

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ СПЕКТРОВ И СПЕКТРОПОДОБНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

В. Б. Злоказов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Работа охватывает всевозможные математические аспекты, связанные с проблемой анализа основных видов данных, получаемых в экспериментальной физике, — спектроподобных распределений (дискретных спектров, сечений реакций и т. д.).

The paper deals with various aspects of the problem of the analysis of the most common kinds of data obtained in experimental physics—spectrum-like distributions (discrete spectrum, cross-sections of the reactions etc.).

ВВЕДЕНИЕ

В данной работе речь пойдет о важнейшей задаче спектрометрии— задаче анализа дискретного спектра излучения или поглощения физических объектов на том или ином уровне структуры материи.

Математическая теория анализа таких спектров имеет более чем 100-летнюю историю. Во всяком случае такие фундаментальные понятия для оптических спектров, как полезная компонента и ее характеристики, аппаратная функция и помеха наблюдения и связанные с ними понятия чувствительности и разрешения анализа (не измерения!) были, по-видимому, известны еще во времена лорда Рэля. В ту и более позднюю эпоху были построены основные положения теоретической и простейшей практической методики анализа наблюдаемых спектров электромагнитных излучений.

Современная постановка задачи спектрометрии (не только ядерной, но и молекулярной), будучи родственной классической в своих общих чертах, отличается от последней в двух существенных аспектах:

- 1) требуется практическая методика высокоточного анализа спектров;
- 2) требуется практическая методика автоматического (в математическом, не техническом смысле) анализа этих спектров (т. е. с минимальным участием человека в управлении алгоритмом).

Каждое из этих требований, а тем более оба вместе, делают упомянутую задачу нетривиальным разделом новой области науки — анализа данных

При написании данной работы преследовались две цели:

1) перечислить в общих чертах хотя бы важнейшие результаты, относящиеся к упомянутой задаче;

2) изложить эти результаты как можно более строго с точки зрения математики, пользуясь, однако, простым языком.

Имеющиеся в настоящее время публикации обзорного типа [1—5] неудовлетворительны как вследствие узости охвата материала (в основном это работы, посвященные одномерным γ -спектрам или молекулярным спектрам), так и недостаточной математической строгости изложения.

Подавляющее большинство авторов (не только математиков) стремится втиснуть задачу анализа аппаратурного спектра в узкие и тесные рамки какого-нибудь классического раздела математического анализа или статистики, хотя в действительности эта задача является важным примером нетрадиционного математического рассмотрения и требует создания адекватного ей формального аппарата.

Далее, дискретный спектрометрический подход, рассуждая формально, есть частный случай более общего «пикоскопического» подхода, когда количественное изучение какого-либо неизвестного феномена сводится к измерению доступных для наблюдения характеристик этого феномена, выделению максимумов и минимумов получающихся кривых и их последующей теоретической интерпретации, т. е. задача анализа дискретного спектра есть в действительности задача общего факторного анализа, и, таким образом, значение этой задачи далеко превосходит рамки не только спектрометрии, но и физики вообще.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АППАРАТУРНОГО СПЕКТРА

Сеанс измерения дает нам наблюдаемый или, иначе, аппаратурный спектр $s(x)$. Аргумент x (энергия, потеря энергии, время, угол и т. д.) может быть в зависимости от способа регистрации либо непрерывной (регистрация аналоговыми методами), либо дискретной величиной — каналом, который мы будем обозначать символом k . В настоящее время дискретное представление является универсальным, поэтому далее будем опираться в основном на него.

Простейшая модель спектра может быть построена, а ее важнейшие характеристики постулированы на основании соображений весьма общего, почти философского характера с привлечением очень немногих физических знаний. Из практики анализа данных известно, что любое множество сигналов есть объединение полезных или информационных сигналов, бесполезных или фоновых сигналов (т. е. не представляющих интереса в данный момент) и шумовых (т. е. не информационных). Общее у фона и шума то, что они оба искажают или заглушают полезные сигналы; разница — в происхождении: фон — компонента детерминированного, шум — случайного происхождения. В рамках простейшего линейного подхода можно записать

$$s(k) = p(k) + b(k) + e(k), \quad (1)$$

где $p(k)$, $b(k)$, $e(k)$ — соответственно полезная, бесполезная и шумовая компоненты.

В дискретной спектрометрии информация заключена в функциях, локализованных в узкой области значений аргумента.

Простое, легко интерпретируемое физически и вместе с тем исчерпывающее описание таких функций дают их центральные моменты:

момент нулевого порядка, иначе площадь фигуры, очерченной такой функцией;

момент первого порядка — центр тяжести, иначе центр или положение;

момент второго порядка — квадрат «ширины» фигуры;

момент третьего порядка — коэффициент, характеризующий асимметрию фигуры и т. д.

Иногда делается учет приборной поправки. Так как $s(x)$ — наблюдаемый результат воздействия «истинного» спектра $t(x)$ на регистрирующий прибор, то в простейшем линейном подходе можно записать

$$s(x) = \int R(x, \mathbf{x}) t(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + n(x), \quad (2)$$

где $R(x, \mathbf{x})$ — приборная функция, $n(x)$ — аддитивная помеха. Термин «истинный» понимается здесь в относительном смысле: не говоря уже о том, что вид $t(x)$ нам может быть известен лишь с точностью до тонкой структуры, определяемой уровнем наших физических знаний вообще и техническими возможностями регистрирующей аппаратуры, наблюдаются часто не сами изучаемые процессы, а инициированные ими вторичные процессы. Суммируя сказанное, можно выписать окончательное выражение для аппаратурного спектра $s(k)$:

$$s(k) = \sum_{i=1}^n p_i(k) + b(k) + e(k), \quad (3)$$

где i -я полезная субкомпонента есть функция, локализованная в некоторой i -й области значений аргумента x , и которая иногда может быть записана так:

$$P_i(x) = \int R(x, \mathbf{x}) t_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (4)$$

Для локализованных функций имеет смысл преобразование Фурье:

$$\Phi(w) = \hat{F}p(x)$$

(здесь и далее \hat{F} — символ преобразования Фурье). Его значение состоит в том, что в дополнение к «амплитудному» представлению информации $p(x)$ мы получаем дуальное ему «частотное» представление $\hat{F}p(x)$ той же самой информации, а именно $|\Phi(w)|^2 = \Phi(w)\Phi(w)$ — распределение функции $p(x)$ по частотам, указывающее, из каких частот построена функция $p(x)$. Частотное пред-

ставление играет важную роль при построении цифровых фильтров и в процедурах деконволюции.

Под фоном $b(k)$ обычно понимается нелокализованная компонента спектра, т. е. размазанная более или менее плавно по всей области изменения x , хотя в принципе бесполезными частями спектра могут быть и пикообразные фигуры (спутательные пики в нейтронных реакторных спектрах, пик обратного рассеяния в γ -спектре и т. д.). Бесполезные пикообразные фигуры должны либо формой отличаться от локализованных, либо объединяться с последними и отсеиваться уже на этапе просмотра результатов анализа спектра.

И, наконец, помеха $e(k)$. Обычное (при отсутствии детальных знаний) для статистического подхода предположение о нормальности распределения здесь не очень подходит, поскольку дискретный спектр представляет собой в каждом канале сумму целочисленных величин — событий в детекторе. Более подходящими оказываются другие распределения, и прежде всего распределение Пуассона. Его применение не требует глубокого проникновения в физическую природу процессов регистрации отсчетов в детекторе; достаточны лишь самые общие предположения о них, такие, как:

1) независимость событий друг от друга и от предыдущей истории;

2) редкость событий (т. е. малость вероятности регистрации двух и более событий по сравнению с вероятностью регистрации одного события).

Тогда вероятность того, что $s(k)$ примет значение N , равна

$$P(s = N) = a^N e^{-a} / N!, \quad (5)$$

где величина a (разная для разных k) является единственным параметром распределения. Пуассоновское распределение обладает важным свойством: математическое ожидание $\hat{M}s$ равно дисперсии $\hat{D}s$ и равно a в (5); так как мы можем считать, что

$$e(k) = s(k) - \hat{M}s(k),$$

то дисперсия $e(k)$ будет равна дисперсии $s(k)$.

Если в канале k зарегистрирована пуассоновская величина $s(k)$, то в качестве оценки ее дисперсии можно взять оценку максимального правдоподобия параметра a , которая равна $s(k)$:

$$a_m = s(k)$$

или байесовскую оценку

$$a_b = s(k) + 1.$$

$\hat{M}e(k)$ будет равно нулю, относительно корреляций между $e(k)$ и $e(j)$ при $k \neq j$ обычно делается предположение об их равенстве нулю. Тем самым мы описали распределение величины $e(k)$ для средней статистики отсчетов.

При быстрой скорости счета предположение о редкости событий, лежащее в основе пуассоновской модели, не проходит. Хорошей моделью для распределения быстрорастущих неотрицательных сумм может служить составное (compound) распределение Пуассона [6], т. е. распределение сумм слагаемых, каждое из которых есть, в свою очередь, сумма случайных пуассоновских величин. В этом случае

$$\hat{D}s(k) = \hat{M}s(k) + c \{\hat{M}s(k)\}^2 \quad (6)$$

с неизвестным коэффициентом c .

Определив c из каких-нибудь дополнительных соображений, можно строить оценку дисперсии спектра на основе (6), т. е.

$$\hat{D}s(k) \approx s(k) + c \{s(k)\}^2.$$

Коэффициент c можно определить по выборочной дисперсии серии спектров одного излучателя или из условия хорошей подгонки спектра методом наименьших квадратов.

Для исключительно бедной статистики пуассоновские модели не подходят. Здесь можно воспользоваться тем, что при бедной статистике спектр становится квазистационарным статистическим рядом и дисперсию в каждой небольшой области спектра можно считать равной выборочной дисперсии значений спектра в этой области, т. е.

$$\hat{D}s(k) = \sum_{i=k-L}^{i=k+L} (s(i) - \bar{s})^2 / 2L, \quad (7)$$

где $2L$ — размер данной области спектра. В силу эргодичности квазистационарных процессов выражение (7) будет более или менее хорошей оценкой дисперсии.

Для спектров с непрерывным аргументом x вопрос о распределении должен решаться особо и там, по-видимому, наиболее разумный путь — построение выборочных оценок по серии эквивалентных спектров.

2. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ОПЕРАЦИИ

Здесь можно отметить такие вопросы: а) выбор ширины ячейки; б) сравнение гистограмм спектров; в) сдвиг спектра.

А. Математические соображения, лежащие в основе выбора ширины ячейки, отвечают следующим двум противоречивым требованиям:

1) размер ячеек должен быть достаточно широким для обеспечения хороших статистических свойств будущей гистограммы (достаточно большая пуассоновская статистика, минимальные корреляции с соседними ячейками и т. д.);

2) размер ячеек должен быть как можно уже для того, чтобы прорисовывалась «тонкая структура» линии регрессии, в частности вершины и щели мультиплетов.

Поскольку процедура объединения точек исходного спектра в ячейки является цифровым фильтром интегрирующего типа, ее применение дает наибольшую систематическую погрешность в определении высокочастотных компонент спектра.

Абстрактные количественные соображения, связанные с выбором ширины ячейки, изложены во многих работах по статистике [7]. Иногда при исследовании тонкой структуры спектральных гистограмм добиться маленького размера ячеек не удается по техническим причинам [8]. В этом случае рекомендуется следующий прием. Измеряется серия сдвинутых спектров

$$s(x), s(x+h), s(x+2h), \dots, s(x+nh)$$

и затем строится среднее из их гистограмм

$$\bar{s}(x) = \sum_{i=0}^n s(x+ih)/n.$$

У гистограммы $\bar{s}(i)$ размер ячейки будет в n раз меньше, чем у исходных. Показано [8], что достигнутое таким образом сужение размеров ячейки позволяет увеличить точность локализации и сепарации пиков.

Б. Простейшие способы [9] решения этой задачи состоят в следующем. Пусть даны спектры $s_1(i), s_2(i), i = 1, \dots, m$. Если дополнительно имеются оценки параметров этих спектров $p_{1j}, p_{2j}, j = 1, k$, то можно действовать двумя путями. Составим одно из двух выражений:

$$\chi_1 = \sum_{i=1}^m \frac{\{s_1(i) - s_2(i)\}^2}{D_1(i)} \quad \text{или} \quad \chi_2 = \sum_{j=1}^k \frac{\{p_{1j} - p_{2j}\}^2}{D_2(j)}, \quad (8)$$

где $D_1(i)$ и $D_2(j)$ — дисперсии величин $s_1(i) - s_2(i)$ и $p_{1j} - p_{2j}$ соответственно, и проверим χ_1 или χ_2 на значимость с помощью χ^2 -критерия. В случае статистической эквивалентности обоих спектров χ_1 и χ_2 будут подчиняться χ^2 -распределению с m и k степенями свободы соответственно.

Данный способ может быть применен и к участкам спектров. Столь простой подход часто неадекватен сложности реальной задачи. Например, эквивалентные в сущности спектры могут быть сдвинуты друг относительно друга или быть пропорциональными друг другу. В этом случае необходим несколько более сложный подход. Запишем

$$s_2(i) = As_1\left(\frac{i-P}{W}\right) \quad \text{или} \quad s_2(i) = As_1\left(\frac{i-P}{Ci+W}\right).$$

Смысл этих записей: спектр s_2 , возможно, сдвинут относительно спектра s_1 на величину p , пропорционален s_1 с коэффициентом A ,

уширен с коэффициентом W (или $Ci + W$). Составим выражение

$$\chi = \sum_{i=1}^m \frac{\{s_2(i) - As_1[(i-P)/(Ci+W)]\}^2}{D_1(i)}. \quad (9)$$

Неопределенные пока величины A , p , C , W можно определить методом наименьших квадратов (МНК). Если в этом случае значение χ соответствует значимо χ_{n-4}^2 -распределению, то гистограммы s_1 и s_2 есть реализации двух регрессий, из которых вторая есть первая, сдвинутая на P каналов, уширенная с коэффициентами $Ci + W$, увеличенная с коэффициентом A . Детали процедуры минимизации (9) даны в разд. 10.

В. Наконец, сдвиг гистограммы, или более общее преобразование гистограммы к представлению в иных координатах (например, более информативных физически). Если i -элемент ячейки исходной гистограммы $h(i)$, а физический интерес представляет представление $h(j)$, где $j = j(i)$, то переход к нему целесообразно осуществить, используя так называемый метод субъячеек [10].

Суть метода состоит в следующем. Каждая большая ячейка i делится на m субъячеек i_k , причем m согласовано с $h(i)$, т. е. большим значениям $h(i)$ соответствуют большие m , и наоборот, и преобразование $i \rightarrow j$ совершается над каждой субъячейкой i_k ; получаемые $h(j_k)$ суммируются в пределах больших ячеек j , и в итоге получается новая гистограмма $h_1(j)$.

Как показано в [10], такой метод вносит существенно меньшие корреляции в $h_1(j)$, чем обычное преобразование больших ячеек.

3. ФИЛЬТРАЦИЯ И ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ГИСТОГРАММ

Под фильтрацией понимается устранение из спектра тех или иных компонент, и прежде всего бесполезных, т. е. фона и шума. В этой области трудно устоять против искушения перенести на спектры технику численной фильтрации, основанную на частотных преобразованиях, столь хорошо зарекомендовавшую себя в работах по радиотехнике и теории связи. Но в радиотехнике и электронике сигнал и помеха разделены частотно, что дает возможность эффективно использовать линейные оптимальные фильтры. В противоположность этому в спектрах функции сигнала и помехи частотно не разделены, т. е. оба представления данных, как «амплитудное», так и «частотное», имеют значительные перекрытия. Например, если функция сигнала $p(x)$ — гауссиан, то она состоит из всех четных частот [поскольку $\hat{F}_p(x) \neq 0$ ни для одной четной w]; с другой стороны, шум содержит компоненту белого шума, состоящую из всех частот, т. е. информация в спектрах представлена в амплитудно-частотном коде, и аппарат амплитудно-независимых фильтров заведомо будет давать низкое качество.

Различаются следующие этапы фильтрации:

- а) подавление грубых погрешностей;
- б) подавление высокочастотной компоненты шума;
- в) подавление низкочастотной компоненты фона.

Оптимальность анализа данных в математической статистике понимается в смысле малости дисперсии оценок этих данных при обработке серий, но в научной спектрометрии чаще всего имеются единственные данные, повторять которые или невозможно, или нецелесообразно.

Далее, нелинейный МНК накладывает дополнительные требования равномерной малости помехи для того, чтобы МНК-оценки параметров были состоятельными вообще и имели небольшую дисперсию, в частности.

Все это создает проблему устранения из общей помехи специфической компоненты — грубой погрешности. Простейший подход состоит в осуществлении какого-либо преобразования, которое резко усиливает локальные экстремумы, например взятие четвертой производной спектра и последующие нахождения в ней локальных максимумов и минимумов. Это будут каналы весьма вероятных грубых погрешностей, которые можно устранить или интерполяцией, или приписыванием данным точкам нулевых весов.

Эффективность этого приема низка. Более точными будут подходы, основанные на более детализированных представлениях о грубой погрешности, или «выбросе». Если мы определим выброс как точку, где резко нарушен ход плавной кривой, то процедура поиска выброса включает в себя следующие шаги:

- 1) проверить участок гистограммы (без проверяемой точки) на плавность изменения;
- 2) построить значение гистограммы в проверяемой точке из условия плавности, например, подгонкой соседних значений плавной кривой — полиномом;
- 3) сравнить реальное значение с построенным; если реальное сильно отличается от построенного, значит, реальное значение содержит грубую ошибку.

Сравнение и проверка понимаются в статистическом смысле, например в смысле χ^2 -критерия [11].

Дополнительно должна быть осуществлена проверка участка на «пикообразность», чтобы исключить идентификацию вершины пика как выброса. Кроме того, выброс может быть результатом сбойного изменения старших разрядов слова накопителя спектра. Следовательно, выбросом будет и какое-либо непиковое значение спектра, отличающееся от соседних более чем в 1,5 раза (при условии не малой статистики).

Простейший в вычислительном отношении, но не очень эффективный в смысле качества подход для подавления высокочастотной компоненты шума состоит в использовании линейных фильтров. Если $s(i)$ — исходный спектр, то фильтр, преобразующий $s(i)$ в $y(i)$

с передаточной функцией $H(w)$, близкой к нулю в области высоких частот, будет иметь вид

$$y(i) = \sum_{(j)} a(i-j) s(j), \quad (10)$$

где $H(w) = |\hat{F}a(i-j)|$ — модуль преобразования Фурье ядра фильтра $a(i-j)$. Примеры использования фильтров типа (10) даны в [12].

Существенно менее примитивными являются амплитудно-зависимые фильтры, и прежде всего сплайновые фильтры [13]. В этом случае сглаженный спектр $t(x)$ получается как решение вариационной задачи: минимизировать выражение

$$\sum_{i=1}^m t^{n^2}(i) + \lambda \sum_{i=1}^m w(i) \{s(i) - t(i)\}^2 \quad (11)$$

в классе функций с непрерывными первой и второй производными. Здесь $w(i)$ — вес каждой точки i , λ — множитель Лагранжа (аргумент минимизации). Решение задачи (11) будет представлять собой семейство полиномов третьего порядка в каждой ячейке $(i, i+1)$ с совпадающими в узлах i производными до второго порядка включительно.

Фильтр (11) является существенно лучшим инструментом подавления шума, чем линейные фильтры, но все же и он вносит заметные искажения в форму полезного сигнала. В [14] предложена более специфическая форма фильтра типа (11), точнее учитывающая особенности отношения сигнал/шум в спектре.

Для упрощения вычислений задача рассматривается в классе гистограмм, а не аналитических функций. Далее введено понятие меры осцилляций гистограмм, в частности предложено такое выражение:

$$\mu(h(i)) = \sum_{(i)} h''^2(i) / (1 + h'^2(i)), \quad (12)$$

где $h''(i)$ и $h'(i)$ — вторая и первая разности гистограммы $h(i)$.

Мера (12) малочувствительна к погрешности в $h'(i)$, поэтому мы можем заменить (чтобы избавиться от неквадратичности) h' на $s'(i)$. Тогда задача сглаживания спектра $s(i)$ гласит: найти гистограмму $g(i)$, которая одновременно была бы близка к грубому контуру $s(i)$ и имела минимальную меру осцилляций. Математически это выглядит так: минимизировать по $g(i)$

$$\sum_{i=0}^{m-1} e(i) g''^2(i) + (\lambda/N) \sum_{i=1}^m (g(i) - s(i))^2, \quad (13)$$

где

$$e(i) = 1/(1 + s'(i)^2), N = \sum_{i=1}^m e(i), g''(i) = g(i+1) - 2g(i) + g(i-1).$$

Поскольку условие минимума как (12), так и (13) по λ не оправдано ни физическими, ни статистическими соображениями, то в фильтре (13) оно отброшено. Здесь λ — просто управляющая переменная. Благодаря нормировке через N , она слабо зависит от масштабных преобразований и может быть определена с помощью тестов. Частотно-амплитудная избирательность фильтра (13) намного лучше, чем фильтра (12). В частности, он почти не искажает такие детали сигнальной информации, как вершины пиков и щели мультиплетов, и, благодаря масштабной независимости, не подавляет отношение сигнал/шум для слабых пиков. В то же время очень эффективно подавляются осцилляции на плавных участках.

Устранение низкочастотной компоненты фона может быть также осуществлено с помощью фильтра типа (10), с теми же замечаниями по поводу их эффективности. В настоящее время особенно популярны фильтры первой и второй разностей [15, 16]:

$$y(i) = s(i+1) - s(i) \text{ или } y(i) = s(i+1) - 2s(i) + s(i-1) \quad (14)$$

в сочетании с элементами сглаживающего типа.

Такой подход подавляет лишь тривиальные участки фона (линейные куски) и вдобавок искажает полезную компоненту. Другой подход состоит в итеративном применении фильтров сглаживающего типа, дающем «размытый» спектр с заглаженными пиками, который может рассматриваться как аппроксимация фона, правда, очень грубая.

Поэтому более привлекательной представляется идея построить частотно-амплитудный фильтр, аналогичный (13). В частности, в [14] предложен подход, основанный на следующей идее: фон должен плавно, не превосходя значений спектра, огибать снизу спектр так, чтобы амплитуда его была близка к значениям спектра в низкой части и не близка в высокой.

Математическая процедура получения фона для гистограммы $s(i)$ включает в себя следующие шаги:

- 1) сгладить спектр $s(i)$ с помощью фильтра (13);
- 2) искать фон $b(i)$ как решение задачи минимизации выражения

$$\sum \{b(i+1) - b(i)\}^2 + \eta \sum w(i) \{s(i) - b(i)\}^2 \quad (15)$$

при ограничениях $b(i) \leq s(i)$. Здесь η — скаляр, аналогичных λ в (13), а $w(i) = 1/s(i)$ — веса.

Ряд авторов предпочитает простые процедуры фильтрации (даже понимая их примитивность), ссылаясь на то, что сложные фильтры требуют больше счетного времени. Учитывая, однако, вспомогательный характер фильтрации при анализе спектров, следует указать на неуместность таких возражений, поскольку время работы даже самого сложного фильтра из перечисленных ничтожно по сравнению с временем осуществления самой важной процедуры анализа — МНК, а выигрыш в качестве сложные фильтры дают огромный.

Аналогично фильтрации интерполяции гистограмм спектров также должна учитывать их особенности, и прежде всего наличие погрешности в значениях спектра и связанные с этим большие колебания значений старших производных, что делает неэффективными классические приемы интерполяции. Поэтому для интерполяции гистограмм, встречающихся в спектрометрии, приходится или ограничиваться функциями невысокого порядка дифференцируемости (линейными), или накладывать на интерполирующие функции дополнительные ограничения. Первое не всегда обеспечивает требуемую точность, поэтому весьма популярным стал аппарат второго направления, а именно сплайновая техника. Для гистограммы $s(i)$, определенной в узлах $i = 1, \dots, m$, интерполирующая ее функция $t(x)$, определенная при всех значениях аргумента, ищется в классе полиномов третьего порядка, каждый из которых задан в интервале $i, i + 1$ так, что выражение

$$\int_0^m t''(x)^2 dx \quad (16)$$

имеет минимальное значение; при этом соседние полиномы совпадают на концах интервалов вместе со своими вторыми производными.

Численная процедура нахождения полиномов для $t(x)$ несколько громоздка [17]; поэтому в [18] предложено упрощение, состоящее в том, что ищется не интерполирующая функция $t(x)$, а интерполирующая гистограмма $t(j)$, заданная для произвольно густого множества узлов $\{j\}$ (включающего и узлы i). Если $s(i)$ определена в узлах $i_0, i_0 + 1, i_0 + 2, i_0 + 3$, а нам требуется значение $s(i)$ в узле j ($i_0 + 1 < j < i_0 + 2$), то неизвестное значение $t(j)$ ($t(i_0 + n) = s(i_0 + n)$, $n = 0, \dots, m$) мы можем найти минимизацией выражения

$$F = \sum_{\{k\}} \{\Delta_2 t(k)\}^2, \quad (17)$$

где множество $\{k\}$ включает в себя индексы $i_0 + 1, j, i_0 + 2$, а $\Delta_2 t(k) = [t(k-1) - 2t(k) + t(k+1)]/h^2(k)$, $h(k) = j - i_0 - 1, 1, i_0 + 2 - j$.

Поскольку выражение (17) зависит от одной неизвестной $t(j)$, то найти минимум (17) по ней просто (корень уравнения $F'_{t(i)} = 0$):

$$t(j) = \left[\frac{2t(i_0+1) - t(i_0)}{(j-i_0-1)^4} + \frac{2(t(i_0+1) + t(i_0+2))}{1} + \frac{2t(i_0+2) - t(i_0+3)}{(i_0+2-j)^4} \right] / D, \quad (18)$$

где

$$D = \frac{1}{(j-i_0-1)^4} + 4 + \frac{1}{(i_0+2-j)^4}.$$

С точки зрения практических приложений формула (17) эквивалентна по смыслу и качеству результата (16); в то же время решение (18) задачи (17) существенно проще.

В качестве дополнительных операций можно упомянуть:

- 1) использование интерполяции гистограмм в комбинации с предварительной фильтрацией;
- 2) проверка участков гистограмм на монотонность и использование на монотонных участках линейной интерполяции.

4. АППРОКСИМАЦИЯ ГИСТОГРАММ

Эта задача формулируется следующим образом. Имеется система гистограмм $\{q_j(i)\}$, $j = 1, \dots, n$; как выражается заданная гистограмма $h(i)$ через гистограммы $g_j(i)$? Такая формулировка в спектротрии часто бывает более естественна, чем та, в которой фигурируют непрерывные функции $g_j(x)$, по следующим причинам. У нас часто нет информации о наблюдаемых процессах, выраженной в непрерывных понятиях, и мы вынуждены домысливать отсутствующие детали. Да и технически очень трудно подобрать удачную комбинацию непрерывных функций, которая бы хорошо аппроксимировала спектральные гистограммы. Эксперимент же в состоянии снабдить нас достаточным количеством моделей гистограмм, так или иначе связанных с изучаемой гистограммой.

Линейный подход к задаче аппроксимации гласит: определить коэффициент p_j комбинации $\sum_{j=1}^n p_j g_j(i)$, такой, что норма выражения

$$\Phi = \left\| h(i) - \sum_{j=1}^n p_j q_j(i) \right\| = \sum_{i=1}^m w(i) \left\{ h(i) - \sum_{j=1}^n p_j g_j(i) \right\}^2 \quad (19)$$

минимальна. Здесь $w(i)$ — веса.

Такая задача имеет единственное решение, если $g_j(i)$ есть система Чебышева.

Решение находится алгебраическими методами.

Применение нелинейного подхода предварительно требует решения проблемы параметризации гистограмм. В [18] предложен следующий подход. Если $h(i)$ — исходная гистограмма, то весьма большое семейство параметрически зависимых от $h(i)$ выражений дается формулой

$$g(i, p_1, p_2, \dots, p_k) = h(P_k(i)), \quad (20)$$

где $P_k(i)$ — полином степени k над i , а p_j — его коэффициенты. Запись (20) может быть обобщена:

$$g(i, p_1, \dots, p_k, p_{k+1}, \dots, p_e) = h\{P_k(i)/Q_e(i)\}, \quad (21)$$

где $P_k(i)$ и $Q_e(i)$ — полиномы степени k и e над i .

Аргумент $P_k(i)$ в гистограмме (20) или $P_k(i)/Q_e(i)$ в (21) может принимать уже непрерывные значения (или, по крайней мере, неце-

лочисленные). Значение $h(P_k)$ при нецелочисленных значениях аргумента может быть определено интерполяцией по ближайшим целочисленным значениям с помощью методов, описанных в разд. 3.

Имея параметризацию (20) [или (21)], мы можем уже построить обобщение выражения (19) на нелинейный случай:

$$\Phi = \left\| h(i) - \sum_{j=1}^n k_j q_j(P_j(i)) \right\|^2 = \sum_{i=1}^m w(i) \left\{ h(i) - \sum_{j=1}^n k_j q_j(P_j(i)) \right\}^2. \quad (22)$$

Параметры p_{kj} в полиноме $P_j(i)$ входят в (22) уже нелинейно. Задача минимизации Φ по параметрам p_{kj} и k_j имеет единственное решение, если производные от $\{q_j(P_j(i))\}$ по параметрам образуют систему Чебышева.

Оценки параметров как в (19), так и в (22) находятся из системы уравнений

$$\frac{d\Phi}{dp_k} = 0, \quad k=1, \dots, L. \quad (23)$$

При этом частные производные от Φ по параметрам имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{dk_{ja}} &= -2 \sum w(i) \left\{ h(i) - \sum_{j=1}^n k_j q_j(P_j(i)) \right\} q_a(P_a(i)); \\ \frac{d\Phi}{dp_a} &= -2 \sum w(i) \left\{ h(i) - \sum_{j=1}^n k_j q_j(P_j(i)) \right\} k_a \frac{dq}{dx} a \frac{dP_a(i)}{dp_a}, \\ & a=1, \dots, n. \end{aligned}$$

Вместо dq/dx можно взять первую разность или вычислить первую производную гистограммы численными методами.

Параметризации (20) и (21) позволяют достичь точности аппроксимации, для достижения которой обычными линейными методами потребовалось бы на несколько порядков больше параметров. Легко видеть, что рассмотренная ранее процедура сравнения двух спектров с помощью выражения (9) является частным случаем аппроксимации одного спектра другим с помощью выражения (21): $(i - P)/(Ci + W)$ есть отношение двух полиномов первой степени.

5. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ И ДЕКОНВОЛЮЦИЯ ГИСТОГРАММ

Пусть M — число точек гистограммы $h(i)$. Тогда дискретное преобразование Фурье для нее равно

$$g(k) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M h(i) \exp[-j2\pi(i-1)k/M], \quad k=0, \dots, M-1, \quad (24)$$

где $j = \sqrt{-1}$. Обратное преобразование выглядит так:

$$h(i) = \sum_{k=0}^{M-1} g(k) \exp(j2\pi ik/M), \quad i=1, \dots, M. \quad (25)$$

Число частот для гистограмм уже ограничено [в силу периодичности функций $\exp(jn)$], и оно тем меньше, чем меньше число каналов, представляющее спектр, т. е. чем шире ячейка гистограммы. Оно уменьшается вдвое с учетом того, что гистограмма спектра — четная функция.

Как и в непрерывном случае, преобразование (24) показывает, из каких частот «построена» гистограмма $h(i)$. Это соображение ложится в основу цифровых фильтров с использованием преобразований (24) и (25) [19]:

1. Строится по (24) последовательность $|g(k)|$.

2. Подавляются с принятием мер предосторожности (т. е. уменьшаются) те значения $g(k)$, частоты k/M которых должны быть подавлены; для подавления фона — это низкие частоты; для сглаживания — высокие частоты.

3. В оставшихся ненулевых $|g(k)|$ восстанавливается $h(i)$ по (25).

Это типичные линейные частотные фильтры, о небольшой эффективности которых уже говорилось в разд. 3.

Численное осуществление (24) и (25) проводится с помощью алгоритмов быстрого Фурье-преобразования [20].

Другой аспект использования (24) — поиск периодичностей в гистограмме $h(i)$. Если $h(i)$ есть наложение периодических функций с периодами T_l , $l = 1, \dots, L$, то в $|g(k)|$ будет иметь место L пиков в точках, представляющих соответствующие частоты.

Важным случаем использования преобразования Фурье является операция деконволюции. Если $f(x)$ есть свертка функций $K(x)$ и $\varphi(x)$, то

$$f(x) = \int K(x-t)\varphi(t)dt. \quad (26)$$

Деконволюция (26), т. е. определение $\varphi(t)$, может быть осуществлена с помощью преобразования Фурье, а именно: так как $\hat{F}f = \hat{F}K\hat{F}\varphi$, то

$$\varphi(t) = \hat{F}^{-1}(\hat{F}f(x)/\hat{F}K(x)) \quad (27)$$

при условии, что \hat{F}^{-1} применима к отношению в скобках в (27) [21].

Условие применимости является нетривиальным. Для его выполнения необходимо довольно быстрое стремление $\hat{F}f/\hat{F}K$ к нулю при $w \rightarrow \infty$ (w — частота). Однако ядро свертки (26) $K(x-t)$ (физически это чаще всего аппаратная функция) обычно «беднее», чем функция $f(x)$ по частотам, поскольку $K(x-t)$ обычно «загрубляет» сигнал $f(x)$ — «смазывает» тонкую и сверхтонкую структуру последнего.

В результате отношение $\hat{F}f/\hat{F}K$ может оказаться даже неограниченной функцией. Применение \hat{F}^{-1} к ней даст или бессмысленный набор чисел, или в лучшем случае сильно деформированную $\varphi(t)$

(вплоть до полной утраты его информативности). Существует аппарат [22] искусственного улучшения подобной ситуации, сводящейся к принудительному удалению интервалов частот, на которых выступает указанная неприятность, или же, наоборот, к искусственному улучшению частотного качества функции $K(x)$, т. е. дополнению ее преобразования Фурье до некоторой вполне регулярной функции, для которой упомянутая неприятность уже не имеет места [23]. Все это, однако, ведет к тому, что искомая функция $\varphi(t)$ определяется с точностью до неизвестной компоненты. Например, одним из способов решения задачи является использование байесовского подхода для получения оценки $\varphi(t)$ при наличии априорной оценки $\varphi_0(t)$.

Байесовский подход действительно уменьшает дисперсию оценки $\varphi(t)$, но байесовские оценки являются смещенными, причем смещение методом не определяется. Правда, суммарное среднеквадратичное отклонение (дисперсия плюс квадрат смещения) может оказаться небольшим, но будет ли оно существенно меньше, чем у априорной функции $\varphi_0(t)$, это остается открытым вопросом.

Этим последним соображением часто пренебрегают исследователи, обрадованные тем, что после применения частотной регуляризации решение, до этого представлявшее собой хаотический набор чисел, вдруг приобретает вполне разумный и вполне правдоподобный вид. Но ведь и решение, нарисованное рукой физика наугад, тоже имело бы столь же разумный и никак не менее правдоподобный вид: однако точность такого «решения» была бы предметом весьма больших сомнений.

По-видимому, успешное применение техники деконволюции (например, при анализе α -спектров или некоторых сечений нейтронных взаимодействий) объясняется тем, что информационный интервал частот у функции f действительно невелик или же решение $\varphi(t)$ получается с точностью до тонкой структуры, не представляющей для физика интереса.

6. ДЕКОМПОЗИЦИЯ ГИСТОГРАММ

Основная задача обработки спектра — это декомпозиция, или разложение его, а точнее его информационной компоненты, на составляющие субкомпоненты и вычисление характеристик последних. В теоретической оптической спектрометрии задача разложения электромагнитного поля на частоты может быть решена представлением спектра в виде ряда Фурье, взятого по системе тригонометрических функций. В нашем случае дело осложняется конечной шириной линий, ведущей к перекрытию последних, наличием непрерывного фона и случайной помехи, глушащих полезные субкомпоненты.

Существующая практика решения задачи декомпозиции качественно описывается следующим образом. Мы сопоставляем реальному спектру — сумме компонент — его модель, которая есть сумма моделей компонент, и подгоняем ее к реальному спектру в надежде, что

для того, чтобы суммарная модель была близка к суммарному спектру в смысле той или иной метрики, модели компонент будут вынуждены располагаться в суммарной модели точно так же, как сами реальные компоненты в суммарном реальном спектре. Однако ситуация здесь настолько сложна, что задача декомпозиции в общем случае столь просто не решается.

Мы рассмотрим задачу для случая малой помехи, наложенной на измеренный спектр и для абсолютно точно известной формы компонент. Итак, пусть известны модели полезных компонент и фона: $P(x, p)$ и $b(x, q)$, т. е. функции, описывающие их форму и при определенных значениях параметров совпадающие с реальными компонентами и фоном. Тогда мы можем представить спектр $s(i)$ в виде

$$s(i) = \sum_{j=1}^n P_j(i, p_j) + b(i, q) + e(i), \tag{28}$$

где норма помехи $e(i)$ мала по сравнению с нормой $s(i)$: $\|e(i)\| \ll \ll \|s(i)\|$. Пусть p_j^0, q^0 — те значения (истинные) параметров, при которых функции $P_j(i, p_j^0)$ и $b(i, q^0)$ совпадают с реальными компонентами и фоном. Используя в качестве меры близости сумму взвешенных квадратов разностей, мы хотим осуществить декомпозицию через условие: минимизировать

$$\sum_{i=1}^M w(i) \left\{ s(i) - \sum_{j=1}^n P_j(i, p_j) - b(i, q) \right\}^2 \tag{29}$$

в пространстве значений параметров p_j и q . Здесь $w(i)$ — веса.

В силу того что $s(i)$ задана с помехой, т. е. неточно, минимизация (29) дает нам не точные значения p_j^0 и q^0 , а возмущенные. Если $\|e(i)\|$ мала, можно предполагать, что возмущения истинных значений параметров тоже невелики, так что в окрестности последних справедливо линейное представление

$$\left. \begin{aligned} P_j(i, p_j) &\approx P_j(i, p_j^0) + \sum_{k=1}^n \frac{dP_j}{dp_{kj}} (p_{kj} - p_{kj}^0); \\ b(i, q) &\approx b(i, q^0) + \sum_{k=1}^t \frac{db}{dq_k} (q_k - q_k^0). \end{aligned} \right\} \tag{30}$$

Тогда выражение (29) примет вид

$$\sum_{i=1}^M w(i) \left\{ e(i) - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{dP_j}{dp_{kj}} \Delta p_{kj} - \sum_{k=1}^t \frac{db}{dq_k} \Delta q_k \right\}^2, \tag{31}$$

где $\Delta p_{kj} = p_{kj} - p_{kj}^0, \Delta q_k = q_k - q_k^0$.

В точке минимума частные производные (31) по параметрам должны быть равны нулю:

$$\sum_{i=1}^M w(i) \left\{ e(i) - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{dP_j}{dp_{kj}} \Delta p_{kj} - \sum_{k=1}^t \frac{db}{dq_k} \Delta q_k \right\} \frac{dP_j}{dp_j} = 0; \quad (32)$$

$$\sum_{i=1}^M w(i) \left\{ e(i) - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{dP_j}{dp_{kj}} \Delta p_{kj} - \sum_{k=1}^t \frac{db}{dq_k} \Delta q_k \right\} \frac{db}{dq_k} = 0 \quad (33)$$

для $j = 1, \dots, n, k = 1, \dots, M$.

Иначе, короче и более обозримо (32) и (33) могут быть записаны так:

$$\sum_{i=1}^M w(i) \sum_{k=1}^n \psi_k(i) \psi_j(i) \Delta p_k = \sum_{i=1}^M w(i) e(i) \psi_j(i), \quad (34)$$

где для краткости $\psi(i)$ обозначают частные производные функций компонент по параметрам в точке истинных значений параметров, а Δp_k — возмущения параметров (как фоновых, так и полезных компонент).

Если функции $\{\psi_k(x)\}$ образуют систему Чебышева по x или каналы $\{i\}$ подобраны так удачно, что система векторов $\{\psi_k(i)\}$ линейно независима, то (34) всегда имеет решение, однозначно определяемое правой частью. Это решение может быть нулевым, если помеха $e(i)$ ортогональна [с весом $w(i)$] функциям $\{\psi_j(i)\}$. Например, если $e(i)$ состоит преимущественно из высоких частот, а функции $\{\psi_j(i)\}$ являются пологими функциями от i , то возмущения Δp_k будут почти нулевыми, т. е. условие (34), которое формально есть условие аппроксимации $s(i)$ системой $\{\psi_j(i)\}$, будет в то же время и условием декомпозиции $s(i)$. Если же $\{\psi_j(i)\}$ сильно коррелированы между собой, то возмущения $\{\Delta p_k\}$ могут оказаться огромными даже при очень малой $e(i)$, т. е. (34) по-прежнему обеспечит аппроксимацию $s(i)$, но не даст ее хорошей декомпозиции. На основе подобных рассуждений мы можем сформулировать следующие достаточные условия хорошей декомпозиции $s(i)$, т. е. совокупной малости возмущений Δp_k :

- 1) как можно меньшая коррелированность функций $\psi_j(i)$ и помехи $e(i)$ (для уменьшения собственной погрешности декомпозиции);
- 2) как можно меньшая взаимная коррелированность функций $\psi_i(x)$ между собой (для уменьшения матричной погрешности декомпозиции).

Мы редко имеем возможность влиять на помеху $e(i)$; следовательно, для хорошей декомпозиции мы должны найти ответ на следующие два вопроса:

- а) как подобрать модели компонент и фона так, чтобы система $\{\psi_i(x)\}$ удовлетворяла условию 1?
- б) как добиться того, чтобы эта система удовлетворяла условию 2?

В качестве меры корреляции двух функций целесообразно взять их нормированное скалярное произведение

$$K(\psi_i, \psi_j) = \int \psi_i(x)\psi_j(x) dx / (\|\psi_i(x)\| \|\psi_j(x)\|). \quad (35)$$

Можно рассмотреть некоторые случаи, типичные для спектрометрии.

1. Одиночный гауссов (или лоренцев) пик без фона с известной и зафиксированной полушириной. В гауссовом случае

$$\begin{aligned} P(i, p) &= P(i, A, p) = A \exp[-(i-p)^2/G^2]; \\ \psi_1 &= \exp[-(i-p)^2/G^2], \\ \psi_2 &= -(2A(i-p)/G^2) \exp[-(i-p)^2/G^2]. \end{aligned} \quad (36)$$

Если обрабатываемый интервал симметричен относительно центра p , то при этом

$$K(\psi_1, \psi_2) = \int (i-p) \exp[-2(i-p)^2/G^2] dx / \text{const} \approx 0.$$

Здесь, правда, задача декомпозиции не решается, но выясняется, что на симметричном интервале параметры амплитуды и положения почти не коррелированы.

2. Одиночный гауссов (или лоренцев) пик на постоянном фоне с фиксированной полушириной. Это уже задача декомпозиции участка на пик и фон:

$$P(i, p) = A \exp[-(i-p)^2/G^2] + C.$$

К ранее рассмотренным ψ добавляется $\psi_3 = 1$. Эта ψ_3 не коррелирована с ψ_2 (т. е. положение пика в случае симметрии интервала будет определено довольно точно), но ψ_3 коррелирована с ψ_1 : $K(\psi_3\psi_2) = = 1/\Delta$, где Δ — длина обрабатываемого интервала. Следовательно, амплитуда (а тем самым и площадь) пика будет определена с дополнительной (матричной) погрешностью из-за неточной декомпозиции. Для ее уменьшения длина обрабатываемого интервала должна быть как можно больше и захватывать не только пик, но и куски чистого фона по краям.

3. Два гауссовых (или лоренцевых) пика без фона с одинаковой фиксированной полушириной. Это задача декомпозиции участка на пики. По формуле (36) имеем для каждого пика ψ_{11} и ψ_{12} для первого, а ψ_{21} и ψ_{22} для второго пика. Значение K для этих частных производных будет зависеть от разности положений пиков $|p_1 - p_2|$. Если $|p_1 - p_2| \gg G$, то все $K \approx 0$; декомпозиция будет идеальной, и оценки параметров будут иметь только собственную (статистическую) погрешность. Если же $|p_1 - p_2| < G$, к собственным погрешностям оценок добавится матричная, которая будет тем больше, чем меньше $|p_1 - p_2|$. При $|p_1 - p_2| \approx 0$ декомпозиция не состоится вообще, хотя аппроксимация [т. е. малость (29)] может иметь место. Декомпозиция не состоится также, если A_1 (или A_2) близко к ну-

лю. Причина: система $\{\psi_i\}$ перестанет в этом случае быть системой Чебышева. Это условие не должно забываться.

Возникает вопрос: не улучшится ли декомпозиция, если перенести задачу в пространство образов Фурье наших функций? Ответ на этот вопрос отрицательный: если $K(\psi_1, \psi_2)$ близок к 1, то $K(\hat{F}\psi_1, \hat{F}\psi_2)$ тоже близок к 1, так как $K(\psi_1, \psi_2) = K(\hat{F}\psi_1, \hat{F}\psi_2)$ в силу теоремы Планшереля [24], не говоря уже о потерях в точности в силу сложностей вычислительной процедуры, реализующей преобразование Фурье.

7. ФОРМА ОТДЕЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ СПЕКТРА

В простейшем случае, когда компонента является симметричным пиком, классическими являются функции Гаусса и Лоренца:

$$\psi_1(x, A, P, W) = A \exp[-(x-p)^2/W^2],$$

$$-\infty < x < +\infty; \quad (37)$$

$$\psi_2(x, A, P, W) = A \cdot 1/[1 + (x-p)^2/W^2],$$

$$-x_1 < x < +x_2, \quad (38)$$

где x_1 и x_2 — достаточно большие числа.

В спектрах распада моделью компоненты служит экспонента

$$\psi(x, A, T) = A \exp(-\ln 2x/T), \quad 0 \leq x < +\infty.$$

Вместо (37) и (38) можно брать выражения

$$\psi_1(x, S, P, W) = (S/W) \exp[-(x-p)^2/W^2],$$

$$\psi_2 = (S/W) [1 + (x-p)^2/W^2].$$

Параметр S (площадь) здесь записан явно, но с точки зрения статистики такое представление не дает никаких преимуществ перед (37) и (38). Для описания фона можно брать видоизменения функций (37) и (38), например функцию Максвелла типа $x \exp(-x^2)$ (для времяпролетных нейтронных спектров), но обычно спектр при анализе разбивается на маленькие участки с одиночными пиками или неразрешенными мультиплетами и на каждом таком участке моделью фона служит полином невысокой степени (0-й, 1-й или 2-й).

Из рассмотрений предыдущего раздела следует, что параметризации (37) и (38) являются очень хорошими, так как не влекут за собой большой матричной ошибки при декомпозиции, кроме тех случаев, когда такая ошибка вызывается объективными причинами: перекрытие пиков, слишком большая для данного фона полуширина и т. д. При анализе симметричного относительно пика участка с симметричным фоном можно получить некоррелированные оценки положений (параметр P) и площадей (AW или S) пиков, которые будут иметь только чисто статистическую погрешность.

Иногда целесообразно брать в качестве моделей компонент не функции отдельных пиков ψ_i , а фиксированные комбинации таких функций $\sum \psi_i$ и разлагать спектр сразу на группы таких функций (спектры рентгеновского излучения для близких элементов).

Рассмотренные функции (37) и (38) представляют собой часто чрезмерные идеализации форм реальных пиков. В таких случаях поступают так.

1. В качестве модели пика берется сумма функций (37) и (38)

$$\psi = A_1\psi_1 + A_2\psi_2 \text{ при } A_1/A_2 = \text{const}$$

(например, спектры рентгеновских излучений) или произведения (37), (38) на полиномы:

$$\psi = P_n(z)\psi_1(z), \psi = P_n(z)\psi_2(z), z = (x - P)/W.$$

Например, если $\psi = z\psi_2(z)$, мы имеем функцию, подобную функции Брейта — Вигнера, широко используемой в ядерной физике, физике высоких энергий и элементарных частиц.

2. Свертка (38) с аппаратной функцией типа (37) (функция Фойгта)

$$\psi(t) = \int \{\exp[-(x-t)^2/G^2]/(1+x^2)\} dx.$$

Параметрами здесь являются P и W в $x = (x' - P)/W$ и амплитуда самого выражения. Выражение K принимает значения, близкие к 1 для параметров близких пиков, так что использование этой модели для декомпозиции мультиплетов вряд ли целесообразно.

3. Функция, предложенная в [25]:

$$\psi(x, A, P, W, \alpha) = A/\{\exp[-(x-p)/(W(1+\alpha))] + \exp[-(x-p)/(W(1-\alpha))]\}^2.$$

Аппроксимирующие свойства этого выражения великолепны даже для случаев сильной асимметрии пиков, но требуют ограничений на вариации параметра α даже для одиночного пика.

4. Использование двух сторон функций (37) и (38):

$$\psi(x, A, P, W_1, W_2) = \begin{cases} (37) \text{ или } (38) \text{ при } (x-p)/W_1 \leq 0, \\ (37) \text{ или } (38) \text{ при } (x-p)/W_2 > 0. \end{cases}$$

Эта модель иногда используется при анализе дифракционных спектров [26].

И, наконец, наибольшее количество самых разнообразных функций, зависящих от параметров, предложено для моделей пиков γ -спектров, зарегистрированных полупроводниковыми детекторами [27].

Здесь целесообразно описать лишь общую идею построения таких моделей. Пик полного поглощения считается в общем гауссовым, т. е. (37); асимметричные хвосты этого пика описываются или функциями типа $\exp(-x)$, или свертками $\exp(-x)$ и гауссовой функции;

наконец, комптоновская ступенька может быть описана функциями типа $1/[1 + \exp(x)]$ или обратным тангенсом. Некоторые авторы дополнительно вводят маленькие гауссианы, сдвинутые относительно основного; иногда умножают основной гауссиан на полином или на другую сложную функцию.

В работе [27] проведен сравнительный анализ моделей по их аппроксимационным свойствам. К сожалению, ценность ее и ей подобных работ сильно снижается тем, что игнорируется то обстоятельство, что целью анализа спектров является не аппроксимация, а декомпозиция спектров, а для последней большое число параметров модели — злейший враг. Авторы особо вычурных моделей могли бы легко убедиться в полной непригодности оных для разложения мультиплетов, применив их к анализу хотя бы таких простых тестов, как венские спектры [3], где относительные характеристики компонент в дублетах известны заранее. Однако, как ни странно, этого не делается, и аппроксимация является всегда заключительной стадией упомянутых исследований.

8. ГИСТОГРАММА В КАЧЕСТВЕ МОДЕЛИ КОМПОНЕНТ

Обычные функции, задаваемые формулой (элементарные, специальные и их суперпозиции), обладают тем достоинством, что могут быть записаны в очень компактной форме, и тем недостатком, что класс реальных зависимостей, которые они могут описать, очень узок. Реальные процессы, наблюдаемые в экспериментах, хотя и в деталях, но все же не описываются, как правило, этими функциями. Пожалуй, единственно универсальным классом функций, исчерпывающим практически все наблюдаемые зависимости, является совокупность их графиков или, вернее, дискретных аналогов этих графиков — гистограмм. Гистограмма, дополненная, если надо, до полной функции с помощью интерполяции, в состоянии отобразить любую зависимость, хотя в отличие от формул требует больше средств изображения.

Итак, пусть $m(i)$ — гистограмма, являющаяся дискретным описанием модели пика. Она может быть измерена экспериментально с большой статистикой на густом множестве каналов или выведена теоретически, как гистограмма функции, заданной формулой. Как уже указывалось ранее, эту гистограмму можно параметризовать:

$$m(i) \rightarrow Am [P(i)/Q(i)],$$

где $P(i)$ и $Q(i)$ — полиномы от i .

Мы ограничимся простейшей параметризацией

$$m(i) \rightarrow Am [(i - P)/W]. \quad (39)$$

Выражение (39) с неизвестными пока параметрами A , P , W будет служить моделью пика после того, как мы уточним способ вычисле-

ния значений по формуле (39), и в частности уточним масштаб измерения A, P, W .

В качестве центра фигуры, описываемой гистограммой $m(i)$, можно выбрать любую ее фиксированную точку, например точку максимума, и объявить ее нулем отсчета. Далее определяем полуширину функции $m(i)$. Для этого находим корни уравнения (здесь i_0 — центр, x — непрерывный аргумент):

$$m(x) = 1/2m(i_0). \tag{40}$$

Уравнение (40) для пикообразной фигуры будет иметь два корня: x_1 и x_2 ; тогда полуширина будет равна $x_2 - x_1$. Далее или делим $m(i)$ на $m(i_0)$ (нормировка по амплитуде), либо делим $m(i)$ на площадь $S = \int m(i) di$ (нормировка по площади). Теперь выражение

$Am\left(\frac{i-P}{W}\right)$ при определенных A, P, W вычисляется так:

а) вычисляется $(i - P)/W = z$;

б) вычисляется $m(z/(x_2 - x_1))$; если требуется, то применяется интерполяция; z отсчитывается по отношению к i_0 (нулю);

в) вычисляется $Am[z/(x_2 - x_1)]$.

В этих условиях модель $m(i)$ имеет нулевой центр и единичную полуширину [как гауссиан $\exp(-\ln 2x^2)$].

Если теперь нам дан участок спектра, пики которого имеют одинаковую, подобную функции $m(i)$, форму, то с использованием параметризации (39) мы можем представить этот участок спектра в виде

$$s(i) = \sum A_i m\left(\frac{i-P_i}{W}\right) + b(i) + e(i).$$

Частные производные от $f = Am((i - P)/W)$ по параметрам вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dA} &= m\left(\frac{i-P}{W}\right); \quad \frac{df}{dP} = \frac{A}{W} m'_x\left(\frac{i-P}{W}\right); \quad \frac{df}{dW} = -\frac{A}{W^2} (i-P) \times \\ &\times m'_x\left(\frac{i-P}{W}\right). \end{aligned} \tag{41}$$

Производная по аргументу $m'_x\left(\frac{i-P}{W}\right)$ может быть вычислена по разностной формуле:

$$m'_x\left(\frac{i-P}{W}\right) = \left\{ m\left(\frac{i-P}{W} + h\right) - m\left(\frac{i-P}{W} - h\right) \right\} / 2h,$$

где h — шаг [например, $h = 1/(x_2 - x_1)$].

Преимущество описанного подхода в том, что задаваемая гистограммой (т. е. фактически рисунком) $m(i)$ способна описать самую сложную формулу пика с любой точностью, и в то же время параметризация (39) вводит всего лишь три параметра, имеющих четкий физический смысл (амплитуда, положение и полуширина пика). Если отличия от обычной гауссовой модели (39) состоят лишь в дета-

лях, то анализ декомпозиционных свойств модели (39) с помощью величины K приводит к тем же выводам, что и для модели (39):

1) приближенная независимость оценок площадей и положений пиков при отсутствии перекрытий и регулярности фона;

2) минимальная матричная ошибка декомпозиции, обусловленная реальным перекрытием пиков и узким фоновым интервалом по сравнению с другими параметризациями.

Дополнительным достоинством подхода является простота смены модели: если модель не адекватна реальным пикам, то достаточно построить адекватную и заменить старую гистограмму новой. Ряд авторов очень сложных моделей пиков, убедившись на практике, что такие модели с большим числом варьируемых параметров совершенно не пригодны для целей декомпозиции, выдвигают такое предложение: модели строить сложные, но все параметры фиксировать, а оставить варьируемыми только физически значимые, т. е. амплитуду, положение, полуширину. Нетрудно догадаться, что такие рассуждения — это в общем-то то же, что и параметризация (39), но существенно более громоздко и неуклюже осуществляемая.

В заключение можно указать, что если модель $m(i)$ нормирована на свою площадь, то площадь реального пика после определения параметров A , P , W вычисляется очень легко:

$$S = \int Am \left(\frac{i-P}{W} \right) di = AW \int m(z) dz = AW \cdot 1 = AW.$$

9. АВТОМАТИЧЕСКИЙ ПОИСК КОМПОНЕНТ В СПЕКТРЕ

Эта проблема распадается на две важные задачи:

1) автоматический поиск пиков и выделение интервалов, содержащих изолированные пики, или неразрешенные мультиплеты;

2) автоматическое определение числа экспонент в их сумме.

Первая играет наибольшую роль, особенно при анализе γ -спектров. Основные методы поиска используют геометрические и статистические свойства компонент и реже информацию об их физической природе [15, 16]. Эти методы включают в себя такие шаги:

1) поиск одиночных пиков и неразрешенных мультиплетов;

2) разрешение мультиплетов и отсева ложных пиков;

3) формирование интервалов;

4) использование физической информации для отсева ложных или неинтересных пиков.

Чаще всего методы представляют собой комбинации различных приемов; поэтому целесообразно изложить не методы, а эти приемы.

Прежде всего можно осуществить сглаживание спектра и вычитание фона с помощью алгоритмов, изложенных в разд. 3. Сами приемы идентификации вершины пика явно или неявно исходят из таких свойств функции $\exp(-x^2)$, которая является как бы идеализированной моделью абстрактного пика, как:

а) $\exp(-x^2)$ достигает максимума в вершине и спадает по краям от нее;

б) $\frac{d}{dx} \exp(-x^2)$ обращается в нуль в вершине; имеет положительный горб слева и отрицательный справа от вершины;

в) вторая производная $\frac{d^2}{dx^2} \exp(-x^2)$ имеет отрицательный минимум в вершине пика и положительные горбы по краям от пика (на расстоянии половины полуширины);

г) свертка гауссовой функции со спектром (без фона) $f(t) = \int \exp[-(x-t)^2/G^2] s(x) dx$ имеет локальные максимумы в вершинах пиков.

Из этих приемов наиболее популярны использование второй производной (разности), так как дополнительно подавляет линейный фон ($\frac{d^2}{dx^2}(a+bx) = 0$), и свертки, так как дополнительно уменьшает статистические флуктуации. Дисперсия второй разности $[s''(i) = s(i+1) - 2s(i) + s(i-1)]$ равна $6D_i$, где D_i — дисперсия $s(i)$, т. е. существенно возрастает по сравнению с нормой; поэтому метод второй разности комбинируют с суммирующими фильтрами (типа «нулевой площади»).

Все эти приемы обладают тем сильным недостатком, что пропускают слабые пики и очень широкие (с полушириной более восьми — десяти каналов) и, кроме того, часто не позволяют идентифицировать даже частично разрешенные мультиплеты.

Более строгий подход состоит в данном случае в построении идентификатора, который принимал бы всюду некоторое нейтральное значение (например, нуль), а в точках, представляющих интерес, — резко отличное от нуля значение. Легко видеть, что перечисленные приемы не являются таким эффективным идентификатором: хотя, например, вторая разность принимает большое отрицательное значение в вершине, но она принимает довольно большое отрицательное значение также и в близкой окрестности вершины.

В работе [11] предложен следующий идентификатор характерных точек пика, названный там квазикривизной:

$$c(i) = s''(i) / \sqrt{1 + s'(i)^2}, \quad (42)$$

в канале i $s'(i)$ — первая, $s''(i)$ — вторая производные (разности). Эффективное использование квазикривизны предполагает предварительное сглаживание спектра и вычитание из него фона. Квазикривизна обладает следующими достоинствами:

1) она так же, как и вторая разность, дополнительно подавляет линейный фон (или его остаток);

2) квазикривизна принимает большое отрицательное значение в вершине пика, большое положительное — в точке минимума меж-

ду горбами частично разрешенного мультиплета и почти равна нулю уже на незначительном расстоянии от упомянутых точек;

3) квазикривизна почти не зависит от амплитуды пика, т. е. если $p(i)$ — пик, а $Ap(i)$ — пик, ему подобный с произвольным коэффициентом A , то $c\{p(i)\} \approx c\{Ap(i)\}$, если только $s'(i) \gg 1$.

Последнее свойство делает квазикривизну одинаково эффективным идентификатором вершин как слабых, так и сильных пиков. Дополнительно можно отметить, что так как $c(i)$ зависит от первой степени полуширины (а не второй, как просто вторая производная), то квазикривизна позволяет уверенно идентифицировать как узкие, так и широкие пики.

Найденные вершины проверяются далее на статистический критерий и критерий формы. Они состоят в том, что должно выполняться

$$s(i) > d(i) \quad (43)$$

как в самой вершине, так и в ближайшей окрестности вершины; здесь $d(i)$ — величина, характеризующая уровень шума и фона в данном канале. В то же время должны выполняться соотношения

$$s(i) < k(i) \max \quad (44)$$

в окрестности вершины, где \max — значение $s(i)$ в вершине, а коэффициенты $k(i)$ характеризуют спад $s(i)$ по краям от вершины (т. е. пикообразность функции).

Невыполнение (43) или (44) служит признаком ложного пика. Следующий шаг — анализ найденных пиков на скрытую мультиплетную структуру.

Алгоритмы такого анализа основываются на следующих свойствах мультиплетов:

- а) неразрешенный мультиплет имеет существенно большую полуширину, чем изолированный пик;
- б) неразрешенный мультиплет имеет иную форму, чем изолированный пик.

Определив приближенно полуширину проверяемого объекта (например, как второй момент в степени 0,5), мы можем сравнить ее с калибровочной и в случае существенного несовпадения строить гипотезу о мультиплетной структуре данного объекта. Далее, построив теоретический изолированный пик с приближенными значениями амплитуды, положения и полуширины и вычтя его из проверяемого, можно проанализировать остаток на значимое превышение им ошибки построений.

Мультипликативный прием [11] состоит в умножении проверяемого объекта на функцию $\{M - t(x)\}^2 / \{M + t(x)\}^2$, где $t(x)$ — модель пика и M — максимум $t(x)$ по x , и проверке остатка на значимое превышение нуля.

Найденные положения $\{P_j\}$ компонент мультиплета должны удовлетворять соотношению

$$(P_{i+1} - P_i) / W \geq r_i, \quad (45)$$

где W — полуширина, r_i — разрешение, определяемое статистикой спектра. Если (45) не выполняется, пики P_{i+1} и P_i следует слить, так как разрешить их математическими средствами мы все равно не в состоянии (объективно не хватает статистики, т. е. информации). Следующий шаг — формирование интервалов, содержащих или изолированные пики, или плохо разрешенные мультиплеты и фон по краям. Прирезка фона по краям пиков или мультиплета необходима, как мы видели в разд. 6, для успешной декомпозиции их и фона. Если прирезать фоновые участки не удастся из-за смежности пиков, необходимо объединение интервалов в большие. Следующий важный этап — использование физической информации о спектре; например, положение пиков в дифракционных спектрах могут быть вычислены по формулам; положение пиков в γ - или X -спектрах — на основании известного или предполагаемого изотопного (элементного) состава образца и т. д. В этих случаях сначала осуществляется формирование интервалов, как описано выше; затем на основании списка вычисленных пиков оставляются только те интервалы, которые содержат пики, близкие по положению к каким-либо пикам из списка; дополнительно при этом может быть уточнено количество пиков в каждом интервале.

Наконец, уточнение количества пиков в спектре может быть осуществлено после МНК-анализа данного спектра, а именно с помощью статистических тестов (например, χ^2 -критерия). К сожалению, этот метод срабатывает лишь в тривиальных случаях и не работает в наиболее сложных и интересных: при наличии очень близких перекрывающихся и слабых пиков.

10. ВОПРОСЫ МИНИМИЗАЦИИ

Построив для спектра $s(i)$ его модель $\sum_k f_k(i, p_k) + b(i, q)$, мы находим оценки его параметров $\{p_k\}$ и $\{q\}$ подгонкой модели к $s(i)$, т. е. минимизацией расстояния в той или иной метрике от модели до $s(i)$. Самый распространенный метод — метод наименьших квадратов. Реже используются метод максимального правдоподобия и различные варианты байесовских методов. В работе [28] упомянута применимость к анализу данных метода максимальной энтропии. Делаются попытки использовать процедуры робастной подгонки [41]. Метод наименьших квадратов наиболее универсален. С одной стороны, сумма квадратов отклонений, нормированных на дисперсию, является достаточно универсальной мерой энтропии данных; с другой, МНК требует минимум априорной информации как о распределении ошибок измерения, так и об оцениваемых параметрах.

Итак, требуется найти минимум выражения

$$F = \sum_i w(i) \left\{ s(i) - \sum_k f_k(i, p_k) - b(i, q) \right\}^2 \quad (46)$$

на множестве значений параметров $\{p_k\}$ и $\{q\}$; $w(i)$ — веса. Здесь возникают сразу два вопроса.

1. В каких случаях минимизация (46) дает действительно хорошие оценки искомых параметров?

2. Как лучше, проще и надежнее получить эти оценки?

В литературе внимание авторов уделяется исключительно второму вопросу. Ответ на первый кажется очевидным из соображений здравого смысла и/или аналогий с линейным оцениванием. Ни то, ни другое, однако, не опирается на строгую математику. Для существования хорошей, или, говоря языком математики, состоятельной оценки параметров нелинейной регрессии, необходимо выполнение таких условий, как:

а) производные по параметрам от функций $\{f_k(x, p_k), b(x, q)\}$ образуют систему Чебышева по x , т. е. если общее число параметров равно n , то детерминант произвольной матрицы из n столбцов по n производных в n различных точках отличен от нуля; это условие выполняется для гауссовой или гауссоподобной модели пика, но часто не выполняется для более сложных параметризаций;

б) начальные значения параметров должны находиться достаточно близко к истинным значениям.

Далее ситуация осложнена следующим обстоятельством.

Состоятельность оценки проявляется в статистике как ансамблевое свойство при анализе серии однотипных данных. В анализе же данных экспериментальной физики чаще всего обрабатывается один набор данных, а других или не будет вообще, или они получаются при других условиях. Это накладывает дополнительное ограничение на класс допустимых для анализа спектров $s(i)$: чтобы оценки параметров были состоятельны и имели небольшую дисперсию, необходимо, чтобы погрешность измерения была не просто малой в смысле дисперсии, но была малой в буквальном смысле, т. е. не превосходила некоторого уровня, определяемого параметризацией модели.

Далее при осуществлении нелинейной минимизации объективно трудно проверить, дошла процедура минимизации до конца или нет; если же взять в качестве оценок значения параметров, не соответствующих минимуму (46), то они могут оказаться несостоятельными, даже если выполнены все вышеназванные условия.

Наконец, минимизация (46) есть лишь средство декомпозиции и следует иметь в виду все то, что было сказано по поводу декомпозиции в разд. 6.

Различные примеры трудностей с получением состоятельной МНК — оценки параметров даны в [39].

Следствием приведенных выше соображений является следующая рекомендуемая стратегия минимизации выражения (46):

а) в спектре $s(i)$ предварительно обязательно устраняются грубые ошибки, т. е. выбросы;

б) желательно использование простой параметризации, гарантирующей как состоятельность МНК-оценок, так и надежную декомпозицию, например (46); ее дополнительное преимущество состоит

в том, что начальные значения параметров при ней могут быть вычислены довольно точно;

в) чтобы в процессе минимизации (46) не выйти за пределы области состоятельности МНК-оценок параметров, целесообразно минимизацию (46) вести при ограничениях, накладываемых на параметры

$$p_{ie} \leq p_i \leq p_{iu}, \tag{47}$$

где p_i, p_{ie}, p_{iu} -й параметр, его нижняя и верхняя границы соответственно; если используется параметризация (39), то достаточны следующие ограничения:

$$A_i \geq s_i, P_{i+1} - P_i \geq r_i W, 0 < W \leq \text{const}, \tag{48}$$

где s_i и r_i — коэффициенты чувствительности и разрешения, зависящие от погрешности в задании спектра и его модели;

г) желательное использование быстроходящихся методов минимизации, например ньютоновского типа. Другие методы, например градиентные, градиентноподобные, Монте-Карло и т. д., нежелательны, так как такие процессы трудно контролировать и слишком велик риск прервать процесс задолго до истинного минимума; ньютоновские методы в этом отношении имеют мощное преимущество: малость приращений параметров часто является надежным указателем для обрыва их процессов.

Процессы ньютоновского типа строятся так. Выписывается выражение для градиента функционала (46):

$$\frac{dF}{dP_j} = - \sum w(i) \{s(i) - g(i, p)\} \frac{dg(i, p)}{dp_j}, \tag{49}$$

где $\{p_j\}$ — множество всех параметров, а $g(i, p) = \sum f_k(i, p_k) + b(i, q)$, для упрощения вычислений и увеличения радиуса сходимости процесса прибегают к линеаризации $g(i, p)$ в окрестности текущего значения параметров p_0 :

$$g(i, p) \approx g(i, p_0) + \sum_k \frac{dq}{dp_k} (p_k - p_{k_0}), \tag{50}$$

после чего (50) может быть подставлено в (49) вместо g . И составляется необходимое (но не достаточное!) условие минимума:

$$\frac{dF}{dpi} = 0.$$

Если используется прием (50), то итерационный процесс будет выглядеть так:

$$p^{h+1} = p^h + \hat{P} (\lambda_h (M_{ij} + \alpha_h R_{ij}) \times \\ \times \sum_i w(i) \{s(i) - g(i, p_0)\} \frac{dg}{dp}).$$

Здесь p^k — вектор параметров на k -й итерации; \hat{P} — оператор проектирования получаемых значений параметров на ограничения (47);

λ_k — шаг на k -й итерации; $M_{ij} = \sum_h w(k) \frac{dg}{dp_i} \frac{dg}{dp_j}$ — матрица Гаусса — Ньютона; α_h и R_{ij} — коэффициент и матрица демпфирования k -го шага, если матрица M_{ij} плохо обусловлена.

Проектирование текущего вектора p на ограничение (47) строится следующим образом:

$$p_i = \begin{cases} p_{ie}, & \text{если } p_i < p_{ie}; \\ p_i, & \text{если } p_{ie} \leq p_i \leq p_{iu}; \\ p_{iu}, & \text{если } p_i > p_{iu}. \end{cases} \quad (51)$$

Некоторые авторы прибегают к вычурной и усложненной параметризации, чтобы добиться выполнения соотношений (47); например, используют p^2 вместо p , чтобы добиться неотрицательности параметра p . Это ухудшает свойства гиперповерхности F и ведет лишь к несостоятельности МНК-оценок таких параметров и ненадежности декомпозиции. Соотношение (51) показывает, что искомая цель может быть достигнута значительно проще и без всякого ущерба для качества МНК-оценок.

В качестве R_{ij} часто берут нулевую матрицу, у которой диагональные элементы заменены диагональными элементами матрицы M_{ij} , α_h — малое (порядка 10^{-4} — 10^{-9}) число. Шаг λ_h в нормальном случае равен единице; но в случае плохой обусловленности матрицы M_{ij} (сильное перекрытие пиков; наличие слабых пиков) следует брать меньшее значение λ_h и большие α_h . Иногда матрицу M_{ij} не вычисляют на каждой итерации, а, начав с некоторого нулевого приближения M_{ij}^0 , корректируют затем ее в процессе итераций, как, например, в методе переменной метрики [4]. Вообще нужно сказать, что сходимость процесса определяется лишь градиентом, а матрица в основном является регулятором скорости сходимости.

11. ВОПРОСЫ МАЛОЙ СТАТИСТИКИ

Малая статистика спектра, т. е. небольшое число единиц в сумме $s(i)$ в каждом канале i , означает также, что данный спектр содержит мало информации об интересующем нас явлении. Для анализа нелинейных регрессий малая статистика создает множество осложнений. Это появление большого количества грубых ошибок — выбросов, большая дисперсия оценок, ненадежность декомпозиции, наконец, затруднения при использовании таких тестов проверки гипотез, как χ^2 . Единственная положительная черта у спектров с малой статистикой — это существенное ослабление требований к точности модели как пиков, так и фона. В некоторых работах [29] рекомендован переход к использованию метода максимального правдоподобия для получения оценок параметров. Если $s(i) = f(i, p)$ и $s(i)$ подчиняется распределению Пуассона, то оценки параметров ищутся из

условия максимума выражения

$$L(p) = \prod_i f(i, p)^{s(i)} \exp(-f(i, p)/s(i)) \quad (52)$$

или максимума выражения $\ln L(p)$. Этот метод является более точным, чем МНК, но все же значение его в преодолении недостатков малой статистики не стоит переоценивать по следующим причинам:

1) хорошие свойства оценок максимального правдоподобия проявляются в основном в асимптотике, т. е. при большой статистике;

2) добавка информации, по сравнению с МНК, за счет перехода от гипотезы о нормальном распределении (что необоснованно) к пуассоновскому не настолько значительна, чтобы существенно улучшить ситуацию, не говоря уже о том, что при особенно малой статистике гипотеза о пуассоновском распределении сама становится малообоснованной; процедура же решения задачи (52) существенно сложнее, чем в случае МНК.

Оставаясь в рамках МНК, выход, по-видимому, следует искать в двух направлениях:

а) упрощение параметризации, в частности устранение нелинейных параметров, или наложение связей на параметры;

б) искусственное повышение статистики группировкой каналов.

Это возможно в силу того, что статистическая погрешность спектра в случае малой статистики намного превосходит погрешность из-за неточности модели; во-вторых, изменение дисперсии в этом случае от канала к каналу незначительно; мы можем считать спектр локально-стационарным и применять локальную группировку, т. е. фактически увеличивать размер ячейки спектра.

Далее, если на симметричном участке с одним слабым пиком приближенно известно его положение, то мы можем применить преобразование, не искажающее форму пика, сохраняющее статистическую независимость отсчетов в соседних каналах и в то же время уменьшающее дисперсию. Это преобразование имеет вид

$$s_1(i) = 1/2 \{s(i) + s(2p - i)\},$$

где p — канал центра пика.

12. АНАЛИЗ МНОГОМЕРНЫХ СПЕКТРОВ

Многомерный спектр $s(x)$, где x — уже вектор, является естественным обобщением одномерных спектров. Существующие способы получения этих спектров сводятся к двум типам:

1) регистрация многомерного распределения $s(k)$, где k — вектор каналов нескольких трактов регистрации (например, нейтронно-дифракционный спектр, снимаемый позиционно-чувствительным детектором [30]);

2) регистрация событий совпадений (несовпадений) значений некоторых измеряемых параметров; из этих событий теоретически легко,

если только позволяет память накопителя, может быть построено распределение $s(\mathbf{k})$ (например, спектры $\gamma - \gamma$ -совпадений при изучении каскадных переходов).

Из многомерных спектров $s(\mathbf{k})$ могут быть построены спектры меньшей размерности:

1) сечения $s(i) : s(i) = s(k_1, k_2, \dots, i, \dots, k_n)$, где все $k_j (k_j \neq i)$ фиксированы;

2) свертки $s(i) : s(i) = \sum_{kj} s(\mathbf{k})$, где суммирование не ведется только по индексам i .

Вопросы, связанные с получением и хранением многомерных спектров, представляют самостоятельный интерес. Например, актуальна проблема оптимальной в том или ином смысле (времени, надежности, объема) сортировки событий, или проблема сжатия информации [40], или преобразования к более наглядным и информативным координатам, чем \mathbf{k} [10, 31].

Формально многомерный, как и одномерный, спектр записывается так:

$$s(\mathbf{k}) = \sum p(\mathbf{k}) + b(\mathbf{k}) + e(\mathbf{k}),$$

где $p(\mathbf{k})$ — многомерные информационные компоненты (размытые или пикообразные), $b(\mathbf{k})$ — фон, $e(\mathbf{k})$ — погрешность измерения.

Относительно погрешностей делаются те же предположения, что и в одномерном случае.

Цель анализа таких спектров — извлечение характеристик пиков — гиперобъема (обобщение площади), координат центра и полуширин по различным осям.

Преимущества многомерной методики состоят, как правило, в следующем:

1) благодаря большому числу независимых координат измерения пики, перекрывающиеся в одномерных спектрах, оказываются разделенными по какой-либо координате в многомерном спектре;

2) использование логики совпадений (антисовпадений) позволяет подавить фон уже на этапе регистрации спектра и тем самым улучшить отношение сигнал/фон.

Недостатки многомерной методики:

а) громоздкость многомерных спектров и вытекающие отсюда проблемы хранения, размещения в памяти ЭВМ и большее время обработки;

б) худшая обозримость и большая математическая сложность процедур обработки.

Анализ включает в себя следующие этапы: а) элементарные операции (арифметика, сдвиги, преобразования координат), б) фильтрация и интерполяция спектров, в) аппроксимация спектров, г) декомпозиция спектров.

Среди элементарных операций существенно большую роль играют операции по преобразованию координат.

Пример 1. Рассмотрим спектры осколков деления $s(E_1, E_2)$, где E_1 (E_2) — энергия первого (второго) осколка. Интерес представляют другие распределения, а именно: $s(E, \mu)$ или $s(E, E_1)$, где $E = E_1 + E_2$, μ — масса одного осколка. Преобразование к новым координатам лучше всего осуществить с помощью метода субъячеек [10], обобщив его на двумерный случай.

Пример 2. Двумерные спектры $s(E, \Delta E)$ [или более общие $s(E, \Delta E_1, \Delta E_2, \dots)$] продуктов ядерных реакций, где E — энергия, оставленная регистрируемым объектом в толстом детекторе, а ΔE (или ΔE_i) — потеря энергии в (i -м) тонком детекторе, дают распределение двумерных центров пиков, координаты которых $E, \Delta E$ однозначно (хотя и не прямо) определяют изотоп. Эти центры расположены на квазигиперболах. Отсюда вытекает задача: преобразовать координаты так, чтобы в новом распределении центры располагались на линиях, более параллельных координатным осям, чем в исходном [32]. Обозначим старые координаты x, y , а новые u, v . Тогда после преобразования

$$u = xy; v = x - ky,$$

в новом распределении прямая $x - y = c_2$ и кривая $xy = c_1$ сохранят ортогональность в начале координат и перейдут в геодезические прямые в новой системе. Обработка распределения с центрами пиков, расположенных параллельно координатным осям, осуществляется легче простыми методами.

Фильтрация и интерполяция многомерных спектров осуществляются методами, представляющими собой обобщения одномерных методов. В частности, сглаживание спектра может быть осуществлено жестким фильтром типа

$$s(\mathbf{k}) = \sum_i a(i, \mathbf{k}) s(\mathbf{k}), \tag{53}$$

где коэффициенты $a(i, \mathbf{k})$ могут быть выбраны из соображений частотной фильтрации. В многомерном случае справедливо все, что было сказано о фильтрации одномерных спектров, поэтому более совершенными фильтрами будут фильтры сплайнового типа, основанные на минимизации выражений типа [для двумерного спектра $a(i, j)$]:

$$\sum e(i, j) \{s''_{xx}(i, j)^2 + s''_{yy}(i, j)^2\} + \frac{\lambda}{N} \sum \{s(i, j) - f(i, j)\}^2, \tag{54}$$

где $e(i, j)$ — мера осцилляций дискретной двумерной гистограммы; s''_{xx}, s''_{yy} — вторые разности по i и j соответственно; $N = 1/\sum e(i, j)$; λ — множитель Лагранжа; $f(i, j)$ — начальный спектр.

Численная реализация фильтра (54), однако, требует или большого времени счета, или большой памяти. Компромиссными будут такие фильтры:

а) локальный фильтр типа (54); выражение (54) составляется для группы из n точек, причем в качестве граничных значений берутся или исходные данные, или уже сглаженные;

б) выражение (54) составляется сначала для одномерных сечений исходного спектра по одной координате, а затем для одномерных сечений уже сглаженного спектра по другой.

Аналогично одномерному случаю интерполяция с помощью выражения сплайнового типа дает более точные результаты.

Более сложным аспектом является аппроксимация многомерных гистограмм. Простейший подход — это обобщение на многомерный случай гауссовой или лоренцевой функции, например, для двумерного случая:

$$A \exp(-M_{ij}(x-x_i)(x-x_j)) \quad (55)$$

или $A/(1 + M_{ij}(x-x_i)(x-x_j))$, где M_{ij} — матрица типа

$$\begin{pmatrix} 1/W_x^2 & r_1/W_x W_y \\ r_2/W_x W_y & 1/W_y^2 \end{pmatrix}. \quad (56)$$

При такой параметризации величины x_i, x_j являются центром двумерного пика, W_x, W_y пропорциональны полуширинам, а r_1, r_2 описывают поворот осей симметрии пика относительно системы координат (если они параллельны, то $r_1 = r_2 = 0$).

Функций более сложных, чем (55), в литературе, по-видимому, не было предложено. Хотя проблема адекватности описания пика для многомерных спектров является менее острой, чем в одномерном случае (в силу меньшей статистики), все же (55) представляет собой чрезмерную идеализацию реальных форм пиков.

В [33] предложено обобщение одномерного метода использования гистограмм в качестве моделей [см. формулу (39) на двумерный случай]. Пусть $m(i, j)$ — гистограмма, являющаяся моделью двумерного пика. Тогда

$$f(x, y, A, P_x, P_y, M_{he}) = Am \{M_{he}(i - P_h)(j - P_e)\}, \quad (57)$$

где M_{he} — матрица типа (56).

Параметризация (57) позволяет ограничиться малым числом параметров для самых сложных форм пиков.

Для спектров γ — γ -совпадений предложен метод, описанный в [34]. Особенностью таких спектров является то, что каждый пик сопровождается парой (по каждой координате) фоновых валиков, обусловленных совпадением квантов пика полного поглощения и фоновых. Эта особенность должна быть учтена в модели фона.

Декомпозиция многомерных спектров осуществляется, как и ранее, с помощью МНК.

На основе анализа декомпозиционных свойств параметризаций (55) и (57) с помощью функции K (см. разд. 6) можно показать, что при них может быть достигнуто хорошее качество декомпозиции,

поскольку параметры A , P_1 , P_2 , r_1 , r_2 оказываются статистически почти независимыми.

Автоматический поиск пиков является существенно более сложной задачей, чем в одномерном случае. Публикации, посвященные этому вопросу, незначительны [35, 36]. Основные идеи, используемые при этом, следующие:

1) из спектра вычитается фон, который строится как огибающая снизу по второй координате огибающих локальных минимумов по первой координате;

2) далее используется двумерная корреляционная функция с эллипсоидным ядром, т. е. форма пика предполагается гауссоподобной и пики находятся как локальные максимумы свертки спектра (без фона) и этой функции; процедура рассчитана на простейшие случаи: симметричные изолированные пики, хорошо разделенные мультиплеты и т.д.;

3) в [36] описан более сложный подход, состоящий в следующем: спектр сглаживается с помощью локального двумерного сплайнового фильтра; затем с помощью двумерной квазикривизны, представляющей собой обобщение одномерной (см. разд. 9), находятся возможные вершины двумерных пиков; ложные из них отсеиваются с помощью статистических и геометрических критериев, аналогичных одномерным; так же сливаются чрезмерно близкие пики (в качестве меры близости — расстояния между пиками, нормированные на полуширины) с помощью процедуры кластеризации [37]; дробление всего оставшегося множества вершин на участки с первым изолированным или неразрешенным мультиплетом осуществляется с помощью приемов кластер-анализа [37]; процедура может использоваться для поиска пиков также данные, вытекающие из физической природы спектра, а именно: положения, например, дифракционных пиков могут быть найдены по формулам, и с их помощью построенное ранее множество вершин может быть откорректировано.

13. ПРОБЛЕМА ОШИБОК

Хотя математическая теория ошибок в определении той или иной величины довольно проста, практика использования понятия ошибки при анализе экспериментальных данных изобилует огромным множеством примеров недоразумений и курьезов.

Основная причина — перенесение в специфическую науку (анализ данных) приемов и методов мышления тех областей, где основной источник погрешностей — это сам процесс вычислений. Это находит свое отражение в часто задаваемом вопросе: «Какова погрешность определения физических параметров (например, площадей пиков), даваемая Вашей программой?». Забавно то, что на этот некорректный с точки зрения математики вопрос часто следует уверенный, хотя столь же некорректный ответ: «1% или, например, 2%», причем в контексте, ясно дающем понять, что программа, показавшая 1%-ную

погрешность, конечно же, лучше программы, давшей лишь 2%-ную погрешность.

Ввиду важности этого вопроса следует остановиться подробнее на возможных источниках погрешностей.

1. В качестве первого источника следует назвать этап построения теоретической модели спектра и его участка. Как уже указывалось, модели эти неточны, и эта неточность ведет к тому, что МНК-оценки при неадекватной модели уже не являются несмещенными. Они имеют систематическую погрешность — смещение, значение которой в принципе не определяется.

2. Приближенный характер указания дисперсий отсчетов и пренебрежения корреляциями между соседними отсчетами дают второй источник систематической погрешности, также в общем случае неконтролируемый.

3. Нелинейность минимизируемого функционала и вытекающая отсюда возможность наличия ложных минимумов или других точек обращения в нуль градиента (особенно при плохой параметризации), а также частая теоретическая неконтролируемость обрыва итерационного процесса в МНК-процедуре приводят к тому, что МНК-оценки параметров оказываются смещенными и имеют нелинейные дисперсии.

4. Наконец, статистические погрешности параметров, получаемые с помощью обратной МНК-матрицы, — это единственные погрешности, которые определяются методом. Они суть трансформированная статистическая погрешность самого спектра, связаны с ней функционально и таким образом отражают количество информации, заключенное в спектре. Правильность их определения вследствие ряда причин носит относительный характер, но тем не менее они являются если не погрешностью в обыденном понимании слова, то все же довольно надежной мерой точности оценок (правда, далеко не покрывающей их полной точности). Практический опыт автора данной работы говорит о том, что систематическая погрешность, как правило, велика по сравнению со статистической при обработке пиков с большой площадью и мала в случае пиков с малой площадью.

5. Для полноты картины следует указать и еще один источник погрешностей — преобразование найденных положений и площадей пиков в физические величины. Особенность этого этапа анализа состоит в том, что неправильное истолкование применяемых статистических методов может вызвать парадоксальный эффект: не увеличение погрешности параметра, а ее уменьшение. Здесь следует напомнить, что информация содержится не только в данных, но и что мы сами являемся источником информации. Не существует абсолютных понятий вероятности, информации, шума и т. д. Все они относительны и имеют смысл только в рамках той или иной субъективной модели. И в силу этого, манипулируя с различными деталями подхода к вычислению погрешностей, мы можем незаметно для себя или принести информацию в данные, или, наоборот, убрать ее из них. Из

статистики можно привести такой пример: возьмем отрезок цифр числа π ; по тестам это типичный отрезок белого шума, с максимальной энтропией и информацией, равной 0. Но стоит нам заподозрить, что данные числа — это знаки π , ситуация резко меняется: информация становится полной, энтропия — нулевой. Хотя сами данные — цифры — не изменились. Приведенные рассуждения могут показаться ненужной данью академической дидактике, однако они имеют непосредственное отношение к процессу преобразования оценок на основе калибровочных данных. Автору приходилось видеть, как разработчик явно слабой программы анализа γ -спектров потряс воображение аудитории картиной «суперточности» в определении линий хорошо изученных нуклидов с помощью этой программы. Чтобы пояснить, в чем тут дело, можно привести такой пример с простой калибровкой — 1 канал — 1 кэВ.

Пусть программа настолько плохо обрабатывает спектр, что оценки положений пиков отличаются от истинных значений на любое сколь угодно большое число. Если калибровка привязана к этому же самому спектру (явно или косвенно), то, хотя вычисленные положения далеки от истинных значений, их энергии будут вычислены абсолютно правильно, с нулевой погрешностью. Идентификация калибровочных пиков является ключом, резко повышающим насыщенность данных семантической информацией, в силу чего их энтропия резко падает.

Итак, из рассмотренного выше вытекает, что более или менее уверенно мы можем определить статистическую компоненту полной погрешности. Нестатистическую компоненту, по-видимому, можно определить лишь в случае, когда модель совершенно адекватна спектру и все вычисления ведутся правильно: в этом случае она будет близка к нулю. В иных случаях ее определить трудно.

Размер статистической погрешности качественно можно оценить из вида обратной МНК-матрицы: для пуассоновского распределения отсчетов в каналах при параметризации (39) погрешности будут равны [38]:

$$\sigma_A \approx k_1 \sqrt{S}, \quad \sigma_p \approx k_2 W_2 / \sqrt{S},$$

где S — площадь пика, W — полуширина.

Отсюда видно, что бесполезно оценивать точность работы программ через точность получающихся статистических оценок.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение хотелось бы коснуться вопроса о проверке качества применяемых при анализе спектров методов и реализующих их программ. Здесь следует упомянуть о важном значении Венского соревнования программ для обработки γ -спектров [3], которое впервые дало возможность получить объективную информацию о состоянии дел в этой области в масштабе многих стран. Результаты этого сорев-

нования изложены в [3]. Здесь следует упомянуть лишь ряд замечаний в связи с ним.

Его организация не свободна от некоторых недостатков. Прежде всего о его цели. Хотя спортивный момент не может быть полностью устранен из таких соревнований, все же научные цели должны иметь высший приоритет. Поэтому вместо того, чтобы пытаться выявить «лучшую во всех отношениях программу» — такой в принципе не может существовать, поскольку критерии оценки качества программ противоречивы, следовало бы: 1) отсеять явно слабые и непригодные программы; 2) определить для оставшихся их место в мировой библиотеке.

Далее трудно согласиться с отождествлением метода и программы. Программа как практическая реализация метода может быть и богаче метода, и беднее его. То же относится и к другим аспектам эксперимента, например детекторным. Поэтому неверно было бы считать, что математический прогресс не важен, так же как было бы неверно утверждать, что технический прогресс не имеет значения. Определение ценности методов должно быть особой задачей соревнования.

Успешное решение задач, стоящих перед соревнованием, требует его тщательной и продуманной организации. Описанные в [3] тесты и способы начисления очков не лишены недостатков. Тесты должны учитывать требования, диктуемые объективной статистикой измерения, а не только пожелания экспериментатора. В частности, бесполезно предлагать определить слабые пики, лежащие ниже порога теоретической чувствительности алгоритма, или разрешить дублет с расстоянием между пиками меньше теоретического разрешения этого алгоритма. Организаторов соревнования можно понять — в реальной практике спектры не всегда удовлетворяют упомянутым условиям. Но в этом случае успех программы, анализирующей такие спектры, может быть делом либо случая, либо недоразумения. Поэтому в тестах следует различать задачи, имеющие решения, и задачи, в которых такого решения для нас не существует.

Но, разумеется, автор этой работы отдает себе отчет в практической сложности организации такого соревнования. Так что на практике, по-видимому, программы долго еще будут проверяться методами, не дающими полной и убедительной картины, т. е. обработкой тестовых искусственных и естественных спектров, подобранных случайно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гаджиков В.— ЭЧАЯ, 1980, т. 11, вып. 6, с. 1474.
2. Паутиан С. Г.— УФН, 1958, т. 66, с. 475.
3. Parr R. M., Houtermans H., Shaerf K. American Nuclear Society Conf. on Computers in Activation Analysis and Gamma-Ray Spectrometry, Mayaguez, Puerto-Rico. 1—4 May 1978, p. 544.
4. Phillips G. W., Marlow K. W. NRL Memorandum Report 3198. Washington, D.C., 1976.

5. Денисов Г. С., Терушкин Б. С.— В сб.: Молекулярная спектроскопия. Вып. 5. Л.: Изд-во ЛГУ, 1981, с. 232—267.
6. Eady W. T., Dryard D., James F. E. e.a. Statistical methods in experimental physics, NHPС, Amsterdam — London, 1971.
7. Haldane J. B. S., Smith S. M.— Biometrika, 1956, v. 43, p. 96.
8. Chamayou J. M. F.— Comp. Phys. Comm., 1980, v. 21, p. 145—161.
9. Zaikin P. N., Kritsky V. G., Ufimtcev M. V.— Comp. Phys. Comm., 1979, v. 18, p. 327—329.
10. Schmitt H. W., Neiler J. H., Walter F. J.— Phys. Rev., 1966, v. 141, p. 3.
11. Злоказов В. Б. ОИЯИ P10-81-204, Дубна, 1981; Nucl. Instrum. and Methods, 1982, v. 199, p. 509—519.
12. Дженкинс Г., Ваттс Д. Спектральный анализ и его приложения: Пер. с англ. М.: Мир, 1971.
13. Saby V. Preprint Note CEA-N-1889, Saclay, 1976.
14. Злоказов В. Б. ОИЯИ P10-80-510, Дубна, 1980; Comp. Phys. Comm., 1981, v. 21, p. 373—383.
15. Mariscotti M.— Nucl. Instrum. and Methods, 1967, v. 50, p. 309.
16. Barnes V.— IEEE Trans. Nucl. Sci., 1968, v. 3, NS-15, p. 437.
17. Бахвалов Н. С. Численные методы. Т. 1. М.: Наука, 1975.
18. Злоказов В. Б. ОИЯИ P11-10186, Дубна, 1976.
19. Saby V. Preprint Note CEA-N-1723, Saclay, 1974.
20. Cooley J. W., Tukey J. W.— Math. of Computer, 1965, v. 19, p. 297—301.
21. Ланцос К. Практические методы прикладного анализа: Пер. с англ. М.: Физматгиз, 1981. 71 с.
22. Green D. W.— Nucl. Instrum. and Methods, 1969, v. 76, p. 349.
23. Турчин В. Ф.— ЖВМФ, 1967, т. 7, № 6, с. 1270—1284.
24. Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теорий функций и функционального анализа. М.: Наука, 1972.
25. Рупп Э. ОИЯИ 10-6614, Дубна, 1972.
26. Cole J., Windsor C. C.— Nucl. Instrum. and Methods, 1980, v. 171, p. 107.
27. Helmer R. G., Lee M. A.— Nucl. Instrum. and Methods, 1980, v. 178, p. 499.
28. Белашов Б. З., Сороко Л. М. ОИЯИ P10-80-696, Дубна, 1980.
29. Wilks S. S. Mathematical statistics, N.Y.—Lond.: J. Wiley, 1962.
30. Balagurov A. M. e.a.— Phys. Stat. Sol. (a), 1979, v. 51 p. 367—374.
31. Волков Н. Г., Цупко-Ситников В. М., Чураков А. К. ОИЯИ 10-12400, Дубна, 1979.
32. Poskanzer A. M., Butler G. W., Hyde E. K.— Phys. Rev. C, 1971, v. 3, N 2, p. 882—904.
33. Злоказов В. Б. ОИЯИ P10-12075, Дубна, 1978; Comp. Phys. Comm., 1979, v. 18, p. 281—286.
34. Emelyanov V. A., Kabina L. P., Kondurov I. A. e.a.— Nucl. Instrum. and Methods, 1980, v. 178, p. 555.
35. Sjölin L., Wlodawer A.— Acta Crystal., 1981, v. A37, p. 594—604.
36. Злоказов В. Б. ОИЯИ 10-83-345, Дубна, 1983.
37. Ту Дж., Гонзалес Р. Принципы распознавания образов: Пер. с англ. М.: Мир, 1972. 520 с.
38. Злоказов В. Б.— Nucl. Instrum. and Methods, 1975, v. 130, p. 543.
39. Злоказов В. Б. ОИЯИ P10-82-105; Comp. Phys. Comm., 1982, v. 28, p. 27—37.
40. Бялко А. А. и др. ОИЯИ P10-80-107, Дубна, 1980.
41. Устойчивые статистические методы оценки данных/Сб. статей под ред. Н. Г. Волкова М.: Машиностроение, 1984.