

УДК 621.391:519.24

Дегтяр О.С., аспірант

Алгоритм розв'язання задачі оцінювання концентрації хлорофілу за допомогою введення параметру регуляризації

Розроблено алгоритм апроксимації для відомих та оцінки невідомих значень концентрацій хлорофілу на основі спектральних даних. Для оцінки невідомих значень використовується процедура псевдообернення з використанням регуляризації розв'язку.

Ключові слова: структурно-параметрична оптимізація, псевдообернення, регуляризація.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: olga.degtiar@gmail.com

O. Degtiar, postgraduate (PhD)

Algorithm for solution of chlorophyll concentration estimation problem using regularization parameter

The algorithm for approximating known chlorophyll concentration values and estimating unknown values based on spectrum reflection develop. Pseudoinverse with solution regularization procedure is used for estimating unknown values.

Key Words: Structural and parametric optimization, pseudoinversion, regularization.

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: olga.degtiar@gmail.com

Статтю представив д. т. н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Розглядається задача оцінювання концентрації хлорофілу в рослинності на основі спектру відображення. Виконано ряд експериментів з метою запису відображених спектрів відбиття листків з різною концентрацією хлорофілу.

Постановка задачі

Нехай маємо відомі N q -вимірних сигналів спектрального розподілу для N різних концентрацій хлорофілу ($N < q$), де

$c = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T$ – відомий вектор значень концентрацій,

$$X = \begin{pmatrix} x_1^1 & x_2^1 & \dots & x_q^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_q^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^N & x_2^N & \dots & x_q^N \end{pmatrix} \text{ – відома матриця}$$

відповідних значень спектрального розподілу.

Задача полягає в оцінюванні M -вимірного ($M < q$) вектору концентрацій $c' = (c'_1, c'_2, \dots, c'_N)^T$ на підставі відомих спектральних даних

$$X_{test} = \begin{pmatrix} x_{1\ test}^1 & x_{2\ test}^1 & \dots & x_{q\ test}^1 \\ x_{1\ test}^2 & x_{2\ test}^2 & \dots & x_{q\ test}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1\ test}^M & x_{2\ test}^M & \dots & x_{q\ test}^M \end{pmatrix}. \quad (1)$$

При цьому розв'язок шукатиметься у класі лінійних моделей, тобто задача зводиться до знаходження q -вимірного вектору α невідомих параметрів лінійної моделі

$$c = X\alpha, \quad (2)$$

та відновлення за допомогою його та матриці (1) вектору концентрацій c' [3].

Регуляризація розв'язку в задачах псевдообернення

Матриця X не є квадратною, це є матриця розмірності $N \times q$, для якої не існує оберненої X^{-1} . В такому випадку вектор α шукатиметься шляхом псевдообернення матриці X [2]: $\alpha = X^+c$ (тут і далі X^+ - позначення псевдооберненої матриці).

Одним із способів задання псевдооберненої матриці є використання границі обернених [1, 27] $X^+ = \lim_{\lambda \rightarrow 0} (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T = \lim_{\lambda \rightarrow 0} X^T (X^T X + \lambda I)^{-1}$.

При цьому $c' \rightarrow c$ при $\lambda \rightarrow 0$, тобто при $\lambda \rightarrow 0$ знаходиться найкраща апроксимація відомого вектору концентрацій. Проте задача полягає в оцінці невідомих концентрацій, спектральні розподіли яких не розглядаються при знаходженні вектору параметрів α .

Для розв'язання некоректно поставлених задач (розглядається випадок $N < q$, отже мова йде про недовизначену систему лінійних рівнянь (2)) пропонується введення регуляризації $\lambda \neq 0$, що по суті є додаванням певної додаткової інформації до вихідної недовизначеної системи. Такий метод отримав назву метод регуляризації Тихонова[4]. Суть його полягає у зведенні вихідної задачі (2) до мінімізації функціоналу $\|c - X\alpha\|^2 + \lambda\|\alpha\|^2 \rightarrow \min_{\alpha}$, де $\|\cdot\|$ – евклідова норма, λ - параметр регуляризації.

Продиференціювавши по α остаточно отримаємо

$$\alpha = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T c, \quad (3)$$

що, власне, і є аналогом псевдооберненої матриці при $\lambda \neq 0$.

Загальні підходи до вибору параметру регуляризації

По суті метод регуляризації полягає у введенні деяких додаткових апріорних оцінок на невідомі параметри моделі. Наприклад, можна шукати розв'язок заданої гладкості, або розв'язок максимально близький до заданого вектору. Мінімізуючи функціонал (3), можна отримати регуляризуючий розв'язок $\alpha(\lambda)$, що залежить від параметру λ .

Зрозуміло, що при малих λ проблема пошуку близька до вихідної (некоректної) задачі, а при великих задача є коректною, проте її розв'язок є далеким від розв'язку вихідної задачі. А саме, зі збільшенням значення параметру регуляризації зменшується відхилення розв'язку від його апріорної оцінки. Очевидно, що на практиці необхідно обирати проміжні значення λ , що встановлюють певний компроміс між прийнятною обумовленістю та близькістю до вихідної задачі.

Алгоритм знаходження параметрів моделі

Одним з методів відшукування параметру регуляризації для вихідної задачі є розбиття вихідної N -вимірної вибірки на n -вимірну тренуючу та m -вимірну валідаційну ($m + n = N$).

Нехай $c_{train} = (c_{train 1}, c_{train 2}, \dots, c_{train n})^T$,

$$X_{train} = \begin{pmatrix} x_{1 train}^1 & x_{2 train}^1 & \dots & x_{q train}^1 \\ x_{1 train}^2 & x_{2 train}^2 & \dots & x_{q train}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1 train}^n & x_{2 train}^n & \dots & x_{q train}^n \end{pmatrix},$$

$c_{valid} = (c_{valid 1}, c_{valid 2}, \dots, c_{valid m})^T$ та

$$X_{valid} = \begin{pmatrix} x_{1 valid}^1 & x_{2 valid}^1 & \dots & x_{q valid}^1 \\ x_{1 valid}^2 & x_{2 valid}^2 & \dots & x_{q valid}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1 valid}^m & x_{2 valid}^m & \dots & x_{q valid}^m \end{pmatrix} - \text{відомі}$$

значення концентрацій та відповідних їм спектральних розподілів.

Невідомі коефіцієнти α знаходяться з лінійної моделі $c_{train} = X_{train} \alpha$. З (3) вони обчислюються за формулою $\alpha(\lambda_{train}) = (X_{train}^T X_{train} + \lambda_{train} I)^{-1} X_{train}^T c_{train}$.

Нижче наведено графіки середньоквадратичного відхилення фактичних значень концентрації від відновлених концентрацій за спектрами $\|c_{train} - X_{train} \alpha(\lambda_{train})\|^2$ та $\|c_{valid} - X_{valid} \alpha(\lambda_{train})\|^2$ для тренуючої та валідаційної вибірок для різних значень параметру регуляризації $\lambda_{train} \in (0, \lambda_1]$.

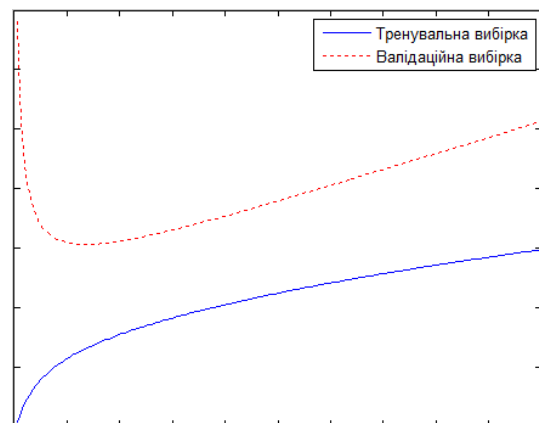


Рис. 1. Графік середньоквадратичного відхилення змодельованого розв'язку від реальних значень концентрацій

Для знаходження остаточно розв'язку вихідної задачі необхідно обрати значення параметру регуляризації λ_{opt} . Для задачі, що розглядається, пропонується обрати компромісне значення параметру для тренуючої та валідаційної вибірок, що є мінімумом відхилення валідаційної вибірки, який береться на

розв'язках, знайдених для тренувальної вибірки

$$\lambda_{opt} = \arg \min_{\lambda_{train} \in (0, \lambda_1]} \|c_{valid} - X_{valid} \alpha(\lambda_{train})\|^2. \quad (4)$$

Результати обчислювального експерименту

У таблиці 1 наведено результати обчислювального експерименту для 7 різних комбінацій даних 40 352-вимірних ($q = 352$) спектральних розподілів та відповідних їм концентрацій: $N = 24$ ($n = 10, m = 14$), $M = 16$.

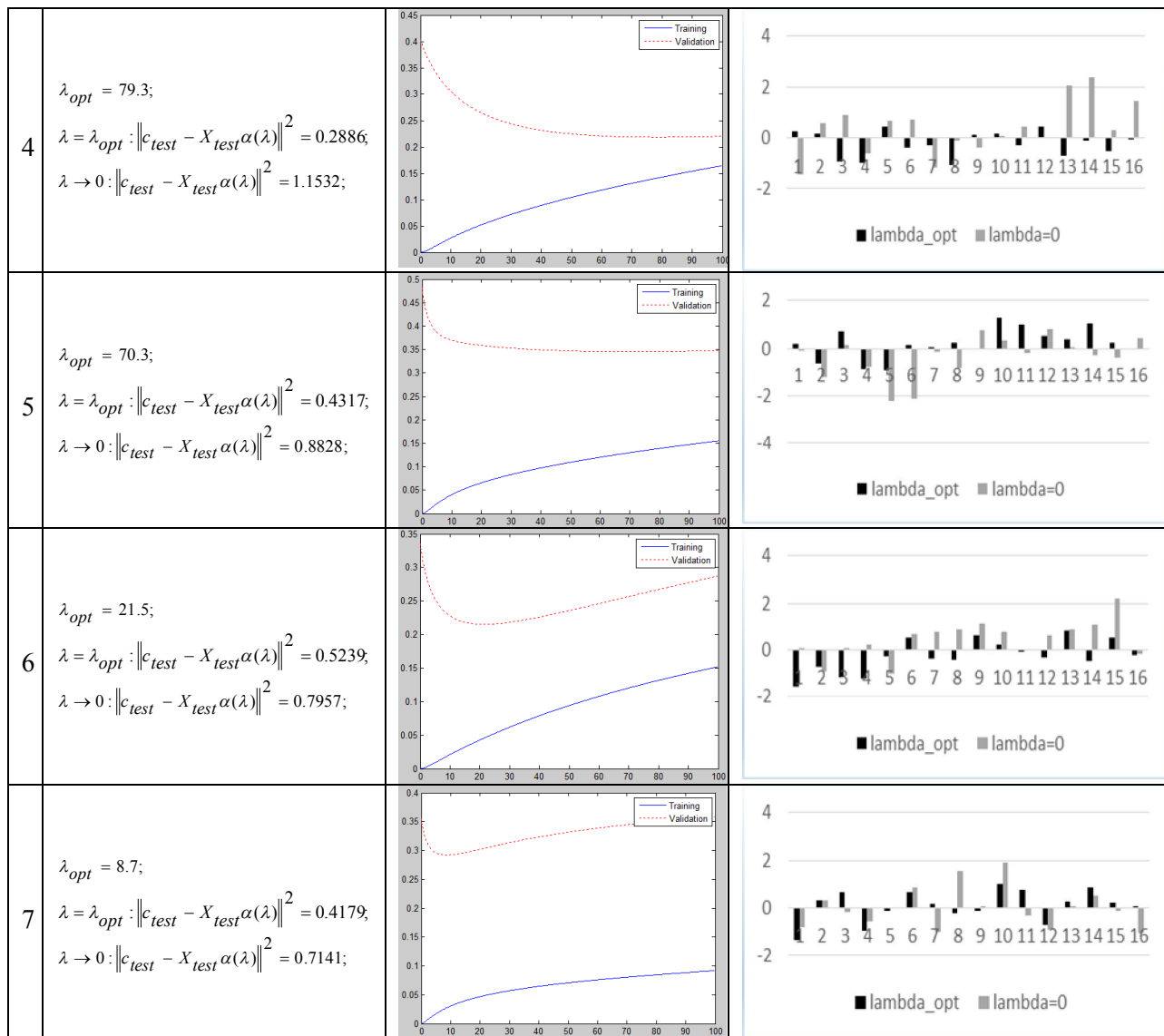
Зокрема для кожної комбінації в таблиці наводяться знайдені за наведеним вище алгоритмом λ_{opt} , середньоквадратичні відхилення фактичних значень концентрації від

відновлених концентрацій за спектрами $\|c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\|^2$ та $\|c_{valid} - X_{valid} \alpha(\lambda_{train})\|^2$ з використанням регуляризації ($\lambda = \lambda_{opt}$) та без неї ($\lambda \rightarrow 0$), графіки знаходження λ_{opt} , графіки оцінок концентрацій c' та її фактичних значень для тестової вибірки (c_{test}) з використанням регуляризації та без неї.

Таблиця 1

Результати обчислювального експерименту з використанням регуляризації та без неї

	Оптимальне значення параметру регуляризації та значення середньоквадратичного відхилення	Середньоквадратичне відхилення фактичних значень концентрації від відновлених концентрацій за спектрами для тренувальної та валідаційної вибірок	Відхилення відновлених значень концентрацій від фактичних з та без використання регуляризації
1	$\lambda_{opt} = 52.6;$ $\lambda = \lambda_{opt} : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.3702;$ $\lambda \rightarrow 0 : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.5879;$		
2	$\lambda_{opt} = 3.1;$ $\lambda = \lambda_{opt} : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.4067;$ $\lambda \rightarrow 0 : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.83424;$		
3	$\lambda_{opt} = 26.9;$ $\lambda = \lambda_{opt} : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.4899;$ $\lambda \rightarrow 0 : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 1.0011;$		



Висновки

В роботі запропоновано алгоритм знаходження апроксимації відомих концентрацій хлорофілу на основі даних спектральних розподілів та оцінка невідомих концентрацій за допомогою введення регуляризації.

Проведено обчислювальний експеримент для оцінки розв'язку з використанням регуляризації та без неї, що показав ефективність використання регуляризації в лінійних моделях для розв'язання задач подібного типу

Список використаних джерел

1. Albert A. Regression, And The Moor-Penrose Pseudoinverse. - Moscow, Nauka, 1977. - 224p.
2. Boublik B.N., Garashchenko F.G., N.F. Kirichenko Structural stability and parametric optimization of beam dynamics. - Kiev, Nauk.dumka, 1985. - 304p.

3. Garashchenko F.G., Shvets O.F., Degtyar O.S. Adaptive models of approximation of signals in structural and parametric classes of functions. // Journal of Automation and Information Sciences. - 2011. Volume 2. - P. 69 – 77.
4. Kirianov D.V., Kirianova E.N. Computational Physics. - Moscow, Polybook Multimedia, 2006. - 352p.

Надійшла до редколегії 26.09.13