

УДК 517.977

В.О. Яценко, П. О. Хандріга

АЛГЕБРАЇЧНІ ТА ОПТИМІЗАЦІЙНІ МЕТОДИ ЗНАХОДЖЕННЯ ПСЕВДООБЕРНЕНИХ МАТРИЦЬ ТА ЇХ ВИКОРИСТАННЯ ДЛЯ ОЦІНЮВАННЯ ВМІСТУ ХЛОРОФІЛУ В РОСЛИННОСТІ**Вступ**

Проблеми ризику екологічної обстановки, що з часом ускладнюється, є однією з основних у програмі забезпечення безпеки існування людського суспільства [1,2,3]. У її розв’язанні значну роль грають системи моніторингу різних хімічних та біологічних компонентів навколишнього середовища з метою спостереження еволюції деградаційних процесів у природі, а також виявлення ексцесів у зв’язку з аварійними ситуаціями техногенного походження або природних аномалій. До числа завдань моніторингу можна віднести наступні: а) виявлення і прогнозування еволюції стану різних ділянок суходолу; б) раннє виявлення екологічних стресів; в) контроль стану техногенних об’єктів підвищеної небезпеки; г) контроль господарських соціально важливих об’єктів, такими як, наприклад, сільськогосподарські угіддя і ліси. Для розв’язання таких завдань найбільш прийнятні дистанційні спостереження, які вимагають розробки нових методів для отримання необхідної інформації. Для цього потрібно знайти зручні для дистанційних вимірів параметри об’єктів та способи тематичного дешифрування результатів вимірів.

Застосування інформаційно-статистичного підходу [4] та псевдообернення [5,6,7,8] дозволило розробити новий метод та побудувати рівняння множинної регресії для концентрації хлорофілу. Псевдообернення матриці - це операція, яка необхідна в багатьох розділах сучасної обчислювальної математики [9]. У випадку, коли необхідно обернути матрицю із потрібною похибкою, може виявитися, що точні методи вимагають завеликих витрат машинного часу. Нами розглядалися наступні методи: а) метод Бен-Ізраеля, який використовує сингулярне розкладання; б) метод визначення псевдооберненої матриці за допомогою граничного переходу. Цікавим та важливим з практичної точки зору є використання теорії

збурень псевдообернених матриць [8]. Для уточнення моделі множинної регресії на основі нових спектральних кривих необхідно виконати лише корегування вектора параметрів використовуючи формули Гревіля [6,8], а не обчислювати спочатку псевдообернену матрицю. Всі ці методи були реалізовані у вигляді комп'ютерно-алгебраїчних процедур у пакеті Matlab. Тестові обчислення проводилися з матрицею третього рангу, яка містила 1000 рядків і 200 стовпців. Розрахунки, результати яких представлені в таб.1, виконувалися на ЕОМ із процесором P4 1800 МГц і об'ємом оперативної пам'яті 512 МБ. У даній роботі псевдообернення використано для визначення концентрації хлорофілу з використанням спектральної кривої відбиття. Його застосування дозволило розробити новий метод та побудувати рівняння множинної регресії для оцінювання концентрації хлорофілу. В роботі також описано результати порівняльного аналізу з методом, що використовує 1-у похідну.

Експериментальні дані

У якості експериментальних даних були використані спектральні криві листків рослин і відповідні значення концентрації хлорофілу. Спектральні криві були отримані за допомогою спектрофотометра СФ-10, обладнаного інтегруючою сферою та системою реєстрації в цифровому вигляді. Концентрація хлорофілу визначалася хімічним методом Арнона [10]. Для експериментів були використані дані, які отримані групою проф. С.М. Кочубей [11-16].

Варіації вмісту хлорофілу були обумовлені розходженнями мінерального харчування і віком рослин. Система „рослинність-ґрунт”, яка була використана для з'ясування стійкості алгоритмів оцінки хлорофілу до впливу спектру відбиття від ґрунту при неповному проєктивному покритті, імітувалися у вигляді фізичних і графічних моделей. Перші здійснювалися шляхом покриття листками тільки певної частини поверхні вимірювальної кювети. Фоном служив чорнозем або пісок. У графічних моделях неповне проєктивне покриття моделювалось математичним додаванням спектральних кривих відбиття листків і фону із заданими ваговими коефіцієнтами. Для перевірки нормальності функції розподілу концентрації хлорофілу був використаний статистичний тест Колмогорова-Смирнова [17]. Значення концентрації хлорофілу

використовувалися на етапі „навчання” із застосуванням множинної регресії. Набір кривих, з якого були вилучені помилкові спостереження, налічував 23 криві.

Метод

Для оцінки вмісту хлорофілу за спектральними даними побудовано систему лінійних рівнянь, яка відповідає різній концентрації хлорофілу. Її розв’язання здійснюється на основі процедури псевдообернення. Характерною особливістю спектральної кривої є наявність двох локальних максимумів, що знаходяться в області червоного краю спектру вимірювання (680-750 нм). Довжини хвиль, що відповідають цим максимумам знаходяться в певній залежності від вмісту хлорофілу в даній рослині.

У деяких випадках локальні максимуми першої похідної можуть бути представлені неявно, тобто мати форму точок перегину. Тому для побудови вектора характеристичних ознак спектральної кривої доцільно брати по декілька характеристичних точок з області першого (696-710 нм.) та другого (716-724 нм.) локальних максимумів. На рис.1 показано графік першої похідної спектральної кривої в області „червоного краю” спектру вимірювання, з якого видно розташування першого та другого локальних максимумів.

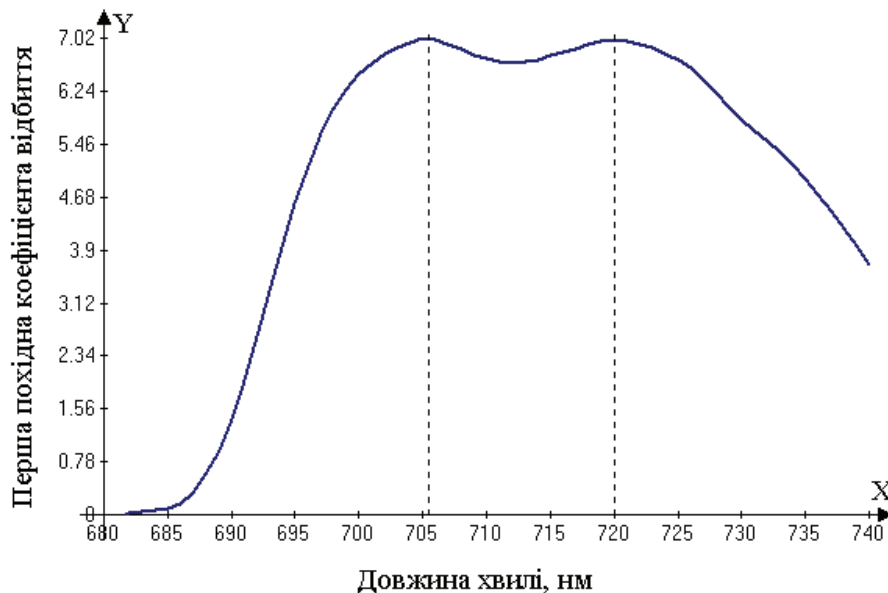


Рисунок 1 - Графік першої похідної спектральної кривої в області „червоного краю” спектру вимірювання

Припускаючи, що структура залежності значення хлорофілу від характеристикних точок першої похідної спектральної кривої є лінійною, побудуємо наступну регресійну модель:

$$z = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n + b_1y_1 + b_2y_2 + \dots + b_my_m + c, \quad (1)$$

де z - значення хлорофілу, x_1, \dots, x_n - значення ординат точок з області першого локального максимуму, y_1, \dots, y_m - значення ординат точок з області другого локального максимуму, $k = (a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_m, c)^T$ - невідомий вектор коефіцієнтів регресійної моделі (1).

Для обчислення вмісту хлорофілу необхідно розв'язати задачу ідентифікації, тобто знайти вектор невідомих параметрів k . Візьмемо l спектральних кривих, для яких відомі відповідні значення хлорофілу, і запишемо систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно параметрів $a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_m, c$

$$\begin{cases} z_1 = a_1x_{11} + a_2x_{12} + \dots + a_nx_{1n} + b_1y_{11} + b_2y_{12} + \dots + b_my_{1m} + c \\ z_2 = a_1x_{21} + a_2x_{22} + \dots + a_nx_{2n} + b_1y_{21} + b_2y_{22} + \dots + b_my_{2m} + c \\ \dots \\ z_l = a_1x_{l1} + a_2x_{l2} + \dots + a_nx_{ln} + b_1y_{l1} + b_2y_{l2} + \dots + b_my_{lm} + c \end{cases}, \quad (2)$$

де j -е рівняння ($j = \overline{1, l}$) рівняння відповідає j -й спектральній кривій. В матричному вигляді система (2) має наступний вигляд:

$$Ak = b, \quad (3)$$

де

$$A = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} & y_{11} & y_{12} & \dots & y_{1m} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} & y_{21} & y_{22} & \dots & y_{2m} & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{l1} & x_{l2} & \dots & x_{ln} & y_{l1} & y_{l2} & \dots & y_{lm} & 1 \end{pmatrix}, \quad k = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \\ b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_m \\ c \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \dots \\ z_l \end{pmatrix},$$

$$A \in R^{l \times (n+m+1)}, \quad k \in R^{n+m+1}, \quad b \in R^l.$$

В загальному випадку матриця A має прямокутну форму, тому для знаходження вектора параметрів k використовуємо теорію псевдообернених матриць [6]. Це дає змогу уникнути обмежень на розмірність матриці A та отримати не точкову оцінку вектора k , а деяку множину оцінок [6,7]

$$\Omega(k) = \{k : k = A^+b + Z(A)v, \forall v \in R^{n+m+1}\}. \quad (4)$$

Кожен елемент побудованої таким чином множини $\Omega(k)$ мінімізує нев'язку рівняння (3)

$$\|Ak - b\| \rightarrow \min_k. \quad (5)$$

Якщо вектор v покласти рівним нулю, то отримуємо розв'язок з найменшою нормою.

Запропонована модель дає можливість змінювати розмірність вектора характеристичних ознак, що має вплив на точність визначення концентрації хлорофілу. Значним чином на якість ідентифікації впливає параметр моделі l . Зокрема, при більшій кількості початкових (навчаючих) кривих, розв'язок буде точнішим.

Розроблений метод було реалізовано у вигляді прикладного програмного забезпечення (ППЗ). На рис. 2 наведено вигляд графічного інтерфейсу ППЗ, яке було розроблено для двох варіантів використання. Перший, користувацький, призначений для експрес-оцінювання хлорофілу в рослинності і застосовується в польових умовах. В функції WINCHL входить: одержання спектральних даних з приладу, обчислення концентрації хлорофілу і збереження результатів у базі даних [18,19].

Розроблений варіант ППЗ простий у використанні і призначений для накопичення спектральних кривих у базі даних і одержання швидких оцінок вмісту хлорофілу в рослинності. Другий, дослідницький, призначений для тестування широкого набору інструментів для обробки спектральних кривих і дослідження їх властивостей. Бібліотека WINCHL містить також алгоритми фільтрації і згладжування, Фур'є-аналізу, диференціювання, генетичного пошуку екстремумів, обчислення головних компонент, множинної регресії та генерації шумів. ППЗ WINCHL містить візуальний конструктор алгоритмів, що дозволяє дослідникові задати послідовність обробки спектральних кривих і їхні параметри на вибір та формувати різні алгоритми оцінювання вмісту хлорофілу. Дослідницький варіант дозволяє також моделювати шум і підбирати

оптимальні параметри фільтрації. Результати оцінювання вмісту хлорофілу, а також параметри алгоритму, який застосовується для оцінювання, зберігаються у базі даних, що дозволяє накопичувати статистичні дані стосовно застосування різних алгоритмів.

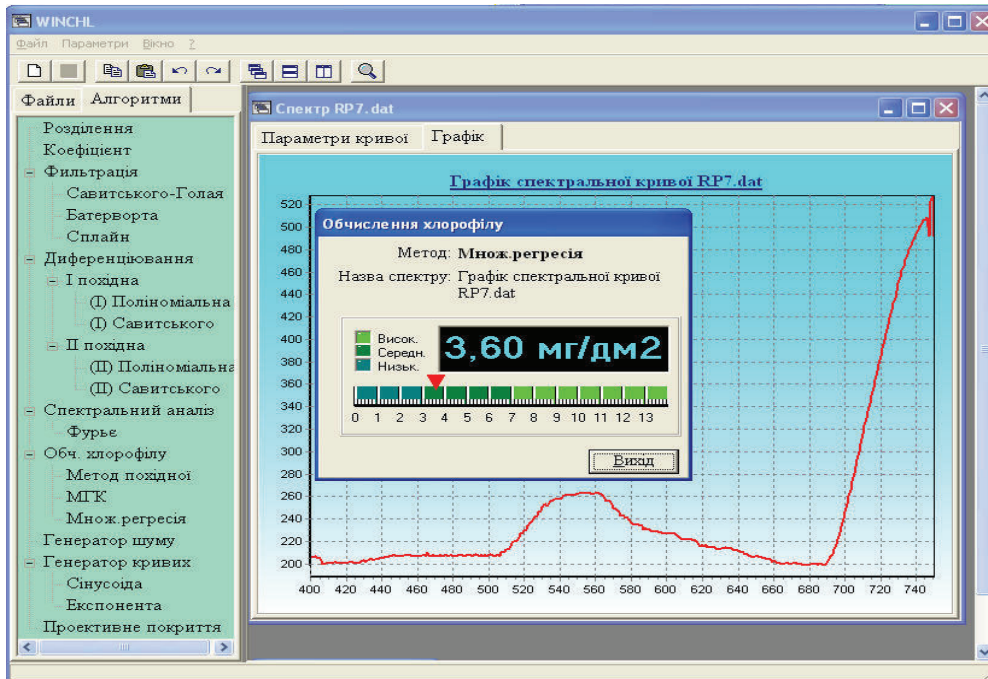


Рисунок 2 - Графічний інтерфейс програмного забезпечення для обчислення вмісту хлорофілу на основі множинної регресії

Проведене комп'ютерне моделювання для різних навчаючих наборів з 6, 9, 12 та 23 кривих. З урахуванням результату обчислення коефіцієнтів k множинної регресії для 6 кривих рівняння (1) має вигляд

$$z = 2.95x_1 - 1.73x_2 - 0.87x_3 + 1.57x_4 - 2.15x_5 + 0.81x_6 - 2.95x_7 + 1.01x_8 + 0.83y_1 - 0.20y_2 - 1.15y_3 - 0.31y_4 + 3.03y_5 + 3.26. \quad (6)$$

Порівняльний аналіз алгоритмів визначення вмісту хлорофілу

Нами проведено порівняння методу множинної регресії з оптимізаційним підходом [20]. При проведенні аналізу були використані наступні обмеження по довжині хвиль. Для першого максимуму – (696-706), для другого – (717-724). Обмеження вибиралися таким чином, щоб пошук локальних екстремумів проводився в найбільш інформативних областях спектральної кривої. Для перевірки оптимізаційного алгоритму і візуалізації результатів була створена програма, що дає можливість вводити похідні спектральних кривих з текстових файлів, відображати їх графічно і знаходити

локальні максимуми. Передбачена також можливість роздруковувати отримані результати. Для знаходження першого і другого локальних максимумів задаються обмеження на їхній пошук. Ці обмеження також можна задавати в інтерактивному режимі.

Таблиця 1

Залежність часу на обчислення псевдооберненої матриці від похибки

Метод	Похибка			
	1e-3	1e-5	1e-7	1e-9
Бен-Ізраеля	0.05.41	0.05.47	0.05.50	0.13.44
Сингулярного розкладення	1.05.53	1.05.53	1.05.53	1.05.53
Граничного переходу	0.03.42	0.03.46	0.04.15	—
скілетне розкладання	0.01.50	0.01.50	0.01.50	0.01.50

Проведені обчислювальні експерименти дозволяють зробити наступні висновки. По-перше, найбільш швидким з ітераційних методів виявляється обчислення псевдооберненої матриці за допомогою граничного переходу. Але, у той же час, метод виявляється не зовсім надійним, коли потрібна висока точність результату. По-друге, метод Бен-Ізраеля вимагає обчислення максимального власного числа матриці яка досліджується. Тому час обчислення зростає приблизно на 45 сек. Якщо максимальне власне число відомо заздалегідь, або обрана деяка його оцінка, цей метод дозволяє знайти рішення за час, який співпадає з часом обчислення при застосуванні методу граничного переходу. По третє, найбільш трудомістким, але й самим надійним з ітераційних методів виявляється метод, що застосовує сингулярне розкладання. При цьому час розрахунку зростає в 20 разів у порівнянні із методом граничного переходу. По четверте, найефективнішим з розглянутих ітераційних і точних методів, є скілетне розкладання.

Якщо вихідна матриця A погано обумовлена, операція обчислення псевдооберненої матриці може виявитися нестійкою до малих змін вхідних даних. Потрібне залучення таких методів обчислення, які дозволили б урахувати погану обумовленість і похибку вхідних даних. Для цього підходять метод регуляризації і сингулярного розкладання. Тестові обчислення показують, що метод граничного переходу є більш швидким, чим метод, що використовує сингулярне розкладання. Результати чисельних експериментів наведені в таб.2. Обчислення проводилися з матрицею, що містить 1000 рядків і 200 стовпців.

Таблица 2

Час, необхідний на обчислення пагано обумовленої матриці

Граничний перехід	Сингулярне розкладання
0.02.67	1.05.53

Порівняння методу множинної регресії та оптимізаційного підходу показало, що вони дають близькі по точності результати при обчисленні вмісту хлорофілу. Метод множинної регресії виявився більш точним при обчисленні хлорофілу для 100% проективного покриття. У випадках коли використовувалися рослини різних типів або проективне покриття було меншим 100%, оптимізаційний метод давав меншу похибку.

Висновки

1. Запропоновано новий метод оцінювання концентрації хлорофілу в рослинності, який базується на аналізі форми спектральної кривої в області червоного краю (680-750 нм). В методі використана множинна регресія та псевдообернення матриці лінійної систем. Розроблено алгоритмічне та програмне забезпечення, яке реалізоване у вигляді набору окремих модулів. Детальний аналіз їх функціонування показав, що значних обчислювальних витрат алгоритм оцінки вмісту хлорофілу не вимагає, що в перспективі дозволяє використати цей метод разом з методом головних компонент для отримання більш точної оцінки на основі використання вбудованих та мобільних обчислювальних систем.

2. Запропонований метод визначення вмісту хлорофілу в рослинності показав досить високі по точності результати. Застосування множинної регресії та оптимізаційного алгоритму псевдообернення матриці дозволило підвищити точність даного методу та забезпечити інваріантність відносно похибок вхідних даних. Можливість оперативно задавати параметри моделі забезпечує автоматизоване визначати вмісту хлорофілу в сільськогосподарській культурі з достатньою для практичних застосувань точністю, що в свою чергу покращує прогнозування врожайності.

Робота була виконана в рамках гранту УНТЦ №2614.

ЛІТЕРАТУРА

1. Davids C., Tyler A.N. Detecting contamination-induced tree stress within the Chernobyl exclusion zone // Remote Sensing of Environment. - 2003. - 85. - P. 30-38.

2. Smith K.L, Steven M.D., Coll J.J. Use of hiper-spectral derivative ratios in the red-edge region to identify plant stress responses to gas leaks // Remote Sensing of Environment. - 2004. - 92. P. 207-217.
3. Polischuk, V. P., T.M. Shadchina, T.I. Kompanetz, I.G. Budzaniivskaya and A.A. Sozinov. Changes in reflectance spectrum characteristic of Nicotiana debneyi plant under the influence of viral infection // Archives of Phytopathology and Plant Protection. - 1997. - 31(1). - P. 115-119.
4. П.А. Хандрига, В.А. Яценко Информационно-статистический метод оценивания содержания биохимических компонентов в растительности по спектральным кривым // Системн_досл_дження та _нформац_йн_технолог_ї.- 2006. - №1. - С. 119?132
5. Икрамов Х.Д., Матин фар М. О компьютерно-алгебраических процедурах для псевдообращения матриц //ЖВМиМФ. - 2003. - Т. 43. - Вып. 2. - С. 163-168.
6. Альберт А. Регрессия, псевдоинверсия, рекуррентное оценивание. - М.: Наука. - 1977. -305 с.
7. Кириченко Н.Ф., Лепеха Н.П. Псевдообращение в задачах управления и наблюдения // Автоматика. - 1993. - №5. - С. 69-81.
8. Кириченко Н.Ф. Аналитическое представление возмущений псевдообратных матриц // Кибернетика и системный анализ. -1997. - № 2. - С. 98-107.
9. Блюмин С.Л., Сараев П.В. Псевдообращение в обучении искусственных нейронных сетей // Современные проблемы информатизации в непромышленной сфере и экономике: Труды V Международной электронной научной конференции.- Воронеж: Центрально-Черноземное книжное издательство. - 2000.- С. 112-113.
10. Arnon D.I. Copper enzymes in isolated chloroplasts. Polyphenoloxidase in Beta vulgaris // Plant Physiology. - 1949. - 24. - P.1-15
11. Кочубей С.М., Кобец Н.И., Шадчина Т.М. Спектральные свойства растений как основа методов дистанционной диагностики. - Киев: Наук. думка. - 1990. - 136 с.
12. Кочубей С.М., Кобец Н.И., Т.М.Шадчина Т.М. Количественный анализ формы спектральной кривой отражения листьев растений как способ тестирования их состояния // Физиология и биохимия культурных растений. - 1988. - 20. - С. - 535-539.
13. Кочубей С.М. Сравнение информативных возможностей многозональной съемки и спектроскопии высокой разрешающей способности при дистанционном зондировании растительного покрова // Косм_чна наука _технолог_я. - 1999. - Т.5. - №2/3. С.- 41-48.
14. Кочубей С.М. Оценка основных параметров сельскохозяйственных посевов по спектру отражения растительности в оптическом диапазоне // Косм_чна наука _технолог_я. - 2003. - Т.9. - №5/6 - С. 185-190.
15. Kochubey S.M., Bidyuk P.I. A Novel Approach to Remote Sensing of Vegetation Conference 'AeroSence. Technologies and Systems for Defence & Security', Orlando USA, 21-25 April 2003. - Vol. 5093. - P.327-329.

16. С.М.Кочубей. Аппаратура и методы дистанционного зондирования растительности в оптическом диапазоне // Космическая наука и технологии. - 2002. - Т.8. - №2/3. - С. 271-275.
17. Орлов А. И. Прикладная статистика. Учебник для вузов. - М.: Экзамен, 2006. - 672 с.
18. Yatsenko V., Kochubey S., Donets V., Kazantsev T. Hardware-software complex for chlorophyll estimation in phytocenoses under field conditions // Detectors and Associated Signal Processing II, Proc. of SPIE. - Jena (Germany). - 13-14 September, 2005.-Vol. 5964.-P.1-6. 14
19. V.A. Yatsenko, V. V. Donets, S.M. Kochubey, P. A. Khandriga, P.D.Chichik Optical spectrometer and software for remote sensing of vegetation. Proc. CAOL 2005. 2nd International Conference on Advanced Optoelectronics and Laser, Yalta, Crimea, Ukraine, September 12-17, 2005. - Vol.1. - P. 303-305
20. V.A.Yatsenko, S.M. Kochubey,. P.M.Pardalos, L.Zhan. Estimation of chlorophyll concentration in vegetation using global optimization approach. 'Technologies, Systems, and Architectures for Transnational Defence II', SPIE Conference 'AeroSense. Technologies and Systems for Defence & Security', Orlando USA, 21-25 April 2003.-V.5071.-174-182
21. V.A. Yatsenko, V. V. Donets, S.M. Kochubey, P. A. Khandriga, P.D.Chichik Optical spectrometer and software for remote sensing of vegetation. Proc. CAOL 2005. 2nd International Conference on Advanced Optoelectronics and Laser, Yalta, Crimea, Ukraine, September 12-17, 2005. - Vol.1. - P. 303-305

Получено 26.10.2006 г.