УДК 517.988.68

А. Л. Агеев, Т. В. Антонова

О НОВОМ КЛАССЕ НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫХ ЗАДАЧ*

При решении некоторых прикладных задач необходимо не просто найти искомое решение некорректно поставленной проблемы [1–3], но и выделить характеристики особенностей этого решения (тип, положение и т. д.). Например, необходимо аппроксимировать положения конечного числа разрывов первого рода у зашумленной функции, если вне этих особенностей функция непрерывно-дифференцируема. Отличительной чертой этих задач является наличие условий (априорной информации) о характеристиках особенностей. В настоящей работе обсуждается этот важный класс задач, которые неустойчивы к малым вариациям входных данных, т. е. некорректно поставлены.

Необходимость развития специализированных методов регуляризации для этого случая сейчас, по-видимому, большинством теоретиков не осознается. Это до некоторой степени оправдано тем, что, на первый взгляд, методы решения неустойчивых задач, когда искомая функция может иметь особенности, давно и хорошо известны:

а) широко развиты методы получения негладких решений (см., например, обзор [4]);

б) при построении алгоритмов выделения особенностей можно взять подходящий метод регуляризации и дополнить его эвристическим методом выделения особенностей для полученного регуляризованного решения; таким образом, первая часть алгоритма вроде бы покрывается существующей теорией.

По пункту «а» упускается из виду, что в задачах, обсуждаемых здесь, интерес представляет именно аппроксимация особенностей, а гладкая часть решения является помехой, т. е. ситуация прямо обратная классическому подходу, где цель заключается в аппроксимации функции, а наличие особенностей делает задачу хуже. По пункту «б» проблема в том, что теоретического исследования всего алгоритма классическая теория не дает.

В связи с обработкой изображений построение алгоритмов выделения особенностей двумерных функций переживает бум и, поскольку существующая теория не дает ответа на многие важные для практики вопросы, некоторые

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 06-01-00116).

прикладники осознают необходимость развития теории. Сейчас получен ряд теоретических результатов для одномерных функций, что позволяет почувствовать специфику этого класса задач. Для двумерных функций положение много хуже, и большинство задач этого типа в настоящее время аккуратно математически не поставлены.

Перечислим некоторые признаки нового класса задач:

1) новые критерии качества решения задачи (например, точность определения положений особенностей, проблема разделения близких пиков и т. д.);

2) наличие нестандартной априорной информации на характеристики особенностей, без учета которой нельзя обеспечить качество решения;

3) новые технические приемы как в теории, так и при построении алгоритмов;

4) новые закономерности, не имеющие аналогов в классической теории.

Главная цель настоящей статьи – проиллюстрировать пункты 1–4, сформулированные выше.

В первом разделе кратко приводится история вопроса и частично обсуждаются постановки прикладных проблем по выделению особенностей. Во втором разделе обсуждается теоретическое исследование алгоритмов выделения особенностей; без доказательства приводятся некоторые теоретические результаты, позволяющие понять специфику нового класса задач. Часть приводимых утверждений публикуется впервые.

1. Развитие прикладных исследований

Количество источников, которые относятся к рассматриваемой в работе теме, совершенно необъятно. Поэтому, за небольшим исключением, ссылки будут делаться на обзоры и монографии, где можно найти список дополнительных работ (см., например, [5, 6]). Дело осложняется тем, что в большинстве прикладных работ нет точной математической постановки, что создает трудности в их интерпретации.

1.1. Спектроскопия

Первые работы, которые необходимо упомянуть, были инициированы задачами спектроскопии. В [7–10] приведено большое количество ссылок на работы, в которых решалось интегральное уравнение Фредгольма первого рода (в основном типа свертки). В частности, в [7] есть ссылки на работы лорда Рэлея и А. Шустера соответственно 1896, 1898 и 1906 годов (были построены итерационные алгоритмы, вкладывающиеся в классическую схему регуляризации [1]). Искомую функцию в спектроскопии чаще всего можно считать суммой некоторого числа узких длинных пиков (иногда добавляется еще гладкая функция – «фон»). Рассматриваемые алгоритмы можно интерпретировать в духе классической теории некорректно поставленных задач, если считать пики имеющими конечную ширину. Однако более естественно считать их δ-функциями, т. е. искать точное решение $x(s)$ в виде

$$x(s) = \sum_{1}^{M} \Delta_i \delta(s - s_i), \tag{1}$$

где M, Δ_i, s_i неизвестны. Либо точное решение может иметь вид

$$x(s) = x_0(s) + \sum_{1}^{M} \Delta_i \delta(s - s_i), \tag{2}$$

где x_0 – гладкая функция. При этом часто априори известно имеет место случай (1) или (2); иногда наличествует дополнительная априорная информация о числе M и s_i, $i = 1, 2, \ldots, M$.

При первой интерпретации (пики имеют конечную ширину) для определения функции $x(s)$ имеются хорошо исследованные регуляризирующие алгоритмы [1–3]. Однако целью расчетов является определение положений пиков. Поэтому к найденному регуляризованному решению приходится добавлять эвристический алгоритм выделения пиков и этот алгоритм теоретически не исследуется. Главная проблема, препятствующая анализу алгоритма: как формализовать понятие «пик». В частности, в этом случае неясно, как теоретически исследовать одну из основных проблем этой области – проблему «разделения близких пиков». Как сказано в [7, с. 167], «в этой связи возникает целый ряд вопросов. Прежде всего хотелось бы знать, от каких факторов зависит степень восстановления мелких деталей, существует ли естественный предел достижимого разрешения и чему равен этот предел в типичных условиях, если он действительно существует».

При второй интерпретации, когда функция $x(s)$ ищется в виде (1) или (2), понятие «пик» прекрасно формализуется, но на этих классах не работает классическая теория некорректно поставленных задач, поскольку построение регуляризирующих алгоритмов на классах функций, включающих δ-функции, встречает существенные трудности. В работах [7, 8] был получен, вероятно, первый теоретический результат в рамках второй интерпретации (мы вернемся к нему в следующем разделе).

Кроме задач классической спектроскопии в настоящее время возник целый ряд физических методов, в которых для извлечения необходимой информации необходимо решать интегральное уравнение Фредгольма первого рода или систему интегральных уравнений первого рода, не являющихся уравнениями типа свертки [11–15] (см. также [6]). Эти задачи можно назвать неклассической спектроскопией. Отметим, что часть из этих задач естественно решается на классических пространствах функций, а часть естественнее рассматривать на классах (1) или (2). Особенно часто подобные задачи возникают при исследовании структуры материалов.

Оценивая ситуацию в целом, можно сказать, что на практике успешно используются различные алгоритмы, в основном вкладывающиеся в классическую схему регуляризации [1]. Несмотря на свою теоретическую необоснованность, эти алгоритмы, дополненные эвристической частью, с практической точки зрения работают вполне приемлемо. Тем не менее вопросы остаются. Поэтому, с точки зрения авторов, нужно переходить на классы функций (1) или (2) и теоретически исследовать различные алгоритмы как алгоритмы выделения характеристик особенностей – чисел M, s_i, Δ_i, $i = 1, 2, \ldots, M$.

В заключение данного подраздела остановимся на одной задаче неклассической спектроскопии. Алгоритмы решения этой задачи интересны тем, что они существенно использовали неклассическую априорную информацию о характеристиках особенностей для функции $x(s)$ вида (1). Отметим, что, насколько известно авторам, информация этого типа ранее в задачах такого рода явно не использовалась.

Метод EXAFS [14–15] в настоящее время широко применяется для расшифровки локальной атомной структуры материалов, которая описывается функцией (функциями) радиального распределения атомов (ФРРА) $g(r)$, $r > 0$. Рассматривается случай (подробнее см. [16–17]) трехкомпонентного материала, описываемого тремя ФРРА $g_i(r)$, $i = 1, 2, 3$. Предполагается, что каждая из ФРРА является суммой узких длинных пиков, хорошо отделенных друг от друга, а фон отсутствует. Проводится один EXAFS-эксперимент. В этом случае основное уравнение имеет вид

$$\sum_1^3 A_i g_i = \chi\,, \tag{3}$$

где $\chi(s)$ получается из экспериментальных данных; A_i – известные интегральные операторы (не типа свертки); $g_i(r)$, $i = 1, 2, 3$ – искомые ФРРА.

Ясно, что если бы все операторы совпадали: $A_1 = A_2 = A_3$, то из уравнения (3) можно было бы в лучшем случае восстановить только функцию $\widehat{g} = \sum_1^3 g_i$, т. е. поставленная задача восстановления ФРРА имела бы неединственное решение. Как было показано в [19], операторы A_i, $i = 1, 2, 3$ в методе EXAFS таковы, что классической неединственности у уравнения (3) нет. Однако из-за погрешностей в задании исходных данных информации, содержащейся в уравнении (3), оказывается недостаточно для удовлетворительного решения задачи. Необходимо привлекать дополнительную априорную информацию.

Обработка разбивалась на два этапа. На первом этапе предполагалось, что искомые функции имеют вид

$$g_i(r) = \sum_{j=1}^{M_i} \Delta_j^i \delta(r - \widehat{r}_j^i), \quad i = 1, 2, 3, \tag{4}$$

где M_j – небольшие числа. Также считалось, что у каждой из ФРРА $\widehat{r}_j^i$ не слишком близки. Были разработаны методы решения уравнения (3) на классе функций (4) при известных ограничениях на $\widehat{r}_j^i$. Большое количество численных экспериментов показало, что для некоторых материалов такого рода решение выделяется однозначно, т. е. априорной информации оказывается достаточно, чтобы выделить нужное решение. Дальнейшие подробности обработки см. в [18–19].

1.2. Астрономия

В астрономии возникают как классические некорректно поставленные задачи (см., например, [5, часть II]), так и задачи выделения конечного числа точечных источников (см. [5, § 21]), когда искомое решение интегрального уравнения типа свертки ищется в форме (1). В упомянутой монографии, в частности, обсуждается задача разделения близких пиков. Видимо, важной особенностью этих задач является большая разномасштабность величин Δ_j^i в (1) (светимость звезд может различаться на несколько порядков).

1.3. Сверхразрешение

В начале 50-х годов (подробнее см. обзор [20]) возникло еще одно направление в спектроскопии, связанное с термином «сверхразрешение». Под этим термином понимается выделение изображений объектов размером меньше дифракционного предела. Так, используя специальные приемы, с помощью микроскопа удается изучать клетки, размер которых меньше длины световой волны. Это направление включает в себя математическую часть, которая, как правило, заключается в решении интегрального двумерного уравнения Фредгольма первого рода с использованием априорной информации о виде изучаемых объектов. Кроме того, это направление включает в себя чисто физическую часть (выбор или даже конструирование физических приборов, выбор условий проведения эксперимента и т. д.) с целью получения наиболее «хороших» условий, позволяющих достичь наилучших результатов.

В настоящий момент эффект сверхразрешения надежно зафиксирован и на его основе успешно работают многие приборы. Физики также получили целый ряд «теоретических» оценок разных параметров, позволяющих им оценивать и конструировать новые приборы. Видимо, наиболее неясным местом, не позволяющим убрать выше кавычки у слова «теоретических», заключается в формальном описании используемой априорной информации. Без этого большая часть проведенного анализа носит эвристический характер.

1.4. Обработка изображений

Большинство задач, обсуждаемых в этом подразделе, формально математически не поставлена и решается прикладниками с использованием эвристических соображений. Чтобы математически поставить эти задачи, необходимо построить модели типа (1) или (2).

Проблематика обработки изображений в настоящее время переживает бум. Используются самые разные методы и подходы, и конечно, не все возникающие в этой области задачи относятся к теме настоящего обзора. Поэтому, не претендуя на полноту ссылок, отошлем читателя к двум недавно появившимся монографиям [21, 22], в которых можно найти дальнейшие ссылки на литературу.

Монография [21] посвящена обработке сигнала с помощью вейвлетов (всплесков). Глава 6 целиком посвящена выделению особенностей: «Особенности и негладкие структуры часто содержат главную информацию о сигнале. Например, разрывы интенсивности изображения указывают на наличие перепадов на картине. В электрокардиограммах или радарных сигналах интересная информация также лежит в области резких переходов». Получены теоретические результаты достаточно общего характера относительно аппроксимации характеристик особенностей в условиях точно заданной функции (раздел 6.2), т. е. теоретическое построение и исследование регуляризирующих алгоритмов не проводилось. На основе численных расчетов автор дает рекомендации по дискретизации и регуляризации (не используя этого термина) в задаче выделения особенностей, в том числе и для двумерных функций.

Работа [22] представляет собой сборник обзорных статей, объединенных единым объектом исследования – контуром. В том числе в главе 6 обсуждаются вопросы восстановления контуров в условиях зашумленного изображения. Как констатируется на с. 303, «...проблема выделения контуров изображений в реальных сценах далека от ее положительного решения. По крайней мере, эффективность используемых обнаружителей границ по сравнению с возможностями, например человека, несоизмерима».

Остановимся подробнее на постановке одной задачи ориентирования по радиолокационным изображениям [23–24]. Эта проблема интересна тем, что в ней естественным образом возникает класс функций с особенностями, аналогичный классу (2).

В задаче навигации по радиолокационным изображениям (РЛИ) конечной целью является уточнение координат точки, из которой формируется РЛИ. Такое уточнение обычно производится за счет сопоставления РЛИ с «эталонным» изображением, сформированным на основе карты местности для заранее заданного положения радиолокатора. При этом наиболее важную роль играют различного рода особенности рассматриваемой функции (изображения), соответствующие реальным объектам на местности – ориентирам. Дело усложняется наличием у РЛИ сильных аппаратных искажений и статистического шума. Для компенсации искажений решается интегральное уравнение Фредгольма первого рода типа свертки, зависящее от параметра R:

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(\varphi-\eta)\, g(R,\varphi)\, d\varphi = f(R,\eta), \quad \eta \in (-\infty,\infty), \quad R \in [c,d]. \tag{5}$$

Измеряемая функция f^σ известна в точках равномерной двумерной сетки и зашумлена аддитивным некоррелированным гауссовским шумом.

В качестве ориентиров рассматриваются многозвенные ломаные. Функция g представляется в виде

$$g(R,\varphi) = g_1(R,\varphi) + \sum_{1}^{N} \Delta_i\, \delta(R-R_i, \varphi-\varphi_i), \tag{6}$$

где g_1 – функция малой интенсивности, отвечающая подстилающему фону, а точки $W_i(R_i,\varphi_i)$ расположены на ломаной; $\delta(R,\varphi)$ – двумерная дельта-функция. Такой вид искомой функции $g(R,\varphi)$ связан с тем, что в случае, когда яркие точки принадлежат более протяженным объектам, часто трудно (или невозможно) точно указать их положение на объекте. Описание метода решения этой задачи и результаты модельных расчетов см. в [23–24].

Остановимся еще на одной трудности, возникающей при обработке изображений. Наряду с шумом и искажениями традиционного вида, математические модели которых известны, при обработке изображений возникают искажения нестандартного вида. Общепринятая терминология в данной области пока не сложилась. В работах [25–27], где обсуждаются эти вопросы, такого рода искажения называются «структурными искажениями». Если некоторый фрагмент изображения отвечает объекту, то в результате структурного искажения часть этого фрагмента сильно искажается и уже не имеет к изображению объекта никакого отношения. Эти эффекты, в частности, могут возникать из-за того, что другие объекты «закрывают» интересующий нас объект.

Оценивая ситуацию в целом, можно сказать, что во многих областях возникает задача анализа изображений с целью выделения на нем точного положения фрагментов, связанных с «объектами» различного типа. Часто дело осложняется наличием шума и разного рода искажениями. При этом, в отличие от спектроскопии, условия получения изображений не стандартизованы, что приводит к новым трудностям в их обработке. Практиками предложено много алгоритмов выделения (локализации) особенностей на изображении, в том числе и в условиях приближенно заданных данных, и эти алгоритмы работают. Однако во многих случаях надежность их работы недостаточна.

2. Теоретические исследования

Чтобы упростить читателю понимание представляемых утверждений, изложение начинается с общей формы записи некорректной проблемы, в которую вкладываются все обсуждаемые далее результаты. Затем приводится пример конкретной задачи и конкретного метода, на которых иллюстрируется общая теория. В следующем подразделе дается обзор опубликованных теоретических результатов. Также анонсируются новые утверждения.

2.1. Общая схема. Пример

В настоящее время все известные авторам теоретические результаты относятся к определению характеристик изолированных особенностей одномерной функции. Отметим, что речь идет о методах регуляризации выделения особенностей. Поэтому, например, результаты [21, раздел 6.2] не упоминаются. Хотя, конечно, эти и другие утверждения могут служить базой для построения методов регуляризации.

Рассмотрим операторное уравнение первого рода

$$Ax = y, \tag{7}$$

где A – линейный непрерывный оператор; Y – гильбертово пространство (как правило, $Y = \mathbb{L}_2$); X – множество решений задачи (7), состоящее из функций с конечным числом особенностей и не являющееся линейным пространством. Точное описание этого множества основано на априорной информации о решаемой задаче и включает тип особенностей и условие на их характеристики. Примеры конкретных множеств будут приведены ниже. Вместо точной правой части y известно y^δ: $\|y-y^\delta\|_{\mathbb{L}_2} \leqslant \delta$; уровень погрешности δ также известен. Предполагается существование точного (искомого) решения x^* данного уравнения. При этом непрерывность обратного оператора к оператору A не предполагается, т. е. решение уравнения (7) относится к классу некорректно поставленных задач [1–3]. Требуется определить характеристики особенностей функции x^* (например, количество и положение). Ясно, что и задача определения характеристик особенностей также некорректно поставлена. Отметим, что определение положения особенностей является нелинейной проблемой.

Скажем несколько общих слов относительно методов решения этих задач. Во всех известных нам случаях по функции y^δ конструируется регуляризованная функция x_λ^δ (при этом не всегда эта функция есть регуляризованное решение уравнения (7)). Здесь $\lambda > 0$ – параметр регуляризации; положение особых точек $s_k^{\lambda\delta}$ функции x_λ^δ аппроксимирует положение особенностей s_k. Обычно в качестве особых точек выступают либо нули этой функции, либо ее локальные экстремумы. В теоретических рассмотрениях, представленных в настоящем обзоре, используются экстремумы (иногда каждому s_k соответствует пара из близко расположенных максимума и минимума, по положению которых определяется аппроксимация к s_k). Должны быть указаны зависимость $\lambda = \lambda(\delta)$, обеспечивающая при достаточно малом δ определение неизвестного нам количества особенностей ℓ, сходимость $s_k^\delta = s_k^{\lambda(\delta)\delta}$ к s_k при $\delta \to 0$ и получение оценок величин $|s_k - s_k^\delta|$. Кроме того, важное значение будут иметь оценки других характеристик алгоритма (порог разделимости и т. д.), которые будут введены позже.

В настоящее время теоретически удалось исследовать класс методов регуляризации, который в классической теории некорректно поставленных задач называется методом средних функций (или усредняющих ядер). Задается усредняющая функция $\phi(t)$, порождающая регуляризирующее семейство функций $\phi_\lambda(t) = \phi(t/\lambda)$ с помощью масштабирования. Регуляризованная функция x_λ^δ обычно получается сверткой y^δ и регуляризирующего семейства функций $\phi_\lambda(t)$ (либо производной этой функции).

Перейдем к конкретному примеру задачи по выделению особенностей. Нам понадобится следующее определение. Пусть функция x дифференцируема за исключением конечного числа точек s_k, $k = 1, 2, \ldots, \ell$. Определим функцию x' для всех $s \neq s_k$ обычным образом и доопределим x' в точках s_k произвольно. Введем множество X функций x:

a) функция x имеет конечное ℓ (неизвестное) число разрывов первого рода в неизвестных точках $\{s_k\}_1^\ell$;

b) вне точек разрыва $\{s_k\}_1^\ell$ функция непрерывно дифференцируема, и в каждой точке разрыва существуют левые и правые конечные пределы производной; функции x, x' принадлежат $\mathbb{L}_2$.

Положим $Y = \mathbb{L}_2$; A – оператор вложения из X в Y. Требуется по функции y^δ: $\|y - y^\delta\|_{\mathbb{L}_2} \leqslant \delta$ определить число разрывов ℓ и аппроксимировать положения $\{s_k\}_1^\ell$ (иногда определяют величины скачков Δ_k, но, для простоты изложения, эта задача здесь обсуждаться не будет). Ясно, что рассматриваемая задача вкладывается в (7).

В качестве конкретного примера рассмотрим усредняющую функцию

$$\phi(t) = \begin{cases} \cos^2 \pi t/2, & t \in [-1, 1], \\ 0, & t \notin [-1, 1]. \end{cases} \tag{8}$$

Введем семейство функций $\phi_\lambda(t) = \phi(t/\lambda)$, зависящих от параметра $\lambda > 0$, и положим

$$x_\lambda^\delta(s) = \frac{d}{ds}\left(\int_{-\infty}^{\infty} y^\delta(t)\,\phi_\lambda(s-t)\,dt\right). \tag{9}$$

Следующее утверждение объясняет, почему положения локальных экстремумов функции $x_\lambda^\delta(s)$ аппроксимируют разрывы s_k.

Лемма 1. *Пусть функция x удовлетворяет условиям a)–b). Тогда для любых λ, $\delta > 0$ имеет место представление*

$$x_\lambda^\delta(s) = \sum_{k=1}^{\ell} \Delta_k \cdot \phi_\lambda(s - s_k) + \alpha_\lambda(s) + \Delta x_\lambda^\delta(s), \tag{10}$$

где $\sup\limits_s |\alpha_\lambda(s)| \leqslant (\sqrt{3}/2)\lambda^{0.5}$, $\sup\limits_s |\Delta x_\lambda^\delta(s)| \leqslant (\pi/2)\delta\lambda^{-0.5}$.

Если δ мало, то при выборе подходящего параметра $\lambda = \lambda(\delta)$ второе и третье слагаемые в этом представлении будут также малы. Кроме того, поскольку ϕ_λ финитна и сосредоточена на отрезке $[-\lambda, \lambda]$, то можно ожидать, что локальные максимумы s_k^δ функции x_λ^δ достигаются в окрестности точек $\{s_k\}_1^\ell$.

Приведем идею метода (подробнее см. [36]). Рассмотрим отрезки, на которых модуль функции x_λ^δ больше некоторого порога P. На каждом из этих отрезков найдем положение точки максимума s_k^δ. Количество отрезков дает число разрывов ℓ, а s_k^δ аппроксимирует точки разрыва s_k, $k = 1, 2, \ldots, \ell$.

Сначала приведем теорему сходимости для конкретной функции x^*. Из результатов работы [36]) следует

Теорема 1. *Пусть функция x^* удовлетворяет условиям a)–b). Тогда существуют порог P, константа $K = K(x^*)$ и величина $\delta_0 = \delta_0(x^*) > 0$ такие, что для всех $\delta < \delta_0$, $\|y - y^\delta\|_{\mathbb{L}_2} \leqslant \delta$ при связи параметров $\lambda = K \cdot \delta^2$ метод определяет число разрывов ℓ и справедлива оценка $|s_k^\delta - s_k| \leqslant K \cdot \delta^2$.*

Обычно утверждение, подобное теореме 1, можно считать вполне удовлетворительным с точки зрения обоснования метода. Но для рассматриваемых здесь задач это не так. Дело в том, что константы K, δ_0, участвующие в теореме, зависят от функции x^*. При этом на всем классе функций x^*, удовлетворяющих условиям a)–b), например, минимум $\delta_0(x^*)$ равен нулю. В практической задаче δ фиксировано, и нет гарантии, что теорема 1 применима и проверить ее применимость нельзя.

Не меняя обозначений, усилим условия a)–b).

a) Функция x имеет конечное ℓ (неизвестное) число разрывов первого рода $(0 < \ell < L)$ в неизвестных точках $\{s_k\}_1^\ell$; L – известно.

b) Вне точек разрыва $\{s_k\}_1^\ell$ функция непрерывно дифференцируема, и в каждой точке разрыва существуют левые и правые конечные пределы производной; функции x, x' принадлежат $\mathbb{L}_2$, $\|x\| \leqslant r$ и $\|x'\| \leqslant r$.

В условии b) число r без ограничения общности можно считать единицей, что мы и будем делать в дальнейшем. Такое усиление условий традиционно и, по-видимому, не должно вызывать вопросов. Но для данных задач этого недостаточно, приходится вводить два неклассических условия.

c) Существует число $\Delta^{\min} > 0$ такое, что величины скачков Δ_k удовлетворяют неравенствам

$$\Delta^{\min} \leqslant \min\{|\Delta_k| : k = 1, 2, \ldots, \ell\}.$$

d) Существует число $\widehat{h} > 0$ такое, что

$$\min_{k \neq j} |s_k - s_j| \geqslant \widehat{h}.$$

На множестве (классе) $\mathfrak{M}$ функций, удовлетворяющих условиям a)–d), уже можно получить гораздо более удовлетворительную теорему [36], по сравнению с теоремой 1, в которой константы K и δ_0 не зависят от x^*. Введем число $\delta_0 > 0$ (в [36] указано явное выражение) и функцию $K(\delta)$, определенную при $\delta \leqslant \delta_0$:

$$K(\delta) = \frac{\Delta^{\min} - \sqrt{(\Delta^{\min})^2 - 4\sqrt{3}\pi\delta}}{2\sqrt{3}\delta} = \frac{\pi}{(\Delta^{\min})^2} + O(\delta).$$

Теорема 2. *Пусть функция $x^* \in \mathfrak{M}$. Тогда существуют порог P и величина $\delta_0 > 0$ такие, что для всех $\delta \leqslant \delta_0$ при связи параметров $\lambda = K(\delta) \cdot \delta^2$ алгоритм определяет число точек разрыва ℓ и для найденных приближений s_k^δ справедлива оценка $|s_k^\delta - s_k| \leqslant K(\delta) \cdot \delta^2$.*

На классе функций $\mathfrak{M}$ для метода П можно стандартным образом определить понятия оптимальности и оптимальности по порядку. Таким образом, на классе $\mathfrak{M}$ можно говорить о методе, обеспечивающем наилучшую (или почти наилучшую) оценку точности аппроксимации положения особенностей.

Определение 1. *Пусть для метода* Π *функция* $\tau(\mathfrak{M}, \Pi, \delta)$ *такова, что для всех* $x^* \in \mathfrak{M}$ *выполнено неравенство* $|s_k^\delta - s_k| \leqslant \tau(\mathfrak{M}, \Pi, \delta)$. *Величину*

$$\widehat{\tau}(\mathfrak{M}, \delta) = \min_{\Pi} \tau(\mathfrak{M}, \Pi, \delta)$$

назовем оптимальной точностью восстановления особенностей на классе функций $\mathfrak{M}$. *Метод* Π *назовем оптимальным (оптимальным по порядку) на классе* $\mathfrak{M}$, *если* $\widehat{\tau}(\mathfrak{M}, \delta) = \tau(\mathfrak{M}, \Pi, \delta)$ *(существует константа* $R > 1$ *такая, что* $\tau(\mathfrak{M}, \Pi, \delta) \leqslant R\widehat{\tau}(\mathfrak{M}, \delta)$*).*

В разделе 1 настоящей работы упоминалось, что, кроме оценки точности положения особенностей, прикладников в не меньшей степени интересуют и другие свойства алгоритмов аппроксимации особенностей. В частности, для особенностей типа δ-функций необходимо формализовать проблему разделения близких пиков; необходимо формализовать понятие «величины» особенности, которая может быть выделена алгоритмом. На все эти вопросы предыдущая теорема ответа не дает.

На том же самом примере продемонстрируем наиболее простой путь формализации этих понятий через ослабление неклассических условий $c) - d)$. Элементарные примеры показывают, что совсем обойтись без этих условий нельзя, поскольку в условиях приближенных данных нельзя, например, разделить очень близкие особенности, так же как не могут быть выделены особенности меньше некоторой величины. Мы приходим к понятиям порога разделимости и порога обнаруживаемости.

Впервые в статистической постановке в [8–9] было введено понятие *разрешающей способности прибора* как расстояния между особенностями типа δ-функций, на котором эти особенности не могут быть разделены никаким методом (решалось интегральное уравнение Фредгольма первого рода). В этих работах указан способ оценки снизу этой величины. Насколько известно авторам, это первый теоретический результат в этой проблематике. Термин «разрешающая способность прибора» кажется авторам слишком специальным. Предлагается заменить его на термин «порог разделимости».

Начнем с введения порога разделимости для конкретного метода [35], а затем введем детерминированный аналог [8–9] порога разделимости. Рассмотрим модификацию условий $c) - d)$.

$c')$ Существует положительная функция $\Delta^{\min}(\delta)$ такая, что справедливы неравенства

$$0 < \Delta^{\min}(\delta) \leqslant \min\{|\Delta_k| : k = 1, 2, \ldots, \ell\}.$$

$d')$ Существует положительная функция $h(\delta)$ такая, что

$$\min_{k \neq j} |s_k - s_j| \geqslant h(\delta).$$

Обозначим через $\mathfrak{M}_1$ множество функций, удовлетворяющих условиям a)–c).

Теорема 3. *Пусть функция* $x^* \in \mathfrak{M}_1$ *и выполнено условие* d') *с функцией* $h(\delta) = 4K(\delta)^{0.5}\delta = \dfrac{4\pi}{\Delta^{\min}}\delta + o(\delta)$. *Тогда существуют порог* P *и величина* $\delta_0 > 0$ *такие, что для всех* $\delta \leqslant \delta_0$ *при связи параметров* $\lambda = K(\delta) \cdot \delta^2$ *алгоритм определяет число точек разрыва* ℓ *и для найденных приближений* s_k^δ *справедлива оценка* $|s_k^\delta - s_k| \leqslant K(\delta) \cdot \delta^2$.

Определение 2. *Для метода* Π *назовем минимальную функцию* $h(\mathfrak{M}_1, \Pi, \delta)$, *которую можно поставить в условии* d'), *порогом разделимости данного алгоритма* Π *на классе функций* $\mathfrak{M}_1$.

Определение 3. *Величину* $\widehat{h}(\mathfrak{M}_1, \delta) = \min\limits_{\Pi} h(\mathfrak{M}_1, \Pi, \delta)$ *назовем порогом разделимости задачи на классе функций* $\mathfrak{M}_1$. *Метод* Π *назовем* P*-оптимальным* (P*-оптимальным по порядку*) *на классе* $\mathfrak{M}_1$, *если* $\widehat{h}(\mathfrak{M}_1, \delta) = h(\mathfrak{M}_1, \Pi, \delta)$ (*существует константа* $R > 1$ *такая, что* $h(\mathfrak{M}_1, \Pi, \delta) \leqslant R\widehat{h}(\mathfrak{M}_1, \delta)$).

Таким образом в теореме 3 установлена оценка сверху порога разделимости для задачи

$$\widehat{h}(\mathfrak{M}_1, \delta) \leqslant 4K(\delta)^{0.5}\delta = \frac{4\pi}{\Delta^{\min}}\delta + o(\delta).$$

Существует аналог теоремы 3 на классе функций $\mathfrak{M}_2$, удовлетворяющих условиям a)–b), d) (с конкретной функцией $\Delta^{\min}(\delta)$). Аналогично определяются понятия *порога обнаружения* для данного метода Π, для задачи и понятия О-оптимальности (О-оптимальности по порядку) на классе функций $\mathfrak{M}_2$. Для экономии места опустим соответствующие определения.

Заметим, что иногда (в зависимости от задачи и от метода) условия c') и d') можно ввести одновременно и рассматривать задачу на классе функций a)–b). Однако в приведенном выше примере разделимость и обнаруживаемость связаны и этого сделать нельзя. Оценки сверху и снизу для величин $\widehat{\tau}(\mathfrak{M}, \delta)$, $\widehat{h}(\mathfrak{M}_1, \delta)$ для широкого класса методов аппроксимации особенностей приведены в следующих подразделах. Из них, в частности, следует, что обсуждаемый в примере метод является оптимальным по порядку на классе $\mathfrak{M}$.

2.2. Методы аппроксимации характеристик особенностей

Обзор начнем с методов, для которых были получены оценки сверху точности определения положения особенностей и порога разделимости.

В большом цикле работ [28–33] для конкретного метода были получены оценки сверху точности локализации особенностей. Итог был подведен в [33]; упомянем также [34], где решалась задача с нелинейным оператором A

в уравнении (7). Кроме задачи выделения разрывов первого рода, обсуждаемой в подразделе 2.1, были рассмотрены еще две задачи. Первая из них отличается от задачи из подраздела 2.1 тем, что оператор A в (7) являлся интегральным оператором Фредгольма типа свертки. В другой задаче оператор A в (7) также являлся интегральным оператором Фредгольма типа свертки, а множество X включало δ-функции и удовлетворяло следующим условиям:

a') функция $x(s) = \overline{x}(s) + \sum_{k=1}^{\ell} \Delta_k \delta(s - s_k)$, число ℓ – неизвестно $(0 < \ell < L)$, L – известно;

b') функция $\overline{x}$ и ее производная $\overline{x}'$ принадлежат $\mathbb{L}_2$ и $\|\overline{x}'\| \leqslant 1$.

Кроме того, для функции x должны были выполняться условия $c), d)$ из подраздела 2.1. Обозначим все три задачи соответственно I, II, III.

Для решения этих задач была предложена общая схема, позволяющая определять характеристики особенностей ℓ, $\{s_k\}$, $\{\Delta_k\}$ единым образом. Вместо функций $\phi(t)$, $x^\delta_\lambda(s)$ в (8), (9) использовались соответственно функции

$$\psi^B(s) = \frac{\operatorname{sign} s}{\pi} \int_{B|s|}^{2B|s|} \frac{\sin \xi}{\xi}\, d\xi,$$

$$x^B_\delta(s) = \sum_{k=1}^{\ell} \Delta_k \cdot \psi^B(s - s_k) + \alpha^B(s) + \Delta x^B_\delta(s). \tag{11}$$

Здесь s_k – положения особенностей, B – параметр регуляризации, для второго и третьего слагаемых имеются оценки. Сумма в правой части (11) такова, что каждому положению s_k отвечает один максимум и один минимум и по их положению однозначно восстанавливается положение s_k. Второе и третье слагаемые вносят некоторую погрешность в определение s_k, но при малой величине δ и при подходящем выборе параметра регуляризации $B = B(\delta)$ эта погрешность мала. На классах $a)$–$d)$ для задач I и II и на классе $a')$–$b')$, $c)$–$d)$ для задачи III были получены оценки $|s^\delta_k - s_k|$, где s^δ_k – найденные приближения к положению особенностей.

Под влиянием работ [8–9] для метода, описанного выше, в работе [35] были введены детерминированные аналоги порога разделимости для метода и порога разделимости в задаче I. Для порога разделимости метода была получена оценка сверху $\widehat{h}(\mathfrak{M}_1, \delta) \leqslant (3/\pi)\delta^{0.5}$.

Следующее важное продвижение было сделано в работе [36]. Для задачи I был построен целый класс регуляризующих методов, определяемых функцией ϕ, которая удовлетворяет условиям:

$i)$ $\phi \in W^1_2$;

$ii)$ $\sup\limits_{t\in[-1,1]} |\phi(t)| = \phi(0) = 1$;

iii) для всех $t \notin [-1,1]$ имеем $|\phi(t)| \leqslant C/|t|$, C – константа;

iiii) $\sup\limits_{t\in[-1,1]} |\phi(t)| - \sup\limits_{t\notin[-1,1]} |\phi(t)| = a > 0.$

Примером функций, удовлетворяющих этим условиям, в частности, могут служить следующие функции:

$$\phi_1(t) = \frac{\sin t}{t}, \quad \phi_2(t) = \begin{cases} \cos^2 \pi t/2, & t \in [-1,1], \\ 0, & t \notin [-1,1], \end{cases} \quad \phi_3[\sigma](t) = \exp\left(-\frac{t^2}{2\sigma}\right),$$

где $\sigma > 0$ – параметр.

Пример, приведенный в предыдущем подразделе, получается при построении усредняющей функции с использованием ϕ_2.

Введем параметр $\delta_0 = (a \cdot \Delta^{\min})^2/(16A)$, где A – константа, зависящая от функции ϕ, и две функции, определенные при $\delta \leqslant \delta_0$,

$$K(\delta) = \left(\frac{2A_1}{a \cdot \Delta^{\min}}\right)^2 + O(\delta), \quad h(\delta) = \frac{8A_1}{a \cdot \Delta^{\min}}\delta + o(\delta),$$

A_1 – константа, зависящая от функции ϕ.

Теорема 4. *Пусть функция $x^* \in \mathfrak{M}$; функция ϕ удовлетворяет условиям i)–iiii). Тогда существует δ_0, что для всех $\delta \leqslant \delta_0$ при связи параметров $\lambda = K(\delta)\cdot\delta^2$ и выполнении условия d′) справедлива оценка $|s_k^\delta - s_k| \leqslant K(\delta)\cdot\delta^2$.*

Заметим, что, как будет ясно из результатов следующего подпункта, в условиях приближенных данных на классе функций $\mathfrak{M}$ для задачи I добиться лучшего порядка аппроксимации положений разрывов, чем $C\delta^2$, нельзя, т. е. построенные методы являются оптимальными по порядку.

2.3. Оценки снизу

Начнем с оценок точности локализации положений особенностей. Затем рассмотрим приемы получения оценок снизу для разделимости.

Изложим основную идею получения оценок снизу в абстрактной формулировке для уравнения (7). Обозначим через $\mathfrak{M}$ класс функций x, удовлетворяющих условиям *a*)–*d*). Возьмем функцию $x(s) \in \mathfrak{M}_1$, имеющую хотя бы один разрыв. Подберем такое $\Delta s > 0$, что $\|Ax^\pm - Ax\| \leqslant \delta$, где $x^\pm \equiv x(s \pm \Delta s)$. Ясно, что $x^\pm \in \mathfrak{M}$.

Возьмем и зафиксируем метод П. Пусть по функции x для уровня погрешности δ метод выдаст величины s_i^δ. Поскольку в качестве точной функции можно взять (приближенная функция есть x) две функции $x^\pm$, то справедливо неравенство

$$\tau(\mathfrak{M}, \Pi, \delta) \equiv \sup_{x^*\in\mathfrak{M}} \sup_{\|x^*-x^\delta\|\leqslant\delta} \sup_i |s_i - s_i^\delta| \geqslant \Delta s.$$

Поскольку метод П произвольный, то эта же оценка справедлива для порога точности: $\widehat{\tau}(\mathfrak{M},\delta) \geqslant \Delta s$. В частности, выбирая подходящую функцию x, можно доказать следующее утверждение.

Предложение 1. *Для задачи* I *справедлива оценка*

$$\widehat{\tau}(\mathfrak{M},\delta) \equiv \min_{\Pi} \tau(\mathfrak{M},\Pi,\delta) \geqslant \left(\frac{\delta}{\Delta^{\min}}\right)^2.$$

По аналогии с конструкцией в [8,9], перейдем к оценке порога разделимости снизу в детерминированной постановке. Изложим основную идею получения оценок снизу в абстрактной формулировке для уравнения (7). Обозначим через $\mathfrak{M}_1$ класс функций x, удовлетворяющих условиям a)–c). Возьмем функцию $x(s) \in \mathfrak{M}$, имеющую один разрыв s_1^1. Подберем функцию $\widehat{x}(s) \in \mathfrak{M}_1$, имеющую два разрыва s_1^2, s_2^2 и такую, что $\|Ax - A\widehat{x}\| \leqslant \delta$ (разрывы s_1^2, s_2^2 должны неизбежно быть близки друг к другу и к разрыву s_1^1).

Возьмем и зафиксируем метод П, которому соответствует порог разделимости $h(\mathfrak{M}_1,\Pi,\delta)$ в условии d'):

$$\min_{k\neq j} |s_k - s_j| \geqslant h(\mathfrak{M}_1,\Pi,\delta).$$

Пусть по функции x для уровня погрешности δ метод выдаст величину количества разрывов ℓ_1. Поскольку в качестве точной и приближенных функций можно взять функцию x, то должно быть $\ell_1 = 1$. С другой стороны, в качестве точной можно рассматривать функцию $\widehat{x}$, а в качестве приближенной функции функцию x. Это значит, что для функции $\widehat{x}$ условие d') должно нарушаться, т. е. справедливо неравенство $h(\mathfrak{M}_1,\Pi,\delta) \geqslant |s_1^2 - s_2^2|$. Поскольку метод произвольный, то это неравенство должно выполняться для порога разделимости задачи. В частности, выбирая подходящую функцию x, можно доказать следующие утверждения.

Предложение 2. *Для решения задачи* I *справедлива оценка*

$$\widehat{h}(\mathfrak{M}_1,\delta) \equiv \min_{\Pi} h(\mathfrak{M}_1,\Pi,\delta) \geqslant (\delta/\Delta^{\min})^2.$$

Пусть уравнение (7) является уравнением типа свертки с ядром $K(t)$ и для него выполнено следующее условие:

e) существуют производные $K'(t)$, $K''(t)$, $K'''(t)$, принадлежащие $\mathbb{L}_2$.

Предложение 3. *Для решения задачи* III *при выполнении условия* e) *справедлива оценка*

$$\widehat{h}(\mathfrak{M}_1,\delta) \equiv \min_{\Pi} h(\mathfrak{M}_1,\Pi,\delta) \geqslant C\sqrt{\delta} + O(\sqrt{\delta}),$$

C *– константа.*

Литература

1. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1974.

2. Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П. Теория линейных некорректных задач и ее приложения. М.: Наука, 1978.

3. Vasin V. V., Ageev A. L. Ill-Posed Problems with A Priori Information. Utrecht, the Netherlands: VSP, 1995.

4. Vasin V. V. Some approaches to reconstruction of nonsmooth solutions of linear ill-posed problems // J. Inverse Ill-Posed Probl. 2007. Vol. 15, № 6. P. 625–643.

5. Гончарский А. В., Черепощук А. М., Ягола А. Г. Численные методы решения обратных задач астрофизики. М.: Наука, 1978.

6. Сизиков В. С. Математические методы обработки результатов измерений. СПб.: Политехника, 2001.

7. Теребиж В. Ю. Введение в статистическую теорию обратных задач. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005.

8. Козлов В. П. О разрешающей способности спектральных приборов. I. Постановка задачи и критерий разрешения // Оптика и спектроскопия. 1964. Т. 16, № 3. С. 501–506.

9. Козлов В. П. О разрешающей способности спектральных приборов. II. Обобщенная разрешающая сила спектрального прибора // Там же. Т. 17, № 2. С. 278–283.

10. Теребиж В. Ю. Восстановление изображений при минимальной априорной информации // Успехи физ. наук. 1995. Т. 165, № 2. С. 143–176.

11. Babanov Yu. A., Vasin V. V., Ageev A. L. et al. A new interpretation of EXAFS spectra in real space. 1. General formalism // Phys. Status Solidi. 1981. Vol. 105, № 3. P. 747–754.

12. Бескачко В. П., Ватолин Н. А., Ухов В. Ф. и др. Расчет функции радиального распределения жидкости по дифракционным данным методом регуляризации // Докл. АН СССР. 1979. Т. 245, № 4. С. 863–865.

13. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: Изд-во иностр. лит., 1950.

14. Stern E. A. Theory of the extended X-ray absorption fine structure techniques // Phys. Rev. 1974. Vol. B10. P. 3027–3037.

15. Sayers D. E., Stern E. A., Lytle F. W. New teqhnique for investigation noncrystalline structure: Fourier analysis of extended X-ray absorption fine structure // Phys. Rev. Lett. 1971. Vol. 27. P. 1204–1207.

16. Zayarnaya T. Ye., Reich T., Hennig C. et al. Application of the Tikhonov regularisation method to the EXAFS analysis of $UO_2(H_2AsO_4)_2 \times H_2O$ // Speciation, Techniques and Facilities for Radioactive Materials at Synchrotron Light Sources: Workshop Proc. Grenoble, France, Sept. 2000, print. OECD 2002 Publ., 75775 Paris Cedex 16, France. P. 359–366.

17. Babanov Yu. A., Zayarnaya T. Ye., Reich T. et al. EXAFS study of U(VI) compounds: a new approach to data analysis // Ibid. P. 105–116.

18. Агеев А. Л., Антонова Т. В., Райх Т. Е. и др. Метод разделяющих функционалов при расшифровке локальной атомной структуры // Матем. моделирование. 2004. Т. 16, № 10. С. 81–92.

19. Ageev A. L., Korshunov M. E., Reich T. Ye. et al. Regularization methods for analysis of EXAFS spectra of chemical complexes // J. Inverse Ill-Posed Probl. 2007. Vol. 15, № 8. P. 767–784.

20. Тычинский В. П. Микроскопия субволновых структур // УФН. 1996. Т. 166, № 11. С. 1219–1229.

21. Малла С. Вэйвлеты в обработке сигналов М.: Мир, 2005.

22. Введение в контурный анализ и его приложения к обработке изображений и сигналов / Ред. Я. А. Фурман. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002.

23. Агеев А. Л., Коршунов М. Е. Обработка изображений с выделением положения объектов // Теория управления и теория обобщенных решений уравнения Гамильтона–Якоби: Тр. международ. семинара CGS'05, 22–26 июня 2005 г., Екатеринбург. Екатеринбург, 2005. Т. 2. С. 61–65.

24. Агеев А. Л., Коршунов М. Е. Регулярные алгоритмы в задачах анализа радиолокационных изображений // Вычислительные методы и программирование. 2007. Т. 8. С. 275–285.

25. Костоусов В. Б., Костоусов А. В. Высокоточная навигация движущихся объектов по радиолокационным изображениям // Тр. Ин-та математики и механики (Динамические системы и проблемы управления). 2005. Т. 11, № 1. С. 139–148.

26. Kostousov V. B., Tarkhanov A. E. Estimation of binary images informativeness // Materials of the 14th Saint Petersburg Intern. Conf. on Integrated Navigation Systems. CSRI «Elektropribor», 2007. P. 248–249.

27. Перевалов Д. С. Исследование алгоритмов обнаружения и локализации объекта на изображении в условиях структурных искажений // Вычислительные технологии. (В печати.)

28. Антонова Т. В. Восстановление функции с конечным числом разрывов 1 рода по зашумленным данным // Изв. вузов. Математика. 2001. № 7. С. 65–68.

29. Antonova T. V. Recovery of function with finite number of discontinuities by noised data // J. Inverse Ill-Posed Probl. 2002. Vol. 10, № 2. P. 1–11.

30. Антонова Т. В. О решении уравнений 1 рода на классах разрывных функций // Проблемы теоретической и прикладной математики: Тр. 31-й Регионал. молодеж. конф. Екатеринбург: УрО РАН, 2000. С. 30–31.

31. Антонова Т. В. О решении нелинейных по параметру уравнений 1 рода на классах обобщенных функций // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 2000. Т. 40, № 6. С. 819–831.

32. Антонова Т. В. Решение нелинейных уравнений 1 рода на классах функций с разрывами / ИММ УрО РАН. Екатеринбург, 2000. 32 с. Деп. в ВИНИТИ 17.10.00, № 2639–В00.

33. Antonova T. V. Solving equations of the first kind on classes of functions with singularities // Proc. of the Steklov Inst. of Mathematics, Suppl. 1. 2002. P. S145–S189.

34. Ageev A. L., Antonova T. V. On solution of nonlinear with respect to parameter equation of the first kind on the class of discontinuous functions // J. Inverse Ill-Posed Probl. 1999. Vol. 7, № 1. P. 1–16.

35. Агеев А. Л., Антонова Т. В. О задаче разделения особенностей // Изв. вузов. Математика. 2007. № 11. С. 1–7.

36. Агеев А. Л., Антонова Т. В. Регуляризирующие алгоритмы выделения разрывов // Журн. вычисл. математики и матем. физики. (В печати.)

Статья поступила 09.01.2008 г.