

1343
FEI--2117.

ФЭИ-2117



ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В. П. СЕМЕНОВ, Л. А. ТРЫКОВ

**Метод оценки
информационного качества и разрешения
спектрометрических систем**

Обнинск — 1990

ФЭИ - 2117

ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В.П.Семёнов, Л.А.Трыков

МЕТОД ОЦЕНКИ ИНФОРМАЦИОННОГО КАЧЕСТВА
И РАЗРЕШЕНИЯ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Обнинск - 1990

УДК 539.1.074.8

В. П. Семенов, Л. А. Триков.

Метод оценки информационного качества и разрешения
спектрометрических систем.

ФЭИ-2117. Обнинск, 1990. - 23 с.

Предложен новый метод для оценки информационного качества и энергетического разрешения спектрометрических систем, который основан на частотном анализе двух спектров: истинного и измеренного. Получены формулы и разработаны принципиальные алгоритмы для реализации этого метода на ЭВМ.

New method for informative quality and energy resolution estimations of spectrometric systems is presented. This method is based on frequency analysis of two energy spectra: true and measured. Mathematical expressions and basic algorithms for computer realization of this method are obtained.

В В Е Д Е Н И Е

В раб. [1] определено понятие спектрометрической системы, выделены основные типы спектрометрических систем: классические и неклассические системы.

На рис. 1 в наглядной форме показано различие в функциях отклика классических и неклассических систем. В трехмерном пространстве изображены две поверхности, которые представляют собой функции отклика двух спектрометрических систем классического типа. По оси X системы координат отложена энергия E регистрируемого излучения, по оси Y — измеряемый спектрометром параметр V регистрируемой частицы, по оси Z — чувствительность спектрометра S . При пересечении изображенных поверхностей в точке E плоскостью, параллельной плоскости $V \text{ } S$, образуются две колоколообразные функции отклика: $K_1(E, V)$ и $K_2(E, V)$. Проекция вершин функций отклика на плоскость $E \text{ } V$ образуют две кривые $V = f_1(E)$ и $V = f_2(E)$. Заштрихованные части плоскости вокруг $f_1(E)$ и $f_2(E)$ ограничены парами кривых, расстояние между которыми по прямой, параллельной оси V , равно величинам абсолютных разрешений $\Delta_1(E)$ и $\Delta_2(E)$. Кривые $S_1(E)$ и $S_2(E)$ на плоскости $E \text{ } K$ отображают функции чувствительности спектрометров, т.е.

$$S_1(E) = \int K_1(E, V) dV, \quad S_2(E) = \int K_2(E, V) dV.$$

В классических методах спектрометрии функцию отклика спектрометра описывают тремя величинами: $S(E)$, $f(E)$, $\Delta(E)$. Этих трех величин достаточно для восстановления энергетического спектра по измеренному аппаратурному распределению. Естественным, но принципиальным моментом является то, что для проведения измерений достаточно одного спектрометра. Например, из двух спектрометров, чьи функции отклика показаны на рис. 1, можно выбрать один с меньшим разрешением.

В неклассических методах спектрометрии функция отклика редуцируется в функцию чувствительности $S(E)$. Поэтому принципиальным моментом является наличие нескольких детекторов с различными функциями чувствительности. Набор детекторов с различными функциями чувствительности образует функцию отклика $K_c(E) = S_c(E)$, $c = \overline{1, N}$,

спектрометра неклассического типа.

Проблема оценки величины разрешения спектрометрических систем неклассического типа до настоящего времени является мало разработанной. В раб. [1] определены понятия информационного качества и эквивалентного разрешения спектрометрических систем. Сформулирован общий подход к оценке информационного качества и разрешения, основанный на анализе пары спектров: истинного $\varphi_0(E)$ (на входе спектрометрической системы) и измеренного $\varphi(E)$ (на выходе системы). Задача оценки информационного качества и разрешения определена в математическом плане как задача нелинейного программирования.

В настоящей работе предложен другой метод оценки информационного качества и разрешения спектрометрических систем в рамках указанного выше общего подхода, а именно: метод частотного анализа пары спектров $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$.

Предлагаемая вниманию работа является продолжением работы [1]. При изложении материала использована терминология, введенная в [1].

1. ЧАСТОТНАЯ ФУНКЦИЯ ОТКЛИКА СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Обозначим истинный энергетический спектр функцией $\varphi_0(E)$, которая значимо отлична от нуля на отрезке энергетической шкалы $[E_{\min}, E_{\max}]$. При измерении этого спектра спектрометрической системой с энергетической функцией отклика $\rho(E', E)$, полученный спектр $\varphi(E)$ имеет вид

$$\varphi(E') = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(E', E) \varphi_0(E) dE. \quad (1)$$

Выполним Фурье-преобразование функций $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$. Спектральная плотность $\varphi_0(E)$ равна

$$F_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi\omega E i} \varphi_0(E) dE. \quad (2)$$

Спектральная плотность $\varphi(E)$ равна

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi\omega E i} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \rho(E', E) \varphi_0(E) dE \right] dE' = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(E) \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi\omega E' i} \rho(E', E) dE' \right] dE. \end{aligned} \quad (3)$$

Предположим, что $P(E', E)$ является функцией разности аргументов $E' - E$ и энергии E , т.е. $P(E', E) = P(E' - E, E)$. Так как мы моделируем реальную спектрометрическую систему классическим спектрометром, то это предположение оправдано [1]. Тогда получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi\omega E' i} P(E', E) dE' = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi\omega E' i} P(E' - E, E) dE' = e^{-2\pi\omega E i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi\omega(E' - E) i} P(E' - E, E) dE' = e^{-2\pi\omega E i} P(\omega, E).$$

Сделаем важное допущение, что функция отклика условного спектрометра не зависит от энергии. Такое допущение накладывает сильное ограничение на тип функции отклика. Это ограничение можно обойти, рассматривая спектр на достаточно коротком энергетическом интервале, где изменение функции отклика с энергией невелико.

Если $P(E' - E, E) = P(E' - E)$, то

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi\omega E' i} P(E' - E) dE' = e^{-2\pi\omega E i} P(\omega). \quad (4)$$

$P(\omega)$ является, по-существу, Фурье-преобразованием или спектральной плотностью функции отклика $P(E' - E)$ как функции аргумента $E' - E$. Формула (3) для спектральной плотности $F(\omega)$ с учетом соотношения (4) приобретает простой вид

$$F(\omega) = P(\omega) \cdot F_0(\omega). \quad (5)$$

В формуле (5) заключена основная идея оценки разрешения (или информационного качества) спектрометрических систем, а именно: вычисляют спектральные плотности $F_0(\omega)$ и $F(\omega)$ истинного $\varphi_0(E)$ и измеренного $\varphi(E)$ спектров, по ним вычисляют спектральную плотность $P(\omega) = F(\omega)/F_0(\omega)$, а $P(\omega)$ прямо связана с величиной информационного качества и разрешения.

Чтобы избежать появления в $P(\omega)$ комплексных переменных и для некоторого упрощения задачи определим $P(\omega)$ как отношение модулей спектральной плотности или как корень квадратный из отношения частотных спектров мощностей

$$P(\omega) = |F(\omega)|/|F_0(\omega)| = \{ [F(\omega)]^2 / [F_0(\omega)]^2 \}^{1/2}. \quad (6)$$

Теперь функция $P(\omega)$ не будет являться в точном смысле спектральной плотностью функции отклика, но её можно считать тем не менее частотным аналогом функции отклика. Поэтому назовем $P(\omega)$ частотной функцией отклика (ЧФО).

Вычислим $P(\omega)$ для нескольких наиболее характерных функций отклика спектрометрических систем.

Функция отклика - плотность нормального распределения.

$$P(E', E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(E)} \exp[-(E'-E)^2/2\sigma^2(E)]. \quad (7)$$

Вычислим $P(\omega, E)$ с учетом зависимости от E .

$$\begin{aligned} P(\omega, E) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(E)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-2\pi\omega(E'-E)i] \cdot \exp[-(E'-E)^2/2\sigma^2(E)] d(E'-E) = \\ &= \exp[-2\pi^2\omega^2\sigma^2(E)]. \end{aligned} \quad (8)$$

Если $\sigma(E)$ не зависит от E , то

$$P(\omega) = \exp[-2\pi^2\omega^2\sigma^2] = \exp[-2\pi^2\omega^2/q^2] = \exp[-0.36\pi^2\omega^2\Delta^2] \quad (9)$$

где q - информационное качество, Δ - разрешение (абсолютное).

Функция отклика - прямоугольник.

$$P(E', E) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta}, & E - \frac{\Delta}{2} \leq E' \leq E + \frac{\Delta}{2}; \\ 0, & E' < E - \frac{\Delta}{2}, E' > E + \frac{\Delta}{2}. \end{cases} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} P(\omega) &= \frac{1}{\Delta} \int_{E-\frac{\Delta}{2}}^{E+\frac{\Delta}{2}} \exp[-2\pi\omega(E'-E)i] dE' = \\ &= \frac{\sin(\pi\omega\Delta)}{(\pi\omega\Delta)} = \frac{\sin[3.46\pi\omega/\sqrt{q^2}]}{[3.46\pi\omega/\sqrt{q^2}]} \end{aligned} \quad (11)$$

Функция отклика - равнобедренный треугольник.

$$P(E', E) = \begin{cases} 0, & E' < E - \Delta; \\ \frac{1}{\Delta^2}(E'-E) + \frac{1}{\Delta}, & E - \Delta \leq E' < E; \\ -\frac{1}{\Delta^2}(E'-E) + \frac{1}{\Delta}, & E \leq E' \leq E + \Delta; \\ 0, & E' > E + \Delta. \end{cases} \quad (12)$$

$$P(\omega) = \int_{E-\Delta}^E \left[\frac{1}{2\Delta^2}(E'-E) + \frac{1}{\Delta} \right] \exp[-2\psi\omega E'i] dE' + \\ + \int_E^{E+\Delta} \left[-\frac{1}{2\Delta^2}(E'-E) + \frac{1}{\Delta} \right] \exp[-2\psi\omega E'i] dE' =$$

$$\frac{\sin^2(\psi\omega\Delta)}{(\psi\omega\Delta)^2} = \left[\frac{\sin[2,45\psi\omega/\sqrt{\varrho}]}{2,45\psi\omega/\sqrt{\varrho}} \right]^2. \quad (13)$$

Функция отклика - прямоугольный треугольник.

$$P(E', E) = \begin{cases} 0, & E' < E-2\Delta; \\ \frac{1}{2\Delta^2}(E'-E) + \frac{1}{\Delta}, & E-2\Delta \leq E' \leq E; \\ 0, & E' > E. \end{cases} \quad (14)$$

$$P(\omega) = \left| \int_{E-2\Delta}^E \exp[-2\psi\omega\Delta i E'] P(E', E) dE' \right| = \frac{1 + 4\psi\omega\Delta i - \exp(4\psi\omega\Delta i)}{8\psi^2\omega^2\Delta^2} =$$

$$= \sqrt{2(1 - \cos 4\psi\omega\Delta) + 8\psi\omega\Delta(2\psi\omega\Delta - \sin 4\psi\omega\Delta)} / 8\psi^2\omega^2\Delta^2 =$$

$$= \frac{\sqrt{2[1 - \cos(4,90\psi\omega/\sqrt{\varrho})] + (9,80\psi\omega/\sqrt{\varrho})[2,45\psi\omega/\sqrt{\varrho} - \sin(4,90\psi\omega/\sqrt{\varrho})]}}{12\psi^2\omega^2/\varrho}. \quad (15)$$

Формула (15) определяет ЧФО для "скошенного вправо" прямоугольного треугольника. Для "скошенного влево" прямоугольного треугольника ЧФО также выражается формулой (15). Т.е. две "зеркальных" друг к другу функции отклика имеют одну и ту же ЧФО, т.е. неразличимы в рамках данного метода.

Соотношения между Δ и ϱ взяты из раб. [1].

Таким же образом можно вычислить $P(\omega)$ для других функций отклика.

Как следует из формул (9), (11), (13), (15) ЧФО является функцией частоты ω и информационного качества ϱ (или разрешения Δ), т.е. $P = P(\omega, \varrho)$, где ϱ играет роль параметра.

На рис. 2 показаны ЧФО для 4-х типов функций отклика. Максимального значения, равного 1, $P(\omega, \varrho)$ достигает при $\varrho \rightarrow \infty$ ($\Delta \rightarrow 0$).

При $\varrho \rightarrow 0$ ($\Delta \rightarrow \infty$) $P(\omega, \varrho) \rightarrow 0$. ЧФО для прямоугольной и треугольной (равнобедренной) функции отклика обращается в нуль в особых точках при $\omega \Delta = k\pi$, где $k = 1, 2, \dots$

Из рис. 1 видно, что ЧФО для функций отклика типа плотности нормального распределения и равнобедренного треугольника слабо отличаются друг от друга, особенно в области низких частот, чего и следовало ожидать.

Таким образом, измеряя истинный спектр $\varphi_0(E)$ с помощью какой-либо спектрометрической системы и получив на выходе измеренный спектр $\varphi(E)$, можно вычислить по формуле (6) эффективную частотную функцию отклика системы в данном эксперименте (в раб. 1 показано, что информационное качество, а значит и функция отклика спектрометрической системы неклассического типа зависят от формы измеряемого спектра, кроме того в любом случае реальное информационное качество зависит от статистики измерения).

Практическое вычисление частотной функции отклика. В практических вычислениях энергетические спектры $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$ должны быть заданы в векторной форме, интеграл Фурье переходит в ряд Фурье с дискретными частотами.

Пусть энергетические спектры заданы в виде значений в дискретных точках с одинаковым шагом

$$\varphi_{0i} = \overline{\varphi_0(E_i)}, \quad \varphi_i = \overline{\varphi(E_i)}, \quad i = 0, N-1, \quad (16)$$

где $\overline{\varphi_0(E_i)}$, $\overline{\varphi(E_i)}$ - средние значения спектров на интервалах $E_{min} + i\Delta E \leq E \leq E_{min} + (i+1)\Delta E$, ΔE - шаг, $E_{max} = E_{min} + N \cdot \Delta E$.

Вычислим спектр мощности для вектора $\overline{\varphi}$

$$\begin{aligned} |F_k|_{\varphi}^2 &= \left[\sum_{i=0}^{N-1} \varphi_i \cdot \cos\left(2\pi \frac{k}{N} i\right) \right]^2 + \left[\sum_{j=0}^{N-1} \varphi_j \cdot \sin\left(2\pi \frac{k}{N} j\right) \right]^2 = \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \varphi_i \varphi_j \cos\left[2\pi \frac{k}{N} (i-j)\right], \quad k = 0, 1, \dots, \text{ant}\left(\frac{N}{2}\right), \quad (17) \end{aligned}$$

где $\text{ant}(x)$ - целая часть числа.

В этой формуле непрерывная частота ω переходит в дискретный набор частот k/N .

Частотная функция отклика P_k равна

$$P_k = \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \varphi_i \varphi_j \cos\left[2\pi \frac{k}{N} (i-j)\right] \right\}^{\frac{1}{2}} / \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \varphi_i \varphi_j \cos\left[2\pi \frac{k}{N} (i-j)\right] \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (18)$$

При этом спектры должны быть нормированы на единичную площадь, т.е.

$$\sum_{i=0}^{N-1} \varphi_{0i} = \sum_{i=0}^{N-1} \varphi_i = 1. \quad (19)$$

2. СТАТИСТИЧЕСКИЕ ПОГРЕШНОСТИ ЧАСТОТНОЙ ФУНКЦИИ ОТКЛИКА

Статистические погрешности ЧФФ порождают два источника:

- статистические погрешности энергетических спектров $\tilde{\varphi}_0$ и $\tilde{\varphi}$;
- статистические погрешности за счет векторизации функций $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$, а также за счет ошибок считывания значений φ_{0i} и φ_i с графиков.

Статистические погрешности частотного спектра мощности. Пусть известна ковариационная матрица \tilde{C}_φ вектора $\tilde{\varphi}$, которая включает в себя погрешности из первого и второго источников. Найдем ковариационную матрицу частотного спектра мощности $|F|^2$.

$$\begin{aligned} \text{Cov}(|F_K|^2, |F_L|^2) &= \overline{\Delta |F_K|^2 \cdot \Delta |F_L|^2} \approx \\ &\approx \overline{\left[\sum_{i=0}^{N-1} \frac{\partial |F_K|^2}{\partial \varphi_i} \cdot \Delta \varphi_i \right] \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial |F_L|^2}{\partial \varphi_j} \cdot \Delta \varphi_j \right]} = \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial |F_K|^2}{\partial \varphi_i} \cdot \frac{\partial |F_L|^2}{\partial \varphi_j} \cdot \overline{\Delta \varphi_i \cdot \Delta \varphi_j} = \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial |F_K|^2}{\partial \varphi_i} \cdot \frac{\partial |F_L|^2}{\partial \varphi_j} \cdot \text{Cov}(\varphi_i, \varphi_j) = \end{aligned}$$

$$4 \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} \text{Cov}(\varphi_i, \varphi_j) \varphi_p \varphi_q \cdot \cos\left[2\pi \frac{K}{N}(i-p)\right] \cdot \cos\left[2\pi \frac{L}{N}(j-q)\right]. \quad (20)$$

При $K=L$ из (20) получим формулу для дисперсии спектра мощности

$$D(|F_K|^2) = \text{Cov}(|F_K|^2, |F_K|^2) =$$

$$4 \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} \text{Cov}(\varphi_i, \varphi_j) \varphi_p \varphi_q \cdot \cos\left[2\pi \frac{K}{N}(i-p)\right] \cdot \cos\left[2\pi \frac{K}{N}(i-q)\right]. \quad (21)$$

Если $\text{cov}(\varphi_i, \varphi_j) = 0$ для $i \neq j$, то формула (21) упрощается

$$D(|F_K|^2) = 4 \sum_{i=0}^{N-1} D_i \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \varphi_j \cdot \cos\left[2\pi \frac{K}{N}(i-j)\right] \right\}^2, \quad (22)$$

где $D_i = \text{cov}(\varphi_i, \varphi_i)$.

Таким же образом можно получить ковариацию двух спектров мощности для $\vec{\varphi}_0$ и $\vec{\varphi}$

$$\text{cov}(|F_K|_{\varphi_0}^2, |F_K|_{\varphi}^2) =$$

$$4 \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} \text{cov}(\varphi_{0i}, \varphi_j) \cdot \varphi_{0p} \varphi_q \cdot \cos\left[2\pi \frac{K}{N}(i-p)\right] \cdot \cos\left[2\pi \frac{K}{N}(j-q)\right], \quad (23)$$

где $\text{cov}(\varphi_{0i}, \varphi_j)$ - элемент ковариационной матрицы $\hat{C}_{\varphi_0 \varphi}$.

Если применяется метод восстановления спектров, в котором в явном виде известен оператор \hat{L} , такой что $\vec{\varphi} = \hat{L} \vec{\varphi}_0$, то

$$\begin{aligned} \text{cov}(\varphi_{0i}, \varphi_j) &= \overline{\Delta \varphi_{0i} \Delta \varphi_j} \approx \Delta \varphi_{0i} \sum_{n=0}^{N-1} L_{jn} \Delta \varphi_{0n} = \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} L_{jn} \overline{\Delta \varphi_{0n} \Delta \varphi_{0i}} = \sum_{n=0}^{N-1} L_{jn} \cdot \text{cov}(\varphi_{0n}, \varphi_{0i}), \end{aligned} \quad (24)$$

где L_{jn} - элемент матрицы \hat{L} .

Матрицу $\hat{C}_{\varphi_0 \varphi}$ можно получить методом рандомизации, если оператор \hat{L} в явном виде неизвестен.

Перепишем (24) в матричном виде

$$\hat{C}_{\varphi_0 \varphi} = \hat{C}_{\varphi \varphi_0} = \hat{L} \hat{C}_{\varphi_0}. \quad (25)$$

Статистические погрешности частотной функции отклика. Ковариация частотной функции отклика равна

$$\begin{aligned} \text{cov}(P_K, P_e) &= \overline{\Delta P_K \Delta P_e} = \\ &= \left[\frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\varphi_0}^2} \cdot \Delta |F_K|_{\varphi_0}^2 + \frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\varphi}^2} \cdot \Delta |F_K|_{\varphi}^2 \right] \left[\frac{\partial P_e}{\partial |F_e|_{\varphi_0}^2} \cdot \Delta |F_e|_{\varphi_0}^2 + \frac{\partial P_e}{\partial |F_e|_{\varphi}^2} \cdot \Delta |F_e|_{\varphi}^2 \right] = \\ &= \frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\varphi_0}^2} \cdot \frac{\partial P_e}{\partial |F_e|_{\varphi_0}^2} \cdot \overline{\Delta |F_K|_{\varphi_0}^2 \Delta |F_e|_{\varphi_0}^2} + \frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\varphi}^2} \cdot \frac{\partial P_e}{\partial |F_e|_{\varphi_0}^2} \cdot \overline{\Delta |F_K|_{\varphi}^2 \Delta |F_e|_{\varphi_0}^2} + \\ &+ \frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\varphi_0}^2} \cdot \frac{\partial P_e}{\partial |F_e|_{\varphi}^2} \cdot \overline{\Delta |F_K|_{\varphi_0}^2 \Delta |F_e|_{\varphi}^2} + \frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\varphi}^2} \cdot \frac{\partial P_e}{\partial |F_e|_{\varphi}^2} \cdot \overline{\Delta |F_K|_{\varphi}^2 \Delta |F_e|_{\varphi}^2}. \end{aligned} \quad (26)$$

$$\frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\vec{\varphi}_0}^2} = -\frac{1}{2|F_K|_{\vec{\varphi}_0}^2} \cdot P_K ; \quad \frac{\partial P_K}{\partial |F_K|_{\vec{\varphi}}^2} = \frac{1}{2|F_K|_{\vec{\varphi}}^2} \cdot P_K ;$$

$$\text{cov}(P_K, P_\ell) = \frac{P_K P_\ell}{4} \left\{ \frac{\text{cov}(|F_K|_{\vec{\varphi}_0}^2, |F_\ell|_{\vec{\varphi}_0}^2)}{|F_K|_{\vec{\varphi}_0}^2 \cdot |F_\ell|_{\vec{\varphi}_0}^2} + \right.$$

$$+ \frac{\text{cov}(|F_K|_{\vec{\varphi}}^2, |F_\ell|_{\vec{\varphi}}^2)}{|F_K|_{\vec{\varphi}}^2 \cdot |F_\ell|_{\vec{\varphi}}^2} - \frac{\text{cov}(|F_K|_{\vec{\varphi}_0}^2, |F_\ell|_{\vec{\varphi}}^2)}{|F_K|_{\vec{\varphi}_0}^2 \cdot |F_\ell|_{\vec{\varphi}}^2} -$$

$$\left. - \frac{\text{cov}(|F_K|_{\vec{\varphi}}^2, |F_\ell|_{\vec{\varphi}_0}^2)}{|F_K|_{\vec{\varphi}}^2 \cdot |F_\ell|_{\vec{\varphi}_0}^2} \right\} . \quad (27)$$

В реальных экспериментах энергетические спектры $\vec{\varphi}_0$ и $\vec{\varphi}$ статистически независимы, так как измерения проводятся независимо, поэтому

$$\hat{C}_{\varphi_0 \varphi} = \hat{C}_{\varphi \varphi_0} = 0 . \quad (28)$$

В расчетных экспериментах нет смысла искусственно задавать погрешности в спектре $\vec{\varphi}_0$, а погрешности считывания и векторизации можно не учитывать вследствие их малости. Поэтому также справедливо равенство (28).

Погрешности считывания примерно равны по абсолютной величине для разных компонентов векторов $\vec{\varphi}_0$ и $\vec{\varphi}$. В целом можно полагать, что матрица \hat{C}^z погрешностей считывания и векторизации будет иметь диагональный вид (погрешности статистически независимы) с элементами

$$\text{cov}^z(\varphi_{0i}, \varphi_{0i}) = \text{cov}^z(\varphi_i, \varphi_i) = d, \quad i = \overline{0, N-1}. \quad (29)$$

Тогда статистические погрешности частотной функции отклика равны

$$\frac{\text{cov}(P_K, P_\ell)}{P_K P_\ell} = d \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} (A_0 \cdot \varphi_{0p} \varphi_{0q} + A \cdot \varphi_p \varphi_q) \sum_{i=0}^{N-1} \cos[2\pi \frac{K}{N}(i-p)] \cdot \cos[2\pi \frac{\ell}{N}(i-q)] +$$

$$+ \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} A_0 \varphi_{0p} \varphi_{0q} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \text{cov}(\varphi_{0i}, \varphi_{0j}) \cdot \cos[2\pi \frac{K}{N}(i-p)] \cdot \cos[2\pi \frac{\ell}{N}(j-q)] +$$

$$+ \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} A \varphi_p \varphi_q \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \text{cov}(\varphi_i, \varphi_j) \cdot \cos[2\pi \frac{K}{N}(i-p)] \cdot \cos[2\pi \frac{\ell}{N}(j-q)] , \quad (30)$$

$$K, \ell = 0, 1, \dots, \text{ant}(N/2),$$

где $A_0 = 1/[|F_k|_{\vec{\varphi}_0}^2 \cdot |F_e|_{\vec{\varphi}_0}^2]$, $A = 1/[|F_k|_{\vec{\varphi}}^2 \cdot |F_e|_{\vec{\varphi}}^2]$.

Формула (30) состоит из трех членов. В первом члене учитываются погрешности считывания и векторизации, во втором - спектра $\vec{\varphi}_0$, в третьем - спектра $\vec{\varphi}$.

Основные варианты вычисления погрешностей ЧФФ.

Вариант 1. Матрицы $\hat{C}_{\varphi_0} = \hat{C}_{\varphi} = 0$, т.е. учитываются только погрешности считывания и векторизации, которые примерно одинаковы и равны d (первый член формулы (30)). Это имеет значение для определения максимального числа частотных компонентов ЧФФ P_k , $k = \bar{0}, M$, $M \leq \text{ant}(N/2)$. Например, M можно найти следующим образом:

$$M = \max\{K\}, \quad K = 0, 1, \dots, \text{ant}(N/2);$$

при условии

$$\{\text{cov}(P_M, P_M)/P_M^2\} \leq \epsilon, \quad (31)$$

где ϵ - заданный уровень относительной погрешности.

Вариант 2. Погрешности считывания и векторизации одинаковы для всех компонентов $\vec{\varphi}_0$ и $\vec{\varphi}$, и равны d . Известна ковариационная матрица \hat{C}_{φ_0} . Введем четырехмерную ковариационную матрицу откликов \hat{C}_k

$$\text{cov}(K_{mk}, K_{ne}) = \Delta K_{mk} \cdot \Delta K_{ne}, \quad (32)$$

где K_{mk} и K_{ne} - элементы матрицы откликов \hat{K} . Пусть известен оператор \hat{L} , с помощью которого получают спектр $\vec{\varphi}$ из $\vec{\varphi}_0$.

$$\vec{\varphi} = \hat{L} \vec{\varphi}_0 = \hat{A} \vec{u}_0, \quad \hat{L} = \hat{A} \hat{K}. \quad (33)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \text{cov}(\varphi_i, \varphi_j) &= \Delta \varphi_i \cdot \Delta \varphi_j \approx \sum_k L_{ik} \cdot \Delta \varphi_{0k} \sum_e L_{je} \cdot \Delta \varphi_{0e} + \\ &+ \sum_k \Delta L_{ik} \cdot \varphi_{0k} \sum_e \Delta L_{je} \cdot \varphi_{0e} + \sum_k L_{ik} \cdot \Delta \varphi_{0k} \sum_e \Delta L_{je} \cdot \varphi_{0e} + \\ &+ \sum_k \Delta L_{ik} \cdot \varphi_{0k} \sum_e L_{je} \cdot \Delta \varphi_{0e}. \end{aligned} \quad (34)$$

Последние два члена в формуле (34) равны нулю, т.к. $\Delta \varphi_{0k} \cdot \Delta L_{je} = 0$, $\Delta L_{ik} \cdot \Delta \varphi_{0e} = 0$ (статистически независимы). Поэтому

$$\text{cov}(\varphi_i, \varphi_j) \approx \sum_k \sum_e L_{ik} \cdot \text{cov}(\varphi_{0k}, \varphi_{0e}) \cdot L_{je} + \sum_k \sum_e \varphi_{0k} \cdot \text{cov}(L_{ik}, L_{je}) \varphi_{0e}. \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \text{Cov}(L_{ik}, L_{le}) &= \overline{\Delta L_{ik} \cdot \Delta L_{le}} \approx \sum_n \sum_m A_{im} \cdot A_{jn} \cdot \overline{\Delta K_{mk} \cdot \Delta K_{ne}} = \\ &= \sum_n \sum_m A_{em} \cdot \text{Cov}(K_{mk}, K_{ne}) \cdot A_{jn} . \end{aligned}$$

Хотя при построении оператора \hat{A} существенно используются элементы матрицы \hat{K} , в рассматриваемом случае оператор \hat{A} можно считать известным точно, т.к. погрешности \hat{K} учитываются при вычислениях $\vec{u}_0 = \hat{K} \vec{\varphi}_0$.

Отсюда получим

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\varphi_i, \varphi_j) &\approx \sum_k \sum_l L_{ik} \cdot \text{Cov}(\varphi_{0k}, \varphi_{0l}) \cdot L_{lj} + \\ &+ \sum_k \sum_l \varphi_{0k} \left[\sum_n \sum_m A_{im} \cdot \text{Cov}(K_{mk}, K_{ne}) A_{jn} \right] \varphi_{0l} . \end{aligned} \quad (36)$$

В матричной записи (36) преобразуется к виду

$$\hat{C}_\varphi = \hat{L} \hat{C}_{\varphi_0} \hat{L}^t + \vec{\varphi}_0^t \hat{A} \hat{C}_K \hat{A}^t \vec{\varphi}_0 . \quad (37)$$

Если операторы \hat{L} и \hat{A} неизвестны в явном виде, то \hat{C}_φ находят методом рандомизации. Независимо (статистически) моделируют компоненты вектора $\vec{\varphi}_0$ и матрицы \hat{K} .

$$\text{Cov}(\varphi_i, \varphi_j) = \left[\sum_{n=1}^N (\varphi_i^n - \varphi_i)(\varphi_j^n - \varphi_j) \right] / N , \quad (38)$$

где φ_i^n - n -я вариация компонента φ_i .

$$\vec{\varphi}^n = \vec{\varphi} + \vec{\xi}^n , \quad (39)$$

где $\vec{\xi}^n$ - n -я вариация случайного вектора $\vec{\xi}$.

Согласно методу раб. [2]

$$\vec{\xi}^n = \hat{T} \vec{h}^n , \quad (40)$$

где \vec{h}^n - случайный вектор, каждый компонент h_i которого статистически независим от другого и распределен по нормальному закону с параметрами $(0, 1)$. Компоненты \vec{h}^n легко получить на ЭВМ.

Матрица \hat{T} такая, что

$$\hat{T} \hat{T}^t = \hat{C}_{\varphi_0} . \quad (41)$$

Из теории матриц следует, что существует треугольная матрица $\hat{T} = \{t_{ij}\}$, удовлетворяющая (41). Если при $j > i$ все $t_{ij} = 0$, то (41) превращается в систему, состоящую из $N(N+1)/2$ уравнений

$$\sum_{k=1}^j t_{ik} t_{jk} = \text{Cov}(\varphi_{0i}, \varphi_{0j}), \quad 1 \leq j \leq i \leq N . \quad (42)$$

Значения t_{ij} можно вычислить последовательно в следующем порядке: 1) $j=1, i=1, 2, \dots, N$; 2) $j=2, i=2, 3, \dots, N$; 3) $j=3, i=3, 4, \dots, N$ и т.д.

Аналогичный метод можно применить для нахождения вариаций матрицы \hat{K} . В этом случае \hat{K} представляют в виде вектора, состоящего из цепочки строк матрицы \hat{K} .

Погрешности считывания и векторизации $\vec{\varphi}_0$ и $\vec{\varphi}$ вычисляют отдельно по формуле (30).

В расчетных экспериментах нет смысла специально задавать матрицу \hat{C}_φ , поэтому формулу (37) можно редуцировать в формулу

$$\hat{C}_\varphi = \vec{\varphi}_0^t \hat{A} \hat{C}_k \hat{A}^t \vec{\varphi}_0. \quad (43)$$

Вариант 3. Энергетический спектр измерен спектрометрической системой неклассического типа и получен аппаратный спектр \vec{u} с ковариационной матрицей \hat{C}_u . Независимым образом измерен или рассчитан истинный спектр $\vec{\varphi}_0$, известна его ковариационная матрица \hat{C}_φ . Погрешности считывания и векторизации одинаковы для $\vec{\varphi}_0$ и $\vec{\varphi}$, и равны α .

Пусть спектр $\vec{\varphi}$ мы получаем из \vec{u} с помощью оператора \hat{A} , т.е. $\vec{\varphi} = \hat{A} \vec{u}$. Так как \vec{u} - измеренный аппаратный спектр, его ковариационная матрица \hat{C}_u отображает чисто статистические погрешности. В отличие от варианта 2 здесь мы не можем не учитывать погрешности оператора. Пусть известна четырехмерная ковариационная матрица \hat{C}_A с элементами

$$\text{Cov}(A_{ik}, A_{je}) = \Delta A_{ik} \cdot \Delta A_{je}. \quad (44)$$

Тогда

$$\Delta \varphi_i \cdot \Delta \varphi_j = \sum_k \sum_e A_{ik} \cdot \text{Cov}(u_k, u_e) \cdot A_{je} + \sum_k \sum_e u_k \cdot \text{Cov}(A_{ik}, A_{je}) \cdot u_e,$$

или в матричном виде

$$\hat{C}_\varphi = \hat{A} \hat{C}_u \hat{A}^t + \vec{u}^t \hat{C}_A \vec{u}. \quad (45)$$

Если оператор \hat{A} неизвестен в явном виде, следует применить для нахождения \hat{C}_φ метод рандомизации. Погрешности считывания и векторизации вычисляют также по формуле (30).

3. МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ИНФОРМАЦИОННОГО КАЧЕСТВА И РАЗРЕШЕНИЯ ПО ЧАСТОТНОЙ ФУНКЦИИ ОТКЛИКА

Пусть мы имеем вычисленную в дискретном представлении ЧФФ P_k , $k = \overline{1, M}$, $M \leq \text{int}(N/2)$ и её ковариационную матрицу \hat{C}_p . В предыдущих разделах показано, как это можно сделать. Параметром ЧФФ является информационное качество q либо разрешение Δ . Эти две величины связаны простыми соотношениями [1]. В зависимости от удобства рассмотрения P_k можно представить в виде функции q , $P_k = P_k(q)$, или в виде $P_k = P_k(\Delta)$.

Задачей оценки информационного качества q (или разрешения Δ) является вычисление значения и погрешности величины q (Δ) по заданной ЧФФ и её ковариационной матрице.

Для получения оценок q или Δ необходимо задать функцию $P_k(q)$ или $P_k(\Delta)$, т.е. предположить тип функции отклика. Рассмотрим наиболее распространенный для спектрометрических систем классического типа и наиболее простой в вычислительном плане тип функции отклика - плотность нормального распределения.

Оценка информационного качества и разрешения для функции отклика типа плотности нормального распределения. Для этой функции отклика q и Δ выражаются через P_k в явном виде. Перепишем формулу (9) для дискретных частот

$$P_k = \exp(-2\pi^2 k^2 / N^2 q) = \exp(-\pi^2 k^2 \Delta^2 / 4 \ln 2 \cdot N^2). \quad (46)$$

Тогда

$$q_k = -2\pi^2 k^2 / \ln P_k \cdot N^2, \quad (47)$$

$$\Delta_k = 2\sqrt{\ln 2} \cdot N \cdot \sqrt{-\ln P_k} / \pi \cdot k. \quad (48)$$

Дисперсии величин q и Δ равны

$$D(q_k) \approx [dq/dP_k]^2 D(P_k) = 4\pi^4 k^4 \text{Cov}(P_k, P_k) / P_k^2 (\ln P_k)^4 \cdot N^4, \quad (49)$$

$$D(\Delta_k) \approx [\partial \Delta / \partial P_k]^2 D(P_k) = \ln 2 \cdot N^2 \cdot \text{Cov}(P_k, P_k) / \pi^2 P_k^2 (-\ln P_k) \cdot k^2. \quad (50)$$

Относительные погрешности q и Δ равны

$$S q_k = \sqrt{D(q_k)} / q_k = \sqrt{\text{Cov}(P_k, P_k)} / P_k (-\ln P_k) = S P_k / (-\ln P_k), \quad (51)$$

$$S \Delta_k = \sqrt{D(\Delta_k)} / \Delta_k = \sqrt{\text{Cov}(P_k, P_k)} / 2 P_k (-\ln P_k) = S P_k / 2 (-\ln P_k). \quad (52)$$

Формулы (47) - (52) дают оценку φ и Δ для отдельного значения ЧФО в точке с частотой K . При этом, если данный тип функции отклика соответствует реальной спектрометрической системе, то значения φ и Δ не должны зависеть от K в пределах статистических погрешностей. Это означает, что член $(-e_n P_k)$ должен расти как K^2 .

В рассмотренном методе используется только одно значение ЧФО в какой-либо точке K и не используется информация об интересующих нас величинах, заключенная в других точках ЧФО. φ_k и Δ_k являются случайными, при этом они являются оценками в разных точках при разных частотах K одних и тех же величин φ и Δ . По правилам статистики уменьшить погрешность, т.е. учесть информацию в различных точках ЧФО можно путём уореднения оценок, сделанных в этих точках, а именно:

$$\varphi = \frac{\sum_{k=1}^M v_k \varphi_k}{\sum_{k=1}^M v_k}, \quad \Delta = \frac{\sum_{k=1}^M w_k \Delta_k}{\sum_{k=1}^M w_k}, \quad (53)$$

где v_k и w_k - статистические веса, $M \leq \text{ant}(N/2)$. Тогда дисперсии φ и Δ будут выражаться формулами

$$D(\varphi) = \frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M v_i v_j \text{cov}(\varphi_i, \varphi_j)}{[\sum_{i=1}^M v_i]^2}, \quad (54)$$

$$D(\Delta) = \frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M w_i w_j \text{cov}(\Delta_i, \Delta_j)}{[\sum_{i=1}^M w_i]^2}. \quad (55)$$

Ковариации $\text{cov}(\varphi_i, \varphi_j)$ и $\text{cov}(\Delta_i, \Delta_j)$ можно приближенно вычислить по формулам

$$\begin{aligned} \text{cov}(\varphi_i, \varphi_j) &\approx \frac{\partial \varphi_i}{\partial P_i} \cdot \frac{\partial \varphi_j}{\partial P_j} \cdot \text{cov}(P_i, P_j) = \\ &= 4\pi^4 \cdot i^2 \cdot j^2 \cdot \text{cov}(P_i, P_j) / N^4 \cdot P_i \cdot P_j \cdot (e_n P_i)^2 (e_n P_j)^2, \end{aligned} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \text{cov}(\Delta_i, \Delta_j) &\approx \frac{\partial \Delta_i}{\partial P_i} \cdot \frac{\partial \Delta_j}{\partial P_j} \cdot \text{cov}(P_i, P_j) = \\ &= e_n^2 \cdot N^2 \cdot \text{cov}(P_i, P_j) / \pi^2 \cdot i \cdot j \cdot P_i \cdot P_j \sqrt{(-e_n P_i)(-e_n P_j)}. \end{aligned} \quad (57)$$

Необходимо найти такие веса v_i и w_i , $i = \overline{1, M}$, чтобы $D(\varphi)$ и $D(\Delta)$ были минимальными. Продифференцируем (54) по v_i и приравняем результат нулю

$$\begin{aligned} \partial D(\varphi) / \partial v_i &= \left[\sum_{j=1}^M v_j \text{cov}(\varphi_i, \varphi_j) + \sum_{i=1}^M v_i \cdot \text{cov}(\varphi_i, \varphi_i) - \right. \\ &\left. - 2 \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M v_i v_j \text{cov}(\varphi_i, \varphi_j) / \sum_{i=1}^M v_i \right] / \left[\sum_{i=1}^M v_i \right]^2 = 0. \end{aligned}$$

Учитывая, что $\text{cov}(\varphi_i, \varphi_j)$ - элементы симметричной ковариационной

матрицы \hat{C}_q , получим

$$\sum_{j=1}^M v_j \text{Cov}(q_\ell, q_j) = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M v_i v_j \text{Cov}(q_i, q_j) / \sum_{i=1}^M v_i \quad (58)$$

Правая часть (58) не зависит от индекса ℓ , т.е. постоянна при значении $\ell = \overline{1, M}$

$$\sum_{j=1}^M v_j \text{Cov}(q_\ell, q_j) = \text{const} \quad (59)$$

В матричной форме (59) имеет вид

$$\hat{C}_q \vec{v} = \vec{C}_{\text{const}} \quad (60)$$

где \hat{C}_q - ковариационная матрица q с элементами $\text{Cov}(q_i, q_j)$, $i, j = \overline{1, M}$, \vec{v} - вектор-столбец с элементами v_i , $i = \overline{1, M}$, \vec{C}_{const} - вектор-столбец, состоящий из одинаковых элементов, равных const . Тогда \vec{v} равно

$$\vec{v} = \hat{C}_q^{-1} \cdot \vec{C}_{\text{const}} \quad (61)$$

В формуле (61) элементы \vec{C}_{const} могут иметь любое значение.

Для определенности потребуем, чтобы эти элементы были равны 1. Обозначим вектор-столбец с M элементами, равными 1, символом $\vec{1}$.

Получим

$$\vec{v} = \hat{C}_q^{-1} \vec{1} \quad (62)$$

Формула (62) позволяет вычислить оптимальные веса v_i , минимизирующие дисперсии $D(q)$. Структура формул для получения дисперсий $D(q)$ и $D(\Delta)$ одинакова, поэтому

$$\vec{w} = \hat{C}_\Delta^{-1} \vec{1} \quad (63)$$

где \hat{C}_Δ - ковариационная матрица Δ .

Если матрицы \hat{C}_q и \hat{C}_Δ диагональные, т.е. нет корреляции между значениями ЧД в точках K или корреляция мала, то приходим к обычным статистическим весам

$$v_i = \text{Cov}^{-1}(q_i, q_i) = 1/D(q_i) \quad (64)$$

$$w_i = \text{Cov}^{-1}(\Delta_i, \Delta_i) = 1/D(\Delta_i) \quad (65)$$

Напишем формулы (53) - (55) в окончательном виде, считая, что веса вычисляются по формулам (64) - (65).

$$q = \frac{2\pi^2}{N^2} \sum_{k=1}^M \frac{k^2}{(-\ell_k P_k)} \cdot \frac{P_k^2 (\ell_k P_k)^4}{k^4 \text{Cov}(P_k, P_k)} / \sum_{k=1}^M \frac{P_k^2 (\ell_k P_k)^4}{k^4 \text{Cov}(P_k, P_k)} \quad (66)$$

$$D(q) = \frac{4\pi^4}{N^4} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \frac{P_i P_j (\ell_i P_i)^2 (\ell_j P_j)^2 \text{Cov}(P_i, P_j)}{i^2 \cdot j^2 \cdot \text{Cov}(P_i, P_i) \cdot \text{Cov}(P_j, P_j)} / \left[\sum_{i=1}^M \frac{P_i^2 (\ell_i P_i)^4}{i^4 \text{Cov}(P_i, P_i)} \right]^2 \quad (67)$$

$$\Delta = \frac{2\sqrt{\ell_n 2} \cdot N}{\pi} \sum_{k=1}^M \frac{\rho_k^2 (-\ell_n \rho_k)^{3/2}}{\text{Cov}(\rho_k, \rho_k)^{3/2}} / \sum_{k=1}^M \frac{k^2 \rho_k^2 (-\ell_n \rho_k)}{\text{Cov}(\rho_k, \rho_k)} \quad (68)$$

$$D(\Delta) = \frac{\ell_n 2 \cdot N^2}{\pi^2} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \frac{i \cdot j \cdot \rho_i \cdot \rho_j \cdot \sqrt{(-\ell_n \rho_i)(-\ell_n \rho_j)}}{\text{Cov}(\rho_i, \rho_i) \cdot \text{Cov}(\rho_j, \rho_j)} \cdot \text{Cov}(\rho_i, \rho_j) / \left[\sum_{i=1}^M \frac{i^2 \rho_i^2 (-\ell_n \rho_i)}{\text{Cov}(\rho_i, \rho_i)} \right]^2 \quad (69)$$

Если корреляции между компонентами ЧФД малы, т.е. $\text{Cov}(\rho_i, \rho_j) = 0$, то формулы (67) и (69) приобретают более простой вид

$$D(q) = \frac{4\ell_n^4}{N^4} / \sum_{k=1}^M \frac{\rho_k^2 (\ell_n \rho_k)^4}{k^4 \text{Cov}(\rho_k, \rho_k)} \quad (70)$$

$$D(\Delta) = \frac{\ell_n 2 \cdot N^2}{\pi^2} / \sum_{k=1}^M \frac{k^2 \rho_k^2 (-\ell_n \rho_k)}{\text{Cov}(\rho_k, \rho_k)} \quad (71)$$

Из упрощенных формул (70) и (71) непосредственно видно, что дисперсии $D(q)$ и $D(\Delta)$ уменьшаются при увеличении M , т.е. числа используемых точек. Члены сумм в этих формулах изменяются с ростом K примерно по закону $[K^2 / \delta \rho_k]^2$. При больших значениях K резко возрастают погрешности $\delta \rho_k$, члены этих сумм становятся малыми, увеличение M не дает заметного уменьшения дисперсии $D(q)$ и $D(\Delta)$. Однако сильно возрастает вероятность появления в точечных оценках q и Δ неучтенных погрешностей, обусловленных погрешностями округления и эффектом конечного суммирования в преобразованиях Фурье. Это может привести к увеличению реальных погрешностей q и Δ при формальном их уменьшении. Такое же явление может возникнуть и в общем случае при расчете дисперсий $D(q)$ и $D(\Delta)$ по формулам (67) и (69).

Требуется найти оптимальное M , которое задавало бы максимальное число членов сумм, но при котором еще не оказывались бы на результатах неучтенные погрешности.

Решим эту задачу способом последовательного фильтрации.

Пусть по формулам (70) - (71) вычислены q и Δ с дисперсиями $D(q)$ и $D(\Delta)$. Вычислим точечные значения q_k и Δ_k с дисперсиями для $k = M+1$ по формулам (47) - (50). Если

$$|q - q_k| > \ell_2 \cdot \sqrt{D(q) + D(q_k)} \quad (72)$$

или

$$|\Delta - \Delta_k| > \ell_2 \cdot \sqrt{D(\Delta) + D(\Delta_k)}, \quad (73)$$

то точка с частотой $k = M+1$ считается ошибочной и не учитывается в соответствующих суммах формул (66) - (69) и (70) - (71). Коэффициент ℓ_2 задает уровень надежности фильтра. Например, при $\ell_2 = 2$

будут отбрасываться вместе с ошибочными около 5 % "правильных" точек, что вполне допустимо.

С помощью такого фильтра можно установить оптимальное значение M , как границу между истинными ($K \leq M$) и ошибочными точечными оценками. Кроме того, фильтр позволяет исключить возможные ошибочные точки ниже границы M .

Оценка информационного качества и разрешения для произвольной функции отклика. Обозначим теоретическую ЧФО для заданного типа функции отклика символом P_K^T . P_K - вычисленная по спектрам $\varphi_0(\varepsilon)$ и $\varphi(\varepsilon)$ ЧФО. Пусть q и Δ не выражаются в явном виде через значения ЧФО.

Для нахождения q или Δ применим метод наименьших квадратов. Формулы для q и Δ одинаковы, поэтому будем вести изложение только для q .

$$\Omega(q) = \sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M [P_k - P_k^T(q)] C_{kl}^{-1} [P_l - P_l^T(q)] \rightarrow \min, \quad (74)$$

где C_{kl}^{-1} - элемент обратной ковариационной матрицы погрешностей ЧФО C_p^{-1} , $M \times \text{ant}(N/2)$.

Минимум $\Omega(q)$ легко найти обычными численными методами поиска экстремума функции, например, методом деления отрезка пополам.

Так как q не выражается в явном виде через значения P_k , то для определения погрешности q следует применить метод рандомизации. Найдем N независимых случайных векторов размерности M

$$\vec{p}^n = \vec{p} + \vec{y}^n, \quad n = \overline{1, N}, \quad (75)$$

где \vec{p} - вектор с координатами вычисленной ЧФО P_k , $k = \overline{1, M}$.

\vec{y}^n - случайный вектор с компонентами, распределенными по M -мерному нормальному закону. Математическое ожидание $M(\vec{y}_i) = 0$,

$M(y_i, y_j) = \text{cov}(P_i, P_j)$, $i, j = \overline{1, M}$. Моделирование случайных векторов \vec{y}^n производится на ЭВМ с использованием формул (40)-

(42). Далее по формуле (74) вычислим N значений q_n . Так как векторы \vec{p}^n статистически независимы, то

$$q = \sum_{n=1}^N q_n / N, \quad (76)$$

$$D(q) = \sum_{n=1}^N (q_n - q)^2 / N. \quad (77)$$

Определить оптимальное значение M можно также методом фильтрации точечных оценок по формулам (72) и (73).

Оценка типа функции отклика. Нетрудно показать, что если вычисленная ЧФО P_k соответствует заданной $P_k^T(q)$, то сумма произве-

дений отклонений $\Omega(q)$ из формулы (74) должна быть распределена по закону χ^2_M . В самом деле, компоненты вектора $\vec{\varepsilon}$, равные $\varepsilon_k = p_k - \hat{p}_k^T(q)$, должны подчиняться многомерному нормальному распределению, вид которого определяется ковариационной матрицей \hat{C}_p . Всегда можно построить такую треугольную матрицу \hat{T} , что $\hat{T} \hat{T}^t = \hat{C}_p$, $\vec{\varepsilon} = \hat{T} \vec{\eta}$, где $\vec{\eta}$ - вектор со статистически независимыми компонентами, распределенными вокруг нуля с дисперсией, равной единице [2].

$$\vec{\eta}^t \vec{\eta} = (\hat{T}^{-1} \vec{\varepsilon})^t (\hat{T}^{-1} \vec{\varepsilon}) = \vec{\varepsilon}^t (\hat{T}^{-1})^t \hat{T}^{-1} \vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}^t \hat{C}_p^{-1} \vec{\varepsilon}.$$

Но $\vec{\eta}^t \vec{\eta} \approx \chi^2_M$, поэтому

$$\Omega(q) = (\vec{p} - \hat{p}^T(q))^t \hat{C}_p^{-1} (\vec{p} - \hat{p}^T(q)) \leq \chi^2_M. \quad (76)$$

Таким образом, если выполняется соотношение (76), то заданный тип функции отклика адекватен спектрометрической системе в статистическом смысле, т.е. при данных погрешностях спектров $\vec{\psi}_0$ и $\vec{\psi}$. Если (76) не выполняется, то следует рассмотреть другие типы функций отклика.

Может случиться так, что соотношение (76) справедливо для нескольких типов функций отклика. Это обычно происходит, если велики погрешности спектров $\vec{\psi}_0$ и $\vec{\psi}$. В таком случае эти функции отклика равноправны для данной спектрометрической системы и спектров $\vec{\psi}_0$, $\vec{\psi}$. Следует ожидать, что вычисленные значения информационного качества для различных равноправных функций отклика будут совпадать в пределах статистических погрешностей. Наиболее удобно вычислять информационное качество (или эквивалентное разрешение) с использованием функции отклика типа плотности нормального распределения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные итоги работы заключаются в следующем:

1. В рамках концепции раб. [1] предложен новый метод для оценки информационного качества и разрешения спектрометрических систем, основанный на частотном анализе пары спектров $\psi_0(\varepsilon)$ и $\psi(\varepsilon)$ - метод частотного анализа.

2. Получены формулы и разработаны принципиальные алгоритмы для реализации метода частотного анализа на ЭВМ. Этот метод значительно

проще в вычислительном плане, чем предложенные в раб. [1] методы, основанные на нелинейном программировании.

3. Как следует из формулы (4) существенным ограничением метода частотного анализа является то, что он дает усредненную по всему рассматриваемому энергетическому диапазону оценку информационного качества ϱ и абсолютного разрешения Δ (энергетический диапазон $[E_{\min}, E_{\max}]$ определяется областью значимых значений спектров $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$). Это важно в тех случаях, когда ϱ и Δ обнаруживают сильную зависимость от энергии.

Для устранения этого ограничения необходимо разработать способы оценки ϱ и Δ на произвольном выделенном участке спектра внутри энергетического диапазона

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Семёнов В.П., Трыков Л.А. Разрешение спектрометрических систем различных типов. Постановка проблемы - Препринт ФЭИ - 1632, Обнинск, 1984.
2. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. - М., "Наука", 1973.

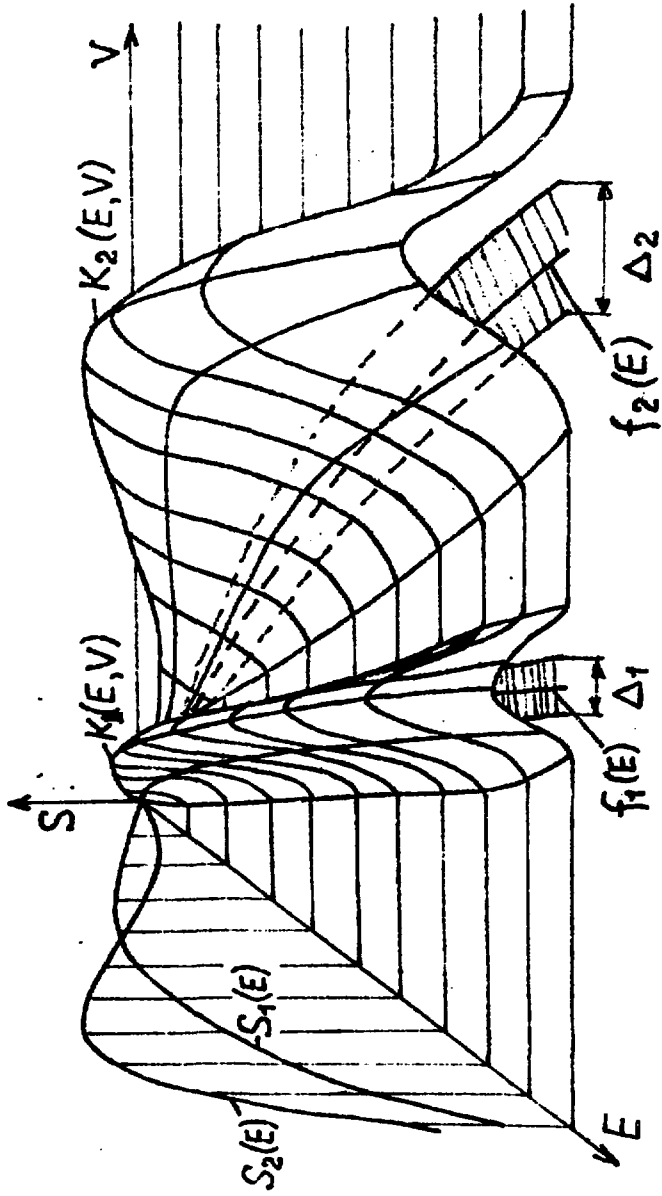


Рис. 1. Функции отклика спектротрических систем различных типов.

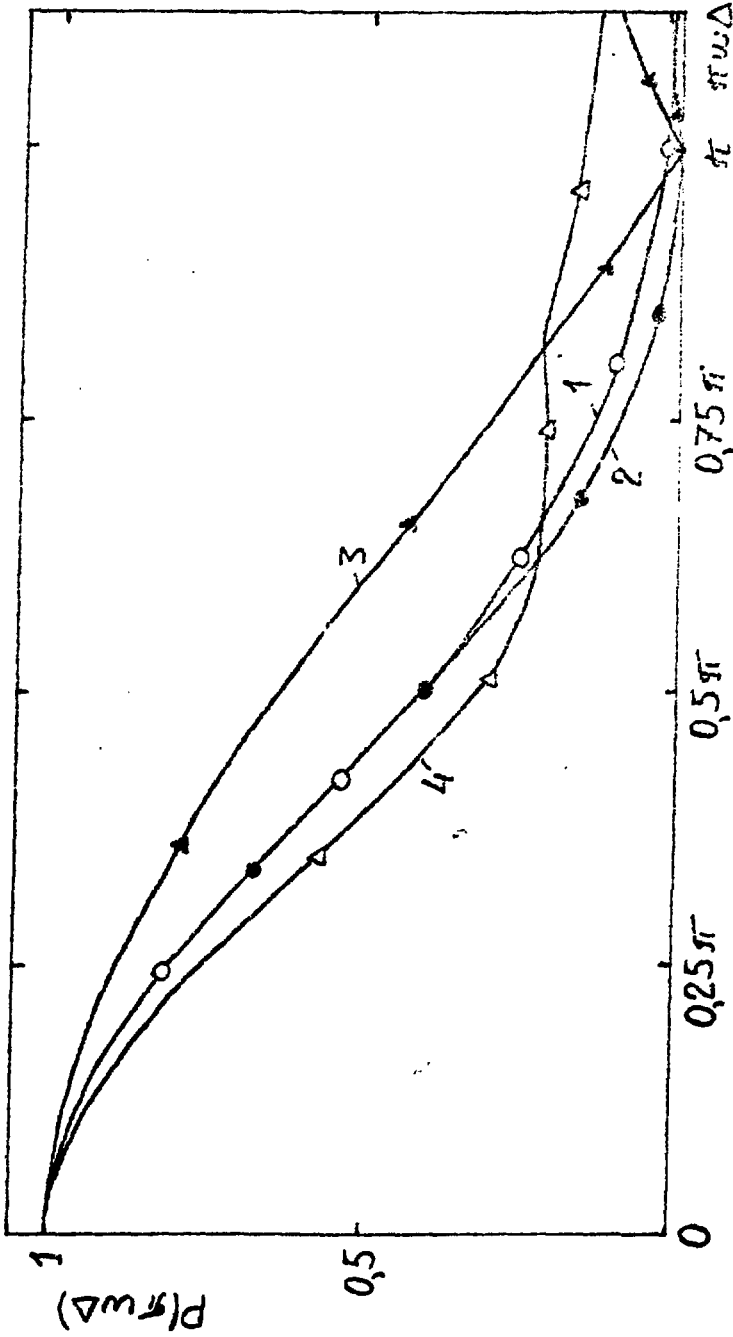


Рис. 2. Частотные функции отклика для 4-х типов функций отклика спектрометрических систем: 1 - плотность вероятности нормального распределения; 2 - равнобедренный треугольник; 3 - равноугольный; 4 - прямоугольный треугольник.

Технический редактор **Н. П. Герасимова**

Подписано к печати 17.07.1990 г. ТБ-03405 Бумага писчая № 1
Формат 60×90^{1/16} Усл. п. л. 1,5 Уч.-изд. л. 1,2 Тираж 80 экз.
Цена 24 коп. Индекс 3624 ФЭИ-2117

Отпечатано на ротапринтере.
249020, г. Обнинск Калужской обл., ФЭИ

24 коп.

Индекс 3624

**Метод оценки информационного качества и разрешения
спектрометрических систем.**

ФЭИ-2117. 1990. 1-23.