

# Краткое объяснение 1D NMR T2 инверсии с регуляризацией Тихонова

Инверсия T2 в ЯМР (NMR) направлена на восстановление распределения времён поперечной релаксации. Поскольку задача плохо обусловлена, могут приводить к значительным колебаниям решения. Регуляризация Тихонова накладывает ограничение на гладкость решения.

## Этапы инверсии

### 1. Получение экспериментальных данных:

- Регистрируется сигнал  $S(t)$ , описываемый суммой экспонент:  
$$S(t) = \sum A_i \exp(-t / T_{2i}) + \text{шум}$$
- Где  $A_i$  — амплитуды, а  $T_{2i}$  — времена поперечной релаксации.

### 2. Построение ядра инверсии:

- Формируется матрица отклика (ядро), связывающая распределение T2 с измерениями:  
$$K_{ij} = \exp(-t_j / T_{2i})$$
- Здесь K представляет собой библиотеку затухающих экспонент для различных значений  $T_2$ .

### 3. Регуляризация Тихонова:

- Вместо прямого решения  $KA = S$  (что приводит к неустойчивости), решается задача минимизации:  
$$\min_A \|KA - S\|^2 + \lambda \|LA\|^2$$
- Параметр регуляризации  $\lambda$  контролирует гладкость решения:
  - Малое  $\lambda \rightarrow$  решение близко к необработанным данным (содержит шум).
  - Большое  $\lambda \rightarrow$  чрезмерное сглаживание, потеря разрешения.
- L — обычно единичная матрица или матрица конечных разностей, накладывающая ограничение на гладкость.

### 4. Решение регуляризованной задачи:

- Используются численные методы (например, `scipy.optimize.lsqr`) для решения задачи минимизации, накладывая также условия неотрицательности A.

### 5. Визуализация:

- Итоговое распределение  $A(T_2)$  строится в логарифмическом масштабе, показывая вклад различных временами релаксации.

## Преимущества регуляризации Тихонова:

- Предотвращает подгонку к шуму в экспериментальных данных.
- Обеспечивает гладкость и физически осмысленный результат.
- Стабилизирует решение в плохо обусловленных инверсиях.