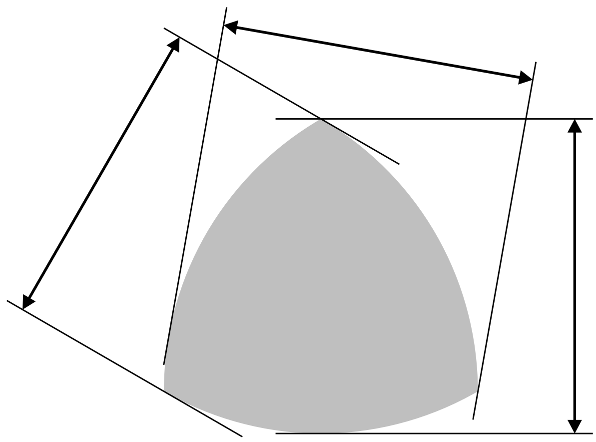
Inversio-ongelmista

Craig, Brown: *Inverse problems in astronomy*, Adam Hilger 1986.

Havaitaan oppositiossa olevaa asteroidia. Pyörimisestä huolimatta sen kirkkaus ei muutu. Projisoitu pinta-ala pysyy ilmeisesti vakiona. Onko asteroidi siis pyörähdyssymmetrinen?

Ei välttämättä, se voi olla esimerkiksi Reuleaux'n kolmio:



Vastaavat ongelmat ovat tähtitieteessä tavallisia, koska havaintogeometriaa ei voi juuri muuttaa.

Suora menetelmä

Konstruoidaan malli havaittavalle ilmiölle esimerkiksi simuloimalla sitä tietokoneella. Lasketaan, millaisia havaintoja saadaan, kun mallia kuvaaville parametreille annetaan tietyt arvot. Parametreja muutellaan, kunnes mallista lasketut havainnot vastaavat todellisia.

Ongelma: onko ratkaisu yksikäsitteinen?

Toinen ongelma: ratkaisun stabiilisuus. Usein havaitaan integroitu suure, johon mallin parametrien suuretkin muutokset vaikuttavat vain vähän. Pienetkin havaintovirheet johtavat hyvin erilaisiin parametrien arvoihin.

Käänteinen menetelmä

Havainnoista lasketaan kohdetta kuvaavat parametrit. Usein matemaattisesti vaikeaa.

Havaintoprosessiin liittyy usein todellisen suureen integrointi, joten informaatiota häviää. (Tieto, että $x + y = 1$, ei kerro mitään luvuista x ja y).

Integrointi on tasoittava operaatio, johon integroitavan pienet häiriöt eivät juuri vaikuta. Käänteinen operaatio vaatii aina jonkinlaista derivointia, joka puolestaan vahvistaa häiriöitä. Siksi pienistä havaintovirheistä voi aiheutua suuria virheitä havainnoista johdettuun malliin.

Integraaliyhtälöt

Mitatun suureen g ja määritettävän ominaisuuden välillä f pätee usein yhtälö

$$g(x) = \int_a^b \mathcal{K}(x,t) f(t)\,dt.$$

Tämä on Fredholmin ensimmäisen lajin integraaliyhtälö. Toisen lajin yhtälö on

$$f(x) = g(x) + \lambda \int_a^b \mathcal{K}(x,t) f(t)\,dt.$$

Integrointirajat ovat kiinteät. Jos integrointiväli riippuu x:stä, saadaan Volterran ensimmäisen ja toisen lajin integraaliyhtälöt.

Jos toisen lajin yhtälöissä λ on pieni, funktiot f ja g ovat likimain samoja, ja integraalitermi kuvaa pientä häiriötä. Yhtälö voidaan silloin ratkaista iteroimalla. Aluksi voidaan valita esim. $f_0 = g$.

$$f_{k+1}(x) = g(x) + \lambda \int \mathcal{K}(x,t) f_k(t)\,dt.$$

Menetelmä ei toimi, jos λ on suuri. Silloin alkuperäisen funktion osuus jää pieneksi ja hallitsevaksi tulee integraalin tasoittava vaikutus. Yhtälö lähenee tällöin ensimmäisen lajin yhtälöä.

Hankalimman tapauksen muodostavat Fredholmin ensimmäisen lajin yhtälöt. Diskreetissä tapauksessa tällaiset yhtälöt voidaan kirjoittaa matriisimuotoon

$$\mathbf{g} = \mathbf{H}\mathbf{f}.$$

Esimerkiksi kuvankäsittelyssä $\mathbf{H}$ on oleellisesti pistemäisen lähteen kuvan leviämistä esittävä funktio (PSF). Jos signaali pääsee laitteistosta lävitse muuttumattomana, $\mathbf{H}$ on yksikkömatriisi. Jos signaali leviää hiukan, $\mathbf{H}$ on nauhamatriisi, jossa nollasta poikkeavat alkiot sijaitsevat lävistäjällä ja sen lähistöllä. Mitä laajemmalle signaali leviää, sitä kauempaa $\mathbf{H}$:n lävistäjästä löytyy nollasta eroavia alkioita ja samalla lävistäjän alkiot pienenevät.

Kun signaali on täysin levinnyt, ovat matriisin $\mathbf{H}$ kaikki alkiot suunnilleen yhtäsuuria. Matriisi on siten lähes singulaarinen ja sen kääntäminen on erittäin epästabiili operaatio. Tämä vastaa myös tilanteen fysikaalista tulkintaa: signaalit ovat levinneet ja sekoittuneet toisiinsa niin pahasti, että alkuperäinen muoto ei enää ole lainkaan näkyvissä.

Esimerkki:
$$\int_0^1 (x+y)f(y)\,dy = x.$$
Jos tähän sijoitetaan yrite $f(y) = ay + b$, saadaan vasemman puolen arvoksi
$$\left(\frac{1}{2}a + b\right)x + \frac{1}{3}a + \frac{1}{2}b.$$
Jotta tämä olisi identtisesti x, täytyy valita $a = -6$ ja $b = 4$. Yhtälön ratkaisu on siten
$$f(y) = 4 - 6y.$$

Yritetään ratkaista yhtälö numeerisesti. Lasketaan integraali trapetsisäännöllä, jolloin integraali on

$$\begin{aligned}\frac{h}{2}\big[(x)f(0) + 2(x+h)f(h) + \cdots \\ + 2(x+(n-1)h)f((n-1)h) + (x+1)f(1)\big].\end{aligned}$$

Lauseke sisältää $n+1$ tuntematonta, nimittäin funktion f arvot $f(0)$, $f(h)$, …, $f(1)$. Yhtälö voidaan kirjoittaa erikseen eri x:n arvoille, jolloin saadaan riittävä määrä yhtälöitä näiden tuntemattomien ratkaisemiseksi.

Valitaan $h = 0.2$, jolloin tuntemattomia funktion arvoja on kuusi kappaletta. Käytetään x:n arvoja 0, 0.2, …, 1.

$$\frac{0.2}{2}\big[0 + 0.4f(0.2) + 0.8f(0.4) + 1.2f(0.6) + 1.6f(0.8) + f(1)\big] = 0,$$
$$\cdots$$
$$\frac{0.2}{2}\big[1 + 2.4f(0.2) + 2.8f(0.4) + 3.2f(0.6) + 3.6f(0.8) + 2f(1)\big] = 1$$

eli matriisimuodossa

$$\frac{0.2}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0.4 & 0.8 & 1.2 & 1.6 & 1.0 \\ 0.2 & 0.8 & 1.2 & 1.6 & 2.0 & 1.2 \\ 0.4 & 1.2 & 1.6 & 2.0 & 2.4 & 1.4 \\ 0.6 & 1.6 & 2.0 & 2.4 & 2.8 & 1.6 \\ 0.8 & 2.0 & 2.4 & 2.8 & 3.2 & 1.8 \\ 1.0 & 2.4 & 2.8 & 3.2 & 3.6 & 2.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(0) \\ f(0.2) \\ f(0.4) \\ f(0.6) \\ f(0.8) \\ f(1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.2 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.8 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Kerroinmatriisi on melkein singulaarinen. Ratkaisulla ei välttämättä ole mitään tekemistä todellisuuden kanssa.

Regularisointi

Singulaarinen matriisi liittyy tilanteeseen, jossa informaatiota on menetetty. Kadonnutta informaatiota ei pystytä palauttamaan, mutta matriisin kääntämistä voidaan kuitenkin yrittää saada stabiilimmaksi.

Regularisoinnin ideana on saada käännettävän matriisin lävistäjälle muita suurempia alkioita.

Kirjoitetaan edellä olleen esimerkin yhtälö muotoon

$$\lambda f(x) + \int_0^1 (x+y) f(y)\, dy = x,$$

missä regularisointiparametri λ on jokin positiivinen vakio. Kun tämä diskretoidaan samalla tavoin kuin edellä, saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{aligned}
\lambda f(0) + \frac{0.2}{2}\big[0 + 0.4f(0.2) + 0.8f(0.4) + {} \\
1.2f(0.6) + 1.6f(0.8) + f(1)\big] = 0, \\
\dots \\
\lambda f(1) + \frac{0.2}{2}\big[1 + 2.4f(0.2) + 2.8f(0.4) + {} \\
3.2f(0.6) + 3.6f(0.8) + 2f(1)\big] = 1.
\end{aligned}$$

Kerroinmatriisin lävistäjälle tulevat luvut ovat nyt parametrin λ verran suurempia. Häiriöalttius on pienempi, ja yhtälö voidaan ratkaista ilman ongelmia.

Kun λ on suuri, uusi yhtälö poikkeaa huomattavasti alkuperäisestä; samoin sen ratkaisu on kaukana alkuperäisen yhtälön ratkaisusta.

On ilmeisesti olemassa jokin regularisointiparametrin λ optimiarvo, jolla ratkaisu on mahdollisimman lähellä alkuperäisen yhtälön ratkaisua, mutta matriisin singulaarisuus ei ole vielä alkanut aiheuttaa omia häiriöitään.

Esimerkkitapauksen ratkaisut eri λ:n arvoilla:

λ	cond($\mathbf{H}$)	$f(0)$	$f(1)$
0.05	43	9.1	-5.6
0.01	123	4.3	-2.1
0.005	242	4.0	-1.9
0.001	1200	3.8	-1.8

Paras tulos saadaan, kun $\lambda = 0.005$. Suuremmilla vakion arvoilla yhtälö poikkeaa liikaa alkuperäisestä ja pienemmillä arvoilla kerroinmatriisi alkaa lähestyä singulaarista.

Yksi mahdollinen keino on muuntaa alkuperäinen tehtävä optimointiongelmaksi. Yhtälöllä $\mathbf{Hf} = \mathbf{g}$ ei välttämättä ole lainkaan ratkaisua, tai sen ratkaisu on hyvin herkkä havaintovirheille. Aina voidaan etsiä sellaisen ratkaisun f, joka antaa minimiarvon normille

$$\| \mathbf{Hf} - \mathbf{g} \| .$$

Jos kerroinmatriisi on singulaarinen, ratkaisu ei ole yksikäsitteinen. Tämä ongelma voidaan korjata regularisoinnilla minimoimalla esimerkiksi normia

$$\| \mathbf{Hf} - \mathbf{g} \|^2 + \lambda^2 \| \mathbf{f} \|^2 .$$

Tämän minimointitehtävän ratkaisuna saadaan sekä vektori $\mathbf{f}$ että parametri λ.