КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

Оптимизация вычислений

УДК 519.64: 53:082

А.Ю. БОЯРЧУК

О РАСШИРЕНИИ МНОЖЕСТВА АППАРАТНЫХ ФУНКЦИЙ

Рассматриваются способы расширения набора аппаратных функций в контексте задачи математической интерпретации экспериментальных спектроскопических исследований. Предложены новые аппаратные функции из множества функций, образующих дельта-образные последовательности, а также построенные путем свертки известных функций.

Введение. Наиболее конструктивным способом расширения множества аппаратных функций может оказаться рассмотрение типичных экспериментов в оптических исследованиях, а именно спектроскопических измерений. Экспериментальное решение большинства спектроскопических задач сводится к изучению спектрального состава и яркости излучения, а также распределения этих величин по поверхности источника и изменения их во времени. Эти исследования осуществляются на установках, состоящих из трех узлов: спектрального прибора, приемника излучения, измерительного устройства [1, 2].

Цель спектральных измерений – это получение истинного распределения энергии в спектре исследуемого источника – распределения, не искаженного прибором. Для достижения данной цели применяют различные методы. Один из них – использование методов математического моделирования процессов измерений. В качестве концептуальной основы построения математической модели линейного измерительного устройства (тракта) в работе рассматривается операторное соотношение:

$$u = Av,\ u \in U,\ v \in V \tag{1}$$

с линейным оператором A, действующим на гильбертовых пространствах U и V.

1. Математическое моделирование измерительного тракта. Содержательным наполнением оператора A в оптических исследованиях является его интегральное представление:

$$Av \equiv \int_a^b K(x,s)v(s)\,ds, \quad x \in [c,d], \qquad (2)$$

где $K(x,s)-$ подынтегральная функция такая, что $K(x,s) \in L_2([a,b]\times[c,d])$.

Трактовка соотношения (1) зависит от того, какой из двух элементов u или v является известным и какой – искомым. Когда заданная квадратично-интегрируемая функция $v(t) \in L_2(-\infty,\infty)$ является функцией времени и ядро $K(\upsilon,t) \equiv \exp(-i\,2\pi\upsilon t)$ – ядро Фурье, то операторное соотношение (1) представляет собой интегральное преобразование Фурье:

$$Av \equiv \Phi\{v(t)\} \equiv u(\upsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} v(t)\exp(-i\,2\pi\upsilon\, t)dt, \qquad (3)$$

которое идентифицирует частоты и амплитуды тех комплексных синусоид (экспонент), на которые разлагается $v(t)$, трактуемая как некоторое произвольное колебание. Это преобразование имеет установившуюся интерпретацию как спектр сигнала. Абсолютная величина $|u(\upsilon)|$, получающейся в результате комплекснозначной функции представляет амплитуды соответствующих частот, в то время как фазовые сдвиги получаются как аргумент

$$(-i\ln\left(u(\upsilon)/\,|u(\upsilon)|\right)) = arctg\left[\frac{\operatorname{Im} u(\upsilon)}{\operatorname{Re} u(\upsilon)}\right]$$

этой комплекснозначной функции. Такое рассмотрение сводит измерение спектра к нахождению амплитуд и фаз комплекснозначной функции $u(^3)$, описывающей спектр сигнала $v(t)$. Для наглядного представления в качестве простейшего физического аналога интегрального преобразования (3) можно привести прохождение сквозь призму солнечного луча, разложенного на спектр (рис. 1) [3].

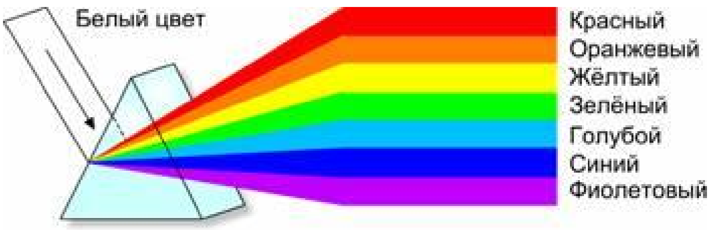

РИС. 1

В силу различных причин интенсивность солнечного луча на входе в призму меняется во времени. На выходе из призмы свет разделяется в пространстве на отдельные «чистые» цвета, или частоты. В этом спектре каждой частоте соответствует своя средняя амплитуда, так что интенсивность как функция от времени трансформировалась в функциональную зависимость амплитуды от частоты (рис. 2). Призма в этом примере оказалась физическим воплощением оператора Фурье.

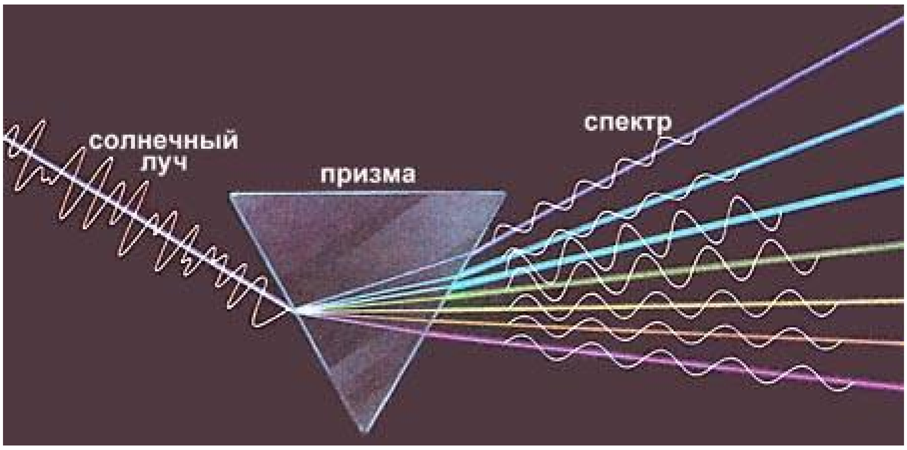

РИС. 2

С вычислительной точки зрения построение квадратурных формул для интеграла (3) от быстроосцилирующих функций представляет серьезную проблему [4]. Иная ситуация с трактовкой соотношения (1) создается в случае, когда известной (или заданной) функцией является $u(x) \in L_2[c,d]$, а искомой – $v(s) \in L_2[a,b]$. Важнейшим этапом исследования в этом случае соотношения (1) является определение компактности (вполне непрерывности) оператора A. Достаточным, но не необходимым условием компактности оператора (2) является соблюдение неравенства [5]:

$$\int_c^d \int_a^b |K(x,s)|^2 \, dx\, ds < \infty . \tag{4}$$

При соблюдении условия (4) можно утверждать, что уравнение:

$$Av \equiv \int_a^b K(x,s) v(s)\, ds = u(x), \quad x \in [c,d] \tag{5}$$

есть интегральное уравнение Фредгольма первого рода, где $A \in \Lambda(V,U)$ линейный компактный оператор, действующий из гильбертова пространства $V = L_2[a,b]$ в гильбертово пространство $U = L_2[c,d]$, $u \in U$ – заданный элемент; $v \in V$ – искомый элемент, $\Lambda(V,U)$ пространство всех ограниченных линейных операторов, определенных на V.

2. Некорректные задачи при моделировании процесса обработки экспериментальных исследований. Компактность оператора A имеет принципиальное значение с точки зрения выбора метода и построения алгоритма решения операторного уравнения первого рода (1), поскольку в бесконечномерном пространстве V компактный оператор A не может иметь ограниченного обратного оператора A^{-1} в пространстве U [5]. Это означает, что формальное обращение (5) или попытка поиска решения задачи (1) в виде $v = A^{-1}u_\delta$ не приводят к удовлетворительным результатам в условиях реального эксперимента, поскольку бесконечно малые вариации наблюдаемых данных $(u_\delta = u + \delta u)$, связанные с экспериментальной процедурой, приводят к сколь угодно большим отклонениям в реконструируемой функции $v(s)$. Таким образом, решение задачи (5) неустойчиво, а задача является некорректно поставленной по Адамару [6 – 9]. Приведенные рассуждения об операторном уравнении (1) неизбежно связаны с вопросом о существовании обратного оператора Φ^{-1}в интегральном преобразовании Фурье. Ответ на этот вопрос положительный, поскольку хорошо известна формула обратного преобразования Фурье:

$$A^{-1}u \equiv \Phi^{-1}\{u(\upsilon)\} \equiv v(t) = \int_{-\infty}^{\infty} u(\upsilon)\exp(i\,2\pi\upsilon\, t)\,d\upsilon.$$

В этом нет противоречия, поскольку оператор Фурье является неограниченным и условие (4) не соблюдается:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\exp(-i\,2\pi\upsilon\, t)|^2\, dt\, d\upsilon = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} 1 dt\, d\upsilon = \infty.$$

Как отмечалось выше при проведении спектральных измерений основная задача состоит в получении распределения энергии в спектре исследуемого источника с минимальными погрешностями, вносимыми прибором. В тех случаях, когда инструментальные искажения существенны, задача сводится к нахождению функции $v(s)$ по известной аппаратной функции $K(x,s)$ и регистрируемой функции $u_\delta(x)$, т. е. к решению линейного интегрального уравнения Фредгольма первого рода

$$\int_a^b K(x,s)v(s)\,ds = u_\delta(x), \quad x \in [c,d], \tag{6}$$

где $K(x,s)-$ аппаратная функция и $u_\delta = u + \delta u.$

Нередко аппаратную функцию определяют экспериментальным путем. Так, аппаратная функция оптического спектрометра может быть измерена с достаточно большой точностью, если для освещения входной щели использовать излучение с выхода другого спектрометра с известной аппаратной функцией, на 1 – 2 порядка меньшей ширины, чем у данного. Также можно использовать источник с узкой спектральной линией, в окрестностях которой перестраивается (по длинам волн, частотам или обратным сантиметрам) спектрометр с измеряемой аппаратной функцией. Рассчитанная или измеренная аппаратная функция реальных приборов на практике аппроксимируется с помощью известных функций.

3. Расширение набора известных аппаратных функций. Один из теоретических методов построения аппаратных функций в спектроскопии был предложен в [10]. В основе метода принята идея использования в качестве аппаратных функций (ядер уравнения (6)) множества функций, образующих дельта-образные последовательности. Правомочность такого подхода обоснована сопоставлением множества используемых в спектроскопии аппаратных функций и импульсных функций. Такой подход позволил включить в число аппаратных функций ряд новых функций, в частности, функцию «шапочка».

Приведем примеры некоторых ядер уравнений, которые наиболее часто реализуются в спектроскопии [10, 11] и образуют дельта-образные последовательности. Ограничимся рассмотрением аппаратных функций, которые зависят от разности аргументов, т. е. $K(x,s) \equiv K(x-s)$.

1. Простейшим ядром уравнения (6) является так называемая щелеобразная аппаратная функция:

$$K_1(x) = \chi_-\left(1/4 - x^2/a^2\right)a^{-1}, \quad (7)$$

где $\chi_-(x) = \begin{cases} 1 \text{ при } x \ge 0, \\ 0 \text{ при } x < 0 \end{cases}$ – асимметричная функция Хевисайда, $a -$ ширина изображения щели.

Щелеобразная аппаратная функция используется в случае широкой щели, освещенной монохроматическим светом, когда ширина ее геометрического изображения во много раз превышает ширину изображения нулевого дифракционного максимума, дифракцией и аберрациями можно пренебречь, и освещенность в фокальной плоскости постоянна по всему изображению щели.

Графическое представление ядра $K_1(x)$ (7) показано на рис. 3 с шириной изображения щели $a = 0.5$. Следует отметить, что функция $K_1(x)$ претерпевает разрыв первого рода при $x = \pm a/2$.

График Фурье-образа $F_1(\omega)$ ядра $K_1(x)$, определяемого выражением

$$F_1(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_1(x) e^{-i\omega x} dx = \frac{\sin(a\omega/2)}{a\omega/2}, \quad (8)$$

показан на рис. 4.

2. Следующим достаточно простым ядром уравнения (6) можно назвать треугольную аппаратную функцию:

$$K_2(x) = \chi_-\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)\left(1 - \frac{|x|}{a}\right)\frac{1}{a}, \quad (9)$$

график ее показан на рис. 5.

Фурье-образ данного ядра (рис. 6) – это простой квадрат Фурье-образа щелеобразной аппаратной функции, т. е.

$$F_2(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_2(x) e^{-i\omega x} d\,x = \left(\frac{\sin(a\,\omega/2)}{a\,\omega/2} \right)^2 . \qquad (10)$$

3. Теоретический анализ формулы (10) и многочисленные экспериментальные исследования позволили сделать заключение о целесообразности использования в качестве аппаратной функции аналога выражения (10).

Дело в том, что в достаточно совершенных приборах аппаратная функция почти целиком определяется дифракцией на апертурной диафрагме. Если (как это обычно бывает в спектральных приборах) апертурная диафрагма прямоугольна, то [12]

$$K_3(x) = \left(\frac{\sin(\pi\,x/a_0)}{\pi\,x/a_0} \right)^2 \frac{1}{a_0}, \qquad (11)$$

причем полуширина аппаратной функции определяется соотношением $a = 0.88589\,a_0$. Аппаратная функция (11) носит название дифракционной (рис. 7), а ее Фурье-образ есть, разумеется, треугольная функция (рис. 8), $a_0 = 0.5$:

$$F_3(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_3(x) e^{-i\omega x} d\,x = \chi_{-}\left(\frac{4\pi^2}{a_0^2} - \omega^2 \right) \left(1 - \frac{a_0\,|\omega|}{2\pi} \right). \qquad (12)$$

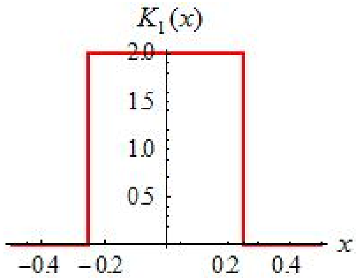

РИС. 3

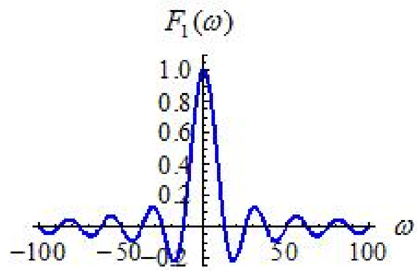

РИС. 4

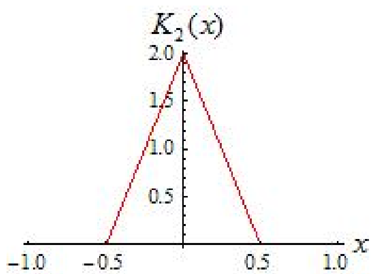

РИС. 5

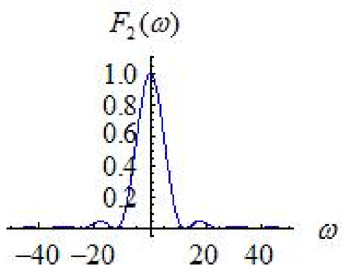

РИС. 6

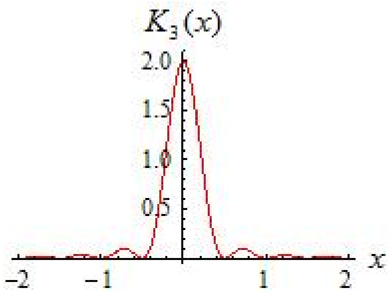

РИС. 7

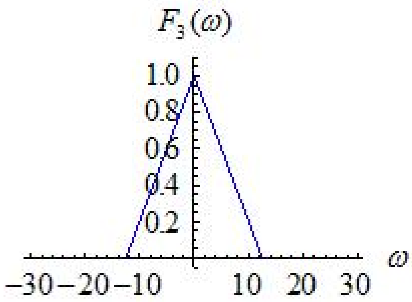

РИС. 8

4. По аналогии с внедрением в практику экспериментальных исследований ядра (11) в спектроскопии используется аппаратная функция, сходная с (8), или функция Дирихле:

$$K_4(x) = \frac{\sin(\pi x/\alpha)}{\pi x}. \tag{13}$$

Одним из приборов с существенно увеличенным геометрическим фактором является спектрометр с интерференционной селективной амплитудной модуляцией. Отличительной особенностью этого спектрометра является тот факт, что при весьма сложной конструкции он имеет достаточно простую аппаратную функцию (13) (рис. 9), $\alpha = 0.5$.

График Фурье-образа $F_4(\omega)$ функции Дирихле:

$$F_4(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_4(x) e^{-i\omega x} d\, x = \chi_-\left(\pi^2 - \alpha^2 \omega^2\right), \tag{14}$$

показан на рис. 10.

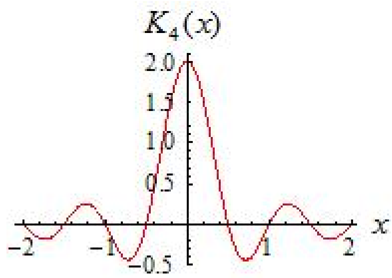

РИС. 9

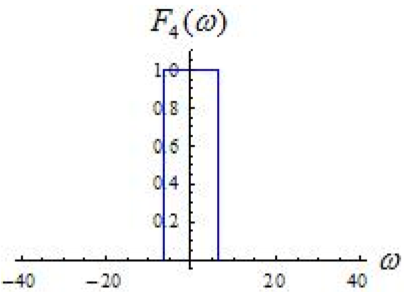

РИС. 10

5. Наиболее распространенным ядром уравнения (6) является функция Гаусса (рис. 11):

$$K_5(x) = \frac{2}{a}\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left(-4\ln 2\frac{x^2}{a^2}\right). \tag{15}$$

В качестве аппаратной эта функция применяется во многих случаях, когда дифракционные и аберрационные искажения незначительны.

Замечательным свойством ядра уравнения (6) в виде функции Гаусса является то обстоятельство, что ее Фурье-образ есть также функция Гаусса (рис. 12), $a = \sqrt{\dfrac{\ln 2}{\pi}}$:

$$F_5(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_5(x) e^{-i\omega x} d\,x = \exp\left(-\frac{a^2\omega^2}{16\ln 2}\right). \quad (16)$$

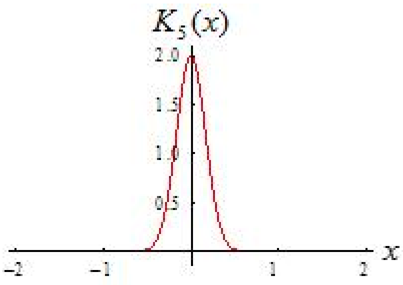

РИС. 11

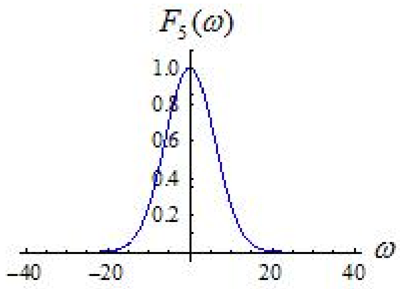

РИС. 12

6. От ядра в виде функции Гаусса (15) вполне логично перейти к рассмотрению ядра уравнения (6) в виде экспоненциальной функции (рис. 13):

$$K_6(x) = \frac{\ln 2}{a} \exp\left(-2\ln 2 \frac{|x|}{a}\right). \quad (17)$$

График Фурье-образа $F_6(\omega)$ экспоненциальной функции:

$$F_6(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_6(x) e^{-i\omega x} d\,x = \frac{1}{1 + \left(\dfrac{a\,\omega}{2\ln 2}\right)^2} \quad (18)$$

показан на рис. 14.

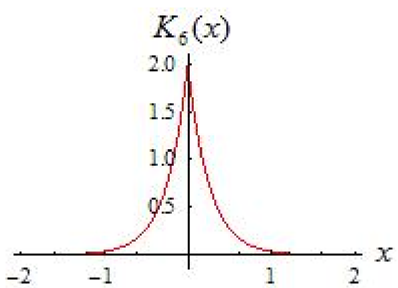

РИС. 13

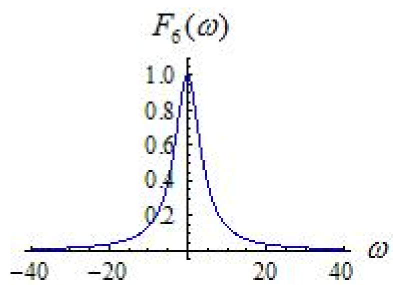

РИС. 14

7. От функции (18) вполне естественным является переход к ядру в виде функции Лоренца или, как определяют ее физики, дисперсионной аппаратной функции (рис. 15), $a=\frac{1}{\pi}$:

$$K_7(x)=\frac{a/2\pi}{x^2+(a/2)^2}. \qquad (19)$$

Аппаратные функции такого вида используют для спектрографов малой и средней дисперсии. Очевидно, ее Фурье-образ есть экспоненциальная функция (рис. 16):

$$F_7(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}K_7(x)e^{-i\omega x}d\,x=\exp\left(-\frac{a\,|\omega|}{2}\right). \qquad (20)$$

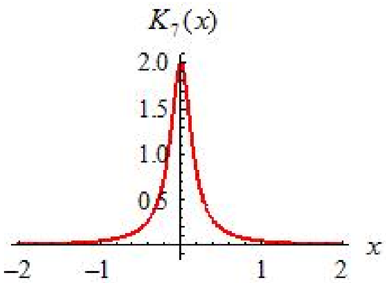

РИС. 15

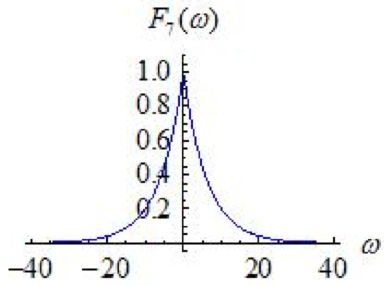

РИС. 16

8. Пополнить перечень ядер интегральных уравнений первого рода в оптических экспериментальных исследованиях можно функцией Стильтьеса (рис. 17), $a=\frac{1}{2\pi}$:

$$K_8(x)=\frac{2}{\pi a}\,\frac{1}{e^{x/a}+e^{-x/a}}=\frac{1}{\pi a}ch^{-1}\frac{x}{a}. \qquad (21)$$

Интересная особенность этого ядра заключается в том, что его Фурье-образ является также функцией Стильтьеса (рис. 18):

$$F_8(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}K_8(x)e^{-i\omega x}d\,x=-\,ch^{-1}\frac{\pi a\,\omega}{2}. \qquad (22)$$

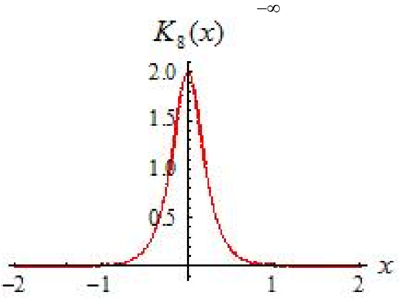

РИС. 17

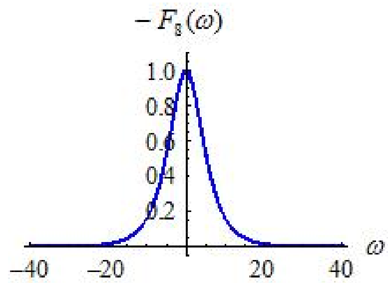

РИС. 18

9. Рассмотренные ядра интегрального уравнения (6) используются в качестве традиционных аппаратных функций и обладают общим характерным свойством – Фурье-образ каждой из них может быть представлен в аналитическом виде. Сравнительно недавно в практику оптических экспериментальных исследований было внедрено ядро типа функции «шапочка» (рис. 19):

$$K_9(x) = \chi_-(a^2 - x^2)\, C \exp[-a^2/(a^2 - x^2)]. \qquad (23)$$

Относительно ядра $K_9(x)$ следует отметить, что наряду с финитностью ($\mathrm{supp}\ K_9(x) = (-a, a)$), бесконечной дифференцируемостью ($K_9 \in C^{(\infty)}(-a, a)$), принадлежностью к множеству импульсных функций $\lim\limits_{a \to +0} \int K_9(a, s)\varphi(s)\, ds = \varphi(0)$) данная функция характеризуется также тем, что ее Фурье-образ нельзя представить в аналитическом виде и функция $F_9(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} K_9(x) e^{-i\omega x} d\,x$ имеет счетное множество нулей (рис. 20).

$$C = \left(2\int\limits_0^a \exp[-a^2/(a^2 - x^2)]dx \right)^{-1}, \quad a = 0.5,\ C = 4.50457.$$

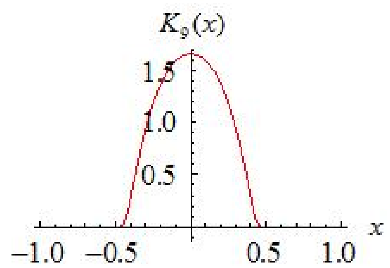

РИС. 19

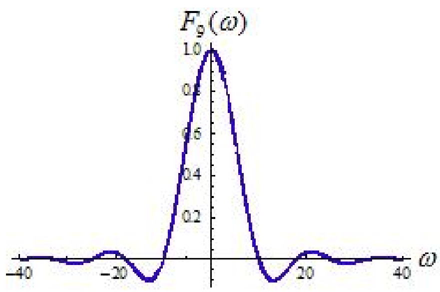

РИС. 20

10. Большие возможности в подборе ядра интегрального уравнения первого рода в оптических экспериментальных исследованиях открываются при использовании сверток рассмотренных аппаратных функций. В качестве примера можно привести свертку функции «шапочка» (23) и функции Лоренца (19):

$$K_{10}(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} K_9(s) K_7(x - s)\, ds =$$

$$= \frac{a_1 C}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_-(a_0^2 - s^2)\exp[-a_0^2/(a_0^2 - s^2)]}{(x - s)^2 + (a_1/2)^2} d\,s = \frac{a_1 C}{2\pi} \int\limits_{-a_0}^{a_0} \frac{\exp[-a_0^2/(a_0^2 - s^2)]}{(x - s)^2 + (a_1/2)^2} d\,s,$$

$$x \in (-\infty, \infty). \qquad (24)$$

На рис. 21 показаны графики функции «шапочка» $K_9(x)$ (23) $(K_9(0) = 1.65714)$, функции Лоренца $K_7(x)$ (19) $(K_7(0) = 2)$ и график свертки этих функций $K_{10}(x)$ (24) $(K_{10}(0) = 1.09737)$.

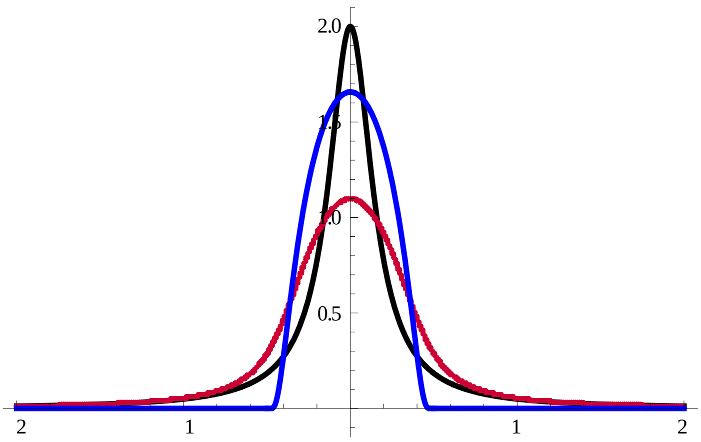

РИС. 21

Выводы. Следует отметить, что проблема аппроксимации экспериментально полученной аппаратной функции $u(x)$ сверткой двух функций, одна из которых априори известна (например, $K_9(x)$), сводится в общем случае к решению некорректно поставленной задачи, а именно – к решению линейного интегрального уравнения Фредгольма первого рода (6) относительно функции $v(s)$. Пример решения такого уравнения с ядром $K_9(x)$ имеется в [13].

О.Ю. Боярчук

ПРО РОЗШИРЕННЯ МНОЖИНИ АПАРАТНИХ ФУНКЦІЙ

Розглядаються підходи до розширення набору апаратних функцій у контексті задачі математичної інтерпретації експериментальних спектроскопічних досліджень. Запропоновані нові апаратні функції із числа функцій, що формують дельта-подібні послідовності, зокрема утворені шляхом згортки відомих функцій.

O.Yu. Boiarchuk

EXPANSION OF THE APPARATUS FUNCTIONS SET

The article focuses on methods of expanding the list of apparatus functions in the context of the problem of mathematical interpretation of spectroscopic experimental results. The new apparatus functions are proposed from the set of functions that form delta-shaped sequences, as well as those that are constructed as a convolution of existing functions.

1. *Мирошников М.М.* Теоретические основы оптико-электронных приборов, 2 изд. – Л.; 1983.
2. *Никитин В.А.* Теоретические основы методологии прецизионной спектрофотометрии. – Л.; 1991.
3. *Брейсуэлл Р.Н.* Преобразование Фурье // В мире науки. – 1989. – № 8. – С. 48 – 56.
4. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы, 7-е изд. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2013. – 636 с.
5. *Колмогоров А.Н., Фомин С.В.* Элементы теории функций и функционального анализа. – М.: Наука, 1972. – 496 с.
6. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1966.
7. *Верлань А.Ф., Сизиков В.С.* Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Спр. пособие. – Киев: Наук. думка, 1986. – 544 с.
8. *Васин В.В., Агеев А.Л.* Некорректные задачи с априорной информацией. – Екатеринбург: Уральская издательская фирма «Наука», 1993. – 263 с.
9. *Сизиков В.С.* Обратные прикладные задачи и MatLab: Учеб. пособие. – СПб.: Лань, 2011. – 256 с.
10. *Старков В.Н.* Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации. – Киев. – Наук. думка, 2002. – 264 с.
11. *Старков В.Н., Боярчук А.Ю.* Ядра интегральных уравнений первого рода в оптических экспериментальных исследованиях // Питання оптимізації обчислень (ПОО–XXXV). – К.: Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова, 2010. – С. 339 – 344.
12. *Раутиан С.Г.* Реальные спектральные приборы // УФН. – 1958. – **66**, вып. 3. – С. 475 – 517.
13. *Бродин М.С., Старков В.Н.* Математическая интерпретация результатов лазерного эксперимента методами вычислительной физики // Геофизический журнал. – 2007. – **29**, № 4. – С. 3 – 12.

Получено 29.10.2015

Об авторе:

Боярчук Александр Юрьевич,
младший научный сотрудник
Института физики НАН Украины.