



УДК 519.6

**А. Ф. Верлань \***, **В. С. Сизиков \*\***, доктора техн. наук,  
**Л. В. Мосенцова \***, аспирантка

\*Ин-т проблем моделирования в энергетике им. Г. Е. Пухова НАН Украины  
(Украина, 03164, Киев, ул. Генерала Наумова, 15,  
тел. (044) 4243541, E-mail: a.f.verlan@gmail.com),

\*\* Санкт-Петербургский государственный  
университет информационных технологий, механики и оптики  
(Россия, 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр-т, д.49,  
тел. (812)233-59-52, E-mail: sizikov2000@mail.ru)

### **Метод вычислительных экспериментов для решения интегральных уравнений в обратной задаче спектроскопии \***

*(Статью представил д-р техн. наук С. Д. Винничук)*

Рассмотрен метод модельных примеров для выбора параметра регуляризации. На основе способа моделирования построен вычислительный алгоритм решения интегральных уравнений Фредгольма I рода и разработана его программная реализация в среде MatLab. Эффективность предложенного подхода проверена на примере решения обратной задачи спектроскопии.

Розглянуто метод модельних прикладів для вибору параметра регуляризації. На основі способу моделювання побудовано обчислювальний алгоритм розв'язку інтегральних рівнянь Фредгольма I роду та розроблено його програмну реалізацію в середовищі MatLab. Ефективність запропонованого підходу перевірено на прикладі розв'язання оберненої задачі спектроскопії.

*Ключевые слова: метод модельных примеров, интегральные уравнения Фредгольма I рода, метод Тихонова, параметр регуляризации.*

Различные прикладные задачи (восстановления изображений и сигналов, спектроскопии, томографии и др.) [1—5] часто описываются интегральными уравнениями Фредгольма I рода. Сложности, возникающие при решении таких уравнений, связаны с некорректностью задачи их решения. Разработан ряд устойчивых методов решения этой задачи [1—8]: метод регуляризации Тихонова, метод фильтрации Винера, методы итеративной регуляризации, методы статистической регуляризации и др.

\* Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 09-08-00034а).

В методе регуляризации Тихонова важным является выбор параметра регуляризации  $\alpha$ . Существует ряд способов его выбора [2—11]: способ невязки, обобщенный принцип невязки, способ отношения, метод перекрестной значимости, локальный регуляризирующий алгоритм, способ подбора и др.

Рассмотрим применение способа модельных (эталонных) примеров, или способа моделирования [4, 12] к решению обратной задачи спектроскопии и другим задачам. Поскольку этот способ основан на проведении вычислительных экспериментов, будем называть его также способом вычислительных экспериментов [13].

**Математические предпосылки способа вычислительных экспериментов.** Выведем основные соотношения (с некоторыми изменениями и дополнениями), необходимые для обоснования способа моделирования [4, 12]. Это, в первую очередь, оценки погрешности регуляризованного решения.

Рассмотрим операторное уравнение I рода:

$$Ay = f, \quad y \in Y, \quad f \in F, \quad (1)$$

где  $y$  и  $f$  — искомый и заданный элементы гильбертовых пространств  $Y$  и  $F$ ;  $A$  — линейный ограниченный оператор из  $Y$  в  $F$ . Оператор  $A$  не предполагается непрерывно обратимым, т.е. задача, представленная уравнением (1), является некорректной. Вместо точных значений  $f$  и  $A$  известны их приближения  $\tilde{f}$  и  $\tilde{A}$  такие, что  $\|\tilde{f} - f\| \leq \delta$ ,  $\|\tilde{A} - A\| \leq \xi$ .

В методе Тихонова регуляризации нулевого порядка вместо уравнения (1) решается уравнение Эйлера [4, 7]:

$$\alpha y_\alpha + \tilde{A}^* \tilde{A} y_\alpha = \tilde{A}^* f, \quad (2)$$

где  $\alpha > 0$  — параметр регуляризации;  $\tilde{A}^*$  — оператор, сопряженный с оператором  $\tilde{A}$ .

Пусть  $\Delta y_\alpha = y_\alpha - y$  — погрешность регуляризованного решения  $y_\alpha$  уравнения (2), а  $y$  — точное решение (в качестве такового берем нормальное псевдорешение [3, 4, 6, 7]). Обозначим  $R = \tilde{A}^* \tilde{A}$ . Имеем следующую оценку по норме погрешности решения [6, 10—12]:

$$\|\Delta y_\alpha\| \leq \|\tilde{T}_\alpha \tilde{A}^*\| (\delta + \xi \|y\|) + \alpha \|\tilde{T}_\alpha\| \|y\|. \quad (3)$$

Здесь  $\tilde{T}_\alpha = (\alpha E + \tilde{R})^{-1}$ , где  $E$  — единичный оператор. Учитывая [6, 10—12], что

$$\|\tilde{T}_\alpha \tilde{A}^*\| \leq \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}, \quad \|\tilde{T}_\alpha\| \leq \frac{1}{\alpha}, \quad (4)$$

на основе (3) получаем оценку абсолютной погрешности решения,

$$\|\Delta y_\alpha\| \leq \frac{\delta + \xi \|y\|}{2\sqrt{\alpha}} + \|y\|, \quad (5)$$

и оценку относительной погрешности решения (более пригодную для обоснования способа моделирования):

$$\frac{\|\Delta y_\alpha\|}{\|y\|} \leq \frac{\|A\|}{2\sqrt{\alpha}} \left( \frac{\delta}{\|A\| \cdot \|y\|} + \frac{\xi}{\|A\|} \right) + 1,$$

или, учитывая  $\|A\| \cdot \|y\| \geq \|f\|$  и полагая  $\|A\| \approx \|\tilde{A}\|$ ,

$$\frac{\|\Delta y_\alpha\|}{\|y\|} \lesssim \frac{\|\tilde{A}\|}{2\sqrt{\alpha}} (\delta_{\text{отн}} + \xi_{\text{отн}}) + 1, \quad (6)$$

где  $\delta_{\text{отн}} = \delta / \|f\|$  и  $\xi_{\text{отн}} = \xi / \|A\|$  — относительные погрешности правой части  $f$  и оператора  $A$ . Однако оценки (5) и (6) существенно завышены и не имеют локального минимума по  $\alpha$ .

Для получения более конструктивных оценок воспользуемся понятием псевдообратного оператора  $A^+ f = u$  [6] и, как следствие,  $\tilde{R}^+ = (\tilde{A}^* \tilde{A})^+$  [4, 12]. В результате вместо завышенной оценки  $\|\tilde{T}_\alpha\|$  согласно (4) получим более точную оценку (ср. [10]):

$$\|\tilde{T}_\alpha\| = \frac{1}{\alpha + \lambda_{\min}(\tilde{R})} = \frac{1}{\alpha + 1/\|\tilde{R}^+\|} = \frac{\|\tilde{R}^+\|}{\alpha \|\tilde{R}^+\| + 1}.$$

Тогда

$$\|\Delta y_\alpha\| \leq \frac{\delta + \xi \|y\|}{2\sqrt{\alpha}} + \frac{p\alpha}{p\alpha + 1} \|y\|, \quad (7)$$

где  $p = \|\tilde{R}^+\| = \|\tilde{A}^+\|^2$ , а также (ср. [4, 12])

$$\frac{\|\Delta y_\alpha\|}{\|y\|} \lesssim \varepsilon(\alpha). \quad (8)$$

Здесь

$$\varepsilon(\alpha) = \frac{\|\tilde{A}\|}{2\sqrt{\alpha}} \eta + \frac{p\alpha}{p\alpha + 1}, \quad (9)$$

где  $\eta = \delta_{\text{отн}} + \xi_{\text{отн}}$ .

Свойства функции  $\varepsilon(\alpha)$  следующие:  $\varepsilon(0) = \infty$ ,  $\varepsilon(\infty) = 1$ . При промежуточных значениях  $\alpha \in (0, \infty)$  функция  $\varepsilon(\alpha)$  может быть или монотонно убывающей, при достаточно больших значениях  $\eta$ , или иметь (единственный) локальный минимум  $\varepsilon_{\min}(\alpha) \in (0, 1)$  при некотором  $\alpha = \alpha_m$  [4, рис. 9; 12, рис. 1]. Согласно [4, 12] локальный минимум существует при

$$\frac{4^{4/3}}{3} p \left( \frac{\|\tilde{A}\| \eta}{4p} \right)^{2/3} < 1$$

или

$$p(\|\tilde{A}\| \eta)^2 < \frac{27}{16} \approx 1,69. \quad (10)$$

Функция  $\varepsilon(\alpha)$  является верхней огибающей для реальной функции

$$\sigma_p(\alpha) = \frac{\|\Delta y_\alpha\|}{\|y\|}.$$

**Описание метода вычислительных экспериментов.** Соотношения (8)—(10) позволяют математически обоснованно сформулировать способ моделирования. Они свидетельствуют о том, что оценка относительной погрешности регуляризованного решения зависит от значений  $\|\tilde{A}\|$ ,  $\eta$  и  $p$ . Поскольку  $p$  зависит от  $\tilde{A}$ , можно сделать вывод о том, что оценка погрешности зависит от  $\tilde{A}$  и  $\eta$ . Поэтому, если решается несколько примеров с одинаковыми значениями  $\tilde{A}$  и  $\eta$ , то для них оценки (8)—(10) погрешностей решений будут одинаковыми. Это главная особенность метода вычислительных экспериментов. Если при этом выполняется неравенство (10), то функция  $\varepsilon(\alpha)$  имеет минимум при некотором значении  $\alpha_m$ , одинаковом для всех примеров.

Отсюда следует, что при решении некоторого исходного примера  $P$  с неизвестным (искомым) решением  $y_P$  можно использовать результаты решения другого, модельного, примера  $Q$ , т.е. примера с известным (заданным) точным решением  $y_Q$ , но с такими же значениями  $\tilde{A}$  и  $\eta$ , как и для примера  $P$ .

При решении примера  $Q$  вычисляем функцию

$$\sigma_p(\alpha)_Q = \frac{\|\Delta y_{\alpha Q}\|}{\|y_Q\|}$$

и по ней находим оптимальное значение  $\alpha_{\text{opt}Q}$ , при котором  $\sigma_p(\alpha) = \min_{\alpha}$ .

Значение  $p$  из (9) можно найти согласно [4, 12]:

$$\alpha_{\text{опт}Q} = \left( \frac{\|\tilde{A}\| \eta}{4p} \right)^{2/3} (1 + p\alpha_{\text{опт}Q})^{4/3}. \quad (11)$$

Решив нелинейное уравнение (11), найдем значение  $P$ . Если  $p\alpha_{\text{опт}Q} \ll 1$ , то

$$\alpha_{\text{опт}Q} \approx \frac{g}{p^{2/3}} \left( 1 + \frac{4}{3} p^{1/3} g \right), \quad g = \left( \frac{\|\tilde{A}\| \eta}{4} \right)^{2/3}, \quad (12)$$

откуда

$$p \approx \left( \frac{4/3g^2 + \sqrt{(4/3g^2)^2 + 4g\alpha_{\text{опт}Q}}}{2\alpha_{\text{опт}Q}} \right)^3, \quad (13)$$

или

$$p \approx \left( \frac{g}{\alpha_{\text{опт}Q}} \right)^{3/2} = \frac{\|\tilde{A}\| \eta}{4\alpha_{\text{опт}Q}^{3/2}}. \quad (14)$$

Это позволяет проверить условие (10), а также построить функцию  $\varepsilon(\alpha)$  согласно (9). При решении примеров  $Q$  и  $P$  не обязательно рассчитывать огибающую кривую  $\varepsilon(\alpha)$ , так как она введена, чтобы показать, какими свойствами должен обладать пример  $Q$ . Как видно из соотношений (8)—(14), пример  $Q$  должен иметь такое же значение  $\|\tilde{A}\| \eta$  (а для повышения точности моделирования такие же  $\tilde{A}$  и  $\eta$ ), как и пример  $P$ .

Можно решить несколько модельных примеров с одинаковыми значениями  $\|\tilde{A}\| \eta$  (или  $\tilde{A}$  и  $\eta$ ). Технология формирования и решения модельных примеров, составляющая основу метода моделирования (вычислительных экспериментов), более подробно изложена в работах [4, 12, 13].

Следует заметить, что модельные примеры  $Q_i$  должны содержать дополнительную, априорную, информацию об исходном примере  $P$ . Если решается, например, обратная задача спектроскопии [5, с. 79—90], то на основе анализа функции  $\tilde{f}_P$  необходимо сделать предварительную оценку числа спектральных линий (максимумов) в искомом спектре  $u_P$ , соотношений их интенсивностей и значений их частот. Использование такой информации в модельных примерах  $Q_i$  позволяет более точно оценить значение  $\alpha$  (а также определить возможности метода регуляризации Тихонова по восстановлению спектров).

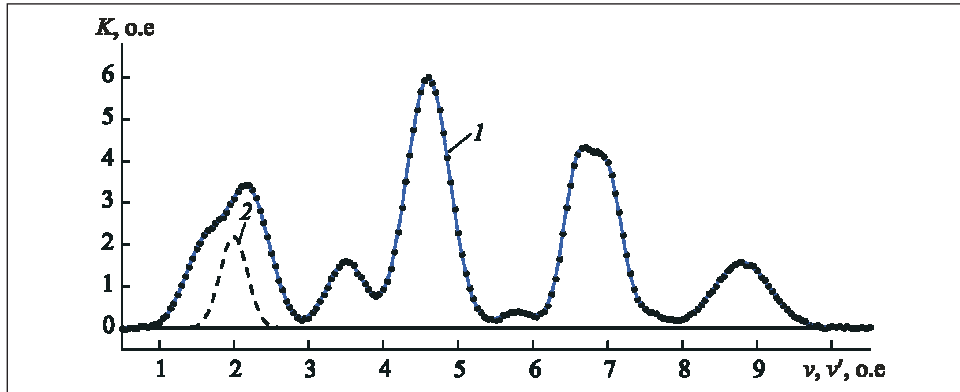


Рис. 1. Исходный пример  $P$  (оригинал): 1 — измеренный спектр  $f(v)$  и  $\tilde{f}(v)$ ; 2 — сечение АФ  $K(2, v')$

Из оценки (7) — (9)

$$\|\Delta y_\alpha\| \leq \left( \frac{\|\tilde{A}\|}{2} \frac{\eta}{\sqrt{\alpha}} + \frac{p\alpha}{p\alpha + 1} \right) \|y\|$$

следует, что при  $\alpha(\eta) = O(\eta)^2$  существует асимптотика:  $\|\Delta y_\alpha\| \rightarrow 0$  при  $\eta \rightarrow 0$ , т.е. алгоритм, порождаемый способом моделирования (вычислительных экспериментов), является регуляризирующим (ср. [4, с. 249]).

В рамках системы MatLab разработано программное обеспечение, содержащее два головных модуля (NumExpP и NumExpQ) и несколько  $m$ -функций. Модуль NumExpP предназначен для решения исходного примера-оригинала  $P$  (решается обратная задача), а NumExpQ — для решения модельного примера  $Q$  (решаются прямая и обратная задачи). В прямой задаче выполняется расчет правой части  $\tilde{f}_Q$ , а в обратной — восстанавливается искомая функция  $y_{\alpha Q}$ , а затем функция  $y_{\alpha P}$  с помощью решения интегрального уравнения Фредгольма I рода методом квадратур с регуляризацией Тихонова [4, 5].

**Пример** (обратная задача спектроскопии [5, 14, 15]). Рассмотрим исходный пример (оригинал)  $P$ , описываемый интегральным уравнением Фредгольма I рода

$$\int_a^b K(v, v') y(v') dv' = \tilde{f}(v), \quad c \leq v \leq d. \quad (15)$$

Здесь  $y(v)$  — истинный спектр, где  $v$  — частота;  $\tilde{f}(v) = f(v) + \delta f$  — изме-

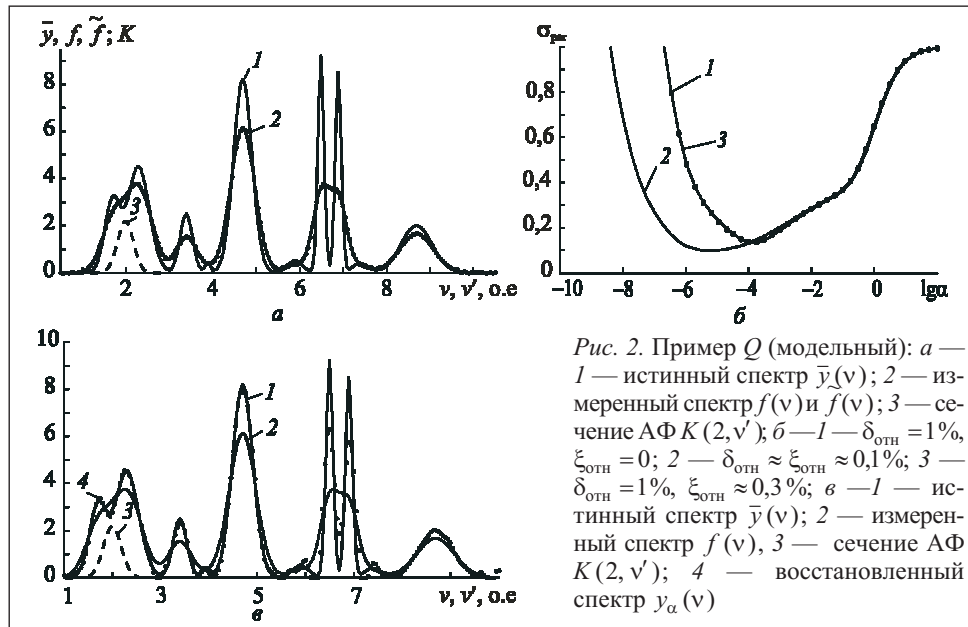


Рис. 2. Пример  $Q$  (модельный):  $a$  — 1 — истинный спектр  $\tilde{y}(v)$ ; 2 — измеренный спектр  $f(v)$  и  $\tilde{f}(v)$ ; 3 — сечение АФ  $K(2, v')$ ;  $b$  — 1 —  $\delta_{отн} = 1\%$ ,  $\xi_{отн} = 0$ ; 2 —  $\delta_{отн} \approx \xi_{отн} \approx 0,1\%$ ; 3 —  $\delta_{отн} = 1\%$ ,  $\xi_{отн} \approx 0,3\%$ ;  $v$  — 1 — истинный спектр  $\tilde{y}(v)$ ; 2 — измеренный спектр  $f(v)$ , 3 — сечение АФ  $K(2, v')$ ; 4 — восстановленный спектр  $y_\alpha(v)$

ренный спектр, где  $\delta f$  — шум;  $K(v, v')$  — аппаратная функция (АФ) спектрометра,

$$K(v, v') = \sqrt{q/\pi} \exp \left\{ -\frac{q(v-v')^2}{1-0,2(v/10)^2} \right\}, \quad (16)$$

где  $q = 15$  (ширина  $K$  убывает с возрастанием частоты  $v$ ).

Как видно из рис. 1, измеренный спектр  $\tilde{f}(v)$  имеет шесть четких флуктуаций, две из которых (при  $v \approx 2$  и  $v \approx 6,8$ ) не проявились, так как ширина АФ ограничивает разрешающую способность спектрометра. Следовательно, истинных флуктуаций (спектральных линий) в спектре более восьми. Поэтому в качестве модельного примера  $Q$  сформирован близкий к  $P$  пример, у которого истинный спектр  $y(v)$  состоит из 10 спектральных линий в виде гауссиан:

$$\begin{aligned} \tilde{y}(v) = & 3,0 \exp \{ -[(v-1,7)/0,25]^2 \} + 4,5 \exp \{ -[(v-2,3)/0,35]^2 \} + \\ & + 2,5 \exp \{ -[(v-3,4)/0,20]^2 \} + 0,4 \exp \{ -[(v-3,9)/0,10]^2 \} + \\ & + 8,2 \exp \{ -[(v-4,7)/0,30]^2 \} + 0,5 \exp \{ -[(v-5,9)/0,25]^2 \} + \\ & + 9,2 \exp \{ -[(v-6,5)/0,10]^2 \} + 8,5 \exp \{ -[(v-6,9)/0,10]^2 \} + \\ & + 0,4 \exp \{ -[(v-7,4)/0,25]^2 \} + 2,0 \exp \{ -[(v-8,7)/0,50]^2 \}. \end{aligned}$$

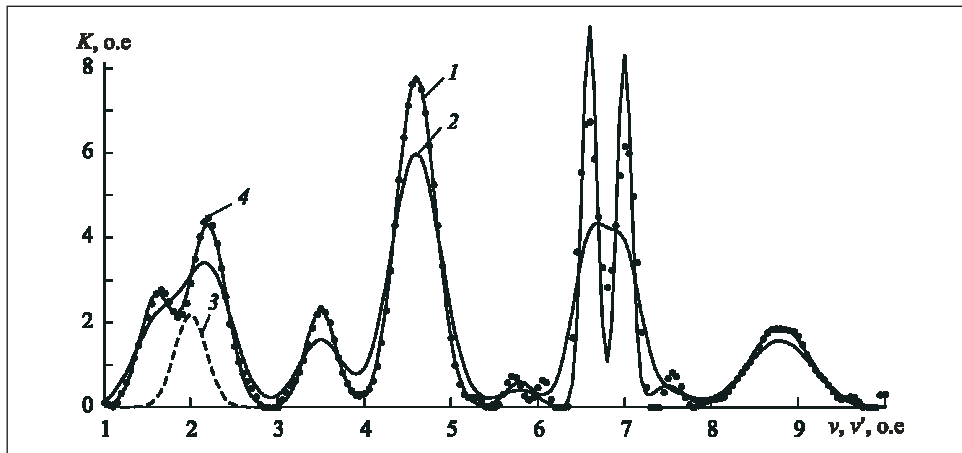


Рис. 3. Пример  $P$  (оригинал) (обозначения те же, что и на рис. 2, в)

На рис. 2, а представлен модельный пример  $Q$ , для которого получено значение  $\eta = \delta_{\text{отн}} + \xi_{\text{отн}} \approx 1\%$  с использованием примера  $P$ . В результате решения уравнения (15) методом квадратур с регуляризацией Тихонова для ряда значений параметра регуляризации  $\alpha$  построена зависимость относительной погрешности регуляризованного решения  $y_\alpha(\nu)$  от точного решения  $\bar{y}(\nu)$ :

$$\sigma_{\text{пер}}(\alpha) = \frac{\|y_\alpha(\nu) - \bar{y}(\nu)\|}{\|\bar{y}(\nu)\|}.$$

Такие зависимости для нескольких вариантов погрешностей  $f$  и  $K$  — соответственно  $\delta_{\text{отн}}$  и  $\xi_{\text{отн}}$  — представлены на рис. 2, б. Значения  $\delta_{\text{отн}}$  и  $\xi_{\text{отн}}$  являются недостаточно точными, поэтому при проведении расчетов было задано несколько значений погрешностей порядка 1%. Погрешности функции  $f$  формировались с помощью нормального датчика случайных чисел `randn.m`, а погрешность  $\xi$  имитировалась варьированием коэффициента  $q$  в (16).

Из рис. 2, б видно, что оптимальное значение параметра регуляризации  $\alpha$ , например для кривой 1 равно приблизительно  $10^{-3,6}$ . Однако при таком значении  $\alpha$  в решении  $y_\alpha(\nu)$  хорошо восстанавливаются сильные линии, а слабые — отягощены ложными флуктуациями и лучше восстанавливаются при большем значении  $\alpha$ .

На рис. 2, в представлен истинный  $\bar{y}(\nu)$  и восстановленный  $y_\alpha(\nu)$  спектры при несколько завышенном значении  $\alpha$ , а именно при  $\alpha = 10^{-3}$ . Как видим, спектр в примере  $Q$  восстановлен вполне удовлетворительно (проявились и близкие и слабые линии).



При значении  $\alpha = 10^{-3}$ , которое было найдено в примере  $Q$ , решен пример  $P$  (рис. 3). Как и в примере  $Q$ , в примере-оригинале  $P$  восстановились слабые и проявились близкие линии.

## Выводы

Численные результаты, полученные при решении ряда прикладных задач (реконструкции искаженных изображений [16], обработки сигналов, рентгеновской компьютерной томографии и др. [5]) свидетельствуют о том, что рассмотренный регуляризирующий алгоритм является работоспособным, а разработанные программы достаточно эффективными, гибкими и удобными для использования. Они могут быть применены наряду с другими пакетами прикладных программ, которые входят в программный комплекс MatLab.

A method of model examples for choice of regularization parameter is considered in the paper. The computational algorithm for solving the Fredholm I kind integral equations is composed as based on the modeling method. The software implementation in the MatLab is developed for the suggested algorithm. The efficiency of theoretical results is tested by solving the inverse spectroscopy problem.

1. *Василенко Г. И.* Теория восстановления сигналов: о редукции к идеальному прибору в физике и технике. — М. : Сов. радио, 1979. — 272 с.
2. *Воскобойников Ю.Е., Преображенский Н.Г., Седельников А.И.* Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. — Новосибирск : Наука, 1984. — 240 с.
3. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. — М. : Наука, 1986. — 288 с.
4. *Верлань А. Ф., Сизиков В. С.* Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. — Киев : Наук. думка, 1986. — 544 с.
5. *Сизиков В. С.* Математические методы обработки результатов измерений. — СПб. : Политехника, 2001. — 240 с.
6. *Морозов В. А.* Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. — М.: Наука, 1987. — 240 с.
7. *Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.* Численные методы решения некорректных задач. — М. : Наука, 1990. — 232 с.
8. *Engl H. W., Hanke M., Neubauer A.* Regularization of Inverse Problems. — Dordrecht : Kluwer, 1996. — 328 p.
9. *Воскобойников Ю. Е., Мухина И. Н.* Локальный регуляризирующий алгоритм восстановления контрастных сигналов и изображений // Автометрия. — 2000. — № 3. — С. 45—53.
10. *Kojdecki M.A.* New criterion of regularisation parameter choice in Tikhonov's method // Biuletyn WAT (Biul. Mil. Univ. Technol.). — 2000. — Vol. 49, № 1 (569). — P. 47—126.
11. *Сизиков В. С.* О способах невязки при решении некорректных задач // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. — 2003. — 43, № 9. — С. 1294—1312.

12. Сизиков В. С. О моделировании некоторых некорректных задач с использованием принципов подобия // Электрон. моделирование. — 1981. — №. 6. — С. 3—8.
13. Мосенцова Л. В. Реализация метода моделирования (вычислительных экспериментов) для решения уравнений Фредгольма I рода в системе MATLAB // Сб. тезисов конф. «Интегральные уравнения» — 2009. — Киев : изд. ИПМЭ, 2009. — С. 110—112.
14. Кочиков И. В., Курамшина Г. М., Пентин Ю. А., Ягола А. Г. Обратные задачи колебательной спектроскопии. — М. : изд. МГУ, 1993. — 204 с.
15. Старков В. Н. Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации. — Киев : Наук. думка, 2002. — 264 с.
16. Сизиков В. С., Белов И. А. Реконструкция смазанных и дефокусированных изображений методом регуляризации // Оптич. журнал. — 2000. — 67, № 4. — С. 60—63.

Поступила 02.12.10;  
после доработки 18.01.11

*ВЕРЛАНЬ Анатолий Федорович, д-р техн. наук, зав. отделом Ин-та проблем моделирования в энергетике им. Г. Е. Пухова НАН Украины. В 1956 г. окончил Киевский политехнический ин-т. Область научных исследований — методы математического и компьютерного моделирования в задачах исследования динамических систем, электрических цепей; численные методы и алгоритмы решения интегральных уравнений.*

*СИЗИКОВ Валерий Сергеевич, д-р техн. наук, профессор кафедры измерительных технологий и компьютерной томографии Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики. В 1964 г. окончил Уральский госуниверситет в г. Свердловске. Область научных исследований — вычислительная и прикладная математика, интегральные уравнения и приложения, некорректные задачи и регулярные методы их решения, томография, реконструкция изображений, обработка сигналов, гравиметрия, программирование.*

*МОСЕНЦОВА Людмила Викторовна, аспирантка Ин-та проблем моделирования в энергетике им. Г. Е. Пухова НАН Украины. В 2008 г. окончила Таврический национальный университет им. В. И. Вернадского. Область научных исследований — интегральные уравнения, некорректные задачи и регулярные методы их решения, восстановление сигналов, программирование.*