

## ИНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРАЛЬНОГО ДУБЛЕТА, ИСКАЖЕННОГО АППАРАТНОЙ ФУНКЦИЕЙ

Н. Г. Преображенский и А. И. Седельников

Исследуется вопрос о влиянии аппаратных искажений на точность решения задачи определения параметров спектрального дублета. Задача рассмотрена в двух вариантах: 1) прямое определение параметров из наблюдаемого контура, 2) предварительное проведение редукции к идеальному прибору методом регуляризации с последующим определением параметров. Показано, что использование двухступенчатой схемы (вариант 2) может существенно понизить информационную обеспеченность искомым параметрам. Изучается эффект повышения точности определяемых параметров от уменьшения их количества.

1. При извлечении информации из контуров спектральных линий весьма распространенной является ситуация, когда функциональный вид обрабатываемого контура известен и предметом поиска является набор входящих в него параметров. Присутствие в обрабатываемом контуре шумов, порождаемых системой регистрации спектроскопической установки, вносит фактор случайности в общую схему определения параметров, вследствие чего для этой цели вполне естественным представляется использование методов математической статистики. Центральное место среди этих методов занимает метод максимума правдоподобия (ММП) [1]. Получивший широкое распространение при обработке спектров метод наименьших квадратов [2-6] совпадает с ММП в случае, когда шумовая составляющая  $\varepsilon_f(\nu)$  обрабатываемого спектрального контура  $f(\nu)$  является гауссовым случайным процессом с корреляционной функцией, интервал корреляции которой существенно меньше шага дискретизации по переменной  $\nu$  при численном представлении функции  $f(\nu)$  (ковариационная матрица  $C_f$  случайного вектора  $\varepsilon_f$  (см. [7]) диагональна).

Преимущества выбора ММП заключаются в следующем. Во-первых, как следует из [7], статистические оценки искомым параметрам, получаемые с помощью ММП, обладают наименьшими значениями дисперсий. Во-вторых, ковариационная матрица погрешностей этих параметров в определенных условиях [7] достаточно хорошо аппроксимируется матрицей  $G^{-1}$ , обратной информационной матрице Фишера  $G$ . Элементы матрицы  $G$  являются функциями вектора искомым параметров. Это дает возможность априори до проведения всего цикла работ, включающих экспериментальные измерения с последующей обработкой их на предмет выявления необходимых параметров, построить зависимости ожидаемых при этом погрешностей от величин самих параметров. Наличие таких зависимостей дает возможность прогнозировать точность ожидаемых результатов и на этой основе планировать эксперимент [8], выбирая из множества его режимов тот, при котором итоговая погрешность вычисляемых физических параметров наименьшая.

В том случае, когда выбранная схема обработки экспериментальных данных отличается от ММП, в соответствии с [1] значения элементов матрицы  $G^{-1}$  имеют смысл нижних границ для соответствующих элементов ковариационной матрицы вектора искомым параметров.

При регистрации спектров с помощью реальных спектральных приборов неизбежны искажения, обусловленные наличием аппаратной функции  $a(\nu)$ . Если при этом истинный контур спектральной линии задан в виде известной функции  $\varphi(\mu, \nu)$ , зависящей от разностной частоты  $\nu$  и вектора неизвестных



параметров  $\mu = [\mu_j]$  ( $j=1, \dots, n$ ,  $n$  — число параметров), то уравнение, связывающее  $\varphi(\mu, \nu)$  и наблюдаемый контур  $f(\nu)$ , имеет вид [9]

$$\int_{-\infty}^{\infty} a(\nu - \nu') \varphi(\mu, \nu') d\nu' = f(\nu). \quad (1)$$

Нахождение статистической оценки вектора  $\mu$  в рамках ММП может быть осуществлено двумя способами.

Первый способ заключается в том, что в качестве искомой оценки выбирается такое  $\mu$ , при котором минимизируется квадратичная форма

$$\rho_1(\mu) = [\Psi_1(\mu), C_f^{-1} \Psi_1(\mu)], \quad (2)$$

где вектор  $\Psi_1$  — дискретный аналог невязки

$$\psi_1(\mu, \nu) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\nu - \nu') \varphi(\mu, \nu') d\nu' - f(\nu), \quad (3)$$

$C_f$  — ковариационная матрица вектора  $f$ , являющегося дискретным аналогом функции  $f(\nu)$ .

Анализ статистических свойств оценки, полученный при этом способе, проведенный для переабсорбированного контура одиночной спектральной линии в [10] и для спектрального дублета в настоящей работе, показывает, что монотонное увеличение полуширины аппаратной функции  $a(\nu)$  приводит к монотонному увеличению дисперсий  $\sigma_j^2$  искомых параметров  $\mu_j$ . Это обстоятельство наводит на мысль о наличии второго способа решения исходной задачи, где в качестве первого этапа должно быть проведено устранение аппаратных искажений (редукция к идеальному прибору) с помощью, например, метода регуляризации [11]. Иными словами, на этом этапе должно быть решено уравнение (1) относительно функции  $\varphi(\nu)$  в предположении, что она не известна.

Статистические свойства полученного при этом регуляризованного решения  $\varphi_\alpha(\nu)$  характеризуются в соответствии с [11] смещением

$$\Delta(\mu, \nu) = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(\omega) \Phi(\mu, \omega) \exp(i\omega\nu)}{|A(\omega)|^2 + \alpha M(\omega)} d\omega \quad (4)$$

и корреляционной функцией

$$\zeta_\varphi(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} S_\varphi \exp(i\omega\nu) d\omega, \quad (5)$$

где спектральная плотность регуляризованного решения определяется через спектральную плотность  $S_f(\omega)$  исходной случайной функции  $\varepsilon_f(\nu)$  как

$$S_\varphi(\omega) = \frac{|A(\omega)|^2 S_f(\omega)}{(|A(\omega)|^2 + \alpha M(\omega))^2}. \quad (6)$$

В (4)—(6) предполагается, что шумовая помеха  $\varepsilon_f(\nu)$  стационарна, благодаря чему для уравнения типа свертки (1) можно применить Фурье-вариант метода регуляризации. Входящие в (4)—(6) выражения имеют смысл:  $A(\omega)$ ,  $\Phi(\mu, \omega)$  — Фурье-образы соответственно функций  $a(\nu)$  и  $\varphi(\mu, \nu)$ ,  $M(\omega)$  — стабилизирующая функция,  $\alpha$  — параметр регуляризации [11].

Статистическая оценка вектора  $\mu$  при втором способе определяется из условия минимизации квадратичной формы

$$\rho_2(\mu) = [\Psi_2(\mu), C_f^{-1} \Psi_2(\mu)], \quad (7)$$

где вектор  $\Psi_2$  есть дискретный аналог функции

$$\psi_2(\mu, \nu) = \varphi(\mu, \nu) + \Delta(\mu, \nu) - \varphi_\alpha(\nu). \quad (8)$$

Элементы ковариационной матрицы  $C_\varphi$  определяются функцией  $\zeta_\varphi(\nu)$  как

$$C_{\varphi pq} = \zeta_{\varphi m}; \quad p, q = 1, \dots, N, \quad (9)$$



где  $m = |q - p| + 1$ ,  $\zeta_{\varphi m} - m$ -я проекция вектора  $\zeta_{\varphi}$ , являющегося дискретным аналогом функции  $\zeta_{\varphi}(\nu)$ ,  $N$  — число дискретных отсчетов по переменной  $\nu$ .

Элементы информационной матрицы  $G$  при первом способе решения задачи будут иметь вид

$$G_{kl} = \left( \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial \mu_k}, C_f^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial \mu_l} \right), \quad (10)$$

где вектор  $\mathbf{u}_1$  есть дискретный аналог левой части уравнения (1).

При втором же способе определения параметров  $\mu_j$  соответственно имеем

$$G_{kl} = \left( \frac{\partial \mathbf{u}_2}{\partial \mu_k}, C_{\varphi}^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}_2}{\partial \mu_l} \right), \quad (11)$$

где вектор  $\mathbf{u}_2$  есть дискретный аналог функции

$$u_2(\mu, \nu) = \varphi(\mu, \nu) + \Delta(\mu, \nu). \quad (12)$$

2. Рассмотрим конкретный пример, когда функция  $\varphi(\mu, \nu)$  представляет собой спектральный дублет доплеровских

$$\varphi(\mu, \nu) = \mu_2 \exp \left\{ -\frac{\ln 2 (\nu - \mu_4)^2}{\mu_1^2} \right\} + \mu_3 \exp \left\{ -\frac{\ln 2 (\nu - \mu_5)^2}{\mu_1^2} \right\}, \quad (13)$$

либо дисперсионных контуров

$$\varphi(\mu, \nu) = \frac{|\mu_2|}{\mu_1^2 + (\nu - \mu_4)^2} + \frac{\mu_3}{\mu_1^2 - (\nu - \mu_5)^2} \quad (14)$$

с неизвестными параметрами  $\mu_j$  ( $j = 1, \dots, 5$ ).

В качестве  $a(\nu)$  рассмотрим три типичные для спектроскопии аппаратные функции [9] дисперсионную

$$a(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{|\gamma|}{\gamma^2 + \nu^2}, \quad (15)$$

гауссову

$$a(\nu) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\gamma \sqrt{\pi}} \exp \left( -\frac{\ln 2 \nu^2}{\gamma^2} \right) \quad (16)$$

и щелевую

$$a(\nu) = \begin{cases} \frac{1}{2\gamma}, & |\nu| \leq \gamma, \\ 0, & |\nu| > \gamma \end{cases} \quad (17)$$

со значением полуширины  $\gamma$ .

Для случая, когда  $\varepsilon_f(\nu)$  есть гауссов стационарный белый шум с дисперсией  $\sigma_f^2$ , вычислены нижние границы дисперсий  $\sigma_j^2$  оценок параметров  $\mu_j$ , совпадающие с диагональными элементами  $G_{jj}^{-1}$  матрицы  $G^{-1}$ . Матрица  $G$  вычислялась в соответствии с отмеченными выше двумя способами по формулам (10) и (11).

На рис. 1—3 представлены зависимости коэффициентов «увеличения ошибки»

$$k_1 = \frac{\bar{\sigma}_1}{\bar{\sigma}_f}; \quad k_3 = \frac{\bar{\sigma}_3}{\bar{\sigma}_f}; \quad k_5 = \frac{\bar{\sigma}_5}{\bar{\sigma}_f} \quad (18)$$

от отношения  $\bar{\gamma} = \gamma/\mu_1$  полуширины аппаратной функции  $\gamma$  к полуширине одиночной линии дублета  $\mu_1$ . Входящие в (18) величины определяются как

$$\bar{\sigma}_f = \frac{\sigma_f}{f_{\max}}, \quad \bar{\sigma}_1 = \frac{\sigma_1}{\mu_1}, \quad \bar{\sigma}_3 = \frac{\sigma_3}{\mu_3}, \quad \bar{\sigma}_5 = \frac{\sigma_5}{\mu_2}, \quad (19)$$

где  $f_{\max}$  — значение максимума функции  $f(\nu)$ ;  $\sigma_1^2, \sigma_3^2, \sigma_5^2$  — дисперсии оценок параметров  $\mu_1, \mu_3, \mu_5$ .

Графики на рис. 1, 2 построены для функции  $\varphi(\mu, \nu)$  вида (13), а рис. 3 — для функции (14). Рис. 1 соответствует случаю, когда  $\mu_3 = \mu_2$  (линии равной ин-



тенсивности), а рис. 2, 3 — случаю, когда  $\mu_3=0.2 \mu_2$  (вторая компонента дублета слабо разрешима из-за малой интенсивности). Аппаратная функция  $a(\nu)$  для графиков рис. 1 принимала в виде (15) и (16), для рис. 2 — в виде (15), (16), (17), для рис. 3 — в виде (16).

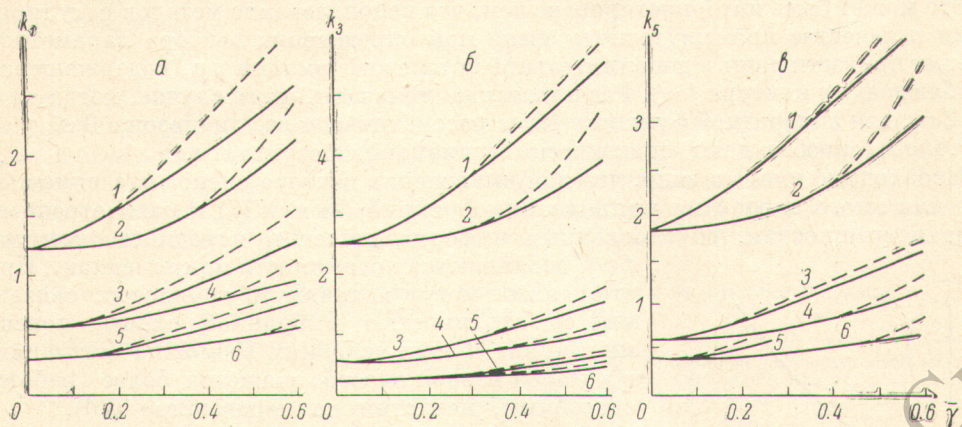


Рис. 1. Зависимость коэффициентов «увеличения погрешности» от соотношения полуширин  $\gamma$  для доплеровского дублета с отношением интенсивностей 1 : 1.

Сплошные линии — вычисление  $G$  по (10), штриховые — по (11). Аппаратная функция: дисперсионная (1, 3, 5) и гауссова (2, 4, 6). Коэффициент  $\eta$  : 1 (1, 2), 1.5 (3, 4), 2 (5, 6).

Результаты, представленные сплошными линиями, соответствуют первому способу решения задачи (вычисление  $G_{kl}$  по формуле (10)). Графики же, приведенные штриховыми линиями, соответствуют случаю решения задачи вторым способом (вычисление  $G_{kl}$  по формуле (11)). При этом определение регуляризо-

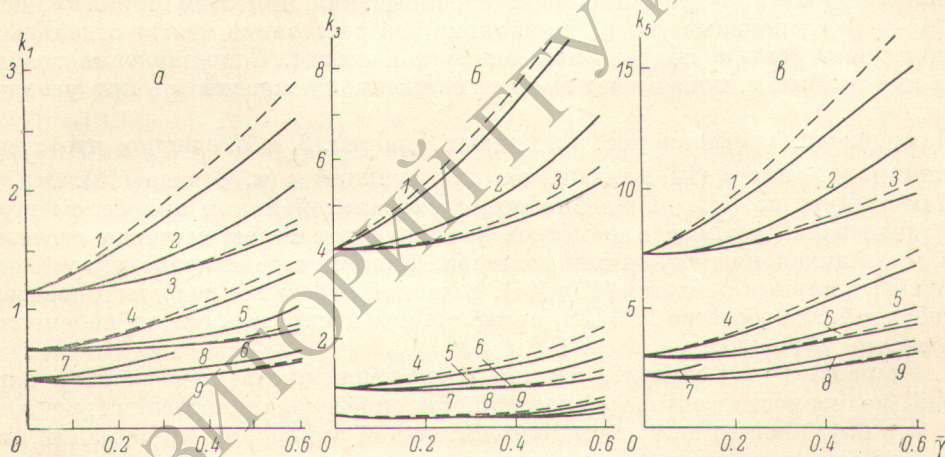


Рис. 2. Зависимости коэффициентов  $k_1, k_2, k_3$  от  $\gamma$  для доплеровского дублета с отношением интенсивностей 5 : 1.

Сплошные линии вычисление  $G$  по (10), штриховые — по (11). Аппаратная функция: дисперсионная (1, 4, 7), гауссова (2, 5, 8), щелевая (3, 5, 9). Коэффициент  $\eta$  : 1 (1, 2, 3), 1.5 (4, 5, 6), 2 (7, 8, 9).

ванного решения производилось с помощью метода регуляризации Тихонова с вычислением параметра  $\alpha$  по принципу невязки и выбором стабилизирующей функции в виде  $M(\omega) = \omega^4$  (стабилизатор второго порядка)<sup>[14]</sup>.

Анализ рис. 1—3 показывает, что с увеличением  $\gamma$  для всех типов аппаратной функции все  $\sigma_i$  увеличиваются, что можно объяснить снижением информационной обеспеченности искомых параметров с ростом  $\tilde{\gamma}$ . Из рассмотренных трех типов аппаратных искажений наиболее сильно этот эффект проявляется для дисперсионной и наименее сильно — для щелевой аппаратной функции.

Сопоставление сплошных и штриховых кривых свидетельствует о том, что



для рассматриваемых случаев нижние границы среднеквадратичных отклонений получаемых при первом способе  $\sigma_i$  и при втором способе  $\sigma_j$ , связаны соотношением

$$\sigma_j \leq \sigma_{j^*} \quad (20)$$

Это может быть интерпретировано тем, что использование методов регуляризации в качестве промежуточного звена при определении вектора параметров  $\mu$  может привести лишь к дополнительной потере информации о  $\mu$ , содержащейся в наблюдаемом контуре  $f(v)$ . Расчеты также показали, что в случае, когда  $\mu_3 = 0.2 \mu_2$ , для аппаратной функции (16) в рассматриваемом диапазоне  $0 \leq \gamma \leq 0.6$  оба способа дают практически одинаковые результаты.

Необходимо иметь в виду, что при вычислении вектора оценок  $\mu$  с помощью того или иного алгоритма минимизации функций (2) или (7) к рассмотренным выше погрешностям, обусловленным информативностью исходного контура  $f(v)$ , добавляются погрешности минимизации. При этом также могут возникнуть трудности, связанные со сходимость выбранной схемы поиска минимума. В этих условиях возможна ситуация, в которой второй способ окажется более работоспособным, несмотря на неравенство (20).

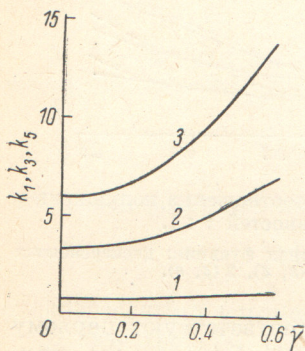


Рис. 3. Зависимость коэффициентов  $k_1$  (1),  $k_3$  (3),  $k_5$  (2) от  $\gamma$  для дисперсионного дублета с отношением интенсивностей 5:1 при  $\eta=1$ .

Аппаратная функция — гауссова.

На рис. 1, 2 проиллюстрировано также поведение зависимостей  $k_1(\bar{\gamma})$ ,  $k_3(\bar{\gamma})$ ,  $k_5(\bar{\gamma})$  при различной степени перекрытия отдельных спектральных компонент дублета. В качестве меры перекрытия при этом принято число  $\eta = (\mu_5 - \mu_4) / \mu_1$ , показывающее, во сколько раз расстояние между отдельными компонентами больше полуширины одиночной линии. Сопоставление результатов для разных  $\eta$ , показывает быстрое снижение дисперсий  $\sigma_j^2$  при увеличении  $\eta$ .

Из сравнения графиков рис. 3 и кривых 2 на рис. 2, а, б, в видно, что  $\sigma_j$  для функции  $\varphi(\mu, \rho)$  вида (14) меньше, чем для функций  $\varphi(\mu, v)$  вида (13).

Как следует из [12], для одиночной спектральной линии при белом шуме  $\varepsilon_f(v)$  дисперсии искоемых параметров уменьшаются с ростом числа отсчетов, укладываемых на полуширине контура. Аналогичное явление имеет место и для спектральных дублетов (13), (14). В данной работе все расчеты проведены при общем числе отсчетов  $N=128$ , причем шаг  $h$  дискретизации по переменной  $v$  равнялся  $h = \mu_1 / 20$ .

3. Из работ [7, 12] следует, что при уменьшении числа неизвестных параметров (размерности вектора  $\mu$ ) погрешность определения последних уменьшается. Это обусловлено внесением дополнительной априорной информации, выражающейся в том, что некоторые из параметров предполагаются известными. Отмеченный эффект может быть достаточно просто объяснен математически.

Пусть первоначально вектор искоемых параметров имеет размерность  $n$ . Обозначим его  $\mu^n = \{\mu_j\}$ ,  $j=1, \dots, n$ , а матрицу, обратную матрице Фишера, обозначим  $Q^{(n)}$ . Предположим, теперь, что один из параметров (например  $\mu_s$ ) стал известным, т. е. вектор неизвестных параметров стал размерности  $(n-1)$ . Матрица Фишера для вектора  $\mu^{(n-1)}$  строится из матрицы для вектора  $\mu^{(n)}$  простым вычеркиванием  $s$ -го столба и  $s$ -строки. Что же касается матрицы  $Q^{(n-1)}$ , то она может быть построена из элементов матрицы  $Q^{(n)}$  в соответствии с методом окаймления [13] по рекуррентной формуле, приведенной в [14] (стр. 188).

$$Q_{kl}^{(n-1)} = Q_{kl}^{(n)} - \frac{Q_{ks}^{(n)} Q_{sl}^{(n)}}{Q_{ss}^{(n)}} \quad (21)$$

Если учесть, что матрица  $Q^{(n)}$  симметрична, и дисперсии совпадают с диагональными элементами матриц  $Q$ , то из (21) получим



$$[\sigma_j^{(n-1)}]^2 = [\sigma_j^{(n)}]^2 - \frac{[Q_{j8}^{(n)}]^2}{[\sigma_8^{(n)}]^2}, \quad (22)$$

здесь  $[\sigma_j^{(n-1)}]^2$  и  $[\sigma_j^{(n)}]^2$  — дисперсии оценки параметра  $\mu_j$  при соответственно  $(n-1)$ -м и  $n$ -м количестве неизвестных параметров. Таким образом, из (22) следует неравенство

$$\sigma_j^{(n-1)} \leq \sigma_j^{(n)}, \quad (23)$$

которое объясняет отмеченный выше эффект.

В таблице приведены результаты «усечения» определяемого в п. 2 вектора  $\mu$  путем перенесения в число известных на каждом шаге по одному параметру: последовательно  $\mu_4, \mu_2, \mu_1, \mu_5$ . Расчеты проведены для функций  $\varphi(\mu, \nu)$ , заданных формулами (13), (14) при коэффициенте перекрытия  $\eta=1$  и отношениях интенсивностей компонентов  $\mu_2 : \mu_1$  равных 1 : 1 и 5 : 1. Аппаратная функция

Влияние уменьшения числа неизвестных параметров на нижние границы погрешностей восстановления

Функция $\varphi(\mu, \nu)$	Отношение интенсивностей компонентов дублета $\mu_2 : \mu_3 = 1 : 1$					Отношение интенсивностей компонентов дублета $\mu_2 : \mu_3 = 5 : 1$				
	$\bar{\sigma}_1$	$\bar{\sigma}_2$	$\bar{\sigma}_3$	$\bar{\sigma}_4$	$\bar{\sigma}_5$	$\bar{\sigma}_1$	$\bar{\sigma}_2$	$\bar{\sigma}_3$	$\bar{\sigma}_4$	$\bar{\sigma}_5$
Допплеровский дублет (13)	1.29	2.59	2.58	2.06	1.94	1.34	4.57	22.20	3.05	8.05
	0.98	1.62	1.71	—	1.91	0.90	0.53	2.25	—	3.08
	0.48	—	0.42	—	0.54	0.89	—	1.10	—	2.16
	—	—	0.31	—	0.37	—	—	1.00	—	1.23
Дисперсионный дублет (14)	—	—	0.31	—	—	—	—	1.00	—	—
	0.72	2.00	1.95	1.19	1.15	0.76	2.25	6.94	1.00	3.70
	0.67	0.82	1.59	—	0.95	0.55	0.87	2.48	—	2.67
	0.62	—	1.59	—	0.93	0.33	—	2.43	—	2.66
	—	—	0.29	—	0.42	—	—	0.98	—	1.43
	—	—	0.29	—	—	—	—	0.98	—	—

принималась в виде (16) с величиной относительной полуширины  $\bar{\gamma}=0.2$ . Относительные погрешности  $\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_3$  и  $\bar{\sigma}_5$  определялись по (19), а  $\bar{\sigma}_2$  и  $\bar{\sigma}_4$  соответственно —  $\bar{\sigma}_2 = \bar{\sigma}_2 / \mu_2$ ,  $\bar{\sigma}_4 = \bar{\sigma}_4 / \mu_1$ .<sup>1</sup> Первоначальная матрица  $Q^{(n)}$  строилась по матрице Фишера (10). Определение дисперсий при последовательном «усечении» вектора  $\mu$  производилось рекуррентно по формуле (22). Прочерки в таблице соответствуют тем параметрам  $\mu_j$ , которые предполагаются в соответствующем ряду известными. Анализ данных таблицы демонстрирует, как уменьшается погрешность при уменьшении количества искомого параметров.

#### Литература

- [1] Статистические методы в экспериментальной физике. Под редакцией А. А. Тяпкина. Атомиздат, М., 1976.
- [2] П. И. Антипова-Карагаева, Н. Н. Казанова. Ж. прикл. спектр., 14, 1093, 1971.
- [3] В. М. Осипов, Н. Ф. Борисова, Т. А. Шереметьева. Опт. и спектр., 39, 458, 1975.
- [4] А. П. Кучеров, А. М. Ярменко. Ж. прикл. спектр., 29, 932, 1978.
- [5] П. И. Мельниченко, А. М. Ярменко. Ж. прикл. спектр., 28, 1062, 1978.
- [6] P. V. Nays, R. G. Robble. Appl. Opt., 10, 193, 1971.
- [7] Н. Г. Преображенский, А. И. Седельников. Опт. и спектр., 49, № 1, 1980.
- [8] Н. П. Клепиков, С. Н. Соколов. Анализ и планирование экспериментов методом максимума правдоподобия. «Наука», М., 1964.
- [9] В. П. Мальшев. Введение в экспериментальную спектроскопию. «Наука», М., 1979.
- [10] Л. Г. Киселева, Н. С. Терпугова. Изв. вузов, физика, № 11, 1976.
- [11] А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. Методы решения некорректных задач. «Наука», М., 1979.
- [12] Н. Г. Преображенский, А. И. Седельников. Ж. прикл. спектр., 30, 777, 1979; 30, 973, 1979; Препринт № 10, ИТПМ СО АН СССР, Новосибирск, 1978.
- [13] Д. К. Фадеев, В. Н. Фадеева. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматлит, М.—Л., 1960.
- [14] Б. Н. Пшеничный, Ю. М. Данилин. Численные методы в экспериментальных задачах. «Наука», М., 1975.

Поступило в Редакцию 9 июля 1980 г.

<sup>1</sup>  $\bar{\sigma}_j$  приведено в процентах при  $\sigma_j$  равном 1% от  $f_{\max}$ .