



Technische Universiteit Delft
Faculteit Elektrotechniek, Wiskunde en Informatica
Delft Institute of Applied Mathematics

Reconstructie van de aardkorst met tomografie
(Reconstruction of the earth's crust by tomography)

Verslag ten behoeve van het
Delft Institute for Applied Mathematics
als onderdeel ter verkrijging

van de graad van

BACHELOR OF SCIENCE
in
TECHNISCHE WISKUNDE

door

THEA VUIK

Delft, Nederland
Juni 2010

Copyright © 2010 door Thea Vuik. Alle rechten voorbehouden.



BSc verslag TECHNISCHE WISKUNDE

**“Reconstructie van de aardkorst met tomografie”
(Reconstruction of the earth’s crust by tomography)**

THEA VUIK

Technische Universiteit Delft

Begeleider

Dr.ir. M.B. van Gijzen

Overige commissieleden

Dr. K. Dekker

Prof.dr.ir. A.W. Heemink

Dr. J.G. Spandaw

Juni 2010

Delft

Inhoudsopgave

1	Inleiding	6
1.1	Onderzoeksvraag	6
1.2	Plan van aanpak	7
2	Modelbeschrijving	8
3	Kleinste kwadratenoplossing met minimale norm	10
4	Testprobleem	12
4.1	Singuliere waardenontbinding	14
4.1.1	Onverstoord	14
4.1.2	Verstoord	18
4.1.3	Foutanalyse singuliere waardenontbinding	20
4.2	Tikhonov regularisatie	24
4.2.1	Foutanalyse Tikhonov regularisatie	27
4.3	ART	29
4.3.1	Toepassing	31
4.4	Vergelijking methoden	34
5	Toepassingen	36
5.1	Probleem 1: onverstoord	36
5.1.1	Singuliere waardenontbinding	36
5.1.2	Tikhonov	36
5.1.3	ART	37
5.2	Probleem 1: verstoord	38
5.2.1	Singuliere waardenontbinding	38
5.2.2	Tikhonov	39
5.2.3	ART	39
5.3	Probleem 2: onverstoord	40
5.3.1	Singuliere waardenontbinding	40
5.3.2	ART	40
5.4	Probleem 2: verstoord	40
5.4.1	Singuliere waardenontbinding	41
5.4.2	ART	41
5.5	Probleem 3: onverstoord	42
5.5.1	Singuliere waardenontbinding	42
5.5.2	Tikhonov	42

5.5.3	ART	43
5.6	Probleem 3: verstoord	44
5.6.1	Singuliere waardenontbinding	44
5.6.2	Tikhonov	44
5.6.3	ART	44
5.7	Vergelijking methoden	46
6	Conclusie	47
7	Dankwoord	48
8	Appendix	50
8.1	Testprobleem: gebruikte programma's	50
8.1.1	Singuliere waardenontbinding	50
8.1.2	Foutanalyse singuliere waardenontbinding	52
8.1.3	Tikhonov regularisatie	53
8.1.4	Voorwaarde L-curve	54
8.1.5	ART	55
8.1.6	plotsol.m	56
8.2	Toepassingen: gebruikte programma's	57
8.2.1	tomography.m	57
8.2.2	sing.m	58
8.2.3	tikhonov.m	59
8.2.4	art.m	59
8.2.5	plotsol.m	60

Hoofdstuk 1

Inleiding

Bij de zoektocht naar olie, gas en steenkool is het onderzoek naar de opbouw van de aardkorst van groot belang. De structuur van de aardkorst kan bepaald worden met behulp van seismische tomografie. Het woord tomografie is afgeleid van de Griekse woorden *tomos* (plak, (door)sneide) en *graphos* (figuur). Seismische tomografie is een methode om een doorsnede van een ontoegankelijk oppervlak te bepalen met behulp van seismische data (projecties). Een projectie is in dit geval een meetbare grootheid die een functie is van de fysische eigenschappen van het gebied. Een bekend voorbeeld van een medische toepassing is het gebruik van röntgenstraling om een beeld te vormen van het inwendige van een lichaam. Meer informatie over toepassingen is te vinden in Lehmann [1].

De structuur van de aardkorst wordt onderzocht met behulp van metingen die verricht worden als er energiepulsen (drukgolven) door een gebied gaan. Deze energiepulsen kunnen op verschillende manieren ontstaan. Lehmann beschrijft het gebruik van twee boorgaten: de een bevat seismische bronnen (explosieven), de ander ontvangers. In ons onderzoek wordt gebruik gemaakt van aardbevingen die op grote diepte plaatsvinden. Hierbij gaan we ervan uit dat de voortplantingsrichting van de druggolven bekend is (berekend met stralentheorie). De ontvangers meten de aankomsttijden van de energiepulsen voor een aantal bevingen en op een aantal verschillende plaatsen op het aardoppervlak. Op deze manier kan de golfvoortplantingssnelheid in discrete gridpunten van de aarde bepaald worden. Omdat de seismische snelheid afhangt van allerlei eigenschappen (zoals dichtheid, samendrukbaarheid en poreusheid), is het nu mogelijk om informatie over de structuur van de aarde te verkrijgen.

Een groot probleem is dat er in werkelijkheid veel onzekerheden zijn. Zo is niet precies bekend waar en wanneer een beving plaatsvindt; worden er meetfouten gemaakt en is de preciese voortplantingsrichting van een straal onbekend.

De vraag die opspeelt is: 'Op welke manier kunnen golfvoortplantingssnelheden bepaald worden aan de hand van door ruis verstoorde metingen?'

1.1 Onderzoeksvraag

De onderzoeksvraag die in dit verslag onderzocht zal worden is:

Op welke manier kunnen golfvoortplantingssnelheden bepaald worden aan de hand van door ruis verstoorde metingen?

Hiertoe worden drie mogelijke methoden onderzocht:

- Singuliere waardenontbinding;
- Tikhonov regularisatie;
- ART (iteratieve methode).

Nadat de werking van iedere methode is bekeken, zullen de drie methoden vergeleken worden. De methoden worden zowel op onverstoorde als op verstoorde problemen toegepast, om te kijken in hoeverre de invloed van ruis onderdrukt kan worden.

1.2 Plan van aanpak

In het vervolg van dit verslag wordt eerst ingegaan op een wiskundige beschrijving van bovenstaand probleem (zie hoofdstuk 2). In dit hoofdstuk wordt een model opgesteld dat gebruikt wordt om een oplossing te vinden. In hoofdstuk 3 wordt ingegaan op de wiskundige techniek van singuliere waardenontbinding. Dit is één van de methoden die gebruikt zal worden om een oplossing te bepalen. In hoofdstuk 4 staat een testprobleem centraal waarvan de oplossing bekend is. Hierdoor is het mogelijk om verschillende methoden (singuliere waardenontbinding, Tikhonov regularisatie en ART) met elkaar te vergelijken. Het is nu ook mogelijk om ruis aan de metingen toe te voegen, waardoor gekeken kan worden in hoeverre de drie methoden ruis onderdrukken. Tenslotte wordt in hoofdstuk 5 ingegaan op drie extra problemen, waarvan de echte oplossing niet bekend is. Ook hierbij worden de drie beschikbare methoden met elkaar vergeleken.

Hoofdstuk 2

Modelbeschrijving

Het doel van tomografie is om aan de hand van gemeten projecties (sommen van interne grootheden) de verdeling van deze grootheden te vinden. In het geval van seismische tomografie wordt de reistijd van een drukgolf gemeten. De gezochte functie is de golfvoortplantingssnelheid in het onderzoeksgebied.

Nolet ([2], [4]) werkt een wiskundige beschrijving van dit probleem uit. De reistijd van een beving is afhankelijk van de snelheid $c(\mathbf{r})$ en de geometrie van de straal. De onbekende snelheid $c(\mathbf{r})$ wordt nu bepaald aan de hand van m reistijdmetingen aan het aardoppervlak:

$$T_i = \int_{S_i} \frac{ds}{c(\mathbf{r})}; \quad i = 1, \dots, m.$$

Door de bolsymmetrische eigenschappen van het aardoppervlak is het mogelijk een startmodel te maken, waarin de waarde van $c(\mathbf{r})$ voorspeld wordt door $c_0(\mathbf{r})$. $c_0(\mathbf{r})$ is dus de geschatte golfvoortplantingssnelheid op ieder punt $\mathbf{r}$. De verwachte reistijd T_i^0 is dan gelijk aan

$$T_i^0 = \int_{S_i^0} \frac{ds}{c_0(\mathbf{r})},$$

waarbij S_i^0 de baan van de straal in het startmodel is. We definiëren de afwijkende reistijd nu als

$$\delta T_i = T_i - T_i^0 = \int_{S_i} \frac{ds}{c} - \int_{S_i^0} \frac{ds}{c_0} \approx \int_{S_i^0} \left(\frac{1}{c} - \frac{1}{c_0} \right) \approx - \int_{S_i^0} \frac{\delta c(\mathbf{r})}{c_0(\mathbf{r})^2} ds, \quad (2.1)$$

waarbij $\delta c = c - c_0$. Om deze vergelijkingen handzaam te kunnen formuleren, verdeelt Nolet de aarde in een grid van n cellen. Vervolgens wordt h_i gedefinieerd als:

$$h_i(\mathbf{r}) = \begin{cases} v_i^{-1/2} & \text{als } \mathbf{r} \text{ in cel } i, \\ 0 & \text{elders,} \end{cases}$$

waarbij $v_i = \int_{\text{cel } i} dV$ het volume van cel i is. Hierbij wordt h_i dimensieloos verondersteld. Als de cellen niet overlappen, dan blijkt dat de functies $h_i(\mathbf{r})$ een orthonormale verzameling vormen:

$$\int_V h_i(\mathbf{r}) h_j(\mathbf{r}) dV = \delta_{ij}. \quad (2.2)$$

Aangenomen wordt dat een benadering voor de snelheidsverstoring $\delta c(\mathbf{r})$ gevonden wordt door:

$$\delta c(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^n \gamma_k h_k(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Merk op dat $\{\gamma_k\}_{k=1}^n$ een gediscretiseerde verzameling van δc is: γ_k is de snelheidsverstoring in gridcel k . Dan moet gelden dat

$$\int_V \delta c(\mathbf{r}) h_i(\mathbf{r}) dV = \int_V \sum_{k=1}^n \gamma_k h_k(\mathbf{r}) h_i(\mathbf{r}) dV.$$

De eindige som en de integraal kunnen verwisseld worden, zodat

$$\int_V \delta c(\mathbf{r}) h_i(\mathbf{r}) dV = \sum_{k=1}^n \gamma_k \int_V h_k(\mathbf{r}) h_i(\mathbf{r}) dV.$$

Uit (2.2) volgt nu dat

$$\int_V \delta c(\mathbf{r}) h_i(\mathbf{r}) dV = \sum_{k=1}^n \gamma_k \delta_{ki} = \gamma_i,$$

zodat zo goed mogelijk aan (2.3) voldaan wordt als

$$\gamma_k = \int_V \delta c(\mathbf{r}) h_k(\mathbf{r}) dV.$$

De onbekende $\delta c(\mathbf{r})$ wordt aan de hand van de metingen bepaald uit γ_k . Hierbij worden vergelijkingen (2.1) en (2.3) samengenomen:

$$\delta T_i = \sum_{k=1}^n - \int_{S_i^0} \frac{1}{c_0(\mathbf{r})^2} \gamma_k h_k(\mathbf{r}) ds = \sum_k A_{ik} \gamma_k,$$

waarbij

$$A_{ik} = - \int_{S_i^0} \frac{h_k(\mathbf{r})}{c_0(\mathbf{r})^2} ds. \quad (2.4)$$

Er wordt dus gezocht naar γ zodat

$$A\gamma = \delta \mathbf{T}, \quad (2.5)$$

waarbij $\delta \mathbf{T} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ (m is het aantal gemeten reistijden van een beving), $\gamma \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ en $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Aangezien A over het algemeen niet vierkant is ($n \neq m$) en geen volle kolomrang heeft, wordt singuliere waardendecompositie toegepast om de oplossing van dit stelsel te bepalen. In het volgende hoofdstuk wordt ingegaan op de wiskundige details van deze methode.

Hoofdstuk 3

Kleinste kwadratenoplossing met minimale norm

In het vorige hoofdstuk hebben we gezien dat de wiskundige beschrijving van het tomo-
grafieprobleem leidt tot de vergelijking $A\gamma = \delta\mathbf{T}$, zie vergelijking (2.5). In dit hoofdstuk
wordt ingegaan op een methode die gebruikt kan worden om de oplossing te bepalen. Hierbij
wordt gebruik gemaakt van een algemene matrix-vectorvergelijking $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Beschouw de vergelijking $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, waarbij $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, en $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Dit systeem kan
inconsistent zijn: er bestaat dan geen keuze voor $\mathbf{x}$ die perfect aan de vergelijking voldoet.
 $\mathbf{b}$ ligt dan niet in de kolomruimte van A . In de meeste gevallen is $m \gg n$ en hoeft niet te
gelden dat de rang van A gelijk aan n is.

Een inconsistent probleem wordt opgelost door het bijbehorende minimalisatieprobleem op
te lossen:

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|. \quad (3.1)$$

Merk op dat $\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|$ minimaal is als $\mathbf{b} - A\mathbf{x}$ loodrecht op de kolomruimte van A staat
($A^T(\mathbf{b} - A\mathbf{x}) = \mathbf{0}$). De kleinste kwadratenoplossing $\bar{\mathbf{x}}$ voldoet aan de normaalvergelijking
 $A^T A \bar{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}$ [5]. Als de kolommen van A lineair onafhankelijk zijn, dan is $A^T A$ inverteerbaar
en

$$\bar{\mathbf{x}} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}.$$

In plaats van $\mathbf{b}$ wordt nu de projectie van $\mathbf{b}$ op de kolomruimte van A gevonden:

$$\mathbf{p} = A\bar{\mathbf{x}} = A(A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}.$$

Als de kolommen van A niet onafhankelijk zijn, dan is $A^T A$ niet inverteerbaar, en de oplossing
 $\bar{\mathbf{x}}$ niet uniek. Immers, bij een mogelijke oplossing $\mathbf{x}_p$ kan een vector $\mathbf{x}_n$ opgeteld worden
die tot de nulruimte van A behoort ($A\mathbf{x}_n = \mathbf{0}$), zodat geldt: $A(\mathbf{x}_p + \mathbf{x}_n) = A\mathbf{x}_p$. Naast de
voorwaarde zoals gegeven in (3.1) is een extra voorwaarde nodig: $\|\mathbf{x}\|$ moet minimaal zijn,
zodat $\mathbf{x}$ loodrecht op de nulruimte van A staat. We zoeken dus naar $\mathbf{x}$ die voldoet aan:

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\| \quad \text{o.v.v.} \quad \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|. \quad (3.2)$$

De singuliere waardenontbinding wordt gebruikt om deze minimumnorm oplossing te bepalen.

Laat $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ een matrix van rang ν . Dan bestaan er orthogonale matrices $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ en $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$, zodanig dat

$$A = U\Sigma V^T, \quad \text{met} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_\nu & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

waarbij $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ en $\Sigma_\nu = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_\nu)$. Hierbij geldt $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots > 0$. Deze σ_i heten de singuliere waarden van A en worden gegeven door de wortels van de positieve eigenwaarden van $A^T A$ (gelijk aan die van AA^T). Voor de kolommen van U en V geldt:

eerste	ν	kolommen van U :	kolomruimte van A ;
laatste	$m - \nu$	kolommen van U :	nulruimte van A^T ;
eerste	ν	kolommen van V :	kolomruimte van A^T ;
laatste	$n - \nu$	kolommen van V :	nulruimte van A .

Een methode om deze matrices te bepalen is te vinden in Strang, [5]. Met behulp van deze singuliere waardenontbinding wordt de oplossing die voldoet aan (3.2), $\mathbf{x}^+$, nu gegeven door

$$\mathbf{x}^+ = V\Sigma^+ U^T \mathbf{b}, \quad (3.3)$$

waarbij $\Sigma^+ = \begin{pmatrix} \Sigma_\nu^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ [5]. De matrix $A^+ = V\Sigma^+ U^T$ heet de pseudoinverse van A .

De oplossing $\mathbf{x}^+$ zoals gevonden in (3.3) zorgt ervoor dat $\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}^+\|$ en $\|\mathbf{x}^+\|$ minimaal zijn. Een bewijs hiervan is te vinden op [6]. Laat daartoe $\mathbf{z} = V^T \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{z}_2 \end{pmatrix}$, en $\mathbf{c} = U^T \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{pmatrix}$, met $\mathbf{z}_1, \mathbf{c}_1 \in \mathbb{R}^\nu$. Vermenigvuldiging met de orthogonale matrix U^T behoudt lengtes, dus

$$\begin{aligned} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\| &= \|U^T(\mathbf{b} - AVV^T \mathbf{x})\| \\ &= \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Sigma_\nu & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{z}_2 \end{pmatrix} \right\| \\ &= \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 - \Sigma_\nu \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{pmatrix} \right\|. \end{aligned}$$

Hieruit volgt dat de norm van $\mathbf{b} - A\mathbf{x}$ minimaal is als $\mathbf{z}_1 = \Sigma_\nu^{-1} \mathbf{c}_1$, zodat

$$V^T \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \Sigma_\nu^{-1} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{z}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_\nu^{-1} U^T \mathbf{b} \\ \mathbf{z}_2 \end{pmatrix}.$$

Nu geldt $\mathbf{x} = V \begin{pmatrix} \Sigma_\nu^{-1} U^T \mathbf{b} \\ \mathbf{z}_2 \end{pmatrix}$. De lengte van $\mathbf{x}$ is minimaal als $\mathbf{z}_2 = \mathbf{0}$. We vinden dan: $\mathbf{x} = \mathbf{x}^+$, zoals gevonden in (3.3). Dus inderdaad geeft $\mathbf{x}^+$ de minimumnorm oplossing van het stelsel $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

In het volgende hoofdstuk wordt onderzocht in hoeverre de singuliere waardenontbinding van invloed is op het numeriek bepalen van de oplossing. Hiervoor worden met behulp van een testprobleem een aantal eigenschappen van deze methode onderzocht.

Hoofdstuk 4

Testprobleem

Nolet beschrijft in zijn artikel [4] een testprobleem, waarvan de oplossing $\mathbf{x}_{model}$ bekend is. $\mathbf{x}_{model}$ correspondeert met γ zoals afgeleid in hoofdstuk 2: in de vector staat de afwijking van de verwachte snelheid in ieder gridpunt (zie vergelijking 2.5).

Het doel van dit onderzoek is nu te onderzoeken met welke methoden een oplossing $\mathbf{x}_{opl}$ gevonden wordt die zo goed mogelijk lijkt op $\mathbf{x}_{model}$. Omdat $\mathbf{x}_{model}$ bekend is, kan bekeken worden in hoeverre een numerieke methode voldoet.

Het model van de aardkorst bestaat uit een rechthoek van 300 km in de diepte en 600 km in de breedte. Dit deel van de aardkorst wordt in een grid van $10 \times 20 = 200$ cellen verdeeld. Er zijn dus 200 onbekende snelheden die bepaald moeten worden.

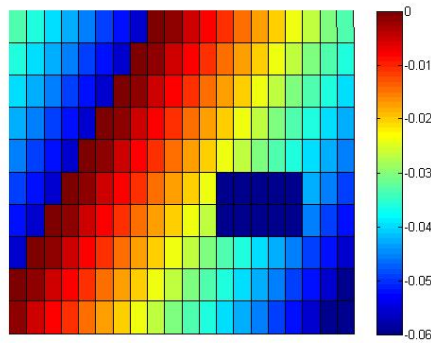
Seismische golven worden veroorzaakt door een bron die zich ver van het gebied bevindt. Elk van de twintig cellen aan het aardoppervlak bevat een seismograaf. We gaan ervan uit dat er twintig stralen door het gebied gaan. Er zijn dus $20 \times 20 = 400$ datapunten: $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{400 \times 1}$ correspondeert met $\delta\mathbf{T}$ in vergelijking 2.5, met

$$b_i = \begin{cases} \text{afwijking verwachte reistijd straal 1, gemeten door seismograaf } i & i = 1, \dots, 20; \\ \text{afwijking verwachte reistijd straal 2, gemeten door seismograaf } i - 20 & i = 21, \dots, 40; \\ \text{enzovoorts.} \end{cases}$$

De doorlooprichting van de straal wordt bekend verondersteld. In matrix $A \in \mathbb{R}^{400 \times 200}$ staan de waarden die afgeleid zijn in vergelijking (2.4).

De oplossing $\mathbf{x}_{model}$ is bij dit testprobleem bekend. In dit geval is het dus mogelijk om de relatieve globale fout van een gevonden oplossing $\mathbf{x}_{opl}$ daadwerkelijk te bepalen (zie vergelijking 4.2).

Een andere manier om te onderzoeken hoe goed $\mathbf{x}_{opl}$ voldoet is door te kijken naar een visualisatie. In figuur 4.1 is te zien hoe $\mathbf{x}_{model}$ er uitziet. We zien in deze figuur het model van de aardkorst, verdeeld in het grid van 200 cellen. De bovenste rij horizontale gridcellen correspondeert met het aardoppervlak, de onderste rij met het diepste deel van het bekeken model.



Figuur 4.1: Afwijking verwachte snelheid in testprobleem

Naast onderzoek naar de gemaakte fout, zal in de volgende paragrafen ook altijd een figuur getoond worden. Het wordt dan duidelijk dat de kwaliteit van het plaatje gelijk opgaat met de gemaakte fout: hoe kleiner de relatieve globale fout is, hoe meer het plaatje lijkt op figuur 4.1.

In de komende paragrafen wordt ingegaan op drie verschillende methoden die gebruikt kunnen worden om een tomografieprobleem op te lossen. Omdat de oplossing van bovenstaand testprobleem expliciet bepaald kan worden, kunnen deze methoden voor dit probleem op toepasbaarheid worden getest. Hierbij wordt in eerste instantie uitgegaan van vector $\mathbf{b}$ zoals ontvangen. Daarna zal aan $\mathbf{b}$ ruis toegevoegd worden, om meetfouten (die in werkelijkheid altijd optreden) te simuleren.

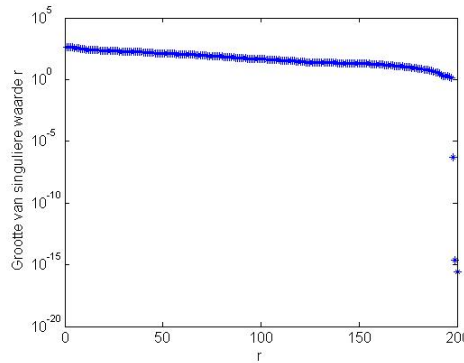
4.1 Singuliere waardenontbinding

4.1.1 Onverstoord

De eerste methode die op het testprobleem toegepast kan worden is het gebruik van de singuliere waardenontbinding, zoals beschreven in hoofdstuk 3. Hierbij zal de gevonden oplossing dus voldoen aan vergelijking (3.2). De singuliere waarden die bij dit probleem behoren zijn weergegeven in figuur 4.2. Merk op dat het gevonden aantal singuliere waarden gelijk is aan 200, dus $\nu = 200$, zie hoofdstuk 3. Voor de kleinste drie singuliere waarden geldt:

$$\sigma_{198} = 4.9781 \cdot 10^{-7}, \sigma_{199} = 2.3319 \cdot 10^{-15} \text{ en } \sigma_{200} = 2.667 \cdot 10^{-16}. \quad (4.1)$$

Het is mogelijk om in plaats van alle 200 singuliere waarden, slechts r singuliere waarden te gebruiken. Dit wordt gedaan door de laatste $200 - r$ singuliere waarden handmatig nul te stellen. Het gevolg is nu dat Σ een effectieve rang r heeft, in plaats van ν . In figuur 4.3 is te zien hoe de oplossing $\mathbf{x}_r^+$ eruit ziet als slechts r singuliere waarden gebruikt worden.



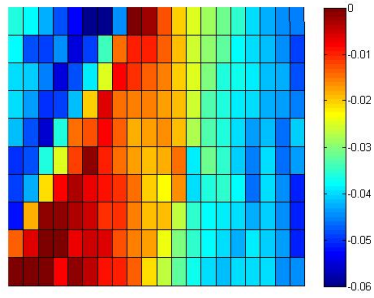
Figuur 4.2: Singuliere waarden van A op logaritmische schaal

Uit figuur 4.3 blijkt dat de best lijkende oplossing niet gevonden wordt door alle 200 singuliere waarden te gebruiken, maar door een kleiner aantal (in dit geval 197) mee te nemen. We zien aan de rechter onderkant van de figuur bij 200 singuliere waarden namelijk een afwijking ontstaan.

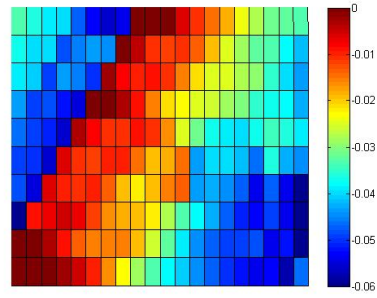
Deze observatie blijkt ook uit een foutanalyse. Hiervoor wordt gekeken naar de fout van de numerieke oplossing $\mathbf{x}_r^+$ bij gebruik van r singuliere waarden ten opzichte van de daadwerkelijke oplossing $\mathbf{x}_{model}$. We definiëren daartoe de norm van de relatieve globale fout e_1 , en de norm van het relatieve residu e_2 , met

$$e_1 = \frac{\|\mathbf{x}_{model} - \mathbf{x}_r^+\|}{\|\mathbf{x}_{model}\|}; \quad e_2 = \frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|} = \frac{\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}_r^+\|}{\|\mathbf{b}\|}. \quad (4.2)$$

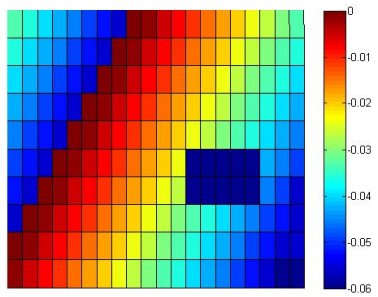
In figuur 4.4 en 4.5 is te zien hoe groot de waarde van e_1 en e_2 is bij gebruik van verschillende aantallen singuliere waarden.



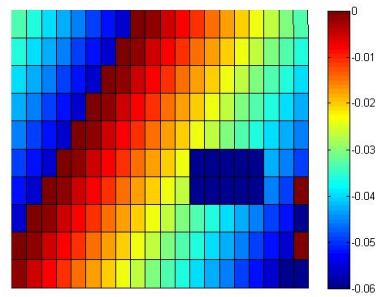
(a) $r = 100$



(b) $r = 150$



(c) $r = 197$



(d) $r = 200$

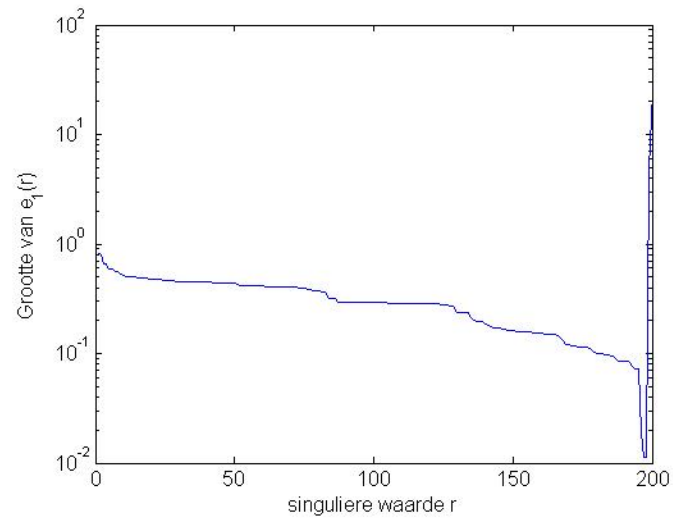
Figuur 4.3: Oplossing $\mathbf{x}_r^+$ bij gebruik van r singuliere waarden

Na foutanalyse blijkt inderdaad dat de kleinste singuliere waarden zorgen voor enorme fouten. Het minimum van e_1 wordt gevonden bij $r = 198$, dan geldt: $e_1 = 0.0112$. Voor e_2 is het minimum gelijk aan $3.0363 \cdot 10^{-13}$, dit wordt gevonden als $r = 197$. Merk op dat de drie kleinste singuliere waarden van A van de orde 10^{-8} en 10^{-16} zijn, zie figuur 4.2. In werkelijkheid zijn deze singuliere waarden exact 0, maar door beperkte machineprecisie wordt hier toch een waarde ongelijk nul aan verbonden. Dit betekent dat deze waarden in Σ^+ van de orde 10^8 respectievelijk 10^{16} zijn en in de gevonden oplossing zullen domineren. Hierdoor wijkt de oplossing $\mathbf{x}_{200}^+$ sterk af van de echte oplossing. In tabel 4.1 zijn de waarden van e_1 en e_2 weergegeven bij gebruik van 197 tot 200 singuliere waarden. In figuren 4.4 en 4.5 is duidelijk te zien hoe een sprong optreedt als de kleinste singuliere waarden gebruikt worden.

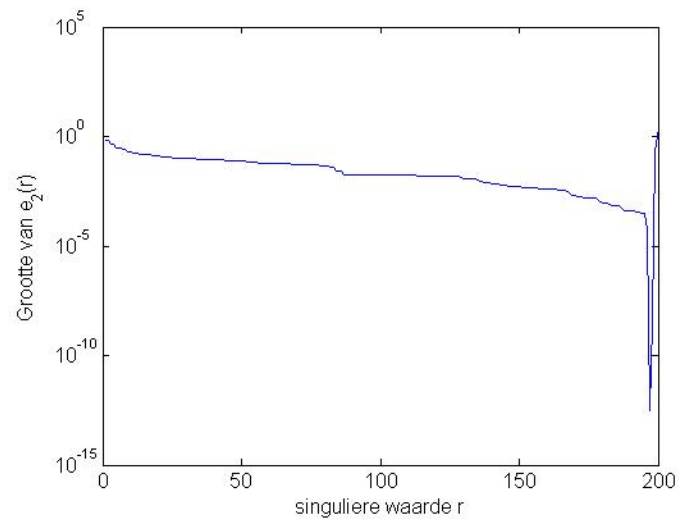
r	e_1	e_2
197	0.0112	$3.0363 \cdot 10^{-13}$
198	0.0112	$3.3896 \cdot 10^{-9}$
199	5.0214	0.2340
200	24.4056	2.5205

Tabel 4.1: Grootte van e_1 en e_2 (zie (4.2)) bij gebruik van r singuliere waarden

In de volgende paragraaf wordt de invloed van ruis op de uitkomsten onderzocht. In werkelijkheid worden er immers altijd meetfouten gemaakt, waardoor de uitkomsten verstoord zijn met ruis. Het is de bedoeling een zo goed mogelijk gelijkend beeld te vinden. De singuliere waardenontbinding is één van de methoden die ruis onderdrukt.



Figuur 4.4: Waarde van e_1 bij gebruik van r singuliere waarden

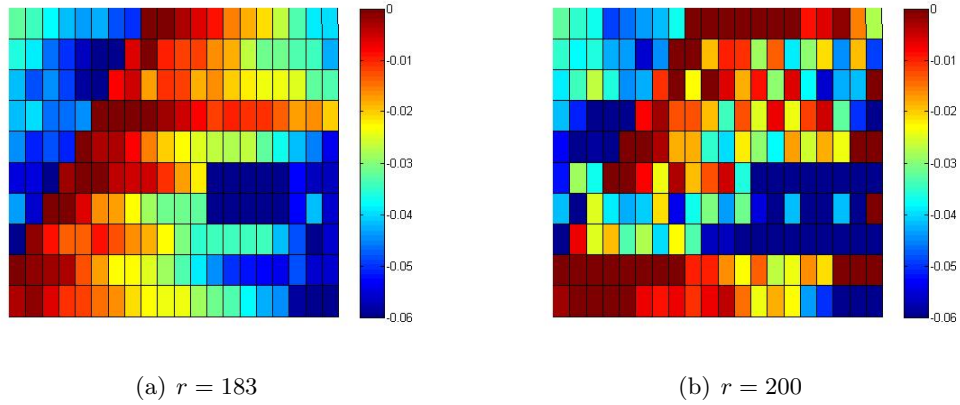


Figuur 4.5: Waarde van e_2 bij gebruik van r singuliere waarden

4.1.2 Verstoord

De invloed van ruis wordt in het model opgenomen door bij de bekende datavector $\mathbf{b}$ een fractie van een vector $\mathbf{n}$ op te tellen. Deze vector bevat normaal verdeelde stochasten. Er geldt dus: $\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{b} + \mathbf{n}$, met $\|\mathbf{n}\| = \epsilon\|\mathbf{b}\|$. Probleem is nu dat de verstoorde vector $\hat{\mathbf{b}}$ niet in de kolomruimte van A zit, zodat er geen exacte oplossingsvector $\mathbf{x}$ gevonden kan worden. In deze paragraaf wordt ingegaan op het gebruik van singuliere waardenontbinding om de invloed van ruis te onderdrukken. In de rest van het hoofdstuk komen andere methoden aan bod die een goede benadering van de oorspronkelijke oplossing $\mathbf{x}_{model}$ geven.

In figuur 4.7 is te zien hoe groot de echte fout e_1 is, afhankelijk van het aantal singuliere waarden dat gebruikt wordt. Het minimum van deze fout wordt gevonden bij gebruik van 183 singuliere waarden, met waarde $e_1 = 0.1326$. De bijbehorende oplossing is te zien in figuur 4.6. Ook een figuur bij gebruik van alle 200 singuliere waarden is te zien.

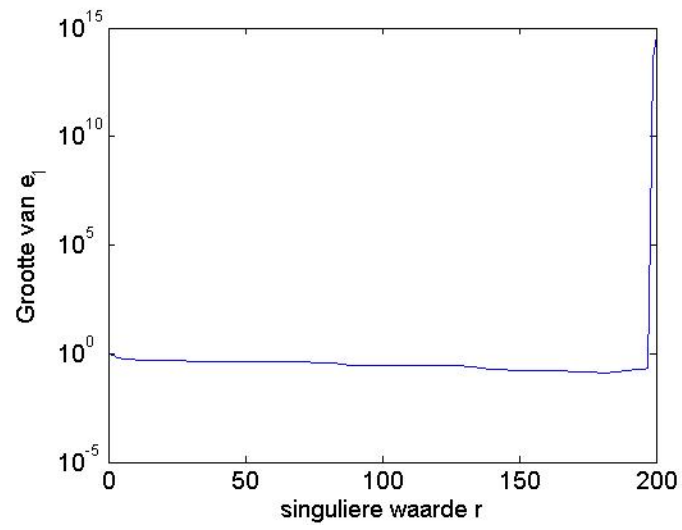


Figuur 4.6: Oplossing bij optreden van ruis ($\epsilon = 0.01$), gebruik van r singuliere waarden

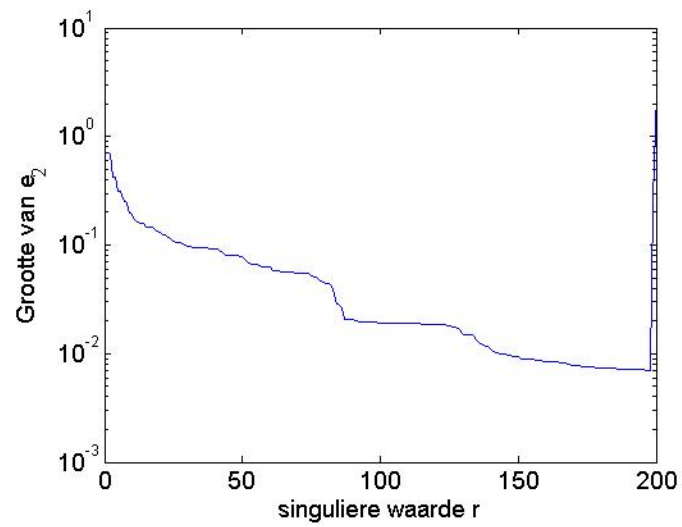
In figuur 4.8 is te zien hoe groot het relatieve residu is, afhankelijk van het aantal gebruikte singuliere waarden. Hier zien we dat de fout snel groeit als de kleinste singuliere waarden ook gebruikt worden. De waarde van e_2 is minimaal als er 198 singuliere waarden gebruikt worden voor de bepaling van de oplossing, met waarde $e_2 = 0.0070$. Omdat de singuliere waardenontbinding altijd zorgt voor minimalisatie van het residu (bewijs in hoofdstuk 3), kan het verschijnsel van foutgroei niet kloppen. De kleinste twee singuliere waarden zijn in werkelijkheid nul, maar worden door beperkte machineprecisie ongelijk nul genomen (orde 10^{-16})(zie ook hoofdstuk 4). We zien in figuur 4.8 inderdaad groei van de fout bij gebruik van de kleinste twee singuliere waarden ongelijk aan nul.

De waarden van e_1 en e_2 bij gebruik van 197 tot 200 singuliere waarden zijn ook te zien in tabel 4.2.

In de volgende paragraaf wordt een nauwkeurige foutanalyse uitgewerkt, waarbij onder andere de sprong in de relatieve globale fout bekeken wordt.



Figuur 4.7: Waarde van e_1 bij verstoring ($\epsilon = 0.01$)



Figuur 4.8: Waarde van e_2 bij verstoring, $\epsilon = 0.01$

r	e_1	e_2
197	0.2064	0.071
198	$4.2177 \cdot 10^5$	0.070
199	$4.2859 \cdot 10^{13}$	0.2610
200	$3.9133 \cdot 10^{14}$	2.6296

Tabel 4.2: Grootte van e_1 en e_2 bij gebruik van r singuliere waarden, verstoring $\epsilon = 0.01$

4.1.3 Foutanalyse singuliere waardenontbinding

In deze paragraaf wordt ingegaan op de grootte van de relatieve globale fout, die bij gebruik van de singuliere waardenontbinding optreedt. Deze uitwerking is zowel voor het onverstoorte als voor het verstoorte probleem toepasbaar.

We weten dat

$$\mathbf{b} = A\mathbf{x}_{model} = U\Sigma V^T \mathbf{x}_{model}. \quad (4.3)$$

Laat $\mathbf{v}_i$ de i -de kolom van V zijn en definieer dat $\mathbf{v}_i^T \mathbf{x}_{model} = \alpha_i \in \mathbb{R}$, dan kunnen we vergelijking (4.3) schrijven als

$$\mathbf{b} = \sum_{i=1}^m \sigma_i \alpha_i \mathbf{u}_i,$$

waarbij $\mathbf{u}_i$ de i -de kolom van U is. Merk op dat, bij gebruik van r singuliere waarden, alleen $\sigma_1, \dots, \sigma_r$ ongelijk aan nul zijn, zodat $\mathbf{b}$ vereenvoudigt tot:

$$\mathbf{b} = \sum_{i=1}^r \sigma_i \alpha_i \mathbf{u}_i.$$

Stel nu dat $\mathbf{b}$ verstoord is met een ruisvector $\mathbf{n} = \sum_{i=1}^m (\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i$, waarbij $\mathbf{u}_i$ ($i = 1 \dots m$) een orthonormale kolom van U is.

Nu volgt dat de bijbehorende verstoorte vector $\hat{\mathbf{b}}$ geschreven kan worden als

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{b}} &= \sum_{i=1}^r \sigma_i \alpha_i \mathbf{u}_i + \sum_{i=1}^m (\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i \\ &= \sum_{i=1}^r (\sigma_i \alpha_i + \mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i + \sum_{i=r+1}^m (\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i. \end{aligned}$$

Als, uitgaand van $\hat{\mathbf{b}}$, een oplossing $\mathbf{x}_r^+$ aan de hand van singuliere waardenontbinding bepaald wordt (gebruik van r singuliere waarden), dan volgt:

$$\mathbf{x}_r^+ = V\Sigma^+ U^T \hat{\mathbf{b}} \quad (4.4)$$

$$= V\Sigma^+ U^T \left(\sum_{i=1}^r (\sigma_i \alpha_i + \mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i + \sum_{i=r+1}^m (\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i \right). \quad (4.5)$$

Merk op dat $\sigma_i^+ = 0$ als $i > r$. Daarnaast kunnen we de orthogonaliteit van U gebruiken. Vergelijking (4.5) is nu gelijk aan:

$$\mathbf{x}_r^+ = \sum_{i=1}^r \frac{\sigma_i \alpha_i + \mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i. \quad (4.6)$$

Omdat $\alpha_i \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i \alpha_i = \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^T \mathbf{x}_{model}$, volgt dat $\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{v}_i = \mathbf{x}_{model}$. Dit invullen in (4.6) geeft:

$$\mathbf{x}_r^+ = \mathbf{x}_{model} + \sum_{i=1}^r \frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i - \sum_{i=r+1}^n \alpha_i \mathbf{v}_i. \quad (4.7)$$

Uit vergelijking (4.7) volgt een aantal conclusies.

We weten dat $\alpha_i = \mathbf{v}_i^T \mathbf{x}_{model}$. De vectoren $\mathbf{v}_i^T$ corresponderen met de kolommen van V , waarvoor geldt dat de eerste ν kolommen van V corresponderen met de kolomruimte van A^T , en de laatste $n - \nu$ kolommen met de nulruimte van A (zie hoofdstuk 3). Dus volgt: als $\mathbf{x}_{model}$ loodrecht op de nulruimte van A staat, dan is $\alpha_i = \mathbf{v}_i^T \mathbf{x}_{model} = 0$ voor alle $i > \nu$. Als er daarnaast geen ruis optreedt, dan geldt dat $\mathbf{x}_r^+ = \mathbf{x}_{model}$ voor alle $r > \nu$. Het is dan dus mogelijk de exacte oplossing met behulp van singuliere waardenontbinding te vinden. In ons geval wordt de relatieve globale fout zonder ruis (zie figuur 4.4 en tabel 4.1) nooit nul, dus $\mathbf{x}_{model}$ heeft componenten in de nulruimte van A . De laatste term in vergelijking (4.7) correspondeert dus met een afwijking als gevolg van de componenten van $\mathbf{x}_{model}$ in de nulruimte van A .

Het is mogelijk om een meer specifieke foutanalyse te maken. Uit vergelijking (4.7) volgt:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_r^+ - \mathbf{x}_{model}\| &= \left\| \sum_{i=1}^r \frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i - \sum_{i=r+1}^n \alpha_i \mathbf{v}_i \right\| \\ &= \left\| V \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{u}_1^T \mathbf{n}}{\sigma_1} \\ \vdots \\ \frac{\mathbf{u}_r^T \mathbf{n}}{\sigma_r} \\ -\alpha_{r+1} \\ \vdots \\ -\alpha_n \end{pmatrix} \right\|. \end{aligned}$$

Omdat de orthogonale matrix V lengtebehoudend is, volgt nu dat bij optreden van ruis geldt:

$$\|\mathbf{x}_r^+ - \mathbf{x}_{model}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^r \left(\frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i} \right)^2 + \sum_{i=r+1}^n \alpha_i^2}. \quad (4.8)$$

Ook in deze vergelijking correspondeert de eerste term met de fout die optreedt door ruis, en de tweede term met de fout die optreedt door componenten van $\mathbf{x}_{model}$ in de nulruimte van A .

Merk op dat zonder optreden van ruis toch een verstoring in het rechterlid ontstaat als gevolg van beperkte machineprecisie ($\epsilon = 10^{-16}$). Als de singuliere waarden niet te klein worden, dan mag de ruisterm toch verwaarloosd worden. Dan volgt dat de afwijking van de verwachte oplossing $\mathbf{x}_{model}$ in het onverstoorte geval gelijk is aan

$$\|\mathbf{x}_r^+ - \mathbf{x}_{model}\| = \sqrt{\sum_{i=r+1}^n \alpha_i^2}.$$

Dus volgt dat

$$e_1(r) = \frac{\sqrt{\sum_{i=r+1}^n \alpha_i^2}}{\|\mathbf{x}_{model}\|},$$

mits singuliere waarde r niet te klein is. Immers, in dat geval gaat de ruis door beperkte machineprecisie wèl een rol spelen.

Toepassen op het testprobleem zonder ruis geeft dat e_1 inderdaad aan bovenstaande vergelijking voldoet, behalve voor $r = 199$ en $r = 200$. In die gevallen heeft de ruisterm immers veel invloed, omdat door een zeer kleine singuliere waarde gedeeld wordt.

Tenslotte is het mogelijk om te kijken naar de relatie tussen $e_1(r)$ en $e_1(r+1)$. Hierdoor is het mogelijk om een uitspraak te doen over het verloop van figuren (4.4) en (4.7). Er geldt:

$$\frac{e_1(r+1)}{e_1(r)} = \frac{\|\mathbf{x}_{r+1} - \mathbf{x}_{model}\|}{\|\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_{model}\|} \quad (4.9)$$

$$= \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{r+1} \left(\frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i}\right)^2 + \sum_{i=r+2}^n \alpha_i^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^r \left(\frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i}\right)^2 + \sum_{i=r+1}^n \alpha_i^2}} \quad (4.10)$$

$$= \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^r \left(\frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i}\right)^2 + \sum_{i=r+1}^n \alpha_i^2 + \left(\frac{\mathbf{u}_{r+1}^T \mathbf{n}}{\sigma_{r+1}}\right)^2 - \alpha_{r+1}^2}{\sum_{i=1}^r \left(\frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i}\right)^2 + \sum_{i=r+1}^n \alpha_i^2}} \quad (4.11)$$

$$= \sqrt{1 + \frac{\left(\frac{\mathbf{u}_{r+1}^T \mathbf{n}}{\sigma_{r+1}}\right)^2 - \alpha_{r+1}^2}{\sum_{i=1}^r \left(\frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}}{\sigma_i}\right)^2 + \sum_{i=r+1}^n \alpha_i^2}}. \quad (4.12)$$

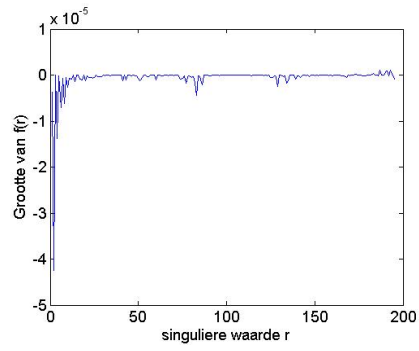
Merk op dat geldt:

$$e_1(r+1) > e_1(r) \Leftrightarrow f(r) = \left(\frac{\mathbf{u}_{r+1}^T \mathbf{n}}{\sigma_{r+1}}\right)^2 - \alpha_{r+1}^2 > 0.$$

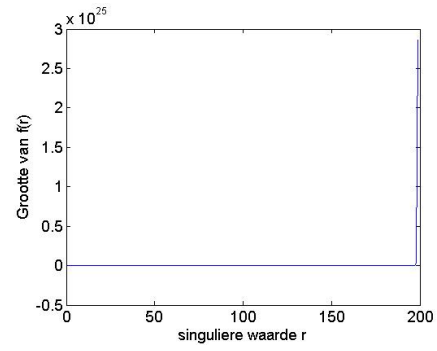
In figuur 4.9 is te zien hoe de functie f eruit ziet. Inderdaad blijkt e_1 toe te nemen als bovenstaande functie positief is.

Voor het testprobleem met ruis (paragraaf 4.1.2) kan de sprong van e_1 bij de kleinste singuliere waarden nu verklaard worden.

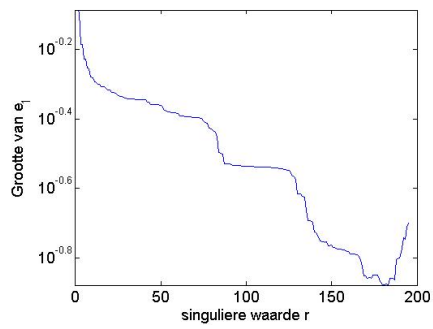
Met behulp van vergelijking (4.1) en bovenstaande afleiding (4.12) verwachten we dat $\frac{e_1(199)}{e_1(198)} \rightarrow \frac{\sigma_{198}}{\sigma_{199}} \rightarrow \frac{4.9781 \cdot 10^{-7}}{2.3319 \cdot 10^{-15}} = \mathcal{O}(10^8)$. En inderdaad, uit tabel 4.2 blijkt dat $\frac{e_1(199)}{e_1(198)} = \frac{4.2859 \cdot 10^{13}}{4.2177 \cdot 10^5} = \mathcal{O}(10^8)!$



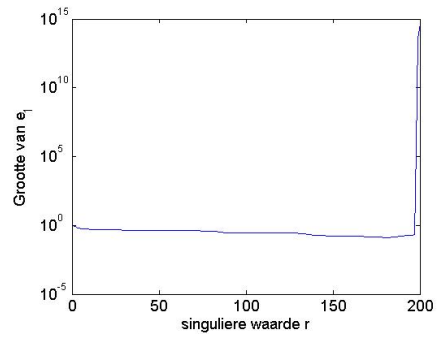
(a) tot $r = 195$



(b) tot $r = 200$



(c) tot $r = 195$



(d) tot $r = 200$

Figuur 4.9: functie $f(r)$ (boven) en relatieve globale fout $e_1(r)$ (onder) met $\epsilon = 0.01$

4.2 Tikhonov regularisatie

Zoals we in paragraaf 4.1.2 gezien hebben, hebben de extreem kleine singuliere waarden een dramatisch effect op de relatieve globale fout (e_1) van de numerieke oplossing als er ruis optreedt in de gemeten variabelen. Naast ruisonderdrukking door deze kleinste singuliere waarden te verwaarlozen (zie paragraaf 4.1.2) is Tikhonov regularisatie een andere manier om fouten in de numerieke oplossing te voorkomen. Een beschrijving van deze methode is te vinden in [3]. In plaats van het stelsel $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$, met $\hat{\mathbf{b}}$ een vector met ruis ($\epsilon = 0.01$), lossen we nu het kleinste kwadratenprobleem

$$\begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

op voor zekere $\lambda \in \mathbb{R}_{>0}$. Het voordeel van deze methode is dat het nu voor iedere waarde van λ ongelijk aan nul mogelijk is om de kleinste kwadratenoplossing te bepalen. Immers, de bijbehorende normaalvergelijkingen voldoen nu aan

$$(A^T A + \lambda^2 I) \mathbf{x} = A^T \hat{\mathbf{b}},$$

waardoor de kleinste kwadratenoplossing $\mathbf{x}_\lambda$ eruit ziet als

$$\mathbf{x}_\lambda = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T \hat{\mathbf{b}}. \quad (4.13)$$

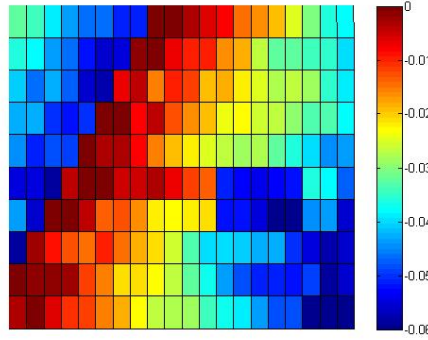
Merk hierbij op dat de matrix $(A^T A + \lambda^2 I)$ inverteerbaar is door de regularisatie; deze oplossing bestaat dus voor iedere waarde van λ ongelijk aan nul.

De gevonden oplossing $\mathbf{x}_\lambda$ voldoet nu automatisch aan de eis dat $\|\hat{\mathbf{b}} - A\mathbf{x}_\lambda\|$ minimaal is (eigenschap kleinste kwadratenoplossing). Naast deze eis zijn we ook op zoek naar de vector $\mathbf{x}_\lambda$ waarvoor $\|\mathbf{x}_\lambda\|$ minimaal is (zie hoofdstuk 3). Door verschillende waarden voor λ te bekijken, is het nu mogelijk de beste oplossing te vinden.

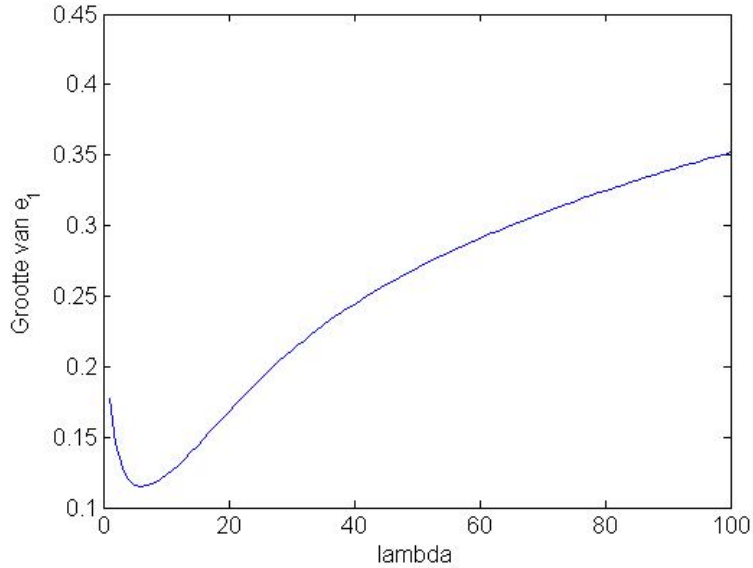
Daarnaast is het mogelijk voor iedere waarde van λ de relatieve globale fout te bepalen (de daadwerkelijke oplossing $\mathbf{x}_{model}$ is immers bekend).

In het onverstoorde geval (zonder ruis) blijkt dat de relatieve globale fout steeds kleiner wordt, naarmate λ kleiner genomen wordt. Hierbij is wel een asymptoot bij $\lambda = 0$, als gevolg van de singuliere waarden die naar nul naderen (voor bewijs, zie paragraaf 4.2.1). De relatieve globale fout bij $\lambda = \frac{1}{1000}$ is gelijk aan $e_1 = 0.0112$.

Vervolgens wordt het gedrag van Tikhonov regularisatie bekeken in het geval van verstoring. In figuur 4.11 is de grootte van e_1 te zien, waarbij een verstoring $\epsilon = 0.01$ genomen is. De relatieve globale fout is in dit geval minimaal als $\lambda = 6$, met $e_1 = 0.1151$. In figuur 4.10 is te zien hoe de oplossing er uit ziet bij $\lambda = 6$.



Figuur 4.10: Beste oplossing bij Tikhonov regularisatie, $\epsilon = 0.01$, $\lambda = 6$

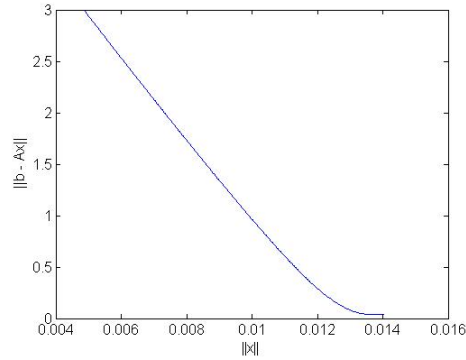


Figuur 4.11: Waarde van e_1 bij Tikhonov regularisatie, $\epsilon = 0.01$

De beste oplossing $\mathbf{x}_\lambda^+$ voldoet aan de eigenschap dat $\|\hat{\mathbf{b}} - A\mathbf{x}_\lambda^+\|$ en $\|\mathbf{x}_\lambda^+\|$ beiden minimaal zijn voor een gegeven waarde van λ (zie hoofdstuk 3). Voor iedere waarde van λ kunnen deze twee waarden bepaald worden.

Behalve het gebruik van de echte oplossing of het residu, kan de geschiktheid van een oplossing dus ook bepaald worden door middel van een zogenaamde L-curve. Deze L-curve plot $\|\hat{\mathbf{b}} - A\mathbf{x}_\lambda\|$ tegen $\|\mathbf{x}_\lambda\|$ als functie van λ . Op deze manier is het mogelijk om op een eenvoudige manier te zien hoe minimalisatie van beide normen mogelijk is. Meer informatie over de L-curve is beschreven door Hansen [9].

In figuur 4.12 is de verhouding te zien tussen $\|\hat{\mathbf{b}} - A\mathbf{x}_\lambda\|$ en $\|\mathbf{x}_\lambda\|$ als $\lambda \in [0, 500]$. Hoe groter λ wordt, hoe kleiner $\|\mathbf{x}_\lambda\|$ is, maar het residu $\|\hat{\mathbf{b}} - A\mathbf{x}_\lambda\|$ groeit (het punt linksboven correspondeert dus met $\lambda = 500$). Als $\lambda \rightarrow 0$, dan gaat $\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}_\lambda\| \rightarrow 0$, maar $\|\mathbf{x}_\lambda\|$ groeit.



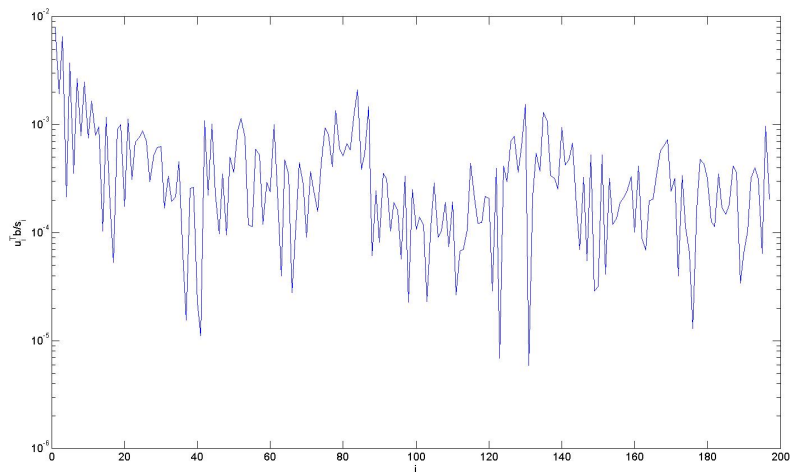
Figuur 4.12: L-curve voor $\lambda \in [0, 500]$

Hansen beschrijft in zijn artikel ([9]) een aantal eigenschappen van de L-curve. Hij stelt dat de L-curve een scherpe hoek (L vorm) heeft als voldaan wordt aan de eigenschap dat voor het onverstoorte rechterlid $\mathbf{b}$ geldt:

De coëfficiënten $|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|$ dalen sneller dan de singuliere waarden σ_i .

Dit is equivalent met de voorwaarde dat de functie $f(i) = \frac{|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|}{\sigma_i}$ dalend moet zijn. In dat geval correspondeert het hoekpunt in de L-curve met de optimale oplossing $\mathbf{x}_\lambda^+$.

In figuur 4.13 is de functie $f(i) = \frac{|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|}{\sigma_i}$ geplot op logaritmische schaal. Het is duidelijk dat er geen enkel patroon in de functie te ontdekken valt. Er is dus niet aan de voorwaarde voldaan: dit is dan ook de reden dat er geen optimale oplossing met behulp van onze L-curve te vinden is.



Figuur 4.13: Voorwaarde om betrouwbare L-curve te vinden: $f(i) = \frac{|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|}{\sigma_i}$ moet dalend zijn

4.2.1 Foutanalyse Tikhonov regularisatie

Ook in het geval van Tikhonov regularisatie is het mogelijk om een foutanalyse te verrichten. Hiervoor passen we weer singuliere waardenontbinding toe: $A = U\Sigma V^T$, zodat $A^T = V\Sigma^T U^T$. In deze afleiding veronderstellen we dat $\lambda > 0$.

Vergelijking (4.13) geschreven kan worden als

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_\lambda &= (V\Sigma^T\Sigma V^T + \lambda^2 I)^{-1} V\Sigma^T U^T \hat{\mathbf{b}} \\ &= (V(\Sigma^T\Sigma + \lambda^2 I)V^T)^{-1} V\Sigma^T U^T \hat{\mathbf{b}} \\ &= V(\Sigma^T\Sigma + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma^T U^T \hat{\mathbf{b}}.\end{aligned}$$

In het onverstoorte geval geldt dat $\mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \sigma_i \alpha_i \mathbf{u}_i = U\Sigma\alpha$, waarbij $\alpha_i = \mathbf{v}_i^T \mathbf{x}_{model}$, zie ook paragraaf 4.1.3. Als $\mathbf{b}$ wel verstoord is met ruisvector $\mathbf{n}$, dan volgt dat we kunnen schrijven:

$$\hat{\mathbf{b}} = U\Sigma\alpha + \sum_{i=1}^m (\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i,$$

zie ook paragraaf 4.1.3.

Invullen geeft dat

$$\mathbf{x}_\lambda = V(\Sigma^T\Sigma + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma^T U^T \hat{\mathbf{b}} = V(\Sigma^T\Sigma + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma^T (\Sigma\alpha + U^T \sum_{i=1}^m (\mathbf{u}_i^T \mathbf{n}) \mathbf{u}_i). \quad (4.14)$$

Merk op dat we vergelijking (4.14) ook kunnen schrijven als

$$\mathbf{x}_\lambda = V(\Sigma^T\Sigma + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma^T \left(\Sigma\alpha + U^T U \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1^T \mathbf{n} \\ \vdots \\ \mathbf{u}_m^T \mathbf{n} \end{pmatrix} \right).$$

Omdat er slechts maximaal n singuliere waarden bestaan ($A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ met $m \gg n$), volgt dat $\mathbf{x}_\lambda$ als sommatie geschreven kan worden:

$$\mathbf{x}_\lambda = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\sigma_i^2 \alpha_i}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \mathbf{v}_i + \frac{\sigma_i (\mathbf{u}_i^T \mathbf{n})}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \mathbf{v}_i \right).$$

Nu geldt, op dezelfde manier als in paragraaf 4.1.3:

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{x}_\lambda - \mathbf{x}_{model}\| &= \left\| \sum_{i=1}^n \left(\frac{\sigma_i^2 \alpha_i}{\sigma_i^2 + \lambda^2} - \alpha_i + \frac{\sigma_i(\mathbf{u}_i^T \mathbf{n})}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \right) \mathbf{v}_i \right\| \\
&= \left\| \sum_{i=1}^n \left(\frac{-\lambda^2 \alpha_i + \sigma_i(\mathbf{u}_i^T \mathbf{n})}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \right) \mathbf{v}_i \right\| \\
&= \left\| V \begin{pmatrix} \frac{-\lambda^2 \alpha_1 + \sigma_1(\mathbf{u}_1^T \mathbf{n})}{\sigma_1^2 + \lambda^2} \\ \vdots \\ \frac{-\lambda^2 \alpha_n + \sigma_n(\mathbf{u}_n^T \mathbf{n})}{\sigma_n^2 + \lambda^2} \end{pmatrix} \right\| \\
&= \sqrt{\left(\sum_{i=1}^n \left(\frac{-\lambda^2 \alpha_i + \sigma_i(\mathbf{u}_i^T \mathbf{n})}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \right)^2 \right)}.
\end{aligned}$$

Controle geeft dat bovenstaande vergelijking inderdaad voldoet, zowel voor het verstoorde als voor het onverstoorte probleem. Merk op dat λ ervoor zorgt dat er niet meer door nul gedeeld kan worden, waardoor ontzettende groei van de fout niet mogelijk is.

In het onverstoorte geval volgt dat

$$\|\mathbf{x}_\lambda - \mathbf{x}_{model}\| = \lambda^2 \sqrt{\left(\sum_{i=1}^n \left(\frac{\alpha_i}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \right)^2 \right)}.$$

Dit betekent dat de relatieve globale fout in het onverstoorte geval minimaal is als we $\lambda = 0$ zouden kiezen (mits de singuliere waarden niet te klein worden). In dit geval heeft Tikhonov regularisatie dezelfde werking als volledige singuliere waardenontbinding, waarbij alle singuliere waarden ongelijk aan nul worden meegenomen (ν waarden).

Bij het testprobleem zijn de kleinste singuliere waarden zó klein (orde 10^{-16}), dat $\lambda = 0$ niet voor de beste oplossing zorgt.

In hoofdstuk 5 worden problemen beschouwd waar $\lambda = 0$ wel de beste oplossing vertegenwoordigt.

4.3 ART

Een derde manier om het stelsel $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ op te lossen, is door gebruik te maken van een iteratieve methode, om zo in een aantal stappen een goede benadering voor $\mathbf{x}$ te vinden. De methode ART (Algebraic Reconstruction Techniques) is beschreven door Van der Sluis en Van der Vorst [3], Censor [7] en Björk en Elfving [8]. In deze paragraaf wordt ingegaan op het gebruik van deze methode. Vervolgens zal ART toegepast worden op het testprobleem.

Het idee van ART is om de oplossing te vinden door correcties per vergelijking toe te passen, waardoor de oplossing om de beurt perfect aan een vergelijking voldoet. Beschouw het stelsel

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad \text{met} \quad A = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Als we willen voldoen aan de voorwaarden die gesteld zijn in vergelijking (3.2), dan volgt dat moet gelden:

$$\mathbf{x} \perp \text{Nul}(A) \Leftrightarrow \mathbf{x} \in \text{Kol}(A^T).$$

Als we nu aan de i -de vergelijking willen voldoen, dan volgt dat moet gelden dat $\mathbf{x} = c\mathbf{a}_i$, met $c \in \mathbb{R}$.

Invullen in de eis dat $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i$ geeft:

$$\mathbf{a}_i^T (c\mathbf{a}_i) = b_i, \quad \text{zodat} \quad c = \frac{b_i}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_i}.$$

We vinden nu voor $\mathbf{x}$:

$$\mathbf{x} = \frac{b_i}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_i} \mathbf{a}_i.$$

Een andere, meer technische manier om bovenstaande te bewijzen, is door gebruik te maken van de singuliere waardenontbinding. Hiervoor gebruiken we weer dat gezocht wordt naar vector $\mathbf{x}$ die zo goed mogelijk aan de i -de vergelijking van het stelsel voldoet, zodanig dat

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i.$$

Merk op dat de matrix $\mathbf{a}_i^T \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ een singuliere waardenontbinding heeft: $\mathbf{a}_i^T = U\Sigma V^T$, met $U \in \mathbb{R}^{1 \times 1}$, $\Sigma \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ en $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

We weten reeds (zie hoofdstuk 3) dat in dit geval

$$U = \begin{pmatrix} U_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i^T)} & U_{\mathcal{N}(\mathbf{a}_i)} \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad V^T = \begin{pmatrix} V_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i)}^T \\ V_{\mathcal{N}(\mathbf{a}_i^T)}^T \end{pmatrix}.$$

Dus geldt dat

$$\mathbf{a}_i^T = U\Sigma V^T = U_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i^T)} \Sigma_r V_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i)}^T$$

(de bijbehorende gereduceerde singuliere waardenontbinding).

In ons geval is $U \in \mathbb{R}^{1 \times 1}$, dus $U = 1 = U_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i^T)}$ voldoet. Σ_r is de wortel van de positieve eigenwaarde van $\mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_i = \|\mathbf{a}_i\|^2$. Dus $\Sigma_r = \|\mathbf{a}_i\|$.

Om te voldoen aan $\mathbf{a}_i^T = U_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i^T)} \Sigma_r V_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i)}^T = \|\mathbf{a}_i\| V_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i)}^T$, moet nu gelden dat $V_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i)}^T = \frac{\mathbf{a}_i^T}{\|\mathbf{a}_i\|}$.

Nu volgt dat de vector $\mathbf{x}$ die zo goed mogelijk aan de i -de vergelijking voldoet gevonden kan worden met behulp van de pseudo-inverse:

$$\mathbf{x}^+ = V_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i)} \Sigma_r^{-1} U_{\mathcal{R}(\mathbf{a}_i^T)}^T b_i = \frac{\mathbf{a}_i}{\|\mathbf{a}_i\|^2} b_i. \quad (4.16)$$

Deze oplossing kan als beginoplossing genomen worden.

Aan de hand van deze schatting kan een verbetering voor de oplossing gevonden worden door de gevonden $\mathbf{x}^+$ aan te passen aan een andere vergelijking uit het stelsel.

Stel dat een schatting $\mathbf{x}^k$ bekend is. Deze oplossing is over het algemeen niet exact, dus

$$A\mathbf{x}^k = \mathbf{b} - (\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k).$$

Gezocht wordt nu naar een correctie $\Delta\mathbf{x}^k$, zodanig dat bij de volgende iteratie zo goed mogelijk aan de i -de vergelijking voldaan wordt:

$$(A\mathbf{x}^{k+1})_i = (A(\mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x}^k))_i = b_i.$$

Dit kan als $(A\Delta\mathbf{x}^k)_i = (\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k)_i$. Met behulp van uitdrukking (4.16) volgt nu dat we $\mathbf{x}^k$ kunnen verbeteren door te voldoen aan vergelijking i met:

$$\Delta\mathbf{x}^k = \frac{\mathbf{a}_i}{\|\mathbf{a}_i\|^2} (\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k)_i.$$

Vervolgens wordt $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x}^k$ bepaald.

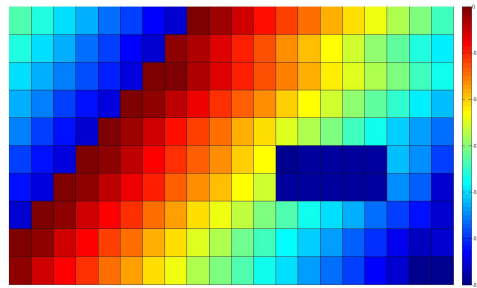
Volgens Van der Sluis, Van der Vorst en Censor ([3], [7]) convergeert ART alleen naar een oplossing van $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ als $\mathbf{b} \in \mathcal{R}(A)$, dus als $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ een exacte oplossing heeft. Dit betekent dat voor ons onverstoorte testprobleem zeker convergentie naar de echte oplossing zal optreden. Als $\mathbf{b}$ door meetonnauwkeurigheden niet in de kolomruimte van A ligt, dan zullen de gevonden iteraten $\mathbf{x}^k$ in de buurt van de echte oplossing blijven schommelen.

In [3] is beschreven dat de eerste iteraties van ART gebruikt worden om een grof beeld van de oplossing te construeren. Hierbij is de invloed van ruis niet zo groot. Pas bij een groter aantal iteraties vindt verfijning van het beeld plaats, waardoor de invloed van ruis naar voren zal komen. Bij toepassing op het verstoorte testprobleem wordt dus verwacht dat de beste oplossing gevonden wordt bij gebruik van een relatief klein aantal iteraties.

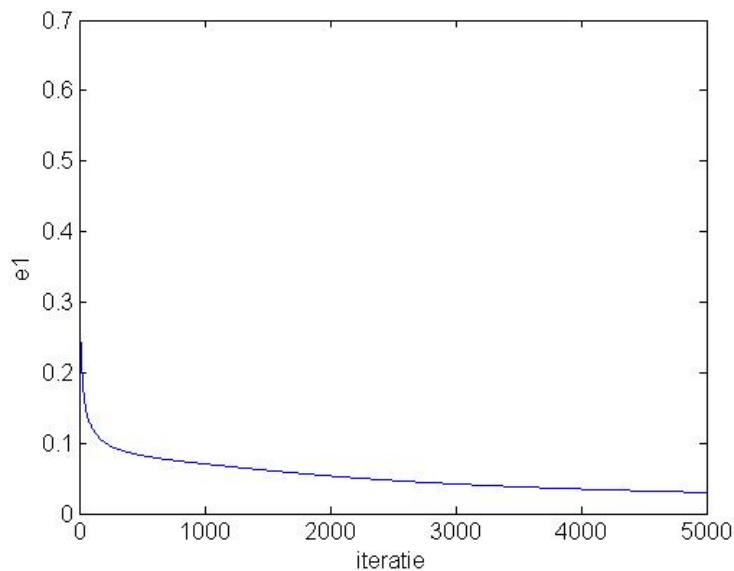
4.3.1 Toepassing

De methode van ART, zoals in de vorige paragraaf beschreven, zal nu op het bekende testprobleem toegepast worden. Hierbij wordt een iteratie gedefinieerd als het vierhonderd maal aanpassen van de schatting voor $\mathbf{x}$, door telkens aan één van de vierhonderd vergelijkingen te voldoen ($A \in \mathbb{R}^{400 \times 200}$). Na afloop van iedere iteratie kan de relatieve globale fout en het relatieve residu bepaald worden.

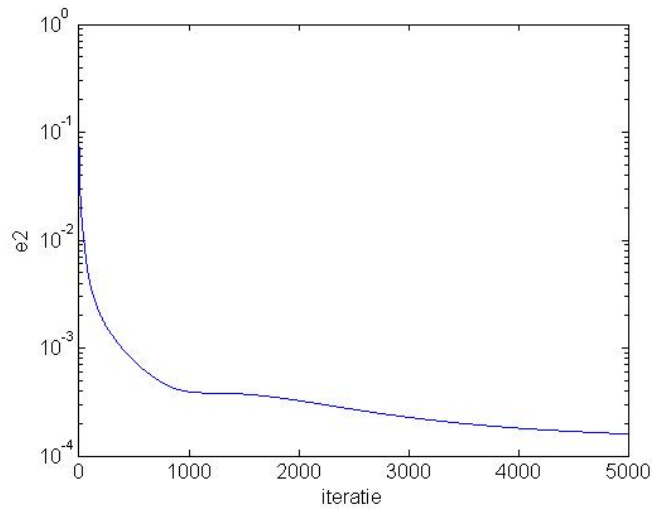
Allereerst is bovenstaande methode, met 5000 iteraties, gebruikt voor het probleem zonder ruis. De oplossing $\mathbf{x}$ na 5000 iteraties is te zien in figuur 4.14. We zien dat dit goed overeenkomt met de daadwerkelijke oplossing (figuur 4.1). In figuur 4.15 is te zien hoe de relatieve globale fout e_1 zich gedraagt. Het minimum wordt nu gevonden bij 5000 iteraties, met waarde $e_1 = 0.0300$. Daarnaast staat in figuur 4.16 het relatieve residu. We zien dat beide fouten blijven afnemen als het aantal iteraties toeneemt, zoals voorspeld in [3].



Figuur 4.14: Oplossing na 5000 iteraties, onverstoord testprobleem

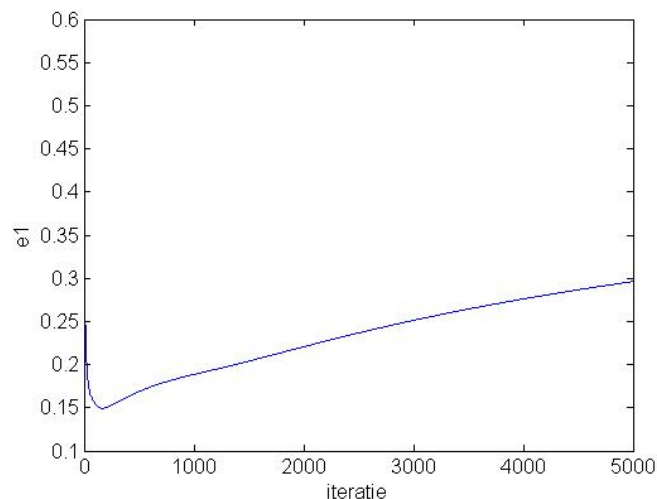


Figuur 4.15: Relatieve globale fout bij toepassing van ART op onverstoord testprobleem

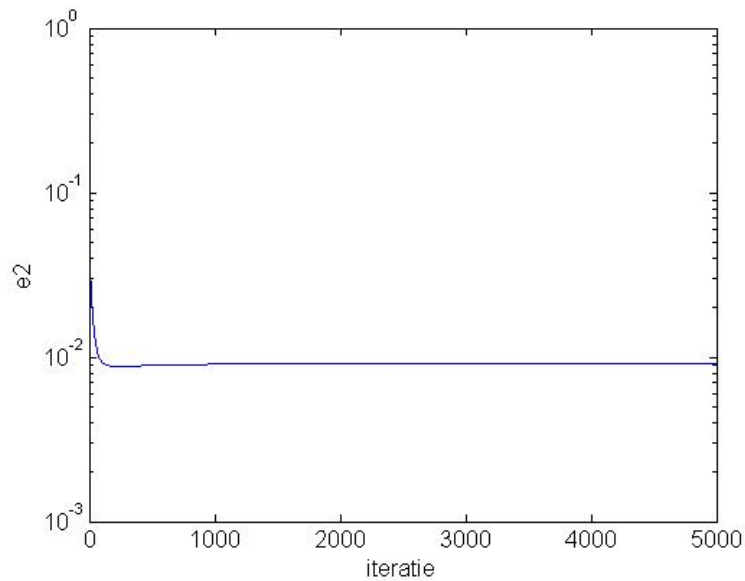


Figuur 4.16: Relatief residu bij toepassing van ART op onverstoord testprobleem

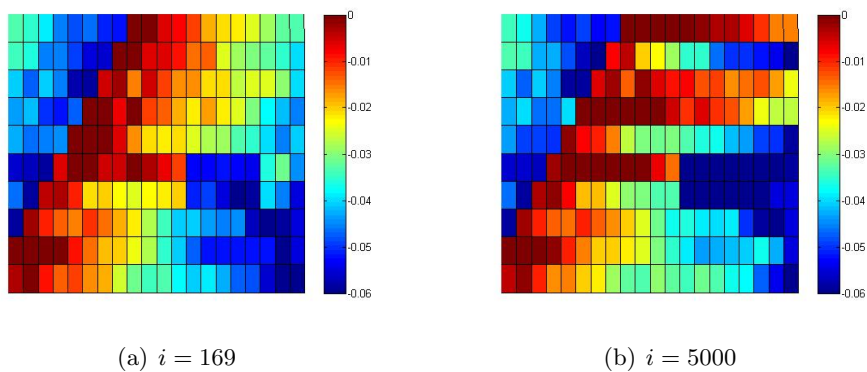
Vervolgens kan ART toegepast worden op het testprobleem waarbij een verstoring van $\epsilon = 0.01$ is toegebracht aan het rechterlid $\hat{\mathbf{b}}$. In figuur 4.17 is de grootte van de relatieve globale fout e_1 te zien. We zien dat deze fout een minimum heeft na 169 iteraties, met $e_1 = 0.1495$. In figuur 4.19 is deze beste oplossing te vinden. Bij een groter aantal iteraties stijgt de relatieve globale fout. Evenzo staat in figuur 4.18 de grootte van het relatieve residu bij verstoring. Ook hier is duidelijk te zien dat er geen convergentie naar de echte oplossing plaatsvindt. De oplossing na 5000 iteraten is te zien in figuur 4.19. We zien dat dit nauwelijks lijkt op de daadwerkelijk gezochte oplossing (figuur 4.1).



Figuur 4.17: Relatieve globale fout bij toepassing van ART op verstoord testprobleem, $\epsilon = 0.01$



Figuur 4.18: Relatief residu bij toepassing van ART op verstoord testprobleem, $\epsilon = 0.01$



Figuur 4.19: Oplossing na i iteraties op verstoord testprobleem, $\epsilon = 0.01$

In de volgende paragraaf worden de drie bekeken methoden (singuliere waardenontbinding, Tikhonov regularisatie en ART) met elkaar vergeleken aan de hand van het testprobleem. Hierbij worden de relatieve globale fouten met elkaar vergeleken. De grootte van e_1 is een betrouwbare maat voor de validiteit van de gevonden oplossing.

4.4 Vergelijking methoden

In voorliggende paragrafen zijn drie methoden (singuliere waardenontbinding, Tikhonov regularisatie, ART) beschreven die de invloed van ruis onderdrukken. Ons doel is om de relatieve globale fout tussen de exacte oplossing en de gevonden oplossing te minimaliseren. In tabel 4.3 zijn de drie methoden voor verschillende ruisniveaus vergeleken. Hierbij is de minimale waarde van e_1 genoteerd. In figuur 4.20 is beter te zien hoe de methoden zich met elkaar verhouden.

ϵ	1	2	3
0	0.0112	0.0112	0.0300
10^{-6}	0.0112	0.0112	0.0180
10^{-5}	0.0112	0.0112	0.0182
10^{-4}	0.0114	0.0114	0.0201
10^{-3}	0.0235	0.0231	0.0459
10^{-2}	0.1326	0.1151	0.1495
10^{-1}	0.3336	0.3140	0.4470

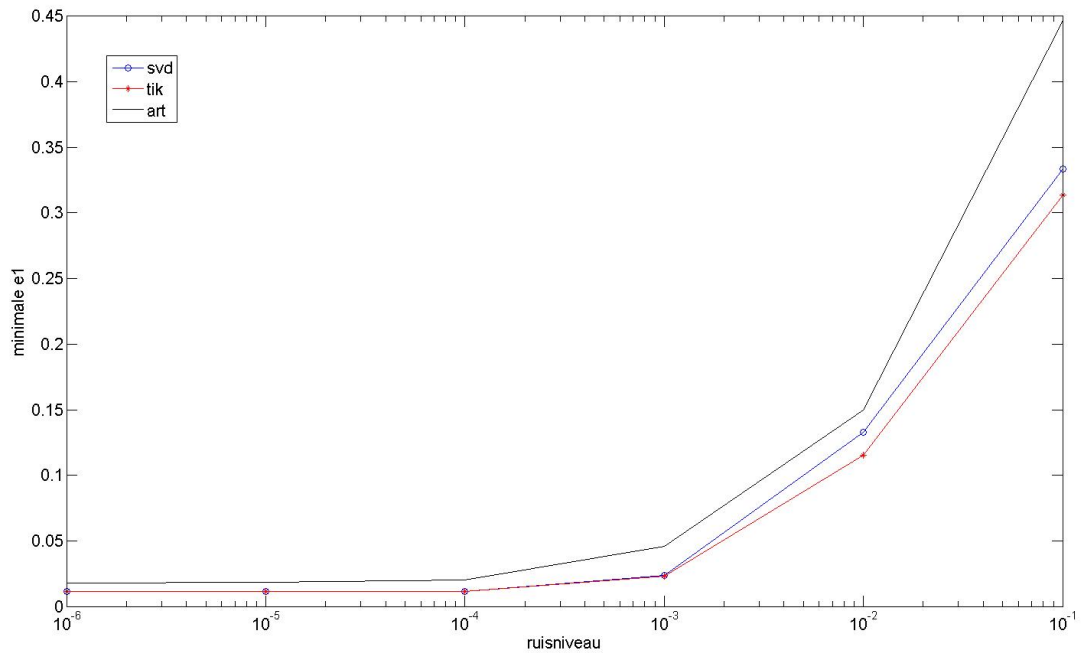
Tabel 4.3: Minimale waarde van e_1 (ruisniveau ϵ) bij gebruik van methode 1 (singuliere waardenontbinding), 2 (Tikhonov regularisatie) of 3 (ART)

Uit de tabel blijkt dat Tikhonov regularisatie het best presteert: het minimum van e_1 is hier zo klein mogelijk. Hierna volgen singuliere waardenontbinding en ART.

Naast vergelijking op het gebied van fouten, is het ook mogelijk om te kijken naar het aantal operaties dat verricht moet worden en de hoeveelheid geheugen die gebruikt wordt bij iedere methode. Onderstaande cijfers zijn afkomstig van Golub en Van Loan, [10], waarbij uitgegaan is van een volle matrix A (rang n).

- Singuliere waardenontbinding: aantal operaties dat verricht wordt is $4mn^2 + 8n^3$. De matrices U en V moeten opgeslagen worden, alsmede de singuliere waarden. Dit zijn dus $m^2 + n^2 + n$ getallen.
- Tikhonov regularisatie: aantal operaties dat per waarde voor λ verricht moet worden is $mn^2 + \frac{n^3}{3}$. Alleen de matrix $A^T A$ moet opgeslagen worden: n^2 getallen.
- ART: aantal operaties om één keer aan alle vergelijkingen te voldoen is $4mn$. Alleen de originele matrix A dient opgeslagen te worden: mn getallen.

Uit bovenstaande opsomming volgt dat ART het minste aantal operaties nodig heeft. Het aantal operaties dat Tikhonov regularisatie nodig heeft hangt af van het aantal waarden λ dat bekeken wordt. Singuliere waardenontbinding heeft een groot aantal operaties nodig. Qua geheugengebruik presteert ART het best, daarna volgt Tikhonov regularisatie. Ook nu is singuliere waardenontbinding het minst voordelig.



Figuur 4.20: Minimale waarde van e_1 bij gebruik van verschillende methoden

Om de beste methode aan te kunnen wijzen, moet dus een keuze gemaakt worden uit de grootte van de fout, de hoeveelheid te verrichten iteraties en de hoeveelheid gebruikt geheugen.

In het volgende hoofdstuk worden andere problemen beschouwd, waarbij de echte oplossing niet bekend is. In dit geval kan dus alleen het relatieve residu bepaald worden, maar het vergelijken van de relatieve globale fout is niet meer mogelijk. Het blijkt dat het relatieve residu niet altijd een goede maat is voor de validiteit van een oplossing (zie paragraaf 5.2.2).

Hoofdstuk 5

Toepassingen

Nadat de theorie aan de hand van een eenvoudig testprobleem bekeken is, worden de methoden toegepast op drie praktijkproblemen, ontvangen van het Vision Lab aan de Universiteit Antwerpen. Dit zijn geen geofysische problemen, maar de wiskundige kenmerken van de problemen komen overeen met die van het testprobleem uit het vorige hoofdstuk. Waarschijnlijk is het gezochte plaatje een gescande afbeelding van Italië, zoals in de volgende figuren herkend kan worden. Merk op dat het in deze problemen dus alleen gaat om de reconstructie van een plaatje.

De echte oplossing van de problemen is niet bekend, zodat alleen aan de hand van het relatieve residu gekeken kan worden in hoeverre de oplossing voldoet. Hierbij bekijken we de problemen eerst zonder ruis op het rechterlid, daarna passen we ruis toe.

5.1 Probleem 1: onverstoord

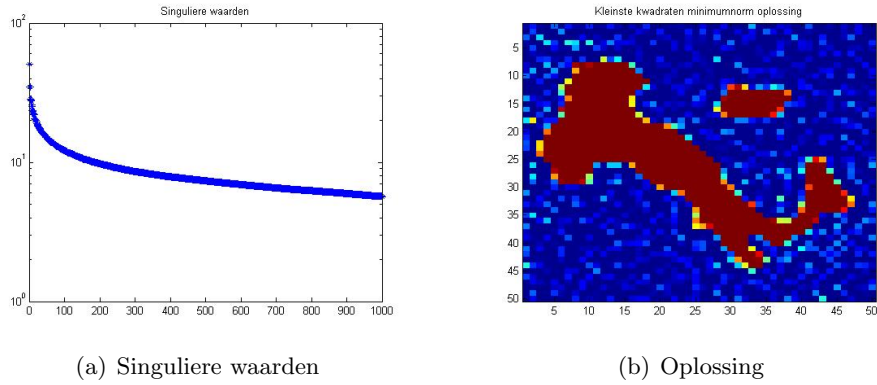
Het eerste probleem betreft een stelsel met $A \in \mathbb{R}^{3750 \times 2500}$ en $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{3750 \times 1}$. In de komende paragrafen worden de verschillende oplossingsmethoden met elkaar vergeleken. Hierbij wordt allereerst een onverstoord rechterlid gebruikt (zoals ontvangen), daarna wordt een verstoring op $\mathbf{b}$ aangebracht. Zonder verstoring blijkt Tikhonov regularisatie het beste plaatje op te leveren (zie paragraaf 5.1.2).

5.1.1 Singuliere waardenontbinding

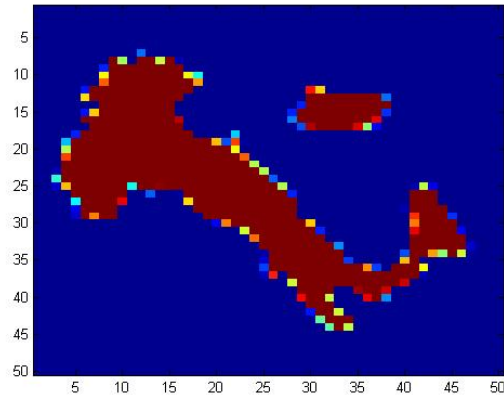
Matrix A heeft in dit geval 2500 singuliere waarden. Aangezien het heel lang duurt om de volledige singuliere waardenontbinding van deze matrix te bepalen, worden alleen de eerste 1000 singuliere waarden bepaald. Een figuur met deze singuliere waarden en de bijbehorende oplossing is te zien in figuur 5.1. Het relatieve residu is in dit geval gelijk aan 0.0206.

5.1.2 Tikhonov

Zoals we in paragraaf 4.2.1 gezien hebben, is het in het onverstoorde geval het handigst om $\lambda = 0$ te kiezen (volledige singuliere waardenontbinding). Inderdaad leidt dit in dit geval tot een zeer heldere oplossing, zie figuur 5.2. Hierbij vinden we relatief residu $3.7499 \cdot 10^{-8}$. Hieruit volgt dat matrix A in dit geval waarschijnlijk geen zeer kleine singuliere waarden heeft (orde machineprecisie), zoals in het testprobleem (zie vergelijking (4.1)).



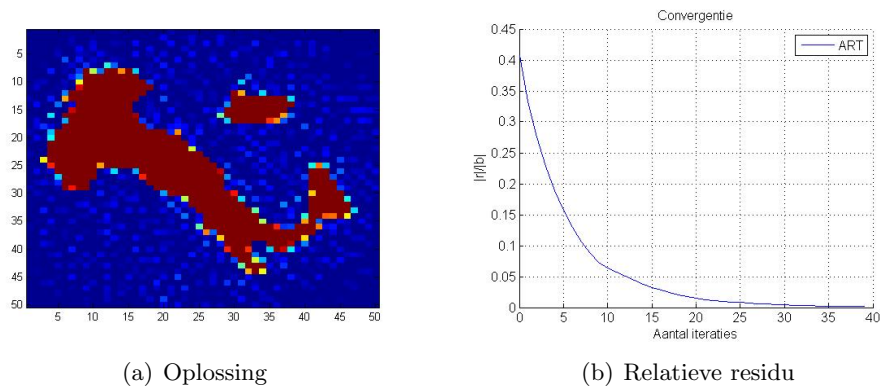
Figuur 5.1: Probleem 1: 1000 singuliere waarden



Figuur 5.2: Probleem 1: Tikhonov regularisatie, $\lambda = 0$

5.1.3 ART

Na veertig iteraties van ART (in één iteratie wordt de hele matrix een keer doorlopen) is het relatieve residu gelijk aan 0.0016. De oplossing en het relatieve residu zijn te zien in figuur 5.3.



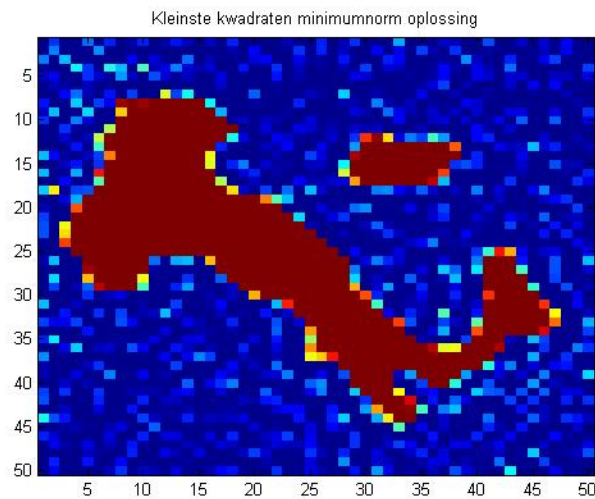
Figuur 5.3: Probleem 1: oplossing en relatief residu na 40 iteraties ART

5.2 Probleem 1: verstoord

De drie methoden kunnen ook met elkaar vergeleken worden bij toepassing van ruis. In dit geval wordt ruisniveau $\epsilon = 0.01$ genomen. Het mooiste plaatje (minst korrelig) wordt gevonden bij Tikhonov regularisatie (zie paragraaf 5.2.2).

5.2.1 Singuliere waardenontbinding

In figuur 5.4 is de oplossing te zien die gevonden wordt bij gebruik van 1000 eigenwaarden. Het relatieve residu is in dit geval gelijk aan 0.0222.



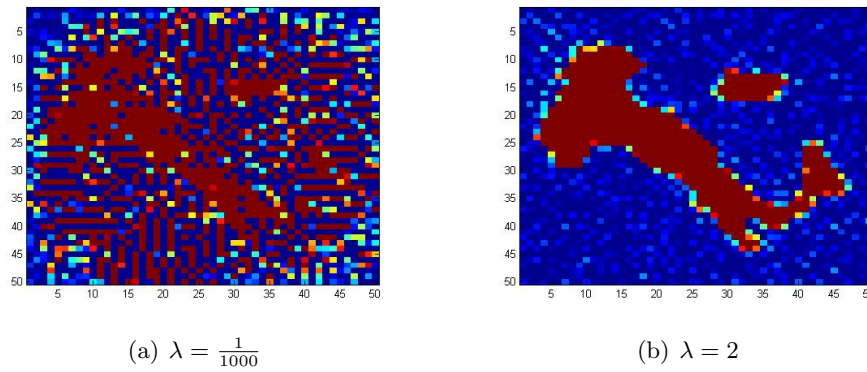
Figuur 5.4: Probleem 1: oplossing met 1000 singuliere waarden, $\epsilon = 0.01$

5.2.2 Tikhonov

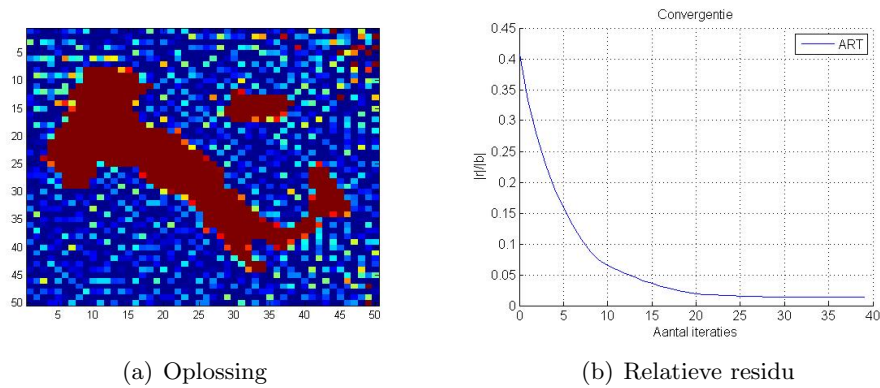
In het geval met ruis is het opvallend dat ook nu het relatieve residu blijft dalen als we λ verkleinen. Dit hoeft niet te betekenen dat het plaatje hierdoor verbetert. In figuur 5.5 is de oplossing te zien voor $\lambda = \frac{1}{1000}$ relatief residu 0.0058 en $\lambda = 2$, met relatief residu 0.0114. We zien dat de oplossing bij $\lambda = 2$ op het oog beter voldoet, ook al is het relatieve residu groter. Het is dus duidelijk dat het relatieve residu eigenlijk geen goede maat is voor de validiteit van de oplossing.

5.2.3 ART

De oplossing en het relatieve residu na toepassing van 40 iteraties van ART zijn te zien in figuur 5.6. Het relatieve residu is nu gelijk aan 0.0133.



Figuur 5.5: Probleem 1: Tikhonov regularisatie, $\epsilon = 0.01$



Figuur 5.6: Probleem 1: oplossing en relatief residu na 40 iteraties ART $\epsilon = 0.01$

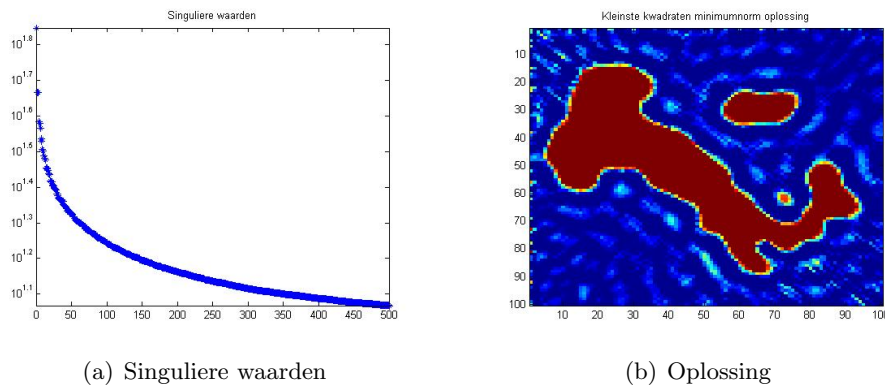
5.3 Probleem 2: onverstoord

Het tweede probleem betreft een stelsel met $A \in \mathbb{R}^{7500 \times 10000}$ en $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{7500 \times 1}$. We zien dat A in dit geval een liggende matrix is, het stelsel is dus onderbepaald. Gevolg hiervan is dat ART bij verstoring opmerkelijke resultaten met zich meebrengt.

Daarnaast is Tikhonov regularisatie niet meer te gebruiken, omdat het geheugen van de computer tekortschiet. Voor dit probleem wordt dus alleen de toepasbaarheid van singuliere waardenontbinding en ART bekeken. In het onverstoorde geval blijkt ART het mooiste plaatje op te leveren (paragraaf 5.3.2).

5.3.1 Singuliere waardenontbinding

De eerste 500 singuliere waarden en de bijbehorende oplossing zijn te zien in figuur 5.7. Het relatieve residu is nu gelijk aan 0.0582. We zien in de oplossing vrij veel lichte kringen, die er niet horen te zijn. Daarnaast is op positie (72,60) een extra 'eiland' te zien, dat daar niet hoort. Het gevonden plaatje is dus niet optimaal.



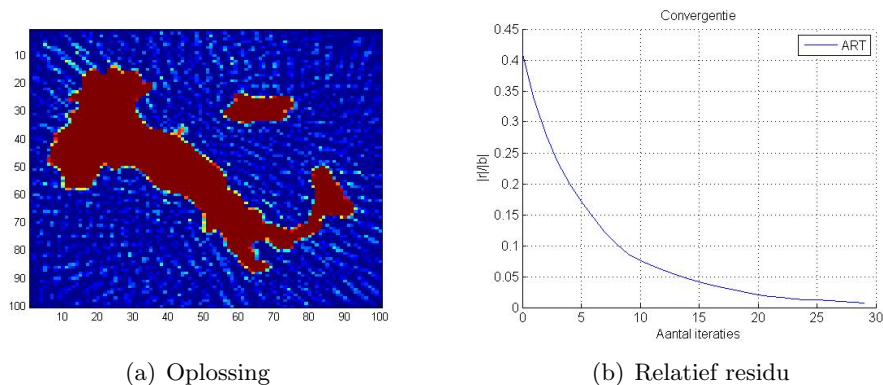
Figuur 5.7: Probleem 2: 500 singuliere waarden

5.3.2 ART

Na dertig iteraties zorgt ART al voor een goede benadering van de oplossing, met relatief residu 0.0073. Figuren van het relatieve residu en de oplossing na dertig iteraties zijn te zien in figuur 5.8.

5.4 Probleem 2: verstoord

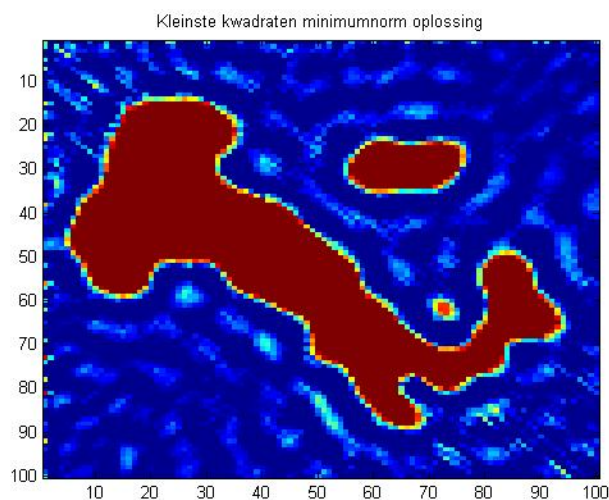
Ook nu wordt ruisniveau $\epsilon = 0.01$ genomen. In de volgende paragrafen worden singuliere waardenontbinding en ART met elkaar vergeleken. ART zorgt hierbij voor opmerkelijke resultaten: de gevonden oplossing blijkt helemaal niet overeen te komen met wat verwacht wordt. Singuliere waardenontbinding zorgt in dit geval dus voor het mooiste plaatje.



Figuur 5.8: Probleem 2: oplossing en relatief residu na 30 iteraties ART

5.4.1 Singuliere waardenontbinding

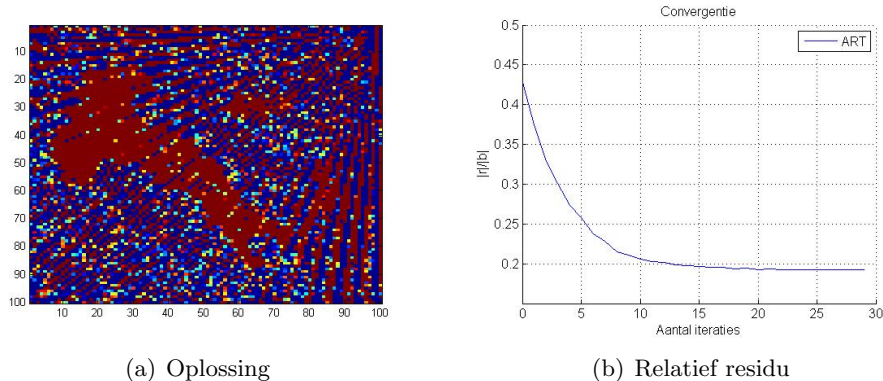
De oplossing bij gebruik van 500 singuliere waarden is te zien in figuur 5.9. Het relatieve residu is nu gelijk aan 0.0589.



Figuur 5.9: Probleem 2: oplossing met 500 singuliere waarden, $\epsilon = 0.01$

5.4.2 ART

Merk op dat $A \in \mathbb{R}^{7500 \times 10000}$ in dit geval een liggende matrix is. Dit heeft grote invloed op de toepassing van ART bij verstoring. In figuren 5.10 zijn de oplossing na 30 iteraties en het relatieve residu te zien. We zien dat er op geen enkele manier convergentie naar de oplossing optreedt. Het relatieve residu is gelijk aan 0.1928.



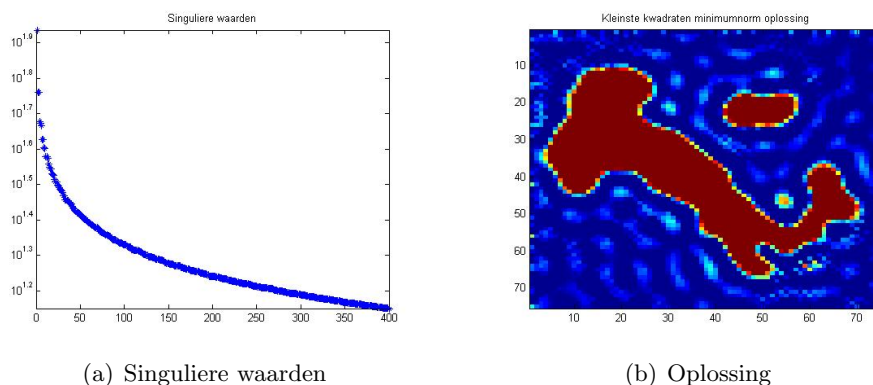
Figuur 5.10: Probleem 2: oplossing en relatief residu na 30 iteraties ART, $\epsilon = 0.01$

5.5 Probleem 3: onverstoord

Het laatste probleem betreft een stelsel met $A \in \mathbb{R}^{11000 \times 5625}$ en $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{11000 \times 1}$. In het onverstoorde geval zorgt Tikhonov regularisatie voor het beste plaatje (paragraaf 5.5.2).

5.5.1 Singuliere waardenontbinding

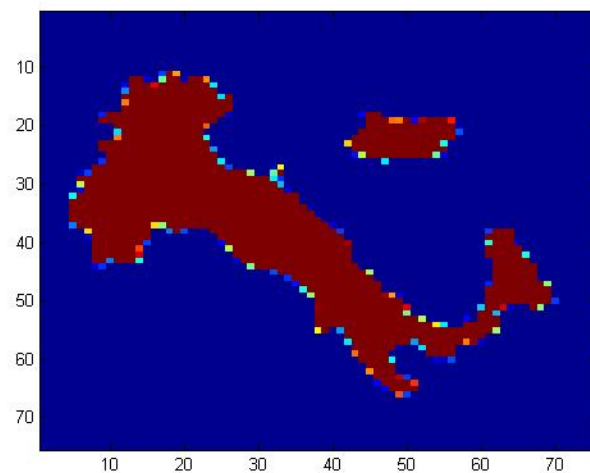
De eerste 400 singuliere waarden en de bijbehorende oplossing is te zien in figuur 5.11. Het relatieve residu is nu gelijk aan 0.0551.



Figuur 5.11: Probleem 3: 400 singuliere waarden

5.5.2 Tikhonov

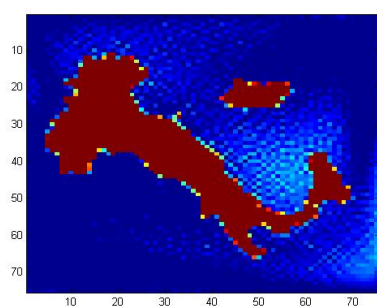
Zoals verwacht levert ook nu de keuze voor $\lambda = 0$ het beste resultaat. In figuur 5.12 is de bijbehorende oplossing te zien, het relatieve residu is in dit geval $6.3092 \cdot 10^{-8}$.



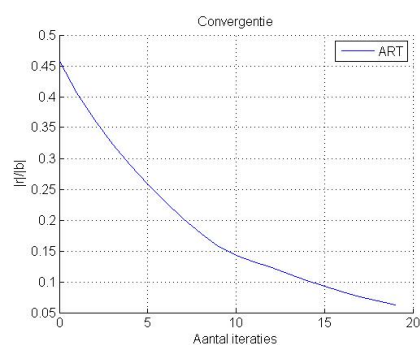
Figuur 5.12: Probleem 3: Tikhonov regularisatie, $\lambda = 0$

5.5.3 ART

Toepassing van ART duurt bij dit probleem erg lang. Na twintig iteraties vinden we figuur 5.13. Het relatieve residu na twintig iteraties is gelijk aan 0.0619. De oplossing is nu minder goed dan bij gebruik van 400 singuliere waarden.



(a) Oplossing



(b) Relatieve residu

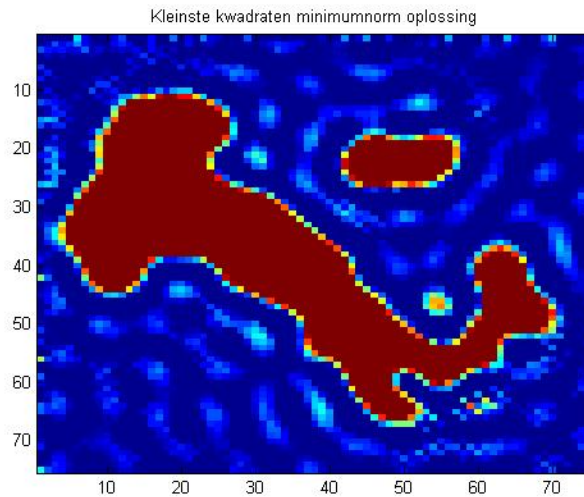
Figuur 5.13: Probleem 3: oplossing en relatief residu na 20 iteraties ART

5.6 Probleem 3: verstoord

Bij een verstoring van $\epsilon = 0.01$ blijkt Tikhonov regularisatie het mooiste plaatje te geven.

5.6.1 Singuliere waardenontbinding

De oplossing bij gebruik van 400 singuliere waarden is te zien in figuur 5.14. Het relatieve residu is nu gelijk aan 0.0559.



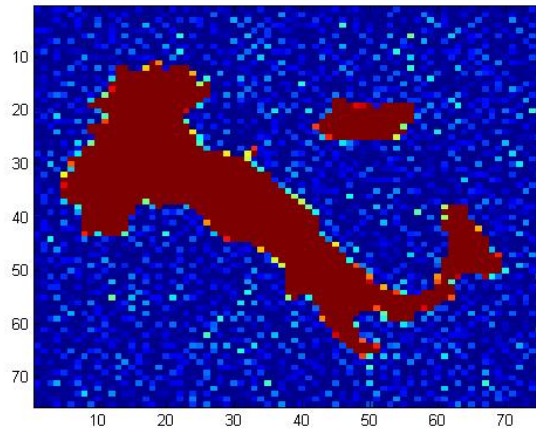
Figuur 5.14: Probleem 3: oplossing met 400 singuliere waarden, $\epsilon = 0.01$

5.6.2 Tikhonov

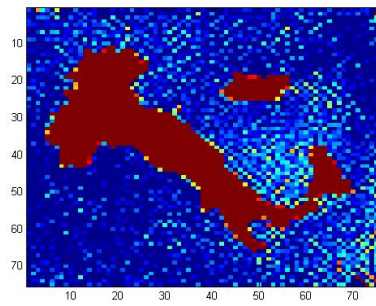
De oplossing bij gebruik van $\lambda = 1$ is te zien in figuur 5.15. Het relatieve residu is dan 0.0074.

5.6.3 ART

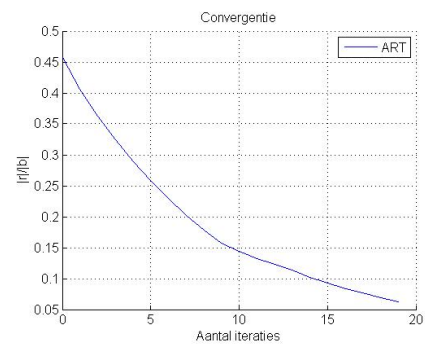
In figuur 5.16 is de oplossing na 20 iteraties en het relatieve residu te zien. Het relatieve residu is ongeveer 0.06.



Figuur 5.15: Probleem 3: Tikhonov regularisatie, $\lambda = 1, \epsilon = 0.01$



(a) Oplossing



(b) Relatieve residu

Figuur 5.16: Probleem 3: oplossing en relatief residu na 20 iteraties ART, $\epsilon = 0.01$

5.7 Vergelijking methoden

Het is mogelijk om de drie methoden met elkaar te vergelijken en de onderdrukking van ruis te onderzoeken. In tabel 5.1 is het relatieve residu te zien bij iedere methode. Bij probleem 2 was Tikhonov regularisatie niet toepasbaar (paragraaf 5.3).

Probleem	Methode	Onverstoord	Verstoord, $\epsilon = 0.01$
1	1000 singuliere waarden	0.0206	0.0222
1	Tikhonov	$\lambda = 0: 3.7499 \cdot 10^{-8}$	$\lambda = 2: 0.0114$
1	ART, 40 iteraties	0.0016	0.0133
2	500 singuliere waarden	0.0582	0.0589
2	ART, 30 iteraties	0.0073	0.1928
3	400 singuliere waarden	0.0551	0.0559
3	Tikhonov	$\lambda = 0: 6.3092 \cdot 10^{-8}$	$\lambda = 1: 0.0074$
3	ART, 20 iteraties	0.0619	0.06

Tabel 5.1: Relatief residu bij gebruik van verschillende methoden op de problemen

Zoals ook al in paragraaf 4.4 is opgemerkt, moet bij de beoordeling van de drie methoden niet alleen gekeken worden naar de gemaakte fout (in dit geval het relatieve residu). Ook de hoeveelheid benodigde operaties en het geheugengebruik spelen een rol. Bij de uitvoering van de drie methoden is hiermee rekening gehouden: er zijn steeds maar een aantal singuliere waarden gebruikt, omdat de benodigde rekentijd en het geheugengebruik enorm toenemen als er meer waarden meegenomen worden. Ook het aantal iteraties ART is hierom beperkt: ondanks dat ART de gevonden oplossing onder bepaalde voorwaarden altijd verbetert (zie paragraaf 4.3), is de hoeveelheid rekentijd al snel heel groot. Tikhonov regularisatie is in probleem 2 niet eens meer te gebruiken.

Het is belangrijk om op te merken dat het relatieve residu niet dezelfde eigenschap heeft als de relatieve globale fout. Als het relatieve residu heel klein is, hoeft dat niet te betekenen dat de bijbehorende oplossing goed lijkt. De 'oognorm', de kwaliteit van het plaatje, speelt dus ook een grote rol. In tabel 5.2 staat welke methode bij ieder probleem het beste plaatje geeft.

Probleem	Onverstoord	Verstoord, $\epsilon = 0.01$
1	Tikhonov regularisatie	Tikhonov regularisatie
2	ART	singuliere waardenontbinding
3	Tikhonov regularisatie	Tikhonov regularisatie

Tabel 5.2: Beste methode op het oog

Uit tabel 5.2 blijkt dat Tikhonov regularisatie (indien toepasbaar) zo snel mogelijk de beste oplossing geeft. Hierbij vinden we zowel een hoge kwaliteit van het plaatje, als een klein relatief residu. Nadeel van Tikhonov is wel dat de hoeveelheid geheugengebruik ons parten kan spelen. Met verstoring blijkt de invloed van de liggende matrix in probleem 2 groot. ART convergeert nu niet naar de juiste oplossing, zodat alleen singuliere waardenontbinding toepasbaar is. In probleem 1 en 3 werken singuliere waardenontbinding en ART goed, maar het gevonden plaatje is behoorlijk grof.

Hoofdstuk 6

Conclusie

In dit verslag is onderzocht op welke manier de golfvoortplantingssnelheden in de aardkorst bepaald kunnen worden.

Hierbij is allereerst ingegaan op een wiskundige beschrijving van het model dat bij dit probleem hoort (hoofdstuk 2). Vervolgens is aan de hand van een geofysisch testprobleem de werking onderzocht van drie verschillende methoden: singuliere waardenontbinding, Tikhonov regularisatie en ART. Deze methoden zijn zowel voor de onverstoorde, als voor de verstoorde metingen toegepast (hoofdstuk 4).

Voor het testprobleem blijkt Tikhonov regularisatie de beste resultaten te geven, daarna volgen singuliere waardenontbinding en ART.

Naast een vergelijking van de gemaakte fout, is het ook belangrijk om te bekijken hoeveel operaties en geheugengebruik een methode nodig heeft. Voor het testprobleem blijkt ART zowel het minste aantal operaties als de kleinste hoeveelheid geheugen te gebruiken. De andere twee methoden hebben beduidend meer operaties en geheugen nodig.

Vervolgens is ingegaan op drie andere problemen, die geen geofysische achtergrond hebben (hoofdstuk 5). De wiskundige structuur van de problemen is echter gelijk. Ook nu zijn de drie methoden vergeleken, zowel zonder als met ruis.

Bij deze extra problemen blijkt dat de hoeveelheid operaties inderdaad erg oploopt. Tikhonov regularisatie is hierom bij probleem 2 niet meer te gebruiken. Daarnaast blijkt ART niet toepasbaar in het geval dat A een liggende matrix is ($n > m$) en verstoring in het rechterlid optreedt.

Een ander opvallend punt is dat het relatieve residu geen goede maat is voor de kwaliteit van het bijbehorende plaatje. Zo is het relatieve residu in paragraaf 5.2.2 wel heel klein, figuur 5.5 lijkt niet op de oplossing. Gevolg is dus dat in dit geval alleen de 'oognorm' maatgevend is.

Ook bij de drie extra problemen blijkt Tikhonov regularisatie (indien toepasbaar) de beste resultaten te geven. Nadeel van deze methode is dat het geheugenverbruik heel groot is, waardoor Tikhonov regularisatie niet altijd gebruikt kan worden. In dat geval zijn alleen singuliere waardenontbinding en ART mogelijk.

Hoofdstuk 7

Dankwoord

Graag wil ik Martin van Gijzen heel hartelijk bedanken voor zijn waardevolle hulp als begeleider. Zonder zijn hulp zou het mij niet gelukt zijn het bachelorproject op deze wijze uit te voeren.

Daarnaast wil ik de de heren Dekker, Heemink en Spandaw bedanken voor hun zitting in mijn afstudeercommissie.

Tenslotte dank ik Joost Batenburg (werkzaam bij het Vision Lab) voor de ontvangen gegevens, die in hoofdstuk 5 zijn gebruikt.

Bibliografie

- [1] Lehmann, Bodo, 2007. Seismic traveltime tomography for engineering and exploration applications. EAGE Publications bv, Houten: pp 13-24.
- [2] Nolet, Guust, 1987. Seismic wave propagation and seismic tomography; in Seismic tomography with applications in global seismology and exploration geophysics (editor: Nolet, Guust). D. Reidel Publishing Company, Dordrecht. Hoofdstuk 1: pp 9,12-14.
- [3] Sluis, A. van der, Vorst, H.A. van der; 1987. Numerical solution of large, sparse, linear algebraic systems arising from tomographic problems; in Seismic tomography with applications in global seismology and exploration geophysics (editor: Nolet, Guust). D. Reidel Publishing Company, Dordrecht. Hoofdstuk 3: pp 55,58,59.
- [4] Nolet, Guust, 1984. Solving or resolving inadequate and noisy tomographic systems. Journal of computational physics **61**, pp 464, 465, 469-476.
- [5] Strang, Gilbert, 1988. Linear algebra and its applications. Harcourt Brace Jovanovich, pp 92-95, 154-157, 442-451.
- [6] Sleijpen, Gerard, 2009. <http://www.math.uu.nl/people/sleijpen/>, course material Numerical Linear Algebra.
- [7] Censor, Yair, 1990. On variable block algebraic reconstruction techniques. Mathematical Methods in Tomography, Springer Berlin/Heidelberg, pp 134-136,138.
- [8] Björk, Åke; Elfving, Tommy; 1979. Accelerated projection methods for computing pseudoinverse solutions of systems of linear equations. BIT Numerical Mathematics, pp 148,149.
- [9] Hansen, Per Christian, 1992. Analysis of Discrete Ill-Posed Problems by Means of the L-Curve. SIAM Review, Vol.34, No.4, pp 564-566.
- [10] Golub, Gene H., Loan, Charles F. van; 1996. Matrix computations, The Johns Hopkins University Press, Baltimore: p 263.
- [11] Krishnamurthy, E.V., Mahadeva Rao, T., Subramanian, K., Prabhu, S.S.; 1974. Reconstruction of Objects from Their Projections Using Generalized Inverses. Computer Graphics and Image Processing **3**, pp 337,338,342,343.

Hoofdstuk 8

Appendix

8.1 Testprobleem: gebruikte programma's

8.1.1 Singuliere waardenontbinding

% In dit programma wordt onderzocht in hoeverre singuliere
% waardenontbinding de invloed van ruis onderdrukt.

```
load matrix.dat; load solution.dat;
A = matrix;
b = A*solution;
r = input('r = ');
plotsol(solution);

% Genereren verstoorde vector b
eps = 10(-2);
randn('state',0)
n = randn(400,1);
n = norm(b)/norm(n)*n;
b = b+eps*n;

x = zeros(200,1);
e1 = ones(r,1);
e2 = ones(r,1);

% Toepassen singuliere waardeontbinding
[U,S,V] = svd(matrix);
semilogy(S,'b*')
xlabel('r','FontSize',12);
ylabel('Grootte van singuliere waarde r','FontSize',12);
set(gca,'FontSize',12);

for i = 1:r
    x = x + 1/S(i,i)*V(:,i)*U(:,i)'\*b;
    e1(i) = norm(solution - x)/norm(solution);
```

```

    e2(i) = norm(A*x - b)/norm(b);
end
figure
plotsol(x)

% Onderzoek relatieve globale fout
figure
semilogy(e1)
[min1,index1] = min(e1)
xlabel('singuliere waarde r','FontSize',14);
ylabel('Grootte van e_1','FontSize',14);
set(gca,'FontSize',14);

```

```

% Onderzoek relatief residu
figure
semilogy(e2)
xlabel('singuliere waarde r','FontSize',14);
ylabel('Grootte van e_2','FontSize',14);
set(gca,'FontSize',14);
[min2,index2] = min(e2)

```

8.1.2 Foutanalyse singuliere waardenontbinding

```

clear all; close all;
% In dit programma wordt het gedrag van de
% relatieve globale fout onderzocht
% bij toepassing van singuliere waardenontbinding.

load matrix.dat;
load solution.dat;
A = matrix;
b = A*solution;

% Genereren verstoorde vector b
eps = 10(-2);
randn('state',0)
n = randn(400,1);
n = norm(b)/norm(n)*n;
b = b+eps*n;

[U,S,V] = svd(matrix);
f = zeros(199,1);
alpha = zeros(200,1);

% Genereren vector alpha
for i = 1:200
    alpha(i) = dot(V(:,i), solution);
end

% Constructie f
for i = 1:199
    f(i) = (dot(U(:,i+1), (eps*n))/S(i+1,i+1))^2 - (alpha(i+1))^2;
end

plot(f)
xlabel('singuliere waarde r','FontSize',14);
ylabel('Grootte van f(r)','FontSize',14);
set(gca,'FontSize',14);

```

8.1.3 Tikhonov regularisatie

```
clear all; close all;
% In dit programma wordt onderzocht in hoeverre
% Tikhonov regularisatie de invloed van ruis onderdrukt.

load matrix.dat;
load solution.dat;
A = matrix;

% Genereren verstoorde vector b
b = A*solution;
randn('state',0)
n = randn(400,1);
n = norm(b)/norm(n)*n;
eps = 10^(-2);
b = b+eps*n;

% Toepassing Tikhonov regularisatie
for i = 1:10
    lambda(i) = i;
    Anieuw = [A ; lambda(i)*eye(200,200)];
    bnieuw = [b ; zeros(200,1)];
    xls = Anieuw\bnieuw;
    e1(i) = norm(solution - xls)/norm(solution);
    e2(i) = norm(b - A*xls);
    lengte(i) = norm(xls);
end

% Onderzoek relatieve globale fout
figure
plot(lambda,e1)
[min1, index1] = min(e1)
xlabel('lambda','FontSize',12);
ylabel('Grootte van e_1','FontSize',12);
set(gca,'FontSize',12);

% Genereren L-curve
figure
plot(lengte, e2)
xlabel('||x||','FontSize',12); ylabel('||b - Ax||','FontSize',12);
set(gca,'FontSize',12);
```

8.1.4 Voorwaarde L-curve

```
clear all; close all;
% Met dit bestand is het mogelijk te kijken of de L-curve een rechte hoek
% maakt, door de bijbehorende voorwaarde te plotten.

load matrix.dat;
load solution.dat;
A = matrix;
b = A*solution;
y = zeros(197,1);

[U,S,V] = svd(A);
for i = 1:197
    y(i) = abs(dot(U(:,i),b)/S(i,i));
end

semilogy(y)
xlabel('i','FontSize',14); ylabel('u_i^Tb/s_i','FontSize',14);
set(gca,'FontSize',14);
```

8.1.5 ART

% In dit programma wordt onderzocht in hoeverre ART
% de invloed van ruis onderdrukt.

```
load matrix.dat;
load solution.dat;
A = matrix;
b = A*solution;
iter = input('Aantal iteraties: ');

% Genereren verstoorde vector b
randn('state',0)
n = randn(400,1);
n = norm(b)/norm(n)*n;
eps = 10^(-2);
b = b+eps*n;

x = zeros(200,1);
d = zeros(400,1);
e1 = zeros(iter,1);

% Toepassing ART
for i = 1:400
    a = A(i,:)';
    d(i) = dot(a,a);
end

for j = 1:iter
    for i = 1:400
        a = A(i,:)';
        dx = 1/d(i) * (b(i) - dot(a,x))*a;
        x = x + dx;
    end
    e1(j) = norm(solution - x)/norm(solution);
    e2(j) = norm(b-A*x)/norm(b);
    if j>1
        if e1(j) < e1(j-1)
            plotsol(x)
        end
    end
end
plotsol(x)
```



```

% Onderzoek relatieve globale fout
figure
plot(e1)
xlabel('iteratie','FontSize',12); ylabel('e1','FontSize',12);
set(gca,'FontSize',12);
[y,index] = min(e1)

% Onderzoek relatief residu
figure
semilogy(e2)
xlabel('iteratie','FontSize',12); ylabel('residu','FontSize',12);
set(gca,'FontSize',12);

```

8.1.6 plotsol.m

```

function plotsol(x)
% Met dit programma is het mogelijk een oplossing te visualiseren.

y = zeros(11,21);
for j = 1:10
    y(11-j,1:20) = x(20*(j-1)+1:20*j)';
end
s= -1./36.;
y = y/s;
pcolor(y)
caxis([-0.06 0]);
colorbar;
drawnow;
axis off
return

```

8.2 Toepassingen: gebruikte programma's

8.2.1 tomography.m

```
% Dit programma kan gebruikt worden om diverse methoden toe te
% passen op een stelsel  $Ax=b$ .

[filename, pathname] = uigetfile('*.mat','Kies een matrix');
[dum, name] = fileparts(filename);
load(name);

% Genereren verstoorde vector b
eps = 1e-2;
b = sinogram;
randn('state',0)
n = randn(3750,1);
n = norm(b)/norm(n)*n;
b = b+eps*n;

% Mogelijke methoden
methods = [];
c = 'b';
method = char('SVD','Tikhonov','ART');
methods = [];
choice = 1;

while ( choice < 3 )
% Keuzemenu
    choice = menu('Kies een methode: ', 'SVD','Tikhonov','ART','STOP' );
    if ( choice == 4 )
        close all;
        return
    end
    solver = method(choice,:);

% Singuliere waardenontbinding
    if (choice == 1)
        r = input('Aantal te gebruiken
singuliere waarden om oplossing te bepalen: ');
        [U,S,V] = svds(A,r);
        figure;
        semilogy(diag(S),'*');
        title('Singuliere waarden')
        x_lsmn = sing(b, U,S,V, r);
        figure;
        plotsol(x_lsmn, vol_geom)
        title('Kleinste kwadraten minimumnorm oplossing')
```

```

% Tikhonov regularisatie
elseif (choice == 2)
    figure;
    [x_it res lambda] = tikhonov(A, b, eps, vol_geom);
    title('Tikhonov oplossing');
    figure;
    plot(lambda,res,c);
    xlabel('Lambda','FontSize',12)
    ylabel('|r|/|b|','FontSize',12)
    title('Convergentie','FontSize',12);
    set(gca,'FontSize',12);
    methods = [methods;solver];
    legend(methods);

% ART
elseif (choice == 3)
    m_iter = input('Aantal iteraties: ');
    [x_it res] = art(A, b, m_iter, eps, vol_geom);
    title('ART oplossing')
    figure;
    xas = [0:1:length(res)-1];
    plot(xas,res,c);
    methods = [methods;solver];
    legend(methods);
    xlabel('Aantal iteraties','FontSize',12);
    ylabel('|r|/|b|','FontSize',12);
    title('Convergentie','FontSize',12);
    set(gca,'FontSize',12);
    grid on;
end
end

```

8.2.2 sing.m

```

function x = sing(b, U, S, V, r)
% Dit programma genereert de oplossing met
% behulp van singuliere waardenontbinding.

y = U'*b;
for i = 1:r
    y(i) = y(i) / S(i,i);
end
x = V*y;
end

```

8.2.3 tikhonov.m

```
function [xls res lambda] = tikhonov(A, b, eps, vol_geom)
% Dit programma genereert de oplossing met
% behulp van Tikhonov regularisatie.

sz = size(A);
m = sz(1);
n = sz(2);
res = zeros(10, 1);

for i = 1:10
    lambda(i) = i;
    Anieuw = [A ; lambda(i)*eye(n,n)];
    bnieuw = [b ; zeros(n,1)];
    xls = Anieuw\bnieuw;
    res = norm(b - A*xls)/norm(b)
    plotsol(xls, vol_geom)
end
```

8.2.4 art.m

```
function [x_it res] = art(A, b, m_iter, eps, vol_geom)
% Dit programma genereert de oplossing met behulp van ART.

sz = size(A);
n = sz(1);
m = sz(2);
x_it = zeros(m,1);
res = zeros(m_iter, 1);
d = zeros(n,1);
r2 = norm(b);

for i = 1:n
    a = A(i,:)';
    if dot(a,a) > 0
        d(i) = dot(a,a);
    end
end
end
```

```

for j = 1:m_iter
    for i = 1:n
        if d(i)>0
            dx = 1/d(i) * (b(i) - dot(A(i,:),x_it))*A(i,:);
            x_it = x_it + dx;
        end
    end
    r1 = norm(b-A*x_it);
    res(j) = r1/r2;
    plotsol(x_it, vol_geom)
end

```

8.2.5 plotsol.m

```

function plotsol(sol, vol_geom)
% Met dit programma is het mogelijk een oplossing te visualiseren.

nx = vol_geom.GridColCount;
ny = vol_geom.GridRowCount;
sol = reshape(sol,nx,ny);
image(sol);
drawnow;
return

```