

## ВИБІР ПАРАМЕТРА РЕГУЛЯРИЗАЦІЇ ЗА СПЕКТРОМ ПОХІДНОЇ У МЕТОДІ ТИХОНОВА

© Голдак Андрій., Сівєрс Володимир, 2007

Національний університет “Львівська політехніка”, кафедра інформаційно-вимірювальних технологій,  
вул. С. Бандери, 12, 79013, Львів, Україна

*Розглянуто новий спосіб вибору параметра регуляризації під час розв’язування рівнянь Фредгольма першого роду методом Тихонова. Здійснено порівняння запропонованого способу вибору параметра регуляризації з основними відомими способами вибору цього параметра, такими, як метод L-кривої та метод узагальненої перехресної перевірки.*

*Рассмотрен новый способ выбора параметра регуляризации при решении уравнений Фредгольма первого рода методом Тихонова. Выполнено сравнение этого способа выбора параметра регуляризации с основными известными методами выбора этого параметра, такими, как метод L-кривой и метод обобщенной перекрестной проверки.*

*The article is devoted to the new way of regularization parameter choosing in Tikhonov method applied to inverse problems of light scattering. The derivative spectrum of calculated solution is used as the criterion of the choosing. The suggested method was compared with such well-known regularization parameter choosing methods as L-curve and Generalized Cross Validation.*

**Вступ.** Інтенсивний розвиток технологій виготовлення матеріалів потребує вирішення нових проблем у вимірюванні параметрів порошкоподібних речовин. Особливо гострою є потреба у розвитку засобів вимірювання, придатних для автоматизації контролю технологічних процесів.

Зокрема, існує потреба у визначенні гранулометричного складу таких речовин: матеріалів порошкової металургії; цементів та матеріалів, що використовуються для виготовлення різноманітних будівельних сумішей та розчинів; сировини для лаків та фарб; подрібненого кам’яного вугілля, що використовується як сировина для теплових електростанцій тощо.

Одним з найперспективніших методів визначення гранулометричного складу є методи, що ґрунтуються на оптичних ефектах, а саме на використанні ефектів розсіяння світла частинками, що досліджуються [1].

Під час розв’язання задачі визначення фракційного складу порошкових речовин методами, що використовують ефекти розсіяння світла, виникає рівняння Фредгольма першого роду [2]:

$$\int_c^d K(\theta, a) \cdot \omega(a) \cdot da = I_s(\theta), \quad (1)$$

де  $K(\theta, a)$  – ядро інтегрального рівняння, що має зміст світла, розсіяного частинкою з характерним розміром  $a$

у координатний кут  $\theta$  сферичної системи координат,  $\omega(a)$  – функція густини розподілу розмірів частинок,  $I_s(\theta)$  – інтенсивність світла, розсіяного сукупністю частинок.

Одним з методів, що найширше застосовується для розв’язання цього рівняння, є метод регуляризації Тихонова. Рівняння (1) у методі Тихонова в операторній формі має вигляд [3, 4]

$$(\alpha L + A^* A) \omega_\alpha = A^* I, \quad (2)$$

де  $A$  – оператор, що відповідає інтегральному рівнянню (1),  $A^*$  – оператор, комплексно спряжений до оператора  $A$ ,  $\omega_\alpha$  – шукана функція, що відповідає  $\omega(a)$ ,  $I$  – відповідає  $I_s(\theta)$ , а оператор  $L$  – одинична матриця або визначений у вигляді [3]:

$$L\omega = \omega - \frac{d^2 \omega}{da^2}. \quad (3)$$

У цій статті розглядаються лише два зображення операторів регуляризації, а саме оператор виду (3) та оператор регуляризації у вигляді одиничної матриці.

Оскільки задача (1) є слабко зумовлена, то для одержання прийнятних розв’язків необхідно ввести певні додаткові критерії [3,4]. Як такі критерії пропонується використати спектр першої похідної одержаних розв’язків. Адже відомо [5], що вищі

гармоніки розв'язків рівняння (1) сходяться до точних значень повільніше ніж нижчі. Будемо шукати такий розв'язок у спектрі першої похідної, у якому вміст вищих гармонік є найменшим. У символічному вигляді запишемо це так:

$$\min \left( \max \left( F_i(\omega_\alpha) \mid \alpha_{\min} < \alpha < \alpha_{\max} \right) \right), \quad (4)$$

де  $F_i$  – значення  $i$ -ї гармоніки спектра  $F$  похідної розв'язку  $\omega_\alpha$ ,  $\alpha_{\min}$  та  $\alpha_{\max}$  – межі зміни параметра  $\alpha$ .

У виразі (4) параметр регуляризації  $\alpha$  лежить в певних межах. Ці межі також визначаються за допомогою введення певних додаткових умов. Для того, щоб звзвити межі зміни параметра регуляризації, використано модельні дослідження функціонала, описаного в [6], що має такий вигляд:

$$\frac{\|\omega_\alpha - \omega\|_{L_2}}{\|\omega\|_{L_2}}, \quad (5)$$

де  $\omega_\alpha$  – розв'язок рівняння (1) за певного значення параметра регуляризації,  $\omega$  – точне значення шуканого розв'язку. У [6] показано, що функціонал (5) має один мінімум. Оскільки згаданий функціонал є фактично аналогом відносної похибки у просторі  $L_2$ , то мінімум цього функціонала буде досягнутий при розв'язку  $\omega_\alpha$ , що є найближчим до точного  $\omega$  в просторі  $L_2$ . Розв'язку  $\omega_\alpha$  буде відповідати певне “оптимальне” значення параметра регуляризації. Значення цього параметра регуляризації та розв'язку, що йому відповідає, на нашу думку, є найкращим з усіх можливих за таких вхідних умов. Власне межі зміни параметра регуляризації встановлено за допомогою модельних досліджень, результати яких показано у наступному підрозділі.

**Модельовання та порівняння.** Для обчислення ядра інтегрального рівняння (1) використано банальну теорію Мі. Вважалось, що відзначається незалежне розсіяння світла частинками.

До  $\omega(a)$  з фізичних міркувань ставляться такі вимоги:  $\omega(a)$  визначена на проміжку від 0 до  $\infty$ , має скінченну кількість екстремумів; її значення не менші від нуля; вона обмежена згори деякою константою  $C$  та задовольняє умову нормування:

$$\int_0^\infty \omega(x) dx = 1. \quad (6)$$

Розподілами, що відповідають цим умовам, є, зокрема, розподіли Релея,  $\chi^2$ , Накагамі, гамма-розподіл тощо. У цій статті розподіл розмірів частинок порошкових речовин апроксимується розподілом Релея та розподілом  $\chi^2$ . Згадки про використання цих розподілів для апроксимації розподілу розмірів частинок можна зустріти у [7], для розподілу Релея, та у [8] для розподілу  $\chi^2$ .

Для наближення модельних досліджень до реальних використано не один фіксований вид розподілів Релея та  $\chi^2$ , а сім'ї цих розподілів. Ці сім'ї показано на рис. 1.

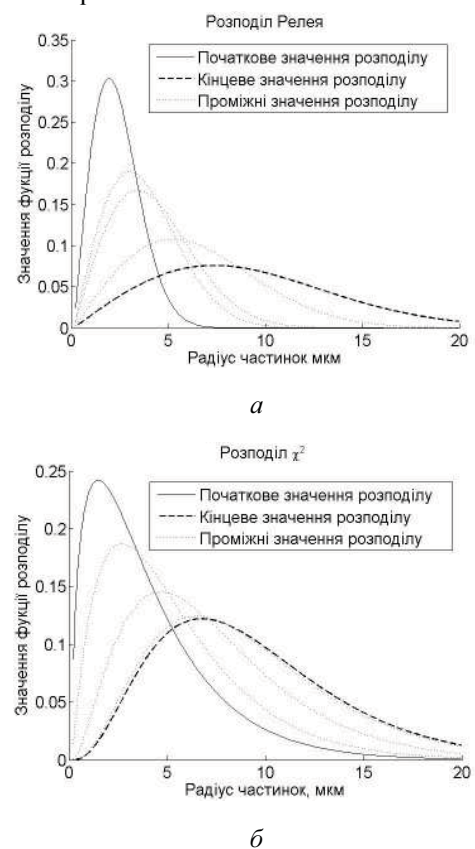


Рис. 1. Сім'ї розподілів Релея та  $\chi^2$

Для визначення меж, у яких лежать “найкращі” значення параметра регуляризації, тобто значення, за яких розв'язок  $\omega_\alpha$  є найближчим до шуканого, виконано такі модельні дослідження. Здійснювалась симуляція вимірювання індикатрисы розсіяного частинками світла та за відомого точного значення розв'язку рівняння (1), накопичувались значення параметра регуляризації  $\alpha$ , які мінімізують вираз (5) в кожному окремому випадку. Гістограма розкиду цих значень параметра регуляризації для обох операторів показана на рис. 2.

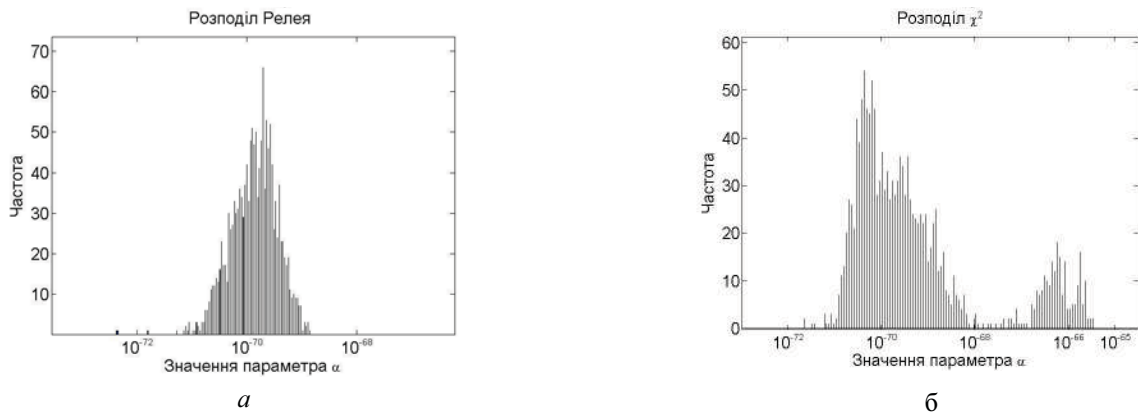


Рис. 2. Розкид оптимальних значень параметра регуляризації

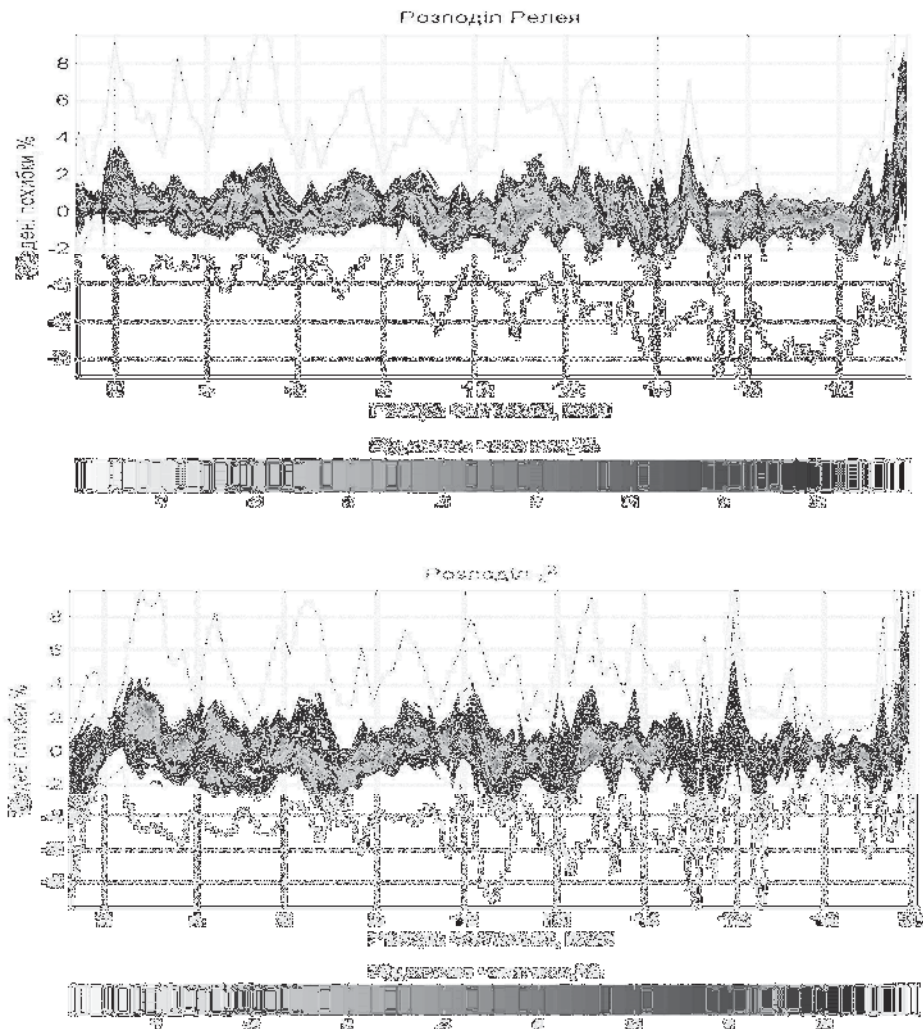


Рис. 3. Результати моделювання визначення  $\omega(\alpha)$  для сімей розподiлів Релея та з використанням параметра регуляризації за спектром похідної

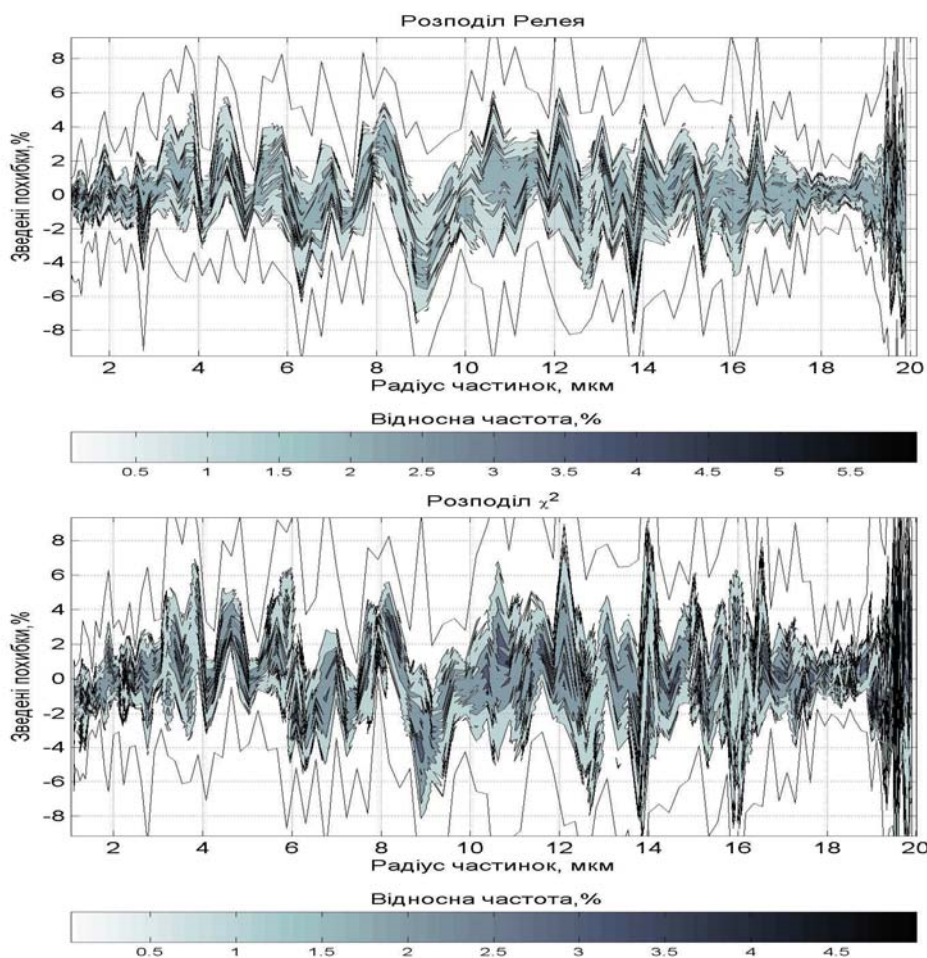


Рис. 4. Результати моделювання визначення  $\omega(a)$  для сімей розподілів Релея та  $\chi^2$  за допомогою методу L-кривої

З рис. 2 бачимо, що значення оптимальних параметрів регуляризації зосереджено у певних межах для обох розподілів. Для сім'ї розподілів Релея значення параметра регуляризації лежить у межах від  $10^{-69} - 10^{-71}$ , а для сім'ї  $\chi^2$  у межах від  $10^{-65} - 10^{-72}$ . Ці межі зміни параметра регуляризації використано для визначення розв'язків рівняння Фредгольма першого роду з використанням критерію (4). Подання результатів моделювання розв'язування рівняння (1) для сімей розподілів, на нашу думку, можливе лише у вигляді графіків похибок визначення  $\omega(a)$ . Найнаочнішими видаються похибки, обчислені за такою формулою:

$$v(a_j) = \frac{\bar{\omega}(a_j) - \omega_\alpha(a_j)}{\max(\bar{\omega}(a_j))} \cdot 100\%, \quad (7)$$

де  $\bar{\omega}(a_j)$  – точне значення функції  $\omega(a)$  на  $j$ -му вузлі,  $\omega_\alpha(a_j)$  – обчислене значення функції  $\omega(a)$  на  $j$ -му вузлі.

На рис. 3 показано результати моделювання визначення  $\omega(a)$  для сімей розподілів Релея та  $\chi^2$ . При фіксованому  $a$  по осі  $y$  ми бачимо межі, в які потрапляло значення  $\omega(a_i)$ , та їхню відносну частоту. Фактично за певного фіксованого значення розмірів частинок  $a$  ми маємо справу з гістограмою розкиду значень функції  $\omega(a_i)$  за фіксованого  $a$ . Замість звичної для гістограм частоти використано її відносні значення. Однаковими кольорами показано значення  $\omega(a)$ , що трапляються з однаковою відносною частотою.

Аналогічні моделювання виконано також з іншими методами вибору параметра регуляризації, такими як

от вибір параметра регуляризації за L-кривою [9, 10] та за УПП [11]. На рис. 4 показано результати таких моделювань у разі використання методу L-кривої. Результати, одержані з застосування методу УПП, зображено на рис. 5.

Порівнюючи рис. 3 та рис. 4 бачимо, що на рис. 3 для сім'ї розподілів Релея межі варіації значень похибки на проміжку від 1 до 10 мкм не перевищують  $\pm 2\%$  і лише близько значень радіуса частинок 2 та 5 мкм значення похибки досягають 4 %, а на проміжку від 10 до 20 мкм в межах приблизно від  $+2\%$  до  $-3\%$ .

Біля значень радіуса частинок 14 мкм та 15,5 мкм спостерігаються викиди до  $-4\%$ , а біля 15 мкм до

$+4\%$ . Близько 20 мкм, там, де значення  $\omega(a)$  є невеликими, похибка змінюється у межах  $-2\%$  до  $+8\%$ .

На рис. 4 значення похибок лежать в межах від  $-4\%$  до  $+6\%$ . Викиди до  $-6\%$  спостерігаються близько 6 мкм, до  $-8\%$  близько 9 мкм та 14 мкм. Значення похибок близько 20 мкм лежать у межах  $\pm 8\%$ . На рис. 5 графік значень похибок для сімей розподілів Релея має зигзагоподібний характер. Ці значення лежить в межах приблизно  $\pm 4\%$  з викидами до  $-6\%$  біля 6 мкм, 9 мкм, 13 мкм, 14 мкм та 16 мкм, та до  $-8\%$  біля 20 мкм.

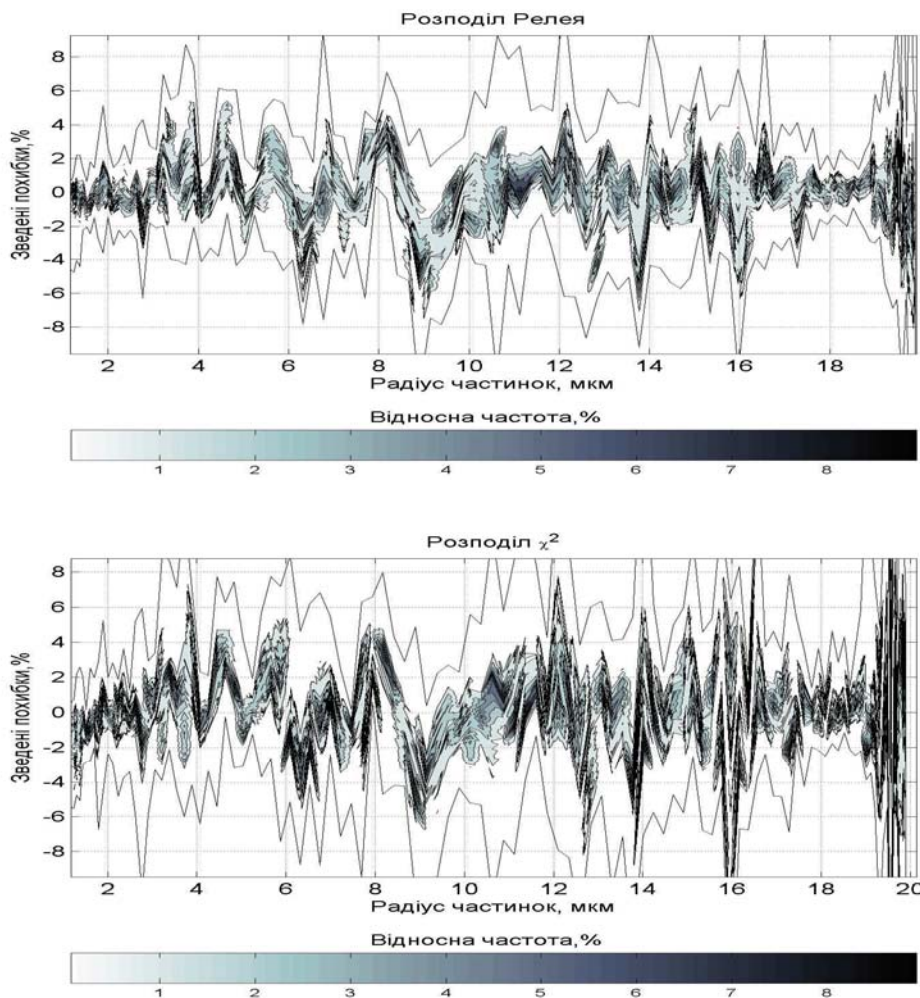


Рис. 5. Результати моделювання визначення  $\omega(a)$  для сімей розподілів Релея та  $\chi^2$  за допомогою методу узагальненої перехресної перевірки

Виконаємо аналогічні порівняння для сімейства розподілів  $\chi^2$  рис. 3, рис. 4 та рис 5. Значення похибок на рис. 3 лежать в межах  $\pm 4\%$  з викидами до  $+6\%$

біля 16 мкм та до  $-6\%$  біля 15 мкм та 16,4 мкм. На рис 4 межі значень похибок лежать в межах приблизно  $\pm 6\%$ . Викиди до  $-8\%$  спостерігаються біля 9 мкм,

13 мкм, 14 мкм, 16 мкм. На проміжку від 19 до 20 мкм значення похибок перевищують  $\pm 8\%$ . На рис. 5 значення похибок лежать в межах приблизно  $\pm 5$  мкм. Викиди до  $-6$  мкм спостерігаються біля мкм, 14 мкм, 16 мкм. На проміжку від 19 до 20 мкм значення похибок перевищують  $\pm 8\%$ .

Порівняння запропонованого способу вибору параметра регуляризації із згаданими вище методами підтверджує переваги вибору параметра регуляризації за спектром похідної.

**Висновки.** Запропоновано спосіб вибору параметра регуляризації у методі Тихонова та показано його переваги перед вибором параметра регуляризації за L-кривою та за УПП.

1. Голдак А. Я. Аналіз методів визначення розмірів частинок порошкоподібних матеріалів // *Методи та прилади контролю якості*. – № 16. – 2006. – С. 86 – 90. 2. Голдак А. Я., Шаповалов Г.О. Модель вимірювання розмірів порошкоподібних матеріалів // *Вимірювальна техніка та метрологія*. – №66. – 2006. – С. 94 – 99. 3. Тихонов А.Н. Арсенин В.Я. *Методы решения некорректных задач*. – М., 1979. – 285 с. 4. Бакушинский А. Б., Гончарский А. В. *Некорректные*

*задачи. Численные методы и приложения*. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1989. – 199 с. 5. Liu Y., Arnott W.P. and Hallett J. *Particle size distribution retrieval from multispectral optical depth: Influences of particle nonsphericity and refractive index* // *J. Geophys. Res.* – №104. – 1999. – P.31753 –31762. 6. Сизиков В.С. *Устойчивые методы обработки результатов измерений: Учебн. пос.* – СПб.: Спецальная литература, 1999. – 240 с. 7. Hwang S. I. Powers S. E. *Using Particle-Size Distribution Models to Estimate Soil Hydraulic Properties* // *Soil Science Society of America Journal*. – № 67. – 2003. – P.1103–1112. 8. Wax A., Yang C., Backman V., Kalashnikov M., Dasari R. R., Feld M.S. et al. *Determination of particle size by using the angular distribution of backscattered light as measured with low-coherence interferometry* // *J. Opt. Soc. Am.* – Vol. 19, No. 4 – April 2002. – P. 312–337. 9. Miller K. *Least squares methods for ill-posed problems with a prescribed bound* // *J. Math. Anal.* – 1970 – 1 – P. 52–74. 10. Lawson C. L., Hanson R. J. *Solving Least Squares Problems* – Philadelphia: SIAM, 1995. – P. 337. 11. Wahba G. *Spline Models for Observational Data*. – Philadelphia: SIAM, 1990. – P.180.