δ 卷积与反卷积——Unfolding 的频域本质

> 本文从 δ 函数与高斯核的卷积/反卷积出发，在频域中揭示 Unfolding 问题病态性的数学根源，以及正则化方法如何在高频端截断噪声放大。

一、正演：δ 函数卷积成高斯分布

1.1 卷积定义

两个函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 的卷积定义为：

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x')\, g(x - x')\, dx'$$

卷积的物理含义：f 的每一个点 x' 被核 g "涂抹"到周围区域，$g(x - x')$ 给出涂抹的权重。

1.2 δ 函数与高斯核卷积

取 $f(x) = \delta(x - x_0)$（位于 x_0 处的 Dirac δ 函数），核函数为高斯：

$$k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_0^2}\right)$$

其中 σ_0 是探测器的分辨率（如刚度分辨率 σ_R）。

利用 δ 函数的筛选性质 $\int \delta(x' - x_0)\, h(x')\, dx' = h(x_0)$，代入 $h(x') = k(x - x')$：

$$\begin{aligned}
(\delta * k)(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x' - x_0) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{2\sigma_0^2}\right) dx' \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_0^2}\right) \\
&= G(x; x_0, \sigma_0)
\end{aligned}$$

结论：δ 函数与高斯核卷积，结果是以 x_0 为中心、宽度 σ_0 的高斯分布。

物理对应：一个原本具有精确刚度 R_0 的粒子（$\delta(R - R_0)$），经过有限分辨率的探测器测量后，重建刚度呈现为以 R_0 为中心、宽度 σ_R 的高斯分布。这就是迁移矩阵在连续极限下的形式——响应矩阵的第 j 列（对应真实 bin j）正是高斯核在离散 bin 中的采样。

1.3 推广：任意分布与高斯核卷积

若原始分布 $f(x)$ 不是 δ 函数而是任意谱形，卷积结果称为 **Folding**：

$$m(x) = (f * k)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_0^2}\right) dx'$$

这就是测量谱 $m(x)$（即 Unfolding 中的 $\boldsymbol{g}$）与真实谱 $f(x)$（即 $\boldsymbol{f}$）和探测器分辨率核 $k(x)$（即响应矩阵 $\mathbf{A}$ 的连续极限）之间的关系。

卷积操作对信息的影响：

- δ 函数（无限尖锐）→ 高斯（有限宽度 σ_0）
- $f(x)$ 中尺度小于 σ_0 的结构 → 在 $m(x)$ 中被抹平
- 高频细节（亚分辨率结构）→ **不可逆地丢失**

二、反演：高斯分布反卷积成 δ

2.1 卷积定理

傅里叶变换将卷积变为乘积——这是解反卷积问题的核心工具：

$$\mathcal{F}[f * k](\omega) = \mathcal{F}[f](\omega) \cdot \mathcal{F}[k](\omega)$$

其中傅里叶变换定义为：

$$\mathcal{F}[f](\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, e^{-i\omega x}\, dx$$

高斯函数的傅里叶变换仍是高斯（这是高斯函数的独特性质）：

$$\mathcal{F}[G(x;0,\sigma)](\omega) = \exp\left(-\frac{\sigma^2\omega^2}{2}\right)$$

关键观察：高斯在时域（bin 空间）宽度为 σ，在频域宽度为 $1/\sigma$。窄高斯（尖锐）→ 宽频域分布（包含更多高频分量）。

2.2 无噪声情况：解析可解

问题：已知测量谱 $m(x) = G(x;0,\sigma)$ 和探测器分辨率核 $k(x) = G(x;0,\sigma_0)$，求原始分布 $f(x)$ 使得 $f * k = m$。

频域求解：

$$\mathcal{F}[f](\omega) = \frac{\mathcal{F}[m](\omega)}{\mathcal{F}[k](\omega)} = \frac{\exp(-\sigma^2\omega^2/2)}{\exp(-\sigma_0^2\omega^2/2)} = \exp\left(-\frac{(\sigma^2-\sigma_0^2)\omega^2}{2}\right)$$

再做逆傅里叶变换，仍是一个高斯：

$$\boxed{f(x) = G\left(x; 0, \sqrt{\sigma^2 - \sigma_0^2}\right)}$$

三种情况分析：

情况	σ **vs** σ_0	$f(x)$ **的结果**	**物理含义**
$\sigma > \sigma_0$	测量宽度 > 分辨率	高斯，宽度 $\sqrt{\sigma^2 - \sigma_0^2}$	原始分布本身有内在宽度，分辨率只是额外展宽
$\sigma = \sigma_0$	测量宽度 = 分辨率	$\delta(x)$	测量到的宽度完全由探测器分辨率解释——原始分布就是 δ
$\sigma < \sigma_0$	测量宽度 < 分辨率	虚数宽度 → 无实数解	**物理上不可能**：测量谱的宽度不能小于探测器分辨率

无噪声情况下的结论是乐观的：理论上，反卷积可以精确恢复 δ 函数。如果真实谱确实是 $\delta(x)$，且我们能无限精确地知道测量谱 $m(x) = G(x; 0, \sigma_0)$ 的完整函数形式（即每个 x 点的值都精确已知），那么做除法 $\mathcal{F}[m]/\mathcal{F}[k]$ 确实能恢复 $\mathcal{F}[\delta] = 1$。

三、有噪声时：灾难性的高频放大

无噪声推导假设我们精确知道 $m(x)$ 的连续函数形式。**实际上测量谱 $m_{\text{meas}}(x)$ 是统计样本的直方图，每 bin 的事例数带有泊松涨落**：

$$m_{\text{meas}}(x) = m_{\text{true}}(x) + \varepsilon(x)$$

其中 $\varepsilon(x)$ 是 bin-by-bin 的统计噪声。

3.1 频域中噪声的致命放大

将含噪测量谱代入反卷积：

$$\mathcal{F}[f_{\text{est}}](\omega) = \frac{\mathcal{F}[m_{\text{meas}}](\omega)}{\mathcal{F}[k](\omega)} = \frac{\mathcal{F}[m_{\text{true}}](\omega)}{\mathcal{F}[k](\omega)} + \frac{\mathcal{F}[\varepsilon](\omega)}{\mathcal{F}[k](\omega)}$$

第一项是真实信号；**第二项是灾难**。噪声 $\varepsilon(x)$ 是逐 bin 独立的随机涨落，其傅里叶变换 $\mathcal{F}[\varepsilon](\omega)$ 在所有频率上近似平坦（白噪声特性）——高频分量的幅度与低频分量在同一量级。

但分母 $\mathcal{F}[k](\omega) = \exp(-\sigma_0^2\omega^2/2)$ 在高频端**指数衰减**。因此反卷积核：

$$\frac{1}{\mathcal{F}[k](\omega)} = \exp\left(+\frac{\sigma_0^2\omega^2}{2}\right)$$

在**高频端指数增长**。噪声项变为：

$$\frac{\mathcal{F}[\varepsilon](\omega)}{\mathcal{F}[k](\omega)} = \mathcal{F}[\varepsilon](\omega) \cdot \exp\left(+\frac{\sigma_0^2\omega^2}{2}\right) \xrightarrow{\omega\to\infty} \infty$$

3.2 数值演示

取 $\sigma_0 = 1$（以 bin 宽为单位）。在空间频率 $\omega = 5$ 处（对应空间周期约 $2\pi/5 \approx 1.26$ bin——即相邻 bin 的逐 bin 振荡）：

$$\frac{1}{\mathcal{F}[k](5)} = \exp\left(+\frac{1^2 \cdot 5^2}{2}\right) = \exp(12.5) \approx 2.7 \times 10^5$$

在 $\omega = 10$ 处（尺度约 0.63 bin 的振荡——完全不可物理分辨）：

$$\frac{1}{\mathcal{F}[k](10)} = \exp(50) \approx 5.2 \times 10^{21}$$

结论：即使噪声在高频分量上的原始幅度仅 10^{-2}（1% 的 bin 向统计涨落），经过 10^{21} 倍的放大后，也足以将真实信号完全淹没。

3.3 物理图像

```
时域（bin 空间）                                    频域（傅里叶空间）

真实谱 f(x) = δ(x):                                  F[f](ω) = 1:
  |                                                    |  ────────────────────
  |                                                    |  （所有频率均等——δ 包含所有频率分
量）
  └──────────── x


探测器核 k(x) ~ Gaussian(σ₀):                          F[k](ω) = exp(-σ₀²ω²/2):
      ╭─╮                                              |  ███████-----------
    ╭╯   ╰╮                                          |  （高频指数衰减——探测器是低通滤波器）
  |     |                                            |


测量谱 m(x) = f*k + ε:                                 F[m](ω):
  ╭─╮                                                  |  ███████-----------
  |  \▨▨                                               |  ▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨▨   ← 噪声均匀
铺满
  |    \▨▨▨                                          |  （低频 = 信号，高频 = 噪声主导）


反卷积 f_est = m / k（无正则化）:                       F[m]/F[k](ω):
  |/\/\/\                                            |          /\/\/\/\/\
  |                                                    |  ────╯              \──   ← 高频噪声
指数发散！
  └────────────                                        |  低频 OK              高频：灾难
  bin 间剧烈振荡，出现负值
```

3.4 离散视角：从 SVD 理解

在离散化的 Unfolding 问题中，频域分析等价于 SVD 分解的奇异值谱。连续傅里叶变换中的高频 ω 对应 Small SVD 中的小奇异值 σ_k（k 大）。关系为：

$$\sigma_k \propto \exp\left(-\frac{\sigma_0^2}{2} \cdot \frac{k^2}{L^2}\right)$$

其中 L 是测量范围。因此：

- $k = 1, 2, 3$（大奇异值）$\to$ 低频模式 $\to$ 对噪声不敏感
- $k \to m$（小奇异值）$\to$ 高频模式 $\to$ 反演时除以 $\sigma_k \approx 0 \to$ 噪声放大 $\to \infty$

这与 Unfolding 文档 §3.2 中的分析完全一致：小奇异值对应的高频模式在直接反演中被指数放大。

四、正则化如何在频域中拯救反卷积

4.1 四类方法的频域等价操作

所有 Unfolding 方法本质上都是在频域**限制高频放大因子**。回顾一般形式的正则化解：

$$\mathcal{F}[f_{\text{reg}}](\omega) = \phi(\omega) \cdot \frac{\mathcal{F}[m](\omega)}{\mathcal{F}[k](\omega)}$$

其中 $\phi(\omega)$ 是**频率依赖的衰减因子**（等效于滤波器）。

方法	$\phi(\omega)$ 的形式	频域含义
无正则化（直接反卷积）	$\phi(\omega) \equiv 1$	所有频率分量均等对待 $\to$ 高频噪声发散
SVD 硬截断	\$\phi(\omega) = \begin{cases} 1, &	\omega
Tikhonov 正则化	\$\phi(\omega) = \dfrac{	\mathcal{F}k
贝叶斯迭代	$\phi(\omega)$ 随迭代步数增加逐渐趋近 1	低分辨率信息先注入，高分辨率信息逐次释放——有限次迭代 = 有限频率带宽
Bin-by-bin 修正	$\phi(\omega) \equiv 0$（对所有 $\omega \neq 0$）	完全不对 bin 间迁移做任何反演——等于放弃恢复所有亚 bin 宽度的结构

4.2 SVD 截断在频域的等价形式

在连续极限下，SVD 截断至 $k_{\max}$ 个奇异值等价于设置截止频率 $\omega_{\max}$，使得 $\sigma_0 \omega_{\max} \approx \sqrt{2 \ln(m/k_{\max})}$。

截止频率与可恢复的最细结构尺度的关系：

$$\Delta x_{\min} \approx \frac{\pi}{\omega_{\max}} \approx \frac{\pi \sigma_0}{\sqrt{2 \ln(m/k_{\max})}} \sim \sigma_0$$

物理结论：无论采用何种正则化方法，你承诺能恢复的**最细 bin 结构尺度不可能小于探测器分辨率 σ_R 本身**。任何声称能从反卷积中恢复比 σ_R 更细之结构的说法，在数学上等价于提取被 $e^{+\sigma_R^2 \omega^2/2}$ 倍增放大的噪声分量。

4.3 Tikhonov 正则化与维纳滤波的等价性

Tikhonov 正则化解的频域衰减因子 $\phi(\omega) = |\mathcal{F}[k]|^2/(|\mathcal{F}[k]|^2 + \tau^2)$ 与信号处理中的**维纳滤波器**（Wiener filter）形式完全一致：

$$\phi_{\text{Wiener}}(\omega) = \frac{|\mathcal{F}[k](\omega)|^2}{|\mathcal{F}[k](\omega)|^2 + \frac{S_\varepsilon(\omega)}{S_f(\omega)}}$$

其中 S_ε 和 S_f 分别是噪声和信号的功率谱密度。Tikhonov 的正则化参数 τ^2 等价于假设噪声与信号的功率比为常数——即假设信号和噪声都是白噪声（各个频率分量功率相等）。更精细的 Unfolding 可以使用非均匀的 $\tau(\omega)$，在信号功率强（低频）地区少加正则化，在信号功率弱（高频）地区多加正则化。

五、完整的数学链条

将上述分析串成 Unfolding 的完整逻辑链：

```
物理层面                              数学层面                        频域层面
══════════════════════════════════════════════════════════════════════════


真实刚度谱 f(R_true)              连续函数 f(x)                  F[f](ω)
       │                                │                          │
       │ 探测器有限分辨率              │ 与高斯核卷积               │ 乘以 e^{-
σ²ω²/2}
       │ (信息丢失，不可逆!)           │ (平滑操作)                 │ (低通滤波)
       ▼                                ▼                          ▼
测量刚度谱 g(R_meas)              m(x) = (f * k)(x) + ε      F[m] = F[f]·F[k] +
F[ε]
       │                                │                          │
       │ Unfolding                      │ 反卷积 + 正则化           │ 除以 F[k] 再乘
ϕ(ω)
       │ (正则化 ≈ 承认丢失不可恢复) │                          │
       ▼                                ▼                          ▼
估计真实谱 f̂(R_true)              f̂_reg(x)                    F[f̂] = ϕ·F[m]/F[k]
                                                                 ≈ F[f] 仅当 |ω|
< ω_max
```

六、总结

$$\boxed{\delta \xrightarrow{\text{卷积 } \sigma_R} \text{Gaussian}(\sigma_R) \xrightarrow{\text{反卷积（无噪声）}} \delta}$$

$$\boxed{\delta \xrightarrow{\text{卷积 } \sigma_R} \text{Gaussian}(\sigma_R) + \varepsilon \xrightarrow{\text{反卷积（有噪声，无正则化）}} \text{振荡灾难}}$$

$$\boxed{\delta \xrightarrow{\text{卷积 } \sigma_R} \mathrm{Gaussian}(\sigma_R) + \varepsilon \xrightarrow{\text{反卷积 + 正则化}} \mathrm{Gaussian}(\sigma_R)\text{（最细可恢复结构} \sim \sigma_R\text{）}}$$

三条结论：

1. **正演（卷积/Folding）使信息不可逆地丢失**：δ 函数的无限尖锐（包含所有频率分量）被高斯核的低通滤波效应（$e^{-\sigma^2\omega^2/2}$）衰减，高频分量在测量谱中变得极其微弱。
2. **反演（反卷积/Unfolding）是病态的**：要恢复高频分量，必须在频域除以 $e^{-\sigma^2\omega^2/2}$，即乘以 $e^{+\sigma^2\omega^2/2}$——这同时将噪声高频分量以相同指数倍率放大。频率越高，信噪比越低，直到噪声完全淹没信号。
3. **正则化 = 在高频端认输**：所有正则化方法（SVD 截断、Tikhonov 惩罚、贝叶斯迭代截止）本质上都是同一个操作——在高频端对反卷积放大因子设置上限，主动放弃恢复那些本质上已被探测器分辨率抹去的亚分辨率结构。

> **一句话**：探测器分辨率 σ_R 是信息丢失的不可逾越的尺度——你可以在 σ_R 内用正则化换取稳定，但不能恢复已经被分辨率永久抹去的东西。

参考文献

- G. Cowan, *Statistical Data Analysis*, Oxford (1998), Chapter 11 — Unfolding 的经典教材级阐述
- A. N. Tikhonov & V. Y. Arsenin, *Solutions of Ill-Posed Problems* (1977) — 反问题正则化理论的奠基著作
- R. N. Bracewell, *The Fourier Transform and Its Applications* (2000) — 卷积与傅里叶变换的标准参考

- 与同一目录下的 筛选条件详解 和上级目录的 Unfolding 完整理论 配套阅读