

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

682/2-81

9/2-81

P10-80-696

Б.З.Белашев, Л.М.Сороко

ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ  
МЕТОДОМ МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ

1980

Введение. Простейшая модель искажений, которые вносит спектрометр в искомый спектр, может быть выражена в виде линейного соотношения между истинным спектром  $f(x)$ , регистрируемым спектром  $s(x)$  и функцией отклика спектрометра  $h(x, \xi)$  на бесконечную узкую спектральную линию. Если случайный шум измерений не зависит от формы изучаемого спектра и является аддитивным, то это линейное соотношение можно записать в дискретной форме при помощи системы линейных уравнений

$$s(x) = \sum_{\xi=1}^M h(x, \xi) f(\xi) + n(x),$$

/1/

$$x = 1, \dots, N; \xi = 1, \dots, M, .$$

где  $M$  и  $N$  равны соответственно числу отсчетов на входе и на выходе спектрометра. Если  $N$  или  $M$  велики, например  $10^2 - 10^4$ , то решение системы линейных уравнений /1/ становится неустойчивым.

Неустойчивость решения системы /1/, вызванная погрешностями измерений как при наблюдении спектра  $s(x)$ , так и при определении функции отклика спектрометра  $h(x, \xi)$ , означает, что у системы /1/ имеется бесконечно много решений. Класс функций, образующих множество возможных решений системы /1/, можно сузить либо при помощи метода регуляризации /1/, либо путем введения априорной информации об искомом спектре, как это делается в регрессионном анализе /2/. Стабилизирующие фильтры вводят в частотное пространство, например, в методах статистической регуляризации /3/, в алгоритме Фурье /4/ или в методе сингулярного разложения /5/.

Метод максимума энтропии. Совсем по-другому решается проблема неоднозначности решений системы /1/ в методе максимума энтропии /6,7/. Из всего множества возможных решений выбирают то, для которого энтропия достигает максимума. Чтобы найти оценку спектра  $\hat{f}(x)$ , которая обращает в максимум энтропию, задачу формулируют как вариационную на условный экстремум и решают ее нелинейными методами.

Форма энтропии  $H$  определяется тем, каковы квантовая статистика физического носителя информации и характер заполнения

квантовых степеней свободы<sup>/8/</sup>. При наблюдении спектров электромагнитного излучения нелазерного происхождения, а также при исследовании спектров адронов и гамма-квантов в качестве энтропии  $H$  можно взять функцию Фридена<sup>/7/</sup>

$$H = \sum_{x=1}^N f(x) \ln f(x). \quad /2/$$

Если шум не зависит от сигнала, то общая энтропия равна сумме энтропии сигнала и энтропии шума. Чтобы шум можно было ввести под знак логарифма, нулевой уровень его отсчета берут таким, чтобы полученные в результате преобразования значения всегда были положительными. В этом случае энтропийный функционал для решения системы /1/ методом максимума энтропии можно записать в виде

$$\begin{aligned} G(\hat{f}, \hat{n}, \lambda(x), \mu) = & \sum_{\xi=1}^M \hat{f}(\xi) \ln \hat{f}(\xi) - \\ & - \rho \sum_{x=1}^N \hat{n}_0(x) \ln \hat{n}_0(x) - \\ & - \sum_{x=1}^N \lambda(x) \left[ \sum_{\xi=1}^M h(x, \xi) \hat{f}(\xi) + \hat{n}_0(x) - B - s(x) \right] - \\ & - \mu \left( \sum_{\xi=1}^M \hat{f}(\xi) - P \right) \Rightarrow \text{Max}, \end{aligned} \quad /3/$$

где  $B = \sup n_-(x) > 0$ ,  $\hat{f}(x)$  - оценка спектра,  $\hat{n}_0(x)$  - оценка смещенного шума,

$$n_0(x) = n(x) + B \geq 0, \quad /4/$$

$\lambda(x)$  и  $\mu$  - множители Лагранжа, а  $\rho$  - параметр, который вводят для того, чтобы получить более гладкую оценку шума  $\hat{n}_0(x)$ .

Условия

$$\begin{aligned} \sum_{\xi=1}^M \hat{f}(\xi) &= P_0, \\ \sum_{x=1}^N s(x) &= A \end{aligned} \quad /5/$$

выражают сохранение энергии и сохранение общего числа частиц, принимавших участие в формировании сигнала на выходе спектрометра.

Алгоритм решения системы уравнений /3/-/5/ приведен в /7/. Сначала составляют уравнения Эйлера, соответствующие в данном случае условию экстремума функционала /3/ по варьируемым функциям  $\hat{f}(\xi)$  и  $\hat{p}_0(\xi)$ :

$$\frac{\partial G}{\partial \hat{f}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \hat{p}} = 0, \quad /6/$$

а также уравнения, отвечающие условию экстремума по множителям Лагранжа  $\lambda(x)$  и  $\mu$ :

$$\frac{\partial G}{\partial \lambda(x)} = 0, \quad x=1, \dots, N, \quad \frac{\partial G}{\partial \mu} = 0. \quad /7/$$

Группа уравнений /6/ позволяет выразить оценки  $\hat{f}(\xi)$  и  $\hat{p}_0(\xi)$  через множители Лагранжа:

$$\hat{f}(\xi) = \exp[-1 - \mu - \sum_{x=1}^N \lambda(x) h(x, \xi)], \quad /8/$$

$$\hat{p}_0(\xi) = \exp[-1 - \lambda(\xi)/\rho]. \quad /9/$$

Подставив оценки /8/ и /9/ в группу уравнений, имеющих явный вид /7/:

$$s(x) = \sum_{\xi=1}^M h(x, \xi) \hat{f}(\xi) + \hat{p}_0(x) - B, \quad /10/$$

$$P_0 = \sum_{\xi=1}^M \hat{f}(\xi),$$

получаем систему из (N+1) нелинейных уравнений относительно (N+1) множителей Лагранжа. Решение этой системы  $\lambda(x)$  и  $\mu$  определяет искомые оценки  $\hat{f}(\xi)$  и  $\hat{p}_0(\xi)$  через /8/ и /9/.

Система нелинейных уравнений. Система нелинейных уравнений относительно множителей Лагранжа  $\lambda(x)$  и  $\mu$  разрешалась методом Ньютона-Рафсона с релаксацией /9/. Этот метод позволяет найти решение системы нелинейных уравнений вида

$$\begin{aligned} f_1(x_1, \dots, x_N) &= 0, \\ \vdots & \\ f_N(x_1, \dots, x_N) &= 0 \end{aligned} \quad /11/$$

по известным решениям  $x_{j,k}$  на  $k$ -й итерации ( $j=1, \dots, N$ ). Для этого задачу сводят к нахождению приращений  $\Delta x_{j,k}$ , которые связывают решения на  $(k+1)$ -й и  $k$ -й итерациях:

$$x_{j,k+1} = x_{j,k} + \Delta x_{j,k} \quad /12/$$

С этой целью функции  $f_i(x_1, \dots, x_N)$ , ( $i=1, \dots, N$ ) раскладывают в ряд Ньютона с точностью до членов, содержащих вторые производные. Для искомым приращений  $\Delta x_{j,k}$  получаем систему линейных уравнений

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f_1}{\partial x_N} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_N}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f_N}{\partial x_N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{1,k} \\ \vdots \\ \Delta x_{N,k} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} f_1(x_{1,k}, \dots, x_{N,k}) \\ \vdots \\ f_N(x_{1,k}, \dots, x_{N,k}) \end{bmatrix}, \quad /13/$$

Чтобы итерационный процесс сходиллся при детерминанте системы /13/, близком к нулю, в правую часть /13/ вводят мультипликативный параметр релаксации  $\tau$  ( $0 < \tau \leq 1$ ), который позволяет сохранить сходимость итерационного процесса. Так, например, при  $\tau \approx 1$  сходимость в пределах  $10^{-6}$  достигается за 8 итераций при среднем значении шума 25% и за 23 итерации при шуме в 0%.

Выбор значений множителей Лагранжа на нулевой итерации зависит от того, какое из двух условий /5/ принять в данной задаче. Если первое условие, то  $\lambda_0(x)$  следует брать равным нулю, а  $\mu_0$  должно удовлетворять условию нормировки. Если второе условие, то все множители Лагранжа на нулевой итерации будут равными нулю. Было замечено, что если значения множителей Лагранжа на нулевой итерации взять неправильно, то из-за экспоненциальной формы оценок сигнала и шума значения последних могут выйти за пределы регистров ЭВМ, и это обнаруживается по остановке процесса счета.

Описание программы. Программа обработки экспериментальных данных по методу максимума энтропии была составлена для ЭВМ БЭСМ-6 и CDC-6500 на языке ФОРТРАН. Программа позволяла получать информацию о наблюдаемом спектре, об оценках искомого спектра и шума и динамике процесса сходимости. Время обработки одного спектра, содержащего от 19 до 63 компонент, составляло от 1 до 5 минут.

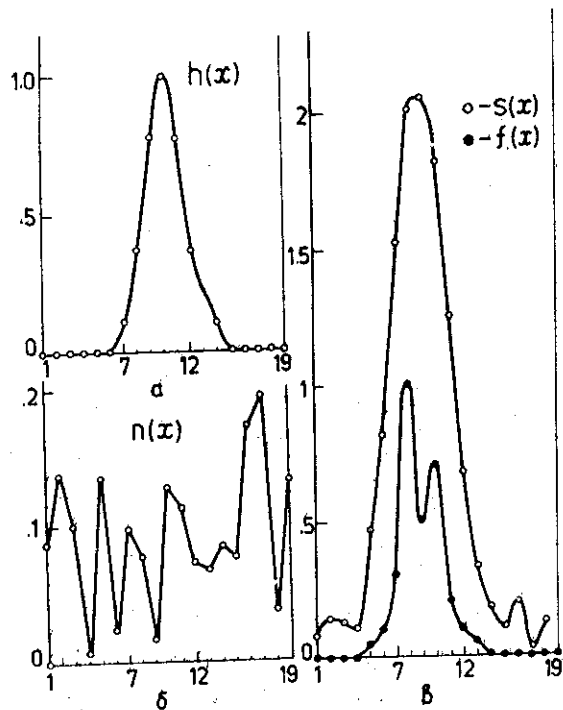


Рис.1. Сигналы, определяющие процесс формирования спектра на выходе спектрометра:  
 а/ функция размытия  $h(x)$ , б/ одна из реализаций аддитивного шума  $n(x)$ , в/ исходный спектр  $f(x)$  и спектр на выходе спектрометра  $s(x)$ .

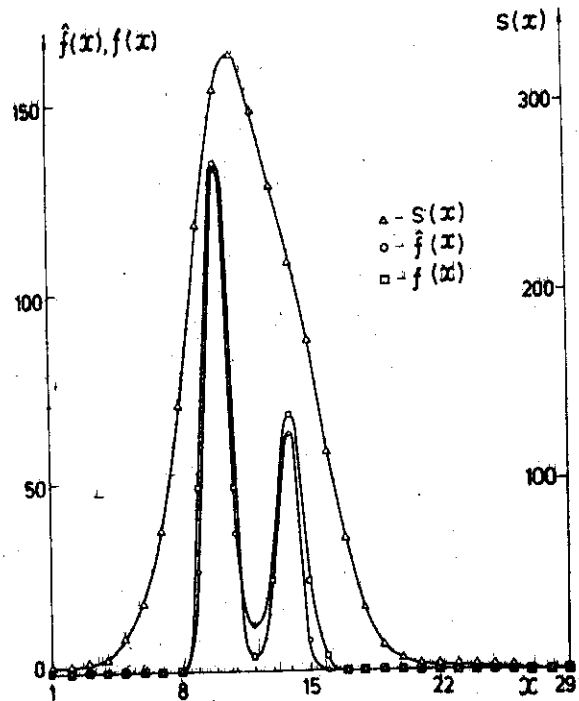


Рис.2. Пример восстановления визуально не наблюдаемого спектрального дублета методом максимума энтропии.

Рис.3. Пример восстановления визуально не наблюдаемого спектрального дублета методом сингулярного разложения.

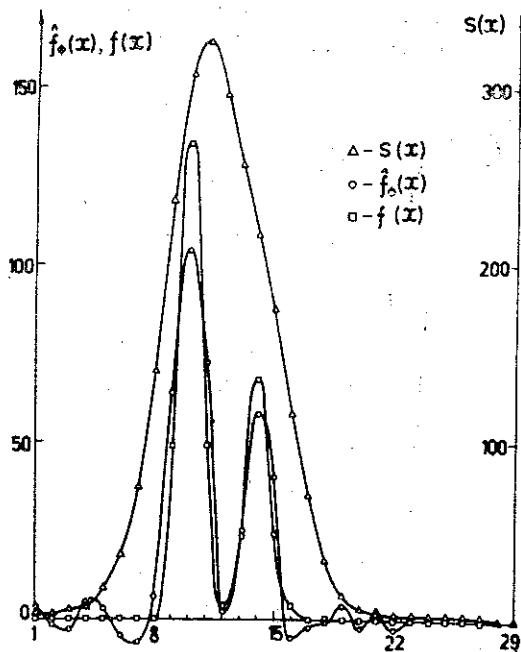
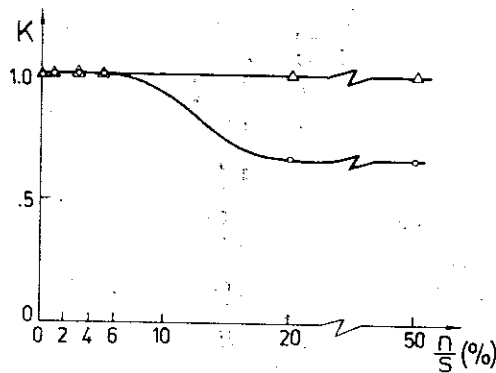


Рис.4. Зависимость контраста  $k$  от относительного шума  $n/s$ . Точки  $\circ$  и  $\Delta$  получены для функций размытия  $h(x) = \exp(-x^2/10)$  и  $h(x) = \exp(-x^2/4)$  соответственно.



В данной работе рассматривались только определенные задачи, для которых  $M = N$ .

Разделение слившихся компонент спектрального дублета. Моделирующие расчеты были выполнены с несимметричной функцией размытия  $h(x, \xi)$  при наличии аддитивного шума со средней амплитудой в 1% от максимального уровня полезного сигнала. На рис.1 приведены: пространственно-инвариантная функция размытия  $h(x)$ , одна из реализаций аддитивного шума  $n(x)$ , искомым спектр  $f(x)$  и спектр  $s(x)$ , измеренный в спектрометре. На рис.2 показаны: наблюдаемый спектр  $s(x)$ , искомым спектр  $f(x)$  и оценка спектра  $\hat{f}(x)$ , полученная методом максимума энтропии. Из сравнения с рис.3, где дана оценка спектра  $\hat{f}_\Phi(x)$ , полученная методом сингулярного разложения<sup>15/</sup>, видно, что оценка спектра по методу максимума энтропии не имеет выбросов, типичных для линейных алгоритмов восстановления, и очень близка к истинному спектру.

Разрешающая способность метода максимума энтропии представлена в виде зависимости контраста восстановленного дублета

$$\kappa = \frac{\hat{f}(\max) - \hat{f}(\min)}{\hat{f}(\max) + \hat{f}(\min)}, \quad /14/$$

где  $\hat{f}(\max)$  и  $\hat{f}(\min)$  равны соответственно оценкам спектра в максимуме и в минимуме между двумя компонентами линейчатого дублета, восстановленными методом максимума энтропии, от относительного шума  $n/s$ . На рис.4 величина  $\kappa$  дана для различных эффективных ширин функции размытия  $h(x)$ .

Было обнаружено, что так же как и в линейных методах восстановления, ошибка в измерении функции размытия спектрометра  $h(x)$  приводит к искажениям в оценке линейчатого дублета. Так, например, отклонение эффективной ширины функции размытия  $h(x)$  на 10% приводит к смещению компонент линейчатого дублета, к искаженным интенсивностям компонент и к возникновению ложных выбросов.

Апостериорное восстановление спектра. Эффективность метода максимума энтропии определяется числом итераций, необходимым для получения наилучшего совпадения оценки спектра с истинным спектром при различных уровнях аддитивного шума. Динамика итераций иллюстрируется рис.5 для случая оценки спектрального дублета, показанного на рис.1, после первой, второй, третьей и пятой итераций. Выбросы на концах интервала, вызванные особенностями выбора начальных условий, исчезают, если в качестве дополнительных условий ввести требование равенства нулю искомой оценки спектра на краях интервала.



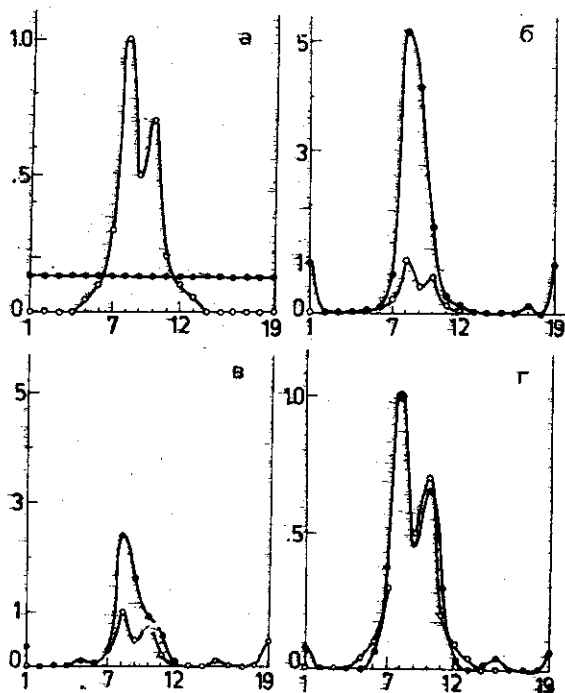


Рис.5. Динамика процесса восстановления спектра методом максимума энтропии: а - 1-я, б - 2-я, в - 3-я и г - 5-я итерация спектра  $f(x)$ , показанного на рис.1.  $\circ$  - исходный спектр,  $\bullet$  - оценка спектра, полученная методом максимума энтропии.

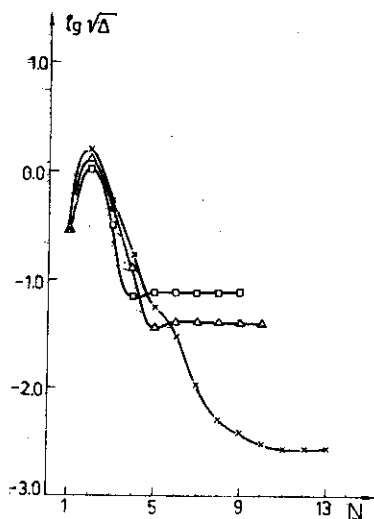


Рис.6. Зависимость среднеквадратичной невязки  $\Delta$  от номера итерации  $N$  при различных уровнях аддитивного шума:  $\times$  - 0,1%,  $\Delta$  - 5%,  $\square$  - 25%.

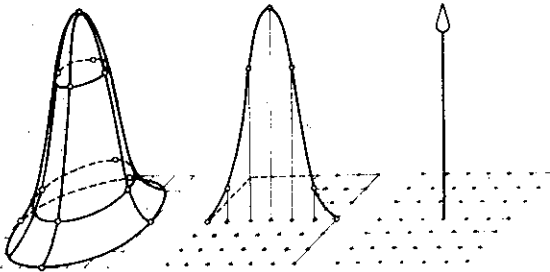


Рис.7. Процесс восстановления двумерного линейчатого сигнала. Слева - сигнал на выходе спектрометра, функция размытия которого имеет вид  $1/|x|$ , а интенсивность аддитивного шума равна 6%. В центре - сигнал после восстановления по столбцам. Справа - после восстановления по строкам.

На рис.6 приведены зависимости невязки от номера итерации  $N$  при различных уровнях аддитивного шума. Видно, что число итераций, необходимое для того, чтобы невязка выходила на плато, уменьшается по мере того, как интенсивность шума возрастает. Однако величина невязки тем больше, чем выше интенсивность шума.

При восстановлении линейчатого сигнала среднеквадратичная невязка по порядку величины равнялась относительной интенсивности аддитивного шума. Выбросы в соседних с пиком точках при  $p/s \approx 6\%$  составляли последовательно 72 дБ, 230 дБ и  $>400$  дБ. Эта особенность метода максимума энтропии демонстрирует существенное преимущество этого метода над линейными методами восстановления, которые дают заметные выбросы обоих знаков при шуме  $p/s \approx 0,1\%$ .

На рис.7 даны результаты восстановления двумерного спектра, описываемого двумерной дельта-функцией. Функция размытия, являющаяся основной характеристикой спектрометра, имеет вид

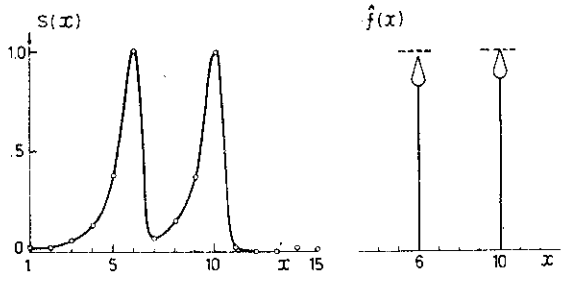


Рис.8. Пример восстановления линейчатого спектра для случая, когда функция размытия сильно несимметрична. Интенсивность аддитивного шума равна 6%. Пунктиром показана интенсивность линий в исходном спектре.

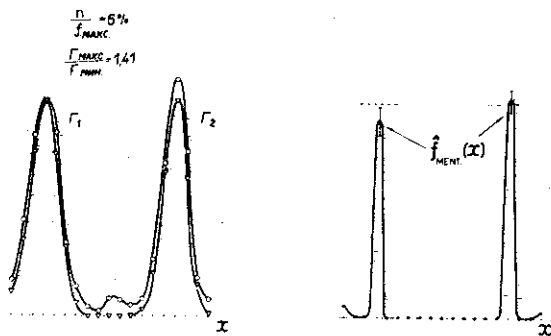


Рис. 9. Пример восстановления линейчатого спектра для случая, когда функция размытия спектрометра изменяется по спектру. Слева - сигнал на выходе спектрометра:  $\Delta$  - в отсутствие шума,  $\circ$  - при интенсивности шума в 6%. Пунктиром показаны интенсивности линий в исходном спектре.

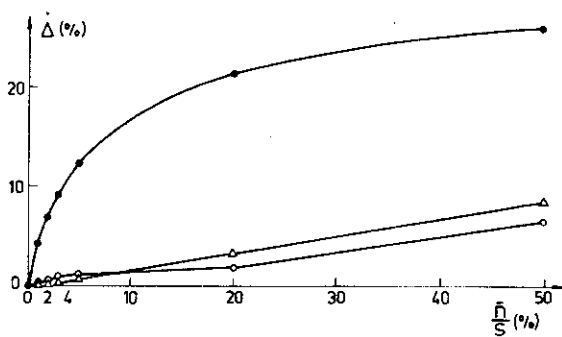


Рис. 10. Зависимость невязки  $\Delta$  от уровня аддитивного шума для функций размытия, приведенных на рис. 11.

$$h(x, y) = \exp[-(x^2 + y^2)/4], \quad /15/$$

Восстановление проводилось в два этапа: сначала вдоль оси  $x$ , а затем - вдоль оси  $y$  и с привлечением второго условия /5/. Максимальный размер двумерного массива данных был равен  $29 \times 29$ . Время счета на ЭВМ БЭСМ-6 составляло около одного часа.

Метод максимума энтропии был промоделирован для сильно несимметричных функций размытия  $h(x)$ . На рис. 8 дан пример восстановления линейчатого спектра из двух компонент. Пунктиром указаны истинные значения интенсивности компонент. Интенсивность шума составляла 6%.

В рассмотренных выше примерах функция размытия спектрометра была одинаковой для всего спектра. Между тем метод максимума энтропии позволяет вести восстановление спектра в случае, когда функция размытия спектрометра неинвариантна по спектру и исходную задачу невозможно свести к простой свертке /3/.

В этих условиях простейшие линейные алгоритмы восстановления применить невозможно. На рис. 9 дан пример восстановления спектра из двух компонент, расположенных в участках спектра, где ширины функции размытия отличаются в 1,2 раза. Восстановление по методу мак-

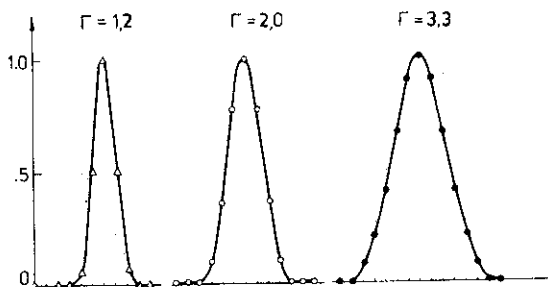


Рис.11. Функции размытия, использованные на рис.10.

функции размытия представлены на рис.11. Из рис.10 видно, что величина невязки монотонно растет с интенсивностью шумов. В отличие от линейных методов восстановления метод максимума энтропии допускает очень высокие уровни шумов.

Авторы выражают благодарность Б.Н.Хоромскому за помощь в работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач, 2-е издание. "Наука", М., 1979.
2. Шеффе Г. Дисперсионный анализ. ГИФМЛ, М., 1963.
3. Василенко Г.И. Теория восстановления сигналов. "Советское радио", М., 1979.
4. Сороко Л.М. ОИЯИ, 1-5030, Дубна, 1970.
5. Andrews H.C., Patterson C.L. The Amer.Math.Monthly, 1975, v.82, No.1, p.1-13.
6. Frieden B.R. J.Opt.Soc.Amer., 1972, v.62, p.511.
7. Фриден Б. В кн.: Обработка изображений и цифровая фильтрация, под ред. Хуанга, пер. с англ. "Мир", М., 1975, с.193-270.
8. Kikuchi R., Soffer B.H. J.Opt.Soc.Amer., 1977, v.67, No.12, p.1656-1665.
9. Лаврентьев М.А., Люстерник Л.А. Курс вариационного исчисления. ГИТТЛ, М.-Л., 1950.

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 октября 1980 года.