УДК 535.338.3; 513.6 doi: 10.17586/2226-1494-2020-20-3-353-363

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ СПЕКТРОВ, ИЗЛУЧАЕМЫХ ВЕЩЕСТВОМ В ГЛУБОКОМ ВАКУУМЕ, С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМА ИНТЕГРАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ

А.А. Александрова, В.С. Сизиков

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация
Адрес для переписки: sizikov2000@mail.ru

Информация о статье
Поступила в редакцию 20.04.20, принята к печати 18.05.20
Язык статьи — русский

Ссылка для цитирования: Александрова А.А., Сизиков В.С. Восстановление дискретных спектров, излучаемых веществом в глубоком вакууме, с помощью алгоритма интегральной аппроксимации // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2020. Т. 20. № 3. С. 353–363. doi: 10.17586/2226-1494-2020-20-3-353-363

Аннотация

Предмет исследования. Рассматривается актуальная обратная задача спектроскопии – восстановление дискретного (линейчатого) спектра по измеренному непрерывному спектру и аппаратной функции спектрометра при наличии помех. **Метод.** Задача сводится к решению системы линейно-нелинейных уравнений относительно интенсивностей линий, входящих линейно, и частот линий, входящих нелинейно в спектр. Для решения системы линейно-нелинейных уравнений развивается алгоритм интегральной аппроксимации, сочетающий решение линейного интегрального уравнения и системы линейных алгебраических уравнений без решения нелинейных уравнений. **Основной результат.** Предложенное решение данной задачи позволяет определить количество линий в спектре и их параметры, и это подтверждает решение численных примеров. **Практическая значимость.** Предложенный алгоритм дает возможность повысить разрешающую способность спектрометра (разрешить близкие линии, выделить из шума слабые линии и т. д.) путем математико-компьютерной обработки дискретного спектра.

Ключевые слова
обратная задача спектроскопии, дискретный (линейчатый) спектр, глубокий вакуум, система линейно-нелинейных уравнений, интенсивности (амплитуды) и часто́ты линий, алгоритм интегральной аппроксимации, разрешающая способность спектрометра

Благодарность
Работа поддержана Правительством Российской Федерации (грант 08-08).

doi: 10.17586/2226-1494-2020-20-3-353-363

RECOVERY OF DISCRETE SPECTRA RADIATED BY SUBSTANCE IN DEEP VACUUM USING INTEGRAL APPROXIMATION ALGORITHM

A.A. Aleksandrova, V.S. Sizikov

ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation
Corresponding author: sizikov2000@mail.ru

Article info
Received 20.04.20, accepted 18.05.20
Article in Russian

For citation: Aleksandrova A.A., Sizikov V.S. Recovery of discrete spectra radiated by substance in deep vacuum using integral approximation algorithm. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2020, vol. 20, no. 3, pp. 353–363 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2020-20-3-353-363

Abstract

Subject of Research. The topical spectroscopy inverse problem is considered: the recovery of a discrete (line) spectrum from the measured continuous spectrum and the spectrometer response (instrument, hardware, spread) function in the presence of noise. **Method.** The problem is reduced to solving a system of linear-nonlinear equations with respect to the intensities of lines entering linearly and the frequencies of lines entering nonlinearly in the spectrum. To solve the system of linear-nonlinear equations, an integral approximation algorithm is developed that combines the solution of a linear integral equation and a system of linear algebraic equations without solving non-linear equations. **Main Results.** The proposed solution makes it possible to determine the number of lines in the spectrum and their parameters and is confirmed by the solution of numerical examples. **Practical Relevance.** The proposed algorithm provides the increase of spectrometer resolution (resolve close lines and isolate weak lines from noise) by applying mathematical-computer processing of the discrete spectrum.

Keywords
spectroscopy inverse problem, discrete (line) spectrum, deep vacuum, system of linear nonlinear equations, intensities (amplitudes) and frequencies of lines, integral approximation algorithm, spectrometer resolution

Acknowledgements
This work was supported by the Government of the Russian Federation (Grant 08-08).

Введение

Спектральный анализ широко используется для качественного и количественного исследования веществ [1–6]. Под *спектром* $u(\nu)$ будем подразумевать зависимость интенсивности излучения u от частоты ν. Спектр бывает, как известно [6], *непрерывный* (сплошной), *дискретный* (линейчатый), *полосатый* и т. д. Для разложения излучения в спектр используются различные *спектральные приборы* [2].

Чтобы повысить разрешающую способность спектрометра, а значит, и качество спектрального анализа, можно использовать физико-технико-коммерческий путь (использовать более совершенный и дорогой спектрометр) или использовать математико-компьютерный путь (выполнить математическую обработку результатов измерений).

Цель данной работы — развитие методики обработки дискретных спектров (решения обратной задачи спектроскопии), а именно, восстановления дискретного спектра по измеренному (заглаженному и зашумленному) спектру и известной аппаратной функции спектрометра путем решения системы линейно-нелинейных уравнений (СЛНУ) (в которую часть неизвестных входит линейно, а часть — нелинейно) алгоритмом интегральной аппроксимации с использованием системы MATLAB. Дискретный (линейчатый) спектр — это спектр, состоящий из дискретных (почти монохроматических) линий. Такой спектр имеют, например, рассеянные межзвездные туманности и низкотемпературная, в частности, газоразрядная плазма, и вообще вещество в состоянии глубокого вакуума.

В статье [7] изложен метод Фурье само-деконволюции разрешения спектральных перекрывающихся линий, причем не используется аппаратная функция спектрометра. В данной же работе, как и в [5, 6, 8–11], решается задача устранения сглаживающего влияния аппаратной функции спектрометра на измеренный спектр.

Постановка задачи

Измеренный спектрометром (например, интерферометром Фабри–Перо) *спектр* $u(\nu)$ (где ν — частота) обычно отличается от *истинного спектра* $z(\nu)$, во-первых, большей сглаженностью: неразрешены близкие линии — результат воздействия аппаратной функции спектрального прибора [1, 4–6, 8, 9], а, во-вторых, зашумленностью (слабые линии «тонут» в шуме – результат случайных погрешностей измерений [6, 9]).

Дадим следующее определение аппаратной функции (ср. [1, 5, 6, 8, 9]).

Аппаратной функцией (АФ) — спектральной чувствительностью, функцией пропускания, частотной характеристикой — спектрометра $K(\nu, \nu')$ называется реакция спектрометра (в виде измеренной интенсивности) на дискретную линию единичной интенсивности и частоты ν' при настройке спектрометра на частоту ν.

Фиксируя ν и изменяя ν', получим некоторую зависимость $K(\nu, \nu')$ в виде кривой (рис. 1). Аналогичные кривые получим для других значений ν. В результате получим двумерную функцию $K(\nu, \nu')$. Чем шире $K(\nu, \nu')$, тем более глаженным будет измеренный спектр $u(\nu)$ по сравнению с истинным спектром $z(\nu)$.

В случае *дискретного спектра* искомый спектр $z(\nu)$ состоит из отдельных практически монохроматических линий, характеризуемых их частотами и интенсивностями (амплитудами). Задача обработки дискретного спектра описывается следующим соотношением [5, 6, 9–11]:

$$Az = \sum_{j=1}^{n} K(\nu_i, \nu_j')z_j + F = \tilde{u}(\nu_i),\ i = \overline{1, m},\ c \le \nu_i \le d, \qquad (1)$$

где z_j — интенсивность (амплитуда) j-ой линии; ν_j' — ее частота; n — число линий; ν_i — частота настройки спектрометра; m — число таких отсчетов; $[c, d]$ — диапазон частот; $\tilde{u}(\nu_i) = u(\nu_i) + \delta u(\nu_i)$, δu — случайная компонента шума измерений; F — детерминированная компонента шума (фон); A — линейно-нелинейный оператор.

В (1) известны (или заданы) $\tilde{u}(\nu_i)$, $K(\nu, \nu')$, ν_i, c, d, m, а искомыми являются z_j, ν_j', n, F. Соотношения (1) образуют СЛНУ, поскольку часть неизвестных (z_j и F) входит линейно, а часть (ν_j') — нелинейно.

Система (1) может рассматриваться и как система нелинейных уравнений (СНУ). В этом случае ее в прин-

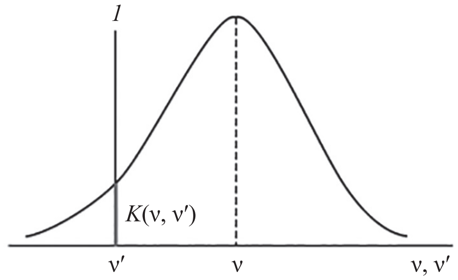

Рис. 1. Зависимость $K(\nu, \nu')$ при некотором фиксированном значении ν (*1* — линия единичной интенсивности)

ципе можно решать известными методами решения СНУ (без ограничений и с ограничениями на решение): методом Ньютона–Канторовича, градиента, хорд, проекций градиента, оврагов и др. [12, 13]. Однако эти методы не учитывают специфику системы (1). В результате потребуется повышенное компьютерное время и память для ее решения, повысится вероятность появления ложных линий — корней нелинейной системы и т. д., и остается открытым вопрос о числе спектральных линий n.

Для решения системы (1) можно воспользоваться следующими методами, предназначенными для решения СЛНУ с учетом ее специфики:

— методом Прони [14], однако он подходит лишь для СЛНУ с матрицей Вандермонда, когда $K(\nu_i, \nu_j')$ изменяется вдоль строки по геометрической прогрессии, а матрица в (1) таковой, вообще говоря, не является;

— алгоритмом Пиблза–Берковица [15], основанным на представлении АФ рядом Тейлора, но он оказался весьма сложным и неточным при пробных вычислениях;

— алгоритмом Фальковича–Коновалова [16], но это очень громоздкий алгоритм;

— так называемым методом переменных проекций (the variable projection method) Голуба–Муллен–Хегланда [17–19], в котором также решается СЛНУ типа (1), однако для отыскания частот в нем используется нелинейный метод (типа Гаусса–Ньютона).

Рассмотрим данные методы более подробно. В [18] СЛНУ (1) решается следующим алгоритмом. Сначала задаются некоторые значения частот ν_j' и ν_i, а амплитуды z_j определяются методом псевдоинверсии Мура–Пенроуза: $z = A^+ \tilde{u}$. Затем значения частот ν_j' уточняются путем решения задачи методом наименьших квадратов (МНК) с использованием методов Гаусса–Ньютона или Левенберга–Марквардта. Таким образом, данная задача решается как линейно-нелинейная. К методу переменных проекций Голуба–Муллен–Хегланда вернемся в конце статьи.

Алгоритм интегральной аппроксимации

Для эффективного решения СЛНУ (1), учитывающего ее специфику, воспользуемся *алгоритмом интегральной аппроксимации* [5, 6, 10, 11], который учитывает особенности этой системы и который уже продемонстрировал свою эффективность в обработке сигналов [10, 11] и частично в спектроскопии [6, 20], где требует дальнейшего развития. Идея алгоритма состоит в следующем.

Часто для решения интегральных уравнений используется метод квадратур, в котором интеграл аппроксимируется конечной суммой, т. е. непрерывная задача дискретизируется. В алгоритме интегральной аппроксимации (АИА) предлагается использовать обратную операцию, а именно, аппроксимировать СЛНУ интегральным уравнением, т. е. заменить дискретную задачу на непрерывную, а затем решать интегральное уравнение методом квадратур, но на другой, очень частой сетке узлов. Это позволит оценить частóты по абсциссам пиков в решении, используя лишь линейные операции, с точностью, зависящей от мелкого шага дискретизации.

Данный алгоритм выполняется в четыре этапа.

Этап 1. Вместо СЛНУ (1) рассматривается линейное интегральное уравнение (ИУ) Фредгольма I рода [5, 6, 8–11]

$$Az \equiv \int_a^b K(\nu, \nu')z(\nu')d\nu' = \tilde{u}(\nu),\ c \le \nu \le d, \qquad (2)$$

относительно искомой функции $z(\nu')$, где A — линейный интегральный оператор. Полагаем, что вместо точных u и K известны $\tilde{u}$ и $\tilde{K}$ такие, что $\|\tilde{u} - u\| \le \delta$, $\|\tilde{K} - K\| \le \xi$, где δ и ξ — верхние оценки погрешностей правой части u и ядра K.

Справедливо следующее *утверждение* [11].

Если $z(\nu')$ в ИУ (2) есть обобщенная функция, равная сумме δ-функций Дирака вида (ср. [21, p. 91]) $z(\nu') = \sum_{j=1}^{n} z_j\delta(\nu' - \nu_j)$ и $a \to -\infty$, $b \to \infty$, то ИУ (2) преобразуется в СЛНУ (1) (с $F = 0$), т. е. между СЛНУ (1) и ИУ (2) имеется взаимный переход.

Этап 2. Задача решения уравнения (2) является *некорректной* [5, 6, 22–28] (если решать уравнение (2), например, методом квадратур, то в качестве решения получим так называемую «пилу» [6, 24] — крайне неустойчивое решение). Исходя из этого, для его решения необходимо применение устойчивых методов, например, метода регуляризации 0-го порядка Тихонова [6, 22–28]. Согласно нему, вместо ИУ (2) решается следующее ИУ

$$\alpha z_\alpha(\varphi) + \int_a^b R(\varphi, \nu')z_\alpha(\nu')d\nu' = U(\varphi),\ a \le \varphi \le b, \qquad (3)$$

где $\alpha > 0$ — параметр регуляризации, а новое ядро и новая правая часть равны

$$R(\varphi, \nu') = R(\nu', \varphi) = \int_c^d K(\nu, \varphi)K(\nu, \nu')d\nu, \qquad (4)$$

$$U(\varphi) = \int_c^d K(\nu, \varphi)\tilde{u}(\nu)d\nu. \qquad (5)$$

Для решения ИУ (2) можно применить метод квадратур [6, 22–24, 27], заменяя интеграл в (2) конечной суммой и получая систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $Az = \tilde{u}$. При этом квадратурные коэффициенты полагаем равными единице, чтобы СЛАУ $Az = \tilde{u}$ была структурно близка СЛНУ (1). Для устойчивости решения вместо СЛАУ $Az = \tilde{u}$ решаем устойчивую СЛАУ, вытекающую из (3)–(5),

$$(\alpha\mathbf{E} + \mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{z}_\alpha = \mathbf{A}^T\tilde{\mathbf{u}} \qquad (6)$$

с квадратной матрицей $\mathbf{R} = (\alpha\mathbf{E} + \mathbf{A}^T\mathbf{A})$ размера $N \times N$, где N — число дискретных отсчетов по ν'; $\mathbf{E}$ — единичная матрица; $\mathbf{A}$ — матрица $m \times N$ на основе K; $\mathbf{A}^T$ — транспонированная матрица; $\tilde{\mathbf{u}}$ — заданный вектор длиной m (измеренный спектр). Искомыми значениями в СЛАУ (6) являются интенсивности $z_{\alpha j} \equiv z_\alpha(\nu_j')$, $j = \overline{1, N}$, на частой сетке узлов с пониженным шагом дискретизации $h = \Delta\nu' = (b - a)/(N - 1)$.

Важным является вопрос о величине параметра регуляризации α. Традиционный способ выбора α — принцип невязки Морозова [29]. Согласно нему, параметр α выбирается из равенства

$$\|Az_\alpha - \tilde{u}\| = \delta, \tag{7}$$

где $\|Az_\alpha - \tilde{u}\|$ — невязка (discrepancy), $\delta = \|\tilde{u} - u\|$, $\tilde{u}$ — измеренный с шумом спектр, а u — незашумленный измеренный спектр, обычно неизвестный. В качестве u предлагается использовать сглаживающий сплайн, проходящий через зашумленные отсчеты $\tilde{u}$ [26, 30]. Обозначим α_d параметр согласно принципу невязки.

Однако α_d применительно к АИА оказывается завышенным и дает заглаженное решение z_α, поэтому следует выбрать α, значительно меньшее α_d (см. далее пример).

При этом шаг дискретизации h следует полагать как можно меньшим, чтобы число дискретных отсчетов N по ν' было несколько сот, а именно, $N \gg n$, где n — предполагаемое число линий (см. (1)). При этом число дискретных отсчетов m по ν такое же, как в (1), или увеличено за счет использования сплайна. Малость шага дискретизации h по ν' — главное условие в алгоритме.

Заметим, что $N <=> m$ и при любом соотношении N и m метод регуляризации Тихонова дает решение (нормальное псевдорешение) ИУ (3) и СЛАУ (6). Если же $N > m$, как в АИА, то при ограниченном числе измерений m (например, $m \approx 100$) можно получить решение $z_\alpha(\nu')$ на большем числе узлов N (например, $N \approx 400$), а значит, с пониженным шагом $h = \Delta\nu'$. При этом СЛАУ $Az = \tilde{u}$ является недостаточной (число уравнений m меньше числа неизвестных N), но СЛАУ (6) является достаточной (число уравнений и число неизвестных равно N).

В результате будет получено решение $z_\alpha(\nu')$, в котором могут разрешиться близкие линии в виде пиков в решении. При этом могут возникнуть ложные пики–линии и их нужно отфильтровать (см. далее рис. 4 и 5).

В работах [5, 6, 9–11] получена следующая оценка по норме погрешности регуляризованного решения $z_\alpha(\nu')$ уравнения (3):

$$\varepsilon(\alpha) \equiv \|\Delta z_\alpha\| \le \left(\frac{\|A\|}{2\sqrt{\alpha}}\eta + \frac{p\alpha}{p\alpha + 1} \cdot \|z_\alpha\| \right), \tag{8}$$

где $\eta = \delta_{rel} + \xi_{rel}$, причем $\delta_{rel} = \delta/\|u\|$ и $\xi_{rel} = \xi/\|A\|$ — относительные погрешности исходных данных, а параметр p можно оценить путем обработки модельных спектров [9].

Оценим погрешность $\sigma_{\nu_j'}$ частоты ν_j' j-ой линии-пика. Для этого используем разложение в ряд Тейлора решения $z_\alpha(\nu')$ в окрестности пика $\tilde{\nu}_j'$:

$$z_\alpha(\nu') \approx z_\alpha(\tilde{\nu}_j') + \frac{1}{2} z''_\alpha(\tilde{\nu}_j')\Delta_j^2, \tag{9}$$

где $z''_\alpha(\tilde{\nu}_j') = \partial^2 z_\alpha(\nu')/\partial\nu'^2|_{\nu'=\tilde{\nu}_j'}$, $\Delta_j = \nu' - \tilde{\nu}_j' = \sigma_{\nu_j'}$. Заметим, что $z_\alpha'(\tilde{\nu}_j') = 0$ и $z'''_\alpha(\tilde{\nu}_j') \approx 0$, поэтому ряд (9) должен давать хорошее приближение для $z_\alpha(\nu')$ в окрестности j-ой линии. Здесь $\tilde{\nu}_j'$ — приближенное значение частоты j-ой линии, соответствующее некоторому пику в решении $z_\alpha(\nu')$, а ν' — некоторое значение частоты в окрестности $\tilde{\nu}_j'$, в частности точное значение частоты ν_j'. Из (9) получим:

$$(\nu' - \tilde{\nu}_j')^2 \approx \frac{2[z_\alpha(\nu') - z_\alpha(\tilde{\nu}_j')\ ]}{z''_\alpha(\tilde{\nu}_j')} \tag{10}$$

или, используя модули,

$$|\nu' - \tilde{\nu}_j'| \approx \sqrt{\frac{2|z_\alpha(\nu') - z_\alpha(\tilde{\nu}_j')|}{z''_\alpha(\tilde{\nu}_j')}}\,. \tag{11}$$

Однако оценка (10) или (11) погрешности частоты j-ой линии не может быть использована на практике в случае реального (не модельного) спектра, так как содержит неизвестную частоту ν', в частности точное значение частоты ν_j'.

Более конструктивной является оценка погрешности частоты с использованием нормы. Обозначая $\|z_\alpha(\nu') - z_\alpha(\tilde{\nu}_j')\| = \|\Delta z_\alpha\| = \varepsilon(\alpha)$ (оценку по норме регуляризованного решения), получим следующую оценку погрешности частоты ν_j' j-ой линии:

$$\sigma_{\nu_j'} \approx \sqrt{\frac{2\varepsilon(\alpha)}{|z''_\alpha(\tilde{\nu}_j')|}}\,, \tag{12}$$

где $\varepsilon(\alpha)$ выражается формулой (8).

Погрешность $\sigma_{\nu_j'}$ увеличивается также за счет конечности шага дискретизации $h = \Delta\nu'$, с которым решаем ИУ (2) численно, и это добавляет погрешность, приблизительно равную $h/2$. Суммируя погрешности квадратично, получим более полную, чем (12), оценку:

$$\sigma_{\nu_j'} \approx \sqrt{\frac{2\varepsilon(\alpha)}{|z''_\alpha(\tilde{\nu}_j')|} + \left(\frac{h}{2}\right)^2}\,. \tag{13}$$

В (13) $z''_\alpha(\tilde{\nu}_j')$ — оценка второй производной регуляризованного решения $z_\alpha(\nu')$ в j-ом пике. Если $h = \text{const}$, то

$$z''_\alpha(\tilde{\nu}_j') \approx \frac{z_\alpha(\tilde{\nu}_j' - h) - 2z_\alpha(\tilde{\nu}_j') + z_\alpha(\tilde{\nu}_j' + h)}{h^2}\,. \tag{14}$$

Оценка (12)–(14) показывает, что погрешность определения частоты $\sigma_{\nu_j'}$ уменьшается с уменьшением шага дискретизации $h = \Delta\nu'$ и с ростом второй производной $z''_\alpha(\tilde{\nu}_j')$, которая растет с уменьшением параметра регуляризации α. Это означает, что решать ИУ (3) нужно с малым шагом h и с пониженным параметром регуляризации α.

Если обрабатывается *модельный спектр* с известными (заданными) точными интенсивностями z_j и частотами ν_j' линий ($j = \overline{1, n}$), то можно использовать следующие соотношения для оценки погрешностей параметров линий. Среднеквадратическая погрешность (СКО, RMSE) амплитуд линий равна (ср. [28]): $\varepsilon = \|\tilde{z} - z\|_2$, аналогичная погрешность частот линий: $\xi = \|\tilde{\nu}' - \nu'\|_2$.

Однако эти формулы неудобны, так как значения ε и ξ зависят от системы единиц. Более удобны формулы, дающие относительные СКО (relative RMSE): $\varepsilon_{rel} = \|\tilde{z} - z\|_2/\|z\|_2$, $\xi_{rel} = \|\tilde{\nu}' - \nu'\|_2/\|\nu'\|_2$.

В приведенных формулах $\tilde{z}$ и $\tilde{\nu}'$ — приближенные интенсивности (амплитуды) и частóты, а z_j и ν_j' — их точные значения. Суммарное СКО по интенсивностям и частотам можно вычислить как относительное суммарное СКО:

$$\zeta_{\text{rel}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{rel}}^2 + \xi_{\text{rel}}^2}. \quad (15)$$

В нижеследующем примере использованы относительные СКО ε_{rel}, ξ_{rel} и ζ_{rel}.

Этап 3. В полученном решении $z_\alpha(\nu')$ выделяется (на основе дополнительной информации) ограниченное количество L наиболее мощных пиков (максимумов), где L задается (с запасом) так, чтобы $L \geq n$, но $L \ll N$, где n — предполагаемое число линий[1]. Фиксируются частóты наиболее мощных максимумов $\tilde{\nu}_j'$, $j = \overline{1, L}$.

Этап 4. Решается уточняющая СЛАУ

$$\sum_{j=1}^{L} K(\nu_i, \tilde{\nu}_j')\tilde{z}_j + \tilde{F} = \tilde{u}(\nu_i),\ i = \overline{1, m},\ c \leq \nu_i \leq d. \quad (16)$$

Это система большого числа (m) уравнений и малого числа (L) неизвестных $\tilde{z}_j$, т. е. переопределенная СЛАУ. Обычно $m \sim 10^2$, а $L \sim 10^1$. Такую СЛАУ (16) следует решать с помощью МНК Гаусса без регуляризации относительно L интенсивностей линий $\tilde{z}_j$, а также фона $\tilde{F}$ (при уже найденных $\tilde{\nu}_j'$ на этапах 2 и 3). В МНК Гаусса получается небольшая СЛАУ с квадратной матрицей порядка $L + 1$.

Оставляются лишь те $\tilde{z}_j$ и $\tilde{F}$, для которых справедливо:

$$\tilde{z}_j \geq Z,\ j = \overline{1, k},\ \tilde{F} > 0, \quad (17)$$

где $Z > 0$ — некоторый априори заданный барьер, а $k \leq L$ — количество $\tilde{z}_j$, преодолевших барьер Z. При этом барьер Z можно определить, используя соотношение [10, 11]:

$$Z = \delta\sqrt{-2\ln P_{\text{fa}}}, \quad (18)$$

где $P_{\text{fa}} \in [0, 1]$ — задаваемая условная вероятность ложной тревоги (fa). Впрочем, обычно ложные максимумы принимают отрицательные значения или значения, близкие к нулю, поэтому нет необходимости использовать соотношения (17), (18).

Как итог изложения алгоритма интегральной аппроксимации, приведем его в виде source code (сравните с pseudo-code).

Этап 1. Вместо СЛНУ (1) рассматривается ИУ (2).

Input: $\tilde{u}(\nu)$, n, m, c, d, $K(\nu, \nu')$, a, b, h, δ, ξ, N.

Этап 2. ИУ (2) решается методом регуляризации Тихонова согласно (3)–(5) с использованием метода квадратур с пониженным шагом дискретизации h. Получается СЛАУ с m уравнениями относительно $N \gg n$ неизвестных $z_{\alpha j} \equiv z_\alpha(\tilde{\nu}_j')$. Параметр регуляризации α выбирается существенно меньше α_{d} (по принципу невязки Морозова согласно (7)). Оцениваются погрешности регуляризованного решения $z_\alpha(\nu')$ согласно (8) и определения частот согласно (13) или (15).

Output: $z_\alpha(\nu')$.

Этап 3. В решении $z_\alpha(\nu')$ выделяются L наибольших пиков (максимумов), причем $L \geq n$, но $L \ll N$.

Output: частóты $\tilde{\nu}_j'$, $j = \overline{1, L}$.

[1] Обычно опытные спектроскописты дают оценки n и L для реального спектра.

Этап 4. Решается уточняющая переопределенная СЛАУ (16) ($L + 1$ неизвестных и $m > L$ уравнений). Оставляются $\tilde{z}_j$ и $\tilde{F}$ согласно (17), (18).

Output: интенсивности линий $\tilde{z}_j$, $j = \overline{1, k}$, фон $\tilde{F}$ и количество линий k.

Достоинством алгоритма является то, что наиболее сложная часть задачи — определение значений нелинейно входящих параметров (частот спектральных линий $\tilde{\nu}_j'$) — решается линейно, а именно, путем решения линейного ИУ (2).

Численные эксперименты

В рамках системы MATLAB разработано программное обеспечение для восстановления дискретных спектров, реализующее алгоритм интегральной аппроксимации. С помощью этого программного обеспечения выполнена обработка следующих спектров.

Примеры с модельными спектрами. В этих примерах, как и в работе [9], полагается, что АФ K спектрометра имеет, вообще говоря, переменную ширину, зависящую от ν, т. е. является неразностной: $K = K(\nu, \nu')$. Это типично для широкополосной спектроскопии [5, 6]. Для характеристики АФ используется $\tau(\nu)$ — полуширина АФ по уровню 0,5, которая, как известно [9], пропорциональна длине волны λ, а значит, обратно пропорциональна частоте: $\tau(\nu) = q/\nu$. Здесь q — некоторый коэффициент, зависящий от спектрометра.

Были рассмотрены следующие АФ (ср. [1, 9, 19, 31]), обусловленные дифракцией, аберрациями, типом щели и характеризуемые их полуширинами $\tau(\nu)$.

1. Щелеобразная, или прямоугольная АФ (определяется только широкой щелью).
2. Треугольная АФ (также при учете только щелевых искажений, являющаяся сверткой двух прямоугольных АФ).
3. Дифракционная АФ Рэлея (когда щель прибора бесконечно узкая и АФ определяется дифракцией на прямоугольной апертурной диафрагме).
4. Гауссова АФ (в случае монохроматоров, когда дифракционные и аберрационные искажения не очень велики) [1, 5, 21, 31, 32].
5. Дисперсионная, или лоренцевая АФ (для спектрографов малой, средней, а иногда и большой дисперсии).
6. Экспоненциальная АФ (фотослоя).
7. АФ Фойхта (свертка гауссовой и дисперсионной АФ).

Использование $\tau(\nu)$ дает возможность сравнивать различные АФ с одинаковыми $\tau(\nu)$. Такое сравнение в работе [9] применительно к непрерывным спектрам показало, что наиболее точные результаты восстановления спектров получаются для дисперсионной и экспоненциальной АФ, а наименее точные — для щелевой и треугольной АФ. Обработка ряда дискретных спектров с различными АФ алгоритмом интегральной аппроксимации подтверждает этот результат.

Продемонстрируем методику на следующем *модельном примере* [6, 10, 11, 20][2].

[2] Этот пример используется авторами в нескольких публикациях [5, 20, 32] как *фантом* (ср. [5, С. 291–294]) для моделирования разных вариантов задачи спектроскопии.

В примере (рис. 2) истинный спектр задавался, как и в работе [20], в виде семи дискретных спектральных линий с амплитудами (в условных единицах): $z_1 = 4{,}4$; $z_2 = 4{,}6$; $z_3 = 1{,}1$; $z_4 = 3{,}2$; $z_5 = 3{,}2$; $z_6 = 2{,}8$; $z_7 = 3{,}6$ и частотами (также в условных единицах): $\nu_1' = 2{,}28$; $\nu_2' = 2{,}36$; $\nu_3' = 2{,}95$; $\nu_4' = 3{,}02$; $\nu_5' = 3{,}56$; $\nu_6' = 3{,}64$; $\nu_7' = 3{,}69$.

АФ спектрометра задавалась в виде следующей частотно-неинвариантной функции — гауссианы, ширина (дисперсия) которой уменьшается с увеличением частоты настройки спектрометра ν (ср. [9, 32]):

$$K(\nu, \nu') = \frac{g}{\sqrt{2\pi}\sigma(\nu)} \exp\left(-\frac{(\nu - \nu')^2}{2\sigma^2(\nu)}\right), \qquad (19)$$

где $\sigma(\nu) = \sigma_0\sqrt{1 - 0{,}16\nu}$, $\sigma_0 = 0{,}05$, $g = 0{,}075$ — нормирующий множитель (все в у.е.). Для каждого реального спектрометра $\sigma(\nu)$, σ_0 и g имеют свои значения. Значение детерминированной компоненты шума (фона) положено равным $F = 0{,}2$, а случайная компонента шума измерений имела среднеквадратическое отклонение (СКО), равное 0,05 (приблизительно 2 %-й шум).

Были положены также: пределы $a = c = 2$, $b = d = 2$ у.е. (см. (2)–(5)); $m = 101$ — число «экспериментальных» отсчетов по ν (см. (1)); $N = 401$ — число отсчетов по ν′ при решении СЛАУ (6); мелкий шаг дискретизации $h = \Delta\nu' = (b - a)/(N - 1)$.

На рис. 2 приведены: истинный дискретный (линейчатый) спектр $z(\nu)$, состоящий из семи линий, измеренный (экспериментальный) спектр без шума $u(\nu)$ и с шумом $\tilde{u}(\nu)$, аппроксимация $\tilde{u}(\nu)$ кубическим сглаживающим сплайном (все длиной $m = 101$), а также АФ спектрометра $K(\nu, \nu')$ согласно формуле (19) на низкой и высокой частотах ν. Видим, что истинный спектр $z(\nu)$ содержит близкие линии (две слева, две посередине и три справа), которые в измеренном спектре $u(\nu)$ не разрешаются.

Применим алгоритм интегральной аппроксимации для восстановления истинного спектра. Сначала решаем ИУ (2) методом регуляризации Тихонова согласно (3)–(5) путем решения СЛАУ (6). Если параметр регуляризации α выбирать с помощью принципа невязки согласно (7), то получим $\alpha = \alpha_d = 10^{-1,1} = 0{,}079$.

Используя спектр $\tilde{u}(\nu)$ длиной $m = 101$, получим несколько регуляризованных решений $z_\alpha(\nu)$ длиной $N = 401$ при $\alpha = \alpha_d$, а также при $\alpha = 10^{-3}$ и $\alpha = 10^{-8}$ (см. рис. 3).

Видим, что при $\alpha = \alpha_d$ и $\alpha = 10^{-3}$ решение получается слишком сглаженным, а при $\alpha = 10^{-8}$, наоборот, слишком неустойчивым (в виде так называемой «пилы» большой амплитуды).

На рис. 4 представлено решение $z_\alpha(\nu)$ при $\alpha = 10^{-6}$ — умеренном значении α. Видим, что разрешение получилось недостаточным (не разрешились две крайние справа линии).

Чтобы повысить разрешение, вместо $\tilde{u}(\nu)$ длиной $m = 101$ использовался кубический сглаживающий сплайн $u_s(\nu)$ длиной $m = 401$, аппроксимирующий измеренный спектр $\tilde{u}(\nu)$ (см. рис. 5).

Используя сплайн $u_s(\nu)$, получено регуляризованное решение $z_\alpha(\nu)$ при $\alpha = 10^{-6}$ (рис. 5). Видно, что несмотря на то, что на рис. 5 длина решения такая же, как на рис. 4 ($N = 401$), разрешение значительно улучшилось. Это связано с тем, что увеличилось число дискретных отсчетов измеренного спектра m, поэтому уменьшился шаг дискретизации (в четыре раза) за счет использования сплайна и, значит, увеличилась частота Найквиста–Котельникова [5, С. 64] и повысилось разрешение.

Рис. 5 демонстрирует разрешение всех семи близких линий. Однако при этом возникает много ложных максимумов–линий.

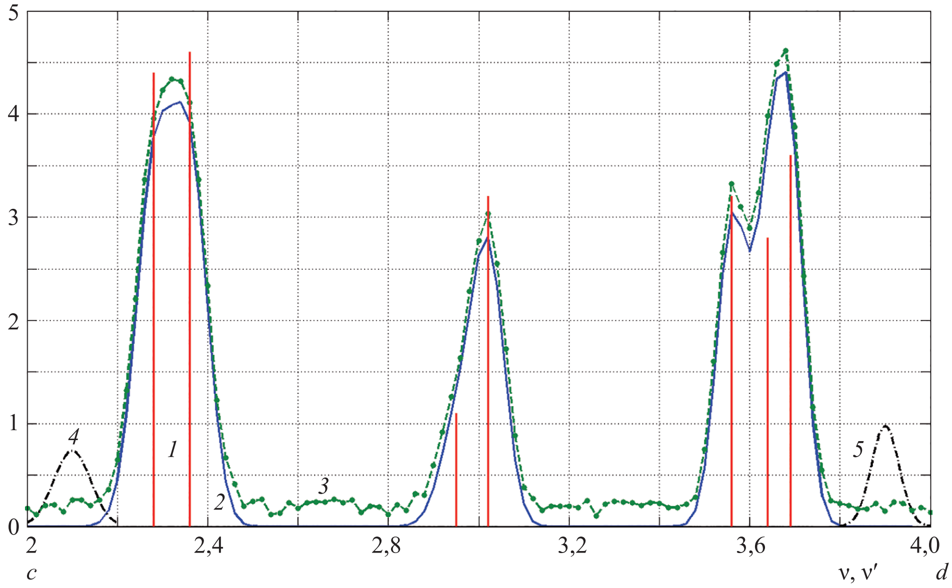

Рис. 2. Численный пример. Прямая задача. По оси ординат — z, u, $\tilde{u}$ и K (в у.е.).
1 — истинный дискретный спектр $z(\nu)$; *2* — измеренный спектр $u(\nu)$ длиной $m = 101$; *3* — измеренный с шумом спектр $\tilde{u}(\nu)$; *4* — $K(2{,}1, \nu')$ — аппаратная функция на низкой частоте $\nu = 2{,}1$; *5* — $K(3{,}9, \nu')$ — аппаратная функция на высокой частоте $\nu = 3{,}9$

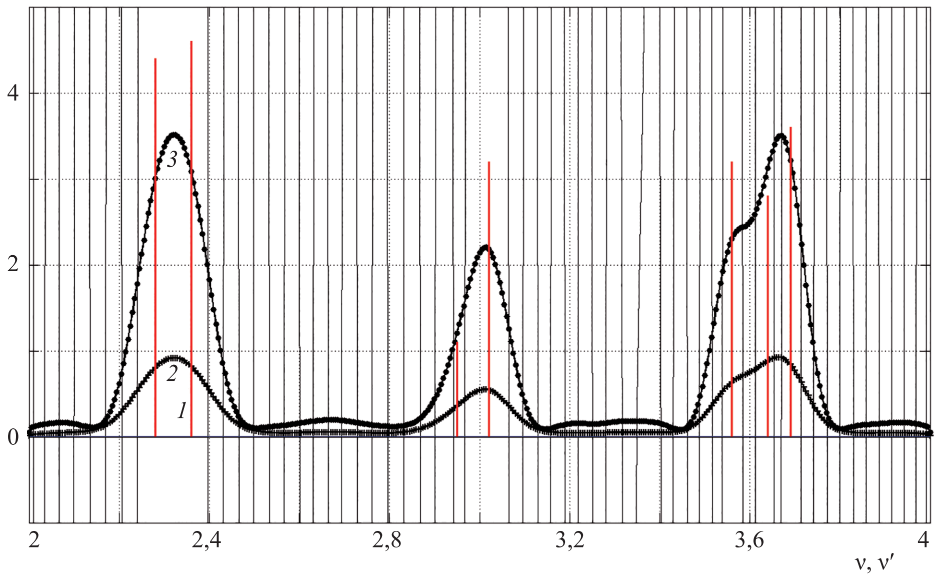

Рис. 3. Точный и восстановленные спектры: *1* — точный спектр $z(\nu')$; *2* — восстановленный спектр $z_\alpha(\nu)$ при $\alpha = \alpha_d$; *3* — восстановленный спектр $0{,}1z_\alpha(\nu)$ при $\alpha = 10^{-3}$; *4* — восстановленный спектр $z_\alpha(\nu)$ при $\alpha = 10^{-8}$

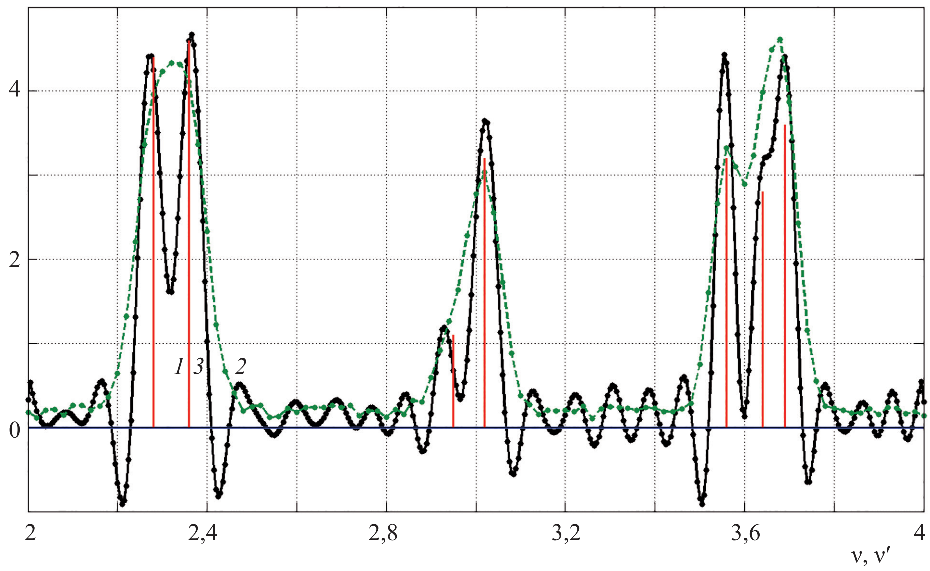

Рис. 4. Точный, измеренный и восстановленный спектры.
1 — точный спектр $z(\nu')$; *2* — измеренный спектр $\tilde{u}(\nu)$ длиной $m = 101$; *3* – восстановленный спектр $0{,}05z_\alpha(\nu)$ длиной $N = 401$ при $\alpha = 10^{-6}$

Берем в регуляризованном решении $z_\alpha(\nu)$ на рис. 5 первые $L = 12$ наибольших максимумов[1] и фиксируем их частóты $\tilde{\nu}_j'$, $j = \overline{1, L}$. Решаем уточняющую СЛАУ (16) относительно $L + 1 = 13$ неизвестных: 12 амплитуд $\tilde{z}_j$ и фона F с помощью МНК Гаусса (регуляризация не требуется, так как СЛАУ (16) является хорошо обусловленной).

На рис. 5 отмечены полученные значения $z_j(\tilde{\nu}_j')$ вертикальными пунктирными линиями. Видим, что все ложные максимумы получили отрицательные значения или значения, близкие к нулю. В качестве барьера для фильтрации ложных линий использовался порог Z, равный 20 % от полученного значения фона F, т. е. $Z = 0{,}2F$, хотя необходимости в использовании порога не было. При этом истинные максимумы получили значения $\tilde{z}_j$, близкие к точным значениям амплитуд z_j. Относительные погрешности, согласно (15), получились равными $\varepsilon_{rel} = 0{,}0621$, $\xi_{rel} = 0{,}0028$, $\zeta_{rel} = 0{,}0622$.

Можно констатировать, что в модельном примере все семь спектральных линий разрешились и с приемлемой точностью определились их частóты $\tilde{\nu}_j'$ и интенсивности $\tilde{z}_j$, причем ни одна линия не потерялась и ни одна ложная линия не проявилась, хотя помехо-сигнальная ситуация была выбрана специально сложной, чтобы продемонстрировать возможности алгоритма интегральной аппроксимации.

[1] Число L берем на основе практической обработки ряда реальных близких спектров.

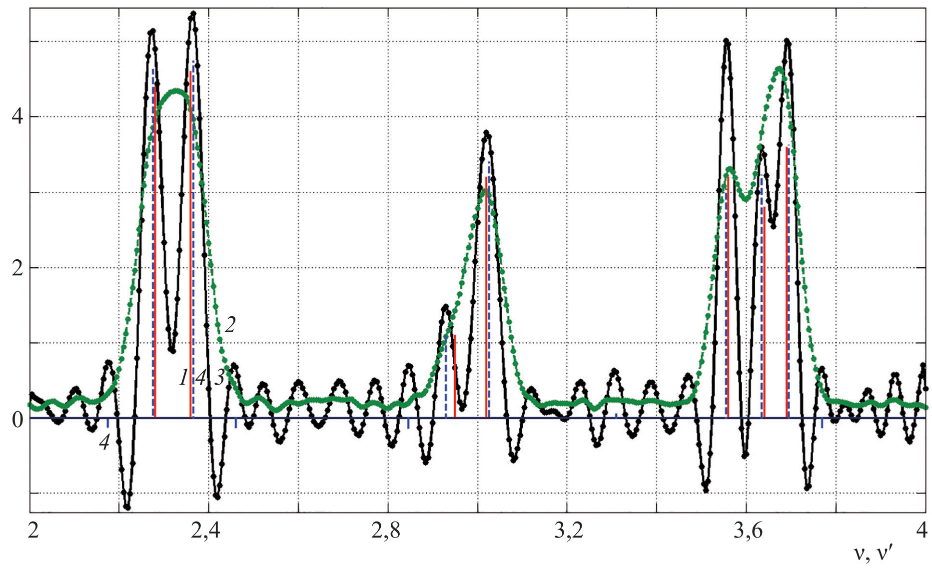

Рис. 5. Численный пример. Обратная задача при увеличенном $m = 401$.

1 — истинный спектр $z(\nu')$ (вертикальные сплошные линии); *2* — аппроксимация измеренного спектра $\tilde{u}(\nu)$ сплайном $u_s(\nu)$ длиной $m = 401$; *3* — регуляризованное решение $0{,}05z_\alpha(\nu')$ длиной $N = 401$ (сплошная линия); *4* — восстановленный спектр $z_j(\nu_j')$ (вертикальные пунктирные линии)

Для сравнения данный модельный пример был решен также *методом переменных проекций* Голуба–Муллен–Хегланда [17–19]. Была использована MATLAB-программа (m-функция) varpro.m [33], предназначенная для реализации метода переменных проекций. Авторы дополнительно разработали головную программу varpro_ex1.m, а также m-функцию adaex1.m.

При решении примера по данным программам полагалось: Ind = dPhi = []. Это означает, что не использовались производные (в виде матрицы Якоби) при решении как линейной, так и нелинейной задач. Это может понизить точность решения, но упрощает процедуру решения.

Задача решалась в трех вариантах.

В варианте 1 вводилась равномерная сетка узлов по $\nu = 2{:}0{,}1{:}4$ с числом узлов $m = 21$. Начальное приближение $\nu' = [2{,}26;\ 2{,}38;\ 2{,}93;\ 3{,}04;\ 3{,}54;\ 3{,}63;\ 3{,}71]$ (число линий $n = 7$). Полученные решения для z и ν' приведены в таблице.

Видим, что погрешность вычисления получилась большой, особенно у линейных параметров z (интенсивностей линий). Это связано, видимо с тем, что в программе varpro.m не предусмотрено задание начального приближения для z.

В варианте 2 вводилась неравномерная сетка узлов по $\nu = [2{,}1;\ 2{,}2;\ 2{,}25;\ 2{,}3;\ 2{,}35;\ 2{,}4;\ 2{,}5;\ 2{,}6;\ 2{,}8;\ 2{,}9;\ 2{,}95;\ 3;\ 3{,}05;\ 3{,}1;\ 3{,}2;\ 3{,}3;\ 3{,}4;\ 3{,}5;\ 3{,}55;\ 3{,}6;\ 3{,}65;\ 3{,}7;\ 3{,}75;\ 3{,}8;\ 3{,}9]$ (число узлов $m = 25$). Начальное приближение для ν' такое же, как в варианте 1. Таблица показывает, что погрешности решений значительно понизились и сблизились с вышеприведенными погрешностями алгоритма интегральной аппроксимации: $\varepsilon_{rel} = 0{,}0621$, $\xi_{rel} = 0{,}0028$, $\zeta_{rel} = 0{,}0622$.

Число спектральных линий обычно неизвестно точно, поэтому в варианте 3 положено (ошибочно), что число спектральных линий равно $n = 9$. Начальное приближение $\nu' = [2{,}1;\ 2{,}26;\ 2{,}38;\ 2{,}93;\ 3{,}04;\ 3{,}1;\ 3{,}54;\ 3{,}63;\ 3{,}71]$ (введены дополнительно две линии). Сетка узлов по ν положена как в варианте 2 (неравномерная). Чтобы вычислить погрешности ε_{rel}, ξ_{rel} и ζ_{rel}, список точных амплитуд и частот дополнен двумя фиктивными линиями с нулевыми интенсивностями:

Таблица. Результаты решения примера методом переменных проекций

Вариант 1	Относительная погрешность
Решение z: 6,413; 3,195; 1,155; 4,421; 1,467; 12,090; 0,682. Решение ν': 2,279; 2,417; 2,863; 3,026; 3,465; 3,652; 3,847. Число итераций $N = 28$. Время решения $T = 1{,}5$ с	$\varepsilon_{rel} = 1{,}1272$ $\xi_{rel} = 0{,}0257$ $\zeta_{rel} = 1{,}1275$
Вариант 2	
Решение z: 4,848; 4,783;1,361; 3,546; 3,271; 3,607; 3,498. Решение ν': 2,280; 2,363; 2,943; 3,020; 3,554; 3,638; 3,696. $N = 5$, $T = 0{,}3$ с	$\varepsilon_{rel} = 0{,}1146$ $\xi_{rel} = 0{,}0014$ $\zeta_{rel} = 0{,}1146$
Вариант 3	
Решение z: 0,407; 4,859; 4,743; 1,302; 3,555; 0,767; 3,271; 3,607; 3,498. Решение ν': 2,141; 2,280; 2,363; 2,941; 3,019; 3,145; 3,554; 3,638; 3,696. $N = 7$, $T = 0{,}4$ с	$\varepsilon_{rel} = 0{,}1481$ $\xi_{rel} = 0{,}0069$ $\zeta_{rel} = 0{,}1483$

$$z = [0; 4,4; 4,6; 1,1; 3,2; 0; 3,2; 2,8; 3,6];$$

$$\nu' = [2,1; 2,28; 2,36; 2,95; 3,02; 3,1; 3,56; 3,64; 3,69].$$

Таблица показывает, что интенсивности z фиктивных линий получили немалые значения 0,407 и 0,767 в результате решения, хотя следовало ожидать почти нулевых значений. Это говорит о том, что не срабатывает механизм подавления ложных линий.

На основе решения примера алгоритмом интегральной аппроксимации и методом переменных проекций можно сделать следующие (предварительные) выводы.

1. Метод переменных проекций требует хорошего начального приближения для ν', а также частой сетки по ν. Заметим, что вводить частую сетку по ν в случае реального эксперимента технически затруднительно. Далее, желательно использовать матрицу производных Якоби, однако это усложняет метод. Наконец, непросто решается вопрос о числе n спектральных линий, так как ложные линии подавляются слабо.
2. Алгоритм интегральной аппроксимации не использует начальное приближение для ν', но он также требует частой сетки узлов, однако не по ν, а по ν', что сделать несложно, так как сетка по ν' создается программным, а не техническим путем. Вопрос об истинном числе n спектральных линий в алгоритме интегральной аппроксимации решается надежно, так как ложные линии надежно фильтруются им (рис. 5).

В общем оба метода дополняют друг друга. Основное их отличие состоит в том, что метод переменных проекций — это линейно-нелинейный метод, а алгоритм интегральной аппроксимации – целиком линейный метод.

Заключение

В данной работе получил дальнейшее развитие алгоритм интегральной аппроксимации обработки дискретных спектров. Решение модельных примеров продемонстрировало высокую эффективность предложенной методики — разрешение близких дискретных линий, выделение слабых линий из шума, восстановление тонкой структуры дискретного спектра. В результате имеет место *повышение разрешающей способности спектрометра*, а значит, и качества спектрального анализа путем математико-компьютерной обработки спектров.

Спектрометр может быть состыкован с компьютером с заложенным в него программным обеспечением или дополнен специализированным вычислительным устройством, реализующим рассмотренный алгоритм обработки спектров. При этом можно использовать несовершенный (и недорогой) спектрометр, но за счет математико-компьютерной обработки получить практически такие же качественные результаты, как с помощью более совершенного (но более дорогого) спектрометра. Под термином «более совершенный» подразумевается спектрометр с более узкой аппаратной функцией, что позволяет разрешать близкие и слабые линии в спектре без математической обработки.

Следует отметить, что предложенный алгоритм обработки дискретных спектров является *универсальным* в том смысле, что может быть использован для восстановления заглаженных и зашумленных спектров в различных областях спектроскопии: спектроскопия газов, жидкостей и плазмы, ядерно-магнитно-резонансная спектроскопия веществ, спектроскопический анализ расплавленных металлов в домнах и т. д.

Литература

1. Раутиан С.Г. Реальные спектральные приборы // Успехи физических наук. 1958. Т. 66. № 3. С. 475–517.
2. Bousquet P. Spectroscopy and Its Instrumentation. London: Hilger, 1971. 239 p.
3. Handbook of Vibrational Spectroscopy / ed. by J.M. Chalmers, P.R. Griffiths. New York: Wiley, 2002. 4000 p. doi: 10.1002/0470027320
4. Fleckl T., Jäger H., Obernberger I. Experimental verification of gas spectra calculated for high temperatures using the HITRAN/HITEMP database // Journal of Physics D: Applied Physics. 2002. V. 35. N 23. P. 3138–3144. doi: 10.1088/0022-3727/35/23/315
5. Сизиков В.С. Прямые и обратные задачи восстановления изображений, спектроскопии и томографии с MatLab: учебное пособие. СПб.: Лань, 2017. 412 с.
6. Сизиков В. Интегральные уравнения и MatLab в задачах томографии, иконики и спектроскопии. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011. 252 с.
7. Kauppinen J.K., Moffatt D.J., Mantsch H.H., Cameron D.G. Fourier self-deconvolution: a method for resolving intrinsically overlapped bands // Applied Spectroscopy. 1981. V. 35. N 3. P. 271–276. doi: 10.1366/0003702814732634
8. Stewart J.E. Resolution enhancement of X-ray fluorescence spectra with a computerized multichannel analyzer // Applied Spectroscopy. 1975. V. 29. N 2. P. 171–174. doi: 10.1366/000370275774455257
9. Сизиков В.С., Кривых А.В. Восстановление непрерывных спектров методом регуляризации с использованием модельных спектров // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 117. № 6. С. 1040–1048. doi: 10.7868/S0030403414110166

References

1. Rautian S.G. Real spectral apparatus. *Soviet Physics Uspekhi*, 1958, vol. 66, no. 2, pp. 245–273. doi: 10.1070/PU1958v001n02ABEH003099
2. Bousquet P. *Spectroscopy and Its Instrumentation*. London, Hilger, 1971, 239 p.
3. *Handbook of Vibrational Spectroscopy*. Ed. by J.M. Chalmers, P.R. Griffiths. New York, Wiley, 2002, 4000 p. doi: 10.1002/0470027320
4. Fleckl T., Jäger H., Obernberger I. Experimental verification of gas spectra calculated for high temperatures using the HITRAN/HITEMP database. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2002, vol. 35, no. 23, pp. 3138–3144. doi: 10.1088/0022-3727/35/23/315
5. Sizikov V.S. *Direct and Inverse Problems of Image Restoration, Spectroscopy and Tomography with MatLab*. Tutorial. St. Petersburg, Lan' Publ., 2017, 412 p. (in Russian)
6. Sizikov V.S. *Integral Equations and MATLAB in Problems of Tomography, Iconics, and Spectroscopy*. Saarbrücken, LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011, 252 p. (in Russian)
7. Kauppinen J.K., Moffatt D.J., Mantsch H.H., Cameron D.G. Fourier self-deconvolution: a method for resolving intrinsically overlapped bands. *Applied Spectroscopy*, 1981, vol. 35, no. 3, pp. 271–276. doi: 10.1366/0003702814732634
8. Stewart J.E. Resolution enhancement of X-ray fluorescence spectra with a computerized multichannel analyzer. *Applied Spectroscopy*, 1975, vol. 29, no. 2, pp. 171–174. doi: 10.1366/000370275774455257
9. Sizikov V.S., Krivykh A.V. Reconstruction of continuous spectra by the regularization method using model spectra. *Optics and Spectroscopy*, 2014, vol. 117, no. 6, pp. 1010–1017. doi: 10.1134/S0030400X14110162

10. Sizikov V.S. Generalized method for measurement data reduction. I. Processing of tonal (narrow-band) signals // Electronic Modeling. 1992. V. 9. N 4. P. 618–633.
11. Sizikov V. Use of an integral equation for solving special systems of linear-non-linear equations // Proc. Conf. Integral Methods in Science and Engineering (IMSE96). V. 2. Approximation Methods. 1997. P. 200–205.
12. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 536 с.
13. Rheinboldt W.C. Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations. 2nd ed. Philadelphia: SIAM, 1998. 157 p.
14. Кей С.М., Марпл С.Л. Современные методы спектрального анализа (обзор) // Труды Института инженеров по электротехнике и радиоэлектронике. 1981. Т. 69. № 11. С. 5–51.
15. Пиблз П., Берковиц Р. Многоцелевой моноимпульсный радиолокатор // Зарубежная радиоэлектроника. 1969. № 10. С. 3–17.
16. Талькович С.Е., Коновалов Л.Н. Разрешение неизвестного числа сигналов // Радиотехника и электроника. 1982. Т. 27. № 1. С. 92–97.
17. Golub G.H., Pereyra V. The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares problems whose variables separate // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1973. V. 10. N 2. P. 413–432. doi: 10.1137/0710036
18. Mullen K.M., van Stokkum I.H.M. The variable projection algorithm in time-resolved spectroscopy, microscopy and mass spectrometry applications // Numerical Algorithms. 2009. V. 51. N 3. P. 319–340. doi: 10.1007/s11075-008-9235-2
19. Hegland M. Error bounds for spectral enhancement which are based on variable Hilbert scale inequalities // Journal of Integral Equations and Applications. 2010. V. 22. N 2. P. 285–312. doi: 10.1216/JIE-2010-22-2-285
20. Кривых А.В., Сизиков В.С. Обработка дискретных спектров с помощью алгоритма интегральной аппроксимации // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2011. № 5(75). С. 14–18.
21. Sidorov D. Integral Dynamical Models: Singularities, Signals and Control. Singapore-London: World Scientific Publ., 2014. 243 p.
22. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. 3-е изд. М.: Наука, 1986. 288 с.
23. Engl H., Hanke M., Neubauer A. Regularization of Inverse Problems. Dordrecht: Kluwer, 1996. 328 p.
24. Петров Ю.П., Сизиков В.С. Корректные, некорректные и промежуточные задачи с приложениями. СПб.: Политехника, 2003. 261 с.
25. Воскобойников Ю.Е., Преображенский Н.Г., Седельников А.И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1984. 240 с.
26. Sizikov V.S., Sidorov D.N. Generalized quadrature for solving singular integral equations of Abel type in application to infrared tomography // Applied Numerical Mathematics. 2016. V. 106. P. 69–78. doi: 10.1016/j.apnum.2016.03.004
27. Тихонов А.Н., Гончарский А.В, Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.
28. Yan L., Liu H., Zhong S., Fang H. Semi-blind spectral deconvolution with adaptive Tikhonov regularization // Applied Spectroscopy. 2012. V. 66. N 11. P. 1334–1346. doi: 10.1366/11-06256
29. Морозов В.А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987. 240 с.
30. Sizikov V.S., Evseev V., Fateev A., Clausen S. Direct and inverse problems of infrared tomography // Applied Optics. 2016. V. 55. N 1. P. 208–220. doi: 10.1364/AO.55.000208
31. Старков В.Н. Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации. Киев: Наукова думка, 2002. 264 с.
32. Sizikov V., Sidorov D. Discrete spectrum reconstruction using integral approximation algorithm // Applied Spectroscopy. 2017. V. 71. N 7. P. 1640–1651. doi: 10.1177/0003702817694181
33. O'Leary D.P., Rust B.W. Variable projection for nonlinear least squares problems // Computational Optimization and Applications. 2013. V. 54. N 3. P. 579–593. doi: 10.1007/s10589-012-9492-9

10. Sizikov V.S. Generalized method for measurement data reduction. I. Processing of tonal (narrow-band) signals. *Electronic Modeling*, 1992, vol. 9, no. 4, pp. 618–633.
11. Sizikov V. Use of an integral equation for solving special systems of linear-non-linear equations. *Proc. Conf. Integral Methods in Science and Engineering (IMSE96). V. 2. Approximation Methods*, 1997, pp. 200–205.
12. Himmelblau D.M. *Applied Nonlinear Programming*. New York, McGray-Hill, 1972, 416 p.
13. Rheinboldt W.C. *Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations*. 2nd ed. Philadelphia, SIAM, 1998, 157 p.
14. Kay S.M., Marple S.L.,Jr. Spectrum analysis – a modern perspective. *Proceedings of the IEEE*, 1981, vol. 69, no. 11, pp. 1380–1419. doi: 10.1109/PROC.1981.12184
15. Peebles P.Z., Jr., Berkowitz R.S. Multiple-target monopulse radar processing techniques. *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*, 1968, vol. AES-4, no. 6, pp. 845–854. doi: 10.1109/TAES.1968.5409051
16. Falkovich S.E., Konovalov L.N. Estimation for unknown numbers of signals. *Soviet Journal of Communications Technology and Electronics*, 1982, vol. 27, no. 1, pp. 92–97.
17. Golub G.H., Pereyra V. The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares problems whose variables separate. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1973, vol. 10, no. 2, pp. 413–432. doi: 10.1137/0710036
18. Mullen K.M., van Stokkum I.H.M. The variable projection algorithm in time-resolved spectroscopy, microscopy and mass spectrometry applications. *Numerical Algorithms*, 2009, vol. 51, no. 3, pp. 319–340. doi: 10.1007/s11075-008-9235-2
19. Hegland M. Error bounds for spectral enhancement which are based on variable Hilbert scale inequalities. *Journal of Integral Equations and Applications*, 2010, vol. 22, no. 2, pp. 285–312. doi: 10.1216/JIE-2010-22-2-285
20. Krivykh A.V., Sizikov V.S. Discrete spectra processing by an integral approximation algorithm. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2011, no. 5(75), pp. 14–18. (in Russian)
21. Sidorov D. *Integral Dynamical Models: Singularities, Signals and Control*. Singapore-London, World Scientific Publ., 2014, 243 p.
22. Tikhonov A.N., Arsenin V.Ya. *Solutions of Ill-Posed Problems*. New York, Wiley, 1977, 258 p.
23. Engl H., Hanke M., Neubauer A. *Regularization of Inverse Problems*. Dordrecht, Kluwer, 1996, 328 p.
24. Petrov Yu.P., Sizikov V.S. *Well-Posed, Ill-Posed, and Intermediate Problems with Applications*. Leiden–Boston, VSP, 2005, 234 p.
25. Voskoboinikov Yu.E., Preobrazhensky N.G., Sedel'nikov A.I. *Mathematical Processing of Experiment in Molecular Gas Dynamics.* Novosibirsk, Nauka Publ., 1984, 240 p. (in Russian)
26. Sizikov V.S., Sidorov D.N. Generalized quadrature for solving singular integral equations of Abel type in application to infrared tomography. *Applied Numerical Mathematics*, 2016, vol. 106, pp. 69–78. doi: 10.1016/j.apnum.2016.03.004
27. Tikhonov A.N., Goncharsky A.N., Stepanov V.V., Yagola A.G. *Numerical Methods for the Solution of Ill-Posed Problems*. Dordrecht, Kluwer, 1995, 254 p. doi: 10.1007/978-94-015-8480-7
28. Yan L., Liu H., Zhong S., Fang H. Semi-blind spectral deconvolution with adaptive Tikhonov regularization. *Applied Spectroscopy*, 2012, vol. 66, no. 11, pp. 1334–1346. doi: 10.1366/11-06256
29. Morozov V.A. *Methods for Solving Incorrectly Posed Problems*. New York, Springer-Verlag, 1984, 257 p. doi: 10.1007/978-1-4612-5280-1
30. Sizikov V., Evseev V., Fateev A., Clausen S. Direct and inverse problems of infrared tomography. *Applied Optics*, 2016, vol. 55, no. 1, pp. 208–220. doi: 10.1364/AO.55.000208
31. Starkov V.N. *Constructive Methods of Computational Physics in Problems of Interpretation*. Kiev, Naukova Dumka Publ., 2002, 264 p. (in Russian)
32. Sizikov V., Sidorov D. Discrete spectrum reconstruction using integral approximation algorithm. *Applied Spectroscopy*, 2017, vol. 71, no. 7, pp. 1640–1651. doi: 10.1177/0003702817694181
33. O'Leary D.P., Rust B.W. Variable projection for nonlinear least squares problems. *Computational Optimization and Applications*, 2013, vol. 54, no. 3, pp. 579–593. doi: 10.1007/s10589-012-9492-9

Авторы

Александрова Анастасия Андреевна — студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, ORCID ID: 0000-0002-3398-6166, nastya.9797@yandex.ru

Сизиков Валерий Сергеевич — доктор технических наук, профессор, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, Scopus ID: 6603236516, ORCID ID: 0000-0002-4618-8753, sizikov2000@mail.ru

Authors

Anastasiya A. Aleksandrova — Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, ORCID ID: 0000-0002-3398-6166, nastya.9797@yandex.ru

Valery S. Sizikov — D.Sc., Full Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, Scopus ID: 6603236516, ORCID ID: 0000-0002-4618-8753, sizikov2000@mail.ru