ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ И СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА (ДИПЛОМНАЯ РАБОТА) специалиста

Оценивание плотности размеров наночастиц на основе вейвлетов

	Выполнил студент
	603 группы
Купј	ряков Василий Юрьевич
-	
	(подпись студента)
	TT
	Научный руководитель:
	с.н.с., к.фм.н.
Шкляев Александр Викторович	
=	
	(подпись научного руководителя)

Москва 2022

1 Введение

В работе мы рассмотрим задачу, которая возникает при исследовании коллоидных примесей в жидкости.

Примеси в исследуемой жидкости — это движущиеся частицы с размерами порядка 10^{-8} м. Для исследования таких примесей используется анализ траекторий наночастиц.

Схема анализа траекторий наночастиц:

- 1. Жидкость освещается лазером.
- 2. Частица, которая попала в луч, рассеивает свет.
- 3. Рассеянный свет попадает на объектив оптического микроскопа.
- 4. Видеокамера записывает последовательность оптических изображений.
- 5. Специальное программное обеспечение по последовательности изображений строит траекторию перемещений частиц.

Траектория движения отдельной частицы является броуновским движением с нулевым сносом и дисперсией σ^2 .

Физически, величина σ^2 является коэффициентом диффузии, поэтому из соотношения Стокса—Эйнштейна следует, что

$$\sigma^2 = \frac{c}{d},$$

где d — размер частицы, а c — некоторая константа.

Наша задача — по траекториям частиц оценить распределение их размеров d.

1.1 Постановка задачи

Мы будем изучать задачу, равносильную оценке распределения размера частиц d: оценить распределение случайной величины $\sigma^2 = c/d$.

Рассмотрим n случайно выбранных частиц E_1, \ldots, E_n . Обозначим дисперсии для их движения как $\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2$.

Для i-й частицы у нас есть два k_i -мерных вектора перемещений:

$$A_i^1,\dots,A_i^{k_i}$$
 — по оси $x,$ $A_i^{k_i+1},\dots,A_i^{2k_i}$ — по оси $y.$

Мы сначала рассмотрим только частный случай, когда все k_i равны k, а случайная величина σ_i^2 непрерывна. Затем в разделе 8 обобщим оценку на случай разных длин траекторий, то есть, различных величин k_i .

Для этого вместо выборки A_i^1,\dots,A_i^{2k} будем рассматривать достаточную статистику

$$Z_i = \sum_{j=1}^{2k} \left(A_i^j \right)^2.$$

Так как случайные величины A_i^1, \ldots, A_i^{2k} условно независимы при условии σ_i^2 и имеют условное распределение $\mathcal{N}(0, \sigma_i^2)$, можем представить случайную величину Z_i в виде:

$$Z_i = \sigma_i^2 Y_i$$

где

$$Y_i \sim \chi^2_{2k}$$
.

При этом Y_i независимы и не зависят от дисперсии σ_i^2 .

Обозначим $X_i = \sigma_i^2$ и сформулируем формальную постановку задачи.

Задача. Пусть:

- 1. X_1, \ldots, X_n независимые одинаково распределенные непрерывные случайные величины с неизвестным распределением и положительным носителем;
- 2. Y_1, \ldots, Y_n независимые одинаково распределенные случайные величины с распределением χ^2_{2k} ;
- 3. Случайные величины $X_1, \ldots, X_n, Y_1, \ldots, Y_n$ независимы в совокупности.
- 4. Z_1, \ldots, Z_n наблюдаемые случайные величины, такие, что:

$$Z_i = X_i Y_i$$
.

Нужно по наблюдениям случайных величин $Z_1,...,Z_n$ оценить распределение случайной величины X_1 .

2 Предварительные сведения

Мы будем рассматривать дискретное вейвлет-преобразование. Сформулируем основные определения и свойства.

Определение. Материнский вейвлет — это функция $\psi(t)$, которая отвечает следующему свойству:

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\left|\hat{\psi}(\xi)\right|^{2}}{|\xi|} d\xi = \int_{-\infty}^{0} \frac{\left|\hat{\psi}(\xi)\right|^{2}}{|\xi|} d\xi < \infty,$$

где $\hat{\psi}(\xi)$ – образ фурье $\psi(\xi)$.

Из этого свойства следует, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t)dt = 0.$$

Из материнского вейвлета $\psi(t)$ строится система вейвлетов

$$\psi_{m,n}(t) = \frac{1}{\sqrt{a^m}} \psi\left(\frac{t}{a^m} - nb\right).$$

В дальнейшем мы будем испольвать вейвлеты с a=2 и b=1. Таким образом, мы будем использовать систему:

$$\psi_{m,n}(t) = \frac{1}{\sqrt{2^m}} \psi\left(\frac{t}{2^m} - n\right).$$

Часто система вейвлетов не является ортогональной, но образует фрейм.

Определение. Семейство ϕ_k является фреймом в $L_2(\mathbb{R})$, если существуют постоянные A и B такие, что

$$\forall f \in L_2(\mathbb{R}) \quad A||f||^2 \leqslant \sum_k |(f, \phi_k)|^2 \leqslant B||f||^2$$

Лемма. Если семейство ϕ_k образует фрейм, то

$$f = \frac{2}{A+B} \sum_{k} (f, \phi_k) \phi_k + Rf,$$

e

$$||R|| \leqslant \frac{B-A}{B+A}$$

Мы будем использовать два вейвлета: Mexican hat и вейвлет Мейера. Приведем их материнские функции.

Определение. Материнская функция вейвлета Mexican hat:

$$\psi(t) = \frac{2}{\sqrt{3}} \pi^{-1/4} \left(1 - t^2 \right) e^{-t^2/2}.$$

Определение. Материнская функция вейвлета Мейера:

$$\psi(t) = \psi_1(t) + \psi_2(t),$$

где

$$\psi_1(t) = \frac{\frac{4}{3\pi} \left(t - \frac{1}{2}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3} \left(t - \frac{1}{2}\right)\right) - \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{4\pi}{3} \left(t - \frac{1}{2}\right)\right)}{\left(t - \frac{1}{2}\right) - \frac{16}{9} \left(t - \frac{1}{2}\right)^3},$$

$$\psi_2(t) = \frac{\frac{8}{3\pi} \left(t - \frac{1}{2}\right) \cos\left(\frac{8\pi}{3} \left(t - \frac{1}{2}\right)\right) + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{4\pi}{3} \left(t - \frac{1}{2}\right)\right)}{\left(t - \frac{1}{2}\right) - \frac{64}{9} \left(t - \frac{1}{2}\right)^3}.$$

Вейвлет Mexican hat образует фрейм с границами A = 3,223, B = 3,596, вейвлет Мейера является ортогональным, т. е. образует базис $L_2(\mathbb{R})$.

Также нам потребуются преобразование Лапласа и формула Меллина обратного преобразования Лапласа.

Определение. Преобразование лапласа функции f(t) – это функция $L_t[f](s)$, которая задается формулой

$$L_t[f](s) = \int_0^\infty f(t)e^{-st}dt.$$

Лемма (Формула Меллина). Пусть $F(s) = L_s[f](t)$ – преобразование Лапласа функции f(t). Тогда

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} e^{ts} ds,$$

где α такое, что контур лежит правее всех особенностей F(s) и F(s) ограничена на этом контуре.

3 Преобразование задачи для использования вейвлетов

Повторим задачу. Есть независимые одинаково распределенные непрерывные (н. о. р) положительные случайные величины (с. в.) X_1, \ldots, X_N с неизвестным распредлением. Есть н. о. р. с. в. Y_1, \ldots, Y_N с распределением $\chi^2(2k)$. Мы наблюдаем случайные величины Z_1, \ldots, Z_N , которые задаются как $Z_i = X_i Y_i$. Нужно оценить распределение X_1 .

Будем строить функции $g_{m,n}$ такие, что Е $g_{m,n}(Z) = \mathrm{E}\,\psi_{m,n}(X)$. Заметим, что достаточно выполнения:

$$\forall x \in \operatorname{Im} X \quad \operatorname{E} g_{m,n}(xY) = \psi_{m,n}(x).$$

Таким образом, нам нужно найти функции $g_{m,n}$ такие, что

$$\int_{0}^{\infty} g_{m,n}(xy) f_Y(y) dy = \psi_{m,n}(x).$$

Тогда

$$f_X(x) \approx \sum_{m,n} \operatorname{E} \psi_{m,n}(X) \psi_{m,n}(x) = \sum_{m,n} \operatorname{E} g_{m,n}(Z) \psi_{m,n}(x),$$

причем в случае с ортогональным вейвлетом здесь будет равенство.

Получаем оценку:

$$f_X(x) \approx \sum_{m,n} \sum_i \frac{g_{m,n}(z_i)}{N} \psi_{m,n}(x)$$

4 Аналитическое вычисление $g_{m,n}(t)$ для Mexican hat вейвлета

4.1 Вспомогательные леммы

В дальнейшем для вычислений нам понадобится несколько технических фактов. Сформулируем и докажем их в этом разделе.

Лемма 1 (О связи мат. ожидания χ^2_{2k} и преобразования Лапласа). Пусть $Y \sim \chi^2_{2k}$ с плотностью $f_Y(y), \ a>0$. Тогда

$$\operatorname{E} g(aY) = \left(\frac{1}{2a}\right)^k \frac{1}{\Gamma(k)} L_z \left[g(z)z^{k-1}\right] \left(\frac{1}{2a}\right).$$

Доказательство. Раскроем математическое ожидание:

$$\operatorname{E} g(aY) = \int\limits_0^\infty g(ay) f_Y(y) dy.$$

Подставим функцию плотности:

$$E g(aY) = \int_{0}^{\infty} g(ay) \frac{1}{\Gamma(k)} \frac{1}{2^{k}} y^{k-1} e^{-y/2} dy.$$

Подставим z = ay:

$$Eg(aY) = \int_{0}^{\infty} g(z) \frac{1}{\Gamma(k)} \frac{1}{2^{k}} \left(\frac{z}{a}\right)^{k-1} e^{-z/(2a)} \frac{dz}{a} = \left(\frac{1}{2a}\right)^{k} \frac{1}{\Gamma(k)} \int_{0}^{\infty} g(z) z^{k-1} \exp\left(-z\frac{1}{2a}\right) dz.$$

Заменим интеграл преобразованием Лапласа:

$$Eg(aY) = \left(\frac{1}{2a}\right)^k \frac{1}{\Gamma(k)} L_z \left[g(z)z^{k-1}\right] \left(\frac{1}{2a}\right).$$

Лемма 2 (Замена переменной в обратном преобразовании Лапласа). *Пусть существует* $L_u^{-1}[f(cu)](t), c > 0$. *Тогда*

$$L_u^{-1}[f(cu)](t) = L_s^{-1}\left[\frac{1}{c}f(s)\right]\left(\frac{t}{c}\right).$$

Доказательство. Воспользуемся формулой Меллина:

$$L_u^{-1}\left[f\left(cu\right)\right](t) = \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} e^{ut} f(cu) du = \frac{1}{c} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} e^{(cu)(t/c)} f(cu) d\left(cu\right).$$

Произведем замену s = cu

$$L_u^{-1}\left[f\left(cu\right)\right](t) = \frac{1}{c} \int_{c\alpha-i\infty}^{c\alpha+i\infty} e^{s(t/c)} f(s) ds.$$

Заменим интеграл на обратное преобразование Лапласа

$$L_u^{-1}\left[f\left(cu\right)\right]\left(t\right) = L_s^{-1}\left[\frac{1}{c}f(s)\right]\left(\frac{t}{c}\right)$$

Лемма 3 (Правильная часть произведения голоморфной функции и функции с нулевой положительной частью). Пусть f(z), g(z) — аналитические функции, коэффициента ряда Лорана для g(z) при положительных степенях нулевые, $\{a_n\}_{n=-\infty}^{\infty}$ — коэффициенты разложения в ряд Лорана функции f(z); $\{b_n\}_{n=-\infty}^{0}$ — коэффициенты разложения в ряд Лорана функции g(z).

Тогда в правильной части разложения в ряд Лорана произведения f(z)g(z) участвуют только коэффициенты правильной части функции f(z). При этом сам ряд имеет вид:

Доказательство. Разложим f(z)g(z) в ряд Лорана:

$$f(z)g(z) = \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n z^n\right) \left(\sum_{m=-\infty}^{0} b_m z^m\right) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} z^k \sum_{m=-\infty}^{0} a_{k-m} b_m.$$

Нас интересуют только правильная часть, поэтому рассматриваем коэффициенты при $k \ge 0$. При этом из ряда Лорана функции f(z) используются коэффициенты k-m. Принимая во внимание, что $k \ge 0$ и $m \le 0$, получаем, что $k-m \ge 0$. А значит, используется только правильная часть функции f(z).

Лемма 4 (Правильная часть ряда Лорана для $f(s) = e^{as}e^{-1/(2s^2)}$). Правильная часть ряда Лорана для функции

$$f(z) = e^{az}e^{-1/(2z^2)}$$

равна

$$\sum_{k=0}^{\infty} z^k \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^{2m+k}/(-2)^m}{(2m+k)! \, m!}.$$

Доказательство. Заменим экспоненты рядами:

$$e^{az}e^{-1/(2z^2)} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(az)^n}{n!}\right) \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1/(2z^2))^m}{m!}\right).$$

Обе функции аналитичны в $\mathbb{C} \setminus \{0\}$, поэтому их ряды сходятся абсолютно. Находим ряд Лорана для f(z), перемножая по Коши эти два ряда:

$$e^{az}e^{-1/(2z^2)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} z^k \sum_{n-2m=k} \chi(n \ge 0) \chi(m \ge 0) \frac{a^n/(-2)^m}{n! \, m!}.$$

Тогда правильная часть:

$$\sum_{k=0}^{\infty} z^k \sum_{n-2m=k} \chi(n \ge 0) \chi(m \ge 0) \frac{a^n/(-2)^m}{n! \, m!} = \sum_{k=0}^{\infty} z^k \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^{2m+k}/(-2)^m}{(2m+k)! \, m!}.$$

Лемма 5 (Правильная часть ряда Лорана для $f(z)=e^{az}e^{-1/(2s^2)}e^{n/s}$). Пусть $k\geq 0;$ пусть

$$f(z) = e^{az}e^{-1/(2z^2)}e^{b/z}.$$

Тогда к-й член ряда Лорана для f равен

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^{2m+k+l}/(-2)^m}{(2m+k+l)! \, m!} \frac{n^l}{l!}.$$

Доказательство. Определим

$$g(z) = e^{az}e^{-1/(2z^2)}$$

 $h(z) = e^{b/z}$.

Обе функции аналитичны в $\mathbb{C}\setminus\{0\}$. Поэтому их ряды сходятся абсолютно и мы можем умножить ряды по Коши, чтобы получить ряд Лорана для f.

У функции $e^{n/z}$ положительная часть нулевая. Поэтому, согласно лемме 3 о правильной части произведения голоморфной функции и функции с нулевой положительной частью, нам достаточно знать только правильную часть разложения функции q, которую мы нашли в предыдущей лемме 4.

Пусть $\{\alpha_n\}_{n=-\infty}^{\infty}$ — коэффициенты разложения g(z) в ряд Лорана, $\{\beta_n\}_{n=-\infty}^0$ — коэффициенты разложения h(z), а $\{\gamma_n\}_{n=-\infty}^{\infty}$ — коэффициенты разложения f.

Приведем формулу k-го члена их произведения, где $k \ge 0$:

$$\gamma_k = \sum_{l=-\infty}^{0} \alpha_{k-l} \beta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \alpha_{k+l} \beta_{-l}.$$

Формулу для α_k возьмем из леммы 4:

$$\alpha_k = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^{2m+k}/(-2)^m}{(2m+k)! \, m!}.$$

И выпишем формулу для β_{-k} :

$$\beta_{-k} = \frac{n^k}{k!}.$$

Подставим α_k и β_{-k} в формулу для γ_k :

$$\gamma_k = \sum_{l=0}^{\infty} \alpha_{k+l} \beta_{-l} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^{2m+k+l}/(-2)^m}{(2m+k+l)! \, m!} \frac{n^l}{l!}.$$

Лемма Жордана позволяет использовать основную теорему о вычетах для интеграла по контуру $(-\infty,\infty)$. Обратное преобразование Лапласа можно найти, используя интеграл Меллина. Этот интеграл использует контур $(\alpha-i\infty,\alpha+i\infty)$. Если мы модифицируем лемму Жордана, чтобы она использовала контур в виде левой полуокружности с центром в α , то сможем использовать основную теорему о вычетах для вычисления обратного преобразования Лапласа.

Лемма 6 (Модифицированная лемма Жордана). Пусть α , t, $R_0 > 0$, функция F(s) непрерывна в области

$$G = \{s \mid \text{Re } s \le \alpha\} \cap \{s \mid |s - \alpha| \ge R_0 > 0\}$$

Обозначим C_R — полуокружность $|z - \alpha| = R$ в области G. И пусть выполняется:

$$\lim_{R \to \infty} \sup_{s \in C_R} |F(s)| = 0.$$

Tог ∂a

$$\lim_{R \to \infty} \int_{C_R} e^{ts} F(s) ds = 0.$$

Доказательство. Для наглядности схематично изобразим контур интегрирования и область G:

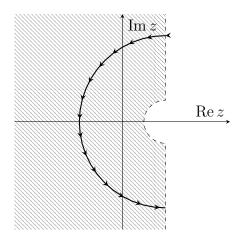


Рис. 1: контур и область

По условию,

$$\forall \varepsilon > 0 \ \exists R \ \forall s \in C_R \ |F(s)| = |F(\alpha + Re^{i\varphi})| < \varepsilon,$$

тогда

$$\left| \int_{C_R} e^{ts} F(s) ds \right| \le \int_{C_R} \left| e^{ts} F(s) \right| |ds| \le \varepsilon \int_{C_R} \left| e^{ts} \right| |ds|.$$

На полуокружности C_R мы можем представить экспоненту e^{ts} в виде:

$$|e^{ts}| = |e^{t(\alpha + R\cos\varphi + Ri\sin\varphi)}| = e^{t(\alpha + R\cos\varphi)}.$$

Подставим это в интеграл:

$$\varepsilon \int_{C_R} \left| e^{st} \right| \left| ds \right| = \varepsilon \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} e^{\alpha t + Rt \cos \varphi} \left| d \left(Re^{i\varphi} \right) \right|$$

И упростим его:

$$\varepsilon \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} e^{\alpha t + Rt \cos \varphi} \left| d \left(Re^{i\varphi} \right) \right| = \varepsilon \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \left| e^{\alpha t + Rt \cos \varphi} Rie^{i\varphi} \right| d\varphi = R\varepsilon e^{\alpha t} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} e^{Rt \cos \varphi} d\varphi$$

$$= R\varepsilon e^{\alpha t} \int_{0}^{\pi} e^{Rt \cos(\varphi + \frac{\pi}{2})} d\varphi = R\varepsilon e^{\alpha t} \int_{0}^{\pi} e^{-Rt \sin \varphi} d\varphi = 2R\varepsilon e^{\alpha t} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} e^{-Rt \sin \varphi} d\varphi.$$

На отрезке $[0,\frac{\pi}{2}]$ выполняется: $\sin \varphi \geq \frac{2}{\pi} \varphi$. А значит,

$$2R\varepsilon e^{\alpha t} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} e^{-Rt\sin\varphi} d\varphi \le 2R\varepsilon e^{\alpha t} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} e^{-Rt\frac{2}{\pi}\varphi} d\varphi = .$$

Этот интеграл уже легко вычисляется:

$$2R\varepsilon e^{\alpha t}\int\limits_{0}^{\frac{\pi}{2}}e^{-Rt\frac{2}{\pi}\varphi}d\varphi=2R\varepsilon e^{\alpha t}\left(\frac{1}{-\frac{2Rt}{\pi}}e^{-\frac{2Rt\varphi}{\pi}}\right)\bigg|_{0}^{\frac{\pi}{2}}=\frac{\pi\varepsilon}{t}e^{\alpha t}\left(1-e^{-Rt}\right).$$

Получившаяся функции стремится к нулю при $R \to \infty$. Отсюда интеграл по дуге стремится к 0.

4.2 Сведение задачи к вычислению обратного преобразования Лапласа

Рассмотрим только случай $X_i > \delta > 0$.

Мы будем использовать вейвлет «Mexican hat», потому что он прост и непрерывен. Его формула:

$$\psi(t) = \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}}(1 - t^2)e^{-t^2/2}.$$

Определим элементы фрейма:

$$\psi_{m,n}(t) = \frac{1}{\sqrt{2^m}} \psi\left(\frac{t}{2^m} - n\right) = \frac{1}{\sqrt{2^m}} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \left(1 - \left(\frac{t}{2^m} - n\right)^2\right) e^{-\left(\frac{t}{2^m} - n\right)^2/2}.$$

Напишем плотность Y_i :

$$f_Y(y) = \frac{1}{2^k} \frac{1}{\Gamma(k)} y^{k-1} e^{-y/2}.$$

Раскроем $E g_{m,n}(xY)$:

$$E g_{m,n}(xY) = \int_{0}^{\infty} g_{m,n}(xy) f_Y(y) dy = \int_{0}^{\infty} g_{m,n}(xy) \frac{1}{2^k} \frac{1}{\Gamma(k)} y^{k-1} e^{-y/2} dy.$$

Произведем замену z = xy:

$$E g_{m,n}(xY) = \frac{1}{2^k} \frac{1}{\Gamma(k)} \int_0^\infty g_{m,n}(z) \frac{z^{k-1}}{x^{k-1}} e^{-z/(2x)} \frac{dz}{x}$$
$$= \left(\frac{1}{2x}\right)^k \frac{1}{\Gamma(k)} \int_0^\infty g_{m,n}(z) z^{k-1} \exp\left(-z\frac{1}{2x}\right) dz.$$

Заменим интеграл преобразованием Лапласа:

$$E g_{m,n}(xY) = \left(\frac{1}{2x}\right)^k \frac{1}{\Gamma(k)} L_z \left[g_{m,n}(z)z^{k-1}\right] \left(\frac{1}{2x}\right).$$

Получаем функциональное уравнение:

$$\left(\frac{1}{2x}\right)^k \frac{1}{\Gamma(k)} L_z \left[g_{m,n}(z) z^{k-1} \right] \left(\frac{1}{2x}\right) = \psi_{m,n}(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^m \psi \left(\frac{x}{2^m} - n\right)$$

Сделаем замену $u = \frac{1}{2x}$:

$$u^{k} \frac{1}{\Gamma(k)} L_{z} \left[g_{m,n}(z) z^{k-1} \right] (u) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{m} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1} u} - n \right) du$$

Перенесем множители в правую часть:

$$L_z \left[g_{m,n}(z) z^{k-1} \right] (u) = \frac{\Gamma(k)}{u^k} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^m \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1} u} - n \right).$$

Произведем обратное преобразование Лапласа:

$$g_{m,n}(z)z^{k-1} = L_u^{-1} \left[\frac{\Gamma(k)}{u^k} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^m \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (z).$$

Выразим $g_{m,n}(z)$:

$$g_{m,n}(z) = \frac{1}{z^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1} u} - n \right) \right] (z). \tag{1}$$

Итак, нам нужно вычислить:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1} u} - n \right) \right] (t).$$

Подставим вместо ψ формулу нашего вейвлета:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (t) = L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \left(1 - \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right)^2 \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right)^2 \right) \right] (t).$$

Введем обозначение:

$$r_{m,n}(u) = \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n\right)\right).$$

И сразу воспользуемся им:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (t) = L_u^{-1} \left[\left(1 - \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right)^2 \right) r_{m,n}(u) \right] (t).$$

Распишем множитель перед экспонентой:

$$1 - \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n\right)^2 = 1 - \left(\frac{1}{2^{2(m+1)}u^2} - 2\frac{1}{2^{m+1}u}n + n^2\right) =$$

$$= \left(1 - n^2\right) + \frac{1}{u}\left(\frac{n}{2^m}\right) - \frac{1}{u^2}\left(\frac{1}{4^{m+1}}\right).$$

Таким образом,

$$L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k}} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (t) =$$

$$= \left(1 - n^{2} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k}} r_{m,n}(u) \right] (t) + \left(\frac{n}{2^{m}} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+1}} r_{m,n}(u) \right] (t) -$$

$$- \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+2}} r_{m,n}(u) \right] (t). \quad (2)$$

Отсюда видно, что достаточно найти $L_u^{-1}[\frac{1}{u^k}r_{m,n}(u)](t)$ для каждого k.

4.3 Нахождение $L_u^{-1}[\frac{1}{u^k}r_{m,n}(u)](t)$

Выше мы ввели

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t).$$

Подставим обратно $r_{m,n}(u)$:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) = L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right)^2 \right) \right] (t).$$

Раскроем квадрат под экспонентой:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) =$$

$$= L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\left(n^2 \right) - \frac{1}{u} \left(\frac{n}{2^m} \right) + \frac{1}{u^2} \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) \right) \right) \right] (t).$$

Сгруппируем $2^{m+1}u$:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) =$$

$$= L_u^{-1} \left[\frac{2^{k(m+1)}}{(2^{m+1}u)^k} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{n^2}{2} + \frac{n}{2^{m+1}u} - \frac{1}{2(2^{m+1}u)^2}\right) \right] (t).$$

Вынесем множители, не зависящие от u, за L_u^{-1} :

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) =$$

$$= e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{k(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} L_u^{-1} \left[\frac{1}{(2^{m+1}u)^k} \exp\left(\frac{n}{2^{m+1}u} - \frac{1}{2(2^{m+1}u)^2}\right) \right] (t).$$

Используя лемму 2 о замене переменной в обратном преобразовании Лапласа, делаем замену $s=2^{m+1}u$:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right](t) = e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s} - \frac{1}{2s^2}\right) \right] \left(\frac{t}{2^{m+1}}\right).$$

4.4 Вычисление обратного преобразование Лапласа

В предыдущем разделе мы выразили:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) = e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s} - \frac{1}{2s^2}\right) \right] \left(\frac{t}{2^{m+1}}\right). \tag{3}$$

Чтобы вычислить правую часть, найдем теперь

$$L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s}\right) \exp\left(-\frac{1}{2s^2}\right) \right] (\tau). \tag{4}$$

Воспользуемся формулой Меллина обратного преобразования Лапласа. У данной функции особенность только в нуле, поэтому можно взять любое число $\alpha>0$:

$$L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s}\right) \exp\left(-\frac{1}{2s^2}\right) \right] (\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} e^{s\tau} \frac{1}{s^k} e^{-1/(2s^2)} e^{n/s} ds.$$

Берем контур $C = C_1 + C_2$, где C_1 — искомый, а C_2 — дуга окружности (слева от C_1 с центром в $(\alpha, 0)$).

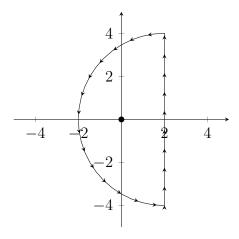


Рис. 2: Наглядное изображение контура.

Оценим $F(s):=(1/s^k)e^{-1/(2s^2)}e^{n/s}$ на C_r , где $r>4\alpha$. Для этого оценим каждый из множителей. Сначала 1/s:

$$\left| \frac{1}{s} \right| = \left| \frac{1}{\alpha + re^{i\phi}} \right| = \frac{1}{\sqrt{(\alpha + r\cos\phi)^2 + (r\sin\phi)^2}} = \frac{1}{r\sqrt{\left(\frac{\alpha}{r} + \cos\phi\right)^2 + \sin^2\phi}} \le \frac{1}{r\sqrt{1 + \frac{2\alpha\cos\phi}{r}}} \le \frac{1}{r\sqrt{1 + \frac{\cos\phi}{2}}} \le \frac{\sqrt{2}}{r}.$$

Теперь оценим $e^{-1/(2s^2)}$ на том же контуре. Известно, что $|e^z|=e^{|z|}$

$$\left| \exp\left(-\frac{1}{2s^2}\right) \right| \le \exp\left(\left|-\frac{1}{2s^2}\right|\right) = \exp\left(\frac{1}{r^2}\right).$$

Аналогично оцениваем $e^{n/s}$:

$$\left| \exp\left(\frac{n}{s}\right) \right| \le \exp\left(\left|\frac{n}{s}\right|\right) = \exp\left(\frac{|n|\sqrt{2}}{r}\right).$$

Объединяем оценки и получаем:

$$\left| \frac{1}{s^k} \exp\left(-\frac{1}{2s^2} \right) \exp\left(\frac{n}{s} \right) \right| \le \left(\frac{\sqrt{2}}{r} \right)^k \exp\left(\frac{1}{r^2} \right) \exp\left(\frac{|n|\sqrt{2}}{r} \right) \xrightarrow[r \to \infty]{} 0.$$

А значит, по лемме Жордана $\int\limits_{C_r} e^{s\tau} F(s) ds$ стремится к нулю. Поэтому можем использовать основную теорему о вычетах:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} e^{s\tau} \frac{1}{s^k} e^{-1/(2s^2)} e^{n/s} ds = \frac{1}{2\pi i} 2\pi i \operatorname{Res}_{0} \left(e^{s\tau} \frac{1}{s^k} e^{-1/(2s^2)} e^{n/s} ds \right).$$

У нас возникает два случая: n = 0 и $n \neq 0$

4.4.1 Случай n = 0

Воспользуемся леммой 4 о правильной части функции $e^{s\tau}e^{-1/(2s^2)}$. Нам нужен k-1-й член ряда Лорана. Получаем:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} e^{s\tau} \frac{1}{s^k} e^{-1/(2s^2)} e^{n/s} ds = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tau^{2j+k-1}/(-2)^j}{(2j+k-1)! \, j!}.$$

Таким образом, мы вычислили выражение 4 для n = 0:

$$L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s}\right) \exp\left(-\frac{1}{2s^2}\right) \right] (\tau) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tau^{2j+k-1}/(-2)^j}{(2j+k-1)! \, j!}.$$

Подставим этот ряд в выражение 3, заменяя τ на $t/2^{m+1}$:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) =$$

$$= e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s} - \frac{1}{2s^2}\right) \right] \left(\frac{t}{2^{m+1}}\right) =$$

$$e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+k-1}/(-2)^j}{(2j+k-1)! j!}.$$

Наконец, подставим получившееся выражение в формулу 2:

$$L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k}} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (t) =$$

$$= \left(1 - n^{2} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k}} r_{m,n}(u) \right] (t) + \left(\frac{n}{2^{m}} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+1}} r_{m,n}(u) \right] (t) +$$

$$+ \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+2}} r_{m,n}(u) \right] (t) =$$

$$= \left(1 - n^{2} \right) e^{-\frac{n^{2}}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k-1} / (-2)^{j}}{(2j+k-1)! j!} +$$

$$+ \left(\frac{n}{2^{m}} \right) e^{-\frac{n^{2}}{2}} 2^{k(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k} / (-2)^{j}}{(2j+k)! j!} -$$

$$- \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) e^{-\frac{n^{2}}{2}} 2^{(k+1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k+1} / (-2)^{j}}{(2j+k+1)! j!}. \quad (5)$$

Теперь получим выражение для g(t), подставляя только что полученную формулу в выражение 1:

$$\begin{split} g_{m,n}(t) &= \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right](t) = \\ &= \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \left(1 - n^2 \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k-1} / (-2)^j}{(2j+k-1)! \, j!} + \\ &\quad + \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \left(\frac{n}{2^m} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{k(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k} / (-2)^j}{(2j+k)! \, j!} - \\ &\quad - \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k+1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k+1} / (-2)^j}{(2j+k+1)! \, j!}. \end{split}$$

Теперь упростим выражение. Вынесем из суммы, степень, не зависящую от переменной суммирования и сделаем замену n=0 (так как рассматриваем именно этот случай):

$$g_{m,0}(t) = \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j}/(-2)^j}{(2j+k-1)! j!} - \left(\frac{t^2}{4^{m+1}}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j}/(-2)^j}{(2j+k+1)! j!} \right).$$

4.4.2 Случай $n \neq 0$

Воспользуемся леммой 5 о правильной части функции $e^{s\tau}e^{-1/(2s^2)}e^{n/s}$. Нам нужен k-1-й член ряда Лорана. Получаем:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{s-i\infty}^{\alpha+i\infty} e^{s\tau} \frac{1}{s^k} e^{-1/2s^2} e^{n/s} ds = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tau^{2j+k-1+i}/(-2)^j}{(2j+k-1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!}.$$

Таким образом, мы вычислили выражение 4 для $n \neq 0$:

$$L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s}\right) \exp\left(-\frac{1}{2s^2}\right) \right] (\tau) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tau^{2j+k-1+i}/(-2)^j}{(2j+k-1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!}.$$

Подставим это выражение в выражение 3, заменяя τ на $t/2^{m+1}$:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) =$$

$$= e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp\left(\frac{n}{s} - \frac{1}{2s^2}\right) \right] \left(\frac{t}{2^{m+1}}\right) =$$

$$= e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+k-1+i} / (-2)^j}{(2j+k-1+i)! j!} \frac{n^i}{i!}.$$

Наконец, подставим это в формулу 2:

$$L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k}} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (t) =$$

$$= \left(1 - n^{2} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k}} r_{m,n}(u) \right] (t) + \left(\frac{n}{2^{m}} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+1}} r_{m,n}(u) \right] (t) +$$

$$+ \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) L_{u}^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+2}} r_{m,n}(u) \right] (t) =$$

$$= \left(1 - n^{2} \right) e^{-\frac{n^{2}}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k-1+i} / (-2)^{j}}{(2j+k-1+i)! j!} \frac{n^{i}}{i!} +$$

$$+ \left(\frac{n}{2^{m}} \right) e^{-\frac{n^{2}}{2}} 2^{k(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k+i} / (-2)^{j}}{(2j+k+i)! j!} \frac{n^{i}}{i!} -$$

$$- \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) e^{-\frac{n^{2}}{2}} 2^{(k+1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k+1+i} / (-2)^{j}}{(2j+k+1+i)! j!} \frac{n^{i}}{i!}. \quad (6)$$

Теперь получим выражение для $g_{m,n}(t)$, подставляя только что полученную формулу в выражение 1

$$\begin{split} g_{m,n}(t) &= \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right](t) = \\ &= \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \left(1 - n^2 \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k-1+i} / (-2)^j}{(2j+k-1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} + \\ &\quad + \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \left(\frac{n}{2^m} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{k(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k+i} / (-2)^j}{(2j+k+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} - \\ &\quad - \frac{1}{t^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k+1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k+1+i} / (-2)^j}{(2j+k+1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!}. \end{split}$$

Упростим:

$$g_{m,n}(t) = \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} e^{-\frac{n^2}{2}} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \left((1 - n^2) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+i} / (-2)^j}{(2j+k-1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} + \left(\frac{nt}{2^m}\right) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+i} / (-2)^j}{(2j+k+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} - \left(\frac{t^2}{4^{m+1}}\right) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+i} / (-2)^j}{(2j+k+1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} \right).$$

4.5 Результат

Выпишем обе полученные формулы вместе:

$$g_{m,0}(t) = \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j}/(-2)^j}{(2j+k-1)! j!} - \left(\frac{t^2}{4^{m+1}}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j}/(-2)^j}{(2j+k+1)! j!} \right).$$

$$g_{m,n}(t) = \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} e^{-\frac{n^2}{2}} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \left((1 - n^2) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+i} / (-2)^j}{(2j+k-1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} + \left(\frac{nt}{2^m}\right) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+i} / (-2)^j}{(2j+k+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} - \left(\frac{t^2}{4^{m+1}}\right) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+i} / (-2)^j}{(2j+k+1+i)! \, j!} \frac{n^i}{i!} \right).$$

К сожалению, такой способ не привел к успеху из-за непригодности для численных методов.

5 Уравнение Фредгольма

Выпишем еще раз интегральное уравнение 3:

$$\psi_{m,n}(x) = \int_{0}^{\infty} g(xy) f_Y(y) dy.$$

Введем замену z = xy:

$$\psi_{m,n}(x) = \int_{0}^{\infty} g(xy) f_Y\left(\frac{xy}{x}\right) d\frac{xy}{x} = \int_{0}^{\infty} g(z) \frac{1}{x} f_Y\left(\frac{z}{x}\right) dz.$$

Таким образом, мы получили интегральное уравнение Фредгольма первого рода:

$$\psi_{m,n}(x) = \int_{0}^{\infty} K(x,z)g(z)dz,$$

где

$$K(x,z) = \frac{1}{x} f_Y\left(\frac{z}{x}\right).$$

5.1 Дискретизация

Будем использовать равномерную сетку $\left[\frac{1}{n_x},\dots,\frac{l_xn_x}{n_x}\right]$ для $x,\left[\frac{1}{n_z},\dots,\frac{l_zn_z}{n_z}\right]$ для z. Для вычисления интеграла используем метод прямоугольников. Дискретизируем функции $K(x,z),\,g_{m,n}(z),\,\psi_{m,n}(x)$:

$$K[x,z] = \begin{cases} K\left(\frac{k_x n_x}{n_x}, \frac{k_z n_z}{n_z}\right), \text{ если } z \in \left[\frac{k_z n_z}{n_z}, \frac{(k_z+1)n_z}{n_z}\right), \\ 0, \text{ иначе.} \end{cases}$$

$$g_{m,n}[z] = \begin{cases} g\left(\frac{k_z n_z}{n_z}\right), \text{ если } z \in \left[\frac{k_z n_z}{n_z}, \frac{(k_z+1)n_z}{n_z}\right), \\ 0, \text{ иначе.} \end{cases}$$

$$\psi_{m,n}[x] = \begin{cases} \psi_{m,n}\left(\frac{k_x n_x}{n_x}\right), \text{ если } x \in \left[\frac{k_x n_x}{n_x}, \frac{(k_x+1)n_x}{n_x}\right), \\ 0, \text{ иначе.} \end{cases}$$

Таким образом,

$$\int_{0}^{\infty} K[x,z]g[z]dz = \frac{1}{n_z} \sum_{j=1}^{l_z n_z} K\left[x, \frac{j}{n_z}\right] g_{m,n}\left[\frac{j}{n_z}\right].$$

Заменяя $\psi_{m,n}(x)$ на дискретизированную версию, получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \psi_{m,n} \left[\frac{1}{n_x} \right] = \frac{1}{n_z} \sum_{j=1}^{l_z n_z} K \left[\frac{1}{n_x}, \frac{j}{n_z} \right] g_{m,n} \left[\frac{j}{n_z} \right], \\ \dots \\ \psi_{m,n} \left[\frac{l_x n_x}{n_x} \right] = \frac{1}{n_z} \sum_{j=1}^{l_z n_z} K \left[\frac{l_x n_x}{n_x}, \frac{j}{n_z} \right] g_{m,n} \left[\frac{j}{n_z} \right]. \end{cases}$$

Построим матрицу K и векторы g, $\psi_{m,n}$:

$$(\boldsymbol{K})_{i,j} = K \left[\frac{i}{n_x}, \frac{j}{n_z} \right],$$

$$(\boldsymbol{g}_{m,n})_j = g_{m,n} \left[\frac{j}{n_z} \right],$$

$$(\boldsymbol{\psi}_{m,n})_i = \psi \left[\frac{i}{n_x} \right].$$

Запишем систему уравнений в матричном виде:

$$\boldsymbol{\psi}_{m,n} = \frac{1}{n_z} \boldsymbol{K} \boldsymbol{g}_{m,n}.$$

5.2 МНК-оптимизация с l_2 -регуляризацией

Определение. Пусть K — матрица, f — вектор. Рассмотрим уравнение:

$$f = Kq$$

где g неизветно.

Пусть $\alpha>0$ — некоторое число, называемое параметром регуляризации. Тогда МНК-оптимизация с l_2 —регуляризацией есть

$$\boldsymbol{g}_* = \operatorname*{arg\,min}_g \left(\| \boldsymbol{K} \boldsymbol{g} - \boldsymbol{f} \|^2 + \alpha^2 \| \boldsymbol{g} \|^2 \right).$$

Построим матрицу $ilde{m{K}}$, увеличив матрицу $m{K}$, чтобы добавить регуляризацию:

$$\tilde{\boldsymbol{K}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{K} \\ \alpha \boldsymbol{E} \end{pmatrix}.$$

И соответствующий $ilde{f}$:

$$ilde{f} = egin{pmatrix} f \ 0 \end{pmatrix}$$
 .

И будем использовать МНК-оптимизацию. Получаем:

$$oldsymbol{g}_{m,n}^* = rg \min_{oldsymbol{g}} \| ilde{oldsymbol{K}} oldsymbol{g} - oldsymbol{f} \|.$$

Покажем, что это эквивалентно определению МНК-оптимизации с l_2 -регуляризацией. В силу неотрицательности нормы и монотонности функции x^2 , выполняется:

$$oldsymbol{g}_{m,n}^* = rg\min_{oldsymbol{q}} \| ilde{oldsymbol{K}} oldsymbol{g} - ilde{oldsymbol{f}}\| = rg\min_{oldsymbol{q}} \| ilde{oldsymbol{K}} oldsymbol{g} - ilde{oldsymbol{f}}\|^2$$

Заметим, что в данном случае квадрат нормы есть сумма квадратов строк векторов. Поэтому выполняется:

$$\boldsymbol{g}_{m,n}^* = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{g}} \left(\|\boldsymbol{K}\boldsymbol{g} - \boldsymbol{f}\|^2 + \|\alpha \boldsymbol{E}\boldsymbol{g} - \boldsymbol{0}\|^2 \right) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{g}} \left(\|\boldsymbol{K}\boldsymbol{g} - \boldsymbol{f}\|^2 + \alpha^2 \|\boldsymbol{g}\|^2 \right)$$

5.3 Градиентный спуск

Вместо процедур для решения МНК-задачи мы можем использовать метод градиентного спуска. Будем использовать матричное представление

$$\boldsymbol{\psi}_{m,n} = \frac{1}{n_z} \boldsymbol{K} \boldsymbol{g}_{m,n}.$$

Тогда можно ввести функцию потери $L(\boldsymbol{\psi}_{m,n},\hat{\boldsymbol{\psi}}_{m,n})$, где $\hat{\boldsymbol{\psi}}_{m,n}=\boldsymbol{K}\hat{\boldsymbol{g}}_{m,n}$, а $\hat{\boldsymbol{g}}_{m,n}$ — оценка для $\boldsymbol{g}_{m,n}$.

В частности, будем рассматривать следующие функции потерь:

- l_1 -потеря: $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = ||x y||_1$;
- l_2 -потеря: $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \|x y\|_2$;
- функция потери Хьюбера:

$$L(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x-y)^2, \text{ при } |x-y| \leqslant 1\\ |x-y| - \frac{1}{2}, \text{ при } |x-y| > 1 \end{cases}.$$

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} L(x_i, y_i)$$

Для каждой из них будем использовать l_1 - или l_2 -регуляризацию. Для l_1 - регуляризации:

$$\tilde{L}(\psi_{m,n}, \hat{\psi}_{m,n}) = L(\psi_{m,n}, \hat{\psi}_{m,n}) + \alpha \|g_{m,n} - \hat{g}_{m,n}\|_{1}.$$

Для l_2 -регуляризации:

$$\tilde{L}(\psi_{m,n}, \hat{\psi}_{m,n}) = L(\psi_{m,n}, \hat{\psi}_{m,n}) + \alpha^2 \|g_{m,n} - \hat{g}_{m,n}\|_2^2$$

Алгоритм оптимизации методом градиентного спуска с параметром β стандартен:

- 1. Берем произвольный начальный вектор $\boldsymbol{g}_{m,n}^{0}$.
- 2. Вычисляем $\psi_{m,n}^0 = K g_{m,n}^0$.
- 3. Вычисляем $L^0 = \tilde{L}(oldsymbol{\psi}_{m,n}, oldsymbol{\psi}_{m,n}^0)$
- 4. Считая компоненты g_1^0, \dots, g_k^0 вектора $\boldsymbol{g}_{m,n}^0$ переменными, а $L^0 = L^0(a_1^0, \dots, a_k^0)$ функцией от компонент вектора $\boldsymbol{g}_{m,n}^0$, вычисляем частные производные b_i :

$$b_i^0 = \frac{\partial L^0(a_1^0, \dots, a_k^0)}{\partial a_i}.$$

- 5. Берем $\mathbf{g}_{m,n}^1 = (a_1^0 \beta b_0^0, \dots, a_k^0 \beta b_k^0).$
- 6. Повторяем шаги 1-5, пока либо L не станет меньше некоторого заранее заданного числа, либо количество повторений превысит некоторое заранее заданное число

5.4 Итеративные методы

В статье [1] рассматриваются итеративные методы решения задачи Фредгольма первого рода: аддитивный и мультипликативный.

В приложении к задаче аддитивный метод использует следующие итерации:

$$g_{m,n,k}(z) = g_{m,n,k-1}(z) + \int_{0}^{\infty} K(x,z)(\psi_{m,n}(x) - \psi_{m,n,k-1}(x))dx,$$

где

$$\psi_{m,n;k}(x) = \int_{0}^{\infty} K(x,z)g_{m,n;k}(z)dz.$$

Для мультипликативного метода используются следующие итерации:

$$g_{m,n;k}(z) = \frac{g_{m,n;k-1}(z)}{\int_0^\infty K(x,z)dx} \int_0^\infty \frac{K(x,z)\psi_{m,n;k-1}(x)}{\psi_{m,n;k}(x)} dx,$$

$$\psi_{m,n;k}(x) = \int_{0}^{\infty} K(x,z)g_{m,n;k}(z)dz.$$

Этот метод работает только для неотрицательных $\psi_{m,n}(x)$ и $g_{m,n}(z)$. В случае, когда эти функции могут принимать отрицательные значения, мы фиксируем число t такое, что $\psi_{m,n}(x) + t \ge 0$ и $g_{m,n}(z) + t \ge 0$, и решаем следующее эквивалентное уравнение:

$$\tilde{\psi}_{m,n}(x) = \int_{0}^{\infty} K(x,z)\tilde{g}_{m,n}(z)dz,$$

где

$$\tilde{g}_{m,n}(z) = g_{m,n}(z) + t,$$

$$\tilde{\psi}_{m,n}(x) = \psi_{m,n}(x) + t \int_{0}^{\infty} K(x,z)dz.$$

6 Поправка для оценок

Оценка, полученная нашим методом не всегда является функцией распределения. Поэтому будем использовать поправку, предложенную в статье [2] В ней рассматриваются два случая. Пусть \hat{f}_X — оценка функции плотности f_X .

В случае, когда выполняется:

$$\int_{0}^{\infty} \max(\hat{f}_X(x), 0) dx > 1,$$

исправленная оценка $\tilde{f}_X(x)$ определяется как:

$$\tilde{f}_X(x) = \max(0, \hat{f}_X(x) - \xi),$$

где ξ выбирается так, чтобы выполнялось

$$\int_{0}^{\infty} \tilde{f}_X(x) dx = 1.$$

В случае, когда выполняется:

$$\int_{0}^{\infty} \max(\hat{f}_X(x), 0) dx > 1,$$

исправленная оценка $\tilde{f}_X(x)$ определяется следующим образом. Фиксируем параметр M>0 и положим

$$\tilde{f}_X(x) = \tilde{f}_X(x; M) = \begin{cases} \max(0, \hat{f}_X(x)) + \eta_M, \text{ для } |x| \leqslant M, \\ \max(0, \hat{f}_X(x)), \text{ для } |x| > M, \end{cases}$$

где

$$\eta_M = \frac{1}{2M} \left(1 - \int \max(0, \hat{f}_X(x)) dx \right).$$

7 Эксперименты

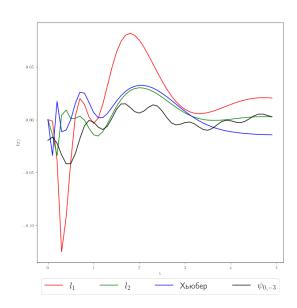
Вычисление значений функции $g_{m,n}(z)$ аналитическим способом, рассмотренным в разделе 4 требует использования длинной арифметики и вычисления большого количества членов ряда. Это приводит к очень низкой скорости построения оценки.

Для построения оценок численными методами мы использовали следующие параметры

- 1. Равномерная сетка по x, состоящая из 1000 точек, минимальная точка: 0,05, максимальная точка: 100.
- 2. Равномерная сетка по z, состоящая из 10 000 точек, минимальная точка: 0,05, максимальная точка: 1000.
- 3. Параметр m от -5 до 5 включительно.
- 4. Параметр n от -5 до 5 включительно.
- 5. Параметр регуляризации α : 0,1.

Опишем графики, приведенные ниже:

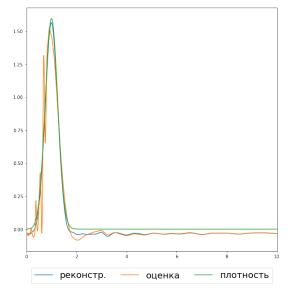
- 1. На графике 3 показано сравнение различных функций ошибок для метода градиентного спуска. А именно, изображено $\int_0^\infty K(x,z)g_{0,-3}(z)dz$, где $g_{0,-3}$ получено с использованием различных функций ошибок. Также изображена функция $\psi_{0,-3}$.
- 2. На графике 4 изображено сравнение различных методов решения уравнения и приведена целевая функция.
- 3. На графиках 5, 6 изображена оценка для некоторых распределений X, полученная методом МНК-оптимизации с l_2 -регуляризацией.
- 4. На графиках 7, 8, 9 изображены оценки, полученные разными методами, для смеси двух нормальных распределений: $\mathcal{N}(1,1/4)$ и $\mathcal{N}(3,1/2)$.



0 100 - 0 073 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050 - 0 050

Рис. 3: Сравнение функций ошибок для метода градиентного спуска

Рис. 4: Сравнение методов градиентного спуска, итеративного и МНКоценки



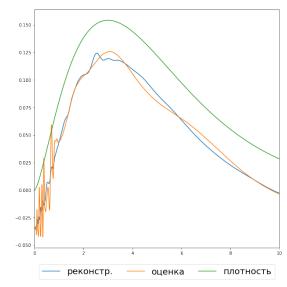


Рис. 5: $X \sim \mathcal{N}(0, 1)$

Рис. 6: $X \sim \chi_5^2$

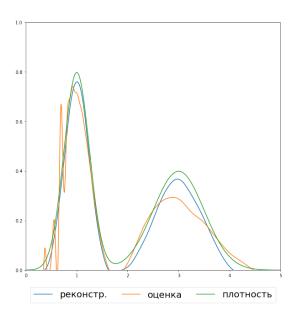


Рис. 7: МНК-оценка для смеси нормальных распределений

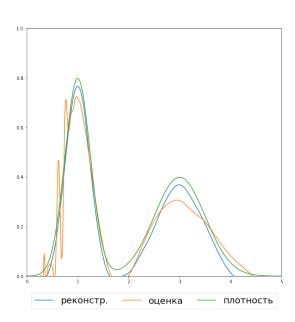


Рис. 8: Оценка итеративным методом для смеси нормальных распределений

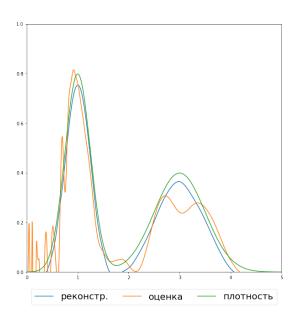


Рис. 9: Оценка методом градиентного спуска для смеси нормальных распределений

8 Обобщение на случай разных длин траекторий

Мы строили функции вида:

$$E g_{m,n}(XY) = E \psi_{m,n}(X) = c_{m,n}$$

и находили оценку плотности как

$$f_X(x) = c_{m,n} \psi_{m,n}(x).$$

Теперь рассмотрим случай, когда длины траекторий могут различаться. Для каждой длины k построим функции $g_{m,n,k}$, как описано выше, и построим оценку $f_{X,k}(x)$

Пусть для длины траектории k у нас есть s_k наблюдений. И всего S наблюдений Тогда оценкой $f_X(x)$ будет:

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{s_k f_{X,k}(x)}{S}.$$

Докажем это. Разложим f_X в ряд по вейвлету:

$$f_X(x) = \sum_{m,n} c_{m,n} \psi_{m,n}(x).$$

Раскроем вейвлет-коэффициенты:

$$f_X(x) = \sum_{m,n} E \psi_{m,n}(X) \psi_{m,n}(x).$$

Представим математическое ожидание в виде математического ожидания условного математического ожидания при условии длины траектории:

$$f_X(x) = \sum_{m,n} E_k \left(E \left(\psi_{m,n}(X) \mid k \right) \right) \psi_{m,n}(x).$$

Для каждой длины траектории мы построили функции $g_{m,n,k}(XY)$. Заменим $\psi_{m,n}(X)$ на $g_{m,n,k}(XY)$:

$$f_X(x) = \sum_{m,n} E_k \left(E\left(g_{m,n}(XY) \mid k\right) \right) \psi_{m,n}(x).$$

По линейности математического ожидания, можем внести сумму внутрь:

$$f_X(x) = \mathcal{E}_k \left(\sum_{m,n} \mathcal{E}(g_{m,n}(XY)|k) \psi_{m,n}(x) \right).$$

Вычислим вейвлет-коэффициенты:

$$f_X(x) = \mathcal{E}_k \left(\sum_{m,n} c_{m,n,k} \psi_{m,n}(x) \right).$$

Заменим вейвлет-разложение на оригинальную функцию:

$$f_X(x) = \mathcal{E}_k f_{X,k}(x).$$

Получаем оценку:

$$f_X(x) = \sum_{k=1}^{K} \frac{s_k f_{X,k}(x)}{S}.$$

9 Вывод

В работе рассмотрена задача построения оценки распределения размера частиц в коллоидных смесях.

Построена аналитическая оценка плотности коэффициента диффузии с использованием вейвлета «Mexican hat».

Предложен способ свести задачу к решению уравнения Фредгольма. Рассмотрены численные методы решения уравнения Фредгольма: МНК-оптимизация с l_2 -регуляризацией, аддитивный и мультипликативный итеративные методы, метод градиентного спуска.

Произведено сравнение численных методов построения оценок.

Лучший результат показывает оценка методом МНК-оптимизации с l_2 -регуляризацией. Метод градиентного спуска позволяет не вычислять заранее матрицу K и допускает вычисления с помощью графического ускорителя. Итеративные методы позволяют использовать арифметику произвольной точности.

Дальнейшее улучшение оценок возможно при улучшении качества решения уравнения Фредгольма, уменьшении шага дискретизации или использовании арифметики произвольной точности.

Также численные методы легко адаптируются для случая, когда случайная величина Y имеет распределение, отличное от хи-квадрат.

В практических применениях построение оценок разбивается на 2 шага. На первом шаге находятся функции $g_{m,n}(Z)$. Это ресурсоемкая и вычислительно трудная задача, но она не зависит данных. На втором шаге вычисляется сама оценка. Это вычисление можно представить, используя сложение векторов и покомпонентное умножение векторов. Каждая из этих операций может быть быстро вычислена.

Список литературы

[1] Minwoo Chae, Ryan Martin и Stephen G. Walker. "On an algorithm for solving Fredholm integrals of the first kind". B: *Statistics and Computing* 29.4 (июль 2019), c. 645—654. ISSN: 1573-1375. DOI: 10.1007/s11222-018-9829-z. URL: https://doi.org/10.1007/s11222-018-9829-z.

[2] Ingrid K. Glad, Nils Lid Hjort u Nikolai G. Ushakov. "Correction of Density Estimators That Are Not Densities". B: Scandinavian Journal of Statistics 30.2 (2003), c. 415—427. ISSN: 03036898, 14679469. URL: http://www.jstor.org/stable/4616772.