РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
АВТОМЕТРИЯ
№ 1 1993

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 621.391

В. В. Миронов
(Рязань)

ОБРАБОТКА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ СПЕКТРОВ С ГАРАНТИРОВАННОЙ ТОЧНОСТЬЮ ПРИ ПРОИЗВОЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ ШУМОВ

При послойном спектральном анализе поверхностей производятся последовательное «разделение» поверхности на «непересекающиеся» слои и исследование спектра на каждом слое. Такой послойный анализ эффективен, например, при исследовании поверхностей с разнородными по химическому составу компонентами, меняющимися от слоя к слою. Предлагается методика по гарантированной оценке концентрации компонент в слоях на различной глубине. При этом на шумы спектров налагаются предельно общие условия, допускающие произвольную корреляцию шумов, в том числе и наиболее неблагоприятную для данного эксперимента. Оценка точности оценивания концентрации производится "a priory" по модернизированному методу наименьших квадратов, связанному с минимаксными задачами оптимизации. Задача моделировалась на IBM PC AT. Данные моделирования приводятся.

Введение. Как известно, при послойном спектральном анализе поверхностей производятся последовательное «разделение» поверхности на «непересекающиеся» слои и исследование спектра на каждом слое. Такой послойный анализ спектров эффективен, например, при исследовании поверхностей с разнородными по химическому составу компонентами, меняющимися от слоя к слою.

В представленной статье в развитие идей работы [1] производится гарантированная оценка концентрации компонент в слоях на различной глубине. Главная трудность здесь, как известно, в том, что на глубинных слоях интенсивность спектра соизмерима с уровнем шума спектрометра.

Одним из наиболее распространенных методов оценки концентрации на различных слоях является метод наименьших квадратов (МНК), при этом природа шума, его характеристики, как правило, игнорируются [2]. Такое игнорирование природы шума, в частности, при отношении сигнал/шум, близком к единице, приводит к неоправданному оптимизму в отношении точности оценивания параметров по МНК [3].

В настоящей статье на шум спектра налагаются предельно общие (в рамках математической модели) условия, а именно величина шума по модулю ограничена известной функцией. Такое ограничение допускает произвольную корреляцию шумов, в том числе и наиболее неблагоприятную для данного эксперимента. Подчеркнем, что речь идет о гарантированной обработке спектров, так как реально достижимая оценка точности оценивания концентрации вычисляется до проведения эксперимента, т. е. "a priory". Оценка же концентрации производится по модернизированному МНК "a posteriory". Характер модернизации ясен из последующего изложения.

Модель последовательности спектров и постановка задачи. Модель последовательности спектров при послойном анализе имеет вид

$$w_i(t) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_{ji} \int_{t_1}^{t_2} K(t, \tau) s_j(\tau) d\tau + \delta_i(t), \qquad (1)$$

где $[t_1, t_2]$ — интервал регистрации спектров, i — номер слоя, считая «от края», $i = \overline{1, n}$, $w_i(t)$ — спектр i-го слоя, $K(t, \tau)$ — аппаратная функция, j — номер исследуемой компоненты, $j = \overline{1, m}$, $s_j(t)$ — спектр j-й компоненты, α_{ji} — коэффициент удельного веса (концентрация) j-й компоненты в i -м слое, $\delta_i(t)$ — суммарный шум при снятии спектра с i-го слоя. На шумы $\delta_i(t)$ наложены неклассические ограничения [2, 3]:

$$|\delta_i(t)| \le \delta_i^*(t), \qquad (2)$$

где $\delta_i^*(t)$ — известные функции. Условия (2) охватывают произвольную корреляцию шумов.

В общем плане ставится следующая задача: оценить элементы матрицы $A = (\alpha_{ji})$ с помощью библиотеки эталонных спектров s_j, $j = \overline{1, M}$.

Модель спектров и задача оценивания на равномерной дискретной сетке. Представим модель (1), (2) в виде

$$w_i(t) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_{ji} \tilde{s}_j + \delta_i(t), \qquad (3)$$

$$|\delta_i(t)| \le \delta_i^*(t), \quad i = \overline{1, n}. \qquad (4)$$

Задав число N, введем на (t, τ) равномерную сетку:

$$\begin{aligned} t_l &= t_1 + (l - 1)h, \\ \tau_k &= t_1 + (k - 1)h, \end{aligned} \qquad (5)$$

где $h = (t_2 - t_1)/N$; $k, l = \overline{1, N}$. Заметим, что специфика практических задач диктует условие

$$N \ll M. \qquad (6)$$

На сетке (5) модель (1), (2) примет вид

$$w_{li} = \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{N} \alpha_{ji} k_{lk} s_{kj} + \delta_{li}, \qquad (7)$$

$$|\delta_{li}| \le \delta_{li}^*, \quad i = 1, 2, \ldots, n; \; l = 1, 2, \ldots, N, \qquad (8)$$

где $w_{li} = w_i(t_l)$, $k_{lk} = K(t_l, \tau_k)$, $s_{kj} = s_j(\tau_k)$, $\delta_{li} = \delta_i(t_l)$, $\delta_{li}^* = \delta_i^*(t_l)$. Тогда (3) будет иметь следующий матричный вид:

$$W = \tilde{S}A + \Delta, \qquad (9)$$

где $W = (w_{li})_{N \times n}$, $\tilde{S} = KS$, $K = (k_{lk})_{N \times N}$, $S = (s_{kj})_{N \times m}$, $A = (\alpha_{ji})_{m \times n}$, $\Delta = (\delta_{li})_{N \times n}$. От матричной записи (9) перейдем к серии линейных моделей:

$$\bar{\mathbf{v}}_i = \tilde{S}\,\bar{\mathbf{a}}_i + \bar{\delta}_i, \quad i = \overline{1, n}, \qquad (10)$$

где $\bar{\mathbf{d}}_i = (v_{1i}/\delta^*_{1i}, ..., v_{Ni}/\delta^*_{Ni})$, $\bar{\rho}_i = (\delta_{1i}/\delta^*_{1i}, ..., \delta_{Ni}/\delta^*_{Ni})$, Z_i — матрица, полученная из S, если каждую l-ю строку матрицы S $(l = \overline{1, N})$ разделить на l-й элемент вектора $\bar{\delta}^*_i$.

Критерий оценивания. В целях упрощения изложения в описанной ниже процедуре у векторов и матриц опущен индекс i. Алгоритмически процедура выполняется последовательно для всех $i = 1, 2, ..., n$ из (11).

Для любого k с условием $m \le k \le N$ выберем числа $l_1, l_2, ..., l_k$ из множества $\{1, 2, ..., N\}$. Пусть $\bar{\mathbf{b}}$ и $\bar{\mathbf{c}}$ есть векторы размерности k, элементами которых являются числа, стоящие в векторах $\mathbf{d}$ и ρ на местах $l_1, l_2, ..., l_k$ соответственно. Пусть B есть матрица размерности $k \times m$, у которой $1, 2, ..., k$-й строками являются $l_1, l_2, ..., l_k$-е строки матрицы Z соответственно. По МНК оптимальная оценка вектора $\mathbf{a}$ находится для каждого k из условия

$$\hat{\mathbf{a}}^{(k)} = \underset{\hat{\mathbf{a}}}{\operatorname{argmin}} (\bar{\mathbf{b}} - B\hat{\mathbf{a}})^T(\bar{\mathbf{b}} - B\hat{\mathbf{a}}). \tag{12}$$

Ясно, что оценка (12) является функцией числа k и матрицы B.

Пусть $\delta = g(\bar{\mathbf{a}})$ — произвольная векторная функция, подлежащая оцениванию. Тогда

$$g(\hat{\mathbf{a}}^{(k)}) = g(\bar{\mathbf{a}}) + G(\Delta\bar{\mathbf{a}}).$$

Здесь $\Delta\bar{\mathbf{a}} = \bar{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}^{(k)}$, G — сумма соответствующего ряда. И следовательно,

$$\|g(\hat{\mathbf{a}}^{(k)}) - g(\bar{\mathbf{a}})\| = \|G(\Delta\bar{\mathbf{a}})\|,$$

где $\|...\|$ — произвольная норма вектора, согласованная по G с $\Delta\bar{\mathbf{a}}$, т. е. $(\forall \Delta\bar{\mathbf{a}}_1, \Delta\bar{\mathbf{a}}_2)$

$$\|\Delta\bar{\mathbf{a}}_1\| \ge \|\Delta\bar{\mathbf{a}}_2\| \Rightarrow \|G(\Delta\bar{\mathbf{a}}_1)\| \ge \|G(\Delta\bar{\mathbf{a}}_2)\|.$$

Будем полагать, что вид G известен.

Замечание 1. В приложениях в качестве G рассматривается начальная сумма ряда, чаще всего линейная его часть [3]. Решается задача по априорной оценке точности оценивания: найти

$$\min_k \min_B \max_{\bar{\mathbf{b}}} \|G(\Delta\bar{\mathbf{a}})\|, \tag{13}$$

где оценка $\hat{\mathbf{a}}^{(k)}$ находится по (12), а вектор $\bar{\mathbf{b}}$ «пробегает» все возможные значения.

В работе [1] доказывается, что

$$\min_k \min_B \max_{\bar{\mathbf{b}}} \|\hat{\mathbf{a}}^{(k)} - \bar{\mathbf{a}}\|_\Sigma, \tag{14}$$

где норма $\|...\|_\Sigma$ определяется как сумма модулей всех его элементов, достигается при $k = m = \dim \mathbf{a}$. В этом случае наилучшая (в смысле гарантированной точности) апостериорная оценка вычисляется по формуле

$$\hat{a} = B^{*-1}\,\bar{\mathbf{b}}, \tag{15}$$

при этом соответствующая оптимальная матрица B^* строится "a priory" на основе введенной сетки дискретизации (5).

З а м е ч а н и е 2. Известно, что в реальных экспериментах по оценке концентрации возможны случаи, когда матрица B из (15) плохо обусловлена. В этом случае предлагается решение с использованием псевдообратной матрицы:

$$\hat{\bar{a}} = B^{\#}\bar{b},$$

где $B^{\#} = C^T(CC^T)^{-1}(D^TD)^{-1}D^T$, $B = DC$ — скелетное разложение матрицы B. Достоинства этого подхода известны [4].

Гарантированная точность оценивания. В этом центральном разделе статьи проведем рассуждения в стиле классической работы [5].

Имеем

$$\Delta a_i = (\bar{e}_i, \Delta\bar{a}), \tag{16}$$

где $\Delta\bar{a} = (\Delta a_1, \dots, \Delta a_m)$, $\bar{e}_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$, число 1 стоит в $\bar{e}_i$ на i-м месте, считая слева, $(\dots, \dots)$ — скалярное произведение векторов.

Рассматривается задача: найти

$$\min_k \min_B \max_{\bar{c}} \Delta a_i. \tag{17}$$

Если $\bar{c} = (c_1, \dots, c_k)$, то, очевидно, в силу (2) и определения $\bar{c}$ $(\forall i)|c_i| \le 1$. Из (12) следует, что

$$\Delta\bar{a} = (B^TB)^{-1}B^T\bar{c}. \tag{18}$$

Пусть $\bar{b}_1, \dots, \bar{b}_m$ — строки матрицы B, удовлетворяющие условиям: 1) линейной независимости,

$$2)\ (\forall i)\ \bar{e}_i = \lambda_{i1}\bar{b}_1 + \dots + \lambda_{im}\bar{b}_m \ \text{ и } \ (\forall i, j)\ \lambda_{ij} > 0. \tag{19}$$

Т а б л и ц а 1

i	$x_{1i}(t)$	$x_{2i}(t)$	i	$x_{1i}(t)$	$x_{2i}(t)$
1	t	t^2	14	$1/t$	1
2	t^2	$1/t^3$	15	1	$1/e^t$
3	$t + 2{,}5$	$1/e^t$	16	$1/\sqrt{t}$	t
4	$\sin t$	$\cos t$	17	$1/\sin t$	$1/\cos t$
5	$\sin^2 t$	$t + 2{,}5$	18	$1/t^5$	$1/e^{t-10}$
6	$\sqrt{\ln t}$	$\cos^2 t$	19	$\sqrt{t}$	$1/t$
7	$t^2 - \ln t$	$\ln t$	20	$1/e^t$	e^t
8	1	$\mathrm{tg}\, t$	21	$1 + \sin t/t$	$2 + 1/t^2$
9	$\mathrm{ctg}\, t$	$\sin^2 t$	22	$1 + \sin t/t$	e^t
10	e^t	$t + \ln t$	23	$1 - 1/t^2$	$100 + 1/e^t$
11	$1/t$	$1/t^2$	24	1	$1 + 1/t$
12	$1/e^t$	$1/\lg t$	25	$1 + 1/t$	$1 - 1/t$
13	$\sin t/t$	$\cos t/t$			

Таблица 2

Номер i	ГМНК		МНК	
	Δa_1	Δa_2	Δa_1	Δa_2
1	0,442	0,048	0,529	0,059
2	0,008	8,266	0,013	11,578
3	0,074	9,852	0,100	13,208
4	1,005	1,153	1,249	1,261
5	1,830	0,114	2,427	0,149
6	0,646	1,711	0,977	2,270
7	0,029	1,030	0,037	1,264
8	1,000	0,009	1,010	0,009
9	0,145	1,001	0,242	1,279
10	0,000	0,112	0,000	0,142
11	9,667	23,333	11,111	26,126
12	27,754	0,830	30,492	0,948
13	3,837	3,577	4,616	5,321
14	4,889	1,444	6,363	1,756
15	1,000	14,780	1,094	17,146
16	1,812	0,141	2,804	0,193
17	0,142	0,005	0,264	0,006
18	185,324	0,002	236,882	0,002
19	0,386	3,093	0,500	4,511
20	7,390	0,000	10,109	0,000
21	3,667	1,927	5,055	2,608
22	0,669	0,008	0,815	0,008
23	8,233	0,072	10,001	0,090
24	6,333	4,889	8,049	6,363
25	1,722	3,167	2,428	4,024

В этом случае из (18), (19) получаем

$$\max_{c_l} \Delta a_i = \max_{c_l = 1} \Delta a_i = \sum_{j=1}^{m} \lambda_{ij}. \quad (20)$$

Для конкретного вида функционала (20) справедлива следующая теорема [6].

Теорема 1. Для того чтобы векторы $\bar{b}_1, \ldots, \bar{b}_m$ реализовали

$$\min_{k=m} \min_{B} \max_{\bar{c}} \Delta a_i,$$

необходимо и достаточно, чтобы для любой строки $\bar{b}_j$ из B выполнялось условие

$$\left| \sum_{k=1}^{m} x_{kj} \right| \leq 1, \quad (21)$$

где $\bar{\mathrm{b}}_j = x_{1j}\bar{\mathrm{b}}_1 + \ldots + x_{mj}\bar{\mathrm{b}}_m$.

Справедлива [5]

Теорема 2. Для любого i экстремум

$$\min_{k} \min_{B} \max_{\bar{c}} \Delta a_i \quad (22)$$

достигается при $k = m = \dim \bar{a}$.

Из теорем 1, 2 следует

Теорема 3. Экстремумы (17) реализуются на одних и тех же строках $\bar{\mathrm{b}}_1, \ldots, \bar{\mathrm{b}}_m$, составляющих матрицу B^*.

Замечание 3. Случай с нарушением условия (19) связан с изменением строк матрицы B и рассмотрен автором в [1]. Теорема 3 в этом случае остается также справедливой. Из теоремы 3 следует, что результат (14) справедлив для любой нормы вектора. Тем самым решается и задача (13).

Алгоритм поиска оптимальной матрицы В*. Поиску оптимальной матрицы B^* из задачи (14) при $k = m$ и смежным вопросам посвящены многочисленные исследования, главным образом с использованием идей линейного программирования. Обширный список литературы по этим вопросам можно найти, например, в [7].

Решение задач при различной априорной информации. При заданной библиотеке эталонных спектров возможны следующие подзадачи, связанные с наличием той или иной априорной информации об оцениваемых компонентах.

Задача 1. Известны число оцениваемых компонент m и номера $j_1, \ldots, j_m$ эталонных спектров $s_{j_k} \in \{s_j\}_{j=1}^{M}$, $k = \overline{1, m}$, по которым оценивается величина концентрации. В этом случае априорная оценка точности находится по (22), оценка концентраций — по (15).

Задача 2. Число m известно, но номера $j_1, \ldots, j_m$ эталонных спектров не известны. В этом случае априорная оценка точности находится как

$$\max_{j_1, \ldots, j_m \in \{1, \ldots, M\}} \Delta a_i,$$

где Δa_i находится по (22), а оценка — вновь по (15).

Задача 3. В отличие от задачи 2 число m также неизвестно. В этом случае априорная оценка точности находится как

$$\max_{m=1, \ldots, M} \max_{j_1, \ldots, j_m} \Delta a_i,$$

Таблица 3

Номер i	Точность при ГМНК	Точность при МНК	Оптимальные моменты измерений		Количество случаев, когда ГМНК точнее МНК	Количество случаев, когда МНК точнее ГМНК
			t_1^*	t_2^*		
1	0,491	0,587	5	11	61	39
2	8,274	11,590	2	11	67	33
3	9,927	13,309	2	11	57	43
4	2,158	2,510	3	11	37	63
5	1,944	2,575	2	9	53	47
6	2,357	3,247	3	11	43	57
7	1,059	1,300	4	11	58	42
8	1,009	1,019	4	11	56	44
9	1,146	1,521	3	11	58	42
10	0,112	0,142	8	11	61	39
11	33,000	37,237	2	5	63	37
12	28,584	31,440	2	5	58	42
13	7,414	9,937	2	3	50	50
14	6,333	8,119	2	11	60	40
15	15,780	18,240	2	11	63	37
16	1,952	2,997	2	11	59	41
17	0,147	0,269	3	11	64	36
18	185,326	236,884	2	3	59	41
19	3,479	5,011	2	11	48	52
20	7,390	10,109	2	11	70	30
21	5,594	7,663	2	4	53	47
22	0,676	0,824	2	11	63	37
23	8,305	10,091	2	11	61	39
24	11,222	14,412	2	11	59	41
25	4,889	6,453	2	11	56	44

где Δa_i находится по (22), а оценка концентраций — по (15).

Замечание 4. Подчеркнем еще раз, что предложенные решения задач дают наилучшие в смысле (13) возможные оценки при заданной информации о спектрах, выделяя при этом условие (2) на шум регистрации.

$$d_i(t) = a_1 x_{1i}(t) + a_2 x_{2i}(t) + \rho_i(t), \tag{23}$$

где $i = 1, ..., 25$. Для любых i и t

$$|\rho_i(t)| \leq 1. \tag{24}$$

Истинное значение параметров: $a_1 = a_2 = 1$. Измерения проводились в моменты времени $t_1 = 2$, $t_2 = 3$, ..., $t_{10} = 11$. Вид функций x_{ji} показан в табл. 1.

Результаты априорной оценки точности Δa_i параметров a_i по ГМНК и МНК приведены в табл. 2.

Ясно, что апостериорная оценка параметров a_1, a_2 из (23) зависит от свойств моделируемых последовательностей

$$\rho_i(t_j),\ i = \overline{1, 25},\ j = \overline{1, 10}.$$

Результаты одного такого моделирования приведены в табл. 3.

При моделировании ошибки $\rho_i(t_j)$ строились по следующему закону:

1) $(\forall i)\ \rho_i(t_j) = (s_j - 0{,}5) \cdot 10^{-2}$, $j = \overline{1, 10}$, где s_j — псевдослучайные числа, равномерно распределенные на интервале (0, 1).

2) $(\forall i)$ случайным образом выбираются четыре индекса $i_1, i_2, i_3, i_4 \in \{1, ..., 10\}$, для которых полагаем $\rho_i(t_{i_1}) = \rho_i(t_{i_2}) = -1$, $\rho_i(t_{i_3}) = \rho_i(t_{i_4}) = 1$.

Априорная точность метода определялась в соответствии с (14). Оптимальные моменты измерений (нормальные места) строились при ГМНК. Было проведено 100 однотипных экспериментов. Апостериорная точность методов в каждом из 100 случаев определялась как фактическая сумма $|\Delta a_1| + |\Delta a_2|$.

Заключение. Таким образом, аналитические исследования и численное моделирование свидетельствуют о предпочтительности использования ГМНК перед МНК при априорной оценке точности в определении концентраций при ограничениях на суммы измерений вида (3).

Вопрос о построении функций $\sigma_i^*(t)$ в реальных экспериментах представляет собой самостоятельную проблему и здесь не обсуждается.

Автор выражает глубокую признательность А. И. Новикову за обсуждение результатов настоящей работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Миронов В. В.** Гарантированная оценка параметров систем по методу наименьших квадратов // Математические методы в задачах управления и обработки данных: Межвуз. сб.—Рязань, 1990.
2. **Бригг Д., Сих М. П.** Анализ поверхности методами оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектрометрии.—М.: Мир, 1987.
3. **Эльсберг П. Е.** Определение движения по результатам измерений.—М.: Наука, 1976.
4. **Лоусон Ч., Хенсон Р.** Численное решение задач метода наименьших квадратов.—М.: Наука, 1986.

5. **Данциг Д. В.** Методы решения общей задачи линейного программирования.—М.: Гостехиздат, 1963.

6. **Лидов М. Л.** К априорным оценкам точности определения параметров по методу наименьших квадратов // Космич. исслед.—1964.—**2**, вып. 5.

7. **Лидов М. Л., Бахтиян Б. Ц., Матасов А. И.** Об одном направлении в проблеме гарантирующего оценивания (Обзор) // Космич. исслед.—1991.—**29**, вып. 5.

Поступило в редакцию 29 апреля 1991 г.