

ТАРТУСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Тартуский государственный университет

Х. Ф. ТАММЕТ

Х. Ф. Таммет

ВВВ ВВВ ЕЕЕ ДД ЕЕЕ НН И И ЕЕЕ ВВВ
 В В В В Е Д Д Е НН И И Е В В
 ВВВ ВВВ ЕЕЕ ДД ЕЕЕ НН И И ЕЕЕ ВВВ
 В В В В Е Д Д Е НН И И Е В В
 ВВВ ВВВ ЕЕ ДДДД ЕЕЕ НН И И ЕЕЕ ВВВ

ЛЛИ ИИИ ЕЕЕ ИИИ ННУУЮ Ю
 ЛЛИ ИИИ Е ИИИ ННУУЮ ЮЮ
 ЛЛИ ИИИ ИИИ ЕЕЕ ИИИ НН УУ ЮЮЮ Ю
 ЛЛИ ИИИ ИИИ Е ИИИ НН У ЮЮЮ
 ЛЛИ ИИИ ИИИ ЕЕЕ ИИИ НН У Ю Ю

К К ОО НН ЕЕЕ ЧЧ НН ОО М М ЕЕЕ РРР ННУУЮ Ю
 К К О О НН Е ЧЧ НН О О М М М Е Р Р Р ННУУЮ ЮЮ
 К К О О НН ЕЕЕ ЧЧ НН О О М М М ЕЕЕ РРР НН УУ ЮЮЮ Ю
 К К О О НН Е ЧЧ НН О О М М Е Р Р Р НН УУ ЮЮЮ
 К К ОО НН ЕЕЕ ЧЧ НН ОО М М ЕЕЕ Р Р Р НН У Ю Ю

ТТТ ЕЕЕ ОО РРР И И Ю Ю
 Т Е О О Р Р Р И И Ю Ю Ю
 Т ЕЕЕ О О Р Р Р И И И ЮЮЮ Ю
 Т Е О О Р Р И И И ЮЮЮ
 Т ЕЕЕ ОО Р И И И Ю Ю

СС ПП ЕЕЕ К ТТТ РРР ОО М М ЕЕЕ ТТТ РРР И И И И
 С П П Е К К Т Р Р Р О О М М М Е Т Р Р Р И И И И
 С П П ЕЕЕ КК Т Р Р Р О О М М М ЕЕЕ Т Р Р Р И И И И И
 С П П Е К К Т Р О О М М Е Т Р Р И И И И И
 СС П П ЕЕЕ К К Т Р О О М М ЕЕЕ Т Р Р И И И И

ВВЕДЕНИЕ В ЛИНЕЙНУЮ
 КОНЕЧНОМЕРНУЮ ТЕОРИЮ
 СПЕКТРОМЕТРИИ

"Валгус"
 Таллин 1975

В В Е Д Е Н И Е

Вряд ли кто-нибудь недооценивает роль спектроскопии в современных физических исследованиях. К спектрометрии, как метрологической дисциплине, а особенно к математическим методам спектрометрии, физики относятся сдержаннее. Спектроскопист, который говорит - хороший спектрометр выдает мне непосредственно то, что надо, а если нет, следует приобрести другой - не такая уж и редкость. В конкретной ситуации он иногда и прав, но ограниченность его подхода очевидна. Реальные возможности спектроскопических исследований прямо зависят от успехов теории спектрометрии и способов реализации теоретических схем. Примером может служить история фурье-спектрометрии. Хотя физическая идея и аппаратура были разработаны уже Физо и Майкельсоном, практическая реализация основных возможностей интерференционной спектрометрии задерживалась до изобретения ЭВМ. С развитием вычислительной техники, очевидно, синхронизировано и теоретическое доказательство преимущества фурье-спектрометрии (Fellgett, 1952, 1958). Следующий большой успех в физических исследованиях, использующих метод фурье-спектрометрии, определил появление нового вычислительного алгоритма (Cooley, Tukey, 1965).

Мы не будем останавливаться на изложении интересной истории теории спектрометрии, берущей свое начало с исследований лорда Рейли. Превосходный исторический обзор можно найти у Раутиана (1958).

В математической теории спектрометрии можно выделить несколько задач, назовем здесь основные:

- 1) построение математической модели спектрометра,
- 2) вычисление реакции аппаратуры на известный спектр,
- 3) вычисление оценки спектра по известной реакции аппаратуры,

Т 20402 - Т Р - 22 - 75
М 902 (I6) - 75

© Тартуский государственный университет, 1975

- 4) описание качества измерения и аппаратуры,
- 5) оптимизация аппаратуры и режима измерения.

Настоящее исследование ставит себе цель изучить общие аспекты третьей задачи, которая иногда называется обратной задачей теории спектрометра. При этом не удастся обойти обсуждение проблем, относящихся к первой задаче, хотя здесь многое будет воспринято читателем как тривиальность.

Вторая задача, которая иногда называется прямой задачей теории спектрометра - специфическая для разных видов спектрометрии. Мы не собираемся изучать эту задачу и предполагаем везде, что ее решение заранее известно.

Четвертая и пятая задачи теории спектрометрии заслуживают самостоятельного исследования и останутся в основном вне сферы нашего внимания.

Избранная нами проблематика охватывает, в первую очередь, ту деятельность спектрометриста, которая называется обработкой наблюдений. Перед тем, как приступить к обработке, полезно выяснить, почему нас не удовлетворяют сырые наблюдения. Известно, что любая обработка может лишь уменьшить, а в лучшем случае сохранить объективную информацию о спектре, содержащуюся в сырых данных. Самый короткий ответ на поставленный вопрос дает девиз известной книги Хемминга (1962) - цель вычислений не числа, а понимание. Очевидно, понимание не является однозначной функцией количества объективной информации.

Выдвинув девиз Хемминга, нельзя забывать, что из любого вычисления непосредственно можно получить лишь числа, и никогда - понимание. Понимание - результат эвристических рассуждений человека, а вычисление способно подготовить лишь полуфабрикат, являющийся сырым материалом для эвристики. Непосредственная цель обработки наблюдений - повышение степени воспринимаемости объективной информации для человека, использующего эту информацию на невычислительном уровне.

Последнее утверждение требует уточнения. Иногда наблюдения обрабатываются поэтапно, и вычисление оценки спектра является лишь первым этапом некоторой цепи. Тогда непосредственная вос-

принимаемость оценки спектра, представлявшей промежуточную информацию в вычислительной цепи, потеряет значение. Нам кажется, что в таких случаях лучше изучить весь многоэтапный процесс вычислений, как целое, хотя мы и отдаем себе отчет, что такая задача нередко слишком трудная для практического решения.

В настоящей работе предполагается, что оценка спектра является конечной целью измерительно-вычислительного этапа познания.

Согласно нашим представлениям, говорить о преимуществах того или иного способа обработки наблюдений или об оптимизации метода обработки наблюдений без учета того, каким образом выход расчетов воспринимается человеком, невозможно. "Человеческий фактор" учитывается на самом деле во всех исследованиях по обработке наблюдений, разница лишь в том, насколько сознательно, полно и обоснованно это делается. Иногда в конкретных исследованиях по методам обработки наблюдений внимание концентрируется на какой-то, возможно существенной, математической подробности. Здесь легко упустить из вида, что небольшие изменения в постановке математической задачи, которая образует одно звено общей физической задачи, могут все выводы из формальных выкладок поставить с ног на голову. Не секрет, что исследователи, занимающиеся теми проблемами обработки наблюдений, которые связываются с некорректно поставленными обратными задачами, плохо понимают друг друга, и что причины непонимания кроются вне сферы формальной математики. Плохое знание и недооценка "человеческого фактора", доходящая до претензий на иллюзорную "полную объективность", имеют здесь, очевидно, не второстепенную роль.

Мы не ставим себе задачей строгий количественный учет закономерностей восприятия информации человеком, просматривающим таблицы или графики оценок спектра. Для решения этой задачи потребовалось бы проведение обширной программы психологических исследований. Мы удовлетворимся тем, что постараемся не утаить неопределенности конкретных содержательных выводов, вытекающей из неопределенности "человеческого фактора", а также стремимся везде к простоте содержательной интерпретации математических методов обработки наблюдений. Если сущность метода обработки наблюдений не будет

понятной для практика-спектроскописта, то он не может разумно дополнить математические результаты неформальными соображениями, основанными на интуитивном знании "человеческого фактора", и вряд ли сумеет правильно интерпретировать физические результаты.

Заглавие настоящего исследования может создать впечатление, что автор намерен подготовить читателя к изучению развернутой теории спектрометрии, будто бы излагаемой в подробных специальных монографиях. К сожалению, такой теории пока нет и одна наша цель - убедить читателя в необходимости и неизбежности разработки систематической общей теории спектрометрии в будущем. Слово "введение" в заглавии должно обеспечить нам право поставить основной акцент на систематизацию и построение понятий, а также простить нам упрощения всюду, где строгое обсуждение практически важных проблем не согласуется с нашими силами и возможностями.

Процесс формирования теории спектрометрии можно проследить по источникам, разбросанным по журнальной литературе. Хотя большинство авторов используют язык конкретных узких приложений, в центре внимания современных исследований стоят, как правило, весьма общие проблемы. Многие из таких проблем по существу общи даже для целого семейства смежных дисциплин, куда можно рядом с теорией спектрометрии причислить теории обработки оптических изображений, интерпретации геофизических наблюдений, декодирования сигналов, восстановления профиля температуры, коррекции динамических измерений. Многие работы как по спектрометрии, так и по смежным дисциплинам упомянуты в приложенном списке литературы. Ввиду ограниченности тематики настоящего исследования этот список не претендует на полноту и в области спектрометрии. Например, относительно хорошо освещенная в литературе теория разрезающей силы не будет нами затронута. Для компенсации этого конкретного пробела укажем здесь некоторые публикации по отмеченной проблеме (Халфин, 1960, 1962, Козлов, 1964, Harris, 1964, Helstrom, 1970, Таммет, 1973).

Главным орудием теории спектрометрии является математическая статистика. Нельзя умалчивать об отставании математических методов, используемых в спектрометрии, от развития абстрактной мате-

матической теории, обзор которой можно найти, например, в монографии (Липцер, Ширяев, 1974). Перспектива внедрения современных статистических методов является многообещающим для будущего развития спектрометрии.

До приложения формальной математической аппаратуры предстоит немало подготовительной работы, где определяющими являются неформальные физические соображения. Одной из наиболее трудных и спорных задач, стоящих перед нами, будет конструирование математической модели для описания физического спектра. Хорошо известно, что любая модель упрощает действительность. Однако для нас не менее существенно избыточность математических моделей. Стандартные математические модели содержат экспериментально непроверяемые элементы, служащие лишь для математической простоты и удобства. Простейший пример - описание множества возможных значений физической величины множеством вещественных чисел, тогда как значения физической величины могут быть сколь угодно точно описаны рациональными числами, которые образуют в множестве вещественных чисел подмножество нулевой меры. Иногда избыточность модели остается на практике незаметной, иногда приводит к парадоксальной ситуации. Неблагоприятный случай встречается и в спектрометрии, где по традиции спектр изображается функцией, имеющей бесконечное число степеней свободы. Бесконечномерное описание содержит бесконечное количество информации, что не может быть доставлено посредством конечных наблюдений. Можно сказать, что задача исчерпывающего измерения бесконечномерной величины поставлена информационно некорректно или физически некорректно. Некорректность обратных задач математической физики в смысле Адамара есть, с нашей точки зрения математическое отображение информационной некорректности соответствующих задач измерения.

Описание объекта при помощи избыточной модели возможно лишь при "заполнении" модели предварительной информацией, не исходящей из наблюдений. Если угадывать неизбежность включения неэкспериментальной информации, то остается два пути - или оказаться в безвыходном положении, или допустить противоречие между словесными утверждениями и фактическими поступками. Объективное описание

бесконечномерного объекта всегда будет лишь иллюзией.

Мы постараемся избежать фетиширования конкретных математических моделей, полагая их в качестве рабочих орудий и позволяя себе пользоваться различными орудиями по мере целесообразности. Как указано в заглавии работы, нашим основным орудием будут конечномерные модели, что вовсе не исключает коротких и поверхностных экскурсов в бесконечномерную теорию.

Переход от традиционной бесконечномерной теории к конечномерной, обладающей в определенном смысле меньшей избыточностью, представляется нам всеобщей тенденцией современных приложений математических методов. Во времена отсутствия мощной вычислительной техники возможности практического использования непосредственных результатов конечномерной теории были скромны. Еще ЭВМ первого поколения едва справлялись с простейшими задачами конечномерной спектроскопии (см., например, Петраш, 1964). Разработка конечномерной теории не имела тогда практического стимула. Бесконечномерная теория легче давала результаты, объясняющие в качественном плане общие закономерности. Бесконечномерная теория хорошо известными способами допускает переход и к конечномерным вычислительным моделям. Появление новых технических средств для численной обработки наблюдений и для конечномерного математического эксперимента привело к пересмотру старых позиций. Параллельное применение двух моделей - теоретической бесконечномерной и вычислительной конечномерной - часто оказывается нерациональным.

Заглавие настоящей работы отражает еще намерение ограничиться рассмотрением линейных методов спектроскопии. Если наш выбор между бесконечномерными и конечномерными моделями исходит из принципиальных соображений, то здесь причина другая. Линейные модели выделяются простотой и отказ от серьезного рассмотрения нелинейных моделей, которые будут лишь эпизодически упоминаться, обусловлен попросту тем, что мы не располагаем сколько-нибудь значимыми общими результатами в этой области.

Настоящая работа написана физиком-экспериментатором и адресована физико-экспериментатору. От читателя не требуется специальной математической подготовки, в основном достаточно математиче-

ских знаний на уровне известного справочника (Г.Корн, Т.Корн, 1961). В большей степени мы будем полагаться на опыт и интуицию читателя как физика-экспериментатора. Предполагается, что читатель, который предварительно не знаком с затрагиваемой проблематикой, будет параллельно изучать и указываемую в тексте литературу.

В работе неизбежно отражаются конкретные интересы автора, относящиеся к спектроскопии подвижностей аэроионов (Таммет, 1967). Однако знакомство с упомянутым узким разделом спектроскопии не обязательно. Мы собираемся изучить лишь самые общие аспекты спектроскопии, не зависящие от конкретной физической проблематики. Во многих рассуждениях даже термин "спектроскопия" представляется условным и его можно было бы заменить на более общий термин "измерение распределений". Спектроскопия подвижностей аэроионов, хотя в дальнейшем она почти нигде не упоминается, представляется нам удачным пробным камнем общей теории, поскольку предполагаемые интересные приложения этой спектроскопии на грани реализуемости и практические успехи определяются продвижением общих методов спектроскопии.

I. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СПЕКТРОМЕТРА

1. Спектр.

Пусть некоторый объект описывается при помощи двух физических величин, одна из которых распределена по второй. Назовем распределенную величину агентом, а величину, по которой агент распределен - аргументом распределения. Агентом и аргументом распределения могут служить, например, интенсивность и частота электромагнитного излучения, масса тела и пространственные координаты, плотность электрического заряда воздуха и подвижность его носителей, и т.д. В настоящем исследовании конкретная реализация распределения значения не имеет и не определяется.

Мы будем пользоваться термином "спектр" как синонимом термина "физическое распределение". Этот терминологический маневр дает нам право пользоваться наглядной спектрометрической терминологией и одновременно обеспечивает естественное распространение приложений на измерения пространственных и временных распределений, обычно не называемых спектрами. Оправданием для нас будет служить, с одной стороны, расплывчатость употребления термина "спектр" в физике и, с другой стороны, направленность наших прикладных интересов к проблемам спектрометрии в обычном смысле.

В настоящей работе рассматриваются спектры одного аргумента. В физике нередко изучаются и многомерные распределения, например, распределение частиц по размеру и заряду. Математический аппарат одномерной спектрометрии позволяет здесь непосредственно описывать лишь маргинальные спектры по одному выбранному аргументу. Однако многие рассуждения оказываются, в сущности, общими, или тривиально просто обобщаются на задачи многомерной спектрометрии, хотя это нигде не будет конкретно упоминаться.

Физический спектр существует как состояние природы и не может быть идентичным какому-нибудь абстрактному объекту математической теории. Нельзя говорить, например, о производной физического спектра - это означало бы отождествление множества физических

спектров с некоторой из возможных его математических моделей.

Математическая модель множества физических спектров - это множество абстрактных объектов, называемых математическими спектрами и находящихся в некоторых неформальных соотношениях с природой. Эти соотношения реализуются через опыт и имеют "диффузный" характер, обусловленный ошибками измерения. Для одного и того же физического явления можно построить разные модели. Модель сама по себе не может быть верной или неверной, она может быть лишь более или менее подходящей для описания рассматриваемого физического явления. В математических исследованиях изучается внутренняя структура какой-нибудь конкретной модели, которая сама вводится как предположение и не подлежит обсуждению. В задачи физики входит также построение математических моделей и сравнение конкурирующих моделей между собой.

Математическая модель спектра может быть построена или независимо, или в составе более общей модели некоторого физического явления, которая называется тогда внешней моделью по отношению к модели спектра. В последнем случае структура математической модели спектра, как правило, определена структурой внешней модели и не может быть обсуждена самостоятельно.

Независимость математической модели спектра может быть лишь относительной, она всегда зависит от разных факторов, в частности и от принципа измерения спектра. Спектр непосредственно не воспринимается. Экспериментальные сведения о спектре получаются посредством устройств, называемых спектральными приборами или аппаратами. Аппарат реагирует на спектр выходным сигналом, который зависит кроме спектра еще от устройства аппарата и его состояния. Информация о спектре содержится в зависимости сигнала от регулируемых параметров аппарата. Это схема естественным способом может найти отражение и в структуре модели спектра.

2. Спектральные шкалы.

Физической спектральной шкалой является множество значений спектрального аргумента. Это множество отображается на какое-нибудь числовое множество, и, в зависимости от структуры последне-

го, мы будем различать типы спектральных шкал. Наиболее интересными представляются конечномерные шкалы и два типа бесконечномерных шкал — плотная шкала из всех рациональных чисел и непрерывная шкала из всех вещественных чисел. Если конечномерная шкала содержит достаточное количество точек, то любая из перечисленных шкал может быть одинаково хорошо согласована с наблюдениями. Бесконечномерные шкалы, особенно непрерывная шкала, явно избыточны. Непрерывная шкала находит применение из-за математического удобства при решении определенных задач. Обычно бесконечномерная спектральная шкала происходит из внешней модели изучаемого физического явления, где спектральный аргумент измеряется вещественным числом.

Число точек спектрального аргумента в конечномерной шкале ниже будет везде обозначено через n и точки пронумерованы целыми числами $0, 1, \dots, n-1$. Конечномерная шкала может быть построена или самостоятельно, или как вторичная шкала, вложенная в бесконечномерную шкалу, заданную внешней моделью. В последнем случае договоримся упорядочивать точки шкалы по возрастанию аргумента бесконечномерной шкалы. Точки конечномерной шкалы на бесконечномерной шкале называются отсчетными точками.

Ширина непрерывной шкалы в общих рассуждениях обычно не ограничивается, но в конкретных задачах спектр изучается в пределах некоторого конечного интервала, который называется рабочим интервалом.

Непрерывную спектральную шкалу $\{x\}$ всегда можно формально заменить на другую непрерывную шкалу $\{x'\}$, которая связана с первой произвольным взаимно-однозначным преобразованием $x' = f(x)$. На практике часто используется, например, логарифмическое преобразование. Можно было бы требовать инвариантность теории спектрометрии к разным классам преобразований спектральной шкалы. Чем шире класс рассматриваемых преобразований, тем более абстрактной и менее наглядной станет теория. Мы смотрим на теорию спектрометрии как на прикладную науку в узком смысле слова и на настоящей стадии развития этой теории автору представляется целесообразным требовать независимость основных величин и алгоритмов лишь от линейных преобразований спектральной шкалы. Поэтому на практике

нам будет необходим содержательный принцип выбора спектральной шкалы из возможных его нелинейных образов.

Иногда приоритетная внешняя модель предписывает свою спектральную шкалу, которая на уровне спектрометрии уже не подлежит обсуждению. Однако нередко внешние предписания не жестки и спектрометрическим соображениям отводится существенная или даже определяющая роль. Тогда можно принять за основу выбора спектральной шкалы принцип однородной заинтересованности, согласно которому равнодлинные участки спектральной шкалы должны представить для исследователя равный интерес. Шкалу, удовлетворяющую принципу однородной заинтересованности, будем называть натуральной спектральной шкалой. Рассмотрим пример. Пусть требуется изобразить спектр электромагнитного излучения для волны длиной 1–1000 нм. В какой-то задаче равномерная шкала длины волны может оказаться чрезмерно сжатой в нижнем конце диапазона, а равномерная шкала частот (в другой задаче, может быть, логарифмическая шкала частот) может представляться однородно растянутой. Это и есть тогда натуральная шкала. Натуральная шкала определяется с точностью до произвольного линейного преобразования. Она рассматривается как заданная извне математической теории и не зависящая от результатов эксперимента привилегированная шкала. Определение спектральной шкалы независимо от экспериментальной информации отличает принцип однородной заинтересованности от принципа однородной разрешающей силы, родственной к известному принципу однородной точности (Jeffreys, 1961).

В случае использования конечномерной спектральной шкалы отсутствует свобода непосредственных преобразований, характерная для непрерывной шкалы. Переход от одной конечномерной шкалы к другой осуществляется, как правило, через промежуточную непрерывную шкалу, на которой конечномерные шкалы рассматриваются как множества отсчетных точек. Таким образом проблема выбора конечномерной шкалы может быть связана с проблемой выбора непрерывной спектральной шкалы.

Принцип однородной заинтересованности и понятие натуральной шкалы распространяются и на конечномерные спектральные шкалы. Здесь требуется, чтобы все точки шкалы представляли для исследова-

теля одинаковый интерес.

3. Математические модели спектра.

Конкретный физический спектр описывается в математической теории некоторым упорядоченным множеством чисел, которое может быть или конечным, или бесконечным. Соответственно мы будем различать конечномерные и бесконечномерные модели спектра.

Предполагаем, что определена осуществляемая или воображаемая физическая операция суперпозиции спектров. Если результат попарного сложения чисел, описывающих два спектра, описывает их физическую суперпозицию, то говорим, что спектры описаны аддитивно. Тогда математическая модель множества физических спектров может быть построена, как линейное векторное пространство или как подпространство линейного векторного пространства. Поскольку мы собираемся ограничиваться изучением линейных методов спектрометрии, то ниже будут подробнее рассмотрены лишь линейные векторные модели спектра.

Начинаем с рассмотрения бесконечномерных конструкций, которые характерны для моделей физических явлений, рассматриваемых в спектрометрии как внешние модели. Измерение бесконечномерно описанного спектра возможно лишь тогда, когда сама внешняя модель почти полностью определяет бесконечномерный спектр, оставляя для измерения лишь конечное число степеней свободы. Таким образом в какой-то стадии бесконечномерная модель всегда сводится к конечномерной. Бесконечномерная модель может быть рассмотрена как некоторая абстрактная вспомогательная конструкция, используемая при построении и сравнении между собой конечномерных моделей спектра.

Наиболее популярной моделью спектра служат функции непрерывного спектрального аргумента. Однако физический спектр не интерпретируется как отображение или как зависимость и поэтому функцию нельзя непосредственно сопоставить с физическим спектром. Косвенное сопоставление может быть осуществлено следующим образом. Предполагаем, что выходной сигнал спектрального аппарата линейно зависит от спектра в смысле физических суперпозиций. Тогда зависимость чувствительности аппарата к спектральному агенту от спек-

трального аргумента описывается аппаратной функцией $g_{\xi}(x)$, которая зависит от состояния аппарата ξ . При зафиксированном спектре любой скалярный результат наблюдения f_{ξ} описывается линейным функционалом от аппаратной функции $f_{\xi} = F(g_{\xi})$. Этот функционал содержит всю экспериментальную информацию о спектре и поэтому воспринимается как непосредственный математический образ физического спектра. Простейшей математической моделью спектров оказываются математические распределения в определении Шварца (см., например, Шварц, 1961). Поскольку наблюдения неизбежно содержат ошибки, то всегда существует регулярное распределение, достаточно точно согласующееся с наблюдениями. Это регулярное распределение однозначно представляется функцией $\varphi(x)$, которая называется плотностью спектра или спектральной функцией. Функционал, связывающий наблюдения со спектром, записывается теперь в виде $f_{\xi} = \int g_{\xi}(x)\varphi(x)dx$.

Использование в спектрометрии математического аппарата общей теории распределений усложняет теорию и увеличивает степень избыточности модели спектра. Положительные результаты - естественная интерпретация и возможность единого описания сплошных и линейчатых спектров - не менее вески. Мы принимаем здесь компромисс, привычный для физиков-экспериментаторов. Ниже везде, где можно, будут использованы язык и аппарат классического анализа, которые будут лишь в случае необходимости расширены введением δ -функции. Соответствующие нестрогие формулировки и рассуждения могут быть всегда уточнены и переведены на строгий математический язык, что проще всего осуществляется в рамках упрощенной теории распределений (Михусинский, Сикорский, 1957).

Конечномерную модель спектра можно строить как на бесконечномерной, так и на конечномерной спектральной шкале.

Рассмотрим бесконечномерную шкалу $\{x\}$ и выберем конечный набор линейно независимых функций $\zeta_i(x)$ на этой шкале. Определим теперь конечномерную модель спектра как порожденное этим набором линейное многообразие функций

$$\varphi(x) = \sum_1^N \varphi_i \zeta_i(x). \quad (3.1)$$

Описанное многообразие рассматривается как линейное векторное пространство и набор функций $\zeta_i(x)$, называемых теперь координат-

ными функциями, как базис в нем. Каждому конкретному спектру сопоставляется конечномерный вектор φ , представляемый набором чисел $\{\varphi_i\}$.

Разные базисы могут порождать одно и то же пространство спектров. В векторном пространстве со скалярным произведением всегда возможно, хоть в принципе, найти ортогональный базис, например, по алгоритму Грама-Шмидта.

Наборы координатных функций, используемых на практике спектрометрии, весьма различные и их не удается строго систематизировать. Перечислим здесь наиболее типичные:

- подмножества общеизвестных систем ортогональных функций, например, тригонометрические функции, функции Уолша, ортогональные полиномы и т.д.,

- собственные функции преобразований, описывающих физические явления или спектрометрическую аппаратуру,

- функции с непересекающимися носителями (носитель - множество тех точек спектральной шкалы, где функция отличается от нуля).

Функции последнего типа представляют особый интерес как средство сопоставления бесконечномерной и конечномерной спектральных шкал. Примерами являются столбцовые функции

$$\zeta_i(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } \frac{x_i+x_{i-1}-1}{2} < x \leq \frac{x_i+x_{i+1}}{2} \\ 0 & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (3.2)$$

и дельта-функции

$$\zeta_i(x) = \delta(x - x_i) \quad (3.3)$$

Переход к конечномерной спектральной шкале особенно прост во втором случае, так как здесь все точки спектральной шкалы, кроме конечного числа точек x_i , несущественны и их можно исключить из рассмотрения.

На конечномерной шкале спектр естественным образом представляется конечным набором чисел, описывающих количества спектрального агента, отнесенные к каждому значению спектрального аргумента. Рассматривая эти числа $\{\varphi_i\}$ как координаты вектора φ , мы

построим пространство спектров вместе с базисом, который будет назван естественным базисом. Очевидно, что и здесь можно по мере целесообразности использовать любой другой базис, составленный из линейно независимых спектров.

Конечномерная модель спектра с базисом (3.2), (3.3) или естественным базисом на конечномерной шкале спектрального аргумента называется фракционной моделью спектра. Отдельные координаты вектора φ интерпретируются здесь как частные количества спектрального агента отдельных фракций по спектральному аргументу.

Мы попытаемся вывести основные соотношения и алгоритмы конечномерной спектрометрии в общем виде, вне зависимости от того, какими выбраны спектральная шкала и координатные функции. Однако конкретная реализация пространства спектров и базиса в нем всегда станут существенными, когда мы дойдем до проблем интерпретации результатов и оценки субъективной воспринимаемости информации.

На практике спектрометрии популярны еще конечномерные параметрические модели спектра. Например, спектр может быть описан посредством набора параметров группы гауссовых линий. Хотя параметрические модели на практике нередко явно выгодны, они не будут нами ближе изучены, поскольку наше рассмотрение ограничивается линейными методами спектрометрии.

4. Метрика пространства спектров.

Расстояние между спектрами $\varphi^{(1)}$ и $\varphi^{(2)}$ определяется в линейной модели как норма разности спектров

$$r(\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}) = \|\varphi^{(1)} - \varphi^{(2)}\| \quad (4.1)$$

Конечномерное пространство спектров нормируется положительно определенной квадратичной формой

$$\|\varphi\|^2 = \varphi^T W \varphi \quad (4.2)$$

Мы представляем векторы везде одностолбцовыми матрицами координат. Верхний индекс t обозначает транспонирование, φ^T является однострочной матрицей. Положительно определенная симметрическая матрица W представляет метрический тензор в используемом базисе.

Конкретное определение нормы является существенным этапом построения математической модели спектра. Это определение, как и определения любых элементов математической модели, может опираться лишь на неформальные соображения.

Если конечномерное пространство спектров выделено путем выбора координатных функций из некоторого внешнего бесконечномерного пространства, которое предварительно нормировано, то норму можно заимствовать из внешнего пространства. Тогда элементы матрицы W вычисляются как скалярные произведения координатных функций во внешнем пространстве. Описанный способ может быть признан естественным в случае, когда внешнее бесконечномерное пространство происходит из внешней модели изучаемого физического явления и нормировано на основе физических соображений. В противном случае посредничество бесконечномерного внешнего пространства представляется искусственным и конечномерное пространство спектров можно нормировать непосредственно путем определения матрицы W .

Конструирование нормы пространства спектров, как правило, совмещается с выбором базиса. Свойство ортогональности базиса воспринимается проще, чем структура матрицы W . Поэтому легче вначале выбрать такой базис, который можно объявить ортогональным так, что $\|\varphi\|^2 = \varphi^T \varphi$. По мере необходимости можно потом переходить в любой другой базис и вычислить соответствующую матрицу W .

Естественный базис на конечномерной шкале и соответствующий δ -базис на бесконечномерной шкале, как правило, объявляются ортогональными. Это соглашение не является единственно возможным и в некоторых случаях оно может оказаться необоснованным. Рассмотрим иллюстрирующий пример.

Пусть спектры представлены столбцами координат φ по естественному базису и нормированы так, что $\sum_i \varphi_i = 1$. На рис. 4.1.а изображены три спектра, конкретный пример рассчитан на двухсотточечной шкале. Расстояния $\sqrt{\sum_i (\varphi_i^{(a)} - \varphi_i^{(b)})^2}$ вычислены в предположении ортогональности естественного базиса. Второй спектр, полученный от первого путем сглаживания, в этой метрике довольно далек от первого. Перейдем теперь в другой базис, где координаты спектра

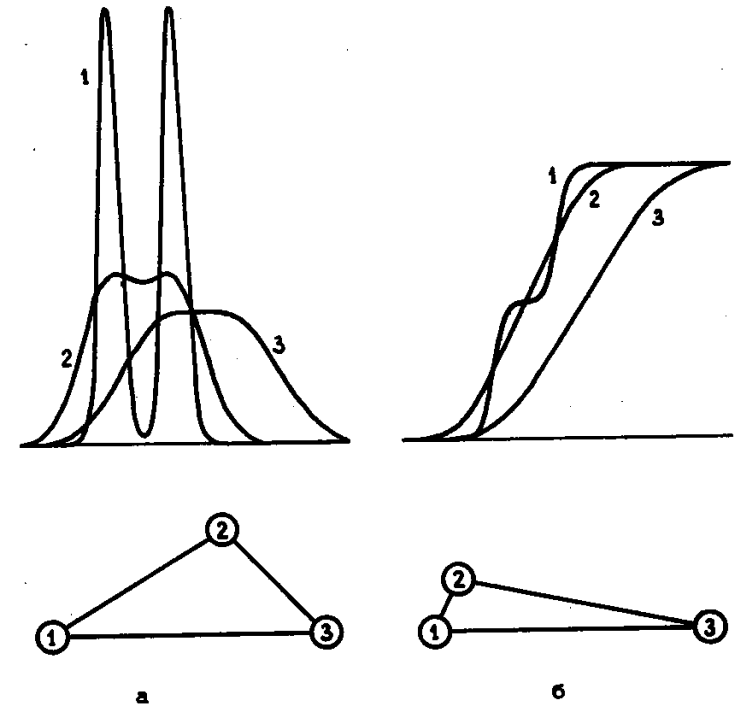


Рис. 4.1. Естественное (а) и кумулятивное (б) координатное представление спектров. Внизу треугольники расстояний. Объяснения в тексте.

будут

$$\varphi_i = \sum_{j=0}^i \varphi_j \quad (4.3)$$

Новое координатное представление, которое можно назвать кумулятивным, показано на рис. 4.1.б для тех же спектров, что и на левой стороне рисунка. Кумулятивное описание спектра, как правило, допускает самостоятельную физическую интерпретацию и может быть введено также непосредственным путем. Поэтому мы имеем равное право объявить кумулятивный базис ортогональным и вычислить рас-

стояния по формуле $\sqrt{\sum_i (\phi_i(a) - \phi_i(b))^2}$. Эти расстояния показаны на правой стороне рисунка. Спектры 1 и 2 теперь близки друг к другу, что лучше согласуется с определенными естественными соображениями о степени близости спектров.

Рассмотренный пример демонстрирует, как мы, отдавая себе в том отчет или нет, всегда вынуждены вводить в модель спектра произвольные с математической точки зрения соглашения, от которых существенно будут зависеть результаты решения конкретных задач спектрометрии.

5. Случайный спектр.

На практике всегда возможно указать такую точку в неограниченном пространстве спектров, которая не может быть реализована в данной физической обстановке, например, из-за слишком большой нормы. При желании ограничить область возможных спектров без привлечения понятий теории вероятностей приходится делить все спектры на возможные и абсолютно невозможные, причем возможные спектры все равноправны, включая и те, которые находятся в непосредственной близости от абсолютно невозможных. Выделение области возможных значений спектров при помощи вероятностной меры позволяет более гибко отражать действительность. Наложение вероятностной меры означает определение некоторого случайного вектора в пространстве спектров, или случайного спектра.

Придерживаясь соглашения п.1.3 об использовании математических распределений, мы описываем случайный спектр функцией плотности вероятности $p_\varphi(\xi)$ в пространстве спектров $\{\xi\}$. Если необходимо указать и параметры t закона распределения, то плотность вероятности записывается в виде $p_\varphi(\xi|t)$. Среднее значение случайного спектра обозначится через $\langle \varphi \rangle$ или $\bar{\varphi}$, ковариационная матрица - через C_φ . Индекс φ в обозначении плотности распределения, если это не вызывает недоразумений, ради краткости можно опустить.

В приложениях мы почти везде предполагаем, что случайный спектр имеет нормальное распределение. Нормальное распределение

имеет плотность вероятности

$$p_\varphi(\xi) = c_n \cdot e^{-\frac{1}{2}(\xi - \bar{\varphi})^T A (\xi - \bar{\varphi})} \quad (5.1)$$

где A - неотрицательно определенная симметрическая матрица, которую мы будем называть информационной матрицей. Целесообразность такой терминологии выяснится в следующей главе.

Если информационная матрица вырождена, то интеграл по распределению расходится и выражение (5.1) не допускает нормирования. Такое распределение называется вырожденным. Если информационная матрица положительно определена, то нормировочная постоянная вычисляется по формуле

$$c_n = \sqrt{\det A} / (2\pi)^{n/2} \quad (5.2)$$

и существует ковариационная или дисперсионная матрица, которая является обратной к информационной матрице

$$C = A^{-1} \quad (5.3)$$

В последнем случае можно еще говорить, что информационная матрица задает в пространстве спектров специальную вероятностную норму $\sqrt{\xi^T A \xi}$.

Путем простого преобразования формулы (5.1) можно получить равносильное выражение плотности нормального распределения

$$p_\varphi(\xi) = c_n \cdot e^{-\frac{1}{2} \xi^T A \xi + \xi^T b} \quad (5.4)$$

где вектор b , который мы будем называть локализационным вектором, связан с параметрами A и $\bar{\varphi}$ соотношением

$$b = A \bar{\varphi} \quad (5.5)$$

Нормировочная постоянная имеет здесь новое значение

$$c_n = \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2} \bar{\varphi}^T A \bar{\varphi}} \quad (5.6)$$

В дальнейшем мы будем без специальных объяснений пользоваться сокращенной записью функции плотности нормального распределе-

ния, определенной формулой (5.4), в виде

$$p_{\varphi}(\xi) = N(\xi|A, b) . \quad (5.7)$$

Наше соглашение отличается от стандартного, где в качестве параметров указываются среднее значение и ковариационная матрица.

В приложениях может появиться функция плотности нормального распределения с асимметрической матрицей A . Тогда некоторые из приведенных выражений потеряют силу. Например, взамен (5.5) пришлось бы писать

$$b = \frac{A^T + A}{2} \bar{\varphi} . \quad (5.8)$$

Поскольку матрица $(A^T + A)/2$ определяет ту же квадратичную форму, что и матрица A , то последняя может быть всегда заменена на равносильную симметрическую матрицу, поэтому везде предполагается, что матрица A симметрическая.

6. Статистическое описание спектра.

Описание конкретного физического спектра означает представление имеющихся сведений о нем в виде, пригодном для восприятия и непосредственной содержательной интерпретации.

Те сведения о спектре, которые существуют уже до измерения, называются предварительной или априорной информацией в отличие от измерительной или апостериорной информации, доставляемой из конкретных наблюдений. Предварительная информация всегда существует, и исследователь ее учитывает, иногда, правда, не отдавая себе отчета. Если же предварительной информации действительно нет, или она действительно не учитывается, то экспериментатор не имеет никакой основы высказать сомнение в исправности спектрального прибора по результатам измерения, какими бы эти результаты ни были. Однако на практике уже малые неполадки аппаратуры уверенно опознаются по аномальным результатам измерения, что возможно лишь при наличии значительной предварительной информации. Предварительная информация всегда используется при выборе структуры модели спектра, без которой нельзя представить и измерительную информацию.

В спектроскопии предварительная информация черпается из физической теории изучаемого явления, из результатов анализа аналогичных экспериментов, из предварительных наблюдений. Нередко описание спектра постепенно уточняется в ходе целой серии дополняющих друг друга измерений. Тогда измерительная информация, доставленная одним наблюдением, рассматривается как предварительная информация по отношению к следующему наблюдению. Нам необходим единый способ количественного описания спектра, который был бы приемлем как в условиях малой определенности до измерения, так и после полного завершения измерений.

Известны разные подходы к статистическому описанию спектра. Хотя все подходы, по-видимому, приведут к одинаковым количественным выводам, они различаются друг от друга в интерпретации, а это для физика существенно. Рассмотрим ниже два основных способа описания спектра.

При первом способе спектр представляется случайным вектором. Конкретный спектр описывается конкретным распределением случайного вектора, причем обычно указывается некий стандартный тип распределения и его параметры. Если сведений мало, например, до измерения, то распределение имеет почти одинаковую плотность в большой области пространства. Когда сведений много, тогда распределение имеет острый пик. Детерминированный вектор, полученный в результате измерения, интерпретируется как конкретная реализация случайного вектора, взятая наугад из ансамбля возможных значений.

При втором способе с истинным спектром сопоставляется детерминированный вектор φ , а с наблюдениями или другими сведениями — случайный вектор f из некоторого другого пространства. Точка φ и распределение случайного вектора f неизвестны. Известны лишь тип распределения f и одна конкретная реализация. Предполагается, что, если бы истинный спектр φ был задан, то это полностью определило бы распределение $p_f(\xi)$. Поскольку спектр действительно неизвестен, возможно лишь выдвинуть гипотетические оценки спектра ψ и вычислить соответствующие гипотетические распределения $p_f(\xi|\psi)$. Плотность такого распределения в точке известной реализации f рассматривается как функция гипотетической оценки

ψ с параметром f , обозначается через $L(\psi|f)$ и называется функцией правдоподобия оценки ψ при заданных наблюдениях или других сведениях f . Функция правдоподобия оценки спектра и служит полным описанием конкретного спектра при втором способе. Этот способ исходит из работ Фишера и соответствующий подход в математической статистике называется фидуциальным. Детальное обсуждение разных подходов статистики можно найти в книге (Кендалл, Стюарт, 1961).

Нормальное распределение обладает симметрией $N(\varphi|A, A\psi) = N(\psi|A, A\varphi)$ и здесь оба способа приводят заведомо к одинаковым практическим выводам. Для перехода от первого способа, где спектр описывается плотностью $p_{\varphi}(\xi) = N(\xi|A, A\varphi_0)$ ко второму достаточно лишь принять $L(\psi) = N(\psi|A, A\psi_0)$. По отношению к интерпретации мы склонны признать, что фидуциальный подход лучше соответствует привычным представлениям физика об измерении макроскопических величин.

7. Запись спектрометра и аппаратный шум.

Запись спектрометра называется первичный результат измерения спектра, непосредственно выдаваемый аппаратом. Физическая запись может быть магнитной записью на магнитной ленте, перфорацией на бумажной ленте, линией, начерченной на бумаге и т.д.

Математическая модель записи строится аналогично математической модели спектра. Аргумент записи будет обозначен через y . Шкала аргумента записи может быть бесконечномерной плотной или непрерывной шкалой, или конечномерной шкалой. Количество точек конечномерной шкалы записи будет везде обозначено через m , точки шкалы пронумеруются целыми числами $0, 1, \dots, m-1$.

При цифровой измерительной технике естественна конечномерная шкала записи. Бесконечномерная шкала нашла использование в связи с графической регистрацией, распространенной в старой аппаратуре. Сопоставление графической записи с функцией непрерывного аргумента кажется простым лишь на поверхностный первый взгляд. Фактически эта задача информационно некорректна. Сопоставление графика с конечномерной таблицей намного проще. На практике графическая запись, как правило, подвергается предварительной обработке и пере-

водится в конечную таблицу.

Если бесконечномерная шкала записи сама мало привлекает внимания, то бесконечномерная модель записи представляется с точки зрения практической спектроскопии совсем искусственной. И все же в некоторых случаях такая модель рассматривается: причиной служит здесь, по-видимому, трудность ситуации, когда спектр имеет бесконечномерное, а запись - конечномерное описание.

Мы ограничиваемся рассмотрением конечномерной модели записи на конечномерной шкале. Числа, представляющие запись, рассматриваются как координаты вектора m -мерного пространства записей. В то время, как с физическим спектром непосредственно сопоставляется вектор, координатное представление которого зависит от выбора базиса, с физической записью мы непосредственно сопоставляем набор координат. Базис, используемый при построении векторного пространства записей, рассматривается как вспомогательный конструктивный элемент. Этот базис называется естественным и он имеет привилегированное положение как единственный базис, обеспечивающий сопоставимость вектора записи с физической записью. Формальная возможность перехода к другому базису рассматривается как избыточность модели, обеспечивающая математическое удобство теории.

В ансамбле реальных или воображаемых повторных измерений одного и того же физического спектра запись описывается случайным вектором \check{f} , среднее значение этого случайного вектора обозначается \bar{f} и называется средней записью, а случайная разность $\check{u} = \check{f} - \bar{f}$ - аппаратным шумом. После измерения известна конкретная запись

$$f = \bar{f} + u, \quad (7.1)$$

а средняя запись и конкретная реализация аппаратного шума u не известны. Если у нас не было бы никакой предварительной информации ни о спектре, ни об аппаратном шуме, то конкретная запись могла быть интерпретирована с одинаковым правом как средняя запись или как только шум. Всякое измерение приобретает смысл только при наличии должной предварительной информации.

Мы полагаем везде известным априори вероятностное распределение шума. Для экспериментатора это означает необходимость предварительного исследования шума, что в свою очередь возможно лишь

при наличии достаточной предварительной информации о спектре. Обычно создаются физические условия, при которых предварительно известно, что средняя запись в повторных измерениях сохраняется. Если до опыта известно, что шум не зависит от спектра, то достаточно изучить шум при условии $\bar{f} = 0$ (запись нулевой линии). Шум, не зависящий от спектра, называется аддитивным. Отметим, что соотношение (7.1) действительно независимо от аддитивности шума. Методику исследования шума рассматривать подробнее мы не будем, она хорошо освещена в литературе (см., например, Дженкинс, Ватс, 1969).

Во всех конкретных задачах мы предполагаем, что шум распределен нормально и полностью описывается ковариационной матрицей, которую обозначаем везде через D .

В простейшем случае ковариационная матрица шума диагональна, тогда шум называется белым.

Если элементы ковариационной матрицы зависят только от разности индексов, то шум называется (в широком смысле) стационарным или однородным. Бесконечные однородные случайные последовательности обладают хорошо изученными простыми свойствами (см., например, Дженкинс, Ватс, 1969). Конечный отрывок однородной последовательности теряет эти простые свойства. На практике конечные последовательности чаще всего обрабатываются по теории бесконечных последовательностей ценой "краевого эффекта" или "ошибки периодического повторения" ("aliasing error").

Простыми свойствами, аналогичными свойствам бесконечных однородных случайных последовательностей, в полной мере обладают конечномерные циркуляционные случайные векторы (см. приложение). Циркуляционный случайный вектор можно вообразить как "свернутую в кольцо" однородную случайную последовательность. Мы будем всюду рассматривать взамен отрывков бесконечных однородных случайных последовательностей циркуляционные случайные векторы. Это, конечно, не исключает "краевой эффект" вообще, а просто переносит его с математической модели на соотношения между моделью и физической действительностью. Нам кажется, что здесь экспериментатор лучше способен оценить допустимость и возможные последствия упрощений.

Более слабым по сравнению с допущением циркуляционной симме-

три является допущение, что ковариационная матрица шума теплицева. Однако в теории общих теплицевых матриц (см. Иохвидов, 1974) нет столь эффективных средств, как метод Фурье-преобразования в теории циркуляционных матриц.

Однородный шум, не зависящий от среднего значения записи \bar{f} , называется аддитивным фоном и обозначается через \check{v} . Если $\check{u} = \bar{f} \check{w}$, где \check{w} — однородный центрированный случайный вектор, не зависящий от средней записи, то шум называется мультипликативным. Пуассонов шум пропорционален квадратному корню средней записи. В более сложной ситуации шум нередко удается описать, как сумму аддитивного фона и мультипликативного или пуассоновского шума.

8. Аппаратное преобразование.

Аппаратное преобразование служит математической моделью физического процесса измерения спектра, который ставит конкретному спектру в соответствие конкретную запись. Наличие аппаратного шума заставляет изобразить аппаратное преобразование случайным оператором. Способом, рассмотренным в предыдущем пункте, отделим случайную часть преобразования от детерминированной и запишем аппаратное преобразование в виде

$$\left. \begin{aligned} f &= \bar{f} + u \\ \bar{f} &= \hat{G} \varphi \end{aligned} \right\} \quad (8.1)$$

где \hat{G} — неслучайный аппаратный оператор, который вместе с законом распределения аппаратного шума описывает спектральный прибор. Символ $\hat{}$ используется здесь, как признак оператора.

Ниже предполагается, что в уравнения (8.1) входят числовые значения физических величин относительно установленных единиц измерения. Тогда аппаратный оператор — безразмерная величина, зависящая от конкретного выбора единиц измерения спектра и записи. В пределах настоящего исследования единицы измерения варьировать не приходится и отмеченная зависимость не существенна. По мере необходимости аппаратный оператор может быть дополнен единицей измерения, равной отношению единиц измерения записи и спектра.

Поскольку опыт дает лишь значение конкретной записи, а сред-

няя запись остается неизвестной, то аппаратное преобразование не может быть однозначно обращено. Проблеме оценивания спектра по записи будут посвящены следующие главы.

В настоящей работе аппаратный оператор везде предполагается точно известным априори. Это одно из самых утеснительных упрощений, которые мы вынуждены принять. На практике всегда известна лишь некоторая приближенная оценка оператора \hat{G} . Однако мы не имеем достаточно удобной математической теории, позволяющей принимать более совершенную модель. Лишь некоторые частные проблемы допускают уточненное рассмотрение. Проще всего удается учитывать неточность аппаратного оператора в линейной разностной задаче (см., например, Савбёлева, 1972). Практический интерес представляет учет той неопределенности аппаратного оператора, которая обусловлена ошибками измерения значений аргумента записи. Обзор соответствующих статистических методов можно найти, например, в статье Бородюка и Вощина (1972).

Мы ограничиваемся изучением линейных спектрометров, описываемых линейными аппаратными операторами. В случае конечномерной модели линейный аппаратный оператор представляется аппаратной матрицей G , содержащей m строк и n столбцов. Детерминированная часть аппаратного преобразования описывается уравнением

$$\bar{F} = G\varphi. \quad (8.2)$$

В случае непрерывной модели это уравнение заменяется на

$$\bar{F}(y) = \int G(y,x)\varphi(x)dx, \quad (8.3)$$

где $G(y,x)$ - аппаратная функция. Интеграл распространяется через рабочий интервал или через интервал $(-\infty, +\infty)$. Напомним, что, согласно определению, вне рабочего интервала $\varphi(x) = 0$.

Средняя запись \bar{F} обычно воображается как запись в отсутствии шума и называется аппаратным образом спектра. Аппаратная функция при фиксированном значении второго аргумента интерпретируется как аппаратный образ δ -линии - бесконечно узкой спектральной линии с единичной интегральной интенсивностью $\varphi(x) = \delta(x-x_0)$. Аналогично столбцы аппаратной матрицы рассматриваются как аппаратные образы координатных векторов пространства спектров, или конечномерных δ -спектров $\varphi_j = \delta_{jk}$, где k - номер столбца.

9. Простейшие аппаратные преобразования.

Аппаратная матрица зависит от выбора базиса в пространстве спектров и при рассмотрении его конкретного вида этот базис должен быть зафиксирован. В пространстве записей всегда используется естественный базис k , говоря о записи, подразумевают ее естественное координатное представление.

Спектрометр, запись которого точно равна желаемому координатному представлению спектра, называется идеальным. Аппаратная матрица идеального спектрометра равна единичной матрице, аппаратная функция - δ -функции. Спектрометр с единичной аппаратной матрицей, но с ненулевым шумом, и шумящий спектрометр с квадратной невырожденной аппаратной матрицей, отличной от единичной матрицы, называются полумидеальными.

Близкими по своим свойствам к идеальному спектрометру являются еще ортогональные спектрометры, имеющие ортогональную аппаратную матрицу. Наиболее известны ортогональные спектрометры, в которых осуществляется преобразование Фурье или Адамара. За обзором мультиплексных методов ортогональной спектрометрии отсылаем к статье Сороко (1973).

В бесконечномерной теории особой простотой выделяются разностные аппаратные функции, обладающие определяющим свойством

$$G(y,x) = g(y-x), \quad (9.1)$$

где g - аппаратная функция одной переменной. Соответствующий спектрометр называется разностным. Аппаратный образ спектра в разностном спектрометре является сверткой аппаратной функции и спектра.

Аналогом разностного спектрометра в конечномерной теории является циркуляционный спектрометр, аппаратная матрица которого циркуляционна (см. приложение). Порождающий вектор аппаратной матрицы называется аппаратным вектором циркуляционного спектрометра. Аппаратный образ спектра в циркуляционном спектрометре является циркуляционной сверткой аппаратного вектора и спектра.

Конечномерный разностный спектрометр с теплицевой аппаратной матрицей $G_{jk} = g_{j-k}$, которая не является циркуляционной, не обладает столь простыми свойствами, как циркуляционный спектрометр.

Поэтому в случае нециркуляционного конечномерного разностного спектрометра выгодно искусственно расширять спектральную шкалу в область, где $\phi = 0$ настолько, что станет возможным использование равносильной циркуляционной модели спектрометра.

К простым можно причислить также преобразования, близкие к единичному преобразованию.

Иногда удается аппаратное преобразование, непосредственно не относящееся к простым, к таковым привести. В случае непрерывных шкал можно выделить класс аппаратных преобразований, приводимых к разностному виду посредством нелинейного преобразования шкал $x' = \xi(x)$, $y' = \eta(y)$. В частности это имеет место, когда $G(y, x) = g(y/x)$, что характерно для спектрометрии подвижностей аэроионов (см., например, Таммет, 1967, 1973). Тогда желаемый результат дает замена переменных $x' = \ln x$, $y' = \ln y$. Нелинейные преобразования требуют особого внимания к возможным следствиям сопровождающего изменения метрики пространств спектров и записей. Действие нелинейного преобразования шкал на результаты обработки наблюдений сложно и в значительной степени контролируется лишь интуицией спектрометриста. Следует упомянуть еще принцип однородной заинтересованности, описанный в п.2.

Иногда упрощение достигается посредством декомпозиции аппаратного преобразования на произведение двух частных преобразований $\hat{G} = \hat{G}' \hat{G}''$. Нередко такая декомпозиция возникает совершенно естественным образом. В типичном случае одно частное преобразование описывается некоторой простой теоретической моделью (дифференцирование, интегрирование, преобразование Фурье или др.), а второе частное преобразование дополняет аппаратное преобразование до более точной модели \hat{G} . "Теоретическое" частное преобразование обычно просто обрамается, иногда аппаратными средствами. Второе частное преобразование тогда рассматривается как "искажение" спектра побочными эффектами, оно может быть интерпретировано как аппаратное преобразование спектрометра, расширенного средствами предварительной обработки наблюдений.

Многоэтапное представление аппаратного преобразования может оказаться выгодным с вычислительной точки зрения. Если прямо привести аппаратное уравнение к циркуляционному виду не удастся, то

может существовать разбиение аппаратного преобразования на частные преобразования, которые или диагональны, или легко приводимы к циркуляционному виду.

Другой простой способ декомпозиции возможен при ленточной аппаратной матрице, что характерно для многих задач спектрометрии. Тогда шкалы спектра и записи разбиваются на частично перекрывающиеся интервалы так, что решение аппаратного уравнения внутри определенного внутреннего подынтервала каждого интервала определяется точками записи только одного интервала. Поскольку количество арифметических операций при матричных вычислениях пропорционально кубу порядка, то подходящее разбиение может дать существенную экономию вычислительной работы.

10. Сопоставление математических моделей.

На практике спектрометрии осуществляется переход как от конечномерной модели (уравнение 8.2) к бесконечномерной (уравнение 8.3), так и обратно. Первый переход выполняется методами теории интерполяции. На практике этот переход встречается как звено перехода от одной конечномерной модели к другой через вспомогательную непрерывную модель. Второй переход называется алгебраизацией уравнения спектрометра, он часто встречается как самостоятельная задача. В литературе эта задача, как правило, обходится стандартной фразой "уравнение таким или иным способом алгебраизуется".

Задача алгебраизации чаще всего возникает в ситуации, когда бесконечномерная модель спектра происходит из внешней модели физического явления, а запись представлена конечным набором чисел, интерпретируемых как значения фиктивной бесконечномерной записи в отсчетных точках $f_j = f(y_j)$. Если теперь выбор конечного набора координатных функций в пространстве спектров предварительно решен на основе самостоятельных соображений, то

$$G_{ji} = \int G(y_j, x) \xi_i(x) dx, \quad (10.1)$$

где $\xi_i(x)$ - координатные функции. Проблемы возникают лишь в случае, когда координатные функции заранее не определены. Тогда координаты спектра интерпретируются как отсчетные значения и задача

алгебраизации сводится к выбору квадратурной формулы, при помощи которой интеграл заменяется на конечную сумму.

Отсчетные точки на спектральной шкале или узлы квадратурной формулы определяются соображениями о структуре конечномерной спектральной шкалы. Ниже предполагается, что узлы равноотстоящие, на практике это встречается наиболее часто.

Обычно предпочтение отдается квадратурным формулам с высокой алгебраической степенью точности перед формулами с низкой алгебраической степенью точности. Например, формула Симпсона предпочитается формуле прямоугольников. Однако подынтегральная функция в уравнении спектрометра не является алгебраическим многочленом и аппроксимируется, как правило, алгебраическими многочленами не лучше, чем, например, тригонометрическими многочленами. Поэтому формулы с высокой алгебраической степенью точности могут не иметь никаких преимуществ перед простейшей формулой прямоугольников, которая обладает, как известно, наивысшей тригонометрической степенью точности.

В преимуществах формулы прямоугольников перед формулой Симпсона (а также перед другими формулами с неравными весами) при интегрировании функции $\psi(x)$, которая отличается от нуля лишь во внутреннем подынтервале (α, β) промежутка интегрирования, убеждают элементарные соображения об усреднении квадратур, взятых со сдвигом по спектральной шкале. Пусть промежуток интегрирования с достаточным запасом перекрывает интервал (α, β) . Тогда квадратуру Симпсона на одном и том же множестве узлов можно построить двумя равносильными способами

$$\left. \begin{aligned} I_1 &= \frac{\Delta x}{3} \sum_k (4\psi(2k\Delta x) + 2\psi((2k+1)\Delta x)) \\ I_2 &= \frac{\Delta x}{3} \sum_k (2\psi(2k\Delta x) + 4\psi((2k+1)\Delta x)) \end{aligned} \right\} \quad (10.2)$$

Квадратура по формуле прямоугольников оказывается арифметическим средним двух предыдущих. Отсюда ясно, что ошибка формулы прямоугольников в нашем случае не превышает ошибки одного из вариантов формулы Симпсона, а в статистическом смысле формула прямоугольников точнее формулы Симпсона.

II. ПРОЯВЛЕНИЕ СПЕКТРА

11. К постановке задачи.

Экспериментальная информация о спектре кодирована в записи так, что она непосредственно воспринимается исследователем с большими или меньшими потерями. Наше внимание будет концентрировано на измерение в условиях, где информация лучше всего воспринимается при представлении результатов в пространстве спектров с базисом, выбранном на основе некоторых содержательных соображений. Термин "проявление" отмечает обработку наблюдений, которая приводит информацию к требуемому виду. Мы рассматриваем схему

запись - проявление - оценка спектра

как универсальную, ее нельзя обходить. В случае, когда запись непосредственно принимается за оценку спектра, будем говорить о тривиальном проявлении. В дальнейшем (см. п.25) выясняется, что тривиальное проявление - одна из разновидностей стабилизированного проявления.

Проявление спектра должно объединить всю информацию, доставленную из всевозможных источников.

Термин "проявление" имеет несколько более или менее точных синонимов. Иногда мы говорим просто о вычислении спектра по заданной записи. Почти точным синонимом является термин "статистическое оценивание спектра". Наиболее часто встречающийся в литературе термин "восстановление спектра" удачен в условиях математического эксперимента, когда запись составляется расчетным путем по заданному спектру, которую затем пытаются восстановить с целью проверки вычислительного метода. В натуральной задаче этот термин менее уместен, особенно, когда спектральный прибор имеет чрезмерно узкую аппаратную функцию и оптимальная обработка наблюдений сводится к сглаживанию записи. Другой встречающийся в литературе термин "редукция спектра к идеальному прибору" ставит на словах неразрешимую задачу и не может быть признан удовлетворительным.

Если проявление сводится к небольшой коррекции записи, кото-

рая и так воспринимается, как спектр, то уместен термин "коррекция" или "корректурa" спектра. Последний термин является традиционным при обработке результатов одноканальных динамических измерений, где решаются те же математические задачи, что и при проявлении спектра (см., например, Krauss, Woschni, 1972).

В ранних исследованиях методов проявления спектра и математически равносильных задач доминирует детерминистский подход, не учитывающий случайные ошибки измерения. Спектр ищется как решение интегрального аппаратного уравнения

$$f(y) = \int G(y,x)\varphi(x)dx, \quad (11.1)$$

полученного из уравнения (8.3) путем замены средней записи на конкретную запись. Конечномерному аналогу уравнения (11.1), как правило, не придавалось самостоятельного значения.

Хорошо известно, что задача решения уравнения первого рода (11.1) поставлена некорректно в смысле Адамара. Исключениями являются лишь специальные случаи, например, когда ядро содержит слагаемое, образующее семейство ортогональных функций аргумента y с параметром x (примеры - преобразование Фурье и единичное преобразование с δ -ядром). Мы предполагаем, что читатель заранее знаком с понятием корректности задач математической физики в смысле Адамара и обходим соответствующие определения. Решение некорректно поставленной задачи, если оно вообще существует, может сколь угодно много изменяться при сколь угодно малой вариации исходных данных $f(y)$. Построение теории обработки наблюдений на основе некорректного уравнения очевидным образом лишено смысла. Все алгоритмы проявления спектра, в качестве основы которых декларировалось уравнение (11.1), фактически имеют в основе еще существенные дополнительные предположения или допущения, которые, как правило, надлежащим образом не анализируются.

Некорректно поставленные задачи являются предельным случаем малоустойчивых задач, или, в терминологии линейной алгебры, плохо обусловленных задач. Например, если добавить ядру уравнения (11.1) сколь угодно малую δ -составляющую $\epsilon \cdot \delta(y-x)$, $\epsilon > 0$, то это уравнение станет вполне корректным уравнением второго рода. Однако, как и раньше, малым вариациям записи могут соответствовать большие

вариации спектра, хотя уже не сколь угодно большие, но достаточные, чтобы сделать постановку задачи проявления спектра практически бессмысленной. Ответственным за трудное положение следует признать, очевидно, не некорректность, а плохую стабильность аппаратного уравнения. Сущность обсуждаемого вопроса легче проглядывается в случае конечномерной формулировки задачи. Некорректному интегральному уравнению по своим свойствам соответствует вырожденная алгебраическая система линейных уравнений, интегральному уравнению с малоустойчивым решением - плохо обусловленная система. Вырожденность алгебраической системы в спектрометрии легко обойти: достаточно изменить матрицу в пределах точности ее определения. Плохая обусловленность более фундаментальное свойство, которое нельзя устранить без содержательного доопределения задачи.

Плохую стабильность уравнений не следует рассматривать как основное возражение против детерминистского подхода к проблеме проявления спектра. Плохо обусловленные уравнения могут появиться и при статистическом подходе, хотя возникающие затруднения преодолеваются здесь более естественным способом. Мы отвергаем детерминистский подход прежде всего по той причине, что он не позволяет разумно описать точность измерения. Детерминистский способ описания ошибок при помощи определения их верхней границы означает существенную потерю фактической экспериментальной информации, а полная реализация этого способа в теории проявления спектра завязнет к тому же в математических затруднениях.

По изложенной причине задача проявления спектра будет ниже изучена с самого начала как статистическая задача.

В настоящей главе предполагается, что модель спектра и предварительная информация о спектре уже при постановке конкретной задачи проявления полностью определены. Зависимость результатов проявления от предварительной информации при варьировании последней изучается в третьей главе.

12. Измерительная информация.

В п.7 объяснилось, что запись содержит информацию о спектре лишь тогда, когда имеется достаточно предварительных сведений о

шуме. Там же мы уже договорились, что плотность распределения шума $p_u(\eta)$ в пространстве записей $\{\eta\}$ будет рассмотрена, как функция, заданная априори. Поскольку шум равен разности конкретной записи f и средней записи \bar{f} , то $p_u(f-h)$ выражает функцию правдоподобия для произвольного гипотетического значения h средней записи. Эта функция является полным описанием измерительной информации в пространстве записей. Переход в пространство спектров осуществляется просто: достаточно выразить оценку средней записи через равносильную оценку спектра $h = G\psi$. Функция правдоподобия оценки спектра

$$L(\psi) = p_u(f - G\psi) \quad (12.1)$$

выражает измерительную информацию в пространстве спектров.

Плотность вероятности нормального или гауссового шума $p_u(\eta) = N(\eta|D^{-1}, 0)$, где D - ковариационная матрица шума. Функция N определена формулами (5.4), (5.7). Для функции правдоподобия оценки спектра получим отсюда выражение $L(\psi) = N(f - G\psi|D^{-1}, 0)$. Преобразуя квадратичную форму $(f - G\psi)^T D^{-1} (f - G\psi)$, учитывая, что $f^T D^{-1} G\psi = \psi^T G^T D^{-1} f$, и переводя множитель с постоянным показателем $-f^T D^{-1} f/2$ в номировочную постоянную, приходим к результату

$$L(\psi) = N(\psi|A_m, b_m), \quad (12.2)$$

где

$$A_m = G^T D^{-1} G \quad (12.3)$$

измерительная информационная матрица и

$$b_m = G^T D^{-1} f \quad (12.4)$$

измерительный локализационный вектор. Изложенный результат хорошо известен из теории наименьших квадратов Гаусса-Маркова.

Выражение (12.2) сохраняет силу и в случае, когда информационная матрица A_m вырождена.

Понятие количества информации используется нами в смысле Шеннона. Это понятие описывает взаимоотношения двух случайных величин - для характеристики одной только записи оно не приложимо. В спектрометрии количество информации можно определить, когда рассматривается вероятностный ансамбль истинных спектров с плотностью распределения $p_\varphi(\xi)$. Обозначим плотность распределения записей

случайных спектров через $p_f(\eta)$. Если по записи возможно уточнить, какой именно спектр из априорного ансамбля попал под измерение, то это отражается в совместной плотности распределения векторов записи и спектра $p_{f\varphi}(\eta, \xi)$. Шенноновское количество информации в записи о спектре определяется формулой

$$I(f, \varphi) = \iint p_{f\varphi}(\eta, \xi) \log \frac{p_{f\varphi}(\eta, \xi)}{p_f(\eta)p_\varphi(\xi)} d\eta d\xi. \quad (12.5)$$

Основание логарифма определяет единицу измерения количества информации.

При весьма общих предположениях (допустимы также нерегулярные распределения) количество информации инвариантно относительно линейных преобразований любого из рассматриваемых случайных векторов (Гелфанд, Яглом, 1957). Вырожденное преобразование может уменьшить количество информации. Инвариантность количества информации относительно невырожденных линейных преобразований означает, что в случае линейного спектрометра с невырожденной квадратной аппаратной матрицей количество информации в записи о спектре, количество информации в записи о средней записи G_φ , и количество информации в эмпирическом спектре $G^{-1}f$ об истинном спектре, между собой равны. Если все рассматриваемые распределения нормальны, то из определения (12.5) вытекает формула (Гелфанд, Яглом, 1957)

$$I(f, \varphi) = -\frac{1}{2} \log \det (E - C_{f\varphi} C_\varphi^{-1} C_{f\varphi}^T C_f^{-1}), \quad (12.6)$$

где E - единичная матрица, C_φ и C_f - ковариационные матрицы векторов φ и f , а $C_{f\varphi}$ - матрица вторых смешанных моментов спектра и записи. Отметим, что $C_f \neq D$, поскольку C_f определена для записи случайного спектра, а D для записи конкретного спектра.

Понятие энтропии записи нами не используется, поскольку в случае непрерывного распределения энтропии не придается самостоятельного содержания (см., например, Колмогоров, 1956).

13. Накопление информации и правдоподобная оценка спектра.

Использование всей имеющейся информации о спектре, как изме-

рительной, так и предварительной, представляется нам неоспоримым правилом. Отказ от учета объективной предварительной информации не в пользу достоверности результатов, наоборот, это может быть рассмотрено как намеренное искажение выдаваемой оценки спектра.

Пусть $L(\psi|f)$ - плотность вероятности распределения сведений f и $L(\psi|g)$ - плотность вероятности распределения других сведений g при гипотезе, что спектр равен некоторой оценке ψ . Если рассматриваемые распределения независимы друг от друга, то распределение вероятности в кронекеровском произведении пространств сведений при той же гипотезе относительно спектра вычисляется по правилу умножения вероятностей независимых событий

$$L(\psi|f, g) = L(\psi|f) \cdot L(\psi|g) . \quad (13.1)$$

Здесь f и g рассматриваются как аргументы, а ψ - как параметр функции L . В дальнейшем мы будем рассматривать конкретную реализацию векторов сведений f и g и трактовать функцию L как функцию правдоподобия оценок в пространстве спектров. Правило (13.1) тогда выступает как предписание вычисления сводной функции правдоподобия по частным функциям правдоподобия, определенным по независимым источникам сведений. Переход на новую точку зрения влечет поворот и в терминологии - теперь мы будем называть величину ψ аргументом, а f и g - параметрами функции правдоподобия L .

Нам придется использовать правило (13.1) для описания процесса последовательного накопления информации из многих источников. Опуская для краткости обозначения параметров, запишем алгоритм одного шага накопления информации в виде

$$L(\psi) := \text{sp} \cdot L'(\psi) \cdot L(\psi) . \quad (13.2)$$

Символ присвоения $:=$ заимствован из языка АЛГОЛ. Этот символ позволяет наглядно записать предписания обновления значений величин и он используется нами и в дальнейшем. $L(\psi)$ на правой стороне предписания обозначает первоначальное значение функции правдоподобия, $L'(\psi)$ - частную функцию правдоподобия по добавляемой информации, а $L(\psi)$ на левой стороне - обновленное значение сводной функции правдоподобия. Постоянная sp включена в формулу для обеспечения свободы нормировки.

Процесс объединения информации, получаемой из разных источников, можно начинать с состояния полной неопределенности $L(\psi) = 1$. На каждом шаге накопления используется алгоритм (13.2), природа добавляемой информации не существенна, важно лишь соблюдение требования независимости источников информации.

Как результат проявления предлагается оценка спектра, которая доставляет сводной функции правдоподобия наибольшее возможное значение. Такая оценка называется оценкой наибольшего правдоподобия, короче, правдоподобной оценкой. Она обладает известными оптимальными свойствами - асимптотическими несмещенностью, эффективностью и нормальностью. Общий алгоритм проявления спектра сводится к составлению конкретного выражения функции правдоподобия оценки спектра и отысканию точки глобального максимума этой функции.

В изложенной схеме используется понятие предварительной или априорной функции правдоподобия оценки спектра. Эта функция составляется на основе априорных сведений, которые рассматриваются как конкретная реализация некоторой случайной величины. При другом подходе априорная информация описывается посредством воображаемого вероятностного ансамбля возможных спектров. Хотя два подхода формально противоположны, на практике они приведут к одинаковым количественным результатам, если только априорная функция правдоподобия в первом и априорная функция плотности вероятности спектра в другом случае определены по одним и тем же содержательным соображениям и являются пропорциональными друг другу. Взамен правила (13.2) при втором подходе используется формула Байеса

$$p(\psi|f) = \text{sp} \cdot p(\psi) \cdot L(\psi|f) , \quad (13.3)$$

где $p(\psi)$ - априорная и $p(\psi|f)$ - апостериорная плотности вероятности спектра, интерпретируемые в теории вероятностей как плотности субъективной вероятности (см., например, Savage, 1962). Хотя нашим основным орудием будут в дальнейшем функции правдоподобия, мы допустим себе кое-где вольность пользоваться и другим подходом, когда это целесообразно.

14. Нормальное проявление.

Вычислительные затруднения общего алгоритма проявления спектра заставляют всегда, когда нет слишком решительных возражений, пользоваться нормальной аппроксимацией вероятностных распределений и функций правдоподобия. Аппаратный шум, как правило, хорошо описывается нормальным распределением. Описание предварительной информации посредством нормального распределения более спорно. Главное возражение возникает по причине, что нормальное распределение не позволяет описать априорную неотрицательность координат спектра.

Если все независимые составляющие информации описываются при помощи функций нормального распределения с параметрами $A^{(k)}$, $b^{(k)}$, то алгоритм накопления (13.2) дает результат

$$\left. \begin{aligned} L(\psi) &= N(\psi | A, b) \\ A &= \sum_k A^{(k)} \\ b &= \sum_k b^{(k)} \end{aligned} \right\} \quad (14.1)$$

Нормальная функция правдоподобия достигает своего наибольшего значения в единственной точке при условии, что информационная матрица A не вырождена. Тогда результатом проявления будет оценка спектра

$$\psi = A^{-1} b, \quad (14.2)$$

которая и доставляет функции правдоподобия (см. выражение 5.4) максимальное значение. По причине симметрии функции нормального распределения эта оценка строго несмещена и распределена в ансамбле независимых по всем источникам информации воображаемых повторных определений спектра нормально с ковариационной матрицей $C = A^{-1}$.

В частном случае, когда вся информация исчерпывается одной записью, действительны формулы (12.2-4) и найденная оценка спектра $A_m^{-1} b_m = (G^T D^{-1} G)^{-1} G^T D^{-1} f$ совпадает с классическим результатом теории наименьших квадратов Гаусса-Маркова (сравни, например,

Линник, 1962).

Если кроме записи существует еще предварительная информация, описываемая функцией правдоподобия $N(\psi | A_p, b_p)$, то получим оценку $\psi = (A_p + A_m)^{-1} (b_p + b_m)$. Выразим A_m и b_m по (12.3-4) и запишем основной алгоритм проявления спектра в развернутом виде

$$\left. \begin{aligned} C &= (G^T D^{-1} G + A_p)^{-1} \\ \psi &= C (G^T D^{-1} f + b_p) \end{aligned} \right\} \quad (14.3)$$

Последний результат был получен различными путями разными авторами. Упомянем здесь работы (Strand, Westwater, 1968, Турчин, Нозик, 1969, Жуковский, 1972).

Алгоритм (14.3) является линейным. Общий алгоритм линейного проявления можно записать в виде

$$\psi = K f + \psi^0, \quad (14.4)$$

матрица K называется проявителем и вектор ψ^0 , представляющий оценку спектра для нулевой записи - нулевой оценкой спектра. Алгоритм (14.3) соответствует проявителю

$$K = (G^T D^{-1} G + A_p)^{-1} G^T D^{-1} \quad (14.5)$$

и нулевой оценке

$$\psi^0 = (G^T D^{-1} G + A_p)^{-1} b_p. \quad (14.6)$$

Ковариационная матрица C описывает точность оценки, учитывая наряду с ошибками измерения и степень неопределенности предварительных сведений. В условиях, когда результаты повторных измерений обрабатываются с фиксированным значением вектора b_p , рассеивание оценок будет соответственно меньше и описывается ковариационной матрицей $C' = K D K^T$. Вычисление дает результат

$$C' = (E + A_m^{-1} A_p)^{-1} C, \quad (14.7)$$

где E - единичная матрица, а C определяется по (14.3).

Многие авторы называют учет предварительной информации в алгоритме (14.3) статистической регуляризацией. Термин "регуляри-

зация" ссылается на модифицирование или доопределение задачи в процессе ее решения. Поскольку наше рассмотрение не содержит подобного элемента, мы откажемся от использования термина "регуляризация" по настоящей задаче. Алгоритм (14.3) описывает естественное решение задачи проявления спектра при учете всей имеющейся информации.

Для дополнения интерпретации алгоритма (14.3) изучим еще частный случай, когда аппаратная матрица квадратна и $b_p = 0$. Тогда

$$\psi = (E + A_m^{-1} A_p)^{-1} G^{-1} f. \quad (14.8)$$

Заметив, что $C_m = A_m^{-1}$ ковариационная матрица оценки спектра при отсутствии предварительной информации, $C_p = A_p^{-1}$ априорная ковариационная матрица ожидаемого спектра и $\psi_m = G^{-1} f$ - оценка спектра при отсутствии предварительной информации, можно писать

$$\psi = (E + C_m C_p^{-1})^{-1} \psi_m. \quad (14.9)$$

Это - классическая формула оптимальной фильтрации конечномерного нестационарного случайного процесса в смысле Колмогорова-Винера. Следовательно, алгоритм (14.3) может быть интерпретирован как результат дополнения классического алгоритма наименьших квадратов оптимальной линейной фильтрацией на основе предварительной информации. Очевидно, проявление по алгоритму (14.3) равносильно может быть интерпретировано и как винеровская фильтрация предоценки спектра $A_p^{-1} b_p$ на основе измерительной информации. Возможность двойкой интерпретации подчеркивает самостоятельность алгоритма (14.3), учитывающего разные составляющие информации на равных правах.

15. Метод априорных уравнений.

Существенная предварительная информация нередко заложена в неформальные соображения экспериментатора. Эта информация накоплена по разным источникам объективных сведений, однако достаточное выявление и описание первичных источников может оказаться

слишком трудным для практического осуществления.

Описанная информация часто отбрасывается как "субъективные предрассудки". Нам представляется, что истинной причиной отбрасывания неформализованной информации чаще всего выступают затруднения в математическом оформлении этой информации, а фраза о "субъективных предрассудках" используется скорее всего как предлог для самооправдания.

В спектроскопии нередки условия, при которых матрица измерительной информации плохо обусловлена и дисперсии координат оценки спектра по одной лишь измерительной информации неприемлемо большие. Дополнение измерительной информации небольшим априорным слагаемым может решительно улучшить оценку спектра. Выразительной иллюстрацией сказанного служат результаты математических экспериментов, проведенных при исследовании методов регуляризации плохо обусловленных задач (см., например, Phillips, 1962, Тихонов, Гласко, 1964). К регуляризации или стабилизации оценки спектра, что будет рассмотрено в третьей главе, приходится прибегать лишь в условиях недостатка объективной предварительной информации. В первую очередь следует в полной мере использовать все имеющиеся объективные сведения независимо от их природы.

Описание нормальной предварительной информации матрицей A_p и вектором b_p не наглядно. Несколько лучше информационной матрицы проглядывается ковариационная матрица $C_p = A_p^{-1}$. Однако непосредственное построение ковариационной матрицы по неформальным соображениям также не просто. Легко допустить даже грубейшие ошибки, нарушающие неотрицательную определенность. К тому же ковариационная матрица не позволяет описать вырожденное распределение, типичное в случае бедной предварительной информации.

Мы предлагаем для математического оформления предварительной информации метод априорных уравнений. Введем такую линейную комбинацию координат спектра $\sigma_p^T \psi$, которая имеет легко интерпретируемый смысл. Если удастся оценить ожидаемое значение f_p и возможные пределы варьирования этой комбинации, то можно записать априорное уравнение

$$\sigma_p^T \psi = f_p \pm \sigma_p, \quad (15.1)$$

которое рассматривается как условная запись априорной функции правдоподобия оценки спектра

$$L(\psi) = \text{сн} \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{g_P^T \psi - f_P}{\sigma_P} \right)^2} \quad (15.2)$$

Для оформления предварительной информации надо записать все возможные независимые априорные уравнения. По априорным уравнениям уже легко найти матрицу A_P и вектор b_P , используя, например, алгоритм накопления (13.2) с начального состояния $A = 0$, $b = 0$. Легко усмотреть, что алгоритм накопления сводится здесь к обычному алгоритму Гаусса составления системы нормальных уравнений по исходным априорным уравнениям. Если число априорных уравнений меньше числа координат спектра, то матрица A_P вырождена. Однако в настоящей задаче невырожденность матрицы A_P вообще не обязательна.

На практике возможны затруднения при определении априорных стандартных отклонений σ_P . В крайнем случае самую грубую оценку дает психологический эксперимент, направленный на облегчение перевода имеющихся неформальных сведений в математическую форму. Можно, например, оценить такое отклонение комбинации $g_P^T \psi$ от значения f_P , которое дало бы основание признать воображаемый экспериментальный результат ψ с 99,7% достоверностью ошибочным, и делить это отклонение на три.

В качестве примера линейных комбинаций, часто допускающих априорную оценку, укажем отдельные координаты спектра ψ_k , первые разности $\psi_{k+1} - \psi_k$ и вторые разности $\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1}$.

Если добавить к измерительным уравнениям априорные уравнения, то получится расширенная система уравнений, содержащая полную информацию о спектре. Решение расширенной системы по алгоритму наименьших квадратов Гаусса-Маркова равносильно оценке спектра с учетом априорной информации согласно алгоритму (14.3). Помимо прикладного значения метод априорных уравнений дополнительно раскрывает сущность основного алгоритма проявления спектра (14.3).

16. Информационная продукция спектрометра.

Допустим, что априорный ансамбль спектров и аппаратный шум оба подчиняются невырожденному нормальному распределению с ковариационными матрицами C_P и D соответственно, а шум и спектр взаимно не коррелированы - $C_{\psi\varphi} = 0$. Используя соотношение $f = G\varphi + u$, получим

$$\left. \begin{aligned} C_f &= GC_P G^T + D \\ C_{f\varphi} &= GC_P \end{aligned} \right\} \quad (16.1)$$

Из формул (12.6) и (16.1) можно вывести простое выражение количества информации в записи о спектре

$$I(f, \varphi) = \log \sqrt{\det (E + GC_P G^T D^{-1})} \quad (16.2)$$

Это количество информации и рассматривается нами как информационная продукция спектрометра на полную запись. Информационная продукция определяется ковариационной матрицей априорного ансамбля спектров, ковариационной матрицей шума и аппаратной матрицей.

Из формул (12.6) и (16.1) легко получить и другое полезное выражение информационной продукции спектрометра

$$I(f, \varphi) = \log \sqrt{\frac{\det C_f}{\det D}} \quad (16.3)$$

равносильное выражению (16.2). Формула (16.3) для близкой задачи получена и проанализована в работах Покровского (Покровский, 1969, Покровский, Тимофеев, 1971).

Изучим теперь процесс накопления количества информации в ходе сканирующего измерения записи. На каждом шагу информация, накопленная предыдущими шагами, выступает как предварительная информация по отношению к предстоящему измерению. Результат одного шага измерения рассматривается как одномерная запись. Соответствующая однострочная аппаратная матрица, которая обозначается g^T , равна текущей строке полной аппаратной матрицы. Единственный элемент ковариационной матрицы шума равен дисперсии ошибок измерения σ^2 .

Согласно (16.2) информационная продукция на один шаг будет

$$\Delta I = \log \sqrt{1 + \frac{g^T C g}{\sigma^2}}, \quad (16.4)$$

где C - текущая ковариационная матрица оценки спектра, полученной в результате предыдущих шагов.

Допустим теперь, что ошибки измерения координат записи статистически независимы (ковариационная матрица шума D диагональна). Тогда количество измерительной информации аддитивно складывается из информационных продукций отдельных шагов и ΔI , вычисляемая по формуле (16.4), интерпретируется как вклад одиночного замера в общую информационную продукцию спектрометра.

Информационный вклад одного замера зависит кроме ошибки σ и нормы вектора g , еще от нормы и ориентации вектора Cg . Формула (16.4) лучше проглядывается, если ее переписать в виде

$$\Delta I = \log \sqrt{1 + \lambda \frac{g^T g}{\sigma^2}}, \quad (16.5)$$

где $\lambda = g^T C g / (g^T g)$ - отношение Рейли. Максимальное значение отношения Рейли равно наибольшему из собственных чисел матрицы C , минимальное - наименьшему из них (см., например, Фаддеев, Фаддеева, 1960). Максимальный информационный вклад достигается при условии, что вектор g пропорционален собственному вектору матрицы C , соответствующему наибольшему собственному значению. Тогда измерение ориентировано наиболее выгодно. К наименее выгодной ориентации можно приблизиться, если выполнить последовательно много измерений при одном и том же векторе g .

Если отдельная точка записи измеряется первой, то ее информационный вклад называется преинформативностью, если последней, то постинформативностью. Постинформативность является основной мерой ценности отдельной точки записи. Анализ постинформативностей может выявить возможность сокращения записи почти без потери информации, выбросив точку с наименьшей постинформативностью. После исключения одной точки постинформативности других точек, как правило, изменяются, и для определения следующей малоинформативной точки прихо-

дится повторить вычисление всех постинформативностей.

Преинформативность точки записи, очевидно, не ниже ее постинформативности. Для плохо построенных аппаратных матриц характерны малые отношения постинформативностей к преинформативностям. Однако эти отношения могут быть малы и в случае хорошей аппаратной матрицы, если только число точек записи превышает число точек спектра.

17. Последовательная обработка наблюдений.

Если матрица предварительной информации положительно определена, то алгоритм накопления информации дает возможность проявить спектр после каждого шага сканирования записи. Непрерывное наблюдение текущего результата измерения на дисплей вычислительного устройства дает, особенно при длительном измерении и многократном сканировании, экспериментатору большие преимущества в управлении ходом эксперимента. Появляется также возможность автоматического управления экспериментом.

При последовательном проявлении спектра мы предполагаем некоррелированность ошибок измерения, что обеспечит информационную независимость отдельных замеров.

Как отмечено уже в предыдущем пункте, каждая точка или координата записи может быть рассмотрена как самостоятельная частная запись f . При этом аппаратная матрица сжимается в одну строку g^T , а матрица D - в одно число σ^2 . Частная функция правдоподобия оценки спектра по рассматриваемой частной записи согласно (12.2-4) будет

$$L(\psi) = N \left(\psi \left| \frac{g g^T}{\sigma^2}, \frac{g f}{\sigma^2} \right. \right). \quad (17.1)$$

Накопление информации начинается с состояния $A = A_p$, $b = b_p$. Формула (13.2), приложенная к одному шагу сканирования, приводит к алгоритму

$$\left. \begin{aligned} A &= A + \frac{gg^T}{\sigma^2} \\ b &= b + \frac{gf}{\sigma^2} \end{aligned} \right\} \quad (17.2)$$

Напомним, что символ := обозначает присваивание в смысле языка АЛГОЛ.

Вычисление промежуточных оценок спектра согласно (14.2) требует обращения матрицы A на каждом шагу, что может оказаться не под силу малым вычислительным машинам, применяемым для "on-line" обработки наблюдений. Затруднительно также одновременное хранение в памяти двух матриц A и A^{-1} .

Оказывается, что накопление матрицы A можно заменить на накопление непосредственно ковариационной матрицы $C = A^{-1}$, что при последовательной обработке в режиме "on-line" намного выгоднее. Для этого алгоритм (17.2) преобразуется по идее пополнения обратной матрицы (Dwyer, Waugh, 1953). Допустим, что матрица A_p не вырождена. В начале вычислений устанавливается $C := C_p = A_p^{-1}$, а пополнение после каждого шага сканирования производится по алгоритму

$$C := C - \frac{Cg(Cg)^T}{\sigma^2 + g^T Cg} \quad (17.3)$$

Теперь можно оценку спектра $\psi = Cb$ найти без обращения матрицы. Отпадает также необходимость резервирования памяти для хранения двух матриц. Поскольку ковариационная матрица симметрическая, то достаточно хранить всего $n(n+1)/2$ элементов этой матрицы и n элементов вектора b .

Алгоритм (17.3) удачно совмещается с пошаговым вычислением количества информации по (16.4).

Изложенный алгоритм оказывается эффективным также при обычной "off-line" обработке наблюдений, если только существует достаточная предварительная информация и ошибки измерения не коррелированы. По сравнению с обычным вычислительным алгоритмом достигается более короткая программа и экономится память, скорость обра-

ботки приблизительно одинакова. Вычислительный опыт показал, что арифметическая точность будет в случае достаточной предварительной информации лучше, чем точность обращения матрицы по быстрому методу Ершова.

В заключение представим полный алгоритм последовательного проявления вместе с расчетом количества информации в виде, непосредственно пригодном для программирования. Алгоритм состоит из трех частей.

1°. Начальная установка

$$\left. \begin{aligned} b &= b_p \\ C &= C_p \\ I &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (17.4)$$

выполняется однократно перед началом измерений.

2°. Шаг накопления

$$\left. \begin{aligned} h &= Cg \\ \gamma &= g^T h \\ I &= I + \frac{1}{2} \log(1 + \gamma/\sigma^2) \\ \gamma &= 1/(\sigma^2 + \gamma) \\ C &= C - \gamma h h^T \\ \gamma &= f/\sigma^2 \\ b &= b + \gamma g \end{aligned} \right\} \quad (17.5)$$

выполняется после каждого замера. В алгоритме использован рабочий вектор h и рабочая переменная γ . Основным объемом вычислений затрачивается на пополнение ковариационной матрицы. Используя здесь еще одну рабочую переменную, можно умножение на γ выполнить однократно для каждой строки матрицы. Если учитывать также симметрию ковариационной матрицы, то шаг накопления включает одну операцию вычисления логарифма, $(3n^2 + 7n + 8)/2$ операции умножения или деления, $(3n^2 + 3n + 4)/2$ операции сложения или вычитания, и служебные операции для обеспечения правильной очередности действия в зависимости от конкретной системы программирования.

3°. Опрос

$$\psi = Cb \quad (17.6)$$

выполняется по мере необходимости после любого шага накопления. Опрос включает n^2 операции умножения и $n(n-1)$ операции сложения.

Алгоритм (17.4-6) при резервировании памяти только для верхнего треугольника ковариационной матрицы реализован в виде стандартной процедуры LSQ МАЛГОЛ-системы ЭВМ Минск-22 (Таммет, 1973в). Вся процедура оказалась короче стандартной процедуры обращения треугольно представленной симметрической матрицы в той же МАЛГОЛ-системе.

18. Проявление при перестановочной информации.

Информация будет названа перестановочной, когда информационные матрицы A_p и A_m взаимно перестановочны и обладают общей системой собственных векторов. Если представить все векторы и тензоры в базисе собственных векторов, то алгоритм проявления записывается проще и легко проглядывается. Особо наглядные результаты получаются в случае, когда аппаратная матрица квадратна, матрицы G , D и A_p попарно перестановочны и $b_p = 0$. Собираем из столбцов собственных векторов матрицу T , в собственный базис приводит тогда преобразование T^{-1} . Обозначим столбцы собственных значений матриц C_m , C_p и G (см. п.14) через c'_m , c'_p и g' , упорядочивая элементы в той очереди, в какой они расположены на диагонали матриц $T^{-1}C_m T$, $T^{-1}C_p T$ и $T^{-1}GT$. Примем еще обозначения $\varphi' = T^{-1}\varphi$, $f' = T^{-1}f$ и $\psi' = T^{-1}\psi$. Путем умножения выражения (14.9) слева на T^{-1} , приходим к алгоритму проявления

$$\left. \begin{aligned} \psi' &= \frac{1}{1 + \frac{c'_m}{c'_p}} \frac{f'}{g'} \\ \psi &= T\psi' \end{aligned} \right\} \quad (18.1)$$

Знак \pm отмечает, что символы векторов-столбцов в соответствующей формуле обозначают не сами векторы-столбцы, а их отдельные коор-

динаты или элементы, причем формула выражает множество n уравнений для каждого элемента по отдельности. Например, формула $a \pm b/c$, где a , b , c n -мерные векторы, выражает n уравнений $a_k = b_k/c_k$. Описанное соглашение относительно символа \pm будет использовано и в дальнейшем.

Алгоритм (18.1) дает наглядную иллюстрацию к фильтрационной интерпретации учета предварительной информации при проявлении. Когда предварительной информации нет, то $c'_p = \infty$ и $\psi' \pm f'/g'$, что непосредственно следует из уравнения $f = G\psi$ в случае отсутствия шума. Множитель $1/(1+c'_m/c'_p)$ хорошо известен из винеровской теории оптимальной фильтрации случайных процессов. Элементы столбца c'_m интерпретируются как квадраты среднеквадратической интенсивности составляющих шума оценки спектра в случае отсутствия предварительной информации. Элементы столбца c'_p являются квадратами среднеквадратических априорных интенсивностей составляющих ожидаемых вариаций спектра. Выражение c'_m/c'_p в (18.1) является квадратичным отношением шум/сигнал для отдельных составляющих. Если ожидаемый сигнал большой и шум малый, то множитель $1/(1+c'_m/c'_p)$ близок к единице, и предварительная информация почти не влияет на оценку составляющей спектра. Если сигнал уступает шуму, то множитель будет малый и соответствующие слагаемые (как правило, высокочастотные) будут при проявлении сильно подавлены.

Проще и нагляднее будет также расчет количества информации. В собственном базисе каждая координата одного вектора может быть коррелирована только с соответствующей ей координатой другого вектора, все остальные корреляционные коэффициенты нули. Описание спектра равносильно n независимым описаниям его координат и количество информации распадается на сумму частных количеств информации по каждой отдельной координате. Частные количества информации могут быть формально объединены в вектор-столбец информации i , так, что

$$I = \sum_k i_k \quad (18.2)$$

Обозначим через c'_f , c'_φ , $c'_{f\varphi}$ столбцы собственных значений матриц C_f , C_φ , $C_{f\varphi}$, имеющих в рассматриваемом случае также об-

щие собственные векторы. Тогда из формулы (12.6) легко получить

$$i \doteq -\log \sqrt{1 - \frac{|c_{f\varphi}^i|^2}{c_f^i c_\varphi^i}} \quad (18.3)$$

Встречающееся здесь отношение $|c_{f\varphi}^i|^2 / (c_f^i c_\varphi^i)$ является квадратом коэффициента корреляции между составляющими спектра и записи.

Общая формула (18.3) призвана лишь демонстрировать известную связь понятия количества информации с понятием корреляции. Поскольку мы предполагаем нормальное распределение случайных величин, то можно исходить из формулы (16.2), откуда получается практический результат

$$i \doteq \log \sqrt{1 + \frac{c_p^i}{d^i} |g^i|^2} \doteq \log \frac{\sqrt{d^i + c_p^i |g^i|^2}}{\sqrt{d^i}}, \quad (18.4)$$

где c_p^i , d^i и g^i - столбцы собственных значений матриц C_p , D и G .

Числитель в формуле (18.4) является стандартным отклонением отдельной составляющей записи в полном ансамбле возможных спектров, а знаменатель - стандартным отклонением той же составляющей при конкретном значении истинного спектра. Следовательно, элемент столбца i равен логарифму отношения неопределенностей рассматриваемой составляющей до и после измерения. Вся информационная продукция спектрометра равна логарифму отношения n -мерных объемов неопределенности в пространстве записей, или, что равносильно, в пространстве спектров, до и после измерения. К той же интерпретации информационной продукции спектрометра можно было бы прийти и в неперестановочной задаче, исходя из формулы (16.3).

19. Циркуляционное проявление.

Алгоритм (18.1) имеет в общем случае скорее всего познавательное значение, поскольку решение проблемы собственных значений требует куда большей вычислительной работы, чем проявление непосредственно по алгоритму (14.3). Свойство перестановочности

приобретает практическое значение лишь при условии, что собственные векторы заранее известны. Такая ситуация встречается, когда аппаратное преобразование, шум и предварительная информация все описываются циркуляционными матрицами, имеющими стандартный собственный базис. Циркуляционные матрицы описаны в приложении к настоящей работе. Соглашения и символы, уговоренные в приложении используются ниже без дополнительных объяснений.

Для компактности записи алгоритмов примем специальное обозначение \tilde{r} для поэлементного отношения предварительной и измерительной информации $\tilde{a}_p / \tilde{a}_m$. Сводя теперь результаты предыдущих пунктов при учете циркуляционной симметрии, приходим к алгоритму циркуляционного проявления

$$\left. \begin{aligned} \tilde{r} &\doteq \frac{\tilde{a}_p \tilde{d}}{\tilde{g}} \\ \tilde{c} &\doteq \frac{1}{1+\tilde{r}} \frac{\tilde{d}}{\tilde{g}} \\ \tilde{k} &\doteq \frac{1}{1+\tilde{r}} \frac{1}{\tilde{g}} \\ \tilde{\psi} &\doteq \tilde{k} \tilde{f} + \tilde{c} \tilde{b}_p \\ \tilde{c}^i &\doteq \tilde{r} \tilde{d} \\ i &\doteq \log \left(1 + \frac{1}{\tilde{k}} \right) \end{aligned} \right\} \quad (19.1)$$

Здесь a_p , a_m , d , g , c , k , c^i - порождающие векторы соответствующих циркуляционных матриц. Вектор k называется векторным проявителем. Координаты оценки спектра, их дисперсии и ковариации вычисляются посредством обратного преобразования Фурье.

Если преобразование Фурье осуществляется по быстрому алгоритму Кули-Тьюки, то арифметический объем циркуляционного проявления будет в сотни и тысячи раз меньше объема проявления непосредственно по общему алгоритму (14.3). Не менее поразительна экономия памяти, так как взамен матриц достаточно хранить лишь порождающие векторы.

При условии $b_p = 0$ оценка спектра будет циркуляционной

сверткой записи с векторным проявителем:

$$\psi = k * f .$$

(19.2)

В случае проявления многих записей одним и тем же проявителем можно однократно вычислить векторный проявитель и в дальнейшем обойтись уже без преобразования Фурье. Потеря в скорости вычислений окупается простотой алгоритма (19.2), которая легко реализуется на простейших цифровых или аналоговых вычислительных устройствах, пригодных для встраивания в спектрометр.

Алгоритм (19.1) допускает наиболее простую и наглядную содержательную интерпретацию по сравнению с рассмотренными ранее. Детальное обсуждение алгоритма доверяется читателю.

Экономия вычислительной работы побуждает использовать метод циркуляционного проявления на практике всегда, когда это не вызывает слишком решительных возражений. Для допустимости циркуляционного проявления требуется, чтобы

- 1) априорные параметры спектра,
- 2) аппаратный образ спектральной линии,
- 3) параметры аппаратного шума

остались инвариантными при циркуляционном сдвиге спектральной шкалы. Под влиянием старой теории, не учитывавшей ни предварительные сведения, ни аппаратный шум, внимание спектрометриста-практика может ошибочно концентрироваться лишь на второе требование. Опыт автора в спектрометрии подвижностей аэроионов показывает, что в этом частном приложении наиболее стеснительным оказывается третье требование. Как только появляется мультипликативная составляющая аппаратного шума, то циркуляционная симметрия нарушается.

20. Неотрицательное проявление.

В большинстве задач спектрометрии изучаются спектры, координаты которых в естественном базисе заведомо неотрицательны. Если результат проявления такого спектра содержит отрицательные координаты, то это может быть лишь следствием игнорирования существующей предварительной информации.

Задача неотрицательного проявления не решима в рамках линей-

ной теории, следовательно, она не относится к нашей тематике. Большое практическое значение задачи заставляет нас в порядке исключения посвятить ей короткий обзор.

Первые результаты, по-видимому, получены в работе (John, 1955), во многом предвосхитившей новейшие исследования в области решения некорректно поставленных бесконечномерных задач. Исследование Джона посвящено обратной задаче теплопроводности.

В последние годы предположение априорной неотрицательности решения привлекло внимание многих исследователей, преимущественно занимающихся задачей обработки изображений (см., например, Biraud, 1969, Jansson, Hunt, Plyler, 1970, Herschel, 1970, MacAdam, 1970, Frieden, 1972). Неотрицательное проявление спектра описано в работе Турчина и Туровцевой (1974).

Априорная неотрицательность спектра может быть естественным способом учтена в рамках метода максимального правдоподобия, общая схема которого излагалась в п.13. Необходимо лишь принять предварительную функцию правдоподобия оценки спектра равной нулю везде, где спектр имеет отрицательные координаты. Такая функция правдоподобия не может быть гауссовой и оценку спектра, обеспечивающую ее максимальное значение, приходится, как правило, искать численными методами теории экстремальных задач.

Простейшую предварительную функцию правдоподобия, обеспечивающую неотрицательную оценку спектра можно записать согласно предложению Турчина и Туровцевой в виде

$$L_p = \text{cn} \cdot \zeta(\psi) \cdot N(\psi | A_p, b_p) , \quad (20.1)$$

где

$$\zeta(\psi) = \begin{cases} 1 & \text{если все } \psi_k \geq 0 \\ 0 & \text{в противном случае} . \end{cases} \quad (20.2)$$

Проявление спектра сводится теперь к отысканию максимума функции

$$L(\psi) = \text{cn} \cdot \zeta(\psi) N(\psi | G^T D^{-1} G + A_p, G^T D^{-1} f + b_p) , \quad (20.3)$$

что может быть выполнено стандартными методами нелинейного программирования. Специальный алгоритм, учитывающий специфику зада-

чи, описан в работе Турчина и Туровцевой (1974).

Неудобство строгого поиска максимума функции (20.3) может побудить спектрометриста-практика обойтись каким-то упрощенным методом, дающим приближенное решение. Самое грубое приближенное решение получается, если проявить спектр по (14.3) и приравнять координаты, которые получили отрицательные значения, нулям. Столь грубое упрощение, сдвигающее без обоснования сумму координат спектра, обычно неприемлемо. Спектральная сумма сохраняется при локальной фильтрации предварительного решения в окрестностях отрицательных координат до устранения отрицательных значений. Метод локальной фильтрации может обеспечить в некоторых прикладных задачах довольно удовлетворительные результаты (Таммет, 1973б). Другой относительно простой приближенный метод - итеративное разрежение спектральной шкалы. При этом те точки, в которых алгоритм (14.3) дает отрицательные значения, исключаются из спектральной шкалы (или соответствующие координаты объявляются априори равными нулю) и вычисления по (14.3) повторяются. Итерация сходится, как правило, через несколько шагов. Однако полученная оценка спектра может не совпадать с точкой истинного максимума правдоподобия. В сказанном убеждает простейший пример: функция $y = 10x_1x_2 - 3(x_1+x_2)^2 - 14x_1 + 6x_2$ имеет максимум $y = 18$ в точке $(-3, -1)$, однако максимум в области неотрицательных координат располагается не в точке $(0, 0)$, где $y = 0$, а в точке $(0, 1)$, где $y = 3$.

Серьезные затруднения встанут при описании точности оценки спектра, полученной методом непосредственной максимизации негауссовой функции правдоподобия. На практике использовалась гауссовая аппроксимация функции правдоподобия в окрестности максимума и ошибки описывались ковариационной матрицей в соответствующем приближении.

III. СТАБИЛИЗАЦИЯ ПРОЯВЛЕНИЯ СПЕКТРА

21. Виды информации.

В предыдущей главе мы говорили об измерительной и предварительной информации, не углубляясь в подробности этих понятий. В математических выкладках явно учитывалась лишь та составляющая предварительной информации, которая описывается внутри математической модели с заданной структурой, не подлежащей модифицированию. Ниже эта составляющая называется внутренней предварительной информацией.

Важная предварительная информация неизбежно вложена уже в математическую структуру модели спектра. Такая информация будет называться структурной или строительной информацией. Хотя мы не в состоянии описать структурную информацию столь же эффективно, как внутреннюю предварительную информацию, мы должны осознать ее роль в практической спектрометрии. Если спектрометрист имеет право сам выбирать модель спектра, структурную информацию нельзя игнорировать. Например, переход от стомерной фракционной модели спектра к трехмерной параметрической модели широкой гауссовой линии означает внесение немалой информации, что требует и конкретного обоснования.

Структурная информация и внутренняя предварительная информация не чужды друг другу. Нет даже резкой границы между отмеченными видами информации, в чем можно убедиться на примере. Пусть первичная спектральная шкала, используемая во внешней модели, бесконечномерна и конечномерная шкала определяется на ней как множество отсчетных точек. Структурная информация, очевидно, зависит от количества отсчетных точек. Нетрудно определить такую внутреннюю предварительную информацию, которая была бы равносильна структурной информации, вносимой при уменьшении числа точек, например, дважды. Для этого достаточно распределить отсчетные точки на пары и принять, что коэффициент корреляции внутри каждой пары равен или

близок к единице. При другом способе каждое нечетное значение определяется априорным интерполяционным уравнением

$$\varphi_k \approx (\varphi_{k-1} + \varphi_{k+1})/2.$$

Информация, вложенная в те предположения относительно внешней структуры математической модели спектра и внутренних связей в ней, которые имеют лишь силу соглашения, ниже называется конвенциональной или условной информацией. Неструктурную внутреннюю составляющую конвенциональной информации мы назовем аппликативной, или прибавочной, информацией. Конвенциональная информация, особенно ее аппликативная составляющая, и служит тем орудием, которое обеспечивает возможность стабилизации проявления спектра.

Та составляющая предварительной информации, которая черпается из природы, будет названа объективной предварительной информацией. Объективная предварительная информация и измерительная информация вместе составляют натуральную информацию, которая противопоставляется конвенциональной информации. Возможна такая интерпретация спектрометрии, где конвенциональная информация полностью будет отнесена к модели спектра, а натуральная информация - к природе. Модель спектра тогда рассматривается как включающая конвенциональные внутренние связи.

Натуральная и структурная информация вместе образуют фундаментальную информацию, которая противопоставляется аппликативной информации.

Описанная классификация информации изображена на схеме рис. 21.1. Информация о шуме рассматривается здесь полностью как предварительная.

При нормальном распределении случайных величин каждая составляющая информации за исключением структурной информации полностью описывается своими информационной матрицей и локализационным вектором. Вид информации указывается индексом у символа матрицы или вектора. Используемые индексы указаны на рис. 21.1.

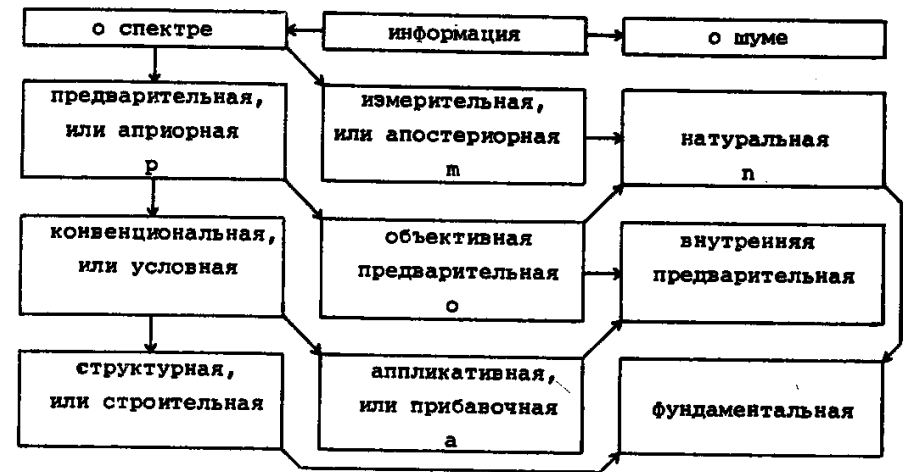


Рис. 21.1. Классификация информации.

22. Восприимчивость информации.

Количество информации в оценке спектра об истинном спектре зависит от многомерного объема той области пространства спектров, куда мы с достаточной достоверностью сможем локализовать оценку измеряемого спектра. В случае нормального распределения минимальная область для фиксированного достоверного уровня ограничивается некоторой изоповерхностью функции правдоподобия. Эта изоповерхность является гиперэллипсоидом, описываемым информационной матрицей A или ковариационной матрицей оценки спектра $C = A^{-1}$. Главные оси эллипсоида направлены по собственным векторам информационной матрицы, длины полуосей обратно пропорциональны квадратным корням ее собственных чисел. Объем эллипсоида, следовательно, обратно пропорционален квадратному корню определителя информационной матрицы. Количественные соотношения вытекают из формулы (16.3) и рассуждений п.18.

Измерительная информационная матрица оценки спектра имеет

вид $G^T D^{-1} G$. Аппаратное преобразование, как правило, сглаживает спектр, и собственные числа матрицы $G^T G$, соответствующие подавляемым высокосеквентным собственным векторам, малы. Если только предварительная информация не меняет положения, то это свойство переносится и на суммарную информационную матрицу. Проявление спектра тогда должно сильно "усиливать" подавленные высокосеквентные слагаемые спектра. При этом настолько же усиливаются и высокосеквентные слагаемые шума, которые не подвергались подавлению аппаратным преобразованием. Говорят, что оценка спектра "разбалтывается" по высокосеквентным собственным направлениям. Эллипсоид неопределенности оценки спектра сильно вытянут по направлениям тех собственных векторов, которым соответствуют малые собственные значения информационной матрицы.

Объем сильно вытянутого узкого эллипсоида может быть малым несмотря на большую длину, что свидетельствует о возможности получения значительного количества объективной информации о спектре. В то же время проекции эллипсоида на все оси исходной координатной системы могут быть большие. Эти проекции пропорциональны квадратным корням диагональных элементов ковариационной матрицы, то есть стандартным отклонениям координат оценки спектра. Исследователь, просматривающий результаты измерения, в полной мере воспринимает лишь центр эллипсоида неопределенности и стандартные отклонения по исходным координатным осям. Количество воспринятой информации описывает в грубом приближении объем нового "субъективного" эллипсоида неопределенности, полуоси которого задаются стандартными отклонениями и главные оси направлены по осям исходной координатной системы. Новый эллипсоид имеет, как правило, по всем направлениям размеры, сравнимые с максимальной длиной вытянутого эллипсоида объективной неопределенности, и его объем соответственно больше. Большая часть существующей информации таким образом может остаться невоспринятой.

Восприимчивость информации при плохо обусловленной измерительной информационной матрице сильно зависит от предварительной информации. В зависимости от ориентации собственных векторов, уже небольшое количество предварительной информации может решительно сократить длину эллипсоида неопределенности, почти не изменяя его

в направлениях, соответствующих большим собственным значениям измерительной информационной матрицы. Пусть эллипсоид вытянут преимущественно только в одном направлении. Тогда k -кратное сокращение длины эллипсоида из-за добавления предварительной информации сопровождается приблизительно k -кратным уменьшением его объема, что описывает фактическое количество добавленной информации. В то же время k -кратно сокращаются все n размеров широкого эллипсоида "субъективной" неопределенности. k^n -кратное уменьшение объема этого эллипсоида описывает прирост количества воспринимаемой информации, намного превышающий количество добавляемой информации. Большинство достигнутого прироста количества воспринимаемой информации получается за счет "освобождения" измерительной информации, остающейся иначе невоспринимаемой для человека. Предварительная информация выступает здесь в роли "катализатора" и ее доля в добытой воспринимаемой информации может остаться малой.

Информация о спектре всегда содержит конвенциональное слагаемое и это слагаемое при определенной свободе допускает некоторую "подрегулировку". Стабилизацией проявления мы назовем такую "подрегулировку" конвенциональной информации, которая направлена на обеспечение хорошей воспринимаемости объективной информации о спектре.

23. Методы регуляризации.

Понятие регуляризации введено Тихоновым (1963) при изучении некорректно поставленных бесконечномерных задач. К таким задачам относится, например, уравнение (11.1). Конечномерная статистическая задача проявления спектра не имеет прямой связи с бесконечномерными задачами математической физики. Однако косвенное влияние идеи Тихонова распространяется и на конечномерные статистические методы.

Тихонов уже в работе (1943), используя результаты Хаусдорфа, выявил в весьма общем виде дополнительные предположения, необходимые для обеспечения корректности обратных задач математической физики. Центральным предположением оказалось требование компактности множества возможных значений искомой функции. В спектромет-

при это означает необходимость выделения ограниченного подмножества возможных спектров из неограниченного полного пространства спектров. Однако если множество возможных спектров и является компактным, уравнение (11.1) все же может не иметь решения в этом компакте по причине ошибок измерения функции $f(y)$.

В работах Тихонова (1963) предложен регуляризующий оператор \hat{R}_δ , зависящий от параметра δ , который при задаче (11.1) должен удовлетворить требованиям:

1°. $\hat{R}_\delta f$ определен для всех записей и всех значений параметра $\delta > 0$.

2°. Если для f существует решение φ (11.1) в обычном смысле, то для любого $\varepsilon > 0$ существует такое δ , что $|f' - f| < \delta \Rightarrow |\hat{R}_\delta f' - \varphi| \leq \varepsilon$ в смысле какой-нибудь определенной нормы.

Задача, которая допускает хотя бы один регуляризующий оператор, называется регуляризуемой в смысле Тихонова. Множество таких задач шире множества корректно поставленных задач.

В упомянутых же работах Тихонова показан способ построения однопараметрического семейства приближенных решения φ_α такого, что, в случае существования точного решения, φ_α при $\alpha \rightarrow 0$ сходится к этому решению.

Метод Тихонова может устранить последствия некорректности задачи, но не способен устранить ее плохой обусловленности. На практике метод Тихонова используется способом, который не имеет обоснования в абстрактной теории (Тихонов, 1963), такую свободу допускает и сам автор метода (Тихонов, Гласко, 1964). В качестве решения задачи выдвигается произвольно выбранный с точки зрения тихоновской теории член семейства φ_{α_0} , хотя явно, что φ_α при $\alpha \ll \alpha_0$ намного отличается от φ_{α_0} и становится "неприемлемым". Это напоминает прекращение процесса численного суммирования числового ряда с неизученной сходимостью по той причине, что продолжение суммирования привело бы к результатам, которые вычислительно просто не нравятся. Известны попытки обоснования выбора параметра регуляризации (см., например, Арсенин, Иванов, 1968). Все такие попытки явно или неявно выходят за рамки первоначальной постановки задачи. В новых работах (см., например, Гордонова, Морозов,

1973, Гордонова, 1973) уже нет бесплодного намерения определить параметр регуляризации на основе только исходной задачи. Для определения параметра явно вводится дополнительное уравнение, которое должно быть наравне с исходным уравнением составлено по конкретным содержательным соображениям. Это уравнение четко ограничивает множество допустимых спектров.

Идея ограничения множества допустимых спектров доведена до крайности в библиотечном методе (см., например, Fuchs, Stechkina, Staroselskii, 1962), при котором заранее определяется конечное множество допустимых спектров и решение задачи сводится к подбору спектра из конечной "библиотеки".

Тихонов (1965) ввел также расширенное понятие некорректности, используемое и в случае конечномерных задач. Это понятие близко к понятию плохой обусловленности и оно учитывает неточность данных. Однако статистическая постановка задач обработки наблюдений представляется нам более естественной и плодотворной.

Когда задача, являющаяся конечномерным аналогом некоторой обратной задачи математической физики, ставится как статистическая задача, то методы, аналогичные регуляризации в смысле Тихонова, называются в литературе методами статистической регуляризации.

Элементы метода статистической регуляризации можно найти уже у Гаусса и Лежандра. Новый подход намечен в работах (Phillips, 1962, Тьюмеу, 1963). В следующих исследованиях заметно влияние тихоновского решения параллельной детеминированной задачи. Суданову и Халфину (1964) принадлежит постановка проблемы корректности задач математической физики с позиции математической статистики. Результаты определенного этапа сведены в обзоре Лаврентьева и Васильева (1966). Здесь выявлена также тесная связь статистической регуляризации с фильтрацией случайных процессов, так, что к истокам метода статистической регуляризации можно причислить классические исследования Колмогорова (1941) и Винера (Wiener, 1949), а также прикладные работы по выделению сигналов на фоне помех (например, Вайнштейн, Зубаков, 1960, Helstrom, 1960).

Первоначальная идея Филлипса, которая была вначале выдвинута без должного обоснования, наиболее детально проанализована и раз-

вита работами Турчина (Турчин, 1967, 1968, Турчин, Нозик, 1969), в которых статистическая регуляризация вырисовывается как самостоятельный вычислительный метод. Сводкой новых результатов является обзорная статья (Турчин, Козлов, Малкевич, 1970).

Понятие статистической регуляризации не имеет четкого определения и оно фактически объединяет разные методы. К статистической регуляризации в том смысле, как этот термин используется в литературе и был использован в настоящем пункте, причисляют также методы проявления спектра, описанные во второй главе настоящей работы. По соображениям, высказанным в п.14, мы во второй главе отказались от использования термина "регуляризация", и будем придерживаться этой точки зрения и в дальнейшем. Терминологическая практика многих авторов почти противоположна нашим взглядам (см., например, Покровский, 1972). Для предотвращения путаницы мы будем, за исключением обзора литературы, вообще отказываться от использования термина "регуляризация" по отношению к конечномерным задачам, заменяя его, где уместно, на термин "стабилизация". Это решение сохраняет для термина "регуляризация" содержание, данное ему в работах Тихонова (1963).

24. Стабилизатор и псевдоаппаратное преобразование.

Полные информационная матрица и локализационный вектор образуются как суммы по натуральной и аппликативной информации $A = A_n + A_a$, $b = b_n + b_a$, так как структурная информация в параметрах функции правдоподобия явно не отражается. Для простоты мы принимаем ниже везде $b_p = 0$, следовательно, $b = G^T D^{-1} f$. Тогда из алгоритма линейного проявления (14.4) выпадает нулевой член и $\psi = K f$. Если при проявлении аппликативная информация не используется, то будем говорить о натуральном проявлении, если используется - то о стабилизированном проявлении. Натуральный проявитель имеет вид (см. п.14)

$$K_n = A_n^{-1} G^T D^{-1}, \quad (24.1)$$

где $A_n = G^T D^{-1} G + A_0$, а стабилизированный проявитель

$$K = (A_n + A_a)^{-1} G^T D^{-1}. \quad (24.2)$$

Стабилизированный проявитель может быть выражен через натуральный соотношением

$$K = S K_n, \quad (24.3)$$

где матрица

$$S = (E + A_n^{-1} A_a)^{-1} \quad (24.4)$$

называется стабилизатором. Стабилизатор преобразует натуральную оценку спектра $\psi_n = K_n f$ в стабилизированную оценку $\psi = K f$

$$\psi = S \psi_n. \quad (24.5)$$

Отсюда стабилизатор может быть интерпретирован как постфильтр для стабилизирующей дообработки натуральной оценки спектра.

Матрица S описывает остаточное преобразование спектра, не устраняемое при стабилизированном проявлении. В том смысле она играет роль аппаратной матрицы для спектрометра, расширенного средстве стабилизированного проявления. Это, пожалуй, наиболее существенная интерпретация стабилизатора. Исходя из последней интерпретации принимается параллельный термин "псевдоаппаратная матрица" для матрицы S . Если не было бы аппаратного шума, то $\psi_n = \varphi$ и соотношение (24.5) превращалось бы в псевдоаппаратное преобразование

$$\psi = S \varphi. \quad (24.6)$$

Псевдоаппаратное преобразование интерпретируется как аппаратное преобразование расширенной измерительно-вычислительной аппаратуры.

Ошибка стабилизированной оценки спектра в некотором смысле описывается ковариационная матрица $C = (A_n + A_a)^{-1}$. Очевидно,

$$C = S C_n, \quad (24.7)$$

где C_n - ковариационная матрица натуральной оценки спектра. Матрица C учитывает наряду с измерительными ошибками и неопределенностью объективных предварительных сведений также неопределенность аппликативных данных согласно информационной матрице A_a .

Поэтому она не описывает фактическое рассеивание результатов проявления повторных записей в предположении $b_a = 0$. Соотношение ковариационных матриц фактических рассеиваний оценок спектра при повторных измерениях S' и S'_n вытекает из (24.5):

$$S' = S'_n S'^T. \quad (24.8)$$

25. Разновидности стабилизации.

Наше рассмотрение ограничивается методами стабилизации проявления посредством аппликативной информации в рамках модели с предфиксированной структурой. Однако для стабилизации можно использовать и структурную информацию. Старейший алгоритм стабилизации - принцип Гаусса ограничения числа координатных функций в методе наименьших квадратов - относится к методам стабилизации посредством структурной информации. Как показано на примерах п.21, аппликативная информация может быть практически равносильной некоторой структурной информации, поэтому из наших результатов возможно вывести некоторые следствия и о структурной стабилизации.

Стабилизатор взаимнооднозначно связан с аппликативной матрицей A_a . Преобразование в одну сторону описывает формула (24.4), преобразование в другую сторону - обратная формула

$$A_a = A_n (S^{-1} - E). \quad (25.1)$$

Отсюда вытекает, что взамен матрицы A_a можно непосредственно определить стабилизатор (псевдоаппаратную матрицу). Такой способ мы назовем мультипликативным включением аппликативной информации или мультипликативной стабилизацией. В случае непосредственного определения матрицы A_a будем говорить об аддитивном включении аппликативной информации или аддитивной стабилизации. Два математически равносильные способа стабилизации существенно отличаются в вычислительном аспекте и в интерпретации. Двойственная интерпретация поможет глубже проникнуть в сущность стабилизированного проявления спектра.

К идее мультипликативной стабилизации можно прямо подойти

следующим образом. В случае недостатка информации натуральная оценка спектра утопает в шумах. При этом естественное решение - отказ от намерения невыполнимого полного проявления спектра, при котором истинная δ -линия должна и проявиться, как δ -линия. Взамен этого ставится цель неполного проявления, при котором удовлетворительным считается оценка δ -линии в виде достаточно узкой диффузной линии. Комплект таких диффузных линий составляет по столбцам псевдоаппаратную матрицу. Посредством выбора ширины диффузных линий можно достичь разумного отношения шума к спектру.

При аддитивной стабилизации матрица A_a может быть построена методом априорных уравнений. Соответствующие априорные уравнения уместно называть конвенциональными уравнениями. Полнота системы конвенциональных уравнений и невырожденность матрицы A_a не обязательны. Нередко даже желательно, чтобы матрица A_a была вырожденной и не действовала на результаты проявления в направлениях, обеспеченных натуральной информацией.

Рассмотрим теперь частный случай, когда размерности пространства спектров и пространства записей равны, и определим преобразователь S' уравнением

$$K_n S' = S K_n. \quad (25.2)$$

При условии $S' = S$ будем говорить о перестановочной стабилизации. Перестановочный стабилизатор имеет всего n степеней свободы. Поэтому алгоритмы выбора стабилизатора из множества перестановочных стабилизаторов менее трудоемки по сравнению с общими алгоритмами.

Стабилизация проявления спектра имеет разные интерпретации в зависимости от того, каким представляется порядок операции:

$$\left. \begin{aligned} \psi &= K_n (S' f) \\ \psi &= (S K_n) f \\ \psi &= S (K_n f) \end{aligned} \right\} \quad (25.3)$$

В первом случае говорят о префильтрации записи, во втором - о стабилизации проявителя, в третьем - о постфильтрации оценки

спектра. Все три разновидности алгоритма (25.3) формально равносильны, однако в вычислительной практике предпочтение отдается второму из них. Причина в том, что матрица A_n , как правило, плохо обусловлена, что и является одной из побудительных причин стабилизации. Поэтому определение натурального проявителя требует повышенной вычислительной точности. Если стабилизация свою цель выполняет, то матрица $A_n + A_a$ лучше обусловлена и непосредственное вычисление стабилизированного проявителя намного легче, чем вычисление отдельных его сомножителей.

Мы до сих пор еще не оговорили, каким требованиям должна удовлетворить матрица, выдаваемая за стабилизатор. Ковариационная матрица стабилизированной оценки в смысле (24.7) существует, и аппликативная информация допускает описание при помощи вероятностного распределения в случае, когда аппликативная матрица (25.1) получается неотрицательно определенной и симметрической. Если матрица S удовлетворяет изложенному требованию, то будем говорить об ординарной стабилизации и ординарном стабилизаторе. Если ординарность не требуется, то будем говорить об обобщенной стабилизации.

Если произведение двух симметрических матриц является также симметрической, то сомножители обязательно престановочны. Поэтому ординарный стабилизатор может быть симметрическим лишь при условии, что он престановочен с натуральными ковариационной и информационной матрицами.

Хотя неординарная стабилизация допускает бедную интерпретацию по сравнению с ординарной и воспринимается в некотором смысле как формальный прием, она находит довольно много приложений на практике. Например, классический способ постфильтрации спектра путем усреднения троек соседних точек с равными весами относится к методам обобщенной стабилизации. Действительно, если $C_n = E$, то $C = S$, а трехдиагональная матрица с равными элементами на всех трех диагоналях имеет как положительные, так и отрицательные собственные значения. В случае неординарной стабилизации существует ковариационная матрица оценки спектра в смысле (24.8), формально можно вычислить также матрицу A_a и провести вычисления

по схеме аддитивной стабилизации. Если интерпретация результатов удовлетворительна для конкретной физической задачи, то мы не видим причины отказа от обобщенных методов стабилизации, если последние оказываются выгодными на практике.

На практике спектрометрии запись спектрометра нередко без всякой обработки воспринимается как оценка спектра. В п.11 это отмечалось как тривиальное проявление. Легко усмотреть, что тривиальное проявление равносильно проявлению спектра со стабилизатором, равным аппаратной матрице. Стабилизатор, соответствующий тривиальному проявлению, не обязательно ординарен (пример - прямоугольная аппаратная функция). Очевидная законность тривиального проявления - еще один аргумент против запрета неординарной стабилизации.

26. Проблема оптимальной стабилизации.

Стабилизация проявления посредством аппликативной информации всегда означает искажение оценки спектра по сравнению с оценкой, основанной на фундаментальной информации. Аппликативная информация может быть рассмотрена как фантазия исследователя, а стабилизация - как умышленная коррекция результатов в соответствии с субъективными желаниями исследователя. С изложенной точки зрения, стабилизация - это почти что фальсификация результатов, и уже самая постановка задачи оптимальной стабилизации может вызвать сомнения. Такая задача на первый взгляд ассоциируется с задачей оптимального поведения жулика, который старается извлечь из лжи максимальную пользу.

Существуют не менее веские соображения в оправдание стабилизации. Ложь заслуживает осуждения лишь тогда, когда существует возможность обойтись без лжи. При измерении лжи, заключающейся в ошибках измерения, обойти нельзя. Как объяснено уже в п.22, человек воспринимает эту ложь в преувеличенном виде, если только ошибки координат оценки спектра сильно скоррелированы между собой. Добавление аппликативной информации может резко сократить увеличение лжи, происходящей из ошибок измерения. Получается, что в результате включения дополнительной лжи общее количество воспри-

нятой исследователем лжи может уменьшаться.

В п.21 мы увидели, что аппликативная информация в некотором смысле равносильна структурной, поэтому она является в определенном смысле не более порочной, равно как и структурная информация.

Интерпретация стабилизированного проявления как неполного проявления и особенно пример тривиального проявления как стабилизированного проявления также убедительно отвергают общие упреки к идее стабилизации.

Приведенные соображения говорят за то, что на стабилизацию проявления следует смотреть как на вполне законное действие, если только при этом соблюдаются какие-то разумные нормы.

Задача оптимальной стабилизации проявления спектра и в более общем виде поставленная задача оптимальной оценки спектра в определенном смысле равносильны. Решение задачи распадается на два этапа. На первом этапе составляется количественный критерий качества оценки спектра. На втором этапе отыскивается стабилизатор или непосредственно оценка спектра, доставляющие выбранному критерию максимальное значение.

Принципиальные проблемы оптимальной стабилизации решаются на первом этапе. Факторов, которые следовало бы учитывать при составлении критерия качества, много. Отметим следующие:

- шум оценки спектра,
- смещение оценки спектра из-за аппликативной информации,
- допустимость оценки спектра по фундаментальной информации,
- количество аппликативной информации,
- гладкость оценки спектра,
- конфигурация псевдоаппаратной матрицы (функции),
- трудоемкость обработки наблюдений.

Некоторые из перечисленных факторов явно взаимосвязаны, а сам список не претендует на полноту.

Чтобы получить критерий оптимальности, следует предварительно определить количественную меру каждого фактора, а затем построить функцию цели, зависящую от всех факторов так, что она монотонно отражает качество результата проявления. Оптимальное проявление сводится к отысканию экстремума функции цели при варьировании

оценки спектра. В случае нормального распределения вероятностей мы будем использовать алгоритм (14.3) и варьировать аппликативную информацию.

Количество воспринимаемой информации определяется шумом оценки спектра. Подавление шума является основной частной целью стабилизации. Традиционной мерой воспринимаемого шума используется след ковариационной матрицы оценки спектра. Эта мера имеет силу соглашения и она широко используется из-за простоты. Равное внимание ко всем координатам спектра не всегда оправдано. Описание шума следом ковариационной матрицы отличается от геометрических соображений п.22. Обе концепции лишены строгого обоснования и обеим присущи свои недостатки. Нам кажется, что сумма дисперсии все же лучше подходит практической мерой в типичных условиях, нежели произведение стандартных отклонений.

Как простейшая мера смещения может быть рассмотрена норма вектора $\psi - \psi_n$, где ψ_n - несмещенная натуральная оценка спектра. Это внешне похоже на определение меры шума, однако здесь имеется принципиальное различие: шум случайный и его конкретная реализация неизвестна, а смещение $\psi - \psi_n$ известно, но его статистическое распределение может остаться неопределенным.

Проблема допустимости оценки будет подробнее изучена в п.28. Количество аппликативной информации можно вычислить при помощи предписаний п.16.

В литературе по методам регуляризации некорректно поставленных задач основное внимание уделяется гладкости оценки спектра. Практический успех методов, основанных на требовании гладкости решения, объясняется, по-видимому, тем, что при этом автоматически подавляется и шум оценки. Локальной мерой негладкости принимается, как правило, квадрат разделенной разности или производной некоторого порядка, интегральной мерой - сумма или интеграл через локальную меру. Другой, менее произвольной мерой гладкости является энтропия спектра, вычисляемая на основе интерпретации спектра как распределения вероятностей. Принцип максимума энтропии имеет глубокое содержание (см., например, Жауев, 1968) и энтропия может быть самостоятельно включена в список факторов, учитываемых при стабилизации. Возможность основания стабилизации на принципе

максимума энтропии изучена в статье (Frieden, 1972).

Описание качества конфигурации столбцов псевдоаппаратной матрицы относится на практике стабилизированного проявления спектра к наиболее трудным проблемам. Определяющими будут здесь соображения, связанные с конкретными физическими приложениями. Обычно столбец, изображенный на рис.26.1.а считают "плохим", а изображенный рядом - "хорошим".

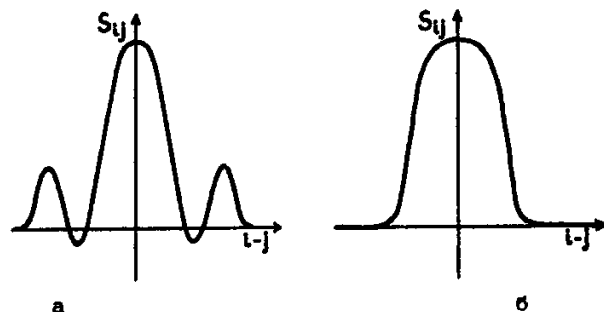


Рис. 26.1. "Плохой" (а) и "хороший" (б) столбцы псевдоаппаратной матрицы, или псевдоаппаратные функции.

Побочные максимумы могут привести к ложной идентификации структуры линейчатого спектра. В качестве примера автор ссылается на собственный опыт (Таммет, 1973 б). В приложении к упомянутой статье приведен пример стабилизированной оценки спектра отрицательных аэроионов, где отчетливо выделяется низкий пик при подвижности $2,2 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Последнее значение близко к подвижности ионов O_2 , измеренной в чистых условиях (Maushart, 1958). Это совпадение было принято в основу существенной рабочей гипотезы. Лишь после долгого заблуждения выяснилось, что псевдоаппаратная функция имела тип рис. 26.1.а и описываемая линия - всего искусственный сателлит соседней высокой линии. Возможные последствия "плохой" псевдоаппаратной функции убедительно демонстрируют примеры, приведенные в работе (Horlick, 1972).

Конкретное определение функции цели, очевидно, возможно лишь в условиях конкретной задачи при учете способа использования

оценки спектра и закономерностей субъективного восприятия информации, а универсального рецепта оптимальной стабилизации вообще не существует.

27. Минимизация сводной ошибки.

Постараемся сконструировать такую условную скалярную меру ошибки измерения спектра, которая учитывала бы как случайный шум, так и систематическое смещение результата из-за стабилизации.

Поскольку мы собираемся рассматривать действие аппликативной информации как систематический фактор, то мы должны описать шум ковариационной матрицей (24.8). Примем, согласно традиции, скалярной мерой шума след этой матрицы

$$\epsilon^2 = \text{Sp}(SA_n^{-1}S^T) . \quad (27.1)$$

Скалярная мера смещения должна быть определена по какой-нибудь норме вектора $\psi - \psi_n = (S - E)\psi_n$, где ψ - стабилизированная оценка, а ψ_n - несмещенная натуральная оценка, определенная по алгоритму (14.3) с учетом только объективной предварительной информации. Принятое нами описание шума (27.1) исходит из точки зрения спектрометриста, рассматривающего графики на глаз. С этой же точки зрения за меру смещения может быть принята величина

$$u^2 = (\psi - \psi_n)^T (\psi - \psi_n) = \psi_n^T (E - S)^T (E - S) \psi_n . \quad (27.2)$$

Параллельно будет использована и другая мера смещения

$$\chi^2 = (\psi - \psi_n)^T A_n (\psi - \psi_n) = \psi_n^T (E - S)^T A_n (E - S) \psi_n , \quad (27.3)$$

ориентированная на случай углубленного анализа результатов. Мера смещения χ^2 будет подробнее обсуждена в следующем пункте.

Опираясь на интуитивные соображения спектрометриста, образуем два критерия сводной ошибки

$$y = \epsilon^2 + \lambda u^2 \quad (27.4)$$

$$z = \epsilon^2 + \lambda \chi^2 , \quad (27.5)$$

где произвольный весовой множитель λ служит для приспособления

введенных величин с возможными неформальными соображениями о качестве проявления.

Сводная ошибка рассматривается нами как условная величина, это понятие не претендует на глубокое содержание.

Нашей задачей теперь будет отыскание такого стабилизатора, который минимизировал бы сводную ошибку. Это не должно быть рассмотрено как претензия на решение проблемы оптимальной стабилизации. В крайнем случае получаемое решение будет оптимальным в узком частном смысле, притом и этот частный смысл определен довольно произвольными соглашениями.

Поставленная задача могла бы быть решена по общим алгоритмам теории экстремальных задач, если бы только большая размерность не причиняла бы излишней трудоемкости. Особо трудоемка эта задача при требовании ординарности стабилизатора.

Решительное уменьшение вычислительного труда возможно лишь при условии сокращения размерности пространства поиска. Отметим две возможности - построение параметрической модели, что будет обсуждено в п.29, и ограничение множества допустимых стабилизаторов перестановочными стабилизаторами.

Если матрица S по предположению перестановочна с A_n , то формальное упрощение задачи достигается преобразованием T^{-1} , где матрица T собрана по столбцам из собственных векторов матрицы A_n . Ординарный перестановочный стабилизатор должен быть симметрическим, что и в дальнейшем предполагается. Обозначим собственные значения матриц A_n и S через a_k^i и s_k^i , а элементы вектора-столбца $T^{-1}\psi_n$ через ψ_k^i . Все введенные величины могут быть определены в поле вещественных чисел, однако для обеспечения удобства в случае циркуляционной симметрии вектор ψ^i рассматривается как комплексный вектор. Используя свойство инвариантности следа матрицы, найдем

$$y = \sum_k \frac{s_k^i{}^2}{a_k^i} + \lambda (1 - s_k^i)^2 |\psi_k^i|^2, \quad (27.6)$$

$$z = \sum_k \frac{s_k^i{}^2}{a_k^i} + \lambda a_k^i (1 - s_k^i)^2 |\psi_k^i|^2. \quad (27.7)$$

Суммы независимых положительных слагаемых минимизируются почленно. Минимум достигается при условии

$$s_k^i = \frac{\lambda a_k^i |\psi_k^i|^2}{1 + \lambda a_k^i |\psi_k^i|^2} \quad (27.8)$$

для y и

$$s_k^i = \frac{\lambda a_k^i{}^2 |\psi_k^i|^2}{1 + \lambda a_k^i{}^2 |\psi_k^i|^2} \quad (27.9)$$

для z . Найденные стабилизаторы оказываются неотрицательно определенными и автоматически удовлетворяют требованиям ординарности.

Определение (27.1) и следующие за ним выводы действительны только в случае невырожденной информационной матрицы A_n . Однако результаты (27.8), (27.9) оказываются действительными и в случае вырожденной матрицы A_n . В этом легко убедиться, если изучить предельный переход $a_k^i \rightarrow 0$ для некоторого k . При $a_k^i = 0$ стабилизация означает полное гашение данных в направлении соответствующего собственного вектора.

В вышеизложенном мы не обратили внимания на допустимость стабилизатора по фундаментальной информации. Проверка допустимости стабилизатора изучается в следующем пункте. Если найденный стабилизатор оказывается недопустимым, то следует метод минимизации сводной ошибки заменить на метод предельно допустимой стабилизации.

Мы не обратили внимания также на качество конфигурации столбцов получаемой псевдоаппаратной матрицы. Плохая конфигурация может свести на нет практическую ценность полученных результатов. Поэтому дополнительная проверка конфигурации псевдоаппаратной матрицы на практике обязательна. В неудачной ситуации естественно отыскать выход в минимизации сводной ошибки при наложении специальных ограничений на стабилизатор. Вставшие при этом вычислительные проблемы не изучены. На практике, очевидно, вычислительные затруднения заставляют прибегать к параметрическим методам, допускающим наиболее простой контроль конфигурации псевдоаппаратной матрицы.

В заключение представим простейший контрпример против гипотезы, что оптимальный перестановочный стабилизатор является оптимальным и в общем случае. Пусть

$$A_n = \begin{pmatrix} 21 & -12 \\ -12 & 14 \end{pmatrix}, \quad \psi_n = \begin{pmatrix} 0,5 \\ 1 \end{pmatrix},$$

тогда

$$T = \begin{pmatrix} 0,6 & 0,8 \\ 0,8 & -0,6 \end{pmatrix}, \quad a_n^i = \begin{pmatrix} 5 \\ 30 \end{pmatrix}, \quad \psi_n^i = \begin{pmatrix} 1,1 \\ -0,2 \end{pmatrix},$$

для нестабилизированной оценки $y = z = 0,233$. Рассмотрим сводные ошибки y и z при $\lambda = 1$. Согласно (27.8) найдем

$$s' = \begin{pmatrix} 0,858 \\ 0,545 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 0,658 & 0,150 \\ 0,150 & 0,746 \end{pmatrix}, \quad y = 0,190,$$

согласно (27.9) найдем

$$s' = \begin{pmatrix} 0,968 \\ 0,973 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 0,971 & -0,002 \\ -0,002 & 0,970 \end{pmatrix}, \quad z = 0,226.$$

В то же время непостоянный ординарный стабилизатор

$$S = \begin{pmatrix} 0,046 & 0,459 \\ -0,190 & 1,070 \end{pmatrix}, \quad A_a = \begin{pmatrix} 127,819 & -63,068 \\ -63,068 & 31,291 \end{pmatrix}$$

обеспечит $y = 0,169$ и $z = 0,165$.

28. Предельно допустимая стабилизация.

Оценка спектра называется допустимой на уровне значимости q , если статистическая гипотеза, согласно которой неизвестный истинный спектр φ точно равен оценке ψ , не может быть отвергнута проверкой на основе натуральной информации против класса всевозможных альтернатив на уровне значимости q . Пусть натуральная информация описывается нормальной функцией правдоподобия с информационной матрицей A_n . Если $\varphi = \psi$, то статистика χ^2 , определенная по формуле (27.3), распределена по закону χ^2 с n степенями свободы

$$P\{\chi^2 < \xi\} = F_{\chi^2}^{(n)}(\xi) = \frac{1}{2^{n/2} \Gamma(\frac{n}{2})} \int_0^{\xi} x^{\frac{n}{2}-1} e^{-\frac{x}{2}} dx. \quad (28.1)$$

Гипотеза $\varphi = \psi$ отвергается и оценка ψ объявляется недопустимой на уровне значимости q , если только

$$F_{\chi^2}^{(n)}(\chi^2) > 1 - q. \quad (28.2)$$

Условие допустимости оценки можно записать и в виде

$$\chi^2 \leq \chi_{n,q}^2, \quad (28.3)$$

где критическое значение $\chi_{n,q}^2$ определяется как решение уравнения

$$F_{\chi^2}^{(n)}(\chi_{n,q}^2) = 1 - q. \quad (28.4)$$

Описанный χ^2 -критерий является асимптотически равномерно наиболее мощным (см., например, Леман, 1959), то есть, если гипотеза $\varphi = \psi$ не отвергается χ^2 -критерием, то она не может быть отвергнута любым критерием на том же уровне значимости q при проверке против класса всевозможных альтернатив. Строго говоря, последнее утверждение действительно лишь в предельном случае больших размерностей пространства спектров, однако мы не знаем конкретного критерия, который превосходил бы в нашей задаче χ^2 -критерий.

На основе высказанного мы признаем оценку спектра ψ допустимой на уровне значимости q тогда, когда условие (28.3) выполняется.

Стабилизатор S называется допустимым на уровне значимости q , если стабилизированная оценка $S\psi_n$ является допустимой на том же уровне значимости. Очевидно, стабилизатор, допустимый в случае одной записи, может оказаться недопустимым при другой, и наоборот.

Критерий χ^2 является инвариантом линейных преобразований. Если натуральная информация извлекается только из измерения, то значение χ^2 можно вычислить и в пространстве записей:

$$\chi^2 = (G\psi - f)^T D^{-1} (G\psi - f). \quad (28.5)$$

Равносильность формул (28.5) и (27.3) легко непосредственно проверяется.

Попробуем теперь отыскать среди стабилизаторов, допустимых на уровне значимости q , такой стабилизатор, который обеспечит наименьшее возможное значение шумовой ошибки ϵ^2 (27.1). Очевидно, этот минимум достигается на границе допустимой области, где $\chi^2 = \chi_{n,q}^2$. Поэтому ограничение (28.3) можно заменить условием

$$\chi^2 = \chi_{n,q}^2 \quad (28.6)$$

Общее решение поставленной задачи исключительно трудоемко. Упрощение достигается, как и раньше, при ограничении множества допустимых стабилизаторов перестановочными стабилизаторами. Используем обозначения, определенные в предыдущем пункте. Минимизируемая величина записывается в виде

$$\epsilon^2 = \sum_k \frac{s_k'^2}{a_k'} \quad (28.7)$$

а ограничение в виде

$$\sum_k a_k' (1 - s_k')^2 |\psi_k'|^2 = \chi_{n,q}^2 \quad (28.8)$$

Задача теперь легко решается методом неопределенных множителей Лагранжа, причем повторяются вычисления, приведенные в предыдущем пункте. Результат совпадает с (27.9), где теперь множитель λ не является произвольным, а должен быть вычислен как лагранжевый множитель из уравнения

$$\sum_k \frac{a_k' |\psi_k'|^2}{(1 + \lambda a_k'^2 |\psi_k'|^2)^2} = \chi_{n,q}^2 \quad (28.9)$$

29. Параметрические методы стабилизации.

Общие алгоритмы оптимальной стабилизации трудоемки по причине большого числа степеней свободы. Решительное упрощение обеспечивает переход к параметрической модели аппликативной информации. При этом общая структура аппликативной информации предварительно определяется на основе неформальных соображений, а свободными

оставляется всего один или несколько параметров. Если при описанном подходе непосредственно конструируется зависящая от параметра аппликативная матрица A_a , то уместно говорить об аддитивной параметрической стабилизации, а если зависящий от параметра стабилизатор S - то о мультипликативной параметрической стабилизации.

Почти все вычислительные методы, причисляемые в литературе к статистической регуляризации и использующие аппликативную информацию, относятся к методам однопараметрической стабилизации. При аддитивной стабилизации аппликативная матрица конструировалась без исключения в виде

$$A_a = \alpha \Omega \quad (29.1)$$

где Ω - заданная симметрическая неотрицательно неопределенная матрица и α - параметр.

Матрица Ω обычно конструируется так, что $\psi^T \Omega \psi$ оказывается некоторой мерой негладкости спектра. Требуемый вид матрицы легко установить при помощи метода конвенциональных уравнений.

Параметр α может быть выбран, например, так, чтобы достигался заданный уровень допустимости стабилизатора. Этот рецепт включает соображения Филлипса. Легко найти и такое α , которое обеспечит минимум сводной ошибки. Возможны и другие подходы. Математические методы отыскания значения параметра, обеспечивающего требуемое значение произвольного функционала от оценки спектра, изучены в работе Гордоновой и Морозова (1973). Интересно отметить, что на этой стадии решения задачи статистический и детерминистский подходы сходятся.

Турчин (см., например, Турчин, Нозик, 1969) предложил принцип, согласно которому аппликативная информация фиксируется гипотезой априорной равновероятности разных значений параметра α . Принцип Турчина может быть интерпретирован как "подгонка" аппликативной информации к натуральной информации (см. Турчин, Козлов, Малкевич, 1970). Это может привести к иллюзии "объективного" оттенка аппликативной информации и даже к иллюзии черпания аппликативной информации из природы. Аппликативная информация по определению не может быть объективной и говорить об "истинном" значении параметра α можно лишь в случае, когда математический аппарат

Турчина используется не для стабилизации, а для учета объективной предварительной информации. Принцип Турчина может быть описан как постулирование фиксированной негауссовской предварительной информации, заданной априорным распределением вероятностей спектра

$$p_{\psi}(\xi) = \text{сн} \int_0^{\infty} N(\xi | \alpha\Omega, 0) d\alpha. \quad (29.2)$$

Замечательным свойством распределения (29.2) является его инвариантность при умножении матрицы Ω на постоянный множитель. Последняя формулировка, которая приведена в статье (Турчин, Туровцева, 1974) как исходное определение, весьма существенна для правильного толкования принципа Турчина.

При аддитивной параметрической стабилизации трудно поддается контролю качество конфигурации столбцов псевдоаппаратной матрицы. Полный контроль конфигурации обеспечит мультипликативная параметрическая стабилизация, при которой конфигурация столбцов псевдоаппаратной матрицы задается непосредственно, оставляя свободным лишь параметр ширины. Здесь затруднения может вызывать контроль ординарности стабилизации. Ординарность наиболее легко контролируется при перестановочной стабилизации. Мультипликативная параметрическая стабилизация наиболее удобна в циркуляционной задаче проявления, что будет рассмотрено в следующем пункте.

30. Стабилизация циркуляционного проявления.

В случае циркуляционной симметрии сильно упрощается вычисление по алгоритмам, использующим собственные векторы и собственные числа матриц. Если спектр проявляется по алгоритму $\tilde{\psi} \doteq \tilde{k}\tilde{f}$ (см. п.19), то принимается

$$\tilde{k} \doteq \tilde{s}\tilde{k}_n \quad (30.1)$$

где \tilde{s} и \tilde{k}_n - фурье-образы порождающих векторов стабилизатора и натурального проявителя. Соотношение (30.1), очевидно, не является универсальным. Принимая это соотношение, мы ограничим класс допустимых стабилизаторов перестановочными стабилизаторами. Отвержение предположения перестановочности означало бы отказ от возможности использования фурье-техники проявления и в случае, когда

аппаратная матрица и шум циркуляционны. Здесь трудоемкость обработки наблюдений, упомянутая в п.26 среди аргументов критерия качества алгоритма стабилизированного проявления, играет определяющую роль - большой выигрыш в трудоемкости на практике почти всегда предпочитается возможному небольшому выигрышу в других факторах.

Результаты п.27 и п.28 по перестановочной стабилизации непосредственно приложимы в циркуляционной задаче. Для перехода к символике, используемой в приложении по циркуляционным матрицам, достаточно заменить в формулах апостроф на тильду, отмечающую фурье-образ порождающего вектора, и выражение $|\psi_k'|^2$ на $|\tilde{\psi}_k|$.

Особый интерес при циркуляционной задаче представляет метод мультипликативной параметрической стабилизации, который обеспечит удобный контроль за конфигурацией порождающего вектора псевдоаппаратной матрицы. Рассмотрим ниже некоторые примеры, используя для математического удобства непрерывную спектральную шкалу. В простейшем случае, когда существуют только измерительная и аппликативная информация, алгоритм стабилизированного проявления имеет вид

$$\tilde{\psi}(\omega) = \frac{\tilde{s}(\omega)}{\tilde{g}(\omega)} \tilde{f}(\omega), \quad (30.2)$$

где \tilde{g} и \tilde{s} - фурье-образы аппаратной функции и стабилизатора, представленные на частотной шкале $\{\omega\}$. Непрерывная шкала рассматривается нами здесь как аппроксимация конечномерной шкалы большой размерности, обеспечивающая наглядную запись формул без явной зависимости от конкретного числа измерений.

Примеры стабилизаторов приведены в таблице 30.1.

Наиболее популярен прямоугольный стабилизатор, хотя получаемая конфигурация псевдоаппаратной функции не выдерживает критики. Прямоугольная стабилизация обычно называется выделением устойчивой, или информативной, составляющей разложения спектра по выбранному базису, и ей посвящена обширная литература, которую мы не способны перечислить. Отметим лишь результат Покровского (1972), который показал, что прямоугольная регуляризация или стабилизация и в случае игнорирования конфигурации псевдоаппаратной функции в

Таблица 30.1

Стабилизаторы, зависящие от параметров

фурье-образ $\tilde{v}(\omega)$		псевдоаппаратная функция $v(x)$	
если $ \omega/\omega_0 < 1$ то 1 иначе 0		$\frac{\omega_0}{\pi} \frac{\sin \omega_0 x}{\omega_0 x}$	
$e^{-(\omega/\omega_0)^2}$		$\frac{\omega_0}{2\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\omega_0^2}{4} x^2}$	
если $ \omega/\omega_0 < \gamma$ то $1 - \frac{(\omega/\omega_0)^2}{\gamma}$ иначе если $ \omega/\omega_0 < 1$ то $\frac{(1 - \omega/\omega_0)^2}{1-\gamma}$ иначе 0	$\delta=0$ 	если $x=0$ то $\frac{(1+\gamma)\omega_0}{3\pi}$ иначе $2(\sin \gamma \omega_0 x - \gamma \sin \omega_0 x) / (\pi\gamma(1-\gamma)\omega_0^2 x^3)$	$\delta=0$
	$\delta=\frac{1}{2}$ 		$\delta=\frac{1}{2}$
	$\delta=1$ 		$\delta=1$

определенном смысле уступает другим методам.

В вычислительной практике прямоугольная стабилизация используется с времен Гаусса и Лехандра. При аппроксимации функции по методу наименьших квадратов множество координатных функций, как правило, подбирается так, что остаточная невязка близка к экспериментальной ошибке данных. В нашей терминологии это означает стабилизацию на уровне допустимости 50%. Тот факт, что метод эмпирического ограничения числа координатных функций, а также близкий к нему метод подбора шага конечномерной шкалы, равносильны регуляризации или стабилизации, отмечен также Леоновым (1972).

Гауссовый стабилизатор гарантирует хорошую конфигурацию псевдоаппаратной функции, но обычно недостаточно круто срезает высшие гармоники. Это заметнее всего в случае, когда и аппаратная функция гауссова.

Последний, наиболее подробно описанный в таблице стабилизатор подсказан успехом сплайн-окна в численном фурье-анализе (Parzen, 1961). Описываемый стабилизатор является двухпараметрическим. Хорошая конфигурация псевдоаппаратной функции гарантирована при $\gamma < 0,5$. Если выбрать фиксированное значение $\gamma = 0,5$, оставляя лишь один свободный параметр, то наибольший отрицательный выброс псевдоаппаратной функции достигает 4%, а первый побочный максимум 0,5% от высоты центрального максимума.

В заключение обращаем внимание на близость мультипликативного метода проявления физического спектра к методу корреляционного и спектрального окон численного фурье-анализа. В частном случае циркуляционного или разностного проявления аналогия дойдет до совпадения выкладок, и что важнее, многих содержательных соображений. Оставив проведение конкретных параллелей заботой читателя, отсылаем его к руководству (Дженкинс, Ваттс, 1969), отличающимся ярко выраженным чувством реальности, столь дефицитным и столь ценным для физика.

Приложение

ЦИРКУЛЯЦИОННЫЕ МАТРИЦЫ И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

1. Определения.

В настоящем приложении везде рассматриваются n -мерные векторы-столбцы и квадратные матрицы над полем комплексных или вещественных чисел. Элементы матрицы обозначаются той же буквой, как и вся матрица, дополненной лишь индексами. Индексы элементов везде пробегает значения $0, 1, \dots, n-1$. Символы \underline{n} и \overline{n} обозначают вычитание и сложение по модулю n .

Циркуляционной матрицей называется матрица A , порожденная вектором a по правилу

$$A_{jk} = a_{j \underline{n} k} \quad (\text{П.1})$$

Циркуляционная матрица и ее порождающий вектор будут везде обозначены соответственно прописным и строчным вариантом одной и той же буквы.

Матрица A' , порождаемая вектором a по правилу

$$A'_{jk} = a_{j \overline{n} k} \quad (\text{П.2})$$

называется косою циркуляционной матрицей. Косая циркуляционная матрица может быть получена из циркуляционной матрицы, порожденной тем же вектором, $(n-1)(n-2)/2$ перестановками столбцов или строк.

Определители циркуляционной и косою циркуляционной матрицы называются циркулянтном и косым циркулянтном.

Циркуляционные матрицы являются частным случаем теплицевых матриц, а косые циркуляционные матрицы - частным случаем ганкелевых матриц. Общая теория ганкелевых и теплицевых матриц подробно изложена в монографии (Иохвидов, 1974), где частный случай циркуляционных матриц, к сожалению, не рассмотрен.

В общих руководствах по линейной алгебре и теории матриц, как правило, упоминаются лишь циркулянты, а свойства самих цирку-

ляционных матриц обходятся молчанием. Редкие авторы (например, Беллман, 1960) посвящают циркуляционным матрицам страницу-две. Углубленный анализ некоторых проблем, связанных с циркуляционными матрицами, можно найти в работе (Nicholson, 1971).

Структуру циркуляционной матрицы иллюстрирует следующий пример:

$$\begin{pmatrix} 0 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 4 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 4 & 3 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Нулевой столбец равен порождающему вектору. Сумма элементов любого столбца или строки равна сумме элементов порождающего вектора.

2. Проблема собственных значений.

В случае циркуляционной матрицы уравнение $Af = \lambda f$ приводится к виду

$$\sum_j a_j f_{k \underline{n} j} = \lambda f_k \quad (\text{П.3})$$

Это уравнение очевидным способом удовлетворяется, если

$$f_{k \underline{n} j} = \text{const} \cdot f_k / f_j \quad (\text{П.4})$$

и

$$\lambda = \text{const} \sum_j a_j / f_j \quad (\text{П.5})$$

Условие (П.4) удовлетворяют нормированные векторы

$$f_k^{(l)} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{2\pi i}{n} lk} \quad (\text{П.6})$$

где l - целое число. Существует ровно n разных векторов (П.6) (например, для $l = 0 \dots n-1$), они образуют полную систему собственных векторов для любой циркуляционной матрицы. Число l называется частотой собственного вектора.

Собственные значения получим по (П.5):

$$\lambda_1 = \sum_j a_j e^{-\frac{2\pi i}{n} 1j} \quad (\text{П.7})$$

Вместо стандартного набора частот $0 \dots n-1$ иногда используется другой набор $0, 1, \dots, \frac{n}{2}-1, -\frac{n}{2}, -\frac{n}{2}+1, \dots, -1$, допускающий более наглядную интерпретацию. Поскольку $f^{(1+n)} = f^{(1)}$, то оба набора равносильны.

3. Конечномерное преобразование Фурье.

Назовем матрицу F с элементами

$$F_{kl} = e^{-\frac{2\pi i}{n} kl} \quad (\text{П.8})$$

Фурье-матрицей порядка n . Легко проверить, что

$$F^{-1} = \frac{1}{n} F^* \quad (\text{П.9})$$

Прямым и обратным преобразованием Фурье вектора a называются операции

$$\left. \begin{aligned} \tilde{a} &= Fa \\ a &= \frac{1}{n} F^* \tilde{a} \end{aligned} \right\} \quad (\text{П.10})$$

Тильда служит символом Фурье-образа и в дальнейшем \tilde{a} рассматривается как сокращенное обозначение вектора-столбца Fa . Другой специальный признак будет использован для краткого обозначения квадрата модуля Фурье-образа

$$\overline{a_k} = |\tilde{a}_k|^2 = \tilde{a}_k \tilde{a}_k^* \quad (\text{П.11})$$

На вычислительной практике преобразование Фурье, как правило, осуществляется не по формуле (П.10), а по равносильному экономичному алгоритму FFT, предложенному в работе (Cooley, Tukey, 1965). По опыту на ЭВМ Минск-32 при условии $n = 2^m$ комплексное FFT занимает время, приблизительно равное времени выполнения $7nm$ сложений с плавающей запятой.

Приложения преобразования Фурье основаны на том факте, что

столбцы матрицы $\frac{1}{\sqrt{n}} F^*$ являются собственными векторами любой циркуляционной матрицы. Поэтому матрица FAF^{-1} , где A - циркуляционная матрица, диагональна, а расположенные на диагонали собственные значения циркуляционной матрицы A согласно (П.7) равны элементам Фурье-образа \tilde{a} порождающего вектора циркуляционной матрицы.

4. Алгебра циркуляционных матриц.

На основе определения легко непосредственно доказать, что произведение двух циркуляционных матриц также является циркуляционной матрицей и что умножение циркуляционных матриц перестановочно. Если $C = AB$, то

$$c_k = \sum_j a_k \tilde{a}_j b_j = \sum_j b_k \tilde{a}_j a_j \quad (\text{П.12})$$

Операция вычисления порождающего вектора c согласно (П.12) называется циркуляционной сверткой векторов a и b , и обозначается

$$c = a * b \quad (\text{П.13})$$

Переходя при помощи преобразования Фурье в универсальный собственный базис циркуляционных матриц, получим $\tilde{c}_k = \tilde{a}_k \tilde{b}_k$, или, согласно договоренности п.18 о символе $\hat{=}$,

$$\tilde{c} \hat{=} \tilde{a} \tilde{b} \quad (\text{П.14})$$

Определитель циркуляционной матрицы (циркулянт) вычисляется по формуле

$$\det A = \prod_j \tilde{a}_j \quad (\text{П.15})$$

Если $\det A \neq 0$, то циркуляционная матрица невырождена и существует обратная матрица A^{-1} , которая также является циркуляционной матрицей. Порождающий вектор циркуляционной матрицы A^{-1} обозначается a^{-1} . Используя (П.14) и учитывая, что единичная матрица E также является циркуляционной матрицей с $e_k = \delta_{0k}$ и $\tilde{e}_k = 1$,

$$\tilde{a}^{-1} \hat{=} 1/\tilde{a} \quad (\text{П.16})$$

В то время как для обращения матрицы в общем случае необходимо выполнение около n^3 арифметических операций, циркуляционная матри-

ца может быть обращена за $n + 2n \lg_2 n$ арифметических операций.

Легко показать, что произведение двух косых циркуляционных матриц является циркуляционной матрицей, а произведение косой циркуляционной матрицы и циркуляционной матрицы - косой циркуляционной матрицей. В этом взаимоотношения косых циркуляционных матриц и циркуляционных матриц подобны взаимоотношениям мнимых и вещественных чисел.

5. Циркуляционное уравнение.

Задача решения системы линейных алгебраических уравнений с циркуляционной матрицей A рассматривается как задача обращения циркуляционного преобразования вектора x в вектор y

$$y = Ax. \quad (П.17)$$

Циркуляционное преобразование равносильно циркуляционной свертке $y = a * x$. Отсюда вытекает алгоритм решения циркуляционного уравнения

$$\tilde{x} \neq \tilde{y}/\tilde{a}. \quad (П.18)$$

Если заданы векторы x и y , а \tilde{x} не имеет нулевых элементов, то циркуляционная матрица уравнения (П.17) может быть определена по формуле

$$\tilde{a} \neq \tilde{y}/\tilde{x}. \quad (П.19)$$

6. Равноэлементные матрицы.

Равноэлементной матрицей называется вырожденная циркуляционная матрица K , все элементы которой равны одному и тому же числу k . Перечислим некоторые легко доказуемые свойства равноэлементных матриц, которые найдут приложение в задачах спектрометрии:

1. $\tilde{k}_j = n \neq \delta_{0j}$ и равноэлементные матрицы через преобразование Фурье связаны со скалярными матрицами, являющимися также частным случаем циркуляционных матриц.

2. Если A - циркуляционная матрица, то $KA = AK$ - равноэлементная матрица с элементами $k \sum_j a_j$.

3. Если A и B - циркуляционные матрицы и K_1 и K_2 - равноэлементные матрицы, то

$$\left. \begin{aligned} (A + K_1)(B + K_2) &= AB + K_3, \\ (A + K_2)^{-1} &= A^{-1} + K_4 \end{aligned} \right\} \quad (П.20)$$

где K_3 и K_4 также равноэлементные матрицы.

7. Некоторые свойства преобразования Фурье.

Перечислим некоторые полезные свойства конечномерного преобразования Фурье, являющиеся аналогами известных свойств бесконечномерного преобразования Фурье. Все перечисляемые свойства строгие и доказываются просто путем непосредственной проверки на основе определений.

1. Равенство Парсеваля:

$$\sum_j \bar{a}_j = n \sum_j |a_j|^2. \quad (П.21)$$

2. Формулы нулевых элементов:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{a}_0 &= \sum_j a_j \\ a_0 &= \frac{1}{n} \sum_j \tilde{a}_j \end{aligned} \right\} \quad (П.22)$$

3. Теорема сдвига:

$$\text{если } b = a_{k \mp d}, \text{ то } \tilde{b}_k = e^{\frac{2\pi i}{n} kd} \tilde{a}_k. \quad (П.23)$$

4. Теорема о разности:

$$\text{если } b_k = (a_{k+1} - a_{k-1})/2$$

$$\text{то } \tilde{b}_k = \frac{e^{\frac{2\pi i}{n} k} - e^{-\frac{2\pi i}{n} k}}{2} \tilde{a}_k = (i \sin \frac{2\pi k}{n}) \tilde{a}_k. \quad (П.24)$$

5. Теорема о сумме:

если $b_k = \sum_{j=k-2p}^{k+2p} a_j$, то $\tilde{b}_k = \left(\sum_{d=-p}^p \cos \frac{2\pi k}{n} d \right) \tilde{a}_k$. (П.25)

8. Сопоставление с бесконечномерной теорией.

Теория интегральной свертки и преобразования Фурье хорошо известны. Мы сохраняем в непрерывной теории символы для Фурье-образа, γ для квадрата модуля Фурье-образа и $*$ для свертки, придав им соответственно модифицированный смысл.

Исходной точкой сопоставления конечномерной и непрерывной моделей является вложение конечномерных шкал спектрального аргумента в соответствующие непрерывные шкалы. Вложение определяется правилом сопоставления аргумента x_k с индексом k и частоты ω_1 с индексом l .

Правило сопоставления должно обеспечить постоянный шаг конечномерных шкал на непрерывных шкалах и сохранить симметрию переменных. При предельном переходе $n \rightarrow \infty$ шаг обеих конечномерных шкал должен стремиться к нулю, а интервалы, перекрываемые конечномерными шкалами - к интервалу $(-\infty, +\infty)$. Произведение $x_k \omega_l$ должно быть равным $\frac{2\pi}{n} kl$ с точностью до слагаемого, кратного 2π .

Всем перечисленным требованиям отвечает правило сопоставления шкал:

$$x_k = \begin{cases} \frac{\lambda k}{\sqrt{n}} & \text{при } k < n/2 \\ \frac{\lambda(n-k)}{\sqrt{n}} & \text{при } k \geq n/2 \end{cases} \quad \omega_l = \begin{cases} \frac{1}{\lambda\sqrt{n}} & \text{при } l < n/2 \\ \frac{n-1}{\lambda\sqrt{n}} & \text{при } l \geq n/2, \end{cases} \quad (\text{П.26})$$

где λ - произвольный масштабный множитель. Сопоставляя интегралы с суммами по формуле прямоугольников, получим соответствие непрерывного и конечномерного преобразования Фурье:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{a}(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} a(x) e^{-i\omega x} dx \leftrightarrow \tilde{a}(\omega_l) = \frac{\lambda}{\sqrt{n}} \sum_k F_{lk} a(x_k) \\ a(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{a}(\omega) e^{i\omega x} \frac{d\omega}{2\pi} \leftrightarrow a(x_k) = \frac{1}{\lambda\sqrt{n}} \sum_l F_{kl}^{-1} \tilde{a}(\omega_l) \end{aligned} \right\} \quad (\text{П.27})$$

Приведенное соответствие может быть использовано как для перевода теоретических выводов от одной математической модели к другой, так и для численного преобразования Фурье в случае использования в теории непрерывной модели.

9. Циркуляционный случайный вектор.

Случайный вектор a с нулевым средним называется циркуляционным (строго говоря - циркуляционным в широком смысле), если его ковариационная матрица C является циркуляционной матрицей. Циркуляционный случайный вектор является конечномерным аналогом стационарного в широком смысле бесконечномерного случайного процесса. Вектор c , соответствующий ковариационной функции непрерывного случайного процесса, будем называть ковариационным вектором циркуляционного случайного вектора.

Если эмпирический ковариационный вектор c с элементами

$$c'_k = \frac{\sum_j a'_j a'_{j+k}}{n}, \quad (\text{П.28})$$

вычисленными по одной реализации a' циркуляционного случайного вектора a , точно совпадает с ковариационным вектором c , то эту реализацию будем называть представительной. Так как ковариационный вектор по определению равен среднему значению вектора c' для случайной реализации, то можно сказать, что реализации циркуляционного случайного вектора представительны в среднем.

Ковариационная матрица циркуляционного случайного вектора c представительной реализацией a равна

$$C = \frac{1}{n} A^T A. \quad (\text{П.29})$$

Поскольку собственные значения матрицы A^T комплексно сопряжены с собственными значениями матрицы A , то

$$\tilde{c} = \frac{1}{n} a^T. \quad (\text{П.30})$$

Полученное соотношение выражает конечномерный аналог теоремы Винера-Хинчина об эргодичных случайных процессах.

10. Вещественные симметрические циркуляционные матрицы.

Собственные значения вещественной симметрической ($a_k = a_{n-k}$) циркуляционной матрицы вещественны. Тогда вещественная и мнимая части комплексных собственных векторов независимо удовлетворяют уравнению (П.3) и являются собственными векторами вещественной симметрической циркуляционной матрицы. Независимые нормированные собственные векторы целесообразно упорядочивать следующим образом (формулы будут записаны только для четных значения числа n)

$$f_k^{(1)} = \begin{cases} \sqrt{1/n} & \text{при } l = 0 \\ \sqrt{2/n} \cos(\frac{2\pi}{n} lk) & \text{при } l = 1 \dots \frac{n}{2} - 1 \\ \sqrt{1/n} (-1)^k & \text{при } l = \frac{n}{2} \\ \sqrt{2/n} \sin(\frac{2\pi}{n} lk) & \text{при } l = \frac{n}{2} + 1 \dots n - 1, \end{cases} \quad (\text{П.31})$$

что сохраняет соответствие с очередностью собственных чисел, полученных по (П.10) или, что равносильно, по вещественной формуле

$$\tilde{a}_k = a_0 + 2 \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} a_j \cos(\frac{2\pi}{n} jk) + (-1)^k a_{n/2}. \quad (\text{П.32})$$

Элементы \tilde{a}_k для $k = \frac{n}{2} + 1 \dots n - 1$ могут быть определены без вычисления по симметрии $\tilde{a}_k = \tilde{a}_{n-k}$.

ЛИТЕРАТУРА

- В основном тексте для книг всегда указан год издания оригинала. Если в списке литературы описан перевод, то год издания оригинала приводится за описанием перевода.
- Арсений В.Я., Иванов В.В. О решении некоторых интегральных уравнений первого рода типа свертки методом регуляризации. - "ЖВМ и МФ", 1968, т.8, №2, с.310-321.
- Арсений В.Я., Иванов В.В. Об оптимальной регуляризации. - "ДАН СССР", 1968, т.182, №1, с.9-12.
- Беллман Р. Введение в теорию матриц. М., 1969. 367 с. Ориг. 1960.
- Бородюк В.П., Воишин А.П. Регрессионный анализ при наличии ошибок в переменных. - В кн.: Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей. - "Труды 5 Всес. симп.". Л., 1972, секция 6, с.29-40.
- Вайнштейн Л.А. Фильтрация помех при численном решении интегральных уравнений первого рода. - "ДАН СССР", 1972, т.204, №5, с.1067-1070.
- Вайнштейн Л.А., Зубаков В.Д. Выделение сигналов на фоне случайных помех. М., 1960. 447 с.
- Гелфанд И.М., Яглом А.М. О вычислении количества информации о случайной функции, содержащейся в другой такой функции. - "УМН", 1957, т.12, №1, с.3-52.
- Гольцман Ф.М. Статистические модели интерпретации. М., 1971. 327 с.
- Гордонова В.И. К вопросу обоснования алгоритмов выбора параметра регуляризации. - "ЖВМ и МФ", 1973, т.13, №5, с.1328-1332.
- Гордонова В.И., Морозов В.А. Численные алгоритмы выбора параметра в методе регуляризации. - "ЖВМ и МФ", 1973, т.13, №3, с.539-545.
- Дженкинс Г., Ваттс Д. Спектральный анализ и его приложения. М., 1971-1972, вып.1-2, 316+287 с. Ориг. 1969.

Жуковский Е.Л. Статистическая регуляризация систем алгебраических уравнений. - "ЖВМ и МФ", 1972, т.12, №1, с.185-191.

Иохвидов И.С. Ганкелевы и теплицевы матрицы и формы. М., 1974. 263 с.

Кендалл М.Дж., Стьюарт А. Статистические выводы и связи. М., 1973. 899 с. Ориг. 1961.

Клепиков Н.П., Соколов С.Н. Анализ и планирование экспериментов методом максимума правдоподобия. М., 1964. 184 с.

Козлов В.П. О разрешающей способности спектральных приборов I. - "Оптика и спектроскопия", 1964, т.17, вып.2, с.278-283.

Козлов В.П. О восстановлении высотного профиля температуры по спектру уходящей радиации. - "Изв. АН СССР. ФАО", 1966, т.2, №2, с.137-148.

Колмогоров А.Н. Интерполирование и экстраполирование стационарных случайных последовательностей. - "Изв. АН СССР. Сер.мат.", 1941, т.5, с.3-14.

Колмогоров А.Н. Теория передачи информации. М., 1956. 33 с.

Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М., 1968. 720 с. Ориг. 1961.

Лаврентьев М.М., Васильев В.Г. О постановке некоторых некорректных задач математической физики. - "Сиб. мат. ж.", 1966, т.7, №3, с.559-576.

Леман Э. Проверка статистических гипотез. М., 1964. 498 с. Ориг. 1959.

Леонов Ю.П. Обобщенные решения метода наименьших квадратов. - "ДАН СССР", 1972, т.206, №1, с.37-40.

Линник Ю.В. Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений. М., 1962. 349 с.

Липцер Р.Ш., Ширяев А.Н. Статистика случайных процессов. М., 1974. 696 с.

Микусинский Я., Сикорский Р. Элементарная теория обобщенных функций. М., 1959. 78 с. Ориг. 1957.

Петраш Г.Г. Исследование аппаратных искажений и методы их учета в инфракрасной спектроскопии. - "Труды ФИАН", 1964, т.27, с.3-62.

Покровский О.М. Об оптимальных условиях косвенного зондирования атмосферы. - "Изв. АН СССР. ФАО", 1969, т.5, №12, с.1324-1326.

Покровский О.М. Сравнение статистических методов решения обратных задач атмосферной оптики. - "Изв. АН СССР. ФАО", 1972, т.8, №2, с.231-233.

Покровский О.М., Тимофеев Ю.М. Об информационной обеспеченности при косвенном зондировании различных слоев атмосферы. - "Изв. АН СССР. ФАО", 1971, т.7, №8, с.901-903.

Раутиан С.Г. Реальные спектральные приборы. - "УФН", 1958, т.66, вып.3, с.475-517.

Савёлова Г.И. О решении уравнения типа свертки с неточно заданным ядром методом регуляризации. - "ЖВМ и МФ", 1972, т.12, №1, с.212-218.

Сороко Л.М. Мультиплексные системы регистрации частиц. - "ПТЭ", 1973, №5, с.7-19.

Судаков В.Н., Халфин Л.А. Статистический подход к корректности задач математической физики. - "ДАН СССР", 1964, т.157, №5, с.1058-1060.

Таммет Х.Ф. Аспирационный метод измерения спектра аэроионов. "Уч. зап. Тартуского гос. ун-та", 1967, вып.195. 234 с.

Таммет Х.Ф. К общим проблемам спектрометрии аэроионов. - "Уч. зап. Тартуского гос. ун-та", 1973, вып.320, с.5-12.

Таммет Х.Ф. К проблеме разрешающей силы в спектрометрии. - "Уч. зап. Тартуского гос. ун-та", 1973а, вып.320, с.76-100.

Таммет Х.Ф. Система обработки наблюдений для одноканального спектрометра аэроионов. - "Уч. зап. Тартуского гос. ун-та", 1973б, вып.320, с.36-47.

Таммет Х.Ф. Справочные материалы для пользования системой программирования МАЛГОЛ-73. Таллин, 1973в. 88 с. (Таллинский политехн. ин-т и Таллинский пед. ин-т).

Тихонов А.Н. Об устойчивости обратных задач. - "ДАН СССР", 1943, т.39, №5, с.195-198.

Тихонов А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации. - "ДАН СССР", 1963, т.151, №3, с.501-504.

Тихонов А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач. -

- "ДАН СССР", 1963, т.153, №1, с.49-52.
- Тихонов А.Н. О некорректных задачах линейной алгебры и устойчивом методе их решения. - "ДАН СССР", 1965, т.163, №3, с.591-594.
- Тихонов А.Н., Гласко В.В. О приближенном решении интегральных уравнений Фредгольма I рода. - "ЖМ и МФ", 1964, т.4, №3, с.564-571.
- Турчин В.Ф. Решение уравнения Фредгольма I рода в статистическом ансамбле гладких функций. - "ЖМ и МФ", 1967, т.7, №6, с.1270-1284.
- Турчин В.Ф. Выбор ансамбля гладких функций при решении обратной задачи. - "ЖМ и МФ", 1968, т.8, №1, с.230-238.
- Турчин В.Ф., Козлов В.П., Малкевич М.С. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач. - "УФН", 1970, т.102, вып.3, с.345-386.
- Турчин В.Ф., Нозик В.З. Статистическая регуляризация решения некорректных задач. - "Изв. АН СССР. ФАО", 1969, т.5, №1, с.29-38.
- Турчин В.Ф., Туровцева Л.С. Восстановление оптических спектров и других неотрицательных функций по методу статистической регуляризации. - "Оптика и спектроскопия", 1974, т.36, вып.2, с.280-287.
- Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М., 1960. 656 с.
- Халфин Л.А. О теоретико-информационном подходе к теории спектральных приборов. - В кн.: Труды Всес. сов. по теории вероятностей и мат. статистике АН СССР. Ереван, 1960, с.187-205.
- Халфин Л.А. К статистической теории спектральных приборов. - В кн.: Труды 6 Всес. сов. по теории вероятностей и мат. статистике. Вильнюс, 1962, с.265-268.
- Шварц Л. Математические методы для физических наук. М., 1965. 412 с. Ориг. 1961.
- Хелстром К. Статистическая теория обнаружения сигналов. М., 1963. 431 с. Ориг. 1960.
- Уоллинг Р.В. Численные методы. М., 1972. 400 с. Ориг. 1962.
- Biraud Y. A new approach for increasing the resolving power by data processing. - "Astron. Astrophys.", 1969, vol.1, N1, p.124-127.
- Cooley J.W., Tukey J.W. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. - "Math. of Computation", 1965, 19, N90, p.297-301.
- Dwyer P.S., Waugh F.V. On errors in matrix inversion. - "J. Amer. Stat. Assoc.", 1953, vol.48, N262, p.289-319.
- Fellgett P. Multi-channel spectrometry. - "JOSA", 1952, vol.42, N11, p.872-872.
- Fellgett P. A propos de la theorie du spectrometre interferentiel multiplex. - "J. Phys. Radium", 1958, vol.19, N3, p.187-191.
- Frieden B.R. Restoring with maximum likelihood and maximum entropy. - "JOSA", 1972, vol.62, N4, p.511-518.
- Fuchs N.A., Stechkina I.B., Staroselskii V.I. On the determination of particle size distribution in polydisperse aerosols by the diffusion method. - "Brit. J. Appl. Phys.", 1962, vol.13, p.280-281.
- Harris J.L. Resolving power and decision theory. - "JOSA", 1964, vol.54, N5, p.606-611.
- Helstrom C.W. Detection and resolution of incoherent objects by a background-limited optical system. - "JOSA", 1969, vol.59, N2, p.164-175.
- Helstrom C.W. Resolvability of objects from the standpoint of statistical parameter estimation. - "JOSA", 1970, vol.60, N5, p.659-666.
- Hershel R.S. Nonlinear object restoration using statistical and analytic constraints. - "JOSA", 1970, vol.60, N11, p.1546-1546.
- Horlick G. Resolution enhancement of line emission spectra by deconvolution. - "Appl. Spectroscopy", 1972, vol.26, N3, p.395-399.
- Jansson P.A., Hunt R.H., Plyler F.K. Resolution enhancement of spectra. - "JOSA", 1970, vol.60, N5, p.596-599.
- Jaynes E.T. Prior probabilities. - "Trans. IEEE SSC", 1968,

vol.4, N3, p.227-241.

Jeffreys H. Theory of probability. Oxford, 1961. 447 p.

John F. Numerical solution of the equation of heat conduction for preceding times. - "Ann. mat. pura e appl.", 1955, vol.40, p.129-142.

Krauss M., Woschni E.-G. Messinformationssysteme. Berlin, 1972. 231 S.

MacAdam D.P. Digital image restoration by constrained deconvolution. - "JOSA", 1970, vol.60, N12, p.1617-1627.

Maushart R. Über die Beweglichkeit positiver Ionen in extrem reinen Gasen und Gasgemischen. - "Ann. Phys.", 1958, Bdl, H.4-5, S.264-280.

Medgyessy P. Decomposition of superpositions of distribution functions. Budapest, 1961. 227 p.

Nicholson P.J. Algebraic theory of finite Fourier transforms. - "J. comp. system sci.", 1971, vol.5, N5, p.524-547.

Parzen E. Mathematical considerations in the estimation of spectra. - "Technometrics", 1961, vol.3, N2, p.167-190.

Phillips D.L. A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind. - "JACM", 1962, vol.9, N1, p.84-97.

Savage L.J. The foundations of statistical inference. London, 1962. 112 p.

Strand O.N., Westwater E.R. The statistical estimation of the numerical solution of a Fredholm integral equation of the first kind. - "JACM", 1968, vol.15, N1, p.100-115.

Twomey S. On the numerical solution of Fredholm integral equations of the first kind by the inversion of the linear system produced by quadrature. - "JACM", 1963, vol.10, N1, p.97-101.

Wiener N. The extrapolation, interpolation and smoothing of stationary time series. N.Y., 1949. 163 p.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
I. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СПЕКТРОМЕТРА	
1. Спектр	10
2. Спектральные шкалы	11
3. Математические модели спектра	14
4. Метрика пространства спектров	17
5. Случайный спектр	20
6. Статистическое описание спектра	22
7. Запись спектрометра и аппаратный шум	24
8. Аппаратное преобразование	27
9. Простейшие аппаратные преобразования	29
10. Сопоставление математических моделей	31
II. ПРОЯВЛЕНИЕ СПЕКТРА	
11. К постановке задачи	33
12. Измерительная информация	35
13. Накопление информации и правдоподобная оценка спектра	37
14. Нормальное проявление	40
15. Метод априорных уравнений	42
16. Информационная продукция спектрометра	45
17. Последовательная обработка наблюдений	47
18. Проявление при перестановочной информации	50
19. Циркуляционное проявление	52
20. Неотрицательное проявление	54
III. СТАБИЛИЗАЦИЯ ПРОЯВЛЕНИЯ СПЕКТРА	
21. Виды информации	57
22. Восприимчивость информации	59
23. Методы регуляризации	61
24. Стабилизатор и псевдоаппаратное преобразование	64
25. Разновидности стабилизации	66
26. Проблема оптимальной стабилизации	69

27. Минимизация сводной ошибки	73
28. Предельно допустимая стабилизация	76
29. Параметрические методы стабилизации	78
30. Стабилизация циркуляционного проявления	80
Приложение. Циркуляционные матрицы и преобразование	
Фурье	84
Литература	93

Тартуский государственный университет.

Ханнес Феликсович Таммет. Введение в линейную конечномерную теорию спектральной метрики. На русском языке. Издательство "Валгус", Таллин.

Редактор Т. Ронгоен. Подписано к печати 19 11 1975. Бумага 60x84/16. Печ. л. 6,25. Усл.-печ. л. 5,81. Учетн.-изд. л. 5,10. Тираж 500 экз. МВ-00725. "Валгус", Таллин, Паркуское шоссе 10. Типография УИ-ТИ МСХ СССР.

Заказ № 363. Цена 31 коп.