
TAMPEREEN YLIOPISTO
Pro gradu -tutkielma

Emmihenna Jääskeläinen

Parametrien estimointi sovellettuna
Pandora-instrumentin mittauksiin

Matematiikan ja tilastotieteen laitos
Matematiikka
Toukokuu 2012

Tampereen yliopisto

Matematiikan ja tilastotieteen laitos

JÄÄSKELÄINEN, EMMIHENNA: Parametrien estimointi sovellettuna Pandora-instrumentin mittauksiin

Pro gradu -tutkielma, 63 s., 5 liites.

Matematiikka

Toukokuu 2012

Tiivistelmä

Tutkielmassa käsitellään parametrien estimointia. Estimointitapoja on useita, ja tässä tutkielmassa keskitytään pienimmän neliösumman menetelmään. Työn lähtökohtana oli halu tutkia Ilmatieteen laitoksen Pandora-nimisen instrumentin herkkyyttä vakioituille oletusarvoille lisäämällä sen parametrien estimointiin bayesiläisen estimoinnin elementtejä.

Tutkielman aluksi esitellään työn läpi käymisen kannalta tärkeitä käsitteitä ja lauseita. Keskeisen asian esittely aloitetaan inversion eli käänteisongelman yleisestä teoriasta ja siihen liittyvien tärkeimpien käsitteiden määrittelystä. Yksi niistä on residuaali, joka on mittauksen ja sovitetun mallin antaman ennusteen erotus. Seuraavaksi esitellään Bayesin kaava tilastotieteen näkökulmasta, minkä jälkeen kaava esitellään inversio-ongelmissa käytetyin termein ilmaistuna. Tämän jälkeen perehdytään tarkemmin pienimmän neliösumman menetelmään lineaarisen ja epälineaarisen mallin näkökulmasta. Lineaarisen mallin ollessa kyseessä esitellään SVD-menetelmä eli singulaariarvohajotelma-menetelmä, ja epälineaarisen mallin tapauksessa esitellään puolestaan Levenberg-Marquardt -menetelmä, jotka molemmat osoittavat omalla kohdallaan sen, kuinka residuaalien neliösumma minimoidaan. Työn lopuksi käsitellään Pandora-instrumentin analyysiohjelmaan lisättyjen bayesiläisten elementtien vaikutusta otsonin ja nitridioksidin määrien arvoihin.

Sisältö

1	Johdanto	1
2	Esitietoja	2
2.1	Merkinnöistä	2
2.2	Matemaattisia peruskäsitteitä ja tarvittavia lauseita	3
2.3	Todennäköisyyksiin liittyviä peruskäsitteitä ja tarvittavia lauseita	5
3	Inversio-ongelmat	10
4	Parametrien estimointi: bayesiläinen lähestymistapa	12
4.1	Bayesin kaavan tilastollinen teoria	12
4.2	Bayesin kaava inversio-ongelmissa	14
5	Parametrien estimointi: pienimmän neliösumman menetelmä	25
5.1	Matemaattinen perusta	25
5.1.1	Lineaarinen menetelmä	25
5.1.2	Epälineaarinen menetelmä	34
5.2	Menetelmän käyttötavat	41
5.2.1	Neliösummat	41
5.2.2	Painotetut neliösummat	42
6	Käytännön sovellus: Pandora-instrumentti	55
6.1	Pandora-instrumentin parametrien estimointi	55
6.2	Tuloksia	57
6.2.1	Suureen arvojen laskemisesta	57
6.2.2	Oletuskorkeuden muutoksen laskeminen	58
6.2.3	Oletusmäärän muutoksen laskeminen	59
6.2.4	Johtopäätökset	61
	Viitteet	63
	Liite A	64
	Liite B	66
	Liite C	68

1 Johdanto

Tämä tutkielma käsittelee parametrien estimointia. Työn idean taustalla oli ensinnäkin halu luoda katsaus siihen, miten jonkin instrumentin tekemät mittaukset voidaan muuttaa halutun suureen, kuten esimerkiksi otsonin, määriksi saatuja mittaustuloksia muokkaamalla. Ilmatieteen laitoksella on Pandora-niminen NASA:n kehittämä spektrometri, ja toinen työn motiivi olikin tutkia Pandora-instrumentin parametrien estimoinnin herkkyyttä vakioiduille odotusarvoille lisäämällä siihen bayesiläisen estimoinnin elementtejä.

Tämän tutkielman luvussa 2 käydään läpi esitietoja, joita tarvitaan tutkielman lukemisessa. Ensin esitellään tässä työssä käytettäviä merkintöjä, jonka jälkeen käydään läpi tarvittavia matemaattisia ja todennäköisyyksiin liittyviä määritelmiä sekä lauseita.

Luvussa 3 esitellään lyhyesti inversion yleistä teoriaa käyden läpi peruskäsitteet.

Tutkielman luku 4 on työn keskeisistä luvuista ensimmäinen. Pykälässä 4.1 esitellään Bayesin kaava tilastotieteen näkökulmasta, jonka jälkeen pykälässä 4.2 kaava esitellään inversio-ongelmissa käytetyin termein ilmaistuna. Kyseisessä pykälässä esitellään keskeiset käsitteet priorin ja uskottavuusfunktio sekä näiden avulla saatava posteriori. Pykälän tärkein tulos on lause 4.7, jossa osoitetaan, että jos priorin ja uskottavuusfunktion jakaumat ovat normaalisia, niin tällöin myös posteriorijakauma on normaalin.

Luku 5 on työn toinen keskeinen luku. Siinä käydään läpi pienimmän neliösumman menetelmää. Ensin esitellään sen matemaattinen teoria lineaarisen ja epälineaarisen mallin sovituksessa. Lineaarisen mallin ollessa kyseessä keskitytään SVD-menetelmään ja epälineaarisen mallin kohdalla puolestaan Levenberg-Marquardt -menetelmään. Tämän jälkeen pykälässä 5.2 esitellään neliösummien kaksi käyttötapaa eli painottomat ja painotetut neliösummat.

Tutkielman lopuksi luvussa 6 esitellään tarkemmin sekä Pandora-instrumenttia että sen parametrien estimointia. Pykälässä 6.2 keskitytään instrumentin datan käsittelyyn ja tulosten esittelyyn.

Lukijalta odotetaan perustietoja matematiikasta ja tilastotieteestä. Matematiikan perustietoihin kuuluu muun muassa lineaarialgebran perusteisiin kuuluvia asioita kuten esimerkiksi matriisin laskusäännöt. Vaikka tilastotieteeseen liittyviä tämän työn kannalta keskeisiä termejä ja lauseita on esitetty tutkielman pykälässä 2.3, niin siitä huolimatta tilastotieteen perusteiden osaaminen helpottaa työn sisällön ymmärtämistä.

Tämän tutkielman päälähde-tekstit ovat Yonathan Bardin kirja *Nonlinear Parameter Estimation* ja Jari Kaipion sekä Erkki Somersalon kirja *Statistical and Computational Inverse Problems*.

2 Esitietoja

Luvussa 2 esitellään itse pääaiheen käsittelyssä tarvittavia matemaattisia ja tilastollisia määritelmiä sekä lauseita. Aloitetaan esitietojen läpi käyminen tässä työssä käytettävistä merkinnöistä.

2.1 Merkinnöistä

Tässä työssä on käytössä seuraavat merkinnät.

- $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $m \times n$ -ulotteinen matriisi
- $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ n -ulotteinen vektori, matriisien yhteydessä sarakevektori
- X satunnaismuuttuja
- $\mathbf{A} = [a_{11}, a_{12}, \dots, a_{mn}]^T$ on vektori, jossa matriisin \mathbf{A} rivit on yhdistetty yhdeksi vektoriksi.
- $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2}$ eli normina käytetään L_2 -normia
- $\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\lambda}$, missä λ on matriisin $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ suurin ominaisarvo
- $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}\mathbf{A}$
- δ on Diracin deltafunktio eli

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & \text{kun } x = 0 \\ 0, & \text{kun } x \neq 0 \end{cases}$$

ja

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

- ∂ on osittaisderivaatan merkki
- $z \propto y$ tarkoittaa, että arvo z on suoraan verrannollinen arvon y kanssa eli $z = ky$, missä k on vakio
- DU tarkoittaa Dobsonin yksikköä, missä 1 DU on $2,6868 \cdot 10^{16}$ molekyyliä neliösentillä

Tutkielmassa keskitytään reaali lukujen avaruuteen, sillä teoriaa sovelletaan oikeisiin mittauksiin.

2.2 Matemaattisia peruskäsitteitä ja tarvittavia lauseita

Tässä pykälässä esitellään pääaiheen käsittelyssä tarvittavia matemaattisia käsitteitä ja lauseita. Aloitetaan positiivisesti definiitin ja positiivisesti semidefiniitin matriisin määritelmällä.

Määritelmä 2.1. (vrt. [1, s. 290]) Olkoon $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ vektori ja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrinen matriisi. Matriisi \mathbf{A} on *positiivisesti definiitti*, jos

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$$

kaikilla $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ ja *positiivisesti semidefiniitti*, jos

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0$$

kaikilla \mathbf{x} .

Määritellään seuraavaksi matriisin jälki.

Määritelmä 2.2. (vrt. [7, s. 25]) Neliömatriisin $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jälki $\text{tr} \mathbf{A}$ on matriisin \mathbf{A} diagonaalialkioiden summa

$$\text{tr} \mathbf{A} = a_{11} + \cdots + a_{nn} = \sum_{i=1}^n a_{ii},$$

missä $a_{ij} \in \mathbf{A}$ kaikilla $i = 1, \dots, n$ ja $j = 1, \dots, n$.

Lause 2.1. *Kaikilla $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pätee*

$$\text{tr}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A}) = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n a_{ik}^2.$$

Todistus (vrt. [7, s. 25,156]). Valitaan mielivaltainen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Merkitköön $[\mathbf{A}]_{ik}$ matriisin \mathbf{A} vaakarivin i ja pystyvirin k alkiota. Saadaan

$$[\mathbf{A}^\top \mathbf{A}]_{kk} = \sum_{i=1}^m [\mathbf{A}^\top]_{ki} [\mathbf{A}]_{ki} = \sum_{i=1}^m a_{ik} a_{ik} = \sum_{i=1}^m a_{ik}^2.$$

Tällöin

$$\text{tr}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A}) = \sum_{k=1}^n [\mathbf{A}^\top \mathbf{A}]_{kk} = \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^m a_{ik}^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n a_{ik}^2.$$

Koska väite pätee mielivaltaiselle matriisille $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, niin väite pätee kaikille matriiseille $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. \square

Lause 2.2. Kaikilla $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pätee

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}).$$

Todistus. Valitaan mielivaltainen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, jolloin $\mathbf{A}^T = [a_{11}, a_{12}, \dots, a_{mn}]$.
Nyt

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^T \mathbf{A} &= [a_{11}, a_{12}, \dots, a_{mn}] \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix} \\ &= a_{11}^2 + a_{12}^2 + \dots + a_{mn}^2 \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n a_{ik}^2, \end{aligned}$$

jolloin lauseen 2.1 nojalla $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$. Koska väite pätee mielivaltaiselle $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, niin se pätee kaikille $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. \square

Seuraavaa lausetta tarvitaan pykälässä 5.2.2.

Lause 2.3. Oletetaan, että $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ ja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Tällöin

$$\mathbf{a}^T \mathbf{A} \mathbf{b} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_i A_{ij} b_j.$$

Todistus (vrt. [1, s. 288]). Matriisien ja vektoritulojen liitännäisyydestä seuraa, että

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

Tulo $\mathbf{A} \mathbf{b}$ on m -ulotteinen sarakevektori, jonka i . elementti on

$$[\mathbf{A} \mathbf{b}]_i = \sum_{j=1}^n A_{ij} b_j,$$

kun $i = 1, \dots, m$. Vektori \mathbf{a} ja tulo $\mathbf{A} \mathbf{b}$ ovat molemmat m -ulotteisia, jolloin tulo $\mathbf{a}^T (\mathbf{A} \mathbf{b})$ voidaan laskea kahden vektorin skalaaritulona. Saadaan

$$\mathbf{a}^T (\mathbf{A} \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^m a_i \left(\sum_{j=1}^n A_{ij} b_j \right) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_i A_{ij} b_j.$$

Siis väite pätee. \square

Esitellään seuraavaksi Cauchy-Schwarzin -epäyhtälö.

Lause 2.4 (Cauchy-Schwarzin epäyhtälö). Kaikilla $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ pätee

$$|\mathbf{u}^T \mathbf{v}| \leq \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|.$$

Todistus. Ks. [5, s. 389] □

Esitellään tämän pykälän lopuksi muutamia tarvittavia vektoreiden ja matriisien derivoimissääntöjä.

Lause 2.5. *Olkoon $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ vektori ja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriisi. Tällöin*

$$\frac{\partial (\mathbf{a}^\top \mathbf{A} \mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{A} \mathbf{a} + \mathbf{A}^\top \mathbf{a}.$$

Jos matriisi \mathbf{A} on symmetrinen, niin tällöin

$$\frac{\partial (\mathbf{a}^\top \mathbf{A} \mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = 2\mathbf{A} \mathbf{a}.$$

Todistus. Ks. [1, s. 294]. □

Lause 2.6. *Olkoot $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriiseja. Tällöin*

$$\frac{\partial \text{tr}(\mathbf{B} \mathbf{A}^\top \mathbf{C})}{\partial \mathbf{A}} = \mathbf{C} \mathbf{B}.$$

Todistus. Ks. [1, s. 294]. □

Lause 2.7. *Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriisi. Tällöin*

$$\frac{\partial \det(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}} = (\mathbf{A}^{-1})^\top \det(\mathbf{A}).$$

Todistus. Ks. [1, s. 296]. □

2.3 Todennäköisyyksiin liittyviä peruskäsitteitä ja tarvittavia lauseita

Tässä pykälässä esitellään pääaiheen käsittelyssä tarvittavia todennäköisyyksiin liittyviä käsitteitä ja lauseita. Aloitetaan otosavaruuden ja satunnaismuuttujan määritelmillä.

Määritelmä 2.3. (vrt. [4, s. 4]) Satunnaiskokeen kaikkien mahdollisten erilaisten tulosten joukkoa Ω kutsutaan *otosavaruudeksi*.

Määritelmä 2.4. (vrt. [8, s. 25]) Olkoon Ω satunnaiskokeen S otosavaruus. Kuvausta

$$X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

kutsutaan *satunnaismuuttujaksi*. Satunnaismuuttuja on siis funktio, joka liittää reaaliluvun $X(s)$ jokaiseen alkioon $s \in \Omega$.

Satunnaismuuttujan ollessa vektori, kuvaus on muotoa

$$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

missä X_j on satunnaismuuttuja kaikilla $j = 1, \dots, n$ [3, s. 321].

Määritelmä 2.5. (vrt. [4, s. 49]) Satunnaismuuttujan X saamia arvoja, $X = x$, kutsutaan *realisaatioiksi*.

Määritellään seuraavaksi satunnaismuuttujan todennäköisyysfunktio.

Määritelmä 2.6. (vrt. [8, s. 26]) Diskreetin satunnaismuuttujan X *todennäköisyysfunktio* $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ on

$$f(x) = P(X = x),$$

missä $P(X = x)$ kertoo sen todennäköisyyden, millä satunnaismuuttuja X saa realisaatiokseen arvon x .

Kertymäfunktioita tarvitaan muun muassa jatkuvan satunnaismuuttujan määrittämiseen, joten esitellään se seuraavaksi.

Määritelmä 2.7. (vrt. [4, s. 50-51]) Olkoon Ω otosavaruus ja $X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Tällöin satunnaismuuttujan X *kertymäfunktio* on

$$F_X(x) = P(X \leq x),$$

missä $x \in \mathbb{R}$.

Määritelmä 2.8. (vrt. [4, s. 78]) Satunnaismuuttuja X on *jatkuva*, jos sen kertymäfunktio $F_X(x)$ on jatkuva kaikilla $x \in \mathbb{R}$.

Määritelmä 2.9. (vrt. [8, s. 131]) Satunnaismuuttujat X ja Y ovat riippumattomia, jos ja vain jos

$$F_{XY}(x, y) = F_X(x) F_Y(y)$$

kaikilla $(x, y) \in \mathbb{R}^2$.

Määritellään seuraavaksi satunnaismuuttujan tiheysfunktio ja todennäköisyysjakauma.

Määritelmä 2.10. (vrt. [4, s. 79]) Jos jatkuvan satunnaismuuttujan X kertymäfunktio on derivoituva, niin derivaattafunktiota $f_X(x) = F'_X(x)$ kutsutaan *tiheysfunktioiksi*. Tällöin $F_X(x)$ voidaan esittää muodossa

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x f_X(u) du$$

kaikilla arvoilla $-\infty < x < \infty$.

Huomautus 2.1. (vrt. [4, s. 81]) Olkoon $B \subset \mathbb{R}$. Yleisesti tapahtuman $X \in B$ todennäköisyys lasketaan

$$(2.1) \quad P(X \in B) = \int_B f_X(x) dx,$$

missä $f_X(x)$ on satunnaismuuttujan X tiheysfunktio. Todennäköisyys on siis se pinta-ala, joka jää x-akselin ja tiheysfunktion väliin joukon B kohdalle.

Määritelmä 2.11. (vrt. [3, s. 321]) Tapahtumille $B \subset \mathbb{R}$ määriteltävää mittaa $\mu_X(B) = P(X \in B)$ kutsutaan satunnaismuuttujan X *todennäköisyysjakaumaksi*.

Satunnaismuuttujan odotusarvo ja varianssi esiintyvät tässä työssä, joten määritellään ne seuraavaksi.

Määritelmä 2.12. (vrt. [8, s. 30]) Olkoon diskreetin satunnaismuuttujan X arvojoukko $\{x_1, \dots, x_n\}$ ja $p_k = P(X = x_k)$, missä $k = 1, \dots, n$. Satunnaismuuttujan X *odotusarvo* on

$$E(X) = \sum_{k=1}^n p_k x_k.$$

Määritelmä 2.13. (vrt. [4, s. 83]) Olkoon X jatkuva satunnaismuuttuja jolla on olemassa tiheysfunktio $f_X(x)$. Tällöin satunnaismuuttujan X odotusarvo on

$$E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x) dx.$$

Määritelmä 2.14. (vrt. [4, s. 86]) Olkoon X satunnaismuuttuja. Sen *varianssi* on

$$\text{Var}(X) = E\{[X - E(X)]^2\}.$$

Huomautus 2.2. (vrt. [4, s. 86]) Määritelmän 2.14 mukainen satunnaismuuttujan varianssi pätee sekä diskreetille että jatkuvalla satunnaismuuttujalle.

Lause 2.8. *Olkoon X satunnaismuuttuja. Tällöin*

$$\text{Var}(X) = E(X^2) - [E(X)]^2,$$

missä $E(X^2) = \sum_{k=1}^n p_k x_k^2$

Todistus. Ks. [8, s. 30]

□

Lause 2.9. Oletetaan, että satunnaismuuttujalla X on olemassa äärellinen odotusarvo sekä äärellinen varianssi. Olkoot $a, b \in \mathbb{R}$ äärellisiä vakioita. Tällöin

$$\begin{aligned} E(a + bX) &= a + bE(X) \\ \text{Var}(a + bX) &= b^2 \text{Var}(X). \end{aligned}$$

Todistus. Ks. [4, s. 152] □

Huomautus 2.3. Olkoot $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. Tällöin lauseen 2.9 nojalla

$$\begin{aligned} (2.2) \quad E(\mathbf{a}X + \mathbf{b}) &= E\left([a_1X + b_1, \dots, a_nX + b_n]^\top\right) \\ &= [E(a_1X + b_1), \dots, E(a_nX + b_n)]^\top \\ &= [a_1E(X) + b_1, \dots, a_nE(X) + b_n]^\top \\ &= \mathbf{a}E(X) + \mathbf{b}. \end{aligned}$$

Huomautus 2.4. Olkoon \mathbf{a}_j matriisin \mathbf{A} j. sarakevektori ja \mathbf{b}_j matriisin \mathbf{B} j. sarakevektori, missä $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Yhtälön 2.2 nojalla saadaan

$$\begin{aligned} (2.3) \quad E(\mathbf{A}X + \mathbf{B}) &= E([\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m]X + [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m]) \\ &= E([\mathbf{a}_1X + \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{a}_mX + \mathbf{b}_m]) \\ &= [E(\mathbf{a}_1X + \mathbf{b}_1), \dots, E(\mathbf{a}_mX + \mathbf{b}_m)] \\ &= [\mathbf{a}_1E(X) + \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{a}_mE(X) + \mathbf{b}_m] \\ &= [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m]E(X) + [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m] \\ &= \mathbf{A}E(X) + \mathbf{B}. \end{aligned}$$

Määritellään seuraavaksi kovarianssi ja kovarianssimatriisi.

Määritelmä 2.15. (vrt. [8, s. 138-139]) Olkoot X ja Y satunnaismuuttujia. Satunnaismuuttujien välinen *kovarianssi* on

$$\text{Cov}(X, Y) = E[(X - E(X))(Y - E(Y))].$$

Lause 2.10. Jos satunnaismuuttujat X ja Y ovat riippumattomia, niin

$$\text{Cov}(X, Y) = 0.$$

Todistus. Ks. [4, s. 134] □

Huomautus 2.5. Määritelmän 2.14 nojalla satunnaismuuttujan X varianssi on sama kuin sen kovarianssi itsensä kanssa.

Määritelmä 2.16. (vrt. [3, s. 321]) Olkoon $\mathbf{X}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ vektorimuotoinen satunnaismuuttuja. Tällöin sen matriisia

$$\text{Var}(\mathbf{X}) = E\left[(\mathbf{X} - E(\mathbf{X}))(\mathbf{X} - E(\mathbf{X}))^\top\right]$$

kutsutaan *kovarianssimatriisiksi*.

Huomautus 2.6. Olkoon $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ matriisi ja $\mathbf{X}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ vektorimuotoinen satunnaismuuttuja. Tällöin yhtälön 2.3 ja määritelmän 2.16 nojalla

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(\mathbf{CX}) &= \mathbb{E} \left\{ [\mathbf{CX} - \mathbb{E}(\mathbf{CX})][\mathbf{CX} - \mathbb{E}(\mathbf{CX})]^\top \right\} \\
 &= \mathbb{E} \left\{ [\mathbf{CX} - \mathbf{CE}(\mathbf{X})][\mathbf{CX} - \mathbf{CE}(\mathbf{X})]^\top \right\} \\
 (2.4) \quad &= \mathbb{E} \left\{ \mathbf{C}[\mathbf{X} - \mathbb{E}(\mathbf{X})][\mathbf{X} - \mathbb{E}(\mathbf{X})]^\top \mathbf{C}^\top \right\} \\
 &= \mathbf{CE} \left\{ [\mathbf{X} - \mathbb{E}(\mathbf{X})][\mathbf{X} - \mathbb{E}(\mathbf{X})]^\top \right\} \mathbf{C}^\top \\
 &= \mathbf{CVar}(\mathbf{X}) \mathbf{C}^\top.
 \end{aligned}$$

Tarkastellaan seuraavaksi satunnaismuuttujaa X ja olkoon (x_1, \dots, x_n) satunnaisotos siitä. Satunnaisotoksen voidaan ajatella olevan satunnaisvektorin (X_1, \dots, X_n) realisaatio, missä satunnaismuuttujat X_1, \dots, X_n ovat riippumattomia ja jakautuvat kuten X .

Määritelmä 2.17. (vrt.[1, s. 3]) Menetelmätapa, jossa määritetään parametrin arvoja tilastolliset seikat huomioiden, kutsutaan *estimoinniksi*.

Määritelmä 2.18. (vrt. [4, s. 229]) Parametrin θ arvio eli *estimaatti* on

$$\hat{\theta} = g(x_1, \dots, x_n),$$

missä g on parametrin θ laskemiseen hyväksi havaittu funktio.

Määritelmä 2.19. (vrt. [4, s. 229]) Parametrin θ *estimaattori* θ^* on

$$\theta^* = g(X_1, \dots, X_n),$$

missä g on parametrin θ laskemiseen hyväksi havaittu funktio.

Parametrisessä estimoinnissa estimaatti ja estimaattori ovat vektoreita, joten esitetään ne vektorimuodossaan.

Olkoon siis

$$\hat{\theta}_i = g_i(x_{i1}, \dots, x_{in})$$

ja

$$\theta_i^* = g_i(X_{i1}, \dots, X_{in}),$$

missä g_i on parametrin θ_i laskemiseen hyväksi havaittu funktio, (X_{i1}, \dots, X_{in}) satunnaisvektori ja (x_{i1}, \dots, x_{in}) satunnaisvektorin realisaatio. Tällöin estimaattivektori on

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = [\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m]^\top$$

ja estimaattorivektori

$$\boldsymbol{\theta}^* = [\theta_1^*, \dots, \theta_m^*]^\top.$$

Määritelmä 2.20. (vrt. [4, s. 230]) Estimaattori θ_i^* on *harhaton*, jos

$$E(\theta_i^*) = \theta_i.$$

Vastaavasti harhattoman estimaattorin antama estimaatti $\hat{\theta}_i$ on *harhaton estimaatti*.

Määritelmä 2.20 voidaan yleistää estimaattorivektoreille. Estimaattorivektori $\boldsymbol{\theta}^*$ on *harhaton*, jos

$$\begin{aligned} E(\boldsymbol{\theta}^*) &= E([\theta_1^*, \dots, \theta_m^*]^\top) \\ (2.5) \quad &= [E(\theta_1^*), \dots, E(\theta_m^*)]^\top \\ &= [\theta_1, \dots, \theta_m]^\top \\ &= \boldsymbol{\theta}. \end{aligned}$$

Jos estimaattori on *harhaton*, niin se on sitä yleensä kaikilla havaintojen lukumäärillä n . *Harhaton* estimaattori ei myöskään sisällä systemaattista virhettä. [4, s. 230]

Tässä työssä estimaattorivektoria kutsutaan estimaattoriksi ja estimaattivektoria estimaatiksi.

3 Inversio-ongelmat

Tässä kappaleessa käsitellään inversiota yleisellä tasolla ja määritellään inversio-ongelmissa käytettäviä käsitteitä.

Usein ollaan tietoisia niistä fysiikan laeista, jotka vaikuttavat havainnon kohteeseen. Tällöin voidaan johtaa yhtälöitä, jotka kuvaavat havaittujen suureiden keskinäisiä suhteita. [1, s. 2] Esitetään tälle määritelmä seuraavaksi.

Määritelmä 3.1. (vrt. [1, s. 2,11]) Yhtälöä, joka on johdettu teoreettisista tarkasteluista, kutsutaan *malliksi*, ja se kuvaa etsittävien suureiden ja tehtyjen mittausten välistä suhdetta.

Niissä tilanteissa, joissa suorat mittaukset ovat mahdottomia, käytetään epäsuoria mittauksia. Tämä aiheuttaa tulosten tulkintaan monimutkaisia ongelmia, joita yleisesti kutsutaan inversio-ongelmiksi. [10, s. 1] Yleisellä tasolla kuvattuna inversio-ongelma pyritään ratkaisemaan sovittamalla mitattuun dataan jotakin mallia, jonka parametrit estimoidaan [6, s. 2].

Määritellään seuraavaksi kolme inversio-ongelmien keskeistä vektoria.

Määritelmä 3.2. (vrt. [10, s. 13]) Vektoria $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, jonka alkiot ovat mittauksia, kutsutaan *mittausvektoriksi*.

Määritelmä 3.3. (vrt. [10, s. 13]) Vektoria $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, jonka alkiot ovat *tuntemattomia* ja jotka kuvaavat tuntematonta tilaa, kutsutaan *tilavektoriksi*. Tuntemattomat alkiot estimoidaan mittausvektorin avulla.

Huomautus 3.1. (vrt. [10, s. 13]) Tilavektorin alkioit ovat diskreettejä arvoja. Kuitenkin jotkut alkioit saattavat olla todellisuudessa jatkuvia funktioita diskreettien arvojen sijaan. Näissä tilanteissa voidaan aina etsiä approksiimaatio jatkuvasta funktiosta diskreettiin arvoon halutulla tarkkuudella.

Esimerkki 3.1. Pandora-instrumentissa tilavektori \mathbf{x} kuvaa ilmakehän tilaa.

Määritelmä 3.4. (vrt. [10, s. 14]) Vektoria $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^m$, jonka alkioit ovat mittausvirheitä, kutsutaan *mittauksen kohinaksi*.

Perinteisissä inversio-ongelmissa lähtökohta on se, että mitataan suure $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ ja tätä mitattua suureta hyödyntäen etsitään informaatiota suureesta $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Jotta nämä kaksi suureta saataisiin yhdistettyä, tarvitaan malli niiden keskinäisen riippuvuuden määrittämiseksi. [3, s. 50]

Määritelmä 3.5. (vrt. [10, s. 14]) Mittausvektorin \mathbf{y} , tilavektorin \mathbf{x} ja mittauksen kohinan $\boldsymbol{\varepsilon}$ välinen suhde voidaan kirjoittaa muodossa

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon},$$

missä funktiota $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ kutsutaan *suoraksi malliksi*.

Suoran mallin määrittämiseksi täytyy tietää, miten käytetty mittauslaite toimii ja ymmärtää, miten mitattu suure liittyy siihen suureeseen, joka todella halutaan saada [10, s. 14].

Huomautus 3.2. (vrt. [10, s. 43-44]) Mittauksen \mathbf{y} ja tilavektorin \mathbf{x} välinen suhde voidaan kirjoittaa myös muodossa

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{b}, \mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon},$$

missä \mathbf{b} on vektori, jonka alkioit ovat tunnettuja malliparametreja.

Huomautus 3.3. (vrt. [1, s. 9]) Merkintä $y_a = f_a(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ tarkoittaa, että muuttuja y_a on vektoreiden \mathbf{b} ja \mathbf{x} funktio f_a .

Instrumentilla tehty mittaus ei vastaa etsityn suureen todellisia arvoja vaan se estimoit niitä. Suureen estimoidun ja suureen todellisten arvojen erotusta kutsutaan *virheeksi* [1, s. 23]. Virhe voidaan kirjoittaa muodossa

$$(3.1) \quad \varepsilon_{a\mu} = y_{a\mu} - f_a(\mathbf{b}_\mu, \mathbf{x}),$$

missä $\varepsilon_{a\mu}$ on mittauskerran μ mittaukseen a liittyvä mittausvirhe ja $f_a(\mathbf{b}_\mu, \mathbf{x})$ vastaa muuttujan todellista arvoa [1, s. 54]. Tämä johtaa seuraavaan määritelmään.

Määritelmä 3.6. (vrt. [1, s. 54]) Jos parametrien todellisia arvoja \mathbf{x} ei tunneta, niin yhtälön 3.1 kaltaiset erotukset voidaan laskea jollekin muulle vektorin \mathbf{x} arvolle. Näitä erotuksia kutsutaan *residuaaleiksi*, ja ne ovat muotoa

$$e_{a\mu} = y_{a\mu} - f_a(\mathbf{b}_\mu, \hat{\mathbf{x}}).$$

Huomautus 3.4. (vrt. [1, s. 54]) Jos $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}$, niin tällöin $\varepsilon_{a\mu} = e_{a\mu}$, eli virheet vastaavat residuaaleja.

Määritellään lopuksi residuaalimatriisi \mathbf{E} .

Määritelmä 3.7. (vrt. [1, s. 23,54]) Olkoon $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$, missä \mathbf{y}_μ on mittausvektori, ja olkoon $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matriisi, jonka alkiot ovat

$$w_{a\mu} = f_a(\mathbf{b}_\mu, \hat{\mathbf{x}})$$

kaikilla $\mu = 1, \dots, n$ ja $a = 1, \dots, m$. Näiden matriisien erotusta

$$\mathbf{E} := \mathbf{Y} - \mathbf{W}$$

kutsutaan *residuaalimatriisiksi*, jonka alkiot ovat määritelmän 3.6 mukaisia residuaaleja $e_{a\mu}$.

4 Parametrien estimointi: bayesiläinen lähestymistapa

Tässä luvussa käsitellään ensin Bayesin kaavan tilastollinen teoria, jonka jälkeen käydään läpi Bayesin kaavan käyttöä inversio-ongelmissa.

Perinteinen parametrien estimointi tuottaa yksittäisiä estimaatteja tuntemattomista, kun vastaavasti bayesiläinen menetelmä tuottaa jakauman. Tästä jakaumasta voidaan määrittää erilaisia estimaatteja, joilla on omat todennäköisyytensä. Bayesiläinen menetelmä yrittää muuttaa huonosti asetettun inversio-ongelman määrittelemällä sen uudestaan hyvin asetettuna laajennuksena todennäköisyysjakaumien laajassa avaruudessa. [3, s. 49-50]

Merkitään seuraavassa satunnaismuuttujalla $\mathbf{Y} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ *mittausta*, satunnaismuuttujalla $\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ *tuntematonta*, josta ollaan kiinnostuneita, ja satunnaismuuttujalla $\mathbf{U} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ *kohinaa*. Mittauksen realisaatiota $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ kutsutaan *dataksi* [3, s. 50].

Määritelmä 4.1. (vrt. [3, s. 50]) Määritelmän 3.5 mukainen suora malli satunnaismuuttujien \mathbf{Y} , \mathbf{X} ja \mathbf{U} avulla ilmaistuna on

$$\mathbf{Y} = f(\mathbf{X}) + \mathbf{U}.$$

4.1 Bayesin kaavan tilastollinen teoria

Määritellään ehdollinen todennäköisyys.

Määritelmä 4.2. (vrt. [4, s. 36-37]) Olkoon Ω otosavaruus ja oletetaan, että $A, B \subseteq \Omega$. Tällöin *tapahtuman A ehdollista todennäköisyyttä ehdolla B* merkitään $P(A | B)$ ja se määritellään

$$P(A | B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}.$$

Todistetaan seuraavaksi Bayesin kaava.

Lause 4.1 (Bayesin kaava). *Olkoon Ω otosavaruus ja oletetaan, että tapahtumat $A, B \subseteq \Omega$ ovat sellaisia, että $P(A) \neq 0$ ja $P(B) \neq 0$. Olkoon $P(A | B)$ tapahtuman A ehdollinen todennäköisyys ehdolla B ja vastaavasti $P(B | A)$ tapahtuman B ehdollinen todennäköisyys ehdolla A . Tällöin*

$$P(A | B) = \frac{P(A) P(B | A)}{P(B)}.$$

Todistus (vrt. [1, s. 36]). Ehdollisen todennäköisyyden määritelmän perusteella

$$(4.1) \quad P(A | B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

ja

$$(4.2) \quad P(B | A) = \frac{P(B \cap A)}{P(A)}.$$

Kertomalla yhtälö 4.1 todennäköisyydellä $P(B)$ ja yhtälö 4.2 todennäköisyydellä $P(A)$ saadaan

$$P(A \cap B) = P(B) P(A | B)$$

ja

$$P(B \cap A) = P(A) P(B | A).$$

Yhdisteen kommutatiivisuudesta seuraa

$$P(B) P(A | B) = P(A \cap B) = P(A) P(B | A)$$

eli

$$(4.3) \quad P(B) P(A | B) = P(A) P(B | A).$$

Jakamalla yhtälö 4.3 puolittain todennäköisyydellä $P(B)$ saadaan

$$P(A | B) = \frac{P(A) P(B | A)}{P(B)}.$$

Siis väite pätee. □

4.2 Bayesin kaava inversio-ongelmissa

Bayesin kaavan tilastollisten perusteiden ollessa selvillä voidaan esitellyt käsitteet määritellä uudestaan inversio-ongelmiin sopivin termein. Aloitetaan priorin määritelmällä.

Määritelmä 4.3. (vrt. [3, s. 51]) Oletetaan, että ennen satunnaismuuttujan \mathbf{Y} mittauksen suorittamista on olemassa jotain tietoa satunnaismuuttujasta \mathbf{X} . Tämä tieto on talletettu tiheysfunktioon $\mathbf{x} \mapsto \pi_{pr}(\mathbf{x})$, jota kutsutaan *priorijakauman tiheysfunktioksi* tai lyhyemmin *prioriksi*.

Priori kertoo siis sen, mitä tuntemattomasta \mathbf{X} tiedetään ennen mittaus-ta \mathbf{Y} [3, s. 51].

Mittauksen \mathbf{Y} ja tuntemattoman \mathbf{X} *yhteisjakauman tiheysfunktio*ta merkitään $\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ [3, s. 51]. Tätä tiheysfunktioita tarvitaan seuraavassa määritelmässä.

Määritelmä 4.4. (vrt. [3, s. 51]) Jos tuntemattomalla satunnaismuuttujalla olisi realisaatio $\mathbf{X} = \mathbf{x}$, niin mittauksen \mathbf{Y} ehdollinen tiheysfunktio eli *uskottavuusfunktio* tällä tiedolla olisi

$$\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \frac{\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\pi_{pr}(\mathbf{x})},$$

jos $\pi_{pr}(\mathbf{x}) \neq 0$.

Mittauksen \mathbf{Y} tiheysfunktioita ehdolla $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ kutsutaan uskottavuusfunktioiksi, koska se esittää eri mittauksen tulosten todennäköisyyden, kun $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ on annettu [3, s. 51]. Ehdollinen todennäköisyys $\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})$ kuvaa siis tietoa havainnosta \mathbf{y} , mitä saataisiin, jos tila olisi \mathbf{x} [10, s. 23].

Uskottavuusfunktion rakentaminen on yleensä yksinkertainen osa bayesiläisten inversio-ongelmien ratkaisua. Se sisältää perinteisissä inversioissa käytetyn suora mallin ja tiedon kohinasta sekä muista mallinnus- ja mittausepävarmuuksista. [3, s. 55]

Tilanteissa, joissa satunnaismuuttujat \mathbf{X} ja \mathbf{U} ovat keskenään riippumattomia, on uskottavuusfunktion rakentaminen melko suoraviivaista. Tämä nähdään seuraavasta lauseesta.

Lause 4.2. *Olkoon suora malli kuten määritelmässä 4.1. Oletetaan, että satunnaismuuttujat \mathbf{X} ja \mathbf{U} ovat keskenään riippumattomia ja että satunnaismuuttujan \mathbf{U} todennäköisyysjakauma tiedetään. Tällöin uskottavuusfunktio on muotoa*

$$\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \pi_{noise}(\mathbf{y} - f(\mathbf{x})).$$

Todistus (vrt. [3, s. 56]). Oletuksen perusteella satunnaismuuttujan \mathbf{U} todennäköisyysjakauma tiedetään, joka voidaan huomautuksen 2.1 ja määritelmän 2.11 nojalla kirjoittaa

$$\mu_U(B) = \int_B \pi_{noise}(\mathbf{u}) d\mathbf{u},$$

missä $B \subset \mathbb{R}^m$. Oletus satunnaismuuttujien \mathbf{X} ja \mathbf{U} keskinäisestä riippumattomuudesta takaa sen, että satunnaismuuttujan \mathbf{U} tiheysfunktio pysyy muuttumattomana, kun kiinnitetään $\mathbf{X} = \mathbf{x}$. Kohinan \mathbf{U} tiheysfunktion muuttumattomana pysymisestä voidaan päätellä se, että $\mathbf{Y} = f(\mathbf{X})$ ehdolla $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ on jakautunut kuten \mathbf{U} eli

$$\int_{\{\mathbf{y} | \mathbf{y} = f(\mathbf{x})\}} \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) d\mathbf{y} = \int_B \pi_{noise}(\mathbf{u}) d\mathbf{u},$$

missä $B \subset \mathbb{R}^m$. Tällöin siis

$$(4.4) \quad \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \pi_{noise}(\mathbf{u}).$$

Voidaan kirjoittaa $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) + \mathbf{u}$, josta saadaan $\mathbf{u} = \mathbf{y} - f(\mathbf{x})$. Sijoittamalla tämä yhtälöön 4.4 saadaan

$$\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \pi_{noise}(\mathbf{y} - f(\mathbf{x})).$$

Siis väite pätee. □

Niissä tilanteissa, joissa satunnaismuuttujat \mathbf{X} ja \mathbf{U} eivät ole keskenään riippumattomia, pitää tietää satunnaismuuttujan \mathbf{U} ehdollinen todennäköisyys, jolloin uskottavuusfunktio $\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})$ saadaan muodostettua [3, s. 56]. Tämä nähdään seuraavasta lauseesta.

Lause 4.3. *Olko suor malli kuten määritelmässä 4.1. Oletetaan, että satunnaismuuttujat \mathbf{X} ja \mathbf{U} eivät ole keskenään riippumattomia ja että satunnaismuuttujan \mathbf{U} ehdollinen todennäköisyysjakauma on muotoa*

$$\mu_U(B | \mathbf{x}) = \int_B \pi_{noise}(\mathbf{u} | \mathbf{x}) d\mathbf{u},$$

missä $B \subset \mathbb{R}^m$. Tällöin uskottavuusfunktio $\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})$ on muotoa

$$\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \pi_{noise}(\mathbf{y} - f(\mathbf{x}) | \mathbf{x}).$$

Todistus (vrt. [3, s. 56]). Oletuksen perusteella kohinan \mathbf{U} ehdollinen todennäköisyysjakauma tiedetään. Tällöin voidaan kirjoittaa

$$\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^m} \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \mathbf{u}) \pi_{noise}(\mathbf{u} | \mathbf{x}) d\mathbf{u}.$$

Kun on kiinnitetty $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ ja $\mathbf{U} = \mathbf{u}$, niin tällöin \mathbf{Y} on kokonaan määritelty eli $\mathbf{Y} = \mathbf{y} = f(\mathbf{x}) + \mathbf{u}$. Nyt

$$\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \mathbf{u}) = \delta(\mathbf{y} - f(\mathbf{x}) - \mathbf{u}),$$

missä δ on Diracin deltafunktio. Täten

$$\begin{aligned}\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^m} \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \mathbf{u}) \pi_{noise}(\mathbf{u} | \mathbf{x}) d\mathbf{u} \\ &= \int_{\mathbb{R}^m} \delta(\mathbf{y} - f(\mathbf{x}) - \mathbf{u}) \pi_{noise}(\mathbf{u} | \mathbf{x}) d\mathbf{u} \\ &= \pi_{noise}(\mathbf{u} | \mathbf{x}) \\ &= \pi_{noise}(\mathbf{y} - f(\mathbf{x}) | \mathbf{x}).\end{aligned}$$

Siis väite pätee. □

Määritelmä 4.5. (vrt. [3, s. 51]) Oletetaan, että mitattu data $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ on annettu. Satunnaismuuttujan \mathbf{X} *posteriorijakauman tiheysfunktio* on ehdollinen todennäköisyysjakauma, jonka tiheysfunktio on

$$\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) = \frac{\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\pi(\mathbf{y})},$$

missä $\pi(\mathbf{y}) \neq 0$.

Huomautus 4.1. Jatkossa sanotaan lyhyesti, että $\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y})$ on posteriorijakauma, kun tarkoitetaan, että $\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y})$ on posteriorijakauman tiheysfunktio.

Huomautus 4.2. (vrt. [3, s. 51]) Posteriorijakaumaa $\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y})$ voidaan merkitä myös $\pi_{post}(\mathbf{x})$.

Posteriorijakauma kertoo siis sen, mitä tiedetään tuntemattomasta \mathbf{X} realisoituneen havainnon $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ jälkeen [3, s. 51].

Nyt kaikki tarvittavat käsitteet on määritelty, joten voidaan siirtyä inversio-ongelmien Bayesin kaavaan. Ratkaistaessa inversio-ongelmia bayesiläisittäin etsitään tuntemattoman \mathbf{X} ehdollinen todennäköisyysjakauma $\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y})$, kun data $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ on annettu [3, s. 51]. Tämä nähdään seuraavasta lauseesta.

Lause 4.4 (Inversio-ongelmien Bayesin kaava). *Olko Ω otosavaruus. Oletetaan, että tuntemattomalla $\mathbf{X}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ on tunnettu priori $\pi_{pr}(\mathbf{x})$ ja että data koostuu mittauksen $\mathbf{Y}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^k$ sellaisista havaituista arvoista \mathbf{y} , että $\pi(\mathbf{y}) \neq 0$. Tällöin tuntemattoman \mathbf{X} posterioritodennäköisyysjakauma annetulla datalla $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ on*

$$(4.5) \quad \pi_{post}(\mathbf{x}) = \pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) = \frac{\pi_{pr}(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})}{\pi(\mathbf{y})}.$$

Todistus (vrt. [3, s. 51]). Määritelmän 4.4 nojalla satunnaismuuttujan \mathbf{Y} ehdollinen todennäköisyys on muotoa

$$(4.6) \quad \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \frac{\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\pi_{pr}(\mathbf{x})},$$

missä $\pi_{pr}(\mathbf{x}) \neq 0$. Kertomalla yhtälö 4.6 todennäköisyydellä $\pi_{pr}(\mathbf{x})$ saadaan

$$(4.7) \quad \pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}) \pi_{pr}(\mathbf{x}).$$

Määritelmän 4.5 nojalla satunnaismuuttujan X posteriorijakauma on muotoa

$$\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) = \frac{\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\pi(\mathbf{y})},$$

jota voidaan huomautuksen 4.2 nojalla merkitä myös $\pi_{post}(\mathbf{x})$. Sijoittamalla tähän yhtälöön yhtälö 4.7 saadaan

$$\pi_{post}(\mathbf{x}) = \pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) = \frac{\pi_{pr}(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})}{\pi(\mathbf{y})}$$

Siis väite pätee. □

Huomautus 4.3. (vrt. [10, s. 24]) Posteriorijakauma määräytyy jo osoittajan perusteella, koska tiheys $\pi(\mathbf{y})$ on käytännössä vain normalisoiva vakio. Tämän perusteella nimittäjä jätetään usein pois ja posteriorijakauma voidaan ilmaista muodossa

$$\pi_{post}(\mathbf{x}) \propto \pi_{pr}(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x}).$$

Periaatteessa on mahdollista, että $\pi(\mathbf{y}) = 0$, joka tarkoittaa sitä, että on mitattu dataa, jonka todennäköisyys on 0. Käytännössä tämä on vain harvoin ongelmana, mutta se vihjaa siihen suuntaan, että taustalla olevat mallit eivät ole yhdenmukaisia todellisuuden kanssa. [3, s. 52]

Jotta saataisiin posteriori määritettyä, pitää siis tietää priorin ja uskottavuusfunktion jakaumat. On useita eri tapoja määrittää ne, mutta tässä työssä keskitytään normaalsiin jakaumiin. Tähän on kaksi syytä. Ensinnäkin niitä on helppo käsitellä, ja toisekseen ne ovat usein hyviä approksimaatioita perimmiltään ei-normaalille jakaumille, kun havainto perustuu suureen määrään keskenään riippumattomiin satunnaisiin tapahtumiin. [3, s. 72]

Määritellään seuraavaksi n -ulotteinen normaalisti jakautunut satunnaismuuttuja.

Määritelmä 4.6. (vrt. [3, s. 72-73]) Olkoon $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ ja $\mathbf{\Gamma} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrinen, positiivisesti definiitti matriisi. Normaalilla n -ulotteisella satunnaismuuttujalla \mathbf{X} , jolla on keskiarvo \mathbf{x}_0 ja kovarianssimatriisi $\mathbf{\Gamma}$, on tiheysfunktio

$$\pi(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi \det(\mathbf{\Gamma})} \right)^{\frac{n}{2}} e^{(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)^\top \mathbf{\Gamma}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0))}.$$

Tällöin käytetään merkintää

$$\mathbf{X} \sim N(\mathbf{x}_0, \mathbf{\Gamma}).$$

Seuraavaa määritelmää tarvitaan ehdollisten kovarianssien laskemiseen.

Määritelmä 4.7. (vrt. [3, s. 74]) Olkoon

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}_{11} & \mathbf{\Gamma}_{12} \\ \mathbf{\Gamma}_{21} & \mathbf{\Gamma}_{22} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

symmetrinen ja positiivisesti definiitti matriisi, missä $\mathbf{\Gamma}_{21} = \mathbf{\Gamma}_{12}^\top$, $\mathbf{\Gamma}_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}$, $\mathbf{\Gamma}_{22} \in \mathbb{R}^{(n-k) \times (n-k)}$ ja $k < n$. Tällöin matriisien $\mathbf{\Gamma}_{11}$ ja $\mathbf{\Gamma}_{22}$ Schurin komplementit ovat

$$\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11} = \mathbf{\Gamma}_{22} - \mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{12}, \quad \tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22} = \mathbf{\Gamma}_{11} - \mathbf{\Gamma}_{12}\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{21}.$$

Huomautus 4.4. (vrt. [3, s. 74]) Matriisi $\mathbf{\Gamma}$ on positiivisesti definiitti, joten myös matriisit $\mathbf{\Gamma}_{11}$ ja $\mathbf{\Gamma}_{22}$ ovat positiivisesti definiittejä. Tästä seuraa, että Schurin komplementit ovat määriteltyjä.

Todistetaan seuraavaksi Schurin komplementtien kääntyvyys ja se, että matriisi $\mathbf{\Gamma}^{-1}$ voidaan ilmaista Schurin komplementtien käänteismatriisien avulla.

Lause 4.5. *Olkoon $\mathbf{\Gamma}$ kuten määritelmässä 4.7. Tällöin Schurin komplementit ovat kääntyviä ja*

$$\mathbf{\Gamma}^{-1} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1} & -\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{12}\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1} \\ -\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1} & \tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}^{-1} \end{bmatrix}.$$

Todistus (vrt. [3, s. 74-75]). Tutkitaan matriisin $\mathbf{\Gamma}$ determinanttia

$$|\mathbf{\Gamma}| = \begin{vmatrix} \mathbf{\Gamma}_{11} & \mathbf{\Gamma}_{12} \\ \mathbf{\Gamma}_{21} & \mathbf{\Gamma}_{22} \end{vmatrix} \neq 0.$$

Vähennetään alemmasta rivistä ylempi rivi, joka on kerrottu termillä $\mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1}$, jolloin saadaan

$$\begin{aligned} |\mathbf{\Gamma}| &= \begin{vmatrix} \mathbf{\Gamma}_{11} & \mathbf{\Gamma}_{12} \\ \mathbf{\Gamma}_{21} - \mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{11} & \mathbf{\Gamma}_{22} - \mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{12} \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} \mathbf{\Gamma}_{11} & \mathbf{\Gamma}_{12} \\ \mathbf{\Gamma}_{21} - \mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{I} & \mathbf{\Gamma}_{22} - \mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{12} \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} \mathbf{\Gamma}_{11} & \mathbf{\Gamma}_{12} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11} \end{vmatrix} \\ &= |\mathbf{\Gamma}_{11}| |\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}|. \end{aligned}$$

Koska $|\mathbf{\Gamma}| \neq 0$, niin tällöin on oltava $|\mathbf{\Gamma}_{11}| |\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}| \neq 0$, eli on oltava $|\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}| \neq 0$. Koska kääntyvän matriisin determinantti eroaa nolasta, niin matriisi $\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}$ on kääntyvä. Vastaavasti saadaan osoitettua matriisin $\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}$ kääntyvyys.

Tarkastellaan sitten lineaarista yhtälöryhmää

$$\begin{bmatrix} \Gamma_{11} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{21} & \Gamma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{cases} \Gamma_{11}\mathbf{x}_1 + \Gamma_{12}\mathbf{x}_2 = \mathbf{y}_1 \\ \Gamma_{21}\mathbf{x}_1 + \Gamma_{22}\mathbf{x}_2 = \mathbf{y}_2. \end{cases}$$

Kerrotaan yhtälöryhmän alempi yhtälö vasemmalta matriisilla Γ_{22}^{-1} ja ratkaistaan siitä sen jälkeen termi \mathbf{x}_2 eli

$$\begin{aligned} & \Gamma_{21}\mathbf{x}_1 + \Gamma_{22}\mathbf{x}_2 = \mathbf{y}_2 \\ \rightarrow & \Gamma_{22}^{-1}(\Gamma_{21}\mathbf{x}_1) + \underbrace{\Gamma_{22}^{-1}\Gamma_{22}}_I \mathbf{x}_2 = \Gamma_{22}^{-1}\mathbf{y}_2 \\ \leftrightarrow & \mathbf{x}_2 = \Gamma_{22}^{-1}(\mathbf{y}_2 - \Gamma_{21}\mathbf{x}_1). \end{aligned}$$

Sijoitetaan saatu termi \mathbf{x}_2 yhtälöryhmän ylempään yhtälöön ja ratkaistaan termi \mathbf{x}_1 eli

$$\begin{aligned} & \Gamma_{11}\mathbf{x}_1 + \Gamma_{12}\mathbf{x}_2 = \mathbf{y}_1 \\ \leftrightarrow & \Gamma_{11}\mathbf{x}_1 + \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}(\mathbf{y}_2 - \Gamma_{21}\mathbf{x}_1) = \mathbf{y}_1 \\ \leftrightarrow & \Gamma_{11}\mathbf{x}_1 + \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\mathbf{y}_2 - \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\Gamma_{21}\mathbf{x}_1 = \mathbf{y}_1 \\ \leftrightarrow & (\Gamma_{11} - \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\Gamma_{21})\mathbf{x}_1 = \mathbf{y}_1 - \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\mathbf{y}_2 \\ \leftrightarrow & \tilde{\Gamma}_{22}\mathbf{x}_1 = \mathbf{y}_1 - \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\mathbf{y}_2 \\ \leftrightarrow & \mathbf{x}_1 = \tilde{\Gamma}_{22}^{-1}\mathbf{y}_1 - \tilde{\Gamma}_{22}^{-1}\Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\mathbf{y}_2. \end{aligned}$$

Vastaavasti saadaan ratkaistua

$$\mathbf{x}_2 = \tilde{\Gamma}_{11}^{-1}\mathbf{y}_2 - \tilde{\Gamma}_{11}^{-1}\Gamma_{21}\Gamma_{11}^{-1}\mathbf{y}_1.$$

Merkitään

$$\Gamma^{-1} = \begin{bmatrix} \Gamma_{11} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{21} & \Gamma_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{L}_{21} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{L}_{22} \end{bmatrix},$$

jolloin saadaan

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{L}_{21} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{L}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{cases} \mathbf{L}_{11}\mathbf{y}_1 + \mathbf{L}_{12}\mathbf{y}_2 = \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{L}_{21}\mathbf{y}_1 + \mathbf{L}_{22}\mathbf{y}_2 = \mathbf{x}_2. \end{cases}$$

Tällöin siis

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{11}\mathbf{y}_1 + \mathbf{L}_{12}\mathbf{y}_2 = \mathbf{x}_1 &= \tilde{\Gamma}_{22}^{-1}\mathbf{y}_1 - \tilde{\Gamma}_{22}^{-1}\Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\mathbf{y}_2 \\ \mathbf{L}_{21}\mathbf{y}_1 + \mathbf{L}_{22}\mathbf{y}_2 = \mathbf{x}_2 &= \tilde{\Gamma}_{11}^{-1}\mathbf{y}_2 - \tilde{\Gamma}_{11}^{-1}\Gamma_{21}\Gamma_{11}^{-1}\mathbf{y}_1, \end{aligned}$$

josta saadaan

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{11} &= \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} & \mathbf{L}_{12} &= -\tilde{\Gamma}_{22}^{-1}\Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1} \\ \mathbf{L}_{21} &= \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} & \mathbf{L}_{22} &= -\tilde{\Gamma}_{11}^{-1}\Gamma_{21}\Gamma_{11}^{-1}. \end{aligned}$$

Nyt

$$\mathbf{\Gamma}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{L}_{12} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{L}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1} & -\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{12}\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1} \\ -\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1} & \tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}^{-1} \end{bmatrix}$$

eli matriisi $\mathbf{\Gamma}^{-1}$ on haluttua muotoa. Koska molemmat väitteet pätevät, niin lause on todistettu. \square

Matriisi $\mathbf{\Gamma}$ on symmetrinen, joten myös matriisi $\mathbf{\Gamma}^{-1}$ on symmetrinen. Tällöin transpoosin laskusääntöjen nojalla

$$\begin{aligned} -\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{11}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{21}\mathbf{\Gamma}_{11}^{-1} &= \left(-\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{12}\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1}\right)^{\top} \\ (4.8) \qquad \qquad \qquad &= \left(\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1}\right)^{\top} \left(\mathbf{\Gamma}_{12}\right)^{\top} \left(-\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1}\right)^{\top} \\ &= -\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1}\mathbf{\Gamma}_{21}\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1}, \end{aligned}$$

missä viimeisen rivin yhtäsuuruus seuraa matriisien $\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1}$ ja $\tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1}$ symmetrisyydestä. [3, s. 75]

Huomautus 4.5. Merkitään jatkossa $e^z = \exp(z)$ luettavuuden helpottamiseksi.

Nyt voidaan todistaa seuraava lause.

Lause 4.6. *Olkoot $\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ ja $\mathbf{Y} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^k$ sellaisia normaalisia satunnaismuuttujia, joiden yhteisjakauman tiheysfunktio $\pi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}_+$ on*

$$\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{y} - \mathbf{y}_0 \end{bmatrix}^{\top} \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}_{11} & \mathbf{\Gamma}_{12} \\ \mathbf{\Gamma}_{21} & \mathbf{\Gamma}_{22} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{y} - \mathbf{y}_0 \end{bmatrix}\right).$$

Tällöin satunnaismuuttujan \mathbf{X} todennäköisyysjakauma ehdolla $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$, $\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$, on

$$\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^{\top} \tilde{\mathbf{\Gamma}}_{22}^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})\right),$$

missä $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{\Gamma}_{12}\mathbf{\Gamma}_{22}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0)$.

Todistus (vrt. [3, s. 75-76]). Siirretään koordinaatiston origo kohtaan $(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)$, jolloin voidaan olettaa, että $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ ja $\mathbf{y}_0 = \mathbf{0}$. Inversio-ongelmien Bayesin kaavan (lause 4.4) ja huomautuksen 4.3 nojalla

$$\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \propto \pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

joten satunnaismuuttujien \mathbf{X} ja \mathbf{Y} yhteistodennäköisyys voidaan ajatella olevan vektorin \mathbf{x} funktio. Lauseen 4.5, yhtälön 4.8 ja transpoosin laskusääntöjen nojalla saadaan

$$\begin{aligned}
& \exp \left(-\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} & -\tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \\ -\tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \Gamma_{21} \Gamma_{11}^{-1} & \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} - \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \Gamma_{21} \Gamma_{11}^{-1} & -\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} + \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \mathbf{x} - \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \Gamma_{21} \Gamma_{11}^{-1} \mathbf{x} - \mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \mathbf{y} \right) \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \mathbf{x} - \mathbf{y}^\top \Gamma_{22}^{-1} \Gamma_{21} \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \mathbf{x} - \mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \mathbf{y} \right) \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \mathbf{x} - \mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y} - \mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \mathbf{y} \right) \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \mathbf{y} \right) \right)
\end{aligned}$$

eli

$$\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{y}^\top \tilde{\Gamma}_{11}^{-1} \mathbf{y} \right) \right).$$

Ryhmitellään saatu eksponenttitermi uudelleen, jolloin yhteisjakauma voidaan esittää muodossa

$$\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left((\mathbf{x} - \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y})^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} (\mathbf{x} - \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y}) + c \right) \right),$$

missä

$$c = \mathbf{y}^\top \left(\tilde{\Gamma}_{11}^{-1} - \Gamma_{22}^{-1} \Gamma_{21} \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \right) \mathbf{y}$$

on riippumaton vektorista \mathbf{x} ja voidaan tällöin jättää pois yhteisjakaumasta. Merkitään

$$(4.9) \quad \bar{\mathbf{x}} = \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y},$$

jolloin

$$\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left((\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \right) \right).$$

Posteriorijakauman määritelmän (määritelmä 4.5) ja huomautuksen 4.3 perusteella $\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \propto \pi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, joten

$$\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \propto -\frac{1}{2} \left((\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \right),$$

missä

$$\bar{\mathbf{x}} = \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{x}_0 + \Gamma_{12} \Gamma_{22}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_0).$$

Siis väite pätee. □

Huomautus 4.6. Inversio-ongelmissa

$$\pi_{pr}(\mathbf{x}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^\top \Gamma_{pr}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\right).$$

Vastaavasti saadaan kohinalle \mathbf{U} todennäköisyysjakauma

$$\pi_{noise}(\mathbf{u}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0)^\top \Gamma_{noise}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0)\right).$$

Seuraava lause näyttää, miten Bayesin kaavaa voidaan hyödyntää lineaarisissa inversio-ongelmissa, kun priorin ja kohinan ovat normaalisia ja keskenään riippumattomia.

Lause 4.7. Oletetaan, että $\mathbf{X}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ ja $\mathbf{U}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ ovat sellaisia keskenään riippumattomia normaalisia satunnaismuuttujia, että

$$\mathbf{X} \sim N(\mathbf{x}_0, \Gamma_{pr}), \quad \mathbf{U} \sim N(\mathbf{u}_0, \Gamma_{noise})$$

ja että matriisit $\Gamma_{pr} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ja $\Gamma_{noise} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ ovat positiivisesti definittejä. Oletetaan edelleen, että on olemassa lineaarinen malli

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{U},$$

missä \mathbf{A} on jokin tunnettu matriisi. Tällöin satunnaismuuttujan \mathbf{X} posterioriheys annetulla realisaatiolla $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ on

$$\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^\top \Gamma_{post}^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})\right),$$

missä

$$\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_0 + \Gamma_{pr} \mathbf{A}^\top (\mathbf{A} \Gamma_{pr} \mathbf{A}^\top + \Gamma_{noise})^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{A} \mathbf{x}_0 - \mathbf{u}_0)$$

ja

$$\Gamma_{post} = \Gamma_{pr} - \Gamma_{pr} \mathbf{A}^\top (\mathbf{A} \Gamma_{pr} \mathbf{A}^\top + \Gamma_{noise})^{-1} \mathbf{A} \Gamma_{pr}.$$

Todistus (vrt. [3, s. 77]). Satunnaismuuttujat \mathbf{X} ja \mathbf{U} ovat normaalisia, joten myös satunnaismuuttuja \mathbf{Y} on normaalinen. Tällöin

$$(4.10) \quad \mathbb{E}\left(\begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{y}_0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}_0 = \mathbf{A} \mathbf{x}_0 + \mathbf{u}_0.$$

Huomautuksen 4.6 nojalla

$$\mathbb{E}\left[(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top\right] = \Gamma_{pr}$$

ja

$$\mathbb{E}\left[(\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)(\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top\right] = \Gamma_{noise},$$

joten

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E} \left[(\mathbf{Y} - \mathbf{y}_0) (\mathbf{Y} - \mathbf{y}_0)^\top \right] \\
&= \mathbb{E} \left[(\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{U} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0 - \mathbf{u}_0) (\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{U} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0 - \mathbf{u}_0)^\top \right] \\
&= \mathbb{E} \left[(\mathbf{A}(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)) (\mathbf{A}(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0))^\top \right] \\
&= \mathbb{E} \left[(\mathbf{A}(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)) \left((\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top \mathbf{A}^\top + (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top \right) \right] \\
&= \mathbb{E} \left[\mathbf{A}(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top \mathbf{A}^\top + \mathbf{A}(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top \right. \\
&\quad \left. + (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top \mathbf{A}^\top + (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0) (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top \right] \\
&= \mathbf{A}\mathbb{E} \left[(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top \right] \mathbf{A}^\top + \underbrace{\mathbf{A}\mathbb{E} [(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top]}_0 \\
&\quad + \underbrace{\mathbb{E} [(\mathbf{U} - \mathbf{u}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top \mathbf{A}^\top]}_0 + \mathbb{E} [(\mathbf{U} - \mathbf{u}_0) (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top] \\
&= \mathbf{A}\mathbf{\Gamma}_{pr}\mathbf{A}^\top + \mathbf{\Gamma}_{noise}
\end{aligned}$$

ja

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E} \left[(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{Y} - \mathbf{y}_0)^\top \right] \\
&= \mathbb{E} \left[(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{A}(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0))^\top \right] \\
&= \mathbb{E} \left[(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top + (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top \mathbf{A}^\top \right] \\
&= \underbrace{\mathbb{E} [(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{U} - \mathbf{u}_0)^\top]}_0 + \mathbb{E} [(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top \mathbf{A}^\top] \\
&= \mathbb{E} [(\mathbf{X} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{x}_0)^\top] \mathbf{A}^\top \\
&= \mathbf{\Gamma}_{pr}\mathbf{A}^\top.
\end{aligned}$$

Tällöin saadaan

$$\text{Cov} \begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{bmatrix} = \mathbb{E} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{X} - \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{Y} - \mathbf{y}_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X} - \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{Y} - \mathbf{y}_0 \end{bmatrix}^\top \right) = \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}_{pr} & \mathbf{\Gamma}_{pr}\mathbf{A}^\top \\ \mathbf{A}\mathbf{\Gamma}_{pr} & \mathbf{A}\mathbf{\Gamma}_{pr}\mathbf{A}^\top + \mathbf{\Gamma}_{noise} \end{bmatrix}.$$

Nyt

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Gamma}_{11} &= \mathbf{\Gamma}_{pr} & \mathbf{\Gamma}_{12} &= \mathbf{\Gamma}_{pr}\mathbf{A}^\top \\
\mathbf{\Gamma}_{21} &= \mathbf{A}\mathbf{\Gamma}_{pr} & \mathbf{\Gamma}_{22} &= \mathbf{A}\mathbf{\Gamma}_{pr}\mathbf{A}^\top + \mathbf{\Gamma}_{noise},
\end{aligned}$$

joten määritelmän 4.7 nojalla

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{22} &= \Gamma_{11} - \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}\Gamma_{21} \\ &= \Gamma_{pr} - \Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top (\mathbf{A}\Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top + \Gamma_{noise})^{-1} \mathbf{A}\Gamma_{pr}.\end{aligned}$$

Merkitään $\tilde{\Gamma}_{22} = \Gamma_{post}$. Yhtälön 4.10 nojalla lauseen 4.6 yhtälöstä 4.9 saadaan

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{x}} &= \mathbf{x}_0 + \Gamma_{12}\Gamma_{22}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \\ &= \mathbf{x}_0 + \Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top (\mathbf{A}\Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top + \Gamma_{noise})^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \\ &= \mathbf{x}_0 + \Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top (\mathbf{A}\Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top + \Gamma_{noise})^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0 - \mathbf{u}_0).\end{aligned}$$

Lauseen 4.6 nojalla

$$\begin{aligned}\pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^\top \tilde{\Gamma}_{22}^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^\top \Gamma_{post}^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})\right),\end{aligned}$$

missä

$$\Gamma_{post} = \Gamma_{pr} - \Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top (\mathbf{A}\Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top + \Gamma_{noise})^{-1} \mathbf{A}\Gamma_{pr}$$

ja

$$(4.11) \quad \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_0 + \Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top (\mathbf{A}\Gamma_{pr}\mathbf{A}^\top + \Gamma_{noise})^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0 - \mathbf{u}_0).$$

Siis väite pätee. \square

Lauseesta 4.7 nähdään, että jos suora malli on lineaarinen ja priorin sekä uskottavuusfunktion jakaumat ovat molemmat normaalisia, niin myös posteriorijakauma on normaalinen. Jos halutaan löytää posteriorijakauman maksimiarvo eli arvo, jonka todennäköisyys on suurin, niin pitää löytää sellainen vektori \mathbf{x} , joka maksimoi posteriorijakauman eli joka minimoi termin

$$(4.12) \quad S(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^\top \Gamma_{post}^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}),$$

missä $\bar{\mathbf{x}}$ on yhtälön 4.11 mukainen.

Jos malli on epälineaarinen, niin posteriorijakauma ei välttämättä ole enää normaalinen, vaikka priorin ja uskottavuusfunktion jakaumat olisivatkin. Ongelma pyritäänkin palauttamaan lineaarikseksi, joka saattaa olla lokaalisti riittävä. [10, s. 84] Tällöin etsitään vektorille \mathbf{x} estimaattia, joka minimoi lokaalisti termin $S(\mathbf{x})$. Tämä tehdään yleensä käyttäen iteratiivisia menetelmiä.

On useita tapoja minimoida tämä termi, mutta tässä työssä keskitytään pienimmän neliösumman menetelmään.

5 Parametrien estimointi: pienimmän neliösumman menetelmä

Tässä luvussa käsitellään pienimmän neliösumman menetelmän teoriaa. Ensin käydään läpi sen matemaattinen perusta, jonka jälkeen perehdytään menetelmän kahteen käyttötapaan, painottomiin ja painotettuihin neliösummiin.

Käytännössä mittaukset ovat yleisesti epätarkkoja, jolloin mallin todellisten arvojen määrittäminen ehdottomalla varmuudella ei ole mahdollista. Myös se, että virheet eivät ole samaa suuruusluokkaa eri mittauksissa, aiheuttaa ongelmia, sillä yhteen mittaussarjaan parhaiten sopiva parametrin \boldsymbol{x} arvo eroaa johonkin toiseen mittaussarjaan sopivasta arvosta. Estimoinnilla saadaan tuotettua sellaisia parametrien arvoja, jotka sopivat dataan hyvin, jotka osuvat kohtalaisen lähelle todellisia arvoja ja jotka eivät muutu liikaa yhdestä kokeilujen joukosta toiseen. [1, s. 3]

Määritellään seuraavaksi tavoitefunktio, joka on parametriseissä estimoinnissa keskeinen käsite.

Määritelmä 5.1. (vrt. [1, s. 47]) Parametriseissä estimoinnissa määritellään menetelmäkohtaisesti *tavoitefunktio* $\Phi(\boldsymbol{x})$, joka mittaa datan poikkeamista mallista.

Esimerkki 5.1. (vrt. [1, s. 47]) Pienimmän neliösumman menetelmässä tavoitefunktio on residuaalien neliösumma.

Neliösummamenetelmä on vanhin ja laajimmin käytetty estimointimenetelmä. Osa sen suosiosta johtuu siitä, että sitä voi soveltaa suoraan deterministiseen malliin ilman, että tehdään mitään oletuksia havaintojen todennäköisyysjakaumasta. Kuitenkin estimaatit, jotka on saatu edellä mainitulla tavalla, voivat olla epätydyttäviä. On tilanteita, joissa ei kuitenkaan voida tehdä mitään parempaakaan. [1, s. 55]

Tietyissä tilanteissa neliösummaestimaatit ovat teoreettisesti optimaalisia. Niissä tapauksissa, joissa havainnoilla on tietyt todennäköisyysjakaumat, on näillä estimateilla ihanteellisia tilastollisia ominaisuuksia. [1, s. 55]

5.1 Matemaattinen perusta

Tässä pykälässä käydään läpi pienimmän neliösumman menetelmän matemaattinen teoria lineaarisen ja epälineaarisen mallin tapauksessa.

5.1.1 Lineaarinen menetelmä

On useita tapoja määrittää pienimmän neliösumman ratkaisu lineaarisissa sovituksissa. Yksi niistä on singulaariarvohajotelma (Singular Value Decomposition), jonka englanninkielisestä nimestä tulee sen lyhenne SVD. Koska

Pandora-instrumentin lineaarisen mallin sovituksessa käytetään SVD-menetelmää, käsitellään sitä tässä osiossa.

SVD perustuu seuraavaan lauseeseen [9, s. 52].

Lause 5.1. *Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mielivaltainen matriisi. Tällöin se voidaan esittää matriisien \mathbf{U} , $\mathbf{\Lambda}$ ja \mathbf{V} hajotelmana*

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T,$$

missä $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ja $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ovat ortogonaalisia matriiseja ja $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ diagonaalimatriisi, jonka jokainen diagonaalialkio λ_j on ei-negatiivinen ja

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{\min\{m,n\}}.$$

Todistus (vrt. [3, s. 311-313]). Jos $m \leq n$, niin diagonaalimatriisi $\mathbf{\Lambda}$ on muotoa

$$\mathbf{\Lambda} = [\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m), \mathbf{0}],$$

missä $\mathbf{0}$ on $m \times (n - m)$ -matriisi. Jos taas $m > n$, niin diagonaalimatriisi on muotoa

$$\mathbf{\Lambda} = [\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n), \mathbf{0}]^T,$$

missä $\mathbf{0}$ on $(m - n) \times n$ -matriisi. Merkitään tässä

$$\mathbf{\Lambda} := (\lambda_1, \dots, \lambda_{\min\{m,n\}}).$$

Olkoon $\|\mathbf{A}\| = \lambda_1$, ja oletetaan, että $\lambda_1 \neq 0$. Olkoon $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ sellainen yksikkövektori, että

$$\|\mathbf{Ax}\| = \|\mathbf{A}\|.$$

Tällainen vektori \mathbf{x} on olemassa, sillä se voidaan valita olevan matriisin $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ yksikkövektoriksi normalisoitu ominaisvektori ominaisarvolla λ_1^2 , jolloin

$$\|\mathbf{Ax}\| = \|\lambda_1 \mathbf{x}\| = \lambda_1 \|\mathbf{x}\| = \lambda_1 = \|\mathbf{A}\|.$$

Olkoon $\mathbf{y} = \left(\frac{1}{\lambda_1}\right) \mathbf{Ax} \in \mathbb{R}^m$. Vektori \mathbf{y} on myös yksikkövektori, sillä

$$\|\mathbf{y}\| = \left\| \left(\frac{1}{\lambda_1}\right) \mathbf{Ax} \right\| = \frac{1}{\lambda_1} \|\mathbf{Ax}\| = \frac{1}{\lambda_1} \|\mathbf{A}\| = \frac{1}{\lambda_1} \lambda_1 = 1.$$

Valitaan sellaiset vektorit $\mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n \in \mathbb{R}^n$ ja $\mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m \in \mathbb{R}^m$, että joukko $\{\mathbf{x}, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ on avaruuden \mathbb{R}^n ortonormaali kanta ja joukko $\{\mathbf{y}, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}$ on avaruuden \mathbb{R}^m ortonormaali kanta. Merkitään

$$\mathbf{V}_1 = [\mathbf{x}, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \mathbf{U}_1 = [\mathbf{y}, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}.$$

Koska joukko $\{\mathbf{x}, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ on avaruuden \mathbb{R}^n ortonormaali kanta, niin vektorit $\mathbf{x}, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ ovat yksikkövektoreita ja toisiaan vastaan kohtisuorassa,

joten matriisi \mathbf{V}_1 on ortogonaalinen. Vastaavasti matriisi \mathbf{U}_1 on ortogonaalinen. Nyt

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= \mathbf{U}_1^\top \mathbf{A} \mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{y}^\top \\ \mathbf{u}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_m^\top \end{bmatrix} [\lambda_1 \mathbf{y}, \mathbf{A} \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{A} \mathbf{v}_n] \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{y}^\top \lambda_1 \mathbf{y} & \mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_n \\ \mathbf{u}_2^\top \lambda_1 \mathbf{y} & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_n \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \mathbf{u}_m^\top \lambda_1 \mathbf{y} & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_n \\ 0 & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_n \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{A} \mathbf{v}_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{w}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

missä $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{(n-1)}$ ja $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{(m-1) \times (n-1)}$. Koska

$$\mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{w}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 + \mathbf{w}^\top \mathbf{w} \\ \mathbf{B} \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2 \\ \mathbf{B} \mathbf{w} \end{bmatrix},$$

niin

$$\left\| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\| = \sqrt{(\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2)^2 + \|\mathbf{B} \mathbf{w}\|^2}.$$

Tästä seuraa, että

$$(5.1) \quad \left\| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\| \geq \sqrt{(\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2)^2} = \lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2.$$

Nyt

$$(5.2) \quad \|\mathbf{A}_1\| \left\| \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\| \geq \left\| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|,$$

sillä

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|^2 &= \left(\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right)^\top \mathbf{A}_1^\top \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \\ &\leq \lambda_1^2 \left(\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right)^\top \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \\ &= \|\mathbf{A}_1\|^2 \left\| \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|^2. \end{aligned}$$

Koska

$$\left\| \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\| = \sqrt{\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2},$$

niin yhtälöiden 5.1 ja 5.2 nojalla

$$\|\mathbf{A}_1\| \left\| \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\| = \|\mathbf{A}_1\| \sqrt{\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2} \geq \lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2,$$

josta saadaan

$$\|\mathbf{A}_1\| \geq \frac{\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2}{\sqrt{\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2}} = \sqrt{\frac{(\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2)^2}{\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2}} = \sqrt{\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2}.$$

Toisaalta, ortogonaalinen muunnos säilyttää matriisin normin, joten

$$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}_1\| \geq \sqrt{\lambda_1^2 + \|\mathbf{w}\|^2}.$$

Koska $\|\mathbf{A}\| = \lambda_1$, niin on oltava $\mathbf{w} = \mathbf{0}$. Jatketaan induktiivisesti. Olkoon $\lambda_2 = \|\mathbf{B}\|$. Oletuksen nojalla

$$\lambda_1 = \|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}_1\| \geq \lambda_2.$$

Jos $\lambda_2 = 0$ eli $\mathbf{B} = \mathbf{0}$, niin voidaan lopettaa, sillä oletuksen perusteella $\lambda_2 \geq \lambda_i$, kun $i = 3, \dots, \min\{m, n\}$, joten $\lambda_i = 0$, kun $i = 3, \dots, \min\{m, n\}$.

Oletetaan, että $\lambda_2 > 0$. Edetään kuten aikaisemmin, eli etsitään sellaiset ortogonaaliset matriisit $\tilde{\mathbf{U}}_2 \in \mathbb{R}^{(m-1) \times (m-1)}$ ja $\tilde{\mathbf{V}}_2 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$, että

$$\tilde{\mathbf{U}}_2^T \mathbf{B} \tilde{\mathbf{V}}_2 = \begin{bmatrix} \lambda_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{bmatrix},$$

missä $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{(m-2) \times (n-2)}$. Määrittelemällä

$$\mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{U}}_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{V}}_2 \end{bmatrix},$$

saadaan ortogonaaliset matriisit, joilla on ominaisuus

$$\mathbf{U}_2^T \mathbf{U}_1^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & \lambda_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{bmatrix}.$$

Jatkamalla induktiivisesti esittämällä jokainen osittainen diagonalisointi ortogonaalisilla muutoksilla saadaan

$$\mathbf{U}_{\min\{m,n\}}^T \cdots \mathbf{U}_1^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \cdots \mathbf{V}_{\min\{m,n\}} = (\lambda_1, \dots, \lambda_{\min\{m,n\}}) = \mathbf{\Lambda}.$$

Merkitään

$$\mathbf{U}^T = \mathbf{U}_{\min\{m,n\}}^T \cdots \mathbf{U}_1^T, \quad \mathbf{V} = \mathbf{V}_1 \cdots \mathbf{V}_{\min\{m,n\}},$$

missä $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ja $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Tällöin voidaan kirjoittaa

$$(5.3) \quad \mathbf{U}^\top \mathbf{A} \mathbf{V} = \mathbf{\Lambda}.$$

Koska jokainen $\mathbf{U}_j^\top, j = 1, \dots, \min\{m, n\}$, on ortogonaalinen, niin myös matriisi \mathbf{U} on ortogonaalinen. Vastaavasti matriisi \mathbf{V} on ortogonaalinen. Tällöin siis $\mathbf{U}\mathbf{U}^\top = \mathbf{I}$ ja $\mathbf{V}\mathbf{V}^\top = \mathbf{I}$. Kertomalla yhtälö 5.3 vasemmalta matriisilla \mathbf{U} ja oikealta matriisilla \mathbf{V}^\top saadaan

$$(5.4) \quad \begin{aligned} & \mathbf{U}^\top \mathbf{A} \mathbf{V} = \mathbf{\Lambda} \\ \rightarrow & \underbrace{\mathbf{U}\mathbf{U}^\top}_{\mathbf{I}} \mathbf{A} \underbrace{\mathbf{V}\mathbf{V}^\top}_{\mathbf{I}} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^\top \\ \leftrightarrow & \mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^\top. \end{aligned}$$

Yhtälöstä 5.4 nähdään, että matriisi \mathbf{A} saadaan esitettyä ortogonaalisten matriisien $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ja $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sekä diagonaalimatriisin $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ hajotelmana. Siis väite pätee. \square

Käydään seuraavaksi ensin läpi SVD-menetelmän käyttö neliömatriiseilla, jonka jälkeen käydään lyhyesti läpi ne tilanteet, joissa rivejä on enemmän kuin sarakkeita ja päinvastoin. Aloitetaan todistamalla matriisin \mathbf{A} käänteismatriisin singulaariarvohajotelman esitysmuoto.

Lause 5.2. *Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kääntyvä. Sen käänteismatriisi voidaan esittää muodossa*

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V} \left[\text{diag} \left(\frac{1}{\lambda_j} \right) \right] \mathbf{U}^\top,$$

missä matriisit \mathbf{U}, \mathbf{V} ja $\mathbf{\Lambda}$ ovat kuten lauseessa 5.1 ja $\lambda_j \neq 0$ kaikilla $j = 1, \dots, n$.

Todistus (vrt. [9, s. 54]). Matriisi \mathbf{A} on neliömatriisi, jolloin myös matriisit \mathbf{U}, \mathbf{V} ja $\mathbf{\Lambda}$ ovat neliömatriiseja. Matriisit \mathbf{U} ja \mathbf{V} ovat ortogonaalisia, joten niiden käänteismatriisit ovat

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\top, \quad \mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}^\top.$$

Matriisi $\mathbf{\Lambda}$ on diagonaalimatriisi, jolloin sen käänteismatriisi on sellainen diagonaalimatriisi, jonka diagonaali-alkiot ovat matriisin $\mathbf{\Lambda}$ diagonaali-alkioiden käänteisalkioita. Merkitään tässä

$$\mathbf{\Lambda}^{-1} := \text{diag} \left(\frac{1}{\lambda_j} \right).$$

Koska matriisi \mathbf{A} voidaan lausua lauseen 5.1 nojalla matriisien \mathbf{U}, \mathbf{V} ja $\mathbf{\Lambda}$ hajotelmana, niin sen käänteismatriisi on muotoa

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^{-1} &= [\mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T]^{-1} \\ &= (\mathbf{V}^T)^{-1} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{U}^{-1} \\ &= (\mathbf{V}^{-1})^{-1} \text{diag} \left(\frac{1}{\lambda_j} \right) \mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{V} \left[\text{diag} \left(\frac{1}{\lambda_j} \right) \right] \mathbf{U}^T.\end{aligned}$$

Siis väite pätee. □

Määritellään seuraavaksi matriisin häiriöalttius.

Määritelmä 5.2. (vrt. [9, s. 54]) Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sellainen matriisi, että $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$, missä matriisit \mathbf{U}, \mathbf{V} ja $\mathbf{\Lambda}$ ovat kuten lauseessa 5.1. Olkoon $\lambda_p = \min \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ ja $\lambda_s = \max \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$. Matriisin \mathbf{A} häiriöalttius on tällöin

$$\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\lambda_s}{\lambda_p}.$$

Jos $\lambda_p = 0$, niin sanotaan, että häiriöalttius on ääretön.

Jos matriisin häiriöalttius on liian suuri, niin matriisi on tällöin *vajaalattuinen*. Jos se on ääretön, niin tällöin matriisi ei ole kääntyvä. Todistetaan tämä seuraavaksi.

Lause 5.3. *Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Jos matriisin \mathbf{A} häiriöalttius on ääretön, niin matriisi ei ole kääntyvä.*

Todistus. Olkoon

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T,$$

missä matriisit \mathbf{U}, \mathbf{V} ja $\mathbf{\Lambda}$ ovat kuten lauseessa 5.1. Oletetaan, että häiriöalttius on ääretön eli $\kappa(\mathbf{A}) = \infty$, jolloin

$$\min \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\} = 0.$$

Siis ainakin $\lambda_n = 0$. Koska diagonaalimatriisin $\mathbf{\Lambda}$ determinantti on

$$\det(\mathbf{\Lambda}) = \prod_{j=1}^n \lambda_j,$$

niin $\det(\mathbf{\Lambda}) = 0$. Oletuksen nojalla $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$, joten tällöin

$$\begin{aligned}\det(\mathbf{A}) &= \det(\mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T) \\ &= \det(\mathbf{U}) \det(\mathbf{\Lambda}) \det(\mathbf{V}^T) \\ &= 0.\end{aligned}$$

Matriisin \mathbf{A} determinantti on siis 0, joten se ei ole kääntyvä. Siis väite pätee. □

Määritellään seuraavaksi matriisin nolla-avaruus ja sarakeavaruus.

Määritelmä 5.3. (vrt. [9, s. 54]) Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Matriisin \mathbf{A} *nolla-avaruus* on

$$\text{Ker}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}\}.$$

Määritelmä 5.4. (vrt. [9, s. 54]) Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, missä \mathbf{a}_k on matriisin k . sarakevektori. Matriisin \mathbf{A} *sarakeavaruus* $C(\mathbf{A})$ on kaikkien matriisin \mathbf{A} sarakevektorien muodostamien lineaarikombinaatioiden joukko eli

$$b_1\mathbf{a}_1 + \dots + b_n\mathbf{a}_n \in C(\mathbf{A})$$

kaikilla skalaareilla $b_1, \dots, b_n \in \mathbb{R}$.

SVD rakentaa ortonormaaleja kantoja matriisin nolla-avaruudelle ja sarakeavaruudelle. Erityisesti ne matriisin \mathbf{U} sarakkeet, joilla samannumeroiset elementit λ_j poikkeavat nolasta, ovat ortonormaali joukko kantavektoreita, jotka virittävät sarakeavaruuden. Vastaavasti matriisin \mathbf{V} ne sarakkeet, joilla samannumeroiset elementit λ_j ovat nolliä, muodostavat nolla-avaruuden ortonormaalina kannan. [9, s. 54-55]

Linearisessa sovituksessa halutaan ratkaista yhtälö

$$(5.5) \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

missä $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ on ei-kääntyvä neliömatriisi eli ainakin yksi $\lambda_j = 0$, kun $j = 1, \dots, n$, ja $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ ovat vektoreita. SVD-menetelmän idea on, että etsitään sellainen vektori \mathbf{x} , jolla residuaalien $e_{a\mu} = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$ neliösumma minimoituu. Kysymykseksi nousee se, onko vektori \mathbf{b} matriisin \mathbf{A} kuvaavaruudessa vai ei [9, s. 55]. Tarkastellaan molemmat mahdolliset tilanteet erikseen.

Jos vektori \mathbf{b} on matriisin \mathbf{A} sarakeavaruudessa, niin tällöin yhtälöllä 5.5 on ratkaisu \mathbf{x} . Itseasiassa sillä on useita ratkaisuja. Jos halutaan valita yksi tietty jäsen tästä vektoreiden ratkaisujoukosta, niin valitaan sellainen vektori, jonka pituus $\|\mathbf{x}\|$ on lyhyin. Tämä vektori löydetään käyttämällä SVD-menetelmää ja korvaamalla jokainen alkio $\frac{1}{\lambda_j}$, missä $\lambda_j \in \mathbf{\Lambda}$, arvolla 0, jos $\lambda_j = 0$. [9, s. 55] Esitetään tämä seuraavassa lauseessa.

Lause 5.4. *Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ei-kääntyvä neliömatriisi. Halutaan valita sellainen vektori $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ yhtälöryhmän*

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

ratkaisujen joukosta, jonka pituus on lyhyin. Tämä vektori saadaan laske-
malla

$$(5.6) \quad \mathbf{x} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{U}^T\mathbf{b},$$

missä $\mathbf{\Lambda}^+ = \text{diag}(\lambda_1^+, \dots, \lambda_n^+)$ ja

$$\lambda_j^+ = \begin{cases} 0, & \lambda_j = 0 \\ \frac{1}{\lambda_j}, & \lambda_j \neq 0 \end{cases}$$

kaikilla $j = 1, \dots, n$.

Todistus (vrt. [9, s. 55]). Olkoon $\mathbf{x}' \in \text{Ker}(\mathbf{A})$. Lasketaan $\|\mathbf{x} + \mathbf{x}'\|$, jolloin saadaan

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x} + \mathbf{x}'\| &= \|\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{U}^T\mathbf{b} + \mathbf{x}'\| \\ &= \|\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{U}^T\mathbf{b} + \mathbf{V}\mathbf{V}^T\mathbf{x}'\| \\ &= \|\mathbf{V}(\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{U}^T\mathbf{b} + \mathbf{V}^T\mathbf{x}')\| \\ &= \|\mathbf{V}\| \|(\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{U}^T\mathbf{b} + \mathbf{V}^T\mathbf{x}')\| \\ &= \|\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{U}^T\mathbf{b} + \mathbf{V}^T\mathbf{x}'\|. \end{aligned}$$

Nyt vektorin $\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{U}^T\mathbf{b}$ komponentti j eroaa nolasta vain jos $\lambda_j \neq 0$. Vektori \mathbf{x}' on matriisin \mathbf{A} nolla-avaruudessa, joten sen voidaan lausua matriisin \mathbf{V} niiden sarakkeiden lineaarikombinaationa, joilla diagonaalimatriisin $\mathbf{\Lambda}$ samannumeroinen alkio λ_j on 0. Matriisin \mathbf{V} sarakkeet ovat keskenään toisiaan vastaan kohtisuorassa, joten vektorin $\mathbf{V}^T\mathbf{x}'$ j . komponentti eroaa nolasta vain jos $\lambda_j = 0$. Täten pituuden $\|\mathbf{x} + \mathbf{x}'\|$ minimi saavutetaan, kun $\mathbf{x}' = 0$. Siis väite pätee. \square

Jos vektori \mathbf{b} ei ole matriisin \mathbf{A} sarakeavaruudessa, niin tällöin yhtälöllä 5.5 ei ole ratkaisua. Tästä huolimatta lauseen 5.4 mukaista yhtälöä 5.6 voidaan käyttää ratkaisun \mathbf{x} rakentamiseen. Näin saatu vektori \mathbf{x} ei tarkalleen ottaen ratkaise yhtälöä 5.5, mutta kaikkien mahdollisten ratkaisuvektorien joukosta se tuottaa lähimmät arvot pienimpien neliösummien mielessä. Todistetaan tämä seuraavaksi.

Lause 5.5. *Vektori \mathbf{x} , joka on määritelty yhtälössä 5.6, minimoi jäännöksen*

$$e = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|.$$

Todistus (vrt. [9, s. 56]). Olkoon $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^n$ mielivaltainen vektori. Tällöin

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{x}') - \mathbf{b} = \mathbf{Ax} + \mathbf{Ax}' - \mathbf{b}.$$

Merkitään $\mathbf{b}' := \mathbf{Ax}'$. Selvästi vektori \mathbf{b}' on matriisin \mathbf{A} kuva-avaruudessa.

Nyt saadaan

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b} + \mathbf{b}'\| &= \|(U\Lambda V^T)(V\Lambda^+U^T\mathbf{b}) - \mathbf{b} + \mathbf{b}'\| \\
&= \left\| U\Lambda \underbrace{V^T V}_I \Lambda^+ U^T \mathbf{b} - \mathbf{b} + U U^T \mathbf{b}' \right\| \\
&= \|(U\Lambda I \Lambda^+ U^T - I)\mathbf{b} + U U^T \mathbf{b}'\| \\
&= \|(U\Lambda \Lambda^+ U^T - I)U U^T \mathbf{b} + U U^T \mathbf{b}'\| \\
&= \|U [(\Lambda \Lambda^+ - I)U^T \mathbf{b} + U^T \mathbf{b}']\| \\
&= \|U\| \|(\Lambda \Lambda^+ - I)U^T \mathbf{b} + U^T \mathbf{b}'\| \\
&= \|(\Lambda \Lambda^+ - I)U^T \mathbf{b} + U^T \mathbf{b}'\|.
\end{aligned}$$

Nyt $\Lambda \Lambda^+ - I$ on diagonaalimatriisi, jonka alkio j on eroa nollasta, jos $\lambda_j = 0$. Vektori \mathbf{b}' on matriisin \mathbf{A} kuva-avaruudessa, joten se voidaan lausua niiden matriisin U sarakkeiden lineaarikombinaationa, joilla samannumeroinen diagonaalimatriisin Λ alkio $\lambda_j \neq 0$. Matriisin U sarakkeet ovat keskenään toisiinsa vastaan kohtisuorassa, jolloin vektorin $U^T \mathbf{b}'$ j : alkio eroa nollasta, jos $\lambda_j \neq 0$. Täten minimi saavutetaan, kun $\mathbf{b}' = 0$. Siis väite pätee. \square

Edellä on oletettu, että matriisi on joko ei-kääntyvä tai kääntyvä, joka pätee teoreettisissa tarkasteluissa. Numeerisesti katsoen tilanne ei ole aivan niin, sillä yleinen tilanne on se, että jotkut alkio λ_j ovat hyvin pieniä, mutta erisuuria kuin 0. Tällöin matriisin häiriöalttius on liian suuri. Tällaisissa tapauksissa jotkin muut menetelmät voivat ratkaista yhtälön 5.5, mutta ratkaisuvektorin arvot ovat suuria ja vektorin kertominen matriisilla \mathbf{A} tuottaa huonon approksimaation vektorista \mathbf{b} . Näissä tilanteissa vektorin \mathbf{x} ratkaiseminen asettamalla pienten arvojen λ_j tilalle arvon 0 ja käyttämällä lauseen 5.4 mukaista menetelmää on usein parempi kuin SVD-menetelmän käyttäminen ilman tätä korvausta. Saattaa tuntua oudolta, että nollataan arvo ja näin jätetään yksi lineaarikombinaatio pois niiden yhtälöiden joukosta, joita yritetään ratkaista. Peruste tälle on kuitenkin se, että kyseinen lineaarikombinaatio on niin pyöristysvirheen dominoima, että se on hyödytön. SVD-menetelmää käyttäessä pitää määrittää pienelle arvolle kynnyksen, jolla $\lambda_j = 0$, ja pitää olla mahdollisesti jokin käsitys siitä, minkä kokoinen jännös on hyväksyttävä [9, s. 56].

Käydään seuraavaksi lyhyesti läpi tilanteet, joissa matriisi \mathbf{A} ei ole neliömatriisi. Jos $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, missä $m < n$ eli sarakkeita on enemmän kuin rivejä, niin tällöin ei ole olemassa yksikäsitteistä ratkaisua ja usein on $(n - m)$ -ulotteinen ratkaisujen joukko. SVD-menetelmää käyttämällä voidaan kuitenkin löytää koko ratkaisuavaruus. [9, s. 58] Se tehdään seuraavaksi esitellyllä tavalla. Lisätään matriisiin \mathbf{A} nollarivejä, kunnes rivejä on yhtä paljon kuin sarakkeita. Vastaavasti lisätään vektoriin \mathbf{b} yhtä monta nolla-alkiota. Tällöin saadaan ei-kääntyvä joukko, jossa on n yhtälöä n :ssä tuntematonta. Tähän

yhtälöryhmään sovelletaan SVD-menetelmää kuten on kuvattu aikaisemmin. Jokainen lisätty nollarivi tuottaa joko arvon 0 tai merkityksettömän arvon λ_j . [9, s. 58]

Jos $m > n$, eli yhtälöitä on enemmän kuin tuntemattomia, lauseiden 5.4 ja 5.5 mukaiset menetelmät soveltuvat ilman muutoksia kyseiseen tilanteeseen [9, s. 59].

5.1.2 Epälineaarinen menetelmä

Joissain tilanteissa tuntemattomien parametrien voidaan olettaa saavan mitä arvoja tahansa ja joissain tilanteissa vain arvot, jotka täyttävät tiettyjen epäyhtälöiden ja yhtälöiden ehdot, ovat hyväksyttäviä. Näissä tilanteissa ongelmana on löytää sellaiset arvot \mathbf{x} , että tavoitefunktio $\Phi(\mathbf{x})$ saavuttaa minimin ehdoilla

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0},$$

missä \mathbf{h} ja \mathbf{g} ovat vektoreita, joiden alkiot ovat annettuja funktioita. [1, s. 83]

Koska Pandora-instrumentti laskee epälineaarisisessa sovituksessa pienimmät neliösummat iteratiivisesti [2, s. 56], niin keskitytään tässä osiossa iteratiiviseen tapaan laskea ne. Käsitellään ensin iteratiivista menetelmää yleisellä tasolla, jonka jälkeen siirrytään esittelemään Pandoran käyttämää Levenberg-Marquardt -menetelmää.

Iteratiivisissa menetelmissä ideana on, että etsitään sellainen estimaatti $\hat{\mathbf{x}}$, jolla residuaalien

$$e_{a\mu} = y_{a\mu} - f_a(\mathbf{b}_\mu, \hat{\mathbf{x}})$$

neliösumma minimoituu.

Iteraation perusidea on se, että aloitetaan annetulla pisteellä \mathbf{x}_1 , jota kutsutaan *alkuarvaukseksi* [1, s. 84]. Sille voidaan antaa arvo eri tavoin. Luonnollisin menetelmä on käyttää esimerkiksi estimateja, joita on saatu aikaisemmista kokeiluista tai käyttää tunnettuja arvoja vastaavista systeemeistä [1, s. 121].

Esimerkki 5.2. (vrt. [2, s. 56]) Pandora-instrumentissä alkuarvaukset ovat lineaarisesta sovituksesta saatuja arvoja. Niiden parametrien alkuarvaukset, joita ei käytetä lineaarisessa sovituksessa, saavat arvon 0.

Alkuarvauksen avulla luodaan pisteiden sarja $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots$, jonka toivotaan suppenevan kohti pistettä $\hat{\mathbf{x}}$, jossa tavoitefunktio $\Phi(\mathbf{x})$ saavuttaa minimin [1, s. 84].

Määritelmä 5.5. (vrt. [1, s. 84]) Pisteen \mathbf{x}_{i+1} laskemista kutsutaan *i. iteraatioksi* ja pistettä \mathbf{x}_i *i. toistoksi*.

Käytännössä on kaksi tapaa lopettaa iterointi. Ensimmäinen on iteroinnin keskeyttäminen äärellisen iteraatiomäärän N jälkeen ja arvon \mathbf{x}_N hyväksyminen estimaattin $\hat{\mathbf{x}}$ approksimaatioksi [1, s. 84]. Toinen on iteroinnin keskeyttäminen siinä vaiheessa, kun iteraatiot eivät enää muuta parametrin arvoja merkittävästi [1, s. 114].

Huomautus 5.1. (vrt. [1, s. 114]) Olkoon $l \in \mathbb{N}$ vektorin \mathbf{x} ulottuvuus. Määritellään pienten lukujen joukko ω_α , missä $\alpha = 1, 2, \dots, l$. Iteraation $i + 1$. piste \mathbf{x}_{i+1} hyväksytään estimaattin $\hat{\mathbf{x}}$ ratkaisuksi, jos

$$|x_{i+1,\alpha} - x_{i,\alpha}| \leq \omega_\alpha,$$

missä $x_{i,\alpha}$ on i . iteraation \mathbf{x}_i α . komponentti.

Huomautus 5.2. (vrt. [1, s. 114]) Joukko ω_α voidaan joko määritellä edeltä käsin tai laskea. Levenberg-Marquardt -menetelmässä se on määritelty olevan

$$\omega_\alpha = 10^{-4}(x_{i,\alpha} + 10^{-3}).$$

Määritelmä 5.6. (vrt. [1, s. 84]) Vektoria

$$\boldsymbol{\sigma}_i := \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i.$$

kutsutaan *i*. askeleeksi.

Jokaisen askeleen $\boldsymbol{\sigma}_i$ toivotaan vievän lähemmäksi minimiä. Tätä ehtoa ei kuitenkaan voida testata suoraan, koska ei tiedetä missä kohti minimi on. Voidaan ajatella, että *i*. askel on parantanut tilannetta, jos seuraavan määritelmän ehto pätee. [1, s. 84]

Määritelmä 5.7. (vrt. [1, s. 84-85]) Askelta $\boldsymbol{\sigma}_i$ kutsutaan *hyväksyttäväksi*, jos pätee, että

$$\Phi(\mathbf{x}_{i+1}) < \Phi(\mathbf{x}_i).$$

Määritelmä 5.8. (vrt. [1, s. 85]) Iteratiivista menetelmää kutsutaan *hyväksyttäväksi*, jos kaikki sen tuottamat askeleet ovat hyväksyttäviä.

Algoritmi 5.1 (Perusiterointi). (vrt. [1, s. 85]) Iteraatiomenetelmät noudattavat seuraavaa järjestystä:

1. Asetetaan $i = 1$ ja hankitaan alkuperäinen arvaus \mathbf{x}_1 .
2. Määritetään ehdotetun *i*. askeleen suuntaan osoittava vektori \mathbf{v}_i .
3. Määritetään sellainen skalaari ρ_i , että askel

$$\boldsymbol{\sigma}_i = \rho_i \mathbf{v}_i$$

on hyväksyttävä. Toisin sanoen, asetetaan

$$(5.7) \quad \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \rho_i \mathbf{v}_i$$

ja valitaan sellainen ρ_i , että määritelmän 5.7 ehto pätee.

4. Testataan toteutuuko lopettamiskriteeri. Jos ei, kasvatetaan indeksiä i yhdellä ja palataan kohtaan 2. Jos lopettamisehto toteutuu, niin hyväksytään piste \mathbf{x}_{i+1} estimaattin $\hat{\mathbf{x}}$ arvoksi.

Määritelmä 5.9. (vrt. [1, s. 85]) Vektoria \mathbf{v}_i kutsutaan *askeleen suunnaksi* ja skalaaria ρ_i *askeleen kooksi*.

Määritelmä 5.10. (vrt. [1, s. 85]) Oletetaan, että mielivaltaisella minimointiprosessin i . iteraatiolla edetään arvosta \mathbf{x}_i johonkin suuntaan \mathbf{v} ja määritellään *säde* funktiolla

$$\mathbf{x}(\rho) := \mathbf{x}_i + \rho\mathbf{v},$$

missä $\rho \geq 0$. Tällä säteellä tavoitefunktio vaihtelee skalaarin ρ muutosten mukaan ja on vain skalaarin ρ funktio

$$\Psi_{i\mathbf{v}}(\rho) := \Phi(\mathbf{x}(\rho)),$$

joka voidaan kirjoittaa funktion $\mathbf{x}(\rho)$ määritelmän perusteella muodossa

$$\Phi(\mathbf{x}(\rho)) = \Phi(\mathbf{x}_i + \rho\mathbf{v}).$$

Määritelmä 5.11. (vrt.[1, s. 85]) Funktion $\Phi(\mathbf{x})$ *gradienttivektori* on

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) := \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{x}}(\mathbf{x}),$$

missä vektorin \mathbf{q} alkio α on $\frac{\partial\Phi}{\partial x_\alpha}$. Merkitään jatkossa

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}_i) := \mathbf{q}_i.$$

Oletetaan aluksi, että $\mathbf{q}_i \neq \mathbf{0}$. Tapausta $\mathbf{q}_i = \mathbf{0}$ käsitellään myöhemmin.

Määritelmä 5.12. (vrt. [1, s. 85-86]) Funktion $\Psi_{i\mathbf{v}}(\rho)$ derivaattaa

$$\Psi'_{i\mathbf{v}} = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{x}}(\mathbf{x}_i) \right)^\top \mathbf{v} = \mathbf{q}_i^\top \mathbf{v}$$

kutsutaan funktion Φ *suunnatuksi derivaataksi* suhteessa vektoriin \mathbf{v} pisteessä \mathbf{x}_i .

Jos derivaatta $\Psi'_{i\mathbf{v}}$ on negatiivinen, niin tällöin funktion $\Phi(\mathbf{x})$ arvo pienenee, kun liikutaan pois pisteestä \mathbf{x}_i suuntaan \mathbf{v} . Jos tässä tapauksessa skalaari ρ on riittävän pieni positiivinen arvo, niin askel $\rho\mathbf{v}$ on hyväksyttävä. Derivaatan $\Psi'_{i\mathbf{v}}$ ollessa positiivinen tai nolla ei välttämättä ole olemassa positiivista skalaaria ρ , jolla askel $\rho\mathbf{v}$ olisi hyväksyttävä. [1, s. 86] Tämä johtaa seuraavaan määritelmään.

Määritelmä 5.13. (vrt. [1, s. 86]) Vektoria \mathbf{v} kutsutaan *hyväksyttäväksi suunnaksi*, jos

$$\Psi'_{i\mathbf{v}} < 0.$$

Lause 5.6. *Suunta \mathbf{v} on hyväksyttävä, jos ja vain jos on olemassa jokin sellainen positiivisesti definiitti matriisi \mathbf{R} , että ehto*

$$(5.8) \quad \mathbf{v} = -\mathbf{R}\mathbf{q}_i$$

pätee.

Todistus (vrt. [1, s. 86]). Todistus tehdään kahdessa osassa. Oletetaan ensin, että suunta \mathbf{v} on hyväksyttävä ja osoitetaan positiivisesti definiitin matriisin \mathbf{R} olemassaolo. Tällöin määritelmistä 5.12 ja 5.13 saadaan, että $\mathbf{q}_i^\top \mathbf{v} < 0$. Valitaan sellainen matriisi \mathbf{R} , että

$$\mathbf{R} = \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^\top}{\mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i} - \frac{\mathbf{v} \mathbf{v}^\top}{\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i} \right).$$

Olkoon vektori $\mathbf{z} \neq \mathbf{0}$ mielivaltainen. Tällöin Cauchy-Schwarzin epäyhtälön (lause 2.4) nojalla

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^\top \mathbf{R} \mathbf{z} &= \mathbf{z}^\top \mathbf{I} \mathbf{z} - \frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^\top \mathbf{z}}{\mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i} - \frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{v} \mathbf{v}^\top \mathbf{z}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i} \\ &= \mathbf{z}^\top \mathbf{z} - \frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{q}_i \mathbf{z}^\top \mathbf{q}_i}{\mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i} - \frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{v} \mathbf{z}^\top \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i} \\ &\geq \mathbf{z}^\top \mathbf{z} - \frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{z} \mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i}{\mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i} - \frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{z} \mathbf{v}^\top \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i} \\ &= -\frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{z} \mathbf{v}^\top \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i}. \end{aligned}$$

Koska $\mathbf{z} \neq \mathbf{0}$, niin $\mathbf{z}^\top \mathbf{z} > 0$. Oletuksen perusteella $\mathbf{q}_i^\top \mathbf{v} < 0$, joten

$$-\frac{\mathbf{z}^\top \mathbf{z} \mathbf{v}^\top \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i} > 0.$$

Siis matriisi \mathbf{R} on positiivisesti definiitti. Kertomalla matriisi $-\mathbf{R}$ vektorilla \mathbf{q}_i saadaan

$$-\mathbf{R}\mathbf{q}_i = -\mathbf{I}\mathbf{q}_i + \frac{\mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i}{\mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i} + \frac{\mathbf{v} \mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i}{\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i} = -\mathbf{q}_i + \mathbf{q}_i + \mathbf{v} = \mathbf{v}.$$

Siis ehto pätee.

Todistetaan sitten suunnan \mathbf{v} hyväksyttävyys. Olkoon \mathbf{R} jokin positiivisesti definiitti matriisi, ja oletetaan, että yhtälö 5.8 pätee. Määritelmän 5.12 ja positiivisen definiittiyden määritelmän perusteella saadaan

$$\Psi'_{i\mathbf{v}} = \mathbf{q}_i^\top \mathbf{v} = -\mathbf{q}_i^\top \mathbf{R}\mathbf{q}_i < 0,$$

joka määritelmän 5.13 perusteella tarkoittaa, että suunta \mathbf{v} on hyväksyttävä.

Siis väite pätee. \square

Huomautus 5.3. Lauseen 5.6 nojalla yhtälö 5.7 voidaan esittää muodossa

$$(5.9) \quad \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \rho_i \mathbf{R}_i \mathbf{q}_i.$$

Olisi hyvä, jos voitaisiin todistaa, että valitun iteraatiomenetelmän tuottama pisteiden jono suppenee kohti tavoitefunktion todellista minimiä. Valittavasti suppenevuuden todistukset vaativat, että tehdään tiettyjä oletuksia tavoitefunktioista, joiden oikeellisuus on hankalaa varmistaa. Myöskään suppenevuustodisten olemassaolo ei takaa, että menetelmän tuottama pisteiden jono suppenee kohti minimiä käytännössä. Menetelmä saattaa tuottaa suppenevan jonon teoriassa, mutta tekee sen suurella määrällä iteraatioita tai vaatii, että laskut tehdään kohtuuttomalla tarkkuudella. [1, s. 87]

Määritelmä 5.14. (vrt. [1, s. 87]) Tavoitefunktion *vakaa piste* on sellainen piste \mathbf{x}_i , jolla $\mathbf{q}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{0}$ eli $\mathbf{q}_i = \mathbf{0}$.

Yhtälöstä 5.9 nähdään, että jokainen \mathbf{x}_j , missä $j \geq i$, yhtyvät pisteen \mathbf{x}_i kanssa. Tällöin iteraatiomenetelmän tuottama pisteiden jono suppenee kohti minimiä, jos voidaan osoittaa, että tavoitefunktioilla ei ole muita vakaita pisteitä. [1, s. 87]

Suppenevuustodistukset vaativat, että on valittu riittävän suuret skalaarit ρ_i ja että matriisit \mathbf{R}_i ovat positiivisesti definiittejä [1, s. 87].

Lause 5.7. *Olkoon D kaikkien sellaisten pisteiden \mathbf{x} joukko, joilla pätee $\Phi(\mathbf{x}) \leq \Phi(\mathbf{x}_1)$. Oletetaan, että seuraavat ehdot pätevät:*

1. *Tavoitefunktioilla Φ on jatkuva ensimmäinen ja rajoitettu toinen derivaatta joukossa D .*
2. *Olkoon μ_i pienin ei-negatiivinen skalaarin ρ arvo, jolla $\Psi_{i\mathbf{v}_i}(\rho)$ saavuttaa lokaalin minimin, missä $\mathbf{v}_i = -\mathbf{R}_i \mathbf{q}_i$. Olkoon α sellainen vakio, että $0 < \alpha < 1$, ja olkoon $\rho_0 > 0$. Valitaan jokainen skalaari ρ_i siten, että joko*

$$\alpha\mu_i \leq \rho_i \leq \mu_i$$

tai

$$\min(\rho_0, \alpha\mu_i) \leq \rho_i \leq \mu_i.$$

3. *Olkoon β ja γ sellaisia vakioita, että $\gamma > \beta > 0$. Valitaan jokainen matriisi \mathbf{R}_i siten, että kaikki sen ominaisarvot λ_j toteuttavat ehdon $\beta \leq \lambda_j \leq \gamma$ kaikilla j .*

Tällöin kaikki jonon $\{\mathbf{x}_i\}$ rajapisteet ovat vakaita pisteitä.

Todistus. Ks. [1, s. 320-322]. □

Iteraatioissa käytettävät peruskäsitteet ja tarvittavat lauseet on nyt käsitelty, joten voidaan siirtyä Levenberg-Marquardt -menetelmään.

Levenberg-Marquardt -menetelmä perustuu siihen havaintoon, että jos matriisi \mathbf{P} on mikä tahansa positiivisesti definiitti matriisi, niin tällöin matriisi $\mathbf{A}_i + \lambda\mathbf{P}$ on positiivisesti definiitti riittävän suurilla arvoilla λ matriisin \mathbf{A}_i ollessa mielivaltainen [1, s. 94].

Lause 5.8. *Olkoon $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mielivaltainen symmetrinen matriisi, ja olkoon $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sellainen diagonaalimatriisi, että*

$$b_{jj} := \begin{cases} |a_{jj}|^{\frac{1}{2}}, & \text{kun } a_{jj} \neq 0 \\ 1, & \text{kun } a_{jj} = 0 \end{cases}.$$

Tällöin matriisi \mathbf{B}^2 on positiivisesti definiitti.

Todistus. Matriisi \mathbf{B}^2 on muotoa

$$b_{jj}^2 := \begin{cases} |a_{jj}|, & \text{kun } a_{jj} \neq 0 \\ 1, & \text{kun } a_{jj} = 0 \end{cases}.$$

Valitaan sellainen mielivaltainen vektori $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, että $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. Nyt vektorin $\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^2$ j . alkio on

$$(\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^2)_j = \begin{cases} x_j |a_{jj}|, & \text{kun } a_{jj} \neq 0 \\ x_j, & \text{kun } a_{jj} = 0 \end{cases},$$

missä x_j on vektorin \mathbf{x} j . alkio. Summan $\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^2 \mathbf{x}$ j . termi on tällöin

$$(\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^2 \mathbf{x})_j = \begin{cases} x_j^2 |a_{jj}|, & \text{kun } a_{jj} \neq 0 \\ x_j^2, & \text{kun } a_{jj} = 0 \end{cases}.$$

Nyt selvästi $x_j^2 \geq 0$ ja $x_j^2 |a_{jj}| \geq 0$ kaikilla $j = 1, \dots, n$, joten $\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^2 \mathbf{x} \geq 0$. Koska $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, niin tällöin $\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^2 \mathbf{x} > 0$. Vektori \mathbf{x} on valittu mielivaltaisesti, joten kaikilla $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ pätee $\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^2 \mathbf{x} > 0$. Siis matriisi \mathbf{B}^2 on positiivisesti definiitti. \square

Valitaan nyt i . iteraation matriisiksi $\mathbf{P}_i = \mathbf{B}_i^2$, missä matriisi \mathbf{B}_i on kuten lauseessa 5.8 [1, s. 94]. Lauseen 5.8 nojalla \mathbf{B}_i^2 on positiivisesti definiitti, jolloin aikaisemmin mainitun havainnon perusteella matriisi $\mathbf{A}_i + \lambda\mathbf{B}^2$ on positiivisesti definiitti. Tämän matriisin käänteismatriisia käytetään Levenberg-Marquardt -menetelmässä matriisina \mathbf{R} eli

$$(5.10) \quad \mathbf{R}_i := (\mathbf{A}_i + \lambda_i \mathbf{B}_i^2)^{-1},$$

missä matriisi \mathbf{A}_i on jokin mielivaltainen symmetrinen matriisi. [1, s. 94]

Huomautus 5.4. (vrt. [1, s. 94]) Levenberg-Marquardt -menetelmässä askeleen kooksi valitaan $\rho_i = 1$ kaikilla i . Tällöin i . askel on lauseen 5.6 ja yhtälön 5.10 nojalla

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_i &= \rho_i \mathbf{v}_i \\ &= 1 (-\mathbf{R}_i \mathbf{q}_i) \\ &= -\mathbf{R}_i \mathbf{q}_i \\ &= -(\mathbf{A}_i + \lambda_i \mathbf{B}_i^2)^{-1} \mathbf{q}_i.\end{aligned}$$

Huomautus 5.5. (vrt. [1, s. 94]) Kun λ_i lähestyy ääretöntä, niin termi $\lambda_i \mathbf{B}_i^2$ dominoi matriisia \mathbf{A}_i . Tällöin

$$\boldsymbol{\sigma}_i \xrightarrow{\lambda_i \rightarrow \infty} -\lambda_i^{-1} \mathbf{B}_i^{-2} \mathbf{q}_i.$$

Siis riittävän suuri λ_i tuottaa aina hyväksyttävän askeleen.

Algoritmi 5.2. (vrt. [1, 94-95]) Arvon λ_i valitsemiseksi käytetään seuraavaa algoritmia:

1. Kun $i = 1$, niin aloitetaan asettamalla $\lambda_0 = 0,01$.
2. Iteraation i . alussa lasketaan

$$\mathbf{v} = -(\mathbf{A}_i + \lambda \mathbf{B}_i^2)^{-1} \mathbf{q}_i$$

ja

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}_i + \mathbf{v}.$$

3. Jos $\Phi(\mathbf{x}^{(1)}) < \Phi(\mathbf{x}_i)$, niin hyväksytään $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}^{(1)}$ ja korvataan λ siten, että $\lambda = \max\{0,1\lambda, \alpha\}$, missä α on pieni positiivinen luku, esimerkiksi 10^{-7} .
4. Jos

$$\frac{(\mathbf{v}^\top \mathbf{q}_i)^2}{(\mathbf{q}_i^\top \mathbf{q}_i)(\mathbf{v}^\top \mathbf{v})} < \frac{1}{2},$$

niin korvataan arvo λ arvolla 10λ ja palataan askeleeseen 2. Muussa tapauksessa etsitään sellainen riittävän pieni arvo ρ_i , että

$$\Phi(\mathbf{x}_i + \rho_i \mathbf{v}) < \Phi(\mathbf{x}_i),$$

ja hyväksytään $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \rho_i \mathbf{v}$.

Edellä esitetty algoritmi saattaa edellyttää suunnan \mathbf{v} laskemista useilla luvun λ arvoilla yhdessä iteraatiossa. Tämä voidaan välttää, jos algoritmin 4. askel korvataan seuraavalla askeleella. [1, s. 95]

- 4' Etsitään sellainen riittävän pieni arvo ρ_i , että $\Phi(\mathbf{x}_i + \rho_i \mathbf{v}) < \Phi(\mathbf{x}_i)$, ja hyväksytään $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \rho_i \mathbf{v}$. Korvataan arvo λ arvolla 10λ .

Kaikki tarvittavat termit, joita tarvitaan Levenberg-Marquardt -menetelmässä, on määritelty ja esitelty, joten voidaan esitellä itse algoritmi. Se on kuin perusiterointi (algoritmi 5.1), mutta termit on Levenberg-Marquardt -menetelmän mukaisia.

Algoritmi 5.3 (Levenberg-Marquardt). Levenberg-Marquardt -iterointi etenee seuraavanlaisesti:

1. Asetetaan $i = 1$ ja hankitaan alkuarvaus \mathbf{x}_1 .
2. Määritellään suuntaan i osoittava vektori

$$\mathbf{v}_i = -\mathbf{R}_i \mathbf{q}_i = -(\mathbf{A}_i + \lambda_i \mathbf{B}_i^2)^{-1} \mathbf{q}_i.$$

3. Asetetaan skalaari $\rho_i = 1$, jolloin askel

$$\boldsymbol{\sigma}_i = -(\mathbf{A}_i + \lambda_i \mathbf{B}_i^2)^{-1} \mathbf{q}_i$$

on huomautuksen 5.5 nojalla hyväksyttävä riittävän suurilla arvoilla λ_i .

4. Testataan toteutuuko lopetuskriteeri eli jos

$$|x_{i+1,\alpha} - x_{i,\alpha}| \leq \omega_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, l,$$

missä $\omega_\alpha = 10^{-4}(x_{i,\alpha} + 10^{-3})$, niin lopetuskriteeri toteutuu. Tällöin iterointi lopetetaan ja hyväksytään piste \mathbf{x}_{i+1} estimaatin $\hat{\mathbf{x}}$ arvoksi. Jos lopetuskriteeriä ei kohdata, niin kasvatetaan indeksiä i yhdellä ja palataan askeleeseen 2.

5.2 Menetelmän käyttötavat

Tässä pykälässä käydään läpi pienimmän neliösumman menetelmän kaksi käyttötappaa, painottomat ja painotetut neliösummat. Aloitetaan painottomilla neliösummilla.

5.2.1 Neliösummat

Tarkastellaan seuraavaksi tavoitefunktiota

$$\Phi(\mathbf{x}) := \mathbf{E}^\top \mathbf{E},$$

missä \mathbf{E}^\top on määritelmän 3.7 mukaisesta residuaalimatriisista \mathbf{E} muodostettu vektori ([1, s. 55]).

Lause 5.9. Funktio $\Phi(\mathbf{x})$ voidaan esittää muodossa

$$(5.11) \quad \Phi(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^m \sum_{\mu=1}^n e_{a\mu}^2.$$

Todistus. Lauseiden 2.1 ja 2.2 nojalla saadaan

$$\Phi(\mathbf{x}) = \text{tr}(\mathbf{E}^\top \mathbf{E}) = \sum_{a=1}^m \sum_{\mu=1}^n e_{a\mu}^2.$$

Siis väite pätee. □

Yksinkertaisimmassa muodossaan neliösummamenetelmä koostuu niiden vektorin \mathbf{x} arvojen löytämisestä, jotka minimoivat tavoitefunktion $\Phi(\mathbf{x})$. Yhtälössä 5.11 funktio $\Phi(\mathbf{x})$ on esitetty komponenttimuodossaan, josta nähdään, että minimointi tehdään residuaalien neliösummille. [1, s. 55]

Huomautus 5.6. (vrt. [1, s. 55]) Tapauksessa, jossa $m = 1$, tavoitefunktio $\Phi(\mathbf{x})$ sievenee muotoon

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^m \sum_{\mu=1}^n e_{a\mu}^2 = \sum_{\mu=1}^n e_{\mu}^2.$$

Tällöin puhutaan *yhden yhtälön neliösummista*.

5.2.2 Painotetut neliösummat

Tavoitefunktio, joka sisältää yksinkertaisen neliösumman, on usein epätydyttävä kahdesta syystä. Ensinnäkin useat muuttujat $y_{a\mu}$ voivat edustaa sellaisia mittauksia, joilla on erilaiset fyysiset dimensiot tai jotka on mitattu eri skaalalla. Voi olla esimerkiksi sellainen tilanne, jossa suureen $y_{1\mu}$ arvo kuuluu välille $[0, 1]$ ja suureen $y_{2\mu}$ arvo välille $[500 - 1000]$. Tällaisten arvojen neliöiden yhteenlaskeminen ei tunnu järkevältä, koska suuremman mittauksen $y_{2\mu}$ avulla lasketut residuaalit todennäköisesti dominoivat mittauksen $y_{1\mu}$ avulla laskettuja residuaaleja. Kyseisen kaltaisessa tilanteessa mittauksen $y_{1\mu}$ sisältämä informaatio saattaa kadota. Toinen syy liittyy epäluotettaviin havaintoihin. Jotkut havainnot ovat vähemmän luotettavampia kuin toiset, jolloin halutaan olla varmoja siitä, että parametriestimaatteihin vaikuttavat enemmän tarkemmat havainnot kuin ne epäluotettavammat. Painottoman neliösumman sisältävän tavoitefunktion kohdalla tämä ei toteudu. [1, s. 56]

Ratkaisu edellä mainittuihin ongelmiin esitellään seuraavassa määritelmässä.

Määritelmä 5.15. (vrt. [1, s. 56]) *Painotettussa pienimmän neliösumman menetelmässä* minimoidaan tavoitefunktiota

$$(5.12) \quad \Upsilon(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^m \sum_{\mu=1}^n c_{a\mu} e_{a\mu}^2,$$

missä $c_{a\mu}$ on residuaalin $e_{a\mu}$ ei-negatiivinen painokerroin ja täten *painomatriisin* $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ alkio kaikilla $\mu = 1, \dots, m$ ja $a = 1, \dots, n$

Minimoimalla yhtälön 5.12 funktio saadaan aikaisemmin mainitut ongelmat ratkaistua. Niille arvoille $y_{a\mu}$, jotka on mitattu laajalla skaalalla tai jotka ovat epäluotettavampia, valitaan pieni painokerroin ja vastaavasti luotettavammille tai pienellä skaalalla mitatuille arvoilla valitaan iso painokerroin. [1, s. 56]

Ennen määritelmän 5.15 yleisemmän muodon ja sen erikoistapauksien esittelyä käydään läpi sopivien painokertoimien valinnan teoriaa.

Sopivien painojen valinta on tärkeää, sillä se takaa parhaimmat mahdolliset tilastolliset ominaisuudet vastaaville estimaattoreille [1, s. 58]. Painot valitaan sellaisesta matriisista, joka johtaa muuttujan \mathbf{x} sellaiseen estimaattiin, jolla on pienin varianssi [1, s. 57].

Oletetaan, että suora malli on lineaarinen, jolloin se voidaan esittää muodossa

$$\mathbf{f}_\mu := \mathbf{f}(\mathbf{b}_\mu, \mathbf{x}) = \mathbf{B}_\mu(\mathbf{b}_\mu) \mathbf{x},$$

missä $\mathbf{B}_\mu(\mathbf{b}_\mu)$ on sovituksessa käytettävien funktioiden matriisi [1, s. 58]).

Seuraava esimerkki selventää funktion \mathbf{f} ja matriisin \mathbf{B} yhteyttä.

Esimerkki 5.3. (vrt. [1, s. 58]) Oletetaan, että sovitetaan yhden yhtälön mallia $f(\mathbf{b}, \mathbf{x}) = x_1 + x_2 b + x_3 b^2$. Tällöin $\mathbf{B}_\mu(\mathbf{b}_\mu)$ on rivivektori $[1, b, b^2]$ ja

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & b_1 & b_1^2 \\ 1 & b_2 & b_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & b_n & b_n^2 \end{bmatrix}.$$

Merkitään $\mathbf{F}^\top = [\mathbf{f}_1^\top, \mathbf{f}_2^\top, \dots, \mathbf{f}_n^\top]$ ja $\mathbf{B}^\top = [\mathbf{B}_1^\top(\mathbf{b}_1), \mathbf{B}_2^\top(\mathbf{b}_2), \dots, \mathbf{B}_n^\top(\mathbf{b}_n)]$. Yhdistämällä yhtälöt kaikilla mittauksilla μ saadaan

$$(5.13) \quad \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1(\mathbf{b}_1) \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_n(\mathbf{b}_n) \mathbf{x} \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1(\mathbf{b}_1) \\ \vdots \\ \mathbf{B}_n(\mathbf{b}_n) \end{bmatrix} \mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{F} = \mathbf{B}\mathbf{x}.$$

Huomautus 5.7. (vrt. [1, s. 58]) Matriisi \mathbf{B} on annetulla datalla vakiomatriisi.

Määritetään seuraavaksi virheille kovarianssimatriisi. Olkoon vektori \mathbf{Y} mittausvektoreiden rivien yhdiste. Oletetaan, että muuttujat \mathbf{b}_μ on mitattu tarkasti ja että jokainen havainto \mathbf{y}_μ on sellainen otos satunnaismuuttujasta, että $E(\mathbf{y}_\mu) = \mathbf{f}_\mu$ eli $E(y_{a\mu}) = f_{a\mu}$. Olkoon matriisi \mathbf{V} vektorin \mathbf{Y} alkioden kovarianssimatriisi. Matriisin \mathbf{V} mielivaltainen alkio $V_{(a\mu)(b\eta)}$ on määritelmän

2.15 nojalla

$$\begin{aligned}
 V_{(a\mu)(b\eta)} &= \text{Cov}(y_{a\mu}, y_{b\eta}) \\
 &= \text{E}[(y_{a\mu} - \text{E}(y_{a\mu}))(y_{b\eta} - \text{E}(y_{b\eta}))] \\
 (5.14) \quad &= \text{E}[(y_{a\mu} - f_{a\mu})(y_{b\eta} - f_{b\eta})] \\
 &= \text{E}(\varepsilon_{a\mu}\varepsilon_{b\eta}).
 \end{aligned}$$

Siis matriisi \mathbf{V} on *virheiden kovarianssimatriisi* [1, s. 58].

Huomautus 5.8. Kovarianssimatriisi \mathbf{V} on vakiomatriisi.

Huomautus 5.9. (vrt. [1, s. 58]) Koska $\text{E}(\mathbf{y}_\mu) = \mathbf{f}_\mu$, niin yhtälön 5.13 nojalla saadaan

$$(5.15) \quad \text{E}(\mathbf{Y}) = \text{E}\left(\begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_n \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \text{E}(\mathbf{y}_1) \\ \vdots \\ \text{E}(\mathbf{y}_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_n \end{bmatrix} = \mathbf{F} = \mathbf{B}\mathbf{x}.$$

Seuraavaa lausetta tarvitaan estimaattorin \mathbf{x}^* muodon ja harhattomuuden todistamiseen.

Lause 5.10. *Funktion*

$$\Theta(\mathbf{x}) = (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x})$$

derivaatta vektorin \mathbf{x} suhteen on muotoa

$$\frac{\partial \Theta(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = -2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}).$$

Todistus. Käyttämällä transpoosin laskusääntöjä ja matriisin kertolaskusääntöjä saadaan funktio $\Theta(\mathbf{x})$ muotoon

$$\begin{aligned}
 \Theta(\mathbf{x}) &= (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}) \\
 &= \left(-\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top + \mathbf{Y}^\top\right) \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}) \\
 &= -\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} + \mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{Y}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} - \mathbf{Y}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x}.
 \end{aligned}$$

Nyt funktion $\Theta(\mathbf{x})$ derivaatta vektorin \mathbf{x} suhteen voidaan laskea käyttämällä derivoimissääntöjä ja lausetta 2.5, jolloin saadaan

$$\frac{\partial \Theta(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = -\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} + \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x} + \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\right)^\top \mathbf{x} - \mathbf{Y}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}.$$

Transpoosin laskusääntöjen ja kovarianssimatriisin symmetrisyyden nojalla derivaatta saadaan muotoon

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Theta(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} &= -\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} + \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{B}^\top (\mathbf{V}^{-1})^\top \mathbf{B}\mathbf{x} - \mathbf{Y}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \\
 &= -2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} + 2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x} \\
 &= -2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}).
 \end{aligned}$$

Siis väite pätee. □

Lause 5.11. Oletetaan, että $\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}$ on kääntyvä matriisi. Tällöin funktion $\Theta(\mathbf{x})$ minimikohta on

$$\mathbf{x}^* = \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}.$$

Todistus (vrt. [1, s. 58]). Funktion $\Theta(\mathbf{x})$ minimikohta löydetään, kun $\Theta'(\mathbf{x}) = 0$, joten lauseen 5.10 perusteella

$$-2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}^*) = 0.$$

Ratkaistaan saadusta yhtälöstä \mathbf{x}^* matriisin $\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}$ kääntyvyyden avulla eli

$$\begin{aligned} & -2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}^*) = 0 \\ \Leftrightarrow & -2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} + 2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x}^* = 0 \\ \Leftrightarrow & 2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x}^* = 2\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} \\ \Leftrightarrow & \mathbf{x}^* = \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}. \end{aligned}$$

Siis väite pätee. □

Huomautus 5.10. (vrt. [1, s. 59]) Vektori \mathbf{x}^* on lineaarinen estimaattori, sillä se on muotoa

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{A}\mathbf{Y},$$

missä $\mathbf{A} = \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1}$.

Nyt voidaan todistaa estimaattorin \mathbf{x}^* harhattomuus.

Lause 5.12. Olkoon \mathbf{x}^* kuten lauseessa 5.11. Tällöin \mathbf{x}^* on muuttujan \mathbf{x} harhaton estimaattori.

Todistus. Huomautusten 5.7 ja 5.8 nojalla matriisit \mathbf{B} ja \mathbf{V} ovat vakioita. Tällöin saadaan lauseen 2.9 ja huomautuksen 5.9 nojalla

$$\begin{aligned} E(\mathbf{x}^*) &= E \left[\left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} \right] \\ &= \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} E(\mathbf{Y}) \\ &= \underbrace{\left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}}_{\mathbf{I}} \mathbf{x} \\ &= \mathbf{x}. \end{aligned}$$

Nyt $E(\mathbf{x}^*) = \mathbf{x}$ eli yhtälön 2.5 perusteella \mathbf{x}^* on muuttujan \mathbf{x} harhaton estimaatti. Siis väite pätee. □

Seuraavaa lausetta tarvitaan estimaattorin \mathbf{x}^* otantajakauman kovarianssimatriisin muodon todistamisessa.

Lause 5.13. *Olkoon \mathbf{x}^* kuten lauseessa 5.11. Tällöin*

$$\mathbf{x}^* - \mathbf{x} = \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}).$$

Todistus. Käyttämällä matriisin kertolaskusääntöjä ja yksikkömatriisia saadaan

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* - \mathbf{x} &= \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} - \mathbf{x} \\ &= \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} - \mathbf{I}\mathbf{x} \\ &= \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} - \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}\mathbf{x} \\ &= \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Siis väite pätee. □

Lause 5.14. *Estimaattorin \mathbf{x}^* otantajakauman kovarianssimatriisi*

$$(5.16) \quad \mathbf{V}_x := E \left[(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}) (\mathbf{x}^* - \mathbf{x})^\top \right]$$

voidaan lausua muodossa

$$\mathbf{V}_x = \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1}.$$

Todistus. Lauseen 5.13 ja transpoosin laskusääntöjen nojalla yhtälön 5.16 matriisi saadaan muotoon

$$\begin{aligned} &E \left[(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}) (\mathbf{x}^* - \mathbf{x})^\top \right] \\ &= E \left\{ \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}) \left[\left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}) \right]^\top \right\} \\ &= \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} E \left[(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}) (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \right] (\mathbf{V}^{-1})^\top \mathbf{B} \left[\left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \right]^\top. \end{aligned}$$

Määritelmän 2.16 ja yhtälön 5.15 nojalla yhtälön 5.14 kovarianssimatriisi \mathbf{V} on muotoa

$$\mathbf{V} = E \left\{ [\mathbf{Y} - E(\mathbf{Y})] [\mathbf{Y} - E(\mathbf{Y})]^\top \right\} = E \left[(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}) (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \right],$$

jolloin saadaan

$$\begin{aligned} &\left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \underbrace{E \left[(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}) (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \right]}_{\mathbf{V}} (\mathbf{V}^{-1})^\top \mathbf{B} \left[\left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \right]^\top \\ &= \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{V} (\mathbf{V}^{-1})^\top \mathbf{B} \left[\left(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \right)^{-1} \right]^\top. \end{aligned}$$

Käyttämällä transpoosin ja käänteismatriisin laskusääntöjä sekä yksikkö-
matriisin määritelmää saadaan

$$\begin{aligned}
& (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \underbrace{\mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}}_I (\mathbf{V}^{-1})^\top \mathbf{B} \left[(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \right]^\top \\
&= (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{I} (\mathbf{V}^{-1})^\top \mathbf{B} \left[\mathbf{B}^{-1} \mathbf{V} (\mathbf{B}^\top)^{-1} \right]^\top \\
&= (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top (\mathbf{V}^{-1})^\top \underbrace{\mathbf{B} \mathbf{B}^{-1}}_I \mathbf{V}^\top (\mathbf{B}^{-1})^\top \\
&= (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \underbrace{(\mathbf{V}^{-1})^\top \mathbf{I} \mathbf{V}^\top}_I (\mathbf{B}^\top)^{-1} \\
&= (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \underbrace{\mathbf{B}^\top \mathbf{I} (\mathbf{B}^\top)^{-1}}_I \\
&= (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{I} \\
&= (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1}.
\end{aligned}$$

Siis

$$\mathbf{V}_x = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1}$$

eli väite pätee. □

Todistetaan seuraavaksi Gaussin-Markovin -lause, joka osoittaa lineaari-
sen ja harhattoman estimaattorin

$$\mathbf{x}^* = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}$$

olevan muuttujan \mathbf{x} estimaattoreista se, jolla on pienin varianssi.

Lause 5.15 (Gaussin-Markovin lause). *Oletetaan, että on voimassa malli*

$$\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x} = \boldsymbol{\varepsilon},$$

missä $\boldsymbol{\varepsilon}$ on satunnaisvektori, jonka odotusarvo on $\mathbf{0}$, \mathbf{y} on havaintovektori
ja \mathbf{B} on sellainen tunnettu matriisi, että $E(\mathbf{y}) = \mathbf{B}\mathbf{x}$. Olkoon \mathbf{V} vektorin $\boldsymbol{\varepsilon}$
kääntyvä kovarianssimatriisi. Tällöin

$$\mathbf{x}^* = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{y}$$

on vektorin \mathbf{x} lineaarisista ja harhattomista estimaattoreista se, jonka kova-
rianssimatriisilla on pienin determinantti.

Todistus (vrt. [1, s. 318-319]). Estimaattorin \mathbf{x}^* lineaarisuudesta seuraa, et-
tä on olemassa sellainen vektorista \mathbf{y} riippumaton matriisi \mathbf{A} , että

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{A}\mathbf{y}.$$

Tällöin

$$E(\mathbf{x}^*) = E(\mathbf{A}\mathbf{y}) = \mathbf{A}E(\mathbf{y}) = \mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{x}.$$

Estimaattori \mathbf{x}^* on oletuksen nojalla harhaton eli $E(\mathbf{x}^*) = \mathbf{x}$. Tällöin

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

eli on oltava $\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{I}$.

Estimaattorin kovarianssimatriisi on yhtälön 5.16 nojalla muotoa

$$(5.17) \quad \mathbf{V}_x = E[(\mathbf{x}^* - \mathbf{x})(\mathbf{x}^* - \mathbf{x})^\top] = E[(\mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{x})(\mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{x})^\top].$$

Muokataan lauseketta $\mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{x}$, jolloin saadaan

$$(5.18) \quad \mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{I}\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{x} = \mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x}).$$

Sijoittamalla yhtälön 5.18 tulos yhtälöön 5.17 ja käyttämällä transpoosin laskusääntöjä saadaan

$$(5.19) \quad \begin{aligned} \mathbf{V}_x &= E[(\mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{x})(\mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{x})^\top] \\ &= E\left\{[\mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x})][\mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x})]^\top\right\} \\ &= E[\mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \mathbf{A}^\top]. \end{aligned}$$

Oletusten $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x}$ ja $E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^\top) = \mathbf{V}$ sekä yhtälön 2.3 nojalla yhtälö 5.19 saadaan muotoon

$$\begin{aligned} &E[\mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \mathbf{A}^\top] \\ &= E(\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^\top \mathbf{A}^\top) \\ &= \mathbf{A}E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^\top) \mathbf{A}^\top \\ &= \mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top. \end{aligned}$$

Nyt halutaan määrittää sellainen matriisi \mathbf{A} , joka minimoi arvon $\det(\mathbf{V}_x)$ eli arvon $\det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)$, kun $\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{I}$. Tehdään tämä käyttäen Lagrangen kertoimia. Olkoon $\boldsymbol{\Lambda}$ Lagrangen kertoimien matriisi. Konstruoidaan Lagrangiani

$$(5.20) \quad \mathbf{L}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\Lambda}) = \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) + \text{tr}[\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{I})]$$

ja etsitään sen derivaatan nollakohta. Derivoidaan yhtälö 5.20 käyttämällä lauseita 2.5, 2.6 ja 2.7, jolloin saadaan

$$(5.21) \quad \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{A}} = 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A}\mathbf{V} + \boldsymbol{\Lambda}^\top \mathbf{B}^\top = 0.$$

Kerrotaan yhtälö 5.21 oikealta matriisilla \mathbf{A}^\top , jolloin saadaan

$$\begin{aligned} & 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) \underbrace{(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top}_I + \mathbf{\Lambda}^\top \underbrace{\mathbf{B}^\top \mathbf{A}^\top}_I = 0 \\ \Leftrightarrow & 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) \mathbf{I} + \mathbf{\Lambda}^\top \mathbf{I} = 0. \end{aligned}$$

Saadaan siis $\mathbf{\Lambda}^\top = -2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)$. Sijoitetaan tämä yhtälöön 5.21, jolloin saadaan

$$\begin{aligned} & 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A}\mathbf{V} + \mathbf{\Lambda}^\top \mathbf{B}^\top = 0 \\ \rightarrow & 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A}\mathbf{V} - 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) \mathbf{B}^\top = 0 \\ \Leftrightarrow & 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A}\mathbf{V} = 2 \det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top) \mathbf{B}^\top \\ (5.22) \quad \Leftrightarrow & (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{B}^\top. \end{aligned}$$

Kerrotaan yhtälö 5.22 oikealta ensin matriisilla \mathbf{V}^{-1} , jolloin saadaan

$$\begin{aligned} & (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{B}^\top \\ \rightarrow & (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A} \underbrace{\mathbf{V}\mathbf{V}^{-1}}_I = \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \\ (5.23) \quad \Leftrightarrow & (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A} = \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1}. \end{aligned}$$

Tämän jälkeen yhtälö 5.23 kerrotaan oikealta matriisilla \mathbf{B} , jolloin saadaan

$$\begin{aligned} & (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{A} = \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \\ \rightarrow & (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{B}}_I = \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} \\ (5.24) \quad \Leftrightarrow & (\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)^{-1} = \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}. \end{aligned}$$

Sijoitetaan yhtälön 5.24 tulos yhtälöön 5.23 ja ratkaistaan saadusta yhtälöstä matriisi \mathbf{A} . Tällöin saadaan

$$\mathbf{A} = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1}.$$

Osoitetaan, että estimaattorilla \mathbf{x}^* on pienin varianssi eli että saatu matriisi \mathbf{A} minimoi tuloksen $\det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)$. Oletetaan, että on olemassa muuttujan \mathbf{x} lineaarinen ja harhaton estimaattori

$$\boldsymbol{\eta}^* = \mathbf{C}\mathbf{y}$$

ja että

$$\mathbf{C} = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} + \mathbf{D},$$

missä $D \neq \mathbf{0}$. Nyt yhtälön 2.3 ja oletuksen $E(\mathbf{y}) = \mathbf{B}\mathbf{x}$ nojalla

$$\begin{aligned} E(\boldsymbol{\eta}^*) &= E(\mathbf{C}\mathbf{y}) \\ &= \mathbf{C}E(\mathbf{y}) \\ &= \left[(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} + \mathbf{D} \right] \mathbf{B}\mathbf{x} \\ &= \underbrace{(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}}_{\mathbf{I}} \mathbf{x} + \mathbf{D}\mathbf{B}\mathbf{x} \\ &= (\mathbf{I} + \mathbf{D}\mathbf{B})\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Koska $\boldsymbol{\eta}^*$ on muuttujan \mathbf{x} harhaton estimaattori, niin on oltava $\mathbf{D}\mathbf{B} = \mathbf{0}$. Lauseen 5.14 nojalla $\text{Var}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{V} (\mathbf{B}^{-1})^\top$. Yhtälön 2.4 avulla saadaan

$$\text{Var}(\boldsymbol{\eta}^*) = \text{Var}(\mathbf{C}\mathbf{y}) = \mathbf{C}\text{Var}(\mathbf{y})\mathbf{C}^\top = \mathbf{C}\mathbf{V}\mathbf{C}^\top,$$

jolloin transpoosin ja käänteismatriisin laskusääntöjen sekä kovarianssimatriisin \mathbf{V} symmetrisyyden nojalla

$$\begin{aligned} \text{Var}(\boldsymbol{\eta}^*) &= \left[(\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} + \mathbf{D} \right] \mathbf{V} \left[\mathbf{V}^{-1} \mathbf{B} (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} + \mathbf{D}^\top \right] \\ &= \mathbf{B}^{-1} \underbrace{\mathbf{V} (\mathbf{B}^\top)^{-1} \mathbf{B}^\top}_{\mathbf{I}} \underbrace{\mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}}_{\mathbf{I}} \mathbf{V}^{-1} \underbrace{\mathbf{B} \mathbf{B}^{-1}}_{\mathbf{I}} \mathbf{V} (\mathbf{B}^\top)^{-1} \\ &\quad + (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \underbrace{\mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}}_{\mathbf{I}} \mathbf{D}^\top + \mathbf{D} \underbrace{\mathbf{V} \mathbf{V}^{-1}}_{\mathbf{I}} \mathbf{B} (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \\ &\quad + \mathbf{D}\mathbf{V}\mathbf{D}^\top \\ &= \mathbf{B}^{-1} \underbrace{\mathbf{V} \mathbf{V}^{-1}}_{\mathbf{I}} \mathbf{V} (\mathbf{B}^\top)^{-1} + (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \underbrace{(\mathbf{D}\mathbf{B})^\top}_{\mathbf{0}} \\ &\quad + \underbrace{\mathbf{D}\mathbf{B}}_{\mathbf{0}} (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} + \mathbf{D}\mathbf{V}\mathbf{D}^\top \\ &= \mathbf{B}^{-1} \mathbf{V} (\mathbf{B}^{-1})^\top + \mathbf{D}\mathbf{V}\mathbf{D}^\top \\ &= \text{Var}(\mathbf{x}^*) + \mathbf{D}\mathbf{V}\mathbf{D}^\top. \end{aligned}$$

Nyt $\mathbf{D}\mathbf{V}\mathbf{D}^\top$ on positiivisesti semidefiniitti matriisi, joten $\mathbf{D}\mathbf{V}\mathbf{D}^\top \geq \mathbf{0}$, missä merkki \geq tarkoittaa Loewnerin osittaista järjestystä. Tällöin saadaan

$$\text{Var}(\boldsymbol{\eta}^*) - \text{Var}(\mathbf{x}^*) \geq \mathbf{0} \quad \leftrightarrow \quad \text{Var}(\mathbf{x}^*) \leq \text{Var}(\boldsymbol{\eta}^*),$$

eli matriisi \mathbf{A} minimoi siis arvon $\det(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}^\top)$ eli se minimoi arvon $\det(\mathbf{V}_{\mathbf{x}})$, joten

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{A}\mathbf{y} = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{y}$$

on muuttujan \mathbf{x} se lineaarinen, harhaton estimaattori, jonka kovarianssimatriisilla on pienin determinantti. Siis väite pätee. \square

Gaussin-Markovin lause osoittaa, että kaikkien lineaaristen harhattomien estimaattorien joukosta lauseen 5.11 mukainen estimaattori \mathbf{x}^* on se, jonka varianssi on pienin [1, s. 59].

Lause 5.16. *Oletetaan, että kaikkien tehtyjen mittausten \mathbf{y} virheet $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, missä $\mu = 1, \dots, n$, ovat riippumattomia ja että niillä on yhtä suuri varianssi σ^2 . Tällöin kovarianssimatriisi on muotoa*

$$\mathbf{V} = \sigma^2 \mathbf{I}.$$

Todistus. Lauseen 2.10 nojalla saadaan

$$\text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_j) = 0,$$

kun $i \neq j$. Huomautuksen 2.5 nojalla saadaan puolestaan, että

$$\text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i) = \text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon}_i),$$

joka on oletuksen nojalla σ^2 . Nyt

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \begin{bmatrix} \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_1) & \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2) & \cdots & \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_n) \\ \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_1) & \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_2) & \cdots & \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_1) & \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_2) & \cdots & \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_n) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma^2 \end{bmatrix} \\ &= \sigma^2 \mathbf{I}. \end{aligned}$$

Siis väite pätee. □

Nyt voidaan todistaa seuraava lause.

Lause 5.17. *Oletetaan, että kovarianssimatriisi on muotoa $\mathbf{V} = \sigma^2 \mathbf{I}$. Tällöin*

$$(5.25) \quad \mathbf{x}^* = (\mathbf{B}^\top \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{Y}$$

ja

$$(5.26) \quad \mathbf{V}_x = \sigma^2 (\mathbf{B}^\top \mathbf{B})^{-1}.$$

Todistus (vrt. [1, s. 59]). Todistetaan ensin ensimmäinen väite. Estimaattori \mathbf{x}^* on lauseen 5.11 mukaan

$$(5.27) \quad \mathbf{x}^* = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}.$$

Sijoittamalla $\mathbf{V} = \sigma^2 \mathbf{I}$ yhtälöön 5.27 sekä käyttämällä matriisin ja skalaarin kertolaskusääntöjä ja yksikkömatriisin ominaisuuksia saadaan

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* &= (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} \\ &= [\mathbf{B}^\top (\sigma^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{B}]^{-1} \mathbf{B}^\top [(\sigma^2 \mathbf{I})^{-1}] \mathbf{Y} \\ &= \sigma^2 (\sigma^2)^{-1} (\mathbf{B}^\top \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{Y} \\ &= 1 (\mathbf{B}^\top \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{Y} \\ &= (\mathbf{B}^\top \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{Y}. \end{aligned}$$

Siis ensimmäinen väite pätee.

Todistetaan sitten toinen väite. Kovarianssimatriisi on lauseen 5.14 nojalla muotoa

$$\mathbf{V}_x = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1}.$$

Sijoittamalla tähän yhtälöön $\mathbf{V} = \sigma^2 \mathbf{I}$ ja käyttämällä yksikkömatriisin laskusääntöjä sekä reaaliluvun käänteisalkion laskusääntöjä saadaan

$$\mathbf{V}_x = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} = [\mathbf{B}^\top (\sigma^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{B}]^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{B}^\top \mathbf{B})^{-1}.$$

Siis toinen väite pätee.

Koska molemmat väitteet pätevät, niin lause on todistettu. \square

Yhtälön 5.25 estimaattori \mathbf{x}^* on painottoman pienimmän neliösumman estimaattori ja yhtälön 5.26 matriisi \mathbf{V}_x on sen kovarianssimatriisi [1, s. 59].

Nyt voidaan todistaa lause, joka kertoo mistä matriisista painot valitaan.

Lause 5.18. *Pienimmän neliösumman menetelmässä, kun malli on lineaarinen, painot valitaan matriisista \mathbf{V}^{-1} eli*

$$c_{(a\mu)(b\eta)} = (V^{-1})_{(a\mu)(b\eta)},$$

missä $V_{(a\mu)(b\eta)} = E[(y_{a\mu} - f_{a\mu})(y_{b\eta} - f_{b\eta})]$.

Todistus. Painot valitaan sellaisesta matriisista, joka johtaa muuttujan \mathbf{x} estimaattoriin, jolla on pienin varianssi. Lauseen 5.11 mukainen estimaattori \mathbf{x}^* on Gaussin-Markovin -lauseen nojalla sellainen estimaattori, jonka kovarianssimatriisilla on pienin determinantti. Lauseen 5.11 nojalla \mathbf{x}^* on muotoa

$$\mathbf{x}^* = (\mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}.$$

Tämä estimaattori saadaan minimoimalla lauseen 5.10 funktio

$$\Theta(\mathbf{x}) = (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x})^\top \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{x}).$$

Tästä nähdään, että matriisi \mathbf{V}^{-1} tuottaa estimaattorin \mathbf{x}^* , jolla on pienin varianssi. Siis painot valitaan matriisista \mathbf{V}^{-1} eli

$$c_{(a\mu)(b\eta)} = (\mathbf{V}^{-1})_{(a\mu)(b\eta)},$$

missä $V_{(a\mu)(b\eta)} = E[(y_{a\mu} - f_{a\mu})(y_{b\eta} - f_{b\eta})]$. Siis väite pätee. \square

Lause 5.18 osoittaa mallin ollessa lineaarinen, että virheiden kovarianssimatriisin käänteismatriisi on määritelmässä 5.15 esitetty painomatriisi eli $\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{C}$.

Yleisimmissä tapauksissa malli on kuitenkin epälineaarinen, jolloin ei voida määrittää parhaimpia käytettäviä painoja. Näissä tapauksissa voidaan silti käyttää painoja, jotka ovat kovarianssimatriisin käänteisalkion elementtejä. Jos kovarianssimatriisia ei tiedetä, niin painot voidaan joko arvata tai määrittää käyttämällä jotain siihen tarkoitettua menetelmää. Voidaan myös yrittää löytää kovarianssimatriisin estimaatti toistamalla kokeiluja. [1, s. 57] Mitään varsinaista teoreettista tapaa epälineaarisen mallin painojen määrittämiseen ei siis ole.

Painojen valinnan teoria on käyty läpi. Esitellään seuraavaksi tarkemmin painojen käyttöä pienimmän neliösumman menetelmässä.

Tarkastellaan seuraavassa tavoitefunktiota

$$(5.28) \quad \Psi(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m \sum_{\mu=1}^n \sum_{\eta=1}^n c_{(a\mu)(b\eta)} e_{a\mu} e_{b\eta},$$

missä painokerroin $c_{(a\mu)(b\eta)} \in \mathbf{V}^{-1}$ kaikilla $\mu, \eta \in [1, n]$ ja $a, b \in [1, m]$. Tämä funktio on yleisempi muotoilu määritelmässä 5.15 esitetylle funktiolle.

Huomautus 5.11. (vrt. [1, s. 56]) Lauseessa 5.9 esitetty tavoitefunktio $\Phi(\mathbf{x})$ on erikoistapaus määritelmän 5.15 tavoitefunktioista, kun $c_{a\mu} = 1$ kaikilla $\mu \in [1, n]$ ja $a \in [1, m]$, ja määritelmässä 5.15 esitetty tavoitefunktio $\Upsilon(\mathbf{x})$ on erikoistapaus yhtälön 5.28 funktiosta $\Psi(\mathbf{x})$.

Yhtälön 5.28 funktiosta $\Psi(\mathbf{x})$ on olemassa kolme muutakin erikoistapausta, jotka esitellään määritelmässä 5.16, 5.17 ja 5.18.

Määritelmä 5.16. (vrt. [1, s. 57]) Olkoon $c_{(a\mu)(b\eta)} = 0$ aina, kun $\mu \neq \eta$, ja olkoon muut painokertoimet riippumattomia mittauskerrasta μ . Tällöin funktio $\Psi(\mathbf{x})$ saadaan muotoon

$$(5.29) \quad \psi_1(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m c_{ab} \sum_{\mu=1}^n e_{a\mu} e_{b\mu}.$$

Tällöin sanotaan, että yhtälö on *painotettu muuttujalla*.

Lause 5.19. Funktio $\psi_1(\mathbf{x})$ voidaan esittää muodossa

$$\psi_1(\mathbf{x}) = \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu^\top \mathbf{C} \mathbf{e}_\mu.$$

Todistus. Valitaan mielivaltainen mittauskerta μ , jolloin yhtälön 5.29 funktio voidaan kirjoittaa muodossa

$$\psi'_\mu(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m c_{ab} e_{a\mu} e_{b\mu}.$$

Lauseen 2.3 ja kertolaskun liitännäisyyden nojalla saadaan

$$\sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m c_{ab} e_{a\mu} e_{b\mu} = \mathbf{e}_\mu^\top \mathbf{C} \mathbf{e}_\mu,$$

jolloin kaikilla mittauksilla pätee

$$\sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu^\top \mathbf{C} \mathbf{e}_\mu = \sum_{\mu=1}^n \left(\sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m c_{ab} e_{a\mu} e_{b\mu} \right) = \psi_1(\mathbf{x}).$$

□

Huomautus 5.12. (vrt. [1, s. 57]) Jos \mathbf{C} on diagonaalimatriisi, niin funktio $\psi_1(\mathbf{x})$ yksinkertaistuu muotoon

$$\psi_1(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^m c_{aa} \sum_{\mu=1}^n e_{a\mu}^2.$$

Määritelmä 5.17. (vrt. [1, s. 57]) Määritelmän 5.15 funktio $\Upsilon(\mathbf{x})$ voidaan esittää muodossa

$$\psi_2(\mathbf{x}) = \sum_{\mu=1}^n c_{1\mu} e_\mu^2,$$

kun $m = 1$. Tällöin sanotaan, että yhtälö on *painotettu kokeilulla*.

Määritelmä 5.18. (vrt. [1, s. 57]) Yhdistämällä määritelmän 5.16 funktio $\psi_1(\mathbf{x})$ ja määritelmän 5.17 funktio $\psi_2(\mathbf{x})$ saadaan

$$\psi_3(\mathbf{x}) = \sum_{\mu=1}^n \sum_{a=1}^m \sum_{b=1}^m c_{1\mu} c_{ab} e_{a\mu} e_{b\mu},$$

joka voidaan lauseen 5.19 nojalla voidaan esittää muodossa

$$\psi_3(\mathbf{x}) = \sum_{\mu=1}^n c_{1\mu} \mathbf{e}_\mu^\top \mathbf{C} \mathbf{e}_\mu.$$

Tällöin sanotaan, että yhtälö on *painotettu kokeilulla ja muuttujalla*.

6 Käytännön sovellus: Pandora-instrumentti

Tässä luvussa käydään läpi ensin Pandora-instrumentin parametrien estimointia, jonka jälkeen siirrytään tulosten esittelyyn.

6.1 Pandora-instrumentin parametrien estimointi

Pandora-niminen spektrometri mittaa sironnutta Auringon valoa aallonpituusalueella 265nm-500nm. [11] Mitatuista spektreistä lasketaan inversioalgoritmeilla halutuille suureille arvoja useilla aallonpituusalueilla useita kertoja päivässä. [13]

Tällä hetkellä instrumentin analyysiohjelma tekee estimoinnit vain klassisia inversiomenetelmiä käyttäen, eli siitä puuttuu kokonaan bayesiläisen estimoinnin elementit. Ohjelma etsii lineaarisen ja epälineaarisen mallin sovituksessa pienimpiä residuaalien neliösummia, joiden avulla muodostetaan etsitty vektori \mathbf{x} . [13] Kuten aikaisemmin on mainittu, Pandora-instrumentti laskee lineaarisessa sovituksessa residuaalien neliösummat käyttäen SVD-menetelmää ja epälinearisessa sovituksessa käyttäen Levenberg-Marquardt-menetelmää.

Instrumentissa mittausvektorin \mathbf{y} alkio aallonpituudella a on

$$(6.1) \quad y_a = \ln F_{0a} - \ln (F_a + P_a^{\text{OFFS}}) - \tau_a^{\text{FIX}},$$

missä F_{0a} on referenssispektrin arvo aallonpituudella a , joka on korjattu Auringon ja Maan välisellä etäisyydellä mittauksen ajanhetkellä, F_a on mittauksen arvo aallonpituudella a , P_a^{OFFS} on korjaustekijä ja τ_a^{FIX} on tunnettu paksuus vinolle mittausgeometrialle aallonpituudella a [2, s. 51].

Suoraa mallia kuvaava funktio f on

$$(6.2) \quad f_a(\mathbf{t}, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{ngas} \tau_{ja}(x_j, t_j) + \tau_a^{\text{RING}} \cdot q^{\text{RING}} + P_a^{\text{SMO}} + P_a^{\text{RESC}},$$

missä $ngas$ on sovitettavien suureiden määrä, $\tau(x_j, t_j)$ on suureen j vinon mittausgeometrian paksuus alkion x_j sekä efektiiviselle lämpötilalle t_j aallonpituudella a ja τ_a^{RING} , q^{RING} , P_a^{SMO} sekä P_a^{RESC} ovat korjaustekijöitä, jotka oletetaan tunnetuiksi [2, s. 51].

Instrumentin yleinen tavoitefunktio ilman kohinaa on muotoa

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{\mu=1}^n (y_a - f_a(\mathbf{t}, \mathbf{x}))^2,$$

missä y_a on yhtälön 6.1 mukainen ja $f_a(\mathbf{x}, \mathbf{t})$ on yhtälön 6.2 mukainen [13].

Käytännössä aloitetaan aina lineaarisella sovituksella. Siinä oletetaan, että korjaustekijä P_a^{OFFS} on nolla, joten mittausvektorin \mathbf{y} alkio aallonpituudella a on

$$y_a = \ln F_{0a} - \ln F_a - \tau_a^{\text{FIX}}.$$

Sovitettava funktio on

$$f_a(\mathbf{t}, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{ngas} A_{jCa} \cdot x_j + \sum_{j=1}^{ngas} A_{jLa} \cdot \Delta t_j \cdot x_j + \tau_a^{\text{RING}} \cdot q^{\text{RING}} + P_a^{\text{SMO}} + P_a^{\text{RESC}},$$

missä A_{jCa} sekä A_{jLa} ovat kalibrointitiedostossa määritettyjä vakioita ja Δt_j on lämpötilan ja vertailulämpötilan ero skaalattuna. Tavoitteena on linearisoida ongelma, joten instrumentin analyysiohjelma luo kalibraatioarvot ja mittausgeometrian tiedot sisältävän matriisin \mathbf{M} , jonka rivi a on

$$M_a = [A_{1Ca}, \dots, A_{ngasCa}, A_{1La}, \dots, A_{ngasLa}, \tau_a^{\text{RING}}, 1, \lambda_a, \lambda_a^2, \dots, \lambda_a^{nsmo}, \Delta_a^{\text{RESC}}, \Delta_a^{\text{RESC}} \lambda_a, \Delta_a^{\text{RESC}} \lambda_a^2, \dots, \Delta_a^{\text{RESC}} \lambda_a^{nresc}]^T,$$

missä λ_a on skaalattu aallonpituus ja Δ_a^{RESC} on instrumentin resoluution es- timoitu muutos. Mittausepävarmuus huomioiden luodaan matriisi \mathbf{M}^* , jonka alkio- ot ovat

$$m_{a\mu}^* = \frac{m_{a\mu}}{\sigma_a},$$

missä $a = 1, \dots, s$, $\mu = 1, \dots, n$, $m_{a\mu} \in \mathbf{M}$ ja σ_a on mittauksen μ mit- tauksvektorin \mathbf{y} aallonpituuden a epävarmuus. Vastaavasti mittausvektoria \mathbf{y} hyödyntäen luodaan vektori \mathbf{y}^* , jonka alkio- ot ovat

$$y_{a\mu}^* = \frac{y_{a\mu}}{\sigma_a}.$$

Residuaali lasketaan yhtälöstä

$$e = \|\mathbf{y}^* - \mathbf{M}^* \mathbf{x}\|$$

lauseen 5.4 mukaista SVD-menetelmää käyttäen, jolloin siis saadaan lasket- tua vektori \mathbf{x} . [13]

Epälineaarissa tapauksessa käytettävässä Levenberg-Marquardt -mene- telmässä Pandora-instrumentin mittauksen minimoitava tavoitefunktio on muotoa

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^n \left(\frac{y_a - f_a(\mathbf{t}, \mathbf{x})}{\sigma_a} \right)^2,$$

missä σ_a on mittauksen \mathbf{y} aallonpituuden a epävarmuus. Etsittyjen para- metrien \mathbf{x} arvot saadaan käyttämällä pykälässä 5.1.2 esiteltyä menetelmää. Käytännössä epälineaarinen sovitus tehdään lineaarisen sovituksen jälkeen ja iteraatioiden lukumäärä on rajoitettu 200 kierrokseen. Alkuarvaukset saadaan lineaarisesta sovituksesta ja jos niitä ei ole siinä käytetty, niin alkuarvauksille asetetaan arvo 0. [13]

6.2 Tuloksia

Tämän työn taustalla oleva tehtävä oli tutkia Pandora-instrumentin vakioitujen oletusarvojen vaikutusta estimoinnin tuloksiin. Tutkimuksen kohteena oli kaksi vakioitua oletusarvoa. Ensimmäinen oli olettu korkeus, jossa mitattavaa suuretta on eniten ja jota merkitään tässä h_{EFF} . Toinen oli suureen oletusmäärä, jota merkitään puolestaan c_{svca} . Esimerkkisuureina käytettiin otsonia O_3 ja nitridioksidia NO_2 . Otsonin h_{EFF} arvo on 20,4 km ja c_{svca} on 300 DU (Dobsonin yksikköä). Nitridioksidin oletuskorkeutta 7,1819 km ei ole määritetty suoraan vakioksi, mutta käytännössä se on sellainen. Oletusmäärä on puolestaan 0,5 DU:ta. [2, s. 43] Ennen tulosten tarkempaa esittelyä tutustutaan lyhyesti suureen arvojen laskemiseen liittyvään teoriaan.

6.2.1 Suureen arvojen laskemisesta

Tässä pykälässä esitellään lyhyesti teoriaa liittyen suureen arvojen laskemiseen.

Määritelmä 6.1. (vrt. [12, s. 34],[13]) Suureen *mittausgeometriaa vastaava kokonaismäärä* \mathbf{c} on suureen määrä sellaisella polulla, jonka fotonit kulkevat Auringosta ilmakehän läpi instrumentin sensoreihin. Tämä vektori lasketaan kaavalla

$$(6.3) \quad \mathbf{c} = c_{svca} \mathbf{x},$$

missä $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ on pienimmän neliösumman menetelmästä saatu tilavektori.

Määritelmä 6.2. (vrt. [2, s. 43,59]) *Ilmamassakerrointa* \mathbf{p} käytetään suureen mittausgeometriaa vastaavien kokonaismäärien muuttamiseen varsinaisiksi määriksi ja sen alkio i lasketaan kaavalla

$$(6.4) \quad p_i = \sec \left\{ \arcsin \left[\left(\frac{R}{R + h_{\text{EFF}}} \right) \sin(z_i^*) \right] \right\},$$

missä R on mittauspaikan ja Maan keskipisteen välinen etäisyys eli noin 6370 km ja z_i^* on auringonkulma, joka on korjattu refraktion takia.

Määritelmä 6.3. (vrt. [12, s. 38]) Suureen määrät ilmoitetaan *pystysuoraa mittausgeometriaa vastaavina kokonaismäärinä* eli arvoina sellaisella pystysuoralla polulla, joka kulkee maan pinnalta ilmakehän yläosaan asti. Tämän vektorin \mathbf{v} arvo i lasketaan kaavalla

$$(6.5) \quad v_i = \frac{c_i}{p_i}.$$

Yhtälöiden 6.3 ja 6.4 perusteella

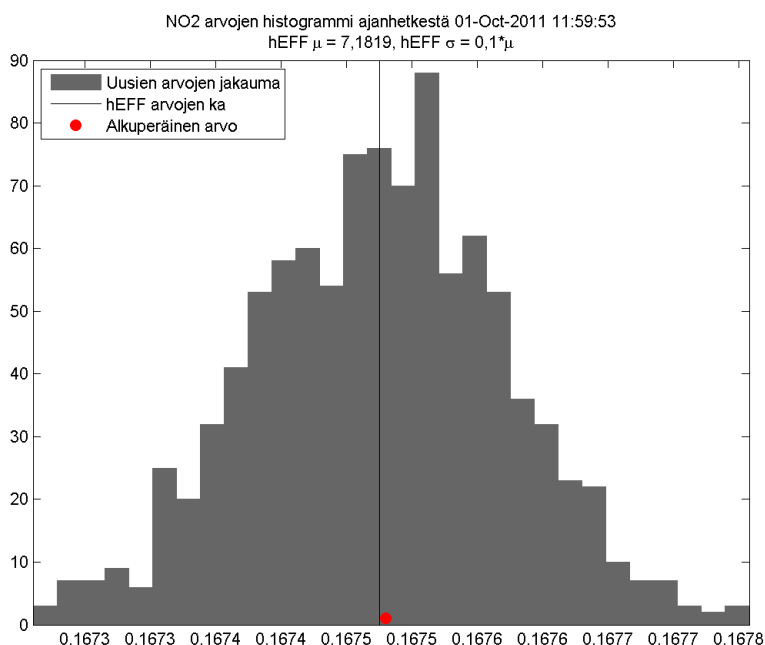
$$(6.6) \quad v_i = \frac{c_{svca} x_i}{\sec \left\{ \arcsin \left[\left(\frac{R}{R + h_{\text{EFF}}} \right) \sin(z_i^*) \right] \right\}}.$$

6.2.2 Oletuskorkeuden muutoksen laskeminen

Oletuskorkeuden muutoksen vaikutusta suureen arvoihin tarkasteltiin siten, että tehtiin 5 kokeilua, joissa jokaisessa luotiin normaalijakauma $N(\mu, \sigma^2)$ parametrein

$$\mu = h_{\text{EFF}}, \quad \sigma^2 = \left(\frac{k}{100} \cdot h_{\text{EFF}} \right)^2,$$

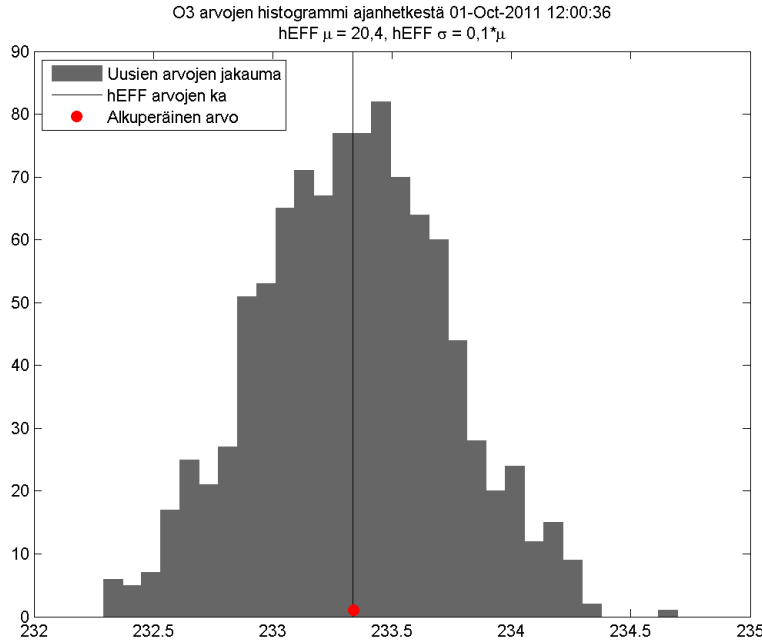
missä $k \in \{10, 20, 30, 40, 50\}$ muuttui kokeilun järjestysnumeron mukaan, eli ensimmäisessä kokeilussa hajonta oli 10% odotusarvosta ja viimeisessä 50% odotusarvosta. Jokaisessa kokeilussa luotiin taulukko, johon arvottiin 1000 lukua luodusta normaalijakaumasta ja niillä laskettiin suureille uusia arvoja käyttämällä laskukaavaa 6.6, missä c_{svca} on vakio. Jokaisesta päivästä valittiin tarkastelun kohteeksi lähinnä keskipäivää oleva ajankohta, koska se on mittausero-geometrisesti luotettavin.



Kuva 1: Päivän 1.10.2011 NO₂-määrien jakauma

Kuva 1 näyttää suureen NO₂ 1.10.2011 lähinnä keskipäivää olevan ajan- kohdan pystysuoraa mittausgeometriaa vastaavien kokonaismäärien jakau- tumisen, kun hajonta on 10% odotusarvosta. Tummanharmaalla on kuvat- tu normaalijakaumasta arvoilla h_{EFF} arvoilla laskettu uusi NO₂-jakauma, musta viiva osoittaa jakauman keskiarvon kohdan ja punainen piste on alku- peräinen NO₂-määrä kyseisellä ajanhetkellä.

Kuva 2 on vastaavanlainen kuva suureen O₃ määristä. Lisää kuvia löytyy liitteestä A.



Kuva 2: Päivän 1.10.2011 O₃-määrien jakauma

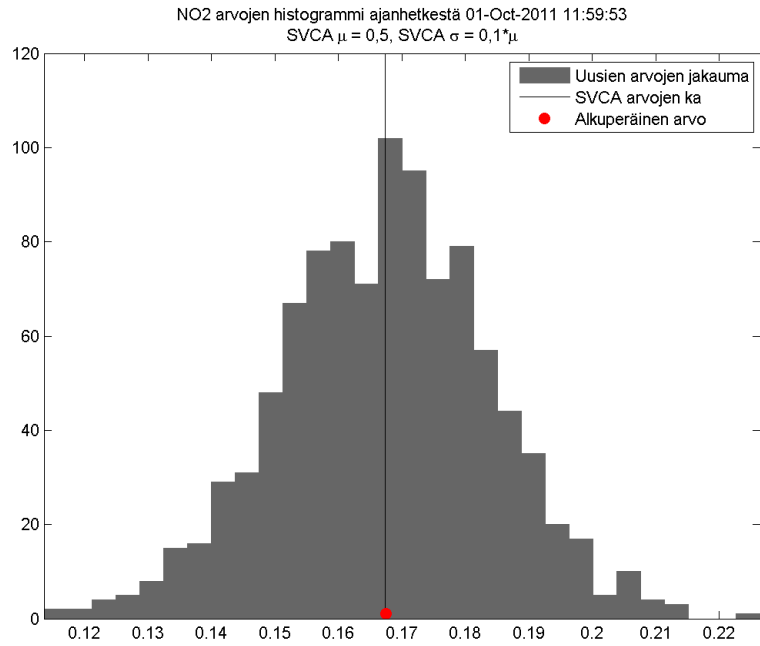
6.2.3 Oletusmäärän muutoksen laskeminen

Oletusmäärän muutoksen vaikutusta suureen arvoihin tarkasteltiin samoin kuin oletuskorkeudenkin. Tehtiin 9 kokeilua, joissa jokaisessa luotiin normaalijakauma $N(\mu, \sigma^2)$ parametrein

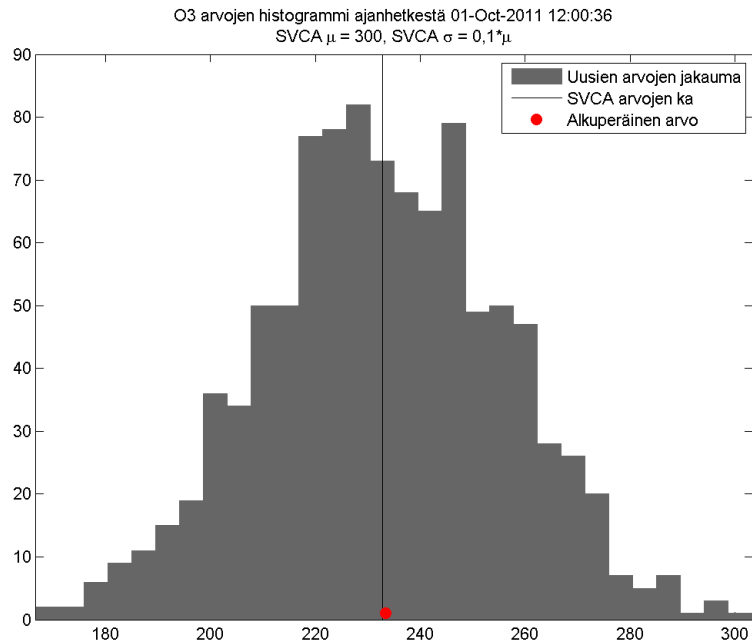
$$\mu = c_{svca}, \quad \sigma^2 = \left(\frac{k}{100} \cdot c_{svca} \right)^2,$$

missä $k \in \{0,5; 1; 2; 5; 10; 20; 30; 40; 50\}$ muuttui kokeilun järjestysnumeron mukaan, eli ensimmäisessä kokeilussa hajonta oli 0,5% odotusarvosta ja viimeisessä 50% odotusarvosta. Jokaisessa kokeilussa luotiin jälleen taulukko, johon arvottiin 1000 lukua luodusta normaalijakaumasta ja niillä laskettiin suureille uusia arvoja käyttämällä laskukaavaa 6.6, missä h_{EFF} on vakio. Jokaisesta päivästä valittiin jälleen tarkastelun kohteeksi lähinnä keskipäivää oleva ajankohta.

Kuva 3 näyttää suureen NO₂ 1.10.2011 lähinnä keskipäivää olevan ajan kohdan pystysuoraa mittausgeometriaa vastaavien kokonaismäärien jakautumisen, kun normaalijakauman hajonta on 10% odotusarvosta. Tummanharmaalla on kuvattu normaalijakaumasta arvotuilla c_{svca} arvoilla laskettu uusi NO₂-jakauma, musta viiva osoittaa jakauman keskiarvon kohdan ja punainen piste on alkuperäinen NO₂-määrä kyseisellä ajanhetkellä. Kuva 4 on vastaavanlainen kuva suureen O₃ määristä. Lisää kuvia löytyy liitteestä B.



Kuva 3: Päivän 1.10.2011 NO₂-määrien jakauma



Kuva 4: Päivän 1.10.2011 O₃-määrien jakauma

Taulukko 1: NO₂-määrien muutokset 1.10.2011

h_{EFF}	c_{svca}	μ	σ	$\sigma\%$	alkuarvo $-\mu$
10%	-	0,16753	0,00009622	0,05744	0,000004436
20%	-	0,16753	0,00020901	0,12476	-0,00000341
30%	-	0,16753	0,00031398	0,18742	0,000001341
40%	-	0,16753	0,00040999	0,24473	0,000003632
50%	-	0,16752	0,00051562	0,3078	0,00001018
-	-	-	-	-	-
-	0,5%	0,16756	0,00082295	0,49114	-0,0000288
-	1%	0,16749	0,0016587	0,99038	0,000043077
-	2%	0,16775	0,0033365	1,989	-0,00021661
-	5%	0,16786	0,0082599	4,9207	-0,00033014
-	10%	0,16744	0,016651	9,9441	0,000087833
-	20%	0,16675	0,033457	20,0638	0,00077641
-	30%	0,16742	0,048576	29,0145	0,00011022
-	40%	0,17004	0,064141	37,7213	-0,0025085
-	50%	0,17226	0,086238	50,0629	-0,0047292

6.2.4 Johtopäätökset

Taulukko 1 kertoo NO₂-määrien muutokset 1.10.2011 lähinnä keskipäivää olevalta ajanhetkeltä. Taulukosta 2 nähdään vastaavasti O₃-määrien muutokset samalta päivältä ja ajanhetkeltä. Lisää taulukoita löytyy liitteestä C. Ensimmäinen sarake kertoo sen, kuinka monta prosenttia oletuskorkeuden h_{EFF} avulla luodun normaalijakauman hajonta on odotusarvosta. Toinen sarake kertoo vastaavasti sen, kuinka monta prosenttia oletusmäärän c_{svca} avulla luodun normaalijakauman hajonta on odotusarvosta. Kolmannessa sarakkeessa on suureen uusien määrien jakauman odotusarvo ja neljännessä sarakkeessa jakauman hajonta. Viidennessä sarakkeessa on laskettu saadun jakauman hajonnan suhde jakauman odotusarvoon prosentteina, ja viimeisessä sarakkeessa on suureen alkuperäisen arvon ja saadun jakauman odotusarvon erotus.

Taulukoista 1 ja 2 nähdään selvästi sarakkeita viisi ja kuusi tarkasteltaessa, että oletuskorkeuden muutoksella ei ollut juuri lainkaan merkitystä. Sen sijaan oletusmäärän muutoksella oli vaikutusta. Oletuskorkeutta muutettaessa alkuperäisen arvon ja saadun odotusarvon ero kasvaa todella hitaasti, ja NO₂-määrien jakauman hajonnan suhde jakauman odotusarvoon on vielä 50%:n muutoksella todella pieni. Vastaavanlainen tilanne on O₃-määrillä.

Oletusmäärää muutettaessa alkuperäisen NO₂-arvon ja saadun jakauman odotusarvon ero välillä 0,5% – 10% on pieni, mutta kasvaa selvästi välillä 20% – 50%. Suurella O₃ on vastaavanlainen tilanne, sillä välillä 0,5% – 5% ero on pieni, mutta suurenee hajonnan arvon kasvaessa. Oletusmäärässä

Taulukko 2: O₃-määrien muutokset 1.10.2011

h_{EFF}	c_{svca}	μ	σ	$\sigma\%$	alkuarvo $-\mu$
10%	-	233,3367	0,39605	0,16973	0,0032822
20%	-	233,3386	0,76021	0,3258	0,0013982
30%	-	233,3145	1,1955	0,51238	0,025538
40%	-	233,3427	1,545	0,66211	-0,0027056
50%	-	233,4227	1,9733	0,84536	-0,08266
-	-	-	-	-	-
-	0,5%	233,3711	1,2318	0,52784	-0,031071
-	1%	233,2544	2,3549	1,0096	0,085615
-	2%	233,365	4,5519	1,9506	-0,024951
-	5%	233,3018	11,6556	4,9959	0,038193
-	10%	232,8527	22,7981	9,7908	0,48726
-	20%	233,4998	48,1356	20,6149	-0,15979
-	30%	230,6381	70,6282	30,6229	2,7019
-	40%	231,1074	91,8735	39,7536	2,2326
-	50%	234,8046	120,6161	51,3687	-1,4646

eron kasvun nopeus on selvästi suurempaa kuin oletuskorkeudessa molemmilla esimerkkisuureilla. NO₂-määrien jakauman hajonnan suhde jakauman odotusarvoon ei ole merkittävää välillä 0,5% – 2%, mutta hajonnan kasvaessa 5 prosenttiin odotusarvosta muutos on jo merkittävä. Vastaavanlainen tilanne on O₃-määrillä.

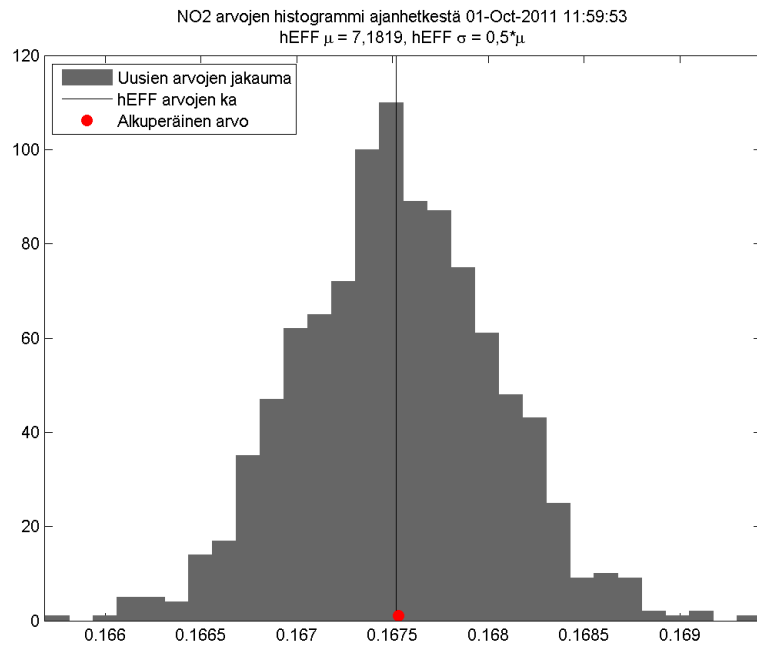
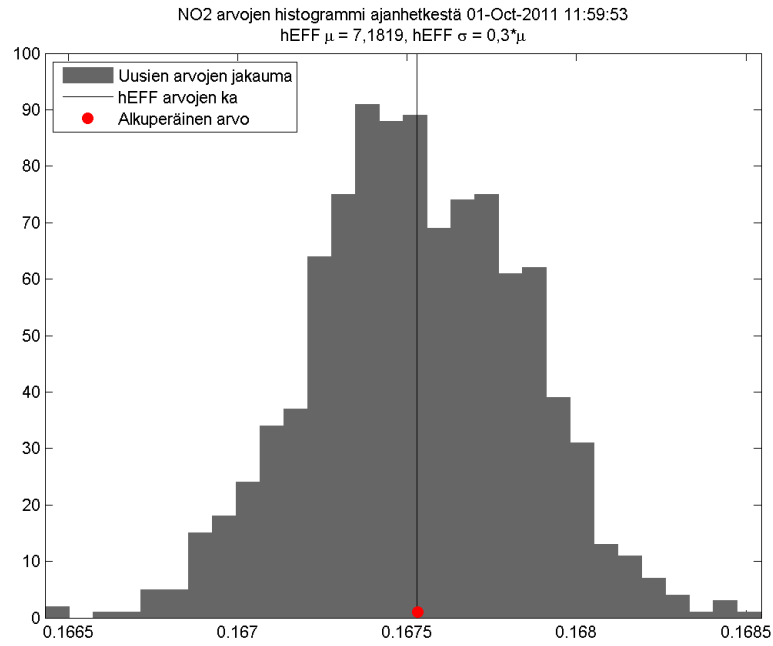
Pandora-instrumentin parametrien estimointi ei ole siis herkkä vakioitun oletuskorkeuden muutoksille, mutta oletusmäärän muutoksille kylläkin. Oletusmäärän muutoksissa pienet virheet eivät vaikuta tuloksiin juuri lainkaan, mutta suuremmilla virheillä on jo merkitystä.

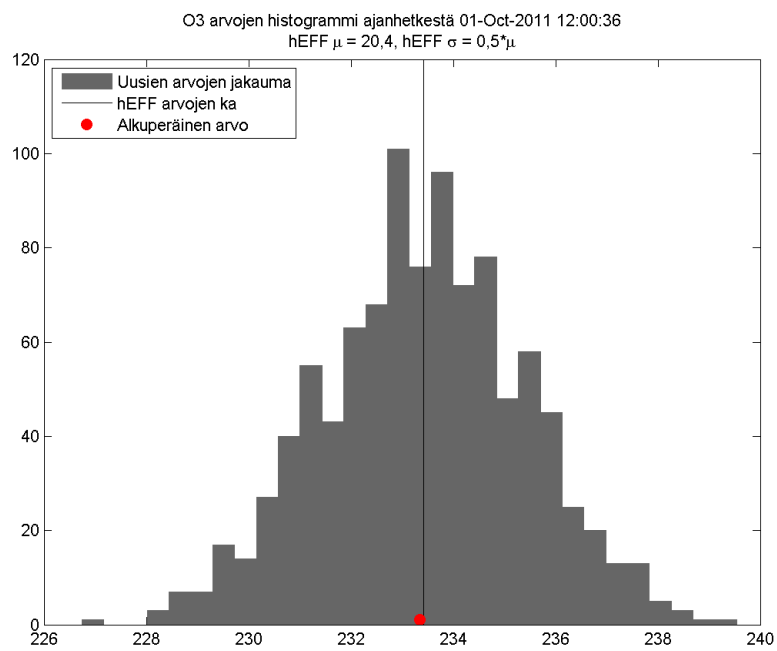
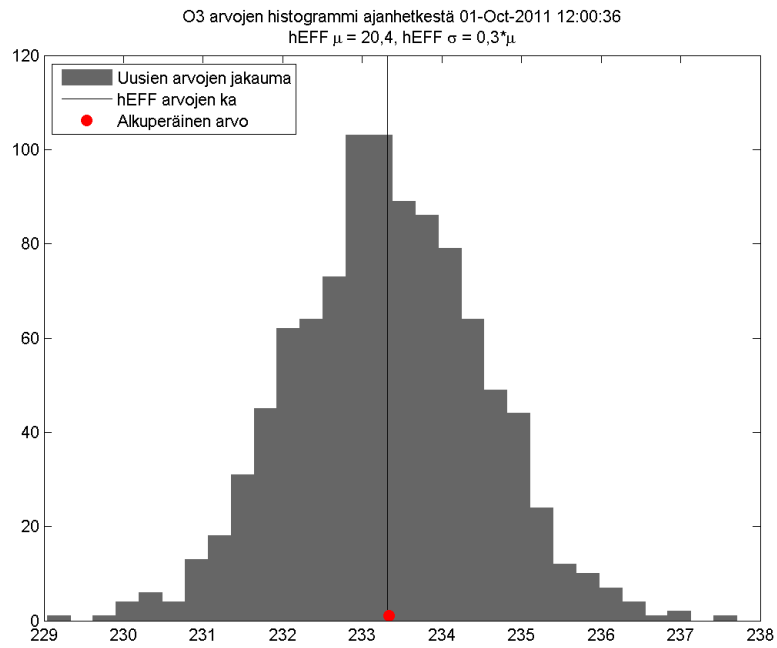
Viitteet

- [1] Bard, Y. *Nonlinear parameter estimation*. Lontoo: Academic Press, 1974
- [2] Cede, A. *Manual for Pandora Software Suite Version 1.3* October 2011
- [3] Kaipio, J., Somersalo, E. *Statistical and computational inverse problems*. New York: Springer Science+Business Media, 2005.
- [4] Laininen, P. *Todennäköisyys ja sen tilastollinen soveltaminen*. Helsinki: Valopaino Oy, 1998
- [5] Lay, D. *Linear Algebra and Its Applications*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 2002
- [6] Menke, W. *Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory*. San Diego, Kalifornia: Academic Press, 1989
- [7] Merikoski, J., Väänänen, K., Laurinolli, T., Sankilampi, T. *Matematiikantaito 15, Lineaarialgebra, 1st ed*. Porvoo: WSOY, 1998
- [8] Niemi, A. *Todennäköisyyslaskennan ja tilastomatematiikan perusteet, 2.painos*. Helsinki: Hakapaino Oy, 1995
- [9] Press, H., Flannery, B., Teukolsky, S., Vetterling, W. *Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing*. Cambridge: Cambridge University Press, 1989
- [10] Rodgers, C. *Inverse methods for atmospheric sounding: Theory and practise*. Singapore: Uto-Print, 2000
- [11] NASA: SMART-COMMIT-ACHIEVE [Viitattu 3.4.2012]. http://smartlabs.gsfc.nasa.gov/instruments_smart.php
- [12] OMI_ATBD_Volume_2_V2.pdf [Viitattu 9.5.2012]. http://www.knmi.nl/omi/documents/data/OMI_ATBD_Volume_2_V2.pdf
- [13] Cede, A. : *Pandora Source Code*. 2011

Liite A

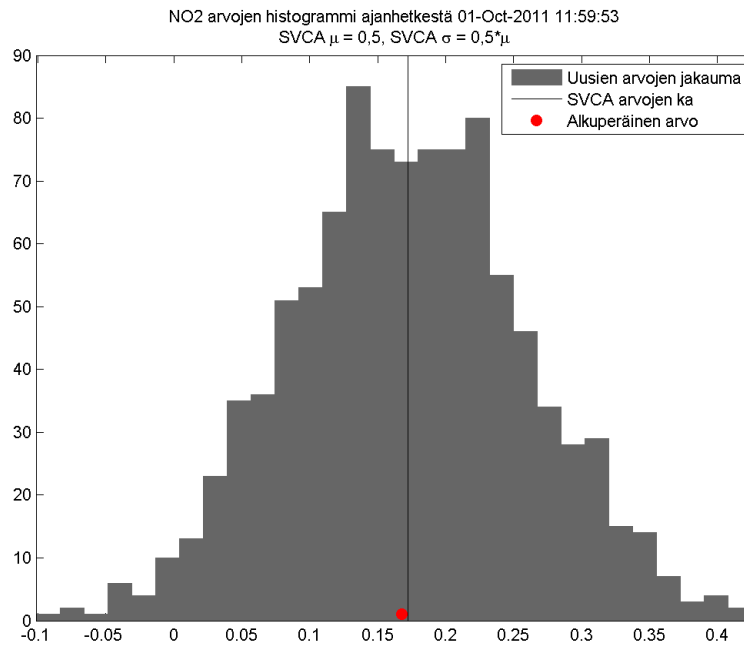
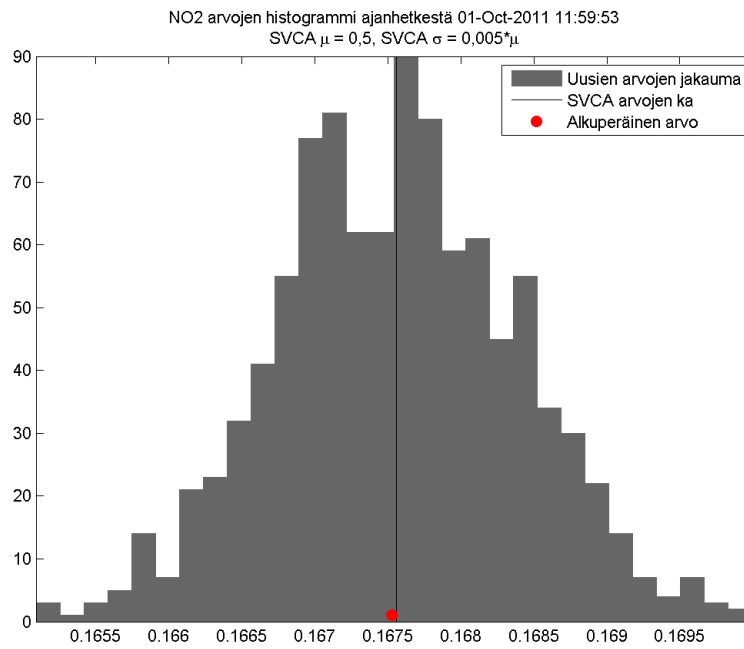
Kuvia oletuskorkeuden muutoksen vaikutuksesta suureiden NO_2 - ja O_3 -määriin.



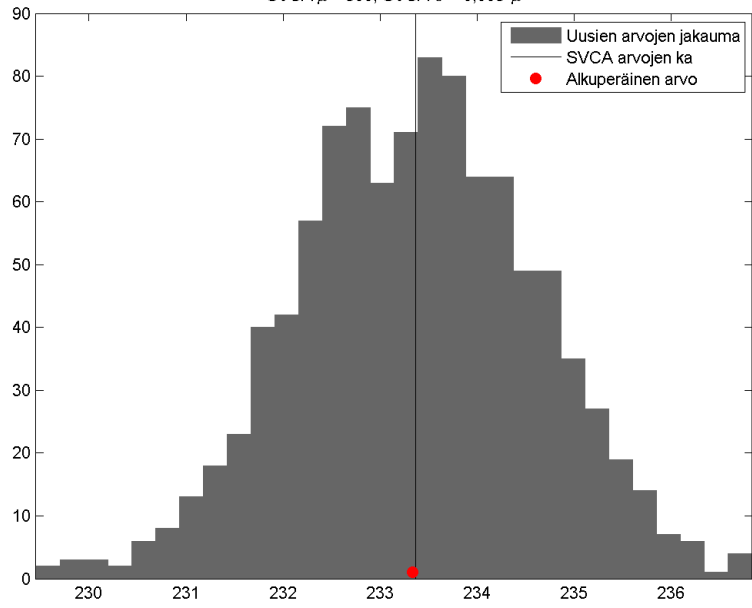


Liite B

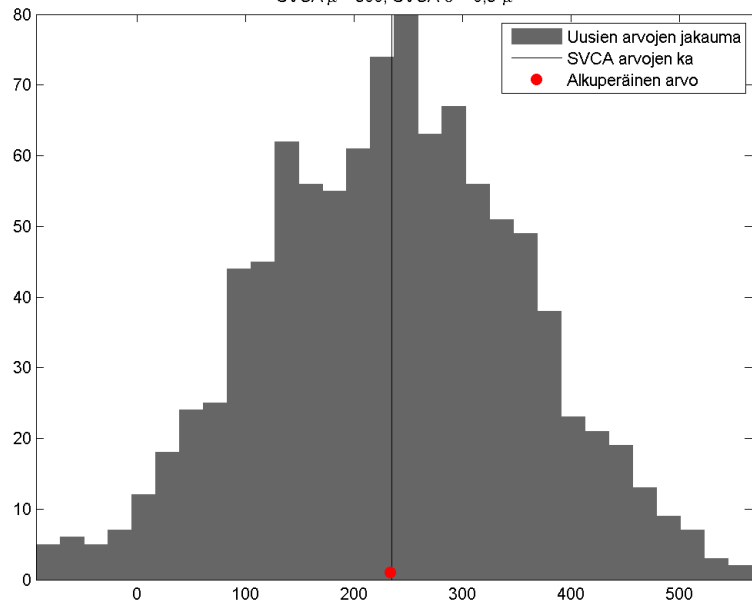
Kuvia oletusmäärän muutoksen vaikutuksesta suureiden NO₂- ja O₃ -määriin.



O3 arvojen histogrammi ajanhetkestä 01-Oct-2011 12:00:36
SVCA $\mu = 300$, SVCA $\sigma = 0,005 \cdot \mu$



O3 arvojen histogrammi ajanhetkestä 01-Oct-2011 12:00:36
SVCA $\mu = 300$, SVCA $\sigma = 0,5 \cdot \mu$



Liite C

Taulukko 3: NO₂-määrien muutokset 14.10.2011

h_{EFF}	c_{svca}	μ	σ	$\sigma\%$	alkuarvo $-\mu$
10%	-	0,13123	0,00012786	0,09743	0,0000059209
20%	-	0,13124	0,00027773	0,21161	-0,0000044134
30%	-	0,13124	0,00041723	0,31792	0,0000020544
40%	-	0,13123	0,00054479	0,41513	0,0000052904
50%	-	0,13123	0,00068517	0,52213	0,000014261
-	-	-	-	-	-
-	0,5%	0,13126	0,00064468	0,49114	-0,000022591
-	1%	0,13121	0,0012994	0,99038	0,000033746
-	2%	0,13141	0,0026138	1,989	-0,00016969
-	5%	0,1315	0,0064707	4,9207	-0,00025863
-	10%	0,13117	0,013044	9,9441	0,000068807
-	20%	0,13063	0,02621	20,0638	0,00060823
-	30%	0,13115	0,038054	29,0145	0,000086345
-	40%	0,13321	0,050247	37,7213	-0,0019651
-	50%	0,13494	0,067557	50,0629	-0,0037048

Taulukko 4: O₃-määrien muutokset 14.10.2011

h_{EFF}	c_{svca}	μ	σ	$\sigma\%$	alkuarvo $-\mu$
10%	-	281,3529	0,79809	0,28366	0,0070683
20%	-	281,3555	1,5322	0,54459	0,0044926
30%	-	281,3044	2,4093	0,85646	0,055606
40%	-	281,3585	3,1132	1,1065	0,0014577
50%	-	281,5153	3,9765	1,4125	-0,15528
-	-	-	-	-	-
-	0,5%	281,3975	1,4853	0,52784	-0,037465
-	1%	281,2568	2,8395	1,0096	0,10323
-	2%	281,3901	5,4887	1,9506	-0,030086
-	5%	281,3139	14,0542	4,9959	0,046053
-	10%	280,7725	27,4898	9,7908	0,587538
-	20%	281,5527	58,0417	20,6149	-0,19267
-	30%	278,1021	85,1631	30,6229	3,2579
-	40%	278,668	110,7805	39,7536	2,692
-	50%	283,126	145,4382	51,3687	-1,766