



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P10-86-100

Б.З.Белашев*, Л.М.Сороко

**РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ
МЕТОДОМ МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ
И ПРОБЛЕМА УСТОЙЧИВОСТИ ОЦЕНОК**

* Институт геологии Карельского
филиала АН СССР, Петрозаводск

1986

ВВЕДЕНИЕ

При решении обратных задач методом максимума энтропии /ММЭ/ мы встречаемся с нелинейным ограничением на оценки искомого решения и шума. Энтропия оценки решения обратной задачи и шума должна принимать экстремальные значения ^{1,2/}. Полученная таким образом оценка решения обратной задачи имеет высокое разрешение и стабильна к шуму. Это - общепризнанное преимущество ММЭ по сравнению с линейными методами решения обратных задач ^{3/}, благодаря которому сфера применения ММЭ постоянно расширяется ^{4,5/}.

Причина устойчивости оценок, получаемых при помощи ММЭ, в настоящее время до конца не выяснена. Можно предположить, что стабилизирующий оператор неявно содержится в ММЭ и что состояние максимальной энтропии достигается благодаря некоторому стабилизирующему взаимодействию входных и выходных данных обратной задачи. Причины устойчивости оценки решения обратной задачи в ММЭ выяснить трудно потому, что ММЭ - нелинейный метод, в котором оценку решения обратной задачи находят при помощи двухступенчатого итерационного алгоритма. Сначала вычисляют множители Лагранжа, а затем по ним строят оценку решения обратной задачи и оценку шума. В результате связь между оценками решения обратной задачи при помощи метода ММЭ и исходными данными затушевывается.

В данной работе алгоритм в ММЭ перефразирован так, чтобы сделать более ясной связь между оценками решения обратной задачи при помощи ММЭ и исходными данными задачи и чтобы облегчить выявление факторов, которые дают устойчивость оценок в ММЭ. Проанализирована связь между ММЭ и методом наименьших квадратов /МНК/. Показано, что условие максимума энтропии в задаче аппроксимации экспериментальных данных функцией известного вида при небольшом числе искомых параметров повышает устойчивость аппроксимации, дает нормальное распределение для плотности вероятности, уменьшает разброс искомых параметров и естественным образом задает границы полосы погрешностей. Получена новая форма записи традиционного алгоритма поиска оценки решения при помощи ММЭ для пуассоновского и белого аддитивного шумов, которая позволяет установить связь между оценкой решения обратной задачи и исходными данными измерений. Проанализированы причины возникновения устойчивости к шумам в ММЭ. Найден стабилизирующий оператор, который дает указанную устойчивость и одновременно задает остаточное размытие в оценке искомого решения об-

ратной задачи. Результаты работы подтверждают выводы, полученные ранее^{/6-8/} путем моделирования на ЭВМ.

МЕТОД МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ И МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Методом наименьших квадратов называют алгоритм аппроксимации данных y_r , $r = 1, 2, \dots, N$, имеющих известную дисперсию σ_r^2 , заданной функцией $\hat{y}_r(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p)$, зависящей от небольшого числа параметров α_q ($p < N$). МНК относится к регрессионному анализу и позволяет рассматривать обратную задачу как переопределенную с небольшим числом свободных параметров. В основе МНК лежит условие распределения случайной величины y_r по нормальному закону:

$$p(y_r) = [2\pi\sigma_r^2]^{-1/2} \exp[-(y_r - \hat{y}_r)^2 / 2\sigma_r^2], \quad /1/$$

где $p(y_r)$ - плотность распределения случайности величины y_r , и требование достижения максимума функции правдоподобия L выборки y_r .

$$L = \ln \prod_{r=1}^N p(y_r) = -\frac{1}{2} \sum_{r=1}^N (y_r - \hat{y}_r)^2 / 2\sigma_r^2 + \text{п.ч.} \Rightarrow \max. \quad /2/$$

Условие максимума функции правдоподобия L эквивалентно условию минимума взвешенной суммы квадратов:

$$Q = \sum_{r=1}^N (y_r - \hat{y}_r)^2 / \sigma_r^2 \Rightarrow \min. \quad /3/$$

Поэтому метод нахождения параметров α_r из системы уравнений

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha_q} = 0, \quad q = 1, 2, \dots, p \quad /4/$$

называют МНК.

Требование минимума для величины Q приводит к устойчивости оцениваемых параметров, так как оно подавляет возможность появления больших значений парциальных квадратов $(y_r - \hat{y}_r)^2$ в выражении /3/. Было замечено, что ошибки оценок искоемых параметров α_r уменьшаются, если в весовые множители σ_r^{-2} в /3/ ввести дополнительные множители, которые имеют нормальное распределение^{/9/}. Чтобы выявить, являются ли выбранные функции параметров $\hat{y}_r = f(\alpha_1, \dots, \alpha_p)$ и число этих параметров правильными, используют критерий χ^2 , где

$$\chi^2 = \frac{Q_{\min}}{N-p}. \quad /5/$$

Если χ^2 близко или меньше единицы, то выбранную аппроксимацию считают удовлетворительной. Это означает, что аппроксимирующая функция \hat{y}_r попадает в полосу погрешностей измерений, задаваемых среднеквадратичным разбросом наблюдений α_r . Критерий χ^2 не вытекает с логической последовательностью из МНК, его ввели априори.

Покажем, что между МНК и ММЭ существует связь, причем более тесная, чем это может показаться на первый взгляд. Известно, что оценка распределения вероятности $p(y_r)$, удовлетворяющая условию максимума энтропии и условию постоянства первых двух моментов величин \hat{y}_r и σ_r^2 , подчиняется нормальному закону распределения^{/10/}. Тогда условие максимума энтропии

$$S = - \sum_{r=1}^N p(y_r) \ln p(y_r) \Rightarrow \max, \quad /6/$$

из которой убраны постоянные слагаемые, эквивалентно условию минимума величины

$$Q_1 = \sum_{r=1}^N \sigma_r^{-3/2} (y_r - \hat{y}_r)^2 \exp[-(y_r - \hat{y}_r)^2 / 2\sigma_r^2] \Rightarrow \max. \quad /7/$$

Искомые параметры α_q , $q = 1, 2, \dots, p$, функции \hat{y}_r находят из системы уравнений

$$\frac{\partial Q_1}{\partial \alpha_q} = 0, \quad q = 1, 2, \dots, p. \quad /8/$$

Из соотношения /7/ видно, что функция Q_1 , так же, как и функция Q в /3/, содержит парциальные квадраты, но, в отличие от соотношения /3/, весовые множители в /7/ имеют нормальное распределение. Это приводит к тому, что вклад больших значений парциальных квадратов в выражение /7/ подавлен и, как результат, повышена устойчивость оценки параметров и уменьшены ошибки оценок. Таким образом, условие максимума энтропии приводит непосредственно к условию в виде суммы парциальных квадратов с множителями при парциальных квадратах, имеющими нормальное распределение. Второе отличие между выражениями /3/ и /7/ - в том, что Q обращается в минимум, а Q_1 - в максимум. Требование максимума для величины Q_1 означает, что вклад больших и малых значений парциальных квадратов в Q_1 незначителен и основная часть Q_1 состоит из парциальных квадратов, которые дают максимум функции

$$f(\hat{y}_r) = (\sigma_r^{-3/2}) (y_r - \hat{y}_r)^2 \exp[-(y_r - \hat{y}_r)^2 / 2\sigma_r^2]. \quad /9/$$

Иначе говоря, парциальные квадраты порядка двух дисперсий $(y_r - \hat{y}_r)^2 \approx 2\sigma_r^2$. Таким образом, благодаря условию максимума

энтропии происходит естественное выделение полосы погрешностей шириной порядка трех среднеквадратичных отклонений данных измерений $2\sqrt{2}\sigma_f$ для аппроксимирующей функции. При этом критерий согласия χ^2 вводится здесь не априори, как в МНК, а непосредственно вытекает из условия максимума энтропии оценки решения обратной задачи. Условие максимума энтропии плотности вероятности $p(y)$ применительно к задаче аппроксимации данных измерений заданной функцией, зависящей от параметров, эффективно повышает устойчивость задачи аппроксимации, приводит к нормальному распределению плотности вероятности, уменьшает погрешности в оценке искомых параметров и, наконец, заметно сужает полосу погрешностей.

НОВАЯ ФОРМА АЛГОРИТМА ММЭ ДЛЯ ПУАССОНОВСКОГО ШУМА

Запишем исходную обратную задачу

$$s(x) = \sum_{\xi=1}^N h(x, \xi) f(\xi) + n(x), \quad x = 1, 2, \dots, M; \quad \xi = 1, 2, \dots, N, \quad /10/$$

в векторной форме:

$$\vec{s} = H\vec{f} + \vec{n}, \quad /11/$$

где $H = \|h(x, \xi)\|$ - линейный оператор, $\vec{f} = \|f(\xi)\|$ - искомый вектор оценки решения обратной задачи /10/ при помощи ММЭ, $\vec{n} = \|n(x)\|$ - вектор статистических флуктуаций, подчиняющихся распределению Пуассона.

Выражения для оценки векторов \vec{f} и \vec{n} в ММЭ имеют вид /3/

$$\left. \begin{aligned} \hat{\vec{f}} &= \exp[-1 - H_T \vec{\lambda}], \\ \hat{\vec{n}} &= \exp[-1 - \vec{\lambda} / \rho], \end{aligned} \right\} \quad /12/$$

где $\vec{\lambda}$ - вектор множителей Лагранжа, ρ - параметр, а H_T - транспонированный оператор H .

Для пуассоновского шума оценка данных измерений \hat{s} в ММЭ имеет вид

$$\hat{s}(x) = \exp[-1 - \lambda(x) / \rho] \times \sum_{\xi=1}^N h(x, \xi) \times \exp[-1 - \sum_{m=1}^M h_f(\xi, m) \lambda(m)]. \quad /13/$$

Если ввести дополнительную матрицу D размером $M \times M$ с элементами $\exp[-1 - \lambda(x) / \rho]$, то соотношение /13/ можно записать в векторном виде:

$$\hat{\vec{s}} = D H \vec{f}. \quad /14/$$

В итерационном алгоритме традиционного ММЭ вектор приращения $\Delta \vec{a}_k$ и новый вектор $\vec{a}_{k+1} = \vec{a}_k + \Delta \vec{a}_k$ на последующей итерации находят из соотношений /12/ и /14/, используя найденный на предыдущей итерации вектор \vec{a}_k . Для определения вектора приращения $\Delta \vec{a}_k$ используют метод Ньютона: производят линеаризацию относительно $\Delta \vec{a}_k$ и ищут решение системы линейных уравнений:

$$D_k (H F_k + I / \rho) \Delta \vec{a}_k = D_k \vec{H} \vec{f}_k + \vec{s}, \quad /15/$$

где

$$F_k = \left\| - \frac{\partial \vec{f}_k(\xi)}{\partial \lambda_k(1)} \right\|. \quad /16/$$

а I - единичная диагональная матрица. С учетом соотношения /12/ представим матрицу F_k в виде произведения матрицы оператора H_T и диагональной матрицы G_k :

$$F_k = H_T \times G_k, \quad /17/$$

где

$$G_k = \hat{f}_k(\xi) = \exp[-1 - \sum_{m=1}^M h_T(\xi, m) \lambda_k(m)]. \quad /18/$$

Тогда с учетом /15/

$$\Delta \vec{a}_k = (H H_T + I G_k / \rho) (H \times \vec{\delta} - G_k^{-1} D_k^{-1} \vec{s}). \quad /19/$$

Оценка решения обратной задачи в ММЭ на $(k+1)$ -й итерации равна

$$\begin{aligned} \hat{\vec{f}}_{k+1} &= \hat{\vec{f}}_k \exp(-H_T \Delta \vec{a}_k) = \\ &= \hat{\vec{f}}_k \exp[(H H_T + I G_k^{-1} / \rho)^{-1} H_T (G_k^{-1} D_k^{-1} \vec{s} - H \times \vec{\delta})] = \\ &= \hat{\vec{f}}_k \exp\left(\frac{\Delta \rho \vec{f}_k}{f_k}\right), \end{aligned} \quad /20/$$

где $(D_k^{-1} \vec{s} - H G_k) \vec{\delta}$ - вектор флуктуации оценки данных измерений на k -й итерации, $\Delta \rho \vec{f}_k$ - регуляризационная оценка флуктуаций решения обратной задачи на k -й итерации, $\vec{\delta}$ -вектор является дискретным аналогом δ -функции.

Соотношение /20/ представляет собой новую форму итерационного алгоритма ММЭ, выражающую оценку решения обратной задачи на $(k+1)$ -й итерации через соответствующую оценку на k -й итерации и через величину флуктуаций данных измерений на k -й ите-

рации. В выражение /20/ входят явно исходные данные измерений \vec{s} и числовой параметр ρ . Соотношение /20/ позволяет проследить связь между оценкой решения, полученной при помощи ММЭ, и исходными данными обратной задачи без помощи множителей Лагранжа. Последние связаны с выражениями /12/, /20/ соотношением

$$\lambda_{k+1} = (H_T H)^{-1} H \ln f_k + G_k^{-1} (H_T + I G_k / \rho)^{-1} (D_k^{-1} \vec{s} - H f) . \quad /21/$$

НОВАЯ ФОРМА АЛГОРИТМА ММЭ ДЛЯ БЕЛОГО АДДИТИВНОГО ШУМА

Исходная обратная задача для белого аддитивного шума имеет вид

$$\vec{s} = H f + \vec{n}_0 - \vec{B} , \quad /22/$$

где H - линейный оператор, f - искомый вектор оценки решения обратной задачи при помощи ММЭ, \vec{s} - вектор результатов измерений, $\vec{n}_0 = \vec{n} + \vec{B}$ - вектор смещенного белого шума, \vec{n} - вектор несмещенного белого шума, а \vec{B} - нижняя граница компонент вектора несмещенного белого шума, причем все компоненты вектора \vec{B} равны.

В этом случае оценки искомого решения задачи f_k и смещенного шума \vec{n}_0 , полученные при помощи ММЭ, задаются также соотношениями /12/. При этом оценка результатов измерений равна

$$\hat{\vec{s}} = H \hat{f} + \hat{\vec{n}}_0 - \vec{B} . \quad /23/$$

Для нахождения приращений множителей Лагранжа $\Delta \lambda_k$ систему нелинейных уравнений /23/ линеаризуют относительно $\Delta \lambda_k$:

$$(H F_k + I / \rho) \Delta \lambda_k = H \hat{f}_k + \hat{\vec{n}}_{0k} - (\vec{s} + \vec{B}) , \quad /24/$$

где

$$F_k = \left\| - \frac{\partial \hat{f}_k(\xi)}{\partial \lambda_k(1)} \right\| = H_T G_k , \quad /25/$$

I - единичная диагональная матрица, а G_k - диагональная матрица с элементами на диагонали:

$$G_k = \hat{f}_k = \exp[-1 - H_T \hat{\lambda}] . \quad /26/$$

Сначала из /24/ с учетом /12/ находим вектор приращений множителей Лагранжа, а затем получаем оценку искомого решения обратной задачи и смещенного белого аддитивного шума:

$$f_{k+1} = f_k \exp(-H \Delta \lambda_k) = f_k \exp[G_k^{-1} (H_T + I G_k / \rho)^{-1} \times H_T (\vec{s} + \vec{B} - H f_k - \hat{\vec{n}}_{0k})] . \quad /27/$$

При этом выражение для множителей Лагранжа имеет вид

$$\lambda_{k+1} = (H_T H)^{-1} H \ln f_k + f_k^{-1} (H_T + I G_k / \rho)^{-1} \times (\vec{s} + \vec{B} - H f_k - \hat{\vec{n}}_{0k}) . \quad /28/$$

Приведенная выше новая форма записи алгоритма ММЭ не меняет, естественно, сущности этого алгоритма, однако она имеет важные преимущества. Одно из них состоит в том, что оценки решения обратной задачи и множителей Лагранжа выражены аналитически непосредственно через исходные результаты измерений. Поэтому такая форма записи алгоритма ММЭ удобна при исследовании проблемы устойчивости оценок решения обратной задачи при помощи ММЭ, а также при сравнении ММЭ с другими методами решения обратных задач.

УСТОЙЧИВОСТЬ ОЦЕНОК РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ В ММЭ

Исследование устойчивости оценок решения обратной задачи в ММЭ проведено совместно для пуассоновского и белого аддитивного шума. В качестве единого соотношения, соответствующего выражениям /21/ и /27/, рассмотрим равенство

$$f_{k+1}(\xi) = f_k(\xi) \exp\left[\frac{\Delta f_k(\xi)}{f_k(\xi)}\right] . \quad /29/$$

Сходимость процесса, задаваемого /29/, достигается благодаря тому, что в экспоненте /29/ находятся значения ошибок оценки решения обратной задачи в ММЭ, которые определяются разностью между вектором $H f_k$ и отфильтрованной от шума оценки исходных данных. Устойчивость регулирующего воздействия оценки указанной выше разности на k -й итерации обусловлена тем, что изменение оценки решения обратной задачи в ММЭ на $(k+1)$ -й итерации происходит в направлении уменьшения абсолютной величины оценки ошибки Δf_k .

Скорость изменения искомой оценки решения обратной задачи от итерации к итерации вначале велика. После нескольких первых итераций оценка имеет характерный вид оценки решения обратной задачи в ММЭ. По мере уменьшения указанной выше разности, которую можно назвать "оценкой ошибки решения обратной задачи", скорость изменения оценок решения уменьшается с увеличением номера итерации и становится очень малой при больших номерах. При этом изменения сосредоточены в области малых значений искомой функции \vec{f} , а большие значения функции \vec{f} практически не меняются.

Важной особенностью соотношения /29/ является то, что здесь нет отрицательных значений функции \vec{f} . Благодаря этому итерационный процесс /29/ быстро сходится после нескольких итераций. Соотношение /29/ позволяет проследить связь между ММЭ и линейными методами решения обратных задач с регуляризацией. В ММЭ также имеется регуляризирующий оператор, но он отличается от аналогичного оператора в линейных методах решения обратных задач, а именно: оператор

$$(\mathbf{H}_T + \mathbf{I}G_k^{-1}/\rho)^{-1} \mathbf{H}_T, \quad /30/$$

входящий в показатель экспоненты выражения /29/, представляет собой регуляризирующий оператор, который минимизирует как отклонение вектора $\mathbf{H}_T \hat{\vec{f}}_k$ от оценки результатов измерений с отфильтрованным шумом в том же смысле, как это имеет место в МНК, так и сумму обратных величин оценки решения обратной задачи. Параметром регуляризации является величина $1/\rho$.

Особенность стабилизирующего оператора /30/ состоит в том, что он хорошо выделяет интенсивные пики в оценке решения обратной задачи, с одной стороны, а с другой - препятствует стремлению к нулевым значениям оценки решения обратной задачи. Именно поэтому в моделирующих экспериментах по применению ММЭ вместо нулевых значений компонент искомого вектора получались ненулевые значения соответствующих компонент оценки искомого сигнала.

Этот факт можно интерпретировать по-другому. Напомним, что введение стабилизирующего оператора в условие обратной задачи приводит к остаточной функции размытия^{/11/}. Так как стабилизирующий оператор в методах регуляризации имеет вид суммы обратных компонент, то остаточная функция размытия в оценке решения обратной задачи зависит от величины сигналов. Поэтому для интенсивных пиков остаточное размытие невелико, а для слабых пиков оно играет существенную роль. Это приводит к главному ограничению ММЭ: сильное размытие слабых пиков препятствует их визуальному выделению. Зависимость остаточного размытия в ММЭ наиболее четко проявилась в моделирующих экспериментах по восстановлению сигналов при различной статистике результатов измерений^{/8/}.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты данной работы позволяют по-новому сформулировать особенности решения обратных задач при помощи ММЭ и осветить различные стороны этого мощного метода. Прежде всего было показано, что условие максимума энтропии, накладываемое на оценки искомого решения и шума в задачах аппроксимации экспериментальных данных, содержащих гауссовский шум, заданной функцией с небольшим числом искомых параметров уменьшает ошибки в оценке искомых параметров и приводит к χ^2 -критерию, близкому к единице. Новая форма записи традиционного алгоритма ММЭ позволяет проследить связь между входными и выходными данными обратной задачи с пуассоновским и белым гауссовским шумами и понять причины, которые приводят к устойчивости оценки искомого решения обратной задачи в ММЭ. Показано, что стабилизирующий оператор равен сумме обратных величин компонент вектора оценки искомого решения обратной задачи. Такой вид стабилизирующего оператора подчеркивает интенсивные пики в искомом решении, но при этом размывает слабые пики и шумовые выбросы. Так как энтропия представляет собой меру потери информации, то это свойство является естественным следствием. Оценки искомого решения в ММЭ содержат в себе минимальный объем информации, который еще согласуется с результатами измерений. Оценка решения обратной задачи в ММЭ содержит минимальное число деталей конфигурационной структуры и благодаря этому имеет минимальное число паразитных деталей. В этом состоит сущность и одновременно причина высокой устойчивости оценки искомого решения обратной задачи, полученного при помощи ММЭ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Burg J.P. Ph.D.Thesis. Department of Geophysics, Stanford University, Stanford, Calif., 1975.
2. Frieden B.R., Swindell W. Science, 1976, vol.191, p.1237.
3. Сороко Л.М. ЭЧАЯ, 1981, т.12, вып.3, с.754.
4. Frieden B.R. Appl.Optics, 1985, vol.24, p.3993.
5. Sibisi S. et al. Nature, 1984, vol.311, p.446.
6. Белашев Б.З., Сороко Л.М. ОИЯИ, P10-80-696, Дубна, 1980.
7. Белашев Б.З. и др. ОИЯИ, P10-82-101, Дубна, 1982.
8. Белашев Б.З., Сороко Л.М. ОИЯИ, P10-85-884, Дубна, 1985.
9. Aramu F. et al. Nucl.Instr. and Meth., 1981, vol.186, No.3, p.553.
10. Фриден Б. Компьютеры в оптических исследованиях. "Мир", М., 1984.
11. Жигунов В.П. ИФВЭ, ОИФ-81-5, Серпухов, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 февраля 1986 года.

Белашев Б.З., Сороко Л.М.

P10-86-100

Решение обратной задачи методом максимума энтропии
и проблема устойчивости оценок

Рассмотрена связь между методом максимума энтропии и методом наименьших квадратов. Показано, что условие максимума энтропии в задаче аппроксимации экспериментальных данных функцией известного вида при небольшом числе параметров повышает устойчивость аппроксимации, дает нормальное распределение для плотности вероятности, уменьшает разброс искомых параметров и естественным образом задает границу полосы погрешностей. Получена новая форма записи традиционного алгоритма поиска оценки решения при помощи метода максимума энтропии для пуассоновского и белого аддитивного шумов, которая позволяет установить связь между оценкой решения обратной задачи и исходными данными измерений. Проанализированы причины возникновения устойчивости к шуму в методе максимума энтропии. Найден стабилизирующий оператор, который приводит к указанной устойчивости и одновременно определяет остаточное размытие в оценке искомого решения обратной задачи.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Belashev B.Z., Soroko L.M.

P10-86-100

The Solution of the Inverse Problem by the Method of Maximum Entropy
and the Stability of the Estimations

The interrelation between the method of least squares and the method of maximum entropy (MENT) is considered. It is shown that the condition of the maximum entropy in the approximation of the experimental data with function of the known kind and of small number of parameters increases the stability of the approximation, gives the normal distribution for the probability density, decreases the spreading of the parameters to be searched and specifies naturally the bounds of errors zone. The new form of the MENT algorithm intended to find the estimations in the Poisson-like and gaussian white noises is presented. With this new form we can find the interrelation between the estimation of the inverse problem and the experimental data. The sources of the immunity against the noise in the MENT have been analyzed. The stabilization operator which gives this immunity and determines the residual spreading of the MENT estimations has been found.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986