

ИДЕНТИФИКАЦИЯ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ

УДК 535.853.3

Н. Г. ПРЕОБРАЖЕНСКИЙ, А. И. СЕДЕЛЬНИКОВ

(Новосибирск)

ВОПРОСЫ ОПТИМИЗАЦИИ ИЗМЕРЕНИЙ В ПРИКЛАДНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

В прикладной спектроскопии экспериментатор регистрирует отклик измерительного прибора на свойства исследуемого объекта. Задача нахождения характеристик объекта по этому отклику — обратная задача интерпретации экспериментальных данных, причем точность ее решения определяется двумя основными факторами: относительной случайной помехой (шумом измерения) и систематическим приборным искажением.

Суммарным систематическим искажениям обычно принято ставить в соответствие аппаратную функцию прибора $K_\delta(\nu)$ с полушириной δ (ν — частота, отсчитываемая от выбранного центра). Росту полуширины δ соответствует увеличение искажающих влияний. Однако на практике величина δ и относительный уровень шума почти всегда взаимосвязаны. Эта связь обычно проявляется в том, что с возрастанием δ увеличивается интенсивность наблюдаемого экспериментального сигнала $f_\delta(\nu)$, т. е. повышается отношение сигнал/шум. Этот факт можно расценивать как падение относительного уровня шумовой помехи. Таким образом, появляются основания говорить о существовании некоторого оптимального режима спектроскопических измерений. Исследуем этот вопрос подробнее.

Искомое спектральное распределение (например, контур линии) $\varphi(\nu)$ и наблюдаемый сигнал $f_\delta(\nu)$ связаны в простейшем случае соотношением свертки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K_\delta(\nu - \nu') \varphi(\nu') d\nu' = f_\delta(\nu). \quad (1)$$

Далее в работе используются аппаратные функции [1, 2]: спектрографа —

$$K_\delta(\nu) = \begin{cases} c & \text{при } \nu \in [-\delta, \delta]; \\ 0 & \text{при } \nu \notin [-\delta, \delta], \end{cases} \quad (2)$$

монохроматора —

$$K_\delta(\nu) = \begin{cases} c(2\delta - |\nu|) & \text{при } |\nu| \leq 2\delta; \\ 0 & \text{при } |\nu| > 2\delta, \end{cases} \quad (3)$$

интерферометра Фабри — Перо (идеального) —

$$K_\delta(\nu) = c \frac{\delta^2}{\delta^2 + (\Delta\nu^2/\pi^2) \sin^2(\pi\nu/\Delta\nu)}, \quad (4)$$

где $\Delta\nu$ — область дисперсии, c — константа.

Для выявления вида зависимости уровня сигнала $f_\delta(\nu)$ и относительного уровня шумовой помехи от полуширины δ аппаратной функции проведены численные расчеты с подстановкой (2)—(4) в (1) при разных значениях δ . Результаты расчетов представлены на рис. 1, где $f_m =$

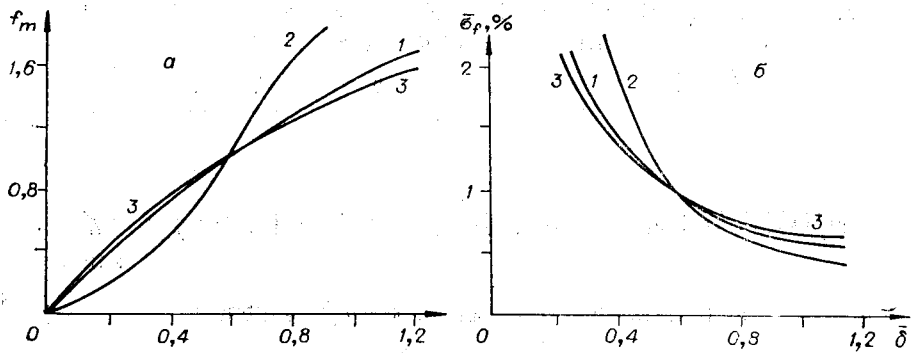


Рис. 1. Зависимость максимального значения f_m сигнала $f_\delta(v)$ (а) и относительного уровня шума $\bar{\sigma}_f$ (б) от относительной полуширины аппаратной функции $\bar{\delta}$.

$= \max [f_\delta(v)]$. В качестве функции $\varphi(v)$ при этом использован доплеровский спектральный контур $\varphi(v) = \exp(-v^2 \ln 2/\gamma^2)$ с полушириной γ . Приведенные на рис. 1 зависимости f_m (в относительных единицах) и $\bar{\sigma}_f = \sigma_f/f_m$ от $\bar{\delta} = \delta/\gamma$ даны для различных спектральных приборов (1 — спектрограф, 2 — монохроматор, 3 — интерферометр Фабри — Перо). Относительная среднеквадратичная погрешность $\bar{\sigma}_f$ составляет 1% от f_m при $\bar{\delta} = 0,6$ (абсолютная же ее величина не зависит от δ).

Известно, что задача нахождения решения $\varphi(v)$ уравнения (1) сопряжена с трудностью, связанной с неустойчивостью решения к случайным ошибкам сигнала $f_\delta(v)$. Уровень этой неустойчивости различен для различных δ . В условиях отмеченной выше взаимосвязи относительной величины шумовой помехи и параметра δ существует режим измерения, при котором неустойчивость минимальна.

Проиллюстрируем это на примере, когда в качестве аппаратной функции $K_\delta(v)$ используется выражение (4). Проводя дискретизацию задачи, сведем уравнение (1) к системе линейных алгебраических уравнений. В соответствии с [3] среднеквадратичная погрешность нерегуляризованного решения уравнения (1) может быть выражена в виде

$$\tilde{\sigma}_\varphi = \delta_f \left[\frac{1}{N} \sum_{j=N_1}^{N_2} \frac{1}{|K_\delta(\omega_j)|^2} \right]^{1/2}, \quad (5)$$

где N — число дискретных отсчетов по переменной v (или по фурье-частотам ω); $N_1 = -N/2 + 1$; $N_2 = N/2 + 1$; $K_\delta(\omega_j)$ — значение фурье-образа аппаратной функции $K_\delta(v)$ на фурье-частоте ω_j . На рис. 2 приведен график отношения $\eta = \tilde{\sigma}_\varphi/\sigma_f$ в виде зависимости от относительной величины параметра $\bar{\delta}$. Как следует из рисунка, зависимость имеет минимум при некотором $\bar{\delta}$, характеризующем наиболее информативный режим измерения.

В силу больших величин коэффициента усиления погрешности η , имеющей место при построении нерегуляризованного решения уравнения (1) (на рис. 2 эта величина имеет порядок $10^2 \div 10^3$), для нахождения $\varphi(v)$ из уравне-

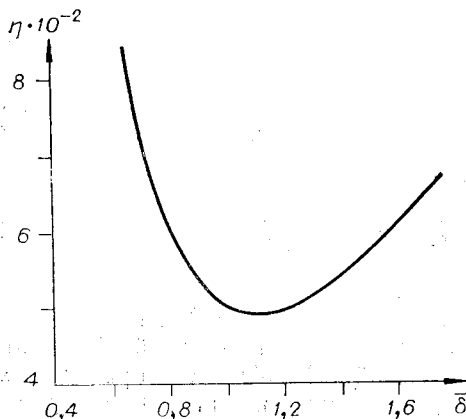


Рис. 2. Зависимость коэффициента усиления погрешности нерегуляризованного решения η от параметра $\bar{\delta}$ для интерферометра Фабри — Перо.

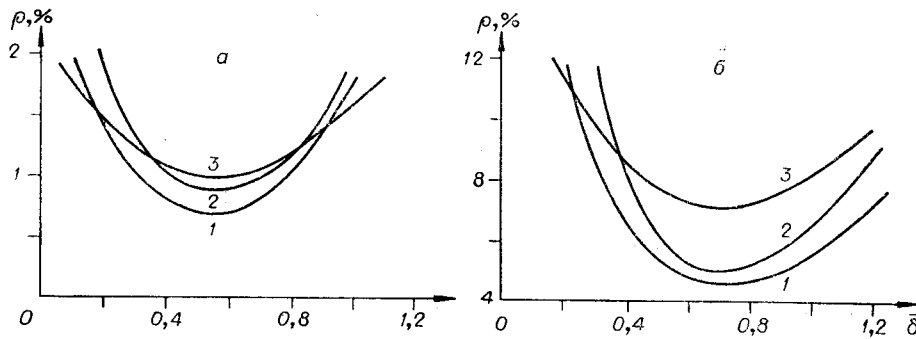


Рис. 3. Зависимость меры погрешности ρ регуляризованного решения от параметра $\bar{\delta}$ при малом (а) и большом (б) уровнях шума.

ния (1) необходимо применять устойчивые методы поиска решения (например, методы регуляризации [3, 4]). При использовании методов регуляризации на погрешность определения $\varphi(v)$ кроме указанных факторов влияют также вид стабилизирующего функционала, величина параметра регуляризации, вид искомого решения, уровень зашумленности и т. д. Однако наличие отмеченного выше минимума неустойчивости при некотором $\bar{\delta}$ существенным образом сказывается и при построении регуляризованного решения [5, 6].

Для рассмотрения этого вопроса в соответствии с [4] примем в качестве меры погрешности регуляризованного решения величину ρ , которую представим в виде зависимости от параметра $\bar{\delta}$:

$$\rho(\bar{\delta}) = \left\{ \sup_v [\beta(v, \bar{\delta})]^2 + \sigma_\varphi^2 \right\}^{1/2}, \quad (6)$$

причем

$$\beta(v, \bar{\delta}) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha M(\omega) \tilde{\varphi}_T(\omega)}{|\tilde{K}_\delta(\omega)|^2 + \alpha M(\omega)} \exp(i\omega v) d\omega; \quad (7)$$

$$\sigma_\varphi^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|K_\delta(\omega)|^2 S(\omega)}{[|\tilde{K}_\delta(\omega)|^2 + \alpha M(\omega)]^2} d\omega, \quad (8)$$

где $\tilde{K}_\delta(\omega)$ и $\tilde{\varphi}_T(\omega)$ — фурье-образы функций $K_\delta(v)$ и точного решения $\varphi_T(v)$; $S(\omega)$ — спектральная плотность шума экспериментальной кривой; α — параметр регуляризации; $M(\omega)$ — стабилизирующая функция [4]. Ограничимся рассмотрением случая, когда $S(\omega) = S = \text{const}$ (белый шум) и $M(\omega) = \omega^4$ (стабилизатор 2-го порядка).

На рис. 3 приведены зависимости $\rho(\bar{\delta})$ для различных спектральных приборов (1 — спектрограф, 2 — монохроматор, 3 — интерферометр Фабри — Перо). Искомое решение предполагалось в виде доплеровского спектрального контура с полушириной γ , параметр $\bar{\delta} = \delta/\gamma$. Уровень зашумленности выбирался из следующего условия: при $\bar{\delta} = 0,5$ среднеквадратичная погрешность измерения должна составлять 1% от f_m (рис. 3, а) или 10% от f_m (рис. 3, б). Параметр регуляризации α находился на основании статистического критерия, характеризуемого максимумом апостериорной плотности вероятности распределения α [3].

Как следует из [6], на положение минимума кривых $\rho(\bar{\delta})$ вид используемого критерия выбора параметра регуляризации влияет слабо. В [6] показано, что в случае, когда шум экспериментального сигнала не является аддитивным, положение минимума смещается к меньшим значениям $\bar{\delta}$.

Графики рис. 3 иллюстрируют наличие оптимальных значений $\bar{\delta} = \bar{\delta}_m$, при которых погрешность восстановления минимальна. Однако в реальных условиях построение таких графиков усложняется тем, что

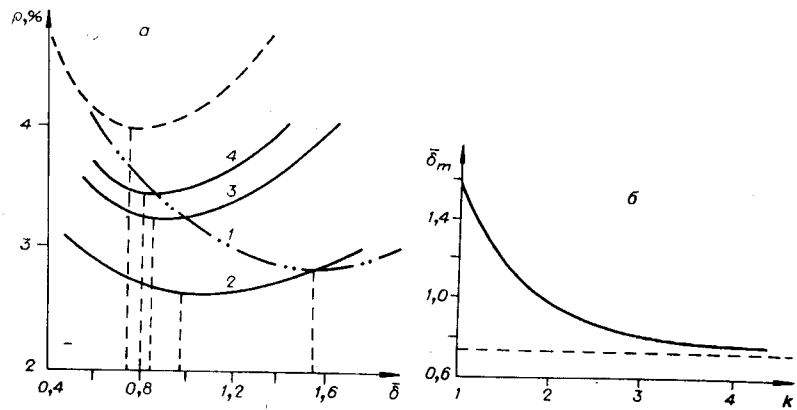


Рис. 4. Результаты применения итерационного алгоритма поиска оптимального δ : а — зависимость $\rho(\delta)$ на различных итерациях ($k = 1, 2, 3, 4$); б — зависимость положения минимума $\bar{\delta} = \delta_m$ от числа итераций.

входящая в (7) функция $\tilde{\varphi}_T(\omega)$ неизвестна. Сначала была рассмотрена возможность использования вместо $\tilde{\varphi}_T(\omega)$ фурье-образа регуляризованного решения $\tilde{\varphi}_\alpha(\omega)$, определяемого из [4]. Зависимость меры погрешности $\rho(\delta)$, получаемой по (7) в результате такой замены (для аппаратной функции спектрографа (2)), приведена на рис. 4, а (штрихпунктирная линия). Сопоставление этой кривой с функцией $\rho(\delta)$, определяемой по (7) при известном $\tilde{\varphi}_T(\omega)$ (штриховая линия на рис. 4, а), свидетельствует о существенном отличии положений минимума для обеих кривых.

Далее использовалась итерационная процедура поиска оптимального δ . Она заключалась в нахождении на k -м шаге зависимости

$$\rho^{(k)}(\delta) = \left\{ \sup_v [\beta^{(k)}(v, \delta)]^2 + \sigma_\varphi^2 \right\}^{1/2}, \quad (9)$$

где

$$\beta^{(k)}(v, \delta) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha M(\omega) [\tilde{\varphi}_\alpha(\omega) |_{\delta=\delta_m^{(k-1)}}]}{|\tilde{K}_\delta(\omega)|^2 + \alpha M(\omega)} \exp(i\omega v) d\omega. \quad (10)$$

При этом $\delta_m^{(k-1)}$ есть положение минимума кривой $\rho^{(k-1)}(\delta)$, получаемой на $(k-1)$ -м шаге.

На рис. 4, а цифрами 2—4 (сплошные линии) представлены графики зависимостей $\rho^{(k)}(\delta)$ при $k = 2, 3, 4$. В качестве начального приближения использовано положение минимума кривой $\hat{\rho}(\delta)$ (штрихпунктирная линия). На рис. 4, б показано, как приближается $\delta_m^{(k)}$ (сплошная линия) к оптимальному значению δ_m (штриховая линия) при увеличении числа итераций k .

Проведенное исследование свидетельствует о том, что характерное для спектроскопических приборов взаимодействие случайного и систематического искажающих факторов обуславливает наличие среди множества режимов измерения наиболее информативного. Использование такого режима позволило бы определить искомые характеристики изучаемой среды наиболее точно. В связи с этим возникает задача оптимального планирования эксперимента, целью которой является поиск таких режимов. Приведенный итерационный алгоритм может быть использован для достижения этой цели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лебедева В. В. Техника оптической спектроскопии.— М.: Изд-во МГУ, 1977.
2. Мальшев В. И. Введение в экспериментальную спектроскопию.— М.: Наука, 1979.
3. Турчин В. Ф., Козлов В. П., Малкевич М. С. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач.— УФН, 1970, т. 102, вып. 3.

4. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач.— М.: Наука, 1979.
5. Преображенский Н. Г., Седельников А. И., Чистый И. Л. Об учете аппаратных искажений в спектрах рассеяния Мандельштама — Бриллюэна.— *Опт. и спектр.*, 1979, т. 49, вып. 1.
6. Преображенский Н. Г., Седельников А. И. Оптимизация спектроскопических измерений на основе методов регуляризации.— *Журн. прикл. спектр.*, 1981, т. 35, вып. 4.

*Поступила в редакцию 22 ноября 1982 г.;
окончательный вариант — 5 июля 1983 г.*

УДК 519.6

А. С. ГОЛЬЦОВ

(Харьков)

ПРИМЕНЕНИЕ АПРИОРНОЙ ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫХ ЗАДАЧ

Для решения обратных задач (ОЗ) широко применяется метод регуляризации Тихонова [1], основанный на изменении исходной некорректной математической постановки задачи формальным добавлением к минимизируемому функционалу некоторого стабилизирующего члена. Такой формальный прием не позволяет выяснить, каким образом изменяется при этом физическая постановка рассматриваемой задачи, что затрудняет выполнение анализа допустимости применения такого подхода, а также не дает возможности оценить точность получаемого приближенного решения. Все это сдерживает применение этого метода в практике решения ОЗ, где в последнее время все чаще стали отдавать предпочтение методам параметрической идентификации [2, 3], которые базируются на предварительной параметризации исходной задачи и учитывают стохастическую природу процесса получения экспериментальной информации. Кроме того, в этих методах максимально используется имеющаяся априорная информация, что позволяет производить оценку точности получаемого решения. Однако до настоящего времени еще не исследованы регуляризующие свойства алгоритмов оптимального оценивания [2, 4], лежащих в основе методов идентификации.

В настоящей работе показано, что выбор стабилизирующей добавки в методе регуляризации Тихонова с учетом априорных сведений об опорной траектории искомого решения сводит рассматриваемую обратную задачу к задаче оптимального оценивания состояния некоторой динамической системы. При этом оптимальное регуляризованное решение может быть найдено оптимальным оцениванием по методу максимума апостериорной вероятности.

Рассмотрена задача одновременного определения состояния $x(\tau)$ и входного воздействия $z(\tau)$ динамической системы

$$\frac{dx}{d\tau} = -ax + z(\tau) + bq(\tau) \quad (1)$$

с начальным условием

$$x(0) = 0 \quad (2)$$

по измерениям сигналов $y(\tau)$ и $u(\tau)$ на интервале $0 \leq \tau \leq \tau_N$ при $\tau_N \rightarrow \infty$, связанных с состоянием системы $x(\tau)$ и измеряемым входным воздействием $q(\tau)$ соотношениями

$$y(\tau) = hx(\tau) + v(\tau), \quad (3)$$

$$u(\tau) = \beta q(\tau) + \xi(\tau), \quad (4)$$