπου ο  $A$  ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας. Προβλήματα που προ-

κύπτουν από την πληθυσμιακή δυναμική στη μεταφορά νετρονίων, την αριθμητική επίλυση των στοχαστικών διαφορικών εξισώσεων, περιέχουν την ποσότητα  $A^{1/2}\mathbf{b}$  η οποία πρέπει να εκτιμηθεί. Σε περίπτωση που ο δοσμένος πίνακας  $A$  είναι επίσης αραιός, η ποσότητα  $A^{1/2}\mathbf{b}$  εμφανίζεται στη δειγματοληψία από την κανονική κατανομή.

Στην ανάλυση δικτύων, η ποσότητα  $\exp(A)\mathbf{b}$  καθορίζει τη συνολική δυνατότητα επικοινωνίας ως ένα μέτρο για το πόσο καλά οι κόμβοι σε ένα γράφημα μπορούν να ανταλλάξουν πληροφορίες. Η συνολική επικοινωνία (total communicability) ενός κόμβου  $i$  μπορεί να οριστεί ως η  $i$ -οστή είσοδος του διανύσματος  $\exp(A)\mathbf{1}$ , όπου  $\mathbf{1}$  είναι ένα διάνυσμα με όλα τα στοιχεία ίσα με ένα, δηλαδή  $TC(i) := (\exp(A)\mathbf{1})_i$ .

- *Εκτίμηση της γενικευμένης συνάρτησης διασταυρωμένης επικύρωσης (generalized cross-validation (GCV) function).*

Η γενικευμένη συνάρτηση διασταυρωμένης επικύρωσης (συνάρτηση GCV) είναι ένα δημοφιλές εργαλείο για τον προσδιορισμό της ρυθμιστικής παραμέτρου (tuning parameter) στο γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης ή ισοδύναμα της παραμέτρου κανονικοποίησης (regularization parameter) στην κανονικοποίηση Tikhonov. Η συνάρτηση GCV χρησιμοποιείται ευρέως σε προβλήματα που πηγάζουν από τη στατιστική, όπως στην εκτίμηση των συντελεστών στο γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης (linear regression model) και στη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων. Επίσης, εμφανίζεται στην επίλυση διακριτών κακώς τοποθετημένων προβλημάτων (discrete ill-posed problems).

## Κεντρική ιδέα

Η κεντρική ιδέα της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι ο κατάλληλος ορισμός των ροπών (moments) ενός δοσμένου πίνακα ανάλογα με τις ιδιότητές του και την ποσότητα που θέλουμε να εκτιμήσουμε. Στον Πίνακα 1 που ακολουθεί συνοψίζουμε τους ορισμούς των ροπών που θα περιγράψουμε στα Κεφάλαια 2-5, αναλόγως την ποσότητα που μας ενδιαφέρει και τις υποθέσεις σχετικά με τον πίνακα του προβλήματος.

Έχοντας ορίσει με κατάλληλο τρόπο τις ροπές του πίνακα αναπτύσσουμε μία μέθοδο παρεκβολής (extrapolation). Η μέθοδος αυτή βασίζεται στον υπολογισμό μίας ακολουθίας τιμών, οι οποίες είναι εύκολο να υπολογιστούν, και στην επέκταση αυτών των τιμών στον υπολογισμό μίας άγνωστης συναφούς ποσότητας. Το κλειδί για να εφαρμοστεί η μέθοδος της παρεκβολής είναι να γραφούν οι επιλεγμένες ροπές ως αθροίσματα, το οποίο πραγματοποιείται μέσω κατάλληλης παραγοντοποίησης του δοσμένου πίνακα.

Ποσότητα	Ιδιότητες πίνακα $A$	Ροπή (moment)
$\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$	αντιστρέψιμος συμμετρικός	$c_{2n}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, (A^T A)^n \mathbf{x}), c_{2n+1}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, A(A^T A)^n \mathbf{x}), n \geq 0$ $c_{2n}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, (AA^T)^n \mathbf{x}), c_{2n+1}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, A^T(AA^T)^n \mathbf{x}), n \leq 0$ $c_n = (\mathbf{x}, A^n \mathbf{x}) \in \mathbb{C}, n \in \mathbb{Z}$
$f(A)\mathbf{b}$	διαγωνίσιμος	$\mathbf{v}_r = A^r \mathbf{b} \in \mathbb{R}^p, r \in \mathbb{Z}$ $\mathbf{v}_f = f(A)\mathbf{b} \in \mathbb{C}^p$
συνάρτηση GCV	$AA^T + \mu I_p, \mu > 0$ (συμμετρικός)	$s_n = s_n(AA^T, \mathbf{x}) = (\mathbf{x}, (AA^T)^n \mathbf{x}) \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{Z}$

Πίνακας 1: Ορισμός των ροπών (moments).

### Επισκόπηση της διατριβής

Στο πρώτο κεφάλαιο θα γίνει αναφορά στα μαθηματικά εργαλεία που θα μας χρειαστούν στην πορεία αυτής της διδακτορικής διατριβής. Αρχικά, θα αναφερθούμε σε ιδιότητες των συμμετρικών, θετικά ορισμένων και ημιορισμένων πινάκων και σε διάφορες μορφές παραγοντοποιήσεων πινάκων με κυριότερες τη φασματική παραγοντοποίηση (spectral factorization) και την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (singular value decomposition (SVD)). Θα αναφέρουμε επίσης κάποια βασικά σημεία από τη θεωρία για τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss, δηλαδή Gauss, Gauss-Radau, Gauss-Lobatto. Επιπλέον, θα αναφέρουμε περιληπτικά τους αλγορίθμους Arnoldi, Lanczos και block Lanczos. Παραθέτουμε τις ανισότητες Kantorovich γραμμένες σε ισοδύναμη μορφή που περιέχουν ροπές (moments) ενός συμμετρικού πίνακα. Στην τελευταία ενότητα αυτού του κεφαλαίου, θα αναφέρουμε κάποιους πίνακες ειδικών μορφών οι οποίοι θα μας χρειαστούν στα αριθμητικά παραδείγματα που θα παρουσιάσουμε στα επόμενα κεφάλαια.

Στο δεύτερο κεφάλαιο, παράγουμε εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ , όπου  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας αντιστρέψιμος πίνακας και  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$  δοθέντα διανύσματα. Αναπτύσσοντας μία μέθοδο παρεκβολής (extrapolation), και συγκεκριμένα παρεχάλλοντας τις ροπές (moments) του πίνακα  $A$  στο σημείο  $-1$ , παράγονται εκτιμήσεις για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ . Ειδικότερα, δημιουργούμε εκτιμήσεις ενός όρου (one-term) και δύο όρων (two-term) για αυτήν την τετραγωνική μορφή. Έπειτα ορίζοντας κατάλληλα την πολική ταυτότητα (polarization identity) προκύπτουν εκτιμήσεις για την επιθυμητή διγραμμική μορφή. Οι εκτιμήσεις αυτές που έχουν προκύψει για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  μπορούν να προσαρμοστούν με σκοπό την εκτίμηση στοιχείων του αντιστρόφου του πίνακα  $A$ . Συγκεκριμένα, επιλέγοντας τα διανύσματα  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  να είναι στήλες του ταυτοτικού πίνακα, δηλαδή  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i, \mathbf{y} = \mathbf{e}_j$  ισχύει  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{e}_i^T A^{-1} \mathbf{e}_j = (A^{-1})_{ij}$ .



Επιπλέον εκτιμήσεις τόσο για την επιθυμητή διγραμμική μορφή όσο και για τα στοιχεία του  $A^{-1}$  παράγονται στην περίπτωση που ο δοσμένος πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός.

Στο τρίτο κεφάλαιο, εκτιμούμε ολόκληρη τη διαγώνιο της συνάρτησης ενός συμμετρικού πίνακα. Δοθέντος ενός συμμετρικού πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  και μίας ομαλής συνάρτησης  $f$  ορισμένης στο φάσμα του  $A$ , αναλύουμε τρεις αριθμητικές μεθόδους για την εκτίμηση της διαγωνίου του πίνακα  $f(A)$ . Συγκεκριμένα, οι μέθοδοι που χρησιμοποιούμε είναι η παρεχβολή και οι κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss (single και block). Ουσιαστικά, χρησιμοποιώντας αυτές τις μεθόδους προκύπτουν εκτιμήσεις για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T f(A) \mathbf{x}$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ , και επιλέγοντας το διάνυσμα  $\mathbf{x}$  να είναι η  $i$ -οστή στήλη του ταυτοτικού πίνακα, παράγονται εκτιμήσεις για τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα  $f(A)$ . Οι προαναφερθείσες μέθοδοι συγκρίνονται ως προς την ακρίβεια των εκτιμήσεων, την απαιτούμενη πολυπλοκότητα και την ταχύτητα προσέγγισης ολόκληρης της διαγωνίου της επιθυμητής συνάρτησης του δοσμένου πίνακα.

Στο τέταρτο κεφάλαιο, αναπτύσσουμε διανυσματικές εκτιμήσεις για τη δράση της συνάρτησης ενός πίνακα  $f(A)$  σε ένα διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ . Συγκεκριμένα, θεωρούμε έναν διαγωνίσιμο (diagonalizable) πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ , μία ομαλή συνάρτηση  $f$  ορισμένη στο φάσμα του πίνακα  $A$  και ένα δοσμένο διάνυσμα  $\mathbf{b}$ . Η δράση της συνάρτησης ενός πίνακα  $f(A)$  στο διάνυσμα  $\mathbf{b}$  ορίζεται ως το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ . Η εκτίμηση αυτής της ποσότητας γίνεται με την ανάπτυξη οικογενειών διανυσματικών εκτιμήσεων που βασίζονται σε μία μέθοδο παρεχβολής, χωρίς τον αναλυτικό υπολογισμό του πίνακα  $f(A)$ . Ειδικότερα, ορίζοντας κατάλληλα διανυσματικές ροπές (vector moments) για τον πίνακα  $A$ , παράγουμε διανυσματικές εκτιμήσεις ενός, δύο και τριών όρων για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ . Οι διανυσματικές αυτές εκτιμήσεις που προκύπτουν για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$  εφαρμόζονται στην εκτίμηση της γενικής μορφής  $X^T f(A) Y$ , όπου  $X, Y \in \mathbb{R}^{p \times m}$  είναι “block διανύσματα” με  $m \ll p$ .

Στο πέμπτο κεφάλαιο, ασχολούμαστε με την εκτίμηση της γενικευμένης συνάρτησης διασταυρωμένης-επικύρωσης (generalized cross-validation (GCV) function) συνδυάζοντας μία μέθοδο παρεχβολής και μία στατιστική προσέγγιση. Συγκεκριμένα, η συνάρτηση GCV μπορεί ισοδύναμα να γραφεί με χρήση διγραμμικών μορφών του τύπου  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ ,  $B$  κατάλληλα ορισμένος πίνακας, οι οποίες μπορούν να εκτιμηθούν με τη μέθοδο της παρεχβολής. Το ίχνος του πίνακα που εμφανίζεται στον παρονομαστή της συνάρτησης GCV εκτιμάται με δύο τρόπους. Ο ένας τρόπος πραγματοποιείται μέσω της εκτίμησης της διαγωνίου του εμφανισθέντος αντιστρόφου πίνακα και ο άλλος τρόπος υλοποιείται χρησιμοποιώντας το στατιστικό Θεώρημα του Hutchinson. Σύμφωνα

με αυτό το θεώρημα για ένα κατάλληλα επιλεγμένο δείγμα  $N$  διανυσμάτων, το ίχνος του αντιστρόφου του επιθυμητού πίνακα θεωρείται ως η μέση τιμή των αντίστοιχων  $N$  τετραγωνικών μορφών. Αξιοποιώντας αυτή τη στατιστική ιδιότητα μπορεί να κατασκευαστεί ένα διάστημα εμπιστοσύνης για το επιθυμητό ίχνος. Με την ελαχιστοποίηση της εκτιμώμενης συνάρτησης GCV σε ένα πλέγμα τιμών, επιτυγχάνεται μία GCV εκτίμηση της παραμέτρου κανονικοποίησης.

Στο έκτο και τελευταίο κεφάλαιο, θα περιγράψουμε αναλυτικά εφαρμογές που στηρίζονται στις εκτιμήσεις που έχουν παραχθεί στα προηγούμενα κεφάλαια. Η πρώτη εφαρμογή με την οποία θα ασχοληθούμε πηγάζει από την ανάλυση δικτύων. Συγκεκριμένα, θα αναγνωρίσουμε τους σημαντικότερους κόμβους ενός δικτύου και θα εξακριβώσουμε την ευκολία μετάβασης ανάμεσα στους κόμβους. Επίσης, θα εκτιμήσουμε την κεντρικότητα υπογραφήματος (resolvent subgraph centrality) κάθε κόμβου και την επικοινωνία υπογραφήματος (resolvent subgraph communicability) μεταξύ δύο κόμβων του γραφήματος. Οι ποσότητες αυτές μπορούν να εκτιμηθούν χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα που έχουν προκύψει στα Κεφάλαια 2 και 3.

Επιπλέον, οι εκτιμήσεις για τη συνάρτηση GCV που περιγράφονται στο Κεφάλαιο 5 μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην επίλυση διακριτών καθώς τοποθετημένων προβλημάτων καθώς και στην εκτίμηση των συντελεστών του γραμμικού μοντέλου παλινδρόμησης που μελετάται στη Στατιστική. Η επίλυση αυτών των δύο προβλημάτων εξαρτάται από μία παράμετρο η οποία καλείται παράμετρος κανονικοποίησης ή ρυθμιστική παράμετρος, αντίστοιχα. Η παράμετρος αυτή μπορεί να προσεγγιστεί με την ελαχιστοποίηση των εκτιμήσεων που έχουν προκύψει για τη συνάρτηση GCV.

## Ευχαριστίες

Σε αυτό το σημείο, θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες σε όλους τους ανθρώπους που συνέβαλαν στην ολοκλήρωση της παρούσας διδακτορικής διατριβής.

Αρχικά, θέλω να ευχαριστήσω ολόψυχα την επιβλέπουσα Καθηγήτρια κα. Μαριλένα Μητρούλη για την καθοδήγηση, τη βοήθεια και την εμπιστοσύνη που μου έδειξε όλο το διάστημα εκπόνησης της παρούσας διδακτορικής διατριβής. Οι γνώσεις που μου προσέφερε σε προβλήματα της Αριθμητικής Γραμμικής Άλγεβρας είναι πολύτιμες. Η αμέριστη στήριξή της τόσο σε επιστημονικά όσο και σε προσωπικά θέματα συνέβαλε καταλυτικά στην ολοκλήρωση της διατριβής μου.

Ευχαριστώ θερμά τα μέλη της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής, τον Καθηγητή κ. Βασίλειο Δουγαλή και τον Επίκουρο Καθηγητή κ. Μιχαήλ Δρακόπουλο για τις γνώσεις που μου προσέφεραν καθ' όλη τη διάρκεια των

σπουδών μου τόσο στο προπτυχιακό και μεταπτυχιακό πρόγραμμα σπουδών, όσο και στην εκπόνηση της παρούσας διδακτορικής διατριβής. Η βοήθειά τους και η εμπιστοσύνη που μου έδειξαν ήταν πολύτιμη.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς επιτροπής, που αποδέχτηκαν να αξιολογήσουν την εργασία μου, τον Καθηγητή κ. Σωτήριο Νοτάρη, τον Καθηγητή κ. Δημήτριο Θηλυκό, τον Καθηγητή κ. Παναγιώτη Ψαρράκο και τον Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Ιωάννη Κολέτσο. Ευχαριστώ ιδιαίτερα τον Καθηγητή κ. Σωτήριο Νοτάρη για τις γνώσεις που μου παρείχε σε θέματα που άπτονται της Αριθμητικής Ανάλυσης και τις πολύτιμες συμβουλές που μου έδινε καθ' όλη τη διάρκεια των διδακτορικών μου σπουδών.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ οφείλω σε όλους τους καθηγητές του Τμήματος Μαθηματικών για τις γνώσεις που μου προσέφεραν τόσο σε προπτυχιακό όσο και μεταπτυχιακό επίπεδο. Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου κ. Χρήστο Κουκουβίνο για την πολύτιμη βοήθεια που μου προσέφερε σε θέματα που πηγάζουν από τον κλάδο της Στατιστικής.

Ευχαριστώ επίσης το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ) για την οικονομική υποστήριξη που μου προσέφερε και με βοήθησε να ολοκληρώσω τις διδακτορικές μου σπουδές.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω μέσα από την καρδιά μου την οικογένειά μου για την αμέριστη συμπαράσταση και υποστήριξη που μου έδειξε και σε αυτή την περίοδο της ζωής μου. Αφιερώνω τη διδακτορική μου διατριβή στη μαμά μου, που έφυγε τόσο νωρίς από τη ζωή.

Παρασκευή Ρούπα  
Αθήνα 2020



# Κεφάλαιο 1

## Μαθηματικό υπόβαθρο

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα αναφέρουμε βασικά θεωρητικά στοιχεία που θα χρειαστούν στην πορεία της παρούσας διδακτορικής διατριβής. Αρχικά, θα καταγράψουμε ιδιότητες των συμμετρικών και θετικά ορισμένων πινάκων. Επίσης, θα αναφέρουμε συνοπτικά κάποιες παραγοντοποιήσεις πινάκων και θα περιγράψουμε αναλυτικά τη φασματική παραγοντοποίηση (spectral factorization) ενός συμμετρικού πίνακα και την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (singular value decomposition (SVD)) ενός πίνακα, οι οποίες θα μας χρειαστούν στην ανάπτυξη των μετέπειτα μεθοδολογιών. Για αυτή την παρουσίαση των αποτελεσμάτων έχουμε στηριχθεί στο βιβλίο του Miroslav Fiedler, [30].

Επιπλέον, στην Ενότητα 1.3 θα παρουσιάσουμε τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss και τον τρόπο που αυτοί συνδέονται με τα ορθογώνια πολυώνυμα. Περισσότερες λεπτομέρειες μπορούν να βρεθούν στο βιβλίο των Golub και Meurant, [38]. Στις Ενότητες 1.4, 1.5 θα καταγράψουμε τους αλγορίθμους Arnoldi, Lanczos [22] και block Lanczos [40, 38]. Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί στην περιγραφή των ανισοτήτων Kantorovich, [24, 50], καθώς και στη σύνδεσή τους με τις ροπές (moments) ενός δοσμένου πίνακα, [17], που αποτελούν κλειδί στην παραγωγή μεθοδολογιών εκτίμησης των ζητούμενων διγραμμικών μορφών. Τέλος, θα περιγράψουμε αναλυτικά κάποιους πίνακες ειδικών μορφών οι οποίοι θα χρειαστούν στα αριθμητικά παραδείγματα που θα αναλύσουμε στα μετέπειτα κεφάλαια.

## 1.1 Συμμετρικοί, θετικά ορισμένοι και ημιορισμένοι πίνακες

### 1.1.1 Ευκλείδειοι και μοναδιαίοι χώροι

Ο ευκλείδειος χώρος διάστασης  $n$  είναι ένας γραμμικός χώρος με  $n$  πραγματικά στοιχεία διανύσματα-στήλες εφοδιασμένος με το εσωτερικό γινόμενο  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  των δύο διανυσμάτων  $\mathbf{x} = (x_i)$  και  $\mathbf{y} = (y_i)$  που δίνεται από τον τύπο

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Ο μοναδιαίος χώρος διάστασης  $n$  είναι ένας γραμμικός χώρος με  $n$  μιγαδικά στοιχεία διανύσματα-στήλες εφοδιασμένος με το εσωτερικό γινόμενο  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  των δύο διανυσμάτων  $\mathbf{x} = (x_i)$  και  $\mathbf{y} = (y_i)$  που δίνεται από τον τύπο

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i,$$

όπου με  $\bar{y}_i$  συμβολίζουμε το συζυγή του μιγαδικού αριθμού  $y_i$ .

Σε όσα ακολουθούν, θα συμβολίζουμε με  $X_n$  έναν μοναδιαίο ή έναν ευκλείδειο χώρο.

**Ορισμός 1.1.** (Εσωτερικό γινόμενο)

Μία απεικόνιση  $(\cdot, \cdot) : X_n \times X_n \rightarrow X_n$  με τις ακόλουθες ιδιότητες

1.  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0$  για κάθε  $\mathbf{x} \in X_n$  και αν  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0 \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$
2.  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \overline{(\mathbf{y}, \mathbf{x})}$  για κάθε  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X_n$
3.  $(\lambda \mathbf{x} + \mu \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \lambda(\mathbf{x}, \mathbf{z}) + \mu(\mathbf{y}, \mathbf{z})$  για  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in X_n$  και  $\lambda, \mu$  μιγαδικούς αριθμούς

λέγεται εσωτερικό γινόμενο.

**Παρατήρηση 1.1.**

1. Από τις ιδιότητες 2 και 3 του εσωτερικού γινομένου συμπεραίνουμε ότι ισχύει  $(\mathbf{x}, \lambda \mathbf{y}) = \bar{\lambda}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ .
2. Αποδεικνύεται εύκολα ότι τα εσωτερικά γινόμενα που έχουν οριστεί στον ευκλείδειο και στον μοναδιαίο χώρο ικανοποιούν τις τρεις παραπάνω ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου, οπότε είναι καλά ορισμένα.

1.1. ΣΥΜΜΕΤΡΙΚΟΙ, ΘΕΤΙΚΑ ΟΡΙΣΜΕΝΟΙ ΚΑΙ ΗΜΙΟΡΙΣΜΕΝΟΙ ΠΙΝΑΚΕΣ

3. Η ιδιότητα 1 του Ορισμού 1.1 επιτρέπει την εισαγωγή της έννοιας του μήκους του διανύσματος  $\mathbf{x}$  σαν τον μη-αρνητικό αριθμό  $\sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$ . Το μέτρο το συμβολίζουμε με  $\|\mathbf{x}\|$  και συνήθως το καλούμε νόρμα του διανύσματος  $\mathbf{x}$ .

- Δύο διανύσματα  $\mathbf{x}$  και  $\mathbf{y}$  λέμε ότι είναι ορθογώνια αν  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ .
- Ένα σύνολο διανυσμάτων  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  λέμε ότι είναι ορθοκανονικό αν ισχύει ότι

$$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{αν } i = j, \\ 0, & \text{αν } i \neq j, \end{cases} \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

- Τα ορθοκανονικά διανύσματα είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

Απόδειξη.

Έστω  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  ορθοκανονικά διανύσματα και  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  μιγαδικοί αριθμοί. Τότε,

$$\lambda_1 \mathbf{x}_1 + \lambda_2 \mathbf{x}_2 + \dots + \lambda_n \mathbf{x}_n = \mathbf{0}$$

και  $(\lambda_1 \mathbf{x}_1 + \lambda_2 \mathbf{x}_2 + \dots + \lambda_n \mathbf{x}_n, \mathbf{x}_j) = 0$ , για  $j = 1, 2, \dots, n$   
 $\Rightarrow \lambda_j = 0$ , για  $j = 1, 2, \dots, n$ , αφού  $(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$ . □

- Αν ένα ορθοκανονικό σύνολο έχει  $n$  στοιχεία και  $n$  είναι η διάσταση, τότε λέγεται ορθοκανονική βάση.

Ένα παράδειγμα ορθοκανονικής βάσης είναι το σύνολο

$$\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T, \mathbf{e}_2 = [0, 1, 0, \dots, 0]^T, \dots, \mathbf{e}_n = [0, \dots, 0, 1]^T.$$

- Έστω  $A$  ένας μιγαδικός (ή πραγματικός) πίνακας διάστασης  $n$ . Ο συζυγής ανάστροφος του πίνακα  $A$  συμβολίζεται με  $A^*$  και ισούται με  $A^* = \overline{A}^T$ .

**Θεώρημα 1.1.**

Έστω  $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$  (ή  $\mathbb{R}^{n \times n}$ ). Τότε ισχύουν τα ακόλουθα.

1.  $(AB)^* = B^*A^*$
2.  $(A^*)^* = A$
3. Αν ο  $A$  είναι αντιστρέψιμος, τότε και ο  $A^*$  είναι αντιστρέψιμος και ισχύει η σχέση

$$(A^{-1})^* = (A^*)^{-1}.$$

Απόδειξη.

1. Έχουμε ότι

$$(AB)^* = \overline{(AB)^T} = \overline{B^T A^T} = \overline{B^T} \overline{A^T} = B^* A^*.$$

2. Ισχύει ότι

$$(A^*)^* = \overline{\overline{A^T}^T} = (A^T)^T = A.$$

3. Από το 1 έχουμε ότι

$$(A^{-1})^* A^* = (AA^{-1})^* = I^* = I,$$

το οποίο συνεπάγεται ότι ο  $A^*$  είναι αντιστρέψιμος και ισχύει  $(A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$ .

□

### Θεώρημα 1.2.

Ισχύει η ισότητα

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^*\mathbf{y}),$$

για κάθε δύο διανύσματα  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  και για κάθε τετραγωνικό πίνακα  $A$ . Αν  $\mathbf{x} = (x_i)$ ,  $\mathbf{y} = (y_i)$  και  $A = (A_{ij})$ , τότε και τα δύο μέλη της παραπάνω ισότητας είναι ίσα με  $\sum_{i,j} A_{ij} \bar{y}_i x_j$ .

Απόδειξη.

Έστω ο πίνακας  $A = (A_{ij})$  διάστασης  $n$ . Θέτουμε  $A\mathbf{x} = \mathbf{z} = (z_i)$  και έτσι ισχύει ότι  $z_i = \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j$ . Για  $\mathbf{y} = (y_i)$  έχουμε ότι

$$\begin{aligned} (A\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sum_{i=1}^n z_i \bar{y}_i = \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j \right) \bar{y}_i \\ &= \sum_{j=1}^n \left( \sum_{i=1}^n A_{ij} \bar{y}_i \right) x_j \\ &= \sum_{j=1}^n x_j \bar{u}_j = (\mathbf{x}, \mathbf{u}), \end{aligned}$$

όπου  $\mathbf{u} = (u_j)$ ,  $u_j = \sum_{i=1}^n y_i \bar{A}_{ij}$ .

Έτσι,  $\mathbf{u} = A^*\mathbf{y}$  και  $(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^*\mathbf{y})$ .

Επίσης ισχύει ότι  $(\mathbf{x}, A^*\mathbf{y}) = (A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} \bar{y}_i x_j$ .

□



## 1.1. ΣΥΜΜΕΤΡΙΚΟΙ, ΘΕΤΙΚΑ ΟΡΙΣΜΕΝΟΙ ΚΑΙ ΗΜΙΟΡΙΣΜΕΝΟΙ ΠΙΝΑΚΕΣ

---

- Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  λέγεται *συμμετρικός* αν  $A^T = A$ , δηλαδή αν  $A = (A_{ij})$  τότε  $A_{ij} = A_{ji}$  για κάθε  $i$  και  $j$ .
- Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  λέγεται *ερμιτιανός* αν  $A^* = A$ , δηλαδή αν  $A = (A_{ij})$  τότε  $A_{ij} = \overline{A_{ji}}$  για κάθε  $i$  και  $j$ .
- Οποιοδήποτε τετραγωνικό πίνακα  $A$  μπορούμε να τον συσχετίσουμε με τον ερμιτιανό πίνακα  $\frac{1}{2}(A + A^*)$ . Αυτός ο πίνακας καλείται *συμμετρικό μέρος* του  $A$  και συχνά συμβολίζεται με  $ReA$ .

### 1.1.2 Ορθογώνιοι, μοναδιαίοι πίνακες

- Ένας πίνακας  $A$  ονομάζεται *ορθογώνιος* αν ισχύει ότι  $AA^T = I$ .
- Ένας πίνακας  $A$  ονομάζεται *μοναδιαίος* αν ισχύει ότι  $AA^* = I$ .

#### Παρατήρηση 1.2.

Ένας πραγματικός ερμιτιανός πίνακας είναι συμμετρικός και ένας πραγματικός μοναδιαίος πίνακας είναι ορθογώνιος.

#### Θεώρημα 1.3.

Οι στήλες ενός μοναδιαίου πίνακα αποτελούν ορθοκανονική βάση. Αντίστροφα, αν οι στήλες ενός πίνακα αποτελούν μία ορθοκανονική βάση, τότε ο πίνακας είναι μοναδιαίος.

Επιπλέον, ισχύει το ακόλουθο θεώρημα.

#### Θεώρημα 1.4.

1. Έστω οι μοναδιαίοι πίνακες  $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ . Το γινόμενο  $AB$  αυτών των πινάκων είναι επίσης μοναδιαίος πίνακας.
2. Ένας μοναδιαίος πίνακας είναι αντιστρέψιμος και ο αντίστροφός του είναι μοναδιαίος.
3. Αν ένας πίνακας  $U$  είναι μοναδιαίος, τότε και ο πίνακας  $U^*$  είναι μοναδιαίος.
4. Ο ταυτοτικός πίνακας είναι μοναδιαίος.

#### Θεώρημα 1.5. (Θεμελιώδες Θεώρημα για Μοναδιαίους Πίνακες -Fundamental Theorem on Unitary Matrices)

Έστω  $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ . Τότε οι ακόλουθες ιδιότητες είναι ισοδύναμες.

1. Ο πίνακας  $U$  είναι μοναδιαίος.

2. Για κάθε διάνυσμα-στήλη  $\mathbf{x}$  του πίνακα  $U$  ισχύει ότι

$$\|U\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|.$$

3. Για κάθε δύο διανύσματα  $\mathbf{x}$  και  $\mathbf{y}$  ισχύει η ισότητα

$$(U\mathbf{x}, U\mathbf{y}) = (\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

4. Αν τα διανύσματα  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$  αποτελούν ορθοκανονική βάση, τότε και τα διανύσματα  $U\mathbf{u}_1, U\mathbf{u}_2, \dots, U\mathbf{u}_n$  αποτελούν ορθοκανονική βάση.

5. Υπάρχει μία ορθοκανονική βάση  $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_n$  τέτοια ώστε  $U\mathbf{f}_1, U\mathbf{f}_2, \dots, U\mathbf{f}_n$  να είναι επίσης ορθοκανονική βάση.

### Παρατήρηση 1.3.

Αντίστοιχο θεώρημα ισχύει και για τους ορθογώνιους πίνακες σε πραγματικό χώρο.

Παραδείγματα μοναδιαίων και ορθογώνιων πινάκων είναι τα ακόλουθα.

1. Ο ταυτοτικός πίνακας  $I$  είναι ορθογώνιος και μοναδιαίος.
2. Οποιοσδήποτε μεταθετικός πίνακας  $P$  (ένας πίνακας του οποίου ένα στοιχείο σε κάθε γραμμή και σε κάθε στήλη είναι 1 και όλα τα υπόλοιπα στοιχεία είναι 0) είναι ορθογώνιος και μοναδιαίος.
3. Οποιοσδήποτε διαγώνιος πίνακας με διαγώνια στοιχεία  $\pm 1$  είναι ορθογώνιος.
4. Οποιοσδήποτε διαγώνιος πίνακας του οποίου τα διαγώνια στοιχεία είναι μιγαδικοί αριθμοί με μέτρο 1 είναι μοναδιαίος.

### Θεώρημα 1.6.

Η ορίζουσα ενός ορθογώνιου πίνακα ισούται με 1 ή  $-1$ . Το μέτρο της ορίζουσας ενός μοναδιαίου πίνακα είναι ίσο με 1.

Απόδειξη.

Έστω  $V$  ένας ορθογώνιος πίνακας. Τότε  $VV^T = I$ .

Έτσι, προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} \det(VV^T) &= \det I \Rightarrow \det V \det V^T = 1 \\ &\Rightarrow (\det V)^2 = 1, \text{ αφού } \det V = \det V^T \\ &\Rightarrow \det V = \pm 1. \end{aligned}$$

Έστω  $U$  ένας μοναδιαίος πίνακας, τότε  $UU^* = I$  και  $\det U \det U^* = 1$ . Όμως  $\det U^* = \det \overline{U^T} = \det \overline{U} = \overline{\det U}$ , και έτσι προκύπτει ότι  $|\det U| = 1$ .  $\square$

## 1.1. ΣΥΜΜΕΤΡΙΚΟΙ, ΘΕΤΙΚΑ ΟΡΙΣΜΕΝΟΙ ΚΑΙ ΗΜΙΟΡΙΣΜΕΝΟΙ ΠΙΝΑΚΕΣ

Το επόμενο θεώρημα δείχνει πως συμπεριφέρεται ένας ερμιτιανός (ή συμμετρικός) πίνακας  $A$  στο μετασχηματισμό ομοιότητας  $PAP^{-1}$  με  $P$  έναν μοναδιαίο (ή έναν ορθογώνιο) πίνακα.

### Θεώρημα 1.7.

Αν ο πίνακας  $A$  είναι ερμιτιανός και ο  $P$  μοναδιαίος, τότε ο πίνακας  $PAP^{-1}$  είναι και αυτός ερμιτιανός. Αν ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός και ο  $P$  ορθογώνιος, τότε και ο πίνακας  $PAP^{-1}$  είναι συμμετρικός.

Απόδειξη.

Έστω  $A$  ένας ερμιτιανός πίνακας και  $P$  ένας μοναδιαίος. Τότε,

$$(PAP^{-1})^* = (PAP^*)^* = PA^*P^* = PAP^* = PAP^{-1},$$

και έτσι ο πίνακας  $PAP^{-1}$  είναι ερμιτιανός.

Έστω  $A$  ένας συμμετρικός πίνακας και  $P$  ένας ορθογώνιος. Τότε,

$$(PAP^{-1})^T = (PAP^T)^T = PA^T P^T = PAP^T = PAP^{-1},$$

δηλαδή ο πίνακας  $PAP^{-1}$  είναι συμμετρικός. □

### Θεώρημα 1.8.

Οι ιδιοτιμές ενός ερμιτιανού πίνακα (καθώς επίσης και ενός συμμετρικού πίνακα) είναι πραγματικές.

Απόδειξη.

Έστω ο ερμιτιανός πίνακας  $A$  και  $\lambda$  μία ιδιοτιμή του  $A$  με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα  $\mathbf{x}$ . Τότε,  $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ . Έτσι,

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) = (\lambda\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \lambda(\mathbf{x}, \mathbf{x}).$$

Επίσης, ισχύει ότι

$$\overline{(A\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \overline{(\mathbf{x}, A\mathbf{x})} = (A\mathbf{x}, \mathbf{x}),$$

δηλαδή το εσωτερικό γινόμενο  $(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ . Άρα,  $\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \in \mathbb{R} \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$ , αφού  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ . □

### 1.1.3 Θετικά ορισμένοι πίνακες

- Ένας ερμιτιανός ή συμμετρικός πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  (ή  $\mathbb{R}^{n \times n}$ ) ονομάζεται *θετικά ορισμένος* (*positive definite*) αν

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) > 0,$$

για κάθε διάνυσμα  $\mathbf{x} \neq 0$ .

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ

---

- Ένας ερμιτιανός ή συμμετρικός πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  (ή  $\mathbb{R}^{n \times n}$ ) ονομάζεται θετικά ημιορισμένος (*positive semidefinite*) αν

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0,$$

για κάθε διάνυσμα  $\mathbf{x}$ .

Στα Θεωρήματα 1.9 και 1.10 που ακολουθούν, συνοψίζουμε τις πιο σημαντικές ιδιότητες των θετικά ορισμένων και ημιορισμένων πινάκων.

**Θεώρημα 1.9.** (Θεμελιώδες Θεώρημα για Θετικά Ορισμένους Πίνακες - *Fundamental Theorem on Positive Definite Matrices*)

Έστω  $A = (A_{ij}) \in \mathbb{C}^{n \times n}$  ένας ερμιτιανός πίνακας (ή  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ένας συμμετρικός πίνακας). Τότε τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα.

1. Ο  $A$  είναι θετικά ορισμένος.
2. Όλες οι ιδιοτιμές όλων των κύριων υποπινάκων του  $A$  είναι θετικές.
3. Όλες οι κύριες υποορίζουσες του  $A$  είναι θετικές.
4.  $\det A(N_k, N_k) > 0$ , για  $k = 1, 2, \dots, n$ , όπου  $N_k = \{1, 2, \dots, k\}$ , δηλαδή

$$A_{11} > 0, \det \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} > 0,$$

$$\det \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} > 0, \dots, \det A > 0.$$

5. Υπάρχει ένας αντιστρέψιμος κάτω τριγωνικός πίνακας  $T$  τέτοιος ώστε  $A = TT^*$ .
6. Υπάρχει ένας αντιστρέψιμος πίνακας  $C$  τέτοιος ώστε  $A = CC^*$ .
7. Για  $k = 1, \dots, n$  τα αθροίσματα όλων των κύριων υποορίζουσών του  $A$  τάξης  $k$  είναι θετικά.
8. Όλες οι ιδιοτιμές του  $A$  είναι θετικές.
9. Υπάρχει ένας μοναδιαίος πίνακας  $U$  (ορθογώνιος πίνακας  $U$ , αν ο  $A$  είναι πραγματικός) και ένας διαγώνιος πίνακας  $D$  με θετικά διαγώνια στοιχεία, τέτοιοι ώστε  $A = UDU^*$ .

**Παρατήρηση 1.4.**

Η ιδιότητα 4 καλείται κριτήριο του Sylvester για το θετικά ορισμένο ενός πίνακα.

**Θεώρημα 1.10.** (Θεμελιώδες Θεώρημα για Θετικά Ημιορισμένους Πίνακες  
-*Fundamental Theorem on Positive Semidefinite Matrices*)

Έστω  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  ένας ερμιτιανός πίνακας (ή  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ένας συμμετρικός πίνακας). Τότε τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα.

1. Ο  $A$  είναι θετικά ημιορισμένος.
2. Ο πίνακας  $A + \epsilon I$  είναι θετικά ορισμένος για κάθε  $\epsilon > 0$ .
3. Όλες οι ιδιοτιμές όλων των κύριων υποπινάκων του  $A$  είναι μη-αρνητικές.
4. Όλες οι κύριες υποορίζουσες του  $A$  είναι μη-αρνητικές.
5. Για  $k = 1, \dots, n$  τα αθροίσματα όλων των κύριων υποορίζουσών του  $A$  τάξης  $k$  είναι μη-αρνητικά.
6. Όλες οι ιδιοτιμές του  $A$  είναι μη-αρνητικές.
7. Υπάρχει ένας μοναδιαίος πίνακας  $U$  (ορθογώνιος πίνακας  $U$ , αν ο  $A$  είναι πραγματικός) και ένας διαγώνιος πίνακας  $D$  με μη-αρνητικά διαγώνια στοιχεία, τέτοιοι ώστε  $A = UDU^*$ .
8. Υπάρχει ένας τετραγωνικός πίνακας  $C$ , τέτοιος ώστε  $A = CC^*$ .

**Θεώρημα 1.11.**

Ένας θετικά ημιορισμένος πίνακας είναι θετικά ορισμένος αν και μόνο αν είναι αντιστρέψιμος.

*Απόδειξη.*

Από την ιδιότητα 3 του Θεωρήματος 1.9, η ορίζουσα ενός θετικά ορισμένου πίνακα είναι θετική και έτσι είναι αντιστρέψιμος.

Αντίστροφα, αν ένας θετικά ημιορισμένος πίνακας είναι αντιστρέψιμος, τότε  $\det A \neq 0$ . Όλες οι ιδιοτιμές του  $A$  είναι μη-αρνητικές, από την ιδιότητα 6 του Θεωρήματος 1.10, άρα θα πρέπει να είναι θετικές. Έτσι από την ιδιότητα 8 του Θεωρήματος 1.9, ο  $A$  είναι θετικά ορισμένος.  $\square$

Σε αυτό το σημείο, θα παρουσιάσουμε κάποιες επιπλέον ιδιότητες των θετικά ορισμένων και θετικά ημιορισμένων πινάκων.

**Θεώρημα 1.12.**

Αν ο  $A$  είναι ένας θετικά ορισμένος πίνακας, τότε υπάρχει ο αντίστροφος του  $A$  και είναι και αυτός θετικά ορισμένος.

Απόδειξη.

Έστω ένα διάνυσμα  $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ . Αφού ο θετικά ορισμένος πίνακας  $A$  είναι αντιστρέψιμος από την ιδιότητα 4 του Θεωρήματος 1.9, μπορούμε να ορίσουμε το διάνυσμα  $\mathbf{y} = A^{-1}\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ . Έτσι, έχουμε

$$(A^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{x}) = (\mathbf{y}, A\mathbf{y}) = (A\mathbf{y}, \mathbf{y}) > 0.$$

Άρα, ο  $A^{-1}$  είναι θετικά ορισμένος.  $\square$

**Θεώρημα 1.13.**

Αν  $A$  ένας θετικά ημιορισμένος πίνακας και  $\alpha$  ένας μη-αρνητικός αριθμός, τότε και ο πίνακας  $\alpha A$  είναι θετικά ημιορισμένος. Αν  $A$  ένας θετικά ορισμένος πίνακας και  $\alpha$  ένας θετικός αριθμός, τότε και ο πίνακας  $\alpha A$  είναι θετικά ορισμένος.

**Θεώρημα 1.14.**

Αν  $A$  και  $B$  είναι θετικά ημιορισμένοι πίνακες ίδιας διάστασης, τότε και ο πίνακας  $A + B$  είναι θετικά ημιορισμένος. Αν επιπλέον, ο  $A$  είναι θετικά ορισμένος πίνακας, τότε και ο πίνακας  $A + B$  είναι θετικά ορισμένος.

**Θεώρημα 1.15.**

Αν  $A$  ένας θετικά ορισμένος πίνακας και  $G$  ένας αντιστρέψιμος πίνακας, τότε και ο πίνακας  $GAG^*$  είναι θετικά ορισμένος. Αν  $A$  ένας θετικά ημιορισμένος πίνακας και  $G$  ένας (πιθανώς ορθογώνιος) πίνακας τέτοιος ώστε ο  $GA$  να υπάρχει, τότε και ο πίνακας  $GAG^*$  είναι θετικά ημιορισμένος.

Απόδειξη.

Έστω ένα διάνυσμα  $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ . Τότε,

$$(GAG^*\mathbf{x}, \mathbf{x}) = (AG^*\mathbf{x}, G^*\mathbf{x}) = (A\mathbf{y}, \mathbf{y}) > 0$$

αφού  $\mathbf{y} = G^*\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ .

Η δεύτερη περίπτωση, προκύπτει εύκολα χρησιμοποιώντας ότι  $(A\mathbf{y}, \mathbf{y}) \geq 0$ .  $\square$

## 1.2 Παραγοντοποιήσεις πινάκων

Σε αυτή την ενότητα περιγράφουμε κάποιες βασικές παραγοντοποιήσεις πινάκων. Ιδιαίτερη έμφαση θα δώσουμε στη φασματική παραγοντοποίηση (spectral factorization) ενός συμμετρικού πίνακα και στην παραγοντοποίηση ιδιαιζουσών τιμών (singular value decomposition) οποιουδήποτε πίνακα.

**Θεώρημα 1.16.** (Παραγοντοποίηση Schur)

Κάθε πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  μπορεί να εκφραστεί ως εξής

$$A = UTU^*,$$

όπου  $U$  είναι ένας μοναδιαίος πίνακας και  $T$  είναι ένας (γενικά μιγαδικός) άνω τριγωνικός πίνακας.

**Θεώρημα 1.17.**

Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  με πραγματικές ιδιοτιμές. Τότε υπάρχει ένας πραγματικός, ορθογώνιος πίνακας  $V$  και ένας πραγματικός, άνω τριγωνικός πίνακας  $T$  ώστε

$$A = VTV^T.$$

**Θεώρημα 1.18.** (Θεμελιώδες Θεώρημα για Συμμετρικούς Πίνακες - Φασματική Παραγοντοποίηση (Spectral Decomposition))

Κάθε συμμετρικός πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  μπορεί να εκφραστεί ως εξής

$$A = V\Lambda V^T, \quad (1.1)$$

όπου  $V = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n]$  είναι ένας ορθογώνιος πίνακας και  $\Lambda \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ένας διαγώνιος πίνακας. Τα διαγώνια στοιχεία  $\lambda_i$  του  $\Lambda$  είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα  $A$  και οι στήλες  $\mathbf{v}_i$  του πίνακα  $V$  είναι τα ιδιοδιανύσματα του  $A$  (η  $k$ -οστή στήλη του  $V$  αντιστοιχεί στην  $k$ -οστή διαγώνια είσοδο του  $\Lambda$ ).

Απόδειξη.

Αφού ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, από το Θεώρημα 1.8 προκύπτει ότι όλες οι ιδιοτιμές του  $A$  είναι πραγματικές. Χρησιμοποιώντας το Θεώρημα 1.17, μπορούμε να γράψουμε τον πίνακα  $A$  στη μορφή  $A = VTV^T$ , όπου  $V$  είναι ένας ορθογώνιος πίνακας και  $T$  είναι ένας πραγματικός άνω τριγωνικός πίνακας. Αφού ο  $A$  είναι συμμετρικός και ο πίνακας  $T$  είναι ορθογώνιος όμοιος με τον  $A$  θα είναι και συμμετρικός σύμφωνα με το Θεώρημα 1.7. Έτσι, ο  $T$  είναι διαγώνιος (πραγματικός) και ας γράψουμε  $\Lambda = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]$  αντί για  $T$ . Η σχέση

$$A = V\Lambda V^T,$$

γράφεται ισοδύναμα

$$AV = V\Lambda,$$

ή

$$A[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n] = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n] \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow [A\mathbf{v}_1, A\mathbf{v}_2, \dots, A\mathbf{v}_n] = [\lambda_1\mathbf{v}_1, \lambda_2\mathbf{v}_2, \dots, \lambda_n\mathbf{v}_n],$$

ή

$$\begin{aligned} A\mathbf{v}_1 &= \lambda_1\mathbf{v}_1, \\ A\mathbf{v}_2 &= \lambda_2\mathbf{v}_2, \\ &\vdots \\ A\mathbf{v}_n &= \lambda_n\mathbf{v}_n. \end{aligned}$$

Έτσι, η  $k$ -οστή στήλη  $\mathbf{v}_k$  του  $V$  (η οποία είναι διαφορετική από το μηδενικό διάνυσμα) είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του  $A$  που αντιστοιχεί στην  $k$ -οστή διαγώνια είσοδο του  $\Lambda$ .  $\square$

**Παρατήρηση 1.5.**

Αντίστροφα, το γινόμενο  $V\Lambda V^T$  είναι ένας συμμετρικός πίνακας αν  $\Lambda$  είναι ένας πραγματικός διαγώνιος πίνακας και  $V$  είναι ένας ορθογώνιος πίνακας.

**Θεώρημα 1.19.** (Θεμελιώδες Θεώρημα για Ερμιτιανούς Πίνακες - Φασματική Παραγοντοποίηση για Μιγαδικούς Πίνακες)

Κάθε ερμιτιανός πίνακας  $A$  μπορεί να εκφραστεί ως εξής

$$A = U\Lambda U^*,$$

όπου  $U$  είναι ένας μοναδιαίος πίνακας και  $\Lambda$  ένας πραγματικός διαγώνιος πίνακας. Τα διαγώνια στοιχεία του  $\Lambda$  είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα  $A$  (οι οποίες είναι πραγματικές από το Θεώρημα 1.8) και οι στήλες του πίνακα  $U$  είναι τα ιδιοδιανύσματα του  $A$  (η  $k$ -οστή στήλη του  $U$  αντιστοιχεί στο  $k$ -οστό διαγώνιο στοιχείο του  $\Lambda$ ).

Απόδειξη.

Η απόδειξη είναι ανάλογη με αυτή του Θεωρήματος 1.18.  $\square$

**Παρατήρηση 1.6.**

Αντίστροφα, αν  $\Lambda$  είναι ένας πραγματικός διαγώνιος πίνακας και  $U$  είναι ένας μοναδιαίος πίνακας, τότε ο πίνακας  $U\Lambda U^*$  είναι ερμιτιανός.

**Θεώρημα 1.20.**

Έστω  $A$  ένας ερμιτιανός (ή συμμετρικός) πίνακας διάστασης  $n$  με ιδιοτιμές  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ . Τότε  $\lambda_1$  είναι η μέγιστη και  $\lambda_n$  η ελάχιστη τιμή της τετραγωνικής μορφής  $(A\mathbf{x}, \mathbf{x})$  για κανονικοποιημένα διανύσματα  $\mathbf{x}$ . Επιπλέον, η μέγιστη τιμή λαμβάνεται για οποιοδήποτε κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_1$ , και η ελάχιστη λαμβάνεται για οποιοδήποτε κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_n$ .

Απόδειξη.

Από το Θεώρημα 1.19 (από το Θεώρημα 1.18, αν ο  $A$  είναι πραγματικός συμμετρικός πίνακας), υπάρχει ένας μοναδιαίος πίνακας  $U$  (ένας ορθογώνιος πίνακας, αν ο  $A$  είναι πραγματικός) και ένας πραγματικός διαγώνιος πίνακας  $\Lambda$  ώστε



## 1.2. ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΕΙΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

$A = U\Lambda U^*$ . Τα διαγώνια στοιχεία  $d_1, \dots, d_n$  του  $\Lambda$  είναι οι ιδιοτιμές του  $A$ , δηλαδή οι διατεταγμένοι αριθμοί  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Έχουμε

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) = (U\Lambda U^* \mathbf{x}, \mathbf{x}) = (\Lambda U^* \mathbf{x}, U^* \mathbf{x}) = (\Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y}),$$

όπου  $\mathbf{y} = U^* \mathbf{x}$  και επιπλέον  $(\mathbf{y}, \mathbf{y}) = (U^* \mathbf{x}, U^* \mathbf{x}) = (UU^* \mathbf{x}, \mathbf{x}) = (\mathbf{x}, \mathbf{x})$ . Έτσι, το  $(\Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y})$  έχει τις ίδιες τιμές για  $(\mathbf{y}, \mathbf{y}) = 1$  με το  $(A\mathbf{x}, \mathbf{x})$  για  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1$ . Εξετάζουμε τώρα τις τιμές που παίρνει η έκφραση

$$(\Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n d_i |y_i|^2,$$

για διανύσματα  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$  τέτοια ώστε

$$(\mathbf{y}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n |y_i|^2 = 1.$$

Έστω  $\max_k d_k = \lambda_1$  και  $\min_k d_k = \lambda_n$ , οπότε

$$(\Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n d_i |y_i|^2 \leq \sum_{i=1}^n \lambda_1 |y_i|^2 = \lambda_1 \sum_{i=1}^n |y_i|^2 = \lambda_1, \quad (1.2)$$

$$(\Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n d_i |y_i|^2 \geq \sum_{i=1}^n \lambda_n |y_i|^2 = \lambda_n \sum_{i=1}^n |y_i|^2 = \lambda_n. \quad (1.3)$$

Παρατηρούμε ότι η ανισότητα (1.2) γίνεται ισότητα αν και μόνο αν  $y_i = 0$  για κάθε  $i$  τέτοιο ώστε  $d_i < \lambda_1$ , δηλαδή αν και μόνο αν  $\Lambda \mathbf{y} = \lambda_1 \mathbf{y}$ . Επιστρέφοντας στον αρχικό πίνακα  $A$ , το διάνυσμα  $\mathbf{x}$  ικανοποιεί την ισότητα

$$\Lambda U^* \mathbf{x} = \lambda_1 U^* \mathbf{x},$$

ή

$$U\Lambda U^* \mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{x}$$

και έτσι

$$A\mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{x}, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1.$$

Αντίστροφα, αν  $\hat{\mathbf{x}}$  είναι ένα κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_1$ , τότε  $(A\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{x}}) = \lambda_1$ .

Τέλος, έχουμε ότι  $(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) \leq \lambda_1$  για  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1$ , και η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το  $\mathbf{x}$  είναι ένα κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_1$ . Η δεύτερη πρόταση του θεωρήματος έπεται από τη σχέση (1.3) με τον ίδιο τρόπο.  $\square$

**Θεώρημα 1.21.**

Κάθε διαγωνίσιμος (*diagonalizable*) πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  παραγοντοποιείται ως ακολούθως

$$A = Q\Lambda Q^{-1}, \quad (1.4)$$

όπου  $Q = [ \mathbf{q}_1 \quad \mathbf{q}_2 \quad \dots \quad \mathbf{q}_n ] \in \mathbb{C}^{n \times n}$  είναι αντιστρέψιμος,  $\Lambda = \text{diag}[\lambda_1, \dots, \lambda_n] \in$

$\mathbb{C}^{n \times n}$  και  $Q^{-1} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{q}}_1^T \\ \hat{\mathbf{q}}_2^T \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{q}}_n^T \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ,  $\mathbf{q}_i, \hat{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{C}^{n \times 1}$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Τα διαγώνια

στοιχεία  $\lambda_i$  του πίνακα  $\Lambda$  είναι οι ιδιοτιμές του  $A$  οι οποίες είναι πραγματικές ή εμφανίζονται ως ζεύγη συζυγών μιγαδικών. Τα διανύσματα-στήλες του  $Q$  είναι τα δεξιά ιδιοδιανύσματα του  $A$  και τα διανύσματα-γραμμές του  $Q^{-1}$  είναι τα αριστερά ιδιοδιανύσματα του πίνακα  $A$ . Καθώς  $Q^{-1}Q = I_n$ , ισχύει ότι  $\hat{\mathbf{q}}_i^T \mathbf{q}_j = \delta_{ij}$ , για  $i, j = 1, 2, \dots, n$ , όπου  $\delta_{ij}$  είναι το δέλτα του Kronecker.

**Θεώρημα 1.22.** Παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (*Singular value decomposition - SVD*)

Έστω  $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$  πίνακας τάξης  $r$ . Τότε υπάρχει ένας μοναδιαίος (ορθογώνιος, αν ο  $A$  είναι πραγματικός) πίνακας  $U$  διάστασης  $m$ , ένας μοναδιαίος (ορθογώνιος) πίνακας  $V$  διάστασης  $n$  και ένας διαγώνιος πίνακας  $S$  διάστασης  $r$  με θετικά διαγώνια στοιχεία ώστε

$$A = U \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^*, \quad (1.5)$$

όπου τα μηδενικά block συμπληρώνουν τον πίνακα  $S$  ώστε να προκύψει ένας  $m \times n$  πίνακας. Ο πίνακας  $S$  είναι μοναδικά προσδιορισμένος (εκτός από τη σειρά των διαγώνιων στοιχείων του).

Απόδειξη.

Χωρίς περιορισμό της γενικότητας, υποθέτουμε ότι  $m \leq n$ , αλλιώς ασχολούμαστε με τον πίνακα  $A^*$  αντί για τον  $A$ . Ο πίνακας  $A^*A$  ταυτίζεται με τον  $\tilde{A}^*\tilde{A}$ , όπου

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix}$$

είναι ένας τετραγωνικός πίνακας διάστασης  $n$  με  $n - m$  μηδενικές γραμμές. Από την ιδιότητα 8 του Θεωρήματος 1.10, ο  $A^*A$  είναι θετικά ημιορισμένος. Από την ιδιότητα 7 του ίδιου θεωρήματος, υπάρχει ένας μοναδιαίος πίνακας  $V$  και

## 1.2. ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΕΙΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

έναν διαγώνιο πίνακα  $D$  διάστασης  $n$  με μη-αρνητικά διαγώνια στοιχεία  $d_i$  ώστε  $A^*A = VDV^*$ . Έτσι,

$$(AV)^*(AV) = D. \quad (1.6)$$

Μπορούμε να υποθέσουμε ότι τα πρώτα  $p$  διαγώνια στοιχεία του  $D$  (διάστασης  $n$ ) είναι θετικά και τα υπόλοιπα είναι μηδέν, δηλαδή

$$D = \begin{bmatrix} \tilde{D} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

όπου  $\tilde{D} = \text{diag}[d_1, \dots, d_p]$  είναι ένας αντιστρέψιμος πίνακας. Έστω  $\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_p$  τα διανύσματα  $d_i^{1/2}(AV)_i$ , όπου  $(AV)_i$  είναι η  $i$ -οστή στήλη του πίνακα  $AV$ ,  $i = 1, \dots, p$ . Αυτά τα  $m$  διανύσματα  $\mathbf{w}_i$  είναι αμοιβαία ορθογώνια από τη σχέση (1.6) και καθένα από αυτά έχει μέτρο 1. Τώρα, γνωρίζουμε (από Gram-Schmidt ορθοκανονικοποίηση) ότι υπάρχουν διανύσματα  $\mathbf{w}_{p+1}, \dots, \mathbf{w}_m$  τέτοια ώστε ο  $U = [\mathbf{w}_1 \ \mathbf{w}_2 \ \dots \ \mathbf{w}_m]$  να είναι ένας μοναδιαίος πίνακας (διάστασης  $m$ ). Θα δείξουμε ότι ισχύει η σχέση

$$AV = U\hat{D}, \quad (1.7)$$

όπου  $\hat{D} = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$  είναι ένας  $m \times n$  πίνακας,  $S = \text{diag}[\sqrt{d_1}, \dots, \sqrt{d_p}]$ .

Η σχέση (1.7) ισχύει για τις πρώτες  $p$  στήλες του  $AV$  από τον ορισμό των  $\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_p$ . Αλλά οι άλλες στήλες του  $AV$  είναι μηδενικές, από τη σχέση (1.6), το μέτρο του διανύσματος  $(AV)_i$  είναι ίσο με το  $i$ -οστό διαγώνιο στοιχείο του  $D$  για  $i > p$  και έτσι είναι μηδέν.

Από τη σχέση (1.7) έπεται ότι  $A = U\hat{D}V^*$ . Ξέρουμε όμως ότι  $\text{rank}A = \text{rank}\hat{D} = p$ , δηλαδή  $p = r$  και η σχέση (1.7) αποδείχθηκε.

Η μοναδικότητα του  $S$  έπεται από το γεγονός ότι τα διαγώνια στοιχεία του  $S$  είναι οι μη-αρνητικές τετραγωνικές ρίζες των ιδιοτιμών του  $A^*A$ .  $\square$

### Παρατήρηση 1.7.

Τα διαγώνια στοιχεία του  $S$  ονομάζονται *ιδιάζουσες τιμές (singular values)* του πίνακα  $A$  (αν ο  $A$  είναι ένας τετραγωνικός πίνακας, ακόμα και τα υπόλοιπα μηδενικά διαγώνια στοιχεία του πίνακα ανάμεσα στους  $U$  και  $V^*$  στο δεξί μέλος της (1.5), θεωρούνται ιδιάζουσες τιμές).

Στην περίπτωση που ο πίνακας  $A$  είναι πραγματικός, τετραγωνικός και πλήρους τάξης (full rank), η παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών μπορεί να εκφραστεί όπως φαίνεται στην ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 1.1.**

Η παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (SVD) του πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  πλήρους τάξης (full rank) είναι

$$A = U\Sigma V^T, \quad (1.8)$$

όπου  $U = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n]$ ,  $V = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n]$  είναι ορθογώνιοι πίνακες και ο διαγώνιος πίνακας  $\Sigma = \text{diag}[\sigma_1, \dots, \sigma_n]$  περιέχει τις ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$  διατεταγμένες σε φθίνουσα σειρά  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n > 0$ .

**Διακριτή συνθήκη Picard**

Θεωρούμε το γραμμικό σύστημα της μορφής  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ . Η διακριτή συνθήκη Picard (discrete Picard condition) εκφράζεται με βάση τις ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  και τα αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα του πίνακα  $A$ . Η συνθήκη αυτή καταγράφεται στο ακόλουθο λήμμα, [43], [44, σελ. 81].

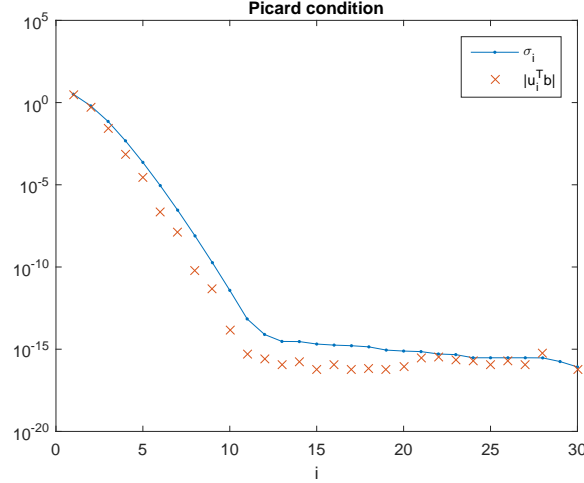
**Λήμμα 1.1.**

Το διάνυσμα  $\mathbf{b}$  ικανοποιεί τη διακριτή συνθήκη Picard αν τα γινόμενα κατά απόλυτη τιμή  $|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|$  φθίνουν γρηγορότερα στο μηδέν από ότι οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  του πίνακα  $A$ , όπου  $\mathbf{u}_i$  είναι τα αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα του πίνακα  $A$ .

Στο παρακάτω παράδειγμα, σχεδιάζουμε τις ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  του πίνακα δοκιμής  $A$  και τα γινόμενα κατά απόλυτη τιμή  $|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|$ , για τις τιμές του δείκτη  $i$ .

**Παράδειγμα 1.1.** Η διακριτή συνθήκη Picard

Θεωρούμε το πρόβλημα δοκιμής Baart με πίνακα  $A$  μεγέθους  $30 \times 30$ , που προκύπτει από τη διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους. Αυτό το πρόβλημα μπορεί να βρεθεί στο πακέτο “Regularization Tools” του Hansen [45], που αφορά διακριτά κακώς τοποθετημένα προβλήματα της μορφής  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ , όπου ο  $A$  έχει πολύ κακή κατάσταση. Ο πίνακας  $A$  αυτού του προβλήματος έχει δείκτη κατάστασης  $\kappa(A) = 2.8401e17$  και το διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{30}$  ικανοποιεί τη διακριτή συνθήκη Picard. Πράγματι, όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στο παρακάτω γράφημα τα γινόμενα κατά απόλυτη τιμή  $|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|$  φθίνουν γρηγορότερα στο μηδέν από ότι οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  του πίνακα  $A$ .



Σχήμα 1.1: Η διακριτή συνθήκη Picard για το πρόβλημα δοκιμής Baart.

### 1.3 Κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss

Δοθέντος ενός μέτρου  $\alpha$  στο διάστημα  $[a, b]$  και μίας συνάρτησης  $f$  (τέτοια ώστε το Riemann-Stieltjes ολοκλήρωμά της και όλες οι ροπές  $f(t_j)$  και  $f(z_k)$  να υπάρχουν), ο γενικός τύπος για τον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss είναι

$$I[f] = \int_a^b f(\lambda) d\alpha(\lambda) = \sum_{j=1}^N \omega_j f(t_j) + \sum_{\kappa=1}^M v_\kappa f(z_\kappa) + R[f], \quad (1.9)$$

όπου τα βάρη  $\{\omega_j\}_{j=1}^N$ ,  $\{v_\kappa\}_{\kappa=1}^M$  και οι κόμβοι  $\{t_j\}_{j=1}^N$  είναι άγνωστοι ενώ οι κόμβοι  $\{z_\kappa\}_{\kappa=1}^M$  είναι προκαθορισμένοι. Το  $R[f]$  είναι το υπόλοιπο, το οποίο συνήθως δεν είναι γνωστό ακριβώς, [38].

- Αν  $M = 0$ , τότε είναι ο γνωστός κανόνας του Gauss χωρίς προκαθορισμένους κόμβους.
- Αν  $M = 1$  και  $z_1 = a$  ή  $z_1 = b$ , είναι ο κανόνας Gauss-Radau με έναν προκαθορισμένο κόμβο.
- Αν  $M = 2$  και  $z_1 = a$  και  $z_2 = b$ , τότε είναι ο κανόνας Gauss-Lobatto με δύο προκαθορισμένους κόμβους.

Ο όρος  $R[f]$  είναι το υπόλοιπο το οποίο γενικά δεν μπορεί να υπολογιστεί απευθείας. Αν το μέτρο  $\alpha$  είναι μία θετική αύξουσα συνάρτηση και αν η  $f$  είναι αρκετά ομαλή, είναι γνωστό ότι το υπόλοιπο δίνεται από τον τύπο, [61],

$$R[f] = \frac{f^{(2N+M)}(\eta)}{(2N+M)!} \int_a^b \prod_{\kappa=1}^M (\lambda - z_\kappa) \left[ \prod_{j=1}^N (\lambda - t_j) \right]^2 d\alpha(\lambda), \quad a < \eta < b. \quad (1.10)$$

Από τον παραπάνω τύπο παρατηρούμε ότι το υπόλοιπο  $R[f]$  για τον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss ( $M = 0$ ) είναι ομόσημο με το  $f^{(2N)}(\eta)$ .

Ο κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss συνδέεται με τα ορθογώνια πολυώνυμα. Από τη θεωρία των ορθογώνιων πολυωνύμων, γνωρίζουμε ότι μία ακολουθία πολυωνύμων  $\{p_i(\lambda)\}_{i=0}^\infty$  μπορεί να προσδιοριστεί έτσι ώστε τα πολυώνυμα να είναι ορθοκανονικά ως προς μέτρο  $\alpha(\lambda)$ , δηλαδή ισχύει ότι

$$\int_a^b p_i(\lambda) p_j(\lambda) d\alpha(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{αν } i = j \\ 0, & \text{αν } i \neq j \end{cases},$$

όπου το πολυώνυμο  $p_\kappa$  είναι ακριβώς βαθμού  $\kappa$  και υποθέτοντας ότι  $\int d\alpha = 1$ .

Η ακολουθία των ορθοκανονικών πολυωνύμων ικανοποιεί την αναδρομική σχέση τριών όρων

$$\gamma_j p_j(\lambda) = (\lambda - \alpha_j) p_{j-1}(\lambda) - \gamma_{j-1} p_{j-2}(\lambda), \quad j = 1, 2, \dots, \quad (1.11)$$

με  $p_{-1}(\lambda) \equiv 0$  και  $p_0(\lambda) \equiv 1$  (υποθέτουμε ότι γνωρίζουμε τους συντελεστές  $\alpha_j$  και  $\gamma_j$ ).

Η σχέση (1.11) μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\lambda p_{j-1}(\lambda) = \gamma_{j-1} p_{j-2}(\lambda) + \alpha_j p_{j-1}(\lambda) + \gamma_j p_j(\lambda).$$

Τώρα, μπορούμε να γράψουμε την αναδρομική σχέση σε μορφή πινάκων

$$\lambda P(\lambda) = J_N P(\lambda) + \gamma_N p_N(\lambda) \mathbf{e}_N,$$

όπου

$$P(\lambda) = \begin{bmatrix} p_0(\lambda) & p_1(\lambda) & \dots & p_{N-1}(\lambda) \end{bmatrix}^T, \\ \mathbf{e}_N = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}^T,$$

$$J_N = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & & & & \\ \gamma_1 & \alpha_2 & \gamma_2 & & & \\ & \gamma_2 & \alpha_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \gamma_{N-1} & \\ & & & \gamma_{N-1} & \alpha_N & \end{bmatrix}. \quad (1.12)$$

Ο πίνακας  $J_N$  λέγεται πίνακας Jacobi και οι ιδιοτιμές του ονομάζονται τιμές Ritz. Οι ιδιοτιμές του  $J_N$  είναι επίσης οι ρίζες του πολυωνύμου  $p_N$ .

Αξίζει να σημειωθεί ότι όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα  $J_N$  είναι πραγματικές (καθώς ο  $J_N$  είναι συμμετρικός) και απλές (γιατί  $\gamma_i \neq 0, i = 1, \dots, N - 1$ ).

**Θεώρημα 1.23.**

Οι ιδιοτιμές του  $J_N$  είναι οι κόμβοι  $t_j$  του κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss ( $M=0$ ). Τα βάρη  $\omega_j$  είναι τα τετράγωνα των πρώτων στοιχείων των κανονικοποιημένων ιδιοδιανυσμάτων του  $J_N$ .

Στον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss, έχουμε ότι το υπόλοιπο  $R_G[f]$  δίνεται από τη σχέση (1.10) βάζοντας  $M = 0$ , δηλαδή

$$R_G[f] = \frac{f^{(2N)}(\eta)}{(2N)!} \int_a^b \left[ \prod_{j=1}^N (\lambda - t_j) \right]^2 d\alpha(\lambda). \quad (1.13)$$

Η προσέγγιση του ολοκληρώματος  $I[f]$  που παίρνουμε από τον κανόνα του Gauss είναι ένα κάτω φράγμα του  $I[f]$ , αν το υπόλοιπο  $R_G[f]$  είναι θετικό και από τον τύπο (1.13) φαίνεται ότι αρκεί  $f^{(2n)}(\xi) > 0, \forall n, \forall \xi, a < \xi < b$ . Αυτό γίνεται αντιληπτό στο ακόλουθο θεώρημα.

**Θεώρημα 1.24.**

Εστω συνάρτηση  $f$  τέτοια ώστε  $f^{(2n)}(\xi) > 0, \forall n, \forall \xi \in (a, b)$  και

$$L_G[f] = \sum_{j=1}^N \omega_j f(t_j).$$

Ο κανόνας του Gauss είναι ακριβής για πολυώνυμα βαθμού μικρότερου ή ίσου του  $2N - 1$  και έχουμε ότι

$$L_G[f] \leq I[f].$$

Για τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης των Gauss-Radau και Gauss-Lobatto προσαρμόζουμε τον πίνακα Jacobi  $J_N$  που δίνεται από τη σχέση (1.12) έτσι ώστε η μία ιδιοτιμή του να είναι το  $a$  (ή το  $b$ ) ή να έχει ιδιοτιμές τα  $a$  και  $b$ , αντίστοιχα, [38].

Στον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης των Gauss-Radau, έχουμε ότι το υπόλοιπο  $R_{GR}[f]$  δίνεται από τη σχέση (1.10) βάζοντας  $M = 1$ , δηλαδή

$$R_{GR}[f] = \frac{f^{(2N+1)}(\eta)}{(2N+1)!} \int_a^b (\lambda - z_1) \left[ \prod_{j=1}^N (\lambda - t_j) \right]^2 d\alpha(\lambda), \quad (1.14)$$

όπου  $z_1 = a$  ή  $b$ .

Αν γνωρίζουμε το πρόσημο των παραγώγων της  $f$ , μπορούμε να φράξουμε το ολοκλήρωμα  $I[f]$ . Αυτό φαίνεται στο ακόλουθο θεώρημα.

**Θεώρημα 1.25.**

Εστω συνάρτηση  $f$  τέτοια ώστε  $f^{(2n+1)}(\xi) < 0, \forall n, \forall \xi \in (a, b)$ ,

$$U_{GR}[f] = \sum_{j=1}^N \omega_j^a f(t_j^a) + v_1^a f(a),$$

με  $\omega_j^a, v_1^a, t_j^a$ , τα βάρη και οι κόμβοι υπολογισμένοι με  $z_1 = a$ ,

$$L_{GR}[f] = \sum_{j=1}^N \omega_j^b f(t_j^b) + v_1^b f(b),$$

με  $\omega_j^b, v_1^b, t_j^b$ , τα βάρη και οι κόμβοι υπολογισμένοι με  $z_1 = b$ .

Ο κανόνας των Gauss-Radau ολοκληρώνει ακριβώς πολυώνυμα βαθμού μικρότερου ή ίσου του  $2N$  και ισχύει η ανισότητα

$$L_{GR}[f] \leq I[f] \leq U_{GR}[f].$$

**Παρατήρηση 1.8.**

Αν το πρόσημο των παραγώγων της  $f$  είναι θετικό, δηλαδή  $f^{(2n+1)}(\xi) > 0, \forall n, \forall \xi \in (a, b)$  τότε τα φράγματα είναι ανάποδα, δηλαδή

$$U_{GR}[f] \leq I[f] \leq L_{GR}[f],$$

όπου τα  $L_{GR}[f]$  και  $U_{GR}[f]$  είναι ορισμένα στο παραπάνω θεώρημα.

Στον κανόνα των Gauss-Lobatto, το υπόλοιπο  $R_{GL}[f]$  δίνεται από τη σχέση (1.10) βάζοντας  $M = 2$ , δηλαδή

$$R_{GL}[f] = \frac{f^{(2N+2)}(\eta)}{(2N+2)!} \int_a^b (\lambda - a)(\lambda - b) \left[ \prod_{j=1}^N (\lambda - t_j) \right]^2 d\alpha(\lambda). \quad (1.15)$$

Το ολοκλήρωμα  $I[f]$  φράσσεται άνω από την προσέγγιση του  $I[f]$  που υπολογίζεται με τον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης των Gauss-Lobatto, αν  $f^{(2n)}(\xi) > 0, \forall n, \forall \xi \in (a, b)$ . Συγκεκριμένα, έχουμε το ακόλουθο θεώρημα.



**Θεώρημα 1.26.**

Εστω συνάρτηση  $f$  τέτοια ώστε  $f^{(2n)}(\xi) > 0, \forall n, \forall \xi \in (a, b)$  και

$$U_{GL}[f] = \sum_{j=1}^N \omega_j f(t_j) + v_1 f(a) + v_2 f(b),$$

με  $t_j, \omega_j, v_1, v_2$ , να είναι οι κόμβοι και τα βάρη υπολογισμένα με  $a$  και  $b$  τους προκαθορισμένους κόμβους.

Ο κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης των Gauss-Lobatto είναι ακριβής για πολώνυμα βαθμού μικρότερου ή ίσου του  $2N + 1$  και ισχύει η ανισότητα

$$I[f] \leq U_{GL}[f].$$

## 1.4 Η μέθοδος Arnoldi και ο συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos

Δοθέντος ενός πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , ενός μη-μηδενικού διανύσματος  $\mathbf{v}$  διάστασης  $n$  και ενός ακεραίου  $m \leq n$ , δημιουργούνται ένα σύνολο από  $(m + 1)$  ορθοκανονικά διανύσματα  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{m+1}\}$  και ένας  $(m + 1) \times m$  άνω Hessenberg πίνακας  $\tilde{H}_m$  ώστε να ισχύει η σχέση

$$AV_m = V_{m+1}\tilde{H}_m, \quad (1.16)$$

όπου  $V_m = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m]$  και  $V_{m+1} = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m, \mathbf{v}_{m+1}]$ , [22].

---

**Αλγόριθμος:** Μέθοδος Arnoldi

---

**Είσοδοι:**

1.  $A$ ,  $n \times n$  πίνακας
2.  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ ,  $n \times 1$  διάνυσμα
3.  $m < n$ , θετικός ακέραιος

**Έξοδοι:**

1. ένα σύνολο από  $m + 1$  ορθοκανονικά διανύσματα  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{m+1}\}$
2. ένας  $(m + 1) \times m$  άνω Hessenberg πίνακας  $\tilde{H}_m = (H_{ij})$

Βήμα 0: Κανονικοποίηση του διανύσματος  $\mathbf{v}$

$$\text{Θέσε } \mathbf{v}_1 = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|_2}$$

Βήμα 1: for  $k = 1, 2, \dots, m$

```

 $\hat{\mathbf{v}} = A\mathbf{v}_k$ 
for  $j = 1, 2, \dots, k$ 
     $H_{j,k} = \mathbf{v}_j^T \hat{\mathbf{v}}$ 
     $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{v}} - H_{j,k} \mathbf{v}_j$ 
end
 $H_{k+1,k} = \|\hat{\mathbf{v}}\|_2$ , if  $H_{k+1,k} = 0$  stop
 $\mathbf{v}_{k+1} = \frac{\hat{\mathbf{v}}}{H_{k+1,k}}$ 
end

```

Η συνολική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου Arnoldi είναι  $O(n^2m + nm^2)$ .

Στην περίπτωση που ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, ο αλγόριθμος Arnoldi λέγεται συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos, [22]. Σε αυτή την περίπτωση, ο άνω Hessenberg πίνακας  $\tilde{H}_m$  γίνεται συμμετρικός, τριδιαγώνιος πίνακας  $\tilde{T}_m$  ο οποίος γράφεται στην ακόλουθη μορφή

$$\tilde{T}_m = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \dots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \beta_m \\ 0 & \dots & \beta_m & \alpha_{m+1} \end{bmatrix}.$$

Η σχέση (1.16) που ισχύει στη μέθοδο Arnoldi ανάγεται στη μορφή

$$AV_m = V_{m+1}\tilde{T}_m. \quad (1.17)$$

Έτσι, προκύπτει ο ακόλουθος αλγόριθμος.

---

**Αλγόριθμος:** Συμμετρικός Αλγόριθμος Lanczos

---

**Είσοδοι:**

1.  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  συμμετρικός πίνακας
2.  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ ,  $n \times 1$  διάνυσμα
3.  $m < n$ , θετικός ακέραιος

**Έξοδοι:**

1. ένα σύνολο από  $m + 1$  ορθοκανονικά διανύσματα  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{m+1}\}$
2. τις εισόδους  $\alpha_j$  και  $\beta_j$  του συμμετρικού και τριδιαγώνιου πίνακα  $\tilde{T}_m$

Βήμα 0: Θέσε  $\mathbf{v}_0 = \mathbf{0}$ ,  $\beta_0 = 0$ ,  $\mathbf{v}_1 = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|_2}$

Βήμα 1: for  $j = 1, 2, \dots, m + 1$

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{v}}_{j+1} &= A\mathbf{v}_j - \beta_{j-1}\mathbf{v}_{j-1} \\
 \alpha_j &= \mathbf{v}_j^T \hat{\mathbf{v}}_{j+1} \\
 \hat{\mathbf{v}}_{j+1} &= \hat{\mathbf{v}}_{j+1} - \alpha_j \mathbf{v}_j \\
 \beta_j &= \|\hat{\mathbf{v}}_{j+1}\|_2, \text{ if } \beta_j = 0 \text{ stop} \\
 \mathbf{v}_{j+1} &= \frac{\hat{\mathbf{v}}_{j+1}}{\beta_j} \\
 \text{end}
 \end{aligned}$$

Η συνολική πολυπλοκότητα του συμμετρικού αλγορίθμου Lanczos είναι  $O(mn^2)$ .

## 1.5 Ο αλγόριθμος block Lanczos

Ο αλγόριθμος block Lanczos είναι επέκταση του κλασικού αλγορίθμου Lanczos στον οποίο αντί για ένα αρχικό διάνυσμα διάστασης  $n$  χρησιμοποιούμε έναν ορθοκανονικό (orthonormal) πίνακα  $n \times q$ , όπου  $q$  είναι ένας φυσικός αριθμός για τον οποίο ισχύει  $0 < q \leq \frac{n}{2}$ . Ο αλγόριθμος αυτός εισήχθη από τους Gene H. Golub και Richard Underwood το 1977 στην εργασία [40].

Ξεκινώντας από έναν αρχικό  $n \times q$  ορθοκανονικό πίνακα  $Q_1$ , ο σκοπός είναι να κατασκευάσουμε μία ακολουθία ορθοκανονικών  $n \times q$  πινάκων  $Q_2, Q_3, \dots, Q_s$  ώστε ο διανυσματικός χώρος που παράγεται από τις στήλες αυτών των πινάκων να περιέχει τις στήλες των πινάκων  $Q_1, AQ_1, A^2Q_1, \dots, A^sQ_1$ . Η διάσταση  $q$  του block πίνακα δεν μπορεί να ξεπερνά το  $\frac{n}{2}$  και ο αριθμός των επαναλήψεων  $s$  είναι το πολύ  $\frac{n}{q}$ . Πιο συγκεκριμένα, ισχύουν οι ανισότητες

$$0 < q \leq \frac{n}{2} \text{ και } 1 < s \leq \frac{n}{q}.$$

Από τη δεύτερη ανισότητα, παρατηρούμε ότι όσο μεγαλύτερη είναι η διάσταση του block τόσο μικρότερο είναι το πλήθος των επαναλήψεων που θα χρειαστούν για τον αλγόριθμο block Lanczos.

Δοθέντος ενός συμμετρικού πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , μπορούμε να παράγουμε έναν block τριδιαγώνιο, συμμετρικό πίνακα  $T_s$  διάστασης  $qs < n$ , όπου  $q$  είναι η διάσταση του block και  $s$  είναι ο αριθμός των επαναλήψεων, δηλαδή ο αριθμός των διαγώνιων block πινάκων που θα έχει ο πίνακας  $T_s$ . Σε αυτή την περίπτωση, ο αλγόριθμος block Lanczos προκύπτει από τη σχέση

$$AQ = QT_s, \tag{1.18}$$

όπου  $Q = [Q_1 \ Q_2 \ \cdots \ Q_s]$  με  $Q_i^T Q_j = \delta_{ij} I_q$  (όπου  $I_q$  είναι ο ταυτοτικός πίνακας διάστασης  $q$ ) και

$$T_s = \begin{bmatrix} \Omega_1 & \Gamma_1^T & & & \\ \Gamma_1 & \Omega_2 & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & \Gamma_{s-1}^T & \\ & & & \Gamma_{s-1} & \Omega_s \end{bmatrix}. \quad (1.19)$$

Τα διαγώνια block  $\Omega_k$  είναι συμμετρικοί  $q \times q$  πίνακες, οι πίνακες  $\Gamma_k$  είναι  $q \times q$  άνω τριγωνικοί και οι  $Q_k$  είναι  $n \times q$  πίνακες, [53].

Αντικαθιστώντας τον  $Q$  και τον  $T_s$  στη σχέση (1.18) προκύπτει

$$A[Q_1 \ Q_2 \ \cdots \ Q_s] = [Q_1 \ Q_2 \ \cdots \ Q_s] \begin{bmatrix} \Omega_1 & \Gamma_1^T & & & \\ \Gamma_1 & \Omega_2 & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & \Gamma_{s-1}^T & \\ & & & \Gamma_{s-1} & \Omega_s \end{bmatrix}. \quad (1.20)$$

Συγκρίνοντας το αριστερό και το δεξί μέλος της σχέσης (1.20), έχουμε

$$AQ_k = Q_{k-1} \Gamma_{k-1}^T + Q_k \Omega_k + Q_{k+1} \Gamma_k, \quad k = 1, \dots, s-1, \quad (1.21)$$

όπου ο  $\Gamma_0$  ορίζεται ως ο  $q \times q$  μηδενικός πίνακας.

Πολλαπλασιάζοντας τη σχέση (1.21) με  $Q_k^T$  και λαμβάνοντας υπόψιν την ορθογωνιότητα των  $Q_i$ , έχουμε

$$\Omega_k = Q_k^T A Q_k, \quad k = 1, \dots, s.$$

Θέτοντας

$$R_k = A Q_k - Q_k \Omega_k - Q_{k+1} \Gamma_k,$$

παρατηρούμε από τη σχέση (1.21) ότι  $Q_{k+1} \Gamma_k$  είναι η  $QR$  παραγοντοποίηση του  $R_k$ . Έτσι, οδηγούμαστε στον ακόλουθο αλγόριθμο block Lanczos για πραγματικό, συμμετρικό πίνακα, [53].

---

**Αλγόριθμος:** Αλγόριθμος block Lanczos

---

**Είσοδοι:**

1.  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  συμμετρικός
2.  $Q_1$   $n \times q$  ορθοκανονικός πίνακας ( $Q_1^T Q_1 = I_q$ )
3.  $s \leq \frac{n}{q}$  θετικός ακέραιος

**Έξοδοι:**

1.  $Q = [Q_1 \ \cdots \ Q_s]$  ώστε  $Q_i^T Q_j = \delta_{ij} I_q$
2. ο block τριδιαγώνιος πίνακας  $T_s$  όπως ορίζεται στην (1.19)

Θέσε  $Q_0$  να είναι  $n \times q$  μηδενικός πίνακας.

for  $k = 1, 2, \dots, s-1$

$$\Omega_k = Q_k^T A Q_k$$

$$R_k = A Q_k - Q_k \Omega_k - Q_{k-1} \Gamma_{k-1}^T$$

$$Q_{k+1} \Gamma_{k+1} = R_k$$

end

$$\Omega_s = Q_s^T A Q_s$$

Η συνολική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου block Lanczos είναι  $\mathcal{O}(4sq^2n + 2sqn^2 - (s-1)\frac{q^3}{3})$ .

## 1.6 Ανισότητες Kantorovich και ροπές (moments)

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ένας αντιστρέψιμος, συμμετρικός πίνακας και  $\mathbf{x}$  ένα μη-μηδενικό διάνυσμα στον  $\mathbb{R}^n$ . Θεωρούμε την ακολουθία

$$c_k = (\mathbf{x}, A^k \mathbf{x}), \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Αυτού του είδους η ακολουθία θα ονομάζεται *βαθμωτή ακολουθία ροπών* (scalar moment sequence) [17].

Θέτουμε τον  $k \times k$  πίνακα

$$G_k^{(i)} = \begin{bmatrix} c_i & \cdots & c_{i+k-1} \\ \vdots & & \vdots \\ c_{i+k-1} & \cdots & c_{i+2k-2} \end{bmatrix}$$

και την ορίζουσά του  $H_k^{(i)} = \det G_k^{(i)}$ .

Αν θέσουμε  $\mathbf{x}_i = A^i \mathbf{x}$ , τότε  $c_k = (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  για κάθε  $i, j$  τέτοια ώστε  $i+j = k$ . Πράγματι, έχουμε

$$\begin{aligned} c_k &= (\mathbf{x}, A^k \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A^k \mathbf{x} = \mathbf{x}^T A^i A^j \mathbf{x}, \quad i+j = k \\ &= (A^i \mathbf{x})^T A^j \mathbf{x} = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j = (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \end{aligned}$$

Τώρα, θέτοντας  $X_k = [\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_{k-1}]$ , ο πίνακας  $G_k^{(0)}$  γράφεται  $G_k^{(0)} = X_k^T X_k$  και είναι ένας πίνακας Gram (Gram matrix), ο οποίος είναι συμμετρικός

και θετικά ημιορισμένος. Γνωρίζουμε ότι σε ένα διανυσματικό χώρο διάστασης  $n$  υπάρχουν το πολύ  $n$  γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα. Έτσι, υπάρχει  $r \leq n$  ( $r$  είναι η διάσταση του διανυσματικού χώρου που παράγεται από τα διανύσματα  $\mathbf{x}_i$ ) τέτοιο ώστε

$$H_k^{(0)} = \begin{cases} > 0, & k = 1, \dots, r, \\ = 0, & k > r. \end{cases}$$

Επιπλέον, ο  $G_k^{(2i)}$  είναι και αυτός πίνακας Gram και μάλιστα ισχύει  $H_k^{(2i)} \geq 0$ , ακόμα και αν  $i < 0$  αφού  $A^{-1}$  είναι συμμετρικός, [17].

Αν ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, η τετραγωνική ρίζα  $A^{1/2}$  του  $A$  υπάρχει. Έτσι, όλοι οι πίνακες  $G_k(i)$  είναι συμμετρικοί και θετικά ημιορισμένοι και αυτό συνεπάγεται ότι  $H_k^{(i)} \geq 0$ , ακόμα και αν  $i < 0$  αφού  $A^{-1}$  είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Έτσι έχουμε το ακόλουθο θεώρημα, [17].

**Θεώρημα 1.27.**

1. Αν ο  $A$  είναι συμμετρικός, τότε για κάθε  $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  ισχύει

$$c_{2i}c_{2i+2} - c_{2i+1}^2 \geq 0. \tag{1.22}$$

2. Αν ο  $A$  είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, τότε για κάθε  $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , ισχύει

$$c_i c_{i+2} - c_{i+1}^2 \geq 0 \tag{1.23}$$

και η ακολουθία  $(c_{i+1}/c_i)$  είναι αύξουσα.

*Απόδειξη.*

Οι δύο αυτές ανισότητες αποδεικνύονται αμέσως λαμβάνοντας υπόψιν ότι οι υποορίζουσες των πινάκων  $G_k^{(2i)}$  και  $G_k^{(i)}$  αντίστοιχα είναι μεγαλύτερες ή ίσες του μηδενός.

Από την ανισότητα (1.23) προκύπτει ότι

$$c_{i+1}^2 \leq c_i c_{i+2} \Rightarrow \frac{c_{i+1}}{c_i} \leq \frac{c_{i+2}}{c_{i+1}},$$

δηλαδή η ακολουθία  $(c_{i+1}/c_i)$  είναι αύξουσα. □

**Ανισότητες Kantorovich για  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  τυχαίο**

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας με μέγιστη ιδιοτιμή  $\lambda_{max}$  και ελάχιστη ιδιοτιμή  $\lambda_{min}$ . Τότε,

$$\|\mathbf{x}\|_2^4 \geq \frac{4\lambda_{min}\lambda_{max}}{(\lambda_{min} + \lambda_{max})^2} (\mathbf{x}^T A \mathbf{x})(\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}), \tag{1.24}$$

## 1.6. ΑΝΙΣΟΤΗΤΕΣ KANTOROVICH ΚΑΙ ΡΟΠΕΣ (MOMENTS)

για κάθε  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ . Αυτή είναι η κλασική ανισότητα Kantorovich, [50].

Χρησιμοποιώντας τις ροπές  $c_k = (\mathbf{x}, A^k \mathbf{x})$  του πίνακα  $A$  έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} &= (\mathbf{x}, A \mathbf{x}) = c_1, \\ \mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x} &= (\mathbf{x}, A^{-1} \mathbf{x}) = c_{-1}, \\ \|\mathbf{x}\|_2^2 &= (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = c_0, \end{aligned}$$

και έτσι η κλασική ανισότητα Kantorovich (1.24) γράφεται στη μορφή

$$\begin{aligned} c_0^2 &\geq \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})^2} c_1 c_{-1} \\ \Rightarrow \frac{c_0^2}{c_1 c_{-1}} &\geq \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})^2}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Η ανισότητα Kantorovich μπορεί να γενικευτεί, όπως φαίνεται στο παρακάτω θεώρημα, [17].

### Θεώρημα 1.28.

Αν ο  $A$  είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, τότε για κάθε  $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , ισχύει

$$1 \geq \frac{c_{i+1}^2}{c_i c_{i+2}} \geq \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})^2}, \quad (1.26)$$

όπου  $\lambda_{\min}$  και  $\lambda_{\max}$  είναι η ελάχιστη και η μέγιστη ιδιοτιμή του πίνακα  $A$  αντίστοιχα.

Απόδειξη.

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, θετικά ορισμένος και ότι  $c_k = (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  με  $i + j = k$  (όπως καταγράφηκε παραπάνω) έχουμε ότι

$$\begin{aligned} c_{i+1}^2 &= (\mathbf{x}, A^{i+1} \mathbf{x})^2 \\ &= (A^{i/2} \mathbf{x}, A^{(i+2)/2} \mathbf{x})^2, \quad i + 1 = \frac{i}{2} + \frac{i + 2}{2} \\ &\leq \|A^{i/2} \mathbf{x}\|_2^2 \|A^{(i+2)/2} \mathbf{x}\|_2^2, \text{ από Cauchy-Schwarz} \\ &= (A^{i/2} \mathbf{x}, A^{i/2} \mathbf{x})(A^{(i+2)/2} \mathbf{x}, A^{(i+2)/2} \mathbf{x}) \\ &= (\mathbf{x}, A^i \mathbf{x})(\mathbf{x}, A^{i+2} \mathbf{x}) \\ &= c_i c_{i+2} \\ \Rightarrow 1 &\geq \frac{c_{i+1}^2}{c_i c_{i+2}}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Το δεύτερο μέρος της ανισότητας (1.26) αποδεικνύεται εφαρμόζοντας την κλασική ανισότητα Kantorovich (1.25) με  $\mathbf{y} = \sqrt{A^{i+1}}\mathbf{x}$ . Έτσι,

$$\begin{aligned} c_0 &= (\mathbf{y}, \mathbf{y}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} = \mathbf{x}^T \sqrt{A^{i+1}} \sqrt{A^{i+1}} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T A^{i+1} \mathbf{x} = c_{i+1}, \\ c_1 &= (\mathbf{y}, A\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T A\mathbf{y} = \mathbf{x}^T \sqrt{A^{i+1}} A \sqrt{A^{i+1}} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T A^{i+2} \mathbf{x} = c_{i+2}, \\ c_{-1} &= (\mathbf{y}, A^{-1}\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T A^{-1}\mathbf{y} = \mathbf{x}^T \sqrt{A^{i+1}} A^{-1} \sqrt{A^{i+1}} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T A^i \mathbf{x} = c_i. \end{aligned}$$

Άρα,

$$\frac{c_{i+1}^2}{c_i c_{i+2}} \geq \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})^2}. \quad (1.28)$$

□

### Παρατήρηση 1.9.

1. Η ανισότητα (1.27) είναι η ανισότητα *Cauchy-Schwarz* γραμμένη με ροπές (*moments*)  $c_k$ .
2. Γνωρίζοντας ότι ο δείκτης κατάστασης του πίνακα  $A$  ισούται με

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}},$$

έχουμε

$$\frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})^2} = \frac{\frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}^2}}{\left(\frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\min}} + \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}\right)^2} = \frac{4\kappa(A)}{(1 + \kappa(A))^2}.$$

3. Η ανισότητα (1.28) με  $i = -1$  είναι η κλασική ανισότητα *Kantorovich*.

### Ανισότητες Kantorovich για μοναδιαίο $\mathbf{x}$

Σε αυτή την υποενότητα θα δούμε τη μορφή που παίρνει η ανισότητα Kantorovich για συμμετρικούς και θετικά ορισμένους πίνακες  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  όταν το διάνυσμα  $\mathbf{x}$  είναι μοναδιαίο ( $\|\mathbf{x}\| = 1$ ), [24].

Πριν δούμε συγκεκριμένα τι συμβαίνει για πίνακες θα αναφέρουμε ένα θεώρημα από την εργασία [24] που ισχύει γενικά για τελεστές σε χώρους Hilbert, το οποίο θα χρησιμοποιήσουμε για να πάρουμε ισοδύναμες εκφράσεις και βελτιώσεις της κλασικής ανισότητας Kantorovich (1.25) για  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ , με  $\|\mathbf{x}\| = 1$ .

Σε αυτό το σημείο θα δώσουμε κάποιους συμβολισμούς που θα χρειαστούν για την διατύπωση αυτού του θεωρήματος.



1.6. ΑΝΙΣΟΤΗΤΕΣ KANTOROVICH ΚΑΙ ΡΟΠΕΣ (MOMENTS)

- $K(A; x) := (Ax, x)(A^{-1}x, x)$ , για κάθε  $x \in H$  με  $\|x\| = 1$ .
- Για τους πραγματικούς (ή τους μιγαδικούς) αριθμούς  $\alpha, \beta$  και για το γραμμικό και φραγμένο τελεστή  $A$  θα προσδιορίσουμε τον μετασχηματισμό

$$C_{\alpha, \beta}(A) := (A^* - \bar{\alpha}I)(\beta I - A),$$

όπου  $A^*$  είναι ο συζυγής τελεστής του  $A$ .

**Θεώρημα 1.29.**

Έστω  $A$  ένας αυτοσυζυγής τελεστής στο χώρο Hilbert  $H$  και  $M > m > 0$  τέτοια ώστε  $mI \leq A \leq MI$  ως προς τη μερική διάταξη τελεστών στο  $B(H)$ . Τότε

$$0 \leq K(A; x) - 1 \leq \begin{cases} \frac{1}{4} \frac{(M-m)^2}{mM} - [Re(C_{m,M}(A)x, x)Re(C_{\frac{1}{m}, \frac{1}{M}}(A^{-1})x, x)]^{1/2} \\ \frac{1}{4} \frac{(M-m)^2}{mM} - |((A - \frac{m+M}{2}I)x, x)| \cdot |((A^{-1} - \frac{m+M}{2mM}I)x, x)| \\ \frac{1}{4} \frac{(M-m)^2}{mM} (Ax, x)(A^{-1}x, x) \\ \frac{(\sqrt{M} - \sqrt{m})^2}{\sqrt{mM}} [(Ax, x)(A^{-1}x, x)]^{1/2} \\ \frac{1}{4} \frac{(M-m)^2}{\sqrt{mM}(m+M)} [(\|Ax\| + (Ax, x))(\|A^{-1}x\| + (A^{-1}x, x))]^{1/2} \end{cases}$$

για κάθε  $x \in H$  με  $\|x\| = 1$ , [24].

Τώρα θα δούμε τι συμβαίνει για συμμετρικούς και θετικά ορισμένους πίνακες  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας με μέγιστη ιδιοτιμή  $\lambda_{max}$ , ελάχιστη ιδιοτιμή  $\lambda_{min}$  και ένα διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  με  $\|\mathbf{x}\| = 1$ . Τότε, η κλασική ανισότητα Kantorovich (1.25) γράφεται στη μορφή

$$\frac{1}{c_1 c_{-1}} \geq \frac{4\lambda_{min}\lambda_{max}}{(\lambda_{min} + \lambda_{max})^2} \Rightarrow c_1 c_{-1} \leq \frac{(\lambda_{min} + \lambda_{max})^2}{4\lambda_{min}\lambda_{max}},$$

καθώς  $c_0 = (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|^2 = 1$ .

Εξειδικεύοντας τις ανισότητες Kantorovich που ισχύουν για γραμμικούς και φραγμένους τελεστές σε χώρο Hilbert όπως φαίνονται στο Θεώρημα 1.29, έχουμε τα ακόλουθα

- ο τελεστής  $A$  είναι ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας,
- $m = \lambda_{min}$  η ελάχιστη ιδιοτιμή του πίνακα  $A$ ,
- $M = \lambda_{max}$  η μέγιστη ιδιοτιμή του πίνακα  $A$ .

Τώρα, οι ανισότητες του Θεωρήματος 1.29 μπορούν να γραφούν σε μία πιο ειδική μορφή λαμβάνοντας υπόψιν τις τρεις παραπάνω εξειδικεύσεις.

Πιο συγκεκριμένα, η δεύτερη κατά σειρά ανισότητα του Θεωρήματος 1.29, η οποία είναι βελτίωση της κλασικής ανισότητας Kantorovich (και για αυτό θα αναφερθούμε σε αυτή), μπορεί να γραφεί σε μορφή η οποία περιέχει τις ροπές  $c_{-1}$ ,  $c_1$ , την ελάχιστη  $\lambda_{min}$  και τη μέγιστη  $\lambda_{max}$  ιδιοτιμή του πίνακα  $A$ . Η μορφή αυτή είναι

$$c_1 c_{-1} \leq \frac{(\lambda_{max} + \lambda_{min})^2}{4\lambda_{min}\lambda_{max}} - \left| c_1 - \frac{\lambda_{min} + \lambda_{max}}{2} \right| \cdot \left| c_{-1} - \frac{\lambda_{min} + \lambda_{max}}{2\lambda_{min}\lambda_{max}} \right|. \quad (1.29)$$

Απόδειξη.

Η δεύτερη κατά σειρά ανισότητα του Θεωρήματος 1.29 είναι η εξής

$$\begin{aligned} K(A; \mathbf{x}) - 1 &\leq \frac{1}{4} \frac{(M - m)^2}{mM} - |((A - \frac{m+M}{2}I)\mathbf{x}, \mathbf{x})| \cdot |((A^{-1} - \frac{m+M}{2mM}I)\mathbf{x}, \mathbf{x})| \\ \Rightarrow K(A; \mathbf{x}) &\leq \frac{(M + m)^2}{4mM} - |((A - \frac{m+M}{2}I)\mathbf{x}, \mathbf{x})| \cdot |((A^{-1} - \frac{m+M}{2mM}I)\mathbf{x}, \mathbf{x})| \\ \Rightarrow K(A; \mathbf{x}) &\leq \frac{(M + m)^2}{4mM} - |(A\mathbf{x} - \frac{m+M}{2}\mathbf{x}, \mathbf{x})| \cdot |(A^{-1}\mathbf{x} - \frac{m+M}{2mM}\mathbf{x}, \mathbf{x})| \\ \Rightarrow K(A; \mathbf{x}) &\leq \frac{(M + m)^2}{4mM} - |(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \frac{m+M}{2}(\mathbf{x}, \mathbf{x})| \cdot |(A^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \frac{m+M}{2mM}(\mathbf{x}, \mathbf{x})| \\ \Rightarrow K(A; \mathbf{x}) &\leq \frac{(M + m)^2}{4mM} - \left| c_1 - \frac{m+M}{2} \right| \cdot \left| c_{-1} - \frac{m+M}{2mM} \right|, \text{ αφού } (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|^2 = 1 \\ \Rightarrow c_1 c_{-1} &\leq \frac{(M + m)^2}{4mM} - \left| c_1 - \frac{m+M}{2} \right| \cdot \left| c_{-1} - \frac{m+M}{2mM} \right|. \end{aligned}$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι  $m = \lambda_{min}$  η ελάχιστη ιδιοτιμή του πίνακα  $A$  και  $M = \lambda_{max}$  η μέγιστη ιδιοτιμή του πίνακα  $A$  η παραπάνω ανισότητα γράφεται ως εξής

$$c_1 c_{-1} \leq \frac{(\lambda_{max} + \lambda_{min})^2}{4\lambda_{min}\lambda_{max}} - \left| c_1 - \frac{\lambda_{min} + \lambda_{max}}{2} \right| \cdot \left| c_{-1} - \frac{\lambda_{min} + \lambda_{max}}{2\lambda_{min}\lambda_{max}} \right|.$$

□

Η ανισότητα (1.29) μπορεί να γραφεί σε γενικότερη μορφή, η οποία περιέχει τις ροπές  $c_i, c_{i+2}$  και αυτή είναι η ακόλουθη

$$c_{i+2}c_i \leq \frac{(\lambda_{max} + \lambda_{min})^2}{4\lambda_{min}\lambda_{max}} - \left| c_{i+2} - \frac{\lambda_{min} + \lambda_{max}}{2} \right| \cdot \left| c_i - \frac{\lambda_{min} + \lambda_{max}}{2\lambda_{min}\lambda_{max}} \right|. \quad (1.30)$$

Απόδειξη.

Η ανισότητα (1.30) προκύπτει από την ανισότητα (1.29) χρησιμοποιώντας το μετασχηματισμό  $\mathbf{y} = \sqrt{A^{i+1}}\mathbf{x}$  ακριβώς με τον ίδιο τρόπο όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 1.28.  $\square$

### Παρατήρηση 1.10.

Η ανισότητα Kantorovich (1.28) για μοναδιαίο διάνυσμα  $\mathbf{x}$  γίνεται ως εξής

$$\frac{1}{c_i c_{i+2}} \geq \frac{4\lambda_{min}\lambda_{max}}{(\lambda_{min} + \lambda_{max})^2} \Rightarrow c_i c_{i+2} \leq \frac{(\lambda_{min} + \lambda_{max})^2}{4\lambda_{min}\lambda_{max}}.$$

Έτσι, παρατηρούμε ότι η ανισότητα (1.30) είναι βελτίωση της ανισότητας (1.28) που ισχύει για οποιοδήποτε διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ .

## 1.7 Πίνακες ειδικών μορφών

Σε αυτή την ενότητα, θα περιγράψουμε κάποιους πίνακες οι οποίοι θα μας χρειαστούν στα αριθμητικά παραδείγματα των επόμενων κεφαλαίων. Συγκεκριμένα, οι δύο πρώτοι πίνακες που θα περιγράψουμε, ο πίνακας Poisson και ο πίνακας Heat flow, προκύπτουν από τη διακριτοποίηση εξισώσεων. Οι δύο τελευταίοι πίνακες που περιγράψουμε πηγάζουν από προβλήματα της Στατιστικής.

### Πίνακας Poisson

Ο πίνακας Poisson διάστασης  $p$  είναι συμμετρικός, θετικά ορισμένος, block τρι-διαγώνιος και αραιός (sparse). Ο πίνακας αυτός προέρχεται από την προσέγγιση πεπερασμένων διαφορών πέντε σημείων της εξίσωσης Poisson σε ένα μοναδιαίο τετράγωνο ενός  $m \times m$  πλέγματος,  $m = \sqrt{p}$ , [38]. Ο πίνακας Poisson είναι της μορφής

$$A = \begin{bmatrix} T_m & -I_m & & & \\ -I_m & T_m & -I_m & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -I_m & T_m & -I_m \\ & & & -I_m & T_m \end{bmatrix},$$

όπου  $I_m$  είναι ο ταυτοτικός πίνακας διάστασης  $m$  και κάθε block  $T_m$  διάστασης  $m$  δίνεται από

$$T_m = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Ο πίνακας αυτός μπορεί να βρεθεί στη MATLAB gallery, [68]. Οι ιδιοτιμές του πίνακα Poisson είναι γνωστές και δίνονται από τον τύπο που καταγράφουμε στο ακόλουθο λήμμα.

**Λήμμα 1.2.**

Οι ιδιοτιμές του πίνακα Poisson διάστασης  $p = m^2$  είναι

$$\lambda_{k,j} = 4 + 2\cos\left(\frac{k\pi}{m+1}\right) + 2\cos\left(\frac{j\pi}{m+1}\right), \quad k, j = 1, \dots, m.$$

Απόδειξη.

Ο πίνακας Poisson μπορεί να εκφραστεί ως το ακόλουθο άθροισμα Kronecker

$$A = \hat{T}_m \otimes I_m + I_m \otimes \hat{T}_m,$$

όπου ο πίνακας  $\hat{T}_m$  διάστασης  $m$  ισούται με

$$\hat{T}_m = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές του τριδιαγώνιου πίνακα  $\hat{T}_m$  δίνονται από τον τύπο, [60, σελ. 59],

$$\lambda_k = 2 + 2\cos\left(\frac{k\pi}{m+1}\right), \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Έστω  $\mathbf{u}_k$  τα ιδιοδιανύσματα του  $\hat{T}_m$  που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές  $\lambda_k$ . Τότε  $\hat{T}_m \mathbf{u}_k = \lambda_k \mathbf{u}_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, m$ .

Προφανώς για τον ταυτοτικό πίνακα  $I_m$  ισχύει  $I_m \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, m$ .

Επομένως, λαμβάνοντας υπόψιν τις ιδιότητες του γινομένου Kronecker έχουμε

$$(\hat{T}_m \otimes I_m)(\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{e}_j) = (\hat{T}_m \mathbf{u}_k) \otimes (I_m \mathbf{e}_j) = (\lambda_k \mathbf{u}_k) \otimes (\mathbf{e}_j) = \lambda_k (\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{e}_j).$$

Ομοίως,  $(I_m \otimes \hat{T}_m)(\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{e}_j) = \lambda_j(\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{e}_j)$ .  
 Αθροίζοντας τις δύο παραπάνω σχέσεις έχουμε

$$(\hat{T}_m \otimes I_m + I_m \otimes \hat{T}_m)(\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{e}_j) = (\lambda_k + \lambda_j)(\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{e}_j).$$

Άρα, οι ιδιοτιμές του πίνακα Poisson  $A = \hat{T}_m \otimes I_m + I_m \otimes \hat{T}_m$  είναι

$$\lambda_{k,j} = 4 + 2\cos\left(\frac{k\pi}{m+1}\right) + 2\cos\left(\frac{j\pi}{m+1}\right), \quad k, j = 1, \dots, m.$$

□

### Παρατήρηση 1.11.

Ο δείκτης κατάστασης του πίνακα Poisson  $A$  ισούται με

$$\kappa(A) = \left| \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \right| = \frac{\lambda_{1,1}}{\lambda_{m,m}} = \frac{1 + \cos\left(\frac{\pi}{m+1}\right)}{1 + \cos\left(\frac{m\pi}{m+1}\right)},$$

και όπως παρατηρούμε η τιμή του εξαρτάται από τη διάσταση του πίνακα.

### Πίνακας Heat flow

Ο πίνακας Heat flow διάστασης  $p$  είναι συμμετρικός, block τριδιαγώνιος και αραιός. Ο πίνακας αυτός προκύπτει από τη διακριτοποίηση του γραμμικού προβλήματος ροής θερμότητας (heat flow) χρησιμοποιώντας μία απλή πεπλεγμένη (implicit) μέθοδο πεπερασμένων διαφορών. Ο πίνακας συντελεστών  $A$  που προκύπτει από το γραμμικό σύστημα εξισώσεων είναι ένας  $m^2 \times m^2$  block τριδιαγώνιος πίνακας της μορφής

$$A = \begin{bmatrix} D & C & & & \\ C & D & C & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & C & D & C \\ & & & & C & D \end{bmatrix},$$

όπου  $C$  είναι ένας  $m \times m$  διαγώνιος πίνακας

$$C = \text{diag} [-u, -u, \dots, -u],$$

$D$  είναι ένας  $m \times m$  τριδιαγώνιος πίνακας ο οποίος δίνεται από

$$D = \begin{bmatrix} 1+4u & -u & & & & \\ -u & 1+4u & -u & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -u & 1+4u & -u \\ & & & & -u & 1+4u \end{bmatrix},$$

και  $u = \frac{\Delta t}{h^2}$ ,  $\Delta t$  είναι το χρονικό διάστημα και  $h$  είναι το βήμα διαμέρισης του διαστήματος. Ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος για  $u > 0$ , [4]. Στο ακόλουθο λήμμα, καταγράφουμε τις ιδιοτιμές του πίνακα Heat flow.

**Λήμμα 1.3.**

Οι ιδιοτιμές του πίνακα Heat flow διάστασης  $p = m^2$  είναι

$$\lambda_{k,j} = 1 + 4u + 2|u| \cos\left(\frac{k\pi}{m+1}\right) - 2u \cos\left(\frac{j\pi}{m+1}\right), \quad k, j = 1, \dots, m.$$

Απόδειξη.

Εκφράζουμε τον πίνακα Heat flow ως

$$A = D \otimes I_m + C \otimes M,$$

όπου  $M$  είναι ο τριδιαγώνιος πίνακας

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές  $\mu_j$  του πίνακα  $M$  είναι  $\mu_j = 2\cos\left(\frac{j\pi}{m+1}\right)$ ,  $j = 1, \dots, m$  και οι ι-

διοτιμές  $\lambda_k$  του τριδιαγώνιου πίνακα  $D$  είναι  $\lambda_k = 1 + 4u + 2|u| \cos\left(\frac{k\pi}{m+1}\right)$ ,  $k = 1, \dots, m$ , [60, σελ. 59]. Προφανώς ο διαγώνιος πίνακας  $C$  έχει ιδιοτιμή το  $-u$ . Ακολουθώντας τη διαδικασία που χρησιμοποιήσαμε στην απόδειξη του Λήμματος 1.2 για τις ιδιοτιμές του πίνακα Poisson μπορούμε να αποδείξουμε ότι οι ιδιοτιμές του πίνακα Heat flow δίνονται από τον τύπο

$$\lambda_{k,j} = 1 + 4u + 2|u| \cos\left(\frac{k\pi}{m+1}\right) - 2u \cos\left(\frac{j\pi}{m+1}\right), \quad k, j = 1, \dots, m.$$

□

**Παρατήρηση 1.12.**

Ο πίνακας Heat flow είναι καλής κατάστασης για θετικές τιμές του  $u$ .

## Πίνακας KMS

Ο πίνακας Kac-Murdock-Szegö (KMS)  $A$  διάστασης  $p$  είναι συμμετρικός, θετικά ορισμένος και Toeplitz. Τα στοιχεία αυτού του πίνακα δίνονται από τον τύπο

$$A_{ij} = r^{|i-j|}, \quad i, j = 1, 2, \dots, p,$$

για  $0 < r < 1$ . Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε όλα τα διαγώνια στοιχεία του  $A$  είναι ίσα με το 1. Ο πίνακας αυτός υπάρχει στη MATLAB gallery και τον καλούμε με την εντολή  $A = \text{gallery}('kms', p, r)$ , [68].

Οι ιδιοτιμές του πίνακα KMS, όπως αυτές περιγράφονται στην εργασία [65], δίνονται στο ακόλουθο λήμμα.

### Λήμμα 1.4.

Οι ιδιοτιμές  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_p$  του πίνακα KMS δίνονται από τον τύπο

$$\lambda_j = \frac{1 - r^2}{1 - 2r \cos \theta_j + r^2}, \quad j = 1, 2, \dots, p,$$

όπου  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$  είναι οι ρίζες της συνάρτησης

$$G(\theta) = \sin(p+1)\theta - 2r \sin p\theta + r^2 \sin(p-1)\theta.$$

Οι ρίζες  $\theta_j$  ικανοποιούν την ανισότητα

$$\frac{(j-1)\pi}{p+1} < \theta_j < \frac{j\pi}{p+1}, \quad j = 1, 2, \dots, p.$$

Επίσης, έχει αποδειχθεί ότι ο αντίστροφος του πίνακα KMS είναι συμμετρικός, τριδιαγώνιος και δίνεται από τον τύπο

$$A^{-1} = \frac{1}{1-r^2} \begin{bmatrix} 1 & -r & & & & \\ -r & 1+r^2 & -r & & & \\ & -r & 1+r^2 & -r & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -r & 1+r^2 & -r \\ & & & & -r & 1 \end{bmatrix}. \quad (1.31)$$

### Παρατήρηση 1.13.

Ο δείκτης κατάστασης του πίνακα KMS προσεγγίζεται από, [66],

$$\kappa(A) = \left| \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \right| = \frac{\lambda_p}{\lambda_1} \simeq \left( \frac{1+r}{1-r} \right)^2, \quad \text{για μεγάλες τιμές του } p. \quad (1.32)$$

### Πίνακας συνδιακύμανσης (Model covariance matrix)

Ο πίνακας συνδιακύμανσης (covariance matrix)  $A$  διάστασης  $p$  είναι συμμετρικός, θετικά ορισμένος της μορφής  $A = \frac{1}{m}X^T X$ , όπου  $X \in \mathbb{R}^{m \times p}$  είναι ο πίνακας δεδομένων (data matrix) οι στήλες του οποίου έχουν κεντραριστεί ώστε να έχουν μέση τιμή μηδέν. Ο πίνακας συνδιακύμανσης αποκαλύπτει περιθωριακές συσχετίσεις μεταξύ των μεταβλητών, ενώ ο αντίστροφος του πίνακα συνδιακύμανσης, ο οποίος καλείται πίνακας ακρίβειας (precision matrix), αναπαριστά τις υπό συνθήκη συσχετίσεις μεταξύ δύο μεταβλητών δεδομένων των υπόλοιπων μεταβλητών, [26].

Τα στοιχεία του πίνακα συνδιακύμανσης προσομοιώνονται από

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 + i^\alpha, & i = j \\ \frac{1}{|i - j|^\beta}, & i \neq j \end{cases}, \quad i = 1, 2, \dots, p,$$

όπου  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$  και  $\beta \geq 1$ , [7]. Τα μη-διαγώνια στοιχεία αυτού του πίνακα εμφανίζουν φθίνουσα συμπεριφορά όσο απομακρύνονται από την κύρια διαγώνιο, η οποία προσομοιώνει τη φθίνουσα συσχέτιση των δειγμάτων δεδομένων υψηλών διαστάσεων στην ανάλυση πινάκων συνδιακύμανσης, βλέπε [52, 63] και τις αντίστοιχες βιβλιογραφικές αναφορές που καταγράφονται σε αυτές τις εργασίες. Θα συμβολίζουμε αυτόν τον πίνακα με  $A = \text{covariance}(p, \alpha, \beta)$ .

Ο πίνακας συνδιακύμανσης  $A$  μπορεί να γραφεί σαν άθροισμα ενός συμμετρικού πίνακα Toeplitz  $T$  και ενός διαγώνιου πίνακα  $D$ . Πράγματι, ισχύει

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 1 + 1 & 1 & \frac{1}{2^\beta} & \cdots & \frac{1}{(p-1)^\beta} \\ 1 & 1 + 2^\alpha & 1 & \cdots & \frac{1}{(p-2)^\beta} \\ \frac{1}{2^\beta} & 1 & 1 + 3^\alpha & \cdots & \frac{1}{(p-3)^\beta} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{(p-1)^\beta} & \cdots & \cdots & 1 & 1 + p^\alpha \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & \frac{1}{2^\beta} & \cdots & \frac{1}{(p-1)^\beta} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & \frac{1}{(p-2)^\beta} \\ \frac{1}{2^\beta} & 1 & 1 & \cdots & \frac{1}{(p-3)^\beta} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{(p-1)^\beta} & \cdots & \cdots & 1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 2^\alpha & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 3^\alpha & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & p^\alpha \end{bmatrix} \\ &= T + D. \end{aligned}$$

Αν υποθέσουμε ότι ο πίνακας  $T$  έχει ιδιοτιμές τις  $t_1 \leq t_2 \leq \cdots \leq t_p$ , τότε οι ιδιοτιμές  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_p$  του πίνακα συνδιακύμανσης θα ικανοποιούν την



ανισότητα, σύμφωνα με το Θεώρημα του Weyl, [50, σελ. 181],

$$\begin{aligned} t_k + 1 &\leq \lambda_k \leq t_k + p^\alpha, \quad k = 1, 2, \dots, p, \quad \text{για } \alpha \geq 0, \\ t_k + p^\alpha &\leq \lambda_k \leq t_k + 1, \quad k = 1, 2, \dots, p, \quad \text{για } \alpha < 0. \end{aligned}$$

Σχετικά με τις ιδιοτιμές των συμμετρικών Toeplitz πινάκων, υπάρχουν πολλές εργασίες στη διεθνή βιβλιογραφία που μελέτησαν τρόπους εκτίμησης και υπολογισμού των ιδιοτιμών αυτών. Ενδεικτικά αναφέρουμε τις εργασίες [12, 59, 65, 66].

#### Παρατήρηση 1.14.

Ο δείκτης κατάστασης του πίνακα συνδιακύμανσης εξαρτάται από τις τιμές των παραμέτρων  $\alpha, \beta$  καθώς επίσης και από τη διάστασή του  $p$ . Ειδικότερα, αριθμητικά έχουμε παρατηρήσει ότι ο δείκτης κατάστασης είναι μία αύξουσα συνάρτηση του  $p$  για μη-αρνητικές τιμές του  $\alpha$ . Επίσης, ο δείκτης κατάστασης επηρεάζεται κυρίως από την τιμή της παραμέτρου  $\alpha$ , όχι ιδιαίτερα από την τιμή του  $\beta$ , και αυξάνεται σημαντικά για μεγάλες τιμές του  $\alpha$ .

### Πίνακας σχεδιασμού με συσχετισμένες στήλες

Θεωρούμε τον πίνακα σχεδιασμού (design matrix)

$$X = [ \mathbf{x}_1 \quad \mathbf{x}_2 \quad \dots \quad \mathbf{x}_d ] = \begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nd} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times d},$$

ο οποίος εμφανίζεται στο γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης (linear regression model).

Οι στήλες του πίνακα  $X$ ,  $\mathbf{x}_i$ ,  $i = 1, \dots, d$  είναι οι παράγοντες (covariates) του προβλήματος. Υποθέτουμε ότι οι παράγοντες  $\mathbf{x}_i$  είναι ομοιόμορφα κατανεμημένοι ως  $N(\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$  και έχουν συσχέτιση  $r = \text{cor}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ , αν  $i \neq j$ , για ένα δοσμένο  $r > 0$ . Σε περίπτωση που υπάρχει και σταθερός όρος στο μοντέλο, ο αντίστοιχος πίνακας σχεδιασμού  $\tilde{X}$  είναι

$$\tilde{X} = [ \mathbf{1} \quad X ] = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{nd} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times (d+1)}.$$

Στο ακόλουθο λήμμα, υπολογίζουμε το φάσμα του πίνακα  $\tilde{X}^T \tilde{X} \in \mathbb{R}^{(d+1) \times (d+1)}$ .

**Λήμμα 1.5.**

Έστω ο πίνακας σχεδιασμού  $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$  του οποίου οι στήλες ακολουθούν την κανονική κατανομή  $N(\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$ . Ο πίνακας  $\tilde{X}^T \tilde{X} \in \mathbb{R}^{(d+1) \times (d+1)}$  έχει μία ιδιοτιμή  $\lambda_0 = n$  με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα  $\mathbf{e}_1$ . Οι υπόλοιπες ιδιοτιμές του είναι  $\lambda_1 = (n-1)\sigma^2(1-r)$  με αλγεβρική πολλαπλότητα  $d-1$  και  $\lambda_2 = (n-1)\sigma^2[(d-1)r+1]$  με αλγεβρική πολλαπλότητα 1.

Απόδειξη.

Αρχικά υπολογίζουμε τον πίνακα  $\tilde{X}^T \tilde{X}$ , ο οποίος ισούται με

$$\begin{aligned} \tilde{X}^T \tilde{X} &= \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_{11} & \dots & x_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1d} & \dots & x_{nd} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{nd} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n 1 & \sum_{j=1}^n x_{j1} & \dots & \sum_{j=1}^n x_{jd} \\ \sum_{j=1}^n x_{j1} & & & \\ \vdots & & X^T X & \\ \sum_{j=1}^n x_{jd} & & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & X^T X & \\ 0 & & & \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

αφού  $\sum_{j=1}^n x_{ji} = 0, \forall i = 1, \dots, d$ , (μηδενική μέση τιμή) εξαιτίας της κατασκευής

του πίνακα  $X$  σύμφωνα με την κανονική κατανομή.

Άρα, ο πίνακας  $\tilde{X}^T \tilde{X}$  έχει μία ιδιοτιμή ίση με  $n$  με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα  $\mathbf{e}_1$ .

Επιπλέον, μπορούμε να εκφράσουμε τη διακύμανση  $\sigma^2$  κάθε παράγοντα  $\mathbf{x}_i = [x_{1i} \ x_{2i} \ \dots \ x_{ni}]^T$  με τη χρήση διανυσματικών νορμών ως ακολούθως

$$\sigma^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_i)^2 = \frac{1}{n-1} \|\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_i\|^2,$$

όπου  $\bar{\mathbf{x}}_i$  δηλώνει τη μέση τιμή του παράγοντα  $\mathbf{x}_i$ .

Αφού η μέση τιμή κάθε παράγοντα είναι μηδέν, έχουμε

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{1}{n-1} \|\mathbf{x}_i\|^2 \\ \Rightarrow \|\mathbf{x}_i\|^2 &= (n-1)\sigma^2, \quad \forall i = 1, \dots, d. \end{aligned} \tag{1.33}$$

Ο υποπίνακας  $X^T X$  του  $\tilde{X}^T \tilde{X}$  μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned}
 X^T X &= \begin{bmatrix} \|\mathbf{x}_1\|^2 & r\|\mathbf{x}_1\|\|\mathbf{x}_2\| & \dots & r\|\mathbf{x}_1\|\|\mathbf{x}_d\| \\ r\|\mathbf{x}_1\|\|\mathbf{x}_2\| & \|\mathbf{x}_2\|^2 & \dots & r\|\mathbf{x}_2\|\|\mathbf{x}_d\| \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r\|\mathbf{x}_d\|\|\mathbf{x}_1\| & r\|\mathbf{x}_d\|\|\mathbf{x}_2\| & \dots & \|\mathbf{x}_d\|^2 \end{bmatrix} \\
 &\stackrel{(1.33)}{=} \begin{bmatrix} (n-1)\sigma^2 & r(n-1)\sigma^2 & \dots & r(n-1)\sigma^2 \\ r(n-1)\sigma^2 & (n-1)\sigma^2 & \dots & r(n-1)\sigma^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r(n-1)\sigma^2 & r(n-1)\sigma^2 & \dots & (n-1)\sigma^2 \end{bmatrix} \\
 &= (n-1)\sigma^2 \begin{bmatrix} 1 & r & \dots & r \\ r & 1 & \dots & r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r & r & \dots & 1 \end{bmatrix} = (n-1)\sigma^2 [(1-r)I + rJ],
 \end{aligned}$$

όπου  $J$  είναι ο  $d \times d$  πίνακας με όλα του τα στοιχεία ίσα με 1. Οι ιδιοτιμές του πίνακα  $X^T X$  είναι  $\lambda_1 = (n-1)\sigma^2(1-r)$  με αλγεβρική πολλαπλότητα  $d-1$  και  $\lambda_2 = (n-1)\sigma^2[(d-1)r+1]$  με αλγεβρική πολλαπλότητα 1.  $\square$

Όπως περιγράφουμε στην Ενότητα 6.3 που αφορά στο γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης και στην εκτίμηση της ρυθμιστικής παραμέτρου  $\mu > 0$  εμφανίζεται ο πίνακας  $B = \tilde{X}\tilde{X}^T + \mu I_n$  για τον οποίο χρειαζόμαστε το ίχνος του  $B^{-1}$ . Θεωρώντας λοιπόν την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών του πίνακα  $\tilde{X} = U\Sigma V^T$  έχουμε ότι

$$\tilde{X}\tilde{X}^T = U\Sigma\Sigma^T U^T \quad \text{και} \quad \tilde{X}^T \tilde{X} = V\Sigma^T \Sigma V^T.$$

Οπότε οι  $d$  πρώτες ιδιοτιμές του πίνακα  $\tilde{X}\tilde{X}^T$  είναι οι ιδιοτιμές του  $\tilde{X}^T \tilde{X}$  και οι υπόλοιπες  $n-d$  είναι μηδέν. Άρα, το ίχνος του πίνακα  $B^{-1}$  δίνεται από

$$Tr(B^{-1}) = \frac{1}{\lambda_0 + \mu} + \frac{1}{\lambda_1 + \mu} + \frac{d-1}{\lambda_2 + \mu} + \frac{n-d}{\mu}. \quad (1.34)$$

### Παρατήρηση 1.15.

Ο δείκτης κατάστασης του πίνακα σχεδιασμού  $X$  είναι  $\kappa(X) = \frac{\sigma_{max}(X)}{\sigma_{min}(X)} =$

$$\sqrt{\frac{\lambda_{max}(X^T X)}{\lambda_{min}(X^T X)}} = \sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}} = \sqrt{\frac{(d-1)r+1}{1-r}}.$$



## Κεφάλαιο 2

# Εκτίμηση της διγραμμικής μορφής $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναφέρουμε τρόπο εκτίμησης και εύρεσης φραγμάτων για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  ορίζοντας κατάλληλα τις ροπές (moments) ενός δοσμένου πίνακα. Συγκεκριμένα, θα παράγουμε παραμετρικές οικογένειες εκτιμήσεων για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  για κάθε αντιστρέψιμο πίνακα  $A$  χρησιμοποιώντας μία μέθοδο παρεμβολής (extrapolation). Η μέθοδος της παρεμβολής έχει χρησιμοποιηθεί στη διεθνή βιβλιογραφία και ειδικότερα στην εργασία [14] για την προσέγγιση της νόρμας του σφάλματος στη λύση γραμμικών συστημάτων και στις εργασίες [18, 19] στην επίλυση συστημάτων κακής κατάστασης και σε προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων, αντίστοιχα. Επίσης, στις εργασίες [15, 16] αναπτύχθηκε μία μέθοδος παρεμβολής για την εκτίμηση του ίχνους δυνάμεων αυτοσυζυγών τελεστών και του αντιστρόφου ενός γραμμικού τελεστή σε ένα χώρο Hilbert, αντίστοιχως. Όπως θα δούμε παρακάτω, χρησιμοποιώντας την ανισότητα Kantorovich γραμμένη σε μορφή που περιέχει ροπές μπορούμε να πάρουμε φράγματα για τα στοιχεία του αντιστρόφου ενός πίνακα [15]. Χρησιμοποιώντας την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (SVD) και παρεμβολή προκύπτουν εκτιμήσεις για τα στοιχεία του  $A^{-1}$  και εν γένει για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ . Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτό το κεφάλαιο είναι μέρος της εργασίας [34].

### 2.1 Εκτιμήσεις για κάθε αντιστρέψιμο πίνακα $A$

Σε αυτή την ενότητα, θα αναλύσουμε μία μέθοδο παρεμβολής για την εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  για οποιονδήποτε αντιστρέψιμο πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  και  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$  δοσμένα διανύσματα. Συγκεκριμένα, χρησιμοποι-

ώντας την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (singular value decomposition) και παρεκβάλλοντας τις ροπές του πίνακα  $A$  στο σημείο  $-1$  δημιουργούνται οικογένειες εκτιμήσεων για τη ζητούμενη διγραμμική μορφή.

Αρχικά, θα εκτιμήσουμε την τετραγωνική μορφή (quadratic form) του τύπου  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ . Η διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  μπορεί να γραφεί με τη βοήθεια τετραγωνικών μορφών χρησιμοποιώντας την πολική ταυτότητα (polarization identity). Ειδικότερα, θέτοντας  $\mathbf{u} = A^T \mathbf{y}$  η διγραμμική μορφή γράφεται ως  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{x}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{u}$  και μέσω της πολικής ταυτότητας εκφράζεται ως

$$\mathbf{x}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{u} = \frac{1}{4} (\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w} - \mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}), \quad (2.1)$$

όπου  $\mathbf{w} = \mathbf{x} + \mathbf{u}$  και  $\mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{u}$ .

Ας αρχίσουμε να περιγράφουμε αναλυτικά τη διαδικασία εκτίμησης τετραγωνικών μορφών η οποία μας οδηγεί στη δημιουργία παραμετρικών οικογενειών εκτιμήσεων ενός και δύο όρων.

### 2.1.1 Ανάλυση ιδιαζουσών τιμών και ροπές

Λαμβάνοντας υπόψη την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (SVD) του δοσμένου πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  η οποία δίνεται από τη σχέση (1.8) και θεωρώντας ένα διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ , μπορούμε να εκφράσουμε τα ακόλουθα γινόμενα σε μορφή αθροισμάτων ως εξής

$$\begin{aligned} A\mathbf{x} &= \sum_{i=1}^p \sigma_i(\mathbf{v}_i, \mathbf{x}) \mathbf{u}_i, & A^T \mathbf{x} &= \sum_{i=1}^p \sigma_i(\mathbf{u}_i, \mathbf{x}) \mathbf{v}_i, \\ A^{-1} \mathbf{x} &= \sum_{i=1}^p \sigma_i^{-1}(\mathbf{u}_i, \mathbf{x}) \mathbf{v}_i. \end{aligned}$$

Ορίζουμε τις ροπές του πίνακα  $A$  ως ακολούθως

$$\begin{aligned} c_{2n}(\mathbf{x}) &= (\mathbf{x}, (A^T A)^n \mathbf{x}), & c_{2n+1}(\mathbf{x}) &= (\mathbf{x}, A(A^T A)^n \mathbf{x}), & n &\geq 0, \\ c_{2n}(\mathbf{x}) &= (\mathbf{x}, (AA^T)^n \mathbf{x}), & c_{2n+1}(\mathbf{x}) &= (\mathbf{x}, A^T(AA^T)^n \mathbf{x}), & n &\leq 0. \end{aligned}$$

Θέτοντας  $a_i = (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)$  και  $b_i = (\mathbf{x}, \mathbf{u}_i)$ , έπεται ότι

$$\begin{aligned} c_0(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, \mathbf{x}) &= (V^T \mathbf{x}, V^T \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)^2 = \sum_{i=1}^p a_i^2 \\ &= (U^T \mathbf{x}, U^T \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p (\mathbf{x}, \mathbf{u}_i)^2 = \sum_{i=1}^p b_i^2, \end{aligned}$$

$$c_1(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, A\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p \sigma_i(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i) = \sum_{i=1}^p \sigma_i a_i b_i,$$

$$c_2(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, A^T A\mathbf{x}) = (A\mathbf{x}, A\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p \sigma_i^2(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)^2 = \sum_{i=1}^p \sigma_i^2 a_i^2,$$

και έτσι η ροπή  $c_{-1}(\mathbf{x})$  εκφράζεται ως το άθροισμα

$$(\mathbf{x}, A^{-1}\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p \sigma_i^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i) = \sum_{i=1}^p \sigma_i^{-1} a_i b_i. \quad (2.2)$$

Γενικά, οι ροπές του πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  μπορούν να εκφραστούν ως τα ακόλουθα αθροίσματα

$$\begin{aligned} c_{2n}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^p \sigma_i^{2n}(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)^2 = \sum_{i=1}^p \sigma_i^{2n} a_i^2, & n \geq 0, \\ c_{2n}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^p \sigma_i^{2n}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i)^2 = \sum_{i=1}^p \sigma_i^{2n} b_i^2, & n \leq 0, \\ c_{2n+1}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^p \sigma_i^{2n+1}(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i) = \sum_{i=1}^p \sigma_i^{2n+1} a_i b_i. \end{aligned}$$

Οι ιδιάζουσες τιμές  $\sigma_i$  του πίνακα  $A$  καθώς και τα εσωτερικά γινόμενα  $a_i$  και  $b_i$  δεν είναι συνήθως γνωστά. Ωστόσο, η τετραγωνική ροπή

$$c_{-1}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, A^T (AA^T)^{-1} \mathbf{x}) = (\mathbf{x}, A^{-1} \mathbf{x}),$$

μπορεί να εκτιμηθεί χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της παρεμβολής και συγκεκριμένα λύνοντας ένα σύστημα που περιέχει ως συνθήκες παρεμβολής (interpolation conditions) κάποιες ροπές για  $n \geq 0$ .

### Συμβολισμός 2.1.

Χάρην απλότητας του συμβολισμού, σε όσα ακολουθούν σε αυτό το κεφάλαιο θα γράφουμε  $c_n$  αντί για  $c_n(\mathbf{x})$ .

Στη συνέχεια, παράγουμε παραμετρικές οικογένειες εκτιμήσεων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ . Συγκεκριμένα, κρατώντας έναν ή δύο όρους στα παραπάνω αθροίσματα που έχουν γραφεί οι ροπές θα παραχθούν οι εκτιμήσεις ενός ή δύο όρων αντίστοιχα. Υποθέτουμε ότι όλοι οι παρονομαστές που θα εμφανιστούν στις παραχθείσες εκτιμήσεις δεν είναι μηδέν.

### 2.1.2 Εκτιμήσεις ενός όρου (One-term estimates)

Η τετραγωνική ροπή  $c_{-1} = \mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  μπορεί να εκτιμηθεί κρατώντας έναν μόνο όρο από το άθροισμα (2.2), δηλαδή

$$c_{-1} = (\mathbf{x}, A^{-1} \mathbf{x}) \simeq \alpha \beta s^{-1},$$

όπου οι άγνωστοι  $\alpha$ ,  $\beta$  και  $s$  προσδιορίζονται λύνοντας το σύστημα που προκύπτει από τις ακόλουθες συνθήκες παρεμβολής,

$$\begin{cases} c_0 = \alpha^2 = \beta^2, \\ c_1 = \alpha \beta s, \\ c_2 = \alpha^2 s^2. \end{cases} \quad (2.3)$$

Το παραπάνω μη-γραμμικό σύστημα δεν έχει μοναδική λύση. Στο ακόλουθο λήμμα δίνεται η γενική μορφή του  $s$  που ικανοποιεί το σύστημα των συνθηκών παρεμβολής (2.3).

#### Λήμμα 2.1.

Η γενική μορφή του  $s$  που ικανοποιεί το σύστημα (2.3) είναι

$$|s| = |c_0^{-\nu/2-1} c_1^{\nu+1} c_2^{-\nu/2}|, \quad \nu \in \mathbb{R}.$$

Απόδειξη.

Λύνοντας το μη-γραμμικό σύστημα (2.3) προκύπτουν διάφορες λύσεις για το  $s$  οι οποίες μπορούν να γραφούν στον ακόλουθο συμπαγή τύπο

$$|s| = |c_0^{-i/2-1} c_1^{i+1} c_2^{-i/2}|, \quad i = 0, -1, -2.$$

Υποθέτοντας ότι  $\alpha^2 = \beta^2 = c_0$ , μπορούμε να επεκτείνουμε αυτόν τον τύπο για οποιονδήποτε πραγματικό αριθμό  $\nu$ , καθώς ισχύει

$$|c_0^{-\nu/2-1} c_1^{\nu+1} c_2^{-\nu/2}| = |(\beta^2)^{-\nu/2-1} (s\alpha\beta)^{\nu+1} (s^2\alpha^2)^{-\nu/2}| = |s|.$$

□

#### Πρόταση 2.1.

Εστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας αντιστρέψιμος πίνακας και  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$  ένα μη-μηδενικό διάνυσμα. Μία οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  δίνεται από τον τύπο

$$e_\nu = c_0^{\nu+2} c_1^{-2\nu-1} c_2^\nu, \quad \nu \in \mathbb{R}. \quad (2.4)$$



Απόδειξη.

Αντικαθιστώντας το  $|s|$  του Λήμματος 2.1 στη σχέση  $c_{-1} \simeq s^{-2}c_1$  προκύπτει η ζητούμενη οικογένεια εκτιμήσεων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ .  $\square$

**Παρατήρηση 2.1.**

Στην περίπτωση που η ροπή  $c_1$  μηδενίζεται μπορούμε να επιλέξουμε  $\nu = -1/2$  και έτσι αποφεύγουμε τη διαίρεση με το μηδέν.

**Πρόταση 2.2.**

Η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου (2.4) ικανοποιεί τις σχέσεις

$$e_\nu = \rho^\nu e_0, \quad e_\nu = \rho e_{\nu-1}, \quad \text{όπου } e_0 = \frac{c_0^2}{c_1}, \quad \rho = \frac{c_0 c_2}{c_1^2} \geq 1, \quad \nu \in \mathbb{R}. \quad (2.5)$$

Αν  $c_1 > 0$  η οικογένεια εκτιμήσεων  $e_\nu$  είναι μία αύξουσα συνάρτηση του  $\nu$  ενώ αν  $c_1 < 0$  τότε είναι φθίνουσα.

Απόδειξη.

Θέτοντας  $\rho = c_0 c_2 / c_1^2$ , έχουμε

$$e_\nu = c_0^{\nu+2} c_1^{-2\nu-1} c_2^\nu = \left( \frac{c_0 c_2}{c_1^2} \right)^\nu \frac{c_0^2}{c_1} = \rho^\nu e_0.$$

Επίσης,  $e_\nu = \rho^\nu e_0 = \rho (\rho^{\nu-1} e_0) = \rho e_{\nu-1}$ .

Εφαρμόζοντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz έχουμε  $(\mathbf{x}, A\mathbf{x})^2 \leq (\mathbf{x}, \mathbf{x})(A\mathbf{x}, A\mathbf{x})$ .

Οπότε ισχύει ότι

$$c_1^2 \leq c_0 c_2 \Rightarrow \rho = c_0 c_2 / c_1^2 \geq 1.$$

Στην περίπτωση που ισχύει  $c_1 > 0$ , δηλαδή  $e_0 = \frac{c_0^2}{c_1} > 0$ , τότε  $e_\nu = \rho e_{\nu-1} \geq e_{\nu-1}$ , για κάθε  $\nu \in \mathbb{R}$  και έτσι η  $e_\nu$  είναι αύξουσα συνάρτηση του  $\nu$ .

Ενώ αν  $c_1 < 0$  τότε  $e_\nu = \rho e_{\nu-1} \leq e_{\nu-1}$ , αφού  $e_\nu$  είναι αρνητικό για κάθε  $\nu \in \mathbb{R}$ , δηλαδή η  $e_\nu$  είναι φθίνουσα συνάρτηση του  $\nu$ .  $\square$

Η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου (2.4) εξαρτάται από μία παράμετρο  $\nu$ . Η θεωρητική τιμή αυτής της παραμέτρου παρουσιάζεται στο ακόλουθο λήμμα.

**Λήμμα 2.2.**

Εστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας θετικά πραγματικός (positive real) πίνακας, δηλαδή  $(\mathbf{x}, A\mathbf{x}) > 0, \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ . Υπάρχει μία τιμή  $\nu_0$  που δίνεται από τη σχέση

$$\nu_0 = \frac{\log(c_{-1}/e_0)}{\log(\rho)}, \quad \rho = c_0 c_2 / c_1^2 > 1,$$

τέτοια ώστε  $e_{\nu_0} = c_{-1}$ .

Απόδειξη.  
Έχουμε

$$\begin{aligned} e_{\nu_0} &= c_{-1} \Rightarrow \rho^{\nu_0} e_0 = c_{-1} \\ \Rightarrow \rho^{\nu_0} &= \frac{c_{-1}}{e_0} \Rightarrow \log \rho^{\nu_0} = \log (c_{-1}/e_0) \\ \Rightarrow \nu_0 &= \frac{\log(c_{-1}/e_0)}{\log(\rho)}, \text{ με } \rho > 1. \end{aligned}$$

□

### Παρατήρηση 2.2.

Αν  $\rho = 1$ , τότε η εκτίμηση ενός όρου δίνει την ακριβή τιμή της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ .

Απόδειξη.  
Έχουμε

$$\rho = 1 \Rightarrow c_1^2 = c_0 c_2 \Rightarrow (\mathbf{x}, A\mathbf{x})^2 = (\mathbf{x}, \mathbf{x})(A\mathbf{x}, A\mathbf{x}),$$

δηλαδή η ανισότητα Cauchy-Schwarz ισχύει σαν ισότητα και έτσι τα διανύσματα  $\mathbf{x}, A\mathbf{x}$  είναι γραμμικά εξαρτημένα. Άρα,  $A\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$ , για κάποιο  $\lambda \in \mathbb{R}^*$ . Οπότε, έχουμε

$$\mathbf{x}^T A\mathbf{x} = \lambda c_0, \quad \mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x} = \frac{1}{\lambda} c_0,$$

και η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου  $e_\nu$  για  $\rho = 1$  είναι

$$e_\nu = e_0 = \frac{c_0^2}{c_1} = \frac{c_0^2}{\lambda c_0} = \frac{1}{\lambda} c_0,$$

δηλαδή ισούται με την ακριβή τιμή της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ . □

### Παρατήρηση 2.3.

Αν ο δοσμένος πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  είναι αρνητικά πραγματικός (negative real), δηλαδή  $(\mathbf{x}, A\mathbf{x}) < 0, \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ , μπορεί να αποδειχθεί αντίστοιχο αποτέλεσμα του Λήμματος 2.2.

Είναι προφανές ότι δεν μπορούμε να γνωρίζουμε τη βέλτιστη τιμή  $\nu_0$  της παραμέτρου  $\nu$  στην πράξη καθώς απαιτείται η γνώση της ακριβούς τιμής της ροπής  $c_{-1}$ . Ωστόσο, έχουμε ένα άνω φράγμα για την τιμή της παραμέτρου  $\nu$  η οποία δίνεται στο παρακάτω πόρισμα.

**Πόρισμα 2.1.**

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας θετικά πραγματικός πίνακας. Ισχύει ότι

$$\nu_0 \leq \frac{\log(c_1/(c_0\sigma_{min}))}{\log(\rho)},$$

όπου  $\sigma_{min}$  είναι η ελάχιστη ιδιάζουσα τιμή του πίνακα  $A$ .

Απόδειξη.

Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz, έχουμε

$$c_{-1} = (\mathbf{x}, A^{-1}\mathbf{x}) \leq \|A^{-1}\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{x}\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\mathbf{x}\|^2 = \frac{c_0}{\sigma_{min}}.$$

Έτσι,  $\log(\frac{c_{-1}}{c_0}) \leq \log(\frac{c_0}{\sigma_{min}}) \Rightarrow \nu_0 \leq \frac{\log(c_1/(c_0\sigma_{min}))}{\log(\rho)}$ . □

### 2.1.3 Εκτιμήσεις δύο όρων (Two-term estimates)

Εκτιμήσεις δύο όρων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1}\mathbf{x}$  μπορούν να προκύψουν κρατώντας δύο όρους στη σχέση (2.2). Έτσι, η ροπή  $c_{-1} = \mathbf{x}^T A^{-1}\mathbf{x}$  μπορεί να εκτιμηθεί ως

$$c_{-1} = (\mathbf{x}, A^{-1}\mathbf{x}) \simeq \hat{e}_\nu = s_1^{-1}\alpha_1\beta_1 + s_2^{-1}\alpha_2\beta_2.$$

Ας θεωρήσουμε τις ακόλουθες συνθήκες παρεμβολής

$$\begin{aligned} c_0 &= (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = (V^T\mathbf{x}, V^T\mathbf{x}) = \sum_i (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)^2 = \alpha_1^2 + \alpha_2^2, \\ &= (U^T\mathbf{x}, U^T\mathbf{x}) = \sum_i (\mathbf{x}, \mathbf{u}_i)^2 = \beta_1^2 + \beta_2^2, \\ c_{2j} &= (\mathbf{x}, (A^T A)^j \mathbf{x}) = \sum_i \sigma_i^{2j} (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)^2 = s_1^{2j}\alpha_1^2 + s_2^{2j}\alpha_2^2, \\ \tilde{c}_{2j} &= (\mathbf{x}, (A A^T)^j \mathbf{x}) = \sum_i \sigma_i^{2j} (\mathbf{x}, \mathbf{u}_i)^2 = s_1^{2j}\beta_1^2 + s_2^{2j}\beta_2^2, \\ c_{2j+1} &= (\mathbf{x}, A(A^T A)^j \mathbf{x}) = \sum_i \sigma_i^{2j+1} (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i) = s_1^{2j+1}\alpha_1\beta_1 + s_2^{2j+1}\alpha_2\beta_2, \\ \tilde{c}_{2j+1} &= (\mathbf{x}, A^T(A A^T)^j \mathbf{x}) = \sum_i \sigma_i^{2j+1} (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i) = s_1^{2j+1}\alpha_1\beta_1 + s_2^{2j+1}\alpha_2\beta_2, \end{aligned}$$

για διάφορες τιμές του  $j \geq 0$ . Με βάση αυτές τις συνθήκες παρεμβολής μπορεί να παραχθεί η ακόλουθη οικογένεια εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{e}_\nu$ .

**Πρόταση 2.3.**

Η οικογένεια εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{e}_\nu$  για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  δίνεται από τη σχέση

$$\hat{e}_\nu = e_0 + \frac{c_0 c_2 - c_1^2}{c_1} \frac{c_0 \tilde{c}_{\nu+2} - c_1 c_{\nu+1}}{c_1 c_{\nu+3} - c_2 \tilde{c}_{\nu+2}}, \quad \nu \in \mathbb{N}, \quad (2.6)$$

όπου  $e_0$  είναι η εκτίμηση ενός όρου της σχέσης (2.4) για  $\nu = 0$ .

Απόδειξη.

Η σχέση (2.6) μπορεί να γραφεί ισοδύναμα ως εξής

$$\hat{e}_\nu = \frac{c_0^2 c_{\nu+3} - c_0 c_2 c_{\nu+1} - c_0 c_1 \tilde{c}_{\nu+2} + c_1^2 c_{\nu+1}}{c_1 c_{\nu+3} - c_2 \tilde{c}_{\nu+2}}. \quad (2.7)$$

Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις για την παράμετρο  $\nu$ , αν  $\nu$  είναι άρτιος ή περιττός.

- Έστω  $\nu$  άρτιος.

Μπορούμε να γράψουμε τις ακόλουθες συνθήκες παρεμβολής

$$\begin{aligned} c_{\nu+2} &= s_1^{\nu+2} \alpha_1^2 + s_2^{\nu+2} \alpha_2^2, \\ \tilde{c}_{\nu+2} &= s_1^{\nu+2} \beta_1^2 + s_2^{\nu+2} \beta_2^2, \\ c_{\nu+3} &= s_1^{\nu+3} \alpha_1 \beta_1 + s_2^{\nu+3} \alpha_2 \beta_2, \\ c_{\nu+1} &= s_1^{\nu+1} \alpha_1 \beta_1 + s_2^{\nu+1} \alpha_2 \beta_2. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω σχέσεις, ο παρονομαστής της σχέσης (2.7) γράφεται ως

$$c_1 c_{\nu+3} - c_2 \tilde{c}_{\nu+2} = s_1 s_2^{\nu+3} \alpha_1 \beta_1 \alpha_2 \beta_2 + s_1^{\nu+3} s_2 \alpha_1 \beta_1 \alpha_2 \beta_2 - s_1^2 s_2^{\nu+2} \alpha_1^2 \beta_2^2 - s_1^{\nu+2} s_2^2 \alpha_2^2 \beta_1^2$$

και ο αριθμητής της σχέσης (2.7) μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned} c_0^2 c_{\nu+3} - c_0 c_2 c_{\nu+1} - c_0 c_1 \tilde{c}_{\nu+2} + c_1^2 c_{\nu+1} = \\ s_1^{\nu+3} \alpha_1 \alpha_2^2 \beta_1 \beta_2^2 + s_2^{\nu+3} \alpha_1^2 \alpha_2 \beta_1^2 \beta_2 - s_1^{\nu+1} s_2^2 \alpha_1 \alpha_2^2 \beta_1^3 - s_1^2 s_2^{\nu+1} \alpha_1^2 \alpha_2 \beta_2^3 - \\ - s_1^{\nu+2} s_2 (\alpha_2^3 \beta_1^2 \beta_2 - \alpha_1^2 \alpha_2 \beta_1^2 \beta_2) - s_1 s_2^{\nu+2} (\alpha_1^3 \beta_1 \beta_2^2 - \alpha_1 \alpha_2^2 \beta_1 \beta_2^2) \end{aligned}$$

λαμβάνοντας υπόψιν ότι ισχύει  $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = \beta_1^2 + \beta_2^2$ .

Επομένως, αντικαθιστώντας αριθμητή και παρονομαστή στη σχέση (2.7) παίρνουμε ότι  $\hat{e}_\nu = s_1^{-1} \alpha_1 \beta_1 + s_2^{-1} \alpha_2 \beta_2$ .

- Έστω  $\nu$  περιττός.  
Τότε, οι συνθήκες παρεμβολής είναι της μορφής

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{\nu+2} = c_{\nu+2} &= s_1^{\nu+2}\alpha_1\beta_1 + s_2^{\nu+2}\alpha_2\beta_2, \\ c_{\nu+3} &= s_1^{\nu+3}\alpha_1^2 + s_2^{\nu+3}\alpha_2^2, \\ c_{\nu+1} &= s_1^{\nu+1}\alpha_1^2 + s_2^{\nu+1}\alpha_2^2. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω σχέσεις, ο παρονομαστής της σχέσης (2.7) γράφεται ως

$$c_1c_{\nu+3} - c_2\tilde{c}_{\nu+2} = s_1s_2^{\nu+3}\alpha_1\beta_1\alpha_2^2 + s_1^{\nu+3}s_2\alpha_1^2\alpha_2\beta_2 - s_1^2s_2^{\nu+2}\alpha_1^2\alpha_2\beta_2 - s_1^{\nu+2}s_2^2\alpha_1\alpha_2^2\beta_1$$

και ο αριθμητής της σχέσης (2.7) μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned} c_0^2c_{\nu+3} - c_0c_2c_{\nu+1} - c_0c_1\tilde{c}_{\nu+2} + c_1^2c_{\nu+1} = \\ s_1^{\nu+3}\alpha_1^2\alpha_2^2\beta_2^2 + s_2^{\nu+3}\alpha_1^2\alpha_2^2\beta_1^2 - s_1^{\nu+1}s_2^2\alpha_1^2\alpha_2^2\beta_1^2 - s_1^2s_2^{\nu+1}\alpha_1^2\alpha_2^2\beta_2^2 - \\ - s_1^{\nu+2}s_2(\alpha_1\alpha_2^3\beta_1\beta_2 - \alpha_1^3\alpha_2\beta_1\beta_2) - s_1s_2^{\nu+2}(\alpha_1^3\alpha_2\beta_1\beta_2 - \alpha_1\alpha_2^3\beta_1\beta_2) \end{aligned}$$

λαμβάνοντας υπόψιν ότι ισχύει  $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = \beta_1^2 + \beta_2^2$ .

Επομένως, αντικαθιστώντας αριθμητή και παρονομαστή στη σχέση (2.7) προκύπτει ότι  $\hat{e}_\nu = s_1^{-1}\alpha_1\beta_1 + s_2^{-1}\alpha_2\beta_2$ .

□

#### Παρατήρηση 2.4.

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (2.7) αποφεύγεται η διαίρεση με το μηδέν, στην περίπτωση που  $c_1 = 0$ . Επιπλέον, ως συνέπεια της ανισότητας Cauchy-Schwarz ο παρονομαστής  $c_1c_{\nu+3} - c_2\tilde{c}_{\nu+2}$ , είναι πάντα θετικός, για έναν συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα. Όταν η ανισότητα Cauchy-Schwarz ισχύει σαν ισότητα, δηλαδή το διάνυσμα  $\mathbf{x}$  είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του πίνακα, η σχέση (2.6) δεν δουλεύει καθώς ο παρονομαστής θα είναι μηδέν.

#### Εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$

Έχοντας λοιπόν εκτιμήσει την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  και χρησιμοποιώντας την πολική ταυτότητα που έχουμε ήδη αναφέρει στην αρχή αυτού του κεφαλαίου είναι πλέον εφικτή η εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  για κάθε αντιστρέψιμο πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  και  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$  δοσμένα διανύσματα.

Θέτοντας τις ροπές  $g_n(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, (A^T A)^n \mathbf{x})$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ , η ζητούμενη διγραμμική μορφή μέσω της πολικής ταυτότητας (2.1) γράφεται ως

$$\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y} = \frac{1}{4} (g_{-1}(\mathbf{w}) - g_{-1}(\mathbf{z})), \quad (2.8)$$

όπου  $\mathbf{w} = \mathbf{x} + \mathbf{u}$ ,  $\mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{u}$  και  $\mathbf{u} = A^T \mathbf{y}$ .

Με αυτόν τον τρόπο η διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  μπορεί να εκτιμηθεί θεωρώντας τις εκτιμήσεις ενός ή δύο όρων για τις ροπές  $g_{-1}(\mathbf{w})$  και  $g_{-1}(\mathbf{z})$  από τις σχέσεις (2.5) και (2.6) αντίστοιχα.

## 2.2 Εκτιμήσεις για συμμετρικούς πίνακες

Σε πολλές εφαρμογές απαιτείται η εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ , όπου ο δοσμένος πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  είναι συμμετρικός. Σε αυτή την περίπτωση, μπορούμε να εξάγουμε επιπλέον αποτελέσματα σχετικά με την εκτίμηση της επιθυμητής διγραμμικής μορφής, τα οποία παρουσιάζονται παρακάτω.

### Σύνδεση με αριθμητική ολοκλήρωση Gauss

Ένα πρώτο αποτέλεσμα αφορά στη σύνδεση των εκτιμήσεων που έχουν προκύψει με τη μέθοδο της παρεμβολής με τα αντίστοιχα φράγματα που προκύπτουν χρησιμοποιώντας την αριθμητική ολοκλήρωση Gauss και τον αλγόριθμο Lanczos. Αυτός ο τρόπος προσέγγισης περιγράφεται στην εργασία [4] και στο βιβλίο των Golub και Meurant [38]. Στο ακόλουθο λήμμα καταγράφεται αυτή η σύνδεση.

#### Λήμμα 2.3.

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός πίνακας.

1. Η εκτίμηση ενός όρου  $e_0$  ταυτίζεται με το κάτω φράγμα της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ , που προκύπτει χρησιμοποιώντας αριθμητική ολοκλήρωση Gauss με  $k = 1$  κόμβο.
2. Η εκτίμηση δύο όρων  $\hat{e}_0$  ταυτίζεται με το κάτω φράγμα της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ , που προκύπτει χρησιμοποιώντας αριθμητική ολοκλήρωση Gauss με  $k = 2$  κόμβους.

Απόδειξη.

Σύμφωνα με το Θεώρημα 1.23, οι  $k$  κόμβοι στον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα Jacobi  $J_k$ . Ο πίνακας αυτός προκύπτει με  $k$  επαναλήψεις του αλγορίθμου Lanczos. Στο βιβλίο των Golub και Meurant [38] αποδεικνύεται ότι η εκτίμηση της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  που προκύπτει στην  $k$ -οστή επανάληψη, δίνεται από το πρώτο διαγώνιο στοιχείο του αντιστρόφου του  $k \times k$  πίνακα Jacobi  $J_k$  πολλαπλασιασμένο με  $\|\mathbf{x}\|^2$ .

1. Για  $k = 1$  Lanczos επανάληψη, ο πίνακας Jacobi είναι

$$J_1 = [\mathbf{u}^T A \mathbf{u}], \text{ όπου } \mathbf{u} = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}.$$

Οπότε,

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x} &\simeq \|\mathbf{x}\|^2 (\mathbf{u}^T A \mathbf{u})^{-1} = \|\mathbf{x}\|^2 (\mathbf{x}^T A \mathbf{x} / \|\mathbf{x}\|^2)^{-1} \\ &= c_0 (c_1 / c_0)^{-1} = c_0^2 / c_1 = e_0.\end{aligned}$$

2. Για  $k = 2$  επαναλήψεις Lanczos, έχουμε τον πίνακα Jacobi

$$J_2 = \begin{bmatrix} c_1/c_0 & \|\mathbf{r}\| \\ \|\mathbf{r}\| & \mu \end{bmatrix}, \text{ όπου } \mathbf{r} = A \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{c_1}{c_0} \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}, \quad \mu = \frac{\mathbf{r}^T A \mathbf{r}}{\|\mathbf{r}\|^2} = \frac{\mathbf{r}^T A \mathbf{r}}{\mathbf{r}^T \mathbf{r}}.$$

Αφού ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, έχουμε

$$\mathbf{r}^T \mathbf{r} = \frac{c_2}{c_0} - \frac{c_1^2}{c_0^2} \text{ και } \mathbf{r}^T A \mathbf{r} = \frac{c_3 c_0^2 + c_1^3 - 2c_1 c_2 c_0}{c_0^3}.$$

$$\text{Έτσι } \mu = \frac{\mathbf{r}^T A \mathbf{r}}{\mathbf{r}^T \mathbf{r}} = \frac{c_3 c_0^2 + c_1^3 - 2c_1 c_2 c_0}{c_0^2 c_2 - c_0 c_1^2}.$$

Ο αντίστροφος του πίνακα Jacobi είναι

$$J_2^{-1} = \frac{1}{\frac{c_1}{c_0} \mu - \|\mathbf{r}\|^2} \begin{bmatrix} \mu & -\|\mathbf{r}\| \\ -\|\mathbf{r}\| & c_1/c_0 \end{bmatrix}.$$

Οπότε,

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x} &\simeq \|\mathbf{x}\|^2 J_2^{-1}(1, 1) = c_0 \frac{\mu}{\frac{c_1}{c_0} \mu - \|\mathbf{r}\|^2} \\ &= \frac{c_1^3 + c_0^2 c_3 - 2c_0 c_1 c_2}{c_1 c_3 - c_2^2} = \frac{c_0^2}{c_1} + \frac{(c_0 c_2 - c_1^2)^2}{c_1^2 c_3 - c_1 c_2^2},\end{aligned}$$

το οποίο είναι η εκτίμηση  $\hat{e}_0$  της σχέσης (2.6), αφού  $\tilde{c}_2 = c_2$ .

□

### Περισσότερα φράγματα για την τετραγωνική μορφή $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$

Αν υποθέσουμε επιπλέον ότι ο συμμετρικός πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  είναι θετικά ορισμένος, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την ανισότητα Kantorovich για την εύρεση περισσότερων φραγμάτων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ .

Από τον ορισμό των ροπών σε περίπτωση που ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός έχουμε ότι

$$c_{-1} = (\mathbf{x}, A^{-1} \mathbf{x}), \quad c_0 = (\mathbf{x}, \mathbf{x}), \quad c_1 = (\mathbf{x}, A \mathbf{x}),$$

για κάθε  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ .

Από το ακόλουθο θεώρημα προκύπτουν φράγματα για τη ροπή  $c_{-1}$ , [15].

**Θεώρημα 2.1.**

Έστω ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ , τότε για κάθε διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ , η ροπή  $c_{-1}$  ικανοποιεί τις ανισότητες

$$\frac{c_0^2}{c_1} \leq c_{-1} \leq \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)} \cdot \frac{c_0^2}{c_1}, \quad (2.9)$$

όπου  $\kappa(A)$  είναι ο δείκτης κατάστασης του πίνακα  $A$ .

Απόδειξη.

Από την κλασική ανισότητα Kantorovich, δηλαδή την ανισότητα (1.28) για  $i = -1$ , έχουμε ότι

$$\frac{c_0^2}{c_{-1}c_1} \geq \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})^2}$$

και λαμβάνοντας υπόψιν ότι το δεύτερο μέλος της παραπάνω ανισότητας είναι ίσο με  $\frac{4\kappa(A)}{(1 + \kappa(A))^2}$  (βλέπε Παρατήρηση 1.9), προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} \frac{c_0^2}{c_{-1}c_1} &\geq \frac{4\kappa(A)}{(1 + \kappa(A))^2} \\ \Leftrightarrow c_{-1} &\leq \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)} \cdot \frac{c_0^2}{c_1}. \end{aligned}$$

Από την ανισότητα Cauchy-Schwarz, δηλαδή την (1.27) για  $i = -1$ , έχουμε

$$1 \geq \frac{c_0^2}{c_{-1}c_1} \Leftrightarrow c_{-1} \geq \frac{c_0^2}{c_1}.$$

Έτσι, προκύπτει η ζητούμενη ανισότητα.  $\square$

Λαμβάνοντας υπόψιν την ανισότητα (2.9) προκύπτει ένα άνω φράγμα για τη βέλτιστη τιμή  $\nu_0$  της παραμέτρου  $\nu$  που απαιτείται στην οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου. Το αποτέλεσμα αυτό δίνεται στην ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 2.4.**

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας. Ισχύει ότι

$$0 \leq \nu_0 \leq \frac{\log(m)}{\log(\rho)},$$

όπου  $m = \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)}$  και  $\kappa(A)$  είναι ο δείκτης κατάστασης του πίνακα  $A$ .



Απόδειξη.

Θέτοντας  $m = \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)}$  η ανισότητα (2.9) γράφεται ως

$$\frac{c_0^2}{c_1} \leq \mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x} \leq m \frac{c_0^2}{c_1}.$$

Έτσι,  $0 < e_0 \leq c_{-1} \leq m e_0$  οπότε

$$e_0 \leq c_{-1} \Rightarrow \frac{\log(1)}{\log(\rho)} \leq \frac{\log(c_{-1}/e_0)}{\log(\rho)} \Rightarrow \nu_0 \geq 0,$$

αφού  $\log(\rho) > 0$ , για  $\rho > 1$ . Αντιστοίχως, προκύπτει

$$c_{-1} \leq m e_0 \Rightarrow \log\left(\frac{c_{-1}}{e_0}\right) \leq \log(m) \Rightarrow \nu_0 \leq \frac{\log(m)}{\log(\rho)}.$$

□

**Παρατήρηση 2.5.**

Αν ο πίνακας  $A$  είναι ορθογώνιος, τότε  $\kappa(A) = 1$  και έτσι από την Πρόταση 2.4 έπεται ότι  $\nu_0 = 0$ , που συνεπάγεται  $e_0 = c_{-1}$ .

**Εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$**

Η εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  μπορεί να γίνει είτε μέσω της πολικής ταυτότητας ή με απευθείας ορισμό των ροπών.

- **Απευθείας ορισμός ροπών**

Δοθέντος ενός συμμετρικού πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ , ορίζουμε τη διγραμμική ροπή (bilinear moment)

$$c_r(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^r \mathbf{y}), \quad r \in \mathbb{Z}.$$

Ακολουθώντας τη διαδικασία που έχει περιγραφεί στην Ενότητα 2.1, προκύπτουν αντίστοιχες εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ . Συγκεκριμένα, προκύπτουν οι ακόλουθες οικογένειες εκτιμήσεων ενός και δύο όρων όπως περιγράφονται στο παρακάτω λήμμα.

**Λήμμα 2.4.**

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός πίνακας και  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ .

1. Μία οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  είναι

$$e_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = c_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})^{\nu+2} c_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})^{-2\nu-1} c_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})^\nu, \quad \nu \in \mathbb{R}. \quad (2.10)$$

2. Μία οικογένεια εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{e}_\nu$  για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  είναι

$$\hat{e}_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \frac{c_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})c_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - c_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})^2}{c_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \cdot \frac{c_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})\tilde{c}_{\nu+2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - c_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})c_{\nu+1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{c_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})c_{\nu+3}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - c_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})\tilde{c}_{\nu+2}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}, \quad \nu \in \mathbb{N},$$

όπου  $e_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  είναι η εκτίμηση ενός όρου της σχέσης (2.10) για  $\nu = 0$ .

### Παρατήρηση 2.6.

Σε περίπτωση που τα επιλεγμένα διανύσματα  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  είναι κάθετα μεταξύ τους, δηλαδή  $c_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ , ο τύπος (2.10) δεν μπορεί να εφαρμοστεί.

- **Πολική ταυτότητα**

Αφού ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, ο υπολογισμός της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  μπορεί να γίνει μέσω της πολικής ταυτότητας της μορφής

$$\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y} = \frac{1}{4} (\mathbf{w}^T A^{-1} \mathbf{w} - \mathbf{z}^T A^{-1} \mathbf{z}), \quad (2.11)$$

όπου  $\mathbf{w} = \mathbf{x} + \mathbf{y}$  και  $\mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ . Έτσι, η διγραμμική ροπή  $c_{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  γράφεται ως εξής

$$c_{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{4} (c_{-1}(\mathbf{w}) - c_{-1}(\mathbf{z})). \quad (2.12)$$

Εκτιμήσεις για τη διγραμμική ροπή  $c_{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  προκύπτουν θεωρώντας τις εκτιμήσεις ενός ή δύο όρων που έχουν παραχθεί για τις αντίστοιχες ροπές  $c_{-1}(\mathbf{w})$  και  $c_{-1}(\mathbf{z})$ .

## 2.3 Εφαρμογή στην εκτίμηση στοιχείων του αντίστροφου πίνακα

Σε αυτή την ενότητα θα εφαρμόσουμε τις παραπάνω οικογένειες εκτιμήσεων που έχουν παραχθεί για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  και τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  με σκοπό να εκτιμήσουμε τα στοιχεία του αντιστρόφου ενός πίνακα  $A$ .

Ειδικότερα, θεωρούμε έναν αντιστρέψιμο πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ . Επιλέγουμε τα διανύσματα  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  να είναι στήλες του ταυτοτικού πίνακα. Έστω  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i$

### 2.3. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΤΗΝ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΤΟΥ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΠΙΝΑΚΑ

και  $\mathbf{y} = \mathbf{e}_j$  η  $i$ -οστή και  $j$ -οστή στήλη του ταυτοτικού πίνακα αντίστοιχα, με  $i, j = 1, 2, \dots, p$ . Έτσι, έχουμε

$$\begin{aligned} c_{-1}(\mathbf{e}_i) &= (A^{-1})_{ii}, \\ c_{-1}(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) &= (A^{-1})_{ij}. \end{aligned}$$

#### Πρόταση 2.5.

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ . Μία οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για τα διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$  είναι

$$(A^{-1})_{ii} \simeq \rho_i^\nu \frac{1}{A_{ii}}, \quad \rho_i = \frac{s_i}{A_{ii}^2}, \quad s_i = \sum_{k=1}^p A_{ki}^2, \quad \nu \in \mathbb{R}.$$

Απόδειξη.  
Έχουμε

$$\begin{aligned} c_0(\mathbf{e}_i) &= \mathbf{e}_i^T \mathbf{e}_i = 1, \quad c_1(\mathbf{e}_i) = \mathbf{e}_i^T A \mathbf{e}_i = A_{ii}, \\ c_2(\mathbf{e}_i) &= (A \mathbf{e}_i)^T A \mathbf{e}_i = \mathbf{e}_i^T A^T A \mathbf{e}_i = \sum_{k=1}^p A_{ki}^2 = s_i. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω σχέσεις στον τύπο (2.5) προκύπτει το ζητούμενο.  $\square$

Αν ο δοσμένος πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός μπορούμε να λάβουμε υπόψιν τη σύνδεση των εκτιμήσεων που προκύπτουν από τη μέθοδο της παρεκβολής με τα αντίστοιχα φράγματα που βασίζονται στη χρήση της αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss και του αλγορίθμου Lanczos, όπως αυτή καταγράφεται στο Λήμμα 2.3. Επομένως, η εκτίμηση  $e_0$  της σχέσης (2.4) και η  $\hat{e}_0$  της (2.6) για  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i$  είναι κάτω φράγματα των διαγώνιων στοιχείων του  $A^{-1}$ . Τα αποτελέσματα αυτά παρουσιάζονται στα δύο λήμματα που ακολουθούν.

#### Λήμμα 2.5.

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός πίνακας. Η εκτίμηση ενός όρου για το στοιχείο  $(A^{-1})_{ii}$ ,  $e_0(\mathbf{e}_i) = 1/A_{ii}$ , ταυτίζεται με το κάτω φράγμα του  $(A^{-1})_{ii}$  που προκύπτει χρησιμοποιώντας αριθμητική ολοκλήρωση Gauss με  $k = 1$  κόμβο.

Απόδειξη.

Σύμφωνα με το Λήμμα 2.3, η εκτίμηση (η οποία είναι κάτω φράγμα με βάση τη μέθοδο Gauss) για  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  που προκύπτει στην πρώτη Lanczos επανάληψη είναι

$$\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x} \simeq \left( \frac{\mathbf{x}^T A \mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|^2} \right)^{-1} \|\mathbf{x}\|^2 = \left( \frac{c_1}{c_0} \right)^{-1} c_0 = \frac{c_0^2}{c_1},$$

και κατά συνέπεια έχουμε

$$(A^{-1})_{ii} = \mathbf{e}_i^T A^{-1} \mathbf{e}_i \simeq \frac{c_0^2(\mathbf{e}_i)}{c_1(\mathbf{e}_i)} = \frac{1}{A_{ii}}.$$

□

**Λήμμα 2.6.**

Εστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός πίνακας. Η εκτίμηση δύο όρων για το στοιχείο  $(A^{-1})_{ii}$ ,  $\hat{e}_0$  της (2.6) για  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i$  ταυτίζεται με το κάτω φράγμα του  $(A^{-1})_{ii}$  που προκύπτει χρησιμοποιώντας αριθμητική ολοκλήρωση Gauss με  $k = 2$  κόμβους.

Απόδειξη.

Χρησιμοποιώντας την αριθμητική ολοκλήρωση του Gauss με  $k = 2$  κόμβους, δηλαδή κρατώντας  $k = 2$  Lanczos επαναλήψεις, τα διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$  φράσσονται σύμφωνα με τη σχέση

$$\frac{s_{ii}}{A_{ii}s_{ii} - (\sum_{k \neq i} A_{ki}^2)^2} \leq (A^{-1})_{ii}, \quad i = 1, \dots, p, \quad (2.13)$$

όπου  $s_{ii} = \sum_{t \neq i} \sum_{k \neq i} A_{ti} A_{tk} A_{ki}$ , η οποία δίνεται στο Θεώρημα 11.1 του βιβλίου των Golub και Meurant [38, σελ. 163].

Η εκτίμηση  $\hat{e}_0$  της (2.6) για  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i$  δίνει

$$(A^{-1})_{ii} \simeq \frac{c_1^3(\mathbf{e}_i) + c_3(\mathbf{e}_i) - 2c_1(\mathbf{e}_i)c_2(\mathbf{e}_i)}{c_1(\mathbf{e}_i)c_3(\mathbf{e}_i) - c_2^2(\mathbf{e}_i)},$$

αφού  $c_0(\mathbf{e}_i) = 1$ . Για έναν συμμετρικό πίνακα  $A$ , ισχύει

$$c_1(\mathbf{e}_i) = A_{ii}, \quad c_2(\mathbf{e}_i) = \sum_{k=1}^p A_{ki}^2 = \sum_{k \neq i} A_{ki}^2 + A_{ii}^2,$$

$$\begin{aligned} c_3(\mathbf{e}_i) &= \sum_{t=1}^p \sum_{k=1}^p A_{it} A_{tk} A_{ki} = \sum_{t=1}^p \left( \sum_{k \neq i} A_{it} A_{tk} A_{ki} + A_{it} A_{ti} A_{ii} \right) \\ &= \sum_{t=1}^p \sum_{k \neq i} A_{it} A_{tk} A_{ki} + \sum_{t=1}^p A_{it} A_{ti} A_{ii} \\ &= \sum_{t \neq i} \sum_{k \neq i} A_{it} A_{tk} A_{ki} + \sum_{k \neq i} A_{it} A_{ti} A_{ii} + \sum_{t=1}^p A_{it} A_{ti} A_{ii} \\ &= s_{ii} + c_1(\mathbf{e}_i) \sum_{k \neq i} A_{ki}^2 + c_1(\mathbf{e}_i) \sum_{t=1}^p A_{it} A_{ti} \\ &= s_{ii} + c_1(\mathbf{e}_i)(c_2(\mathbf{e}_i) - c_1^2(\mathbf{e}_i)) + c_1(\mathbf{e}_i)c_2(\mathbf{e}_i) = s_{ii} + 2c_1(\mathbf{e}_i)c_2(\mathbf{e}_i) - c_1^3(\mathbf{e}_i). \end{aligned}$$

### 2.3. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΤΗΝ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΤΟΥ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΠΙΝΑΚΑ

Οπότε,  $\sum_{k \neq i} A_{ki}^2 = c_2(\mathbf{e}_i) - c_1^2(\mathbf{e}_i)$  και  $s_{ii} = c_3(\mathbf{e}_i) - 2c_1(\mathbf{e}_i)c_2(\mathbf{e}_i) + c_1^3(\mathbf{e}_i)$ .

Αντικαθιστώντας στο κάτω φράγμα της σχέσης (2.13), έχουμε

$$\frac{s_{ii}}{A_{ii}s_{ii} - (\sum_{k \neq i} A_{ki}^2)^2} = \frac{c_1^3(\mathbf{e}_i) + c_3(\mathbf{e}_i) - 2c_1(\mathbf{e}_i)c_2(\mathbf{e}_i)}{c_1(\mathbf{e}_i)c_3(\mathbf{e}_i) - c_2^2(\mathbf{e}_i)}.$$

□

Στην περίπτωση του συμμετρικού πίνακα  $A$ , μπορούν να προκύψουν επιπλέον εκτιμήσεις για τα μη-διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$ . Ειδικότερα, χρησιμοποιώντας την εκτίμηση ενός όρου  $e_\nu$ ,  $\nu \in \mathbb{R}$ , που δίνεται από τον τύπο (2.5), τα μη-διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$  μπορούν να εκτιμηθούν όπως φαίνεται στην ακόλουθη πρόταση.

#### Πρόταση 2.6.

Εστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός πίνακας. Μία οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για τα μη-διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$  είναι

$$(A^{-1})_{ij} \simeq 2^\nu \left[ \frac{[(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} + 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} + 2A_{ij})^{2\nu+1}} - \frac{[(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} - 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} - 2A_{ij})^{2\nu+1}} \right], \quad \nu \in \mathbb{R}.$$

Απόδειξη.

Από την πολική ταυτότητα έχουμε

$$(A^{-1})_{ij} \simeq \frac{1}{4} (\mathbf{w}^T A^{-1} \mathbf{w} - \mathbf{z}^T A^{-1} \mathbf{z}),$$

όπου  $\mathbf{w} = \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j$  και  $\mathbf{z} = \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j$ .

Εκτιμώντας κάθε τετραγωνική μορφή μέσω των εκτιμήσεων ενός όρου που δίνονται από τον τύπο (2.5) έχουμε

$$\mathbf{w}^T A^{-1} \mathbf{w} \simeq \rho^\nu e_0 = \rho^\nu \frac{c_0^2(\mathbf{w})}{c_1(\mathbf{w})} = \left( \frac{c_0(\mathbf{w})c_2(\mathbf{w})}{c_1^2(\mathbf{w})} \right)^\nu \frac{c_0^2(\mathbf{w})}{c_1(\mathbf{w})} = \frac{c_0^{\nu+2}(\mathbf{w})c_2^\nu(\mathbf{w})}{c_1^{2\nu+1}(\mathbf{w})},$$

όπου

$$c_0(\mathbf{w}) = 2, \quad c_1(\mathbf{w}) = A_{ii} + A_{jj} + 2A_{ij}, \quad c_2(\mathbf{w}) = (A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} + 2(A^2)_{ij}.$$

Ομοίως, έχουμε

$$\mathbf{z}^T A^{-1} \mathbf{z} \simeq \frac{c_0^{\nu+2}(\mathbf{z})c_2^\nu(\mathbf{z})}{c_1^{2\nu+1}(\mathbf{z})},$$

όπου

$$c_0(\mathbf{z}) = 2, \quad c_1(\mathbf{z}) = A_{ii} + A_{jj} - 2A_{ij}, \quad c_2(\mathbf{z}) = (A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} - 2(A^2)_{ij}.$$

Επομένως,

$$\begin{aligned} (A^{-1})_{ij} &\simeq \frac{1}{4} \left[ \frac{2^{\nu+2} [(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} + 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} + 2A_{ij})^{2\nu+1}} - \frac{2^{\nu+2} [(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} - 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} - 2A_{ij})^{2\nu+1}} \right] \\ &= 2^\nu \left[ \frac{[(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} + 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} + 2A_{ij})^{2\nu+1}} - \frac{[(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} - 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} - 2A_{ij})^{2\nu+1}} \right], \quad \nu \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

□

### Παρατήρηση 2.7.

Για  $\nu = 0$  μία εκτίμηση ενός όρου για τα μη-διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$  είναι

$$(A^{-1})_{ij} \simeq \frac{-4A_{ij}}{(A_{ii} + A_{jj})^2 - 4A_{ij}^2}, \quad i \neq j.$$

Αν ο πίνακας  $A$  είναι επιπλέον θετικά ορισμένος, εξειδικεύουμε το Θεώρημα 2.1 και προκύπτουν άνω και κάτω φράγματα για τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου ενός πίνακα  $A$ , δηλαδή  $(A^{-1})_{ii}$  για  $i = 1, 2, \dots, p$ , όπως φαίνεται και στο ακόλουθο θεώρημα, [15].

### Θεώρημα 2.2.

Εστω ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ . Τα διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$ ,  $(A^{-1})_{ii}$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , φράσσονται από

$$\frac{1}{A_{ii}} \leq (A^{-1})_{ii} \leq m \cdot \frac{1}{A_{ii}}, \quad (2.14)$$

$$\text{όπου } m = \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)}.$$

Απόδειξη.

Θεωρώντας  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i$ ,  $i = 1, \dots, p$  έχουμε

$$\begin{aligned} c_{-1} &= (\mathbf{x}, A^{-1}\mathbf{x}) = (\mathbf{e}_i, A^{-1}\mathbf{e}_i) = (A^{-1})_{ii}, \\ c_0 &= (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_i) = 1, \\ c_1 &= (\mathbf{x}, A\mathbf{x}) = (\mathbf{e}_i, A\mathbf{e}_i) = A_{ii}, \end{aligned}$$

και έτσι η διπλή ανισότητα (2.9) γράφεται στη μορφή

$$\frac{1}{A_{ii}} \leq (A^{-1})_{ii} \leq \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)} \cdot \frac{1}{A_{ii}} = m \cdot \frac{1}{A_{ii}},$$

$$\text{όπου } m = \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)}. \quad \square$$

### 2.3. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΤΗΝ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΤΟΥ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΠΙΝΑΚΑ

#### Σύνοψη των τύπων

Σε αυτό το σημείο θα συγκεντρώσουμε τους τύπους που έχουν παραχθεί σε αυτό το κεφάλαιο. Συγκεκριμένα, στον Πίνακα 2.1 συνοψίζουμε τους τύπους εκτιμήσεων των τετραγωνικών και διγραμμικών μορφών του τύπου  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  και  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  αντίστοιχα, για οποιονδήποτε αντιστρέψιμο πίνακα  $A$ . Στον Πίνακα 2.2 συγκεντρώνουμε τους αντίστοιχους τύπους εκτιμήσεων για την προσέγγιση των στοιχείων του αντιστρόφου ενός δοσμένου πίνακα  $A$  ανάλογα με τον αν είναι συμμετρικός ή οποιοσδήποτε αντιστρέψιμος πίνακας. Τέλος, στον Πίνακα 2.3 καταγράφουμε τα αποτελέσματα, θεωρητική τιμή και φράγματα, για τη βέλτιστη τιμή  $\nu_0$  της παραμέτρου  $\nu$ , από την οποία εξαρτάται η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου  $e_\nu$ .

Μορφή	Οικογένειες εκτιμήσεων
$\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$	<p>▷ ενός όρου</p> $e_\nu = \rho^\nu e_0, \rho = \frac{c_0 c_2}{c_1^2} \geq 1, \nu \in \mathbb{R}$ <p>▷ δύο όρων</p> $\hat{e}_n = e_0 + \frac{c_0 c_2 - c_1^2}{c_1} \frac{c_0 \tilde{c}_{n+2} - c_1 c_{n+1}}{c_1 c_{n+3} - c_2 \tilde{c}_{n+2}}, \quad n \in \mathbb{N}$
$\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$	$\frac{1}{4} (\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w} - \mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}),$ <p>όπου <math>\mathbf{w} = \mathbf{x} + A^T \mathbf{y}, \mathbf{z} = \mathbf{x} - A^T \mathbf{y}</math></p>

Πίνακας 2.1: Τύποι εκτίμησης τετραγωνικών και διγραμμικών μορφών για οποιονδήποτε αντιστρέψιμο πίνακα.

Ιδιότητες του $A$	Στοιχείο	Τύπος εκτίμησης
αντιστρέψιμος	$A_{ii}^{-1}$	$\rho_i^\nu \frac{1}{A_{ii}}, \quad \rho_i = \frac{s_i}{A_{ii}^2}, \quad s_i = \sum_{k=1}^p A_{ki}^2, \quad \nu \in \mathbb{R}$
αντιστρέψιμος	$A_{ij}^{-1}$	$\frac{1}{4} (\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w} - \mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}),$ <p>όπου <math>\mathbf{w} = \mathbf{e}_i + A^T \mathbf{e}_j, \mathbf{z} = \mathbf{e}_i - A^T \mathbf{e}_j</math></p>
συμμετρικός	$A_{ij}^{-1}$ $i \neq j$	$2^\nu \left[ \frac{[(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} + 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} + 2A_{ij})^{2\nu+1}} - \frac{[(A^2)_{ii} + (A^2)_{jj} - 2(A^2)_{ij}]^\nu}{(A_{ii} + A_{jj} - 2A_{ij})^{2\nu+1}} \right],$ <p style="text-align: center;"><math>\nu \in \mathbb{R}</math></p>

Πίνακας 2.2: Τύποι εκτίμησης των στοιχείων του αντιστρόφου ενός πίνακα μέσω της παρεμβολής.

Ιδιότητες του $A$	Βέλτιστη παράμετρος $\nu_0$ για την οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου
θετικά πραγματικός	▷ θεωρητική τιμή $\nu_0 = \frac{\log(c_{-1}/e_0)}{\log(\rho)}, \quad \rho = c_0 c_2 / c_1^2 > 1$ ▷ άνω φράγμα $\nu_0 \leq \frac{\log(c_1 / (c_0 \sigma_{\min}))}{\log(\rho)}$
συμμετρικός θετικά ορισμένος	▷ φράγμα $0 \leq \nu_0 \leq \frac{\log(m)}{\log(\rho)},$ όπου $m = \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)}$

Πίνακας 2.3: Φράγματα για τη βέλτιστη τιμή  $\nu_0$  της παραμέτρου της οικογένειας εκτιμήσεων ενός όρου.

## 2.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

### Υπολογιστική πολυπλοκότητα

Αρχικά, θα σημειώσουμε την υπολογιστική πολυπλοκότητα των εκτιμήσεων. Η πολυπλοκότητα των εκτιμήσεων που έχουν παραχθεί εξαρτάται από τον υπολογισμό των εμπλεκόμενων ροπών, οι οποίες περιέχουν τα γινόμενα της μορφής

$$(A^T A)^n \mathbf{x} \quad \text{ή} \quad (A A^T)^n \mathbf{x} \quad \text{και} \quad A(A^T A)^n \mathbf{x} \quad \text{ή} \quad A^T(A A^T)^n \mathbf{x}.$$

Ο υπολογισμός αυτών των γινομένων γίνεται μέσω του υπολογισμού διαδοχικών γινομένων πινάκων με διανύσματα και όχι απευθείας. Ενδεικτικά αναφέρουμε τον τρόπο υπολογισμού των ροπών  $c_1 = (\mathbf{x}, A\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A\mathbf{x}$  και  $c_2 = (\mathbf{x}, A^T A\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A^T A\mathbf{x}$ . Πρώτα υπολογίζουμε το γινόμενο πίνακα με διάνυσμα  $\mathbf{w}_1 = A\mathbf{x}$  και έχουμε

$$c_1 = \mathbf{x}^T \mathbf{w}_1 \quad \text{και} \quad c_2 = \mathbf{w}_1^T \mathbf{w}_1.$$

Έτσι, οι παραχθείσες εκτιμήσεις απαιτούν τον υπολογισμό εσωτερικών γινομένων (inner products - ip's) και το γινόμενο πινάκων-διανυσμάτων (matrix-vector products - mvp's).

Στον Πίνακα 2.4 καταγράφουμε το πλήθος των αριθμητικών πράξεων που απαιτούνται για τον υπολογισμό των εκτιμήσεων  $e_\nu$  και  $\hat{e}_\nu$ , για πυκνούς (dense) και banded πίνακες με bandwidth  $s$ .



## 2.4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Πίνακας $A$	$e_\nu$	$\hat{e}_\nu, \nu$ άρτιος	$\hat{e}_\nu, \nu$ περιττός
dense	$\mathcal{O}(p^2)$	$\mathcal{O}((\nu + 3)p^2)$	$\mathcal{O}((\nu + 2)p^2)$
συμμετρικός dense	$\mathcal{O}(p^2)$	$\mathcal{O}((\nu/2 + 2)p^2)$	$\mathcal{O}((\nu/2 + 3/2)p^2)$
banded	$\mathcal{O}(sp)$	$\mathcal{O}((\nu + 3)sp)$	$\mathcal{O}((\nu + 2)sp)$
συμμετρικός banded	$\mathcal{O}(sp)$	$\mathcal{O}((\nu/2 + 2)sp)$	$\mathcal{O}((\nu/2 + 3/2)sp)$

Πίνακας 2.4: Αριθμητικές πράξεις για την εκτίμηση της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ .

Στον Πίνακα 2.5 καταγράφουμε το πλήθος των αριθμητικών πράξεων που απαιτούνται για την εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  χρησιμοποιώντας τη σχέση (2.8), για οποιονδήποτε πίνακα  $A$ . Ο τύπος (2.12) απαιτεί τον διπλάσιο αριθμό των πράξεων που αναφέρονται στον Πίνακα 2.4 για συμμετρικούς πίνακες. Παρατηρούμε ότι ο υπολογισμός κάθε ροπής  $g_n(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, (A^T A)^n \mathbf{x})$ ,  $n = 0, 1, \dots$ , απαιτεί  $n$  mvp's.

Πίνακας $A$	$e_0$	$e_\nu$	$\hat{e}_\nu$
μη-συμμετρικός	$\mathcal{O}(3p^2)$	$\mathcal{O}(5p^2)$	$\mathcal{O}((2\nu + 7)p^2)$

Πίνακας 2.5: Αριθμητικές πράξεις για την εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ .

Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε αριθμητικά παραδείγματα ώστε να μελετήσουμε τη συμπεριφορά των εκτιμήσεων ενός και δύο όρων που έχουν παραχθεί. Όλοι οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας το υπολογιστικό πακέτο MATLAB (R2009b), 64-bit, σε υπολογιστή Intel Core i7, με RAM 8 Gb. Οι ακριβείς τιμές που καταγράφονται στα παραδείγματα έχουν υπολογιστεί χρησιμοποιώντας την έτοιμη συνάρτηση “inv” του MATLAB. Η βέλτιστη τιμή  $\nu_0$  της παραμέτρου  $\nu$  που απαιτείται στην οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου και καταγράφεται στα ακόλουθα παραδείγματα δίνεται από το Λήμμα 2.2.

### Εκτίμηση τετραγωνικών και διγραμμικών μορφών

#### Παράδειγμα 2.1. Ο πίνακας Parter

Θεωρούμε τον πίνακα Parter διάστασης  $p = 1000$ , ο οποίος είναι ένας Cauchy και Toeplitz πίνακας, καλής κατάστασης ( $\kappa(A) = 4.2306$ ), με στοιχεία  $A_{ij} = 1/(i - j + 0.5)$ . Ο πίνακας αυτός μπορεί να βρεθεί στη MATLAB gallery,

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΓΡΑΜΜΙΚΗΣ ΜΟΡΦΗΣ $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$

[68]. Επιλέγουμε το διάνυσμα  $\mathbf{x}$  να είναι ένα τυχαίο διάνυσμα μήκους  $p$  που προέρχεται από την κανονική κατανομή. Στον Πίνακα 2.6 καταγράφουμε τις εκτιμήσεις που προκύπτουν χρησιμοποιώντας τις οικογένειες εκτιμήσεων ενός και δύο όρων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$  με τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα. Η ακριβής τιμή της επιθυμητής τετραγωνικής μορφής είναι  $2.0500e2$ . Σχετικά με την οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου  $e_\nu$ , η βέλτιστη παράμετρος είναι  $\nu_0 = -9.9987e-1$ . Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε τόσο οι εκτιμήσεις ενός όρου όσο και η εκτίμηση δύο όρων μπορούν να επιτύχουν ικανοποιητικές προσεγγίσεις για την επιθυμητή τετραγωνική μορφή.

	$e_{-1.1}$	$e_{-1}$	$e_{-0.9}$	$\hat{e}_0$
Rel	$8.8595e-2$	$1.2043e-4$	$9.6942e-2$	$6.5475e-4$
Est	$1.8684e2$	$2.0497e2$	$2.2487e2$	$2.0486e2$

Πίνακας 2.6: Εκτιμήσεις για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ .

Στη συνέχεια παράγουμε εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ , όπου  $A$  είναι ο πίνακας Parter διάστασης  $p = 1000$ ,  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_1$  (δηλαδή η πρώτη στήλη του ταυτοτικού πίνακα) και  $\mathbf{y}$  είναι ένα τυχαίο διάνυσμα μήκους  $p$  με θετικά στοιχεία τα οποία προέρχονται από την ομοιόμορφη κατανομή. Η εκτίμηση της διγραμμικής μορφής μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας την πολική ταυτότητα (2.8). Αρχικά λοιπόν θα εκτιμήσουμε τις απαιτούμενες τετραγωνικές μορφές  $\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w}$ ,  $\mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}$ , όπου  $\mathbf{w} = \mathbf{x} + A^T \mathbf{y}$  και  $\mathbf{z} = \mathbf{x} - A^T \mathbf{y}$ . Στον Πίνακα 2.7 καταγράφουμε τα σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων που προκύπτουν για την εκάστοτε τετραγωνική μορφή. Σχετικά με την οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου  $e_\nu$ , η βέλτιστη παράμετρος για την εκτίμηση της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w}$  είναι  $\nu_0 = 4.5037$  και για την  $\mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}$  είναι  $\nu_0 = 4.4096$ .

	$e_{4.4}$	$e_{4.5}$	$e_{4.55}$	$\hat{e}_0$	$\hat{e}_1$
$\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w}$	$1.1542e-2$	$4.1457e-4$	$5.1958e-3$	$2.4077e-1$	$2.5865e-1$
$\mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}$	$9.2693e-4$	$8.8021e-3$	$1.3635e-2$	$2.0813e-1$	$2.2340e-1$

Πίνακας 2.7: Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων για τις τετραγωνικές μορφές  $\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w}$ ,  $\mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}$ .

Έχοντας εκτιμήσει τις δύο τετραγωνικές μορφές  $\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w}$  και  $\mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}$  προκύπτουν οι εκτιμήσεις που καταγράφονται στον Πίνακα 2.8 για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  μέσω της πολικής ταυτότητας (2.8).

## 2.4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

	$e_{4.4}$	$e_{4.5}$	$e_{4.55}$	$\hat{e}_0$	$\hat{e}_1$
Rel	1.0620e-1	8.2208e-2	7.0061e-2	5.3186e-1	5.7301e-1

Πίνακας 2.8: Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ .

**Παράδειγμα 2.2.** Απευθείας ορισμός ροπών - Πολική ταυτότητα.

Σε αυτό το παράδειγμα, συγκρίνουμε τη συμπεριφορά των εκτιμήσεων ενός όρου για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  που προκύπτουν είτε με απευθείας ορισμό των ροπών μέσω του τύπου (2.10) είτε μέσω της πολικής ταυτότητας (2.11) για συμμετρικούς πίνακες. Θεωρούμε την τιμή της παραμέτρου που απαιτείται στην οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου  $\nu = 1$ .

Ειδικότερα, δοκιμάζουμε τους συμμετρικούς πίνακες  $A = \text{covariance}(4000, 1, 5)$  και τον πίνακα KMS με  $r = 0.2$  διάστασης  $p = 1000$ , οι οποίοι περιγράφονται στην Ενότητα 1.7. Τα διανύσματα  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  καταγράφονται στον Πίνακα 2.9. Με  $\mathbf{1}$  συμβολίζουμε το διάνυσμα κατάλληλης διάστασης με όλα τα στοιχεία ίσα με ένα και με  $\text{rand}$  δηλώνουμε ένα τυχαίο διάνυσμα κατάλληλου μήκους με θετικά στοιχεία τα οποία προέρχονται από την ομοιόμορφη κατανομή. Τα σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων δίνονται στον Πίνακα 2.9.

$A$	$\mathbf{x}$	$\mathbf{y}$	πολική ταυτ.	απευθείας υπολ.
$\text{covariance}(4000, 1, 5)$	$\mathbf{e}_{100}$	$\text{rand}$	8.0918e-1	2.8619e-6
$\text{KMS}(1000, 0.2)$	$\text{rand}$	$\mathbf{1}$	1.5315e-3	4.4940e-5

Πίνακας 2.9: Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση της διγραμμικής μορφής  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  για συμμετρικούς πίνακες.

Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στον Πίνακα 2.9, ο απευθείας τρόπος εκτίμησης δίνει καλύτερα αποτελέσματα εν συγκρίσει με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που προκύπτουν χρησιμοποιώντας την πολική ταυτότητα (2.11). Η διαφορά των σχετικών σφαλμάτων είναι αρκετά μεγάλη στην περίπτωση του πίνακα συνδιακύμανσης που αναφέρουμε. Μία εξήγηση αυτής της παρατήρησης είναι ότι οι εκτιμήσεις των δύο τετραγωνικών μορφών που υπολογίζονται στην πολική ταυτότητα είναι πολύ κοντά μεταξύ τους και έτσι προκύπτει η αφαίρεση πολύ κοινών ποσοτήτων. Συγκεκριμένα, οι δύο αυτές τετραγωνικές μορφές προσεγγίζονται από  $\mathbf{w}^T A^{-1} \mathbf{w} \simeq c_{-1}(\mathbf{w}) = 0.8830$  και  $\mathbf{z}^T A^{-1} \mathbf{z} \simeq c_{-1}(\mathbf{z}) = 0.8799$ .

Εκτίμηση των στοιχείων του  $A^{-1}$

**Παράδειγμα 2.3.** Μονοτονία των εκτιμήσεων ενός όρου.

Σε αυτό το παράδειγμα, ελέγχουμε τη μονοτονία της συνάρτησης  $e_\nu = \rho^\nu e_0$  των εκτιμήσεων ενός όρου που δίνεται από τη σχέση (2.5).

Αρχικά, θεωρούμε τον πίνακα Parter διάστασης  $p = 3000$ , ο οποίος περιγράφεται στο Παράδειγμα 2.1. Στον Πίνακα 2.10 καταγράφουμε τις εκτιμήσεις για το στοιχείο  $A_{1500,1500}^{-1} = 2.0271e - 1$ . Η βέλτιστη τιμή του  $\nu$  είναι  $\nu_0 = -9.9978e - 1$ . Παρατηρούμε ότι πράγματι η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου  $e_\nu$  είναι αύξουσα συνάρτηση του  $\nu$ , αφού  $c_1 = 2 > 0$ .

$\nu$	$e_\nu$	Σχετικό σφάλμα
-1	2.0267e-1	1.9821e-4
$\nu_0$	2.0271e-1	Ακριβής τιμή
-0.9	2.2182e-1	9.4289e-2
-0.8	2.4279e-1	1.9771e-1
-0.7	2.6573e-1	3.1090e-1
-0.6	2.9084e-1	4.3478e-1
-0.5	3.1833e-1	5.7038e-1

Πίνακας 2.10: Αύξουσα οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για το στοιχείο  $A_{1500,1500}^{-1} = 2.0271e - 1$ , για τον πίνακα Parter διάστασης  $p = 3000$ .

Επίσης, θεωρούμε τον πίνακα orsreg1 διάστασης  $p = 2205$ , από τη συλλογή πινάκων SuiteSparse Matrix Collection [23]. Ο πίνακας αυτός είναι αραιός και κακής κατάστασης ( $\kappa(A) = 1.5394e4$ ). Στον Πίνακα 2.11 παρουσιάζουμε τις εκτιμήσεις ενός όρου που προκύπτουν για το στοιχείο  $A_{1490,1490}^{-1} = -5.7741e - 3$  για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $\nu$ . Η βέλτιστη τιμή του  $\nu$  είναι  $\nu_0 = 5.0027$ . Παρατηρούμε ότι η οικογένεια εκτιμήσεων  $e_\nu$  είναι φθίνουσα συνάρτηση του  $\nu$ , καθώς  $c_1 = -1.2640e4 < 0$ .

## 2.4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

$\nu$	$e_\nu$	Σχετικό σφάλμα
3	-1.0365e-3	8.2048e-1
3.5	-1.5915e-3	7.2437e-1
4	-2.4436e-3	5.7680e-1
4.5	-3.7519e-3	3.5022e-1
5	-5.7606e-3	2.3254e-3
$\nu_0$	-5.7741e-3	Ακριβής τιμή
5.5	-8.8448e-3	5.3183e-1
6	-1.3580e-2	1.3520e0
6.5	-2.0851e-2	2.6112e0

Πίνακας 2.11: Φθίνουσα οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για το στοιχείο  $A_{1490,1490}^{-1} = -5.7741e - 3$ , για τον πίνακα orsreg1 διάστασης  $p = 2205$ .

**Παράδειγμα 2.4.** Σύγκριση με τη μέθοδο της αριθμητικής ολοκλήρωσης *Gauss*.

Θεωρούμε τον πίνακα Poisson διάστασης  $p = 900$  ο οποίος περιγράφεται στην Ενότητα 1.7. Ο πίνακας Poisson χρησιμοποιείται σε παρόμοιο παράδειγμα στο βιβλίο [38, Πίνακας 11.6]. Υπολογίζουμε το στοιχείο  $A_{150,150}^{-1} = 0.3602$ . Βλέπουμε ότι η εκτίμηση  $e_0$ , που είναι επίσης το κάτω φράγμα που λαμβάνεται από την αριθμητική ολοκλήρωση Gauss με  $k = 1$  κόμβο, δηλαδή κρατώντας μόνο μία Lanczos επανάληψη, δεν είναι καλή προσέγγιση. Ωστόσο, για  $\nu = 2.12$  η εκτίμηση  $e_\nu = 0.3599$  είναι μία καλή προσέγγιση που επιτυγχάνεται με ένα μόνο mvp. Η βέλτιστη τιμή του  $\nu$  για την οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου είναι  $\nu_0 = 2.1250$ .

Χρησιμοποιώντας τον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss με  $k = 20$  κόμβους, λαμβάνουμε την ίδια τιμή 0.3599 που προκύπτει και με την εκτίμηση ενός όρου  $e_{2.12}$ . Μία πολύ καλή προσέγγιση του επιθυμητού διαγώνιου στοιχείου επιτυγχάνεται με χρήση της αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss με  $k = 40$  κόμβους. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 2.12.

	$e_0 = \text{Gauss}$ $k = 1$	$e_{2.1}$	$e_{2.12}$	$\hat{e}_0 = \text{Gauss}$ $k = 2$	$\hat{e}_1$	Gauss $k = 20$	Gauss $k = 40$
Rel	3.0593e-1	4.2858e-3	8.5768e-4	1.4576e-1	1.6555e-1	8.2489e-4	2.9294e-5
Est	0.2500	0.3586	0.3599	0.3077	0.3006	0.3599	0.3602

Πίνακας 2.12: Εκτιμήσεις για το διαγώνιο στοιχείο  $A_{150,150}^{-1} = 0.3602$  του πίνακα Poisson διάστασης  $p = 900$ .

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΓΡΑΜΜΙΚΗΣ ΜΟΡΦΗΣ $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$

Επιπλέον, θεωρούμε τον πίνακα Heat flow διάστασης  $p = 900$  με  $u = 0.2$ , ο οποίος έχει δείκτη κατάστασης  $\kappa(A) = 2.6$ . Ο πίνακας αυτός υπάρχει και στην εργασία [4, Πίνακας 1]. Αναλυτική περιγραφή αυτού του πίνακα μπορεί να βρεθεί στην Ενότητα 1.7. Στον Πίνακα 2.13 καταγράφουμε τα αποτελέσματα για την εκτίμηση του διαγώνιου στοιχείου  $A_{1,1}^{-1} = 0.5702$ . Η βέλτιστη τιμή της παραμέτρου  $\nu$  για την  $e_\nu$  είναι  $\nu_0 = 1.0668$ . Παρατηρούμε ότι το σχετικό σφάλμα της εκτίμησης  $e_\nu$  για  $\nu = 1$  (το οποίο είναι πολύ κοντά στη βέλτιστη τιμή  $\nu_0$ ) είναι της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-3})$ . Οι εκτιμήσεις δύο όρων  $\hat{e}_0$  και  $\hat{e}_1$  δεν βελτιώνουν την τάξη του σχετικού σφάλματος. Όμως, χρησιμοποιώντας την εκτίμηση που προκύπτει με την αριθμητική ολοκλήρωση του Gauss με μόνο  $k = 4$  κόμβους, η τάξη του σχετικού σφάλματος είναι  $\mathcal{O}(10^{-6})$ .

	$e_0 = \text{Gauss}$ $k = 1$	$e_1$	$\hat{e}_0 = \text{Gauss}$ $k = 2$	$\hat{e}_1$	Gauss $k = 4$
Rel	2.5686e-2	1.6284e-3	1.0194e-3	1.4790e-3	2.2083e-6
Est	0.5556	0.5693	0.5696	0.5694	0.5702

Πίνακας 2.13: Εκτιμήσεις για το διαγώνιο στοιχείο  $A_{1,1}^{-1} = 0.5702$  του πίνακα Heat flow διάστασης  $p = 900$ .

**Παράδειγμα 2.5.** *Εκτίμηση των στοιχείων του αντιστρόφου πινάκων συνδιακύμανσης.*

Σε αυτό το παράδειγμα, εκτιμούμε στοιχεία του αντιστρόφου πινάκων συνδιακύμανσης της μορφής  $A = \text{covariance}(p, \alpha, \beta)$  διάστασης  $p = 4000$ , όπως αυτοί περιγράφονται στην Ενότητα 1.7. Αρχικά, παράγουμε εκτιμήσεις για το μη-διαγώνιο στοιχείο  $A_{8,9}^{-1} = -1.5030e - 3$  του αντιστρόφου του πίνακα συνδιακύμανσης με  $\alpha = 3/2$  και  $\beta = 3$ . Στον Πίνακα 2.14 καταγράφουμε τις εκτιμήσεις που προκύπτουν για το επιθυμητό στοιχείο του  $A^{-1}$  με χρήση του τύπου που δίνεται στην Πρόταση 2.6, για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $\nu$ , με τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα.

	$\nu = 0$	$\nu = 1/4$	$\nu = 1/2$	$\nu = 3/4$	$\nu = 1$
Rel	1.9918e-5	3.9837e-3	8.0001e-3	1.2029e-2	1.6071e-2
Est	-1.5030e-3	-1.5090e-3	-1.5150e-3	-1.5211e-3	-1.5272e-3

Πίνακας 2.14: Εκτιμήσεις για το μη-διαγώνιο στοιχείο  $A_{8,9}^{-1} = -1.5030e - 3$  του πίνακα συνδιακύμανσης διάστασης  $p = 4000$ .

## 2.4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στη συνέχεια εκτιμούμε όλα τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου πινάκων συνδιακύμανσης διάστασης  $p = 4000$  για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $\alpha, \beta$ . Η ποιότητα των αποτελεσμάτων που προκύπτουν ελέγχεται από το μέσο σχετικό σφάλμα των διαγώνιων στοιχείων του πίνακα το οποίο ορίζεται ως

$$\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \frac{|(A^{-1})_{ii} - e(e_i)|}{|(A^{-1})_{ii}|}.$$

Στον Πίνακα 2.15 παρουσιάζουμε τα μέσα σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση αυτών των πινάκων χρησιμοποιώντας την εκτίμηση ενός όρου  $e_\nu$  για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $\nu$ . Η τελευταία στήλη του Πίνακα περιέχει τον χρόνο εκτέλεσης υπολογισμένο σε δευτερόλεπτα για την εκτίμηση ολόκληρης της διαγωνίου.

$(\alpha, \beta)$	$\kappa(A)$	$e_0$	$e_{1/4}$	$e_{1/2}$	$e_{3/4}$	$e_1$	Χρόνος
(1,2)	2.9956e3	2.4416e-4	1.8553e-4	1.2510e-4	6.2785e-5	3.3206e-5	4.3279e-2
(1/2,4)	7.6118e1	3.0162e-3	2.3172e-3	1.6111e-3	8.9787e-4	1.8367e-4	3.5464e-2
(1,1)	2.9109e3	2.6710e-4	1.8500e-4	9.9504e-5	4.4659e-5	8.2616e-5	3.6578e-2

Πίνακας 2.15: Μέσο σχετικό σφάλμα για την εκτίμηση της διαγωνίου του αντιστρόφου πινάκων συνδιακύμανσης διάστασης  $p = 4000$ .

**Παράδειγμα 2.6.** Φράγματα για τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου ενός πίνακα.

Έστω ο πίνακας KMS  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  με  $r = 0.2$ , ο οποίος περιγράφεται στην Ενότητα 1.7. Στον Πίνακα 2.16 καταγράφουμε τα φράγματα για τα διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$  που δίνονται από τη σχέση (2.14) για διάφορες διαστάσεις  $p$  του πίνακα KMS.

Τα κάτω φράγματα για όλα τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου του πίνακα  $A$  είναι ίσα με 1 καθώς όλα τα διαγώνια στοιχεία του  $A$  είναι ίσα με 1. Επίσης, τα άνω φράγματα είναι ίσα μεταξύ τους για όλα τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου του  $A$  καθώς το άνω φράγμα προκύπτει από το κάτω πολλαπλασιασμένο με τον παράγοντα  $m = \frac{(1 + \kappa(A))^2}{4\kappa(A)}$  ο οποίος είναι ο ίδιος για όλα τα διαγώνια στοιχεία του  $A$ .

Αξίζει να σημειωθεί ότι ο αντίστροφος του πίνακα KMS, που δίνεται από τον τύπο (1.31), εξαρτάται μόνο από την τιμή της παραμέτρου  $r$  και όχι από τη διάσταση  $p$ . Αυτό γίνεται φανερό και από τον Πίνακα 2.16. Από την άλλη πλευρά, ο δείκτης κατάστασης του πίνακα KMS προσεγγίζεται από τον τύπο (1.32) για μεγάλες τιμές του  $p$  και έτσι εξηγείται γιατί είναι σχεδόν ίδιος για τα διάφορα  $p$ .

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΓΡΑΜΜΙΚΗΣ ΜΟΡΦΗΣ  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$

$p$	$\kappa(A)$	Διαγ. Στοιχ. $i$	Ακριβής τιμή	Κάτω φράγμα	Άνω φράγμα
100	2.2490	1, 100	1.0417	1.0000	1.1734
		2, ..., 99	1.0833	1.0000	1.1734
200	2.2498	1, 200	1.0417	1.0000	1.1736
		2, ..., 199	1.0833	1.0000	1.1736
500	2.2500	1, 500	1.0417	1.0000	1.1736
		2, ..., 499	1.0833	1.0000	1.1736
1000	2.2500	1, 1000	1.0417	1.0000	1.1736
		2, ..., 999	1.0833	1.0000	1.1736

Πίνακας 2.16: Φράγματα για τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου του πίνακα KMS.

Επιπλέον, θεωρούμε τον ορθογώνιο Chebyshev-Vandermode πίνακας  $Q$  τα στοιχεία του οποίου δίνονται από τον τύπο  $Q_{ij} = \cos\left((i-1)(j-1)\frac{\pi}{p-1}\right)$ . Ο πίνακας αυτός υπάρχει στη MATLAB gallery και τον καλούμε με την εντολή  $Q = \text{gallery}('orthog', p, -1)$ , όπου  $p$  είναι η διάσταση του πίνακα  $Q$ . Θεωρούμε τον πίνακα  $A = Q^T Q$  ο οποίος είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Ο πίνακας  $A$  είναι καλής κατάστασης (όπως φαίνεται και από το δείκτη κατάστασης του  $A$  στον Πίνακα 2.17). Τα διαγώνια στοιχεία του  $A$  για  $i = 2, 3, \dots, p-1$  είναι ίσα μεταξύ τους και  $A_{11} = A_{pp}$ .

$p$	$\kappa(A)$	Διαγ. Στοιχ. $i$	Ακριβής τιμή	Κάτω φράγμα	Άνω φράγμα
100	2.1473	1, 100	0.0100	0.0100	0.0115
		2, ..., 99	0.0200	0.0198	0.0228
200	2.1028	1, 200	0.0050	0.0050	0.0057
		2, ..., 199	0.0100	0.0100	0.0114
500	2.0643	1, 500	0.0020	0.0020	0.0023
		2, ..., 499	0.0040	0.0040	0.0045
1000	2.0452	1, 1000	0.0010	0.0010	0.0011
		2, ..., 999	0.0020	0.0020	0.0023

Πίνακας 2.17: Φράγματα για τα διαγώνια στοιχεία του αντίστροφου πίνακα.

Ο πίνακας  $A$  έχει μικρό δείκτη κατάστασης, κι έτσι το άνω φράγμα, το οποίο εξαρτάται από αυτόν, είναι “κοντά” στο κάτω φράγμα. Κατά συνέπεια, τα φράγματα που προκύπτουν με αυτή τη μέθοδο είναι πολύ καλές προσεγγίσεις των διαγώνιων στοιχείων του αντιστρόφου του  $A$ .



## Κεφάλαιο 3

# Εκτίμηση της διαγωνίου συναρτήσεων πινάκων

Σε αυτό το κεφάλαιο, προσαρμόζουμε και συγκρίνουμε μία μέθοδο παρεκβολής με τη μέθοδο που βασίζεται στους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss (single και block) για την προσέγγιση ολόκληρης της διαγωνίου μίας συνάρτησης  $f$  ενός πίνακα  $A$ , δηλαδή του πίνακα  $f(A)$ . Στην ουσία, χρησιμοποιώντας αυτές τις μεθόδους προκύπτουν εκτιμήσεις για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T f(A) \mathbf{x}$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ , και επιλέγοντας το διάνυσμα  $\mathbf{x}$  να είναι η  $i$ -οστή στήλη του ταυτοτικού πίνακα, παράγονται εκτιμήσεις για τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα  $f(A)$ . Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτό το κεφάλαιο είναι μέρος της εργασίας [35].

Ας υποθέσουμε ότι ο δοσμένος πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  είναι συμμετρικός και ότι η συνάρτηση  $f$  είναι ομαλή και ορίζεται στο φάσμα του  $A$ . Θεωρούμε τη φασματική παραγοντοποίηση του πίνακα  $A$ , η οποία δίνεται από τη σχέση (1.1) και αποτελεί βασικό εργαλείο για την ανάπτυξη των προαναφερόμενων μεθόδων, που μας επιτρέπει να εκφράσουμε τον πίνακα  $A$  ως το άθροισμα

$$A = \sum_{k=1}^p \lambda_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k^T,$$

όπου  $\lambda_k \in \mathbb{R}$  οι ιδιοτιμές του πίνακα  $A$  με αντίστοιχα κανονικοποιημένα ιδιοδιανύσματα  $\mathbf{v}_k$ . Ο πίνακας  $f(A)$  είναι επίσης συμμετρικός [48], οπότε για κάθε διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$  έχουμε

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \sum_{k=1}^p \lambda_k(\mathbf{v}_k, \mathbf{x}) \mathbf{v}_k \quad \text{και} \quad f(\mathbf{A})\mathbf{x} = \sum_{k=1}^p f(\lambda_k)(\mathbf{v}_k, \mathbf{x}) \mathbf{v}_k.$$

Επομένως, η τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T f(\mathbf{A}) \mathbf{x}$  μπορεί να εκφραστεί ως το ακόλου-

θο άθροισμα

$$\mathbf{x}^T f(A)\mathbf{x} = \sum_{k=1}^p f(\lambda_k)(\mathbf{x}, \mathbf{v}_k)^2. \quad (3.1)$$

Η σχέση (3.1) αποτελεί κλειδί τόσο για τη μέθοδο της παρεκβολής όσο και για τις μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss. Ειδικότερα, στη μέθοδο της παρεκβολής ορίζουμε τις ροπές του πίνακα  $A$  ως ακολούθως

$$c_n = (\mathbf{x}, A^n \mathbf{x}), \quad n \in \mathbb{R},$$

οι οποίες μπορούν να γραφούν σαν άθροισματα χρησιμοποιώντας τη σχέση (3.1) για  $f(t) = t^n$ ,  $n \in \mathbb{R}$ . Κρατώντας λίγους όρους στα άθροισματα των ροπών  $c_0$ ,  $c_1$  και  $c_2$ , τα οποία θεωρούμε ως συνθήκες παρεμβολής, προκύπτουν εκτιμήσεις για την επιθυμητή διγραμμική μορφή.

Από την άλλη πλευρά, εκφράζοντας το άθροισμα (3.1) σαν ένα Riemann-Stieltjes ολοκλήρωμα μπορεί να εκτιμηθεί μέσω των κανόνων αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss.

### 3.1 Η μέθοδος της παρεκβολής στην εκτίμηση της διαγωνίου του πίνακα $f(A)$

Η τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T f(A)\mathbf{x} = (\mathbf{x}, f(A)\mathbf{x})$  μπορεί να εκτιμηθεί μέσω της οικογένειας εκτιμήσεων ενός όρου που έχει παραχθεί στην εργασία [32] και δίνεται από τη σχέση

$$e_{f,\nu} = f\left(\rho^\nu \frac{c_1}{c_0}\right) c_0, \quad \rho = \frac{c_0 c_2}{c_1^2}, \quad \nu \in \mathbb{R}, \quad c_n = (\mathbf{x}, A^n \mathbf{x}), \quad n \in \mathbb{R}. \quad (3.2)$$

Τώρα, μπορούμε να εκτιμήσουμε τη διαγώνιο του πίνακα  $f(A)$  και το αποτέλεσμα δίνεται στην ακόλουθη πρόταση.

#### Πρόταση 3.1.

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός πίνακας. Η διαγώνιος του πίνακα  $f(A)$  μπορεί να εκτιμηθεί από το διάνυσμα  $\mathbf{d} = [d_1, \dots, d_p] \in \mathbb{R}^p$ , όπου

$$d_i = f\left(\rho_i^\nu A_{ii}\right), \quad \rho_i = \frac{s_i}{A_{ii}^2}, \quad s_i = \sum_{k=1}^p A_{ki}^2, \quad i = 1, 2, \dots, p, \quad \nu \in \mathbb{C}. \quad (3.3)$$

Η βέλτιστη τιμή  $\nu_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , της παραμέτρου  $\nu$  για την εκτίμηση κάθε διαγωνίου στοιχείου  $(f(A))_{ii}$  είναι

$$\nu_i = \frac{\log(f^{-1}((f(A))_{ii})) - \log A_{ii}}{\log s_i - 2 \log A_{ii}}, \quad (3.4)$$

### 3.1. Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΗΣ ΠΑΡΕΚΒΟΛΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΓΩΝΙΟΥ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ $F(A)$

---

δεδομένου ότι η συνάρτηση  $f$  είναι αντιστρέψιμη.

Απόδειξη.

Για  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i$ , οι απαιτούμενες ροπές της σχέσης (3.2) είναι

$$\begin{aligned} c_0(\mathbf{e}_i) &= \mathbf{e}_i^T \mathbf{e}_i = 1, & c_1(\mathbf{e}_i) &= \mathbf{e}_i^T A \mathbf{e}_i = A_{ii}, \\ c_2(\mathbf{e}_i) &= \mathbf{e}_i^T A^2 \mathbf{e}_i = \sum_{k=1}^p A_{ki}^2 = s_i \end{aligned}$$

και  $\mathbf{e}_i^T f(A) \mathbf{e}_i = (f(A))_{ii}$ . Αντικαθιστώντας τις παραπάνω σχέσεις στον τύπο (3.2) παίρνουμε το ζητούμενο.

Επίσης, για μία αντιστρέψιμη συνάρτηση  $f$  έχουμε

$$\begin{aligned} d_i = (f(A))_{ii} &\Rightarrow f(\rho_i^{\nu_i} A_{ii}) = (f(A))_{ii} \\ &\Rightarrow \rho_i^{\nu_i} A_{ii} = f^{-1}((f(A))_{ii}) \\ &\Rightarrow \rho_i^{\nu_i} = \frac{f^{-1}((f(A))_{ii})}{A_{ii}} \\ &\Rightarrow \log \rho_i^{\nu_i} = \log \left( \frac{f^{-1}((f(A))_{ii})}{A_{ii}} \right) \\ &\Rightarrow \nu_i = \frac{\log \left( \frac{f^{-1}((f(A))_{ii})}{A_{ii}} \right)}{\log \rho_i} \\ &\Rightarrow \nu_i = \frac{\log(f^{-1}((f(A))_{ii})) - \log A_{ii}}{\log s_i - 2 \log A_{ii}}. \end{aligned}$$

□

#### Παρατήρηση 3.1.

Αν η παράμετρος  $\nu$  είναι πραγματικός αριθμός και η συνάρτηση  $f$  είναι μονότονη, τότε ανάλογα με το πρόσημο του διαγώνιου στοιχείου  $A_{ii}$  προκύπτει η μονοτονία των εκτιμήσεων  $d_i$  ως συνάρτηση του  $\nu$ , [32].

#### Παρατήρηση 3.2.

Θεωρώντας τον τύπο (3.3) για  $f(t) = t^{-1}$ , έχουμε ότι τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου προσεγγίζονται από τη σχέση

$$(A^{-1})_{ii} \simeq d_i = \rho_i^{-\nu} \frac{1}{A_{ii}}, \quad \rho_i = \frac{s_i}{A_{ii}^2}, \quad s_i = \sum_{k=1}^p A_{ki}^2.$$

Κάνοντας αλλαγή μεταβλητής και συγκεκριμένα βάζοντας όπου  $\nu$  το  $-\nu$  προκύπτει  $(A^{-1})_{ii} \simeq \rho_i^{\nu} \frac{1}{A_{ii}}$ , δηλαδή η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για τα διαγώνια στοιχεία του  $A^{-1}$  που δίνεται στην Πρόταση 2.5.

### Αριθμητική υλοποίηση - Πολυπλοκότητα

Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε, ο τύπος (3.3) είναι εύκολα υλοποιήσιμος και οι απαιτούμενοι υπολογισμοί θα γίνουν πολύ γρήγορα. Ο τύπος αυτός μπορεί να υλοποιηθεί σε διανυσματική μορφή (vectorized form) και με αυτόν τον τρόπο θα επιταχυνθεί ο συνολικός υπολογισμός.

Όσον αφορά στην υπολογιστική πολυπλοκότητα, η εκτίμηση ενός διαγώνιου στοιχείου, που γίνεται μέσω του τύπου (3.3), απαιτεί μόνο αριθμητικές πράξεις της τάξης  $\mathcal{O}(p)$ . Για την εκτίμηση ολόκληρης της διαγώνιου απαιτούνται  $\mathcal{O}(p^2)$  αριθμητικές πράξεις.

## 3.2 Εκτιμήσεις μέσω των κανόνων αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss

### 3.2.1 Αριθμητική ολοκλήρωση single Gauss

Σε αυτή την υποενότητα περιγράφουμε συνοπτικά την προσέγγιση των τετραγωνικών μορφών  $\mathbf{x}^T f(A) \mathbf{x}$  χρησιμοποιώντας τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss και τον αλγόριθμο Lanczos προκειμένου να εκτιμηθεί ολόκληρη η διαγώνιος του πίνακα  $f(A)$ . Το άθροισμα (3.1) μπορεί να θεωρηθεί ένα Riemann-Stieltjes ολοκλήρωμα της μορφής

$$\int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} f(\lambda) d\alpha(\lambda),$$

όπου το μέτρο  $\alpha(\lambda)$  είναι μία κατά τμήματα σταθερή συνάρτηση που προσδιορίζεται από τον τύπο

$$\alpha(\lambda) = \begin{cases} 0, & \text{αν } \lambda < \lambda_{min}, \\ \sum_{i=1}^j (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)^2, & \text{αν } \lambda_j \leq \lambda < \lambda_{j+1}, \\ \sum_{i=1}^p (\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)^2, & \text{αν } \lambda_{max} \leq \lambda. \end{cases}$$

Αυτό το Riemann-Stieltjes ολοκλήρωμα μπορεί να προσεγγιστεί χρησιμοποιώντας τη μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss [4, 38]. Για το λόγο αυτό είναι αναγκαία η παραγωγή μίας ακολουθίας ορθογωνίων πολυωνύμων που μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Lanczos.

### Αριθμητική υλοποίηση - Πολυπλοκότητα

Η πολυπλοκότητα αυτού του αλγορίθμου εξαρτάται από την πολυπλοκότητα του αλγορίθμου Lanczos, η οποία είναι της τάξεως  $\mathcal{O}(kp^2)$ , όπου  $k$  είναι ο αριθμός των απαιτούμενων επαναλήψεων [22]. Λόγω της φύσης αυτής της μεθόδου, η

### 3.2. ΕΚΤΙΜΗΣΕΙΣ ΜΕΣΩ ΤΩΝ ΚΑΝΟΝΩΝ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ ΤΟΥ GAUSS

αριθμητική υλοποίηση γίνεται στοιχείο με στοιχείο και έτσι με μία επανάληψη αυτού του αλγορίθμου μπορούμε να εκτιμήσουμε μόνο ένα διαγώνιο στοιχείο. Έτσι, η συνολική πολυπλοκότητα της εκτίμησης ολόκληρης της διαγωνίου του πίνακα  $f(A)$  είναι της τάξης  $\mathcal{O}(kp^3)$ .

#### 3.2.2 Αριθμητική ολοκλήρωση block Gauss

Σε αυτή την υποενότητα, περιγράφουμε την προσέγγιση των επιθυμητών τετραγωνικών μορφών χρησιμοποιώντας τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss.

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας συμμετρικός πίνακας και  $X = [\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \mathbf{x}_q] \in \mathbb{R}^{p \times q}$  με  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{p \times 1}$ ,  $i = 1, 2, \dots, q$ . Η μορφή  $X^T f(A) X$  μπορεί να εκτιμηθεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο block Lanczos και τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss. Οι Gene H. Golub και Gérard Meurant έχουν εκτιμήσει τη μορφή  $X^T f(A) X$  χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο block Lanczos με μέγεθος του block  $q = 2$ , [38]. Επίσης, στην εργασία [9] εφαρμόζουν τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss για μεγέθη block  $q \geq 2$  σε πίνακες που πηγάζουν από την ανάλυση δικτύων και τη μηχανική μάθηση.

Χρησιμοποιώντας τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss, μπορούμε να εκτιμήσουμε τη μορφή  $X^T f(A) X$ , θεωρώντας τη φασματική παραγοντοποίηση του πίνακα  $A = V \Lambda V^T$ .

Θέτοντας  $R = X^T V = [\mathbf{r}_1 \ \mathbf{r}_2 \ \cdots \ \mathbf{r}_p] \in \mathbb{R}^{q \times p}$ ,  $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^{q \times 1}$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , είμαστε σε θέση να ξαναγράψουμε την αρχική μορφή ως εξής

$$\begin{aligned} X^T f(A) X &= X^T V f(\Lambda) V^T X = R f(\Lambda) R^T \\ &= [\mathbf{r}_1 \ \mathbf{r}_2 \ \cdots \ \mathbf{r}_p] \begin{bmatrix} f(\lambda_1) & & & \\ & f(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & f(\lambda_p) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1^T \\ \mathbf{r}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{r}_p^T \end{bmatrix} \\ &= \mathbf{r}_1 f(\lambda_1) \mathbf{r}_1^T + \mathbf{r}_2 f(\lambda_2) \mathbf{r}_2^T + \cdots + \mathbf{r}_p f(\lambda_p) \mathbf{r}_p^T = \sum_{i=1}^p f(\lambda_i) \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i^T. \end{aligned}$$

Το τελευταίο άθροισμα μπορεί να θεωρηθεί ως ένα ολοκλήρωμα Riemann-Stieltjes της μορφής  $\int_a^b f(\lambda) d\alpha(\lambda)$  με  $\alpha(\lambda)$  να είναι ένας  $q \times q$  πίνακας μέτρου και  $a, b$  είναι τα άκρα του διαστήματος που περιέχει τις ιδιοτιμές του  $A$ , [38]. Αυτό το ολοκλήρωμα, το οποίο είναι ένας  $q \times q$  συμμετρικός πίνακας, μπορεί να εκτιμηθεί χρησιμοποιώντας τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss. Αυτοί οι κανόνες χρησιμοποιούν την ύπαρξη των ορθογωνίων πολυώνυμων-πίνακων που σχετίζονται με το μέτρο  $\alpha(\lambda)$  και την παραγωγή του πίνακα Ja-

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΓΩΝΙΟΥ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΠΙΝΑΚΩΝ

---

cobi χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο block Lanczos, ο οποίος περιγράφεται στην Ενότητα 1.5.

### Αριθμητική υλοποίηση - Πολυπλοκότητα

Η πολυπλοκότητα αυτού του αλγορίθμου εξαρτάται από την πολυπλοκότητα του αλγορίθμου block Lanczos, η οποία είναι της τάξεως  $\mathcal{O}(k(2qp^2 + pq^2 + q^3k^2))$ , όπου  $k$  είναι ο αριθμός των απαιτούμενων επαναλήψεων. Παρόλο που χρησιμοποιούνται blocks, η διαδικασία υλοποίησης γίνεται στοιχείο με στοιχείο.

Για την εκτίμηση ολόκληρης της διαγωνίου του πίνακα  $f(A)$  μπορούμε να θεωρήσουμε τις στήλες του πίνακα  $X$  να είναι οι στήλες του ταυτοτικού πίνακα. Επιλέγοντας τον πίνακα  $X$  με αυτό τον τρόπο, μπορούμε ταυτόχρονα να εκτιμήσουμε τα μη-διαγώνια στοιχεία του πίνακα  $f(A)$ . Στην πραγματικότητα, με μία μόνο εκτέλεση αυτού του αλγορίθμου μπορούμε να υπολογίσουμε  $q$  διαγώνια στοιχεία και  $\frac{(q-1)q}{2}$  μη-διαγώνια στοιχεία.

Χρησιμοποιώντας τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss και τον αλγόριθμο block Lanczos με μέγεθος του block  $q$ , όπου  $q$  είναι διαιρέτης της διάστασης  $p$ , ο αριθμός των εκτελέσεων αυτού του αλγορίθμου είναι  $\frac{p}{q}$ . Έτσι, η συνολική πολυπλοκότητα εκτίμησης ολόκληρης της διαγωνίου του πίνακα  $f(A)$  είναι της τάξεως  $\mathcal{O}(k(2p^3 + p^2q + pq^2k^2))$ . Σε περίπτωση που η διάσταση  $p$  του πίνακα είναι πρώτος αριθμός, τότε για ένα δοσμένο  $q$  τρέχουμε τον αλγόριθμο block Lanczos  $\lceil \frac{p}{q} \rceil - 1$  φορές για μέγεθος του block  $q$  και μία φορά για μέγεθος του block ίσο με το υπόλοιπο της διαίρεσης του  $p$  με το  $q$ . Για παράδειγμα, αν έχουμε  $q = 2$ , τότε τα πρώτα  $p - 1$  διαγώνια στοιχεία προσεγγίζονται χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο block Lanczos και το τελευταίο διαγώνιο στοιχείο προσεγγίζεται από τον αλγόριθμο single Lanczos.

### 3.3 Αριθμητικά αποτελέσματα

Σε αυτή την ενότητα, παρουσιάζουμε κάποια αριθμητικά παραδείγματα με σκοπό να συγκρίνουμε τις προαναφερθείσες μεθόδους αυτού του κεφαλαίου ως προς την ακρίβεια και το χρόνο εκτέλεσης. Οι υπολογισμοί των παραδειγμάτων πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας MATLAB (R2015a), 64-bit, σε υπολογιστή Intel Core i7, με 16 Gb DDR4 RAM.

Στους παρακάτω Πίνακες παρουσιάζουμε το μέσο σχετικό σφάλμα (mean

relative error-MRE) για όλα τα διαγώνια στοιχεία το οποίο ορίζεται ως

$$\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \frac{|(f(A))_{ii} - est(i)|}{|(f(A))_{ii}|},$$

όπου  $est(i)$  είναι μία εκτίμηση του διαγώνιου στοιχείου  $(f(A))_{ii}$  το οποίο δίνεται είτε από την Πρόταση 3.1 για μία τιμή του  $\nu$ , η οποία μπορεί να επιλεγεί σύμφωνα με τα αποτελέσματα της εργασίας [32], ή χρησιμοποιώντας τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss.

Σε καθένα από τα αριθμητικά παραδείγματα που ακολουθούν παρουσιάζονται δύο Πίνακες αποτελεσμάτων. Στην πρώτη γραμμή των πρώτων Πινάκων, καταγράφεται η ακρίβεια που επιτυγχάνεται με τη μέθοδο της παρεμβολής. Για αυτή την τάξη ακρίβειας, οι μέθοδοι συγκρίνονται ως προς τον χρόνο εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα). Δεδομένου ότι οι μέθοδοι Gauss μπορούν να επιτύχουν καλύτερη ακρίβεια, παρουσιάζουμε έναν δεύτερο Πίνακα στον οποίο δίνουμε τα χαρακτηριστικά των αλγορίθμων που βελτιώνουν την εκτίμηση, τα μέσα σχετικά σφάλματα καθώς και το χρόνο εκτέλεσης.

### Παράδειγμα 3.1. Ο πίνακας συνδιακύμανσης.

Θεωρούμε τον πίνακα συνδιακύμανσης  $A = \text{covariance}(1600, 1, 1)$  που περιγράφεται στην Ενότητα 1.7. Ο πίνακας αυτός έχει δείκτη κατάστασης  $\kappa(A) = 1.1655e3$ . Η διαγώνιος του αντιστρόφου του πίνακα συνδιακύμανσης, δηλαδή του πίνακα ακρίβειας, δίνει πληροφορίες σχετικά με την ποιότητα των δεδομένων στην ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας. Οι στατιστικές προσεγγίσεις για αυτή την εκτίμηση αναπτύχθηκαν στην εργασία [6].

Στον Πίνακα 3.1 παρουσιάζουμε το μέσο σχετικό σφάλμα και το χρόνο εκτέλεσης για την εκτίμηση της διαγώνιου του αντιστρόφου του πίνακα συνδιακύμανσης. Όσον αφορά στη μέθοδο της παρεμβολής, η προσέγγιση του  $\nu$  που προκύπτει από τα αποτελέσματα της εργασίας [32] είναι  $-9.8455e - 1$ , οπότε θεωρούμε  $\nu = -1$  σε αυτό το παράδειγμα.

Σε αυτόν τον Πίνακα βλέπουμε ότι το μέσο σχετικό σφάλμα μπορεί να είναι της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-4})$  χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της παρεμβολής. Ωστόσο, παρατηρούμε ότι ο χρόνος εκτέλεσης είναι καλύτερος σε σύγκριση με τις μεθόδους του Gauss. Το μέσο σχετικό σφάλμα της ίδιας τάξης μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο single Gauss με 1 – 8 επαναλήψεις και τον block Gauss με 1 επανάληψη, για μεγέθη του block  $q = 2$  και  $q = 4$ .

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΓΩΝΙΟΥ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΠΙΝΑΚΩΝ

Μέσο σχετικό σφάλμα $\mathcal{O}(10^{-4})$			
Μέθοδος	Χαρακτηριστικά	MRE	Χρόνος
παρεκβολή	$\nu = -1$	$2.0641e-4$	$8.4059e-3$
single Gauss	$k = 1$	$6.6699e-4$	$9.2968e-1$
	$k = 2$	$2.2722e-4$	$1.8356e0$
	$k = 5$	$1.4983e-4$	$4.4445e0$
	$k = 8$	$1.0288e-4$	$7.1232e0$
block Gauss	$q = 2, k = 1$	$2.9644e-4$	$1.2749e0$
	$q = 4, k = 1$	$1.3112e-4$	$6.2551e-1$

Πίνακας 3.1: Εκτιμώντας τη διαγώνιο του αντιστρόφου του πίνακα συνδιακύμανσης.

Επιπλέον, στον Πίνακα 3.2 βλέπουμε ότι η περαιτέρω βελτίωση της ακρίβειας μπορεί να επιτευχθεί με την αύξηση του αριθμού των επαναλήψεων στους αλγορίθμους, αλλά έτσι αυξάνεται και ο χρόνος εκτέλεσής τους. Παρατηρούμε επίσης ότι η μέθοδος του block Gauss είναι πιο αποδοτική από την αντίστοιχη του single Gauss και ότι μπορούν να ληφθούν καλύτερες εκτιμήσεις όσο το μέγεθος  $q$  του block αυξάνεται και απαιτούνται λιγότερες Lanczos επαναλήψεις.

Βελτίωση της ακρίβειας			
Μέθοδος	Χαρακτηριστικά	MRE	Χρόνος
single Gauss	$k = 10$	$7.9655e-5$	$8.7596e0$
	$k = 50$	$4.0413e-7$	$4.3391e1$
block Gauss	$q = 5, k = 10$	$1.8105e-9$	$3.6852e0$
	$q = 50, k = 8$	$2.8034e-9$	$9.9002e-1$
	$q = 100, k = 5$	$5.3669e-10$	$6.6297e-1$
	$q = 400, k = 2$	$2.7435e-10$	$3.5001e-1$
	$q = 400, k = 3$	$1.0872e-12$	$5.8034e-1$

Πίνακας 3.2: Βελτίωση της ακρίβειας για την εκτίμηση της διαγωνίου του αντιστρόφου του πίνακα συνδιακύμανσης.

**Παράδειγμα 3.2.** Ο πίνακας *Poisson*.

Θεωρούμε τον πίνακα Poisson διάστασης  $p = 1600$ , ο οποίος έχει δείκτη κατάστασης  $\kappa(A) = 6.8062e2$ . Περιγραφή αυτού του πίνακα μπορεί να βρεθεί στην Ενότητα 1.7. Για αυτόν τον πίνακα, εκτιμούμε τη διαγώνιο του εκθετικού πίνακα, δηλαδή τη διαγώνιο του πίνακα  $\exp(A)$ .



### 3.3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στον Πίνακα 3.3 παρουσιάζουμε το μέσο σχετικό σφάλμα και τον χρόνο εκτέλεσης για την εκτίμηση της επιθυμητής διαγωνίου. Επιλέγουμε την παράμετρο  $\nu$  που απαιτείται στη μέθοδο της παρεκβολής να ισούται με  $\nu = 1.5$ , καθώς προσεγγίζεται από την τιμή 1.2920, [32]. Σε αυτόν τον Πίνακα βλέπουμε ότι η μέθοδος της παρεκβολής δίνει μέσο σχετικό σφάλμα της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-2})$ . Η ίδια τάξη ακρίβειας προκύπτει χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο single Gauss με 3 Lanczos επαναλήψεις και τον block Gauss για διάφορα μεγέθη των blocks.

Μέσο σχετικό σφάλμα τάξης $\mathcal{O}(10^{-2})$			
Μέθοδος	Χαρακτηριστικά	MRE	Χρόνος
παρεκβολή	$\nu = 1.5$	$5.8909e-2$	$2.5288e-3$
single Gauss	$k = 3$	$3.0317e-2$	$1.6983e-1$
block Gauss	$q = 2, k = 3$	$1.8474e-2$	$4.6504e-1$
	$q = 4, k = 3$	$1.0240e-2$	$3.3889e-1$
	$q = 5, k = 2$	$9.0320e-2$	$2.2385e-1$
	$q = 10, k = 2$	$6.3070e-2$	$1.4032e-1$
	$q = 20, k = 2$	$4.9444e-2$	$1.1417e-1$

Πίνακας 3.3: Εκτιμώντας τη διαγώνιο του εκθετικού του πίνακα Poisson.

Αυξάνοντας τον αριθμό των επαναλήψεων στους αλγορίθμους Lanczos (single και block) μπορούμε να βελτιώσουμε την ακρίβεια των αποτελεσμάτων, αν και έτσι αυξάνεται και το υπολογιστικό κόστος. Τα αποτελέσματα που αφορούν αυτές τις βελτιώσεις παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.4.

Βελτίωση της ακρίβειας			
Μέθοδος	Χαρακτηριστικά	MRE	Χρόνος
single Gauss	$k = 5$	$8.4888e-5$	$1.8483e-1$
	$k = 10$	$1.1232e-13$	$3.1540e-1$
	$k = 15$	$2.0199e-15$	$4.6211e-1$
block Gauss	$q = 2, k = 5$	$4.6615e-5$	$6.0113e-1$
	$q = 5, k = 5$	$1.8810e-5$	$4.4663e-1$
	$q = 10, k = 5$	$8.1788e-6$	$3.7403e-1$
	$q = 20, k = 5$	$2.8884e-6$	$3.0043e-1$

Πίνακας 3.4: Βελτίωση της ακρίβειας για την εκτίμηση της διαγωνίου του εκθετικού του πίνακα Poisson.

Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο block Gauss, παρατηρούμε ότι όσο το μέγεθος

### ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΓΩΝΙΟΥ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΠΙΝΑΚΩΝ

$q$  του block αυξάνεται προκύπτουν λίγο καλύτερες εκτιμήσεις. Αξίζει να σημειωθεί ότι το μέγεθος του block του αλγορίθμου block Lanczos πρέπει να είναι μικρότερο ή ίσο με 40, διαφορετικά δεν μπορούμε να λάβουμε αποτελέσματα για αυτόν τον πίνακα. Αυτό οφείλεται στη δομή αυτού του πίνακα, δεδομένου ότι είναι banded με bandwidth 80. Γενικά, για banded πίνακες με bandwidth  $s$ , το μέγεθος του block πρέπει να είναι μικρότερο ή ίσο με  $s/2$ , ώστε τα αποτελέσματα να είναι ακριβή.

#### Παράδειγμα 3.3. Ο πίνακας Heat flow.

Σε αυτό το παράδειγμα, θεωρούμε τον πίνακα Heat flow διάστασης  $p = 1600$  με  $u = 0.2$ , όπως περιγράφεται στην Ενότητα 1.7. Θα εκτιμήσουμε τη διαγώνιο του λογαρίθμου του πίνακα Heat flow. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν καταγράφονται στον Πίνακα 3.5. Η εκτιμώμενη τιμή της παραμέτρου  $\nu$  που χρειαζόμαστε για τη μέθοδο της παρεκβολής είναι  $-5.4236e - 1$ , [32], και έτσι επιλέγουμε  $\nu = -0.5$ . Η μέθοδος της παρεκβολής δίνει μέσο σχετικό σφάλμα της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-3})$ .

Μέσο σχετικό σφάλμα τάξης $\mathcal{O}(10^{-3})$			
Μέθοδος	Χαρακτηριστικά	MRE	Χρόνος
παρεκβολή	$\nu = -0.5$	3.5675e-3	6.5691e-4
single Gauss	$k = 2$	1.4895e-3	1.1073e-1

Πίνακας 3.5: Εκτιμώντας τη διαγώνιο του λογαρίθμου του πίνακα Heat flow.

Στον Πίνακα 3.6 παρατηρούμε ότι ο αλγόριθμος single Gauss επιτυγχάνει μέσο σχετικό σφάλμα της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-14})$  με χρήση 10 Lanczos επαναλήψεων. Στον block αλγόριθμο, το σχετικό σφάλμα μειώνεται όσο αυξάνεται το μέγεθος του block. Αυτός ο πίνακας είναι επίσης block τριδιαγώνιος και κατά συνέπεια banded με bandwidth 80. Έτσι, το μέγεθος του κάθε block πρέπει να είναι μικρότερο από 40.

Βελτίωση της ακρίβειας			
Μέθοδος	Χαρακτηριστικά	MRE	Χρόνος
single Gauss	$k = 10$	2.2324e-14	3.1853e-1
block Gauss	$q = 5, k = 10$	4.8949e-15	1.8203e0
	$q = 10, k = 10$	3.7721e-15	2.2397e0

Πίνακας 3.6: Βελτίωση της ακρίβειας για την εκτίμηση της διαγωνίου του λογαρίθμου του πίνακα Heat flow.

## Κεφάλαιο 4

### Εκτίμηση του γινομένου $f(A)\mathbf{b}$

Έστω ένας διαγωνίσιμος (diagonalizable) πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  και μία ομαλή συνάρτηση  $f$  που ορίζεται στο φάσμα του πίνακα  $A$ . Σε αυτό το κεφάλαιο, παράγουμε εκτιμήσεις για τη δράση του πίνακα  $f(A)$  πάνω σε ένα διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ , δηλαδή το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ , χωρίς τον αναλυτικό υπολογισμό του πίνακα  $f(A)$ . Για το λόγο αυτό, χρησιμοποιούμε τη μέθοδο της παρεκβολής για την παραγωγή διανυσματικών εκτιμήσεων ενός, δύο και τριών όρων για την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$ . Έχοντας εκτιμήσει το γινόμενο αυτό, εφαρμόζουμε τις παραχθείσες εκτιμήσεις με σκοπό την προσέγγιση της γενικής μορφής  $X^T f(A)Y$ , όπου  $X, Y \in \mathbb{R}^{p \times m}$  είναι “block διανύσματα” με  $m \ll p$  στήλες. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτό το κεφάλαιο είναι μέρος της εργασίας [55].

#### 4.1 Διανυσματικές εκτιμήσεις για το $f(A)\mathbf{b}$

Θεωρούμε τον διαγωνίσιμο πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ο οποίος παραγοντοποιείται σύμφωνα με τη σχέση (1.21) ως εξής

$$A = Q\Lambda Q^{-1},$$

όπου οι πίνακες  $Q, \Lambda$  περιγράφονται στην Ενότητα 1.2. Για μία δοσμένη συνάρτηση  $f$  που ορίζεται στο φάσμα του  $A$ , ο πίνακας  $f(A) \in \mathbb{C}^{p \times p}$  μπορεί να εκφραστεί ως

$$f(A) = Qf(\Lambda)Q^{-1} = \sum_{j=1}^p f(\lambda_j)\mathbf{q}_j\mathbf{q}_j^T.$$

Για κάθε ακέραιο  $r \in \mathbb{Z}$  και ένα διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ , μπορούμε να ορίσουμε τις διανυσματικές ροπές (vector moments)  $\mathbf{v}_r \in \mathbb{R}^p$  του πίνακα  $A$  ως

$$\mathbf{v}_r = A^r \mathbf{b}.$$

Κάθε είσοδος  $v_{r,i}$  της διανυσματικής ροπής  $\mathbf{v}_r$  μπορεί να εκφραστεί ως το α-κόλουθο άθροισμα

$$v_{r,i} = \mathbf{e}_i^T \mathbf{v}_r = \mathbf{e}_i^T A^r \mathbf{b} = \sum_{j=1}^p \lambda_j^r (\mathbf{e}_i, \mathbf{q}_j) (\hat{\mathbf{q}}_j, \mathbf{b}) = \sum_{j=1}^p \lambda_j^r \alpha_{j,i} \beta_j, \quad (4.1)$$

όπου  $\alpha_{j,i} = (\mathbf{e}_i, \mathbf{q}_j)$ ,  $\beta_j = (\hat{\mathbf{q}}_j, \mathbf{b})$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, p$ .

Η διανυσματική ροπή συνάρτησης (function vector moment)  $\mathbf{v}_f \in \mathbb{C}^p$  του πίνακα  $A$  ορίζεται ως

$$\mathbf{v}_f = f(A)\mathbf{b}.$$

Για τις εισόδους  $v_{f,i}$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , της διανυσματικής ροπής συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$ , έχουμε

$$v_{f,i} = \mathbf{e}_i^T f(A)\mathbf{b} = \sum_{j=1}^p f(\lambda_j) (\mathbf{e}_i, \mathbf{q}_j) (\hat{\mathbf{q}}_j, \mathbf{b}) = \sum_{j=1}^p f(\lambda_j) \alpha_{j,i} \beta_j. \quad (4.2)$$

Μία προσέγγιση της  $\mathbf{v}_f$  μπορεί να προκύψει χωρίς τον υπολογισμό της παραγοντοποίησης του πίνακα  $A$ . Ας κρατήσουμε  $k$  όρους στο άθροισμα (4.2), δηλαδή

$$\mathbf{v}_f = \begin{bmatrix} v_{f,1} \\ v_{f,2} \\ \vdots \\ v_{f,p} \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^k f(\tilde{\lambda}_{j,1}) \tilde{\alpha}_{j,1} \tilde{\beta}_{j,1} \\ \sum_{j=1}^k f(\tilde{\lambda}_{j,2}) \tilde{\alpha}_{j,2} \tilde{\beta}_{j,2} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^k f(\tilde{\lambda}_{j,p}) \tilde{\alpha}_{j,p} \tilde{\beta}_{j,p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^k f(\tilde{\lambda}_{j,1}) \tilde{m}_{j,1} \\ \sum_{j=1}^k f(\tilde{\lambda}_{j,2}) \tilde{m}_{j,2} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^k f(\tilde{\lambda}_{j,p}) \tilde{m}_{j,p} \end{bmatrix}. \quad (4.3)$$

Οι άγνωστοι  $\tilde{\lambda}_{j,i}$  και  $\tilde{m}_{j,i} = \tilde{\alpha}_{j,i} \tilde{\beta}_{j,i}$  μπορούν να προσδιοριστούν θεωρώντας ως συνθήκες παρεμβολής τη σχέση (4.1) για διάφορες μη-αρνητικές τιμές του  $r$ , δηλαδή

$$\mathbf{v}_r = \begin{bmatrix} v_{r,1} \\ v_{r,2} \\ \vdots \\ v_{r,p} \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^k (\tilde{\lambda}_{j,1})^r \tilde{\alpha}_{j,1} \tilde{\beta}_{j,1} \\ \sum_{j=1}^k (\tilde{\lambda}_{j,2})^r \tilde{\alpha}_{j,2} \tilde{\beta}_{j,2} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^k (\tilde{\lambda}_{j,p})^r \tilde{\alpha}_{j,p} \tilde{\beta}_{j,p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^k (\tilde{\lambda}_{j,1})^r \tilde{m}_{j,1} \\ \sum_{j=1}^k (\tilde{\lambda}_{j,2})^r \tilde{m}_{j,2} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^k (\tilde{\lambda}_{j,p})^r \tilde{m}_{j,p} \end{bmatrix}. \quad (4.4)$$

#### 4.1.1 Διανυσματικές εκτιμήσεις ενός όρου

Εφαρμόζοντας τα αθροίσματα της σχέσης (4.3) για  $k = 1$ , κάθε είσοδος της διανυσματικής ροπής συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  μπορεί να προσεγγιστεί από

$$v_{f,i} \simeq f(\tilde{\lambda}_{1,i}) \tilde{m}_{1,i}, \quad i = 1, 2, \dots, p,$$

#### 4.1. ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΙΚΕΣ ΕΚΤΙΜΗΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ $f(A)\mathbf{b}$

όπου οι άγνωστοι  $\tilde{\lambda}_{1,i}$ ,  $\tilde{m}_{1,i}$  προσδιορίζονται από τις συνθήκες παρεμβολής (4.4) για  $r = 0, 1, 2$ , δηλαδή

$$\begin{aligned} v_{0,i} &\simeq \tilde{m}_{1,i}, \\ v_{1,i} &\simeq \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{m}_{1,i} \simeq \tilde{\lambda}_{1,i}v_{0,i}, \\ v_{2,i} &\simeq \tilde{\lambda}_{1,i}^2\tilde{m}_{1,i} \simeq \tilde{\lambda}_{1,i}^2v_{0,i}. \end{aligned}$$

Λύνοντας το παραπάνω σύστημα εξισώσεων, μπορούμε να πάρουμε τον ακόλουθο συμπαγή τύπο για τα  $\tilde{\lambda}_{1,i}$

$$\tilde{\lambda}_{1,i} = v_{0,i}^{j-1} v_{1,i}^{1-2j} v_{2,i}^j, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \quad i = 1, 2, \dots, p. \quad (4.5)$$

Παρατηρούμε ότι στη σχέση (4.5) αν το  $j$  πάρει οποιαδήποτε μιγαδική τιμή, δηλαδή  $j = \gamma + i\delta$ , αυτό οδηγεί και πάλι στην ίδια τιμή  $\tilde{\lambda}_{1,i}$ . Πράγματι, για  $j = \gamma + i\delta$ , ισχύει

$$v_{0,i}^{\gamma+i\delta-1} v_{1,i}^{1-2(\gamma+i\delta)} v_{2,i}^{\gamma+i\delta} = (\tilde{m}_{1,i})^{\gamma+i\delta-1} (\tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{m}_{1,i})^{1-2\gamma-2i\delta} (\tilde{\lambda}_{1,i}^2\tilde{m}_{1,i})^{\gamma+i\delta} = \tilde{\lambda}_{1,i}.$$

Επομένως, μπορούμε να παράγουμε μία οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων ενός όρου (one-term vector estimates)  $\varphi_z$  για τη διανυσματική ροπή συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$ .

##### Πρόταση 4.1.

1. Μία οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων ενός όρου  $\{\varphi_z, z \in \mathbb{C}\}$  για τη διανυσματική ροπή συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  δίνεται από

$$\varphi_{z,i} = f(v_{0,i}^{z-1} v_{1,i}^{1-2z} v_{2,i}^z) v_{0,i}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad i = 1, 2, \dots, p. \quad (4.6)$$

2. Η οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων ενός όρου (4.6) ικανοποιεί τη σχέση

$$\varphi_{z,i} = f\left(\rho_i^z \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right) v_{0,i}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad (4.7)$$

όπου  $\rho_i = v_{0,i}v_{2,i}/v_{1,i}^2$  και  $v_{0,i}v_{1,i} \neq 0$ , για  $i = 1, 2, \dots, p$ . Αν  $v_{0,i} = 0$  ή  $v_{1,i} = 0$ , μπορούμε να εφαρμόσουμε τη σχέση (4.6) για  $z = 1$  ή  $z = \frac{1}{2}$  αντίστοιχα.

Απόδειξη.

1. Αντικαθιστώντας τις τιμές του  $\tilde{\lambda}_{1,i}$  στη σχέση  $v_{f,i} \simeq f(\tilde{\lambda}_{1,i})v_{0,i}$ , προκύπτει ο

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ ΓΙΝΟΜΕΝΟΥ $f(A)\mathbf{b}$

τύπος  $\varphi_{z,i} = f(v_{0,i}^{z-1}v_{1,i}^{1-2z}v_{2,i}^z)v_{0,i}$ , για κάθε  $i = 1, 2, \dots, p$ .

2. Ισχύει

$$\begin{aligned}\varphi_{z,i} &= f(v_{0,i}^{z-1}v_{1,i}^{1-2z}v_{2,i}^z)v_{0,i} = f\left(\frac{v_{0,i}^z v_{2,i}^z}{v_{1,i}^{2z}} \cdot \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right)v_{0,i} \\ &= f\left(\left(\frac{v_{0,i}v_{2,i}}{v_{1,i}^2}\right)^z \cdot \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right)v_{0,i} = f\left(\rho_i^z \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right)v_{0,i},\end{aligned}$$

όπου  $\rho_i = v_{0,i}v_{2,i}/v_{1,i}^2$ . Οπότε,  $\varphi_{z,i} = f\left(\rho_i^z \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right)v_{0,i}$ .  $\square$

Η οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων ενός όρου  $\varphi_z$  εξαρτάται από μία παράμετρο  $z \in \mathbb{C}$ . Το ακόλουθο λήμμα προσδιορίζει την ύπαρξη βέλτιστων τιμών  $(z_{opt})_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , που οδηγούν σε ακριβή εκτίμηση κάθε εισόδου της διανυσματικής ροπής συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$ .

### Λήμμα 4.1.

Εστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας διαγωνίσιμος πίνακας,  $f$  μία αντιστρέψιμη συνάρτηση και  $\rho_i = v_{0,i}v_{2,i}/v_{1,i}^2$ .

1. Αν  $\rho_i \neq 1$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , υπάρχει μία βέλτιστη τιμή  $(z_{opt})_i$  η οποία δίνεται από

$$(z_{opt})_i = \frac{\log\left(f^{-1}\left(\frac{v_{f,i}}{v_{0,i}}\right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}}\right)}{\log(\rho_i)}, \quad (4.8)$$

τέτοια ώστε  $\varphi_{(z_{opt})_i,i}$  δίνει την ακριβή τιμή της  $v_{f,i}$ .

2. Αν  $\rho_i = 1$  τότε η βέλτιστη τιμή  $(z_{opt})_i$  μπορεί να είναι κάθε μιγαδικός αριθμός, δηλαδή  $\varphi_{z,i} = v_{f,i}$ ,  $\forall z \in \mathbb{C}$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ .

Απόδειξη.

1. Για κάθε  $i = 1, 2, \dots, p$ , ισχύει

$$\begin{aligned}\varphi_{(z_{opt})_i,i} &= v_{f,i} \stackrel{(4.7)}{\Rightarrow} f\left(\rho_i^{(z_{opt})_i} \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right)v_{0,i} = v_{f,i} \Rightarrow f\left(\rho_i^{(z_{opt})_i} \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right) = \frac{v_{f,i}}{v_{0,i}} \\ &\Rightarrow \rho_i^{(z_{opt})_i} \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}} = f^{-1}\left(\frac{v_{f,i}}{v_{0,i}}\right) \Rightarrow \rho_i^{(z_{opt})_i} = f^{-1}\left(\frac{v_{f,i}}{v_{0,i}}\right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}} \\ &\Rightarrow (z_{opt})_i = \frac{\log\left(f^{-1}\left(\frac{v_{f,i}}{v_{0,i}}\right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}}\right)}{\log(\rho_i)}, \text{ όπου } \rho_i = v_{0,i}v_{2,i}/v_{1,i}^2 \neq 1.\end{aligned}$$

2. Αν  $\rho_i = 1$ , τότε η σχέση (4.7) γράφεται ως  $\varphi_{z,i} = f\left(\frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right)v_{0,i}$ , η οποία είναι ανεξάρτητη από την παράμετρο  $z \in \mathbb{C}$ .  $\square$

#### 4.1. ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΙΚΕΣ ΕΚΤΙΜΗΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ $f(A)\mathbf{b}$

Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz, μπορούμε να πάρουμε ένα φράγμα για κάθε βέλτιστη τιμή  $(z_{opt})_i$  η οποία δίνεται στο ακόλουθο λήμμα.

##### Λήμμα 4.2.

Έστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας διαγωνίσιμος πίνακας και  $f$  μία αύξουσα πραγματική συνάρτηση. Αν  $v_{0,i} > 0$ ,  $v_{1,i} > 0$  και  $\rho_i > 1$  τότε ένα άνω φράγμα για τη βέλτιστη τιμή  $(z_{opt})_i$  δίνεται από

$$(z_{opt})_i \leq \frac{\log \left( f^{-1} \left( \kappa(Q) f(\rho(A)) \frac{\|\mathbf{b}\|}{v_{0,i}} \right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}} \right)}{\log(\rho_i)},$$

όπου  $\kappa(Q)$  είναι ο δείκτης κατάστασης του πίνακα των ιδιοδιανυσμάτων του  $A$ ,  $Q$ , και  $\rho(A)$  είναι η φασματική ακτίνα του  $A$ .

Απόδειξη.

Ισχύει ότι  $\|f(A)\|_2 \leq \kappa(Q) \cdot f(\rho(A))$  [48, σελ. 102]. Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz, έχουμε

$$\begin{aligned} v_{f,i} = (\mathbf{e}_i, f(A)\mathbf{b}) &\leq |(\mathbf{e}_i, f(A)\mathbf{b})| \leq \|\mathbf{e}_i\| \cdot \|f(A)\mathbf{b}\| \leq \|f(A)\|_2 \cdot \|\mathbf{b}\| \\ &\leq \kappa(Q) \cdot f(\rho(A)) \cdot \|\mathbf{b}\|. \end{aligned}$$

Αφού  $v_{0,i} > 0$  και  $f$  είναι μία αύξουσα συνάρτηση, έχουμε

$$f^{-1} \left( \frac{v_{f,i}}{v_{0,i}} \right) \leq f^{-1} \left( \kappa(Q) \cdot f(\rho(A)) \cdot \frac{\|\mathbf{b}\|}{v_{0,i}} \right).$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι  $v_{1,i} > 0$ , έχουμε

$$\begin{aligned} f^{-1} \left( \frac{v_{f,i}}{v_{0,i}} \right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}} &\leq f^{-1} \left( \kappa(Q) \cdot f(\rho(A)) \cdot \frac{\|\mathbf{b}\|}{v_{0,i}} \right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}} \\ \Rightarrow \log \left( f^{-1} \left( \frac{v_{f,i}}{v_{0,i}} \right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}} \right) &\leq \log \left( f^{-1} \left( \kappa(Q) \cdot f(\rho(A)) \cdot \frac{\|\mathbf{b}\|}{v_{0,i}} \right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}} \right) \\ \Rightarrow (z_{opt})_i &\leq \frac{\log \left( f^{-1} \left( \kappa(Q) \cdot f(\rho(A)) \cdot \frac{\|\mathbf{b}\|}{v_{0,i}} \right) \frac{v_{0,i}}{v_{1,i}} \right)}{\log(\rho_i)}, \text{ αφού } \rho_i > 1. \end{aligned}$$

□

##### Παρατήρηση 4.1.

Αν η συνάρτηση  $f$  είναι φθίνουσα, τα  $v_{0,i}$ ,  $v_{1,i}$  δεν είναι και τα δύο θετικά και το  $\rho_i$  είναι είτε μεγαλύτερο είτε μικρότερο του 1, τότε ένα παρόμοιο αποτέλεσμα με αυτό του Λήμματος 4.2 μπορεί να προκύψει.

**Παρατήρηση 4.2.**

Αν ο πίνακας  $A$  είναι κανονικός (*normal*), προκύπτει καλύτερο φράγμα για τη βέλτιστη τιμή  $(z_{opt})_i$ . Συγκεκριμένα, ισχύει  $\kappa(Q) = 1$ , κι έτσι δεν είναι αναγκαίος ο υπολογισμός του πίνακα των ιδιοδιανυσμάτων  $Q$ .

Στη συνέχεια, αποδεικνύουμε τη σχέση μεταξύ της διανυσματικής εκτίμησης ενός όρου για  $z = 0$  με την εκτίμηση που προκύπτει χρησιμοποιώντας τους κανόνες μη-συμμετρικής αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss και τον μη-συμμετρικό αλγόριθμο Lanczos με μία μόνο επανάληψη, [38]. Συγκεκριμένα, η ακόλουθη πρόταση ισχύει για κάθε πίνακα.

**Πρόταση 4.2.**

Εστω  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ένας μη-συμμετρικός πίνακας. Κάθε στοιχείο της διανυσματικής εκτίμησης  $\varphi_0$  ισούται με την εκτίμηση που προκύπτει χρησιμοποιώντας την μη-συμμετρική αριθμητική ολοκλήρωση Gauss και τον μη-συμμετρικό αλγόριθμο Lanczos με μία επανάληψη για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{e}_i^T f(A)\mathbf{b}$ , υποθέτοντας ότι  $(\mathbf{e}_i, \mathbf{b}) \neq 0$ .

Απόδειξη.

Εφαρμόζουμε τον μη-συμμετρικό αλγόριθμο Lanczos με αρχικά διανύσματα  $\mathbf{u} = \frac{\mathbf{b}}{(\mathbf{e}_i, \mathbf{b})}$  και  $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{e}_i$  [38, σελ. 43], τα οποία ικανοποιούν τη σχέση  $(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{u}) = 1$ . Κρατώντας μία επανάληψη αυτού του αλγορίθμου, ο πίνακας Jacobi  $J_1$  έχει ένα μόνο στοιχείο, δηλαδή  $J_1 = [\tilde{\mathbf{u}}^T \mathbf{A} \mathbf{u}]$ . Ισχύει,  $\tilde{\mathbf{u}}^T \mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{e}_i^T \mathbf{A} \mathbf{b} \frac{1}{(\mathbf{e}_i, \mathbf{b})} = \frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}$ .

Επομένως,

$$\mathbf{e}_i^T f(A)\mathbf{b} = (\mathbf{e}_i, \mathbf{b}) f(\tilde{\mathbf{u}}^T \mathbf{A} \mathbf{u}) = v_{0,i} f\left(\frac{v_{1,i}}{v_{0,i}}\right) = \varphi_{0,i}, \text{ για κάθε } i = 1, 2, \dots, p. \quad \square$$

Η οικογένεια των διανυσματικών εκτιμήσεων ενός όρου  $\varphi_z$  που έχει προκύψει παρέχει ακριβή προσέγγιση σε περίπτωση που οι βέλτιστες τιμές  $(z_{opt})_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , μπορούν να προσδιοριστούν a priori. Προκειμένου να ξεπεραστεί αυτή η δυσκολία κρατάμε περισσότερους όρους στα αθροίσματα (4.4) και προχωράμε στην παραγωγή εκτιμήσεων περισσότερων όρων.

### 4.1.2 Διανυσματικές εκτιμήσεις δύο όρων

Εφαρμόζοντας τα αθροίσματα (4.3) για  $k = 2$ , κάθε είσοδος της διανυσματικής ροής συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  μπορεί να προσεγγιστεί από

$$v_{f,i} \simeq f(\tilde{\lambda}_{1,i})\tilde{m}_{1,i} + f(\tilde{\lambda}_{2,i})\tilde{m}_{2,i}, \quad i = 1, 2, \dots, p,$$



#### 4.1. ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΙΚΕΣ ΕΚΤΙΜΗΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ $f(A)\mathbf{b}$

όπου οι άγνωστοι  $\tilde{\lambda}_{j,i}$ ,  $\tilde{m}_{j,i}$ ,  $j = 1, 2$ , προσδιορίζονται χρησιμοποιώντας ως συνθήκες παρεμβολής τις (4.4) για  $r = 0, 1, 2$ .

##### Πρόταση 4.3.

Οι διανυσματικές εκτιμήσεις δύο όρων (*two-term vector estimates*) για τις διανυσματικές ροπές  $\mathbf{v}_n$  ικανοποιούν την εξίσωση διαφορών δευτέρας τάξης, δηλαδή

$$v_{n+1,i} - r_i v_{n,i} + q_i v_{n-1,i} = 0, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.9)$$

όπου  $r_i = \tilde{\lambda}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{2,i} \in \mathbb{C}$ ,  $q_i = \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i} \in \mathbb{C}$ , για κάθε  $i = 1, 2, \dots, p$ .

Απόδειξη.

Ισχύει  $v_{n+1,i} \simeq (\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+1}\tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+1}\tilde{m}_{2,i}$ .

$$\begin{aligned} r_i v_{n,i} &= (\tilde{\lambda}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{2,i})((\tilde{\lambda}_{1,i})^n \tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^n \tilde{m}_{2,i}) = \\ &= (\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+1} \tilde{m}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{1,i} (\tilde{\lambda}_{2,i})^n \tilde{m}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{2,i} (\tilde{\lambda}_{1,i})^n \tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+1} \tilde{m}_{2,i}, \end{aligned}$$

$$q_i v_{n-1,i} = (\tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i})((\tilde{\lambda}_{1,i})^{n-1} \tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^{n-1} \tilde{m}_{2,i}) = \tilde{\lambda}_{2,i} (\tilde{\lambda}_{2,i})^n \tilde{m}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{1,i} \tilde{\lambda}_{2,i}^n \tilde{m}_{2,i}.$$

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω σχέσεις, βλέπουμε ότι η εξίσωση διαφορών  $v_{n+1,i} - r_i v_{n,i} + q_i v_{n-1,i} = 0$  ικανοποιείται.  $\square$

Θεωρούμε το σύστημα εξισώσεων

$$v_{n+1,i} - r_i v_{n,i} + q_i v_{n-1,i} = 0, \quad v_{n+2+k,i} - r_i v_{n+1+k,i} + q_i v_{n+k,i} = 0, \quad n, k \in \mathbb{Z}.$$

Η λύση του συστήματος δίνεται από

$$r_i = \frac{v_{n-1,i}v_{n+2+k,i} - v_{n+1,i}v_{n+k,i}}{v_{n-1,i}v_{n+1+k,i} - v_{n,i}v_{n+k,i}}, \quad (4.10)$$

$$q_i = \frac{v_{n,i}v_{n+2+k,i} - v_{n+1,i}v_{n+1+k,i}}{v_{n-1,i}v_{n+1+k,i} - v_{n,i}v_{n+k,i}}. \quad (4.11)$$

Επίσης, για κάθε  $i = 1, 2, \dots, p$ , έχουμε

$$\tilde{\lambda}_{1,i} = \frac{r_i + \sqrt{r_i^2 - 4q_i}}{2} \quad \text{και} \quad \tilde{\lambda}_{2,i} = \frac{r_i - \sqrt{r_i^2 - 4q_i}}{2}. \quad (4.12)$$

Η λύση του συστήματος των αντίστοιχων συνθηκών παρεμβολής δίνεται από τους τύπους, για κάθε  $i = 1, 2, \dots, p$ ,

$$\tilde{m}_{1,i} = \frac{1}{\tilde{\lambda}_{2,i} - \tilde{\lambda}_{1,i}} (\tilde{\lambda}_{2,i} v_{0,i} - v_{1,i}), \quad \tilde{\lambda}_{1,i} \neq \tilde{\lambda}_{2,i}, \quad (4.13)$$

$$\tilde{m}_{2,i} = \frac{1}{\tilde{\lambda}_{2,i} - \tilde{\lambda}_{1,i}}(v_{1,i} - \tilde{\lambda}_{1,i}v_{0,i}), \quad \tilde{\lambda}_{1,i} \neq \tilde{\lambda}_{2,i}. \quad (4.14)$$

Ως αποτέλεσμα, παίρνουμε μία οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{\varphi}_{n,k}$  για τη διανυσματική ροπή συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  η οποία δίνεται στην ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 4.4.**

Μία οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων  $\{\hat{\varphi}_{n,k}, n, k \in \mathbb{Z}\}$  για τη διανυσματική ροπή συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  δίνεται από

$$(\hat{\varphi}_{n,k})_i = f(\tilde{\lambda}_{1,i})\tilde{m}_{1,i} + f(\tilde{\lambda}_{2,i})\tilde{m}_{2,i}, \quad n, k \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, 2, \dots, p, \quad (4.15)$$

όπου  $\tilde{\lambda}_{1,i}, \tilde{\lambda}_{2,i}, \tilde{m}_{1,i}$  και  $\tilde{m}_{2,i}$  ορίζονται από τις σχέσεις (4.12), (4.13), (4.14) αντίστοιχα.

**Παρατήρηση 4.3.**

Θέτουμε  $(\hat{\rho}_{n,k})_i = (v_{n-1,i}v_{k+1,i})/(v_{n,i}v_{k,i}), i = 1, 2, \dots, p$ . Αν για κάποιο  $i$ , ισχύει ότι  $v_{n-1,i} = v_{n+k,i} = 0$  ή  $(\hat{\rho}_{n,n+k})_i = 1$  ή  $r_i^2 = 4q_i$ , τότε η σχέση (4.15) δεν μπορεί να δώσει εκτιμήσεις για τη συγκεκριμένη επιλογή του ζεύγους των παραμέτρων  $(n, k)$ . Αν  $n = k = 1$ , παίρνουμε  $(\hat{\rho}_{1,1})_i = (v_{0,i}v_{2,i})/v_{1,i}^2$  το οποίο είναι ίσο με το  $\rho_i$  που χρησιμοποιείται στις διανυσματικές εκτιμήσεις ενός όρου.

### 4.1.3 Διανυσματικές εκτιμήσεις τριών όρων

Κρατώντας τρεις όρους στα αθροίσματα (4.3), κάθε είσοδος της διανυσματικής ροπής συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  προσεγγίζεται από

$$v_{f,i} \simeq f(\tilde{\lambda}_{1,i})\tilde{m}_{1,i} + f(\tilde{\lambda}_{2,i})\tilde{m}_{2,i} + f(\tilde{\lambda}_{3,i})\tilde{m}_{3,i}, \quad i = 1, 2, \dots, p,$$

όπου οι άγνωστοι  $\tilde{\lambda}_{j,i}, \tilde{m}_{j,i}, j = 1, 2, 3$ , προσδιορίζονται χρησιμοποιώντας ως συνθήκες παρεμβολής τις (4.4) για  $r = 0, 1, 2$ .

**Πρόταση 4.5.**

Οι διανυσματικές εκτιμήσεις τριών όρων (*three-term vector estimates*) για τις διανυσματικές ροπές  $\mathbf{v}_n$  ικανοποιούν την εξίσωση διαφορών τρίτης τάξης, δηλαδή

$$v_{n+2,i} - s_i v_{n+1,i} + t_i v_{n,i} - g_i v_{n-1,i} = 0, \quad n \in \mathbb{Z},$$

όπου

$$s_i = \tilde{\lambda}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{3,i}, \quad t_i = \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{3,i} + \tilde{\lambda}_{2,i}\tilde{\lambda}_{3,i} \quad \text{και} \quad g_i = \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i}\tilde{\lambda}_{3,i}. \quad (4.16)$$

#### 4.1. ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΙΚΕΣ ΕΚΤΙΜΗΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ $f(A)\mathbf{b}$

Απόδειξη.

$$\text{Ισχύει } v_{n+2,i} \simeq (\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+2}\tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+2}\tilde{m}_{2,i} + (\tilde{\lambda}_{3,i})^{n+2}\tilde{m}_{3,i},$$

$$\begin{aligned} s_i v_{n+1,i} &= (\tilde{\lambda}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{3,i})((\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+1}\tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+1}\tilde{m}_{2,i} + (\tilde{\lambda}_{3,i})^{n+1}\tilde{m}_{3,i}) = \\ &= (\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+2}\tilde{m}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}(\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+1}\tilde{m}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}(\tilde{\lambda}_{3,i})^{n+1}\tilde{m}_{3,i} + \tilde{\lambda}_{2,i}(\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+1}\tilde{m}_{1,i} + \\ &\quad + (\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+2}\tilde{m}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{2,i}(\tilde{\lambda}_{3,i})^{n+1}\tilde{m}_{3,i} + \tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+1}\tilde{m}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+1}\tilde{m}_{2,i} + \\ &\quad + (\tilde{\lambda}_{3,i})^{n+2}\tilde{m}_{3,i}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} t_i v_{n,i} &= (\tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{3,i} + \tilde{\lambda}_{2,i}\tilde{\lambda}_{3,i})((\tilde{\lambda}_{1,i})^n\tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^n\tilde{m}_{2,i} + (\tilde{\lambda}_{3,i})^n\tilde{m}_{3,i}) = \\ &= \tilde{\lambda}_{2,i}(\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+1}\tilde{m}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}(\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+1}\tilde{m}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i}(\tilde{\lambda}_{3,i})^n\tilde{m}_{3,i} + \tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{1,i})^{n+1}\tilde{m}_{1,i} + \\ &\quad + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{2,i})^n\tilde{m}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}(\tilde{\lambda}_{3,i})^{n+1}\tilde{m}_{3,i} + \tilde{\lambda}_{2,i}\tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{1,i})^n\tilde{m}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{2,i})^{n+1}\tilde{m}_{2,i} + \\ &\quad + \tilde{\lambda}_{2,i}(\tilde{\lambda}_{3,i})^{n+1}\tilde{m}_{3,i}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_i v_{n-1,i} &= (\tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i}\tilde{\lambda}_{3,i})((\tilde{\lambda}_{1,i})^{n-1}\tilde{m}_{1,i} + (\tilde{\lambda}_{2,i})^{n-1}\tilde{m}_{2,i} + (\tilde{\lambda}_{3,i})^{n-1}\tilde{m}_{3,i}) = \\ &= \tilde{\lambda}_{2,i}\tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{1,i})^n\tilde{m}_{1,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{3,i}(\tilde{\lambda}_{2,i})^n\tilde{m}_{2,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i}(\tilde{\lambda}_{3,i})^n\tilde{m}_{3,i}. \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω σχέσεις, βλέπουμε ότι η εξίσωση διαφορών  $v_{n+2,i} - s_i v_{n+1,i} + t_i v_{n,i} - g_i v_{n-1,i} = 0$  ικανοποιείται.  $\square$

Για να βρούμε τις παραμέτρους  $s_i, t_i, g_i$  θεωρούμε το σύστημα εξισώσεων, για  $n, k, \ell \in \mathbb{Z}$ ,

$$\begin{aligned} v_{n+2,i} - s_i v_{n+1,i} + t_i v_{n,i} - g_i v_{n-1,i} &= 0, \\ v_{n+k+3,i} - s_i v_{n+k+2,i} + t_i v_{n+k+1,i} - g_i v_{n+k,i} &= 0, \\ v_{n+\ell+4,i} - s_i v_{n+\ell+3,i} + t_i v_{n+\ell+2,i} - g_i v_{n+\ell+1,i} &= 0. \end{aligned}$$

Η λύση προέκυψε χρησιμοποιώντας το Symbolic Math Toolbox του MATLAB. Στους παραγόμενους συμβολικά τύπους κάναμε κατάλληλες απλοποιήσεις και τελικά πήραμε τις ακόλουθες σχέσεις.

$$\begin{aligned} s_i &= \frac{v_{n,i}v_{n+k,i}v_{n+\ell+4,i} - v_{n,i}v_{n+\ell+1,i}v_{n+k+3,i} - v_{n+k,i}v_{n+\ell+2,i}v_{n+2,i}}{w_i} + \\ &+ \frac{v_{n+k+1,i}v_{n+\ell+1,i}v_{n+2,i} - v_{n+k+1,i}v_{n-1,i}v_{n+\ell+4,i} + v_{n+\ell+2,i}v_{n-1,i}v_{n+k+3,i}}{w_i}, \quad (4.17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} t_i &= \frac{v_{n+1,i}v_{n+k,i}v_{n+\ell+4,i} - v_{n+1,i}v_{n+\ell+1,i}v_{n+k+3,i} - v_{n+k,i}v_{n+\ell+3,i}v_{n+2,i}}{w_i} + \\ &+ \frac{v_{n+k+2,i}v_{n+\ell+1,i}v_{n+2,i} - v_{n+k+2,i}v_{n-1,i}v_{n+\ell+4,i} + v_{n+\ell+3,i}v_{n-1,i}v_{n+k+3,i}}{w_i}, \quad (4.18) \end{aligned}$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ ΓΙΝΟΜΕΝΟΥ  $f(A)\mathbf{b}$

$$g_i = \frac{v_{n,i}v_{n+k+2,i}v_{n+l+4,i} - v_{n,i}v_{n+l+3,i}v_{n+k+3,i} - v_{n+1,i}v_{n+k+1,i}v_{n+l+4,i}}{w_i} + \frac{v_{n+1,i}v_{n+l+2,i}v_{n+k+3,i} + v_{n+k+1,i}v_{n+l+3,i}v_{n+2,i} - v_{n+k+2,i}v_{n+l+2,i}v_{n+2,i}}{w_i}, \quad (4.19)$$

όπου

$$w_i = v_{n,i}v_{n+k,i}v_{n+l+3,i} - v_{n,i}v_{n+k+2,i}v_{n+l+1,i} - v_{n+1,i}v_{n+k,i}v_{n+l+2,i} + v_{n+1,i}v_{n+k+1,i}v_{n+l+1,i} - v_{n+k+1,i}v_{n+l+3,i}v_{n-1,i} + v_{n+k+2,i}v_{n+l+2,i}v_{n-1,i}.$$

Οι τύποι για τις παραμέτρους  $\tilde{\lambda}_{1,i}$ ,  $\tilde{\lambda}_{2,i}$  και  $\tilde{\lambda}_{3,i}$ , που έχουν προκύψει λύνοντας συμβολικά το σύστημα των εξισώσεων (4.16), είναι οι ακόλουθοι:

$$\tilde{\lambda}_{1,i} = \frac{s_i}{3} - \frac{(A_p)_i}{3 \cdot 2^{4/3}} + \frac{3t_i - s_i^2}{3 \cdot 2^{2/3}(A_p)_i} - 2^{-2/3}3^{-1/2} \sqrt{-\left(\frac{3t_i - s_i^2 + 2^{-2/3}(A_p)_i^2}{(A_p)_i}\right)^2}, \quad (4.20)$$

$$\tilde{\lambda}_{2,i} = \frac{s_i}{3} - \frac{(A_p)_i}{3 \cdot 2^{4/3}} + \frac{3t_i - s_i^2}{3 \cdot 2^{2/3}(A_p)_i} + 2^{-2/3}3^{-1/2} \sqrt{-\left(\frac{3t_i - s_i^2 + 2^{-2/3}(A_p)_i^2}{(A_p)_i}\right)^2}, \quad (4.21)$$

$$\tilde{\lambda}_{3,i} = (B_p)_i + \frac{s_i}{3} + \frac{s_i^2 - 3t_i}{9(B_p)_i}, \quad (4.22)$$

$$\text{όπου } (A_p)_i = \left(27g_i + 3\sqrt{3}\sqrt{4t_i^3 - t_i^2s_i^2 - 18t_i g_i s_i + 27g_i^2 + 4g_i s_i^3 - 9t_i s_i + 2s_i^3}\right)^{1/3}$$

$$\text{και } (B_p)_i = \left(\frac{g_i}{2} - \frac{t_i s_i}{6} + \sqrt{\left(\frac{s_i^3}{27} - \frac{t_i s_i}{6} + \frac{g_i}{2}\right)^2 + \left(\frac{t_i}{3} - \frac{s_i^2}{9}\right)^3 + \frac{s_i^3}{27}}\right)^{1/3}.$$

Η λύση του συστήματος των αντίστοιχων συνθηκών παρεμβολής, δίνεται από τους τύπους

$$\tilde{m}_{1,i} = \frac{v_{2,i} - \tilde{\lambda}_{2,i}v_{1,i} - \tilde{\lambda}_{3,i}v_{1,i} + \tilde{\lambda}_{2,i}\tilde{\lambda}_{3,i}v_{0,i}}{(\tilde{\lambda}_{1,i} - \tilde{\lambda}_{2,i})(\tilde{\lambda}_{1,i} - \tilde{\lambda}_{3,i})}, \quad (4.23)$$

$$\tilde{m}_{2,i} = -\frac{v_{2,i} - \tilde{\lambda}_{1,i}v_{1,i} - \tilde{\lambda}_{3,i}v_{1,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{3,i}v_{0,i}}{(\tilde{\lambda}_{1,i} - \tilde{\lambda}_{2,i})(\tilde{\lambda}_{2,i} - \tilde{\lambda}_{3,i})}, \quad (4.24)$$

## 4.2. ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΙΚΕΣ ΕΚΤΙΜΗΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΗ ΜΟΡΦΗ $X^T f(A)Y$

$$\tilde{m}_{3,i} = \frac{v_{2,i} - \tilde{\lambda}_{1,i}v_{1,i} - \tilde{\lambda}_{2,i}v_{1,i} + \tilde{\lambda}_{1,i}\tilde{\lambda}_{2,i}v_{0,i}}{(\tilde{\lambda}_{1,i} - \tilde{\lambda}_{3,i})(\tilde{\lambda}_{2,i} - \tilde{\lambda}_{3,i})}. \quad (4.25)$$

Έτσι, μπορούμε να δημιουργήσουμε μία οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  για τη διανυσματική ροπή συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  η οποία δίνεται στην ακόλουθη πρόταση.

### Πρόταση 4.6.

Μία οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων  $\{\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}, n, k, \ell \in \mathbb{Z}\}$  για τη διανυσματική ροπή συνάρτησης  $\mathbf{v}_f$  δίνεται από

$$(\tilde{\varphi}_{n,k,\ell})_i = f(\tilde{\lambda}_{1,i})\tilde{m}_{1,i} + f(\tilde{\lambda}_{2,i})\tilde{m}_{2,i} + f(\tilde{\lambda}_{3,i})\tilde{m}_{3,i}, \quad n, k, \ell \in \mathbb{Z}, \quad (4.26)$$

όπου  $\tilde{\lambda}_{1,i}, \tilde{\lambda}_{2,i}, \tilde{\lambda}_{3,i}, \tilde{m}_{1,i}, \tilde{m}_{2,i}, \tilde{m}_{3,i}$  προσδιορίζονται από τους τύπους (4.20), (4.21), (4.22), (4.23), (4.24), (4.25) αντίστοιχα και  $i = 1, 2, \dots, p$ .

### Παρατήρηση 4.4.

Αν για κάποιο  $i$ , ισχύει ότι  $v_{n+1,i} = v_{n+k+2,i} = v_{n+\ell+3,i} = 0$  ή  $(\hat{\rho}_{n,n+k})_i = (\hat{\rho}_{n+\ell+2,n-1})_i = (\hat{\rho}_{n+k+1,n+\ell+1})_i = 1$ , τότε η σχέση (4.26) δεν μπορεί να δώσει εκτιμήσεις για τη συγκεκριμένη επιλογή των παραμέτρων  $(n, k, \ell)$ .

## 4.2 Διανυσματικές εκτιμήσεις για τη μορφή $X^T f(A)Y$

Θεωρούμε τη γενική μορφή

$$X^T f(A)Y, \quad (4.27)$$

όπου  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  είναι ένας διαγωνίσιμος πίνακας,  $X = [\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_m]$ ,  $Y = [\mathbf{y}_1 \ \mathbf{y}_2 \ \dots \ \mathbf{y}_m] \in \mathbb{R}^{p \times m}$  είναι “block διανύσματα” με  $m \ll p$  στήλες και  $f$  είναι μία ομαλή συνάρτηση που ορίζεται στο φάσμα του πίνακα  $A$ . Σε αυτή την ενότητα, αναπτύσσουμε εκτιμήσεις για την παραπάνω γενική μορφή υιοθετώντας τις διανυσματικές εκτιμήσεις που έχουν προκύψει για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ , όπως αυτές περιγράφονται παραπάνω.

Στη διεθνή βιβλιογραφία, υπάρχουν μέθοδοι για την προσέγγιση της μορφής  $X^T f(A)Y$ , όπου ο πίνακας  $X^T Y$  είναι πλήρους τάξης (full rank). Στις εργασίες [27, 58], περιγράφεται μία προσέγγιση εκτίμησης της μορφής  $X^T f(A)Y$  που βασίζεται σε κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss και block anti-Gauss. Τα αρχικά “block διανύσματα” πρέπει να είναι διορθογώνια (biorthogonal), δηλαδή  $X^T Y = I_m$ , ή διαφορετικά τα “block διανύσματα”  $X, Y$  μπορούν

να γίνουν διορθογώνια χρησιμοποιώντας την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών. Η προτεινόμενη μέθοδος μπορεί να εφαρμοστεί για κάθε επιλογή των  $X, Y$  και δεν είναι απαραίτητο να είναι ή να γίνουν διορθογώνια.

Ας εκφράσουμε λοιπόν την επιθυμητή μορφή ως ακολούθως

$$\begin{aligned} X^T f(A)Y &= X^T f(A) [ \mathbf{y}_1 \quad \mathbf{y}_2 \quad \dots \quad \mathbf{y}_m ] \\ &= X^T [ f(A)\mathbf{y}_1 \quad f(A)\mathbf{y}_2 \quad \dots \quad f(A)\mathbf{y}_m ]. \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι κάθε γινόμενο  $f(A)\mathbf{y}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ , μπορεί να εκτιμηθεί χρησιμοποιώντας τις οικογένειες διανυσματικών εκτιμήσεων ενός, δύο και τριών όρων  $\varphi_z$  (4.6),  $\hat{\varphi}_{n,k}$  (4.15) και  $\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  (4.26), αντίστοιχα. Συγκεκριμένα, μπορούμε να διατυπώσουμε την ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 4.7.**

*Οικογένειες διανυσματικών εκτιμήσεων ενός, δύο και τριών όρων για τη μορφή  $X^T f(A)Y$  μπορούν να προκύψουν εκτιμώντας κάθε είσοδο  $X^T f(A)\mathbf{y}_i$ , με τις διανυσματικές εκτιμήσεις ενός, δύο και τριών όρων  $X^T \varphi_z$ ,  $X^T \hat{\varphi}_{n,k}$ ,  $X^T \tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  αντίστοιχα.*

### 4.3 Αριθμητικά αποτελέσματα

#### Υπολογιστική πολυπλοκότητα

Η υπολογιστική πολυπλοκότητα των διανυσματικών εκτιμήσεων για την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  παρουσιάζεται στον Πίνακα 4.1. Συγκεκριμένα, η οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων ενός όρου  $\varphi_z$  για την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  απαιτεί τον υπολογισμό μόνο δύο γινομένων πινάκων-διανυσμάτων (matrix-vector products - mvp's). Επιπλέον, η πολυπλοκότητα των οικογενειών διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{\varphi}_{n,k}$  και τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  εξαρτάται από την τιμή των παραμέτρων που απαιτούνται για την εφαρμογή τους. Η υπολογιστική πολυπλοκότητα της οικογένειας διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  είναι της τάξης  $\mathcal{O}(\mu p^2)$ , όπου  $\mu = \max\{n + k + 3, n + \ell + 4\}$ , για κάθε πυκνό (dense) πίνακα  $A$  διάστασης  $p$ . Σε περίπτωση που ο δοσμένος πίνακας είναι banded με bandwidth  $s$ , η πολυπλοκότητα αυτών των διανυσματικών εκτιμήσεων είναι της τάξης  $\mathcal{O}(sp)$ .

### 4.3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Πίνακας $A$	$f(A)\mathbf{b}$		
	$\varphi_z$	$\hat{\varphi}_{n,k}$	$\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$
dense	$\mathcal{O}(2p^2)$	$\mathcal{O}((n+k+2)p^2)$	$\mathcal{O}(\mu p^2)$
banded	$\mathcal{O}(2sp)$	$\mathcal{O}((n+k+2)sp)$	$\mathcal{O}(\mu sp)$

Πίνακας 4.1: Υπολογιστική πολυπλοκότητα των διανυσματικών εκτιμήσεων για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ .

Η υπολογιστική πολυπλοκότητα των διανυσματικών εκτιμήσεων για τη μορφή  $X^T f(A)Y$ , με  $X, Y \in \mathbb{R}^{p \times m}$ ,  $1 \leq m \ll p$ , εξαρτάται από το  $m$  και η τάξη της είναι  $\mathcal{O}(mp^2)$ . Όταν ο δοσμένος πίνακας  $A$  είναι banded με bandwidth  $s$ , η πολυπλοκότητα είναι της τάξης  $\mathcal{O}(msp)$ . Οι απαιτούμενες αριθμητικές πράξεις παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.2.

Πίνακας $A$	$X^T f(A)Y$		
	$X^T \varphi_z$	$X^T \hat{\varphi}_{n,k}$	$X^T \tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$
dense	$\mathcal{O}(2mp^2)$	$\mathcal{O}(m(n+k+2)p^2)$	$\mathcal{O}(m\mu p^2)$
banded	$\mathcal{O}(2msp)$	$\mathcal{O}(m(n+k+2)sp)$	$\mathcal{O}(m\mu sp)$

Πίνακας 4.2: Υπολογιστική πολυπλοκότητα των διανυσματικών εκτιμήσεων για τη γενική μορφή  $X^T f(A)Y$ .

Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε αρκετά αριθμητικά παραδείγματα που δείχνουν την απόδοση των παραγόμενων οικογενειών διανυσματικών εκτιμήσεων τόσο για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$  όσο και για τη μορφή  $X^T f(A)Y$ . Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν χρησιμοποιώντας το υπολογιστικό πακέτο MATLAB (R2015a), 64-bit, σε υπολογιστή Intel Core i7, με 16 Gb DDR4 RAM.

Σε όλα τα παραδείγματα, παρουσιάζουμε πίνακες στους οποίους καταγράφεται το σχετικό σφάλμα για τις παραχθείσες διανυσματικές εκτιμήσεις. Η ακριβής τιμή προσδιορίζεται με τον υπολογισμό του πίνακα  $f(A)$  χρησιμοποιώντας έτοιμες συναρτήσεις του MATLAB, όπως “expm”, “sqrtm”, “logm” κ.α. Η συνάρτηση προσήμου του πίνακα  $A$  υπολογίζεται από τον τύπο  $\text{sign}(A) = A(A^2)^{-1/2}$ . Σε όσα ακολουθούν, με  $\text{rand}(p, 1)$  δηλώνουμε ένα τυχαίο διάνυσμα μήκους  $p$  με θετικά στοιχεία τα οποία προέρχονται από την ομοιόμορφη κατανομή και με  $\text{randn}(p, 1)$  δηλώνουμε ένα τυχαίο διάνυσμα μήκους  $p$  που προέρχεται από την κανονική κατανομή. Τέλος, συμβολίζουμε με  $\mathbf{1}$  το διάνυσμα μήκους  $p$  που έχει όλα του τα στοιχεία ίσα με 1.

**Παράδειγμα 4.1.** Διανυσματικές εκτιμήσεις ενός όρου για το  $f(A)\mathbf{b}$ .

Θεωρούμε τον συμμετρικό, θετικά ορισμένο και ορθογώνιο πίνακα  $A = B^T B$  διάστασης  $p = 700$ , όπου ο  $B$  έχει στοιχεία  $B_{ij} = \sqrt{\frac{2}{p+1}} \sin\left(\frac{ij\pi}{p+1}\right)$ . Ο πίνακας  $B$  μπορεί να βρεθεί στη MATLAB gallery και καλείται με την εντολή  $B = \text{gallery}('orthog', 700)$ , [68]. Έστω  $\mathbf{b}$  ένα διάνυσμα μήκους  $p = 700$  το οποίο προέρχεται από την κανονική κατανομή. Εκτιμούμε το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$  για τρεις διαφορετικές συναρτήσεις  $f$ , χρησιμοποιώντας την διανυσματική εκτίμηση ενός όρου  $\varphi_0$ . Αφού ο πίνακας  $A$  είναι ορθογώνιος, η βέλτιστη τιμή για την παράμετρο είναι  $z = 0$ . Πρόκειται για επέκταση του αποτελέσματος που υπάρχει στην εργασία [34, Παρατήρηση 4]. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.3.

συνάρτηση $f(A)$	$A^{-1}$	$\exp(A)$	$\sqrt{A}$
Σχετ. Σφάλμα	8.6856e-17	1.3646e-15	5.4705e-15

Πίνακας 4.3: Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση του  $f(A)\mathbf{b}$  χρησιμοποιώντας τη διανυσματική εκτίμηση ενός όρου  $\varphi_0$ .

**Παράδειγμα 4.2.** Διανυσματικές εκτιμήσεις δύο όρων για το  $A^{1/2}\mathbf{b}$ .

Θεωρούμε τον μη-συμμετρικό πίνακα  $A = dw256B$  διάστασης  $p = 512$  που προέρχεται από προβλήματα ηλεκτρομαγνητισμού και έχει επιλεγεί από τη συλλογή πινάκων SuiteSparse Matrix Collection [23]. Ο πίνακας αυτός είναι διαγωνίσιμος με θετικές ιδιοτιμές και καλής κατάστασης ( $\kappa(A) = 3.7328$ ). Εκτιμούμε την ποσότητα  $A^{1/2}\mathbf{b}$  για δύο διαφορετικά διανύσματα  $\mathbf{b}$ . Επιλέγουμε το πρώτο διάνυσμα  $\mathbf{b}$  να προέρχεται από την ομοιόμορφη κατανομή (δεύτερη στήλη του Πίνακα 4.4) και το δεύτερο διάνυσμα να προέρχεται από την κανονική κατανομή (τρίτη στήλη του Πίνακα 4.4). Η προσέγγιση αυτών των ποσοτήτων έγινε με χρήση της οικογένειας διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{\varphi}_{n,k}$  (4.15) για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $n$  και  $k$ . Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.4.

Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στον Πίνακα 4.4, χρησιμοποιώντας την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{\varphi}_{n,k}$  για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $n, k$ , μπορούμε να επιτύχουμε σχετικά σφάλματα της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-3})$  ή  $\mathcal{O}(10^{-4})$ . Στην τελευταία γραμμή αυτού του Πίνακα καταγράφεται το μέσο σχετικό σφάλμα (mean relative error - MRE) των εκτιμήσεων για τις διάφορες τιμές των παραμέτρων  $n, k$ .



$(n, k)$	Σχετ. Σφάλμα [ $\mathbf{b} = \text{rand}(512, 1)$ ]	Σχετ. Σφάλμα [ $\mathbf{b} = \text{randn}(512, 1)$ ]
(1,0)	9.9679e-4	7.7755e-4
(1,1)	1.9075e-3	1.1618e-3
(1,3)	3.6696e-3	1.3892e-3
(1,-2)	3.6671e-4	8.3626e-4
(0,4)	3.5097e-3	4.4683e-3
<i>MRE</i>	2.0901e-3	1.7266e-3

Πίνακας 4.4: Εκτιμώντας την ποσότητα  $A^{1/2}\mathbf{b}$  για τον πίνακα  $A = dw256B$  διάστασης  $p = 512$  χρησιμοποιώντας την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $n$  και  $k$ .

#### Παράδειγμα 4.3. Διανυσματικές εκτιμήσεις τριών όρων για το $\exp(A)\mathbf{b}$ .

Θεωρούμε τον πίνακα Poisson διάστασης  $p = 1600$  ο οποίος περιγράφεται στην Ενότητα 1.7. Συγκεκριμένα, θεωρούμε τον πίνακα  $A$  ως τον πολλαπλασιασμό του πίνακα Poisson με 0.02, που μπορεί να προκύψει με την εντολή του MATLAB  $A = 0.02 * \text{gallery}('poisson', 40)$ , [68]. Επίσης, επιλέγουμε δύο διαφορετικά διανύσματα  $\mathbf{b}$ . Θεωρούμε το διάνυσμα  $\mathbf{b}$  ώστε η  $i$ -οστή είσοδος του  $\mathbf{b}$  να ισούται με την εφαπτομένη του αντίστοιχου δείκτη  $i$ , δηλαδή  $b_i = \tan(i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$  (δεύτερη στήλη του Πίνακα 4.5). Το δεύτερο διάνυσμα  $\mathbf{b}$  προέρχεται από την ομοιόμορφη κατανομή (τρίτη στήλη του Πίνακα 4.5).

Εκτιμούμε την ποσότητα  $\exp(A)\mathbf{b}$  για αυτά τα δύο διανύσματα  $\mathbf{b}$ . Η εκτίμηση αυτών των ποσοτήτων έχει γίνει χρησιμοποιώντας την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  (4.26) για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $n$ ,  $k$  και  $\ell$ . Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.5.

Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στον Πίνακα 4.5, χρησιμοποιώντας την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $n$ ,  $k$ ,  $\ell$ , επιτυγχάνουμε ικανοποιητικά σχετικά σφάλματα. Συγκεκριμένα, τα σχετικά σφάλματα που προκύπτουν είναι της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-10})$  και  $\mathcal{O}(10^{-8})$ , αν το αρχικό διάνυσμα  $\mathbf{b}$  είναι τυχαίο ή  $b_i = \tan(i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , αντίστοιχα.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ ΓΙΝΟΜΕΝΟΥ $f(A)\mathbf{b}$

$(n, k, \ell)$	Σχετ. Σφάλμα [ $b_i = \tan(i)$ ]	Σχετ. Σφάλμα [ $\mathbf{b} = \text{rand}(1600, 1)$ ]
(1,0,0)	1.6454e-6	1.6563e-10
(1,2,0)	2.8671e-4	5.8612e-5
(1,0,3)	4.0753e-8	6.7314e-6
(1,2,5)	1.9537e-6	4.5347e-6
(1,2,3)	9.2279e-2	1.5779e-5

Πίνακας 4.5: Εκτιμώντας το γινόμενο  $\exp(A)\mathbf{b}$  για τον πίνακα Poisson διάστασης  $p = 1600$  χρησιμοποιώντας την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $n$ ,  $k$  και  $\ell$ .

**Παράδειγμα 4.4.**  $f(A)\mathbf{b}$ : Σύγκριση των διανυσματικών εκτιμήσεων δύο και τριών όρων.

Σε αυτό το παράδειγμα, συγκρίνουμε τη συμπεριφορά των διανυσματικών εκτιμήσεων δύο και τριών όρων. Ειδικότερα, εκτιμούμε την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  για διάφορες επιλογές πινάκων  $A$ , διανυσμάτων  $\mathbf{b}$  και συναρτήσεων  $f$ . Εκτιμούμε την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  χρησιμοποιώντας τη διανυσματική εκτίμηση δύο όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0}$  και τη διανυσματική εκτίμηση τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$ .

Δοκιμάζουμε τον πίνακα KMS διάστασης  $p = 800$  με  $r = 0.2$ , ο οποίος περιγράφεται στην Ενότητα 1.7. Επίσης, θεωρούμε τον διαγωνίσιμο πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{300 \times 300}$  του οποίου τα στοιχεία είναι ομοιόμορφα κατανομημένα, [58]. Αυτός ο πίνακας είναι μη-συμμετρικός και αόριστος (indefinite) με μιγαδικές ιδιοτιμές. Μπορούμε να κατασκευάσουμε αυτόν τον πίνακα χρησιμοποιώντας την εντολή του MATLAB  $A = \text{rand}(300)/100$ .

Οι άλλοι πίνακες που χρησιμοποιήθηκαν έχουν επιλεγεί από τη συλλογή πινάκων SuiteSparse Matrix Collection [23]. Οι πίνακες ex1 (μη-συμμετρικός) και Chem97ZtZ (συμμετρικός) είναι διαγωνίσιμοι με διάσταση  $p = 216$  και  $p = 2541$  αντίστοιχα. Ο τελευταίος πίνακας που δοκιμάστηκε είναι ο Trefethen\_500 ο οποίος είναι συμμετρικός, θετικά ορισμένος, διάστασης  $p = 500$ . Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.6. Συγκεκριμένα, στις δύο τελευταίες στήλες του Πίνακα 4.6, καταγράφουμε τα σχετικά σφάλματα που προκύπτουν χρησιμοποιώντας τη διανυσματική εκτίμηση δύο όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0}$  και τη διανυσματική εκτίμηση τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$  αντίστοιχα.

Στον Πίνακα 4.6, παρατηρούμε ότι η διανυσματική εκτίμηση τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$ , επιτυγχάνει καλύτερα σχετικά σφάλματα εν συγκρίσει με τη διανυσματική εκτίμηση δύο όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0}$ .

### 4.3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Πίνακας $A$	διάνυσμα $\mathbf{b}$	συνάρτηση $f(A)$	$\hat{\varphi}_{1,0}$	$\tilde{\varphi}_{1,0,0}$
$KMS(800, 0.2)$	$rand(800, 1)$	$\log(A)$	$1.8984e-2$	$8.2597e-4$
$KMS(800, 0.2)$	$randn(800, 1)$	$\sqrt{A}$	$1.3775e-3$	$4.8433e-5$
$rand(300)/100$	$rand(300, 1)$	$\exp(A)$	$3.0348e-2$	$5.8355e-8$
$rand(300)/100$	$\mathbf{1}$	$\sqrt{A}$	$1.3289e-2$	$1.3277e-2$
$ex1$	$\mathbf{1}$	$\exp(A)$	$2.4133e-8$	$8.3008e-12$
$ex1$	$randn(216, 1)$	$\exp(A)$	$5.3671e-7$	$2.8318e-11$
$Chem97ZtZ$	$\mathbf{1}$	$\sqrt{A}$	$7.2613e-3$	$6.4037e-3$
$Trefethen_500$	$randn(500, 1)$	$\log(A)$	$6.8993e-3$	$6.0093e-3$
$Trefethen_500$	$rand(500, 1)$	$sign(A)$	$4.1969e-4$	$6.4524e-4$

Πίνακας 4.6: Εκτιμώντας την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  χρησιμοποιώντας τις οικογένειες διανυσματικών εκτιμήσεων δύο και τριών όρων.

#### Παράδειγμα 4.5. Μία εφαρμογή του $A^{1/2}\mathbf{b}$ .

Θεωρούμε τον πίνακα συνδιακύμανσης  $A = covariance(p, \alpha, \beta)$  διάστασης  $p = 2000$  για διάφορες τιμές των παραμέτρων  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ . Περιγραφή αυτού του πίνακα μπορεί να βρεθεί στην Ενότητα 1.7. Στη Στατιστική, ένα από τα πιο συνηθισμένα προβλήματα είναι η δειγματοληψία από μία πολυμεταβλητή Gaussian κατανομή με θετικά ορισμένο πίνακα συνδιακύμανσης  $A$ , [20]. Σε αυτά τα προβλήματα, εμφανίζεται το γινόμενο  $A^{1/2}\mathbf{b}$ , όπου  $\mathbf{b} = randn(2000, 1)$ . Ελέγχουμε τη συμπεριφορά των διανυσματικών εκτιμήσεων  $\hat{\varphi}_{1,0}$  και  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$  για διάφορους πίνακες συνδιακύμανσης. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.7. Όπως μπορούμε να δούμε, η συμπεριφορά των εκτιμήσεων είναι σχεδόν ίδια για τους πίνακες συνδιακύμανσης που δοκιμάσαμε και τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα είναι ικανοποιητικά.

$(\alpha, \beta)$	$\hat{\varphi}_{1,0}$	$\tilde{\varphi}_{1,0,0}$
(1, 1)	$9.8098e-4$	$2.3706e-4$
(1/2, 4)	$1.2601e-4$	$1.0777e-5$

Πίνακας 4.7: Σχετικά σφάλματα των διανυσματικών εκτιμήσεων δύο και τριών όρων για το γινόμενο  $A^{1/2}\mathbf{b}$  για πίνακες συνδιακύμανσης.

**Παράδειγμα 4.6.** Εκτιμώντας τη μορφή  $X^T \exp(A)Y$ ,  $X^T Y = I_m$ .

Θεωρούμε τον διαγωνίσσιμο πίνακα  $A = \text{rand}(300)/100$ , ο οποίος περιγράφεται στο Παράδειγμα 4.4. Εκτιμούμε τη μορφή

$$X^T \exp(A)Y,$$

όπου  $X = [ \mathbf{e}_1, 2\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 ] \in \mathbb{R}^{300 \times 2}$  και  $Y = [ \mathbf{e}_1 - \frac{2}{3}\mathbf{e}_2, \frac{1}{3}\mathbf{e}_2 ] \in \mathbb{R}^{300 \times 2}$ ,  $X^T Y = I_2$ , [58]. Προκειμένου να εκτιμηθεί αυτή η μορφή, χρησιμοποιούμε τις διανυσματικές εκτιμήσεις  $X^T \hat{\varphi}_{n,k}$  (4.15) και  $X^T \tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  (4.26), για διάφορες τιμές των αντίστοιχων παραμέτρων. Τα σχετικά σφάλματα αυτών των εκτιμήσεων καταγράφονται στον Πίνακα 4.8. Όπως παρατηρούμε σε αυτόν τον Πίνακα, μπορούμε να επιτύχουμε ικανοποιητική ακρίβεια χρησιμοποιώντας είτε την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων είτε την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων. Ωστόσο, η οικογένεια των διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων μπορεί να επιτύχει καλύτερα αποτελέσματα. Συγκεκριμένα, η τάξη των σχετικών σφαλμάτων για  $X^T \hat{\varphi}_{n,k}$  είναι  $\mathcal{O}(10^{-5})$  και η τάξη των σχετικών σφαλμάτων για  $X^T \tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$  κυμαίνεται μεταξύ  $\mathcal{O}(10^{-6})$  και  $\mathcal{O}(10^{-9})$ .

$X^T \hat{\varphi}_{n,k}$		$X^T \tilde{\varphi}_{n,k,\ell}$	
$(n, k)$	Σχετ. Σφάλμα	$(n, k, \ell)$	Σχετ. Σφάλμα
(1, 0)	4.6408e-5	(1, 0, 0)	9.0910e-9
(1, 1)	9.0938e-5	(1, -4, 0)	4.7983e-6
(1, 2)	8.3419e-5	(1, 0, 1)	2.5599e-8
(1, 3)	8.3175e-5	(1, 0, 2)	2.5774e-8
(1, 7)	8.3169e-5	(1, 7, 3)	1.6071e-6

Πίνακας 4.8: Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση της μορφής  $X^T \exp(A)Y$  με  $A$  μη-συμμετρικό πίνακα και  $X^T Y = I_2$ .

**Παράδειγμα 4.7.** Εκτιμώντας τη μορφή  $X^T f(A)Y$ ,  $X^T Y \neq I_m$ .

Το παράδειγμα αυτό είναι παρόμοιο με ένα παράδειγμα που υπάρχει στην εργασία [58]. Έστω  $A \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$  ένας συμμετρικός, θετικά ορισμένος πίνακας με ισαπέχουσες ιδιοτιμές στο διάστημα  $[\frac{5}{2}, 4]$ . Μπορούμε να δημιουργήσουμε αυτόν τον πίνακα χρησιμοποιώντας τη σχέση  $A = QDQ^T$ , όπου  $D$  είναι ο διαγώνιος πίνακας που περιέχει τις δοσμένες ιδιοτιμές του  $A$  και  $Q$  είναι ένας ορθογώνιος πίνακας που μπορεί να προκύψει με την εντολή του MATLAB  $Q = \text{orth}(\text{randn}(p, p))$ . Μας ενδιαφέρει η εκτίμηση της μορφής  $X^T f(A)Y$ , όπου

$X = \begin{bmatrix} 3\mathbf{e}_1, & \frac{5}{2}\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{100 \times 2}$  και  $Y = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{e}_3, & \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{100 \times 2}$ ,  $X^T Y \neq I_2$ . Δοκιμάζουμε τέσσερις διαφορετικές συναρτήσεις  $f$ . Προσεγγίζουμε αυτή τη μορφή με τη χρήση των διανυσματικών εκτιμήσεων  $X^T \hat{\varphi}_{1,0}$  και  $X^T \tilde{\varphi}_{1,0,0}$ . Καταγράφουμε τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα για την προσέγγιση της μορφής  $X^T f(A)Y$  στον Πίνακα 4.9. Όπως παρατηρούμε σε αυτόν τον Πίνακα, μπορούμε να επιτύχουμε ικανοποιητικά σχετικά σφάλματα χρησιμοποιώντας αυτές τις διανυσματικές εκτιμήσεις.

$f(A)$	$X^T \hat{\varphi}_{1,0}$	$X^T \tilde{\varphi}_{1,0,0}$
$A^{-1}$	2.6614e-4	2.7289e-5
$\exp(A)$	1.1694e-3	9.8659e-6
$\log(A)$	5.8018e-5	2.7359e-6
$\sqrt{A}$	1.0499e-5	3.3539e-7

Πίνακας 4.9: Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση της μορφής  $X^T f(A)Y$  με  $A$  συμμετρικό, θετικά ορισμένο πίνακα και  $X^T Y \neq I_2$ .

### Σύγκριση με άλλες μεθόδους

Στη συνέχεια, συγκρίνουμε τη συμπεριφορά των διανυσματικών εκτιμήσεων που έχουν προκύψει για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$  και τη μορφή  $X^T f(A)Y$  με τη μέθοδο της παρεκβολής με αντίστοιχες εκτιμήσεις που υπάρχουν στη διεθνή βιβλιογραφία. Συγκεκριμένα, συγκρίνουμε τις προτεινόμενες εκτιμήσεις για την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  με αυτές που προκύπτουν χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Arnoldi [48] ή μία πολυωνυμική προσέγγιση που περιγράφεται στην εργασία [20]. Επίσης, συγκρίνουμε τις παραχθείσες εκτιμήσεις για τη μορφή  $X^T f(A)Y$  με αντίστοιχες εκτιμήσεις που βασίζονται σε κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης block Gauss και anti-Gauss.

Ο αλγόριθμος block Gauss και anti-Gauss που χρησιμοποιείται στο Παράδειγμα 4.10 περιγράφεται στην εργασία [27] και ο κώδικας MATLAB υπάρχει στην ιστοσελίδα <http://bugs.unica.it/~gppe/soft/#blgausssexp>.

**Παράδειγμα 4.8.**  $f(A)\mathbf{b}$ : Η μέθοδος Arnoldi - Η μέθοδος της παρεκβολής.

Σε αυτό το παράδειγμα, συγκρίνουμε τις προτεινόμενες διανυσματικές εκτιμήσεις για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$  με τις αντίστοιχες προσεγγίσεις που προκύπτουν χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Arnoldi. Τα αποτελέσματα δίνονται στον Πίνακα 4.10 και οι πίνακες που έχουν χρησιμοποιηθεί περιγράφονται στα παραπάνω παραδείγματα. Συμβολίζουμε με  $k_a$  τον αριθμό των απαιτούμενων επαναλήψεων Arnoldi ώστε να επιτύχουμε σχετικά σφάλματα ίδιας τάξεως με τα αντίστοιχα

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ ΓΙΝΟΜΕΝΟΥ $f(A)\mathbf{b}$

σχετικά σφάλματα των διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$ . Όπως παρατηρούμε σε αυτόν τον Πίνακα, ο αριθμός των επαναλήψεων Arnoldi εξαρτάται από τον πίνακα  $A$ , ενδεικτικά αναφέρουμε ότι ο πίνακας  $dw256B$  χρειάζεται μόνο 3 επαναλήψεις ενώ ο πίνακας συνδιακύμανσης (covariance matrix) με παραμέτρους  $\alpha = \beta = 1$  απαιτεί 14 επαναλήψεις ώστε να επιτευχθεί η ίδια τάξη ακρίβειας με τη μέθοδο της παρεκβολής.

πίνακας $A$	$\mathbf{b}$	$f(A)$	Arnoldi	$\tilde{\varphi}_{1,0,0}$	“speedup”
<i>ex1</i>	<i>rand</i>	$\exp(A)$	$1.8002e-12$ ( $k_a = 6$ )	$1.0731e-11$	1.2
<i>ex1</i>	<i>randn</i>	$\sqrt{A}$	$3.0297e-2$ ( $k_a = 10$ )	$2.9920e-2$	2
<i>dw256B</i>	<i>randn</i>	$\log(A)$	$2.1910e-2$ ( $k_a = 3$ )	$6.0449e-2$	0.6
<i>covariance(100, 1, 1)</i>	<i>randn</i>	$\sqrt{A}$	$2.1202e-4$ ( $k_a = 14$ )	$2.3245e-4$	2.8
<i>KMS(100, 0.2)</i>	<i>randn</i>	$\exp(A)$	$3.6915e-6$ ( $k_a = 5$ )	$1.4288e-6$	1

Πίνακας 4.10: Εκτιμώντας το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$  χρησιμοποιώντας τη διανυσματική εκτίμηση τριών όρων και τις προσεγγίσεις με τη μέθοδο Arnoldi.

Ωστόσο, αξίζει να σημειωθεί ότι η μέθοδος Arnoldi μπορεί να επιτύχει καλύτερες εκτιμήσεις καθώς ο αριθμός των επαναλήψεων αυξάνεται αλλά έτσι αυξάνεται και η πολυπλοκότητα. Στην τελευταία στήλη του Πίνακα 4.10 καταγράφουμε το “speedup”, το οποίο ορίζεται ως το πηλίκο του αριθμού των απαιτούμενων mvp’s της προσέγγισης Arnoldi, δηλαδή  $k_a$  mvp’s, προς τον αριθμό των mvp’s της εκτίμησης  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$ , δηλαδή 5 mvp’s. Η αναγραφόμενη τιμή εκφράζει το “speed up” της μεθόδου της παρεκβολής.

**Παράδειγμα 4.9.**  $f(A)\mathbf{b}$ : Πολυωνυμικές εκτιμήσεις - Διανυσματικές εκτιμήσεις.

Σε αυτό το παράδειγμα, συγκρίνουμε τη συμπεριφορά των διανυσματικών εκτιμήσεων με μία πολυωνυμική προσέγγιση της ποσότητας  $f(A)\mathbf{b}$  για συμμετρικούς και θετικά ορισμένους πίνακες, η οποία εισήχθη στην εργασία [20]. Ειδικότερα, εκτιμούμε το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ , για δύο διαφορετικές συναρτήσεις  $f$ , με  $\mathbf{b} = \text{randn}(p, 1)$ , χρησιμοποιώντας τη διανυσματική εκτίμηση δύο όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0}$  και τη διανυσματική εκτίμηση τριών όρων  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$ . Επειδή το διάνυσμα  $\mathbf{b}$  είναι τυχαίο, τρέχουμε δέκα φορές τον αλγόριθμο για τον υπολογισμό των  $\tilde{\varphi}_{1,0}$ ,  $\tilde{\varphi}_{1,0,0}$  και υπολογίζουμε το μέσο σχετικό σφάλμα. Συγκρίνουμε τα αποτελέσματα αυτών των διανυσματικών εκτιμήσεων με τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα που καταγράφονται στους Πίνακες 6.1 και 6.4 στην εργασία [20], για κάποιους συμμετρικούς και θετικά ορισμένους πίνακες από τη συλλογή πινάκων SuiteSparse Matrix Collection, [23].

### 4.3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

πίνακας $A$	$f(A)$	πολυων. προσέγγιση	$\hat{\varphi}_{1,0}$	$\tilde{\varphi}_{1,0,0}$
Trefethen_2000	$\log(A)$	$1.8060e-4$	$3.3217e-3$	$3.1668e-3$
plbuckle	$\log(A)$	$1.0433e-2$	$6.9828e-2$	$5.4545e-2$
plbuckle	$\sqrt{A}$	$2.87e-4$	$6.8554e-2$	$3.1275e-2$
nasa1824	$\sqrt{A}$	$1.26e-3$	$1.2821e-1$	$9.5264e-2$
nasa1824	$\log(A)$	$2.6332e-2$	$1.4220e-1$	$1.3022e-1$

Πίνακας 4.11: Εκτιμώντας την ποσότητα  $f(A)\mathbf{b}$  χρησιμοποιώντας τις διανυσματικές εκτιμήσεις δύο και τριών όρων και μία πολυωνυμική προσέγγιση.

Όπως μπορούμε να δούμε στον Πίνακα 4.11, η προτεινόμενη μέθοδος παρεκβολής και η πολυωνυμική προσέγγιση, μπορούν να επιτύχουν σχεδόν την ίδια τάξη ακρίβειας, αλλά η πολυωνυμική προσέγγιση απαιτεί  $k_p = 200$  επαναλήψεις για αυτούς τους πίνακες. Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι αυτή η πολυωνυμική προσέγγιση μπορεί να επιτύχει πολύ ικανοποιητικές εκτιμήσεις για το γινόμενο  $\exp(A)\mathbf{b}$ , σύμφωνα με τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην εργασία [20].

**Παράδειγμα 4.10.**  $X^T f(A)Y$ : Αριθμητική ολοκλήρωση Gauss/anti-Gauss - Διανυσματικές εκτιμήσεις.

Εκτιμούμε τη μορφή  $X^T \exp(A)Y$ , όπου  $X = [ \mathbf{e}_1, 2\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 ] \in \mathbb{R}^{p \times 2}$  και  $Y = [ \mathbf{e}_1 - \frac{2}{3}\mathbf{e}_2, \frac{1}{3}\mathbf{e}_2 ] \in \mathbb{R}^{p \times 2}$ , χρησιμοποιώντας αριθμητική ολοκλήρωση block Gauss και anti-Gauss και την προτεινόμενη μέθοδο της παρεκβολής. Δοκιμάζουμε δύο πίνακες για να συγκρίνουμε τη συμπεριφορά των παραγόμενων εκτιμήσεων. Συγκεκριμένα, δοκιμάζουμε τον μη-συμμετρικό, διαγωνίσιμο πίνακα  $\text{rand}(300)/100$ , ο οποίος περιγράφεται στο Παράδειγμα 4.4, και τον συμμετρικό πίνακα  $A = QDQ^T$  με καθορισμένες ιδιοτιμές που περιγράφεται στο Παράδειγμα 4.7. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.12. Στις παρενθέσεις αυτού του Πίνακα καταγράφεται ο χρόνος εκτέλεσης σε δευτερόλεπτα. Όπως μπορούμε να δούμε από τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.12 επιτυγχάνουμε μία δίκαιη ακρίβεια και με τις δύο μεθόδους, αλλά η ακρίβεια εξαρτάται σαφώς από τον πίνακα. Η προσέγγιση που βασίζεται στην αριθμητική ολοκλήρωση Gauss και anti-Gauss μπορεί γενικά να επιτύχει ακριβείς εκτιμήσεις σε σύντομο χρονικό διάστημα. Η προτεινόμενη μέθοδος παρεκβολής μπορεί να επιτύχει δίκαιες εκτιμήσεις σε συγκρίσιμο χρόνο εκτέλεσης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ ΓΙΝΟΜΕΝΟΥ  $f(A)\mathbf{b}$

---

πίνακας $A$	block (anti) Gauss	$X^T \hat{\varphi}_{1,0}$	$X^T \tilde{\varphi}_{1,0,0}$
$rand(300)/100$	$3.1969e-6$ [8.8105e-3 sec]	$3.0993e-4$ [1.1209e-2 sec]	$5.0143e-9$ [9.5020e-3 sec]
$A = QDQ^T$	$1.8063e-6$ [9.2280e-3 sec]	$1.1683e-3$ [4.3060e-3 sec]	$5.9752e-6$ [9.4030e-3 sec]

Πίνακας 4.12: Εκτιμώντας τη μορφή  $X^T f(A)Y$  χρησιμοποιώντας τις οικογένειες διανυσματικών εκτιμήσεων δύο, τριών όρων και την αριθμητική ολοκλήρωση block Gauss/anti-Gauss.



## Κεφάλαιο 5

# Εκτίμηση της γενικευμένης συνάρτησης διασταυρωμένης - επικύρωσης (GCV)

Η γενικευμένη συνάρτηση διασταυρωμένης-επικύρωσης (generalized cross - validation (GCV) function) είναι ένα μαθηματικό εργαλείο που χρησιμοποιείται ευρέως σε πολλά προβλήματα που πηγάζουν από την περιοχή της Αριθμητικής Ανάλυσης, της Στατιστικής κ.α. Ο ακριβής υπολογισμός αυτής της συνάρτησης είναι εφικτός μόνο σε προβλήματα μικρής διάστασης, συνεπώς κρίνεται αναγκαία η εκτίμησή της. Σε αυτό το κεφάλαιο παράγουμε εκτιμήσεις για τη συνάρτηση αυτή χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της παρεκβολής και το Θεώρημα του Hutchinson. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτό το κεφάλαιο είναι μέρος της εργασίας [56].

### Συμβολισμός 5.1.

*Χάρη συντομίας, η γενικευμένη συνάρτηση διασταυρωμένης - επικύρωσης θα αποκαλείται συνάρτηση GCV.*

Η συνάρτηση αυτή εισήχθη από τους Craven και Wahba το 1979 στην εργασία [21] και δίνεται από τον τύπο

$$V(\mu) = \frac{\|A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}\|^2}{(\text{Tr}(I_p - A_\mu))^2}, \quad (5.1)$$

όπου  $A \in \mathbb{R}^{p \times m}$  είναι ο πίνακας συντελεστών και  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$  είναι το διάνυσμα σταθερών όρων, που περιέχει ένα άγνωστο σφάλμα  $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^p$ , του γραμμικού συστήματος  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  ( $= \mathbf{b}_{\text{exact}} + \mathbf{e}$ ). Επιπλέον έχουμε  $A_\mu = A(A^T A + \mu I_m)^{-1} A^T$ ,  $\mathbf{x}_\mu = (A^T A + \mu I_m)^{-1} A^T \mathbf{b}$  και  $\mu$  είναι η παράμετρος κανονικοποίησης. Η μέθοδος GCV βασίζεται σε στατιστικές θεωρήσεις, δηλαδή ότι μία καλή τιμή της

παραμέτρου κανονικοποίησης θα πρέπει να προβλέψει τις τιμές δεδομένων που λείπουν. Αυτή η μέθοδος είναι μία μέθοδος πρόβλεψης η οποία πραγματεύεται την ελαχιστοποίηση του προβλεπόμενου μέσου τετραγωνικού σφάλματος (predictive mean-square error)  $\|A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}_{exact}\|$ , όπου  $\mathbf{b}_{exact}$  είναι το άγνωστο διάνυσμα που δεν περιέχει σφάλμα, [44, σελ. 184].

Στην εργασία [67] ο Wahba έδειξε ότι αν ικανοποιείται η διακριτή συνθήκη Picard και ο θόρυβος είναι λευκός (white noise), η τιμή της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  που ελαχιστοποιεί την αναμενόμενη τιμή της  $V(\mu)$  είναι κοντά στη θέση ελαχίστου της αναμενόμενης τιμής του προβλεπόμενου μέσου τετραγωνικού σφάλματος  $\|A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}_{exact}\|$ . Επομένως, η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης GCV ως προς  $\mu$  οδηγεί στην εκτίμηση της παραμέτρου κανονικοποίησης.

## 5.1 Συνάρτηση GCV και διγραμμικές μορφές

Η συνάρτηση GCV μπορεί ισοδύναμα να γραφεί με χρήση διγραμμικών μορφών. Συγκεκριμένα, στην εργασία [57] παρουσιάστηκαν τα ακόλουθα αποτελέσματα.

**Λήμμα 5.1.**

Ισχύει ότι  $I_p - A_\mu = \mu(AA^T + \mu I_p)^{-1}$ .

Απόδειξη.

Έχουμε ότι

$$\begin{aligned} & (AA^T + \mu I_p)^{-1}(AA^T + \mu I_p) = I_p \\ \Rightarrow & (AA^T + \mu I_p)^{-1}AA^T + \mu(AA^T + \mu I_p)^{-1} = I_p \\ \Rightarrow & \mu(AA^T + \mu I_p)^{-1} = I_p - (AA^T + \mu I_p)^{-1}AA^T. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Αντικαθιστώντας την ταυτότητα

$$(AA^T + \mu I_p)^{-1}A = A(A^T A + \mu I_m)^{-1}$$

στη σχέση (5.2) προκύπτει το ζητούμενο. □

**Λήμμα 5.2.**

Ισχύει ότι  $\|A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}\|^2 = \mu \mathbf{b}^T [\mu(AA^T + \mu I_p)^{-2}] \mathbf{b} = \mu^2 \mathbf{b}^T (AA^T + \mu I_p)^{-2} \mathbf{b}$ .

Απόδειξη.

Έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \|A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}\|^2 &= (A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b})^T (A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}) \\ &= [A(A^T A + \mu I_m)^{-1} A^T \mathbf{b} - \mathbf{b}]^T [A(A^T A + \mu I_m)^{-1} A^T \mathbf{b} - \mathbf{b}]. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Η ταυτότητα του Λήμματος 5.1

$$I_p - A(A^T A + \mu I_m)^{-1} A^T = \mu(AA^T + \mu I_p)^{-1}$$

μπορεί να χρησιμοποιηθεί και το δεξί μέλος της (5.3) απλοποιείται και γράφεται ως εξής

$$\|A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}\|^2 = \mu^2 \mathbf{b}^T (AA^T + \mu I_p)^{-2} \mathbf{b}.$$

□

Έτσι, θέτοντας  $B = AA^T + \mu I_p$ , ο τύπος (5.1) της συνάρτησης GCV μπορεί να γραφεί με τη χρήση διγραμμικών μορφών ως εξής

$$V(\mu) = \frac{\mathbf{b}^T B^{-2} \mathbf{b}}{(\text{Tr}(B^{-1}))^2}. \quad (5.4)$$

## 5.2 Εκτίμηση της συνάρτησης GCV

Έχοντας εκφράσει τη συνάρτηση GCV με τη βοήθεια διγραμμικών μορφών, μπορούμε να προχωρήσουμε στην εκτίμησή της. Συγκεκριμένα,

- ο αριθμητής της συνάρτησης GCV, δηλαδή η τετραγωνική μορφή  $\mathbf{b}^T B^{-2} \mathbf{b}$ , θα εκτιμηθεί με τη χρήση της μεθόδου της παρεκβολής,
- ο παρονομαστής της συνάρτησης GCV που περιέχει το  $\text{Tr}(B^{-1})$  θα εκτιμηθεί με δύο τρόπους. Ο πρώτος βασίζεται στο Θεώρημα του Hutchinson και τη μέθοδο της παρεκβολής και ο δεύτερος στην εφαρμογή του τύπου (3.3).

Ας αρχίσουμε να περιγράψουμε αναλυτικά τον τρόπο εκτίμησης της συνάρτησης GCV.

### 5.2.1 Εκτίμηση των τετραγωνικών μορφών $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ , $q = 1, 2$

Δοθέντος ενός πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{p \times m}$ , θέτουμε τον πίνακα  $B = AA^T + \mu I_p \in \mathbb{R}^{p \times p}$ , ο οποίος είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος.

Για κάθε ακέραιο  $n$  και κάθε διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ , μπορούμε να ορίσουμε τις ροπές του πίνακα  $B \in \mathbb{R}^{p \times p}$  ως

$$c_n = c_n(B, \mathbf{x}) = (\mathbf{x}, B^n \mathbf{x}),$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΔΙΑΣΤΑΤΡΩΜΕΝΗΣ - ΕΠΙΚΥΡΩΣΗΣ (GCV)

---

και τις ροπές του πίνακα  $AA^T$  ως

$$s_n = s_n(AA^T, \mathbf{x}) = (\mathbf{x}, (AA^T)^n \mathbf{x}), \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Οι ροπές  $s_n$  του πίνακα  $AA^T$  και οι ροπές  $c_n$  του πίνακα  $B$  συνδέονται με τη σχέση που παρουσιάζεται στην ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 5.1.**

Οι ροπές  $c_n$  ικανοποιούν τη σχέση

$$c_n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mu^k s_{n-k}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (5.5)$$

Για αρνητικούς ακεραίους, οι ροπές του πίνακα  $B$  ικανοποιούν τη σχέση

$$c_{-n} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{n+k-1}{k} \mu^{-n-k} s_k, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (5.6)$$

όπου  $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$  είναι ο διωνυμικός συντελεστής.

Απόδειξη.

Μπορούμε να αποδείξουμε ότι

$$(AA^T + \mu I_p)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (AA^T)^{n-k} (\mu I_p)^k = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mu^k (AA^T)^{n-k},$$

χρησιμοποιώντας το διωνυμικό θεώρημα για πίνακες που επικοινωνούν (communicated matrices). Έτσι, ισχύει

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^T (AA^T + \mu I_p)^n \mathbf{x} &= \mathbf{x}^T \left( \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mu^k (AA^T)^{n-k} \right) \mathbf{x} = \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mu^k \mathbf{x}^T (AA^T)^{n-k} \mathbf{x} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mu^k s_{n-k}. \end{aligned}$$

Επιπλέον, μπορούμε να αποδείξουμε τη γενίκευση του διωνυμικού θεωρήματος για αρνητικούς ακεραίους σε μορφή πινάκων, δηλαδή

$$(AA^T + \mu I_p)^{-n} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{n+k-1}{k} \mu^{-n-k} (AA^T)^k,$$

που συγκλίνει για  $\|AA^T\| < \mu$ . Έτσι αποδεικνύεται ο τύπος (5.6).  $\square$

**Πρόταση 5.2.**

Οι ροπές  $s_n$  μπορούν να γραφούν στη μορφή

$$s_n = \|\mathbf{y}_n\|^2, \text{ όπου } \mathbf{y}_n = \begin{cases} (AA^T)^{\frac{n}{2}}\mathbf{x}, & \text{αν } n \text{ είναι άρτιος,} \\ A^T(AA^T)^{\frac{n-1}{2}}\mathbf{x}, & \text{αν } n \text{ είναι περιττός,} \end{cases}$$

και κατά συνέπεια  $s_n \geq 0$ .

Απόδειξη.

Ισχύει  $\|\mathbf{y}_n\|^2 = \mathbf{y}_n^T \mathbf{y}_n$ . Αν ο αριθμός  $n$  είναι άρτιος, έχουμε

$$\mathbf{y}_n^T \mathbf{y}_n = \mathbf{x}^T [(AA^T)^{\frac{n}{2}}]^T (AA^T)^{\frac{n}{2}} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T (AA^T)^{\frac{n}{2}} (AA^T)^{\frac{n}{2}} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T (AA^T)^n \mathbf{x} = s_n.$$

Ομοίως, αν ο αριθμός  $n$  είναι περιττός, έχουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_n^T \mathbf{y}_n &= \mathbf{x}^T [(AA^T)^{\frac{n-1}{2}}]^T AA^T (AA^T)^{\frac{n-1}{2}} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T (AA^T)^{\frac{n-1}{2}} (AA^T) (AA^T)^{\frac{n-1}{2}} \mathbf{x} = \\ &= \mathbf{x}^T (AA^T)^n \mathbf{x} = s_n. \end{aligned}$$

□

Θεωρούμε τη φασματική παραγοντοποίηση (1.1) του συμμετρικού πίνακα  $B \in \mathbb{R}^{p \times p}$  και έτσι οι ροπές  $c_n$  μπορούν να εκφραστούν ως αθροίσματα και κρατώντας λίγους όρους προκύπτουν οι ακόλουθες οικογένειες εκτιμήσεων.

**Εκτιμήσεις ενός όρου**
**Πρόταση 5.3.**

Η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-2} \mathbf{x}$  δίνονται από τον τύπο

$$f_\nu = s_0^{3-2\nu} (s_1 + \mu s_0)^{4\nu-2} (s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)^{-2\nu}, \quad \nu \in \mathbb{C} \quad (5.7)$$

και ικανοποιεί τη σχέση

$$f_\nu = \rho^{-2\nu} \frac{s_0^3}{(s_1 + \mu s_0)^2}, \quad \rho = \frac{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)}{(s_1 + \mu s_0)^2}.$$

Επιπλέον, υπάρχει μία τιμή  $\nu_f$  για την παράμετρο  $\nu \in \mathbb{C}$  η οποία δίνεται από τον τύπο

$$\nu_f = \frac{\log\left(\frac{s_0^3}{c_{-2}(s_1 + \mu s_0)^2}\right)}{2 \log \rho}, \quad \rho = \frac{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)}{(s_1 + \mu s_0)^2} \neq 1, \quad (5.8)$$

τέτοια ώστε  $f_{\nu_f} = c_{-2}$ . Αυτή η τιμή  $\nu_f$  θα αναφέρεται ως η βέλτιστη τιμή για την παράμετρο  $\nu$ .

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ  
ΔΙΑΣΤΑΤΡΩΜΕΝΗΣ - ΕΠΙΚΥΡΩΣΗΣ (GCV)

---

Απόδειξη.

Λαμβάνοντας υπόψιν τα αποτελέσματα από την εργασία [32], μία οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-2} \mathbf{x}$  είναι η ακόλουθη

$$f_\nu = c_0^{3-2\nu} c_1^{4\nu-2} c_2^{-2\nu}, \quad \nu \in \mathbb{C}. \quad (5.9)$$

Χρησιμοποιώντας την Πρόταση 5.1 για  $n = 0, 1, 2$ , έχουμε

$$c_0 = s_0, \quad c_1 = s_1 + \mu s_0, \quad c_2 = s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0. \quad (5.10)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (5.9) και (5.10), προκύπτει η οικογένεια εκτιμήσεων που δίνεται από τη σχέση (5.7).

Επιπλέον, έχουμε

$$\begin{aligned} f_\nu &= s_0^{3-2\nu} (s_1 + \mu s_0)^{4\nu-2} (s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)^{-2\nu} \\ &= \frac{s_0^{-2\nu} (s_1 + \mu s_0)^{4\nu}}{(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)^{2\nu}} \cdot \frac{s_0^3}{(s_1 + \mu s_0)^2} \\ &= \left( \frac{(s_1 + \mu s_0)^2}{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)} \right)^{2\nu} \cdot \frac{s_0^3}{(s_1 + \mu s_0)^2} \\ &= \rho^{-2\nu} \frac{s_0^3}{(s_1 + \mu s_0)^2}, \quad \text{όπου } \rho = \frac{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)}{(s_1 + \mu s_0)^2}. \end{aligned}$$

Επίσης, ισχύει  $f_{\nu_f} = c_{-2}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \rho^{-2\nu_f} \frac{s_0^3}{(s_1 + \mu s_0)^2} = c_{-2} &\Rightarrow \rho^{-2\nu_f} = c_{-2} \frac{(s_1 + \mu s_0)^2}{s_0^3} \Rightarrow \\ -2\nu_f \log \rho = \log \left( c_{-2} \frac{(s_1 + \mu s_0)^2}{s_0^3} \right) &\Rightarrow \nu_f = \frac{\log \left( \frac{s_0^3}{c_{-2}(s_1 + \mu s_0)^2} \right)}{2 \log \rho}. \end{aligned}$$

□

Παρόμοια σχέση για την εκτίμηση της τετραγωνικής μορφής  $\mathbf{x}^T B^{-1} \mathbf{x}$  δίνεται στη ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 5.4.**

Μία οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-1} \mathbf{x}$  δίνεται από τον τύπο

$$e_\nu = s_0^{2-\nu} (s_1 + \mu s_0)^{2\nu-1} (s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)^{-\nu}, \quad \nu \in \mathbb{C} \quad (5.11)$$

και ικανοποιεί τη σχέση

$$e_\nu = \rho^{-\nu} \frac{s_0^2}{s_1 + \mu s_0}, \quad \rho = \frac{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)}{(s_1 + \mu s_0)^2}.$$

Η βέλτιστη τιμή για την παράμετρο  $\nu$  είναι

$$\nu_e = \frac{\log\left(\frac{s_0^2}{c_{-1}(s_1 + \mu s_0)}\right)}{\log \rho}, \quad \rho = \frac{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)}{(s_1 + \mu s_0)^2} \neq 1, \quad (5.12)$$

τέτοια ώστε  $e_{\nu_e} = c_{-1}$ .

Απόδειξη.

Αποδεικνύεται όπως η Πρόταση 5.3.  $\square$

**Λήμμα 5.3.**

Έστω  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ ,  $\mathbf{y} = B\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$  και  $L = \sum_{1 \leq i < j \leq n} (x_i y_j - x_j y_i)^2$ . Έστω  $\epsilon_1$  ένας πραγματικός αριθμός τέτοιος ώστε  $0 < \epsilon_1 \ll 1$ . Αν  $L \in [0, \epsilon_1)$ , τότε οι βέλτιστες τιμές για τις παραμέτρους των εκτιμήσεων ενός όρου προσεγγίζονται από  $\nu_e \simeq -1$  και  $\nu_f \simeq -3/2$ .

Απόδειξη.

Η ταυτότητα Lagrange μπορεί να εκφραστεί σε μορφή διανυσμάτων ως εξής

$$\|\mathbf{x}\|^2 \|\mathbf{y}\|^2 - (\mathbf{x}, \mathbf{y})^2 = \sum_{1 \leq i < j \leq n} (x_i y_j - x_j y_i)^2.$$

Για κάθε διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$  και ένα διάνυσμα  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$  της μορφής  $\mathbf{y} = B\mathbf{x}$ , έχουμε

$$\|\mathbf{x}\|^2 \|\mathbf{y}\|^2 - (\mathbf{x}, \mathbf{y})^2 = \|\mathbf{x}\|^2 \|B\mathbf{x}\|^2 - (\mathbf{x}, B\mathbf{x})^2 = \|\mathbf{x}\|^2 (B\mathbf{x}, B\mathbf{x}) - (\mathbf{x}, B\mathbf{x})^2 = c_0 c_2 - c_1^2.$$

Αφού  $L \in [0, \epsilon_1)$ , ισχύει ότι  $c_0 c_2 - c_1^2 \simeq 0 \Rightarrow c_0 c_2 \simeq c_1^2$  και η ανισότητα Cauchy-Schwarz ισχύει σχεδόν σαν ισότητα. Έτσι, το  $\mathbf{x}$  μπορεί να προσεγγίσει ένα ιδιοδιάνυσμα του πίνακα  $B$  και έστω ότι  $\lambda$  είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή. Θεωρώντας ότι το  $\mathbf{x}$  είναι το  $i$ -οστό ιδιοδιάνυσμα του  $B$  και από τη φασματική παραγοντοποίηση του πίνακα  $B$ , δηλαδή  $B = U\Lambda U^T$ , έχουμε

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{\mathbf{x}^T B^{k+1} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T B^k \mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}^T U \Lambda^{k+1} U^T \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T U \Lambda^k U^T \mathbf{x}} = \frac{(U^T \mathbf{x})^T \Lambda^{k+1} (U^T \mathbf{x})}{(U^T \mathbf{x})^T \Lambda^k (U^T \mathbf{x})} \simeq \frac{\mathbf{e}_i^T \Lambda^{k+1} \mathbf{e}_i}{\mathbf{e}_i^T \Lambda^k \mathbf{e}_i} = \frac{\lambda^{k+1}}{\lambda^k} = \lambda.$$

Οπότε, έχουμε  $\frac{c_1 c_{-1}}{c_0^2} \simeq \lambda \frac{1}{\lambda} = 1$  και  $\frac{c_2 c_0}{c_1^2} \simeq \lambda \frac{1}{\lambda} = 1$ . Έτσι,  $\frac{c_1 c_{-1}}{c_0^2} \simeq \frac{c_2 c_0}{c_1^2} = \rho$

$$\text{και } \nu_e = \frac{\log(c_0^2 / c_1 c_{-1})}{\log(c_2 c_0 / c_1^2)} \simeq \frac{\log(1/\rho)}{\log(\rho)} = \frac{-\log(\rho)}{\log(\rho)} = -1.$$

Επίσης, ισχύει

$$\frac{c_0^3}{c_{-2} c_1^2} = \frac{c_{-1} c_0 c_0 c_0}{c_{-2} c_{-1} c_1 c_1} \simeq \frac{c_0 c_1 c_1 c_1}{c_{-1} c_0 c_2 c_2} = \frac{c_0^2 c_1 c_1 c_1 c_1}{c_1 c_{-1} c_0 c_0 c_2 c_2} \simeq \frac{c_1^2 c_1^2 c_1^2}{c_0 c_2 c_0 c_2 c_0 c_2} = \left(\frac{1}{\rho}\right)^3.$$

$$\text{Οπότε, έχουμε } \nu_f = \frac{\log(c_0^3 / c_{-2} c_1^2)}{2 \log(\rho)} \simeq \frac{\log(1/\rho)^3}{2 \log(\rho)} = -\frac{3}{2}. \quad \square$$

**Πόρισμα 5.1.**

Αν  $\rho \simeq 1$  τότε  $\nu_e \simeq -1$  και  $\nu_f \simeq -3/2$ .

Απόδειξη.

Αφού ισχύει  $\rho \simeq 1 \Rightarrow c_0 c_2 \simeq c_1^2 \Rightarrow c_0 c_2 - c_1^2 \Rightarrow L \in [0, \epsilon_1)$ .

Έτσι, ικανοποιείται η υπόθεση του Λήμματος 5.3 και  $\nu_e \simeq -1$ ,  $\nu_f \simeq -3/2$ .  $\square$

**Εκτιμήσεις δύο και τριών όρων**

Η τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ , μπορεί να εκτιμηθεί χρησιμοποιώντας μία οικογένεια εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{e}_{n,k}$  που δίνεται από τον παρακάτω τύπο, [32]

$$\hat{e}_{n,k} = l_1^{-q} |\alpha_1|^2 + l_2^{-q} |\alpha_2|^2, \quad n, k \in \mathbb{Z}, \quad (5.13)$$

όπου

$$|\alpha_1|^2 = \frac{c_0 l_2 - c_1}{l_2 - l_1}, \quad |\alpha_2|^2 = \frac{c_1 - c_0 l_1}{l_2 - l_1}, \quad l_{1,2} = \frac{r \pm \sqrt{r^2 - 4t}}{2}, \quad l_1 \neq l_2,$$

$$r = \frac{c_{n-1} c_{n+2+k} - c_{n+1} c_{n+k}}{c_{n-1} c_{n+1+k} - c_n c_{n+k}}, \quad t = \frac{c_n c_{n+2+k} - c_{n+1} c_{n+1+k}}{c_{n-1} c_{n+1+k} - c_n c_{n+k}}.$$

Οι ροπές  $c_n$  δίνονται από

$$c_n = \begin{cases} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mu^k s_{n-k}, & n = 0, 1, 2, \dots \\ \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{-n+k-1}{k} \mu^{n-k} s_k, & n = \dots, -2, -1. \end{cases}$$

Μία καλή επιλογή για το ζεύγος των παραμέτρων  $n, k \in \mathbb{Z}$  θα μπορούσε να είναι μικροί ακέραιοι αριθμοί ώστε ο υπολογισμός των ροπών να μην απαιτεί πολλές αριθμητικές πράξεις και το υπολογιστικό κόστος να είναι χαμηλό. Για το λόγο αυτό, θέτουμε  $n = 1$ ,  $k = 0$  και προσαρμόζουμε τον τύπο για την εκτίμηση  $\hat{e}_{1,0}$  στην ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 5.5.**

Μία εκτίμηση δύο όρων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ , είναι

$$\hat{e}_{1,0} = l_1^{-q} |\alpha_1|^2 + l_2^{-q} |\alpha_2|^2, \quad (5.14)$$

όπου

$$|\alpha_1|^2 = \frac{s_0 l_2 - (s_1 + \mu s_0)}{l_2 - l_1}, \quad |\alpha_2|^2 = \frac{s_1 + \mu s_0 - s_0 l_1}{l_2 - l_1}, \quad l_{1,2} = \frac{r \pm \sqrt{r^2 - 4t}}{2}, \quad l_1 \neq l_2,$$

$$r = \frac{s_0 s_3 - s_1 s_2}{s_0 s_2 - s_1^2} + 2\mu, \quad t = \frac{s_1 s_3 - s_2^2}{s_0 s_2 - s_1^2} + \mu r - \mu^2.$$



## 5.2. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ GCV

Απόδειξη.

Από την Πρόταση 5.1 για  $n = 0, 1, 2, 3$ , έχουμε

$$c_0 = s_0, \quad c_1 = s_1 + \mu s_0, \quad c_2 = s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0, \quad c_3 = s_3 + 3\mu s_2 + 3\mu^2 s_1 + \mu^3 s_0.$$

Οπότε,

$$\begin{aligned} r &= \frac{c_0 c_3 - c_2 c_1}{c_0 c_2 - c_1^2} = \frac{s_0(s_3 + 3\mu s_2 + 3\mu^2 s_1 + \mu^3 s_0) - (s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)(s_1 + \mu s_0)}{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0) - (s_1 + \mu s_0)^2} \\ &= \frac{s_0 s_3 - s_1 s_2 + 2\mu s_0 s_2 - 2\mu s_1^2}{s_0 s_2 - s_1^2} = \frac{s_0 s_3 - s_1 s_2}{s_0 s_2 - s_1^2} + 2\mu, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} t &= \frac{c_1 c_3 - c_2^2}{c_0 c_2 - c_1^2} = \frac{(s_1 + \mu s_0)(s_3 + 3\mu s_2 + 3\mu^2 s_1 + \mu^3 s_0) - (s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)^2}{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0) - (s_1 + \mu s_0)^2} \\ &= \frac{s_1 s_3 - s_2^2 - \mu s_1 s_2 - \mu^2 s_1^2 + \mu^2 s_0 s_2 + \mu s_0 s_3}{s_0 s_2 - s_1^2} = \frac{s_1 s_3 - s_2^2}{s_0 s_2 - s_1^2} + \mu^2 + \mu \frac{s_0 s_3 - s_1 s_2}{s_0 s_2 - s_1^2} \\ &= \frac{s_1 s_3 - s_2^2}{s_0 s_2 - s_1^2} + \mu^2 + \mu(r - 2\mu) = \frac{s_1 s_3 - s_2^2}{s_0 s_2 - s_1^2} + \mu r - \mu^2. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τις ροπές  $c_0$  και  $c_1$  από τη σχέση (5.5), προκύπτει ο τύπος για τα  $|\alpha_i|^2$ ,  $i = 1, 2$ . □

Ακολουθώντας τη διαδικασία που περιγράψαμε στην Υποενότητα 4.1.3 για την παραγωγή διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων για το γινόμενο  $f(A)\mathbf{b}$ , προκύπτει η ακόλουθη οικογένεια εκτιμήσεων τριών όρων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ ,

$$\tilde{\epsilon}_{n,k,\ell} = l_1^{-q} |\alpha_1|^2 + l_2^{-q} |\alpha_2|^2 + l_3^{-q} |\alpha_3|^2, \quad n, k, \ell \in \mathbb{Z}, \quad (5.15)$$

όπου

$$|\alpha_1|^2 = \frac{c_2 - l_2 c_1 - l_3 c_1 + l_2 l_3 c_0}{(l_1 - l_2)(l_1 - l_3)},$$

$$|\alpha_2|^2 = -\frac{c_2 - l_1 c_1 - l_3 c_1 + l_1 l_3 c_0}{(l_1 - l_2)(l_2 - l_3)},$$

$$|\alpha_3|^2 = \frac{c_2 - l_1 c_1 - l_2 c_1 + l_1 l_2 c_0}{(l_1 - l_3)(l_2 - l_3)},$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ  
ΔΙΑΣΤΑΥΡΩΜΕΝΗΣ - ΕΠΙΚΥΡΩΣΗΣ (GCV)

---

$$\begin{aligned}
 l_1 &= \frac{s}{3} - \frac{A_p}{3 \cdot 2^{4/3}} + \frac{3t - s^2}{3 \cdot 2^{2/3} A_p} - 2^{-2/3} 3^{-1/2} \sqrt{-\left(\frac{3t - s^2 + 2^{-2/3} A_p^2}{A_p}\right)^2}, \\
 l_2 &= \frac{s}{3} - \frac{A_p}{3 \cdot 2^{4/3}} + \frac{3t - s^2}{3 \cdot 2^{2/3} A_p} + 2^{-2/3} 3^{-1/2} \sqrt{-\left(\frac{3t - s^2 + 2^{-2/3} A_p^2}{A_p}\right)^2}, \\
 l_3 &= B_p + \frac{s}{3} + \frac{s^2 - 3t}{9B_p},
 \end{aligned}$$

$$A_p = \left(27g + 3\sqrt{3}\sqrt{4t^3 - t^2s^2 - 18tgs + 27g^2 + 4gs^3 - 9ts + 2s^3}\right)^{1/3},$$

$$B_p = \left(\frac{g}{2} - \frac{ts}{6} + \sqrt{\left(\frac{s^3}{27} - \frac{ts}{6} + \frac{g}{2}\right)^2 + \left(\frac{t}{3} - \frac{s^2}{9}\right)^3 + \frac{s^3}{27}}\right)^{1/3},$$

$$\begin{aligned}
 s &= \frac{c_n c_{n+k} c_{n+l+4} - c_n c_{n+l+1} c_{n+k+3} - c_{n+k} c_{n+l+2} c_{n+2}}{w} + \\
 &+ \frac{c_{n+k+1} c_{n+l+1} c_{n+2} - c_{n+k+1} c_{n-1} c_{n+l+4} + c_{n+l+2} c_{n-1} c_{n+k+3}}{w},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 t &= \frac{c_{n+1} c_{n+k} c_{n+l+4} - c_{n+1} c_{n+l+1} c_{n+k+3} - c_{n+k} c_{n+l+3} c_{n+2}}{w} + \\
 &+ \frac{c_{n+k+2} c_{n+l+1} c_{n+2} - c_{n+k+2} c_{n-1} c_{n+l+4} + c_{n+l+3} c_{n-1} c_{n+k+3}}{w},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 g &= \frac{c_n c_{n+k+2} c_{n+l+4} - c_n c_{n+l+3} c_{n+k+3} - c_{n+1} c_{n+k+1} c_{n+l+4}}{w} + \\
 &+ \frac{c_{n+1} c_{n+l+2} c_{n+k+3} + c_{n+k+1} c_{n+l+3} c_{n+2} - c_{n+k+2} c_{n+l+2} c_{n+2}}{w},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 w &= c_n c_{n+k} c_{n+l+3} - c_n c_{n+k+2} c_{n+l+1} - c_{n+1} c_{n+k} c_{n+l+2} + c_{n+1} c_{n+k+1} c_{n+l+1} - \\
 &- c_{n+k+1} c_{n+l+3} c_{n-1} + c_{n+k+2} c_{n+l+2} c_{n-1}.
 \end{aligned}$$

Οι ροπές  $c_n$  δίνονται από

$$c_n = \begin{cases} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mu^k s_{n-k}, & n = 0, 1, 2, \dots \\ \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{-n+k-1}{k} \mu^{n-k} s_k, & n = \dots, -2, -1. \end{cases}$$

### 5.2.2 Εκτίμηση του ίχνους του αντιστρόφου

Σε αυτή την υποενότητα, θα εκτιμήσουμε το ίχνος του αντιστρόφου του πίνακα  $B^{-1}$ , το οποίο εμφανίζεται στον παρονομαστή της συνάρτησης GCV. Η εκτίμηση αυτή μπορεί να γίνει με δύο τρόπους. Ο πρώτος τρόπος βασίζεται σε έναν στοχαστικό εκτιμητή ο οποίος αναπτύχθηκε από τον Hutchinson, [51]. Στο Λήμμα 5.4 αναφέρουμε αυτό το αποτέλεσμα. Ο δεύτερος τρόπος εκτίμησης του ίχνους γίνεται μέσω της εφαρμογής του τύπου (3.3) για την εκτίμηση της διαγωνίου του  $B^{-1}$  και κατά συνέπεια του επιθυμητού ίχνους.

**Λήμμα 5.4.** [Hutchinson 1990, [51]]

Έστω  $A$  ένας  $p \times p$  συμμετρικός πίνακας με μη-μηδενικό ίχνος. Έστω  $U$  μία διακριτή τυχαία μεταβλητή η οποία παίρνει τιμές  $\pm 1$  με πιθανότητα εμφάνισης  $1/2$  και έστω  $\mathbf{u} = [u_1 \ \dots \ u_p]^T$  ένα διάνυσμα με  $p$  ανεξάρτητα δείγματα από την  $U$ . Τότε η τετραγωνική μορφή  $\mathbf{u}^T A \mathbf{u}$  είναι ένας αμερόληπτος εκτιμητής του ίχνους του  $A$  και  $\text{var}(\mathbf{u}^T A \mathbf{u}) = 2 \sum_{i \neq j} a_{ij}^2$ .

Η υλοποίηση του Λήμματος 5.4 απαιτεί ένα δείγμα τυχαίων διανυσμάτων με στοιχεία  $\pm 1$  με πιθανότητα εμφάνισης  $1/2$ . Έστω  $N$  το μέγεθος αυτού του δείγματος. Ένας εναλλακτικός τρόπος επιλογής των διανυσμάτων  $\mathbf{x}_i$  περιγράφεται στην εργασία [31]. Συγκεκριμένα, τα διανύσματα  $\mathbf{x}_i$  επιλέγονται να είναι οι στήλες πινάκων Hadamard.

Η μέση τιμή των τετραγωνικών μορφών  $\mathcal{F}(\mathbf{x}_i) = (\mathbf{x}_i, B^{-1} \mathbf{x}_i) = \mathbf{x}_i^T B^{-1} \mathbf{x}_i$ , είναι ένας εκτιμητής για το ίχνος του αντιστρόφου του πίνακα  $B$  και δίνεται από

$$\mathcal{T} = \frac{\sum_{i=1}^N \mathcal{F}(\mathbf{x}_i)}{N}. \quad (5.16)$$

Προκειμένου να υπολογίσουμε τον εκτιμητή  $\mathcal{T}$  για το ίχνος  $\text{Tr}(B^{-1})$ , είναι απαραίτητο να εκτιμήσουμε τις τετραγωνικές μορφές  $\mathcal{F}(\mathbf{x}_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ . Η εκτίμηση αυτή θα γίνει με χρήση των οικογενειών εκτιμήσεων ενός, δύο και τριών όρων, όπως αυτές έχουν περιγραφεί στην Υποενότητα 5.2.1. Αξίζει να σημειωθεί ότι στην εργασία [42] χρησιμοποιείται αυτός ο εκτιμητής προσεγγίζοντας κάθε τετραγωνική μορφή με χρήση των κανόνων αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss.

#### Συμβολισμός 5.2.

Οι εκτιμητές που προκύπτουν για το ίχνος  $\text{Tr}(B^{-1})$  χρησιμοποιώντας τις εκτιμήσεις ενός, δύο και τριών όρων θα συμβολίζονται με  $\mathcal{T}_1$ ,  $\mathcal{T}_2$ ,  $\mathcal{T}_3$ , αντίστοιχα.

Λαμβάνοντας τώρα υπόψιν την ειδική μορφή του πίνακα  $B$  μπορούμε να προσαρμόσουμε τη σχέση (3.3) και να εκτιμήσουμε κάθε διαγώνιο στοιχείο

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΔΙΑΣΤΑΥΡΩΜΕΝΗΣ - ΕΠΙΚΥΡΩΣΗΣ (GCV)

---

του  $B^{-1}$ . Συγκεκριμένα, θέτοντας  $\hat{A} = AA^T$  ο πίνακας  $B$  εκφράζεται ως  $B = \hat{A} + \mu I_p$ . Στην πρόταση που ακολουθεί καταγράφουμε το αποτέλεσμα.

**Πρόταση 5.6.**

Το ίχνος του πίνακα  $B^{-1}$  μπορεί να εκτιμηθεί από

$$Tr(B^{-1}) \simeq \sum_{i=1}^p d_i, \quad (5.17)$$

όπου  $d_i = \rho_i^{-\nu} \frac{1}{\hat{A}_{ii} + \mu}$ ,  $\rho_i = \frac{s_i}{(\hat{A}_{ii} + \mu)^2}$ ,  $s_i = \sum_{k=1}^p \hat{A}_{ki}^2 + 2\mu\hat{A}_{ii} + \mu^2$  και  $\nu \in \mathbb{R}$ .

Απόδειξη.

$$\text{Έστω } B = [B_{ij}] = \hat{A} + \mu I_p = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} + \mu & \hat{A}_{12} & \cdots & \hat{A}_{1p} \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} + \mu & \cdots & \hat{A}_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{A}_{p1} & \hat{A}_{p2} & \cdots & \hat{A}_{pp} + \mu \end{bmatrix}.$$

Κάθε διαγώνιο στοιχείο  $(B^{-1})_{ii}$  μπορεί να εκτιμηθεί από τη σχέση (3.3) με  $f(t) = t^{-1}$ , η οποία γίνεται

$$d_i = \rho_i^{-\nu} \frac{1}{B_{ii}} = \rho_i^{-\nu} \frac{1}{\hat{A}_{ii} + \mu}, \quad \nu \in \mathbb{R},$$

όπου

$$\begin{aligned} \rho_i &= \frac{s_i}{B_{ii}^2} = \frac{s_i}{(\hat{A}_{ii} + \mu)^2}, \\ s_i &= \sum_{k=1}^p B_{ki}^2 = \hat{A}_{1i}^2 + \hat{A}_{2i}^2 + \cdots + (\hat{A}_{ii} + \mu)^2 + \cdots + \hat{A}_{pi}^2 \\ &= \sum_{k=1}^p \hat{A}_{ki}^2 + 2\mu\hat{A}_{ii} + \mu^2, \quad i = 1, 2, \dots, p. \end{aligned}$$

Επομένως, το ίχνος του πίνακα  $B^{-1}$  μπορεί να εκτιμηθεί από  $\sum_{i=1}^p d_i$ . □

### 5.2.3 Εκτίμηση της παραμέτρου κανονικοποίησης

Έχοντας εκτιμήσει τις ποσότητες που εμφανίζονται στον αριθμητή και στον παρονομαστή της συνάρτησης GCV μπορούμε να δημιουργήσουμε προσεγγίσεις

για την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$  ελαχιστοποιώντας τις παραχθείσες εκτιμήσεις. Στις παρακάτω προτάσεις και στα αντίστοιχα πορίσματα δίνονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν.

**Πρόταση 5.7.**

Μία εκτίμηση ενός όρου για τη συνάρτηση GCV είναι

$$\tilde{V}_1(\mu) = \frac{f_\nu}{\mathcal{J}_1^2}, \quad (5.18)$$

όπου η  $f_\nu$  δίνεται από τη σχέση (5.7).

**Πόρισμα 5.2.**

Η ενός όρου GCV εκτίμηση  $\tilde{\mu}_1$  για την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$  δίνεται από

$$\tilde{\mu}_1 = \underset{\mu}{\operatorname{argmin}} \left( \tilde{V}_1(\mu) \right),$$

όπου η  $\tilde{V}_1(\mu)$  δίνεται από τον τύπο (5.18).

**Πρόταση 5.8.**

Μία εκτίμηση δύο όρων για τη συνάρτηση GCV είναι

$$\tilde{V}_2(\mu) = \frac{\hat{e}_{n,k}}{\mathcal{J}_2^2}, \quad (5.19)$$

όπου η  $\hat{e}_{n,k}$  δίνεται από τη σχέση (5.13) με  $q = 2$ .

**Πόρισμα 5.3.**

Η δύο όρων GCV εκτίμηση  $\tilde{\mu}_2$  για την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$  δίνεται από

$$\tilde{\mu}_2 = \underset{\mu}{\operatorname{argmin}} \left( \tilde{V}_2(\mu) \right),$$

όπου η  $\tilde{V}_2(\mu)$  δίνεται από τον τύπο (5.19).

**Πρόταση 5.9.**

Μία εκτίμηση τριών όρων για τη συνάρτηση GCV είναι

$$\tilde{V}_3(\mu) = \frac{\tilde{e}_{n,k,\ell}}{\mathcal{J}_3^2}, \quad (5.20)$$

όπου η  $\tilde{e}_{n,k,\ell}$  δίνεται από τη σχέση (5.15) με  $q = 2$ .

**Πόρισμα 5.4.**

Η τριών όρων GCV εκτίμηση  $\tilde{\mu}_3$  για την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$  δίνεται από

$$\tilde{\mu}_3 = \underset{\mu}{\operatorname{argmin}} \left( \tilde{V}_3(\mu) \right),$$

όπου η  $\tilde{V}_3(\mu)$  δίνεται από τον τύπο (5.20).

### 5.3 Διάστημα εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV

Σε αυτή την ενότητα θα κατασκευάσουμε ένα διάστημα εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV. Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τον τρόπο κατασκευής διαστημάτων εμπιστοσύνης μπορούν να βρεθούν στο βιβλίο [70]. Αρχικά, θα παράγουμε φράγματα για τον αριθμητή της συνάρτησης GCV, δηλαδή για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{b}^T B^{-2} \mathbf{b}$ . Έπειτα, λαμβάνοντας υπόψιν ότι το ίχνος του πίνακα  $B^{-1}$  εκτιμάται από μία μέση τιμή, υιοθετώντας τον στοχαστικό εκτιμητή του Hutchinson, μπορούμε να κατασκευάσουμε ένα διάστημα εμπιστοσύνης για το  $Tr(B^{-1})$ . Συνδυάζοντας αυτά τα αποτελέσματα προκύπτει ένα διάστημα εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV.

#### 5.3.1 Φράγματα για την τετραγωνική μορφή $\mathbf{b}^T B^{-2} \mathbf{b}$

**Πρόταση 5.10.**

Η τετραγωνική μορφή  $\mathbf{b}^T B^{-2} \mathbf{b}$  φράσσεται ως εξής

$$\frac{\|\mathbf{b}\|^2}{\lambda_{max}^2} \leq (\mathbf{b}, B^{-2} \mathbf{b}) \leq \frac{\|\mathbf{b}\|^2}{\lambda_{min}^2}, \quad (5.21)$$

όπου  $\lambda_{min}$ ,  $\lambda_{max}$  είναι η ελάχιστη και η μέγιστη ιδιοτιμή του πίνακα  $B$  αντίστοιχα.

Απόδειξη.

Για μία φθίνουσα συνάρτηση  $f$ , ισχύει [32]

$$f(\lambda_{max}) \leq \frac{\mathbf{b}^T f(B) \mathbf{b}}{\mathbf{b}^T \mathbf{b}} \leq f(\lambda_{min}) \Rightarrow \|\mathbf{b}\|^2 f(\lambda_{max}) \leq \mathbf{b}^T f(B) \mathbf{b} \leq \|\mathbf{b}\|^2 f(\lambda_{min}).$$

Για  $f(x) = x^{-2}$ , έχουμε

$$\frac{\|\mathbf{b}\|^2}{\lambda_{max}^2} \leq (\mathbf{b}, B^{-2} \mathbf{b}) \leq \frac{\|\mathbf{b}\|^2}{\lambda_{min}^2}.$$

□

Λαμβάνοντας υπόψιν τη σχέση ανάμεσα στη μέθοδο της παρεμβολής και στη διαδικασία που βασίζεται στην αριθμητική ολοκλήρωση του Gauss για εκτίμηση διγραμμικών μορφών [32, 34], προκύπτει το ακόλουθο κάτω φράγμα.

**Πρόταση 5.11.**

Η τετραγωνική μορφή  $(\mathbf{b}, B^{-2} \mathbf{b})$  φράσσεται ως εξής

$$\hat{e}_{1,0} \leq (\mathbf{b}, B^{-2} \mathbf{b}), \quad (5.22)$$

όπου  $\hat{e}_{1,0}$  είναι η εκτίμηση δύο όρων για την τετραγωνική μορφή  $(\mathbf{b}, B^{-2}\mathbf{b})$  που δίνεται από τη σχέση (5.14).

Απόδειξη.

Η παράγωγος τέταρτης τάξης της συνάρτησης  $f(x) = x^{-2}$  είναι  $f^{(4)} = 120x^{-6}$  η οποία είναι θετική. Κατά συνέπεια, η εκτίμηση δύο όρων  $\hat{e}_{1,0}$  είναι κάτω φράγμα για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{b}^T B^{-2}\mathbf{b}$ , [32].  $\square$

Ένα άνω φράγμα για την τετραγωνική μορφή δίνεται στην ακόλουθη πρόταση.

**Πρόταση 5.12.**

Ένα φράγμα για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{b}^T B^{-2}\mathbf{b}$  είναι

$$(\mathbf{b}, B^{-2}\mathbf{b}) \leq \kappa_2(Q) \frac{\|\mathbf{b}\|^2}{\rho^2(B)}, \quad (5.23)$$

όπου  $\kappa_2(Q)$  είναι ο δείκτης κατάστασης του πίνακα των ιδιοδιανυσμάτων,  $Q$ , και  $\rho(B)$  είναι η φασματική ακτίνα του  $B$ .

Απόδειξη.

Ισχύει ότι  $\|f(B)\|_2 \leq \kappa_2(Q) \cdot f(\rho(B))$  [48, σελ. 102]. Για  $f(x) = x^{-2}$ , έχουμε ότι  $\|B^{-2}\|_2 \leq \kappa_2(Q) \frac{1}{\rho^2(B)}$ . Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz, έχουμε

$$(\mathbf{b}, B^{-2}\mathbf{b}) \leq |(\mathbf{b}, B^{-2}\mathbf{b})| \leq \|\mathbf{b}\| \cdot \|B^{-2}\mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{b}\|^2 \cdot \|B^{-2}\| \leq \|\mathbf{b}\|^2 \kappa_2(Q) \frac{1}{\rho^2(B)}. \quad \square$$

**5.3.2 Διάστημα εμπιστοσύνης για το  $Tr(B^{-1})$**

Σύμφωνα με το Θεώρημα του Hutchinson το ίχνος ενός πίνακα, και στην περίπτωση που μας ενδιαφέρει το ίχνος του αντιστρόφου του πίνακα  $B$ , μπορεί να εκτιμηθεί με τη μέση τιμή τετραγωνικών μορφών. Οπότε, μπορούμε να κατασκευάσουμε ένα διάστημα εμπιστοσύνης για τη θεωρητική τιμή του  $Tr(B^{-1})$ . Έτσι, ένα  $100(1 - \alpha)\%$  διάστημα εμπιστοσύνης για το  $Tr(B^{-1})$  είναι

$$Pr \left( Tr(B^{-1}) \in \left( \mathcal{T} - \frac{s}{\sqrt{N}} z_{\alpha/2}, \mathcal{T} + \frac{s}{\sqrt{N}} z_{\alpha/2} \right) \right) = 1 - \alpha, \quad (5.24)$$

όπου  $N$  είναι το μέγεθος του δείγματος των τυχαίων διανυσμάτων  $\mathbf{x}_i$ ,  $\mathcal{T}$  είναι η μέση τιμή των τετραγωνικών μορφών που είναι η εκτίμηση που έχουμε βρει για το ίχνος  $Tr(B^{-1})$ ,  $s$  είναι η τυπική απόκλιση των τετραγωνικών μορφών,  $\alpha$  είναι το επίπεδο σημαντικότητας και  $z_{\alpha/2}$  είναι η κρίσιμη τιμή της τυπικής κανονικής κατανομής, δηλαδή το άνω  $\alpha/2$  ποσοστιαίο σημείο της τυπικής κανονικής κατανομής  $N(0, 1)$ .

### Κατασκευή διαστήματος εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV

Από τη σχέση (5.24) ισχύει η ακόλουθη ανισότητα με πιθανότητα  $1 - \alpha$

$$\frac{1}{\mathcal{T} + \frac{s}{\sqrt{N}}z_{\alpha/2}} < \frac{1}{Tr(B^{-1})} < \frac{1}{\mathcal{T} - \frac{s}{\sqrt{N}}z_{\alpha/2}}. \quad (5.25)$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι  $\tilde{V}(\mu) = \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{T}^2}$ , όπου  $\mathcal{F} = f_\nu$  ή  $\hat{e}_{n,k}$  ή  $\tilde{e}_{n,k,\ell}$  σύμφωνα με τις σχέσεις (5.18), (5.19), (5.20) και χρησιμοποιώντας το διάστημα εμπιστοσύνης για το  $\frac{1}{Tr(B^{-1})}$ , μπορούμε να παράγουμε το ακόλουθο διάστημα εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV  $V(\mu)$

$$Pr \left( V(\mu) \in \left( \frac{\mathcal{F}}{\left( \mathcal{T} + \frac{s}{\sqrt{N}}z_{\alpha/2} \right)^2}, \frac{\mathcal{F}}{\left( \mathcal{T} - \frac{s}{\sqrt{N}}z_{\alpha/2} \right)^2} \right) \right) = 1 - \alpha. \quad (5.26)$$

## 5.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

### 5.4.1 Προσδιορισμός της παραμέτρου κανονικοποίησης

Η GCV εκτίμηση  $\tilde{\mu}$  της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  είναι η θέση ελαχίστου της εκτιμώμενης συνάρτησης  $\tilde{V}(\mu)$  που δίνεται από (5.18), (5.19) ή (5.20). Η προτεινόμενη μέθοδος υπολογίζει τις ροπές  $s_n$  και μετά για κάθε τιμή της παραμέτρου κανονικοποίησης που ανήκει στο πλέγμα που έχουμε επιλέξει χρειάζεται μόνο μία απλή αντικατάσταση αυτής της τιμής στους τύπους (5.7), (5.11) ή (5.14). Έτσι, η πολυπλοκότητα δεν επηρεάζεται από τον αριθμό των σημείων του πλέγματος του  $\mu$  και αυτό οδηγεί σε γρήγορη υλοποίηση της μεθόδου.

Σχετικά με το πλέγμα των τιμών της παραμέτρου  $\mu$ , στην προσέγγισή μας υιοθετούμε το πλέγμα που περιγράφεται στο λογισμικό του P.C. Hansen, [45]. Η κατασκευή αυτού του πλέγματος βασίζεται στη συμπαγή μορφή της παραγοντοποίησης ιδιάζουσών τιμών (compact singular value decomposition). Ειδικότερα, το πλέγμα για το  $\mu$  μπορεί να προσδιοριστεί ως  $[max(\sigma_{min}, 16\epsilon\sigma_{max}), \sigma_{max}]$ , όπου  $\epsilon$  είναι το “έψιλον” της μηχανής,  $\sigma_{min}$ ,  $\sigma_{max}$  είναι η ελάχιστη και η μέγιστη ιδιάζουσα τιμή του πίνακα  $A$  αντίστοιχα.



### 5.4.2 Υπολογιστική πολυπλοκότητα

Η εκτίμηση της συνάρτησης GCV απαιτεί την προσέγγιση  $N + 1$  τετραγωνικών μορφών, συγκεκριμένα του αριθμητή της συνάρτησης GCV και των  $N$  τετραγωνικών μορφών στον παρονομαστή της. Η υπολογιστική πολυπλοκότητα για τις παραχθείσες οικογένειες εκτιμήσεων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ , εξαρτάται από τον υπολογισμό των ροπών  $s_n$  του πίνακα  $AA^T$ . Ο υπολογισμός του πίνακα  $AA^T$  έχει πολυπλοκότητα κυβικής τάξης, για αυτό δεν συνιστάται. Στην προσέγγισή μας, αυτές οι ροπές υπολογίζονται χρησιμοποιώντας την Πρόταση 5.2. Συγκεκριμένα, για κάθε ροπή  $s_n$  πρέπει να υπολογίσουμε  $n$  mvp's και μία νόρμα, επομένως η πολυπλοκότητα είναι τετραγωνική. Η υπολογιστική πολυπλοκότητα των παραγόμενων εκτιμήσεων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ , παρουσιάζεται στον Πίνακα 5.1.

Ειδικότερα, η οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ , απαιτεί τον υπολογισμό μόνο δύο mvp's. Επιπλέον, η πολυπλοκότητα της οικογένειας εκτιμήσεων δύο όρων  $\hat{e}_{n,k}$  και τριών όρων  $\tilde{e}_{n,k,\ell}$  εξαρτάται από την τιμή των παραμέτρων που απαιτούνται για την εφαρμογή τους.

Η υπολογιστική πολυπλοκότητα για την οικογένεια εκτιμήσεων τριών όρων  $\tilde{e}_{n,k,\ell}$  είναι της τάξης  $\mathcal{O}(cp^2)$ , όπου  $c = \max\{n + k + 3, n + \ell + 4\}$ , για κάθε πυκνό (dense) πίνακα  $A$  διάστασης  $p$ . Σε περίπτωση που ο δεδομένος πίνακας είναι banded με bandwidth  $s$ , η πολυπλοκότητα αυτών των εκτιμήσεων είναι της τάξης  $\mathcal{O}(sp)$ . Παρατηρούμε ότι ο συνολικός αριθμός των απαιτούμενων mvp's είναι ανεξάρτητος από τη διάσταση του προβλήματος δοκιμής.

Πίνακας $A$	$\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ , $q = 1, 2$		
	one-term	two-term	three-term
dense	$\mathcal{O}(2p^2)$	$\mathcal{O}((n + k + 2)p^2)$	$\mathcal{O}(cp^2)$
banded	$\mathcal{O}(2sp)$	$\mathcal{O}((n + k + 2)sp)$	$\mathcal{O}(csp)$

Πίνακας 5.1: Υπολογιστική πολυπλοκότητα των εκτιμήσεων για την τετραγωνική μορφή  $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ ,  $q = 1, 2$ .

### 5.4.3 Αριθμητικά παραδείγματα

Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε αριθμητικά παραδείγματα στα οποία χρησιμοποιούμε τις GCV εκτιμήσεις ενός όρου  $\tilde{\mu}_1$  και δύο όρων  $\tilde{\mu}_2$  για την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$ . Δοκιμάζουμε κάποια προβλήματα που έχουν επιλεγθεί από το πακέτο “Regularization Tools” του Hansen, [45]. Καθένα από αυτά τα προβλήματα παράγει έναν πίνακα  $A$  και μία λύση  $\mathbf{x}$ . Σε κάθε περίπτωση, υπολογίζουμε το διάνυσμα  $\mathbf{b}$  ώστε  $\mathbf{b} = A\mathbf{x}$ . Το διαταραγμένο διάνυσμα  $\mathbf{b}_{per} \in \mathbb{R}^p$

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΔΙΑΣΤΑΤΡΩΜΕΝΗΣ - ΕΠΙΚΥΡΩΣΗΣ (GCV)

---

υπολογίζεται από τη σχέση

$$\mathbf{b}_{per} = \mathbf{b} + \mathbf{e} \|\mathbf{b}\| \frac{\sigma}{\sqrt{p}}, \quad (5.27)$$

όπου  $\sigma$  είναι το δοσμένο επίπεδο θορύβου και  $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^p$  είναι ο Gaussian θόρυβος με μέση τιμή μηδέν και διασπορά ένα, [28]. Το διάνυσμα  $\mathbf{e}$  παράγεται με την εντολή του Matlab  $\mathbf{e} = \text{randn}(p, 1)$ .

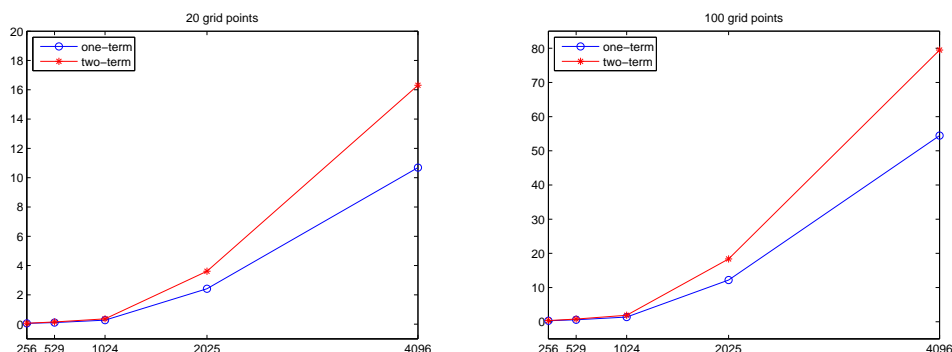
Στα ακόλουθα παραδείγματα, η εκτίμηση της συνάρτησης GCV  $\tilde{V}(\mu)$  υλοποιήθηκε χρησιμοποιώντας είτε τις εκτιμήσεις ενός όρου  $f_\nu$  και  $e_\nu$  ή τις εκτιμήσεις δύο όρων  $\hat{e}_{1,0}$ . Οι πίνακες που εμφανίζονται σε αυτά τα προβλήματα ικανοποιούν την υπόθεση του Πορίσματος 5.1, δηλαδή  $\rho = \frac{s_0(s_2 + 2\mu s_1 + \mu^2 s_0)}{(s_1 + \mu s_0)^2} \simeq 1$ ,  $s_n = (\mathbf{b}, (A A^T)^n \mathbf{b})$ , οι παράμετροι για τις εκτιμήσεις ενός όρου είναι  $\nu_f = -3/2$  για τον αριθμητή και  $\nu_e = -1$  για τον παρονομαστή της συνάρτησης GCV. Σε όλα τα παραδείγματα θεωρούμε το μέγεθος δείγματος  $N = 50$  για το Θεώρημα του Hutchinson. Επίσης, η ακριβής τιμή της συνάρτησης GCV υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας το πακέτο του Hansen, [45]. Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν χρησιμοποιώντας MATLAB (R2015a), 64-bit, σε υπολογιστή Intel Core i7, με 16 Gb DDR4 RAM.

### Παράδειγμα 5.1. Χρόνος εκτέλεσης.

Θεωρούμε τον Tomo, ένα πρόβλημα δοκιμής δισδιάστατης τομογραφίας, το οποίο επίσης δοκιμάζεται στην εργασία [28]. Το σχήμα 5.1 εμφανίζει το χρόνο εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) ως συνάρτηση του μεγέθους του προβλήματος για τον προσδιορισμό της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$ . Ειδικότερα, ο χρόνος εκτέλεσης αναφέρεται στην ελαχιστοποίηση των εκτιμήσεων ενός και δύο όρων. Χρησιμοποιούμε 20 (γράφημα στα αριστερά) και 100 (γράφημα στα δεξιά) σημεία του πλέγματος.

Όπως μπορούμε να δούμε στο σχήμα 5.1, και οι δύο εκτιμήσεις είναι πολύ γρήγορες, αλλά η εκτίμηση ενός όρου είναι ακόμη πιο γρήγορη από την εκτίμηση δύο όρων. Ο χρόνος εκτέλεσης επηρεάζεται μόνο από το μέγεθος του προβλήματος και από τον αριθμό των σημείων του πλέγματος και δεν εξαρτάται από το επίπεδο θορύβου. Σε αυτό το παράδειγμα, θεωρούμε το επίπεδο θορύβου  $\sigma = 10^{-3}$ .

## 5.4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

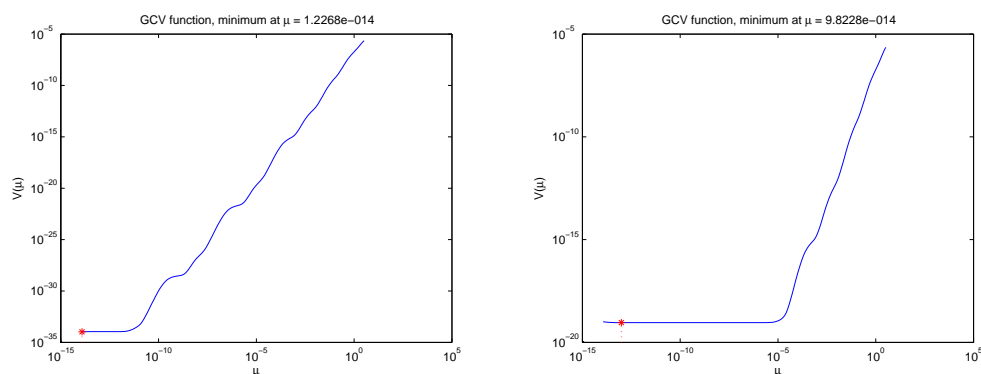


Σχήμα 5.1: Χρόνος εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) ως συνάρτηση του μεγέθους του προβλήματος για την προσέγγιση της παραμέτρου κανονικοποίησης για το πρόβλημα δοκιμής Tomo.

### Παράδειγμα 5.2. Το πρόβλημα δοκιμής Baart.

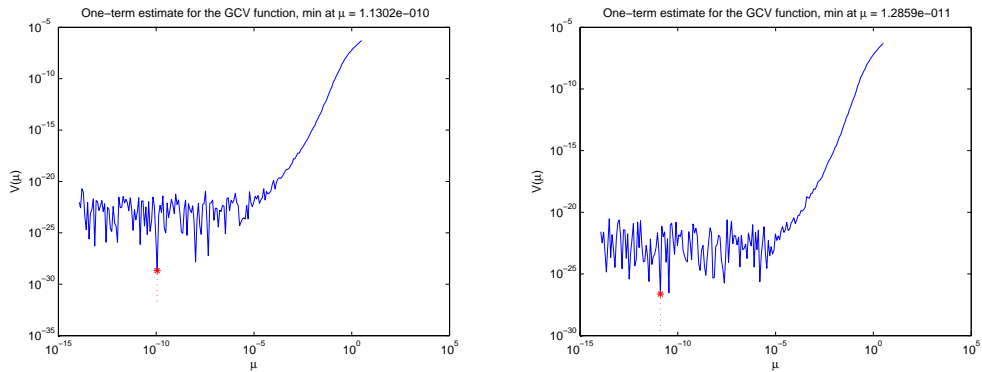
Σε αυτό το παράδειγμα, δοκιμάζουμε το πρόβλημα δοκιμής Baart με πίνακα  $A$  μεγέθους  $1000 \times 1000$ . Αυτό το πρόβλημα προκύπτει από τη διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm πρώτου είδους. Αρχικά, ελέγχουμε το πρόβλημα χωρίς θόρυβο και στη συνέχεια προσθέτουμε θόρυβο  $\sigma = 10^{-7}$ . Μας ενδιαφέρει η προσέγγιση της τιμής της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  για τα δύο αυτά προβλήματα.

Συγκεκριμένα, στα γραφήματα 5.2, 5.3, 5.4, απεικονίζουμε με κόκκινο “αστέρι (\*)” τη θέση του ελαχίστου και καταγράφουμε την τιμή της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  η οποία προκύπτει ελαχιστοποιώντας την ακριβή συνάρτηση GCV, την εκτίμηση ενός όρου και την εκτίμηση δύο όρων της συνάρτησης GCV, αντίστοιχα.

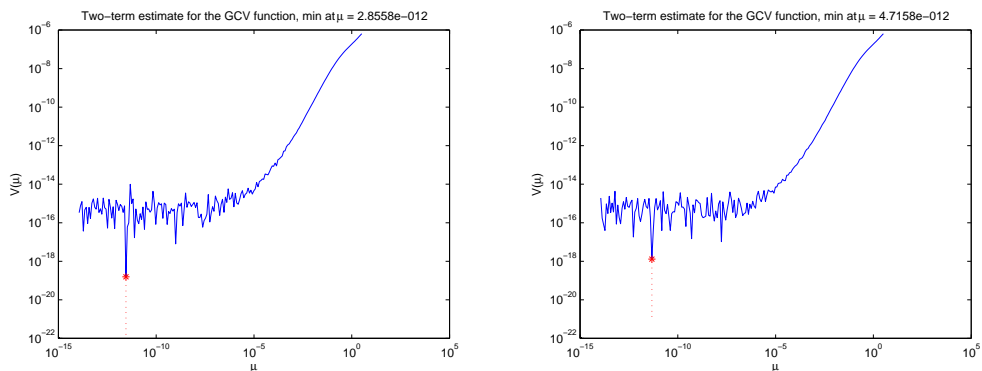


Σχήμα 5.2: Ελαχιστοποίηση της ακριβούς συνάρτησης GCV για το πρόβλημα χωρίς θόρυβο (αριστερό γράφημα) και με θόρυβο (δεξί γράφημα) για το πρόβλημα δοκιμής Baart.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΔΙΑΣΤΑΤΡΩΜΕΝΗΣ - ΕΠΙΚΥΡΩΣΗΣ (GCV)



Σχήμα 5.3: Ελαχιστοποίηση της εκτίμησης ενός όρου για το πρόβλημα χωρίς θόρυβο (αριστερό γράφημα) και με θόρυβο (δεξί γράφημα) για το πρόβλημα δοκιμής Baart.



Σχήμα 5.4: Ελαχιστοποίηση της εκτίμησης δύο όρων για το πρόβλημα χωρίς θόρυβο (αριστερό γράφημα) και με θόρυβο (δεξί γράφημα) για το πρόβλημα δοκιμής Baart.

Όπως βλέπουμε στα παραπάνω σχήματα, η τιμή της παραμέτρου κανονικοποίησης χρησιμοποιώντας τις εκτιμήσεις ενός και δύο όρων είναι πολύ κοντά στην τιμή του  $\mu$  που λαμβάνεται ελαχιστοποιώντας την ακριβή συνάρτηση GCV. Η νόρμα του σφάλματος  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\|$  καταγράφεται στον Πίνακα 5.2. Όπως παρατηρούμε σε αυτόν τον Πίνακα, η ποιότητα της λύσης  $\mathbf{x}_\mu$  είναι αρκετά ικανοποιητική όχι μόνο για το πρόβλημα χωρίς θόρυβο αλλά και για το αντίστοιχο πρόβλημα με θόρυβο.

#### 5.4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Πρόβλημα δοκιμής ( $p, \sigma$ )	Μέθοδος	$\mu$	$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\ $
Baart (1000,0)	GCV-One	1.1302e-10	6.2320e-2
	GCV-Two	2.8558e-12	5.9482e-2
	Exact GCV	1.2268e-14	3.8809e-1
Baart (1000,10 <sup>-7</sup> )	GCV-One	1.2859e-11	6.0436e-2
	GCV-Two	4.7158e-12	5.9925e-2
	Exact GCV	9.8228e-14	6.2214e-2

Πίνακας 5.2: Παράμετροι που χαρακτηρίζουν τα αριθμητικά παραδείγματα των σχημάτων 5.2, 5.3 και 5.4.

#### Παράδειγμα 5.3. Διάστημα εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV.

Θεωρούμε το πρόβλημα δοκιμής Spikes με πίνακα  $A$  μεγέθους  $800 \times 800$ , χωρίς την παρουσία θορύβου. Σε αυτό το παράδειγμα, ελέγχουμε την αποτελεσματικότητα του διαστήματος εμπιστοσύνης για τη συνάρτηση GCV. Συγκεκριμένα, θεωρούμε  $\alpha = 0.01$  και κατασκευάζουμε ένα 99% διάστημα εμπιστοσύνης  $[L, U]$  για τη συνάρτηση GCV. Για διάφορες τιμές της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$ , υπολογίζουμε τη συνάρτηση GCV  $V(\mu)$  και την εκτίμηση ενός όρου της συνάρτησης GCV  $\tilde{V}_1(\mu)$ , με σκοπό να υπολογίσουμε το απόλυτο σφάλμα  $|V(\mu) - \tilde{V}_1(\mu)|$ . Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.3. Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε σε αυτόν τον Πίνακα, το μήκος του διαστήματος εμπιστοσύνης μπορεί να θεωρηθεί ένα άνω φράγμα για το απόλυτο σφάλμα  $|V(\mu) - \tilde{V}_1(\mu)|$ .

$\mu$	$V(\mu)$	$\tilde{V}_1(\mu)$	$[L, U]$	$U - L$	$ V(\mu) - \tilde{V}_1(\mu) $
$5 \cdot 10^{-3}$	5.254673e-11	4.309219e-10	[4.3130e-11, 2.1174e-9]	2.0743e-9	3.7838e-10
$10^{-2}$	2.632498e-10	3.531509e-10	[2.1000e-10, 1.4375e-8]	1.4165e-8	8.9901e-11
$5 \cdot 10^{-2}$	2.751742e-9	1.093766e-9	[4.3682e-10, 6.4843e-9]	6.0475e-9	1.6580e-9
$10^{-1}$	8.051378e-9	1.132330e-9	[1.2109e-10, 2.1564e-8]	2.1443e-8	6.9190e-9

Πίνακας 5.3: Προσέγγιση του απόλυτου σφάλματος  $|V(\mu) - \tilde{V}_1(\mu)|$  μέσω του διαστήματος εμπιστοσύνης για το πρόβλημα δοκιμής Spikes.

#### Σύνοψη των αποτελεσμάτων

- Οι τύποι των εκτιμήσεων είναι εύκολα υλοποιήσιμοι με χαμηλή πολυπλοκότητα και χρειάζονται μόνο λίγα mnr's.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΔΙΑΣΤΑΤΡΩΜΕΝΗΣ - ΕΠΙΚΥΡΩΣΗΣ (GCV)

---

- Ο συνολικός αριθμός των απαιτούμενων  $mnp$ 's δεν επηρεάζεται από το μέγεθος του πίνακα και επομένως ο υπολογισμός είναι πολύ γρήγορος ακόμη και για προβλήματα μεγάλης κλίμακας.
- Οι προτεινόμενες GCV εκτιμήσεις της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  είναι πολύ γρήγορες αφού οι ροπές  $s_n$  που απαιτούνται στη μέθοδο της παρεκβολής είναι ανεξάρτητες από το  $\mu$  και επομένως δεν χρειάζεται να υπολογίζονται για κάθε τιμή του πλέγματος.
- Ο χρόνος εκτέλεσης είναι ανεξάρτητος από το επίπεδο θορύβου.
- Η θέση ελαχίστου  $\tilde{\mu}$  της εκτιμώμενης GCV συνάρτησης  $\tilde{V}(\mu)$  παρέχει μία ικανοποιητική εκτίμηση της παραμέτρου κανονικοποίησης που επικυρώνεται ελέγχοντας την ποιότητα της λύσης  $\mathbf{x}_{\tilde{\mu}}$  σε διάφορα διακριτά κακώς τοποθετημένα προβλήματα, τα οποία παρουσιάζονται στην Ενότητα 6.2.

# Κεφάλαιο 6

## Εφαρμογές

### 6.1 Ανάλυση δικτύων

Η ανάλυση δικτύων έχει πολλές εφαρμογές στην καθημερινή ζωή. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι δίκτυα από την κοινωνιολογία (π.χ. κοινωνικά δίκτυα), τεχνολογικά και πληροφοριακά δίκτυα (π.χ. το διαδίκτυο, κοινωνικά δίκτυα αλληλεπίδρασης), βιολογικά δίκτυα (π.χ. αλληλεπιδράσεις πρωτεϊνών) και πολλά ακόμη [54].

Είναι συχνά ενδιαφέρον να μπορούμε να αναγνωρίσουμε τους σημαντικούς κόμβους ενός δικτύου ή να εξακριβώσουμε την ευκολία μετάβασης ανάμεσα στους κόμβους. Αυτές οι ποσότητες μπορούν να προσδιοριστούν υπολογίζοντας τις διγραμμικές μορφές  $\mathbf{x}^T f(A)\mathbf{y}$ , όπου  $A$  είναι ο πίνακας γειτνίασης (adjacency matrix) που αναπαριστά το γράφημα του δικτύου,  $f$  είναι μία ομαλή συνάρτηση και  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  είναι κατάλληλα επιλεγμένα διανύσματα.

#### 6.1.1 Βασικές έννοιες

Η ανάλυση δικτύων απαιτεί τη χρήση εννοιών από τη θεωρία γραφημάτων, γραμμική άλγεβρα, αριθμητική ανάλυση και υπολογιστική φυσική [11, 27]. Παρακάτω, παραθέτουμε κάποιους βασικούς ορισμούς από τη θεωρία γραφημάτων.

- Ένα γράφημα  $G$  είναι ένα σύνολο από κόμβους (κορυφές)  $V$  με πλήθος κόμβων  $|V| = p$  και πλευρές  $E = \{(i, j) : i, j \in V\}$ .
- Ένα γράφημα είναι μη-κατευθυνόμενο (undirected graph) αν οι πλευρές είναι μη-διατεταγμένα ζεύγη των κόμβων και κατευθυνόμενο (directed) αν τα ζεύγη είναι διατεταγμένα (οι πλευρές έχουν μία κατεύθυνση).
- Ένας περίπατος (walk) μήκους  $k$  στο γράφημα  $G$  είναι μία ακολουθία κόμβων  $v_1, v_2, \dots, v_{k+1}$  τέτοιοι ώστε  $(v_i, v_{i+1}) \in E$  για κάθε  $1 \leq i \leq k$ .

Ένα μονοπάτι (path) είναι ένας περίπατος χωρίς επαναλαμβανόμενους κόμβους.

- Ένας κλειστός περίπατος (closed walk) είναι ένας περίπατος που ξεκινά και τελειώνει στον ίδιο κόμβο.
- Κύκλος (cycle) είναι ένας κλειστός περίπατος χωρίς επαναλαμβανόμενους κόμβους.
- Κάθε γράφημα μπορεί να αναπαρασταθεί με έναν πίνακα. Ο πίνακας γειτνίασης (adjacency matrix) ενός δικτύου με γράφημα  $G$  δίνεται από

$$A = (A_{ij}), A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{αν υπάρχει πλευρά που ενώνει τους κόμβους } i \text{ και } j, \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Ο πίνακας γειτνίασης  $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$  που συνδέεται με ένα μη-κατευθυνόμενο γράφημα  $G$  είναι συμμετρικός. Από την άλλη πλευρά, ο πίνακας γειτνίασης ενός κατευθυνόμενου γραφήματος είναι μη-συμμετρικός.

Δοθέντος ενός μεγάλου γραφήματος, είναι συχνά χρήσιμο να εξάγουμε αριθμητικές ποσότητες για να περιγράψουμε καθολικές ιδιότητες του γραφήματος, όπως η σημαντικότητα ενός συγκεκριμένου κόμβου ή η ευκολία μετάβασης από τον ένα κόμβο στον άλλο. Δεν είναι δύσκολο να δούμε ότι για  $m > 1$ , το στοιχείο  $(A^m)_{ij}$  του  $A^m$  ισούται με τον αριθμό των περιπάτων μήκους  $m$  που ξεκινούν από τον κόμβο  $i$  και καταλήγουν στον κόμβο  $j$  [27]. Κάποιοι ακόμα σημαντικοί ορισμοί είναι οι ακόλουθοι [11, 27].

- Ο βαθμός (degree) ενός κόμβου  $i$  είναι  $(A\mathbf{1})_i$  με  $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T$  (δηλαδή το άθροισμα των στοιχείων της  $i$ -οστής γραμμής του πίνακα  $A$ ), είναι ένα μέτρο για τη σημαντικότητα του κόμβου  $i$ .
- Η κεντρικότητα  $f$ -υπογραφήματος ( $f$ -subgraph centrality) του κόμβου  $i$ , είναι το διαγώνιο στοιχείο  $(f(A))_{ii}$ , το οποίο είναι ένα αξιόπιστο μέτρο για τη σημαντικότητα του κόμβου  $i$ . Συγκεκριμένα, ο πιο σημαντικός κόμβος σε ένα δίκτυο μπορεί να θεωρηθεί ως ο κόμβος με τη μεγαλύτερη κεντρικότητα  $f$ -υπογραφήματος.
- Η  $f$ -επικοινωνία ( $f$ -communicability) ανάμεσα στους κόμβους  $i$  και  $j$ , δίνεται από το στοιχείο  $(f(A))_{ij}$  και ποσοτικοποιεί την ευκολία μετάβασης ανάμεσα στους κόμβους  $i$  και  $j$ .

Οι συναρτήσεις πινάκων, οι οποίες αξιολογούν την κεντρικότητα  $f$ -υπογραφήματος, είναι το εκθετικό του πίνακα  $A$ ,  $\exp(A)$ , και ο πίνακας resolvent



$(I_p - aA)^{-1}$ , όπου ο  $A$  είναι ο πίνακας γειτνίασης του γραφήματος, [11, 25]. Ο πίνακας (resolvent) είναι

$$(I_p - aA)^{-1} = I + aA + a^2A^2 + \dots + a^kA^k + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} a^kA^k,$$

όπου  $0 < a < \frac{1}{\rho(A)}$  και  $\rho(A)$  είναι η φασματική ακτίνα του πίνακα  $A$ . Τα φράγματα της παραμέτρου  $a$  εξασφαλίζουν ότι ο πίνακας  $I - aA$  είναι αντιστρέψιμος και ότι η γεωμετρική σειρά συγκλίνει στον αντίστροφο.

- Η *κεντρικότητα υπογραφήματος* (resolvent subgraph centrality) του κόμβου  $i$  είναι το διαγώνιο στοιχείο  $((I_p - aA)^{-1})_{ii}$ .
- Η *επικοινωνία υπογραφήματος* (resolvent subgraph communicability) μεταξύ των κόμβων  $i$  και  $j$  είναι το στοιχείο  $((I_p - aA)^{-1})_{ij}$ .

### Γενικευμένη συνάρτηση πίνακα (Generalized matrix function)

Έστω ο πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  με τάξη  $r$ . Οι γενικευμένες συναρτήσεις πινάκων (generalized matrix functions) είναι επεκτάσεις του ορισμού των συναρτήσεων πινάκων για μη-τετραγωνικούς (rectangular) πίνακες και αρχικά μελετήθηκαν από τους Hawkins και Ben-Israel το 1973 στην εργασία [46]. Ας θεωρήσουμε τη συμπαγή παραγοντοποίηση ιδιάζουσών τιμών του πίνακα  $A$ , δηλαδή  $A = U_r \Sigma_r V_r^T$ . Τότε, η γενικευμένη συνάρτηση πίνακα  $f^\circ : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$  που αντιστοιχεί στη συνάρτηση  $f$  ορίζεται ως

$$f^\circ(A) := U_r f(\Sigma_r) V_r^T,$$

όπου  $f(\Sigma_r) = \text{diag}(f(\sigma_1), f(\sigma_2), \dots, f(\sigma_r))$  και  $\sigma_i$   $i = 1, \dots, r$  είναι οι ιδιάζουσες τιμές του  $A$  [3, 46].

Πρόσφατες μελέτες επικεντρώνονται σε εκτιμήσεις ποσοτήτων που σχετίζονται με τις γενικευμένες συναρτήσεις πινάκων που εμφανίζονται στην ανάλυση δικτύων. Συγκεκριμένα, δίνεται έμφαση στην εκτίμηση μέτρων που δίνουν πληροφορίες σχετικά με κατευθυνόμενα γραφήματα, χρησιμοποιώντας αριθμητική ολοκλήρωση του Gauss και τη διδιαγωνιοποίηση (bidiagonalization) Golub-Kahan [2, 3]. Σύμφωνα με την εργασία [3] έχουμε

$$\mathbf{z}^T f^\circ(A) \mathbf{x} = \mathbf{y}^T g(A^T A) \mathbf{x}, \quad (6.1)$$

όπου  $g(t) = (\sqrt{t})^{-1} f(\sqrt{t})$  και  $\mathbf{y} = A^T \mathbf{z}$ .

Επομένως, εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{z}^T f^\circ(A) \mathbf{x}$  μπορούν να επιτευχθούν με την προσέγγιση ποσοτήτων της μορφής  $\mathbf{y}^T g(A^T A) \mathbf{x}$ . Συνήθεις επιλογές για τη συνάρτηση  $f$  είναι είτε  $f(t) = \sinh(t)$  ή  $f(t) = at(1 - (at)^2)^{-1}$ , όπου  $a \in (0, \sigma_{max}^{-1})$  και  $\sigma_{max}$  είναι η μέγιστη ιδιάζουσα τιμή του πίνακα  $A$ , [3].

### 6.1.2 Αριθμητικά αποτελέσματα

Στη συνέχεια, παραθέτουμε αριθμητικά παραδείγματα στα οποία εκτιμούμε ποσότητες που εμφανίζονται στην ανάλυση δικτύων. Οι εκτιμήσεις αυτές στηρίζονται στη θεωρία που έχει περιγραφεί στα Κεφάλαια 2 και 3.

**Παράδειγμα 6.1.** *Εκτίμηση της κεντρικότητας και της επικοινωνίας υπογραφήματος.*

Χρησιμοποιώντας τις εκτιμήσεις για τη διγραμμική μορφή  $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$  που έχουν περιγραφεί στο Κεφάλαιο 2, παίρνουμε εκτιμήσεις για την κεντρικότητα υπογραφήματος (resolvent subgraph centrality) και την επικοινωνία υπογραφήματος (resolvent subgraph communicability). Στα ακόλουθα αριθμητικά αποτελέσματα θεωρούμε την παράμετρο  $a = 0.85/\lambda_{max}$ , όπου  $\lambda_{max}$  είναι η μέγιστη ιδιοτιμή του  $A$ , [11, 25].

Αρχικά, θεωρούμε τον πίνακα γειτνίασης ca-GrQc από την ομάδα Snap της συλλογής πινάκων SuiteSparse Matrix Collection, [23]. Ο πίνακας αυτός είναι ιδιάζων, συμμετρικός και έχει διάσταση  $p = 5242$ . Όμως, ο πίνακας  $B = I_p - aA$ , με  $A = \text{ca-GrQc}$ , είναι αντιστρέψιμος και έχει δείκτη κατάστασης  $\kappa(B) = 2.2378e1$ . Επίσης, θεωρούμε τον πίνακα γειτνίασης pref διάστασης  $p = 4000$ . Αυτός ο πίνακας αντιπροσωπεύει συνδεδεμένα απλά γραφήματα, είναι συμμετρικός και μπορεί να βρεθεί στο toolbox CONTEST του MATLAB, [64]. Ο δείκτης κατάστασης του πίνακα  $B = I_p - aA$ , με  $A = \text{pref}$ , είναι  $\kappa(B) = 1.2043e1$ .

Στους παρακάτω Πίνακες εκτιμούμε την κεντρικότητα υπογραφήματος και την επικοινωνία υπογραφήματος χρησιμοποιώντας τις εκτιμήσεις ενός όρου  $e_n$  και δύο όρων  $\hat{e}_n$  που δίνονται από τις σχέσεις (2.5) και (2.6), αντίστοιχα. Για τα μη-διαγώνια στοιχεία  $((I_p - aA)^{-1})_{ij}$  που ποσοτικοποιούν την επικοινωνία υπογραφήματος χρησιμοποιούμε τη σχέση (2.8) και μετά τις προαναφερθείσες εκτιμήσεις  $e_n$  και  $\hat{e}_n$ . Ειδικότερα, εκτιμούμε την κεντρικότητα υπογραφήματος του κόμβου 5 του πίνακα ca-GrQc με ακριβή τιμή 1.0003 (Πίνακας 6.1) και την επικοινωνία υπογραφήματος μεταξύ των κόμβων 1 και 17 του πίνακα pref με ακριβή τιμή  $2.0418e - 1$  (Πίνακας 6.2).

$e_0$	$e_{0.9}$	$e_1$	$e_{1.1}$	$e_{1.5}$	$\hat{e}_0$	$\hat{e}_1$	$\hat{e}_2$	$\hat{e}_3$
3.4721e-4	3.4835e-5	1.2055e-7	3.4595e-5	1.7347e-4	2.2197e-16	0	0	0

Πίνακας 6.1: Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων της κεντρικότητας υπογραφήματος του κόμβου 5 του πίνακα ca-GrQc διάστασης  $p = 5242$ .

$e_0$	$e_1$	$e_2$	$\hat{e}_0$	$\hat{e}_1$	$\hat{e}_2$	$\hat{e}_3$
7.2989e-1	4.4738e-1	5.9324e-5	3.2726e-1	4.2900e-1	4.8159e-1	5.1084e-1

Πίνακας 6.2: Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων της επικοινωνίας υπογραφήματος μεταξύ των κόμβων 1 και 17 του πίνακα pref διάστασης  $p = 4000$ .

Στους Πίνακες 6.1 και 6.2 καταγράφεται το σχετικό σφάλμα των εκτιμήσεων των ζητούμενων ποσοτήτων. Στον Πίνακα 6.1, παρατηρούμε ότι για διάφορες τιμές της παραμέτρου  $\nu$  μπορούμε να επιτύχουμε ικανοποιητικό σχετικό σφάλμα, χρησιμοποιώντας τις εκτιμήσεις ενός και δύο όρων. Ειδικότερα, το σχετικό σφάλμα της εκτίμησης  $e_\nu$  για  $\nu = 1$  είναι της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-7})$ , αλλά τα σχετικά σφάλματα για τις εκτιμήσεις δύο όρων είναι πολύ μικρότερα. Επίσης, στον Πίνακα 6.2, παρατηρούμε ότι το σχετικό σφάλμα για την εκτίμηση ενός όρου  $e_\nu$  για  $\nu = 2$  είναι της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-5})$ . Αντίθετα, οι εκτιμήσεις δύο όρων είναι λιγότερο ικανοποιητικές, όπως φαίνεται από τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα που είναι της τάξης  $\mathcal{O}(10^{-1})$ .

### Παράδειγμα 6.2. Προσδιορισμός σημαντικότερων κόμβων σε δίκτυο.

Ο σημαντικότερος κόμβος σε ένα δίκτυο μπορεί να προσδιοριστεί υπολογίζοντας τη διαγώνιο του πίνακα  $f(A)$  και στη συνέχεια εντοπίζοντας το δείκτη του διανύσματος που αντιστοιχεί στο μεγαλύτερο στοιχείο. Σε αυτό το παράδειγμα, εκτιμούμε ολόκληρη τη διαγώνιο του πίνακα resolvent  $(I_p - aA)^{-1}$  με παράμετρο  $a = 0.85/\lambda_{max}$ , χρησιμοποιώντας τις εκτιμήσεις που έχουν περιγραφεί στο Κεφάλαιο 3.

Στον Πίνακα 6.3 προσδιορίζουμε τους σημαντικότερους κόμβους στα δίκτυα email, autobahn, internet, που αντιπροσωπεύουν πραγματικά δίκτυα μεγάλης διάστασης [27], χρησιμοποιώντας τον πίνακα resolvent. Στη δεύτερη στήλη αυτού του Πίνακα καταγράφεται ο συνολικός αριθμός των κόμβων, δηλαδή η διάσταση  $p$  της αντίστοιχου πίνακα γειτνίασης. Οι τρεις τελευταίες στήλες του Πίνακα 6.3 εμφανίζουν τον χρόνο εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) για τον προσδιορισμό του σημαντικότερου κόμβου χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της παρεκβολής και τις μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss (single και block).

Τα χαρακτηριστικά των μεθόδων του Gauss επιλέγονται έτσι ώστε να επιτυγχάνεται η μικρότερη δυνατή υπολογιστική πολυπλοκότητα. Συγκεκριμένα, επιλέγουμε  $k = 2$  κόμβους και το μέγεθος  $q$  του κάθε block να είναι ίσο με τον ελάχιστο διαιρέτη της διάστασης  $p$ . Η διάσταση  $p$  του δικτύου internet είναι πρώτος αριθμός. Για αυτό το δίκτυο χρησιμοποιείται η τιμή  $q = 2$ . Όσον αφορά στη μέθοδο της παρεκβολής εφαρμόζουμε τον τύπο (3.3). Η τιμή

της απαιτούμενης παραμέτρου είναι  $\nu = -1$ , ακολουθώντας το Πρόρισμα 4 της εργασίας [32].

Δίκτυο	Κόμβοι	σημαντικότερος κόμβος	Χρόνος		
			Παρεχβολή	Single Gauss	Block Gauss
email	1133	105	3.0255e-3	2.5456e-1	1.9332e-1
autobahn	1168	693	3.3218e-3	3.1138e-1	6.6705e-1
internet	22963	4	5.8657e-1	4.1855e4	5.6162e4

Πίνακας 6.3: Ο χρόνος εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) για τον προσδιορισμό του σημαντικότερου κόμβου σε πραγματικά δίκτυα μεγάλης διάστασης.

## 6.2 Διακριτά κακώς τοποθετημένα προβλήματα (discrete ill-posed problems)

### 6.2.1 Θεωρητικό πλαίσιο

Θεωρούμε το γραμμικό σύστημα

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

όπου  $A \in \mathbb{R}^{p \times m}$  ( $p \geq m$ ) είναι ο πίνακας των συντελεστών,  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$  το διάνυσμα των σταθερών όρων και  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$  η ζητούμενη λύση του συστήματος. Όταν ο πίνακας  $A$  έχει πολύ μεγάλο δείκτη κατάστασης συνεπάγεται ότι κάποιες (ή όλες) οι εξισώσεις είναι αριθμητικά γραμμικά εξαρτημένες. Συχνά ο μεγάλος δείκτης κατάστασης προκαλείται από ένα “λανθασμένο” μαθηματικό μοντέλο το οποίο θα έπρεπε να τροποποιηθεί προτού υπολογιστεί μία αριθμητική του λύση. Μαθηματικά εργαλεία, όπως η παραγοντοποίηση ιδιζουσών τιμών (SVD), μπορούν να εντοπίσουν αυτές τις γραμμικές εξαρτήσεις και έτσι να βελτιωθεί το μοντέλο και να οδηγηθούμε σε ένα τροποποιημένο σύστημα με πίνακα που έχει καλύτερο δείκτη κατάστασης. Αυτό το τροποποιημένο σύστημα μπορεί να επιλυθεί με τις κλασικές αριθμητικές μεθόδους, [41].

Ωστόσο, υπάρχουν κατηγορίες προβλημάτων για τα οποία ο πίνακας συντελεστών είναι πράγματι πολύ κακής κατάστασης, δηλαδή αυτή η ιδιότητα είναι μέρος της μοντελοποίησης του προβλήματος. Έτσι, οι κλασικές τεχνικές της Γραμμικής Άλγεβρας δεν μπορούν να εφαρμοστούν και η αριθμητική επίλυση γίνεται συχνά πολύ δύσκολη. Η αντιμετώπιση αυτού του είδους των γραμμικών συστημάτων εξαρτάται από το είδος της κακής κατάστασης του πίνακα  $A$ . Μία σημαντική τάξη προβλημάτων που εμφανίζεται συχνά στις εφαρμογές είναι τα διακριτά κακώς τοποθετημένα προβλήματα (discrete ill-posed problems).

## 6.2. ΔΙΑΚΡΙΤΑ ΚΑΚΩΣ ΤΟΠΟΘΕΤΗΜΕΝΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ (DISCRETE ILL-POSED PROBLEMS)

Τα προβλήματα αυτά προκύπτουν από τη διακριτοποίηση των κακώς τοποθετημένων προβλημάτων όπως οι ολοκληρωτικές εξισώσεις Fredholm πρώτου είδους. Σε αυτή την περίπτωση όλες οι ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$  φθίνουν στο μηδέν και η διακριτή συνθήκη του Picard ικανοποιείται, [43, 44]. Δεδομένου ότι δεν υπάρχει κενό μεταξύ των ιδιάζουσών τιμών, δεν έχει νόημα η αριθμητική τάξη για αυτούς τους πίνακες. Για αυτά τα προβλήματα, ο στόχος είναι να βρεθεί μία ισορροπία μεταξύ της νόρμας υπολοίπων (residual norm) και της νόρμας της λύσης, [44].

Η μαθηματική μοντελοποίηση αυτού του είδους των προβλημάτων είναι μία συγκεκριμένη κλάση προβλημάτων ελαχίστων τετραγώνων της μορφής

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2, \quad (6.2)$$

όπου ο πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{p \times m}$  έχει ιδιάζουσες τιμές που φθίνουν στο μηδέν και είναι πολύ κακής κατάστασης. Συχνά, λόγω των σφαλμάτων στρογγύλευσης καθώς και των σφαλμάτων που υπάρχουν στα δεδομένα, τέτοιοι πίνακες έχουν πλήρη τάξη με την αυστηρή μαθηματική έννοια και το πρόβλημα των ελαχίστων τετραγώνων (6.2) δεν είναι κακώς τοποθετημένο με την κλασική έννοια του Hadamard. Ωστόσο, εξακολουθεί να είναι δόκιμη η ορολογία διακριτά κακώς τοποθετημένα προβλήματα, επειδή πολλές από τις δυσκολίες αυτών των προβλημάτων παρουσιάζονται και σε προβλήματα της μορφής (6.2). Επίσης, τα προβλήματα αυτά συχνά προκύπτουν όταν διακριτοποιείται ένα υποκείμενο κακώς τοποθετημένο πρόβλημα για τον υπολογισμό της αριθμητικής του λύσης, [43].

Το διάνυσμα  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$  περιέχει ένα άγνωστο σφάλμα  $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^p$ . Έστω  $\mathbf{b}_{exact}$  το άγνωστο διάνυσμα το οποίο δεν περιέχει το σφάλμα, δηλαδή  $\mathbf{b} = \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e}$ . Η ακριβής λύση του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων της παραπάνω μορφής (6.2) είναι

$$\mathbf{x}_{exact} = A^\dagger \mathbf{b}_{exact}.$$

Εξαιτίας όμως της ύπαρξης του άγνωστου σφάλματος  $\mathbf{e}$  στο διάνυσμα  $\mathbf{b}$  και της μεγάλης νόρμας του  $A^\dagger$ , η λύση του προβλήματος (6.2), η οποία είναι  $A^\dagger \mathbf{b} = \mathbf{x}_{exact} + A^\dagger \mathbf{e}$ , περιέχει το σφάλμα  $A^\dagger \mathbf{e}$  και πρακτικά δεν είναι μία καλή προσέγγιση της ακριβούς λύσης  $\mathbf{x}_{exact}$ , [28].

Μία καλύτερη προσέγγιση της λύσης  $\mathbf{x}_{exact}$  μπορεί να προκύψει λύνοντας ένα άλλο πρόβλημα το οποίο είναι κοντά στο αρχικό αλλά λιγότερο “ευαίσθητο” στο σφάλμα  $\mathbf{e}$  που υπάρχει στο  $\mathbf{b}$ . Αυτός ο τρόπος είναι γνωστός ως κανονικοποίηση (regularization). Μία από τις πιο διαδεδομένες μεθόδους κανονικοποίησης είναι η κανονικοποίηση Tikhonov. Η απλούστερη μορφή της είναι η αντικατάσταση του αρχικού προβλήματος (6.2) με το ακόλουθο ποινικοποιημένο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m} \{\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \mu \|\mathbf{x}\|^2\}, \quad (6.3)$$

όπου η παράμετρος  $\mu > 0$  ονομάζεται παράμετρος κανονικοποίησης (regularization parameter). Η λύση του ποινικοποιημένου προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων (6.3) δίνεται από τον τύπο

$$\mathbf{x}_\mu = (A^T A + \mu I_m)^{-1} A^T \mathbf{b}. \quad (6.4)$$

Όπως είναι φανερό η λύση (6.4) εξαρτάται από την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$ . Μία καλή επιλογή για αυτήν την παράμετρο θα οδηγήσει σε καλή προσέγγιση της ακριβούς λύσης. Ένας τρόπος επιλογής αυτής της παραμέτρου είναι μέσω της ελαχιστοποίησης της συνάρτησης GCV η οποία δίνεται από τον τύπο (5.1) και έχει εκτιμηθεί στο Κεφάλαιο 5.

### Παρατήρηση 6.1.

Μία άλλη διαδεδομένη μέθοδος κανονικοποίησης για τη λύση των διακριτών κακώς τοποθετημένων προβλημάτων είναι η *Truncated SVD (TSVD)*. Η μέθοδος αυτή κρατά τις  $k$  μεγαλύτερες ιδιάζουσες τιμές του πίνακα  $A$  και οι υπόλοιπες  $m - k$  ιδιάζουσες τιμές θεωρούνται ίσες με το μηδέν. Έστω  $\Sigma_k \in \mathbb{R}^{m \times m}$  ο διαγώνιος πίνακας που περιέχει αυτές τις ιδιάζουσες τιμές. Μπορούμε τώρα να ορίσουμε τον πίνακα  $A_k = U \Sigma_k V^T$  τάξης  $k$ . Οι προσεγγιστικές λύσεις με τη μέθοδο *TSVD* δίνονται από τον τύπο

$$\mathbf{x}_k = A_k^\dagger \mathbf{b} = \sum_{j=1}^k \frac{\mathbf{u}_j^k \mathbf{b}}{\sigma_j} \mathbf{v}_j, \quad k = 1, 2, \dots, r,$$

όπου  $r$  είναι η τάξη του πίνακα  $A$ . Σε αυτή τη μέθοδο το  $k$  είναι η παράμετρος κανονικοποίησης, [49].

### 6.2.2 Αριθμητικά αποτελέσματα

Στη συνέχεια, παραθέτουμε αριθμητικά παραδείγματα στα οποία λύνουμε διακριτά κακώς τοποθετημένα προβλήματα επιλεγμένα από το πακέτο “Regularization Tools” του Hansen, [45]. Περισσότερες λεπτομέρειες σχετικά με τον τρόπο κατασκευής των προβλημάτων μπορούν να βρεθούν στην Υποενότητα 5.4.3.

Η λύση των προβλημάτων αυτών γίνεται μέσω του αντίστοιχου ποινικοποιημένου προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων (6.3). Η τιμή της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  προσδιορίζεται μέσω της ελαχιστοποίησης της ακριβούς συνάρτησης GCV και των εκτιμήσεων ενός και δύο όρων. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούμε τις GCV εκτιμήσεις ενός όρου  $\tilde{\mu}_1$  και δύο όρων  $\tilde{\mu}_2$  (με  $n = 1$ ,  $k = 0$ ) που δίνονται στα Πορίσματα 5.2 και 5.3. Οι απαιτούμενες παράμετροι στις εκτιμήσεις ενός όρου είναι  $\nu_f = -3/2$  και  $\nu_e = -1$ , καθώς οι πίνακες αυτών των προβλημάτων ικανοποιούν την υπόθεση του Πορίσματος 5.1, όπως

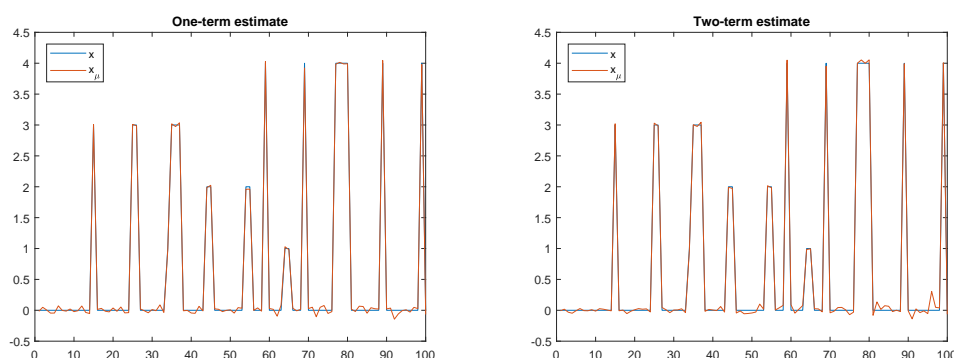
## 6.2. ΔΙΑΚΡΙΤΑ ΚΑΚΩΣ ΤΟΠΟΘΕΤΗΜΕΝΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ (DISCRETE ILL-POSED PROBLEMS)

έχουμε ήδη αναφέρει στην Ενότητα 5.4. Η ακριβής τιμή της συνάρτησης GCV υπολογίζεται χρησιμοποιώντας το πακέτο του Hansen, [45]. Η ποιότητα των λύσεων  $\mathbf{x}_{\bar{\mu}}$  αξιολογείται υπολογίζοντας τη νόρμα του σφάλματος  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\bar{\mu}}\|$ .

Σε όλα τα παραδείγματα θεωρούμε το μέγεθος δείγματος  $N = 50$  για το Θεώρημα του Hutchinson, εκτός από το τελευταίο παράδειγμα στο οποίο χρησιμοποιήσαμε  $N = 100$ . Το πλέγμα που χρησιμοποιείται για την παράμετρο  $\mu$  περιγράφεται στην Υποενότητα 5.4.1. Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν χρησιμοποιώντας MATLAB (R2015a), 64-bit, σε υπολογιστή Intel Core i7, με 16 Gb DDR4 RAM.

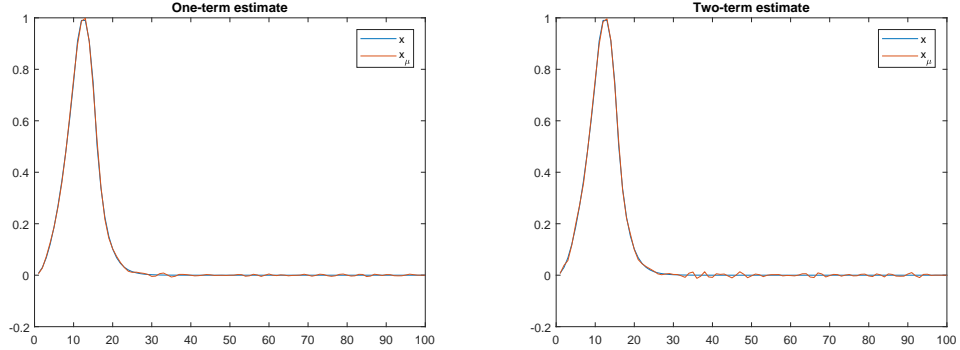
### Παράδειγμα 6.3. Τα προβλήματα δοκιμής Tomo και Heat.

Σε αυτό το παράδειγμα, δοκιμάζουμε τα προβλήματα Tomo και Heat με πίνακα  $A$  μεγέθους  $100 \times 100$  και το επίπεδο θορύβου είναι  $\sigma = 10^{-3}$  και  $\sigma = 10^{-4}$  αντίστοιχα. Το πρόβλημα δοκιμής Heat προκύπτει από την αντίστροφη εξίσωση θερμότητας. Στα γραφήματα 6.1, 6.2 σχεδιάζουμε την ακριβή λύση  $\mathbf{x}$  των προβλημάτων και την εκτίμηση ενός όρου (αριστερά γραφήματα) ή την εκτίμηση δύο όρων (δεξιά γραφήματα) για τη λύση  $\mathbf{x}_{\mu}$ . Η κατάλληλη επιλογή της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  μπορεί να οδηγήσει σε μία ικανοποιητική λύση  $\mathbf{x}_{\mu}$  η οποία είναι πολύ κοντά στην αρχική λύση  $\mathbf{x}$ , όπως μπορούμε να δούμε σε αυτά τα γραφήματα και στον Πίνακα 6.4 στον οποίο καταγράφεται η νόρμα του σφάλματος  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mu}\|$ .



Σχήμα 6.1: Λύση του προβλήματος δοκιμής Tomo με τη χρήση των εκτιμήσεων ενός και δύο όρων.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ



Σχήμα 6.2: Λύση του προβλήματος δοκιμής Heat με τη χρήση των εκτιμήσεων ενός και δύο όρων.

Πρόβλημα δοκιμής ( $p, \sigma$ )	Μέθοδος	$\mu$	$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\ $
Tomo ( $100, 10^{-3}$ )	GCV-One	$8.2879e-4$	$3.1328e-1$
	GCV-Two	$3.9349e-6$	$5.5987e-1$
	Exact GCV	$3.7321e-3$	$3.6006e-1$
Heat ( $100, 10^{-4}$ )	GCV-One	$1.0389e-7$	$4.8332e-2$
	GCV-Two	$2.3073e-8$	$6.1547e-2$
	Exact GCV	$2.2734e-4$	$5.9325e-1$

Πίνακας 6.4: Παράμετροι που χαρακτηρίζουν τα αριθμητικά παραδείγματα των γραφημάτων 6.1 και 6.2.

### Παράδειγμα 6.4. Τα προβλήματα δοκιμής Baart και Phillips.

Σε αυτό το παράδειγμα, συγκρίνουμε τα αποτελέσματα που προκύπτουν χρησιμοποιώντας τις παραχθείσες οικογένειες εκτιμήσεων με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που υπάρχουν στο Κεφάλαιο 15 στο βιβλίο των Golub και Meurant, [38]. Συγκεκριμένα, δοκιμάζουμε τα προβλήματα Baart και Phillips με τετραγωνικό πίνακα  $A$  διάστασης 100 και 200, αντίστοιχα. Στον Πίνακα 6.5, καταγράφουμε την εκτίμηση GCV για το  $\mu$ , το υπόλοιπο  $\mathbf{b}_{per} - A\mathbf{x}_\mu$  (το διάνυσμα  $\mathbf{b}_{per}$  δίνεται από τη σχέση (5.27)) και τη νόρμα του σφάλματος  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\|$ . Όπως παρατηρούμε σε αυτόν τον Πίνακα, η ποιότητα των εκτιμήσεων εξαρτάται από το επίπεδο θορύβου  $\sigma$ . Ωστόσο, οι εκτιμήσεις για την παράμετρο κανονικοποίησης είναι καλές. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα του Πίνακα 6.5 με τα αποτελέσματα στους Πίνακες 15.10 και 15.12 στο [38, σελ. 327, 331], τα οποία έχουν προκύψει χρησιμοποιώντας τις μεθόδους που περιγράφονται στις εργασίες [19] και [42], βλέπουμε ότι η ποιότητα των λύσεων είναι σχεδόν ίδια.



6.2. ΔΙΑΚΡΙΤΑ ΚΑΚΩΣ ΤΟΠΟΘΕΤΗΜΕΝΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ  
(DISCRETE ILL-POSED PROBLEMS)

Πρόβλημα ( $p$ )	$\sigma$	$\mu$		$\ \mathbf{b}_{per} - A\mathbf{x}_\mu\ $		$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\ $	
		GCV-One	GCV-Two	GCV-One	GCV-Two	GCV-One	GCV-Two
Bart (100)	$10^{-7}$	2.855718e-12	2.044066e-12	2.6298e-7	2.6290e-7	5.8582e-2	5.7744e-2
	$10^{-5}$	5.286602e-9	2.291529e-9	2.4339e-5	2.4205e-5	6.4653e-2	6.3754e-2
	$10^{-3}$	2.291529e-9	1.174044e-9	3.1809e-3	3.1809e-3	5.6132e-1	5.9153e-1
	$10^{-1}$	4.646328e-8	6.491280e-8	2.8115e-1	2.6879e-1	5.1292e0	7.4336e0
Phillips (200)	$10^{-7}$	7.338751e-7	3.036678e-7	1.8031e-6	1.4264e-6	7.3570e-4	7.4559e-4
	$10^{-5}$	1.474286e-5	2.272868e-4	1.5585e-4	3.0357e-4	5.5019e-3	7.8508e-3
	$10^{-3}$	9.404826e-5	7.157553e-4	1.4791e-2	1.5077e-2	2.0590e-1	6.7724e-2
	$10^{-2}$	9.326777e-4	1.122007e-4	1.3631e-1	1.3517e-1	5.7666e-1	1.3282e0
	$10^{-1}$	1.729768e-3	3.859297e-4	1.4218e0	1.4536e0	2.5851e0	7.4383e0

Πίνακας 6.5: Τα προβλήματα δοκιμής Bart και Phillips για διάφορα επίπεδα θορύβου  $\sigma$ .

**Παράδειγμα 6.5.** Το πρόβλημα δοκιμής Shaw.

Σε αυτό το παράδειγμα, συγκρίνουμε τη συμπεριφορά της προτεινόμενης μεθόδου με μία μέθοδο που βασίζεται στην μερική διδιαγωνιοποίηση (bidiagonalization), η οποία περιγράφεται στην εργασία [57]. Συγκεκριμένα, δοκιμάζουμε το πρόβλημα Shaw με πίνακα  $A$  μεγέθους  $200 \times 200$  για διάφορα επίπεδα θορύβου  $\sigma$ . Στον Πίνακα 6.6 παρουσιάζουμε την εκτίμηση GCV για την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$  και τις αντίστοιχες νόρμες σφαλμάτων  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\|$ . Συγκρίνοντας αυτά τα αποτελέσματα με τα αντίστοιχα που παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.1 της εργασίας [57], παρατηρούμε ότι οι παραχθείσες GCV εκτιμήσεις για την παράμετρο κανονικοποίησης  $\mu$  είναι πολύ κοντά και μπορούν να επιτευχθούν ικανοποιητικές προσεγγίσεις.

$\sigma$	$\mu$			$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\ $		
	GCV-One	GCV-Two	Exact GCV	GCV-One	GCV-Two	Exact GCV
$10^{-2}$	4.648693e-6	7.676470e-6	7.008714e-4	2.4151e0	5.0564e0	7.7344e-1
$10^{-4}$	1.579728e-8	2.381715e-6	6.251839e-7	3.9144e-1	6.1598e-1	4.4459e-1
$10^{-6}$	5.793231e-9	2.124513e-9	3.785969e-7	3.3267e-1	2.7528e-1	4.5536e-1
$10^{-8}$	3.991690e-10	1.147620e-12	2.045106e-10	2.6640e-1	1.0418e-1	2.6010e-1
$10^{-10}$	2.750381e-11	8.214432e-13	2.417275e-10	2.2266e-1	9.3875e-2	2.6201e-1
$10^{-12}$	3.250896e-11	6.949720e-13	8.214432e-13	2.2792e-1	9.0655e-2	9.3922e-2

Πίνακας 6.6: Το πρόβλημα δοκιμής Shaw διάστασης 200 για διάφορα επίπεδα θορύβου  $\sigma$ .

**Παράδειγμα 6.6.** Προβλήματα δοκιμής μεγάλης διάστασης.

Θεωρούμε τέσσερα διαφορετικά προβλήματα δοκιμής μεγάλης διάστασης με διάφορα επίπεδα θορύβου  $\sigma$ . Ειδικότερα, θεωρούμε το πρόβλημα δοκιμής

Phillips διάστασης  $p = 3000$  και  $p = 10000$  με θόρυβο  $\sigma = 10^{-5}$ , το πρόβλημα Tomo διάστασης  $p = 10000$  με  $\sigma = 10^{-4}$ , το πρόβλημα Baart διάστασης  $p = 15000$  με  $\sigma = 10^{-6}$  και το πρόβλημα Heat διάστασης  $p = 20000$  με  $\sigma = 10^{-3}$ . Στον Πίνακα 6.7 αναφέρουμε την τιμή της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  και τη νόρμα του σφάλματος της παραγόμενης λύσης χρησιμοποιώντας τις εκτιμήσεις ενός ή δύο όρων. Παρατηρούμε ότι η GCV εκτίμηση της παραμέτρου κανονικοποίησης  $\mu$  είναι πολύ ικανοποιητική, αφού η νόρμα του σφάλματος  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\|$  είναι αρκετά μικρή. Αξίζει να σημειωθεί ότι η ποιότητα της λύσης  $\mathbf{x}_\mu$  δεν εξαρτάται από την διάσταση του προβλήματος δοκιμής.

Πρόβλημα δοκιμής ( $p, \sigma$ )	Μέθοδος	$\mu$	$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_\mu\ $
Phillips (3000, $10^{-5}$ )	GCV-One	9.5202e-7	8.1020e-3
	GCV-Two	5.1542e-6	3.2307e-3
	Exact GCV	1.6812e-3	1.7508e-2
Phillips (10000, $10^{-5}$ )	GCV-One	7.7961e-8	6.6911e-2
	GCV-Two	1.0254e-6	4.2442e-3
	Exact GCV	1.1201e-3	1.5003e-2
Tomo (10000, $10^{-4}$ )	GCV-One	4.0425e-5	5.1220e-1
	GCV-Two	5.2334e-7	2.2169e-1
	Exact GCV	4.9637e-4	6.0263e-1
Baart (15000, $10^{-6}$ )	GCV-One	2.9667e-11	6.1209e-2
	GCV-Two	1.0473e-12	5.7591e-2
	Exact GCV	1.3162e-6	1.3940e-1
Heat (20000, $10^{-3}$ )	GCV-One	4.8599e-6	1.3017e-1
	GCV-Two	2.9431e-6	1.1307e-1
	Exact GCV	8.6606e-4	9.3654e-1

Πίνακας 6.7: Εκτιμήσεις GCV για το  $\mu$  για προβλήματα δοκιμής μεγάλης διάστασης.

## 6.3 Στατιστική: Γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης

### 6.3.1 Θεωρητικό πλαίσιο

Σε διάφορα προβλήματα της Στατιστικής μας ενδιαφέρει η ταυτόχρονη μελέτη δύο ή περισσότερων μεταβλητών, για να προσδιορίσουμε με ποιον τρόπο οι μεταβλητές αυτές σχετίζονται μεταξύ τους. Ο κλάδος της Στατιστικής που

εξετάζει τη σχέση μεταξύ δύο ή περισσότερων μεταβλητών με απώτερο σκοπό την πρόβλεψη μίας από αυτές μέσω των άλλων, λέγεται ανάλυση παλινδρόμησης (regression analysis).

Σε κάθε πρόβλημα παλινδρόμησης διακρίνουμε συνήθως δύο είδη μεταβλητών, τις ανεξάρτητες (independent variables) και τις εξαρτημένες (dependent, response variables). Ανεξάρτητες μεταβλητές είναι εκείνες στις οποίες μπορούμε να δίνουμε μία συγκεκριμένη τιμή ή παίρνουν τιμές που μπορούμε να παρατηρήσουμε αλλά όχι να ελέγξουμε. Η εξαρτημένη μεταβλητή αντανακλά το αποτέλεσμα μεταβολών στις ανεξάρτητες μεταβλητές, [71].

Όπως αναφέραμε παραπάνω, ο στόχος της μελέτης ενός γραμμικού μοντέλου παλινδρόμησης (θεωρία πολλαπλής παλινδρόμησης) είναι η πρόβλεψη (prediction) μίας μεταβλητής  $y$  με βάση τα στοιχεία που διαθέτουμε για ένα σύνολο άλλων μεταβλητών  $x_1, x_2, \dots, x_d$ . Στο κλασικό γραμμικό μοντέλο, η  $y$  θεωρείται ότι αποτελεί μία τυχαία μεταβλητή (με συγκεκριμένες στατιστικές ιδιότητες) και ότι περιέχει ένα γραμμικό κομμάτι που χρησιμοποιεί τις μεταβλητές  $x_1, x_2, \dots, x_d$  και ένα τυχαίο σφάλμα  $e$ , δηλαδή

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_d x_d + e.$$

Χρησιμοποιώντας  $n$  ανεξάρτητες παρατηρήσεις, παίρνουμε

$$\begin{aligned} y_1 &= \beta_1 x_{11} + \beta_2 x_{12} + \dots + \beta_d x_{1d} + e_1, \\ y_2 &= \beta_1 x_{21} + \beta_2 x_{22} + \dots + \beta_d x_{2d} + e_2, \\ &\vdots \\ y_n &= \beta_1 x_{n1} + \beta_2 x_{n2} + \dots + \beta_d x_{nd} + e_n. \end{aligned}$$

Έτσι το γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης μπορεί να γραφεί στην ισοδύναμη μορφή πινάκων

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (6.5)$$

όπου  $X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nd} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times d}$  ( $n > d$ ) είναι ο πίνακας σχεδιασμού

(design matrix),  $\mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_n]^T \in \mathbb{R}^n$  είναι το διάνυσμα απόκρισης (response vector),  $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_1 \ \epsilon_2 \ \dots \ \epsilon_n]^T \in \mathbb{R}^n$  είναι το διάνυσμα των ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων σφαλμάτων (independent and identically distributed (iid) random errors), όπου  $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$  για κάθε  $i = 1, 2, \dots, n$  και  $\boldsymbol{\beta} = [\beta_1 \ \beta_2 \ \dots \ \beta_d]^T \in \mathbb{R}^d$  είναι η παράμετρος-διάνυσμα παλινδρόμησης που επιθυμούμε να εκτιμήσουμε.

Ένας τρόπος εκτίμησης των συντελεστών του μοντέλου, δηλαδή του διάνυσματος  $\beta$  είναι η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων. Η εκτίμηση των συνήθων ελαχίστων τετραγώνων (ordinary least squares (OLS)) του (6.5) προκύπτει ελαχιστοποιώντας το  $\|\mathbf{y} - X\beta\|^2$  και δίνεται από

$$\beta_{OLS} = (X^T X)^{-1} X^T \mathbf{y}.$$

Αν ο πίνακας  $X^T X$  είναι ιδιάζων και καθώς το διάνυσμα απόκρισης  $\mathbf{y}$  είναι “μολυσμένο” με ένα άγνωστο σφάλμα, λαμβάνουμε υπόψιν το ποινικοποιημένο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων της μορφής

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^d} \{\|\mathbf{y} - X\beta\|^2 + \mu\|\beta\|^2\}, \quad (6.6)$$

το οποίο εξαρτάται από μία κατάλληλα επιλεγμένη τιμή της παραμέτρου  $\mu$ . Στην εργασία [37] αποδείχθηκε ότι το διάνυσμα  $\beta$  ικανοποιεί μία οικογένεια ridge εκτιμήσεων που εξαρτάται από μία παράμετρο  $\mu$ , η οποία καλείται ρυθμιστική παράμετρος (tuning parameter) σε αυτά τα προβλήματα. Η οικογένεια ridge εκτιμήσεων για το  $\beta$  δίνεται από

$$\hat{\beta}(\mu) = (X^T X + \mu I_d)^{-1} X^T \mathbf{y}.$$

Η αποτελεσματικότητα της λύσης των ποινικοποιημένων ελαχίστων τετραγώνων εξαρτάται από την κατάλληλη επιλογή της ρυθμιστικής παραμέτρου  $\mu$  καθώς οδηγεί στην επιλογή του σωστού στατιστικού μοντέλου.

Όπως και στην επίλυση των διακριτών κακώς τοποθετημένων προβλημάτων που περιγράφηκαν στην Ενότητα 6.2, ο προσδιορισμός της ρυθμιστικής παραμέτρου  $\mu$ , γίνεται μέσω της μεθόδου GCV. Λαμβάνοντας υπόψιν τους συμβολισμούς του γραμμικού μοντέλου παλινδρόμησης (6.5), η συνάρτηση GCV (5.4) γράφεται ως

$$V(\mu) = \frac{\mathbf{y}^T B^{-2} \mathbf{y}}{(Tr(B^{-1}))^2}, \quad (6.7)$$

όπου  $B = X X^T + \mu I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$  και  $X$  είναι ο πίνακας σχεδιασμού. Θα χρησιμοποιήσουμε τις εκτιμήσεις ενός όρου  $\tilde{V}_1(\mu)$  και δύο όρων  $\tilde{V}_2(\mu)$  για τη συνάρτηση GCV που δίνονται από τους τύπους (5.18) και (5.19) αντίστοιχα, για την εκτίμηση της ρυθμιστικής παραμέτρου  $\mu$ .

### 6.3.2 Μελέτη προσομοίωσης

Στην ακόλουθη μελέτη προσομοίωσης, θεωρούμε το στατιστικό μοντέλο με υψηλά συσχετισμένους παράγοντες (high correlated covariates), όπου όλοι έχουν την ίδια διακύμανση. Αυτή η κλάση πινάκων περιγράφεται αναλυτικά

στην Ενότητα 1.7. Λαμβάνουμε ξεχωριστά υπόψιν τις περιπτώσεις όπου το μοντέλο δεν περιέχει σταθερό όρο (intercept) και την περίπτωση με σταθερό όρο. Ας ξεκινήσουμε να περιγράψουμε αναλυτικά το μοντέλο που θα μελετήσουμε.

Προσομοιώνουμε 100 datasets που αποτελούνται από  $n$  παρατηρήσεις από το στατιστικό μοντέλο

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon},$$

όπου  $X = [\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \mathbf{x}_d]_{n \times d}$  είναι ο πίνακας σχεδιασμού και οι στήλες του  $\mathbf{x}_i$ ,  $i = 1, \dots, d$  είναι οι παράγοντες που ακολουθούν την κανονική κατανομή  $N(\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$ . Το διάνυσμα των σφαλμάτων  $\boldsymbol{\epsilon}_{n \times 1}$  είναι κανονικά κατανομημένο ως  $N(\mathbf{0}, I_n)$  και  $\boldsymbol{\beta}$  είναι ένα τυχαία επιλεγμένο  $d \times 1$  διάνυσμα. Στην περίπτωση που το μοντέλο περιέχει σταθερό όρο όλα τα στοιχεία της πρώτης στήλης του πίνακα σχεδιασμού είναι ίσα με ένα. Έτσι, το μοντέλο με σταθερό όρο θα έχει τη μορφή

$$\mathbf{y} = \tilde{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon},$$

όπου  $\tilde{X} = [\mathbf{1} \ X]$  και ο πίνακας  $X$  έχει τις ιδιότητες που έχουμε περιγράψει παραπάνω.

Για όλα τα προσομοιωμένα παραδείγματα, η συνήθης εκτίμηση των ελαχίστων τετραγώνων (OLS) δεν είναι ικανοποιητική και έτσι χρησιμοποιούμε την ελαχιστοποίηση του αντίστοιχου ποινικοποιημένου προβλήματος (6.6).

Στους Πίνακες που ακολουθούν, παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα της εκτίμησης της παραμέτρου παλινδρόμησης  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  για διάφορες διαστάσεις των πινάκων σχεδιασμού  $X$  ή  $\tilde{X}$ . Το πλέγμα που χρησιμοποιείται για την παράμετρο  $\mu$  περιγράφεται στην Υποενότητα 5.4.1. Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν χρησιμοποιώντας MATLAB (R2015a), 64-bit, σε υπολογιστή Intel Core i7, με 16 Gb DDR4 RAM.

Στις πρώτες στήλες των Πινάκων απεικονίζεται η διακύμανση  $\sigma^2$  των παραγόντων  $\mathbf{x}_i$ ,  $i = 1, \dots, d$ . Η διακύμανση είναι ίση με 0.25 και 1 στις περιπτώσεις που εξετάζουμε. Στη δεύτερη στήλη καταγράφονται οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται. Συγκεκριμένα, οι μέθοδοι που παρουσιάζουμε είναι οι ακόλουθες.

- Exact GCV

Η μέθοδος αυτή υπολογίζει τον τύπο της συνάρτησης GCV με βάση την παραγοντοποίηση ιδιαζουσών τιμών (SVD) και μπορεί να βρεθεί στο πακέτο του Hansen, [45].

- GCV-One

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στην εκτίμηση ενός όρου της συνάρτησης GCV και υλοποιεί τον τύπο  $\tilde{V}_1(\mu)$  (με  $\nu_f = -3/2$  και  $\nu_e = -1$ ) που δίνεται από τη σχέση (5.18).

- GCV-Two

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στην εκτίμηση δύο όρων της συνάρτησης GCV και υλοποιεί τον τύπο  $\tilde{V}_2(\mu)$  (με  $n = 1, k = 0$ ) που δίνεται από τη σχέση (5.19).

- GCV-One( $\mathbf{e}_i$ )

Αυτή η μέθοδος υλοποιεί τον τύπο (5.7) για τον αριθμητή (με  $\nu_f = -3/2$ ) και τον τύπο (5.17) για τον παρονομαστή (με  $\nu = -1$ ) της εκτιμώμενης συνάρτησης GCV.

- GCV-T1

Η μέθοδος GCV-T1 υλοποιεί τον τύπο (5.7) για τον αριθμητή (με  $\nu_f = -3/2$ ) και τον τύπο (1.34) για τον παρονομαστή (που υπολογίζει ακριβώς το ίχνος του πίνακα  $B^{-1}$  με βάση τις ιδιοτιμές του) της εκτιμώμενης συνάρτησης GCV.

Στην τρίτη και στην τέταρτη στήλη η μέση τιμή της εκτιμώμενης ρυθμιστικής παραμέτρου  $\mu$  και η μέση τιμή του αντίστοιχου απαιτούμενου χρόνου (σε δευτερόλεπτα) καταγράφονται. Στην πέμπτη στήλη των Πινάκων απεικονίζεται ο συντελεστής επιτάχυνσης (speedup factor - SF) ο οποίος εκφράζεται ως

$$SF = \frac{time_{\text{exact GCV}}}{time_{\text{method}}}.$$

Η ποιότητα της λύσης  $\hat{\beta}$  αξιολογείται με τον υπολογισμό του μέσου τετραγωνικού σφάλματος ( $MSE(\hat{\beta})$ ) του παραγόμενου εκτιμητή  $\hat{\beta}(\mu)$ , που υπολογίζεται από τον τύπο

$$MSE(\hat{\beta}) = E[\|\hat{\beta} - \beta\|^2]$$

και εμφανίζεται στην τελευταία στήλη των πινάκων.

Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι λόγω της κατασκευής του πίνακα σχεδιασμού και συγκεκριμένα αφού οι παράγοντες του  $\mathbf{x}_i \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$ ,  $i = 1, \dots, d$ , η συσχέτιση  $r$  των παραγόντων δίνεται από τον ακόλουθο τύπο, που έχει εκφραστεί με τη βοήθεια νορμών,

$$r = cor(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j}{\|\mathbf{x}_i\| \|\mathbf{x}_j\|}, \quad i, j = 1, \dots, d, \quad i \neq j.$$

Στους Πίνακες που παρουσιάζουμε παρακάτω θεωρούμε ίδια συσχέτιση των παραγόντων ίση με  $r = 0.999$  ή  $r = 0.8$ .

6.3. ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ: ΓΡΑΜΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ

- Συσχέτιση παραγόντων:  $r = 0.999$ .

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	5.9094e-1	2.1902e-2	-	6.1124e-1
	GCV-One	1.6985e-1	6.5967e-4	33.2014	7.9650e-1
	GCV-Two	2.4755e-1	7.8833e-4	27.7828	7.1166e-1
	GCV-One( $e_i$ )	1.5732e-1	6.4923e-4	33.7353	8.9493e-1
	GCV-T1	3.7213e-1	6.4480e-4	33.9671	6.3205e-1
1	Exact GCV	9.8921e-1	2.1828e-2	-	5.2153e-1
	GCV-One	3.5394e-1	6.5243e-4	33.4565	6.3445e-1
	GCV-Two	5.4247e-1	7.7464e-4	28.1783	6.0732e-1
	GCV-One( $e_i$ )	3.1464e-1	6.4788e-4	33.6914	6.9532e-1
	GCV-T1	6.0041e-1	6.4452e-4	33.9819	5.8731e-1

Πίνακας 6.8: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $X_{100 \times 6}$ .

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	4.8973e-1	2.2012e-2	-	5.7386e-1
	GCV-One	1.9091e-1	6.6933e-4	32.8866	6.3990e-1
	GCV-Two	1.6315e-1	7.9069e-4	27.8390	7.1962e-1
	GCV-One( $e_i$ )	1.5732e-1	6.5424e-4	33.6451	7.6961e-1
	GCV-T1	1.9575e-1	6.5123e-4	33.8007	6.1154e-1
1	Exact GCV	7.9510e-1	2.2276e-2	-	4.2876e-1
	GCV-One	3.8709e-1	6.7665e-4	32.9210	4.8686e-1
	GCV-Two	3.3948e-1	7.8507e-4	28.3745	5.2634e-1
	GCV-One( $e_i$ )	3.1464e-1	6.7398e-4	33.0514	5.9400e-1
	GCV-T1	3.4296e-1	6.5760e-4	33.8747	5.1230e-1

Πίνακας 6.9: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $\tilde{X}_{100 \times 7}$ .

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	7.7571e-1	2.2405e-2	-	6.4085e-1
	GCV-One	2.4896e-1	7.0932e-4	31.5866	8.4998e-1
	GCV-Two	3.1470e-1	8.3219e-4	26.9229	8.0412e-1
	GCV-One( $e_i$ )	2.2305e-1	6.9186e-4	32.3837	8.8405e-1
	GCV-T1	4.3276e-1	6.7824e-4	33.0340	7.3860e-1
1	Exact GCV	1.1968	2.2003e-2	-	5.7760e-1
	GCV-One	4.9860e-1	7.2376e-4	30.4010	6.3504e-1
	GCV-Two	6.0885e-1	8.4788e-4	25.9506	6.2630e-1
	GCV-One( $e_i$ )	4.4609e-1	7.1976e-4	30.5699	6.6019e-1
	GCV-T1	8.6180e-1	6.8156e-4	32.2833	6.1625e-1

Πίνακας 6.10: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $X_{200 \times 10}$ .

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	8.2269e-1	2.2978e-2	-	5.8908e-1
	GCV-One	2.5850e-1	7.3364e-4	31.3205	7.4309e-1
	GCV-Two	2.3462e-1	8.4738e-4	27.1165	7.8261e-1
	GCV-One( $e_i$ )	2.4305e-1	7.1754e-4	32.0233	7.5029e-1
	GCV-T1	3.2299e-1	7.1289e-4	32.2322	7.0848e-1
1	Exact GCV	1.0864	2.4547e-2	-	5.0989e-1
	GCV-One	5.6537e-1	7.9805e-4	30.7587	5.2467e-1
	GCV-Two	4.7612e-1	9.0637e-4	27.0828	5.7095e-1
	GCV-One( $e_i$ )	4.9609e-1	7.6773e-4	31.9735	5.6362e-1
	GCV-T1	5.8887e-1	7.6251e-4	32.1924	5.2109e-1

Πίνακας 6.11: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $\tilde{X}_{200 \times 11}$ .

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	1.7715	3.1048e-2	-	7.1281e-1
	GCV-One	5.7176e-1	1.3580e-3	22.8630	7.7552e-1
	GCV-Two	6.1393e-1	1.6853e-3	18.4228	7.6790e-1
	GCV-One( $e_i$ )	4.9975e-1	1.3125e-3	23.6556	7.1332e-1
	GCV-T1	5.1352e-1	1.2928e-3	24.0161	7.6367e-1
1	Exact GCV	1.1616	3.1412e-2	-	4.6203e-1
	GCV-One	1.2054	1.4547e-3	21.5935	4.5642e-1
	GCV-Two	1.0778	1.6780e-3	18.7199	4.5627e-1
	GCV-One( $e_i$ )	9.9950e-1	1.3913e-3	22.5774	4.4783e-1
	GCV-T1	1.0270	1.3852e-3	22.6769	4.4318e-1

Πίνακας 6.12: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $X_{1000 \times 50}$ .

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	1.8936	3.2574e-2	-	5.6198e-1
	GCV-One	6.3770e-1	1.5241e-3	21.3726	6.3129e-1
	GCV-Two	5.4290e-1	1.6693e-3	19.5136	6.6779e-1
	GCV-One( $e_i$ )	5.1823e-1	1.4244e-3	22.8686	6.7509e-1
	GCV-T1	7.1158e-1	1.4119e-3	23.0710	5.9354e-1
1	Exact GCV	1.2869	3.0653e-2	-	4.1756e-1
	GCV-One	1.2892	1.4788e-3	20.7283	4.1266e-1
	GCV-Two	1.0651	1.6059e-3	19.0877	4.1567e-1
	GCV-One( $e_i$ )	1.0275	1.4561e-3	21.0514	4.2801e-1
	GCV-T1	1.1766	1.4214e-3	21.5654	4.0983e-1

Πίνακας 6.13: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $\tilde{X}_{1000 \times 51}$ .



### 6.3. ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ: ΓΡΑΜΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ

- Συσχέτιση παραγόντων:  $r = 0.8$ .

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	3.1543	2.2041e-2	-	5.5065e-2
	GCV-One	3.2712	7.2141e-4	30.5527	5.4415e-2
	GCV-Two	3.5971	8.3102e-4	26.5228	5.3680e-2
	GCV-One( $e_i$ )	3.2199	7.1922e-4	30.6457	5.3107e-2
	GCV-T1	3.1839	7.1885e-4	31.2930	5.4831e-2
1	Exact GCV	6.3403	2.2181e-2	-	1.7219e-2
	GCV-One	6.5940	7.2469e-4	30.6076	1.7213e-2
	GCV-Two	6.5750	8.4031e-4	26.3962	1.7155e-2
	GCV-One( $e_i$ )	6.3087	7.1954e-4	30.8266	1.6540e-2
	GCV-T1	6.3403	7.1901e-4	30.8494	1.7219e-2

Πίνακας 6.14: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $X_{200 \times 10}$ .

$\sigma^2$	Μέθοδος	$\mu$	Χρόνος	SF	$MSE(\hat{\beta})$
0.25	Exact GCV	3.1543	2.2495e-2	-	5.4595e-2
	GCV-One	3.2429	7.3401e-4	30.6467	5.4102e-2
	GCV-Two	3.1913	8.4230e-4	26.7066	5.4389e-2
	GCV-One( $e_i$ )	3.1543	7.2888e-4	30.8624	5.4595e-2
	GCV-T1	3.1543	7.2821e-4	30.8908	5.4595e-2
1	Exact GCV	6.3087	2.2701e-2	-	1.5374e-2
	GCV-One	6.5586	7.3395e-4	30.9299	1.5306e-2
	GCV-Two	6.4671	8.4093e-4	26.9951	1.5331e-2
	GCV-One( $e_i$ )	6.3087	7.3198e-4	31.0131	1.5374e-2
	GCV-T1	6.3087	7.2735e-4	31.2106	1.5374e-2

Πίνακας 6.15: Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού  $\tilde{X}_{200 \times 11}$ .

#### Σύνοψη των αποτελεσμάτων

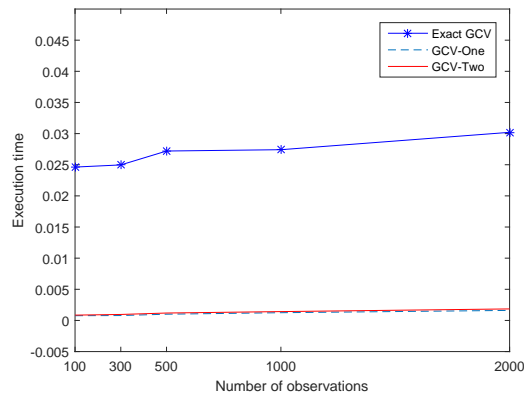
- Η εκτιμώμενη τιμή της ρυθμιστικής παραμέτρου  $\mu$ .  
 Η τιμή του  $\mu$  στην Exact GCV είναι η θέση ελαχίστου της (6.7). Στη GCV-One ή GCV-Two η τιμή του  $\mu$  είναι η θέση ελαχίστου της (5.18) ή της (5.19). Οι τιμές του  $\mu$  διαφέρουν και έτσι εστιάζουμε στην επίτευξη ενός συγκρίσιμου μέσου τετραγωνικού σφάλματος, δηλαδή να επιτύχουμε ένα μέσο τετραγωνικό σφάλμα της ίδιας τάξης με μία εκτίμηση πολύ μικρότερης πολυπλοκότητας (τετραγωνική τάξη) από τον θεωρητικό υπολογισμό (κυβική τάξη).
- Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα  $MSE(\hat{\beta})$ .  
 Είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι σε όλες τις προσομοιώσεις επιτεύχθηκαν

φτηνές λύσεις με  $MSE(\hat{\beta})$  της ίδιας τάξης με τον ακριβή υπολογισμό που δείχνει ότι οι μέθοδοι εκτίμησης μπορεί να είναι προτιμότερες για τον προσδιορισμό της ρυθμιστικής παραμέτρου. Καθώς η διακύμανση αυξάνει το  $MSE(\hat{\beta})$  σε όλες τις μεθόδους μειώνεται.

- Ο χρόνος εκτέλεσης και ο συντελεστής επιτάχυνσης (*speedup factor - SF*).

Παρατηρούμε ότι οι μέθοδοι εκτίμησης είναι πολύ πιο γρήγορες από τον ακριβή υπολογισμό της συνάρτησης GCV (όπως αναμέναμε από τη μείωση της πολυπλοκότητας). Ο SF απεικονίζει αυτή τη διαφορά. Επίσης, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι οι μέθοδοι εκτίμησης που στηρίζονται στις εκτιμήσεις ενός όρου (δηλαδή οι GCV-One, GCV-One( $e_i$ ) και GCV-T1) έχουν τον υψηλότερο συντελεστή επιτάχυνσης (έως και 33% για ορισμένες περιπτώσεις) ενώ η GCV-Two επιτυγχάνει επίσης καλό ρυθμό.

Το γράφημα 6.3 απεικονίζει τον χρόνο εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) ως συνάρτηση του αριθμού των παρατηρήσεων για την επίλυση του προβλήματος των ελαχίστων τετραγώνων. Συγκεκριμένα, θεωρούμε πέντε πίνακες σχεδιασμού  $X$  διάστασης  $n \times 10$  για  $n = 100, 300, 500, 1000, 2000$ . Οι μέθοδοι που απεικονίζονται είναι η Exact GCV και οι μέθοδοι εκτίμησης GCV-One και GCV-Two. Βλέπουμε ότι αυτές οι μέθοδοι έχουν σχεδόν γραμμική συμπεριφορά. Οι GCV-One και GCV-Two επιτυγχάνουν εξαιρετικά γρήγορο χρόνο εκτέλεσης και σε σύγκριση με την Exact GCV έχουν συντελεστή επιτάχυνσης μέχρι 32%.



Σχήμα 6.3: Χρόνος εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) ως συνάρτηση του αριθμού παρατηρήσεων για την επίλυση του προβλήματος των ελαχίστων τετραγώνων.

# Βιβλιογραφία

- [1] E. Androulakis, C. Koukouvinos, K. Mylona, Tuning Parameter Estimation in Penalized Least Squares Methodology, *Communications in Statistics - Simulation and Computation* 40:9, pp. 1444-1457, 2011.
- [2] F. Arrigo, M. Benzi, Edge Modification Criteria for Enhancing the Communicability of Digraphs, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* 37, pp. 443-468, 2016.
- [3] F. Arrigo, M. Benzi, C. Fenu, Computation of generalized matrix functions, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* 37, pp. 836-860, 2016.
- [4] Z. Bai, M. Fahey, G. Golub, Some large-scale matrix computation problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 74, pp. 71-89, 1996.
- [5] Z.-Z. Bai, G. H. Golub, Bounds for the trace of the inverse and the determinant of symmetric positive definite matrices, *Annals Numer. Math.* 4, pp. 29-38, 1997.
- [6] S. Balmand, A. Dalalyan, On estimation of the diagonal elements of a sparse precision matrix, *Electron. J. Statist.* 10 (1), pp. 1551-1579, 2016.
- [7] C. Bekas, A. Curioni, I. Fedulova, Low-cost data uncertainty quantification, *Concurr. Comput.: Practise and Experience* 24, pp. 908-920, 2012.
- [8] C. Bekas, E. Kokiopoulou, Y. Saad, An estimator for the diagonal of a matrix, *Applied Numerical Mathematics* 57, pp. 1214-1229, 2007.
- [9] M. Bellalij, L. Reichel, G. Rodriguez, H. Sadok, Bounding matrix functionals via partial global block Lanczos decomposition, *Applied Numerical Mathematics*, 94, pp. 127-139, 2015.

- [10] M. Benzi, P. Boito, Quadrature rule-based bounds for functions of adjacency matrices, *Linear Algebra Appl.* 433, pp. 637-652, 2010.
- [11] M. Benzi, C. Klymko, Total Communicability as a centrality measure, *Journal of Complex Networks* 1 (2), pp. 124-149, 2013.
- [12] D. Bini, V. Pan, On the evaluation of the eigenvalues of a banded Toeplitz block matrix, *J. of Complexity* 7, pp. 408-424, 1991.
- [13] A. Bouhamidi, R. Enkhbat, K. Jbilou, Conditional gradient Tikhonov method for a convex optimization problem in image restoration, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 255, pp. 580-592, 2014.
- [14] C. Brezinski, Error estimates for the solution of linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.* 21, pp. 764-781, 1999.
- [15] C. Brezinski, P. Fika, M. Mitrouli, Moments of a linear operator on a Hilbert space, with applications to the trace of the inverse of matrices and the solution of equations, *Numer. Linear Algebra Appl.* 19, pp. 937-953, 2012.
- [16] C. Brezinski, P. Fika, M. Mitrouli, Estimations of the trace of powers of positive self-adjoint operators by extrapolation of the moments, *Electron. Trans. Numer. Anal.* 39, pp. 144-155, 2012.
- [17] C. Brezinski, M. Raydan, Cauchy-Schwarz and Kantorovich type inequalities for scalar and matrix moment sequences, *Advances in Computational Mathematics* 26, 71-80, 2007.
- [18] C. Brezinski, G. Rodriguez, S. Seatzu, Error estimates for linear systems with applications to regularization, *Numer. Algo.* 49, pp. 85-104, 2008.
- [19] Brezinski, G. Rodriguez, S. Seatzu, Error estimates for the regularization of least squares problems, *Numer. Algo.* 51, pp. 61-76, 2009.
- [20] J. Chen, M. Anitescu, Y. Saad, Computing  $f(A)b$  via least squares polynomial approximations, *SIAM J. Sci. Comput.* 33, pp. 195-222, 2011.
- [21] P. Craven, G. Wahba, Smoothing noisy data with spline functions, *Numerische Mathematik* 31, pp. 377-403, 1979.
- [22] B. N. Datta, *Numerical Linear Algebra and Applications*, Second Edition, SIAM, 2010.

- 
- [23] T. Davis, Y. Hu, The SuiteSparse Matrix Collection, <https://sparse.tamu.edu/>.
- [24] S.S. Dragomir, New Inequalities of the Kantorovich Type for Bounded Linear Operators in Hilbert Spaces, *Linear Algebra and its Applications* 428, pp. 2750-2760, 2008.
- [25] E. Estrada, D. J. Higham, Network properties revealed through matrix functions, *SIAM Review* 52 (4), pp. 696-714, 2010.
- [26] J. Fan, Y. Liao, H. Liu, An overview on the estimation of large covariance and precision matrices, *Econometrics Journal* 19, C1–C32, 2016.
- [27] C. Fenu, D. Martin, L. Reichel, G. Rodriguez, Network analysis via Partial Spectral Factorization and Gauss Quadrature, *SIAM J. Sci. Comput.* 35 (4), pp. 2046-2068, 2013.
- [28] C. Fenu, L. Reichel, G. Rodriguez, GCV for Tikhonov regularization via global Golub-Kahan decomposition, *Numer. Linear Algebra Appl.* 23, pp. 467-484, 2016.
- [29] C. Fenu, L. Reichel, G. Rodriguez, H. Sadok, GCV for Tikhonov regularization by partial SVD, *BIT Numer. Math.* 57 (4), pp. 1019-1039, 2017.
- [30] M. Fiedler, *Special Matrices and Their Applications in Numerical Mathematics*, Second Edition, Dover, 2008.
- [31] P. Fika, C. Koukouvinos, Stochastic estimates for the trace of functions of matrices via Hadamard matrices, *Communications in Statistics - Simulation and Computation* 46:5, pp. 3941-3503, 2017.
- [32] P. Fika, M. Mitrouli, Estimation of the bilinear form  $y^* f(A)x$  for Hermitian matrices, *Linear Algebra Appl.* 502, pp. 140-158, 2016.
- [33] P. Fika, M. Mitrouli, Fast estimates for the diagonal of the inverse of large scale matrices appearing in applications, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 355, 91-105, 2019.
- [34] P. Fika, M. Mitrouli, P. Roupa, Estimates for the bilinear form  $x^T A^{-1}y$  with applications to linear algebra problems, *Electron. Trans. Numer. Anal.* 43, pp. 70-89, 2014.
- [35] P. Fika, M. Mitrouli, P. Roupa, Estimating the diagonal of matrix functions, *Math. Meth. Appl. Sci.* 41, pp. 1083-1088, 2018.

- [36] S. Gazzola, P. Novati, M. R. Russo, On Krylov projection methods and Tikhonov regularization, *Electron. Trans. Numer. Anal.* 44, pp. 83-123, 2015.
- [37] G. H. Golub, M. Heath, G. Wahba, Generalized Cross-Validation as a method for choosing a good ridge parameter, *Technometrics* 21, pp. 215-223, 1979.
- [38] G. H. Golub, G. Meurant, *Matrices, Moments and Quadrature with Applications*, Princeton University Press, Princeton, 2010.
- [39] G. H. Golub, M. Stoll, A. Wathen, Approximation of the scattering amplitude and linear systems, *Elec. Trans. Numer. Anal.* 31, pp. 178-203, 2008.
- [40] G. H. Golub, R. Underwood, The block Lanczos method for computing eigenvalues, *Mathematical software III*, J. Rice Ed., Academic Press, New York, pp. 361-377, 1977.
- [41] G. H. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, Third Edition, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 1996.
- [42] G. H. Golub, U. Von Matt, Generalized cross-validation for large-scale problems, *Journal of Computational and Graphical Statistics* 6, pp. 1-34, 1997.
- [43] P. C. Hansen, The discrete picard condition for discrete ill-posed problems, *BIT* 30, pp. 658-672, 1990.
- [44] P. C. Hansen, *Rank-deficient and discrete ill-posed problems*, SIAM, Philadelphia, 1998.
- [45] P. C. Hansen, *Regularization Tools Version 4.0 for MATLAB 7.3*, *Numerical Algorithms* 46, pp. 189-194, 2007.
- [46] J. B. Hawkins, A. Ben-Israel, On generalized matrix functions, *Linear and Multilinear Algebra* 1, pp. 163-171, 1973.
- [47] N. J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, SIAM, Philadelphia, USA, 1996.
- [48] N. J. Higham, *Functions of Matrices: Theory and Computation*. SIAM, Philadelphia, PA, USA, 2008.

- [49] M. E. Hochstenbach, L. Reichel, G. Rodriguez, Regularization parameter determination for discrete ill-posed problems, *J. Comput. Appl. Math.* 273, pp. 132-149, 2015.
- [50] R.A. Horn, C.R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1985.
- [51] M. F. Hutchinson, A stochastic estimator of the trace of the influence matrix for Laplacian smoothing splines, *Commun. Statist., Simula.* 19, pp. 433-450, 1990.
- [52] V. Kalantzis, C. Bekas, A. Curioni, E. Gallopoulos, Accelerating data uncertainty quantification by solving linear systems with multiple right-hand sides, *Numer. Algor.* 62, pp. 637-653, 2013.
- [53] Z. Lin, S. Wei, Accelerating Iterations Involving Eigenvalue or Singular Value Decomposition by Block Lanczos with Warm Start, Microsoft Technical Report MSR-TR-2010-162, 2010.
- [54] F. D. Malliaros, V. Megalooikonomou, Expansion properties of Large Social Graphs, *Lecture Notes in Computer Science* 6637, pp. 311-322, 2011.
- [55] M. Mitrouli, P. Roupas, Vector estimates for  $f(A)b$  via extrapolation, *Electron. Trans. Numer. Anal.* 47, pp. 179-196, 2017.
- [56] M. Mitrouli, P. Roupas, Estimates for the generalized cross-validation function via an extrapolation and statistical approach, *Calcolo* 55, pp. 1-25, 2018.
- [57] L. Reichel, G. Rodriguez, S. Seatzu, Error estimates for large-scale ill-posed problems, *Numer. Algorithms* 51 (3), pp. 341-361, 2009.
- [58] L. Reichel, G. Rodriguez, T. Tang, New block quadrature rules for the approximation of matrix functions, *Linear Algebra Appl.* 502, pp. 299-326, 2016.
- [59] L. Reichel, L. N. Trefethen, Eigenvalues and Pseudo-eigenvalues of Toeplitz Matrices, *Linear Alg. Appl.* 162-164, pp. 153-185, 1992.
- [60] G. D. Smith, *Numerical solution of partial differential equations: Finite difference methods*, third edition, Clarendon Press, Oxford, 1985.
- [61] J. Stoer, R. Bulirsch, *Introduction to numerical analysis*, second edition, Springer-Verlag, Berlin 1983.

## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

---

- [62] Z. Strakoš, P. Tichý, On efficient numerical approximation of the bilinear form  $c^*A^{-1}b$ , SIAM J. Sci. Comput. (SISC) 33, pp. 565-587, 2011.
- [63] J. Tang, Y. Saad, A probing method for computing the diagonal of a matrix inverse, Numer. Linear Algebra Appl. 19, pp. 485-501, 2012.
- [64] A. Taylor, D. J. Higham, CONTEST: Toolbox files and documentation. Available at [http://www.mathstat.strath.ac.uk/research/groups/numerical\\_analysis/contest/toolbox](http://www.mathstat.strath.ac.uk/research/groups/numerical_analysis/contest/toolbox).
- [65] W. F. Trench, Numerical solution of the eigenvalue problem for Hermitian Toeplitz matrices, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 10, pp. 135-156, 1989.
- [66] W. F. Trench, Numerical solution of the eigenvalue problem for efficiently structured Hermitian matrices, Linear Algebra Appl. 154-156, pp. 415-432, 1991.
- [67] G. Wahba, Practical approximate solutions to linear operator equations when the data are noisy, SIAM J. Numer. Anal. 14, pp. 651-667, 1977.
- [68] The MATLAB gallery, <http://www.mathworks.com/help/matlab/ref/gallery.html>.
- [69] Γ. Δ. Ακρίβης, Β. Α. Δουγαλής, Εισαγωγή στην αριθμητική ανάλυση, 3η έκδοση, ΠΕΚ, Ηράκλειο, 2009.
- [70] Χ. Δαμιανού, Μ. Κούτρας, Εισαγωγή στη στατιστική, Μέρος Ι, Εκδόσεις Συμμετρία, Αθήνα, 2003.
- [71] Χ. Δαμιανού, Μ. Κούτρας, Εισαγωγή στη στατιστική, Μέρος ΙΙ, Εκδόσεις Συμμετρία, Αθήνα, 1998.



# Κατάλογος Πινάκων

1	Ορισμός των ροπών (moments). . . . .	xii
2.1	Τύποι εκτίμησης τετραγωνικών και διγραμμικών μορφών για οποιονδήποτε αντιστρέψιμο πίνακα. . . . .	59
2.2	Τύποι εκτίμησης των στοιχείων του αντιστρόφου ενός πίνακα μέσω της παρεκβολής. . . . .	59
2.3	Φράγματα για τη βέλτιστη τιμή $\nu_0$ της παραμέτρου της οικογένειας εκτιμήσεων ενός όρου. . . . .	60
2.4	Αριθμητικές πράξεις για την εκτίμηση της τετραγωνικής μορφής $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ . . . . .	61
2.5	Αριθμητικές πράξεις για την εκτίμηση της διγραμμικής μορφής $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ . . . . .	61
2.6	Εκτιμήσεις για την τετραγωνική μορφή $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{x}$ . . . . .	62
2.7	Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων για τις τετραγωνικές μορφές $\mathbf{w}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{w}$ , $\mathbf{z}^T (A^T A)^{-1} \mathbf{z}$ . . . . .	62
2.8	Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων για τη διγραμμική μορφή $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ . . . . .	63
2.9	Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση της διγραμμικής μορφής $\mathbf{x}^T A^{-1} \mathbf{y}$ για συμμετρικούς πίνακες. . . . .	63
2.10	Αύξουσα οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για το στοιχείο $A_{1500,1500}^{-1} = 2.0271e - 1$ , για τον πίνακα Parter διάστασης $p = 3000$ . . . . .	64
2.11	Φθίνουσα οικογένεια εκτιμήσεων ενός όρου για το στοιχείο $A_{1490,1490}^{-1} = -5.7741e - 3$ , για τον πίνακα orsreg1 διάστασης $p = 2205$ . . . . .	65
2.12	Εκτιμήσεις για το διαγώνιο στοιχείο $A_{150,150}^{-1} = 0.3602$ του πίνακα Poisson διάστασης $p = 900$ . . . . .	65
2.13	Εκτιμήσεις για το διαγώνιο στοιχείο $A_{1,1}^{-1} = 0.5702$ του πίνακα Heat flow διάστασης $p = 900$ . . . . .	66
2.14	Εκτιμήσεις για το μη-διαγώνιο στοιχείο $A_{8,9}^{-1} = -1.5030e - 3$ του πίνακα συνδιακύμανσης διάστασης $p = 4000$ . . . . .	66
2.15	Μέσο σχετικό σφάλμα για την εκτίμηση της διαγωνίου του αντιστρόφου πινάκων συνδιακύμανσης διάστασης $p = 4000$ . . . . .	67

## ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

---

2.16	Φράγματα για τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου του πίνακα KMS. . . . .	68
2.17	Φράγματα για τα διαγώνια στοιχεία του αντίστροφου πίνακα. . .	68
3.1	Εκτιμώντας τη διαγώνιο του αντιστρόφου του πίνακα συνδιακύμανσης. . . . .	76
3.2	Βελτίωση της ακρίβειας για την εκτίμηση της διαγωνίου του αντιστρόφου του πίνακα συνδιακύμανσης. . . . .	76
3.3	Εκτιμώντας τη διαγώνιο του εκθετικού του πίνακα Poisson. . . .	77
3.4	Βελτίωση της ακρίβειας για την εκτίμηση της διαγωνίου του εκθετικού του πίνακα Poisson. . . . .	77
3.5	Εκτιμώντας τη διαγώνιο του λογαρίθμου του πίνακα Heat flow. .	78
3.6	Βελτίωση της ακρίβειας για την εκτίμηση της διαγωνίου του λογαρίθμου του πίνακα Heat flow. . . . .	78
4.1	Υπολογιστική πολυπλοκότητα των διανυσματικών εκτιμήσεων για το γινόμενο $f(A)\mathbf{b}$ . . . . .	91
4.2	Υπολογιστική πολυπλοκότητα των διανυσματικών εκτιμήσεων για τη γενική μορφή $X^T f(A)Y$ . . . . .	91
4.3	Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση του $f(A)\mathbf{b}$ χρησιμοποιώντας τη διανυσματική εκτίμηση ενός όρου $\varphi_0$ . . . . .	92
4.4	Εκτιμώντας την ποσότητα $A^{1/2}\mathbf{b}$ για τον πίνακα $A = dw256B$ διάστασης $p = 512$ χρησιμοποιώντας την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων δύο όρων για διάφορες τιμές των παραμέτρων $n$ και $k$ . . . . .	93
4.5	Εκτιμώντας το γινόμενο $\exp(A)\mathbf{b}$ για τον πίνακα Poisson διάστασης $p = 1600$ χρησιμοποιώντας την οικογένεια διανυσματικών εκτιμήσεων τριών όρων για διάφορες τιμές των παραμέτρων $n$ , $k$ και $\ell$ . . . . .	94
4.6	Εκτιμώντας την ποσότητα $f(A)\mathbf{b}$ χρησιμοποιώντας τις οικογένειες διανυσματικών εκτιμήσεων δύο και τριών όρων. . . . .	95
4.7	Σχετικά σφάλματα των διανυσματικών εκτιμήσεων δύο και τριών όρων για το γινόμενο $A^{1/2}\mathbf{b}$ για πίνακες συνδιακύμανσης. . . . .	95
4.8	Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση της μορφής $X^T \exp(A)Y$ με $A$ μη-συμμετρικό πίνακα και $X^T Y = I_2$ . . . . .	96
4.9	Σχετικά σφάλματα για την εκτίμηση της μορφής $X^T f(A)Y$ με $A$ συμμετρικό, θετικά ορισμένο πίνακα και $X^T Y \neq I_2$ . . . . .	97
4.10	Εκτιμώντας το γινόμενο $f(A)\mathbf{b}$ χρησιμοποιώντας τη διανυσματική εκτίμηση τριών όρων και τις προσεγγίσεις με τη μέθοδο Arnoldi. . . . .	98

4.11	Εκτιμώντας την ποσότητα $f(A)\mathbf{b}$ χρησιμοποιώντας τις διανυσματικές εκτιμήσεις δύο και τριών όρων και μία πολυωνυμική προσέγγιση. . . . .	99
4.12	Εκτιμώντας τη μορφή $X^T f(A)Y$ χρησιμοποιώντας τις οικογένειες διανυσματικών εκτιμήσεων δύο, τριών όρων και την αριθμητική ολοκλήρωση block Gauss/anti-Gauss. . . . .	100
5.1	Υπολογιστική πολυπλοκότητα των εκτιμήσεων για την τετραγωνική μορφή $\mathbf{x}^T B^{-q} \mathbf{x}$ , $q = 1, 2$ . . . . .	117
5.2	Παράμετροι που χαρακτηρίζουν τα αριθμητικά παραδείγματα των σχημάτων 5.2, 5.3 και 5.4. . . . .	121
5.3	Προσέγγιση του απόλυτου σφάλματος $ V(\mu) - \tilde{V}_1(\mu) $ μέσω του διαστήματος εμπιστοσύνης για το πρόβλημα δοκιμής Spikes. . . . .	121
6.1	Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων της κεντρικότητας υπογραφήματος του κόμβου 5 του πίνακα ca-GrQc διάστασης $p = 5242$ . . . . .	126
6.2	Σχετικά σφάλματα των εκτιμήσεων της επικοινωνίας υπογραφήματος μεταξύ των κόμβων 1 και 17 του πίνακα pref διάστασης $p = 4000$ . . . . .	127
6.3	Ο χρόνος εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) για τον προσδιορισμό του σημαντικότερου κόμβου σε πραγματικά δίκτυα μεγάλης διάστασης. . . . .	128
6.4	Παράμετροι που χαρακτηρίζουν τα αριθμητικά παραδείγματα των γραφημάτων 6.1 και 6.2. . . . .	132
6.5	Τα προβλήματα δοκιμής Baart και Phillips για διάφορα επίπεδα θορύβου $\sigma$ . . . . .	133
6.6	Το πρόβλημα δοκιμής Shaw διάστασης 200 για διάφορα επίπεδα θορύβου $\sigma$ . . . . .	133
6.7	Εκτιμήσεις GCV για το $\mu$ για προβλήματα δοκιμής μεγάλης διάστασης. . . . .	134
6.8	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $X_{100 \times 6}$ . . . . .	139
6.9	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $\tilde{X}_{100 \times 7}$ . . . . .	139
6.10	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $X_{200 \times 10}$ . . . . .	139
6.11	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $\tilde{X}_{200 \times 11}$ . . . . .	140
6.12	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $X_{1000 \times 50}$ . . . . .	140
6.13	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $\tilde{X}_{1000 \times 51}$ . . . . .	140
6.14	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $X_{200 \times 10}$ . . . . .	141
6.15	Αποτελέσματα για πίνακα σχεδιασμού $\tilde{X}_{200 \times 11}$ . . . . .	141

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

---

# Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Η διακριτή συνθήκη Picard για το πρόβλημα δοκιμής Baart. . .	17
5.1	Χρόνος εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) ως συνάρτηση του μεγέθους του προβλήματος για την προσέγγιση της παραμέτρου κανονικοποίησης για το πρόβλημα δοκιμής Tomo. . . . .	119
5.2	Ελαχιστοποίηση της ακριβούς συνάρτησης GCV για το πρόβλημα χωρίς θόρυβο (αριστερό γράφημα) και με θόρυβο (δεξί γράφημα) για το πρόβλημα δοκιμής Baart. . . . .	119
5.3	Ελαχιστοποίηση της εκτίμησης ενός όρου για το πρόβλημα χωρίς θόρυβο (αριστερό γράφημα) και με θόρυβο (δεξί γράφημα) για το πρόβλημα δοκιμής Baart. . . . .	120
5.4	Ελαχιστοποίηση της εκτίμησης δύο όρων για το πρόβλημα χωρίς θόρυβο (αριστερό γράφημα) και με θόρυβο (δεξί γράφημα) για το πρόβλημα δοκιμής Baart. . . . .	120
6.1	Λύση του προβλήματος δοκιμής Tomo με τη χρήση των εκτιμήσεων ενός και δύο όρων. . . . .	131
6.2	Λύση του προβλήματος δοκιμής Heat με τη χρήση των εκτιμήσεων ενός και δύο όρων. . . . .	132
6.3	Χρόνος εκτέλεσης (σε δευτερόλεπτα) ως συνάρτηση του αριθμού παρατηρήσεων για την επίλυση του προβλήματος των ελαχίστων τετραγώνων. . . . .	142