2 – Metodi lineari

M. Bertero – DISI – Università di Genova

- Metodi ai minimi quadrati
- Soluzioni approssimate con vincoli
- Soluzioni regolarizzate alla Tikhonov
- Scelta del parametro di regolarizzazione
- Regolarizzazione mediante derivate

Un problema di ricostruzione di immagini può essere ricondotto ad un problema di deconvoluzione. Tale problema è mal posto, nel senso che la sua soluzione può non esistere, non essere unica e non dipendere con continuità dai dati. Un primo approccio è fornito da una riformulazione come problema ai minimi quadrati. Tuttavia la soluzione risulta ancora numericamente instabile. Questa difficoltà può essere aggirata mediante i metodi di regolarizzazione alla Tikhonov.

2.1 – Metodi ai minimi quadrati

Il problema di ricostruzione di immagini, così come è stato precedentemente formulato, può essere ricondotto ad un problema di deconvoluzione. Infatti, se si suppone di poter trascurare il termine di noise ristto al termine di segnale nel modello di formazione di immagini, il problema consiste nel determinare un oggetto f tale che:

$$K*f=g \quad ,$$

essendo note g e K. Al fine di semplificare la notazione, si indicherà con A la matrice circolante a blocchi definita dalla convoluzione ciclica di f con K, Af=K*f. Pertanto il problema base è la risoluzione di un particolare sistema lineare che verrà scritto nella forma seguente:

$$Af = g \qquad . \qquad (2.1)$$

Si tratta quindi di studiare la o le soluzioni di questo problema e capire se forniscono un'approssimazione ragionevole dell'oggetto incognito f_0.

Dal teorema di convoluzione per la convoluzione ciclica segue che, nel dominio delle frequenze, l'equazione (2.1) diventa:

$$\hat{K}(\underline{k})\hat{f}(\underline{k}) = \hat{g}(\underline{k}) \quad , \qquad (2.2)$$

con ovvie notazioni per le trasformate di Fourier discrete (DFT) di K, f e g; ad esempio:

$$\hat{f}(\underline{k}) = \sum_{\underline{n}} f(\underline{n}) e^{-i\frac{2\pi}{N}\underline{k}\cdot\underline{n}} \quad , \quad \underline{k}\cdot\underline{n} = k_1 n_1 + k_2 n_2 \quad .$$

L'equazione (2.2) sembra banale; tuttavia la sua risoluzione presenta notevoli difficoltà se si tiene conto che, dal modello di formazione di immagini (1.9), segue che:

$$\hat{g}(\underline{k}) = \hat{K}(\underline{k})\hat{\overline{f}}(\underline{k}) + \hat{w}(\underline{k}) \quad , \qquad (2.3)$$

da cui sostituendo nella (2.2) si ottiene:

$$\hat{K}(\underline{k})\hat{f}(\underline{k}) = \hat{K}(\underline{k})\hat{\overline{f}}(\underline{k}) + \hat{w}(\underline{k}) \quad .$$

Nei caso di un sistema a banda limitata, per un certo numero di pixel nel dominio delle frequenze la DFT di K può essere nulla; dalla relazione precedente si ha che:

$$\hat{K}(\underline{k}) = 0 \quad \Rightarrow \quad 0 = \hat{w}(\underline{k}) \quad .$$

Poichè il noise è indipendente dallo strumento (dipende dal rivelatore) la sua DFT non è necessariamente nulla nei pixels in cui la funzione di trasferimento è nulla. Pertanto in questi pixels l'equazione (2.2) è inconsistente. Ne segue che l'equazione fondamentale (2.1) non ammette soluzione.

Osservazione – Le componenti della DFT del noise al di fuori della banda dello strumento costituiscono il cosiddetto noise fuori banda. Si può scrivere:

$$w(\underline{n}) = w_{in}(\underline{n}) + w_{out}(\underline{n}) \quad ,$$

dove il primo termine rappresenta il noise in banda (la sua DFT è nulla al di fuori della banda e coincide con quella del noise sulla banda) mentre il secondo termine è il noise fuori banda. Se si conosce la banda dello strumento, il noise fuori banda è determinabile mentre non lo è quello in banda.

Il noise fuori banda può essere eliminato mediante un filtraggio opportuno: basta moltiplicare la DFT dell'immagine per un filtro in Fourier che è 1 sulla banda e 0 fuori. Si può allora considerare la (2.1) con g sostituita dalla g filtrata. In tal caso, al di fuori della banda, l'equazione (2.2) si riduce alla identità 0=0 e quindi non si ha piu' incompatibilità dell'equazione. Si può dunque concludere che, se si usa l'immagine filtrata, l'equazione (2.1) ha sempre soluzione. Tuttavia la soluzione non è unica. Infatti, sia f una soluzione di tale equazione e sia **B** la banda dello strumento definita da:

$$B = \left\{ \underline{k} \;\middle|\; \hat{K}\left(\underline{k}\right) \neq 0 \right\} \qquad ;$$

si consideri allora un oggetto h tale che:

$$\hat{h}\left(\underline{k}\right) = 0 \;\; , \;\; \text{se} \;\; \underline{k} \in B \;\; ; \;\; \hat{h}\left(\underline{k}\right) \neq 0 \;\; , \;\; \text{se} \;\; \underline{k} \notin B \quad ,$$

i valori fuori banda di h essendo arbitrari. E' evidente che f+h è ancora soluzione della stessa equazione e dunque tale equazione ha infinite soluzioni.

Anzichè modificare il problema modificando l'immagine mediante filtraggio (la banda dello strumento potrebbe non essere esattamente nota), si può ottenere lo stesso risultato modificando l'equazione.

Si dice soluzione ai minimi quadrati del problema di ricostruzione di immagini, oggi oggetto f che risolve il problema di minimo:

$$\left\| Af - g \right\|^2 = \min \quad , \qquad (2.4) \ ,$$

dove ||.|| indica l'usuale norma Euclidea:

$$\left\| h \right\|^2 = \sum_{\underline{n}} \left| h\left(\underline{n}\right) \right|^2 \quad .$$

La risoluzione del problema di minimo (2.4) è equivalente alla risoluzione dell'equazione lineare:

$$A^T A \, f = A^T g \quad . \qquad (2.5)$$

che è l'equazione di Eulero associata alla minimizzazione del funzionale.

Osservazione – La matrice trasposta A^T è una matrice circolante a blocchi associata alla PSF $K^T(\underline{n}) = K(-\underline{n})$, la cui DFT è data da:

$$\hat{K}^T\left(\underline{k}\right) = \hat{K}^*\left(k\right) \quad ;$$

quindi la sua funzione di trasferimento è la complessa coniugata della funzione di trasferimento di A.

Per dimostrare l'equivalenza di (2.4) e (2.5), si supponga che f sia un punto di minimo del funzionale ai minimi quadrati e si consideri una variazione del funzionale attorno a f; si consideri cioè il suo valore in un punto f '= f + t h, dove f è il punto di minimo, h è un oggetto arbitrario (definisce la direzione lungo laquale si considera la variazione) e t è un numero reale arbitrario (il passo nella direzione h). Si ha ovviamente:

$$\|Af-g\|^2 \le \|Af'-g\|^2 = \|Af-g+t\,Ah\|^2 \quad .$$

Poichè si ha:

$$\|Af'-g\|^2 = \|Af-g\|^2 + t^2\|Ah\|^2 + 2t\left(Af-g, Ah\right) = \quad (2.6)$$

$$= \|Af-g\|^2 + t^2\|Ah\|^2 + 2t\left(A^T Af - A^T g, h\right) ,$$

ne segue che, per ogni t ed ogni h, il punto di minimo f deve soddisfare la condizione:

$$t^2\|Ah\|^2 + 2t\left(A^T Af - A^T g, h\right) \ge 0 \quad .$$

Mentre il primo termine è non-negativo, il secondo non ha segno definito e, se non null, è dominante per t piccolo.

Pertanto la condizione di minimo implica che, per ogni h, f soddisfi la ''condizione di ortogonalità'':

$$\left(A^T Af - A^T g, h\right) = 0 \quad , \qquad (2.7)$$

la quale, a sua volta, implica la (2.5).

Poichè sia A che A^T sono matrici circolanti a blocchi, anche A^TA lo è, ed è associata ad una PSF che è la funzione di autocorrelazione della PSF di A:

$$\left(K \otimes K\right)\left(\underline{n}\right) = \left(K^T * K\right)\left(\underline{n}\right) = \sum_{\underline{n}''} K\left(\underline{n}'' - \underline{n}\right) K\left(\underline{n}''\right) =$$

$$= \sum_{\underline{n}'} K\left(\underline{n}' + \underline{n}\right) K\left(\underline{n}'\right) \ .$$

Si è passati dalla prima alla seconda espressione usando la periodicità di K dopo aver effettuato il cambiamento di variabile $\underline{n}''=\underline{n}'+\underline{n}$. Ne risulta che la funzione di autocorrelazione è pari. La sua DFT, il cosiddetto ''spettro'' della PSF K, è dato dal modulo quadro della DFT di K, cioè della funzione di trasferimento della matrice A.

Dalle proprietà precedenti di $A^T A$ segue che, calcolando la DFT di ambo i membri della (2.4), si ottiene l'equazione:

$$\left|\hat{K}(\underline{k})\right|^2 \hat{f}(\underline{k}) = \hat{K}^*(\underline{k})\hat{g}(\underline{k}) \quad . \qquad (2.8)$$

Tale equazione non presenta più una delle difficoltà della (2.2); infatti, sulla banda dello strumento essa si riduce al'identità 0=0. Pertanto la (2.8) è sempre compatibile e la (2.5) ha sempre soluzione. Tuttavia la soluzione non è unica e quindi, se il sistema di formazione di immagini è a banda limitata, esistono infinite soluzioni ai minimi quadrati del problema di ricostruzione di immagini.

Tutte le soluzioni del problema sono date da:

$$\hat{f}(\underline{k}) = \frac{\hat{g}(\underline{k})}{\hat{K}(\underline{k})} \quad , \quad \text{se } \underline{k} \in B \ ; \ \hat{f}(\underline{k}) = \hat{h}(\underline{k}), \ \text{se } \underline{k} \notin B \ ,$$

dove h è una tabella fatta con valori arbitrari.

Dalle considerazioni precedenti e dall'eguaglianza di Parseval per la DFT segue che la norma Euclidea di una generica soluzione ai minimi quadrati è data da:

$$\|f\|^2 = \frac{1}{N^2}\sum_{\underline{n}\in B}\left|\frac{\hat{g}(\underline{k})}{\hat{K}(\underline{k})}\right|^2 + \frac{1}{N^2}\sum_{\underline{n}\notin B}\left|\hat{h}(\underline{k})\right|^2 \quad .$$

E' quindi ragionevole chiedersi quale tra queste è quella di norma minima. Dall'equazione prededente è evidente che si tratta di quella corrispondente a h=0. Tale soluzione ai minimi quadrati e di norma minima viene detta soluzione generalizzata ed indicata da:

$$f^+(\underline{n}) = \frac{1}{N^2}\sum_{\underline{k}\in B}\frac{\hat{g}(\underline{k})}{\hat{K}(\underline{k})}e^{i\frac{2\pi}{N}\underline{n}\cdot\underline{k}} \quad . \qquad (2.9)$$

E' ovvio che la soluzione generalizzata esiste sempre ed è unica.

Esiste tuttavia un'ultima seria difficoltà: la soluzione generalizzata non è stabile rispetto al noise; una piccola perturbazione dei dati dovuta al noise è sufficiente ad alterare completamente la soluzione generalizzata e quindi a renderla priva di qualunque significato fisico.

Questo fenomeno è dovuto al fatto che la funzione di trasferimento può assumere valori molto piccoli sulla banda. Si sostituisca la (2.3) nella (2.8) e si ammetta che la banda dello strumento coincida con l'insieme di tutti i possibili valori dell'indice n (ciò è quasi sempre vero nei casi pratici, a causa degli errori di discretizzazione ed arrotondamento); si ottiene:

$$f^{+}(\underline{n}) = f_0(\underline{n}) + \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{k}} \frac{\hat{w}(\underline{k})}{\hat{K}(\underline{k})} e^{i\frac{2\pi}{N}\underline{n}\cdot\underline{k}} . \qquad (2.9)$$

Il secondo termine in questa equazione rappresenta la propagazione del noise dai dati alla soluzione generalizzata. Poichè il noise può essere grande là dove la funzione di trasferimento è piccola, il secondo termine può essere molto grande; è inoltre fortemente oscillante perchè, in genere, la funzione di trasferimento è piccola a grandi frequenze (si vedano gli esempi).

2.2 – Soluzioni approssimate con vincoli

La soluzione generalizzata, anche se risolve il problema di ricostruzione di immagini nella sua formulazione ''ai minimi quadrati'', tuttavia non è una soluzione accettabile poichè troppo influenzata dal noise. Occorre quindi individuare delle soluzioni approssimate che non soffrano di questa patologia. Tenuto conto che queste soluzioni approssimate devono avere i seguenti requisiti:

- non essere troppo grandi ed oscillanti;

- riprodurre l'immagine misurata entro i limiti dovuti al noise,

si vede che si possono considerare i due problemi seguenti:

$$A) \quad \|Af - g\|^2 = \min, \text{ sotto la condizione } \|f\|^2 \le E^2;$$

$$B) \quad \|f\|^2 = \min, \text{ sotto la condizione } \|Af - g\|^2 \le \varepsilon^2,$$

dove E ed ε sono costanti assegnate.

Nel caso del problema A) si suppone che una valutazione della norma Euclidea dell'oggetto incognito sia nota (informazione ''a priori'' sull'oggetto incognito f) e si considera quindi una soluzione ai minimi quadrati vincolata. Nel caso del problema B) si suppone invece che sia nota una valutazione della norma Euclidea del noise (informazione a volte deducibile dall'analisi del processo di misurazione dell'immagine) e si considera una soluzione di norma minima compatibile coi dati. In entrambi i casi è ovvio che viene scartata la soluzione generalizzata precedentemente definita.

E' importante riconoscere che i problemi precedenti sono equivalenti ai seguenti altri:

$$A') \quad \|Af - g\|^2 = \min \text{ , sotto la condizione } \|f\|^2 = E^2 \text{ ;}$$

$$B') \quad \|f\|^2 = \min \text{ , sotto la condizione } \|Af - g\|^2 = \varepsilon^2 \text{,}$$

in cui i vincoli di diseguaglianza sono sostituiti da vincoli di eguaglianza. Infatti, come si vedra', questi ultimi vincoli sono piu' semplici da trattare.

Per dimostrare che le soluzioni di A) sono soluzioni di A') (il viceversa è ovvio), supponiamo che la soluzione generalizzata non soddisfi al vincolo, cioè $\| f^{+} \| > E$. Ne segue che il minimo del funzionale ai minimi quadrati è esterno alla ''palla'' di raggio E; ne segue anche che non si possono avere minimi interni, come risulta dalla variazione prima del funzionale data in (2.6) (il termine lineare non è nullo e quindi può essere negativo). Pertanto i minimi vincolati devono stare sulla buccia della ''palla'' .

Analogamente basta far vedere che le soluzioni di B) lo sono anche di B'). Si supponga, per assurdo, che f, soluzione di B), sia tale che:

$$\|Af - g\| = \varepsilon_0 < \varepsilon \ ; \quad \text{inoltre sia} \quad h \quad \text{tale che} \ \|Ah\| \le \frac{1}{2}(\varepsilon - \varepsilon_0) \ .$$

Se si pone f '=f + t h, con |t|<1, si ha:

$$\|Af' - g\| \le \|Af - g\| + |t|\|Ah\| \le \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(\varepsilon - \varepsilon_0) < \varepsilon \ ;$$

$$\|f'\|^2 = \|f\|^2 + 2t(f,h) + t^2\|h\|^2 \ . \quad \text{Posto} \quad \alpha = \frac{(f,h)}{\|h\|^2},$$

si ha la contraddizione $\|f'\|<\|f\|$ se $-2\alpha<t<0$, per $\alpha>0$, o se $0<t<-2\alpha$, per $\alpha<0$.

I problemi A') e B') sono l'uno il duale dell'altro poichè si passa dall'uno all'altro scambiando il ruolo del funzionale da minimizzare con quello del funzionale che fornisce il vincolo di eguaglianza.

Entrambi i problemi possono essere risolti mediante il metodo dei moltiplicatori di Lagrange , che implica i seguenti passi:

- si combinano quadraticamente i due funzionali nel funzionaleseguente:

$$\Phi_{\mu}\left[f\,;\,g\right] = \left\|Af - g\right\|^2 + \mu\left\|f\right\|^2 \quad , \qquad (2.10)$$

dove μ è il moltiplicatore di Lagrange;

-si minimizza il funzionale precedente per ogni valore di μ.

Ammesso che tale problema di minimo, per ogni μ, abbia una ed una sola soluzione f_{μ} , allora i problemi A') e B') hanno una ed una sola soluzione se:

$$A')\ \text{esiste un unico valore di } \mu = \mu_A \text{ tale che : } \left\|f_{\mu}\right\| = E \ ;$$

$$B')\ \text{esiste un unico valore di } \mu = \mu_B \text{ tale che : } \left\|Af_{\mu} - g\right\| = \varepsilon \ .$$

Per ogni valore di $\mu > 0$, il funzionale (2.10) ha un unico punto di minimo che è dato da:

$$f_\mu = \left(A^T A + \mu\, I\right)^{-1} A^T g \quad , \qquad (2.11)$$

dove I è la matrice identica, o anche da:

$$f_\mu\left(\underline{n}\right) = \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{k}} \frac{\hat{K}^*\left(\underline{k}\right)}{|\hat{K}\left(\underline{k}\right)|^2 + \mu} e^{i\frac{2\pi}{N}\underline{n}\cdot\underline{k}} \quad . \qquad (2.12)$$

Dimostrazione – Come nel caso del funzionale ai minimi quadrati, se f_μ è un punto di minimo, si consideri la variazione prima del funzionale attorno a tale punto; si ha:

$$\Phi_\mu\left[f_\mu; g\right] \le \Phi_\mu\left[f_\mu + t\,h; g\right] = \left\|A\left(f_\mu + t\,h\right) - g\right\|^2 +$$

$$+ \mu\left\|f_\mu + t\,h\right\|^2 = \left\|Af_\mu - g\right\|^2 + \mu\left\|f_\mu\right\|^2 +$$

$$+ 2t\left\{\left(Af_\mu - g, Ah\right) + \mu\left(f_\mu, h\right)\right\} + t^2\left\{\left\|Ah\right\|^2 + \mu\left\|h\right\|^2\right\} =$$

$$= \Phi_\mu \left[f_\mu ; g \right] + 2t \left\{ \left(A^T A f_\mu - A^T g , h \right) + \mu \left(f_\mu , h \right) \right\} +$$
$$+ t^2 \left\{ \left\| Ah \right\|^2 + \mu \left\| h \right\|^2 \right\} \quad .$$

Ripetendo gli argomenti che hanno condotto all'equazione (2.5), si ottiene la condizione di ortogonalità, vera per ogni h:

$$\left(A^T A f_\mu + \mu f_\mu - A^T g , h \right) = 0 \quad , \qquad (2.13)$$

da cui segue l' equazione di Eulero, associata alla minimizzazione del funzionale in questione:

$$\left(A^T A + \mu I \right) f_\mu = A^T g \quad . \qquad (2.14)$$

Se si trasforma questa equazione mediante la DFT, si ottiene:

$$\left(| \hat{K}(\underline{k}) |^2 + \mu \right) \hat{f}_\mu (\underline{k}) = \hat{K}^* (\underline{k}) \hat{g} (\underline{k}) \quad , \qquad (2.15)$$

da cui risulta facilmente che esiste una ed una sola soluzione data dalla (2.12), che può anche essere scritta nella forma piu' generale (2.11).

Osservazione 1 – La (2.12) può anche essere ottenuta in altro modo. Se si utilizza l'eguaglianza di Parseval il funzionale (2.10) può essere scritto nella forma seguente:

$$\Phi_\mu[f;g] = \frac{1}{N^2}\sum_k \left\{ \left| \hat{K}(\underline{k})\hat{f}(\underline{k}) - \hat{g}(\underline{k}) \right|^2 + \mu \left| \hat{f}(\underline{k}) \right|^2 \right\} . \quad (2.16)$$

Mediante semplici manipolazioni algebriche si ottiene:

$$\left| \hat{K}(\underline{k})\hat{f}(\underline{k}) - \hat{g}(\underline{k}) \right|^2 + \mu \left| \hat{f}(\underline{k}) \right|^2 =$$

$$= \left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right) \left| \hat{f}(\underline{k}) \right|^2 - 2\,\mathrm{Re}\left(\hat{K}^*(\underline{k})\hat{f}^*(\underline{k})\hat{g}(\underline{k}) \right) + |\hat{g}(\underline{k})|^2 =$$

$$= \left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right) \left| \hat{f}(\underline{k}) - \frac{\hat{K}^*(\underline{k})}{|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu}\hat{g}(\underline{k}) \right|^2 + \frac{\mu}{|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu} |\hat{g}(\underline{k})|^2$$

E' allora evidente che l'oggetto che minimizza il funzionale è quello la cui DFT annulla il primo termine nell'espressione precedentemente ottenuta, si ha pertanto:

$$\hat{f}_{\mu}(\underline{k}) = \frac{\hat{K}^{*}(\underline{k})}{|\hat{K}(\underline{k})|^{2} + \mu}\hat{g}(\underline{k}) \quad , \qquad (2.17)$$

da cui segue di nuovo la (2.12).

Osservazione 2 - Dalle considerazioni precedenti segue dunque che, per ogni valore $\mu > 0$ del moltiplicatore di Lagrange, il funzionale (2.10) ha un unico punto di minimo, dato dalla (2.12). Pertanto tale punto di minimo è facilmente ed efficientemente calcolabile mediante la DFT, in quanto è possibile l'uso dell'algoritmo veloce FFT se N è una potenza di 2. Si osservi anche che :

$$\lim_{\mu \to 0} f_{\mu}(\underline{n}) = f^{+}(\underline{n}) \quad ; \qquad (2.18)$$

infatti, dalla (2.17) segue che la DFT di f_{μ} è automaticamene nulla sulla banda del sistema di formazione di immagini.

E' anche interessante osservare che, entro la banda, la (2.17) può essere scritta nella forma seguente:

$$\hat{f}_{\mu}(\underline{k}) = \frac{|\hat{K}(\underline{k})|^2}{|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu} \frac{\hat{g}(\underline{k})}{\hat{K}(\underline{k})} \quad ; \qquad (2.18)$$

pertanto la (2.17) può essere vista come una versione filtrata della soluzione generalizzata, il filtro in frequenze essendo dato da:

$$\hat{K}_{\mu}(\underline{k}) = \frac{|\hat{K}(\underline{k})|^2}{|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu} \quad . \qquad (2.19)$$

Esso è automaticamente nullo al di fuori della banda; tenendo conto di ciò si verifica facilmente che:

$$f_{\mu} = K_{\mu} * f^{+} \quad , \qquad (2.20)$$

dove K_{μ} è la DFT inversa della (2.19).

Per stabilire se i problemi vincolati A') e B') hanno soluzione occorre stabilire se esiste un valore di μ tale che il corrispondente punto di minimo del funzionale soddisfa al vincolo. Consideriamo separatamente i due casi.

Problema A') – In questo caso occorre calcolare la quantità:

$$E_\mu = \left\| f_\mu \right\| \qquad . \qquad (2.21)$$

Dall'eguaglianza di Parseval si ottiene:

$$E_\mu^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{k}} \left| \hat{f}_\mu(\underline{k}) \right|^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{n}} \frac{|\hat{K}(\underline{k})|^2}{\left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right)^2} \left| \hat{g}(\underline{k}) \right|^2 \quad ;$$

e pertanto:

$i)$ E_μ è una funzione decrescente di μ;

$ii)$ $E_0 = \left\| f^+ \right\| \quad ; \quad \left\| E_\infty \right\| = 0 \quad .$

Ne segue che, se la norma della soluzione generalizzata è maggiore di E, allora il Problema A') ha una ed una sola soluzione.

Problema B') – In questo caso occorre calcolare la quantità:

$$\varepsilon_\mu = \left\| A f_\mu - g \right\| \qquad . \qquad (2.22)$$

Dall'eguaglianza di Parseval, dopo alcuni passaggi algebrici, si ottiene:

$$\varepsilon_\mu^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{k}} \left| \hat{K}(\underline{k}) \hat{f}_\mu(\underline{k}) - \hat{g}(\underline{k}) \right|^2 = \frac{\mu^2}{N^2} \sum_{\underline{k}} \frac{|\hat{g}(\underline{k})|^2}{\left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right)^2} =$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{k} \notin B} |\hat{g}(\underline{k})|^2 + \frac{\mu^2}{N^2} \sum_{\underline{k} \in B} \frac{|\hat{g}(\underline{k})|^2}{\left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right)^2} \quad .$$

Si ricordi che i valori della DFT al di fuori della bandasono unicamente dovuti al noise e quindi la g fuori banda coincide con il noise fuori banda.

Dai calcoli precedenti e relative osservazioni segue che:

$$i) \quad \varepsilon_\mu \text{ è una funzione crescente di } \mu\,;$$

$$ii) \quad \varepsilon_0 = \left\| w_{out} \right\| \quad ; \quad \varepsilon_\infty = \left\| g \right\| \quad .$$

Ne segue che il Problema B') ha una ed una sola soluzione non banale se e solo se la costante ε soddisfa le condizioni seguenti:

$$\left\| w_{out} \right\| \leq \varepsilon \leq \left\| g \right\| \quad .$$

Tali condizioni sono ragionevoli. Infatti, poichè ε è una stima della norma Euclidea del noise, se la prima diseguaglianza non è soddisfatta, ciò vuol dire che il noise è stato eccessivamente sottostimato e pertanto non esiste soluzione del problema. D'altra parte, se la seconda diseguaglianza non è soddisfatta, ciò vuol dire che l'immagine consiste di solo noise o, in altri termini non contiene segnale. In questo caso il problema può avere infinite soluzioni, tra le qualila soluzione banale f = 0.

2.3 – Soluzioni regolarizzate alla Tikhonov

Lo studio dei precedenti problemi variazionali rende piu' plausibile il concetto di metodo di regolarizzazione, introdotto dal matematico Russo A. Tikhonov. Per un problema variazionale che, come la minimizzazione del funzionale ai minimi quadrati, soffre di patologie quali la non unicità del minimo e/o la sua instabilità rispetto al noise, la regolarizzazione consiste nell'aggiunta di un funzionale di ''penalizzazione'', detto funzionale regolarizzante, moltiplicato per un parametro positivo, detto parametro di regolarizzazione, in modo tale che il funzionale modificato ha uno ed un solo punto di minimo che sia meno sensibileall'effetto del noise.

Si vede che il funzionale (2.10) definisce un metodo di regolarizzazione; pertanto nel linguaggio della teoria della regolarizzazione si userà la seguente nomenclatura:

- $\Omega[f] = \|f\|^2$: funzionale regolarizzante;
- f_μ : soluzione regolarizzata;
- μ : parametro di regolarizzazione.

Le soluzioni regolarizzate formano una famiglia ad un parametro di soluzioni approssimate del problema di ricostruzione di immagini. Al variare del parametro di regolarizzazione queste soluzioni descrivono una traiettoria nello spazio di tutti i possibili oggetti (cioè le tabelle N x N). La traiettoria parte dallasoluzione generalizzata, quindi da un punto molto distante dall'origine (la tabella tutta nulla), dato che la norma della soluzione generalizzata è molto grande. La norma della soluzione regolarizzata è minore di questa e diminuisce al crescere di μ, fino a che la soluzione regolarizzata converge nell'origine per μ che tende all'infinito. In corrispondenza, la quantità definita nella (2.22), che prende il nome di discrepanza, parteda valori molto piccoli (zero, in assenza di noise fuori banda e cresce al crescere di μ . Pertanto, per valori piccoli del parametro di regolarizzazione si ha una soluzione che è molto sensibile al noise (molto grande) ma che ben riproduce i dati; al contrario, per valori grandi del parametro di regolarizzazione si ha una soluzione che è molto stabile (molto piccola) ma che mal riproduce i dati.

Il problema è dunque trovare un valore di μ che permetta un compromesso tra stabilità della soluzione e rappresentazione dei dati.

Se si tiene conto del modello di formazione di immagine (1.9) o (2.3), si può vedere facilmente che, lungo la traiettoria delle soluzioni regolarizzate, esiste un punto che è il piu' vicino all'oggetto ''vero'' di cui g è l'immagine noisy. Infatti, se si usano le seguenti notazioni:

$$g = A\overline{f} + w \quad , \quad f_\mu = R_\mu g \quad ,$$

si ottiene:

$$f_\mu - \overline{f} = \left(R_\mu A - I\right)\overline{f} + R_\mu w \quad ,$$

e si può definire l'errore di ricostruzione come la quantità:

$$\rho(\mu) = \left\| f_\mu - \overline{f} \right\| \quad . \qquad (2.23)$$

Dalla diseguaglianza triangolare segue allora che:

$$\rho(\mu) \leq \left\| \left(R_\mu A - I\right)\overline{f} \right\| + \left\| R_\mu w \right\| = \rho_{appox}(\mu) + \rho_{noise}(\mu) \quad .$$

Il primo termine viene detto errore di approssimazione, il secondo errore da propagazione del noise.

Usando l'uguaglianza di Parseval si ottiene:

$$\rho^2_{appox}(\mu) = \left\| \left(R_\mu A - I \right) \overline{f} \right\|^2 = \frac{\mu^2}{N^2} \sum_{\underline{k}} \frac{|\hat{\overline{f}}(\underline{k})|^2}{\left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right)^2}$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{k} \notin B} |\hat{\overline{f}}(\underline{k})|^2 + \frac{\mu^2}{N^2} \sum_{\underline{k} \in B} \frac{|\hat{\overline{f}}(\underline{k})|^2}{\left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right)^2} \quad .$$

Pertanto l' errore di approssimazione è una funzione crescente di μ, con valori nell'intervallo:

$$\left\| \overline{f}_{out} \right\| \leq \rho_{appox}(\mu) \leq \| f \| \quad .$$

Il valore minimo è dovuto all'impossibilità dell'algoritmo di ricostruire i valori dell'oggetto fuori banda; il valore massimo è dovuto al tendere a zero della soluzione regolarizzata quando μ tende all'infinito. Si osservi che l'errore di approssimazione non dipende dal noise.

Usando nuovamente l'eguaglianza di Parseval, si ha inoltre che:

$$\rho_{noise}^2(\mu) = \left\| R_\mu w \right\|^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\underline{n}} \frac{|\hat{K}(\underline{k})|^2}{\left(|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu \right)^2} \left| \hat{w}(\underline{k}) \right|^2$$

Pertanto, l' errore da propagazione del noise è una funzione decrescente di μ, con valori nell'intervallo:

$$\left\| w^+ \right\| \geq \rho_{noise}(\mu) \geq 0 \qquad .$$

L'estremo superiore è dovuto al contributo del noise alla soluzione generalizzata ed è quindi molto grande; l'estremo inferiore è dovuto al solito fatto che la soluzione regolarizzata tende a zero per μ che tende all'infinito.

Poichè l'errore di ricostruzione è maggiorato dalla somma di due funzioni di μ , una crescente ed una decrescente, ne segue che, in genere, esso ha un punto di minimo, corrispondente ad un valore ottimale del parametro di regolarizzazione μ_{opt}.

2.4 – Scelta del parametro di regolarizzazione

Dalle considerazioni precedenti segue che, per ogni particolare problema e per ogni particolare immagine, esiste un valore ottimale del parametro di regolarizzazione, nel senso che esiste un valore di tale parametro che minimizza l'errore di ricostruzione, ossia lo scarto quadratico medio tra gli oggetti ricostruiti, cosi' come sono forniti dalle soluzioni regolarizzate, e l'oggetto vero (incognito). Tale valore ottimale può essere calcolato in un esperimento di simulazione, ossia in un esperimento in cui:

- dato l'oggetto e data la PSF, si calcola l'immagine come prodotto di convoluzione e si perturba il risultato mediante noise;

- a partire dall'immagine simulata si calcolano le soluzioni regolarizzate per diversi valori di μ e si cerca il valore che minimizza l'errore di ricostruzione.

Nel caso di immagini reali, come è ovvio, la procedura precedente non può essere applicata. Occorre quindi sviluppare dei metodi che permettano di ottenere delle stime approssimate del valore ottimale del parametro di regolarizzazione.

I metodi per la determinazione delle soluzioni approssimate con vincoli, introdotte nel paragrafo 2.2, possono essere ora interpretataìi come metodi per la stima del valore ottimale del parametro di regolarizzazione.

$$Metodo\ A) - \text{Sia nota una valutazione } E \text{ della norma dell'oggetto;}$$

$$\text{allora la stima } \mu_E \text{ di } \mu_{opt} \text{ è l'unica soluzione dell'equazione:}$$

$$E_\mu = \left\| f_\mu \right\| = E \quad .$$

$$Metodo\ B) - \text{Sia nota una valutazione } \varepsilon \text{ della norma del noise;}$$

$$\text{allora la stima } \mu_\varepsilon \text{ di } \mu_{opt} \text{ è l'unica soluzione dell'equazione:}$$

$$\varepsilon_\mu = \left\| Af_\mu - g \right\| = \varepsilon \ .$$

E’ interessante cercare di comprendere eventuali relazioni tra le due stime suddette. Ciò è possibile solo nel caso di una qualche relazione tra i due parametri E ed ε. A tal fine si definisca l’insieme seguente:

$$S = \left\{ f \ \middle| \ \left\| f \right\| \leq E \ , \left\| Af - g \right\| \leq \varepsilon \right\} \quad .$$

L'insieme S, se non è vuoto, è un insieme di soluzioni approssimate e vincolate. Pertanto, si dirà che la coppia $\{\varepsilon, E\}$ è compatibile se il corrispondente insieme S non è vuoto.

Data la coppia {e , E} il primo problema che si pone è: come è possibile stabilire se S è vuoto o meno? Vale il seguente risultato:

L'insieme S non è vuoto se e solo se:

$$f_{\mu_\varepsilon} \in S \quad \Leftrightarrow \quad f_{\mu_E} \in S \quad .$$

Dimostrazione – E' ovvio che, se vale una delle due relazioni di appartenenza (entrambe sono facili da verificare), allora S non è vuoto. Meno ovvio è il solo se; in altri termini, se S non è vuoto, allora entrambe le soluzioni regolarizzate fornite dai metodi A) e B), devono appartenere all'insieme S. Come corollario si ha che, se una delle due gli appartiene (e quindi S non è vuoto), allora anche l'altra gli deve appartenere.

La dimostrazione è per assurdo. Si consideri, ad esempio la soluzione fornita dal metodo A), che è anche la soluzione del problema A'), e si supponga che essa non appartenga a S.

Poichè essa è soluzionedel problema A'), essa è anche, tra tutte le soluzioni che soddisfano alla prima condizione, quella che ha il valore piu' piccolo di ||Af - g||. Tale valore deve essere minore di ε poichè tra le soluzioni che soddisfano alla prima condizione ve ne sono che soddisfano alla seconda. Lo stesso tipo di considerazioni, scambiando ovviamente tra di loro due funzionali, si applica alla soluzione fornita dal metodo B).

Corollario – Se una delle due soluzioni non appartiene ad S, allora S è vuoto. Si ha quindi un metodo numerico semplice per verificare se S è vuoto o meno.

Osservazione – Il metodo B) viene anche detto metodo della discrepanza di Morozov. Infatti il funzionale:

$$\varepsilon(f) = \|Af - g\| \quad ,$$

viene detto funzionale discrepanza. A volte l'altro funzionale:

$$E(f) = \|f\| \quad ,$$

viene detto funzionale energia. Si osservi che si ha:

$$\varepsilon_\mu = \varepsilon(f_\mu) \quad , \quad E_\mu = E(f_\mu) \ .$$

Si consideri, nel piano {ε , E} , l'insieme S delle coppie compatibili. Esso è caratterizzato come segue: è il sottoinsieme del primo quadrante formato dai punti che si trovano al di sopra e a destra della curva L (l'origine del nome verrà chiarita in seguito) descritta dai punti:

$$\left\{\varepsilon_{\mu}, E_{\mu}\right\} \qquad , \qquad 0 \le \mu < +\infty \quad .$$

Infatti, in base a quanto visto in precedenza, si ha che, se la coppia {ε , E} è compatibile, allora si ha:

$$\varepsilon \ge \varepsilon_{\mu_E} \;\; , \;\; E = E_{\mu_E} \;\; ; \;\; \varepsilon = \varepsilon_{\mu_\varepsilon} \;\; , \;\; E \ge E_{\mu_\varepsilon} \;\; ,$$

e quindi il punto si trova al di sopra e a destra della curva L. D'altra parte è ovvio che ogni punto che soddisfa a questa condizione definisce una coppia compatibile.

La curva L è convessa, parte dal punto di coordinate $\{||w_{out}|| , ||f^{+}||\}$, per μ=0, e finisce nel punto {||g|| , 0}, raggiunto per μ che tende all'infinito. Al crescere del valore di μ la curva viene percorsa da sinistra verso destra. Da questa osservazione segue che, se la coppia {ε , E} è compatibile, allora si ha:

$$\mu_E \le \mu_\varepsilon \quad ,$$

e quindi la soluzione fornita dal problema A) è meno regolarizzata di quella fornita dal problema B).

Nel caso in cui sia ε che E sono assegnati e formano una coppia compatibile, una scelta possibile del parametro di regolarizzazione è data da:

$$\mu_{\varepsilon / E} = \left(\frac{\varepsilon}{E} \right)^2 \quad .$$

Nelle simulazioni numeriche solitamente si verifica che le seguenti diseguaglianze sono quasi sempre soddisfatte:

$$\mu_{\varepsilon / E} \; < \; \mu_E \; < \; \mu_{opt} \; < \mu_{\varepsilon} \quad .$$

Pertanto il calcolo di μ_E e μ_ε permette di ottenere un estremo superiore ed uno inferiore per il valore ottimale del parametro di regolarizzazione. In molti casi si verifica che il valore di μ_ε è molto vicino al valore ottimale e questo è uno dei motivi per cui il metodo della discrepanza è uno dei metodi piu' frequentemente usati per la stima del parametro di regolarizzazione.

La difficoltà principale dei metodi fino ad ora considerati è la necessità di avere informazioni o sulla soluzione o sul noise.

Nei casi in cui non si ha una stima sufficientemente accurata nè di ε nè di E occorre utilizzare metodi che permettano di valutare μ senza richiedere altre informazioni oltre all'immagine g.

Due di questi metodi sono la generalized cross-validation ed il metodo della curva L.

L'idea base del primo consiste nel permettere ai dati di scegliere essi stessi il valore di μ. A tal fine si elimina uno dei dati del problema (cioè un pixel dell'immagine) e si considera il problema di ricostruire l'oggetto con tutti gli altri dati. La ricostruzione, fornita dalla soluzione regolarizzata, viene utilizzata per calcolare il dato mancante e questo, che sarà una funzione di μ, viene confrontato con il dato vero. Si ripete l'operazione per tutti i dati ed alla fine si calcola lo scarto quadratico medio tra i dati calcolati e quello vero. Questo è una funzione di μ che viene detta funzione di cross-validation. La stima del parametro di regolarizzazione, cosi' come fornita dai dati, è quel valore di m che minimizza la funzione di cross-validation.

E' ovvio che il metodo suddetto è computazionalmente molto oneroso poichè non è possibile utilizzara la FFT per risolvere i problemi con dati mancanti.

Per il motivo precedentemente indicato, nonostante il chiaro significato della procedura che consiste nella minimizzazione della funzione di cross-validation, questa viene sostituita dalla minimizzazione della funzione di generalized cross-validation (GCV), definita da:

$$V(\mu) = \frac{\left\| Af_\mu - g \right\|^2}{\left[Tr\left(I - A_\mu \right) \right]^2} \quad , \quad A_\mu = AA^T \left(AA^T + \mu I \right)^{-1} \quad ,$$

dove I indica la matrice identica e Tr indica la traccia della matrice, cioè la somma dei suoi elementi diagonali, o anche la somma dei suoi autovalori. Poichè la matrice A_μ è circolante ed è diagonalizzata dalla DFT, si ottiene:

$$Tr\left(I - A_\mu\right) = \sum_{\underline{n}} \left(1 - \frac{|\hat{K}(\underline{n})|^2}{|\hat{K}(\underline{n})|^2 + \mu} \right) = \sum_{n} \frac{\mu}{|\hat{K}(\underline{n})|^2 + \mu} \ .$$

Si osservi anche che il numeratore di $V(\mu)$ è il quadrato del funzionale discrepanza.

Poichè sia numeratore che denominatore del quoziente che definisce la funzione di generalized cross-validation sono funzioni crescenti di μ, è ragionevole attendersi che essa abbia un punto di minimo. Si osservi infatti che la funzione logaritmo è la differenza di due funzioni crescenti:

$$\ln V(\mu) = 2 \ln \left\| A f_\mu - g \right\| - 2 \ln Tr\left(I - A_\mu\right) .$$

Pertanto il punto di minimo di questa funzione viene preso come stima del valore ottimale del parametro di regolarizzazione. Piu' esattamente è stato dimostrato che esso fornisce una stima del punto di minimo del cosiddetto errore di predizione, definito da:

$$T(\mu) = \left\| A f_\mu - \overline{g} \right\| , \quad \overline{g} = A \overline{f} \quad ;$$

pertanto esso è lo scarto quadratico medio tra l'immagine calcolata, associata alla soluzione regolarizzata e l'immagine senza noise (è ovvio cheesso è calcolabile solo in simulazione).

Come è stato verificato ampiamente mediante simulazioni, il metodo della GCV fornisce, in genere, una sottostima del valore ottimale del parametro di regolarizzazione.

Infine, il metodo della curva L, che come la GCV, non richiede informazioni sulla soluzione o sul noise, deriva dall'osservazione che, questa curva, introdotta in relazione allo studio delle coppie compatibili, quando rappresentata in un grafico log-log, ha un tipico andamento che ricorda la lettera L.

Questo comportamento può essere spiegato qualitativamente come segue. Si ricordi che E_μ è grande per piccoli μ ed è piccolo per grandi μ mentre ε_μ ha il comportamento opposto. Quindi quando una delle due variabili è grande l'altra è piccola. Ora la parte quasi verticale della curva corrisponde a valori di μ per i quali la soluzione regolarizzata è molto sensibile alla propagazione del noise; quindi E_μ varia rapidamente mentre ε_μ varia lentamente. D'altra parte la parte orizzontale della curva corrisponde a valori di μ per i quali la soluzione regolarizzata è dominata dall'errore di approssimazione. Quindi ε_μ varia rapidamente mentre E_μ varia lentamente.

Il valore di μ fornito dal metodo corrisponde ad uno dei punti del ''gomito'' formato dalla curva. In genere si sceglie il punto corrispondente alla massima curvatura.

Il metodo fornisce, in genere, sottostime di μ.

2.5 – Regolarizzazione mediante derivate

Si può generalizzare il metodo di regolarizzazione precedente considerando una penalizzazione del funzionale ai minimi quadrati (o discrepanza che dir si voglia) mediante la norma di derivate opportune. Poichè siamo nel discreto, si useranno differenze finite. Per chiarire la loro definizione consideriamo prima il caso 1D. Se f(n) è un segnale periodico, con periodo N, le differenze prime destra e sinistra sono definite da:

$$\left(D_+ f\right)[n] = f[n+1] - f[n] \quad , \quad \left(D_- f\right)[n] = f[n] - f[n-1] \ ;$$

inoltre la differenza seconda simmetrica è definita da:

$$\left(D_+ D_- f\right)[n] = \left(D_- D_+ f\right)[n] = f[n+1] - 2 f[n] + f[n-1] \ .$$

Prendendo la DFT di ambo i membri e tenendo conto delle proprietà della DFT rispetto alle traslazioni, si verifica facilmente che:

$$\left(D_+ \hat{D}_- f\right)[k] = 4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right) f[k] \ .$$

Osservazione - D_+D_- è una matrice circolante data da:

$$D_+D_- = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} .$$

Se D è la successione periodica generata da (-2, 1, 0, ..., 0, 1), si può anche scrivere:

$$D_+D_-f = D^{(2)} * f \quad ,$$

e la DFT di D è data da:

$$\hat{D}^{(2)}(k) = -4\sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right) \quad .$$

Le precedenti definizioni si estendono facilmente al caso 2D. Le differenze prime destra e sinistra, relative ai due indici, sono date da:

$$\left(D_{+}^{(1)} f\right)[\underline{n}] = f[n_1 + 1, n_2] - f[n_1, n_2] \quad ,$$
$$\left(D_{-}^{(1)} f\right)[\underline{n}] = f[n_1, n_2] - f[n_1 - 1, n_2] \quad ,$$
$$\left(D_{+}^{(2)} f\right)[\underline{n}] = f[n_1, n_2 + 1] - f[n_1, n_2] \quad ,$$
$$\left(D_{-}^{(2)} f\right)[\underline{n}] = f[n_1, n_2] - f[n_1, n_2 - 1] \quad .$$

Si può inoltre definire il Laplaciano discreto come segue:

$$(\Delta f)[\underline{n}] = \left(D_{+}^{(1)} D_{-}^{(1)} f\right)[\underline{n}] + \left(D_{+}^{(2)} D_{-}^{(2)} f\right)[\underline{n}] \; .$$

Si può di nuovo scrivere:

$$\Delta f = D^{(2)} * f \quad ,$$

e si ha:

$$\hat{D}^{(2)}[\underline{k}] = -4 \left\{ \sin^2\left(\frac{\pi k_1}{\mathrm{N}}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi k_2}{\mathrm{N}}\right) \right\} \; .$$

La nuova soluzione regolarizzata può ora essere definita come il punto di minimo del funzionale:

$$\Psi[f;g] = \|Af - g\|^2 + \mu\|\Delta f\|^2 \quad ,$$

che, utilizzando l'eguaglianza di Parseval ed i risultati precedenti, può anche essere scritto nella forma seguente:

$$\Psi_\mu[f;g] = \frac{1}{N^2}\sum_k \left\{ \left| \hat{K}(\underline{k})\hat{f}(\underline{k}) - \hat{g}(\underline{k}) \right|^2 + \mu \left| \hat{D}^{(2)}(\underline{k})\hat{f}(\underline{k}) \right|^2 \right\} \quad .$$

Procedendo in modo analogo a quello utilizzato per la minimizzazione del funzionale Φ_μ[f;g], si verifica facilmente che questo funzionale ha un unico punto di minimo che è dato da:

$$\hat{f}_\mu(\underline{k}) = \frac{\hat{K}^*(\underline{k})}{|\hat{K}(\underline{k})|^2 + \mu|\hat{D}^{(2)}(\underline{k})|^2}\hat{g}(\underline{k}) \quad .$$