

ЗАВДАННЯ ДЕКОНВОЛЮЦІЇ СПЕКТРА: ПОРІВНЯННЯ ДВОХ ОСНОВНИХ МЕТОДІВ ВИБОРУ ПАРАМЕТРА РЕГУЛЯРИЗАЦІЇ

О.М. Соколов

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

Вибір параметра регуляризації – важливий і досі актуальний етап у методі регуляризації розв'язання некоректно поставлених завдань, зокрема, завдання деконволюції спектра, тобто, усунення спотворювального впливу апаратури під час реєстрації експериментальних спектрометричних даних. Завдання зводиться до вирішення інтегрального рівняння Фредгольма 1-го роду:

$$\int_a^b K(t, s)x(s)ds = y_\delta(t), \quad t \in [c, d], \quad \text{або, в операторному вигляді, } Kx = y_\delta, \quad (1)$$

де $x(s)$ – вихідна залежність (неспотворений спектр), що нас цікавить, $y_\delta(t)$ – отримана в результаті реєстрації спектра апаратурою залежність (зареєстрований спектр), δ -рівень її похибки, $K(t,s)$ – апаратна функція, яка передбачається заданою.

У методі регуляризації [1,2] рішення рівняння (1) з правою частиною $y_\delta(t)$ замінюється завданням на мінімум функціоналу Тихонова

$$\arg \min_x (\|Kx - y_\delta\|_{L_2}^2 + \alpha \|x\|_{W_2^1}^2), \quad (2)$$

яка стійка до похибки в даних, на відміну від завдання (1). Від вибору параметра регуляризації (ПР) залежить стійкість рішення задачі (2) і відхилення рішення x_α від точного рішення вихідної задачі (1). Тому вибору ПР α приділяється особлива увага. Введемо параметричні функціонали (функції від параметра α):

$$\rho(\alpha) = \|Kx_\alpha - y_\delta\|_{L_2}, \quad (3)$$

$$\gamma(\alpha) = \|x_\alpha\|_{W_2^1} \equiv \left(\|x_\alpha\|_{L_2}^2 + \|x'_\alpha\|_{L_2}^2 \right)^{1/2}. \quad (4)$$

$$\varphi(\alpha) = \|Kx_\alpha - y_\delta\|_{L_2}^2 + \alpha \cdot \|x_\alpha\|_{W_2^1}^2. \quad (5)$$

Усі три функції суворо монотонні. Функції $\rho(\alpha)$ та $\varphi(\alpha)$ (нев'язка і функціонал Тихонова) зростають, норма регуляризованого рішення $\gamma(\alpha)$ зменшується [2]. Зазвичай через великий діапазон зміни величин, при зображенні цих функцій на графіку застосовується логарифмічний масштаб по обох осях. Застосування логарифмічного масштабу по осі α фактично означає, що ми перейшли до нової змінної p , пов'язаної з α відношенням $\alpha = 10^p$ або, інакше, $p = \log_{10}(\alpha)$.

Перехід до логарифмічного масштабу по осі ординат для ρ або γ означає заміну змінної виду $\rho_{new} = \log_{10}(\rho_{old})$ і $\gamma_{new} = \log_{10}(\gamma_{old})$. На рис.1 величини наведено саме після такої заміни змінних.

Методи вибору параметра регуляризації можна розділити на дві групи. До першої, що передбачає відомим рівень δ похибки в даних, відноситься, наприклад, вибір за принципом невід'язки [2] (вибір з умови: невід'язка рівняння (1) на регуляризованому рішенні така ж, як на точному рішенні, тобто дорівнює δ). До другої групи методів вибору параметра регуляризації, що не використовують відомостей про рівень і характер похибки в даних, відноситься привабливий своєю графічною наочністю метод L-кривий [3].

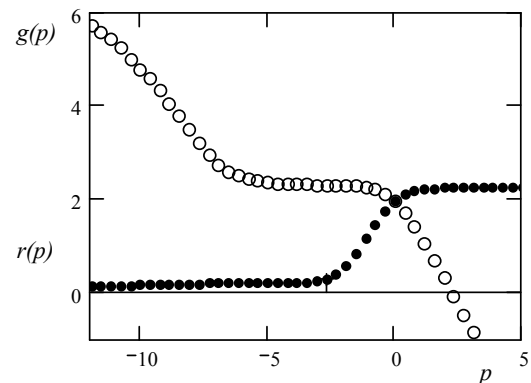


Рис.1. Функції невід'язки ($r(p)$ - •••) та норми ($g(p)$ - ооо) (наведені після заміни змінних, збігаються з невід'язкою $\rho(\alpha)$ та нормою $\gamma(\alpha)$ в лог-лог масштабі)

Критерій вибору ПР за принципом нев'язки [2] будується на основі залежності $\rho(\alpha)$ та зводиться до рівняння

$$\rho(\alpha) = \tau\delta, \tau \approx 1. \quad (r(p) = \log(\delta)). \quad (6)$$

Рішенням рівняння (6) відповідає точка перетину графіка функції $r(p)$ і прямий на рівні $\lg(\delta)$ (див. рис.2). Рівень похибки не завжди відомий точно і може бути заданий з помилкою. При цьому при малих значеннях δ точка перетину прямий і графіка функції $r(p)$ визначиться з великою похибкою.

Вибір параметра регуляризації за методом L-кривий. Візьмемо функцію $g(p)$ норми регуляризованого рішення, графік якої наведено на рис.1, і зробимо ще одну заміну змінної $p = p(r)$, користуючись тим, що функція нев'язки $r(p)$ строго зростаюча і може бути звернена.

Таким чином, ми отримаємо складну функцію норми від нев'язки. При цьому графік норми перетворюється і набуде вигляду, показаного на рис. 3. Це і є L-крива. Вона має характерний вигин, «кут», коли майже вертикальна частина кривої перетворюється на майже горизонтальну ділянку. Критерій L-кривий пропонує вибирати значення ПР α , що відповідає куту L-кривий.

Неявна схожість зазначених методів вибору ПР. На рис. 1, де наведені одночасно графіки норми і нев'язки, вертикальна рисочка відзначає межу, де функція нев'язки починає помітне зростання. Точки графіка норми, що лежать ліворуч від цієї межі, при заміні змінної, яка переведе цей графік в L-криву, стиснуться вліво, що лежать трохи правіше - розтягнуться в горизонтальну ділянку. Саме ця межа

визначає положення точок в області кута L-кривої і, зауважимо, вона близька до значення ПР, одержуваного за принципом нев'язки. Залежність між нормою g і нев'язкою r взаємно-однозначна. Тому L-крива на рис. 3 є як графіком прямий, так і зворотної функції, тобто, функції нев'язки від норми. Для звичного положення осей графіка досить повернути рис. 3 на 90° проти годинникової стрілки. Ми побачимо графік функції $r(g)$ (рис.4), схожий на графік $r(p)$ на рис.2 і який ми отримуємо з нього після відповідної заміни змінної. Таким чином, L-крива має сильну схожість з графіком нев'язки (з урахуванням повороту). L-криву можна трактувати не тільки як параметрично задану криву, а й як перетворений графік функції норми регуляризованого рішення від нев'язки. Від нього вона «успадковує» свої основні властивості. Положення кута визначається головним чином тим, де на графіку нев'язки $r(p)$ майже горизонтальна ділянка повільного зростання переходить у ділянку помітного зростання. Тому критерій L-кривий і принцип нев'язки повинні давати близькі результати.

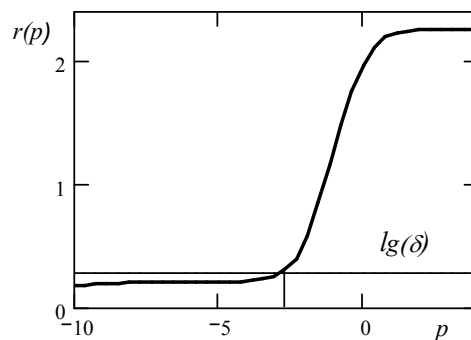


Рис.2. Визначення ПР за принципом нев'язки

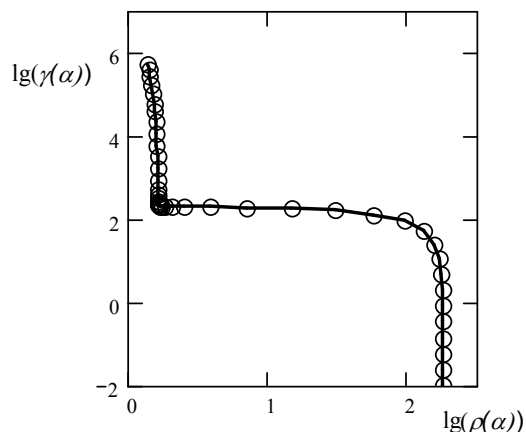


Рис. 3. Типова форма L-кривої, яка задана в параметричному вигляді. Може трактуватися як функція норми від нев'язки в лог-лог масштабі

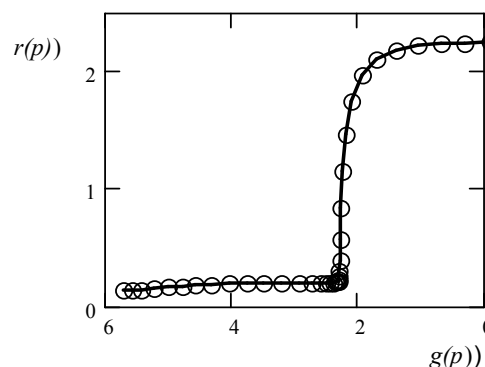


Рис.4. Поворот графіка L-кривий на 90° проти годинникової стрілки. Може трактуватися як функція нев'язки від норми в лог-лог масштабі

1. А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. *Методы решения некорректных задач*. - М.: Наука, 1979
2. В.А. Морозов. *Регулярные методы решения некорректно поставленных задач*. - М.: изд. МГУ, 1974.
3. P. C. Hansen, The L-curve and its use in the numerical treatment of inverse problems; in P. Johnston (Ed.), *Computational Inverse Problems in Electrocardiography*, WIT Press, Southampton, 2001; pp. 119-142.