УДК621.396+681.511

Ю.Л. Забулонов, Г.В. Лисиченко, Л.А. Одукалец, Е.Г.Ревунова

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ИДЕНТИФИКАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ МЕТОДОМ ПОИСКА СООТВЕТСТВИЯ

Предложена модификация метода поиска соответствия направленная на повышение точности идентификации радионуклидов при определении содержания радионуклидов в объектах окружающей среды. Метод сочетает достоинства подходов разреженной аппроксимации и построения модели оптимальной сложности. Приведены результаты экспериментов, подтверждающие улучшение точности оценки параметров предложенным методом.

Задача надежного выявления и идентификации радиоактивных материалов осложняется флуктуациями естественного радиационного фона, низкими уровнями активности определяемых радионуклидов и неизвестным радионуклидным составом радиоактивных материалов. Целью данной работы является повышение точности идентификации радионуклидов в объектах окружающей среды методом поиска соответствия [1-3].

Постановка задачи. В рамках аппроксимационного подхода к определению содержания радионуклидов в объектах окружающей среды спектр рассматривается как суперпозиция функций отклика детектора на воздействия гамма-квантов с определенными энергиями [3]. Набор возможных воздействий известен, требуется определить, какие именно воздействия и с какими параметрами (активностями) сформировали наблюдаемый выход измерительной системы (спектр гамма излучения). Другими словами, по L парам данных вход-выход $D_L = \{(z_i,y_i)\}_{i=1,L}$, распределение вероятностей которых неизвестно, требуется установить отображение f**:** $Z\rightarrow Y$, согласующееся с множеством данных D_L. В задаче определения содержания радионуклидов из физических соображений известно, что отображение f (сигнал $f(z)$ на выходе измерительной системы) представимо линейной относительно параметров моделью:

$$f(\mathrm{z})=\sum_{j=1,\mu} \theta_j\ \varphi_j(z) + \varepsilon; \tag{1}$$

где z – независимая переменная (энергия гамма-квантов); $\varphi_j(z)$ – некоторая система функций (каждая функция – отклик детектора на воздействие гамма-квантов с определенной энергией), $\boldsymbol{\theta}=(\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_\mu)$ – параметры (весовые коэффициенты воздействий); ε – собственный шум измерительной системы, μ - общее число функций. При зашумленном векторе выхода $\mathbf{y}$ задача разреженной аппроксимации имеет следующий вид [4]:

$$\boldsymbol{\theta}^{*}=\min_{\theta} \|\boldsymbol{\theta}\|_0 \text{ при условии } \|\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\theta}\|_2\leq\delta, \tag{2}$$

δ – (малая) величина, пропорциональная норме вектора шума $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\mathbf{y}$ – вектор выхода (измеренный спектр), $\mathbf{X}$ – матрица входов (базисных функций).

Решение задачи разреженной аппроксимации получают методом поиска соответствия (МПС) (matching pursuit). Начиная с $\mathbf{f}_0=0$ ($\mathbf{f}_k \in \Re^L$), на (k+1)-м проходе вычисляют $\mathbf{f}_{k+1}=\mathbf{f}_k+\theta_{k+1}\boldsymbol{\varphi}_{k+1}$, выбирая $\boldsymbol{\varphi}_{k+1} \in \Re^L \subset \mathbf{X}$ и θ_{k+1}, минимизирующие квадрат нормы остатка:

$$(\theta_{k+1},\boldsymbol{\varphi}_{k+1}) = \mathrm{argmin}_{\theta\varphi} \|\mathbf{e}_k-\theta\boldsymbol{\varphi}\|^2,\ \mathbf{e}_k=\mathbf{y}-\mathbf{f}_k. \quad (3)$$

Достоинства МПС: оптимальность для некоторых типов базисов $\{\varphi\}$ [1]; низкая вычислительная сложность по сравнению с методами l_1-аппроксимации [4] и m-членным разложением [5]. Недостаток – неоптимальность при зашумленном $\mathbf{y}$.

При решении с помощью МПС разреженной ЗА с зашумленным y возникает проблема останова. Новым подходом к обеспечению оптимальности решения разреженной ЗА является применение теста Грибонваля [6] для проверки решения на оптимальность. Пусть $M=\|\boldsymbol{\theta}\|_0$, $\mathbf{e}=\mathbf{y}-\boldsymbol{\Phi\theta}$ – остаток при представлении $\mathbf{y}$ M-членной линейной моделью $\mathbf{y}=\sum_{i=1,M} \theta_i\boldsymbol{\varphi}_i+\mathbf{e}$, $|\mathbf{e}|_K = (\sum_{i\in K}|\langle \mathbf{e},\boldsymbol{\varphi}_i\rangle|^2)^{1/2}$ - сумма K наибольших скалярных произведений $\mathbf{e}$ со всеми $\boldsymbol{\varphi}_i$ словаря. Если

$$\mu(2M-1)<1,\ |\mathbf{e}|_1+|\mathbf{e}|_{2M} < 0.5(1-\mu(2M-1)) \min_i|\theta_i|, \quad (4)$$

то решение $\boldsymbol{\theta}^*=(\theta_1,\theta_2,...,\theta_M)$, i=1,…,M (i- индекс коэффициента) является решением с максимально возможной разреженностью и наименьшей ошибкой аппроксимации. Здесь $\mu(.)$ имеет вид:

$$\mu(M)=\sup_{card(I)\le M} \sup_{j\notin I} \sum_{i\in I} |\langle \boldsymbol{\varphi}_j,\boldsymbol{\varphi}_i\rangle|,\ \boldsymbol{\varphi}_i\in\boldsymbol{\Phi}\subset\mathbf{X},\ \|\boldsymbol{\varphi}_i\|_2=1. \quad (5)$$

где M – "разреженность", т.е. число членов в линейном разложении (1), $M\le N$; $i\in I$, i индексирует элементы подпространства, для всех возможных card(I)-членных разложений y (card(I)=1,...,M, i=1,...,card(I)); I – множество индексов функций, образующих подпространство; $card(I)\le M$ – означает, что мощность множества индексов (размерность подпространства) варьируется от 1 до M. Индекс i индексирует функции $\boldsymbol{\varphi}_i$ внутри подпространства ($i\in I$). Индекс j индексирует функции $\boldsymbol{\varphi}_j$ вне подпространства $j\notin I$.

Для преодоления недостатка метода поиска соответствий проявляющегося при наличии шума – необходимости задания порога на значение остатка для останова – предложено его модифицировать путем использования для останова теста Грибонваля, а при неприменимости теста Грибонваля – критерия выбора модели [7, 8].

А. На первом этапе ММПС необходимо определить (для рассматриваемого базиса), будет ли использоваться для останова тест Грибонваля либо критерий выбора модели. Для этого необходимо

Шаг А.1. Сформировать матрицу входов $\mathbf{X}\in\Re^{L\times N}$, $L<<N$: значения столбцов $\mathbf{X}(\cdot,i)$ сформировать из пронормированных по l_2 значений базисных функций $\boldsymbol{\varphi}_i$.
А.2. Для исходного набора базисных функций $\mathbf{X}$ вычислить функцию связности (5).

Поскольку при использовании теста Грибонваля проверять условие Грибонваля необходимо на каждом проходе, то целесообразно заранее вычислить значения функции связности для всех возможных M.

А.3. Проверить "условие связности базиса" $\mu(M)<1$ для M=1,...,0.5N. Если условие связности выполняется хотя бы для M=1 ($M\geq1$), в качестве критерия останова ММПС используется *тест оптимальной разреженности* Грибонваля (см. Б).

При невыполнении условия связности для останова используются *критерии выбора модели* (см. В).

Б. ММПС с остановом по тесту оптимальной разреженности Грибонваля.
Инициализировать $\mathbf{f}_0=0$, $\mathbf{R}_k=\mathbf{y}=(y_1,\ldots,y_L)$.
Шаг Б.1. В матрице входов $\mathbf{X}$, найти базисную функцию i, скалярное произведение вектора $\boldsymbol{\varphi}_i$ которой с вектором текущего остатка $\mathbf{R}_k$ максимально:

$$\gamma_k = \operatorname{argmax}_{\,i=1,\ldots,N} |\langle \mathbf{X}(\cdot,i),\mathbf{R}_k\rangle|; \tag{6}$$

γ_k – индекс базисной функции в матрице входов $\gamma_k\in\{1,\ldots,N\}$.
Б.2. Определить значение вектора параметров как
$\boldsymbol{\theta}_k=(\boldsymbol{\Phi}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi}_k)^{-1}\boldsymbol{\Phi}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_k$, где $\boldsymbol{\Phi}_k=\{\boldsymbol{\Phi}_{k\text{-}1}, \boldsymbol{\varphi}_{\gamma k}\}$.
Б.3. Вычислить новый вектор остатка $\mathbf{R}_{k+1} = \mathbf{R}_k - \theta\gamma_k\mathbf{X}(\cdot,\gamma_k)$.
путем вычитания из вектора остатка базисной функции с индексом γ_k ($\boldsymbol{\varphi}_k=\mathbf{X}(\cdot,\gamma_k)$) помноженной на соответствующий коэффициент $\theta\gamma_k = \boldsymbol{\theta}_k(\gamma_k)$.
Б.4. Вычислить $|\mathbf{R}|_1+|\mathbf{R}|_{2k}$.

$$|\mathbf{R}|_1 = |\mathbf{R}_{k+1}|_1 = (|\langle \mathbf{R}_{k+1},\boldsymbol{\varphi}_{\,i}\rangle|^2)^{1/2}, \tag{7}$$

$$|\mathbf{R}|_{2k} = |\mathbf{R}_{k+1}|_{2k} = (\textstyle\sum_{i\in I2k} |\langle \mathbf{R}_{k+1},\boldsymbol{\varphi}_i\rangle|^2)^{1/2},$$

где I_{2k} – множество индексов $2k$ наибольших скалярных произведений $|\langle \mathbf{R}_{k+1},\boldsymbol{\varphi}_i\rangle|$, $|\mathbf{...}|_{\mathrm{K}}$ – «норма» введенная Грибонвалем.
Б.5. Вычислить:

$$0.5(1-\mu(2k-1))\,\min_i|\theta_i|, \tag{8}$$

где i – индекс параметра, минимального по модулю; k – число отобранных базисных функций
Б.6. Проверить выполнение $|\mathbf{R}_{k+1}|_1+|\mathbf{R}_{k+1}|_{2k} < 0.5(1-\mu(2k-1))\,\min_i|\theta_i|$.

Если неравенство удовлетворяется, полученная k-членная линейная модель является решением с максимально возможной разреженностью и наименьшей ошибкой аппроксимации на основании теста оптимальной разреженности Грибонваля.

В противном случае продолжить формирование модели, перейдя на следующую итерацию – на шаг Б.1.

В. ММПС с остановом по критерию выбора модели

Инициализировать $\mathbf{f}_0=0$, $\mathbf{R}_k=\mathbf{y}=(y_1,\dots,y_L)$.

Шаг В.1. В матрице входов $\mathbf{X}$, найти базисную функцию i, скалярное произведение вектора $\boldsymbol{\varphi}_i$ которой с вектором текущего остатка $\mathbf{R}_k$ максимально.

$$\gamma_k = \operatorname{argmax}_{\,i=1,\dots,N} |\langle \mathbf{X}(\cdot,i),\mathbf{R}_k \rangle|; \tag{9}$$

γ_k – индекс базисной функции в матрице входов $\gamma_k\in\{1,\dots,N\}$,

В.2. Определить значение вектора параметров как: $\boldsymbol{\theta}_k=(\boldsymbol{\Phi}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi}_k)^{-1}\boldsymbol{\Phi}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_k$.

В.3. Вычислить новый вектор остатка $\mathbf{R}_{k+1}=\mathbf{R}_k-\theta\gamma_k\mathbf{X}(\cdot,\gamma_k)$.

В.4. Вычислить значение используемого критерия выбора модели $CR(k)$.

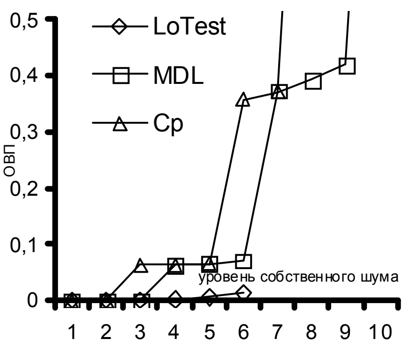
В.5. Произвести сравнение $CR(k)\geq CR(k-1)$.

Если неравенство удовлетворяется, то для выбранного критерия и метода перебора моделей полученная k-членная линейная модель является моделью оптимальной сложности при данном уровне шума выхода $\mathbf{y}$.

В противном случае продолжить формирование модели, перейдя на В.1.

Экспериментальное исследование модифицированного метода поиска соответствий. Соблюдение условия Грибонваля $\mu(2M-1)<1$ обеспечивается соответствующим выбором системы базисных функций. Поэтому нами было исследовано выполнение условия Грибонваля для различных типов БФ: гауссовских с разными дисперсиями, функции отклика детектора (ФОД) спектрометра Вектор. Гауссовские БФ представлены функциями вида $f_n(x)=\exp(-(x-c)^2)$; $c=d*n+o$ ($d=5$, $o=20$); $k_1=1/r^2=0.1$ и $k_2=1/r^2=0.2$.

Рассчитанная зависимость связности базиса μ от значения разреженности приведена на рис. 2.



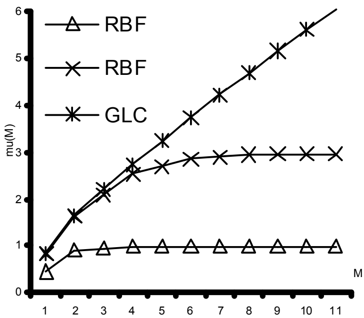


Рис. 1 Зависимость ОВП от УСШ

Рис. 2 Зависимость $\mu(\cdot)$ от разреженности (М) для различных БФ

Выявлено, что среди исследованных базисов только гауссовский (с k_2=0.2) удовлетворяют условию Грибонваля во всем диапазоне изменения значений разреженности.

Проведено экспериментальное сравнение точности восстановления вектора параметров в зависимости от уровня шума с помощью ММПС при останове по критериям выбора модели и по тесту Грибонваля. "Истинная" модель имела сложность s=4 и была сформирована линейной моделью (1) с РБФ (k_2=0.2, d=5, o=20), удовлетворяющим условию ($\mu(2M-1)<1$), и параметрами θ_1, θ_2, θ_3, θ_4. Тестовый сигнал искажался шумом возрастающей амплитуды 1.0–10.0. Зависимость ошибки вектора параметров (ОВП) от уровня собственного шума (УСШ) приведена на рис. 1. Выявлено следующее: до тех пор, пока сложность модели, полученной по критериям выбора модели, совпадает с истинной (уровень шума $\leq$ 3) $ОВП_{CR}$ мала и близка к $ОВП_G$ по тесту Грибонваля. Когда сложность модели становится меньше истинной (уровень шума >3), $ОВП_{CR}$ много больше, чем $ОВП_G$.

В следующем эксперименте исследуется поведение значений левой и правой частей неравенства теста Грибонваля в зависимости от сложности модели (числа базисных функций). В частности, чтобы применять тест Грибонваля для останова МПС, необходимо выяснить – является ли поведение частей неравенства при нарастании порядка модели (числа базисных функций) монотонным. И сохраняется ли монотонность при искажении данных выхода шумом возрастающей амплитуды. Соотношение структуры модели, полученной МПС с остановом по тесту Грибонваля, с истинной моделью также требует экспериментального исследования. Рассмотрим, как в эксперименте по исследованию зависимости ОВП от УСШ ведут себя левая и правая часть неравенства в тесте Грибонваля. Обозначим t_1– левую часть неравенства в тесте Грибонваля ($|\mathbf{e}|_1+|\mathbf{e}|_{2M}$) и t_2 - правую часть ($0.5(1-\mu(2M-1)) \min_i|\theta_i|$). Зависимость t_1 и t_2 от числа базисных функций вошедших в модель при различных уровнях шума приведены на рис.3.

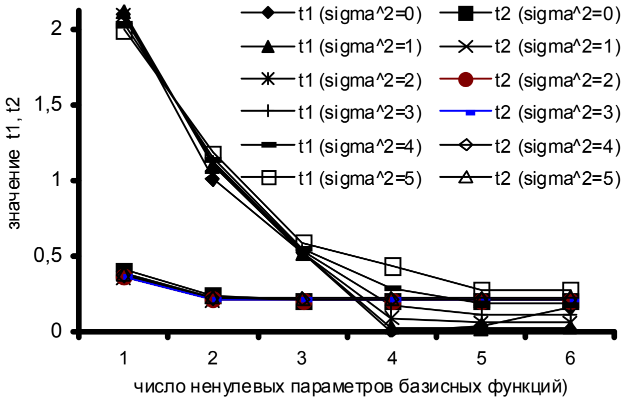


Рис.3 Зависимость t_1 и t_2 от числа базисных функций

Как видно из рисунка, при уровне шума до четвертого (включительно), тест Грибонваля останавливает МПС на истинной модели и обеспечивает минимальную ошибку восстановления вектора параметров (рис. 1).

При уровне шума 5 останов происходит при модели на один большей, чем истинная продолжая при этом демонстрировать высокую точность восстановления параметров (рис. 1). Начиная с уровня шума 5 и выше тест на l_0 оптимальность уже не может отыскать модель с наибольшей возможной разреженностью. Это проявляется в том, что при $\sigma^2=5$ какое бы число базисных функций мы ни взяли t_1 всегда больше t_2, т.е. условие теста на оптимальную разреженность не выполняется. Критерии выбора модели при этом уровне шума продолжают обеспечивать построение модели, однако эта модель далека от истинной и соответственно ОВП ее – велика.

Вывод. Экспериментальное исследование точности оценки параметров линейной модели, получаемой при разреженной аппроксимации методом поиска соответствия (случай, когда число входов намного превосходит длину выборки), проведенное для различных типов базиса (гауссовский, функции отклика детектора) позволило обосновать целесообразность применения критерия l_0-оптимальности Грибонваля для малых уровней шума и базисов, для которых выполняется условие Грибонваля. Показано, что для базиса, не удовлетворяющего условию Грибонваля, и при больших уровнях шума в методе поиска соответствия оптимальным является использование критериев выбора модели.

1. *Mallat S., Z. Zhang*, Matching pursuit with time frequency Dictionaries, IEEE Trans. Signal Proc. 41(12),1993.
2. *Vincent P., Bengio Y.,* (2001). Kernel Matching Pursuit // Machine Learning, 48 (1-3), 165-187.

3. *Забулонов Ю.Л., Лисиченко Г.В., Ревунова Е.Г.,* Повышение надежности идентификации радионуклидов при анализе низкоинтенсивных полей ионизирующего излучения. //Сб. научн. тр. СНИЭиП.– Севастополь, 2005. – вып.16.-С.114-124.
4. *Donoho D.L., Elad M.* (2002) Optimally sparse representation in general (non-orthogonal) dictionaries via L_1 minimization, Proc. Nat. Acad. Sci. 100 P. 197-2202.
5. *D. L. Donoho, M. Elad, V. Temlyakov*, Stable Recovery of Sparse Overcomplete Representations in the Presence of Noise, Technical report, Department of Statistics, Stanford University, 2004.
6. *Gribonval R., Figueras i Ventura R. M., Vandergheynst P.*, A simple test to check the optimality of sparse signal approximations, Tech. Rep., IRISA PI-1661, 2004.
7. *Mallows C.L.* Some comments on C_P // Technometrics. – 1973. – vol. 15. – N 4. – P. 661–675.
8. *Hansen M., Yu B.* Model selection and minimum description length principle // In J. Amer. Statist. Assoc. – 2001. – vol. 96. – P. 746-774.