УДК 535.33/.34.01

К ВОПРОСУ О КОРРЕКТНОСТИ ЗАДАЧИ ДИАГНОСТИКИ ПЛАЗМЫ ПО КОНТУРАМ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

А. А. Козырев и *Н. С. Терпугова*

Исследованы качества оценок параметров нереабсорбированного контура спектральной линии, получаемых с помощью метода наименьших квадратов. Показано, что задача одновременной оценки сдвига и полуширины может быть решена вполне корректно.

1. Поскольку параметры контура спектральной линии связаны хорошо известными соотношениями с такими характеристиками плазмы, как температура и концентрация ее компонент [1], то естественно стремление производить диагностику плазмы по экспериментально измеренным контурам спектральных линий. Однако эта задача относится к классу так называемых некорректно поставленных задач [2], и поэтому в каждом конкретном случае требует тщательного подхода к выбору способа решения, а также к интерпретации полученных оценок. В литературе встречаются попытки получить оценки параметров контура спектральной линии одним из наиболее распространенных статистических способов: методом наименьших квадратов [3, 4], но нигде не обсуждаются такие важные вопросы, как однозначность полученных оценок и устойчивость их относительно случайных ошибок измерений. В данной работе авторы задавались целью рассмотреть, насколько корректно может быть поставлена задача оценки параметров контура спектральной линии по методу наименьших квадратов.

2. Оценки параметров по методу наименьших квадратов ищутся из условия минимума функции качества

$$F = \sum_{i=1}^{n} [I'_i - I(\nu_i \mid \theta)]^2 \to \min_{\theta}, \qquad (1)$$

где $I(\nu_i \mid \theta)$ — выражение, описывающее распределения интенсивности по контуру спектральной линии, $\theta = \{\theta_1, \theta_2, \ldots \theta_n\}$ — вектор параметров контура, I_i — интенсивность, измерения в различных точках контура.

Рассмотрим сначала вопрос об устойчивости оценок параметров контура относительно случайных ошибок измерений. Элементы матрицы вариаций для метода наименьших квадратов имеют следующий вид:

$$V_{ij} = \sigma^2 J_{ij}^{-1}, \qquad (2)$$

где σ^2 — дисперсия случайных ошибок измерений, J_{ij}^{-1} — элементы матрицы, обратной к информационной матрице Фишера. Как известно, диагональные элементы матрицы вариаций характеризуют дисперсию оценок, а недиагональные — коэффициент корреляции между параметрами.

В случае некоррелированного гауссовского шума элементы информационной матрицы Фишера (ИМФ) вычисляются по формулам

$$J_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial I(\nu_k \mid \theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial I(\nu_k \mid \theta)}{\partial \theta_j}, \tag{3}$$

или асимптотически при $n \to \infty$

$$J_{ij} = n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial I(\nu \mid \theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial I(\nu \mid \theta)}{\partial \theta_j} d\nu. \tag{4}$$

Из (2) и (3) видно, что дисперсия ошибок измерений входит в выражения для дисперсии оценок параметров только как линейный множитель. Следовательно, оценки параметров в этом случае устойчивы по отношению к случайным погрешностям измерений и при увеличении объема выборки n будут сходиться к истинным значениям параметров в среднеквадратичном.

Проведем анализ матрицы вариаций для случая переабсорбированного контура с дисперсионным и допплеровским механизмами уширения. В первом случае контур описывается выражением

$$I(\nu \mid \alpha, \beta) = \frac{I_0}{1 + (\alpha\nu - \beta)^2}, \tag{5}$$

где $\alpha = 1/\delta$, $\beta = \Delta/\delta$, δ, Δ — полуширина и сдвиг спектральной линии, I_0 — полная интенсивность. В случае эффекта Допплера профиль имеет гауссовскую форму

$$I(\nu \mid \alpha, \beta) = I_0 e^{-(\alpha\nu - \beta)^2}. \tag{6}$$

Минимизация обычно проводится по параметрам α и β, а I_0 совпадает с множителем, согласующим единицы измерения. Поэтому его мы здесь рассматривать не будем.

Приведем матрицы, обратные информационным матрицам Фишера, для обоих механизмов уширения при отсутствии аппаратурных искажений

$$J^{-1}_{(D)\,ij} = \frac{4}{n\pi} \begin{pmatrix} \alpha^3 & \beta\alpha^2 \\ \beta\alpha^2 & [1+\beta^2]\,\alpha \end{pmatrix}, \tag{7}$$

$$J^{-1}_{(\Gamma)\,ij} = \frac{4\sqrt{2}}{n3\sqrt{\pi}} \begin{pmatrix} \alpha^3 & \beta\alpha^2 \\ \beta\alpha^2 & [3+4\beta^2]\,\alpha \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Из выражений (7), (8) видно, что дисперсия параметра изменяется как куб самой величины, а дисперсия параметра является функцией обоих параметров. Коэффициент корреляции определяется в основном параметром α и в обоих случаях он одинаков. Учитывая зависимость параметров α и β от полуширины и сдвига, можно сделать следующие выводы:

а) дисперсия полуширины убывает с увеличением δ и особенно быстро падает, когда полуширина становится больше единицы;

б) так как для большинства линий сдвиг либо полностью отсутствует, либо он мал по сравнению с полушириной, то дисперсия параметра β обратно пропорциональна полуширине;

в) корреляция между полушириной и сдвигом будет заметна только для малых полуширин при ненулевом сдвиге.

Влияние аппаратурных искажений на дисперсию оценок рассмотрено в работе [5]. Здесь мы только отметим, что дисперсии оценок оказались монотонными функциями от отношения полуширин аппаратной функции γ и контура δ. Так, например, при допплеровской форме контура и гаус-

[illegible] аппаратной функции дисперсии оценок пропорциональны следующим выражениям:

$$\left.\begin{aligned}\Delta_\beta &= (1+\xi^2)^{3/2},\\ \Delta_\alpha &= (1+\xi^2)^{5/2},\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

где $\xi = \alpha\tau = \gamma/\delta$.

3. Вопрос об однозначности оценок параметров можно исследовать, анализируя следующую функцию:

$$g(\theta,\ \theta_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \ln P(X \mid \theta)\, P(X \mid \theta_0)\, dX. \tag{10}$$

Здесь θ — вектор текущих значений параметров, θ_0 — вектор истинных значений параметров, а $P(X \mid \theta)$ — функция правдоподобия; $g(\theta,\ \theta_0)$ является математическим ожиданием логарифма функции правдоподобия и известна в математической статистике под названием обобщенной функции неопределенности [6, 7]. Поскольку метод наименьших квадратов является частным случаем метода максимального правдоподобия при некоррелированных гауссовских ошибках измерений, то, подставляя в (10) гауссовскую функцию правдоподобия и учитывая, что X_i — в нашем случае это измеренные интенсивности I'_i, получим

$$g(\theta,\ \theta_0) = -\sum_{i=1}^{n} [I(\nu_i \mid \theta) - I(\nu_i \mid \theta_0)]^2, \tag{11}$$

или при $n \to \infty$

$$g(\theta,\ \theta_0) = -\int_{-\infty}^{+\infty} [I(\nu \mid \theta) - I(\nu \mid \theta_0)]^2\, d\nu. \tag{12}$$

Принципиально вопрос об однозначности оценок параметров решается на основе следующей теоремы [7]: «Если для любых $\theta = \theta_0$, $g(\theta,\ \theta) < g(\theta_0,\ \theta_0)$, то оценка $\hat\theta$, полученная по методу максимального правдоподобия, при $n \to \infty$ сходится почти наверное к истинному значению параметра θ».

Возможны три случая: функция качества имеет единственный экстремум, тогда задача (1) может быть решена любым из способов локального поиска; функция качества имеет несколько локальных экстремумов и единственный глобальный, тогда решить задачу (1) можно лишь с применением специальных алгоритмов глобального поиска; функция качества имеет несколько глобальных экстремумов, тогда задача является плохо обусловленной и однозначного решения получить нельзя. Для выяснения вопроса о числе и виде экстремумов, а следовательно, для выбора подходящего алгоритма поиска, необходимо в каждом конкретном случае исследовать функцию неопределенности, подставив в (12) соответствующее выражение для формы контура.

4. Рассмотрим функции неопределенности для дисперсионной (5) и для доплеровской (6) форм контура. В этих случаях выражение (12) принимает вид

$$g_D(\alpha,\ \beta,\ \alpha_0,\ \beta_0) = -\frac{\pi}{2}\left[\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha_0} - \frac{4(\alpha+\alpha_0)}{(\beta_0\alpha - \alpha_0\beta)^2 + (\alpha+\alpha_0)^2}\right], \tag{13}$$

$$g_\Gamma(\alpha,\ \beta,\ \alpha_0,\ \beta_0) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left[\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha_0} - \frac{2\sqrt{2}\exp-\left[\frac{(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)^2}{\alpha_0^2+\alpha^2}\right]}{\sqrt{\alpha_0^2+\alpha^2}}\right]. \tag{14}$$

Необходимые условия экстремума для функций (13) и (14) имеют следующий вид:

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial g_D}{\partial\beta} &= \frac{-8(\alpha+\alpha_0)\,\alpha_0\,(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)}{[(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)^2+(\alpha+\alpha_0)^2]^2} = 0,\\ \frac{\partial g_D}{\partial\alpha} &= \frac{1}{\alpha^2} + 4\,\frac{(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)^2+(\alpha+\alpha_0)^2-2(\alpha+\alpha_0)\,[(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)\,\beta_0+(\alpha+\alpha_0)]}{[(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)^2+(\alpha+\alpha_0)^2]^2} = 0;\end{aligned}\right\} \tag{15}$$

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{\partial g_{\Gamma}}{\partial \beta} = \frac{4\sqrt{\pi}\,\alpha_0(\beta_0\alpha - \alpha_0\beta)\exp\left\{-\left[\frac{(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)^2}{\alpha_0^2+\alpha^2}\right]\right\}}{(\alpha_0^2+\alpha^2)^{3/2}} = 0,\\
&\frac{\partial g_{\Gamma}}{\partial \alpha} = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\left[\frac{1}{\alpha^2} + 2\sqrt{2}\exp\left\{-\left[\frac{(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)^2}{\alpha_0^2+\alpha^2}\right]\right\}\times\right.\\
&\times\left\{\frac{[\alpha(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)-\beta_0(\alpha_0^2+\alpha^2)]\,2(\beta_0\alpha-\alpha_0\beta)}{(\alpha_0^2+\alpha^2)^{5/2}} - \frac{\alpha}{(\alpha_0^2+\alpha^2)^{3/2}}\right\}\Bigg] = 0.
\end{aligned}\right\} \quad (16)$$

Решение каждой системы (15) и (16) дает единственную точку с координатами $\beta=\beta_0$ и $\alpha=\alpha_0$. Тем самым гарантируется однозначность оценок параметров в данном случае. Процесс поиска оценок параметров методом наименьших квадратов для случая дисперсионной и доплеровской форм контура был промоделирован на ЭВМ. Область определения параметров была выбрана следующей: $0.02 \leqslant \alpha$, $\alpha_0 \leqslant 50$; $-1 \leqslant \beta$, $\beta_0 \leqslant 1$ при количестве экспериментальных точек $n=20$. Варьировались величины α_0, β_0 и величина обрезания крыльев контура. Результаты моделирования сводятся к следующему.

а. Величина невязки при минимизации зависит от того, принадлежит ли α промежутку [0, 02, 1] или промежутку [1,50]. В первом случае максимальная невязка не превышала 1% для гауссовского профиля и 3% — для дисперсионного. Во втором случае величина невязки для гауссовского профиля составила 22%.

б. В обоих случаях сходимость к минимуму была более быстрой для гауссовского профиля.

в. Предварительный анализ показал, что методы случайного поиска экстремума более эффективны для решения данной задачи по сравнению с градиентными методами. Этого следовало ожидать, поскольку функция качества не является линейной функцией параметров α и β.

Таким образом, из всего сказанного можно сделать выводы: при оценке параметров контура спектральной линии методом наименьших квадратов можно получить однозначное решение задачи; для выяснения вопроса о числе решений и выбора эффективного алгоритма поиска необходимо в каждом конкретном случае исследовать соответствующую функцию неопределенности; полученное решение будет всегда устойчивым относительно случайных ошибок измерений.

В заключение авторы выражают благодарность З. И. Червовой за помощь в проведении расчетов на ЭВМ.

Литература

[1] Г. Грим. Спектроскопия плазмы. «Мир», М., 1971.
[2] А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. Методы решения некорректных задач. «Наука», М., 1974.
[3] E. von Meerwall. Comput. Phys. Comm., *8*, 117, 1975.
[4] Н. С. Терпугова. Изв. СО АН СССР, сер. хим., № 3, 1968.
[5] Л. Г. Киселева, Н. С. Терпугова. Изв. вузов, физика, № 11, 1976.
[6] С. Р. Рао. Линейные статистические методы и их применения. «Наука», М., 1968.
[7] А. Ф. Терпугов. Математическая статистика. Изд. ТГУ, Томск, 1974.

Поступило в Редакцию 24 ноября 1976 г.
В окончательной редакции 17 октября 1977 г.