A dekonvolúciós probléma megfogalmazása

$o(x)$ a keresett objektum (célfüggvény)
$s(x)$ a simító hatású (spread) függvény
$i(x)$ a mérhető adatokat tartalmazó képfüggvény (image)

$$i(x) = \int_{-\infty}^{\infty} s(x - x')\, o(x')\, \mathrm{d}x' \tag{3}$$

A fenti integrálegyenlet megoldását akkor nevezzük dekonvolúciónak, ha az $s(x)$ ismeretében meghatározzuk belőle a keresett $o(x)$ objektumot. Ez az integrálegyenlet a Fredholm-integrálegyenlet speciális esete. A Fredholm-egyenletben az $s(x, x')$ függvény, a „kernel" függvényalakja változhat az agrumentumokkal. Ez azért érdekes, mert a dekonvolúcióhoz használható az elsőfajú (first kind) Fredholm-egyenlet megoldási módszere.

Tegyük fel, hogy a (3) egyenlet $o\,(x')$ megoldásfüggvénye nem adható meg teljes pontossággal, csak egy

$$\hat{o}(x') = o(x') + \vartheta(x') \tag{4}$$

A $\vartheta(x')$-től elvárjuk, hogy eleget tegyen az

$$\int_{-\infty}^{\infty} s(x - x')\vartheta(x')\,\mathrm{d}x' = 0 \tag{5}$$

egyenletnek. Jelöljük s Fourier-transzformáltját τ-val, ϑ-ét pedig Θ-val, akkor az (5) átírható

$$\tau(\omega)\Theta(\omega) = 0 \tag{6}$$

alakba. A $\Theta(\omega)$-val szembeni elvárásainkat könnyebb megfogalmazni, mert az adatgyűjtés általában átengedi az alacsony frekvenciákat, de gyengíti vagy teljesen kiszűri a magasakat. Ezért a $\tau(\omega)$ értéke kis ω esetén nagy, nagy ω esetén pedig fokozatosan eltűnik. Következésképpen kis ω esetén $\Theta(\omega) = 0$ a kívánatos, viszont nagy ω esetén $\Theta(\omega)$ értéke bármekkora (véges) lehet. Azt reméljük tehát, hogy a nagy frekvenciák szűrése (simítása) megoldja a problémánkat.

A Fourier-transzforáció szimmetrikus megfogalmazása két alternatív jelölésmóddal

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x}\,\mathrm{d}x$$

$$\tag{1}$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega x}\,\mathrm{d}\omega$$

$$G(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) e^{-2\pi i\zeta x}\,\mathrm{d}x$$

$$\tag{2}$$

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\zeta) e^{2\pi i\zeta x}\,\mathrm{d}\zeta$$

Ha $f(x)$ és $g(x)$ argumentuma (x) azonos, akkor

$$\omega = 2\,\pi\,\zeta$$

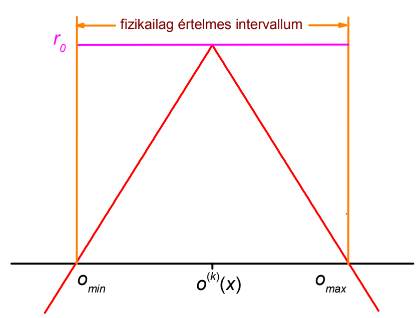
Ha az (1) változatban mind x-et, mind ω-t megszorozzuk $\sqrt{2\pi}$ -vel, akkor a (2) változatot kapjuk.

Inverz szűrés

Az
$$i(x) = s(x) \otimes o(x) \tag{7}$$
egyenlet Fourier-transzformáltja a frekvenciatérben
$$I(\omega) = \tau(\omega)\, O(\omega) \tag{8}$$
Ennek megoldása az objektum-függvényre a frekvenciatérben:
$$O(\omega) = \frac{1}{\tau(\omega)}\, I(\omega) \tag{9}$$
A $\tau(\omega)$-val történő osztást nevezzük inverz szűrésnek. A kísérleti hibák miatt nem a (7) egyenlet szerinti képfüggvényt mérjük, hanem helyette azt, amihez az $n(x)$ zajfüggvény hozzáadódik:
$$i(x) = s(x) \otimes o(x) + n(x) \tag{10}$$
A zaj eltávolítására bevezethetünk egy olyan szűrőt, amely az
$$\hat{O}(\omega) = \frac{I(\omega)}{\tau(\omega)}\, B(\omega) \tag{11}$$
egyenlet szerint eltünteti a zajt $O(\omega)$-ból.
Az iteratív szűrés alapja az, hogy a $B(\omega)$ szűrőt egymást követő dekonvolúciós lépések során finomítjuk. A „finomítás" célfüggvénye a
$$\Phi = \int \left[i(x) - s(x) \otimes \hat{o}^{(k)}(x) \right]^2 \mathrm{d}x \tag{12}$$
eltérésnégyzetösszeg. Ez tehát azt jelenti, hogy megvizsgáljuk a **mért** $i(x)$, valamint a k-adik iterációban kapott $\hat{o}^{(k)}(x)$ felhasználásával „rekonvoluált" $\hat{i}^{(k)}(x)$ közötti eltérések négyzeteinek összegét. Világos, hogy ennek minimalizálása a cél.

Az egyik iteratív módszer a **lineáris relaxációs** módszer. Eszerint az iterációra felírható az
$$o^{(k+1)} = \hat{o}^{(k)} + r\left(\hat{o}^{(k)}\right)\left[i - s \otimes \hat{o}^{(k)} \right] \tag{13}$$
rekurzív formula, ahol $r\left(\hat{o}^{(k)}\right)$ az $\hat{o}^{(k)}$ értékétől függő **relaxációs paraméter**. Ha csak egyszerűen ki akarjuk vágni (clipping) a fizikailag nem értelmes értékeket, akkor r értéke vagy r_0 (megtartjuk), vagy 0 (nem tartjuk meg). (Pl. transzmittancia esetén értelmes, ha $0 < \hat{o}^{(k)} < 1$, vagy kinetikai görbe esetén $0 < \hat{o}^{(k)} < c_0 \cdot \varepsilon_{max}$.) Ezzel az a baj, hogy kicsi r_0 esetén igen lassú a konvergencia, nagy r_0 esetén pedig túlerősödhet egy-egy tartomány, aminek következtében a következő lépésben kivágásra kerül – és soha többet nem kerül vissza véges értékkel.

A **Jansson-módszer** igen elegáns megoldást talált ennek kikerülésére. Ennek megfogalmazásához tekintsük a következő ábrát:



$\hat{o}_{\min}$ és $\hat{o}_{\max}$ a fizikai értelemmel bíró objektumfüggvény-határértékek. Az $r\left(\hat{o}^{(k)}\right)$ relaxációs függvény ezek középértékénél maximális, innen pedig lineárisan csökken, a szélső értékeknél éppen 0.
Az ábrán látható háromszög-függvény az alkalmazott relaxációs függvény, amelynek alakja:

$$r\left(\hat{o}^{(k)}\right)=r_0\left[1-\frac{\left|\hat{o}_{\max}-\hat{o}_{\min}-2\hat{o}^{(k)}\right|}{\hat{o}_{\max}-\hat{o}_{\min}}\right] \tag{14}$$

Eszerint a fizikailag értelmes intervallum közepén végezzük a legnagyobb **pozitív korrekciót**, aminek a mértéke az intervallum szélei felé csökken. Ahol az $\hat{o}^{(k)}$ értéke az értelmes intervallumon kívül esik, ott **negatív korrekciót** alkalmazunk, tehát visszatereljük a megoldásfüggvényt a fizikailag értelmes határok közé.

Jansson szerint az eljárás csodákat művel. Azt is megteszi, hogy dekonvolúció közben állandóan tartja a görbe alatti területet – ha az $s(x)$ függvény integrálja pontosan 1. Első alkalmazásakor – az N_2O Q-sávjának 2798 cm^{-1} körüli dekonvolúciója során – az $s(x)$ kb. 70 pontból állt. A nagyfrekvenciás zajt egy 25 pontos harmadfokú polinomszűrővel simították. $\hat{o}^{(o)}$ kezdeti becslésként a simított $i(x)$ mért görbét használták. $r_0 = 0{,}1$ paraméterezéssel iteráltak, minden lépés után simítást alkalmazva, az **első öt lépésben**. Az utolsó öt lépésben $r_0 = 0{,}2$ volt, és nem alkalmaztak simítást.

Megjegyzés: a relaxációs módszer az ***időtartományban*** dolgozik.
Az inverz szűrést „komolyabban” véve, dolgozhatunk a ***frekvenciatartományban***.
Ekor az

$$i(x)=o(x)\otimes s(x)+n(x) \tag{15}$$

egyenletet a megfelelő Fourier-transzformáltakkal

$$I(x)=O(x)\,\tau(x)+N(x) \tag{16}$$

alakban írhatjuk, amiből a megoldás

$$O(x)=\frac{I(\omega)}{\tau(\omega)}-\frac{N(\omega)}{\tau(\omega)}=\frac{I(\omega)-N(\omega)}{\tau(\omega)} \tag{17}$$

A **Fourier-spektrum folytatása** az a módszer, amelyben először kiszűrjük a zajt, aztán inverz szűrünk, majd a kapott függvényt valahogy folytatjuk, és újra inverz szűrünk.

A digitális Fourier-transzformáció (DFT) a következőképpen végezhető:

$$F(n)=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}f(k)e^{-\frac{2\pi ink}{N}} \tag{18}$$

Az inverz DFT az alábbi formula szerint végezhető:

$$f(k)=\sum_{k=0}^{N-1}F(n)e^{\frac{2\pi ink}{N}} \tag{19}$$