

## О возможности оценивания значения функции в заданных точках ее области определения по измерениям конечного числа ее линейных функционалов

А. И. Чуличков<sup>a</sup>, Б. Юань<sup>b</sup>

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,  
кафедра компьютерных методов физики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.*

*E-mail: <sup>a</sup> achulichkov@gmail.com, <sup>b</sup> yuanboyuan1983@hotmail.com*

Статья поступила 02.12.2013, подписана в печать 24.01.2014.

Исследуется возможность оценивания значения функции в заданных точках ее области определения по измерениям конечного числа ее линейных функционалов; измерения сопровождаются случайной погрешностью. Указано линейное конечномерное подпространство, проекция на которое поддается оценке с конечной погрешностью, дан метод оценивания этой проекции с контролем точности. Используется математический аппарат редукции измерений Ю. П. Пытьева. Приведен пример оценивания спектра излучения по данным измерения на двухщелевом спектрометре.

*Ключевые слова:* математическая модель измерения, редукция измерения, спектрометрия, оптимальные решения.

УДК: 519.7. PACS: 02.60.Gf.

### Введение

В экспериментальных исследованиях, как правило, результатом измерения является конечный набор чисел, каждое из которых является значением функционала некоторой искомой функции, искаженным (случайной) погрешностью. По набору этих функционалов требуется оценить значение функции в заданном наборе точек ее области определения.

Типичной является задача, в которых результат измерения имеет вид

$$\xi_i = \int_{\lambda' \in X} a(\lambda', \lambda'_i) g(\lambda') d\lambda' + \nu_i = (a_i, g) + \nu_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

где  $a_i(\cdot) = a(\cdot, \lambda'_i)$ , а  $a(\cdot, \cdot)$  — аппаратная функция измерительного прибора, на вход которого подан сигнал  $g(\cdot)$ . К ним относятся задачи повышения разрешения в оптике и спектрометрии [1, 2], радиовидении [3] и другие [4].

В настоящей статье для получения оценки функции  $g(\cdot)$  используется математический аппарат редукции измерений, данный в теории измерительно-вычислительных систем [4–6]. Оценка значений функции в заданном наборе точек интерпретируется как результат измерения этой функции с помощью некоторого идеального измерительного прибора или ближайшего к нему при дополнительном ограничении на уровень погрешности на его выходе. Функция  $g(\cdot)$  рассматривается как представитель класса эквивалентных функций, являющихся элементом лебегова пространства  $\mathcal{L}^2(X)$ . Исследуются предельно достижимые точности оценивания значения функции  $g(\cdot)$  в заданных точках области ее определения, дается метод этого оценивания. Эффективность предложенного метода демонстрируется на примере задачи повышения разрешения в спектрометрии.

### 1. Постановка и решение задачи оценивания элемента бесконечномерного гильбертова пространства по измерению конечного числа функционалов

Пусть  $g$  — неизвестный элемент пространства  $\mathcal{L}^2(X)$ , он измеряется в эксперименте по схеме (1). Перепишем ее как схему измерений значений  $n$  линейных функционалов  $g$  в виде

$$\xi_i = (a_i, g) + \nu_i, \quad i = 1, \dots, n; \quad (2)$$

здесь  $\{\xi_1, \dots, \xi_n\} = \xi \in \mathcal{R}_n$ ,  $\{\nu_1, \dots, \nu_n\} = \nu \in \mathcal{R}_n$  — элементы  $n$ -мерного евклидова пространства, заданные своими координатами,  $a_i \in \mathcal{L}^2(X)$  заданы своими представителями, являющимися линейно независимыми кусочно-непрерывными функциями на  $X$ ,  $g = g(\cdot): X \rightarrow \mathcal{R}_1$  — априори неизвестный элемент пространства  $\mathcal{L}^2(X)$ . Вектор  $\nu \in \mathcal{R}_n$  — случайный вектор с нулевым математическим ожиданием и невырожденным ковариационным оператором  $\Sigma \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_n)$ . Этот вектор моделирует случайную погрешность, которая сопровождает результат измерения набора линейных функционалов. Априорная информация об элементе  $g \in \mathcal{L}^2(X)$  отсутствует.

Схему измерений (2) можно переписать в векторном виде

$$\xi = Ag + \nu, \quad (3)$$

где оператор  $A$  для каждого  $g \in \mathcal{L}^2(X)$  ставит в соответствие вектор  $Ag \in \mathcal{R}_n$  с координатами

$$(Ag)_i = (a_i, g), \quad i = 1, \dots, n. \quad (4)$$

Задача состоит в том, чтобы указать, какая информация о значениях функции  $g(\cdot)$  в произвольно заданных точках  $x_1, \dots, x_N \in X$  содержится в результате измерения (2), и получить как можно более точную оценку этой информации. В точках  $x_1, \dots, x_N \in X$  функции  $a_i(\cdot)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , непрерывны.

Определим предельные возможности восстановления  $g$  из измерений (2), сформулировав два утверждения.

**Утверждение 1.** Вектор  $\xi \in \mathcal{R}_n$  не зависит от проекции  $g \in \mathcal{L}^2(X)$  на ортогональное дополнение  $\mathcal{L}^\perp(a_1, \dots, a_n)$  к линейной оболочке  $\mathcal{L}(a_1, \dots, a_n)$  элементов  $a_i \in \mathcal{L}^2(X)$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

Действительно, раскладывая  $\mathcal{L}^2(X)$  в прямую сумму  $\mathcal{L}^2(X) = \mathcal{L}(a_1, \dots, a_n) \oplus \mathcal{L}^\perp(a_1, \dots, a_n)$  и записывая  $g = Pg + (I - P)g$ , где  $P$  — ортогональный проектор на  $\mathcal{L}(a_1, \dots, a_n)$ , получим  $\xi_i = (a_i, Pg) + (a_i, (I - P)g) + \nu_i = (a_i, Pg) + \nu_i$ .

Следовательно, вся информация об элементе  $(I - P)g$  в измерениях (2) отсутствует, и имеет смысл оценивать только элемент  $Pg$ , который представим в виде

$$Pg = \sum_{j=1}^n f_j a_j, \quad (5)$$

где  $f_1, \dots, f_n \in \mathcal{R}_1$  — коэффициенты разложения  $Pg$  по  $a_1, \dots, a_n$ . Подставим (5) в (3) и (4), получим

$$(Ag)_i = (a_i, Pg + (I - P)g) = \sum_{j=1}^n (a_j, a_i) f_j, \quad i = 1, \dots, n, \\ \xi = Bf + \nu. \quad (6)$$

Здесь  $f \in \mathcal{R}_n$  — вектор с координатами  $f_1, \dots, f_n$ , а линейный оператор  $B \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_n)$  задан своей матрицей  $B_{ij} = (a_i, a_j)$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ .

Поскольку в точках  $x_1, \dots, x_N \in \mathcal{R}_1$  функции  $a_i(\cdot)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , непрерывны, то  $N$  значений проекции  $Pg(\cdot)$  в этих точках можно рассматривать как координаты  $u_i$  вектора  $u \in \mathcal{R}_N$  и определить следующим образом:

$$u_i = Pg(x_i) = \sum_{j=1}^n f_j a_j(x_i), \quad i = 1, \dots, N,$$

и можно записать  $u = Uf \in \mathcal{R}_N$ , где линейный оператор  $U \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_N)$  определен своей матрицей  $U_{ij} = a_j(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, N$ ,  $j = 1, \dots, n$ .

Задача оценивания значений элемента  $Pg$  в точках  $x_1, \dots, x_N$  непрерывности функций  $a_j(x)$ ,  $j = 1, \dots, n$ , теперь может быть поставлена как конечномерная задача редукции измерения (6) к виду, свойственному измерению конечномерного вектора  $f$  с помощью измерительного прибора  $U \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_N)$  [4].

Эта задача может быть рассмотрена в двух постановках. В первой требуется получить наиболее точные оценки значений  $Pg(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , т.е. наиболее точные оценки значений координат вектора  $Uf$ .

Пусть  $R \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_N)$  — линейный оператор, тогда  $R\xi = RBf + R\nu = Uf + (RB - U)f + R\nu$  интерпретируется как искомое значение вектора  $Uf$ , искаженное сигналом  $(RB - U)f$ , зависящим от  $f$ , и шумовым сигналом  $R\nu$ . Так как  $f$  априори неизвестен, выберем  $R_* \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_N)$  так, чтобы  $(R_*B - U)f = 0$  при любом  $f$ , т.е.  $R_*B = U$ , и так, чтобы при этом условии средняя энергия шумового сигнала  $\mathbf{E}\|R_*\nu\|^2$  была как можно меньшей [4]:

$$R_* = \arg \inf \{ \mathbf{E}\|R\nu\|^2 \mid R \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_N), RB = U \}; \quad (7)$$

здесь  $\mathbf{E}$  — символ математического ожидания. В этом случае  $R_*\xi = Uf + R_*\nu$  является несмещенной оценкой  $Uf$  минимальной среднеквадратичной погрешности, ее можно интерпретировать как выходной сигнал «идеального» измерительного прибора, измеряющего значения значений  $Pg(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , искаженный погрешностью  $R_*\nu$  минимальной энергии  $\mathbf{E}\|R_*\nu\|^2$ .

Заметим, что в общем случае задача (7) разрешима тогда и только тогда, когда разрешимо уравнение  $RB = U$ . Однако если элементы  $a_i \in \mathcal{L}^2(X)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , линейно независимы, то  $B \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_n)$  обратим и справедливо следующее утверждение.

**Утверждение 2.** Вектор  $\hat{u} = UB^{-1}\xi$  является несмещенной оценкой значений составляющей  $Pg$  элемента  $g$  в точках  $x_1, \dots, x_N$  непрерывности функций  $a_j(x)$ ,  $j = 1, \dots, n$ , сопровождающейся минимальной среднеквадратичной погрешностью, равной

$$\mathbf{E}\|\widehat{Pg} - Uf\|^2 = \text{tr } UB^{-1}\Sigma B^{-1}U^*, \quad (8)$$

ортогональная к  $Pg$  составляющая  $(I - P)g$  элемента  $g$  не контролируется измерением (2).

Действительно, в силу обратимости  $B$  уравнение  $RB = U$  имеет единственное решение  $R_* = UB^{-1}$ . Вторая часть утверждения 2 является следствием независимости вектора  $\xi$  и  $(I - P)g$ .

Однако на практике величина  $\mathbf{E}\|\widehat{Pg} - Uf\|^2 = \text{tr } UB^{-1}\Sigma B^{-1}U^*$  часто оказывается неприемлемо большой. Поэтому во второй постановке вместо равенства  $(RB - U)f = 0$  для любого  $f \in \mathcal{R}_n$  потребуем максимальной близости линейных операторов  $RB$  и  $U$  (по норме Гильберта–Шмидта<sup>1</sup>), наложив ограничение на энергию шума:  $\mathbf{E}\|R\nu\|^2 \leq \varepsilon$ . Этот подход сводит исходную проблему к задаче редукции к измерительному прибору  $R_\varepsilon B$ , наиболее близкому к  $U$  при заданных ограничениях на энергию шума  $\mathbf{E}\|R_\varepsilon\nu\|^2$  на его выходе [4, 5]:

$$R_\varepsilon = \arg \inf \{ \|RB - U\|_2^2 \mid \mathbf{E}\|R\nu\|^2 \leq \varepsilon \}. \quad (9)$$

Элемент  $R_\varepsilon\xi \in \mathcal{L}^2(X)$  интерпретируется как результат измерения сигнала  $f$  с помощью измерительного прибора  $RB$ , наиболее близкого к  $U$ , при условии, что уровень шума на его выходе не превышает  $\varepsilon$ .

Решение задачи (9), полученное в [4, 6], для обратимого оператора  $B$  имеет вид

$$R_\varepsilon = \begin{cases} 0, & \varepsilon = 0; \\ UB^{-1}, & \varepsilon \geq \varepsilon_0; \\ R(\omega_\varepsilon) = UB(B^2 + \omega_\varepsilon \Sigma)^{-1}, & 0 < \varepsilon < \varepsilon_0. \end{cases} \quad (10)$$

Здесь  $\varepsilon = \text{tr } UB^{-1}\Sigma B^{-1}U^*$ , а  $\omega_\varepsilon > 0$  — единственный корень уравнения  $\text{tr } UB(B^2 + \omega \Sigma)^{-1}\Sigma(B^2 + \omega \Sigma)^{-1}BU^* = \varepsilon$ . При этом если  $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ , то  $G(R_\varepsilon) = \|R_\varepsilon B - U\|_2^2 = \omega_\varepsilon^2 \text{tr } U(B\Sigma^{-1}B + \omega_\varepsilon I)^{-2}U^*$ , а  $H(R_\varepsilon) = \mathbf{E}\|R_\varepsilon\nu\|^2 = \varepsilon$ . Первое из этих двух выражений дает оценку близости синтезированного прибора  $RB$  к  $U$ , а второй — оценку погрешности на его выходе.

На практике следует воспользоваться оперативной характеристикой задачи (9), которая дает зна-

<sup>1</sup> Квадрат нормы Гильберта–Шмидта линейного оператора  $Q \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_N)$ , заданного матрицей  $\{Q_{ij}\}$ , равен  $\|Q\|^2 = \text{tr } QQ^* = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n Q_{ij}^2$ .

чение функционалов  $G(R)$  и  $H(R)$  при  $R = R(\omega)$  как функций параметра задачи  $\omega > 0$ :  $G(\omega) = \omega^2 \times \text{tr } U(B^* \Sigma^{-1} B + \omega I)^{-2} U^*$ ,  $H(\omega) = \text{tr } UB(B^2 + \omega \Sigma)^{-1} \times \Sigma(B^2 + \omega \Sigma)^{-1} BU^*$ .

Параметр задачи теперь выбирается из соображений компромисса между отличием  $G(\omega)$  оператора  $R(\omega)B$  от  $U$ , и величиной погрешности  $H(\omega)$  на его выходе.

## 2. Редукция данных спектроскопии к идеальному прибору

Метод, предложенный выше, применялся для редукции измерений интенсивности излучения газоразрядной лампы на длинах волн в окрестности эмиссионного спектра  $D$ -линии натрия (дублета с положением максимумов  $\lambda'_1 = 588.9950$  и  $\lambda'_2 = 589.5924$  нм). Ширины щелей спектрометра были выбраны так, чтобы аппаратная функция имела трапециевидную форму. Ее график приведен на рис. 1.

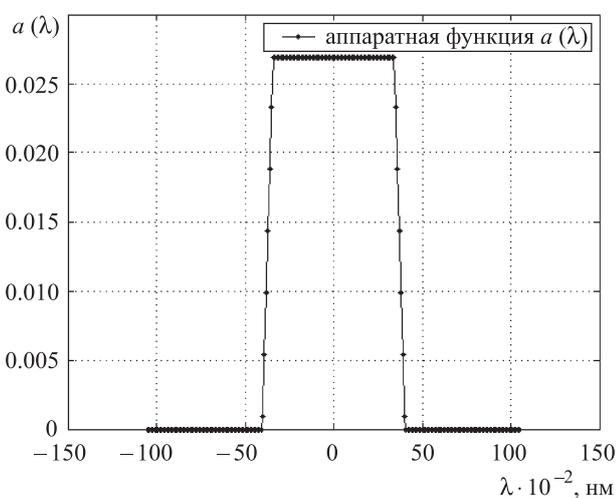


Рис. 1. Аппаратная функция в зависимости от длины волны

Спектр измерялся согласно схеме измерения (1), в которой длины волн  $\lambda'_1, \dots, \lambda'_{211}$  изменялись от 588.20 до 590.30 нм с шагом 0.01 нм. Результат измерения спектра, вектор  $\xi$ , изображен на рис. 2; здесь по горизонтальной оси отложены значения двухсот одиннадцати длин волн, в которых измерялся спектр, по вертикальной оси отложена интенсивность измеренного спектра в условных единицах. Ширина аппаратной функции существенно больше ширины линий дублета, в измеренном спектре они не разрешены. В математической модели спектроскопического эксперимента матричные элементы  $B_{ij} = (a_i, a_j) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\lambda' - \lambda'_i) a(\lambda' - \lambda'_j) d\lambda'$  матрицы  $B$  вычислялись точно, а ковариационный оператор погрешности был выбран в виде  $\Sigma = \sigma^2 I$ , где  $\sigma^2 = 6.43$ , что соответствует некоррелированной погрешности.

Значение длин волн, в которых оценивалось значение входного измеряемого спектра, были выбраны на отрезке от 588.86 до 589.63 нм с шагом 0.01 нм.

Результат решения задачи (7) приведен на рис. 3. Как видно из рисунка, оценка сигнала  $u$  на выходе «идеального измерительного прибора»  $U$  действительно

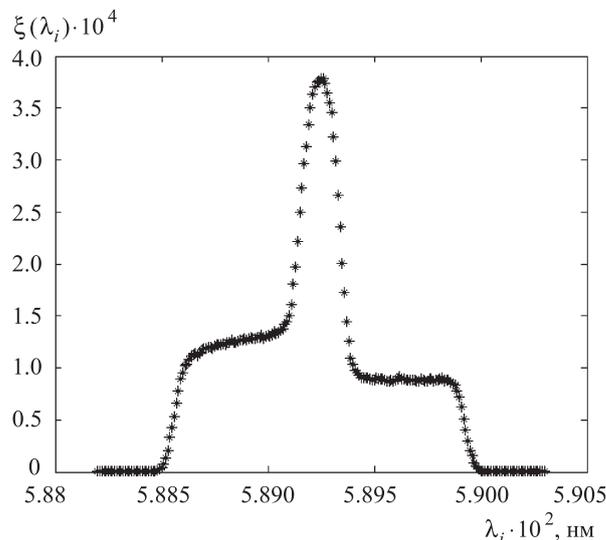


Рис. 2. Результат измерения спектра, в усл. ед.

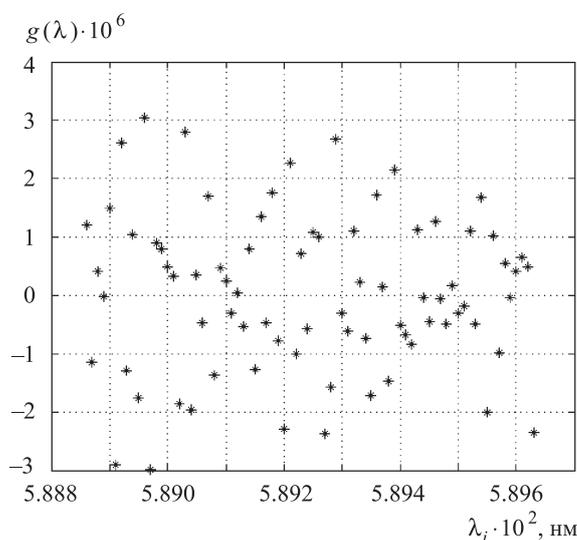


Рис. 3. Результат  $\hat{u} = UB^{-1}\xi$  оценивания значения проекции  $Pg(\lambda_i)$  спектра для длин волн в точках равномерной сетки с шагом, равным 0.01 нм, в усл. ед.

приводит к неприемлемо большой шумовой погрешности. Величина погрешности, вычисленная по формуле (8), в данном случае равна  $5.7 \cdot 10^{-10}$  усл. ед., поэтому вместо оценки функций в заданных точках проводилась редукция измерения  $\xi$  к «идеальному измерительному прибору»  $U$  путем решения задачи (10).

Для выбора параметра  $\omega$  использовалась оперативная характеристика задачи (10), приведенная на рис. 4 в виде зависимостей  $H(\omega)$  и  $G(\omega)$  от величины параметра  $\omega \geq 0$ . Было выбрано значение  $\omega = 2^{-22}$ ; как видно из графиков рис. 4, это обеспечивает достаточно малое отличие  $RB$  от  $U$ , и при этом  $\mathbf{E}\|R(\omega)\nu\| \approx \mathbf{E}\|\nu\|$ . Так как число координат вектора  $Uf$  примерно в три раза меньше числа экспериментальных точек, это означает, что дисперсия шумовой составляющей оценки  $R\xi$  в одной точке примерно в три раза больше дисперсии экспериментальной погрешности.

На рис. 5 показан результат редукции в виде выходного сигнала прибора  $RB$ , измеряющего спектр в точках отрезка от 588.86 до 589.63 нм с шагом 0.01 нм.

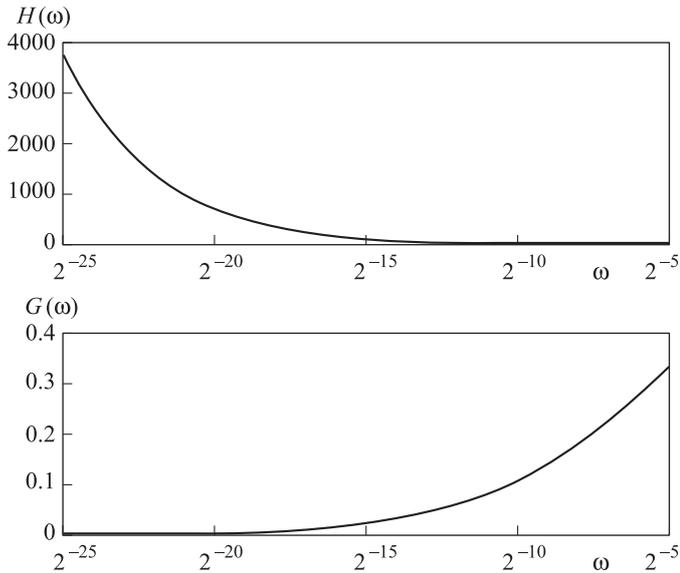


Рис. 4. Оперативная характеристика задачи редукции измерений. На верхнем графике в условных единицах приведено среднее значение квадрата нормы случайной погрешности редукции в зависимости от  $\omega$ . На нижнем — значение квадрата евклидовой нормы разности синтезированного прибора  $RB$  от «идеального»  $U$  в зависимости от параметра  $\omega$ ,  $\omega = 2^i$ ,  $i = -25, \dots, -5$

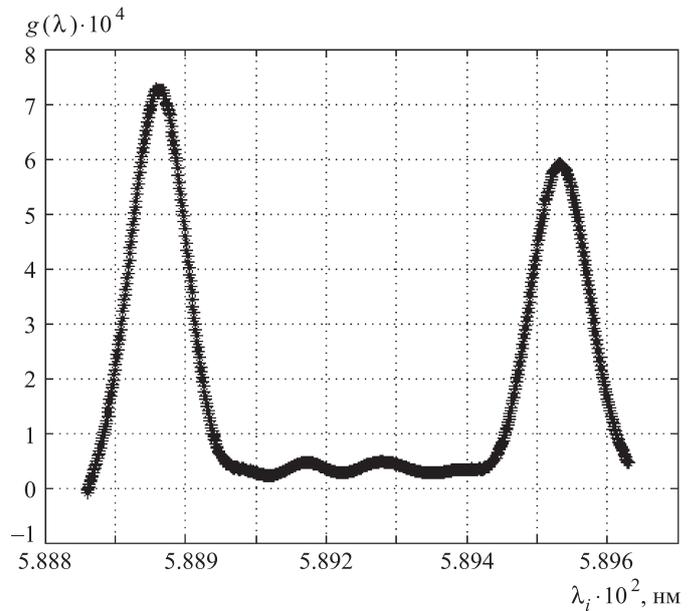


Рис. 6. Результат оценивания значения проекции  $Pg(\lambda_i)$  спектра для длин волн в точках равномерной сетки с шагом, равным 0.001 нм

сигнала спектрометра, измеряющего спектр в точках того же интервала с вдвое меньшим шагом, равным 0.001 нм.

**Заключение**

В работе предложен метод оценивания предельных возможностей оценивания  $g \in \mathcal{L}^2(X)$  в заданных точках по измерениям конечного значения ее линейных функционалов, выполненных с погрешностью. Показано, что оценить с конечной погрешностью можно лишь значения ортогональной проекции  $Pg$  элемента  $g$  на конечномерное линейное подпространство  $\mathcal{L}_n \subset \mathcal{L}^2(X)$ , получена оценка этой погрешности; конечномерное подпространство  $\mathcal{L}_n$  построено как линейная оболочка известных кусочно непрерывных функций, а точки, в которых оценивается значение  $Pg$ , являются точками непрерывности этих функций. Если погрешность оценивания проекции  $Pg$  в заданных точках неприемлемо велика, предложен метод редукции измерений к виду, который имел бы результат измерения спектра на приборе, наиболее близком к прибору, измеряющему значения проекции  $Pg$  в заданных точках, при ограничении энергии случайной погрешности на его выходе. Приведен пример интерпретации данных спектрометрического эксперимента.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-07-00338а).

Авторы выражают благодарность доценту И. В. Митину за предоставленные им экспериментальные данные.

**Список литературы**

1. Pyt'ev Yu.P., Chulichkov A.I., Sobolev S.S., Antonjuk V.A. // Pattern Recognition and Image Analysis. 2004. **14**, N 1, P. 50.
2. Митин И.В., Пытьев Ю.П., Шодмонкулов Т.Д. // Матем. моделирование. 1991. **3**, № 12. С. 31.

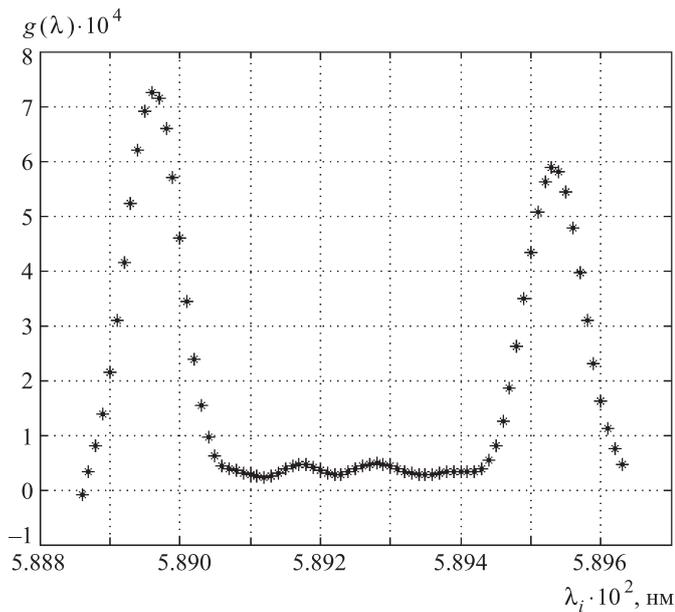


Рис. 5. Результат оценивания значения проекции  $Pg(\lambda_i)$  спектра для длин волн в точках равномерной сетки с шагом, равным 0.01 нм

Видна случайная составляющая в виде коррелированного шума, дающая два ложных максимума между пиками дублета. Конечная ширина пиков полученного дублета обусловлена тем, что восстанавливается не сама функция  $g(\lambda)$ , а ее приближение линейными комбинациями функций  $a(\lambda - \lambda_i)$ ,  $i = 1, \dots, 211$ .

По той же причине увеличение числа точек, в которых оценивается значение  $Pg(\cdot)$ , не приводит к существенному увеличению разрешения пиков. На рис. 6 приведена оценка спектра в виде графика выходного

3. Батова С.С., Пирогов Ю.А., Чуличков А.И. // Научно-технич. конф. «Гиперспектральные приборы и технологии»: Сб. тез. докл. Красногорск, 17–18 января 2013. С. 140.
4. Пытьев Ю.П. Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем. М., 2004.
5. Чуличков А.И. Основы теории измерительно-вычислительных систем. Тамбов, 2000.
6. Пытьев Ю.П. Математические методы интерпретации эксперимента. М., 1989.
7. Лебедева В.В. Экспериментальная оптика. 4-е изд. М., 2005.

### The possibility of estimating the values of a function at given points of the measurement results of a finite number of its linear functionals

A. I. Chulichkov<sup>a</sup>, Boyuan Yuan<sup>b</sup>

*Department of Computer Methods of Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*

*E-mail: <sup>a</sup>achulichkov@gmail.com, <sup>b</sup>yuanboyuan1983@hotmail.com.*

The possibility of estimating the values of a function at given points of its domain is investigated. The estimation uses results of the measurements of a finite number of linear functionals; the results of the measurements are distorted by an error. It is shown that only the component of the functions from the linear finite-dimensional subspace can be estimated with a finite error. A method for estimating this component with accuracy control is proposed. The mathematical methods of measurement reduction proposed by Yu. P. Pyt'ev are used. An example of the estimation of an emission spectrum that is measured by a double-slit spectrometer is described.

*Keywords:* mathematical model of measurement, measurement reduction, spectrometry, optimal decisions.

*PACS:* 02.60.Gf.

*Received 2 December 2013.*

*English version: Moscow University Physics Bulletin 3(2014).*

#### Сведения об авторах

1. Чуличков Алексей Иванович — доктор физ.-мат. наук, профессор, профессор; тел.: (495) 939-41-78), e-mail: achulichkov@gmail.com.
2. Юань Боюань — аспирант; тел.: (495) 939-41-78, e-mail: yuanboyuan1983@hotmail.com.