АКАДЕМИЯ НАУК СССР
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
АВТОМЕТРИЯ

№ 2 1972

С. В. ВАРНАВИН, В. В. ГУЩИН
(*Горький*)

ОБ ЭФФЕКТИВНОМ ИСПОЛЬЗОВАНИИ АПРИОРНОЙ ИНФОРМАЦИИ ПРИ СГЛАЖИВАНИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

В настоящее время существует много различных методов восстановления отсчетов функции по искаженным ошибками результатам эксперимента. Однако, как правило, эти методы являются лишь приближением к наилучшей обработке в смысле извлечения максимальной информации из экспериментальных данных.

Известно, что наиболее полную информацию несет апостериорная плотность распределения искомого параметра или функции. В качестве наилучшей оценки обычно выбирают математическое ожидание апостериорного распределения, что соответствует критерию «минимума среднего риска», либо моду, что соответствует максимуму правдоподобия по Фишеру, либо, наконец, медиану при минимаксном критерии. При нормальном распределении измеряемых оценок все указанные критерии совпадают. Для построения апостериорного распределения можно воспользоваться формулами Байеса, но при этом необходимо обладать априорной информацией о восстанавливаемой функции.

Отметим, что известные в литературе методы сглаживания существенно отличаются от байесовских, являясь в лучшем случае оптимальными лишь по критерию максимума правдоподобия, так как предполагают полное отсутствие знаний о распределении вероятностей по классу аппроксимирующих функций (как, например, это имеет место в методе наименьших квадратов). Между тем такая априорная информация явно или неявно присутствует почти в каждом физическом эксперименте. Рассмотрим, каким образом можно использовать априорную информацию для оптимизации процесса восстановления истинных значений исследуемой функции по данным эксперимента.

Пусть при измерениях получаются значения функции $f(x)$, представляющей собой искаженный ошибками результат действия оператора известного вида A* на искомую функцию $\varphi(x)$:

$$f(x) = A\{\varphi(x)\} + \varepsilon_f(x). \tag{1}$$

Необходимо восстановить по результатам измерений истинный вид $\varphi(x)$.

---

* В дальнейшем оператор предполагается известным точно. Неопределенность в его задании чаще всего оказывается возможным включить в обобщенную «ошибку эксперимента» $\varepsilon_f(x)$.

Поскольку при эксперименте чаще всего интересуются значениями $\varphi(x)$ в конечном ряде дискретных точек x_i, $i=1, 2, \ldots, n$ и соответственно получают отсчеты функции $f(x)$ в этих точках, вместо функций $\varphi(x)$, $f(x)$ и $\varepsilon(x)$ можно рассматривать n-мерные векторы, компоненты которых — значения соответствующих функций в точках x_i. Тогда (1) можно записать в виде

$$f_i = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}\varphi_k + \varepsilon_{fi}. \qquad (2)$$

Значения отсчетов f_i известны нам с ошибками ε_{fi}, поэтому восстанавливаемые из (2) отсчеты φ_k также будут получаться с ошибками ε_{φ_k}, величина которых определяется свойствами оператора A. Необходимо восстановить истинный вид вектора $\vec{\varphi}$, исключив по возможности влияние ошибок эксперимента.

Весьма часто оператор A бывает таким, что обратная задача [задача определения $\varphi(x)$ из (1)] оказывается некорректной*. В этих случаях для надежного восстановления истинного вида $\vec{\varphi}$ необходимо применять методы, специально разработанные для задач такого типа, например методы регуляризации, предложенные А. Н. Тихоновым [1—3]. Если же обратная задача корректна, мы имеем дело с простым сглаживанием и восстановление $\vec{\varphi}$ общепринятыми методами сглаживания также дает достаточно достоверные результаты.

В качестве критерия оптимальности восстановления истинного вида $\vec{\varphi}$ используем критерий максимума апостериорной плотности вероятностей

$$P\left(\vec{\varphi}/\vec{f}\right) = \mathrm{const}\, P\left(\vec{f}/\vec{\varphi}\right) P\left(\vec{\varphi}\right). \qquad (3)$$

Соотношение (3) представляет собой формулу Байеса. Здесь $P(\vec{f}/\vec{\varphi})$ — условная плотность вероятностей получения в результате измерений вектора $\vec{f}$ при заданном $\vec{\varphi}$, характеризующем «состояние природы» ($P(\vec{f}/\vec{\varphi})$, естественно, совпадает с распределением ошибок эксперимента); $P(\vec{\varphi})$ — априорная плотность вероятностей вектора $\vec{\varphi}$; $P(\vec{\varphi}/\vec{f})$ — условная плотность вероятностей вектора $\vec{\varphi}$ при заданном векторе $\vec{f}$.

Результатом оптимального восстановления $\vec{\varphi}$ будем считать вектор $\vec{\varphi}_{\text{опт}}$, обращающий (3) в максимум:

$$P\left(\vec{\varphi}_{\text{опт}}/\vec{f}\right) = \max P\left(\vec{\varphi}/\vec{f}\right). \qquad (4)$$

Наиболее распространенный из существующих методов сглаживания — метод наименьших квадратов — использует для восстановления истинного вида $\vec{\varphi}$ критерий «максимума правдоподобия», согласно которому восстановленный вектор $\vec{\varphi}_{\text{восст}}$ должен удовлетворять соотношению

$$P\left(\vec{f}/\vec{\varphi}_{\text{восст}}\right) = \max P\left(\vec{f}/\vec{\varphi}\right). \qquad (5)$$

* Задача определения $\varphi(x)$ из уравнения $f(x) = A\{\varphi(x)\}$ считается в математической физике поставленной корректно, если: а) решение существует и единственно; б) решение непрерывно зависит от начальных данных. На практике чаще всего нарушается второе требование; например, это имеет место, когда f — набор отсчетов функции, а $\vec{\varphi}$ — соответствующий набор отсчетов производной. При этом $|\varepsilon_\varphi| \gg |\varepsilon_f|$.

Легко видеть, что (5) представляет собой частный случай (4) при $P(\vec{\varphi})=\mathrm{const}$. Действительно, при использовании на практике метода наименьших квадратов обычно считают, что априорная информация о распределении вероятностей по классу аппроксимирующих функций (например, полиномов Чебышева) полностью отсутствует, и полагают $P(\vec{\varphi})\equiv\mathrm{const}$. Между тем, часто есть возможность получить некоторую информацию о виде $P(\vec{\varphi})$ косвенным путем и использовать ее, добиваясь оптимальности не только в смысле (5), но и в смысле (4).

Использование априорной информации о восстанавливаемой функции является существенно необходимым при решении некорректных обратных задач методами регуляризации. Априорная информация об ожидаемой гладкости искомого решения позволяет сузить класс функций, в котором отыскивается это решение, и тем самым преодолеть некорректность задачи. Однако способ ввода этой информации, применяемый в методе А. Н. Тихонова [1—3], обычно слабо связан с физикой задачи и представляет поэтому определенные трудности при практическом осуществлении. Статистической природе реальных задач в большей степени отвечает предложенное В. Ф. Турчиным [4—6] обобщение метода А. Н. Тихонова — так называемый метод статистической регуляризации. При статистической регуляризации априорная информация о гладкости искомой функции $\varphi(x)$ вводится в виде предположения о принадлежности вектора $\vec{\varphi}$ к некоторому статистическому ансамблю «гладких» векторов, задаваемому на n-мерном пространстве векторов $\vec{\varphi}$ своей плотностью вероятностей $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$*. Такой способ ввода априорной информации является более общим, чем обычное задание класса аппроксимирующих функций**, и более информативным в статистическом смысле. Чтобы восстановленный вектор был приближенным (с точностью до ошибки эксперимента) решением уравнения

$$f_i=\sum_{k=1}^{n}A_{ik}\varphi_k \qquad (6)$$

вводится требование принадлежности искомого вектора к статистическому ансамблю «близких к решению (6)» векторов, задаваемому на пространстве векторов $\vec{\varphi}$ плотностью вероятностей $P_{\text{б}}\left(\vec{\varphi}\right)$. Поскольку точность соблюдения (6) определяется ошибкой эксперимента, в качестве $P_{\text{б}}\left(\vec{\varphi}\right)$ естественно рассматривать распределение ошибок эксперимента. Таким образом, учет ошибок измерений в методе В. Ф. Турчина также вполне отвечает их статистической природе.

Восстановленный вектор $\vec{\varphi}$ должен удовлетворять как априорно заданным через посредство ансамбля $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ требованиям к гладкости, так и требованию близости к решению (6), т. е. должен принадлежать к ансамблю, характеризуемому плотностью вероятностей

$$P_{\text{б.г}}\left(\vec{\varphi}\right)=\mathrm{const}\cdot P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)\cdot P_{\text{б}}\left(\vec{\varphi}\right). \qquad (7)$$

---

* Мы намеренно не уточняем, к каким пространствам принадлежат векторы $\vec{f}$ и $\vec{\varphi}$, поскольку для идеи излагаемых методов это несущественно.

** Если между векторами $\vec{\varphi}$ и функциями $\varphi(x)$ существует взаимно однозначное соответствие, задание класса аппроксимирующих функций в обычном понимании будет соответствовать частному случаю, когда $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)=\mathrm{const}$ в какой-то области пространства векторов φ и $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)\equiv 0$ вне этой области.

В качестве восстановленного вектора $\vec{\varphi}_{\text{восст}}$ предлагается рассматривать математическое ожидание в ансамбле (7):

$$\vec{\varphi}_{\text{восст}} \equiv \langle \vec{\varphi} \rangle_{\text{б.г}}, \tag{8}$$

а в качестве среднеквадратичной ошибки восстановления — среднеквадратичное отклонение от математического ожидания в этом ансамбле:

$$\sigma_i^2 \equiv \langle (\varphi_i - \langle \varphi_i \rangle_{\text{б.г}}) \rangle_{\text{б.г}}. \tag{9}$$

В. Ф. Турчин отмечает аналогию выражения (7) с формулой Байеса (3). В самом деле, плотность распределения ошибок измерений представляет собой, как уже отмечалось, $P\left(\vec{f}/\vec{\varphi}\right)$, а $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ — не что иное, как априорная плотность вероятностей $P\left(\vec{\varphi}\right)$, т.е. $P_{\text{б.г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ — аналог $P(\vec{\varphi}/\vec{f})$.

Вообще говоря, для того, чтобы восстановленный таким способом вектор $\vec{\varphi}_{\text{восст}}$ был оптимальным в смысле (4), необходимо находить его не из (8), а из условия

$$\left.\frac{dP_{\text{б.г}}\left(\vec{\varphi}\right)}{d\vec{\varphi}} = 0\right|_{\vec{\varphi}=\vec{\varphi}_{\text{восст}}}. \tag{10}$$

Однако, при нормальном распределении $P_{\text{б.г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ это условие тождественно условию (8). На практике весьма часто встречаются нормальные распределения ошибок эксперимента $P_{\text{б}}\left(\vec{\varphi}\right)$. Для получения линейного алгоритма решения задачи удобно выбирать $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ также в виде нормального распределения, что и делается в [4—6], хотя в конкретной физической задаче фактическое распределение $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ может и не быть нормальным.

При отсутствии подробной априорной информации о гладкости искомой функции выражение $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ должно включать в себя характеризующий эту гладкость неизвестный априори параметр регуляризации, аналогичный используемому в работах А. Н. Тихонова. В частных случаях уравнение, получающееся из (8), для восстановленного методом статистической регуляризации решения совпадает с уравнением А. Н. Тихонова, т. е. метод А. Н. Тихонова можно рассматривать как частный случай реализации стратегии (7)—(8). Следует, однако, отметить, что метод А. Н. Тихонова или методы В. Ф. Турчина с неизвестным априори параметром регуляризации нельзя считать реализацией стратегии Байеса (3)—(4), так как (7) соответствует формуле Байеса лишь в случаях, когда $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ полностью задана априори.

Если априорная информация о $\varphi(x)$ достаточно подробна и можно обойтись без введения в $P_{\text{г}}\left(\vec{\varphi}\right)$ априори неизвестного параметра, то метод статистической регуляризации является прямой реализацией стратегии Байеса и степень приближения восстановленного вектора $\vec{\varphi}_{\text{восст}}$ к оптимальному в смысле (4) ограничена лишь возможной неполнотой априорных данных об искомой функции.

Хотя рассмотренный способ ввода априорной информации был разработан применительно к решению некорректных обратных задач, ничто не препятствует использованию его и в тех случаях, когда обратная задача корректна, т. е. когда приходится иметь дело с простым сглаживанием. При этом восстановление искомой функции будет более эффективным в смысле (5), чем восстановление по методу наименьших квадратов, и тем более близким к оптимальному по Байесу, чем удачнее подобран априорный ансамбль $P_г\left(\vec{\varphi}\right)$.

В [6] предложен простой способ построения $P_г\left(\vec{\varphi}\right)$ в случаях, когда априори известна некоторая конечная выборка «типичных» векторов $\vec{\Phi}^\nu$, $\nu = 1 \div N$, той же природы, что и искомый вектор $\vec{\varphi}$. Разумеется, наиболее благоприятным является случай, когда набор «типичных» векторов $\vec{\Phi}^\nu$ получается в результате серии точных прямых измерений (которые по каким-либо причинам не всегда осуществимы), и восстанавливаемые векторы $\vec{\varphi}$ сглаживаются по образцу векторов «типичного» набора. При этом близость восстановления к оптимальному в смысле (5) определяется полнотой охвата возможных случаев векторами «типичной» выборки. Однако возможно и построение выборки $\vec{\Phi}^\nu$ путем моделирования. При этом, конечно, ключевым фактором оптимальности восстановления будет достоверность моделирования исследуемого процесса.

Предположим, что тем или иным путем получена конечная выборка из N «типичных» векторов $\vec{\Phi}^\nu$, $\nu = 1, 2, \ldots, N$. Априорный ансамбль векторов $\vec{\varphi}$ можно задать в виде нормального распределения с корреляционной матрицей, тождественной корреляционной матрице выборки «типичных» векторов. Для удобства перейдем от заданной выборки к выборке с нулевым средним. Компоненты среднего вектора заданной выборки $\vec{\Phi}^0$:

$$\Phi_i^0 = \frac{1}{N}\sum_{\nu=1}^{n}\Phi_i^\nu, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{11}$$

Компоненты новых «типичных» векторов $\vec{\Phi}'^\nu$:

$$\Phi_i'^\nu = \Phi_i^\nu - \Phi_i^0. \tag{12}$$

Компоненты корреляционной матрицы сдвинутой выборки C:

$$C_{ik} = \frac{1}{N}\sum_{\nu=1}^{N}\Phi_i'^\nu \cdot \Phi_k'^\nu. \tag{13}$$

Нормальное распределение с корреляционной матрицей C, в качестве которого выбран ансамбль $P_г\left(\vec{\varphi}\right)$, можно записать в виде (см., например, [7])

$$P_г\left(\vec{\varphi}\right) = C_1 \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\vec{\varphi}, C^{-1}\vec{\varphi}\right)\right\}, \tag{14}$$

где

$$C_1 \equiv \sqrt{\frac{\det(C^{-1})}{(2\pi)^n}}.$$

Поскольку выборка типичных функций сдвинута на $\vec{\Phi}^0$, необходимо сдвинуть на $\vec{\Phi}^0$ и исходное уравнение (6). Введем новые векторы:

$$\vec{f}' \equiv \vec{\varphi} - A\vec{\Phi}^0; \quad \vec{\varphi}' \equiv \vec{\varphi} - \vec{\Phi}^0 \tag{15}$$

и перепишем (6) в виде

$$f_i' = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}\varphi_k'. \tag{16}$$

В (14) вместо $\vec{\varphi}$ также следует ввести $\vec{\varphi}'$.

Если ошибки эксперимента в точках отсчета функции $f(x)$ распределены нормально с нулевыми средними и со среднеквадратичными значениями s_i и не зависят друг от друга от точки к точке, ансамбль «близких векторов» $P_б(\vec{\varphi})$ описывается нормальным распределением

$$P_б(\vec{\varphi}) = P(\vec{f}/\vec{\varphi}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi s_i^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2s_i^2}\left[f_i - \sum_{j=1}^{n} A_{ij}\varphi_j\right]^2\right\}.$$

Аналогичный ансамбль для сдвинутых векторов φ' описывается таким же распределением

$$P_б(\vec{\varphi}') = P(\vec{f}'/\vec{\varphi}') = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi s_i^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2s_i^2}\left[f_i' - \sum_{j=1}^{n} A_{ij}\varphi_j'\right]^2\right\}. \tag{17}$$

Выражение (17) можно переписать в виде (см. [7])

$$P_б(\vec{\varphi}') = C_2 \exp\left\{-\frac{1}{2}(\vec{\varphi}', B'\vec{\varphi}') + (\vec{B}, \vec{\varphi})\right\}, \tag{17a}$$

где $B = A^+WA$; $\vec{B} = A^+W\vec{f}'$; $C_2 \equiv \sqrt{\frac{\det B}{(2\pi)^n}}$; W — диагональная матрица ошибок с элементами $W_{ik} = \frac{\delta_{ik}}{s_i^2}$ (δ_{ik} — символ Кронекера).

Плотность вероятностей, определяющая ансамбль «близких и гладких» векторов $\vec{\varphi}'$, опишем соотношением

$$P_{б.г}(\vec{\varphi}') = \mathrm{const}\, P_б(\vec{\varphi}')\, P_г(\vec{\varphi}') = C_3 \exp\left\{-\frac{1}{2}(\vec{\varphi}', K\vec{\varphi}') + (\vec{B}, \vec{\varphi}')\right\}, \tag{18}$$

где C_3 — константа, не зависящая от $\vec{\varphi}'$; $K = B' + C^{-1}$. Восстановленный вектор $\vec{\varphi}'_{восст}$ найдем как математическое ожидание в ансамбле (18):

$$\vec{\varphi}'_{восст} = \vec{\varphi}'_{б.г} = K^{-1}\vec{B},$$

а ошибку восстановления — как дисперсию в том же ансамбле:

$$\sigma_i^2 = \langle [\varphi_i' - \langle \varphi_i' \rangle_{б.г}]^2 \rangle_{б.г} = (K^{-1})_{ii}.$$

Переходя к искомому восстановленному вектору $\vec{\varphi}_{восст}$, получаем окончательно:

$$\vec{\varphi}_{восст} = \vec{\Phi}^0 + (B + C^{-1})^{-1}\vec{B}; \quad \sigma_i^2 = [(B' + C^{-1})^{-1}]_{ii}. \tag{19}$$

В частном случае, когда измеряются непосредственно отсчеты функции

$\varphi(x)$, $\varphi(x_i)$, оператор A следует считать единичным, и соответственно заменить в (19) B на W, $\vec{B}$ на $\overrightarrow{Wf'}$.

Описанный алгоритм восстановления отсчетов исследуемой функции и вычисления ошибок восстановления легко реализовать на ЭВМ. Следует, однако, учитывать, что при большом числе восстанавливаемых отсчетов ($n \gtrsim 30$) могут возникнуть трудности при реализации программ обращения матриц. В этих случаях «длинные» экспериментальные кривые придется восстанавливать по частям.

Предлагаемый алгоритм представляет собой один из многих возможных алгоритмов сглаживания экспериментальных данных. Другие способы построения априорного ансамбля $P_{\text{г}}(\vec{\varphi})$ также могут оказаться достаточно эффективными, как это имело место при решении некорректных обратных задач (см., например, [5, 6]).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Н. Тихонов. О решении некорректно поставленных задач методом регуляризации.— Докл. АН СССР, 1963, № 3.
2. А. Н. Тихонов. О некорректных задачах линейной алгебры и устойчивом методе их решения.— Докл. АН СССР, 1965, № 3.
3. А. Н. Тихонов, В. Б. Гласко. О приближенном решении интегральных уравнений Фредгольма 1-го рода.— Журнал вычислительной математики и математической физики, 1964, № 3.
4. В. Ф. Турчин. Решение уравнения Фредгольма 1-го рода в статистическом ансамбле гладких функций.— Журнал вычислительной математики и математической физики, 1967, № 6.
5. В. Ф. Турчин. Выбор ансамбля гладких функций при решении обратной задачи.— Журнал вычислительной математики и математической физики, 1968, № 1.
6. В. Ф. Турчин, В. З. Нозик. Статистическая регуляризация решения некорректных задач.— Изв. АН СССР, Физика атмосферы и океана, 1969, № 1.
7. М. Д. Кендалл, А. Стьюарт. Теория распределений. М., «Наука», 1966.

Поступила в редакцию
24 марта 1971 г.