УДК 535.853.1

ПРЕДЕЛЬНО ДОСТИЖИМЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ВЫИГРЫША ФЕЛЖЕТА В МУЛЬТИПЛЕКС-СПЕКТРОСКОПИИ

А. Я. Паршин и *Б. Н. Гречушников*

Получены предельные оценки возможных значений выигрыша Фелжета при произвольных линейных преобразованиях спектральной плотности как в случае фотонных шумов, так и в случае собственных шумов приемника.

Хорошо известно, что спектральные приборы с мультиплекс-фактором (Фурье-спектрометры, Адамар-спектрометры и т. д.) в случае фотонных шумов не обладают выигрышем Фелжета [1, 2] (т. е. лучшим, чем для классического сканирующего прибора, средним отношением сигнала к шуму при эквивалентных геометрических факторах и разрешающих силах). Мы покажем, что это утверждение справедливо для любого мультиплекс-спектрометра из класса «несамообучающихся», т. е. не использующих поступающую во время измерения спектральную информацию для перестройки самой программы измерений. Будет показано также, что в случае, когда определяющими являются собственные шумы приемника, не зависящие от величины сигнала, наибольшим возможным выигрышем Фелжета обладает спектрометр Адамара.

Пусть n — число разрешаемых спектральных интервалов, f_k — исследуемая спектральная плотность излучения ($k=1, \ldots n$), а измерение ведется путем регистрации m последовательных отсчетов сигнала приемника $\varphi_i=(T/m)\, q\Phi_i$ (q — квантовый выход приемника, $i=1, \ldots m$), накопленного за одинаковые промежутки времени T/m, T — полное время измерения. Световой поток на приемнике Φ_i (квант/с) есть результат некоторого линейного преобразования спектральной плотности

$$\Phi_i=\sum_{k=1}^{n} A_{ik} f_k, \quad 0 \leqslant A_{ik} \leqslant 1. \tag{1}$$

Неравенства, ограничивающие возможные значения элементов матрицы $\|A\|$, являются следствием, во-первых, того факта, что Φ_i — величина существенно положительная, и, во-вторых, предположения, что в процессе преобразования световой поток не усиливается.

Величины Φ_i содержат наряду с полезным сигналом случайный шум $\delta\Phi_i=(m/Tq)\, \delta\varphi_i$, корреляционная матрица которого $\|B_\Phi\|_{ij}=\overline{\delta\Phi_i\delta\Phi_j}$. В случае фотонных шумов следует положить

$$\|B_\Phi\|_{ij}=(m/Tq)\, \Phi_i\delta_{ij}.$$

Нашей задачей является отыскание такой матрицы $\|A\|$, которая позволяла бы определять компоненты f_k из уравнений (1) с наилучшей в заданных условиях точностью. Ясно, что вид такой матрицы зависит, вообще говоря, как от вида самого спектра, так и от конкретной экспериментальной задачи. Если, однако, заранее об измеряемом спектре ничего не известно $\left(\text{кроме порядка величины полной интенсивности } F=\sum_{k=1}^{n} f_k\right)$ и поступающая спектральная информация не используется для перестройки программы измерений (т. е. $\|A\|$ никак не скоррелирована с $\|f\|$), то можно поставить задачу об отыскании матрицы $\|A\|$, наилучшей «в среднем по всем возможным спектрам». В этом случае имеем

$$\|B_\Phi\|_{ij}=\frac{F}{Tq}\frac{m}{n}\delta_{ij}\sum_{k=1}^{n}A_{ik}$$

или, вводя матрицу весов $\|P\|_{ij}=p_i\delta_{ij}$, $p_i^{-1}=\sum\limits_{k=1}^{n}A_{ik}$,

$$\|B_\Phi\|=\frac{F}{Tq}\frac{m}{n}\|P^{-1}\| \tag{2}$$

$\left(\text{без ограничения общности можно считать } \sum\limits_{k=1}^{n}A_{ik}>0\right)$.

Уравнения (1), вообще говоря, несовместны. Однако если ранг $\|A\|$ равен n, всегда существует однозначно определенное наилучшее приближенное решение $\|f_0\|$ (в смысле метода наименьших квадратов [3])

$$\|f_0\|=(\|\tilde{A}\|\|P\|\|A\|)^{-1}\|A\|\|P\|\|\Phi\|=\|A^+\|\|\Phi\|,\quad \|\tilde{A}\|_{ij}=\|A\|_{ji}$$

с корреляционной матрицей $\|B_f\|_{ij}=\overline{\delta f_{0i}\delta f_{0j}}$

$$\|B_f\|=\|A^+\|\|B_\Phi\|\|\tilde{A}^+\|=\frac{F}{Tq}\frac{m}{n}(\|\tilde{A}\|\|P\|\|A\|)^{-1}.$$

При $m=n$, естественно, $\|A^+\|=\|A^{-1}\|$ и $\|f_0\|=\|f\|$.

В качестве характеристики среднего отношения сигнал/шум естественно оптимизировать, оставаясь в рамках метода наименьших квадратов, величину K, определенную как

$$\frac{1}{K^2}=\left(\frac{n}{F}\right)^2\frac{1}{n}\operatorname{Sp}\|B_f\|. \tag{3}$$

Таким образом, задача сводится к отысканию таких матриц $\|A\|$, для которых величина K^{-2} минимальна. Замечая, что $\|\tilde{A}\|\|P\|\|A\|$ — положительно определенная матрица с собственными числами λ_i, $i=1,\ldots,n$, и используя известное неравенство

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\right)\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^{-1}\right)\geqslant n^2,\quad \lambda_i>0,$$

получим

$$\operatorname{Sp}(\|\tilde{A}\|\|P\|\|A\|)^{-1}\geqslant n^2(\operatorname{Sp}\|\tilde{A}\|\|P\|\|A\|)^{-1}.$$

Далее, учитывая неравенства (1), имеем

$$\operatorname{Sp}(\|\tilde{A}\|\|P\|A\|=\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}p_iA_{ik}^2\leqslant\sum_{i=1}^{m}p_i\sum_{k=1}^{n}A_{ik}=m$$

и окончательно

$$\frac{1}{K^2}\geqslant\frac{n^2}{TqF}. \tag{4}$$

Равенство в (4) достигается только для таких матриц $\|A\|$, которые с точностью до произвольной перестановки строк совпадают с единичной ($m=n$) или с матрицей, представляющей собой столбец из единичных матриц (m кратно n). Именно такие матрицы соответствуют в наших обозначениях обычному сканирующему прибору.

Перейдем к случаю шумов, не зависящих от сигнала. Положим

$$\|B_\Phi\|_{ij}=\frac{m}{Tq^2}\sigma\delta_{ij}, \tag{5}$$

где σ — дисперсия собственных шумов приемника. Тогда

$$\frac{1}{K^2}=\frac{mn}{T}\frac{\sigma}{q^2F^2}\,\mathrm{Sp}\,(\|\tilde{A}\|\|A\|)^{-1}. \tag{6}$$

Отметим, что при выводе (6) уже не требуется предполагать, что $\|A\|$ и $\|f\|$ никак не коррелируют. Другими словами, никакое «самообучение» прибора не поможет улучшить среднее по всему спектру отношение сигнал/шум, если для оценки этого отношения использовать величину K, определенную согласно (3).

Асимптотически точную (при больших n) оценку правой части (6) можно получить следующим образом. Во-первых, поскольку $\|\tilde{A}\|\|A\|$ — положительно определенная матрица, то

$$\mathrm{Sp}\,(\|\tilde{A}\|\|A\|)^{-1}\geqslant n\,(\det\|\tilde{A}\|\|A\|)^{-\frac{1}{n}} \tag{7}$$

(это следует из неравенства между средним арифметическим и средним геометрическим n положительных чисел).

Далее, можно показать (см. Приложение), что для всякой матрицы $\|A\|$, удовлетворяющей неравенствам (1),

$$\det\|\tilde{A}\|\|A\|\leqslant(n+1)^{n+1}\left(\frac{m}{4n}\right)^n, \tag{8}$$

причем равенство достигается на «адамаровских» (0,1)-матрицах $\|A_{\text{ад}}\|$ [2] (или их тривиальных обобщениях, если m кратно n) — квадратных матрицах порядка $n=4t-1$ со следующими свойствами:

$$\|\tilde{A}_{\text{ад}}\|\|A_{\text{ад}}\|=t\|I\|+t\|J\|,\quad I_{ik}=\delta_{ik},\quad J_{ik}=1,$$

$$\mathrm{Sp}\,(\|A_{\text{ад}}\|\|A_{\text{ад}}\|)^{-1}=\left(\frac{2n}{n+1}\right)^2.$$

Из (7) и (8) имеем

$$\frac{1}{K^2}>4n^3(n+1)^{-\frac{n+1}{n}}\frac{\sigma}{Tq^2F^2} \tag{9}$$

(равенство не достигается ни для каких матриц), в то время как для «адамаровских» матриц [2,5]

$$\frac{1}{K^2_{\text{ад}}}=\frac{4n^4}{(n+1)^2}\frac{\sigma}{Tq^2F^2}. \tag{10}$$

При $n\to\infty$ правые части (9) и (10) совпадают, так что оценка (9) является асимптотически точной. Таким образом, максимально достижимый при больших n выигрыш Фелжета (т. е. отношение значений K для $\|A\|=\|A_{\text{ад}}\|$ и $\|A\|=\|I\|$) составляет $\sqrt{n}/2$.

Приложение

Для оценки $\det\|\tilde{A}\|\|A\|$, $0\leqslant A_{ik}\leqslant 1$ дополним матрицу $\|A\|$ до квадратной $m\times m$ матрицы $\|A'\|$, приписав к $\|A\|$ справа $m-n$ столбцов, подчиненных следующим условиям:

$$\sum_{i=1}^{m}A'_{ik}A'_{il}=N\delta_{kl};\quad k=1,\ldots m;\quad l=n+1,\ldots m.$$

Геометрически это означает построение системы $m-n$ векторов, ортогональных друг другу и каждому из n заданных векторов. Имеем

$$\det\|\tilde{A}'\|\|A'\|=N^{m-n}\det\|\tilde{A}\|\|A\|.$$

Далее, построим «окаймляющую» $(m+1)\times(m+1)$ матрицу $\|C\|$

$$C_{ik}=2A'_{ik};\quad i,\ k=1,\ldots m;$$

$$C_{i0}=1;\quad i=0,\ldots m;$$

$$C_{0k}=0; \quad k=1, \dots m;$$
$$\det\|C\|=2^m \det\|A'\|.$$

Вычтем из каждого из столбцов с 1-го по n-й крайний левый столбец, а столбцы $n+1, \dots m$ оставим без изменения, получится матрица $\|C'\|$

$$\det\|C'\|=\det\|C\|.$$

Наконец, вводя $m\times(m+1)$ матрицу $\|D\|$, полученную из $\|C'\|$ вычеркиванием верхней строки, имеем, согласно обобщенному неравенству Адамара [4],

$$\det\|C'\|\|\tilde{C}'\| \leqslant (n+1)\det\|D\|\|\tilde{D}\|,$$

откуда

$$\det\|\tilde{A}\|\|A\| \leqslant N^{-(m-n)}4^{-m}(n+1)\det\|D\|\|\tilde{D}\| \leqslant N^{-(m-n)}4^{-m}(n+1)\left(\frac{1}{m}\operatorname{Sp}\|D\|\|\tilde{D}\|\right)^m =$$
$$= N^{-(m-n)}(4m)^{-m}(n+1)\left[m+\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}(2A_{ik}-1)^2+4N(m-n)\right]^m \leqslant$$
$$\leqslant N^{-(m-n)}(4m)^{-m}(n+1)\left[m(n+1)+4N(m-n)\right]^m.$$

Правая часть последнего неравенства минимальна при $N=\frac{m}{4}\frac{n+1}{n}$, поэтому

$$\det\|\tilde{A}\|\|A\| \leqslant (n+1)^{n+1}\left(\frac{m}{4n}\right)^n.$$

Литература

[1] Р. Дж. Белл. Введение в Фурье-спектроскопию, гл. 2. «Мир», М., 1975.
[2] N. J. A. Sloane, T. Fine, G. R. Phillips, M. Harwit. Appl. Opt., *8*, 2103, 1969.
[3] Ю. В. Линник. Метод наименьших квадратов и основы теории обработки наблюдений, гл. VI. Физматгиз, М., 1962.
[4] Ф. Р. Гантмахер. Теория матриц, гл. IX. «Наука», М., 1966.
[5] E. D. Nelson, M. L. Fredman. J. Opt. Soc. Am., *60*, 1664, 1970.

Поступило в Редакцию 8 апреля 1977 г.