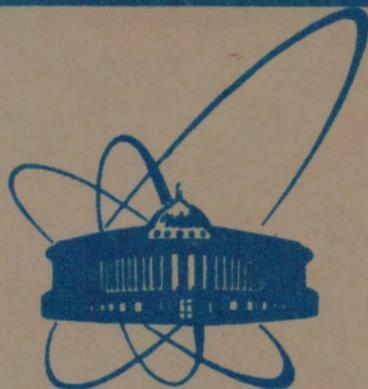


сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна



2319/82

13/v-82

P10-82-101

Б.З.Белашев, В.И.Данилов, Л.М.Сороко

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ
МЕТОДОМ МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ

1982

ВВЕДЕНИЕ

Интерпретацию данных эксперимента, включающую процесс устранения эффектов, вносимых используемым прибором, обычно ведут традиционными методами^{/1,2/}, среди которых наиболее популярным является метод наименьших квадратов для подгонки искомых параметров по критерию минимума χ^2 ^{/3/}. Ограничивающим фактором успешного применения традиционных методов обработки экспериментальных данных является требование малости шумов. В типичных условиях шум $\approx 10\%$ полностью исключает возможность правильной расшифровки экспериментальных данных, и это является принципиальным недостатком всей группы методов. Существенно более высокую устойчивость к шумам при сохранении высокого разрешения по спектру дает метод максимума энтропии^{/4,5/}. В работе^{/6/} изложены основы этого метода, а в работе^{/7/} - результаты численного моделирования для узких спектральных линий на нулевом фоне. Было показано, что для рассмотренного класса сигналов относительная точность оценок интенсивности спектральных компонент не превышает относительной точности самих исходных данных. Это свойство метода в значительной степени отличается от характеристик традиционных линейных методов, где ошибки оценки во много раз больше ошибок исходных данных.

В данной работе метод максимума энтропии был использован для восстановления сигналов, содержащих плавнomenяющиеся компоненты, в том числе при осциллирующих знакопеременных функциях размытия. Эти результаты сравнены с данными, полученными с помощью метода регуляризации.

МЕТОД МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ ДЛЯ СИГНАЛОВ ПЛАВНОЙ ФОРМЫ

Метод максимума энтропии позволяет по наблюдаемому сигналу $s(x)$, $x=1,2,\dots,M$, зарегистрированному прибором с функцией размытия $h(x,\xi)$, $\xi=1,2,\dots,N$, найти оценки $\hat{f}(\xi)$, $\hat{n}_0(x)$ истинного спектра $f(\xi)$ и смещенного шума $n_0(x)$:

$$n_0(x) = n(x) + B, \quad /1/$$

где B - верхняя граница абсолютных значений отрицательных величин шума $n(x)$. Оценки спектра и шума $\hat{f}(\xi)$, $\hat{n}_0(x)$ удовлетворяют условиям наблюдения сигнала $s(x)$, которые для аддитивного шума выражаются соотношением

$$s(x) = \sum_{\xi} h(x, \xi) \hat{f}(\xi) + \hat{n}_0(x) - B,$$

/2/

линейным ограничениям, априори накладываемым на функции $\hat{f}(\xi)$ и $\hat{n}_0(x)$, а также максимизируют энтропийный функционал $H[\hat{f}(\xi)]$, $H[\hat{n}_0(x)]$, который записывается в аддитивной форме

$$H[\hat{f}(\xi), \hat{n}_0(x)] = H[\hat{f}(\xi)] + \rho H[\hat{n}_0(x)],$$

/3/

где $H[\hat{f}(\xi)]$ - энтропия оценки спектра,

$$H[\hat{f}(\xi)] = - \sum_{\xi=1}^N \hat{f}(\xi) \ln \hat{f}(\xi),$$

/4/

а $H[\hat{n}_0(x)]$ - энтропия оценки смещенного шума,

$$H[\hat{n}_0(x)] = - \sum_{x=1}^M \hat{n}_0(x) \ln \hat{n}_0(x).$$

/5/

Свободный параметр ρ , служащий для сглаживания оценки шума и не входящий явно в выражение для оценки сигнала, имеет существенное значение для построения эффективной вычислительной процедуры получения оценки спектра. Для входного линейного сигнала $f(\xi)$, показанного пунктиром на рис.1, по выходному сигналу $s(x)$ с аддитивным шумом $n/s = 14\%$, функции размытия $h(x, \xi) = \exp(-|x-\xi|)$ получены оценки входного сигнала с параметрами

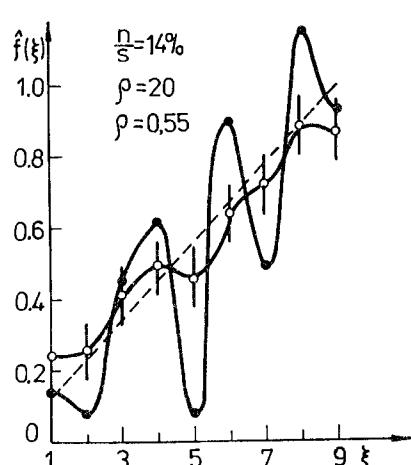


Рис. 1. Линейная функция /---/ и ее оценки по МЭНТ с параметрами $\rho=20$ (●) и $\rho=0,55$ (○).

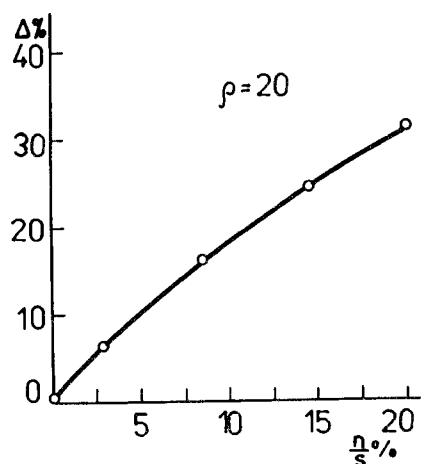
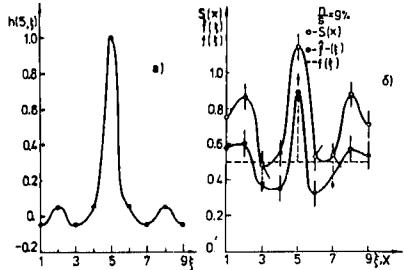
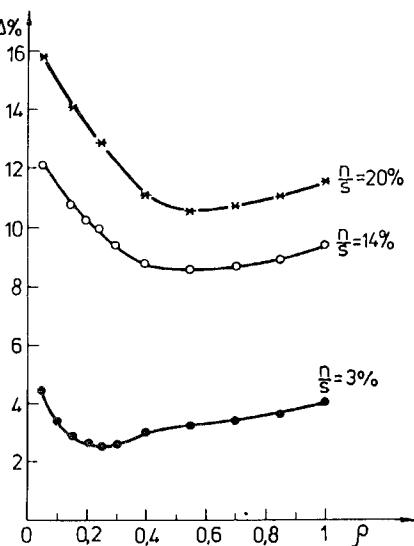


Рис. 2. Зависимость невязки Δ оценки по МЭНТ с $\rho = 20$ от относительного уровня шума.

ми $\rho = 20$ и $\rho = 0,55$, которые приведены на том же рисунке. Видно, что оценка с параметром $\rho = 20$, использованным в работе^{7/} и дающим хорошие результаты при восстановлении узких пиков на нулевом фоне, не дает восстановления линейной функции, тогда как оценка с параметром $\rho = 0,55$ отличается от линейной функции только в пределах ошибки исходных данных. На рис.2 показана зависимость невязки оценки линейной функции, полученной с параметром $\rho = 20$, от уровня входного шума n/s , а на рис.3 - зависимость невязки от параметра ρ при различных отношениях n/s . Видно, что существует оптимальное значение параметра ρ , при котором точность оценки спектра не хуже точности исходных данных. Существование оптимального значения параметра может быть объяснено структурой энтропийного функционала. При очень малом значении параметра ρ оценка спектра в значительной степени отражает уровень входного шума, а при большом ρ оценка шума содержит часть сигнала и с неизбежностью искажает восстановленный спектр. Вариации в определенных пределах при выборе оптимального значения ρ не дают возрастания дисперсии оценок шума, которая принята нами за меру точности восстановленного сигнала. Видно также, что плавные функции более чувствительны к выбору параметра ρ . А именно, область допустимых значений параметра ρ имеет значительно меньший диапазон, чем для спектров с узкими пиками, причем оптимальные значения параметра ρ также оказываются значительно меньшими. Последняя закономерность может быть связана с тем фактором, что энтропия сигнала возрастает естественным образом при переходе от скачкообразных

Рис.3. Зависимость невязки Δ оценки по МЭНТ от параметра ρ при различных относительных уровнях шума.

Рис.4. Функция размытия /а/, истинный $f(\xi)$ /---/ и наблюдаемый $s(x)$ (○) спектры, оценка по МЭНТ (●).



к плавным сигналам, а энтропия шума по отношению к энтропии сигнала уменьшается.

Метод максимума энтропии /МЭНТ/ был промоделирован для знакопеременной осциллирующей функции размытия $h(x, \xi)$, показанной на рис.4а и описывающей форму спектральной линии, соответствующей цугу синусоиды. Истинный спектр $f(\xi)$, состоящий из трех знакопеременных пиков и положительного фона, подвергаемый обработке спектра $s(x)$ с относительным уровнем аддитивного шума $n/s=9\%$, оценка спектра по МЭНТ $\hat{f}(\xi)$, полученная с условием сохранения суммы компонент спектра при оптимальном параметре $r=1,5$, показаны на рис.4б. Видно, что МЭНТ весьма эффективен также при знакопеременной осциллирующей функции размытия. Однако наличие плавного фона и выбор оптимального значения минимизирующего невязку, не позволяет получить достаточно хорошее разрешение в оценке спектра. Оценка спектра оказывается сглаженной, как и в регуляризационных методах.

СРАВНЕНИЕ С МЕТОДОМ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

Полученные результаты были сравнены с широко используемым в настоящее время методом регуляризации по Тихонову. Для моделирования были использованы истинные спектры $f(\xi)$, показанные пунктиром соответственно на рис.5а и 5б, функция размытия

$h(x, \xi) = \exp(-\frac{1}{18}|x-\xi|)$ и аддитивный шум $n/s = 8\%$. Восстановление методом регуляризации велось по программе SLAY без линейных ограничений, априори накладываемых на оценки спектра и шума. Апостериорная реконструкция спектра по МЭНТ проводилась при условии сохранения суммы компонент сигнала. Оценки спектра, полученные обоими методами, приведены на рис.5а, б. На рис.5а показана также величина ошибки спектра, вычисленная по дисперсии оценки шума в МЭНТ. Видно, что в большинстве точек оценка по МЭНТ ближе к истинному спектру, чем регуляризационная оценка. Вместе с тем регуляризационная оценка, показанная на рис.5а, точнее отражает характерную особенность истинного спектра.

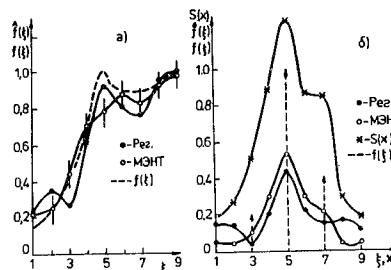


Рис.5. Сравнение с регуляризационным методом: а/ пик на линейно растущем фоне; б/ три δ-образных пика.

СРАВНЕНИЕ МЕТОДА МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ С АЛГЕБРАИЧЕСКИМ РЕКОНСТРУКТИВНЫМ МЕТОДОМ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Итерационный способ построения оценки по МЭНТ^{/7/} при решении обратных задач большой размерности требует большого времени и значительных объемов памяти ЭВМ. Это результат вычисления и обращения матрицы вторых производных минимизируемой функции в методе Ньютона. Встает вопрос о разработке быстрых и экономичных алгоритмов нахождения оценки по МЭНТ. С этой целью был исследован так называемый алгебраический итерационный метод решения обратной задачи, использующий мультипликативную коррекцию оценки решения на каждой итерации согласно итерационному алгоритму^{/8/}

$$\tilde{f}^{l+1}(\xi) = \tilde{f}^l(\xi) \cdot \frac{s(x)}{\sum_{\eta=1}^N h(x, \eta) \tilde{f}^l(\eta)}. \quad /6/$$

Связь этого метода, названного MART /Multiplicative Algebraic Reconstruction Technique/, с МЭНТ была найдена Лейтом и сформулирована им в виде теоремы^{/9/}. Содержание этой теоремы и принцип действия MART были продемонстрированы на примере решения системы линейных уравнений, которая имеет детерминант, равный нулю, и поэтому дает бесчисленное множество решений. Исходные линейные уравнения имеют вид

$$\begin{cases} f(1)+f(2) & = 3, \\ f(3) + f(4) & = 7, \\ f(1) + f(3) & = 4, \\ f(2) + f(4) & = 6. \end{cases} \quad /7/$$

Положительно определенное решение этой системы по МЭНТ было найдено методом Ньютона: $\hat{f}(1)=1,2$; $\hat{f}(2)=1,8$; $\hat{f}(3)=2,8$; $\hat{f}(4)=4,2$. Для решения системы /7/ методом MART на нулевой итерации положим $\tilde{f}^0(1)=\tilde{f}^0(2)=\tilde{f}^0(3)=\tilde{f}^0(4)=1$. Тогда на первой итерации из двух первых уравнений /7/ в соответствии с формулой /6/ получим $\tilde{f}^1(1)=\tilde{f}^1(2)=3/2$, $\tilde{f}^1(3)=\tilde{f}^1(4)=7/2$, а на второй итерации из оставшихся уравнений — $\tilde{f}^2(1)=3/2 \cdot 4/5=1,2$; $\tilde{f}^2(2)=3/2 \cdot 6/5=1,8$; $\tilde{f}^2(3)=7/2 \cdot 4/5=0,8$; $\tilde{f}^2(4)=7/2 \cdot 6/5=4,2$. Последующие итерации не меняют полученного решения. Решение достигнуто за две итерации и оказалось совпадающим с решением по МЭНТ. При этом схема вычислений проста, вычисление, обращение и запоминание матрицы вторых производных не требуются. Традиционно MART применяют в томографии, когда матрица $h(x, \xi)$, как и в рассмотренном примере, состоит, главным образом, из единиц и нулей.

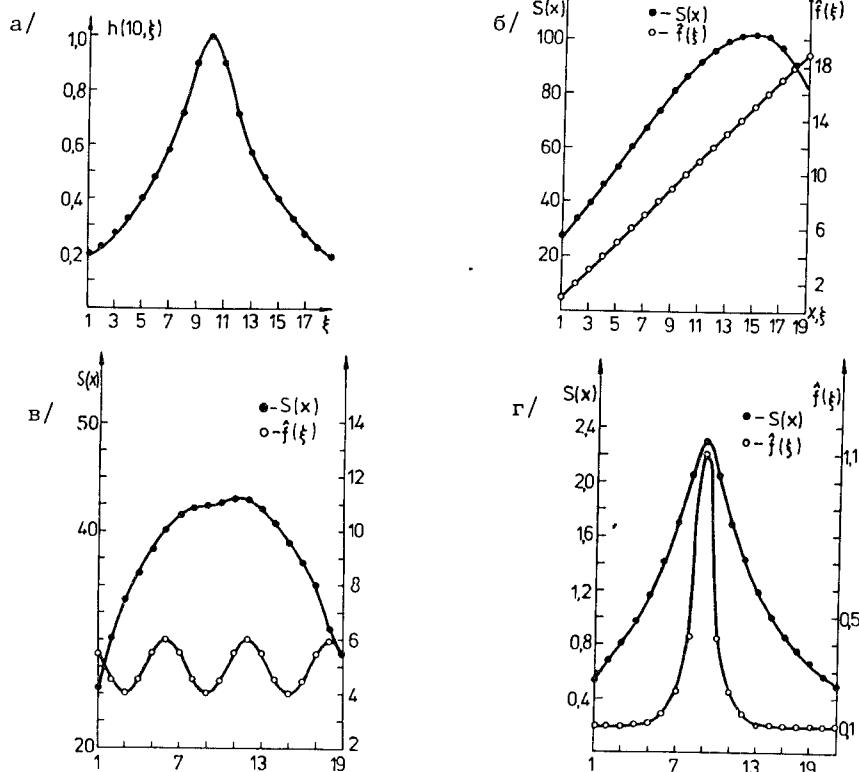


Рис.6. Функция размытия /а/, наблюдаемый спектр $s(x)$ (●) и его оценка по MART (○) для линейной функции /б/, смещенного косинуса /в/, пика на постоянной подложке /г/.

Апостериорное восстановление спектра методом MART было проведено для трех видов искомых спектров: линейно растущего с увеличением ξ , смещенного косинуса и синглетного пика на небольшой подложке, размытых функцией

$$h(x, \xi) = \begin{cases} \exp(-\frac{1}{s} |x - \xi|), & \text{если } |x - \xi| \leq 3, \\ \exp(-3/5), & \text{если } |x - \xi| > 3, \end{cases} \quad /8/$$

при отсутствии шумов. На рис.6а показана функция $h(x, \xi)$, а на рис.6б, в, г - соответственно наблюдаемые спектры $s(x)$ и оценки спектров по методу MART. Опыт моделирования показал, что итерируемые оценки сходятся к оценке по МЭНТ, если на каждой ите-

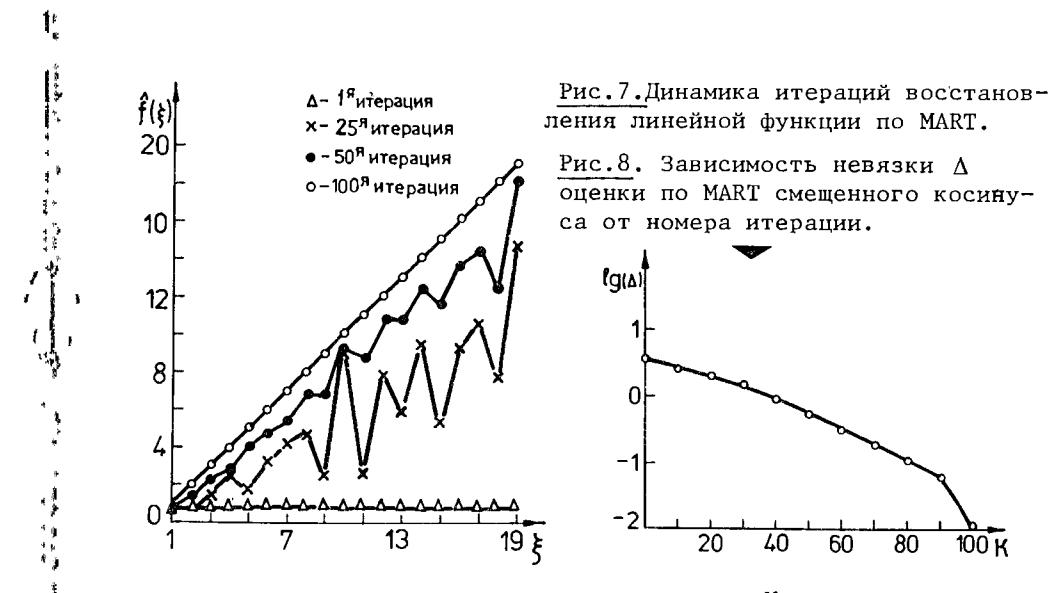


Рис.7. Динамика итераций восстановления линейной функции по MART.

Рис.8. Зависимость невязки Δ оценки по MART смещенного косинуса от номера итерации.

рации выбирать уравнение с отношением $s(x) [\sum_{\eta=1}^N h(x, \eta) \tilde{f}^i(\eta)]^{-1}$, наиболее сильно отличающимся от единицы, и изменять по формуле /6/ элемент, соответствующий максимуму функции размытия для данного x . Динамика процесса сходимости показана на примере линейной функции на рис.7 для 1-й, 25-й, 50-й, 100-й итераций, а на рис.8 приведена зависимость невязки от номера итерации для смещенного косинуса. При введении в условие задания шума метод MART дает хорошие результаты вплоть до шумов не более 10%. При более высоком шуме иногда наблюдается расходимость итерирующих оценок. Количество итераций, необходимое для получения окончательной оценки, весьма велико. Поэтому в задачах большой размерности применение MART не может дать существенного сокращения времени вычислений, однако уменьшает требуемый объем памяти ЭВМ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что метод максимума энтропии применим для восстановления сигналов в виде плавных спектров, в том числе при осциллирующих знакопеременных функциях размытия. Вывод о том, что точность оценки спектра по МЭНТ не хуже точности исходных данных /7/, является правильным, если выбрать значение параметра ρ , близкое к значению, минимизирующему дисперсию оценки шума.

Для спектров, содержащих узкие пики на плавном фоне, выбор оптимального ρ приводит к сглаживанию пиков. Для таких сиг-

налов МЭНТ дает примерно такие же результаты, как и регуляризационный метод Тихонова. Сопоставление МЭНТ и MART показало, что в отсутствие шума оценки по МЭНТ и MART совпадают, при шуме менее 10% оценка по MART близка к оценке по МЭНТ. При шуме 10% и более метод MART может дать расходящиеся итерации. Для задач малой размерности МЭНТ с использованием метода Ньютона сходится быстро, тогда как сходимость для большой размерности ограничена временем вычисления обратной матрицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Василенко Г.В. Теория восстановления сигналов. "Советское радио", М., 1979.
2. Тихонов А.Н., Арсенин В.А. Методы решения некорректных задач. "Наука", М., 1979.
3. Худсон Д. Статистика для физиков. "Мир", М., 1967.
4. Burg J.P. Ph.D.Thesis, Department of Geophysics, Stanford University, Stanford, Calif., 1975.
5. Friden B.R., Swindell W. Science, 1976, vol.191, p.1237.
6. Сороко Л.М. ЭЧАЯ, 1981, т.12, 3, с.754.
7. Белашев Б.З., Сороко Л.М. ОИЯИ, Р10-80-696, Дубна, 1980.
8. Rodney A., Brooks P.D., Di Chiro G. Phys.Med.Biol., 1976, vol.21, 5, p.689.
9. Lent A. In: 1976 SPSE Conf.Proc., SPSE, 1977, p.249.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 февраля 1982 года.

Белашев Б.З., Данилов В.И., Сороко Л.М.
Исследование спектров методом максимума энтропии

P10-82-101

Исследованы возможности метода максимума энтропии для расшифровки экспериментально наблюдаемых спектров. В линейчатых спектрах метод максимума энтропии эффективно устраняет искажения, обусловленные приборным уширением, и позволяет получить оценки с высоким разрешением и относительной точностью не хуже точности исходных данных. Метод максимума энтропии промоделирован для спектров с плавнomenяющимися компонентами, а также для осциллирующих знакопеременных функций размытия. Показано, что эффективность метода высока при правильном выборе его свободного параметра ρ , однако при наличии плавных компонент резкие скачкообразные изменения спектров оказываются сглаженными. Проведено сравнение с регуляризационным методом Тихонова. Оказалось, что регуляризационный метод и метод максимума энтропии для спектров этого типа дают примерно одинаковые результаты. Изучена также связь метода максимума энтропии с алгебраическим методом решения обратной задачи MART.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Belashev B.Z., Danilov V.I., Soroko L.M.
Spectra Studies by the Maximum Entropy Method

P10-82-101

The scopes of maximum entropy approach are studied by deconvolving experimentally observed spectra. The maximum entropy approach removes with high efficiency the distortions in spectra with narrow peaks and can give the estimation of the spectrum with high resolution and with relative errors no more than those in the initial data. The maximum entropy approach has been simulated on spectra of slowly varying components and also for sign alternating point spread functions. It is shown that efficiency of this approach at properly elected free parameter ρ was high, though the jumps in spectra on the background of slowly varying components were smoothed out. The comparison of this approach with that of Tichonov's regularization method is made. It has been found that the regularization method and the maximum entropy approach give approximately the same results. The connection between the maximum entropy approach and the MART algebraic method of reconstruction are studied.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.

налов МЭНТ дает примерно такие же результаты, как и регуляризационный метод Тихонова. Сопоставление МЭНТ и MART показало, что в отсутствие шума оценки по МЭНТ и MART совпадают, при шуме менее 10% оценка по MART близка к оценке по МЭНТ. При шуме 10% и более метод MART может дать расходящиеся итерации. Для задач малой размерности МЭНТ с использованием метода Ньютона сходится быстро, тогда как сходимость для большой размерности ограничена временем вычисления обратной матрицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Василенко Г.В. Теория восстановления сигналов. "Советское радио", М., 1979.
2. Тихонов А.Н., Арсенин В.А. Методы решения некорректных задач. "Наука", М., 1979.
3. Худсон Д. Статистика для физиков. "Мир", М., 1967.
4. Burg J.P. Ph.D.Thesis, Department of Geophysics, Stanford University, Stanford, Calif., 1975.
5. Friden B.R., Swindell W. Science, 1976, vol.191, p.1237.
6. Сороко Л.М. ЭЧАЯ, 1981, т.12, 3, с.754.
7. Белашев Б.З., Сороко Л.М. ОИЯИ, Р10-80-696, Дубна, 1980.
8. Rodney A., Brooks P.D., Di Chiro G. Phys.Med.Biol., 1976, vol.21, 5, p.689.
9. Lent A. In: 1976 SPSE Conf.Proc., SPSE, 1977, p.249.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 февраля 1982 года.

Белашев Б.З., Данилов В.И., Сороко Л.М.
Исследование спектров методом максимума энтропии

P10-82-101

Исследованы возможности метода максимума энтропии для расшифровки экспериментально наблюдаемых спектров. В линейчатых спектрах метод максимума энтропии эффективно устраняет искажения, обусловленные приборным уширением, и позволяет получить оценки с высоким разрешением и относительной точностью не хуже точности исходных данных. Метод максимума энтропии промоделирован для спектров с плавнomenяющимися компонентами, а также для осциллирующих знакопеременных функций размытия. Показано, что эффективность метода высока при правильном выборе его свободного параметра ρ , однако при наличии плавных компонент резкие скачкообразные изменения спектров оказываются сглаженными. Приведено сравнение с регуляризационным методом Тихонова. Оказалось, что регуляризационный метод и метод максимума энтропии для спектров этого типа дают примерно одинаковые результаты. Изучена также связь метода максимума энтропии с алгебраическим методом решения обратной задачи MART.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Belashev B.Z., Danilov V.I., Soroko L.M.
Spectra Studies by the Maximum Entropy Method

P10-82-101

The scopes of maximum entropy approach are studied by deconvolving experimentally observed spectra. The maximum entropy approach removes with high efficiency the distortions in spectra with narrow peaks and can give the estimation of the spectrum with high resolution and with relative errors no more than those in the initial data. The maximum entropy approach has been simulated on spectra of slowly varying components and also for sign alternating point spread functions. It is shown that efficiency of this approach at properly elected free parameter ρ was high, though the jumps in spectra on the background of slowly varying components were smoothed out. The comparison of this approach with that of Tichonov's regularization method is made. It has been found that the regularization method and the maximum entropy approach give approximately the same results. The connection between the maximum entropy approach and the MART algebraic method of reconstruction are studied.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.