

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
Купряков Василий Юрьевич

(подпись студента)

Научный руководитель:
с.н.с., к.ф.-м.н.
Шкляев Александр Викторович

(подпись научного руководителя)

Москва
2022

Содержание

1	Введение	2
1.1	Постановка задачи	2
2	Предварительные сведения	3
3	Преобразование задачи для использования вейвлетов	6
4	Аналитическое вычисление $g_{m,n}(t)$ для Mexican hat вейвлета	6
4.1	Вспомогательные леммы	6
4.2	Сведение задачи к вычислению обратного преобразования Лапласа	11
4.3	Нахождение обратного преобразования Лапласа	13
4.4	Вычисление обратного преобразование Лапласа	14
4.4.1	Случай $n = 0$	15
4.4.2	Случай $n \neq 0$	17
4.5	Результат	18
5	Уравнение Фредгольма	19
5.1	Дискретизация	19
5.2	МНК-оптимизация с l_2 -регуляризацией	20
5.3	Градиентный спуск	21
5.4	Итеративные методы	22
6	Поправка для оценок	23
7	Эксперименты	24
8	Обобщение на случай разных длин траекторий	27
9	Вывод	28

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 устроена следующим образом:

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 .

Задача оценивания размеров наночастиц рассматривалась в статьях [1], [2], [3], где для построения оценок использовали методы, отличные от рассмотренных в настоящей работе. При этом работа является обобщением метода, рассмотренного в статье [3], где оценка строится на основе коэффициентов Фурье.

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, \dots, E_n . Обозначим их коэффициенты диффузии через $\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2$.

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

$$\begin{aligned} A_i^1, \dots, A_i^{k_i} & \text{ — по оси } x, \\ A_i^{k_i+1}, \dots, A_i^{2k_i} & \text{ — по оси } y. \end{aligned}$$

Мы сначала рассмотрим только частный случай, когда все k_i равны k , а случайная величина σ_i^2 имеет абсолютно непрерывное распределение. 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

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

Так как случайные величины A_i^1, \dots, 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

$$Y_i \sim \chi_{2k}^2, X_i = \sigma_i^2.$$

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

Сформулируем математическую постановку задачи.

Задача 1. Пусть:

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

$$Z_i = X_i Y_i.$$

Основная цель — по наблюдениям случайных величин Z_1, \dots, Z_n оценить плотность случайной величины X_1 .

2 Предварительные сведения

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

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

$$\int_0^\infty \frac{|\hat{\psi}(\xi)|^2}{|\xi|} d\xi = \int_{-\infty}^0 \frac{|\hat{\psi}(\xi)|^2}{|\xi|} d\xi < \infty,$$

где $\hat{\psi}(\xi)$ — образ Фурье $\psi(t)$.

Из этого свойства следует, что

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

На основе материнского вейвлета $\psi(t)$ строится система вейвлетов

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

где m, n — целые числа, a, b — произвольные параметры такие, что $a > 1, b > 0$.

Вейвлет $\psi(t)$, на основе которого строится система вейвлетов $\psi_{m,n}(t)$, называется *материнским вейвлетом*.

В дальнейшем мы будем использовать системы вейвлетов с параметрами $a = 2$ и $b = 1$. Таким образом, мы будем использовать систему:

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

Зачастую система вейвлетов не является ортогональной, но образует фрейм.

Определение. Семейство $\{\varphi_k\}_{k=1}^\infty$ является *фреймом* в $L_2(\mathbb{R})$, если существуют положительные постоянные A и B такие, что

$$\forall f \in L_2(\mathbb{R}) \quad A\|f\|^2 \leq \sum_{k=1}^\infty |(f, \phi_k)|^2 \leq B\|f\|^2.$$

Постоянные A и B называются нижней и верхней границами фрейма соответственно.

Если $A = B$, то фрейм называется *жестким*.

Приведем лемму об аппроксимации функции элементами фрейма.

Лемма 1. Если семейство $\{\varphi_k\}_{k=1}^\infty$ образует фрейм, то

$$f = \frac{2}{A+B} \sum_{k=1}^\infty (f, \phi_k) \phi_k + Rf,$$

где

$$\|R\| \leq \frac{B-A}{B+A}.$$

Очевидно, что если фрейм жесткий, аппроксимация точна, то есть $R = 0$. Заметим также, что любой ортогональный базис является жестким фреймом.

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

Определение. Назовем вейвлетом Mexican hat вейвлет $\psi(t)$, определенной следующим образом:

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

Определение. Назовем вейвлетом Мейера вейвлет $\psi(t)$, определенной следующим образом:

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

где

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

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

Система вейвлетов Mexican hat образует фрейм с границами $A = 3,223$, $B = 3,596$. Система вейвлетов Мейера является ортогональной, то есть образует базис $L_2(\mathbb{R})$.

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

Определение. Преобразованием Лапласа функции $f(t)$ называют функция $L_t[f](s)$, которая задается формулой

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

Лемма 2 (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 действительное число, что контур $(\alpha - i\infty, \alpha + i\infty)$ лежит правее всех особенностей $F(s)$, и $F(s)$ ограничена на этом контуре.

3 Преобразование задачи для использования вейвлетов

Рассмотрим задачу 1. Для ее решения будем строить функции $g_{m,n}$ такие, что $E g_{m,n}(Z) = E \psi_{m,n}(X)$ при $m, n \in \mathbb{Z}$. Заметим, что достаточно выполнения соотношения

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

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

$$\int_0^\infty g_{m,n}(xy) f_Y(y) dy = \psi_{m,n}(x). \quad (1)$$

Тогда плотность распределения случайной величины X будет аппроксимироваться суммой

$$\frac{2}{A+B} \sum_{m,n} E \psi_{m,n}(X) \psi_{m,n}(x) = \frac{2}{A+B} \sum_{m,n} E g_{m,n}(Z) \psi_{m,n}(x), \quad (2)$$

где A, B — границы фрейма, образованного системой вейвлетов. Отметим, что если система вейвлетов образует жесткий фрейм (в частности, ортогональный базис) в $L_2(\mathbb{R})$, эта аппроксимация точна.

Получаем оценку, где мы использовали вместо $E g_{m,n}(Z)$ оценку, основанную на выборочном среднем:

$$\hat{f}_X(x) = \sum_{m,n} \sum_i \frac{g_{m,n}(z_i)}{N} \psi_{m,n}(x). \quad (3)$$

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 3. Пусть $Y \sim \chi_{2k}^2$ с плотностью $f_Y(y)$, $a > 0$. Тогда

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

Доказательство. Раскроем математическое ожидание:

$$E g(aY) = \int_0^\infty g(ay) f_Y(y) dy.$$

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 $z = ay$:

$$\begin{aligned} E g(aY) &= \int_0^{\infty} g(z) \frac{1}{\Gamma(k)} \frac{1}{2^k} \left(\frac{z}{a}\right)^{k-1} e^{-z/(2a)} \frac{dz}{a} = \\ &= \left(\frac{1}{2a}\right)^k \frac{1}{\Gamma(k)} \int_0^{\infty} g(z) z^{k-1} \exp\left(-z \frac{1}{2a}\right) dz. \end{aligned}$$

Заменим интеграл преобразованием Лапласа:

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

■

Лемма 4 (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 (лемма 2):

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

Произведем замену $s = cu$

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

Заменим интеграл на обратное преобразование Лапласа

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

■

Лемма 5 (Правильная часть произведения голоморфной функции и функции с нулевой положительной частью). Пусть:

1. $f(z), g(z)$ — функции, голоморфные в некотором кольце R с центром в 0;
2. ряды Лорана этих функций сходятся абсолютно в кольце R ;
3. коэффициента ряда Лорана для $g(z)$ при положительных степенях нулевые;
4. $\{a_n\}_{n=-\infty}^{\infty}$ — коэффициенты разложения в ряд Лорана функции $f(z)$;
5. $\{b_n\}_{n=-\infty}^0$ — 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 $f(z)$.

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 мы рассматриваем коэффициенты при $k \geq 0$. При этом из ряда Лорана функции $f(z)$ используются коэффициенты $k - m$. Принимая во внимание, что $k \geq 0$ и $m \leq 0$, получаем, что $k - m \geq 0$. А значит, используется только правильная часть функции $f(z)$. ■

Лемма 6. 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. Заменяем 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 два рассматриваемых ряда по Коши:

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

Тогда правильная часть ряда имеет вид

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

■

Лемма 7. Пусть $k \geq 0$; пусть

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

Тогда k -й член ряда Лорана для f равен

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

Доказательство. Положим

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

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

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 5 о правильной части произведения голоморфной функции и функции с нулевой положительной частью, нам достаточно знать только правильную часть разложения функции g , которую мы нашли в предыдущей лемме 6.

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 $k \geq 0$:

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

Формулу для α_k возьмем из леммы 6:

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

Выпишем формулу для β_{-k} :

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

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

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

■

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 8 (Модифицированная лемма Жордана). Пусть α , t , R_0 — положительные параметры, функция $F(s)$ непрерывна в области

$$G = \{s \mid \operatorname{Re} s \leq \alpha\} \cap \{s \mid |s - \alpha| \geq R_0 > 0\}.$$

Обозначим через C_R полуокружность $|z - \alpha| = R$ в области G . Пусть выполняется соотношение

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

Тогда

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

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

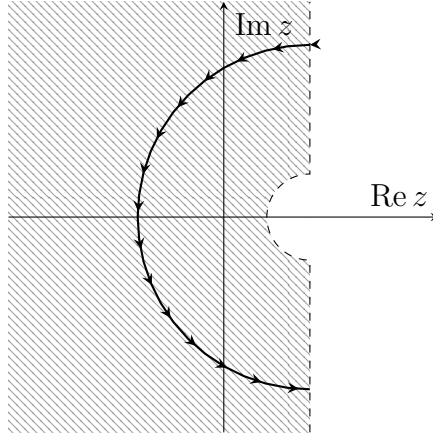


Рис. 1: Контур и область.

По условию

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

тогда

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

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 полученное представление в интеграл:

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

Упростим полученное выражение:

$$\begin{aligned} \varepsilon \int_{\pi/2}^{\pi/2} e^{\alpha t + Rt \cos \varphi} |d(Re^{i\varphi})| &= \varepsilon \int_{\pi/2}^{\pi/2} |e^{\alpha t + Rt \cos \varphi} Rie^{i\varphi}| d\varphi = R\varepsilon e^{\alpha t} \int_{\pi/2}^{\pi/2} e^{Rt \cos \varphi} d\varphi \\ &= R\varepsilon e^{\alpha t} \int_0^{\pi} e^{Rt \cos(\varphi + \frac{\pi}{2})} d\varphi = R\varepsilon e^{\alpha t} \int_0^{\pi} e^{-Rt \sin \varphi} d\varphi = 2R\varepsilon e^{\alpha t} \int_0^{\pi/2} e^{-Rt \sin \varphi} d\varphi. \end{aligned}$$

На отрезке $[0, \pi/2]$ выполняется неравенство $\sin \varphi \geq (2/\pi)\varphi$. А значит,

$$2R\varepsilon e^{\alpha t} \int_0^{\pi/2} e^{-Rt \sin \varphi} d\varphi \leq 2R\varepsilon e^{\alpha t} \int_0^{\pi/2} \exp\left(-Rt \frac{2}{\pi} \varphi\right) d\varphi.$$

Полученный интеграл вычисляется напрямую:

$$2R\varepsilon e^{\alpha t} \int_0^{\pi/2} e^{-Rt \frac{2}{\pi} \varphi} d\varphi = 2R\varepsilon e^{\alpha t} \left(\frac{1}{-\frac{2Rt}{\pi}} \exp\left(-\frac{2Rt\varphi}{\pi}\right) \right) \Big|_0^{\pi/2} = \frac{\pi\varepsilon}{t} e^{\alpha t} (1 - e^{-Rt}).$$

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

4.2 Сведение задачи к вычислению обратного преобразования Лапласа

Отметим, что естественно полагать отделимость коэффициента дифракции от нуля.

Мы будем использовать вейвлет Mexican hat, он прост и непрерывен. Напомним, что материнский вейвлет здесь задается выражением

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

Определим элементы фрейма:

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

Выпишем плотность распределения 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 $z = xy$:

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

Заменим интеграл преобразованием Лапласа:

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

Получаем функциональное уравнение

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

Производя замену $u = 1/(2x)$, получаем:

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

Перенесем множители в правую часть:

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

Произведем обратное преобразование Лапласа:

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

Отсюда получаем соотношение

$$g_{m,n}(z) = \frac{1}{z^{k-1}} \frac{\Gamma(k)}{\sqrt{2^m}} L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n\right) \right] (z). \quad (4)$$

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:

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

Вводя обозначение

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

получаем:

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

При этом

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

Таким образом,

$$\begin{aligned} L_u^{-1}\left[\frac{1}{u^k}\psi_{m,n}\left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n\right)\right](t) &= \\ &= (1 - n^2) L_u^{-1}\left[\frac{1}{u^k}r_{m,n}(u)\right](t) + \left(\frac{n}{2^m}\right) L_u^{-1}\left[\frac{1}{u^{k+1}}r_{m,n}(u)\right](t) - \\ &\quad - \left(\frac{1}{4^{m+1}}\right) L_u^{-1}\left[\frac{1}{u^{k+2}}r_{m,n}(u)\right](t). \quad (5) \end{aligned}$$

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

4.3 Нахождение обратного преобразования Лапласа

Выше мы ввели

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

Используя выражение для $r_{m,n}(u)$, получаем:

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

Выражение под обратным преобразованием Лапласа представимо в виде

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

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

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

Используя лемму 4 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 было получено соотношение:

$$L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) = e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp \left(\frac{n}{s} - \frac{1}{2s^2} \right) \right] \left(\frac{t}{2^{m+1}} \right). \quad (6)$$

Чтобы вычислить правую часть, найдем величину

$$L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp \left(\frac{n}{s} \right) \exp \left(-\frac{1}{2s^2} \right) \right] (\tau). \quad (7)$$

Воспользуемся формулой Меллина обратного преобразования Лапласа. Данная функция имеет особенность только в нуле, откуда α может быть выбрано произвольным положительным числом. Отсюда

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

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

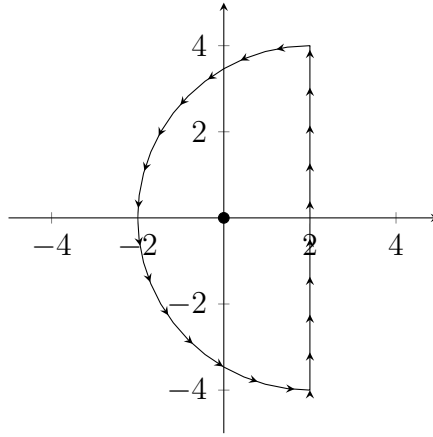


Рис. 2: Наглядное изображение контура.

Оценим $F(s) := (1/s^k) e^{-1/(2s^2)} e^{n/s}$ на C_r при $r > 4\alpha$. Для этого оценим каж-

дый из множителей. Заметим, что

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

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

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

Аналогично оцениваем $e^{n/s}$:

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

Объединяя полученные оценки, получаем

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

Применяя модифицированную лемму Жордана (8), получаем, что интеграл $\int_{C_r} e^{s\tau} F(s) ds$ стремится к нулю при $r \rightarrow \infty$. Следовательно, в силу теоремы Коши о вычетах:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} e^{s\tau} \frac{1}{s^k} e^{-1/(2s^2)} e^{n/s} ds = \frac{1}{2\pi i} 2\pi i \operatorname{Res}_0 \left(e^{s\tau} \frac{1}{s^k} e^{-1/(2s^2)} e^{n/s} ds \right).$$

Здесь возникает два различных случая: $n = 0$ и $n \neq 0$

4.4.1 Случай $n = 0$

Нам нужен $(k-1)$ -й член ряда Лорана функции $e^{s\tau} e^{-1/(2s^2)}$. Воспользуемся леммой 6 о правильной части этой функции. 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 (7) 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 (6), заменяя τ на $t/2^{m+1}$:

$$\begin{aligned} L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) &= \\ &= e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} L_s^{-1} \left[\frac{1}{s^k} \exp \left(\frac{n}{s} - \frac{1}{2s^2} \right) \right] \left(\frac{t}{2^{m+1}} \right) = \\ &= e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k-1} (-2)^{-j}}{(2j+k-1)! j!}. \end{aligned}$$

Наконец, подставим получившееся выражение в формулу (5):

$$\begin{aligned} L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (t) &= \\ &= (1 - n^2) L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) + \left(\frac{n}{2^m} \right) L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+1}} r_{m,n}(u) \right] (t) + \\ &\quad + \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+2}} r_{m,n}(u) \right] (t) = \\ &= (1 - n^2) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k-1} (-2)^{-j}}{(2j+k-1)! j!} + \\ &\quad + \left(\frac{n}{2^m} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{k(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k} (-2)^{-j}}{(2j+k)! j!} - \\ &\quad - \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k+1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}} \right)^{2j+k+1} (-2)^{-j}}{(2j+k+1)! j!}. \quad (8) \end{aligned}$$

Теперь получим выражение для $g_{m,n}(t)$, подставляя соотношение (8) в выражение (4):

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

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 $n \neq 0$

Нам нужен $(k-1)$ -й член ряда Лорана функции $e^{s\tau} e^{-1/(2s^2)} e^{n/s}$. Воспользуемся леммой 7 о правильной части этой функции. Получаем:

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

Таким образом, мы вычислили выражение (7) 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 (6), заменяя τ на $t/2^{m+1}$:

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

Наконец, подставим результат в формулу (5):

$$\begin{aligned} L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} \psi_{m,n} \left(\frac{1}{2^{m+1}u} - n \right) \right] (t) &= \\ &= (1-n^2) L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^k} r_{m,n}(u) \right] (t) + \left(\frac{n}{2^m} \right) L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+1}} r_{m,n}(u) \right] (t) + \\ &\quad + \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) L_u^{-1} \left[\frac{1}{u^{k+2}} r_{m,n}(u) \right] (t) = \\ &= (1-n^2) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k-1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+k-1+i} (-2)^{-j}}{(2j+k-1+i)! j!} \frac{n^i}{i!} + \\ &\quad + \left(\frac{n}{2^m} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{k(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+k+i} (-2)^{-j}}{(2j+k+i)! j!} \frac{n^i}{i!} - \\ &\quad - \left(\frac{1}{4^{m+1}} \right) e^{-\frac{n^2}{2}} 2^{(k+1)(m+1)} \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2^{m+1}}\right)^{2j+k+1+i} (-2)^{-j}}{(2j+k+1+i)! j!} \frac{n^i}{i!}. \quad (9) \end{aligned}$$

Теперь получим выражение для $g_{m,n}(t)$, подставляя полученное соотношение (9) в выражение (4)

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

Упрощая полученное выражение, получим:

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

4.5 Результат

Выпишем обе полученные формулы вместе:

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

5 Уравнение Фредгольма

Используем другой подход к получению оценок, исходя из того же интегрального уравнения (1):

$$\psi_{m,n}(x) = \int_0^{\infty} g(xy) f_Y(y) dy.$$

Произведем 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 $\left[\frac{1}{n_x}, \dots, \frac{l_x n_x}{n_x}\right]$ для x , $\left[\frac{1}{n_z}, \dots, \frac{l_z n_z}{n_z}\right]$ для z . Для вычисления интеграла используем метод прямоугольников. Дискретизируем функции $K(x, z)$, $g_{m,n}(z)$, $\psi_{m,n}(x)$:

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

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 \mathbf{K} и векторы \mathbf{g} , $\boldsymbol{\psi}_{m,n}$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{K})_{i,j} &= K \left[\frac{i}{n_x}, \frac{j}{n_z} \right], \\ (\mathbf{g}_{m,n})_j &= g_{m,n} \left[\frac{j}{n_z} \right], \\ (\boldsymbol{\psi}_{m,n})_i &= \psi_{m,n} \left[\frac{i}{n_x} \right]. \end{aligned}$$

Запишем систему уравнений в матричном виде:

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

5.2 МНК-оптимизация с l_2 -регуляризацией

Определение. Пусть \mathbf{K} — матрица, \mathbf{f} — вектор. Рассмотрим уравнение:

$$\mathbf{f} = \mathbf{K} \mathbf{g},$$

где \mathbf{g} неизвестно.

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

$$\mathbf{g}_* = \arg \min_g (\|\mathbf{K} \mathbf{g} - \mathbf{f}\|^2 + \alpha^2 \|\mathbf{g}\|^2).$$

Построим матрицу $\tilde{\mathbf{K}}$, увеличив матрицу \mathbf{K} , чтобы добавить регуляризацию:

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

Рассмотрим $\tilde{\mathbf{f}}$:

$$\tilde{\mathbf{f}} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Будем использовать МНК-оптимизацию. Получаем:

$$\mathbf{g}_{m,n}^* = \arg \min_g \|\tilde{\mathbf{K}} \mathbf{g} - \tilde{\mathbf{f}}\|.$$

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

$$\mathbf{g}_{m,n}^* = \arg \min_{\mathbf{g}} \|\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{g} - \tilde{\mathbf{f}}\| = \arg \min_{\mathbf{g}} \|\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{g} - \tilde{\mathbf{f}}\|^2.$$

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

$$\mathbf{g}_{m,n}^* = \arg \min_{\mathbf{g}} (\|\mathbf{K}\mathbf{g} - \mathbf{f}\|^2 + \|\alpha\mathbf{E}\mathbf{g} - \mathbf{0}\|^2) = \arg \min_{\mathbf{g}} (\|\mathbf{K}\mathbf{g} - \mathbf{f}\|^2 + \alpha^2\|\mathbf{g}\|^2).$$

5.3 Градиентный спуск

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

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

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

В частности, будем рассматривать следующие функции потерь:

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

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

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

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

$$\tilde{L}(\boldsymbol{\psi}_{m,n}, \hat{\boldsymbol{\psi}}_{m,n}) = L(\boldsymbol{\psi}_{m,n}, \hat{\boldsymbol{\psi}}_{m,n}) + \alpha \|\mathbf{g}_{m,n} - \hat{\mathbf{g}}_{m,n}\|_1.$$

Для l_2 -регуляризации:

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

Алгоритм оптимизации методом градиентного спуска с параметром β стандартен:

1. Берем произвольный начальный вектор $\mathbf{g}_{m,n}^0$.

2. Вычисляем $\psi_{m,n}^0 = K g_{m,n}^0$.
3. Вычисляем $L^0 = \tilde{L}(\psi_{m,n}, \psi_{m,n}^0)$.
4. Считая компоненты g_1^0, \dots, g_k^0 вектора $g_{m,n}^0$ переменными, а $L^0 = L^0(a_1^0, \dots, a_k^0)$ функцией от компонент вектора $g_{m,n}^0$, вычисляем частные производные b_i :

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

5. Берем $g_{m,n}^1 = (a_1^0 - \beta b_0^0, \dots, a_k^0 - \beta b_k^0)$.
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 [4] 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 $\psi_{m,n}(x) + t \geq 0$ и $g_{m,n}(z) + t \geq 0$, и решаем следующее эквивалентное уравнение:

$$\tilde{\psi}_{m,n}(x) = \int_0^\infty K(x, z)\tilde{g}_{m,n}(z)dz,$$

где

$$\begin{aligned}\tilde{g}_{m,n}(z) &= g_{m,n}(z) + t, \\ \tilde{\psi}_{m,n}(x) &= \psi_{m,n}(x) + t \int_0^{\infty} K(x, z) dz.\end{aligned}$$

6 Поправка для оценок

Оценка, полученная нашим методом, не всегда является функцией плотности. Поэтому будем использовать поправку, предложенную в статье [5]. 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

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

где

$$\eta_M = \frac{1}{2M} \left(1 - \int_0^{\infty} \max(0, \hat{f}_X(x)) dx \right).$$

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, приведены графики $\int_0^\infty K(x, z)g_{0,-3}(z)dz$, где $g_{0,-3}$ получено с использованием различных функций ошибок. Также приведен график $\psi_{0,-3}$.
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 $\mathcal{N}(3, 1/2)$. На этих графиках реконструкцией называется аппроксимация плотности, приведенная в уравнении (2), оценкой — оценка, указанная в формуле (3). Также используется поправка, рассмотренная в разделе 6.

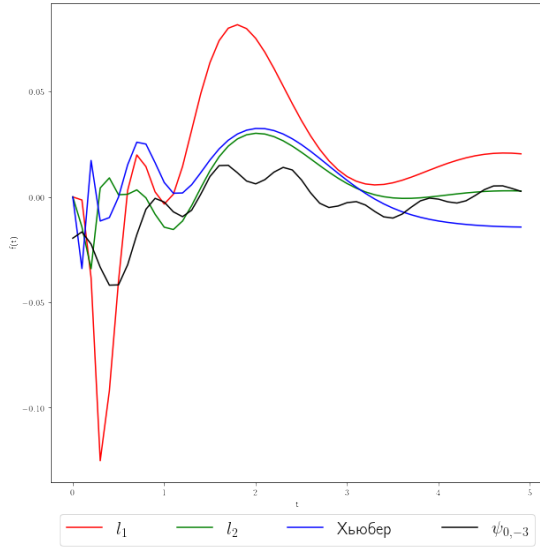


Рис. 3: Сравнение подгонки вейвлета $\psi_{0,-3}(x)$ функциями $g_{0,-3}(z)$, полученными методом градиентного спуска с различными функциями потерь.

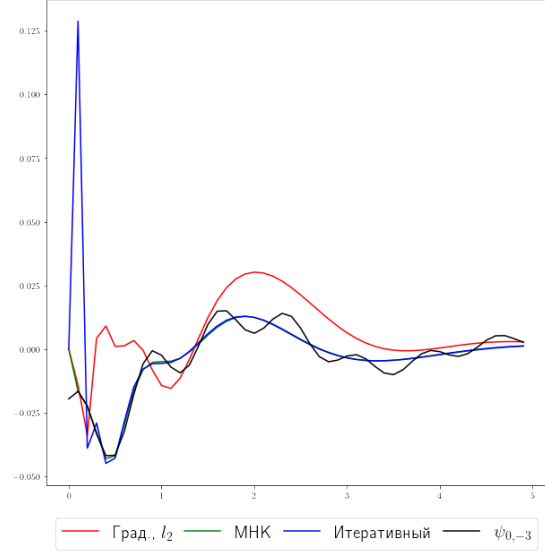


Рис. 4: Сравнение подгонки вейвлета $\psi_{0,-3}(x)$ функциями $g_{0,-3}$, полученными итеративным методом, градиентным спуском и МНК-оценкой.

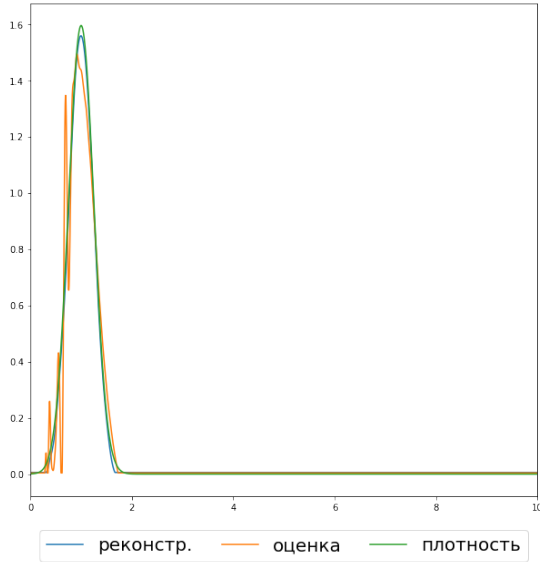


Рис. 5: $X \sim \mathcal{N}(1, 1/4)$.

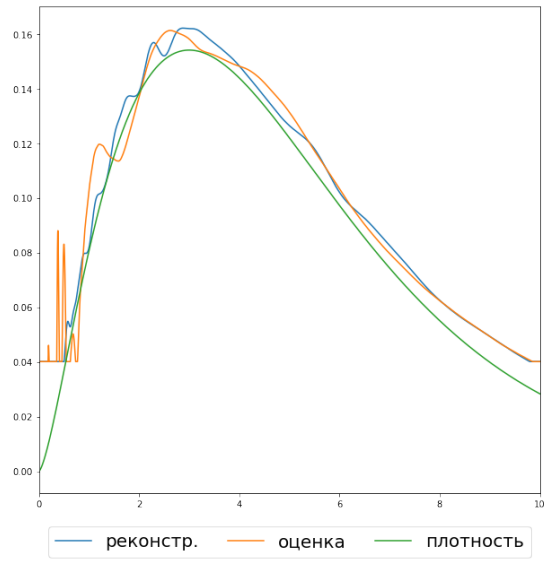


Рис. 6: $X \sim \chi_5^2$.

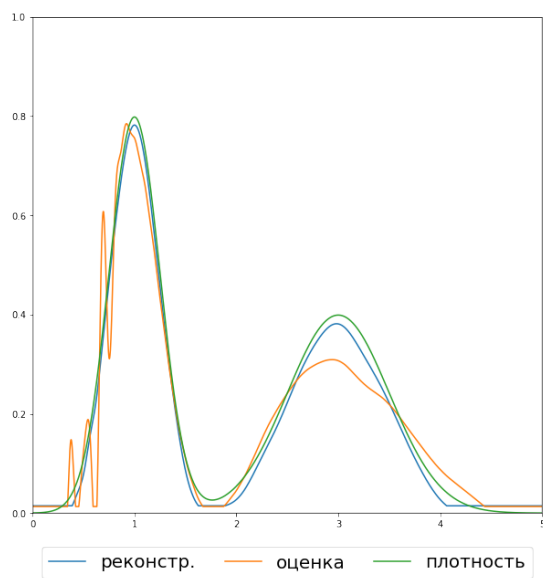


Рис. 7: МНК-оценка для смеси нормальных распределений.

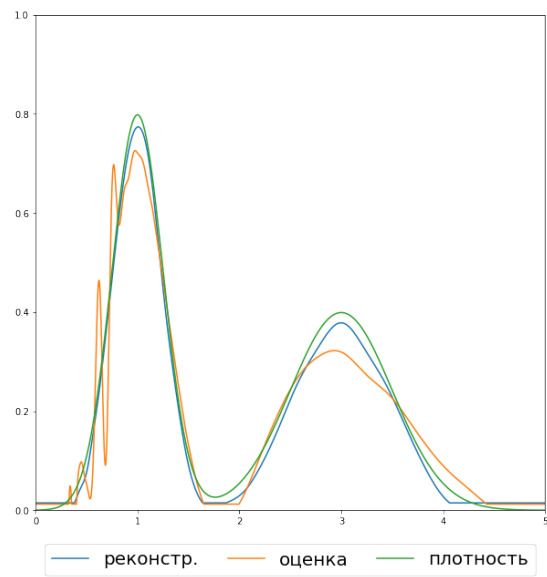


Рис. 8: Оценка итеративным методом для смеси нормальных распределений.

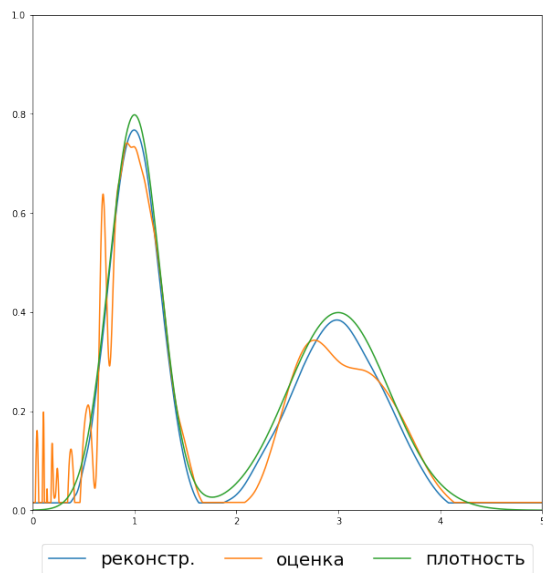


Рис. 9: Оценка методом градиентного спуска для смеси нормальных распределений.

8 Обобщение на случай разных длин траекторий

Мы строили функции вида:

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

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:

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

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

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

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

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

По линейности математического ожидания, можем внести сумму внутрь:

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

Вычислим вейвлет-коэффициенты:

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

Заменяем вейвлет-разложение на оригинальную функцию:

$$f_X(x) = E_k f_{X,k}(x).$$

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 от 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 осуществлена.

Список литературы

- [1] Thorsten Wagner, Hans-Gerd Lipinski и Martin Wiemann. “Dark field nanoparticle tracking analysis for size characterization of plasmonic and non-plasmonic particles”. В: *Journal of Nanoparticle Research* 16.5 (май 2014), с. 2419. ISSN: 1572-896X. DOI: 10.1007/s11051-014-2419-x. URL: <https://doi.org/10.1007/s11051-014-2419-x>.

- [2] Yusuke Matsuura и др. “Determination of an accurate size distribution of nanoparticles using particle tracking analysis corrected for the adverse effect of random Brownian motion”. В: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (26 2018), с. 17839—17846. DOI: 10.1039/C7CP08332G. URL: <http://dx.doi.org/10.1039/C7CP08332G>.
- [3] Е. С. Филатова и А. В. Шкляев. “Оценка плотности в условиях мультипликативного шума”. В: *Фундамент. и прикл. матем.* 23.1 (2020), с. 259—267. URL: <http://mi.mathnet.ru/fpm1878>.
- [4] Minwoo Chae, Ryan Martin и Stephen G. Walker. “On an algorithm for solving Fredholm integrals of the first kind”. В: *Statistics and Computing* 29.4 (июль 2019), с. 645—654. ISSN: 1573-1375. DOI: 10.1007/s11222-018-9829-z. URL: <https://doi.org/10.1007/s11222-018-9829-z>.
- [5] Ingrid K. Glad, Nils Lid Hjort и Nikolai G. Ushakov. “Correction of Density Estimators That Are Not Densities”. В: *Scandinavian Journal of Statistics* 30.2 (2003), с. 415—427. ISSN: 03036898, 14679469. URL: <http://www.jstor.org/stable/4616772>.
- [6] Ingrid Daubechies. *Ten Lectures on Wavelets*. CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics. Society for Industrial и Applied Mathematics, 1992. ISBN: 978-1-61197-010-4. DOI: 10.1137/1.9781611970104.fm. URL: <https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/1.9781611970104.fm>.
- [7] Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М. *Гидродинамика*. Т. 6. Теоретическая физика. Наука, 1986.