

АВТОМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ЛИНЕЙЧАТЫХ СПЕКТРОВ

П.М.Гопыч

Харьковский государственный университет, Харьков, Украина

Дан обзор методов и проблем автоматической (без участия человека) обработки на ЭВМ линейчатых спектров излучения на примере задач ядерной спектроскопии. Обсуждаются оптимизация и стандартизация этих методов, их связь с проблемами психологии человека и искусственного интеллекта.

Methods and problems of automatic computer processing of linear spectra without human participation are observed on the example of the problems of nuclear spectroscopy. Optimisation and standardization of these methods and their connection with human psychology and artificial intellect problems are discussed.

ВВЕДЕНИЕ

Линейчатые спектры излучения — один из основных типов первичных экспериментальных данных в физике, других естественных науках, в прикладных исследованиях. Обилие таких данных и большая трудоемкость их количественного анализа требуют активного использования ЭВМ для их обработки. К настоящему времени для решения этой задачи создано много (десятки или даже сотни) различных компьютерных программ, которые отличаются подходами к обработке, методами приближенных вычислений, оцениванием погрешностей результатов и т.д. Описанию существенных с точки зрения последующего анализа особенностей методов получения линейчатых спектров и особенностей методов их обработки с помощью ЭВМ посвящена обширная литература, частично систематизированная в обзорах, монографиях (например, [1—5]) и даже в учебных пособиях (например, [6]).

Компьютерную обработку линейчатых спектров, получаемых в области ядерной спектроскопии, широко применяют с начала 60-х годов. По мере совершенствования измерительной техники и ЭВМ требования к программам обработки спектров видоизменялись. Так, уже перестали

быть проблемой ранее весьма существенные трудности в технической и программной реализации активного диалога человека и ЭВМ, практически сняты ограничения на объем доступной для вычислений оперативной памяти и на скорость их выполнения. Показано, что принципиальные, собственно вычислительные трудности при решении задачи обработки спектров практически отсутствуют [4,5], а все этапы как предварительной, так и окончательной их обработки можно успешно алгоритмизировать [7,8]. Акцент в исследованиях стал перемещаться на поиск методов сравнения качества многочисленных уже существующих программ, на их оптимизацию и стандартизацию [9,10]. Об актуальности и важности последней проблемы свидетельствует, в частности, то, что к стандартизации программ полной обработки линейчатых спектров (или отдельных ее этапов) проявляет интерес [10] один из комитетов Международной электротехнической комиссии, так как такие программы входят сейчас в состав программного обеспечения многоканальных анализаторов импульсов, которые используются в хозяйственной деятельности и поэтому требуют соответствующего метрологического обеспечения.

Среди программ обработки спектров различают автоматические, работающие без участия человека, и автоматизированные, существенно предполагающие участие в процессе обработки человека-оператора, главным образом, на этапе принятия решений о выборе гипотез при зрительном анализе либо спектра в целом, либо отдельных его информационных участков. Популярности автоматизированных программ способствует доступность ЭВМ, имеющих удобные и мощные технические и программные средства для организации активного диалога с оператором и наглядного (с помощью дисплея) представления спектральных данных в форме, удобной для их зрительного анализа человеком. Распространению автоматических программ мешает отсутствие единых общепринятых формализованных критериев принятия решений в условиях статистической неопределенности. Главным образом именно в связи «со сложностью в определении оптимальных критериев по экспериментальным данным и трудностями в автоматическом распознавании образов» [11] область применения автоматических программ пока ограничена в основном предварительной обработкой спектров.

Такое положение нельзя считать удовлетворительным. Скорость обработки спектров автоматизированными программами принципиально ограничена. Ее верхний предел определяется пропускной способностью человека-оператора как информационного канала, которая составляет всего 30—50 бит/с [12], что на много порядков меньше возможностей современных ЭВМ. Поэтому в системе оператор — ЭВМ, работающей в диалоговом режиме, человек — наиболее медленная часть системы, которая и определяет в конечном счете полную (и весьма низкую) скорость авто-

матризированной обработки спектров. Уже давно отмечено [1,3], что возможные темпы получения спектральных данных могут заметно превышать возможные темпы их обработки с помощью автоматизированных программ, поэтому скорость обработки спектров такими программами в определенной мере сдерживает и темпы таких исследований. Кроме того, программы автоматизированной обработки спектров существенно используют в ходе работы «воображение, опыт и интуицию» [4] человека-оператора. За счет этого преодолевают названные выше трудности автоматической обработки. Однако такое участие человека оказывает на результаты анализа спектров автоматизированными программами неконтролируемое субъективное влияние, снижающее уровень достоверности получаемых результатов, которые зависят в этом случае от индивидуальных особенностей и наклонностей (вплоть до настроения, темперамента, добросовестности) оператора, ведущего обработку спектров.

Добиться существенного повышения скорости обработки спектров, исключить влияние на его результаты неконтролируемых субъективных факторов и создать благоприятные условия для оптимизации и стандартизации методов и программ полной обработки спектров можно только за счет использования автоматических программ. Как уже отмечалось, собственно вычислительные трудности при создании таких программ практически отсутствуют. Проблема в создании на основе теории распознавания образов для конкретной задачи об обработке линейчатых спектров оптимальных количественных критериев принятия решений о выборе гипотез в условиях статистической неопределенности, в их применении и в интерпретации получаемых с их помощью результатов. В последние годы эта проблема активно исследовалась и в ее решении достигнут некоторый прогресс. Настоящий обзор посвящен полученным новым результатам и описанию их практического применения для создания, исследования, оптимизации и стандартизации автоматических программ обработки линейчатых спектров.

1. ПРОБЛЕМЫ АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ

Для программ автоматической обработки спектров исходными данными являются [7]: измеренный спектр $y(x)$ в цифровой форме (x — номер канала, $y(x)$ — число отсчетов в канале x); параметр ib , определяющий характерную ширину пиков, подлежащих обнаружению, — параметр ширины; параметр l чувствительности поиска пиков и некоторые вспомогательные величины (номера каналов, ограничивающих обрабатываемый участок спектра, номер этого спектра и т.д.). Никакой другой

информации не требуется. Параметр ширины ib (обычно целое число [7]) задают приближенно равным ожидаемому значению средней (полу)ширины пиков в спектре (например, 5, 10, 20... каналов). Значение этого параметра определяет характерную ширину особенностей (пиков), подлежащих обнаружению, и позволяет отличать полезную информацию от фоновой (например, пики полного поглощения от широких комптоновских ступенек или от широких пиков обратного рассеяния в γ -спектрах, пики полного поглощения от возможных «выбросов» — резко выпадающих значений спектра в отдельных его каналах). Параметр чувствительности l задают исходя из требований к обработке так, чтобы соблюсти необходимый для экспериментов данного типа компромисс между чувствительностью поиска и достоверностью его результатов. Кроме того, неявно предполагают, что спектр линейчатый, т.е. содержит полезную информацию в виде достаточно узких пиков (линий) на гладком фоне, информация о котором существенного значения, как правило, не имеет, а форма пиков (линий) известна по результатам предварительных опытов.

Программа на основе перечисленных исходных данных автоматически, без участия человека, осуществляет (подробнее см. [7,8]) поиск пиков с характерной шириной каналов ib , разбивает спектр на информационные участки, которые в дальнейшем можно рассматривать независимо, для всех пиков на таких информационных участках определяет начальные приближенные значения искоемых параметров, а затем в ходе подгонки и сами эти параметры (положения — в каналах, площади в отсчетах), оценивает погрешности результатов обработки и выводит итоговую таблицу результатов. Программы для установления соответствия между положениями и площадями пиков и соответствующими им физическими величинами (программы калибровки) могут работать после этого совершенно независимо, поэтому здесь их не рассматриваем (это отдельная задача).

Как показано в [7,8], все перечисленные этапы автоматической обработки спектров можно успешно алгоритмизировать. Основным препятствием на пути создания автоматических программ являются следующие трудности, имеющие, вообще говоря, принципиальный характер.

Автоматический поиск пиков и определение порога чувствительности поиска. Результаты автоматической идентификации пиков в спектрах зависят от порога чувствительности поиска и пользователя, ведущего обработку, очень часто не удовлетворяют: по сравнению с желаемым программа «недодает пики или обнаруживает их в избытке» [1]. Это связано с тем, что «задача автоматического поиска пиков аналогична задаче распознавания образов, а это достаточно сложная и отнюдь не решенная проблема» [4]. Причем трудности возникают не только при получении,

но и при вероятностной интерпретации уже полученных результатов, которая неизбежна в связи со статистическим характером обрабатываемых данных.

Погрешности определения параметров спектра и оптимальный критерий прерывания подгонки. Задачу определения параметров пиков из состава сложных мультиплетов (ее называют еще разложением или декомпозицией спектра) сводят обычно [4,5] к системе существенно нелинейных уравнений со слагаемыми, искаженными принципиально неизбежными статистическими флуктуациями экспериментальных значений. Причем используемые при этом математические модели как отдельного пика, так и фона известны только приближенно, поскольку их тоже определяют из анализа экспериментальных данных. Решение находят путем численной минимизации значения взвешенной суммы (по номеру канала x) среднеквадратичных отклонений экспериментальных значений от значений, вычисленных для анализируемого участка спектра по принятой для него математической модели (аддитивные фон и заданное число пиков). Варьируемые в ходе численной итерационной процедуры минимизации (подгонки) значения искоемых параметров пиков (и фона) приближенно задаются до начала подгонки из независимых соображений либо программно [7,8], либо вручную [4].

Численные задачи декомпозиции спектров часто оказываются некорректно поставленными, а соответствующие им процедуры минимизации неустойчивы. Эту трудность успешно преодолевают математически [4] на основе метода регуляризации по А.Н.Тихонову [13]. Однако при этом остаются проблема оптимального прерывания итераций в ходе подгонки и проблема оценивания погрешностей найденных в результате подгонки значений параметров, которые тесно взаимосвязаны.

Критериев прерывания подгонки предложено множество, так как ни один из них не гарантирует, что подгонка будет прервана в истинном минимуме минимизируемого функционала. Поэтому на практике используют одновременно по несколько (допустим, четыре [4]) критериев прерывания, свободные параметры которых подбирают вычислительно-экспериментальным путем при обработке экспериментальных данных так, чтобы результаты подгонки удовлетворяли требованиям пользователей. При оценивании погрешностей [4] найденных значений параметров спектра вначале находят чисто статистические погрешности (обычно из диагональных элементов обратной матрицы линейного шага или из диагональных элементов подобной ей регуляризованной матрицы), а затем получают так называемые «полные» погрешности, завышая только что найденные «статистические» погрешности с помощью какого-либо искусственного приема, надежность которого исследуется потом особо [14] вычислительно-экспериментальным или экспериментальным путем.

Однако известно, что задача обработки спектров связана со следующей очень существенной особенностью. Дело в том, что «... состоятельность оценки проявляется в статистике как ансамблевое свойство при анализе серии однотипных измерений. В анализе же данных экспериментальной физики чаще всего обрабатывается один набор данных, а других или не будет вообще, или они получаются при других условиях» [5]. Чтобы оценки были состоятельными, накладывают дополнительное ограничение: «необходимо, чтобы погрешность измерения была не просто малой в смысле дисперсии, но была малой в буквальном смысле, т.е. не превосходила некоторого уровня, определяемого параметризацией модели» [5]. Это ограничение очень жесткое и ему могут удовлетворять только участки спектра с высокой статистической обеспеченностью, которые в реальных данных редки. Поэтому получаемые в результате подгонки конкретного спектра (один набор данных) оценки значений параметров пиков зачастую несостоятельны. Следовательно, вычисленные при этом значения погрешностей бывают физически неудовлетворительны и, как правило, занижены*. Последнее обстоятельство хорошо известно экспериментаторам — пользователям программ обработки спектров, и некоторые из них реагируют на него, волевым образом увеличивая найденные программой погрешности положений или площадей пиков в полтора, два и более раз, исходя из конкретной ситуации и своего предшествующего опыта.

Таким образом, критерий оптимального прерывания подгонки и универсальные корректные методы состоятельного оценивания искомым значений параметров спектра, определяемых в результате этой подгонки, практически отсутствуют. Это утверждение в одинаковой мере относится и к автоматическим, и к неавтоматическим программам обработки спектров.

Определение числа пиков в мультиплете. Число перекрывающихся пиков, образующих мультиплет, и начальные значения параметров этих пиков для подгонки задают для автоматизированных программ «вручную» при разметке, т.е. во время просмотра спектра оператором, ведущим его обработку. Однако экспериментальный спектр искажен статистическими флуктуациями, а математическая модель пика и математическая модель фона известны только приближенно, поэтому в таких условиях одинаково эффективная аппроксимация экспериментальных данных пиками и фоном может быть осуществлена большим числом способов. Результат декомпозиции анализируемого участка спектра, таким образом, неоднозначен и зависит от того, сколько пиков, по мнению опе-

*Конечно, реальные погрешности могут быть больше вычисленных и по причинам, не связанным собственно со статистикой. Например, из-за нестабильной работы измерительной аппаратуры (см. рис.14).

ратора, содержит мультиплет и какой, по его мнению, порядок полинома, аппроксимирующего фон под этими пиками.

Преодолеть возникающую неопределенность разложения мультиплета на составляющие его пики пытаются иногда путем использования «физической информации о спектре, например, положения пиков в дифракционных спектрах могут быть вычислены по формулам, положения пиков в γ - и X -спектрах — на основе известного или предполагаемого изотопного (элементного) состава образца и т.д. Уточнение количества пиков в спектре может быть осуществлено после МНК-анализа данного спектра... с помощью статистических тестов (например, χ^2 -критерия). К сожалению, этот метод срабатывает лишь в тривиальных случаях и не работает в наиболее сложных и интересных: при наличии очень близких перекрывающихся и слабых пиков» [5]. В таких наиболее сложных случаях предложено пользоваться характерным свойством регуляризованных процессов ньютоновского типа, которое «состоит в том, что попытка нахождения регуляризованным итерационным процессом такого числа закономерностей*, которое больше истинного для каждой конкретной задачи, приводит к псевдорешению, где либо имеются закономерности с нулевыми или пренебрежимо малыми амплитудами, либо имеются пары закономерностей с разными амплитудами, но с совпадающими или очень близкими другими параметрами... Совпадающие или очень близкие параметры означают совпадающие или очень близкие положения двух линий на данном участке... Например, при полуширине одиночной линии в 5—6 каналов расчетные позиции двух пиков, отстоящих друг от друга меньше чем на 0,25—0,3 канала, вполне можно считать совпадающими» [4]. Следовательно, в «сложном» случае оператор должен сделать несколько вариантов разметки анализируемого участка спектра, предполагая существование разного количества образующих мультиплет пиков, а после вычислений по описанному выше способу отобрать тот из вариантов, результаты обработки которого содержат пики «с нулевыми или пренебрежимо малыми амплитудами» и (или) пики «с разными амплитудами, но с совпадающими или очень близкими остальными параметрами». Далее считают, что для этого варианта пиков «с нулевыми или пренебрежимо малыми амплитудами» на самом деле нет, а пики «с разными амплитудами, но с совпадающими или очень близкими остальными параметрами» объединяют в один пик, амплитуда которого — сумма амплитуд объединенных пиков. Оставшееся после такой процедуры число

*В терминологии работы [4] «число закономерностей» означает число пиков в мультиплете.

пиков в мультиплете считают истинным. Утверждается, что «привлечение дополнительной физической информации... действительно становится необходимым только при очень плохой точности данных измерения (при недостаточной статистике). Лишние закономерности... можно отсекать только с помощью регуляризованного итерационного процесса» [4].

Однако из физических соображений очевидно, что в реальных спектрах могут быть и истинные пики малых амплитуд, и истинные пики, отстоящие друг от друга на $0,25-0,3$ канала. Факт малости амплитуды пика или факт близости положений двух пиков сам по себе не может означать, что малого пика нет, а на месте двух близких пиков есть только один, но большей амплитуды. Все варианты возможны. Окончательное решение о структуре анализируемого участка спектра принимает человек с учетом всей доступной ему информации, в том числе той, которая в анализируемых данных не содержится. Но основным аргументом для принятия такого решения по результатам обработки должна быть информация о том, какой из возможных вариантов структуры спектра более вероятен. Однако метод [4] рецептов вычисления таких вероятностей не дает. Таким образом, главное и несомненное достоинство регуляризованного итерационного процесса состоит в том, что он сохраняет устойчивость и позволяет получать значения параметров пиков в разных предположениях о структуре (количестве пиков) обрабатываемого мультиплета, в том числе и для случаев, когда пик мал или пики близко расположены друг к другу. Получаемые при этом результаты человек может использовать при определении числа пиков в мультиплете, однако необходимых количественных рекомендаций для принятия требуемого решения такой метод в явном виде все-таки не дает. Поэтому сейчас по-прежнему очень остро стоит проблема вычисления, исходя только из статистической обеспеченности эксперимента, вероятностей того, что какой-либо (любой) конкретный пик входит в состав анализируемого мультиплета или вероятностей того, что мультиплет состоит из того или иного набора пиков с определенными положениями и амплитудами. Форма (математическая модель) пика предполагается при этом известной.

Стандартизация программ обработки спектров. Необходимость сравнения качества, оптимизации и стандартизации программ обработки спектров давно назрела и в этом направлении сделаны первые шаги [9, 10]. Но объективные критерии для определения качества алгоритмов и программ пока почти не используют. Поэтому и само тестирование программ, и его результаты могут быть в значительной мере и субъективными, и случайными или даже «быть делом недоразумения» [5]. Для сравнения качества программ необходим количественный статистически оправданный критерий такого сравнения и конкретная практическая методика его применения. Тогда тестирование будет иметь объективный

количественный характер и его результаты можно будет использовать, чтобы сформулировать и обосновать единый стандарт на программы полной обработки спектров или стандартизировать отдельные этапы такой обработки. Однако широко распространено мнение, что «на практике, по-видимому, программы долго еще будут проверяться методами, не дающими полной и убедительной картины» [5]. Так, вероятно, будет до тех пор, пока не будут созданы и приняты научной общественностью упомянутые статистические критерии сравнения программ и методики их применения.

2. СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЛИНЕЙЧАТЫХ СПЕКТРОВ

Проблемы (автоматической) обработки спектров обусловлены их существенно статистической природой. По этой причине на разных этапах обработки возникают объективно неоднозначные ситуации, в которых принимаемое решение о выборе гипотез может быть сформулировано только в вероятностной терминологии. Следовательно, для решения проблем автоматической обработки надо научиться вычислять по обрабатываемому спектру его вероятностные характеристики. Установить эти характеристики можно, если только статистические свойства спектра известны и заданы в явном виде. Однако обычно используемые (см. [1—5] и множество других примеров) модели линейчатых спектров являются детерминированными и никаких сведений о статистических свойствах экспериментальных данных не содержат, хотя неявно всегда предполагают, что отсчеты в каналах спектра распределены по закону Пуассона (в пределе большой статистики — по закону Гаусса) и не коррелированы между собой (экспериментальное подтверждение этой гипотезы есть в [15]). Поэтому нового прогресса в решении проблем автоматической обработки можно добиться только на основе использования таких моделей линейчатых спектров, в которых их статистические свойства заданы в явном виде. Будем называть их стохастическими моделями линейчатых спектров [16].

Представим функцию, аппроксимирующую экспериментальный спектр (например, в смысле минимума χ^2), в виде суммы двух слагаемых: полностью детерминированного (не содержащего случайных параметров), описывающего истинный, не возмущенный статистическими флуктуациями спектр (это обычная детерминированная модель [1—5]), и случайного, описывающего случайные искажения истинного спектра, связанные с наличием статистических флуктуаций экспериментальных значений.

Для фона:

$$fon(x) = fon_0(x) + u_c(x), \quad (1)$$

где x — каналы, $fon(x)$ — случайная функция, аппроксимирующая экспериментальный фон; $fon_0(x)$ — детерминированная функция, описывающая истинный, не искаженный флуктуациями фон; $u_c(x)$ — случайная функция, описывающая случайные отклонения кривой, аппроксимирующей фон, от ее истинных значений (шум).

Для пика:

$$u(x) = a_0 u_1(x) + au_2(x), \quad (2)$$

где $u(x)$ — случайная функция, аппроксимирующая пик; $a_0 u_1(x)$ — детерминированная функция, описывающая истинный, не искаженный флуктуациями пик (a_0 — истинная амплитуда этого пика); $au_2(x)$ — случайная функция, описывающая случайные искажения кривой, аппроксимирующей пик, от ее истинных значений (a — случайная амплитуда). В дальнейшем будем предполагать, что $u_1(x) = u_2(x)$, т.е. функция, описывающая форму пика, случайными флуктуациями не искажается.

Для спектра:

$$y(x) = fon(x) + u_c(x) + \sum_{j=1}^m (a_0 + a_j) u_j(x), \quad (3)$$

где $y(x)$ — случайная функция, аппроксимирующая измеренный спектр; j — номер пика в спектре; m — их полное число.

Предполагается, что распределение плотности вероятности $\mu(a_j)$ для случайного параметра a_j (случайной амплитуды j -го пика) имеет вид симметричного гауссиана с нулевым средним значением

$$\mu(a_j) = (2\pi \sigma_j)^{-1/2} \exp(-a_j^2 / (2\sigma_j^2)), \quad (4)$$

а функция $u_c(x)$ — белый гауссов шум с нулевым средним значением и постоянной плотностью мощности N_0 . Значение σ_j дисперсии случайного отклонения амплитуды j -го пика от ее истинного значения, которое связано с влиянием статистических флуктуаций экспериментальных данных, в начальном приближении можно принять равным погрешности определения его амплитуды, найденной в результате обработки спектра. Чтобы выразить плотность мощности шума N_0 через параметры фона, выпишем формулы для корреляционной функции $R(\tau)$ белого шума:

$$R(\tau) = N_0 \sigma(\tau) / 2; \quad R(0) = n_0^2, \quad (5)$$

где τ — длина корреляции; n_0^2 — среднеквадратичное значение амплитуды шума. Полагая

$$n_0 = fon^{1/2}, \quad (6)$$

для N_0 из (5) найдем

$$N_0 = 2fon_0. \quad (7)$$

Таким образом, модель спектра (3) содержит аддитивные случайные функции двух типов, описывающие искажения истинного спектра статистическими флуктуациями экспериментальных значений: шум и m линейных по случайным параметрам a_j случайных функций $a_j u_j(x)$. Статистические свойства этих функций явно заданы — это формулы (4) — (7). Поскольку случайные параметры a_j входят в модель (3) линейно, то будем называть ее линейной стохастической моделью. Модель учитывает искажения истинного спектра и флуктуациями фона, и флуктуациями числа отсчетов в пике. Но когда в (2) положили, что функция $u_1(x)$, описывающая форму истинного пика, совпадает с функцией $u_2(x)$, описывающей случайные отклонения от этой кривой, то заложили тем самым основное ограничение модели — флуктуациями числа экспериментальных отсчетов в пике искажается только его истинная амплитуда, а форма пика и его положение за счет этого не меняются. В то же время флуктуации в числе фоновых отсчетов (шум) приводят, согласно модели, к искажению в спектре и амплитуд, и положений всех пиков, и их формы.

Из всего разнообразия задач, приводящих к информации спектрального типа, можно выделить распространенный и практически важный случай, который рассмотренной модели соответствует почти полностью: определение спектрометрическими методами соотношения компонент в образце известного состава. В этом случае характеристический спектр каждой из компонент известен и поэтому положения пиков в обрабатываемом спектре можно считать заданными. Следовательно, ограничение модели, пренебрегающей случайными искажениями положений за счет флуктуаций числа отсчетов в пиках, здесь можно считать несущественным. Линейную модель (3) можно обобщить и включить в рассмотрение случайные искажения амплитуд, положений и формы пика за счет флуктуаций числа отсчетов под пиком. Однако в таком случае модель становится нелинейной по случайным параметрам и тогда трудно рассчитывать на получение с ее помощью аналитических результатов.

В [17] рассмотренная линейная стохастическая модель одномерных линейчатых спектров [16] обобщена на случай линейчатых спектров произвольной k -й размерности, которая может быть полезна, например, при анализе двумерных или трехмерных спектров, получаемых в корре-

ляционных экспериментах в области ядерной спектроскопии (совпадения $\gamma\gamma$, $\gamma\gamma I$ и т.д.).

3. АВТОМАТИЧЕСКИЙ ПОИСК ПИКОВ И ПОКАЗАТЕЛИ ЕГО КАЧЕСТВА.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРОГА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПОИСКА

Допустим, что на основе некоторого критерия установлено, что в спектре (3) кроме фона, информация о котором не имеет существенного значения, присутствует $m - 1$ пик. Будем искать количественный критерий и показатели его качества, на основе которого можно сделать статистически оправданный вывод о том, какая из двух следующих альтернативных гипотез более вероятна. Гипотеза H_0 : в спектре (3) m -й пик отсутствует, спектр $y(x)$ содержит $m - 1$ пик. Гипотеза H_1 : в спектре (3) m -й пик присутствует, спектр $y(x)$ содержит m пиков. Если такой критерий известен, то при его последовательном m -кратном применении можно установить полное число пиков в спектре.

Перепишем выражение (3) в виде

$$y(x) = u_c(x) + \sum_{j=1}^m a_j u_j(x) + u_s(x) + u_i(x), \quad (8)$$

где

$$u_s(x) = \text{fon}_0(x) + \sum_{j=1}^{m-1} a_{0j} u_j(x); \quad u_i(x) = a_{0m} u_m(x). \quad (9)$$

Таким образом, задача о выборе гипотез H_0 и H_1 есть задача об обнаружении полностью детерминированного процесса $u_i(x)$ на фоне шума $u_c(x)$, m мешающих процессов со случайной амплитудой (a_j для j -го процесса) и мешающего полностью детерминированного процесса $u_s(x)$. Аналогичные задачи возникают также в теории обнаружения радиолокационных сигналов в присутствии помех.

Функции от номера канала x представим в виде многомерных векторов, координатные составляющие которых суть дискреты Котельникова [18]. Тогда формула (8) приобретает вид

$$y = u_c + \sum_{j=1}^m a_j u_j + u_s + u_i. \quad (10)$$

Плотность вероятности $p_0(u)$ случайной реализации некоторого вектора u белым гауссовым шумом с нулевым средним значением и постоянной плотностью мощности N_0 есть

$$p_0(\mathbf{u}) = (\pi N_0)^{\nu/2} \exp(-\mathbf{u}^2/N_0), \quad (11)$$

где ν — размерность векторного пространства, которому принадлежит вектор \mathbf{u} . Плотность вероятности $p_m(\mathbf{u})$ случайной реализации вектора \mathbf{u} шумом и m мешающими процессами со случайной амплитудой a_j найдем, используя выражение (11) и закон суперпозиции распределений вероятностей:

$$p_m(\mathbf{u}) = p_{m-1}(\mathbf{u}) \left(\frac{N_0/\sigma_m^2}{2\mathbf{u}_m \mathbf{R}_m + N_0/\sigma_m^2} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{2(\mathbf{u} \mathbf{R}_m)^2}{N_0(2\mathbf{u}_m \mathbf{R}_m + N_0/\sigma_m^2)} \right], \quad (12)$$

где

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{u}_1; \quad \mathbf{R}_m = \mathbf{u}_m - 2 \sum_{j=1}^{m-1} \frac{\mathbf{R}_j(\mathbf{u}_m \mathbf{R}_j)}{2\mathbf{u}_j \mathbf{R}_j + N_0/\sigma_j^2}. \quad (13)$$

Предполагается, что распределение плотности вероятности для случайного параметра a_j имеет вид симметричного гауссиана (4). Плотность вероятности $p_{m+1}(\mathbf{u})$ случайной реализации вектора \mathbf{u} шумом, m мешающими процессами со случайной амплитудой и полностью детерминированным процессом \mathbf{u}_s равна

$$p_{m+1}(\mathbf{u}) = p_m(\mathbf{u}) \exp[-(\mathbf{u}_s \mathbf{R}_{m+1}^s - 2\mathbf{u} \mathbf{R}_{m+1}^s)/N_0], \quad (14)$$

$$\mathbf{R}_{m+1}^s = \mathbf{u}_s - 2 \sum_{j=1}^m \frac{\mathbf{R}_j(\mathbf{u}_s \mathbf{R}_j)}{2\mathbf{u}_j \mathbf{R}_j + N_0/\sigma_j^2}. \quad (15)$$

Аналогично плотность вероятности $p_{m+2}(\mathbf{u})$ случайной реализации вектора \mathbf{u} шумом, m мешающими процессами со случайной амплитудой и полностью детерминированными процессами \mathbf{u}_s и \mathbf{u}_i запишем в виде

$$p_{m+2}(\mathbf{u}) = p_m(\mathbf{u}) \exp[-(\mathbf{u}_{s+i} \mathbf{R}_{m+1}^{s+i} - 2\mathbf{u} \mathbf{R}_{m+1}^{s+i})/N_0], \quad (16)$$

где $\mathbf{u}_{s+i} = \mathbf{u}_s + \mathbf{u}_i$, а формула для \mathbf{R}_{m+1}^{s+i} аналогична формуле (15).

Разделив почленно равенство (16) на равенство (14), получим отношение правдоподобия

$$l(\mathbf{u}) = \frac{p_{m+2}(\mathbf{u})}{p_{m+1}(\mathbf{u})} = \exp[-(\mathbf{u}_i \mathbf{R}_{m+1}^i + 2\mathbf{u}_s \mathbf{R}_{m+1}^i - 2\mathbf{u} \mathbf{R}_{m+1}^i)/N_0]. \quad (17)$$

Функционал правдоподобия (17) показывает, во сколько раз вероятность реализации вектора \mathbf{u} шумом, m мешающими процессами со случайной амплитудой, детерминированным мешающим процессом u_s и подлежащим обнаружению детерминированным процессом u_i больше вероятности реализации вектора \mathbf{u} только мешающими процессами. Он и задает для модели (3) статистически оптимальный алгоритм обнаружения пика (процесса u_i в спектре (10)) и тем самым статистически оправданный количественный критерий выбора между гипотезами H_0 и H_1 . Если это отношение на некоторой функции \mathbf{u} (экспериментальный спектр \mathbf{u} или его часть) имеет значение больше порогового

$$l(\mathbf{u}) > l_0, \quad (18)$$

то следует отдать предпочтение гипотезе H_1 , в противном случае — гипотезе H_0 . Эти результаты были впервые получены в [16].

Для альтернативных гипотез, каковыми являются гипотезы H_0 и H_1 , показателями качества алгоритма обнаружения являются условная вероятность F ложного обнаружения (статистическая обеспеченность критерия) и условная вероятность D истинного обнаружения (мощность критерия). Для их вычисления найдем плотность вероятности случайного эффекта оптимальной обработки шума и мешающих процессов. Введем для этого логарифмический частный функционал правдоподобия

$$z = \mathbf{u} \mathbf{R}_{m+1}^i = \mathbf{u}_c \mathbf{R}_{m+1}^i + \sum_{j=1}^m a_j \mathbf{u}_j \mathbf{R}_{m+1}^i + \mathbf{u}_s \mathbf{R}_{m+1}^i = z_c + \sum_{j=1}^m z_j + z_s \quad (19)$$

и найдем закон распределения вероятности и дисперсию для z . Учитывая, что z_c и z_j являются некоррелированными случайными величинами, распределенными по Гауссу с нулевым средним значением, а z_s — постоянная, для z получаем следующий закон распределения вероятностей:

$$\mu(z) = (2\pi \sigma_z^2)^{-1/2} \exp[-(z - z_s)^2 / (2\sigma_z^2)] \quad (20)$$

с дисперсией

$$\sigma_z^2 = N_0 \mathbf{u}_i \mathbf{R}_{m+1}^i / 2. \quad (21)$$

Поскольку условные вероятности ложного F и истинного D обнаружения пиков определяются равенствами

$$F = \int_{z_0}^{\infty} \mu(z) dz; \quad (22)$$

$$D = \int_{z_0}^{\infty} l(z) \mu(z) dz, \quad (23)$$

где z_0 — пороговое значение частного функционала правдоподобия z , то, учитывая (17), (20), (21), из (22), (23) найдем

$$F = [1 - \Phi(q_0)]/2, \quad (24)$$

$$D = [1 + \Phi(q - q_0)]/2, \quad (25)$$

где $\Phi(q)$ — интеграл вероятностей, а для q_0 и q имеем

$$q_0 = (z_0 - z_s)/\sigma_z, \quad (26)$$

$$q = (2\sigma_z/N_0) (2u_i R_{m+1}^i/N_0)^{1/2}. \quad (27)$$

Формулы (24)–(27), определяющие условные вероятности ложного и истинного обнаружения, определяют показатели качества оптимального алгоритма обнаружения пиков для линейной стохастической модели спектров (3). Они также впервые получены в [16]. Параметр q_0 , который входит в эти формулы, определяют по заданной максимальной приемлемой вероятности ложного обнаружения F : он связан с пороговым значением z_0 частного функционала правдоподобия (или порогом чувствительности поиска). В [16] для примеров $m = 1$ (синглет) и $m = 2$ (дублет) приведены в явном виде аналитические выражения, определяющие F и D — показатели качества модельного статистически оптимального алгоритма поиска в предположении, что форма пиков в спектре описывается симметричной гауссовой кривой. В качестве оценок σ_j были взяты значения, вычисленные по эмпирическим формулам (48), (54) (разд.4). Параметр q , с помощью которого определяется (27) условная вероятность D истинного обнаружения пика при заданной вероятности F его ложного обнаружения, можно вычислить и для случаев $m > 2$ в виде функции от параметров всех пиков, образующих мультиплет, фона и величин σ_j . Правда, явный вид выражений для σ_j известен пока только для синглета (48) и дублета (54), однако это не исключает возможности практического применения результатов, так как в качестве оценок σ_j для мультиплетов с $m > 2$ в начальном приближении можно принять полученную в результате их обработки погрешность в определении амплитуд пиков, образующих мультиплет.

При выводе соотношений (24)–(27) нигде существенно не использовалась информация о форме пиков, поэтому они могут применяться при

любом конкретном виде функций $u_j(x)$. В частности, они могут быть заданы таблично.

Таким образом, для рассмотренной линейной стохастической модели обрабатываемого спектра (3) в общем виде получен алгоритм статистически оптимального обнаружения пиков в присутствии фона и произвольного числа мешающих пиков и определены показатели качества этого алгоритма — условные вероятности F и D . С помощью полученных результатов для мультиплета произвольного m -го порядка (состоящего из m пиков), используя найденные в результате его обработки значения параметров всех пиков и их погрешности (ошибки амплитуд), можно сделать статистически оправданный выбор между двумя альтернативными гипотезами: m -й пик присутствует в составе мультиплета или m -й пик отсутствует в составе мультиплета.

На основе линейной стохастической модели k -мерных линейчатых спектров приведенные здесь результаты обобщены на случай идентификации пиков в спектрах произвольной k -й размерности [17]. Показано, что оптимальный модельный алгоритм обнаружения k -мерных пиков и показатели его качества также определяются формулами (17), (24), (25), однако в этом случае их записывают не для векторов, а для матриц размерностью $k \times k$.

Теперь рассмотрим подробнее наиболее часто встречающуюся на практике идентификацию одиночных пиков ($m = 1$) и на основе общей формулы (17) исследуем модельный статистически оптимальный алгоритм их поиска. Предполагаем, что спектр состоит только из пиков, которые отстоят друг от друга настолько далеко, что их взаимным влиянием можно пренебречь. Идентификация пиков из состава дублетов ($m = 2$) или мультиплетов более высокого порядка ($m > 2$) — отдельная задача и для нее всякий раз существует свой оптимальный алгоритм обнаружения.

Из общей формулы (17) для идентификации одиночных пиков получим следующую формулу для логарифмического отношения правдоподобия (без ограничения общности полагаем, что спектр содержит только один пик):

$$L(y) = \alpha (a_0 / fon_0) (yu - fon u - a_0 u^2 / 2), \quad (28)$$

где $L(y) = \ln l(y)$; y — спектр; u — функция формы пика; a_0 — его истинная амплитуда. Фон fon под пиком для простоты полагаем постоянным с амплитудой fon_0 . Для коэффициента α имеем

$$\alpha = fon_0 / (fon_0 + u^2 \sigma^2). \quad (29)$$

Показатели качества (24), (25) оптимального алгоритма обнаружения (28) соответственно равны

$$F = [1 - \Phi ((\alpha/(2k))^{1/2} L_0)]/2, \quad (30)$$

$$D = \{1 + \Phi [(\alpha/(2k))^{1/2} (L_0 - a_0 k (b/\text{fon})^{1/2})]\}/2, \quad (31)$$

где Φ — интеграл вероятностей; $L_0 = \ln l_0$ — пороговое значение L (l_0 — правая часть неравенства (18)); α определяется формулой (29). Предполагается, что форма пика — симметричный гауссиан с полушириной b каналов. Тогда $u^2 = kb$ с $k = (\pi/(8 \ln 2))^{1/2}$.

Видно, что оптимальный модельный алгоритм обнаружения одиночных пиков (28) и показатели его качества (30), (31) явно зависят от истинных значений параметров идентифицируемого пика (a_0 , u) и от истинного значения фона под пиком (fon_0). Поскольку эти параметры априори при поиске неизвестны, то оптимальный алгоритм обнаружения (28) в полном объеме в принципе реализовать нельзя.

Чтобы реализовать модельный оптимальный алгоритм обнаружения хотя бы частично, на основе частного функционала правдоподобия (28) построим частный функционал правдоподобия $z(y)$, который уже не зависит явно от истинной амплитуды пика a_0 :

$$z(y) = (yu - \text{fon } u) (\text{fon}_0 u^2)^{-1/2}. \quad (32)$$

Поскольку для $z(y)$ функцию формы пика u и фон fon можно приближенно найти предварительно (до или во время поиска), то функционал (32) уже можно использовать на практике как алгоритм поиска пиков с критерием обнаружения $z(y) > z_0$, где z_0 — некоторое пороговое значение z . Алгоритм обнаружения на основе функционала (32) будем называть субоптимальным для модели спектра (3).

На основе этого алгоритма создана программа для ЭВМ (программа ALISA [19]). В ней вместо имеющихся в (32) скалярных произведений (интегралов) в каждом канале x_i обрабатываемого спектра вычисляется сумма

$$z(x_i) = (\text{fon}_0 b)^{-1/2} \sum_{x=x_i-b}^{x_i+b} [y(x) - \text{fon}_0(x)] u(x - x_i), \quad (33)$$

где $y(x)$ — число отсчетов в канале x ; $\text{fon}_0(x)$ — оценка истинного значения фона в канале x , за которую принята прямая, проходящая через точки с координатами $(x_i - 2b, y_-)$ и $(x_i + 2b, y_+)$, а y_- , y_+ — средние значения числа отсчетов $y(x)$ по трем близлежащим к $(x_i - 2b)$ и $(x_i + 2b)$ каналам; $u(x - x_i) = \exp(-\ln 16(x - x_i)^2/b^2)$ — функция формы идентифицируемого пика (b — его полуширина). При таком ее выборе $u^2 = kb$ (не-

существенный здесь коэффициент k в (33) опущен). Имеется также вариант программы с дополнительным критерием, исключающим из рассмотрения пики с малой полушириной (пик считается идентифицированным, если $z(x_i) > z_0$ в двух или более соседних каналах или если эти каналы разделены одним каналом, для которого $z(x_i) < z_0$).

Количественные характеристики (F и D) качества этой программы, реализующей модельный субоптимальный алгоритм поиска, обсудим несколько ниже. А сейчас подчеркнем, что условная вероятность F ложного обнаружения является параметром алгоритма поиска и поэтому ее значение оператор, ведущий обработку, должен задавать из независимых соображений, руководствуясь только требованиями, предъявляемыми к этой обработке. Условные вероятности F и D образуют систему равенств

$$D + P_D = 1; \quad F + P_F = 1, \quad (34)$$

где D — вероятность обнаружения пика при условии, что он действительно присутствует в спектре; P_D — вероятность его необнаружения при том же условии; F — вероятность обнаружения пика при условии, что в обрабатываемом спектре пик на самом деле отсутствует (т.е. F — это вероятность ложной обработки, когда случайные статистические флуктуации экспериментальных данных интерпретируются как пик); P_F — вероятность необнаружения пика при том же условии. Поскольку вероятности F и D определены при разных условиях и для них справедливы формулы (24), (25), то

$$F + D \neq 1; \quad 0 < F \leq D < 1. \quad (35)$$

Из-за статистической природы экспериментальных данных никогда нельзя полностью исключить возможность интерпретации случайных флуктуаций в спектрах как истинного пика, поэтому всегда $F > 0$. По той же причине нельзя полностью исключить вероятность необнаружения в спектре истинного пика как угодно большой амплитуды, который может быть маскирован случайными флуктуациями экспериментальных значений, поэтому всегда $D < 1$. Из равенств (34) еще следует, что при идентификации пиков нулевой амплитуды, когда обрабатываются спектры без пиков, $F = D$. Таким образом, идеальная ситуация, когда в спектрах при их (автоматической) обработке всегда будут найдены все (в том числе малые) истинные пики, но не будет идентифицировано ни одного ложного, в принципе невозможна (всегда $F > 0$, $D < 1$).

Задавая вероятность ложного обнаружения F , необходимо найти приемлемый для экспериментов данного типа компромисс между двумя крайними возможностями. Первая — выбрать значение F большим. При этом обеспечивается высокая вероятность истинного обнаружения, в том

числе малых пиков. Однако и вероятность ложного обнаружения велика, т.е. среди идентифицированных пиков может встречаться много ложных. В этом случае чувствительность поиска высокая, но низка достоверность получаемого результата. Вторая — выбрать значение F малым. При этом вероятность истинного обнаружения меньше, поэтому при поиске часть пиков может быть пропущена, особенно малых. Однако вероятность ложного обнаружения также мала, т.е. среди идентифицированных пиков будет встречаться мало ложных. В этом случае чувствительность поиска низкая, но достоверность получаемого результата высока.

Чтобы найти связь между численными значениями показателей качества программ (алгоритмов) поиска пиков (F и D), параметрами обрабатываемых спектров и параметрами самих этих программ (алгоритмов), удобно воспользоваться [20] результатами проводимого на ЭВМ систематического модельного эксперимента. Для этого численно моделируют (конструируют) большое число коротких (5—10 (полу)ширин идентифицируемого пика) спектров с квазиэкспериментальной статистикой и постоянным истинным фоном, содержащих или не содержащих пик, форма которого точно известна (обычно это симметричный гауссиан). Амплитуда пика a , его полуширина b и амплитуда фона под пиком fon при этом точно известны, так как были заданы при конструкции. Обработка большого числа ($\sim 10^4 - 10^5$) таких спектров с квазиэкспериментальной статистикой позволяет для любого конкретного алгоритма идентификации пиков определить значение порога чувствительности поиска, соответствующего любому наперед заданному значению условной вероятности F ложного обнаружения, и определить зависимость условной вероятности D истинного обнаружения от значений параметров пика и фона (от a , b , fon) при этом значении F .

Численный эксперимент [20] проводят в два этапа. Во-первых, определяют зависимость F от порога чувствительности поиска. Для этого конструируют большое число квазиэкспериментальных спектров с постоянным фоном fon , не содержащих пиков ($a = 0$). Во всех этих спектрах исследуемая программа, работающая с фиксированным значением порога чувствительности, осуществляет поиск пиков. Тогда значение F , соответствующее заданному значению порога чувствительности поиска, есть

$$F = p/n, \quad (36)$$

где p — число найденных пиков; n — число обработанных спектров (предполагается, что в каждом спектре может быть только один пик). Во-вторых, определяют зависимость $D(a)$ условной вероятности D истинного обнаружения от амплитуды идентифицируемого пика a при фиксированном значении условной вероятности F ложного обнаружения

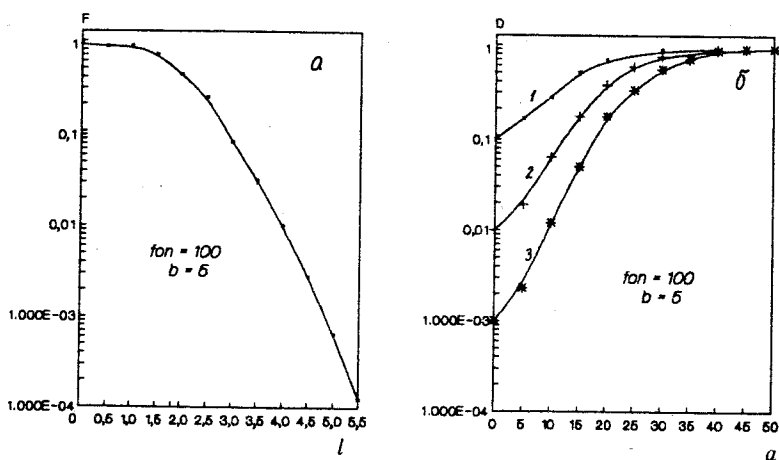


Рис. 1. Условная вероятность F ложного обнаружения в зависимости от значения l порога чувствительности поиска (а) и зависимости условной вероятности D истинного обнаружения при $F = 0,1; 0,01; 0,001$ (кривые 1, 2, 3 соответственно) от амплитуды a идентифицируемого пика (б) для программы [19], реализующей модельный субоптимальный алгоритм поиска (32). Точки — результат модельного эксперимента

(полуширина пика b и амплитуда фона под пиком fon в этом случае также фиксированы). Для этого конструируют большое число спектров с пиками разной амплитуды a (и постоянными b, fon), и программа поиска со значением порога чувствительности, соответствующим выбранному значению F (например, $F = 0,01$), ищет пики во всех таких спектрах. Тогда

$$D = p(a)/n(a), \quad (37)$$

где $p(a)$ — число идентифицированных пиков с амплитудой a ; $n(a)$ — число обработанных спектров, содержащих такие пики. Погрешности ΔF , ΔD найденных значений F и D вычисляются по формуле для погрешностей величин, распределенных по биномиальному закону. Например,

$$\Delta F = (F(1 - F)/n)^{1/2}. \quad (38)$$

На рис. 1—3 приведены для примера некоторые результаты исследования по приведенной выше методике [20] свойств программы (программа ALISA [19]), реализующей субоптимальный модельный алгоритм поиска (32), (33).

Зависимость условной вероятности F ложного обнаружения от порога l чувствительности поиска показана на рис. 1а, зависимость условной ве-

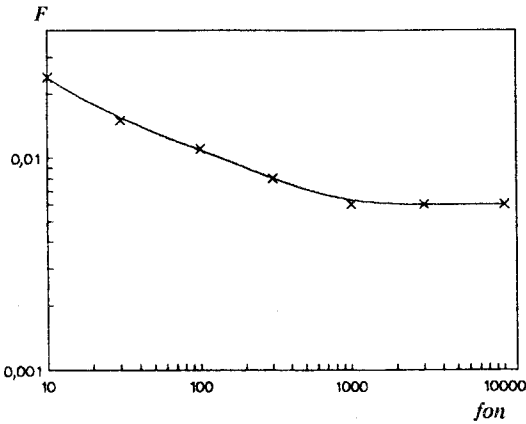


Рис.2. Зависимость F от амплитуды истинного фона fon в обрабатываемом спектре при фиксированном ($l = 4,0$) пороге чувствительности поиска для программы идентификации пиков [19]. (x) — результат модельного эксперимента

роятности D истинного обнаружения пика от его амплитуды a при $F = 0,1; 0,01; 0,001$ — на рис.1,б. Пример зависимости F от амплитуды фона fon , найденной при фиксированном пороге l чувствительности поиска, показан на рис.2. Из этого рисунка, в частности, следует, что в спектрах с переменным фоном, когда идентификация пиков осуществляется при постоянном пороге чувствительности поиска, значение условной вероятности F ложного обнаружения по спектру, хотя и не очень сильно, но меняется. Поэтому чтобы в таких спектрах с помощью программы [19] получить $F = const$ при поиске, его надо вести при переменном значении порога чувствительности l .

На рис.3 при $F = 0,1$ сравниваются зависимости вероятности $D(a)$ истинного обнаружения пиков от их амплитуды a для программы ALISA в двух ее вариантах (кривые 2,3), для программы ALISA, когда при ее работе истинные фон и полуширина гауссовых пиков в спектре априори точно известны (кривая 4), зависимости $D(a)$ для оптимального модельного алгоритма поиска, вычисленные в различных предположениях (кривые 1,5). Кривые 2,3,4 построены по значениям, полученным в результате модельного эксперимента на ЭВМ, кривые 1,5 рассчитаны по формулам (30), (31). Кривая 5 получена при $\alpha = 1$, кривая 1 — при значении α , определяемом формулой (29), когда в качестве оценки σ берется потенциальная погрешность определения амплитуды одиночного пика по формуле (48). Значение $\alpha = 1$ получается из (29) при $\sigma = 0$, т.е. случай соответствует более простой, чем (3), стохастической модели, в которой учитываются случайные искажения истинного спектра статистическими флуктуациями экспериментальных значений только фона, а увеличением числа отсчетов в области пиков пренебрегается. Из рисунка видно, что кривые 1,5 ограничивают экспериментальные зависимости 2,3,4

Рис.3. Зависимость условной вероятности D истинного обнаружения пика симметричной гауссовой формы с полушириной $b = 5$ каналов при постоянном фоне с истинной амплитудой $fon = 100$ отсчетов от его амплитуды a с условной вероятностью ложного обнаружения $F = 0,1$: 1 — расчет (31) с σ (48); 2 — ALISA [19] без дополнительного критерия; 3 — ALISA [19] с дополнительным критерием; 4 — ALISA [19] с априори точно известными истинным фоном и полушириной идентифицируемого пика; 5 — расчет (31) с $\alpha = 1$. Точки на кривых 2, 3, 4 — результат модельного эксперимента. Расчет $D(a)$ по формуле (31) с σ (39) приводит к полному совпадению кривых 1 и 3

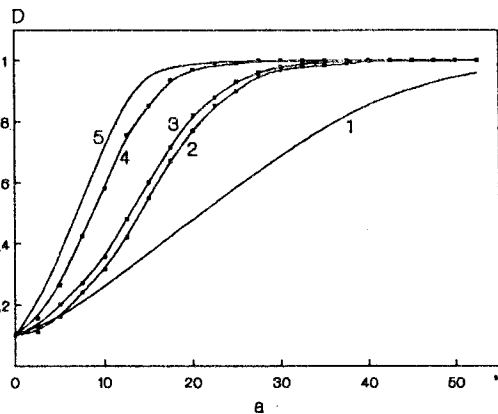


Рис.3. Зависимость условной вероятности D истинного обнаружения пика симметричной гауссовой формы с полушириной $b = 5$ каналов при постоянном фоне с истинной амплитудой $fon = 100$ отсчетов от его амплитуды a с условной вероятностью ложного обнаружения $F = 0,1$: 1 — расчет (31) с σ (48); 2 — ALISA [19] без дополнительного критерия; 3 — ALISA [19] с дополнительным критерием; 4 — ALISA [19] с априори точно известными истинным фоном и полушириной идентифицируемого пика; 5 — расчет (31) с $\alpha = 1$. Точки на кривых 2, 3, 4 — результат модельного эксперимента. Расчет $D(a)$ по формуле (31) с σ (39) приводит к полному совпадению кривых 1 и 3

сверху и снизу. Тот, на первый взгляд парадоксальный, факт, что теоретическая кривая 1 для оптимального алгоритма поиска лежит ниже кривых 2,3,4 для разных вариантов программной реализации субоптимального алгоритма поиска, объясняется неполным соответствием между моделью спектра (3) и используемой при построении кривой 1 (вынужденно, из-за отсутствия других) оценкой дисперсии σ (48). Дело в том, что оценка (48) найдена для случая, когда погрешность σ определяется и фоновыми отсчетами, и отсчетами в пике, а для подстановки в (29) нужна оценка, определяемая только отсчетами в пике. Поэтому использование при вычислении α , F и D значения σ , рассчитанного по формуле (48), приводит к двукратному учету фона и за счет этого — к занижению вычисленных значений $D(a)$. Расчетная кривая 1 полностью совмещается с эмпирической кривой 3, если для вычисления σ использовать формулу

$$\sigma = 3,4 [1 + 2(a/fon)^{-1/2}] b^{-1/2}, \quad (39)$$

которая найдена тоже эмпирически при подгонке кривой 3 выражениями (29)—(31) с σ в качестве варьируемого параметра (функции). Такое совмещение найденной по результатам модельного эксперимента кривой 3 и расчетной модельной кривой означает, что стохастическая модель (3) с определяемым по формуле (39) значением σ позволяет полностью количественно описать качество программы, реализующей субоптимальный алгоритм поиска. Расчетная кривая 5 лежит много выше кривых 2,3,4. Это обусловлено тем, что при вычислении $D(a)$ по формуле (31) с

$\alpha = 1$ пренебрегается увеличением флуктуаций в области пика, а амплитуда a , полуширина пика b и фон под пиком fon предполагаются априори точно известными. Расчетную кривую 5 можно приблизить к эмпирической кривой 3, если использовать в вычислениях эффективный фон $fon_{eff} \sim 4fon$, однако при этом форма эмпирической кривой полностью не воспроизводится.

Из рис.3 также следует, что зависимость $D(a)$ для программы ALISA с дополнительным тестом (кривая 3) всюду выше, чем для того же алгоритма без этого теста (кривая 2). Это говорит о возможности улучшения качества поиска путем введения в программу дополнительных критериев, содержащих априорную информацию о спектре (в данном случае содержание этой априорной информации в том, что пик в спектре не может быть с полушириной менее двух каналов). Однако гораздо большее влияние оказывает на качество поиска пиков использование априорной информации об истинном фоне fon в обрабатываемых спектрах (кривая 4 на рис.3 гораздо выше кривых 2,3). Таким образом, качество программ поиска тем лучше, чем большее количество априорной информации об обрабатываемом спектре они используют. Получать такую дополнительную информацию о спектрах можно, например, при их итеративной обработке в целом.

В [21] влияние дополнительных критериев на качество программ поиска пиков исследовано специально. Для четырех программ из [22—24] по методике работы [20] проверена целесообразность применения используемых в них дополнительных критериев для улучшения качества программ поиска.

При сравнении оригинальных авторских текстов на Фортране программ PEAK FIND [22], PEAKS [23], PEAK и PEAKI [24] с описаниями их алгоритмов из соответствующих работ во всех программах были выделены группы из нескольких операторов, которые проверяют результаты вычислений по описанным алгоритмам на соответствие некоторым дополнительным критериям. Каждая из названных программ исследовалась в двух вариантах: в оригинальном авторском варианте и в варианте, из оригинального текста которого были изъяты группы операторов, реализующих авторские дополнительные критерии. Эти варианты каждой из программ рассматривались в дальнейшем как самостоятельные программы и исследовались независимо.

С помощью ЭВМ конструировали большое число спектров длиной 40 каналов, содержащих пики симметричной гауссовой формы с амплитудой a , или спектры без пиков. В каждом из этих спектров каждая из программ (в обоих вариантах) осуществляла поиск пиков при определенном значении параметра, определяющего порог чувствительности

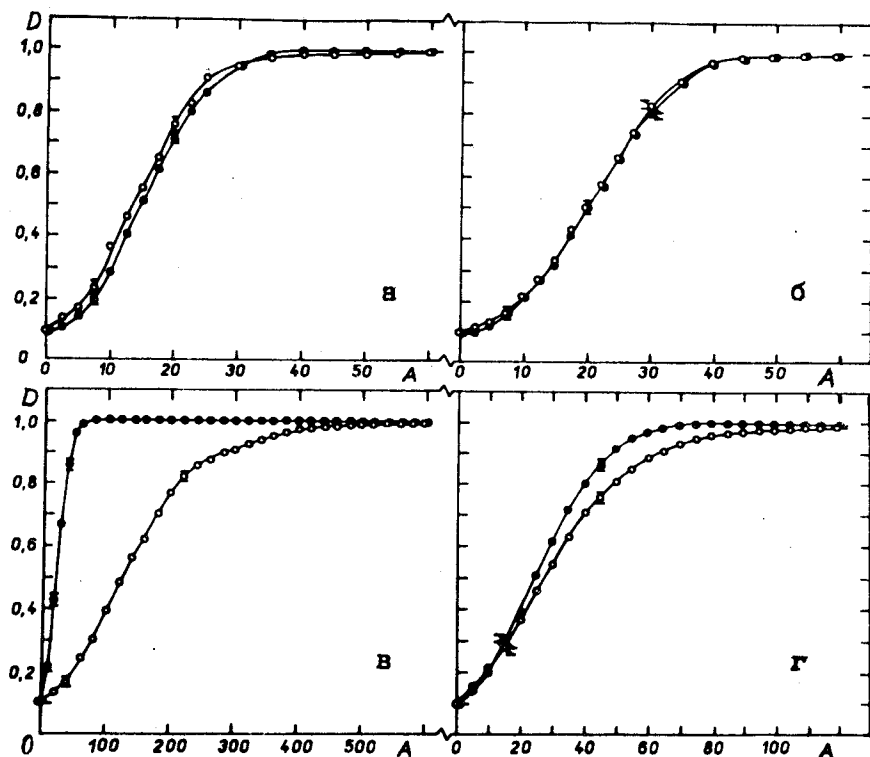


Рис.4. Влияние дополнительных критериев идентификации на качество программ поиска пиков. Точки — значения (по результатам модельного эксперимента) условной вероятности D истинного обнаружения пиков симметричной гауссовой формы с амплитудой a отсчетов и полушириной $b = 5$ каналов на фоне $fon = 100$ отсчетов при значении порога чувствительности поиска, соответствующем условной вероятности ложного обнаружения $F = 0,1$ для программ поиска пиков PEAK FIND (а), PEAKS (б), PEAK (в) и PEAKI (г) с дополнительными критериями (о) и без этих критериев (*)

поиска. При обработке спектров без пиков ($a = 0$) для каждой из программ была найдена зависимость условной вероятности F ложного обнаружения от порога чувствительности поиска и значения этих порогов, соответствующих $F = 0,1$. Затем при обработке модельных спектров, содержащих пики разной амплитуды a , для всех программ были найдены зависимости $D(a)$ при $F = 0,1$. Результаты показаны на рис.4, где приведены зависимости $D(a)$ при $F = 0,1$ для всех четырех программ в обоих

вариантах. Результаты для программ с дополнительными критериями показаны светлыми кружками, а для программ без них — темными. Из рисунка видно, что для программ из [22,23] с дополнительными критериями и без них зависимости $D(a)$ приблизительно одинаковы (хотя качество PEAK FIND [22] с дополнительным критерием несколько лучше, чем без него) и, следовательно, качество идентификации пиков обоими вариантами этих программ тоже практически одинаково. А использование дополнительных критериев в программах из [24] заметно ухудшает их качество почти во всем диапазоне амплитуд идентифицируемых пиков. Отсюда следует, что эти программы легко улучшить, изъяв из них критерии, которые были введены их авторами для улучшения качества идентификации пиков. Тогда характеристики этих программ будут в целом такими же, как и программ поиска из [22,23]. Полученные результаты показывают, что к внесению дополнений в алгоритмы программ поиска пиков следует относиться с осторожностью, так как можно получить эффект, обратный ожидаемому. Они хорошо иллюстрируют известное положение о том, что никакие преобразования над исходным спектром не могут увеличить количество извлекаемой из него информации, если не делать каких-либо дополнительных априорных предположений о свойствах этого спектра.

Алгоритмы поиска одиночных пиков — это процедуры принятия решений для простых альтернативных гипотез, показатели качества которых — условная вероятность F ложного обнаружения (значимость критерия) и условная вероятность D истинного обнаружения (мощность критерия). Чтобы оценить качество алгоритма или конкретной программы поиска пиков, надо найти зависимость условной вероятности D истинного обнаружения (при $F = \text{const}$) от параметров идентифицируемых пиков и фона в спектре. Чтобы сравнить между собой качество разных алгоритмов или программ поиска пиков, надо сравнить между собой найденные для них зависимости D от параметров идентифицируемых пиков и фона в спектре при одном и том же, одинаковом для всех сравниваемых программ, значении F . Тогда лучше будет качество идентификации пиков той программой, для которой значение D больше (при $F = \text{const}$ и одинаковых значениях параметров пиков и фона). Такой способ сравнения программ автоматического поиска пиков с использованием для вычисления характеризующих их значений F и D результатов модельного эксперимента по методике работы [20] предложен в [25]. Сравнение будет корректным, если функция распределения вероятностей $\mu(z)$ в формулах (22), (23) для разных программ поиска действительно описывается симметричной гауссовой кривой. В [26] на примере нескольких реальных программ показано, что это предположение выполняется. Количествен-

ное сравнение качества описанных в [7,19,22—24,27,28] программ автоматического поиска пиков выполнено в [29].

Каждая программа поиска должна содержать минимум два параметра, с помощью которых осуществляется ее настройка: порог чувствительности и параметр (полу)ширины, (напомним, он определяет характерную ширину максимумов в спектре, которые следует интерпретировать как пик). Порог чувствительности поиска действительно имеется в числе формальных параметров каждой из сравниваемых программ, а параметр ширины, к сожалению, участвует в качестве формального параметра не во всех этих программах (зачастую они сразу жестко настраиваются авторами на поиск пиков с полушириной ~ 5 каналов, характерных для γ -спектров от полупроводниковых детекторов). Параметр ширины является формальным параметром только для 4 из 8 сравниваемых программ из [7,19,22—24,27,28] и в [29] не было возможности провести их настройку по этому параметру. Поэтому параметр ширины не варьировался, зато полуширина пиков в квазиэкспериментальных спектрах, по результатам обработки которых проводилось сравнение качества программ, выбрана равной 5 каналам — наиболее типичному значению полуширины пиков в γ -спектрах от полупроводниковых детекторов. Путем анализа каждой из сравниваемых программ $\sim 10^5$ коротких квазиэкспериментальных спектров без пиков были найдены зависимости F от порога чувствительности поиска (как на рис.1,а) для всех исследуемых программ и для каждой из них определено такое значение порога, которое соответствует значению условной вероятности ложного обнаружения $F = 0,1$. При найденных значениях параметра чувствительности поиска, соответствующих $F = 0,1$, путем анализа с помощью каждой из программ еще $\sim 10^5$ коротких квазиэкспериментальных спектров с пиками симметричной гауссовой формы и разной амплитуды были найдены зависимости условной вероятности $D(a)$ истинного обнаружения от амплитуды a идентифицируемого пика. При определении F и D постоянная составляющая в квазиэкспериментальных спектрах равна 100 отсчетов. Полученные результаты приведены на рис.5.

Из сопоставления зависимостей $D(a)$ на рис.5 видно, что большинство программ близки по качеству между собой (кривые 2—5,7,8). Низкое значение $D(a)$ для программы РЕАКИ (кривая 6) связано с ухудшением качества этой программы за счет используемого в ней дополнительного критерия поиска (см. рис.4,в и [21]). Наибольшее значение D при всех амплитудах a идентифицируемых пиков характерно для программы ALISA [19], следовательно, она лучшая среди сравниваемых программ. Кривая 9 определяет зависимость $D_0(a)$ для оптимального модельного ал-

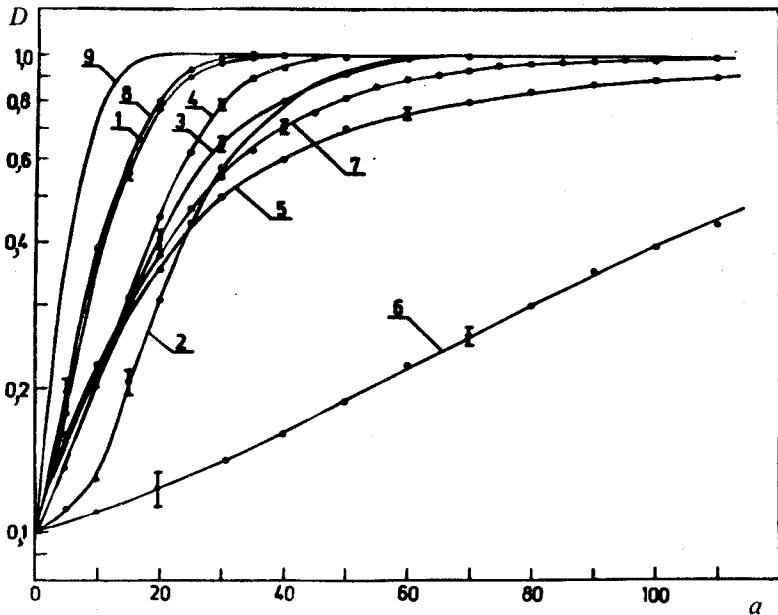
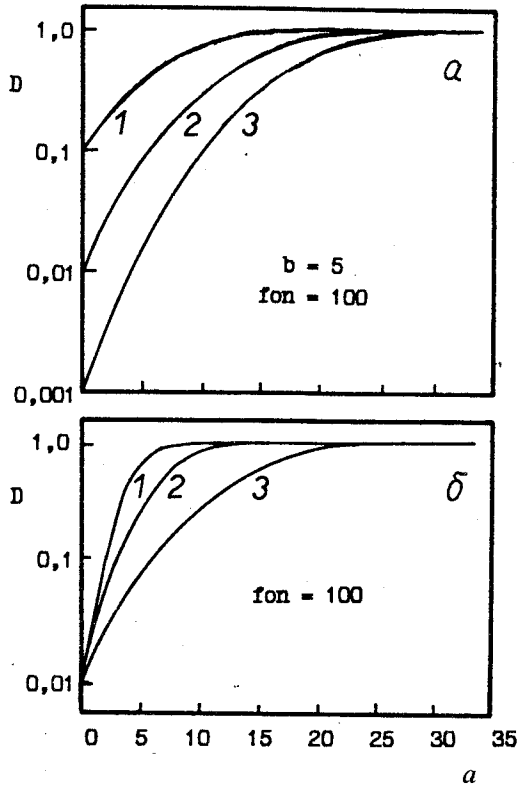


Рис.5. Сравнение качества программ автоматического поиска пиков при фиксированном значении условной вероятности ложного обнаружения $F = 0,1$: 1 — PEAK FIND [23]; 2 — SUCH [29]; 3 — SUPIK [7]; 4 — PEAKS [24]; 5 — FIND [30]; 6 — PEAK [25]; 7 — PEAKI [25]; 8 — ALISA [19]; 9 — расчет $D(a)$ для модельного оптимального алгоритма поиска (31) с $\alpha = 1$

горитма поиска в предположении, что спектр искажается только статистическими флуктуациями фона и что параметры фона и идентифицируемого пика точно известны (формула (31) с $\alpha = 1$). Кривые 8,9 на рис.5 те же, что кривые 3,5 на рис.3, при обсуждении которого, напомним, был сделан вывод о том, что улучшения качества программы ALISA можно добиться за счет использования априорной информации о спектре. Поскольку ALISA — лучшая из исследованных программ, то этот вывод теперь можно дополнить утверждением: наиболее вероятно, что использование дополнительной априорной информации о спектре является еще и единственным путем для повышения качества идентификации пиков с помощью модельного субоптимального алгоритма поиска (32), (33).

Сравнение качества реальных программ автоматического поиска одиночных пиков в многомерных линейчатых спектрах выполнить пока, к сожалению, нельзя просто из-за отсутствия таких достаточно полных программ даже для обработки двумерных спектров. Поэтому приведем

Рис.6. Показатели качества модельного оптимального алгоритма поиска одиночных пиков в двумерных спектрах [17] — зависимость условной вероятности $D(a,b)$ истинного обнаружения пиков симметричной гауссовой формы от их амплитуды a и полуширины b на постоянном фоне $fon = 100$ отсчетов. a — кривые 1,2,3 — расчет при $b = 5$ для $F = 0,1; 0,01; 0,001$ соответственно; b — кривые 1,2,3 — расчет при $F = 0,01$ для $b = 15; 10; 5$ соответственно. Все расчеты проведены со значением σ по формуле (72)



для иллюстрации только показатели качества идентификации одиночных пиков симметричной гауссовой формы на постоянном фоне в двумерных спектрах, вычисленные для оптимального модельного алгоритма поиска таких пиков, найденного в [17]. Приведенные на рис.6 зависимости условной вероятности $D(a, b)$ истинного обнаружения

двумерных пиков от их амплитуды a и полуширины b вычислены с использованием формулы (74) для σ — дисперсии случайного отклонения амплитуды двумерного пика от ее истинного значения, связанной со статистическими флуктуациями экспериментальных данных. Ранее из рис.3 мы видели, что использование формулы (48), аналогичной (74), для σ в случае одномерных спектров приводит к заниженным значениям $D(a)$ (соответствующая кривая 1 — самая нижняя на этом рисунке), поэтому и значения $D(a, b)$ на рис.6 следует интерпретировать только как оценки снизу значений условной вероятности истинного обнаружения двумерных пиков соответствующим оптимальным модельным алгоритмом поиска.

Показатели качества идентификации пиков — вероятности F и D — условные по отношению к первоначальной гипотезе о наличии пика в спектре, т.е. F — вероятность обнаружения, если известно, что пика в спектре нет (гипотеза H_0), а D — вероятность обнаружения, если извест-

но, что пик на самом деле существует (гипотеза H_1). Условные вероятности F и D определены при разных условиях, поэтому, как отмечалось, $F + D \neq 1$, а это и непривычно, и часто неудобно. Пользователя на самом деле интересуют безусловные по отношению к первоначальной гипотезе о наличии пика в спектре вероятности того, что обнаруженный при поиске пик является истинным $P_{и}$ или ложным $P_{л}$. Другими словами, при анализе результатов измерений надо установить вероятность существования некоторой линии, если заранее не оговорено ее 100%-ное присутствие (или отсутствие) в спектре. Эта задача легко решается [30], если известны условные вероятности F и D для каждого обнаруженного пика и если за результат опыта принимают не непосредственно измеренный спектр, а результат его обработки.

Пусть результатом измерения является событие A — обнаружен пик. Тогда $P_{л} = P(H_0|A)$ — вероятность того, что событие A является следствием осуществления гипотезы H_0 (пика в спектре нет); $P_{и} = P(H_1|A)$ — вероятность того, что событие A является следствием осуществления гипотезы H_1 (пик в спектре есть); $F = P(A|H_0)$ — вероятность события A при условии, что верна гипотеза H_0 ; $D = P(A|H_1)$ — вероятность события A при условии, что верна гипотеза H_1 , и по известной формуле Байеса имеем

$$P(H_i|A) = \frac{P(H_i) P(A|H_i)}{P(H_0) P(A|H_0) + P(H_1) P(A|H_1)}. \quad (40)$$

Откуда

$$P_{л} = \left(1 + \kappa \frac{D}{F}\right)^{-1}; \quad P_{и} = \left(1 + \kappa^{-1} \frac{F}{D}\right)^{-1}; \quad P_{и} + P_{л} = 1, \quad (41)$$

где $\kappa = P(H_1)/P(H_0)$; $P(H_0)$, $P(H_1)$ — априорные вероятности гипотез H_0 и H_1 ; $P_{и}$, $P_{л}$ — безусловные апостериорные вероятности истинного и ложного обнаружения.

Коэффициент κ в формулах для $P_{и}$, $P_{л}$ учитывает дополнительную априорную информацию о спектре. Наличие этого коэффициента в формулах для безусловных вероятностей количественно отражает тот принципиально важный факт, что окончательное решение о наличии или об отсутствии пика принимается с учетом всей доступной априорной информации о спектре, в том числе такой субъективной, как опыт экспериментатора. Вопрос о выборе конкретного численного значения κ сложен, практически не исследован и зависит от многих факторов, в том числе от

вида и цели проводимых исследований. Однако в большинстве случаев в начальном приближении можно считать, что для исследователя, обрабатывающего только один спектр и не обладающего дополнительной информацией об эксперименте, гипотезы H_0 и H_1 равновероятны и $\kappa = 1$. Поскольку для F и D всегда верно соотношение $0 < F \leq D < 1$, то при $\kappa = 1$ для безусловных вероятностей $P_{и}$, $P_{л}$ имеем

$$0 < P_{л} \leq 0,5; \quad 0,5 \leq P_{и} < 1, \quad (42)$$

т.е. по результатам одного измерения факт существования пика можно доказать с практически 100%-ной вероятностью, но доказать факт отсутствия пика без привлечения дополнительной информации очень трудно. Повышения надежности идентификации пиков можно добиться за счет повторных измерений, поэтому необходимо уметь вычислять апостериорные вероятности истинного и ложного обнаружения по результатам произвольной серии экспериментов.

Пусть проведена серия из n идентичных измерений одного и того же спектра, например, γ -спектра, причем в i измерениях при обработке обнаружен пик — событие A^{in} . Тогда по аналогии с выводом формулы (40) имеем: $P_{л}^{in} = P(H_0 | A^{in})$, $P_{и}^{in} = P(H_1 | A^{in})$ — вероятности гипотез H_0 (пика нет) и H_1 (пик есть) при условии, что событие A^{in} наблюдалось; $F_{in} = P(A^{in} | H_0)$, $D_{in} = P(A^{in} | H_1)$ — вероятности осуществления события A_{in} в предположении, что верны гипотезы H_0 и H_1 соответственно. Теперь по формуле Байеса с учетом введенных обозначений получим

$$P_{л}^{in} = \left(1 + \kappa \frac{D_{in}}{F_{in}} \right)^{-1}; \quad P_{и}^{in} = \left(1 + \kappa^{-1} \frac{F_{in}}{D_{in}} \right)^{-1}, \quad (43)$$

где $\kappa = P(H_1) / P(H_0)$ — отношение априорных вероятностей гипотез H_0 и H_1 .

Значения F_{in} и D_{in} можно найти [30], если для каждого из обработанных спектров известны показатели качества идентификации пиков — условные вероятности F и D :

$$F_{in} = \frac{n!}{i! (n-i)!} \prod_{k=1}^i F_k \prod_{l=i+1}^n (1 - F_l), \quad (44)$$

$$D_{in} = \frac{n!}{i! (n-i)!} \prod_{k=1}^i D_k \prod_{l=i+1}^n (1 - D_l), \quad (45)$$

где индекс k у F и D — для спектров, в которых найден пик, индекс l — для спектров, в которых пик не найден.

В рамках классической теории проверки статистических гипотез условные вероятности F_{in} , D_{in} имеют следующий смысл. Значение F_{in} — это вероятность принять ложный пик за истинный, если пик считают обнаруженным, когда он найден в i измерениях из n . Значение D_{in} — это вероятность повторения статистического опыта, т.е. если пик существует, то вероятность его обнаружить i раз при проведении n измерений равна D_{in} . Вероятности F_{in} и D_{in} можно также использовать при принятии решения о наличии пика, если обрабатывается сразу n спектров, или если обрабатывается один спектр, но несколькими (n) независимыми алгоритмами идентификации пиков. Тогда F_{in} , D_{in} будут количественными характеристиками качества применяемых методов обработки (первая попытка проверить целесообразность использования одновременно нескольких программ поиска при обработке одного и того же спектра описана в [31]).

Обсудим, наконец, выбор конкретного численного значения порога чувствительности поиска l , при котором целесообразно осуществлять поиск пиков с помощью автоматических программ. Но поскольку значение l содержательно интерпретировать нельзя (оно связано с особенностями программирования алгоритма поиска), то будем обсуждать не само это значение, а соответствующее ему значение условной вероятности F ложного обнаружения, так как F и l связаны взаимно однозначно (см., например, рис.1,а). Такой переход обеспечивает также единообразие при описании свойств разных программ поиска, так как одному и тому же значению F соответствует для каждой программы свое численное значение l , которое зависит от особенностей алгоритма, принятых в нем приближений, деталей программирования и т.д. Будем считать, что поиск пиков целесообразно осуществлять при том значении F (и соответствующем ему пороге чувствительности l), которое присуще человеку-оператору, когда он идентифицирует пики вручную при зрительном анализе обрабатываемого спектра (как это принято в программах автоматизированной обработки). Действительно, в этом случае пользователь, т.е. сам оператор, заведомо удовлетворен результатами поиска и, следовательно, здесь имеет место то оптимальное соотношение между чувствительностью поиска и достоверностью его результатов, которое соответствует требованиям к обработке спектров в экспериментах данного типа. Чтобы найти искомое значение F , надо исследовать количественные характеристики человека-оператора при (в задаче) идентификации пиков. Для него они те же, что и для автоматических программ, — условные вероятности F и D .

Такое исследование выполнено в [32] с помощью многократного модельного эксперимента по методике, полностью аналогичной методике [20], использованной ранее при сравнении качества автоматических программ [21, 29]. Моделировали большое число коротких квазиэкспериментальных спектров с пиками или без пиков (таких же, как в [20, 21, 29]), но идентификацию этих пиков осуществляла в них не программа поиска, а человек-оператор при зрительном анализе этих спектров на экране дисплея ЭВМ. Для решения этой задачи создана система программ АТОС (автоматический тест обработки спектров), которая моделирует спектры с квазиэкспериментальной статистикой длиной по 50 каналов, каждый из которых содержит либо один пик симметричной гауссовой формы и полушириной 5 каналов на постоянном фоне, либо только фон. Последовательность моделируемых спектров с пиком или без пика, амплитуда и положение максимума пика в спектрах с пиком формируются случайным образом, поэтому испытуемый человек-оператор не знает ни порядка следования спектров с пиком или без пика, ни положения и амплитуды a возможного пика в этих спектрах. Фон во всех случаях задавали постоянным и равным 100 отсчетам. Поскольку при поиске пиков машинными программами форма пика предполагается известной, то испытуемому во время работы в графическом виде на экране дисплея ЭВМ тоже предоставляют информацию о форме линии, не искаженной статистическими флуктуациями. Вычисление значений F и $D(a)$ для каждого испытуемого производится после того, как он завершил поиск пиков во всем запланированном для него объеме квазиэкспериментальных спектров. Во время испытаний взаимное наблюдение за ходом выполнения теста не допускали.

Качество поиска пиков при зрительном анализе спектров человеком существенно зависит от его предшествующего опыта, поэтому в число испытуемых были включены две группы лиц: профессионалы, имеющие большой практический опыт обработки спектров, и непрофессионалы, которые с проблемой идентификации пиков впервые знакомились перед началом испытаний по подготовленному для них единому информационному пакету (школьники, гуманитарии, студенты-физики первых курсов).

Пример результатов испытаний для группы профессионалов приведен на рис. 7. Видно, что качество поиска пиков разными операторами-профессионалами почти одинаково (соответствующие зависимости $D_{оп}(a)$ близки). Кроме того, для всех профессионалов оказалось практически одинаковым значение условной вероятности F ложного обнаружения: $F = 0,012 \pm 0,004$. Эти факты можно интерпретировать как количественное проявление того факта, что требования, предъявляемые к идентификации пиков операторами-профессионалами, и их возможности такой идентификации объективно близки, а $F \sim 0,01$ соответствует их

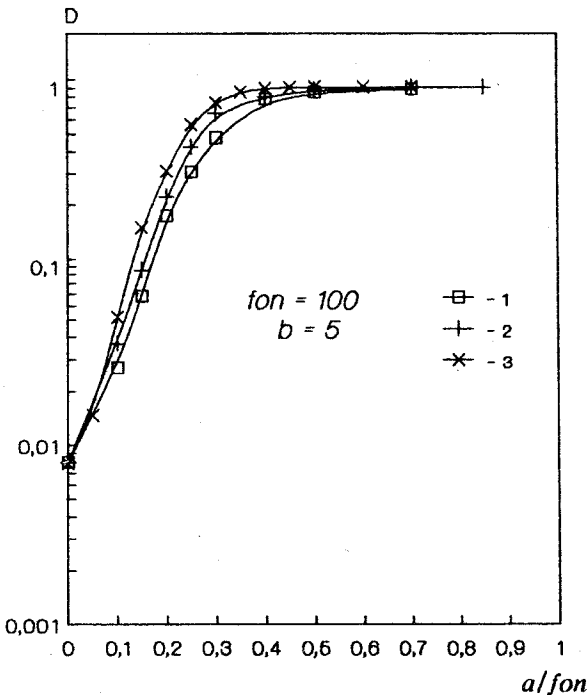


Рис.7. Зависимости условной вероятности $D(a)$ истинного обнаружения пика симметричной гауссовой формы с полушириной $b = 5$ каналов и амплитудой a на постоянном фоне ($fon = 100$ отсчетов) для операторов-профессионалов ($D_{оп}(a)$ — кривые 2,3) и для автоматической программы [19], реализующей модельный субоптимальный алгоритм поиска (32) ($D_{пр}(a)$) — кривая 1)

представлению о «хорошем» качестве поиска пиков. Отсюда следует вывод: автоматический поиск пиков в линейчатых спектрах с помощью машинных программ целесообразно проводить при таком значении порога чувствительности поиска, который соответствует условной вероятности ложного обнаружения $F \sim 0,1$. На рис.7 приведена также зависимость $D_{пр}(a)$ при $F \sim 0,01$ для программы [19], реализующей субоптимальный модельный алгоритм поиска (32). Видно, что при всех амплитудах $a > 0$ идентифицируемых пиков $D_{пр}(a) > D_{оп}(a)$, причем в диапазоне амплитуд $0,1 \leq a/fon \leq 0,2$ (fon — амплитуда фона под пиком) $D_{пр}(a) \cong 2D_{оп}(a)$, т.е. качество поиска пиков автоматической программой может быть лучше, чем операторами-профессионалами, в некоторых случаях приблизительно в два раза. Это означает, что автоматические программы могут не уступать человеку по эффективности поиска одиночных пиков в линейчатых спектрах, если человек и программа поставлены в одинаковые условия относительно априорной информации [33]. Более того, превышение значений $D(a) = D_{пр}(a)$ для автоматической программы над значениями $D(a) = D_{оп}(a)$ для операторов-

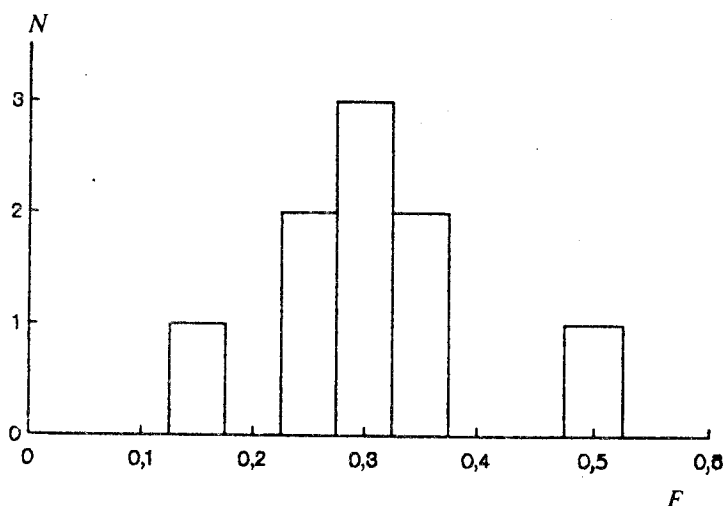


Рис.8. Гистограмма распределения значений условной вероятности F ложного обнаружения, построенная по результатам испытаний операторов-непрофессионалов. Тестирование проводилось [32] с помощью многократного модельного эксперимента

профессионалов при $F = \text{const}$ означает, что машинная программа использует доступную ей при поиске априорную информацию о спектре (форма и ширина идентифицируемых пиков) эффективнее, чем человек.

Результаты испытаний для группы непрофессионалов сильно отличаются от результатов для группы профессионалов. Из рис.8, где в виде гистограммы приведены значения F для испытуемых-непрофессионалов, видно, что имеется большой разброс значений, найденных в ходе испытаний, и что результаты группируются вокруг значения $F \cong 0,3$. Большой разброс этих значений, возможно, связан с трудностями, которые испытывают непрофессионалы при первоначальном осознании ими того, что такое пик. А тот факт, что спектры априори без пиков непрофессионалы сортируют на спектры с пиками и без пиков не равновероятно, требует дополнительного обсуждения. Его объяснение возможно на основе понятия о человеческой рефлексии. Согласно [34] в условиях отсутствия предпочтения выбора при неясных (неопределенных) критериях из двух альтернативных гипотез человек осуществляет выбор на основе внутренних предпочтений не равновероятно. Вероятность выбора одного из вариантов — $0,617$, а другого $1-0,617 = 0,383$. На основе близости количественного значения $F \sim 0,3$ и предсказываемого [34] значе-

ния вероятности выбора в условиях неопределенности критериев (0,383) можно заключить, что операторы-непрофессионалы, принимая решение о наличии (отсутствии) пика в спектрах, его заведомо не содержащих, также подчиняются законам человеческой рефлексии и делают выбор на основе внутренних предпочтений, которые непосредственно из экспериментальных данных не следуют. В таком случае вопрос об интерпретации получаемого численного значения F лежит за пределами собственно физики или математики в области человеческой психологии. С другой стороны, это означает, что совокупность возмущенных статистическими флуктуациями модельных спектров с пиками или без пиков можно рассматривать как однозначно определенную и легко воспроизводимую простейшую математическую модель объекта, удобную для количественных исследований характеристик узнавания зрительных образов человеком при наличии случайных помех. А комплекс компьютерных программ (типа АТОС [32]) для генерирования таких спектров, их отображения на экране дисплея ЭВМ, обслуживания диалога и представления результатов тестирования может служить экспериментальной базой для проведения исследований в области психологии человека, которые имеют и фундаментальное, и важное прикладное значение с точки зрения изучения влияния человеческого фактора на надежность особо сложных и аварийно опасных технических систем. Эта проблема сейчас чрезвычайно актуальна [35].

4. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ПОГРЕШНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПИКОВ И ОПТИМАЛЬНЫЕ КРИТЕРИИ ПРЕРЫВАНИЯ ПОДГОНКИ

Чтобы преодолеть связанные с несостоятельностью оценок трудности в определении параметров пиков по результатам подгонки обрабатываемого спектра, в [36] предложено использовать результаты многократного модельного эксперимента на ЭВМ. Они позволяют установить связь между параметрами (детерминированной) математической модели спектра и погрешностями в их определении, которые обусловлены только статистической природой экспериментальных данных, т.е. найти потенциальные погрешности определения параметров пиков. Эмпирические формулы для вычисления потенциальных погрешностей определения параметров одиночных пиков и пиков из состава дублета в зависимости от значений параметров этих пиков и параметров фона в спектре приведены в [37] (в [36] такие формулы названы функциями физической достоверности — ф.ф.д.).

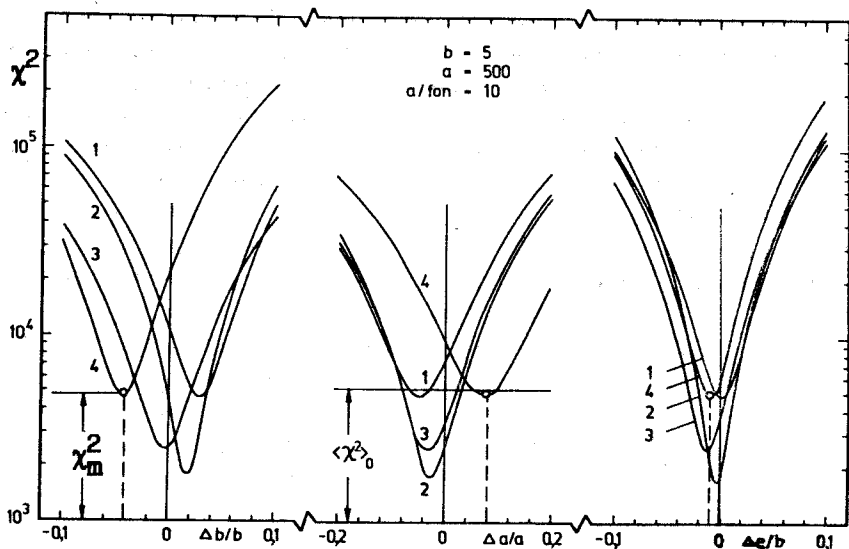


Рис.9. Форма минимумов χ^2 для четырех квазиэкспериментальных спектров с одним пиком симметричной гауссовой формы на постоянном фоне, которые сконструированы при одинаковых значениях параметров математической модели спектра, но с разной квазиэкспериментальной статистикой. a , b , fon — значения параметров, заданные при конструировании (амплитуда и полуширина пика, амплитуда фона), Δa , Δb , $\Delta \epsilon$ — отклонения в амплитуде, полуширине и положении пика от их заданных значений. Функционал χ^2 определен формулой (46)

Когда мы говорим о потенциальных погрешностях, то имеем в виду погрешности, найденные по результатам обработки одного измеренного спектра (одной статистической реализации опыта), но учитывающие разброс результатов и по всем другим возможным статистическим реализациям таких данных (как если бы существовала возможность произвольное число раз повторить эксперимент в заведомо одинаковых условиях и найти погрешности значений параметров пиков по результатам обработки всех таких спектров). Сказанное иллюстрирует рис.9, где показана форма минимума χ^2 для четырех (кривые 1—4) модельных квазиэкспериментальных спектров, содержащих одиночный пик на постоянном фоне, которые сконструированы при одинаковых параметрах математической модели спектров (амплитуды пика и его полуширина, отношение амплитуды пика к амплитуде фона), но со всякий раз разными последовательностями статистических флуктуаций в каждом канале. Для четвертого спектра (кривая 4) на рисунке кружками отмечены

положения минимума χ^2 . По горизонтали в относительных единицах отложены отклонения полуширины, амплитуды и положения пика от их истинных значений, задаваемых при конструировании. Разброс положений минимумов на всех фрагментах рис.9 вызван только влиянием конкретного распределения статистических флуктуаций экспериментальных значений, т.е. связан только с разной статистической реализацией опыта, выполняемого в одинаковых условиях (в модельном эксперименте «одинаковость условий опыта» обеспечивается одинаковостью параметров спектра, задаваемых при конструировании, а разным статистическим реализациям опыта соответствует разный набор случайных флуктуаций числа отсчетов в каждом канале). Сплошными вертикальными линиями отмечены значения параметров пиков, заложенные при конструировании модельных спектров, штриховыми линиями — значения этих параметров, найденные в результате подгонки для одного из спектров (кривая 4). Погрешность определения параметров, связанная с методикой подгонки, меньше размеров кружков. Расстояние между штриховой и сплошной линиями равно величине смещения каждого из параметров от его истинного значения, которое является следствием только конкретной статистической реализации опыта. Среднеквадратичные значения таких смещений, найденные по результатам многократного модельного эксперимента на ЭВМ, принимают [37] равными значениям соответствующих потенциальных погрешностей (ф.ф.д.) для данного мультиплета с данными параметрами его математической модели, т.е. погрешности, обусловленной только статистической обеспеченностью экспериментальных данных. При оценке погрешностей с помощью ф.ф.д. их значения для параметров пиков во всех спектрах с одинаковой статистической обеспеченностью будут одинаковы. Такой подход к оценке ошибок достигнутого приближения учитывает не только данное, полученное в конкретном опыте распределение статистических флуктуаций (что имеет место при оценке погрешностей по диагональным элементам обратной матрицы линейных итераций), но и другие возможные статистические реализации и в этом смысле содержит в себе интегральную информацию, усредненную по статистическому ансамблю спектров с одинаковой статистической обеспеченностью, но с разными последовательностями флуктуаций экспериментальных значений. Потенциальные погрешности и есть состоятельные оценки погрешностей, поскольку «состоятельность оценки проявляется в статистике как ансамблевое свойство при анализе серий однотипных измерений» [5].

Из рассмотрения кривых на рис.9 можно сформулировать и правило для оптимального прерывания итерационного процесса подгонки в ходе обработки спектров. Действительно, при оценке погрешностей результа-

тов подгонки путем вычисления потенциальных погрешностей с помощью ф.ф.д. саму подгонку вовсе не обязательно проводить так, чтобы были найдены значения параметров, соответствующие минимуму χ^2 (например, для кривой 2), так как получаемая при этом информация может оказаться избыточной. Подгонку достаточно вести до того момента, пока не достигнуто значение $\chi^2 = \langle \chi^2 \rangle_0$, которое есть среднее из минимальных значений $\chi^2 = \chi_m^2$ по ансамблю спектров, измеренных в заведомо одинаковых условиях и имеющих одинаковую статистическую обеспеченность. При этом предельное значение $\chi^2 = \langle \chi^2 \rangle_0$, которого следует достичь в ходе подгонки, должно быть известно в виде функции, зависящей от параметров пиков из состава обрабатываемого мультиплета и параметров фона. Для одиночных пиков и дублетов такие функции найдены в [36], правда, в предположении, что максимизируемый при подгонке квадратичный функционал определяется несколько нестандартно:

$$\chi^2 = \frac{10^6}{k} \sum_{i=1}^k \frac{(y(i) - z(i))^2}{z(i) + 1}, \quad (46)$$

где $y(i)$ — экспериментальное значение в канале i (за вычетом фона); $z(i)$ — соответствующее ему расчетное значение в соответствии с принятой математической моделью обрабатываемого спектра. Это ограничивает область применения полученных результатов. Однако использование формулы (46) для минимизируемого функционала в некоторых случаях может быть более предпочтительно [8].

Ниже приведены формулы для потенциальных погрешностей определения параметров одиночных пиков и дублетов (ф.ф.д.), найденные с помощью многократного модельного эксперимента [37].

Для одиночных пиков:

$$\sigma_x = 0,5(1 + 2(a/fon)^{-1/2})(b/a)^{1/2}, \quad (47)$$

$$\sigma_a = 1,4(1 + 2(a/fon)^{-1/2})(a/b)^{1/2}, \quad (48)$$

$$\sigma_b = 0,8(1 + 2(a/fon)^{-1/2})(b/a)^{1/2}, \quad (49)$$

$$\sigma_s = 1,4(s(1 + 2,83(a/fon)^{-1}))^{1/2}, \quad (50)$$

$$\langle \chi^2 \rangle_0 = 2(1 + 12(a/fon)^{-1})(1 + 10^6(1 + a)^{-1}), \quad (51)$$

где — $\sigma_x, \sigma_a, \sigma_b, \sigma_s$ — потенциальные погрешности в определении положений x , амплитуд a , полуширин b , площадей s одиночных пиков симметричной гауссовой формы на постоянном фоне fon . По формуле (51) вычисляют граничное значение χ^2 (определяемое формулой (46)), кото-

рого следует достичь в процессе подгонки (оптимальное правило для прерывания итераций). Для примеров на рис.9 значение $\langle \chi^2 \rangle_0$ отмечено горизонтальной линией. Относительная точность вычисления погрешностей по формулам (47)—(50) составляет $\sim 20\%$. Они получены в диапазоне значений параметров

$$10^{-1} \leq a/\text{fon} \leq 10^4; \quad 10^2 \leq a \leq 10^6; \quad 2 \leq b \leq 20.$$

Для дублетов:

$$\sigma_{x1} = 1,34 \left(\frac{b}{az} \right)^{1/2} \exp \left[1,3 \left(\frac{a}{\text{fon}} \right)^{-0,4} \right] d^{0,4 (a/\text{fon})^{-1/4} - 3,2}, \quad (52)$$

$$\sigma_{x2} = 2,24 \left(\frac{b}{a} \right)^{1/2} \exp[5 \exp(-4,5d)] \left[1 + \left(\frac{a}{\text{fon}} \right)^{-1} + \frac{1}{4} \ln(0,05 + z) \right], \quad (53)$$

$$\sigma_{a1} = \sigma_{a2} = 3,36 \left(\frac{a}{b} \right)^{1/2} \left(\frac{a}{\text{fon}} \right)^{-1/3} d^{-3}, \quad (54)$$

$$\langle \chi^2 \rangle_0 = \frac{5 \cdot 10^4}{a} \exp \left(\frac{37,3}{6,2 + \ln(a/\text{fon})} + \frac{2,4 \cdot 10^3}{a^2/\text{fon}} \right), \quad (55)$$

где $a = a_1 + a_2$; $d = |x_2 - x_1|/b$; $z = a_1/a_2$; a_1, a_2, x_1, x_2 — амплитуды и положения меньшего («1») и большего («2») пика из состава дублета; b — полуширина этих пиков; fon — амплитуда фона. Эмпирические формулы (52)—(56) получены для следующего диапазона значений параметров:

$$0,125 \leq a_1/a_2 \leq 1,0; \quad 0,4 \leq a/\text{fon} \leq 50;$$

$$0,2 \leq d \leq 1,0; \quad 2500 \leq a \leq 100000.$$

Обратим внимание, что формула (55) для предельного значения $\langle \chi^2 \rangle_0$, которого следует достичь в ходе подгонки при определении параметров пиков из состава дублета (оптимальное правило для прерывания итераций), зависит только от суммарной амплитуды a и от ее отношения к амплитуде фона a/fon . Ни от амплитуд a_1, a_2 , ни от расстояния $|x_2 - x_1|$ между пиками из состава дублета $\langle \chi^2 \rangle_0$ не зависит. Степень согласия данных модельного эксперимента и расчетов по приведенным выше эмпирическим формулам показывают примеры на рис.10,11 (σ_a для одиночных пиков и $\langle \chi^2 \rangle_0$ для дублетов).

Интересно сравнить потенциальные погрешности, вычисленные по эмпирическим формулам, с результатами реального эксперимента. Для

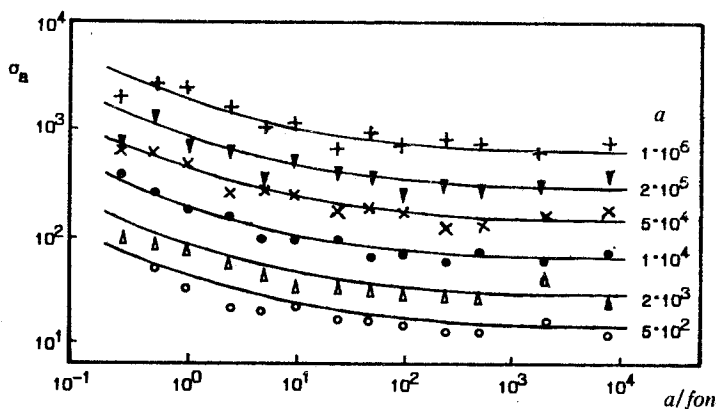


Рис.10. Потенциальная погрешность σ_a в определении амплитуды a одиночного пика симметричной гауссовой формы на фоне с амплитудой fof в зависимости от отношения a/fof . Значки — результат модельного эксперимента, кривые — расчет по формуле (48)

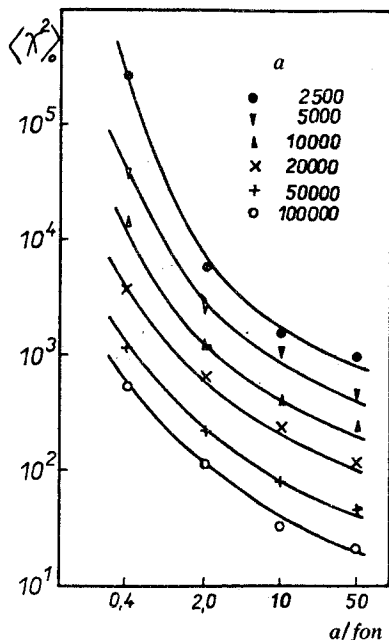


Рис.11. Предельное значение $\langle \chi^2 \rangle_0$, которого надо достичь при подгонке дублетов. $a = a_1 + a_2$, a_1, a_2 — амплитуды образующих дублет пиков, fof — амплитуда истинного фона. Значки — результат модельного эксперимента, кривые — расчет по формуле (55)

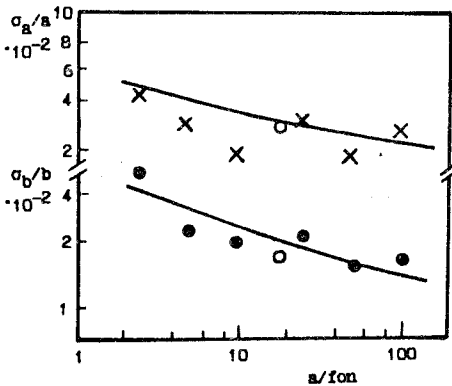


Рис.12. Сравнение расчета по формулам (48), (49) (кривые) потенциальных погрешностей в определении амплитуды a (σ_a) и полуширины b (σ_b) одиночного пика с результатами модельного (x, *) и реального (o) эксперимента. В реальном опыте $a = 1018$ отсчетов, $b = 5,8$ каналов, $t_1 = 3$ м, $t_2 = 2$ м. Расчет для $a = 1000$ отсчетов, $b = 5$ каналов

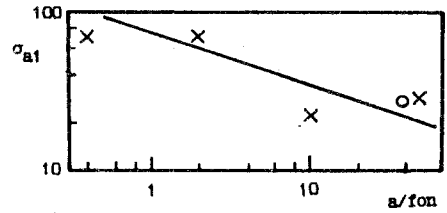
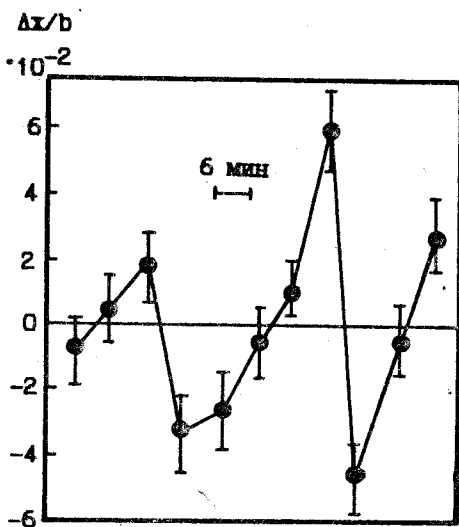


Рис.13. Сравнение расчета по формуле (54) (кривая) потенциальной погрешности σ_{a1} ($= \sigma_{a2}$) в определении амплитуды $a1$ меньшего из пиков, образующих дублет, с результатами модельного (x) и реального (o) экспериментов. В реальном опыте средние значения $a = a1 + a2 = 2499$ отсчетов, $a1/a2 = 0,667$, $d = 1,03$, $b = 5,8$ канала. Расчет для $a = a1 + a2 = 2500$ отсчетов, $a1/a2 = 0,5$, $d = 1,0$, $b = 5$ каналов. fon — амплитуда истинного фона

этого проводили [37] многократные (по 11 раз) измерения спектра γ -лучей от стандартного источника ^{22}Na на типовом спектрометре с Ge(Li)-детектором и многоканальным анализатором импульсов TRIDAC-C. Измерение каждого спектра проводили в фиксированной геометрии опыта в два этапа: без цифрового сдвига каналов в течение времени t_1 и с цифровым сдвигом каналов в течение времени t_2 . Так осуществлялось аппаратное суммирование пика от одиночной линии полного поглощения γ 1275 кэВ и комптоновского плато от этой же линии. В случае дублета измерения проводили в три этапа: фон (измерения без цифрового сдвига каналов, время t_1), первый пик дублета (цифровой сдвиг k каналов, время t_2), второй пик дублета (цифровой сдвиг $k + \Delta k$ каналов, время t_3). Получаемые экспериментальные данные обрабатывали так же, как ранее модельные квазиэкспериментальные спектры. Расчеты по эмпирическим формулам сравниваются с результатами обработки выполненных измерений на рис.12,13. Из рисунков видно, что формулы из [37] можно успешно использовать для анализа реальных спектров. На рис.14 эксперименталь-

Рис.14. Положения одного и того же одиночного пика, найденные в серии из 11 последовательных идентичных измерений спектра γ -лучей на спектрометре с Ge(Li)-детектором. Горизонтальная линия — среднее положение пика по результатам всех измерений, $\Delta x/b$ — отклонение от среднего значения в единицах полуширины. Пределы погрешностей вычислены по формуле (47). Средние параметры пика в экспериментальном спектре: амплитуда $a = 1018$ отсчетов, полуширина $b = 5,8$ каналов, отношение амплитуды пика к амплитуде фона $a/f_{0n} = 18,5$



ные (по результатам 11 последовательных идентичных измерений) положения одного и того же одиночного пика (точки) сравниваются друг с другом и их потен-

циальными погрешностями (пределы ошибок). Видно, что размах аппаратных динамических нестабильностей в положении пика более чем вдвое превышает погрешности, обусловленные статистикой, поэтому для $\sigma_x, \sigma_{x1}, \sigma_{x2}$ их сравнение с результатами анализа экспериментальных данных не производится. Отсюда также следует, что аппаратные нестабильности, проявляющиеся при измерении с высоким энергетическим разрешением γ -спектров, не всегда позволяют в полной мере реализовать достигаемую в таких случаях статистическую точность эксперимента.

Выше приведены формулы, найденные для потенциальных погрешностей в определении параметров одиночных пиков и пиков из состава дублета эмпирически, при анализе результатов многократного модельного эксперимента [36,37]. Такая работа очень трудоемка и для мультиплетов с $m > 2$ трудно осуществима. Поэтому в [38] с учетом эмпирических результатов [37] методом максимума правдоподобия в рамках линейной стохастической модели спектров [16] получены выражения для вычисления потенциальных погрешностей в определении параметров пиков из состава мультиплета произвольной сложности.

Функцию правдоподобия для участка спектра, содержащего мультиплет из m пиков, запишем [38] в виде (обозначения те же, что в разделе 3):

$$l = p_m(y - u_s) \left(\frac{N_0/\sigma_m^2}{2u_m \mathbf{R}_m + N_0/\sigma_m^2} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{2l(y - u_s) \mathbf{R}_m l^2}{N_0(2u_m \mathbf{R}_m + N_0/\sigma_m^2)} \right]. \quad (56)$$

Чтобы l зависела только от истинных параметров спектра, положим, что квадрат дисперсии σ_i^2 случайной амплитуды a_i пропорционален истинной амплитуде a_{0i} i -го пика (ν — коэффициент пропорциональности):

$$\sigma_i^2 = \nu a_{0i}. \quad (57)$$

Для определенности полагаем, что функция $u_i(x)$, описывающая форму одиночного пика, — симметричный гауссиан с полушириной b каналов:

$$u_i(x) = \exp[-\beta(x - \lambda_i)^2/b^2], \quad (58)$$

а $\beta = 4 \ln 2 = 2,7725887\dots$ Теперь функция правдоподобия l — это функция $2m + 1$ параметров: $a_{01}, \dots, a_{0m}, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ и N_0 . Для логарифмической функции правдоподобия L из (56) — (58) имеем

$$L(a_{01}, \dots, a_{0m}, \lambda_1, \dots, \lambda_m) = L_1 + L_2 + L_3, \quad (59)$$

где

$$L_1 = -\frac{1}{N_0} \left(y - \sum_{i=1}^m a_{0i} u_i \right)^2, \quad (60)$$

$$L_2 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \ln[1 + f a_{0i} (u_i \mathbf{R}_i)], \quad (61)$$

$$L_3 = \frac{f}{N_0} \sum_{i=1}^m a_{0i} \left[\left(y - \sum_{j=1}^m a_{0j} u_j \right) \mathbf{R}_i \right]^2 [1 + f a_{0i} (u_i \mathbf{R}_i)]^{-1}, \quad (62)$$

$$f = 2\nu/N_0. \quad (63)$$

В формулах для L опущены члены, не зависящие от a_{0i}, λ_i .

Оценки математического ожидания ошибок в определении параметров мультиплетов ищут, следуя стандартной процедуре [39]. Определим матрицу

$$\mathbf{A} = \begin{vmatrix} \left\langle -\frac{\partial^2 L}{\partial a_{0i} \partial a_{0j}} \right\rangle & \left\langle -\frac{\partial^2 L}{\partial a_{0i} \partial \lambda_j} \right\rangle \\ \left\langle -\frac{\partial^2 L}{\partial \lambda_j \partial a_{0i}} \right\rangle & \left\langle -\frac{\partial^2 L}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \right\rangle \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{vmatrix}, \quad (64)$$

где A_{ij} — блочные матрицы $m \times m$, $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение производных по шумам и случайным амплитудам a_i линейной стохастической модели спектров. Матрица B , обратная матрице A , дает корреляционные моменты эффективных оценок положений и амплитуд всех пиков (B_{11} — для амплитуд, B_{22} — для положений). Учитывая правило обращения для блочных матриц

$$B_{11} = [A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}], \quad B_{22} = [A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}], \quad (65)$$

все вычисления при получении оценок можно свести к операциям над матрицами порядка $m \times m$. На практике число пиков в мультиплете невелико ($m < 5$), поэтому вычислительная сторона задачи трудностей не представляет, особенно при использовании ЭВМ. Некоторая громоздкость вычислений связана с необходимостью обращаться к рекуррентным формулам (13), с помощью которых задаются решающие функции R_m .

Элементы матрицы A — вторые частные производные, усредненные по шумам и ансамблю случайных функций $a_i u_i$. Вычисление производных можно выполнить прямым дифференцированием L_1, L_2, L_3 из (60) — (62). Получаемые результаты усредняют с учетом того, что для любой гладкой вектор-функции s среднее от следующего скалярного произведения равно нулю:

$$\langle (y - \text{fon} - \sum_{i=1}^m a_{0i} u_i) s \rangle = 0. \quad (66)$$

С учетом (66) для вторых частных производных от L получают достаточно простые, но громоздкие формулы. Эти формулы задают полный набор правил для вычисления потенциальных погрешностей определения параметров пиков в мультиплете любой сложности в рамках линейной стохастической модели спектров [16]. Однако в них пока неизвестен коэффициент ν , введенный формулой (57). Чтобы найти ν , выпишем в явном виде формулы для потенциальных погрешностей в простейшем случае определения параметров одиночных пиков и сравним их с результатами модельного эксперимента и эмпирическими формулами из [37]. Тогда коэффициент ν найдется как подгоночный параметр при таком сравнении.

Для случая синглета ($m = 1$) матрица A имеет вид

$$A = \begin{vmatrix} \langle -\partial^2 L / \partial a^2 \rangle & 0 \\ 0 & \langle -\partial^2 L / \partial \lambda^2 \rangle \end{vmatrix}. \quad (67)$$

Следовательно, погрешности σ_a, σ_λ в определении амплитуды пика a и его положения λ задаются равенствами:

$$\sigma_a^2 = -(\partial^2 L / \partial a^2)^{-1}; \quad \sigma_\lambda^2 = -(\partial^2 L / \partial \lambda^2)^{-1}. \quad (68)$$

Прямые вычисления дают

$$\sigma_a^2 = N_0 [1 + fa(uR)] \{2u^2 [1 + (v/N_0) u^2 (1 + fa(uR))] \}. \quad (69)$$

Учитывая, что для симметричного гауссиана $u^2 = b(\pi/2\beta)^{1/2}$, и полагая

$$N_0 = 2r \text{ fon}, \quad v = q [b(\pi/2\beta)]^{-1}, \quad (70)$$

из (69) найдем (r, q — новые параметры):

$$\sigma_a = a \left\{ \frac{2^{1/2}}{s(a, b)} \left(q + \frac{r}{a/\text{fon}} \right) \left[1 - \frac{q^2 2^{1/2}}{s(a, b)} \left(q + \frac{r}{a/\text{fon}} \right)^{-1} \right] \right\}^{1/2}, \quad (71)$$

где $s(a, b)$ — площадь гауссова пика с амплитудой a и полушириной b . Всегда $s(a, b) \gg 1$, поэтому вместо (71) можно записать приближенную формулу (при $s(a, b) > 50$ ее отличие от (71) менее 1%):

$$\sigma_a \cong a \left[\left(q + \frac{r}{s(a, b)} \right) \frac{2^{1/2}}{s(a, b)} \right]^{1/2}. \quad (72)$$

Из сравнения расчета по формуле (72) с результатами модельного эксперимента [37] (для σ_a они показаны на рис.10) для параметров q и r найдем

$$q = 1,4 \pm 0,3; \quad r = 9 \pm 2.$$

Расчеты значений σ_a по эмпирической формуле (48) и по только что найденной формуле (72) с приведенными значениями q и r описывают результаты модельного эксперимента практически одинаково и в этом смысле эквивалентны.

Таким образом, все параметры в общих формулах для погрешностей полностью определены и теперь они пригодны для вычисления потенциальных погрешностей параметров мультиплетов любого порядка.

Для погрешности σ_λ определения положения λ одиночного пика по аналогии найдем [38]:

$$\sigma_\lambda = \left(\frac{(2/\pi \beta)^{1/2} br}{a(a/\text{fon})} \right)^{1/2}. \quad (73)$$

Эта формула существенно отличается от соответствующей формулы (47), но в предельном случае $a/\text{fon} \ll 1$ хорошо описывает результаты модельного эксперимента. Следовательно, приведенные здесь формулы правильно воспроизводят погрешности в амплитудах, а для погрешностей в положениях пиков правильные результаты получаются лишь в пре-

дельном случае малых (по сравнению с фоном) амплитуд. Это связано с тем, что линейная стохастическая модель спектров [16] предполагает наличие искажений в положениях пиков только за счет флуктуаций фона (см. разд.2).

Приведем еще формулу для вычисления потенциальной погрешности в определении амплитуды одиночного пика симметричной гауссовой формы в двумерных спектрах [17]:

$$\sigma_a = 1,4(1 + 2(a/fo\text{н})^{1/2}) (a/b)^{1/2}f(b), \quad (74)$$

где, как обычно, a и b — амплитуда и полуширина, а

$$f(b) = 0,4[\exp(-b/3) + \exp(-b/17)]. \quad (75)$$

Видно, что формула (74) — это произведение эмпирической формулы (48) для вычисления потенциальной погрешности σ_a в определении амплитуды одиночного пика в одномерном спектре на эмпирическую функцию $f(b)$, которая найдена в [17] при сведении рассмотрения двумерного спектра к совокупности одномерных спектров (сечений двумерного пика разными плоскостями, проходящими через его вершину). Других результатов, относящихся к потенциальным погрешностям определения параметров пиков в многомерных спектрах, пока нет.

5. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА ПИКОВ В МУЛЬТИПЛЕТЕ

В силу статистической природы экспериментальных данных ответ на вопрос о числе пиков в мультиплете можно дать только в вероятностной терминологии. Поэтому вычисленные на основе данных о статистической обеспеченности опыта вероятности обнаружения пиков в мультиплете — это, вообще говоря, вся объективная количественная информация, которую можно извлечь и которая необходима для решения задачи об определении числа составляющих мультиплет пиков. На основе этих данных окончательное решение (есть пик или его нет) принимает только человек с учетом всей доступной ему информации, в том числе — не содержащейся в обрабатываемом спектре.

Задача о вычислении вероятностей обнаружения пиков из состава мультиплета произвольного m -го порядка в рамках линейной стохастической модели спектров в общем виде решена в [16]. Однако для того, чтобы воспользоваться общими формулами, надо знать погрешности σ_i в определении амплитуды каждого i -го пика из состава анализируемого мультиплета ($i \leq m$), которые для произвольного m определяются, к сожалению, только в неявном виде [38] посредством соотношений (59)—(66). Такое

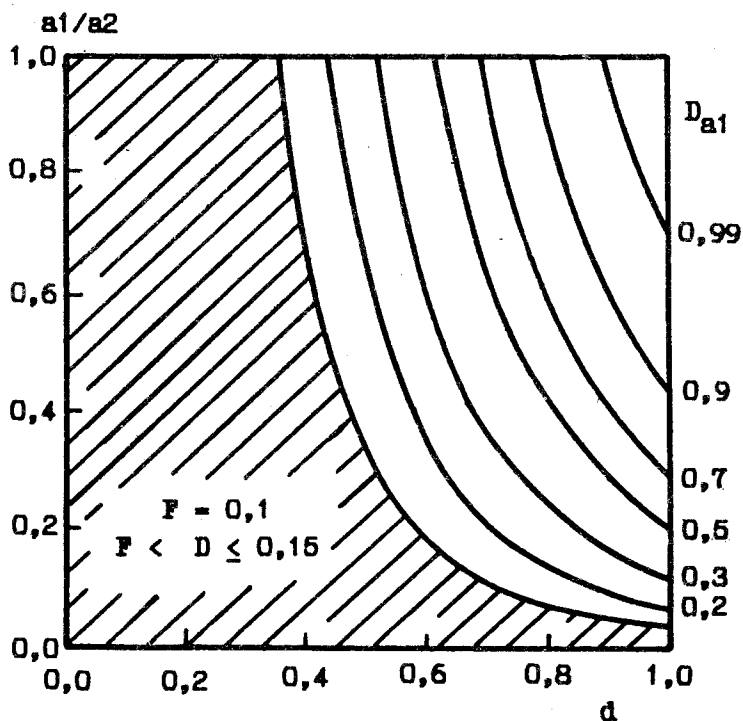


Рис.15. Условная вероятность D_{a1} истинного обнаружения меньшего из пиков, образующих дублет, при значении условной вероятности ложного обнаружения $F = 0,1$. Кривые — расчет D_{a1} в зависимости от значений $a1/a2$ (отношение амплитуды меньшего к амплитуде большего из пиков) и от d (расстояние между пиками в единицах полуширины). Пример для полуширины пиков $b = 5$ каналов, амплитуды большего пика $a2 = 100$ отсчетов и амплитуды фона $fon = 100$ отсчетов

определение σ_i для случая произвольного m лишает результаты наглядности, поэтому конкретные вычисления вероятностей определения пиков из состава мультиплета опубликованы пока только для дублетов ($m = 2$) [37]. По общим формулам из [16] вычислены (рис.15) условные вероятности D истинного обнаружения пиков из состава дублетов при фиксированной вероятности F их ложного обнаружения с использованием оценок погрешностей σ_a в определении амплитуд образующих дублет пиков по эмпирической формуле (54). Из рисунка видно, что для меньшего из образующих дублет пиков условная вероятность D_{a1} его истинного обнаружения

ружения, как и следовало ожидать, сильно зависит от расстояния d между пиками. При фиксированном d наиболее благоприятны условия обнаружения пиков равных амплитуд, когда $a_1 = a_2$. При фиксированном отношении a_1/a_2 с увеличением расстояния d между пиками дублета их взаимное влияние друг на друга уменьшается и вероятность их истинного обнаружения приближается к значению, характерному для каждого из этих пиков в случае, когда они изолированы. Для пика большей амплитуды (a_2) зависимость условной вероятности D_{a_2} его истинного обнаружения от отношения a_1/a_2 практически отсутствует (она слабо уменьшается при $a_1/a_2 \rightarrow 1$).

Некую информацию для принятия решения о наличии пика в мультиплете могут дать [36] и формулы для вычисления потенциальных погрешностей определения параметров этих пиков, например, формулы (52) — (54) для потенциальных погрешностей в определении параметров пиков из состава дублета. Дело в том, что при некоторых значениях параметров мультиплета разброс их значений, связанный только со статистикой, допускает значения, не имеющие реального физического смысла. Например, отрицательные амплитуды. Поэтому можно ввести критерий, определяющий область значений параметров мультиплета (физическую область), которой соответствуют достаточно точные результаты, представляющие интерес для пользователя. Границу физической области значений параметров мультиплета можно определить, например, для дублета, с помощью неравенства $\sigma_{a_1}/a_1 < 1$ (a_1 — амплитуда меньшего из пиков в составе дублета, σ_{a_1} — потенциальная погрешность ее определения). Если для параметров реального мультиплета такое неравенство выполняется, то можно считать, что его декомпозиция на составляющие пики целесообразна. Приведенные соображения и послужили основанием для того, чтобы назвать формулы для вычисления потенциальных погрешностей в определении параметров пиков функциями физической достоверности (ф.ф.д.) [36]. Ясно, что ф.ф.д. можно использовать и для целей планирования экспериментов.

6. ПРОГРАММА АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ В СТАТИСТИЧЕСКИ ОПРЕДЕЛЕННЫХ УСЛОВИЯХ — ЭТАП

Приведенные выше теоретико-методические результаты, полученные на основе линейной стохастической модели спектров [16], частично реализованы [40] в виде компьютерной программы для автоматической обработки линейчатых спектров в статистически определенных условиях ЭТАП (первое сообщение в [41]). При создании этой программы изна-

чально (еще в 1977 г.) ставилась задача поэтапного решения проблемы автоматической обработки спектров с постепенной алгоритмизацией и реализацией в виде программ для ЭВМ только тех задач автоматической обработки спектров, для решения которых уже имеется достаточно проработанная и надежная теоретическая база. Поэтому программа ЭТАП все пики в обрабатываемых спектрах интерпретирует пока как одиночные, а задача разложения мультиплетов считается следующим этапом автоматической обработки спектров, теоретическое изучение которого продолжается. Зато обработку спектров с одиночными пиками ЭТАП осуществляет в полностью статистически определенных условиях, и получаемые результаты такой обработки, как будет показано ниже, близки к статистически оптимальным.

Программа ЭТАП [40] предназначена для быстрой автоматической обработки линейчатых спектров, например, γ -спектров от полупроводниковых детекторов. Она осуществляет автоматический поиск пиков при фиксированном значении условной вероятности F ложного обнаружения, вычисляет положения найденных пиков, их амплитуды, полуширины, площади с соответствующими погрешностями, а также условную вероятность D истинного обнаружения всех найденных пиков. Предполагаемая форма пиков — симметричный гауссиан, подгонка его параметров и разложение сложных мультиплетов (когда между максимумами составляющих его пиков нет разделяющего их минимума) не производится.

Техника автоматической обработки спектров, содержащих только одиночные пики, достаточно разработана [7], поэтому при создании ЭТАП основное внимание уделяли ее оптимизации и корректной интерпретации результатов обработки. В число параметров, управляющих работой программы, включено значение F условной вероятности ложного обнаружения пиков, при котором следует обрабатывать спектр. Предусмотрена также итеративная обработка спектров. С ее помощью учитывают влияние изменения полуширины пиков вдоль спектра на определение фона, на разбиение спектра на информационные участки, которые можно рассматривать независимо, на качество идентификации пиков. Оптимизация структурной схемы ЭТАП и отдельных ее подпрограмм позволила создать компактную и быстро работающую программу.

Поиск пиков в программе ЭТАП осуществляют при фиксированном, заданном оператором до начала обработки значении условной вероятности F ложного обнаружения. Поскольку большинство программ поиска пиков имеют [29] близкие значения условной вероятности D истинного обнаружения пиков при $F = \text{const}$ (т.е. близки по качеству), то основной фактор, который определял выбор алгоритма поиска, — это независимость F от амплитуды фоновой подложки. Поэтому в [40] предпочтение

было отдано алгоритму поиска из [27], для которого независимость F от амплитуды фона fon в спектре (при $fon > 100$ отсчетов) обусловлена тем, что поиск пиков ведется в преобразованном спектре, из экспериментального значения в каждом канале которого извлечен квадратный корень. Независимость F от амплитуды фона проверена для программы поиска из [27] с помощью многократного модельного эксперимента по методике работы [20]. Так была найдена [40] эмпирическая формула $F(1)$, связывающая значения условной вероятности F и порога чувствительности l . Эту формулу используют в программе ЭТАП при определении требуемого при поиске порога чувствительности l по заданному в исходных данных значению F .

Площадь s каждого пика вычисляют в программе ЭТАП по формуле $s = 1,064ab$, где a и b — амплитуда и полуширина пика симметричной гауссовой формы (возможен также учет разных поправок и вычисление s путем поканального суммирования отсчетов под пиком). Погрешности в положении, амплитуде, полуширине, площади вычисляют по эмпирическим формулам (47) — (50). Напомним, определяемые этими формулами значения погрешностей — это потенциальные погрешности в определении параметров одиночного пика симметричной гауссовой формы при имеющейся статистической обеспеченности данных. Условную вероятность D истинного обнаружения каждого из идентифицированных пиков вычисляют также по эмпирической формуле [40], найденной при интерполяции результатов модельного эксперимента, в ходе которого получены зависимости $D(x)$ с $X = a/fon^{0,477}$ для значений условной вероятности ложного обнаружения $F = 0,001; 0,01; 0,1$.

Комплексную проверку программы ЭТАП проводили при обработке с ее помощью контрольного квазиэкспериментального спектра (параметры которого задавали при его конструкции и поэтому они были точно известны) и экспериментального спектра γ -лучей радионуклидов из набора образцовых стандартных гамма-источников ОСГИ (измерения с Ge(Li)-детектором и типовой спектрометрической аппаратурой). Результаты работы программы ЭТАП сравнивали также с результатами работы программ «Каток-Ф» [42] и «Метод моментов» [43]. Сравнение показало, что для всех одиночных пиков в экспериментальном спектре значения их параметров, найденные всеми этими программами, в пределах погрешностей практически совпадают. Поскольку ЭТАП вычисляет потенциальные погрешности, то, следовательно, получаемые с ее помощью результаты для одиночных пиков можно квалифицировать как полученные с предельной для данной статистической обеспеченности опыта точностью, т.е. они близки к статистически оптимальным.

Таким образом, главной особенностью ЭТАП является то, что автоматический поиск пиков в обрабатываемом спектре осуществляется при фиксированном и одинаковом по всему спектру значении F условной вероятности ложного обнаружения и с вычислением для всех идентифицированных пиков условной вероятности D их истинного обнаружения. Благодаря этому обработка спектра осуществляется в статистически определенных условиях. Поэтому итоговая таблица результатов программы ЭТАП (ее фрагмент из [40] приведен для примера ниже) существенно отличается от итоговых таблиц всех других программ обработки спектров. Основное отличие состоит в том, что ЭТАП сообщает не только найденные значения параметров пиков и их погрешности, но и условную вероятность D истинного обнаружения каждого из пиков при фиксированной и одинаковой по всему обрабатываемому спектру условной вероятности F ложного обнаружения (для приводимой таблицы $F = 0,001$).

Таблица. Фрагмент итоговой таблицы результатов обработки спектра автоматической программой ЭТАП (пример из [40])
 $F = 0,001$

Номер пика	p	Δp	s	Δs	b	Δb	D
1	39,94	0,53	1265	281	4,78	1,56	0,55
2	101,41	0,14	4940	278	4,62	0,39	1,00
3	109,80	0,05	22661	356	5,65	0,13	1,00
4	121,00	0,24	2416	261	4,36	0,71	1,00
5	139,22	0,36	2193	281	5,41	1,05	0,98
6	149,79	0,44	1070	239	3,89	1,30	0,68
7	164,43	0,45	1743	282	4,49	1,32	0,86

Примечание. p , Δp , s , Δs , b , Δb — найденные программой значения положений (каналы), площадей (отсчеты), полуширин (каналы) идентифицированных пиков с соответствующими погрешностями. F и D — условные вероятности ложного и истинного обнаружения для всех пиков.

Указанное отличие имеет принципиальное значение. «Современные условия публикации статей, как правило, не позволяют описывать условия опытов и приводить протоколы основных и контрольных измерений. Это плохо, так как отсутствие этих сведений крайне затрудняет критический анализ результатов» [44]. Чтобы частично компенсировать этот недостаток, статьи с экспериментальными результатами часто иллюстрируют рисунками типичных экспериментальных спектров или их наиболее важных фрагментов. Тогда читатель получает возможность зритель-

но оценить статистическую обеспеченность экспериментальных данных (число отсчетов в каналах, соотношения между амплитудами пиков и фоном, степень разделения пиков в мультиплетах и т.д.) и, следовательно, качественно оценить вклад статистических эффектов в полную погрешность эксперимента и надежность первичных экспериментальных данных. Но для количественного сравнения результатов разных опытов этого качественного материала недостаточно. Статистически корректное количественное сравнение качества первичных экспериментальных данных только по результатам их обработки возможно, если для всех пиков в сравниваемых спектрах сообщаются условные вероятности D их истинного обнаружения при (одинаковом) известном значении условной вероятности F их ложного обнаружения. Необходимые для этого исходные данные и предоставляет программа ЭТАП. Тогда такое сравнение не требует анализа полных протоколов измерений. Достаточно воспользоваться результатами обработки сравниваемых спектров программой ЭТАП (в частности, вычисляемые с ее помощью значениями D при $F = \text{const}$) и формулами для F_{in} , D_{in} (44), (45), найденными в [30].

Таким образом, в разных лабораториях, разным исследователям спектральные данные надо анализировать на ЭВМ с использованием программ, которые обеспечивают обработку спектров в статистически определенных условиях (с вычислением D при фиксированном значении F), и значения F и D должны приводиться в публикуемых таблицах результатов наряду, например, с энергией и интенсивностью каждой линии (во всяком случае, для линий, которым соответствуют пики со значениями D , заметно меньшими единицы). С 1977 г. и до сих пор единственной программой, удовлетворяющей этим требованиям, остается программа ЭТАП [40].

За время своего существования программа ЭТАП развивалась, вбирая в себя новые результаты исследований проблем автоматической обработки спектров. По сравнению с опубликованным вариантом [40] в нее внесены к настоящему времени следующие дополнения: вычисления по требованию пользователя наряду со значениями D и в дополнение к ним безусловных апостериорных вероятностей истинного и ложного обнаружения пиков $P_{и}$, $P_{л}$ (по результатам работы [30] с $\kappa = 1$) и поиск пиков с помощью программы [19], которая, как показано в [29], является лучшей среди существующих программ поиска. Кроме того, обоснован выбор конкретного численного значения условной вероятности F ложного обнаружения, при котором целесообразно в большинстве случаев осуществлять автоматическую обработку спектров, $F \cong 0,01$ [32], что полностью снимает существовавшую ранее неопределенность, игравшую для многих

роль психологического барьера при практическом использовании программы ЭТАП.

7. СТАНДАРТИЗАЦИЯ ПРОГРАММ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ

Ранние методика и опыт сравнения программ обработки спектров, описанные в [9], имеют важное положительное значение, так как впервые на основе широкого сотрудничества была предпринята попытка решить вопрос о количественном определении качества компьютерных программ обработки линейчатых спектров на примере γ -спектров высокого энергетического разрешения. Это бесспорный шаг вперед по сравнению с распространенной до сих пор практикой оценки качества таких программ на основе опыта их эксплуатации.

В основе методики [9] лежит следующий принцип. Определяют несколько эталонных γ -спектров, измеренных (или синтезированных из измеренных) с помощью типовой аппаратуры. Эти спектры содержат некоторое число характерных особенностей — одиночные пики больших и малых амплитуд на большом и малом, линейном и нелинейном фоне, дублеты с разными отношениями площадей составляющих их пиков и разными расстояниями между этими пиками. Определяют также некоторые количественные критерии качества программ, которые вычисляют по результатам обработки этими программами всех эталонных спектров. Таким образом, основная идея метода — сравнение результатов обработки разными программами небольшого числа одних и тех же «эталонных» спектров. Основной недостаток такого подхода — использование статистической выборки малого объема (это эталонные спектры), которая не может охватить всего возможного многообразия статистических ситуаций и в связи с этим — невозможность воспользоваться в полном объеме статистически обоснованными количественными критериями сравнения.

Рассмотрим возможность сравнения компьютерных программ обработки спектров на основе другого подхода, основанного на использовании результатов многократного модельного эксперимента.

Обычно программы обработки спектров входят в состав систем обработки измерительной информации (СОИИ), которые, в свою очередь, являются одним из элементов информационно-измерительных систем (ИИС) — основного средства получения информации, например, в ядерной физике. Объектами стандартизации могут быть и ИИС, и СОИИ. СОИИ имеют дело, как правило, только с цифровым эквивалентом некой физической величины (массивом данных), выполняя обусловленные программой вычисления. Поэтому аттестация СОИИ и ее элементов имеет ряд особенностей [45], связанных с необходимостью оценивания методических погрешностей, обусловленных спецификой алгоритма,

программы, разрядностью ЭВМ и т.д. Метрологическую аттестацию алгоритма (программы) в рамках СОИИ могут выполнять двумя способами: либо расчетными методами, либо с помощью модельного эксперимента [45]. Таким образом, предложенная в [20] методика исследования качества программ поиска пиков на основе использования результатов многократного модельного эксперимента полностью соответствует одному из принятых в метрологии подходов к аттестации алгоритмов и программ. О возможности ее использования для стандартизации программ поиска пиков впервые упоминается в [46]. Подробнее она обсуждается в [47], где подчеркивается необходимость использования для метрологической характеристики качества алгоритмов идентификации условных вероятностей F и D , введенных в [16].

В рамках формальной модели погрешностей СОИИ рассматривают как черный ящик, у которого доступны для наблюдения лишь вход и выход. На вход подают сигнал (цифровой массив) с известными информативными параметрами, построенный в соответствии с математической моделью, адекватно отражающей свойства исследуемого явления, и анализируют соответствие информативных параметров выходного сигнала (цифрового массива) ожидаемым значениям. Неинформативные параметры сигнала могут быть случайными, но должны лежать в диапазоне значений, допускаемом аттестуемой системой. Изменяя значения параметров входного сигнала, можно получить функции влияния — зависимости изменений метрологических характеристик от изменений влияющих величин или неинформативных параметров (в пределах условий эксплуатации). Для случая аттестации программ поиска пиков входным сигналом является набор большого числа модельных квазиэкспериментальных спектров, известные информативные параметры которого — задаваемые при конструировании параметры идентифицируемых пиков, неинформативные параметры — порог чувствительности поиска и амплитуда фона под пиком. Выходным сигналом является факт обнаружения (необнаружения) пика. Искомые метрологические характеристики (функции влияния) — это зависимости условной вероятности D истинного обнаружения пиков от значений условной вероятности F ложного обнаружения (порога чувствительности поиска), амплитуды a идентифицируемого пика, его полуширины b , амплитуды фона под пиком fon , от параметров самой программы. Таким образом, в [19—21, 29, 40] фактически уже выполнена метрологическая аттестация ряда программ автоматического поиска пиков (для разных программ в разном объеме), поскольку для них найдены функции влияния $D(a, b, fon)$, определяющие метрологические свойства этих программ при разных значениях F . Причем эти функции влияния найдены по принятой в метрологии схеме и, следовательно, методика [20] и результаты аттестации с ее помощью

программ поиска естественно занимают свое место в существующей схеме метрологического обеспечения СОИИ. Выполненная работа по аттестации программ поиска может служить основой для разработки на ее базе отраслевого, государственного или международного стандарта. В этом направлении осталось сделать только один шаг — определить те допустимые изменения характеристик программ, которые следует считать удовлетворяющими требованиям предполагаемого стандарта. С учетом уже полученных результатов и накопленного опыта сделать это нетрудно.

Другой этап полной обработки линейчатых спектров, для которого, можно считать, имеется сейчас необходимая теоретико-методическая и метрологическая база стандартизации и соответствующий опыт ее использования, — это оценки погрешностей определения параметров пиков (пока только для изолированных пиков и пиков из состава дублетов). При аттестации способов оценивания погрешностей входным сигналом СОИИ также является набор большого числа модельных квазиэкспериментальных спектров, известные информативные параметры которых — задаваемые при конструировании параметры пиков и параметры фона. Неинформативные параметры — управляющие параметры программы подгонки и параметры математической модели одиночного пика, используемые при подгонке. Выходным сигналом является разброс найденных в результате обработки значений параметров пиков. Искомые функции влияния — зависимости величины среднеквадратичного разброса значений определяемых параметров пиков от статистической обеспеченности данных (от истинных значений параметров сконструированных пиков и фона). Для случая синглета и дублета функции влияния (формулы для вычисления потенциальных погрешностей или функции физической достоверности) с помощью такого модельного эксперимента уже найдены [37] — это формулы (47)—(50), (52)—(54). Для мультиплетов с числом пиков больше двух на основе результатов из [38] пока можно вычислить только потенциальные погрешности определения их амплитуд. Следовательно, формулы из [37] для потенциальных погрешностей определения параметров синглета и дублета в силу специфики метода их получения являются функциями влияния по определению, т.е. являются метрологическими характеристиками процедуры оценивания погрешностей, и по ним можно сверять правильность оценивания погрешностей с помощью используемых для этого других методик.

Отметим, что для мультиплетов существенное влияние на погрешности определения параметров составляющих их пиков оказывает погрешность, с которой известна форма одиночного пика при подгонке (при гауссовой форме пика — погрешность, с которой известна его полуширина). Для случая дублетов это продемонстрировано в [8], однако систематических количественных результатов по этой проблеме пока

нет. Несмотря на это при подгонке предполагаемого стандарта допустимый диапазон значений погрешностей параметров математической модели одиночного пика, используемой при разложении мультиплетов, все же надо оговаривать.

Таким образом, подход [47] к метрологической аттестации программ полной обработки спектров или отдельных ее этапов, основанный на использовании результатов многократного модельного эксперимента на ЭВМ, полностью соответствует принятой системе метрологического обеспечения элементов СОИИ и поэтому может служить основой для подготовки соответствующих стандартов. Необходимые для стандартизации методов (программ) поиска пиков и оценивания погрешностей определения их параметров предварительные исследования уже выполнены. Использование большого числа модельных квазиэкспериментальных спектров при такой метрологической аттестации программ никаких технических трудностей сейчас не представляет.

8. АВТОМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ЛИНЕЙЧАТЫХ СПЕКТРОВ И ПРОБЛЕМА ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

Определение граничных возможностей ЭВМ при решении задач интеллектуального типа (например, автоматическое распознавание образов при обработке изображений, получаемых в результате физического эксперимента) много лет активно обсуждается в связи с проблемой создания искусственного интеллекта и актуально до сих пор. Многие результаты были получены при исследовании этой проблемы на примере задачи о распознавании образов и геометрической реконструкции событий на фотоснимках с трековых приборов физики высоких энергий — искровых и пузырьковых камер. Именно накопленный при этом опыт создания на базе ЭВМ систем обработки трековой информации существенно повлиял на формирование современных представлений о возможностях вычислительной техники и ее назначении при решении различных задач. Попытки полной замены человеческого интеллекта путем создания автоматических, работающих без участия человека, систем обработки камерных снимков с помощью ЭВМ закончились неудачей, несмотря на огромные усилия, затраченные на создание мощного специализированного программного обеспечения, основанного на разнообразных математических методах распознавания образов. В итоге было установлено следующее. «Как правило, удается обрабатывать в автоматическом режиме 80—90% информации на снимках. Увеличивая объем и сложность программного обеспечения, ... удастся повысить этот показатель до 90—95%. Однако дальнейшее продвижение при обработке

сравнительно сложных событий всегда оказывается невозможным... Эта устойчивость в наличии около 90% простой для автоматической обработки информации на изображениях, получаемых в процессе эксперимента с трековыми камерами, может быть связана с известной природной целесообразностью..., которая улавливается человеком на интуитивном уровне и переносится на разработку организуемых им исследований с созданием экспериментальных установок... Здесь мы сталкиваемся, возможно, с проявлением неизвестной еще закономерности в природе, из которой... можем сделать определенные выводы. А именно: использование ЭВМ в системах обработки изображений... носит ограниченный характер... Около 10% подлежащей обработке информации на изображениях должны обрабатываться человеком-оператором... Не исключено также, что сам факт установления этой закономерности может быть использован для решения задачи построения подлинного искусственного интеллекта» [48].

Программа ЭТАП [40] автоматической обработки линейчатых спектров много лет использовалась в различных физических центрах для обработки спектрометрической информации, получаемой при проведении фундаментальных и прикладных исследований методами ядерной спектроскопии. Опыт ее эксплуатации свидетельствует, что около 90% пиков в экспериментальных спектрах являются обычно одиночными и эффективно обрабатываются в автоматическом режиме. Остальные приблизительно 10% пиков входят в состав мультиплетов разной сложности, автоматическое разложение которых на составляющие их пики в ЭТАП не производится. В таких случаях для обработки мультиплетов привлекали, при необходимости, другие программы, работающие при участии человека-оператора. Таким образом, на изображениях, получаемых в спектрометрических экспериментах, т.е. в линейчатых спектрах, тоже проявляется «устойчивость в наличии около 90% простой для автоматической обработки информации», которая впервые установлена в [48] при анализе методов обработки изображений на камерных снимках. Следовательно, и при обработке линейчатых спектров «мы сталкиваемся, возможно, с проявлением неизвестной еще закономерности в природе», о которой говорилось выше, и этот факт, не исключено, «может быть использован для решения задачи построения подлинного искусственного интеллекта».

Задача автоматической обработки линейчатых спектров технически много проще, чем задача автоматической обработки изображений на камерных снимках. Это дает шанс исследовать ее гораздо подробнее и получить, таким образом, более детальную информацию и о возможности имитации интеллекта человека с помощью ЭВМ при распознавании образов, и о самом процессе распознавания образов человеком.

Наш опыт по разработке программ автоматической обработки спектров указывает на важность при исследовании автоматического распознавания образов с помощью ЭВМ «встречных» исследований возможностей интеллекта самого человека по распознаванию тех же образов. Такие исследования приводят к результатам, которые убедительно демонстрируют и границу компьютерных возможностей, и соотношение между возможностями человека и ЭВМ. Например, нами установлено [32], что опытный человек-оператор (профессионал) идентифицирует одиночные пики в спектрах при значении условной вероятности ложного обнаружения $F = 0,012 \pm 0,004$, оператор-непрофессионал осуществляет идентификацию при $F \sim 0,3$. Это легко понять, так как «многое из того, чем мы владеем в качестве знаний, опыта и информации, есть результат развитой интуиции. Длительная специализация в определенном виде деятельности позволяет расширить наши интуитивные способности в соответствующей предметной области» [49]. Приведенный пример как раз и демонстрирует роль такой длительной специализации в расширении интуитивных способностей оператора при решении конкретной задачи об идентификации пиков. Ведь качество поиска пиков операторами-непрофессионалами и операторами-профессионалами — это предельные случаи, характеризующие интуитивные способности по распознаванию определенных образов (пиков) полностью неподготовленным оператором и оператором, длительно специализирующимся в этом виде деятельности. Причем результаты таких исследований для профессионалов можно рассматривать как количественное описание предельных возможностей интеллекта человека при решении конкретных задач распознавания образов. Сравнение зависимостей $D(a)$ при $F = 0,01$ для профессионалов и для программы идентификации [19], реализующей субоптимальный модельный алгоритм поиска (рис.7), показывает, что здесь машина не только не уступает человеку, но и превосходит его. Причем ЭВМ может успешно обрабатывать спектральные данные при любом наперед заданном значении F и в этом смысле ее возможности шире, чем возможности человеческого интеллекта. В то же время на вопрос, почему при поиске пиков профессионалами для них характерно значение условной вероятности ложного обнаружения $F \approx 0,01$, а при поиске пиков непрофессионалами для них характерно значение $F \sim 0,3$, можно ответить, только исследуя самого человека. Из свойств экспериментальных данных или компьютерных программ эти конкретные численные значения F для профессионалов и дилетантов никак не следуют.

Опыт работ по созданию автоматических программ указывает также на важность объективного количественного учета имеющейся априорной информации об обрабатываемых данных (спектрах), которая в них не-

посредственно не содержится. Возможность корректного количественного учета, вообще говоря, произвольной дополнительной информации о спектре при принятии решения о наличии (отсутствии) в нем пика представляет коэффициент k в формулах (41), (43), впервые выписанных для случая идентификации пиков в [30]. Вопрос о выборе численного значения k для разных конкретных случаев остается пока не исследованным, но ясно, что перспективы его определения связаны с исследованиями и компьютерных программ, и самого интеллекта человека. В этой связи еще раз обратим внимание на такие очень важные факты. 1. Качество поиска пиков автоматическими программами тем лучше, чем большее количество априорной информации о спектре они используют (рис.3). 2. Когда человек и компьютерная программа поставлены в одинаковые условия относительно используемой априорной информации о спектре, качество автоматического поиска пиков не только не хуже, но в ряде случаев даже лучше, чем качество поиска тех же пиков квалифицированным оператором (рис.7). Из сопоставления этих фактов следует: имеющее место на практике лучшее качество идентификации пиков человеком по сравнению с качеством их идентификации автоматическими программами обусловлено используемой при поиске (зачастую неосознанно) дополнительной априорной информации о спектрах, не содержащейся в анализируемых данных, которая доступна человеку, но недоступна ЭВМ. Наибольшую роль априорная информация играет при обработке так называемых «сложных» изображений, что дает основание считать более сложными как раз те изображения, для правильного распознавания которых необходимо большее количество дополнительной информации. Для обработки именно таких «сложных» изображений и целесообразно привлекать человека-оператора, так как он является носителем требуемой при распознавании дополнительной информации. Количество же таких данных на изображениях, которые (из-за недостатка априорной информации) плохо обрабатываются в автоматическом режиме и для анализа которых обычно привлекают человека-оператора, — около 10%. Такой процент данных, которые трудно поддаются автоматической обработке, имеет место и на камерных снимках [48], и в линейчатых спектрах. Согласно предположению, высказанному в [48], «здесь мы сталкиваемся, возможно, с проявлением неизвестной еще закономерности в природе». Таким образом, полностью автоматическая обработка изображений с помощью ЭВМ может быть успешной, когда при обработке используют не только математические методы распознавания, но и (в формализованном виде) некую априорную информацию, носителем которой является обычно человек-оператор и который приобрел ее ранее в ходе обучения при анализе других аналогичных изображений. Поэтому

для полной имитации интеллекта человека в задаче распознавания образов с помощью ЭВМ необходимо вначале выяснить, какую именно дополнительную информацию использует человек при обработке изображений определенного типа (например, линейчатых спектров или камерных снимков), формализовать ее и предоставить в распоряжение автоматической программе, решающей ту же проблему, что и человек. Программы автоматической обработки линейчатых спектров оперируют с относительно несложными объектами (спектрами), поэтому, можно надеяться, в этом случае такой дополнительной информации человек использует не очень много, она достаточно проста и ее удастся выявить и формализовать. Это может обеспечить эффективную работу автоматических программ даже в сложных случаях, для обработки которых сейчас привлекают человека-оператора. Отсюда еще один вывод: программы автоматической обработки линейчатых спектров (как и другие автоматические программы для ЭВМ, имитирующие человеческий интеллект в задачах распознавания образов) должны быть обучаемыми или самообучаемыми. В ходе обучения (самообучения) автоматическая программа должна получать ту дополнительную априорную по отношению к конкретным обрабатываемым данным информацию, которая в них не содержится, но без которой невозможно правильное решение задач распознавания, особенно в так называемых сложных случаях. Обычно (например, при работе автоматизированных программ) носителем этой дополнительной информации является человек, поэтому так важно для полного решения проблемы автоматического распознавания образов с помощью ЭВМ исследовать свойства интеллекта самого человека, в частности, при решении им задач распознавания. Таким образом, усилия по созданию программ автоматической, без участия человека, полной обработки линейчатых спектров должны привести не только к решению этой, самой по себе очень важной, проблемы, но помогут еще уточнить границы возможного использования ЭВМ для решения задач интеллектуального типа и будут способствовать исследованиям самого процесса распознавания образов человеком, т.е. исследованиям человеческого интеллекта.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В последние годы удалось существенно продвинуться в понимании и решении ряда проблем автоматической обработки линейчатых спектров и создать на этой основе компьютерную программу ЭТАП для полностью автоматической обработки спектров в статистически определенных условиях, результаты работы которой при обработке изолированных пиков близки к статистически оптимальным.

Предложена стохастическая модель линейчатых спектров (одномерных и произвольной k -й размерности), показана ее эффективность и продуктивность для решения проблем автоматической обработки спектров. Практически полностью решена проблема автоматического поиска одиночных пиков, полученные теоретико-методические и практические результаты позволяют ставить здесь в качестве реальной текущей задачи задачу подготовки стандарта на программы (алгоритмы) такого поиска. Продемонстрирована важность практического использования в программах автоматической обработки количественных характеристик качества алгоритмов поиска — условных вероятностей F и D ложного и истинного обнаружения пиков, даны рецепты для вычисления F и D , в том числе — для пиков из состава сложных мультиплетов, получены формулы для вычисления безусловных апостериорных вероятностей истинного $P_{и}$ и ложного $P_{л}$ обнаружения пиков. Найден параметр, с помощью которого можно статистически корректно учесть влияние на результаты обработки дополнительной априорной информации о спектре. Изучено влияние на результаты обработки субъективных факторов и на этой основе конкретизирован выбор численного значения порога чувствительности поиска программ идентификации пиков — одного из важнейших параметров, управляющих процессом обработки спектра (найден, что порог чувствительности должен соответствовать значению $F = 0,012 \pm 0,004$). Показана эффективность методики таких исследований для изучения проблем психологии, в частности, рефлексии человека. Введено понятие о потенциальных, зависящих только от статистической обеспеченности опыта, погрешностях определения параметров пиков, дана методика их вычисления по результатам многократного модельного эксперимента и (частично) методом максимума правдоподобия в рамках линейной стохастической модели спектров. С помощью модельного эксперимента найдены формулы для вычисления потенциальных погрешностей определения параметров одиночных пиков и дублетов, с помощью метода максимума правдоподобия — соотношения для вычисления потенциальных погрешностей в определении амплитуд и положений пиков из состава мультиплета произвольной сложности (погрешности в положениях — только для пиков малых амплитуд). Показана возможность стандартизации методов оценивания погрешностей в определении параметров пиков. Указан способ определения оптимальных критериев прерывания подгонки при итеративном поиске значений параметров математической модели, описывающей спектр, даны примеры таких критериев для случая обработки изолированных пиков и дублетов.

Подводя итог, можно заключить, что проблему автоматической обработки спектров, содержащих одиночные пики, можно считать практи-

чески решенной. В понимании проблем автоматического разложения мультиплетов на составляющие их пики достигнут значительный прогресс, и полученные теоретико-методические результаты позволяют приступить к практической реализации наиболее важных компонентов компьютерной программы, которая будет решать в начальном приближении проблему автоматической обработки линейчатых спектров, включая и разложение сложных мультиплетов. Эти работы будут способствовать также получению новых результатов в области проблем психологии человека и искусственного интеллекта. Перспектива полного решения проблемы автоматической, без участия человека, обработки линейчатых спектров связана с созданием обучающихся (самообучающихся) программ для ЭВМ, которые должны имитировать интеллект человека при решении им задач распознавания образов.

Автор выражает благодарность проф. И.И.Залюбовскому за всестороннюю помощь и поддержку, М.Х.С.Бакру (M.H.S.Bakr), Г.В.Винель, Л.А.Выловой, В.А.Дерюге, А.А.Марчуку, В.И.Сорокину, В.В.Сотникову, В.Хабенихту (W.Habenicht), В.М.Цупко-Ситникову, Е.К.Чернышевой, Г.Элеру (H.Oehler) за сотрудничество при получении значительной части из приведенных здесь результатов, а также Р.И.Гопыч, обеспечившей условия для работы над текстом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Цупко-Ситников В.М. — В сб.: ЭВМ в экспериментальной физике. ОИЯИ, Д10-5255, Дубна, 1970, с.125; Цупко-Ситников В.М. — ОИЯИ, Д10,11-8450, Дубна, 1974, с.300.
2. Quittner P. — Gamma-Ray Spectroscopy with Particular Reference to Detector and Computer Evaluation Techniques. Budapest, Akademiai kiado, 1972.
3. Lederer C.M. — Radioactivity in Nuclear Spectroscopy. Ed. by J.M.Hamilton, J.C.Manthuruthie. Gordon and Breach Science Publ., 1972, vol.1, p.73.
4. Гаджиков В. — ЭЧАЯ, 1980, т.11, вып.6, с.1474.
5. Злоказов В.В. — ЭЧАЯ, 1985, т.16, вып.5, с.1126.
6. Волков Н.Г. и др. — Методы ядерной спектроскопии. М.: Энергоатомиздат, 1990.
7. Элер Г. и др. — ОИЯИ P10-6817, P10-6818, P10-6819, Дубна, 1972; ПТЭ, 1973, 5, с.253; ВИНТИ 6652-73деп., М. 1973.
8. Элер Г. и др. — ОИЯИ, P10-7364, P10-7365, P10-7366, P10-7367, Дубна, 1973.
9. Parr R.M. et al. — Amer. Nucl. Society Conf. on Computers in Activation Analysis and Gamma-Ray Spectroscopy. Mayaguez, Puerto-Rico 1—4 Mai 1978, p.544.
10. Поленов Б.В., Стась К.Н. — Атомная энергия, 1986, т.60, вып.2, с.157.
11. Немец О.Ф., Оффенгенден Р.Г. — Вестник АН УССР, 1974, 12, с.81.
12. Голембо З.Б., Венников Г.В. — Итоги науки и техники. Сер. Техническая кибернетика. М.: ВИНТИ, 1970, с.5.
13. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. — Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1974.

14. Александров В.С. и др. — 24 Сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Тезисы докл. Л.: Наука, 1974, с.484.
15. Eckhoff N.D. — Nucl. Instr. and Meth., 1969, vol.68, p.93.
16. Гопыч П.М. и др. — Изв. АН СССР, сер. физ., 1975, т.39, 3, с.564.
17. Гопыч П.М., Марчук А.А. — В кн.: Прикладная ядерная спектроскопия. М.: Энергоатомиздат, 1983, вып.12, с.129.
18. Котельников В.А. — Теория потенциальной помехоустойчивости. М.: Госэнергоиздат, 1956.
19. Гопыч П.М. и др. — 32 Сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Тез. докл. Л.: Наука, 1983, с.582.
20. Гопыч П.М. и др. — ПТЭ, 1977, №4, с.90.
21. Гопыч П.М., Дерюга В.А. — ПТЭ, 1983, с.23; 22 Сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Тез. докл. Л.: Наука, 1979, с.475.
22. Routti J., Prussin S.G. — Nucl. Instr. and Meth., 1969, vol.72, p.125.
23. Аврамов С.Р. и др. — ОИЯИ, Р10-9741, Дубна, 1976.
24. Винель Г.В. и др. — ОИЯИ, Р10-10844, Дубна, 1977.
25. Гопыч П.М. и др. — I Всесоюз. сов. по автоматизации научных исследований в ядерной физике. Тез. докл. Киев: ИЯИ АН УССР, 1976, с.150.
26. Гопыч П.М., Дерюга В.А. — ОИЯИ, Д10,11-11264. Дубна, 1978, с.322.
27. Фромм В.-Д. — ОИЯИ, 10-9094, Дубна, 1975.
28. Волков Н.Г. и др. — 24 Сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Тез. докл. Л.: Наука, 1974, с.483; Волков Н.Г. — Там же, с.454.
29. Гопыч П.М., Залюбовский И.И. — В кн.: Вопросы точности ядерной спектроскопии. Вильнюс: ИФ АН ЛитССР, 1988, с.136.
30. Гопыч П.М., Сотников В.В. — В кн.: Прикладная ядерная спектроскопия. М.: Энергоатомиздат, 1983, вып.12, с.271.
31. Гопыч П.М. и др. — ОИЯИ, Д10,11-11264, 1978, с.326.
32. Гопыч П.М. и др. — ПТЭ, 1992, №3, с.95; 41 Сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Тез. докл. Л.: Наука, 1991, с.483.
33. Гопыч П.М., Сотников В.В. — Межд. сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Тез. докл. СПб: Наука, 1993, с.361.
34. Lefebvre V.A. — The Fundamental Structure of Human Refraction. N.Y., Peter Lang Publ., 1990; Lefebvre V.A. — Algebra of Conscience. Dordrecht-Yolland, D.Reidel Publ. Co., 1982.
35. Малкин С.Д. и др. — Атомная энергия за рубежом, 1990, №5, с.9.
36. Гопыч П.М. и др. 24 Сов. по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Тез. докл. Л.: Наука, 1974, с.479; Гопыч П.М. и др. — Там же, с.480; Гопыч П.М. и др. — Там же, с.481.
37. Гопыч П.М. — В кн.: Вопросы точности ядерной спектроскопии. Вильнюс: ИФ АН ЛитССР, 1986, с.138; Гопыч П.М. — Исследование структуры переходных атомных ядер из области $50 < Z, N < 82$. Дисс. канд. физ.-мат. наук. Харьков, ХГУ, 1974.
38. Гопыч П.М. — В кн.: Вопросы точности ядерной спектроскопии. Вильнюс: ИФ АН ЛитССР, 1988, с.139.
39. Брандт Э. — Статистические методы анализа наблюдений. М.: Мир, 1975.
40. Гопыч П.М. и др. — В кн.: Прикладная ядерная спектроскопия. М.: Энергоиздат, 1982, вып.11, с.86;
41. Гопыч П.М. и др. — ОИЯИ, Д10,11-11264, Дубна, 1978, с.330.
42. Gadjokov V. — JINR, E10-12353, Дубна, 1979.
43. Вылов Ц. и др. — ОИЯИ, Р6-9072, Дубна, 1975.
44. Желепов Б.С. — Методы разработки сложных схем распада. Л.: Наука, 1974.
45. Кабуров И.С. и др. — В кн.: Проблемы метрологии информационно-измерительных систем в области физико-технических измерений. М.: ВНИИФТРИ, 1982, с.4.

46. Гопыч П.М. — В кн.: Точные измерения в ядерной спектроскопии. Вильнюс: Моклас, 1984, с.94.
47. Гопыч П.М., Дерюга В.А. — В кн: Вопросы точности ядерной спектроскопии. Вильнюс: ИФ АН ЛитССР, 1984, с.21.
48. Бородюк В.П., Шкунденков В.Н. — ОИЯИ, Р10-85-744, Дубна, 1985.
49. Велихов Е.П. — ЭВМ пятого поколения. М.: Финансы и статистика, 1984 (предисловие).