

К-41



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

10-94-411

На правах рукописи

УДК 621.391

**КОСАРЕВ**

Евгений Леонидович

**ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ  
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ  
И МЕТОДЫ ИХ РЕШЕНИЯ**

Специальность: 05.13.16 — применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Дубна 1994

Работа выполнена в Институте Физических Проблем им. П.Л. Капицы,  
Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,  
академик

Ю.Е. Нестерихин

доктор физико-математических наук,  
профессор

Г.А. Ососков

доктор физико-математических наук,  
профессор

И.М. Соболев

Ведущая организация:

Физический институт им. П.Н. Лебедева, Российской академии наук,  
г. Москва

Защита состоится \_\_\_\_\_ 1994 года в \_\_\_\_\_ часов  
на заседании Специализированного ученого совета Д 047.01.04  
при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации  
Объединенного института ядерных исследований по адресу:  
141980, г. Дубна, Московской обл.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке  
Объединенного института ядерных исследований

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 1994 года.

Ученый секретарь  
Специализированного Совета  
кандидат физико-математических наук

Иванченко

З.М. Иванченко

## Введение

### Актуальность темы

Согласно общепринятой терминологии, прямыми задачами физики называются такие задачи, в которых определяются следствия по известным причинам, обратными же задачами являются такие задачи, в которых восстанавливаются причины по наблюдаемым следствиям, когда "по данным наблюдений или опытов ищутся значения параметров, входящих в принятые закономерности, или даже сами закономерности"<sup>1</sup>. Если вдуматься в это определение, то различие между этими типами задач, по существу совпадает с различием между теоретической и экспериментальной физикой, и с этой точки зрения практически любая задача экспериментальной физики является обратной.

В самом деле, даже прямое измерение какой-либо физической величины не дает искомого результат непосредственно как по причине всегда имеющихся шумов или ошибок измерения, так и по причине конечной разрешающей способности всякого измерительного прибора. Исключение шумов, а правильнее было бы сказать, уменьшение их влияния, и коррекция на конечное разрешение прибора или, как иногда говорят, редукция к идеальному прибору и есть типичные примеры обратных задач.

Из сказанного ясно, что обе указанные задачи взаимосвязаны, и фактически именно шумы определяют величину возможного увеличения разрешения (или сверхразрешения) измерительного прибора. В отсутствие шумов разрешение возможно увеличивать неограниченно. Несмотря на то, что указанная точка зрения известна в физике уже более 40 лет со времени работ Г.С. Горелика и И.Л. Бернштейна [2] и [3], практические алгоритмы восстановления были весьма несовершенны, что препятствовало их широкому использованию в экспериментальных исследованиях.

Рассматриваемые обратные задачи практически из всех разделов экспериментальной физики, включая сюда также астрономию и геофизику, а также медицинскую и техническую диагностику, математически могут быть сведены к решению интегральных уравнений первого рода вида

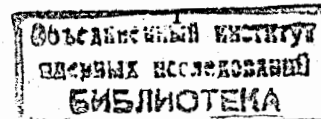
$$Af(y) = F(x), \quad (1)$$

где  $A$  обозначает интегральный оператор (возможно и нелинейный)

$$Af(y) = \int_a^b K[x, y, f(y)] dy, \quad (2)$$

определяемый конкретной задачей,  $f(y)$  - искомая функция а  $F(x)$  есть измеряемая на опыте зависимость. Целью является определение неизвестной функции  $f(y)$  по измеряемой  $F(x)$ .

<sup>1</sup>Кавычками отмечена цитата из доклада В.А. Амбарцумяна [1] на международном симпозиуме по фундаментальным проблемам теоретической и математической физики в Дубне в 1979 г.



Однако, уже в первом издании монографии Куранта и Гильберта [4] было отмечено по отношению к интегральным уравнениям первого рода вида

$$f(s) = \int K(s, t)\varphi(t)dt, \quad (3)$$

что: "... Затруднения для теории интегральных уравнений первого рода лежат в том обстоятельстве, что при непрерывном ядре  $K(s, t)$  многообразие всех кусочно-непрерывных функций  $\varphi(s)$  преобразовывается в часть того же многообразия, так как все получающиеся таким образом функции  $f(s)$  во всяком случае непрерывны. Если ядро  $K(s, t)$  дифференцируемо, то всякая кусочно-непрерывная функция, даже всякая только интегрируемая функция  $\varphi(s)$ , преобразуется в дифференцируемую. Стало быть, интегральное уравнение не может иметь для всякой непрерывной функции  $f(s)$  непрерывное решение  $\varphi(s)$ . Лишь постольку, поскольку ядро уклоняется от правильного поведения, можно ожидать разрешимости уравнения (2) для более общих классов функций."

Фундаментальная причина трудностей, возникающих при применении интегральных уравнений первого рода к обработке данных физических экспериментов заключается в том, что решения этих уравнений неустойчивы к малым изменениям входных данных, и таким образом оказывается нарушенным необходимое условие корректности по Адамару: решение должно непрерывно зависеть от начальных данных, если в качестве начальных данных допускаются произвольные непрерывные функции.

Эта неустойчивость в свою очередь объясняется тем, что в бесконечномерном пространстве вполне непрерывные операторы, не могут иметь непрерывных обратных. К классу вполне непрерывных операторов относится оператор (3) при, например, непрерывном по обеим переменным ядре  $K(s, t)$ . Однако, как было показано в 1943 г. А.Н.Тихоновым [5] при ограничении области возможных решений компактным множеством  $M$  из взаимной однозначности отображения следует непрерывность обратного оператора.

На основании этой теоремы впоследствии были сформулированы условия корректности обратных задач по Тихонову, в которых, в отличие, от условий Адамара, не доказываются существование решения обратной задачи

$$Ax = y, \quad x \in X, y \in Y,$$

а постулируется существование некоторого множества  $M \subset X$  в пространстве всех возможных решений  $X$ , такого, что решение *единственно* на этом множестве, т.е. на множестве  $N = A(M)$  определен обратный оператор  $A^{-1}$ , и решение устойчиво в области  $N$ , т.е. обратный оператор  $A^{-1}$  непрерывен в соответствующей метрике, определенной в области  $N$ . Если  $M$  - компактное множество, то условие корректности по Тихонову следует из его теоремы 1943 г.

Учет некорректности обратных задач, обусловленной их принципиальной неустойчивостью к вариации входных экспериментальных данных, становится еще более важным, если иметь в виду, что экспериментальные данные всегда имеют в своем составе шумовую компоненту различного происхождения. Шумы могут определяться самой физической природой измеряемого сигнала, как например, радиоактивного распада, описывающегося пуассоновским распределением, или сигнала определяемого другими квантовыми эффектами, а могут быть просто случайными ошибками измерения, большей частью (но далеко не всегда) имеющими

гауссовское распределение. Оба вида шумов являются независимыми, но никогда не могут быть устранены оба полностью.

В обратных задачах, рассматриваемых в диссертации, наличие случайности во входных данных является существенным. Для полноты следует упомянуть о другом типе обратных задач - задачах синтеза, в которых задаваемые функции не содержат случайной компоненты, и для решения которых могут успешно применяться хорошо развитые методы минимизации. Задачи синтеза не рассматриваются в диссертации.

Многообразие и важность практических применений обусловило появление многочисленных обзоров и монографий по обратным задачам [6-22], включая также обзор автора [12]. Однако, несмотря на такое обилие литературы по данному предмету, безусловно свидетельствующему об актуальности темы, проблема адекватного учета как статистической информации о входных данных, так и специфики некорректной задачи, т.е. конкретного вида интегрального оператора (1), и априорной информации о решении, постоянно стоит перед экспериментаторами, работающими на пределе возможностей используемых измерительных приборов и желающими извлечь максимум информации из полученных экспериментальных данных.

## Цель работы

Целью диссертационной работы являлось, во-первых, разработка новых алгоритмов решения обратных задач экспериментальной физики на основе метода максимума правдоподобия с полным учетом как статистической информации об экспериментальных данных, аналитических свойств интегральных операторов конкретных обратных задач, так и доступной информации о решении.

Второй целью являлось создание программ для ЭВМ, реализующих разработанные алгоритмы, и программных комплексов, позволяющих их использовать для различных задач восстановления сигналов, возникающих в экспериментальной практике.

И наконец, третьей задачей являлось исследование пределов улучшения разрешения при обработке экспериментальных данных в непараметрическом случае с использованием новых алгоритмов восстановления сигналов.

## Основные направления исследований

В диссертации эти вопросы решены для обратных задач о токе эмиссии в микротроне, о диагностике цилиндрических плазменных разрядов, о восстановлении пространственного распределения вспыхивающих звезд в шаровых звездных скоплениях, об оптимальной фильтрации, о восстановлении энергетического спектра ультрамягкого рентгеновского излучения по измерению его поглощения в газе, об экспоненциальном анализе, и о пределе сверхразрешения при восстановлении сигналов.

Важным практическим аспектом диссертационной работы является не только проведение теоретического рассмотрения, но и доведение его до работающих пакетов программ для ЭВМ, делающих общедоступными все полученные результаты.



## Научная новизна и практическая ценность работы

Оригинальные результаты, представленные в диссертации, опубликованы в работах [23-40] и могут быть кратко сформулированы следующим образом:

- Предложен и исследован новый способ аппроксимации экспериментальных данных ортогональными полиномами, основанный на вычислении очередных коэффициентов Фурье только остатка разложения (метод "снятия шкурок с лукавицы"), имеющий меньший рост вычислительной погрешности с ростом степени полинома по сравнению с классическим способом, основанным на вычислении коэффициентов Фурье разлагаемой функции.
- Предложен и исследован метод решения интегрального уравнения Шлемильха, основанный на разложении искомой функции и входных данных по полиномам. С использованием этого метода измерены эмиссионные характеристики борид-лантанового ( $LaB_6$ ) катода в полях до  $500 \text{ kV/cm}$  и температурах до  $1720^\circ\text{C}$  в ускоряющем резонаторе микротрона.
- Предложен и исследован метод решения интегрального уравнения Абеля, основанный на разложении искомой функции по полиномам. Этот метод непосредственно применим в геометро-оптических задачах физики плазмы с цилиндрической симметрией как без учета рефракции, так и с ее учетом, и как составная часть полной диагностической задачи при учете дифракции и поглощения диагностического пучка в плазме.
- Предложен и исследован метод ортогональных разложений для определения пространственной плотности звезд в шаровых звездных скоплениях в случае, когда скопление разрешается на отдельные звезды и требуется предварительное определение поверхностной плотности. Он основан на разработанном автором методе численного решения интегрального уравнения Абеля и методе ортогональных разложений Н.Н.Ченцова для оценки плотности вероятности случайной величины по ее наблюдениям. Метод дает также оценку погрешности восстановленной пространственной плотности. Указанным методом определена пространственная плотность вспыхивающих звезд в Плеядах, и показано, что первоначальное ее определение астрономами из Бюраканской обсерватории было неверным.
- Показано, что оптимальная фильтрация неслучайных данных от случайной шумовой составляющей осуществляется применением известного винеровского фильтра к спектру Фурье полного сигнала вместе с шумовой компонентой также, как и при оптимальном обнаружении стационарного сигнала в присутствии стационарного случайного шума с известными спектрами сигнала и шума. Предложен алгоритм реализации квазиоптимального винеровского фильтра, использующего оценки спектра сигнала и шума в тех областях пространства Фурье, где они хорошо определены, и экстраполяцию этих оценок в область, где они определены плохо. При экстраполяции спектральных оценок сигнала используется имеющаяся априорная информация о сигнале. В большом числе спектроскопических данных оказывается достаточным простая прямая экстраполяция спектра сигнала (в логарифмических единицах). Алгоритм реализован в виде программы для ЭВМ, которая нашла широкое использование как в научных исследованиях, так и для специальных применений.

- Предложена и реализована многодырочная камера-обскура для наблюдения слабых источников в области вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгена. С помощью этой камеры проведены наблюдения источников в указанных областях спектра, возникающих в импульсных дуговых разрядах высокого давления.

- Собраны и критически проанализированы имеющиеся экспериментальные данные по фотопоглощению рентгеновского излучения в молекулярном водороде в диапазоне  $17\text{-}400 \text{ эВ}$  и получена простая аппроксимация этих данных. Показано, что данные по водороду в известных таблицах Хенке содержат систематическую ошибку величиной около  $-30\%$ .

- Предложен и подробно исследован новый способ обработки данных в экспериментах по восстановлению спектра ультрамягкого рентгеновского излучения по измерению его поглощения в газе на основе метода максимума правдоподобия. Метод способен успешно восстанавливать как дискретные, так и непрерывные спектры и их комбинацию без априорной информации о виде спектра. Для чисто дискретных спектров и при использовании этой информации энергетическое разрешение метода достигает пределов, следующих из неравенства Рао-Крамера. С использованием указанного метода создан газовый детектор полного поглощения для ультрамягкого рентгена (УМР) на основе многопроволочной пропорциональной камеры, сочетающей  $100\%$  эффективность регистрации с рекордным энергетическим разрешением  $\leq 6\%$  в указанном диапазоне. Этим детектором впервые измерен спектр УМР из катодного пятна вакуумной дуги.

- Показано, что существует абсолютный предел улучшения разрешения при восстановлении сигналов по сравнению с классическим рэлеевским или дифракционным пределом. Максимальное значение достижимого сверхразрешения определяется шумом и может быть вычислено по теореме Шеннона о максимальной скорости передачи информации через канал связи с шумом. В непараметрическом случае сверхразрешение зависит логарифмически от величины отношения сигнал/шум. Рассмотрена связь сверхразрешения с соотношением неопределенностей.

- Создан комплекс программ для восстановления из экспериментальных данных неотрицательных сигналов, искаженных измерительным прибором в присутствии шума. Шум в отдельных точках независим и может иметь гауссовское, биномиальное или пуассоновское распределения. Программы комплекса предназначены для коррекции на аппаратную функцию произвольного вида, зависящую только от разности аргументов (эта задача весьма распространена в спектроскопии любого рода), для разложения заданной экспериментальной функции на экспоненты с непрерывным спектром декрементов (эта задача имеет многочисленные применения, например, в ядерной физике или оптике при исследовании временной структуры процессов флуоресценции), и для восстановления спектра ультрамягкого рентгеновского излучения из измерений его поглощения в газе. Программы основаны на методе максимума правдоподобия, при использовании которого улучшение разрешения сигналов в результате обработки достигает теоретического предела, следующего из теоремы Шеннона в теории информации.

## Апробация работы

Диссертация содержит результаты 18 оригинальных работ [23] - [40], опубликованных в России и за рубежом в период с 1972 по 1993 годы. Работы докладывались на семинарах в ИФП имени П.Л.Капицы РАН, ФИАН им.П.Н.Лебедева, МГУ им.М.В.Ломоносова, ИАЭ им.И.В.Курчатова, МИФИ, ЛВТА ОИЯИ, ИППИ РАН, Института математики Сибирского отделения РАН в Новосибирске, ИЯФ им.Г.И.Будкера СО РАН, ГЕОХИ им.В.И.Вернадского РАН, у чл.-корр. РАН проф. С.М.Рытова (РИАН им.А.Л.Минца) в России, а также в статистической лаборатории Кембриджского университета, Англия у проф. Д.Кендалла, в Дарсберийской лаборатории в Англии, в ЦЕРНе, Швейцария у проф. Дж.Шарпака, в Photon Factory, KEK, Tsukuba, Japan, а также на международной школе по вычислительной физике в Чехословакии в 1979 году, на международной конференции по приборам для синхротронного излучения SRI-82 в Гамбурге, Германия, на Всесоюзной конференции по томографии в Новосибирске в 1984 г., на международном совещании по методу максимума энтропии MAXENT Workshop, Cambridge, UK, 1988 и на международной конференции по обратным задачам в Осаке, Япония в 1990 г.

Основные результаты получены в Институте физических проблем имени П.Л.Капицы РАН частично в соавторстве с Л.А.Вайнштейном, Е.Панос, В.Д.Песковым, В.И.Гельфгатом и Е.Р.Подольком.

## Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из 9 глав. Она изложена на 232 стр., содержит 61 рисунок, 11 таблиц, тексты 12 программ для ЭВМ на 35 стр. и список литературы из 273 наименований.

## Содержание диссертации

### Глава 1. Введение

В этой главе, главным образом, в методологических целях изложены основные математические факты из теории операторных уравнений первого рода в функциональных пространствах, объясняющие фундаментальную причину некорректности обратных задач, сводящихся к решению интегральных уравнений первого рода с вполне непрерывными операторами, к каковым относятся все интегральные уравнения, рассматриваемые в диссертации. Преодоление этой некорректности основывается на использовании теоремы А.Н.Тихонова 1943 г. о непрерывности взаимно однозначного отображения на компактных множествах. Выбор компактного множества, называемого множеством корректности по Тихонову, должен производиться на основании любой доступной информации о решении, например, из физических соображений о природе решения, или доступной априорной информации о характеристиках решения (таких как, например, гладкость, неотрицательность, или монотонность, или нечто иное), а не на основании самого уравнения обратной задачи.

Кратко описана схема применения метода максимума правдоподобия (ММП) для решения обратных задач на компактных множествах, аппроксимируемых для большинства задач, рассматриваемых в диссертации, конечномерными множествами.

### Глава 2. Задача о токе эмиссии и ортогональные полиномы

Задача сводится к решению интегрального уравнения Шлемилха

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} I(E \cos \varphi) d\varphi = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} I(E \sin \varphi) d\varphi. \quad (1)$$

в котором  $I(E)$  искомая функция, а  $J(E)$  экспериментальные данные. Точное решение уравнения (1) в виде

$$I(E) = 2J(0) + 2E \int_0^{\pi/2} J'(E \sin \varphi) d\varphi. \quad (2)$$

мало пригодно для практических вычислений, т.к. в этой формуле присутствует плохо обусловленная операция численного дифференцирования функции  $J(E)$ , известной из эксперимента только с конечной точностью, и приводящей поэтому к большому росту ошибок решения.

Основой для предлагаемого нами нового способа численного решения интегрального уравнения (1) является следующий факт. Функции  $E^m$  при  $m = 1, 2, \dots$  являются собственными функциями линейного интегрального оператора в правой части уравнения (1). В самом деле, пусть

$$I(E) = E^m,$$

тогда

$$J(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} E^m \sin^m \varphi d\varphi = \lambda_m E^m,$$

где собственные числа  $\lambda_m$ , равные

$$\lambda_m = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin^m \varphi d\varphi = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2} + 1)},$$

могут быть записаны в виде рекуррентных формул

$$\lambda_0 = 1/2, \quad \lambda_1 = 1/\pi, \quad \lambda_m = \lambda_{m-2} (1 - 1/m), \quad m = 2, 3, \dots$$

Нетрудно проверить, что функции  $E^m$  являются собственными функциями и для преобразования от  $J$  к  $I$  согласно уравнению (2).

Знание собственных функций интегральных преобразований (1) и (2) позволяет построить простой алгоритм численного решения уравнения (1). Задача сводится к получению аппроксимации функции  $J$  полиномом конечной степени

$$J(E) \approx \sum_{k=0}^M j_k E^k = P_M(E).$$

Несмотря на то, что это есть классическая задача численного анализа, берущая начало еще с работ П.Л.Чебышева об интерполировании по способу наименьших квадратов и подробно изложенная во многих современных работах и руководствах, при ее использовании для решения практических задач оказалось, что существует не отмеченная ранее возможность значительно улучшить выходную точность по сравнению с получаемой на основании стандартных рекомендаций указанных выше работ.

Сначала мы действуем стандартно: для нахождения разложения экспериментальной функции  $y(x_i)$  по обычным полиномам находим разложение этой функции по полиномам Чебышева  $\{\varphi_k(x_i)\}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$ , ортогональным на заданной дискретной совокупности входных точек  $\{x_i\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , после чего линейным преобразованием коэффициентов разложения по полиномам Чебышева находим разложение по обычным полиномам. Однако при получении каждого очередного  $M+1$ -го коэффициента разложения по ортогональным полиномам мы не пользуемся стандартной формулой

$$c_{M+1} = (y, \varphi_{M+1}) \quad (3)$$

(здесь и далее в формулах (5) и (6) круглые скобки означают скалярное произведение), а вместо этого сначала находим остаток аппроксимации

$$R_M(x) = y(x) - \sum_{k=0}^M c_k \varphi_k(x) \quad (4)$$

и только затем следующий коэффициент разложения

$$c_{M+1} = (R_M, \varphi_{M+1}). \quad (5)$$

(см. [25]). Аппроксимация продолжается вплоть до такой степени  $M$ , при которой впервые выполняется условие

$$(R_M, R_M) \leq (\delta y, \delta y). \quad (6)$$

По предложению нобелевского лауреата профессора А.Клуга из лаборатории молекулярной биологии Кембриджского университета Англии совокупность формул (4) и (5) может быть названа процессом "снятия шкурки с луковицы".

В диссертации с помощью численных экспериментов и аналитических показано, что при генерации последовательных полиномов с помощью трехчленного рекуррентного соотношения оба варианта вычислений как классический, так и новый, являются неустойчивыми - погрешность в обоих вариантах растет экспоненциально с увеличением степени полиномов, однако коэффициент роста погрешности разный: примерно 0.85 десятичного порядка на степень в новом способе и 1.1 в классическом. Превосходство нового способа несомненно.

Задача о токе эмиссии в микротроне была решена автором в 1972 г. [23], что позволило с большим пониманием подойти к оценке предельных токов в микротроне, связанных с взаимодействием пучка с ускоряющим резонатором. Фактически это была первая обратная задача экспериментальной физики, рассмотренная автором. На рис.1 показаны входные данные и выходные результаты задачи о токе эмиссии. Из рисунка видно, что величина погрешности решения примерно равна погрешности входных данных, что указывает на хорошую обусловленность разработанного нового способа решения интегрального уравнения Шлемильха.

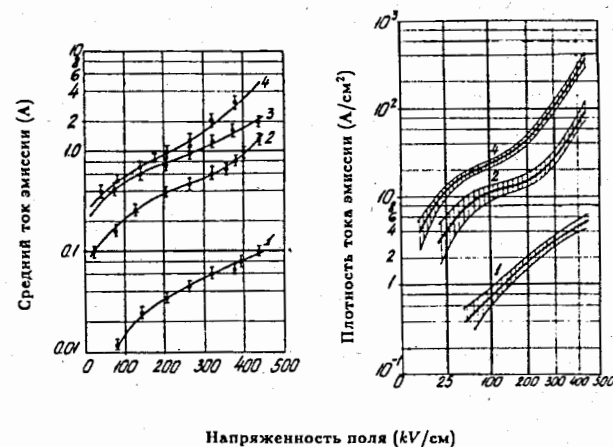


Рис.1 Входные данные (слева) и выходные результаты (справа) задачи о токе эмиссии. Цифры на графиках соответствуют различной температуре борид-лантанового катода: 1 = 1600°C, 2 = 1650°C, 3 = 1680°C, 4 = 1720°C.

### Глава 3. Интегральное уравнение Абеля и звездная задача

Интегральное уравнение Абеля

$$F(x) = \int_0^x \frac{f(y)dy}{\sqrt{x-y}}, \quad 0 \leq y \leq x, \quad (7)$$

в котором  $F(x)$  заданная, а  $f(y)$  искомая функция, впервые было введено и решено Н.Абелем в 1826 г. в связи с обобщением задачи механики о таутохроне, и фактически это была первая задача физики, непосредственно приводящая к интегральному уравнению первого рода. Это уравнение имеет столь многообразные применения в различных областях науки, что их полное перечисление заняло бы здесь слишком много места. Отметим только два, рассматриваемых в диссертации: в физике плазмы при диагностике цилиндрических разрядов волновыми пучками [26] и астрономии при определении пространственной плотности звезд в шаровых звездных скоплениях [27], [28].

Оба интегральных уравнения: Шлемильха (1) и Абеля (7) тесно связаны и заменой переменных могут быть преобразованы одно в другое. Точное решение интегрального уравнения Абеля

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{dx} \int_0^x \frac{F(y)dy}{\sqrt{(x-y)}}$$

также не пригодно в непосредственном виде для обработки экспериментальных данных, заданных с погрешностью, как и указанное выше точное решение интегрального уравнения Шлемильха, и фактически до недавнего времени отсутствовал

достаточно простой и эффективный алгоритм численного решения уравнения Абеля с учетом этой погрешности.

Оптимальный способ численного решения уравнения Абеля (т.е. дающий наименьшую потерю точности по сравнению с точностью исходных данных) должен учитывать как статистические свойства функции  $F(x)$ , связанные с погрешностями измерений, так и аналитические свойства преобразования Абеля, выражаемые формулой (7). Такой способ был предложен автором в 1973 году [24]. Он очень близок к описанному выше способу решения интегрального уравнения Шлемилха и основан на разложении искомой функции  $f(x)$  по собственным функциям интегрального оператора

$$Af = \frac{1}{2\sqrt{x}} \int_0^x \frac{f(y)dy}{\sqrt{(x-y)}},$$

которыми являются степенные функции  $f_n(x) = x^n$  для  $n=0, 1, 2, \dots$ . Соответствующие собственные значения вычисляются по рекуррентной формуле

$$\lambda_0 = 1, \lambda_n = \lambda_{n-1}/(1 + 1/2n), \quad n = 1, 2, \dots$$

Таким образом, если  $f(x) = x^n$ , то  $F(x) = 2\lambda_n x^n \sqrt{x}$ . Отличие  $F(x)$  от последнего выражения может быть обусловлено только ошибками измерений.

В большинстве физических приложений уравнения Абеля искомая функция  $f(x)$  может быть аппроксимирована с достаточной точностью полиномом конечной степени

$$f(x) = \sum_{k=0}^m f_k x^k, \quad 0 \leq x \leq a. \quad (8)$$

В этом случае экспериментальная функция  $F(x)$  необходимо представляется в виде

$$F(x) = \varphi(x) \sum_{k=0}^m \lambda_k f_k x^k, \quad (9)$$

где  $\varphi(x) = 2\sqrt{x}$ .

Разложение (9) находится методом среднеквадратичной аппроксимации функциями

$$\Phi_k(x) = \varphi(x) P_k(x),$$

ортогональными на заданном отрезке  $0 \leq x \leq a$  с весом

$$w(x) \sim 1/[\delta F(x)]^2,$$

где  $\delta F(x) > 0$  - среднеквадратичная погрешность измерения функции  $F$  в точке  $x$ , а  $P_k(x)$  - ортогональные полиномы на отрезке  $[0, a]$  с весовой функцией  $q(x) = w(x)\varphi^2(x)$ .

В зависимости от того, как задана функция  $F(x)$ , строятся разные системы полиномов. При непрерывном задании  $F(x)$  и  $w(x) = const$  этими полиномами являются классические полиномы Якоби  $P_k^{(0,1)}((2x-a)/a)$ . При задании  $F(x)$  в дискретной системе точек  $x_1, x_2, \dots, x_n$  строится указанная выше система полиномов Чебышева, ортонормированных на указанном множестве точек. Степень

$m$  аппроксимирующего полинома выбирается методом регрессионного анализа с использованием статистики

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left\{ \left[ F(x_i) - \varphi(x_i) \sum_{k=0}^m c_k P_k(x_i) \right] / \delta F(x_i) \right\}^2,$$

которая распределена как  $\chi_{n-m-1}^2$ .

Одновременно с вычислением ортогональных полиномов определяются их коэффициенты и тем самым искомое разложение

$$F(x) = \varphi(x) \sum_{k=0}^m F_k x^k. \quad (10)$$

После этого мы вычисляем

$$f_k = F_k / \lambda_k$$

и по формуле (8) находим  $f(x)$ . Коридор ошибок восстановленного решения, возникающий из-за случайных ошибок в исходных данных, вычисляется по формуле

$$\delta f(x) = 2 \left[ \sum_{\alpha, \beta=0}^m (DF)_{\alpha\beta} x^\alpha x^\beta / (\lambda_\alpha \lambda_\beta) \right]^{1/2}. \quad (11)$$

В этом выражении  $DF$  - ковариационная матрица (матрица ошибок) коэффициентов  $F_k$ , определяемая при получении разложения (10).

Этот коридор ошибок, или неустраняемая погрешность, приблизительно соответствует 95%-ной доверительной зоне для решения  $f(x)$ . В практических задачах основным источником погрешности восстановления является наличие случайных ошибок в исходных данных. Поэтому оценка погрешности (11) неизбежно имеет вероятностный характер.

Использование полиномов конечной степени, по существу, есть способ регуляризации решения интегрального уравнения Абеля, позволяющий ограничить рост ошибок. Этот способ основан на известной теореме Пикара о разложении решения по взаимно сопряженным собственным функциям ядра.

В задаче о шаровых звездных скоплениях в предположении сферической симметрии пространственная плотность звезд  $I(r)$  связана с наблюдаемой поверхностной плотностью  $J(R)$  (которая в этом предположении будет иметь круговую симметрию) следующим интегральным уравнением первого рода:

$$J(R) = 2 \int_R^{R_0} \frac{I(r)rdr}{\sqrt{r^2 - R^2}}, \quad 0 \leq R \leq R_0,$$

в котором  $R_0$  есть радиус скопления такой, что при  $R > R_0$

$$I(R) = J(R) = 0.$$

Это уравнение заменой переменных сводится к интегральному уравнению Абеля (7).

Для применения описанного выше способа решения интегрального уравнения Абеля к задаче о звездном скоплении, которое разрешается на отдельные звезды,

необходимо сначала получить оценку поверхностной плотности по наблюдениям координат звезд. В громадном большинстве работ для этого применяется метод гистограмм, который, как было показано Н.В.Смирновым еще в 1950 г. в одномерном случае имеет точность порядка  $N^{-1/3}$ , где  $N$  объем выборки, т.е. число звезд, используемых для оценки плотности.

Мы для этой цели применяем метод, предложенный Н.Н.Ченцовым в 1962 году, и состоящий в разложении неизвестной плотности по некоторому ортогональному базису. Среди всех методов оценки плотности вероятности случайной величины этот метод имеет наивысшую возможную точность порядка  $N^{-1/2}$ , определяемую статистикой.

Выбирая в качестве базисных функций те, которые используются при решении интегрального уравнения Абеля описанным выше способом, получаем новый метод восстановления пространственной плотности звезд в шаровых скоплениях, который был использован автором для определения пространственной плотности вспыхивающих звезд в Плеядах [27], [28].

Метод был предварительно испытан на работоспособность с помощью моделирования Монте-Карло и было показано, что он может правильно восстанавливать пространственную плотность шаровых скоплений по наблюдениям только угловых координат звезд в проекции на небесную сферу начиная с минимального числа звезд  $\sim 50$ .

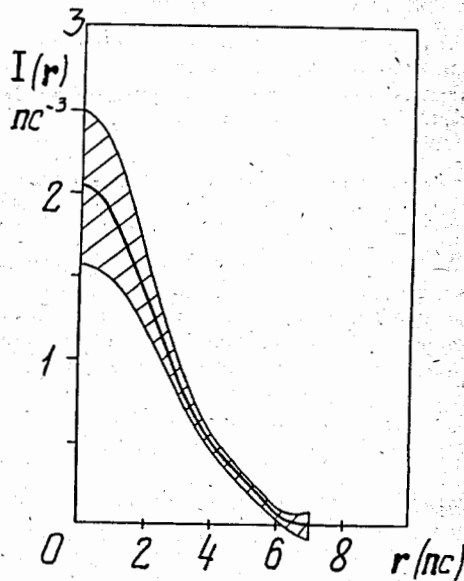


Рис.2 Пространственная плотность вспыхивающих звезд в Плеядах.

На рисунке показана пространственная плотность 441 вспыхивающей звезды в Плеядах, а также погрешность ее восстановления. Полученная кривая с учетом

ее погрешности показывает, что в центре скопления наблюдается максимум, а не минимум плотности, как первоначально было определено бюраканскими астрономами. Эта задача помимо самостоятельного интереса с точки зрения астрономии демонстрирует, что при решении обратных задач очень важен полный учет всей статистической информации, содержащейся во входных данных.

#### Глава 4. Оптимальная фильтрация данных с шумами

Почти любой тип анализа экспериментальных данных требует предварительного сглаживания данных. Это связано прежде всего с наличием ошибок измерения, а иногда также со статистическим характером самих данных. Эта задача также является классической задачей численного анализа, описанная во многих руководствах, и программы для ЭВМ, решающие эту задачу тем или иным способом, доступны для использования на большинстве современных ЭВМ. Тем не менее оказалось, что учет всей доступной информации о данных, включая статистику шумовой компоненты, позволяет предложить новый эффективный алгоритм оптимальной фильтрации. Результаты этой главы основаны на совместных работах автора и Е. Pantos [29], [30]. Постановка задачи состоит в следующем.

Пусть мы имеем измеренные значения  $f_i$  функции  $f(x)$  в дискретных точках  $x_1, x_2, \dots, x_N$  с соответствующими ошибками измерений (шумом)  $\epsilon_i$

$$f_i = f(x_i) + \epsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

и рассмотрим случай, когда нет систематических ошибок, т.е.

$$\bar{\epsilon}_i = 0,$$

и ошибки измерений в разных точках некоррелированы между собой, т.е.

$$\bar{\epsilon}_i \bar{\epsilon}_j = \sigma^2 \delta_{ij}.$$

Здесь  $\delta_{ij}$  — есть символ Кронекера и  $\sigma^2$  — есть дисперсия шума, одинаковая во всех точках.

Функция  $f(x)$  может быть разложена в ряд по некоторым ортогональным базисным функциям  $\{\varphi_\alpha(x)\}$

$$f(x) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \varphi_{\alpha}(x), \quad \alpha = 1, 2, \dots \quad (12)$$

со следующим соотношением ортогональности

$$(\varphi_{\alpha}, \varphi_{\beta}) = \sum_i \varphi_{\alpha}(x_i) \varphi_{\beta}(x_i) = \delta_{\alpha\beta}.$$

Аналитическая форма базисных функций выбирается в соответствии с физикой рассматриваемой проблемы.

Хорошо известно, что минимальная ошибка аппроксимации

$$\min_{\{c_{\alpha}\}} R_M^2, \quad \alpha = 1, 2, \dots, M, \dots \quad (13)$$

где

$$R_M^2 = \sum_i \left[ f(x_i) - \sum_{\alpha=1}^M c_{\alpha} \varphi_{\alpha}(x_i) \right]^2, \quad M = 1, 2, \dots$$



получается если для коэффициентов разложения  $c_\alpha$  используются коэффициенты Фурье

$$c_\alpha = (f, \varphi_\alpha) = \sum_i f(x_i) \varphi_\alpha(x_i).$$

Поскольку из наблюдений нам известны только значения  $\hat{f}_i$ , включающие случайный шум  $\varepsilon_i$ , то минимизация (13) не может быть выполнена в явном виде. Вместо этого мы можем искать минимум среднего значения  $\min \hat{R}_M^2$ , где

$$\hat{R}_M^2 = \sum_i \left[ f(x_i) - \sum_{\alpha=1}^M \hat{c}_\alpha \varphi_\alpha(x_i) \right]^2$$

$$\hat{c}_\alpha = (\hat{f}, \varphi_\alpha) = \sum_i \hat{f}_i \varphi_\alpha(x_i).$$

Минимум величины  $\hat{R}_M^2$  соответствует минимуму разности (в среднеквадратичном смысле) между неизвестной функцией  $f(x)$ , и ее аппроксимацией.

Поскольку шум  $\varepsilon_i$  случайный, значения величин  $\hat{c}_\alpha$ ,  $\hat{f}_i$  и  $\hat{R}_M^2$  также являются случайными, и поэтому, строго говоря, следует искать не минимум  $\hat{R}_M^2$ , но минимум среднего значения  $\overline{\hat{R}_M^2}$ . Для нахождения такого минимума мы вводим в (12) дополнительно неизвестные коэффициенты  $k_\alpha$ , так чтобы иметь новую "отфильтрованную" функцию

$$\hat{f}_1(x) = \sum_\alpha k_\alpha \hat{c}_\alpha \varphi_\alpha(x)$$

Для того, чтобы найти неизвестные коэффициенты  $k_\alpha$ , необходимо решить следующую хорошо поставленную математическую задачу: найти минимум величины  $\hat{R}^2$ , где

$$\hat{R}^2 = \sum_i \left[ f(x_i) - \sum_\alpha k_\alpha \hat{c}_\alpha \varphi_\alpha(x_i) \right]^2$$

$$\overline{\hat{R}^2} = \sum_\alpha [k_\alpha^2 D(\hat{c}_\alpha) + c_\alpha^2 (1 - k_\alpha)^2].$$

Здесь обозначено

$$D(\hat{c}_\alpha) = (D\hat{c})_{\alpha\alpha}.$$

Действуя стандартным методом,

$$\frac{\partial \overline{\hat{R}^2}}{\partial k_\alpha} = 0,$$

мы находим эти коэффициенты

$$k_\alpha = \frac{c_\alpha^2}{c_\alpha^2 + D(\hat{c}_\alpha)}. \quad (14)$$

Эта важная формула соответствует хорошо известному фильтру Винера в теории оптимального обнаружения стационарного случайного сигнала в присутствии стационарного случайного шума, когда известны спектры как сигнала, так и шума. В нашем случае мы имеем однако не случайный сигнал  $f(x_i)$  и только

лишь случайный шум. Иными словами, мы показали, что винеровский фильтр (14) дает минимум  $\overline{\hat{R}^2}$  не только для случайного сигнала и шума, но также и для неслучайного сигнала, а лишь случайного шума. Этот факт весьма важен для обработки данных физических экспериментов, так как часто мы измеряем принципиально неслучайную функцию, например, спектр поглощения какого-либо газа, не зависящий, естественно, ни от времени, ни от места измерения.

Минимальное значение  $\overline{\hat{R}^2}$  равно

$$\overline{\hat{R}^2}_{\min} = \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{1 + c_\alpha^2 / D(\hat{c}_\alpha)},$$

и для погрешности аппроксимации функции  $\hat{f}_1(x)$  мы имеем выражение

$$\delta \hat{f}_1(x) = 2\sigma \left( \sum_\alpha k_\alpha^2 \varphi_\alpha^2(x) \right)^{1/2}$$

Последнее выражение примерно равно погрешности аппроксимации неизвестной функции  $f(x)$ , которую мы хотим узнать. Множитель 2 в этой формуле приблизительно соответствует обычно принимаемому 95% доверительному интервалу.

Важно отметить, что непосредственное использование формулы фильтра Винера (14) для целей оптимальной фильтрации невозможно, поскольку в эту формулу входят неизвестные нам амплитуды  $c_\alpha$ . Если бы мы знали эти амплитуды, мы могли бы тогда сконструировать оптимальный фильтр для их выделения из шума, но в этом случае их выделять вовсе не нужно, поскольку мы считаем их известными!

Этот недостаток формулы (14) одновременно представляет собой ее большое достоинство. Именно в этом месте нашей процедуры оптимальной фильтрации мы можем использовать любую известную нам или до опыта, или полученную из опыта информацию о спектре неизвестного сигнала  $f(x)$ .

Мы предлагаем следующий алгоритм для использования оптимальной фильтрации. Вместо неявной формулы (14) для фильтра Винера мы используем приближенную явную формулу

$$\hat{k}_\alpha = \frac{\hat{c}_\alpha^2}{\hat{c}_\alpha^2 + D(\hat{c}_\alpha)},$$

основанную на известных из опыта амплитудах  $\hat{c}_\alpha$  для сигнала большего, чем шум

$$\hat{c}_\alpha^2 \geq D(\hat{c}_\alpha) \text{ для } \alpha \leq \alpha_0,$$

и простую прямолинейную экстраполяцию

$$\ln(\hat{c}_\alpha^2) \approx A_1 \alpha + B_1 \text{ для } \alpha_0 \leq \alpha \leq \alpha_1$$

для той части спектра, где сигнал слабее, чем шум

$$\hat{c}_\alpha^2 \ll D(\hat{c}_\alpha)$$

и полностью тонет в нем.

Мы убедились, что такой простой подход вполне достаточен для большинства спектроскопических данных. Однако имеются случаи, например, для данных EX-AFS экспериментов (представляющих собой затухающие синусоиды), где скорость уменьшения амплитуд спектра Фурье лучше аппроксимируется выражением

$$\ln(\hat{\sigma}_a^2) \approx A_2 \ln \alpha + B_2.$$

Использование той или иной экстраполяции сигнала с той области, где он сильнее, чем шум, на ту область, где он слабее, чем шум, приводит к плавно спадающей фильтрующей функции, не вызывающей Гиббсовских осцилляций, которые всегда возникают при резком обрыве фильтрующей функции.

Приведенный здесь вывод винеровского фильтра для неслучайного сигнала и случайного шума вместе с полным текстом соответствующей программы оптимальной фильтрации для ЭВМ были впервые опубликованы автором и Е.Пантосом в препринте Дарсберийской лаборатории в 1982 г. Впоследствии примерно то же самое, но без указания конкретного алгоритма экстраполяции и без ссылки на работы [29] и [30], было опубликовано (по-видимому, совершенно независимо) в полезной книге "Numerical Recipes" (The Art of Scientific Computing) by W.H.Press et al, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1 изд. 1989, 2 изд. 1992. Программа оптимальной фильтрации с использованием быстрого преобразования Фурье на основе описанного алгоритма широко используется как в нашей стране, так и за рубежом. Текст ее приведен в гл.9 диссертации.

## Глава 5. Многодырочная камера для мягкого рентгена

В этой главе описана конструкция многодырочной камеры-обскуры для наблюдения рентгеновского излучения плазменного разряда в опытах академика П.Л.Капицы, осуществленную по предложению автора и В.Д.Пескова. Камера сочетает увеличенную светосилу, пропорциональную числу отверстий, с хорошим разрешением, определяемым диаметром одного отверстия. Восстановление изображения в этой камере сводится к решению двумерного интегрального уравнения свертки с ядром, определяемым расположением отверстий. Поскольку в данной задаче получение сверхразрешения по сравнению с размером отверстия не является необходимым, то расположение отверстий выбиралось таким, для которого легко реализуется обратный фильтр, полностью восстанавливающий исходное изображение при большом отношении сигнал/шум.

Приведены результаты тестовых измерений стационарных источников и результаты наблюдения ультрафиолетового и рентгеновского излучения в импульсных дуговых разрядах.

Описанные в этой главе результаты получены автором совместно с Г.Ф.Карабджаком, А.Ф.Кашлюком, С.В.Переверзевым и В.Д.Песковым [34].

## Глава 6. Метод максимума правдоподобия и пропорциональный счетчик мягкого рентгена с ультравысоким энергетическим разрешением

Работа, описываемая в этой главе, выполненная совместно с В.Д.Песковым и Е.Р.Подольяком [31], также была напрямую связана с исследованиями по физике плазмы газового разряда в мощных СВЧ полях, проводившихся П.Л.Капицей. Уже в первых спектральных измерениях было обнаружено мощное ультрафиолетовое

излучение из дугового разряда, позднее в спектре излучения был обнаружен мягкий рентген. Для его детектирования Г.Д.Богомоловым и В.Д.Песковым ранее был разработан многоклеточный счетчик рентгеновского излучения, наполненный водородом. Этот счетчик можно представить в виде набора последовательно расположенных однонитевых счетчиков (секций). При прохождении излучения через такую систему оно будет поглощаться в газе, и каждый элементарный счетчик будет измерять число фотонов, поглотившихся в его объеме. Достигнутое разрешение счетчика было примерно равно 50 эВ в области энергии фотонов вблизи 300 эВ.

Это разрешение представлялось недостаточным для решения поставленных задач. Для увеличения разрешения необходимо было двигаться в двух независимых направлениях: получить более точные данные по фотопоглощению рентгеновского излучения в молекулярном водороде и разработать новый более эффективный способ обработки данных по измерению поглощения исследуемого рентгеновского излучения с неизвестным спектром в счетчике, наполненном водородом. Счетчик соединялся напрямую с плазменной установкой П.Л.Капицы без всякого вакуумного окна.

Для решения первой из указанных задач были собраны и критически проанализированы все имевшиеся экспериментальные данные по фотопоглощению рентгеновского излучения в молекулярном водороде, а Е.Р.Подольяком и В.И.Алавердовым были выполнены дополнительные измерения. Результаты анализа опубликованы в работах [32] и [33], где приведена аппроксимация полученных данных, имеющая погрешность около 5% с достоверительной вероятностью 95% в диапазоне 17-400 эВ.

Задача восстановления спектра рентгеновского излучения по измерению поглощения сводится к решению следующего интегрального уравнения первого рода

$$N(x) = \int_{\Delta E} I(E)[1 - e^{-\alpha(E)\Delta}]e^{-\alpha(E)x} dE, \quad (15)$$

в котором  $x$  - обозначает глубину слоя поглощения рентгеновского излучения в газе,  $N(x)$  - интенсивность излучения на глубине  $x$ ,  $I(E)$  - искомый спектр рентгеновского излучения на входе слоя поглощения газа толщиной  $x$ ,  $\alpha(E)$  - коэффициент поглощения рентгеновского излучения как функция энергии  $E$ ,  $\Delta$  - размер одной секции пропорционального счетчика для регистрации излучения, так что множитель

$$w(E) = 1 - \exp[-\alpha(E)\Delta]$$

представляет собой эффективность регистрации, пропорциональную вероятности поглощения рентгеновского фотона с энергией  $E$  в одной секции счетчика толщиной  $\Delta$ . Интегрирование в (15) производится по диапазону энергий фотонов  $\Delta E$ , где  $w(E) \geq 0$ .

Интегральное уравнение (15) есть частный случай общего уравнения (1) из Введения к автореферату, где входные данные являются случайными, поскольку в большинстве случаев  $N(x)$  имеет пуассоновское распределение при каждом  $x$ . После дискретизации интегрального уравнения (15) получаем систему линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных  $I_k = I(E_k)$ ,  $k = 1, 2, \dots, m$  из входных данных  $N_i = N(x_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$

$$N_i = \sum_{k=1}^m I_k P_{ik}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (16)$$

в которой  $P_{ik} = \delta E \cdot [1 - e^{-\alpha(E_k)\Delta}] \cdot e^{-\alpha(E_k)x_i}$ , а  $\delta E = E_{k+1} - E_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, m-1$  шаг дискретизации по энергии фотонов.

Подчеркнем, что число уравнений  $n$  в системе (16) может быть как больше, так и меньше количества неизвестных  $m$ . Для случайных входных данных  $N_i = N(x_i)$  в подавляющем большинстве случаев система (16) не имеет решения. Именно случайность значений  $N_i$  и приводит к несовместности системы (16) в отличие от уравнения (1) при точной правой части.

Для придания смысла решению системы (16) примем во внимание, что случайные величины  $\{N_i\}$  в совокупности независимы и могут рассматриваться имеющими полиномиальное распределение, при котором вероятность  $\mathcal{P}$  получить из опыта точно указанные выше значения равна

$$\mathcal{P} = \frac{N!}{\prod_{i=1}^n N_i!} \prod_{i=1}^n p_i^{N_i}$$

Здесь введены следующие обозначения

$$N = \sum_{i=1}^n N_i, \quad p_i = \sum_{k=1}^m p_{ik} g_k, \quad p_{ik} = \frac{P_{ik}}{\sum_{j=1}^n P_{jk}} = \frac{\exp[-\alpha(E_k)x_i]}{\sum_{j=1}^n \exp[-\alpha(E_k)x_j]},$$

$$g_k = I(E_k) / \sum_{j=1}^m I(E_j).$$

Решением системы (16) согласно методу максимума правдоподобия (МП), назовем вектор  $\{g_k\}$ , при котором вероятность  $\mathcal{P}$  или  $\log \mathcal{P}$  достигают максимальных значений. Величину  $L = \log \mathcal{P}$  будем называть далее функцией правдоподобия.

Максимум функции правдоподобия всегда существует, так как она непрерывна, и выражение

$$L = \text{const} + \sum_{i=1}^n N_i \log p_i = \text{const} + N \sum_{i=1}^n f_i \log p_i,$$

где  $f_i = N_i/N$ , ограничено сверху, поскольку

$$\sum_i f_i \log p_i - \sum_i f_i \log f_i = \sum_i f_i \log (p_i/f_i) \leq 0$$

в силу неравенства теории информации.

Поиск максимума функции правдоподобия производится с помощью итерационной процедуры, представляющей собой модификацию итерационной процедуры, ранее предложенной М.З.Тараско. В этом методе не делается никаких предположений о виде восстанавливаемой функции  $I(E)$ , кроме того, что  $I(E) \geq 0$ . Не требуется также информации о начальном приближении, в качестве которого мы обычно выбираем  $I(E) = \text{const} > 0$ .

В явном виде итерационная формула может быть записана в следующей форме

$$g_k^{(s+1)} = g_k^{(s)} + h g_k^{(s)} \sum_{i=1}^n p_{ik} \left( \frac{f_i}{\sum_{j=1}^m p_{ij} g_j^{(s)}} - 1 \right). \quad (17)$$

Здесь  $s=1,2,\dots$  - номер итерации,  $h$  - длина шага в пространстве искомого вектора  $\{g\}$ . При  $h=1$  итерационная формула (17) совпадает с итерационной формулой М.З.Тараско.

Отметим, что итерационная формула (17) является нелинейной: искомым вектор  $\{g_k\}$  входит не только линейно в левую и правую части формулы (17), но и в знаменатель выражения в скобках правой части этой формулы. Эта нелинейность метода максимума правдоподобия является принципиальной, так как именно она обеспечивает получение сверхрешения по сравнению с любыми линейными методами восстановления сигналов.

Итерации продолжаются пока величина

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(\delta N_i)^2}{N_i},$$

где  $\delta N_i = N(p_i - f_i)$ , больше, чем уровень  $\chi_{n-1}^2(P_1)$ , где  $P_1$  - уровень значимости  $\chi^2$  критерия, обычно принимаемый равным 5%, и должны останавливаться, как только эта величина уменьшится до уровня

$$\chi^2 \leq \chi_{n-1}^2(P_2),$$

где  $P_2 = (80 - 95)\%$ .

Таким образом, не следует стремиться уравнивать невязку точнее, чем это позволяет сделать точность измерений. Это важный принцип при решении обратных задач.

Оценка погрешности восстановленного спектра  $\delta I(E)$  производится методом статистического моделирования повторением процедуры восстановления 10-20 раз для различных случайных наборов исходных данных с одной и той же функцией распределения. На этом закончено краткое описание процедуры восстановления методом МП для входных данных с биномиальным или с пуассоновским распределениями. Модификация итерационной формулы (17) для входных данных с гауссовским распределением описана в гл.7 диссертации.

Итерационная формула (17) представляет собой разновидность метода первого порядка поиска экстремума функции в многомерном пространстве, когда на каждом шаге итераций используется только одно направление градиента функции правдоподобия и оптимизируется только длина шага вдоль этого направления. Для чисто дискретных спектров рентгеновского излучения поиск экстремума производится более быстрым методом Ньютона - Рафсона второго порядка, и оценка погрешности восстановления дается на основании неравенства Рао-Крамера, дающего нижнюю границу точности оценок ММП.

В этой главе приведены обширные материалы по численной проверке изложенного метода решения интегрального уравнения (15) как для непрерывных и дискретных спектров, так и для их комбинации. Итерационная формула (17) пригодна для произвольных спектров, однако если в процессе итераций оказывается, что решение приближается к дискретному спектру, то целесообразно дальнейший поиск производить с помощью программы для дискретных спектров.

Получаемая погрешность в этих случаях практически совпадает с допускаемой неравенством Рао-Крамера.

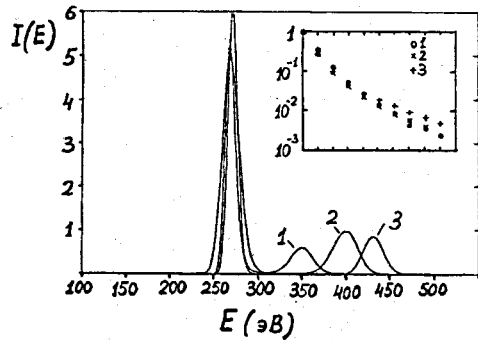


Рис.3 Рентгеновские спектры в опытах с рентгеновской трубкой. На врезке показаны исходные экспериментальные данные.

На этом рисунке приведены рентгеновские спектры, полученные в опыте с рентгеновской трубкой при напряжениях на трубке 410, 448 и 470 вольт. Спектры восстановлены описанным методом из данных по поглощению. На рисунке видно, что верхняя граница спектра равна напряжению на рентгеновской трубке в каждом из трех независимых опытов. Кроме того, в каждом из опытов видна одна и та же линия углерода  $C_{K\alpha}$ ,  $E = 275$  эВ. Полуширина линии, равная разрешению счетчика, примерно равна 15 эВ ( $\leq 6\%$ ). Лучшего значения трудно было ожидать, так как данные по поглощению, определяющие ядро интегрального уравнения (15), известны только с точностью около 5%. Указанное энергетическое разрешение для газовых счетчиков полного поглощения является рекордным и в настоящее время.

## Глава 7. Пакет программ восстановления сигналов RECOVERY и его применения

Материал данной главы основан на совместной работе автора диссертации с В.И.Гельфгатом и Е.Р.Подольяком [38], депонированной в ВИНТИ в 1991 г., а также опубликованной на английском языке в 1993 г. в журнале Computer Physics Communications [39].

Восстановление сигналов сводится к решению линейного интегрального уравнения первого рода

$$\int_a^b K(x, y) f_0(y) dy = F_0(x), \quad c \leq x \leq d, \quad (18)$$

в котором  $f_0(y)$  искомая функция (сигнал),  $F_0(x)$  результат преобразования (искажения) сигнала измерительным прибором, характеризуемым аппаратной функцией  $K(x, y)$  - ядром интегрального уравнения, причем результатом измерения является не функция  $F_0(x)$ , а случайная функция  $F(x)$ , лишь среднее значение которой по разным реализациям шума равно правой части  $F_0(x)$  этого интегрального уравнения

$$\overline{F(x)} = F_0(x). \quad (19)$$

Это условие фактически означает отсутствие систематических ошибок при измерениях. Кроме того, принимается, что шум некоррелирован в соседних точках

$$\overline{\delta F(x_i) \cdot \delta F(x_j)} = \sigma_i^2 \cdot \delta_{ij}, \text{ где } \delta F(x) = F(x) - F_0(x),$$

В этой главе рассматривается только случай восстановления положительных (точнее неотрицательных) сигналов  $f_0(y) \geq 0$ . Хотя этот случай не исчерпывает всех потребностей практики, однако он имеет достаточно широкую область применимости. Так, например, все задачи восстановления энергетических спектров относятся к этому классу.

Описываемый в этой главе комплекс программ RECOVERY предназначен для восстановления из экспериментальных данных неотрицательных сигналов, искаженных измерительным прибором в присутствии шума. Шум в отдельных точках независим и может иметь гауссовское, биномиальное или пуассоновское распределения. Программы комплекса реализуют решение интегрального уравнения свертки с ядром  $K(x, y) = K(x - y)$  для коррекции на аппаратную функцию произвольного вида, зависящую только от разности аргументов (эта задача весьма распространена в спектроскопии любого рода), решение интегрального уравнения Лапласа в действительной области

$$f(t) = \int_0^{\infty} g(\lambda) \exp(-\lambda t) d\lambda,$$

в котором  $f(t)$  заданная функция, а  $g(\lambda)$  искомая функция для разложения заданной экспериментальной функции на экспоненты с непрерывным спектром декрементов (эта задача имеет многочисленные применения, например, в ядерной физике или оптике при исследовании временной структуры процессов флуоресценции), и решение интегрального уравнения (15) (см. выше) для восстановления спектра ультрамягкого рентгеновского излучения из измерений его поглощения в газе. Программы основаны на методе максимума правдоподобия, при использовании которого достигается максимальное улучшение разрешения сигналов.

Комплекс программ состоит из набора трех главных подпрограмм MLU8, MLG8 и MLP8, реализующих итерационный способ нахождения максимума функции правдоподобия для неотрицательных решений соответственно для случаев гауссовского распределения ошибок во входных данных с постоянной величиной дисперсии  $\sigma_0^2$  во всех экспериментальных точках, гауссовского распределения для случая, когда в разных точках дисперсия может быть разной  $\sigma_i^2$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , и для пуассоновского распределения входных данных. Подпрограмма MLP8 требует положительности аппаратной функции, для подпрограмм MLU8 и MLG8 аппаратная функция может быть знакопеременной.

Из других служебных программ достойна особого упоминания подпрограмма быстрого преобразования Фурье, используемая для вычисления циклических сверток при решении интегрального уравнения свертки. Эта подпрограмма написана В.И.Гельфгатом на основе разработанного им ранее нового алгоритма БПФ, и она имеет наилучшие характеристики среди известных нам программ по параметрам памяти и быстродействия.



В работах [38] и [39] приведены полные тексты на Фортране всех программ и подпрограмм комплекса *RECOVERY*, реализующие метод скорейшего подъема при поиске максимума функции правдоподобия. Это дает возможность применять эти программы на любых ЭВМ, имеющих фортрановский компилятор. Следует упомянуть единственное ограничение, состоящее в том, что графическая часть пакета рассчитана на использование IBM-совместимых персональных ЭВМ и компилятора IBM Fortran/2.

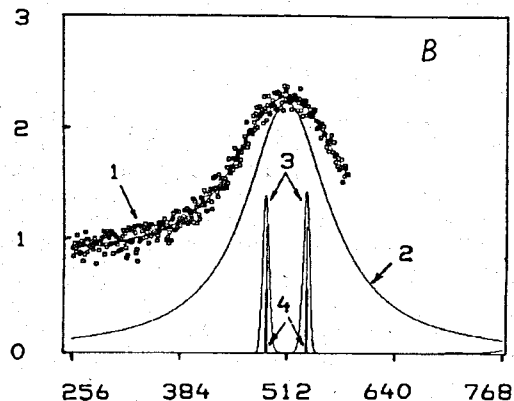


Рис.4 Восстановление сигнала программой *Dconv2* для аппаратной функции с лоренцевским профилем шириной  $D = 60$ , отношением сигнал/шум 20 дБ при числе данных  $N = 329$ . 1 - входные данные, 2 - аппаратная функция, 3 - результат восстановления, 4 - точный ответ. В целях графической ясности кривая 1 сдвинута по вертикали вверх. Достигнутое значение  $\chi^2$ -критерия равно  $\chi^2/N = 0.903$

Выше показан один пример работы комплекса *RECOVERY* для решения интегрального уравнения свертки с использованием подпрограммы *MLU8*. Напомним, что при решении не используется никакая априорная информация об искомой функции, кроме ее неотрицательности.

## Глава 8. Шенноновский предел сверхразрешения при восстановлении сигналов

В этой главе показывается, что существует абсолютный предел улучшения разрешения при восстановлении сигналов по сравнению с классическим рэлеевским или дифракционным пределом. Максимальное значение достижимого разрешения определяется шумом и может быть вычислено по теореме Шеннона о максимальной скорости передачи информации через канал связи с шумом. Показывается, что в непараметрическом случае сверхразрешение зависит логарифмически от величины отношения сигнал/шум.

Впервые результаты этой главы были доложены на международном совещании по методу максимума энтропии в Англии в 1988 г. и опубликованы в работах [35-37] в 1989-1990 гг. Ввиду сравнительной новизны и важности этого результата

приведем здесь его простой эвристический вывод, следуя работе [36]. Подробное формальное доказательство опубликовано в [37] и воспроизведено в главе 8 диссертации.

Основное уравнение восстановления сигналов (18) совпадает с таким же уравнением для передачи сигналов через канал связи с шумом, причем роль аппаратной функции, характеризуемой ядром  $K(x, y)$ , играют характеристики канала связи. Если параметры канала связи не зависят от времени, то аппаратная функция  $K(x, y)$  зависит только от разности аргументов

$$K(x, y) = K(x - y)$$

и соответствующая такому ядру аппаратная функция измерительного прибора является пространственно инвариантной.

Для случая, когда аппаратная функция  $K(x - y)$  имеет ограниченную ширину пространственного спектра Фурье  $W$ , существование предела разрешения близких сигналов  $f_0(y)$  следует из известной теореме К.Шеннона 1949 г. о предельной скорости передачи информации через канал связи с шумом. Для наших целей формула Шеннона может быть записана в следующей форме

$$(B/X)(\text{бит/см}) = W_{\text{см}}^{-1} \log_2(1 + E_s/E_n). \quad (20)$$

Здесь обозначено через  $X = d - c$ ,  $B/X$  есть максимальное число бит информации на единицу измерения переменной  $x$ , различимых при данных уровнях энергии сигнала

$$E_s = \int_{-\infty}^{\infty} F_0^2(x) dx$$

и шума

$$E_n = n \cdot \sigma^2,$$

$n$  равно числу точек измерения экспериментальной функции

$$F(x) = F_0(x) + N(x),$$

и  $\sigma^2$  дисперсия шума в отдельных точках.

Если мы определим ширину аппаратной функции как эквивалентную ширину ее квадрата из соотношения

$$\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} K^2(x) dx, \quad (21)$$

при условии, что  $K(0) = 1$ , и обозначим через  $\delta$  минимальное расстояние, на котором могут быть различимы близкие сигналы  $f_0(y)$ , то коэффициентом сверхразрешения (Super Resolution) мы будем называть отношение

$$SR = \Delta/\delta. \quad (22)$$

Доказательство теоремы Шеннона, данное самим Шенноном, основано на разложении правой части  $F(x)$  в ряд Котельникова по базисным функциям с ограниченным спектром

$$y_i(x) = \frac{\sin \pi(2Wx - i)}{\pi(2Wx - i)}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Фактически, однако, в шенноновском доказательстве никак не используются аналитические свойства базисных функций ряда Котельникова, а учитывается только, что при конечном интервале наблюдения

$$X = d - c$$

имеется лишь конечное число отсчетов

$$n = 2WX.$$

Для аппаратных функций с неограниченным спектром (как, например, для лорентцевского или гауссовского профилей) можно вместо разложения по ряду Котельникова использовать разложение по любому другому подходящему базису. Этот метод решения интегральных уравнений первого рода описан, в работе [12], где он назван методом ортогональных разложений (МОР), причем, как показано в работах [29] и [30] для получения минимальной среднеквадратичной погрешности решения необходимо использовать во всех рядах сравнительно небольшое число  $m < n$  членов разложения.

А.Н.Колмогоровым указано, что для справедливости теоремы Шеннона фактически достаточно конечномерности пространства сигналов, что имеет место практически для всех типов экспериментальных данных  $F(x)$ , поскольку функция  $F(x)$  всегда измеряется в конечном числе экспериментальных точек.

Естественно, что формула Шеннона должна быть изменена для базисных функций с неограниченным спектром. Из соображений размерности вместо (20) мы можем записать

$$\Delta/\delta = \text{Const} \times \log_2(1 + E_s/E_n).$$

Численное значение константы, которое вообще говоря, может зависеть как от формы аппаратной функции, так и от формы различаемых сигналов, не может быть определено только из анализа размерности. Для этой цели в работах [35-37] используются два способа:

- вычисление ширины  $\Delta$  по формуле (21) для различных аппаратных функций с ограниченным спектром и
- численные эксперименты.

Оба способа дают приблизительно одно и то же значение  $\text{Const} \approx 1/3$  и, окончательно мы приходим к формуле для предельного сверхразрешения

$$SR = \frac{1}{3} \log_2(1 + E_s/E_n).$$

Наиболее важный вывод из этой формулы состоит в том, что в непараметрическом случае предельное сверхразрешение логарифмически зависит от отношения сигнал/шум. Численные эксперименты хорошо подтверждают справедливость этой формулы.

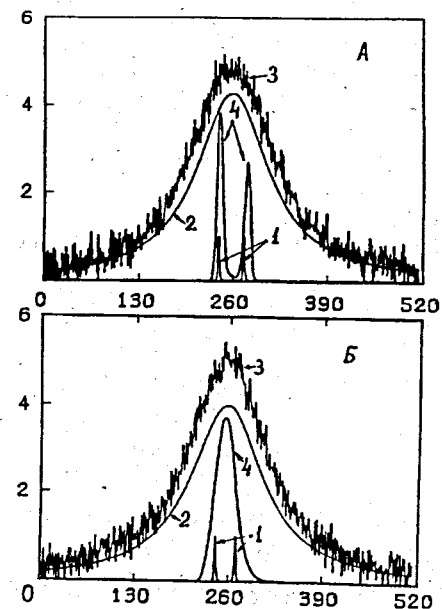


Рис.5 Восстановление двух линий на расстояниях больше и меньше порога разрешения

На рис.5 показан пример восстановления двух линий, свернутых с лорентцевской аппаратной функцией с параметром  $D = 60$  и наличии шума 20 дБ при расстоянии между линиями: а)  $\delta_2 = 35$  (больше порога разрешения) и б)  $\delta_2 = 28$  (меньше порога разрешения).

## Глава 9. Тексты программ

В этой главе приводятся тексты программ, описанных в диссертации:

- Программы аппроксимации экспериментальных данных полиномом методом ортогональных разложений с новым способом нахождения коэффициентов Фурье ("снятие шкурок с луковицы") CODA1, CODA2 на Алголе для ЭВМ HP-1000 и CODAF на Фортране;
- Программы для решения интегрального уравнения Шлемильха CAT3 и CAT6 на Алголе для ЭВМ HP-1000;
- Программа для решения задачи диагностики цилиндрического плазменного разряда с учетом рефракции на основе решения интегрального уравнения Абеля PHASE на Алголе для ЭВМ HP-1000;
- Программа оптимальной фильтрации FILT и основная подпрограмма FILTER, реализующая алгоритм описанный в гл.4 на Фортране;

- Главные программы пакета RECOVERY: Dconv, Dexra и Datten для решения интегрального уравнения свертки, интегрального уравнения Лапласа в действительной области и для восстановления спектра рентгеновского излучения по измерениям его поглощения в газе IBM, Fortran/2.

## Литература

- [1] Амбарцумян В.А. Обратные задачи астрофизики. В сборнике "Фундаментальные проблемы теоретической и математической физики", стр.9-20, D 12831, Дубна, 1979
- [2] Горелик Г.С. О применении модуляционного метода в оптической интерферометрии. *ДАН СССР*, том 83, стр.549-552, 1952
- [3] Бернштейн И.Л., Горелик Г.С. К теории звездного интерферометра Майкельсона. *ДАН СССР*, т.86, стр.47-50, 1952
- [4] Курант Р. и Гильберт Д. Методы математической физики. Пер. с нем., том 1, стр.147, ГГТИ, М., 1932
- [5] Тихонов А.Н. Об устойчивости обратных задач. *ДАН СССР*, том 39, N 5, стр.195-198, 1943
- [6] Раутиан С.Г. Реальные спектральные приборы. *УФН*, т.66, вып.3, стр.475-517, 1958
- [7] Турчин В.Ф., Козлов В.П., Малкевич М.С. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач. *УФН*, т.102, вып.3, стр.345-386, 1970
- [8] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. Наука, ФМ, М., 1 изд., 1974, 3 изд., 1986
- [9] Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. Теория линейных некорректных задач и ее приложения. Наука, М., 1978
- [10] Frieden B.R. Image Enhancement and Restoration. In "Picture Processing and Digital Filtering", pp.179-248, ed.T.S.Huang, Springer-Verlag, Berlin - N.Y., 1979
- [11] Лаврентьев М.М., Романов В.Г., Шишатский С.П. Некорректные задачи математической физики и анализа. Наука, М., 1980
- [12] Kosarev E.L. Application of the 1-st Kind Integral Equations in Experimental Physics. *Comput. Phys. Comm.* Vol.20., No.1, pp. 69-75, 1980
- [13] Blass W.E., Halsey B.W. Deconvolution of Absorption Spectra. - N.Y. : Acad. Press, 1981. - 160 P.
- [14] Mendel J.M. Optimal Seismic Deconvolution. Academic Press, N.Y., 1983
- [15] Deconvolution with application in spectroscopy. Ed. P.A.Jansson. Academic Press, N.Y., 1984

- [16] Алгоритмы и программы восстановления зависимостей / В.Н. Вапник, Т.Г. Глазкова, В.А. Кошечев и др.; Под ред. В.Н. Вапника. - М. : Наука, 1984. - 815 с.
- [17] Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения. Методы. Алгоритмы. Программы : Справочное пособие. - Киев : Наукова думка, 1986. - 543 с.
- [18] Василенко Г.И., Тараторкин А.М. Восстановление изображений. - М. : Радио и связь, 1986. - 302 с.
- [19] Реконструкция изображений. Под ред. Г.Старка. Пер. с англ. изд. Academic Press, 1987, Мир, М., 1992
- [20] Тихонов А.Н., Гончарский А.В., В.В.Степанов, Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. Наука, ФМ, М., 1990
- [21] Пытьев Ю.П. Методы анализа и интерпретации эксперимента. Изд. МГУ, М., 1990
- [22] Федотов А.М. Некорректные задачи со случайными ошибками в данных. Наука, Сиб.отд., Новосибирск, 1990

## Основные работы автора по теме диссертации

- [23] Е.Л.Косарев. Измерение катодных потерь в микротроне. *ЖТФ*, т.42, N4, 841 - 843, 1972.
- [24] Косарев Е.Л. О численном решении интегрального уравнения Абеля. *ЖВМ и МФ*, том 13, N 6, стр.1591-1596, 1973
- [25] Е.Л.Косарев. Аппроксимации экспериментальных данных полиномом методом ортогональных разложений. Алгоритмы N П 000257 в сб.: *Алгоритм и программы*, N1, 1973, изд. ВНИЦЕНТР, М., 1973.
- [26] Л.А.Вайнштейн, Е.С.Биргер, Н.Б.Конюхова, Е.Л.Косарев, Г.П.Прудковский. Коротковолновая диагностика плазменного шнура. *Физика плазмы*, т. 2, вып. 4, стр. 658 - 671, 1976.
- [27] Е.Л.Косарев. Новый метод восстановления пространственной плотности звезд в шаровых скоплениях и его применение к вспыхивающим звездам в Плеядах. *Письма в астрономический журнал*, т.6, N7, стр. 408-413. 1980
- [28] Е.Л.Косарев. Пространственное распределение вспыхивающих звезд в Плеядах, вычисленное методом ортогональных разложений по данным наблюдений. *Переменные звезды*, т. 21, N3, стр. 321-363, 1980
- [29] Kosarev E.L., Pantos E. Optimal Smoothing of Noisy Data by Fast Fourier Transform. *J. Phys. E. : Sci. Instrum.* Vol.16, pp. 537-543, 1983
- [30] Косарев Е.Л., Пантос Е. Оптимальное сглаживание данных с шумом, использующее быстрое преобразование Фурье. *Приборы и техника эксперимента* - 1985. - Вып. 3. - С. 92-95.

- [31] Косарев Е. Л., Песков В. Д., Подоляк Е. Р. Восстановление спектра ультрамягкого рентгеновского излучения из измерений его поглощения в газе. *ЖТФ*. - 1983. - Т. 53, вып. 6. - С. 1101-1114.  
E.L.Kosarev, V.D.Peskov and E.R.Podolyak. High resolution soft X-ray spectrum reconstruction by MWPC attenuation measurements. *NIM*, Vol.208, pp.637-645, 1983
- [32] Косарев Е.Л., Подоляк Е.Р. Фотопоглощение рентгеновского излучения в молекулярном водороде в диапазоне энергий фотонов 17-400 эВ. *Оптика и спектроскопия*, т.56, вып.4, стр.643-646, 1984
- [33] E.L.Kosarev, E.R.Podolyak. Comments on the data on photoabsorption in molecular hydrogen for low-energy X-rays. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, A261, 161-162, 1987
- [34] Г.Ф.Карабаджак, А.В.Кашлюк, Е.Л.Косарев, С.В.Переверзев, В.Д.Песков. Многодырочная камера-обскуры для наблюдения слабого импульсного рентгеновского излучения. *ПТЭ*, вып.2, стр.181-186, 1988
- [35] Косарев Е. Л. Шенноновский предел сверхразрешения и его достижение при восстановлении сигналов. *ПТЭ*. - 1989. - Вып.4. - С. 84-87.
- [36] E.L.Kosarev. Superresolution limit for signal recovery. In J.Skilling (ed.), *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, Kluwer Academic Publ., Dordrecht, 1989, pp.475-480
- [37] Косарев Е. Л. О пределе сверхразрешения при восстановлении сигналов. *Радиотехника и электроника*. т.35, вып.1, стр. 68-87, 1990  
E.L.Kosarev. Shannon's superresolution limit for signal recovery. *Inverse Problems*, Vol.6, No.1, pp. 55-76, 1990
- [38] Гельфгат В.И., Косарев Е.Л., Подоляк Е.Р. Комплекс программ восстановления сигналов из зашумленных данных методом максимума правдоподобия. *Приборы и техника эксперимента*, вып.5, стр.93-98, 1991
- [39] Гельфгат В.И., Косарев Е.Л., Подоляк Е.Р. Комплекс программ восстановления сигналов из зашумленных данных методом максимума правдоподобия. Депонированная статья в ВИНТИ, номер 2635-В91, 112 стр., 1991
- [40] V.I.Gelfgat, E.L.Kosarev, E.R.Podolyak. Programs for signal recovery from noisy data using the maximum likelihood principle.  
Part 1: General description. *CPC*, Vol.74, No.3, pp.335-348, 1993  
Part 2: Program implementation. *ibid*, pp.349-357, 1993

Рукопись поступила в издательский отдел  
21 октября 1994 года.