

ПРЕДЕЛЬНО ДОСТИЖИМЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ВЫИГРЫША ФЕЛЖЕТА В МУЛЬТИПЛЕКС-СПЕКТРОСКОПИИ

А. Я. Паршин и Б. Н. Гречушников

Получены предельные оценки возможных значений выигрыша Фелжета при произвольных линейных преобразованиях спектральной плотности как в случае фотонных шумов, так и в случае собственных шумов приемника.

Хорошо известно, что спектральные приборы с мультимплекс-фактором (Фурье-спектрометры, Адамар-спектрометры и т. д.) в случае фотонных шумов не обладают выигрышем Фелжета [1, 2] (т. е. лучшим, чем для классического сканирующего прибора, средним отношением сигнала к шуму при эквивалентных геометрических факторах и разрешающих силах). Мы покажем, что это утверждение справедливо для любого мультимплекс-спектрометра из класса «несамообучающихся», т. е. не использующих поступающую во время измерения спектральную информацию для перестройки самой программы измерений. Будет показано также, что в случае, когда определяющими являются собственные шумы приемника, не зависящие от величины сигнала, наибольшим возможным выигрышем Фелжета обладает спектрометр Адамара.

Пусть n — число разрешаемых спектральных интервалов, f_k — исследуемая спектральная плотность излучения ($k=1, \dots, n$), а измерение ведется путем регистрации m последовательных отсчетов сигнала приемника $\varphi_i = (T/m) q\Phi_i$ (q — квантовый выход приемника, $i=1, \dots, m$), накопленного за одинаковые промежутки времени T/m , T — полное время измерения. Световой поток на приемнике Φ_i (квант/с) есть результат некоторого линейного преобразования спектральной плотности

$$\Phi_i = \sum_{k=1}^n A_{ik} f_k, \quad 0 \leq A_{ik} \leq 1. \quad (1)$$

Неравенства, ограничивающие возможные значения элементов матрицы $\|A\|$, являются следствием, во-первых, того факта, что Φ_i — величина существенно положительная, и, во-вторых, предположения, что в процессе преобразования световой поток не усиливается.

Величины Φ_i содержат наряду с полезным сигналом случайный шум $\delta\Phi_i = (m/Tq) \delta\varphi_i$, корреляционная матрица которого $\|B_\Phi\|_{ij} = \delta\Phi_i \delta\Phi_j$. В случае фотонных шумов следует положить

$$\|B_\Phi\|_{ij} = (m/Tq) \Phi_i \delta_{ij}.$$

Нашей задачей является отыскание такой матрицы $\|A\|$, которая позволяла бы определять компоненты f_k из уравнений (1) с наилучшей в заданных условиях точностью. Ясно, что вид такой матрицы зависит, вообще говоря, как от вида самого спектра, так и от конкретной экспериментальной задачи. Если, однако, заранее об измеряемом спектре ничего не известно (кроме порядка величины полной интенсивности $F = \sum_{k=1}^n f_k$) и

поступающая спектральная информация не используется для перестройки программы измерений (т. е. $\|A\|$ никак не скоррелирована с $\|f\|$), то можно поставить задачу об отыскании матрицы $\|A\|$, наилучшей «в среднем по всем возможным спектрам». В этом случае имеем

$$\|B_\Phi\|_{ij} = \frac{F}{Tq} \frac{m}{n} \delta_{ij} \sum_{k=1}^n A_{ik}$$

или, вводя матрицу весов $\|P\|_{ij} = p_i \delta_{ij}$, $P_i^{-1} = \sum_{k=1}^n A_{ik}$,

$$\|B_\Phi\| = \frac{F}{Tq} \frac{m}{n} \|P^{-1}\| \quad (2)$$

(без ограничения общности можно считать $\sum_{k=1}^n A_{ik} > 0$).

Уравнения (1), вообще говоря, несовместны. Однако если ранг $\|A\|$ равен n , всегда существует однозначно определенное наилучшее приближенное решение $\|f_0\|$ (в смысле метода наименьших квадратов [3])

$$\|f_0\| = (\|A\| \|P\| \|A\|)^{-1} \|A\| \|P\| \Phi = \|A^+\| \Phi, \quad \|A\|_{ij} = \|A\|_{ji}$$

с корреляционной матрицей $\|B_f\|_{ij} = \overline{\delta f_{0i} \delta f_{0j}}$

$$\|B_f\| = \|A^+\| \|B_\Phi\| \|A^+\| = \frac{F}{Tq} \frac{m}{n} (\|A\| \|P\| \|A\|)^{-1}.$$

При $m=n$, естественно, $\|A^+\| = \|A^{-1}\|$ и $\|f_0\| = \|f\|$.

В качестве характеристики среднего отношения сигнал/шум естественно оптимизировать, оставаясь в рамках метода наименьших квадратов, величину K , определенную как

$$\frac{1}{K^2} = \left(\frac{n}{F}\right)^2 \frac{1}{n} \text{Sp} \|B_f\|. \quad (3)$$

Таким образом, задача сводится к отысканию таких матриц $\|A\|$, для которых величина K^{-2} минимальна. Замечая, что $\|A\| \|P\| \|A\|$ — положительно определенная матрица с собственными числами λ_i , $i=1, \dots, n$, и используя известное неравенство

$$\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i\right) \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1}\right) \geq n^2, \quad \lambda_i > 0,$$

получим

$$\text{Sp} (\|A\| \|P\| \|A\|)^{-1} \geq n^2 (\text{Sp} \|A\| \|P\| \|A\|)^{-1}.$$

Далее, учитывая неравенства (1), имеем

$$\text{Sp} (\|A\| \|P\| \|A\|) = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n p_i A_{ik}^2 \leq \sum_{i=1}^m p_i \sum_{k=1}^n A_{ik} = m$$

и окончательно

$$\frac{1}{K^2} \geq \frac{n^2}{TqF}. \quad (4)$$

Равенство в (4) достигается только для таких матриц $\|A\|$, которые с точностью до произвольной перестановки строк совпадают с единичной ($m=n$) или с матрицей, представляющей собой столбец из единичных матриц (m кратно n). Именно такие матрицы соответствуют в наших обозначениях обычному сканирующему прибору.

Перейдем к случаю шумов, не зависящих от сигнала. Положим

$$\|B_\Phi\|_{ij} = \frac{m}{Tq^2} \sigma \delta_{ij}, \quad (5)$$

где σ — дисперсия собственных шумов приемника. Тогда

$$\frac{1}{K^2} = \frac{mn}{T} \frac{\sigma}{q^2 F^2} \text{Sp} (\| \bar{A} \| \| A \|)^{-1}. \quad (6)$$

Отметим, что при выводе (6) уже не требуется предполагать, что $\| A \|$ и $\| f \|$ никак не коррелируют. Другими словами, никакое «самообучение» прибора не поможет улучшить среднее по всему спектру отношение сигнал/шум, если для оценки этого отношения использовать величину K , определенную согласно (3).

Асимптотически точную (при больших n) оценку правой части (6) можно получить следующим образом. Во-первых, поскольку $\| \bar{A} \| \| A \|$ — положительно определенная матрица, то

$$\text{Sp} (\| \bar{A} \| \| A \|)^{-1} \geq n (\det \| \bar{A} \| \| A \|)^{-\frac{1}{n}} \quad (7)$$

(это следует из неравенства между средним арифметическим и средним геометрическим n положительных чисел).

Далее, можно показать (см. Приложение), что для всякой матрицы $\| A \|$, удовлетворяющей неравенствам (1),

$$\det \| \bar{A} \| \| A \| \leq (n+1)^{n+1} \left(\frac{m}{4n} \right)^n, \quad (8)$$

причем равенство достигается на «адамаровских» $(0,1)$ -матрицах $\| A_{ад} \|$ [2] (или их тривиальных обобщениях, если m кратно n) — квадратных матрицах порядка $n = 4t - 1$ со следующими свойствами:

$$\| \bar{A}_{ад} \| \| A_{ад} \| = t \| I \| + t \| J \|, \quad I_{ik} = \delta_{ik}, \quad J_{ik} = 1,$$

$$\text{Sp} (\| A_{ад} \| \| A_{ад} \|)^{-1} = \left(\frac{2n}{n+1} \right)^2.$$

Из (7) и (8) имеем

$$\frac{1}{K^2} > 4n^3 (n+1)^{-\frac{n+1}{n}} \frac{\sigma}{Tq^2 F^2} \quad (9)$$

(равенство не достигается ни для каких матриц), в то время как для «адамаровских» матриц [2,5]

$$\frac{1}{K_{ад}^2} = \frac{4n^4}{(n+1)^2} \frac{\sigma}{Tq^2 F^2}. \quad (10)$$

При $n \rightarrow \infty$ правые части (9) и (10) совпадают, так что оценка (9) является асимптотически точной. Таким образом, максимально достижимый при больших n выигрыш Фелжета (т. е. отношение значений K для $\| A \| = \| A_{ад} \|$ и $\| A \| = \| I \|$) составляет $\sqrt{n/2}$.

Приложение

Для оценки $\det \| \bar{A} \| \| A \|$, $0 \leq A_{ik} \leq 1$ дополним матрицу $\| A \|$ до квадратной $m \times m$ матрицы $\| A' \|$, приписав к $\| A \|$ справа $m - n$ столбцов, подчиненных следующим условиям:

$$\sum_{i=1}^m A'_{ik} A'_{il} = N \delta_{kl}; \quad k = 1, \dots, m; \quad l = n+1, \dots, m.$$

Геометрически это означает построение системы $m - n$ векторов, ортогональных друг другу и каждому из n заданных векторов. Имеем

$$\det \| \bar{A}' \| \| A' \| = N^{m-n} \det \| \bar{A} \| \| A \|.$$

Далее, построим «окаймляющую» $(m+1) \times (m+1)$ матрицу $\| C \|$

$$C_{ik} = 2A'_{ik}; \quad i, k = 1, \dots, m;$$

$$C_{i0} = 1; \quad i = 0, \dots, m;$$

$$C_{0k} = 0; \quad k = 1, \dots, m;$$

$$\det \|C\| = 2^m \det \|A'\|.$$

Вычтем из каждого из столбцов с 1-го по n -й крайний левый столбец, а столбцы $n+1, \dots, m$ оставим без изменения, получится матрица $\|C'\|$

$$\det \|C'\| = \det \|C\|.$$

Наконец, вводя $m \times (m+1)$ матрицу $\|D\|$, полученную из $\|C'\|$ вычеркиванием верхней строки, имеем, согласно обобщенному неравенству Адамара [4],

$$\det \|C'\| \|\tilde{C}'\| \leq (n+1) \det \|D\| \|\tilde{D}\|,$$

откуда

$$\begin{aligned} \det \|A\| \|A\| &\leq N^{-(m-n)} 4^{-m} (n+1) \det \|D\| \|\tilde{D}\| \leq N^{-(m-n)} 4^{-m} (n+1) \left(\frac{1}{m} \text{Sp} \|D\| \|\tilde{D}\| \right)^m = \\ &= N^{-(m-n)} (4m)^{-m} (n+1) \left[m + \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n (2A_{ik} - 1)^2 + 4N(m-n) \right]^m \leq \\ &\leq N^{-(m-n)} (4m)^{-m} (n+1) [m(n+1) + 4N(m-n)]^m. \end{aligned}$$

Правая часть последнего неравенства минимальна при $N = \frac{mn+1}{4-n}$, поэтому

$$\det \|A\| \|A\| \leq (n+1)^{n+1} \left(\frac{m}{4n} \right)^n.$$

Литература

- [1] Р. Дж. Белл. Введение в Фурье-спектроскопию, гл. 2. «Мир», М., 1975.
- [2] N. J. A. Sloane, T. Fine, G. R. Phillips, M. Harwit. Appl. Opt., 8, 2403, 1969.
- [3] Ю. В. Линник. Метод наименьших квадратов и основы теории обработки наблюдений, гл. VI. Физматгиз, М., 1962.
- [4] Ф. Р. Гантмахер. Теория матриц, гл. IX. «Наука», М., 1966.
- [5] E. D. Nelson, M. L. Fredman. J. Opt. Soc. Am., 60, 1664, 1970.

Поступило в Редакцию 8 апреля 1977 г.