Р.З. Деянов, Б.М. Щедрин, Е.М. Бурова

ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ МЕТОД РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В ЗАДАЧЕ ВЫДЕЛЕНИЯ ЛИНИИ ФОНА ПРИ ОБРАБОТКЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Задача выделения линии фона часто возникает при первичной обработке данных физического эксперимента, когда из полученных значений требуется выделить фоновую составляющую. В первую очередь, это связано с обработкой дифракционных спектров в нейтронографии, оже-спектроскопии, газовой электронографии, с обработкой порошковых дебаеграмм.

Факторы, порождающие линию фона, носят, как правило, случайный характер и, главное, не всегда известно какие именно физические факторы участвуют в формировании линии фона. Поэтому, основным вопросом выделения линии фона является выбор функций, которыми ее моделируют. Как правило, основными свойствами таких функций является их плавность, или, с математической точки - гладкость и ограниченность функции кривизны. Функция кривизны задается выражением:

$$k(u(x)) = \frac{|u''(x)|}{\left(1+(u'(x))^2\right)^{3/2}}.$$

Из физических соображений линия фона, обозначим ее как B (background), ищется такой, чтобы минимизировалась выбранная норма для функции кривизны. Отметим очевидное соотношение $\|k(u)\| \le \|u''\|$ (для любой нормы). Таким образом, если мы будем минимизировать норму $\|u''\|$ на некотором специально заданном множестве функций, то добьемся и уменьшения нормы $\|k(u)\|$.

Формализуем нашу задачу. Рассмотрим пространство функций интегрируемых с квадратом на $[a,b]$ с метрикой $\rho_{U_2}(u,v) = \left\{ \int_a^b (u(x)-v(x))^2 dx \right\}^{1/2}$ (далее просто $\rho(u,v)$). Это метрическое пространство $U_2[a,b]$. Для $u,v \in U_2[a,b]$: $(u,v) = \int_a^b uv dx$, $\|u\|_{U_2}^2 = (u,u)$

(далее, под $\| \|$ будем понимать $\| \|_{U_2}$). На множестве $D=\{u\in C^4[a,b];\ u(a)=u'(a)=u(b)=u'(b)=0\}$ рассмотрим линейные операторы дифференцирования $L_1u=\dfrac{du}{dx}, L_2u=\dfrac{d^2u}{dx^2}$.

Пусть нам известно $\delta>0$ такое, что для данной экспериментальной функции $u_\delta(x)\in C[a,b]$ выполняется $\rho(u_\delta,B)\le\delta$. Пусть также известно число $R>0$ такое, что выполняется $\|L_2B\|\le R$. Как показала практика, значения δ,R не сложно найти по экспериментальным данным. Введем множество $D_{\delta,R}=\{u\in C^4[a,b];\rho(u_\delta,u)\le\delta,\ \|L_2u\|\le R\}$. Не ограничивая общности, можно считать $D_{\delta,R}\subseteq D$ (что можно добиться линейной заменой переменных).

Поставим задачу выделения линии фона как поиск элемента множества $D_{\delta,R}$ с минимальным значением квадрата нормы второй производной, т.е.

$$\|L_2u\|^2\to\ \min\ ,\quad u\in D_{\delta,R}. \tag{1}$$

Решение задачи существует, единственно ([1], с. 133–139) и сводится к поиску регуляризованного решения по А.Н.Тихонову. При этом, априорная информация о значениях δ,R позволяет обойтись без решения задачи определения параметра регуляризации α. Согласно детерминированному методу регуляризации [2, с.136] решение (1) ищется как минимум квадратичного функционала на множестве $D_{\delta,R}$:

$$\min\ \Psi[u]=\|u-u_\delta\|^2+\frac{\delta^2}{R^2}\|L_2u\|^2\ ,\qquad u\in D_{\delta,R}. \tag{2}$$

Пусть u_α $(\alpha=\delta^2/R^2)$ решение (2), тогда оно с необходимостью удовлетворяет тождеству Эйлера:

$$(u_\alpha-u_\delta,v)+\alpha(L_2u_\alpha,L_2v)\equiv0\ ,\qquad \forall\ v\in D_{\delta,R}.$$

Учитывая для множества D самосопряженность оператора $L_2=L_2^*$, получаем уравнение Эйлера:

$$\alpha u_\alpha^{(4)}+u_\alpha=u_\delta\ ,\qquad u_\alpha(a)=u'_\alpha(a)=u_\alpha(b)=u'_\alpha(b)=0. \tag{3}$$

Решение (3) существует и единственно для любой непрерывной функции u_δ ([3], с.117).

Будем рассматривать варианты А)- Г) решения задач (2),(3):

А) проводится дискретизация (2) на неравномерной сетке,

Б) проводится дискретизация (2) на равномерной сетке,

В) проводится дискретизация (3) на равномерной сетке,

Г) решение (3) находится для любой точки $[a,b]$.

***Вариант* А.** Проводится дискретизация исходного функционала (2) с неравномерной сеткой по аргументу x: $x_0, x_1, \dots, x_n (x_0 = a, x_n = b)$, $u_{\delta,i} = u_\delta(x_i)$ и искомыми значениями $u_i = u(x_i)$. Функционал (2) переходит в квадратичную форму от переменных $u_0, u_1, \dots, u_n$:

$$\Phi(\bar{u}) = \sum_{i=0}^{n} h_i (u_i - u_{\delta,i})^2 + \alpha \sum_{i=1}^{n-1} h_i ((u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) / h_i^2)^2 \to \min .$$

Минимум (единственный) данный квадратичной формы определяется как решение СЛАУ: $A\bar{u} = \bar{f}$, где $\bar{u} = (u_0, u_1, \dots, u_n)^T$, $f = (h_0 u_{\delta,0}, h_1 u_{\delta,1}, \dots, h_n u_{\delta,n})^T$, A-симметричная положительно-определенная матрица. Приведем ее верхний треугольный вид:

$$A = \begin{pmatrix} h_0 + \alpha h_1^{-3} & -2\alpha h_1^{-3} & \alpha h_1^{-3} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & h_j + \alpha(h_{j-1}^{-3} + 4h_j^{-3} + h_{j+1}^{-3}) & -2\alpha(h_j^{-3} + _{j+1}^{-3}) & \alpha h_{j+1}^{-3} & & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & & h_{n-1} + \alpha(h_{n-2}^{-3} + 4h_{n-1}^{-3}) & -2\alpha h_{n-1}^{-3} \\ & & & & & h_n + \alpha h_{n-1}^{-3} \end{pmatrix}.$$

Для решения СЛАУ $A\bar{u} = f$ применяли метод монотонной прогонки ([4], с.98), который требует всего $8n-5$ операций сложения и вычитания, $8n-5$ операций умножения и $3n$ операций деления. Достаточные условия корректности (устойчивости) данного метода прогонки для матрицы A выражаются как $\alpha \le \min\left\{\frac{1}{2}h_0 h_1^3, \frac{1}{3}h_1 h_2^3, \frac{1}{2}h_n h_{n-1}^3, \frac{1}{3}h_{n-1}h_{n-2}^3, \frac{1}{2}\sigma_{\min}\right\}$,

где $\sigma_{\min} = \min\limits_{2 \le i \le n-2} \dfrac{h_i}{h_{i-1}^{-3} + h_{i+1}^{-3}}$ ([4], с.100).

***Вариант* Б.** Проводится дискретизация исходного функционала (2) с равномерной сеткой по аргументу x: $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, \dots, n$. В этом случае функционал (2) также переходит в квадратичную форму от переменных $u_0, u_1, \dots, u_n$:

$$\Phi(\bar{u}) = \sum_{i=0}^{n} (u_i - u_{\delta,i})^2 + \alpha h^{-3} \sum_{i=1}^{n-1} (u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1})^2 \to \min$$

Минимум определяется как решение СЛАУ $Au = u_\delta$ с симметричной положительно-определенной матрицей $A = E + (\alpha / h^3)D$, где матрица $D = D^T$ (вырождена):

$$D=\begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ -2 & 5 & -4 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & \ldots & \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \\ & & & 1 & -4 & 5 & -2 \\ & & & 0 & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Для данной матрицы A найден эффективный метод обращения (методом прогонки), который требует порядка $9n$ операций умножения и n операций деления.

Вариант **В.** Проводится дискретизация уравнения Эйлера (3) на равномерной сетке. Оператор дифференцирования четвертого порядка заменим соответствующим оператором конечной разности четвертого порядка: $u_i^{(4)} \approx \frac{1}{h^2}(u_{i-2} - 4u_{i-1} + 6u_i - 4u_{i+1} + u_{i+2})$, $i = 0,\ldots,n-1$. С учетом нулевых граничных условий, мы можем рассматривать нашу функцию как периодическую (с периодом $T = b - a$) и принять $u_{-1} = u_{n-1}$, $u_{-2} = u_{n-2}$, $u_{n+1} = u_1$, $u_{n+2} = u_2$.Тогда

$$u_0^{(4)} \approx \frac{1}{h^4}(u_{n-2} - 4u_{n-1} + 6u_0 - 4u_1 + u_2),$$

$$u_1^{(4)} \approx \frac{1}{h^4}(u_{n-1} - 4u_0 + 6u_1 - 4u_2 + u_3),$$

$$u_{n-2}^{(4)} \approx \frac{1}{h^4}(u_{n-4} - 4u_{n-3} + 6u_{n-2} - 4u_{n-1} + u_0),$$

$$u_{n-1}^{(4)} \approx \frac{1}{h^4}(u_{n-3} - 4u_{n-2} + 6u_{n-1} - 4u_0 + u_1)\ .$$

Отсюда получаем СЛАУ : $(E + pC)u = u_\delta$, $p = \alpha / h^4$, где $(E + pC)$ симметричная циркулянтная матрица:

$$E + pC = \begin{pmatrix} 1+6p & -4p & p & 0 & 0 & \ldots & 0 & p & -4p \\ -4p & 1+6p & -4p & p & 0 & \ldots & \ldots & 0 & p \\ p & -4p & 1+6p & -4p & p & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & p & -4p & 1+6p & -4p & p \\ p & 0 & \ldots & \ldots & 0 & p & -4p & 1+6p & -4p \\ -4p & p & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & p & -4p & 1+6p \end{pmatrix}.$$

Следовательно, при решении СЛАУ можно избежать трудоемкой операции обращения матрицы и найти решение (при условии невырожденности матрицы) в явном виде, т.к. известны вещественные собственные значения $y_k = 1 + p(6 - 4r_k + r_k^2 + r_k^{n-2} - 4r_k^{n-1})$ и собственные вектора $x_k = (1,\ r_k, r_k^2,\ ...,\ r_k^{n-1})^T$, где $r_k = \cos\dfrac{2\pi k}{n} + i\sin\dfrac{2\pi k}{n}$ (k-й корень из 1). Для нахождения y_k вычислим $6 - 4(r_k + r_k^{n-1}) + r_k^2 + r_k^{n-2} =$
$= 6 - 8\cos\alpha_k + 2\cos 2\alpha_k = 16\sin^4\dfrac{\alpha_k}{2},\ \ \alpha_k = \dfrac{2\pi k}{n}$. Таким образом, $y_k = 1 + 16p\sin^4\dfrac{\pi k}{n} > 0$ (отсюда матрица $E + pC$ является положительно-определенной) и решение дается как $u = \dfrac{1}{n}F^*\Lambda^{-1}Fu_\delta$, где $\Lambda^{-1} = diag\left\{y_0^{-1}, y_0^{-2}, ..., y_{n-1}^{-1}\right\}$, F – матрица дискретного преобразования Фурье, у которой столбцами являются собственные вектора x_k.

Можно также рассматривать следующий оператор конечной разности четвертого порядка([6], с.234):

$$u_i^{(2)} \approx \frac{1}{h^2}(\alpha_2 u_{i-2} + \alpha_1 u_{i-1} + \alpha_0 u_i + \alpha_1 u_{i+1} + \alpha_2 u_{i+2}),$$

$$u_i^{(4)} \approx \frac{1}{h^2}(\alpha_2 u_{i-2}^{(2)} + \alpha_1 u_{i-1}^{(2)} + \alpha_0 u_i^{(2)} + \alpha_1 u_{i+1}^{(2)} + \alpha_2 u_{i+2}^{(2)}) =$$

$$\frac{1}{h^4}(\beta_4 u_{i-4} + \beta_3 u_{i-3} + \beta_2 u_{i-2} + \beta_1 u_{i-1} + \beta_0 u_i + \beta_1 u_{i+1} + \beta_2 u_{i+2} + \beta_3 u_{i+3} + \beta_4 u_{i+4}),$$ где

$\alpha_0 = -60,\ \alpha_1 = 32,\ \alpha_2 = -2$. Значения β_k выражаются через α_k как

$\beta_0 = 2(\alpha_0^2 + \alpha_1^2 + \alpha_2^2),\ \beta_1 = 2(\alpha_0\alpha_1 + \alpha_2\alpha_1),\ \beta_2 = \alpha_1^2 + 2\alpha_2\alpha_0,\ \beta_3 = 2\alpha_2\alpha_1,\ \beta_4 = \alpha_2^2$.

Принималось $u_0 = u_n,\ u_{-1} = u_{n-1},\ u_{-2} = u_{n-2},\ u_{-3} = u_{n-3},\ u_{-4} = u_{n-4}$, $u_{n+1} = u_1,\ u_{n+2} = u_2,\ u_{n+3} = u_3,\ u_{n+4} = u_4$. Собственные значения

$y_k = 1 + p(\beta_0 + \beta_1 r_k + \beta_2 r_k^2 + \beta_3 r_k^3 + \beta_4 r_k^4 + \beta_4 r_k^{n-4} + \beta_3 r_k^{n-3} + \beta_2 r_k^{n-2} + \beta_1 r_k^{n-1})$, или

$y_k = 1 + p(\beta_0 + 2(\beta_1\cos\alpha_k + \beta_2\cos 2\alpha_k + \beta_3\cos 3\alpha_k + \beta_4\cos 4\alpha_k))$. Решение также дается как $u = \dfrac{1}{n}F^*\Lambda^{-1}Fu_\delta$. Меняется только $\Lambda^{-1} = diag\left\{y_0^{-1}, y_0^{-2}, ..., y_{n-1}^{-1}\right\}$. Собственные вектора $x_k = (1,\ r_k, r_k^2,\ ...,\ r_k^{n-1})^T$, как известно, являются общими для всех циркулянтов([7], с.44).

***Вариант* Г.** Выразим решение (3) в явном виде. Предварительно, приведем уравнение к виду:

$$u^{(4)} + 4\lambda^4 u = 4\lambda^4 u_\delta\ , \qquad u(a) = u'(a) = u(b) = u'(b) = 0,$$

где $\lambda = (R/(2\delta))^{1/2}$. Решением данного уравнения является функция:

$$u(x)=\sum_{k=1}^{4}c_k u_k(x)+4\lambda^4\int_a^x u_4(x-t)u_\delta(t)dt\ ,$$

где $\quad u_1(x)=\cosh\lambda x\cdot\cos\lambda x\,,\quad u_2(x)=\frac{1}{2}(\cosh\lambda x\cdot\sin\lambda x+\sinh\lambda x\cdot\cos\lambda x)\,,$

$$u_3(x)=\frac{1}{2}\sinh\lambda x\cdot\sin\lambda x\,,\quad u_4(x)=\frac{1}{4}(\cosh\lambda x\cdot\sin\lambda x-\sinh\lambda x\cdot\cos\lambda x)\,.$$

Коэффициенты c_k определяются из граничных условий:

$$u_1(a)c_1+u_2(a)c_2+u_3(a)c_3+u_4(a)c_4=0\,,$$
$$u_1(b)c_1+u_2(b)c_2+u_3(b)c_3+u_4(b)c_4=b_3\,,$$
$$-4u_4(a)c_1+u_1(a)c_2+u_2(a)c_3+u_3(a)c_4=0\,,$$
$$-4u_4(b)c_1+u_1(b)c_2+u_2(b)c_3+u_3(b)c_4=b_4\,,$$
$$b_3=-4\lambda^4\int_a^b u_4(b-t)u_\delta(t)dt\,,$$
$$b_4=-4\lambda^3\left.\left(\frac{d}{dx}\int_a^x u_4(x-t)u_\delta(t)dt\right)\right|_{x=b}.$$

Доказательство дано в ([5]).

Замечание 1.. Оценки параметров алгоритма - δ и R, несложно вычисляются применением метода скользящего среднего: пусть S_m-оператор применения метода скользящего среднего по m точкам. Тогда, можно определить $\delta=\|S_m(u_\delta)-u_\delta\|$, $R=\|L_2S_m(u_\delta)\|$.

Замечание 2. Если искомая функция не удовлетворяет нулевым граничным условиям (3), т.е. выполняется $u(a)=y_1$, $u'(a)=d_1$, $u(b)=y_2$, $u'(b)=d_2$ так, что $y_1^2+y_2^2+d_1^2+d_2^2\neq 0$, то вводим новую функцию $z(x)=u(x)-P_3(x)$, где

$$P_3(x)=\frac{1}{b-a}\left[(b-x)y_1+(x-a)y_2\right]+$$
$$+\frac{(x-a)(x-b)}{(b-a)^3}\left[(d_1(b-a)+y_1-y_2)(x-b)+(d_2(b-a)+y_1-y_2)(x-a)\right]\ .$$

Тогда, очевидно, $z(a)=z'(a)=z(b)=z'(b)=0$, функция $u_\delta(x)$ заменится на $u_\delta(x)-P_3(x)$, значение δ останется прежним, но R изменится на

$$R_Z=\left(R^2-\left.\left(P_3''P_3'-P_3'''P_3\right)\right|_a^b\right)^{1/2}.$$

Замечание 3. Данный алгоритм может также применяться для фильтрации шумов экспериментальных данных; на рис.1 показано выделение полезного сигнала.

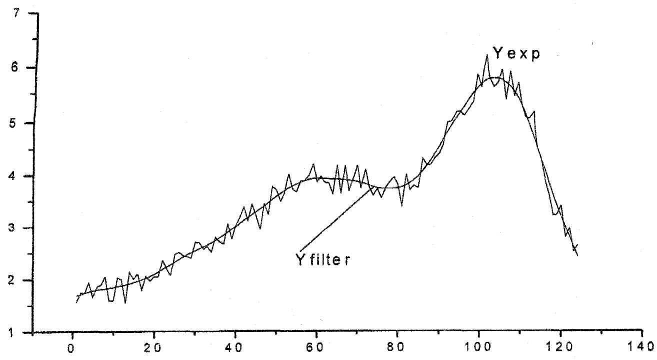

Рис.1. Фильтрация шумов экспериментальной функции.

Замечание 4. Определенную сложность для известных алгоритмов проведения линии фона вызывает требование проведения линии фона строго под спектром. Наш алгоритм успешно справляется с подобным требованием (см. рис.2)

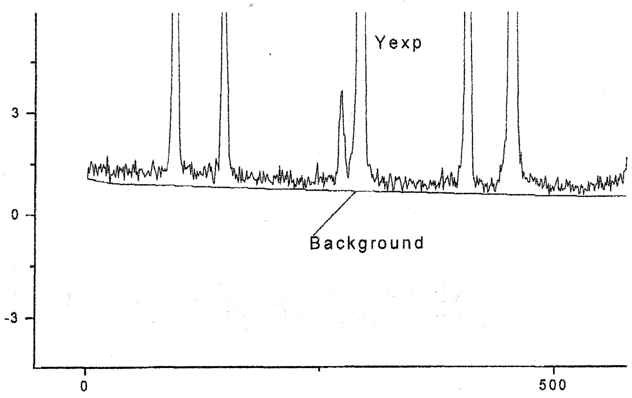

Рис.2. По условиям задачи линия фона проведена строго под спектром.

Практическое использование

Данный алгоритм успешно применялся при обработки данных порошковых дифрактограмм, оже-спектроскопии, газовой электронографии, нейтронограмм (рис. 3-5).

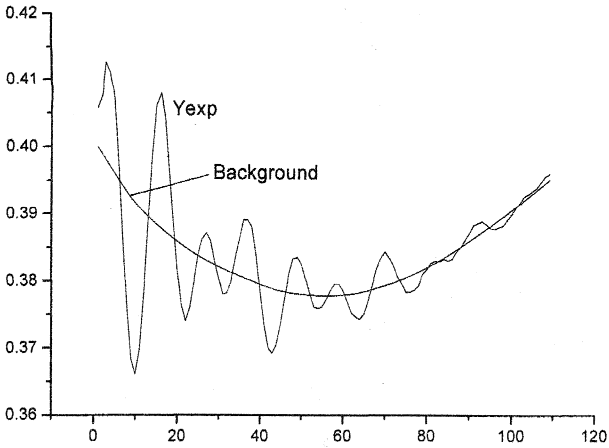

Рис.3. Выделение линии фона в газовой электронографии (Yexp – интенсивность рассеяния электронов на газе молекулы CHCl3).

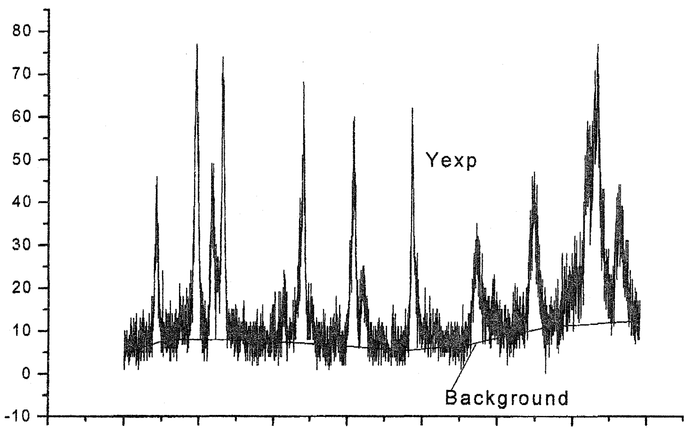

Рис.4. Выделение линии фона по данным порошковой рентгенограммы (количество точек -3500).

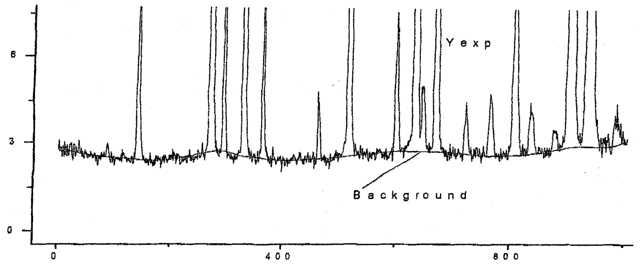

Рис.5. Выделение линии фона по данным нейтронограммы.

При числе точек в спектре N=4096 время счета занимает менее долей секунды на PC средней мощности. Проведенные тесты показали, что ограничения на количество точек спектра определяется только ограниченностью памяти PC. В этом смысле интересно рассмотреть следующую постановку задачи проведения линии фона: с непрерывно работающего прибора поступает спектр; требуется в режиме реального времени выдавать числовые значения спектра без линии фона. В настоящее время такой алгоритм нами разработан, проводится его апробация.

Заключение. На основе метода регуляризации А.Н.Тихонова разработан эффективный алгоритм и серия соответствующих программ для выделения гладкой линии фона при обработке экспериментальных данных. Следует отметить, что алгоритм пригоден не только для выделения линии фона, но и для построения фильтрующей функции.

Литература

1. Тихонов А.Н, Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - М., Наука, 1979, 285 с.
2. Морозов В.А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. - М.: Изд-во МГУ, 1974, 359 с.
3. Тихонов А.Н., Васильева А.Б., Свешников А.Г. Дифференциальные уравнения. - М.: Наука, 1980, 231 с.
4. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. - М.: Наука, 1978, 591 с.
5. Деянов Р.З., Щедрин Б.М. Восстановление гладкой функции детерминированным методом регуляризации. - М.: Изд-во МГУ, В кн. Вычислительные методы и программирование, вып. 39, 1983, с.55-61.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. т.1. - М.: Наука, 1966, 464с.
7. Воеводин В.В., Тыртышников Е.Е. Вычислительные процессы с теплицевыми матрицами. - М.: Наука, 1987, 320 с.