

DISSERTATION

Anwendungen der Maximum Entropie Methode zur Verbesserung der Auflösung von IR-Spektren

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades
eines Doktors der technischen Wissenschaften

eingereicht an der Technischen Universität Wien,
Technisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

von

Michael Kenn

Stanislaugasse 7/22
1030 Wien

1. April 1994

Danksagung

Herrn Univ. Prof. Dr. H. G. Feichtinger danke ich für seine Bereitschaft, mich bei der Verfassung dieser Arbeit zu unterstützen. Das umsomehr, weil er zu dieser Zeit in Amerika weilte und trotzdem keine Mühen gescheut hat.

Herrn Univ. Prof. Dr. R. Schnabl danke ich für das große Wissen, welches ich mir im Laufe von zahlreichen Lehrjahren von ihm aneignen durfte.

Herrn Univ. Prof. Dr. U. Mayer danke ich für die Aufgabenstellung. Er hat diese interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen Mathematik und Chemie ins Leben gerufen.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Einleitung | 7 |
| 2 | Herleitung der Maximum Entropie Methode | 9 |
| 2.1 | Voraussetzungen und Definitionen | 9 |
| 2.2 | Theorem der Self-Deconvolution | 10 |
| 2.2.1 | Wahl des Linienprofils | 12 |
| 2.3 | Die Autokorrelationsfunktion | 12 |
| 2.4 | Entropie | 16 |
| 2.5 | Die entscheidende Idee | 24 |
| 2.6 | Maximierung der Entropie | 25 |
| 2.7 | Berechnung der Koeffizienten $(c_n)_{n=0(1)M}$ | 28 |
| 2.7.1 | Der <i>Levinson</i> -Algorithmus | 28 |
| 2.7.2 | Der <i>Burg</i> -Algorithmus | 30 |
| 2.8 | Optimale Anzahl der Koeffizienten c_i | 35 |
| 2.8.1 | Akaike Information Criterion | 36 |
| 2.8.2 | Final Prediction Error | 39 |
| 2.9 | Ermittlung des verbesserten Spektrums $S'(\nu)$ | 39 |
| 2.10 | Zusammenfassung | 40 |
| 3 | Theoretische Beispiele zur Maximum Entropie Methode | 42 |
| 3.1 | Einbandenspektren | 42 |
| 3.1.1 | Division durch das exakte Linienprofil | 42 |
| 3.1.2 | Division durch ein Linienprofil mit falscher Halbwertsbreite | 44 |
| 3.2 | Zweibandenspektren | 59 |
| 3.2.1 | Zwei Banden mit gleichen Halbwertsbreiten und gleichen Intensitäten | 59 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.2.2 | Zwei Banden mit gleichen Halbwertsbreiten und verschiedenen Intensitäten | 70 |
| 3.3 | Mehrbandenspektren | 72 |
| 4 | Numerische Durchführung | 76 |
| 4.1 | Voraussetzungen und Definitionen | 76 |
| 4.2 | Die diskrete Fouriertransformation | 77 |
| 4.2.1 | Ein FFT-Algorithmus ohne Umordnen der Datenpunkte | 78 |
| 4.3 | Die numerische Durchführung der Maximum Entropie Methode | 79 |
| 4.3.1 | Division durch eine Linienprofilfunktion | 81 |
| 4.3.2 | Der <i>Burg</i> -Algorithmus | 82 |
| 4.3.3 | Berechnung des verbesserten Spektrums | 83 |
| 5 | Datenmanipulationen und Rauschen | 84 |
| 5.1 | Definition von Rauschen | 84 |
| 5.2 | Theoretische Beispiele zum Rauschen | 86 |
| 5.2.1 | Einbandenspektren | 86 |
| 5.3 | Berechnung von normalverteilten Zufallsgrößen | 90 |
| 5.4 | Statistische Untersuchungen | 91 |
| 5.4.1 | Einbandenspektrum | 92 |
| 5.4.2 | Dreibandenspektrum | 104 |
| 6 | Die LOMEPE Methode | 134 |
| 6.1 | Theorem der LOMEPE Methode | 134 |
| 6.2 | Der LOMEPE Qualitätsfaktor q | 136 |
| 6.2.1 | Einbandenspektrum | 137 |
| 6.2.2 | Dreibandenspektrum | 141 |
| A | Das Programm | 156 |
| A.1 | Allgemeines | 156 |
| A.2 | Installation und Starten | 157 |
| A.3 | Eingabewerte | 157 |
| A.4 | Menüpunkte | 160 |
| A.5 | Die Source Dateien | 169 |
| B | Verwendete Hilfsmittel | 172 |
| B.1 | Software | 172 |

| | |
|------------------------|-----|
| B.2 Rauschen | 173 |
|------------------------|-----|

Vorwort

Diese Arbeit ist ein Überblick über Vorgangsweisen, wie mit Hilfe der *Maximum Entropie Methode* (MEM) eine Auflösungserhöhung von IR-Spektren erzielt werden kann. Obwohl Methoden, welche auf einer Maximierung der Entropie einer Zeitreihe beruhen, schon seit einigen Jahren zur Rekonstruktion und Analyse von Datenfehlern angewandt werden (siehe dazu z. B. [16]), wurde sie in der IR-Spektroskopie, und dabei speziell für chemische Anwendungen, erst unlängst entdeckt. Aufgabe dieser Arbeit ist es, die *Maximum Entropie Methode* für die Verwendung in der Chemie aufzubereiten, Vorteile und Nachteile gegenüber der bewährten *Fourier Self Deconvolution*-Methode zu bestimmen, ihre prinzipielle Verwendbarkeit bei verschiedenen Typen von IR-Spektren zu untersuchen und letztendlich ein extrem bedienerfreundliches Programm zu beschreiben, welches auch ohne genaue Kenntnis der Methode bedienbar ist und dessen Erstellung als Beitrag zur Erfüllung der gestellten Aufgabe anzusehen ist.

Im ersten Kapitel, der Einleitung, wird definiert mit welcher Art von IR-Spektren gearbeitet wird und wie man zu diesen kommt. Das zweite Kapitel umfaßt eine vollständige theoretische Herleitung der *Maximum Entropie Methode*, wozu auch der sogenannte *Burg*-Algorithmus gehört. Das anschließende dritte Kapitel befaßt sich mit einigen theoretisch konstruierten IR-Spektren, anhand derer das exakte Ergebnis der *Maximum Entropie Methode*, ohne Einwirkung von Rauschen, Datenungenauigkeiten und diskreter Fouriertransformation, studiert werden kann.

Bei der Durchführung einer *Maximum Entropie Methode* treten vielerlei mathematische Probleme auf, welche im vierten Kapitel diskutiert werden. Dazu gehören insbesondere die Durchführung einer diskreten Fouriertransformation und die Division durch ein diskretes Linienprofil. Das in der Praxis unvermeidlich auftretende Rauschen, sowie Datenungenauigkeiten jeglicher Art werden im fünften Kapitel behandelt. In diesem Kapitel werden insbesondere auch jene Effekte studiert, die eine diskrete Fouriertransformation oder eine Basislinienkorrektur mit sich ziehen.

Das sechste Kapitel beschäftigt sich schließlich mit der erst unlängst vorgestellten *Line Shape Optimized Maximum Entropy Linear Prediction*-Methode [7, 8, 9], kurz LOMEPEP genannt, welche eine Kombination von FSD

und MEM darstellt. Es werden unter anderem auch die Versuchsserien, welche bereits im fünften Kapitel für die *Maximum Entropie Methode* durchgeführt wurden, für die LOMEPE Methode nachvollzogen.

Zuletzt findet sich im Anhang eine genaue Programmbeschreibung einer vielseitig verwendbaren WINDOWS-Applikation, mit welcher FSD, MEM und LOMEPE durchgeführt werden können. Ebenfalls im Anhang findet sich eine Aufstellung der verwendeten Hilfsmittel inklusive einer Tabelle des bei den Versuchsserien verwendeten Rauschens.

Kapitel 1

Einleitung

Wird Licht der Wellenlänge λ beziehungsweise der Frequenz $\nu = \frac{1}{\lambda}$ und der Intensität I_0 durch ein Medium geschickt, so wird ein Teil des Lichtes absorbiert, und das Licht tritt mit einer Intensität $I(\nu) \leq I_0$ aus dem Medium aus. Der Quotient

$$T(\nu) = \frac{I(\nu)}{I_0}, \quad 0 \leq T(\nu) \leq 1 \quad (1.1)$$

wird als *Transmittance*-Spektrum (Durchlässigkeitsspektrum) bezeichnet.

Zumeist ist ein IR-Spektrum jedoch nicht in Form eines *Transmittance*-Spektrums $T(\nu)$ sondern durch den negativen Logarithmus, dem sogenannten *Absorbance*-Spektrum $S(\nu)$ gegeben.

$$S(\nu) = -\ln T(\nu) \quad (1.2)$$

Unter der Bezeichnung Spektrum ist in dieser Arbeit stets das *Absorbance*-Spektrum zu verstehen.

IR-Spektren sind Spektren, die durch Absorption von elektromagnetischer Strahlung infolge Anregung von Molekülschwingungen zustande kommen. Ein aus n Atomen bestehendes nichtlineares Molekül besitzt $3n - 6$ charakteristische Fundamentalschwingungen, ein lineares Molekül $3n - 5$. Diese sind im IR-Spektrum je nach Schwingungsverhalten als mehr oder weniger ausgeprägte Banden zu erkennen.

Im allgemeinen weisen IR-Spektren jedoch eine größere Zahl von Absorptionsbanden auf, da zusätzlich zu den Fundamentalschwingungen auch noch

Obertöne und Kombinationstöne (Summen- und Differenzöne) auftreten, sodaß IR-Spekren größerer Moleküle im allgemeinen sehr kompliziert aufgebaut sind.

Ziel dieser Arbeit ist es, weniger intensive Banden, oder solche, welche Aufgrund von Überlappungen nicht zu erkennen sind, mit Hilfe der *Maximum Entropie Methode* nachzuweisen.

Kapitel 2

Herleitung der Maximum Entropie Methode

Die Maximum Entropie Methode ist ein Verfahren zur Auflösungserhöhung von IR-Spektren. Sie beruht auf dem Prinzip der Fourier Self-Deconvolution (FSD). Dabei wird ein gegebenes, zu verbesserndes Spektrum zunächst durch eine Fouriertransformation in seinen Zeitreihenbereich (Interferogrammbe- reich) transformiert. Das so erhaltene Interferogramm wird dann durch die Fouriertransformierte einer sogenannten Linienprofilfunktion dividiert, und man erhält dadurch das Interferogramm des verbesserten Spektrums.

Bis hierher sind die Vorgangsweisen der FSD und der Maximum Entropie Methode ident. Während man bei der FSD-Methode das verbesserte Spektrum durch einfaches Zurücktransformieren des neuen Interferogramms erhält, verwendet die Maximum Entropie Methode an dieser Stelle ein alternatives Verfahren. Dabei wird das verbesserte Spektrum derart bestimmt, sodaß ein gewisser, als Entropie des Spektrums bekannter Ausdruck, maximiert wird.

2.1 Voraussetzungen und Definitionen

Bevor ich die Maximum Entropie Methode herleite, möchte ich zunächst einige Festlegungen treffen. Gehen wir davon aus, daß ein gemessenes Spektrum $S(\tilde{\nu})$ vorliegt. Diesem Spektrum entspricht eindeutig sein Interfero-

gramm $I(x)$. Dabei gilt

$$S(\tilde{\nu}) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(x)e^{-2\pi i\tilde{\nu}x} dx = \mathcal{F}I(x) \quad (2.1)$$

bzw.

$$I(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\tilde{\nu})e^{2\pi i x\tilde{\nu}} d\tilde{\nu} = \mathcal{F}^{-1}S(\tilde{\nu}) \quad (2.2)$$

\mathcal{F} bezeichnet den Fouriertransformationsoperator.

Ein Schrägstrich über einem Ausdruck bedeutet stets den konjugiert komplexen Wert

$$\overline{a + ib} = a - ib \quad a, b \in R \quad (2.3)$$

Fett geschriebene Ausdrücke sind stets Vektoren oder Matrizen. Bei einer Matrix \mathbf{A} bedeutet $|\mathbf{A}|$ die Determinante der Matrix, \mathbf{A}^T ist die transponierte Matrix und \mathbf{A}^H die hermitsche Matrix ($\mathbf{A}^H = \overline{\mathbf{A}^T}$).

2.2 Theorem der Self-Deconvolution

Wir gehen davon aus, daß sich jedes Spektrum $S(\tilde{\nu})$ als Summe von Einzelspektren $S^{(k)}(\tilde{\nu})$ darstellen läßt. Jedes dieser $S^{(k)}(\tilde{\nu})$ representiert eine Bande.

$$S(\tilde{\nu}) = \sum_k S^{(k)}(\tilde{\nu}) \quad (2.4)$$

Wünschenswert wäre es, wenn jede dieser Banden durch ein Strichspektrum (einer δ -Funktion) beschrieben werden könnte. In diesem Fall ist eine bestmögliche Auflösung gewährleistet.

$$\delta(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)}) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi i(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)})t} dt \quad (2.5)$$

Aus physikalisch-chemischen Gründen haben die Banden eines gemessenen Spektrums jedoch stets eine gewisse Form. Diese Form ist durch die sogenannte Linienprofilfunktion $S_0(\tilde{\nu})$ gegeben, wobei sich das Maximum von $S_0(\tilde{\nu})$ an der Stelle 0 befindet. Nehmen wir an, daß die Formen der einzelnen Banden durch die Linienprofilfunktionen $S_0^{(k)}(\tilde{\nu})$ beschrieben werden

können. $S_0^{(k)}(\tilde{\nu})$ wird auch Relaxationsfunktion, die Inversfouriertransformierte $I_0^{(k)}(x)$ von $S_0^{(k)}(\tilde{\nu})$

$$I_0^{(k)}(x) = \mathcal{F}^{-1} S_0^{(k)}(\tilde{\nu}) = \int_{-\infty}^{+\infty} S_0^{(k)}(\tilde{\nu}) e^{2\pi i x \tilde{\nu}} d\tilde{\nu} \quad (2.6)$$

auch Korrelationsfunktion genannt. Die Faltung

$$\begin{aligned} S^{(k)}(\tilde{\nu}) &= S_0^{(k)}(\tilde{\nu}) * \delta(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)}) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} S_0^{(k)}(\tilde{\nu} - t) \delta(t - \tilde{\nu}_0^{(k)}) dt = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} S_0^{(k)}(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)} - t) \delta(t) dt = \\ &= S_0^{(k)}(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

liefert eine Translation der Linienprofilfunktion $S_0^{(k)}(\tilde{\nu})$ um $\tilde{\nu}_0^{(k)}$ nach rechts, d. h. das Maximum der Linienprofilfunktion $S_0^{(k)}(\tilde{\nu})$ wird an die Stelle $\tilde{\nu}_0^{(k)}$ verschoben.

Bei Fouriertransformation geht bekanntlich Faltung in Multiplikation über. Wegen (2.4) und

$$\mathcal{F}^{-1} \delta(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)}) = e^{2\pi i \tilde{\nu}_0^{(k)} x} \quad (2.8)$$

gilt jetzt im Interferogrammbereich

$$I(x) = \sum_k I^{(k)}(x) = \sum_k I_0^{(k)}(x) e^{2\pi i \tilde{\nu}_0^{(k)} x}. \quad (2.9)$$

Sind die Linienprofile der einzelnen Banden annähernd gleich, so können diese durch Division eliminiert werden.

$$\frac{I(x)}{I_0(x)} = \sum_k \frac{I_0^{(k)}(x)}{I_0(x)} e^{2\pi i \tilde{\nu}_0^{(k)} x} \approx \sum_k e^{2\pi i \tilde{\nu}_0^{(k)} x} \quad (2.10)$$

Bis zu diesem Moment sind die FSD Methode und die Maximum Entropie Methode ident. Bei der FSD Methode erhält man nach Rücktransformation so das gesuchte, verbesserte Spektrum.

$$S'(\tilde{\nu}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{I(x)}{I_0(x)} e^{-2\pi i \tilde{\nu} x} dx \approx \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi i (\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)}) x} dx = \sum_k \delta(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0^{(k)}) \quad (2.11)$$

2.2.1 Wahl des Linienprofils

Bei IR-Spektren ist die gängigste Wahl des Linienprofils $S_0(\tilde{\nu})$ eine Lorentz-funktion [14, 5, 6].

$$S_L(\tilde{\nu}) = \frac{\frac{\sigma_L}{\pi}}{\sigma_L^2 + \tilde{\nu}^2} \quad (2.12)$$

Dabei bezeichnet $2\sigma_L$ die Breite der Funktion auf halber Höhe. Das Peakmaximum wurde so gewählt, daß der Flächeninhalt unter der Kurve 1 beträgt. Das ist jedoch unerheblich, da das Spektrum nach Self-Deconvolution gewöhnlich normiert wird. Führt man eine inverse Fouriertransformation des Lorentz-Linienprofils durch¹, so erhält man folgendes Interferogramm:

$$I_L(x) = e^{-2\sigma_L \pi |x|} \quad (2.13)$$

Manchmal nimmt man zusätzlich eine additive Störung in Form einer Gaußkurve

$$S_G(\tilde{\nu}) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\sigma_G^2 \pi}} e^{-\frac{\tilde{\nu}^2 \ln 2}{\sigma_G^2}} \quad (2.14)$$

mit zugehörigem Interferogramm

$$I_G(x) = e^{-\frac{(\sigma_G \pi x)^2}{\ln 2}} \quad (2.15)$$

an [14]. Die Linienprofilfunktion $S_0(\tilde{\nu})$ ergibt sich aus dem Prozentsatz λ dieser Störung.

$$S_0(\tilde{\nu}) = \lambda C_1 S_L(\tilde{\nu}) + (1 - \lambda) C_2 S_G(\tilde{\nu}) \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \quad (2.16)$$

$$I_0(x) = \lambda C_1 I_L(x) + (1 - \lambda) C_2 I_G(x) \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \quad (2.17)$$

2.3 Die Autokorrelationsfunktion

In der Mathematik [2, 17, 18] wird die Kreuzkorrelation $R_{fg}(x)$ zweier Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ durch folgenden Ausdruck definiert:

$$R_{fg}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{f(t)} g(t+x) dt \quad (2.18)$$

¹z.B. mit Hilfe des Residuensatzes der komplexen Funktionentheorie.

Sind die beiden Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ ident, so spricht man von der Autokorrelationsfunktion $R_f(x)$ von $f(x)$.

$$R_f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{f(t)} f(t+x) dt \quad (2.19)$$

Nach dem sogenannten Kreuzkorrelationstheorem (z. B. [2], S. 54) besteht ein Zusammenhang zwischen der Kreuzkorrelationsfunktion $R_{fg}(x)$ der Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ und deren Fouriertransformierten $F(y)$ und $G(y)$.

$$\mathcal{F}R_{fg}(x) = \overline{\mathcal{F}f(x)} \cdot \mathcal{F}g(x) = \overline{F(y)}G(y) \quad (2.20)$$

Dabei müssen jedoch $f(x)$ und $g(x)$ sogenannte *gute* Funktionen sein. Das heißt, daß die n -te Ableitung für $x \rightarrow \infty$ schneller gegen 0 geht als jede beliebige ganze negative Potenz von x .

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x^m f^{(n)}(x) = 0 \quad \forall m, n \in \mathbb{N} \quad (2.21)$$

Gewöhnlich schreibt man statt dessen

$$f^{(n)}(x) = o(x^{-m}) \quad x \rightarrow \infty \quad \forall m, n \in \mathbb{N}. \quad (2.22)$$

Man kann nun im Theorem (2.20) die Funktionen $f(x) = g(x)$ durch das Interferogramm $I(x)$ eines Spektrums $S(\tilde{\nu})$ ersetzen. Es folgt dann

$$\mathcal{F}R_f(x) = |S(\tilde{\nu})|^2 = P(\tilde{\nu}), \quad (2.23)$$

wobei $P(\tilde{\nu})$ *Powerspektrum* genannt wird.

Daß diese Formel nicht immer verwendbar ist zeigt der Fall der fast periodischen Funktionen, insbesondere der Fall des monochromatischen Lichts. Hier ist das Interferogramm $I(x)$ bekanntlich gegeben durch

$$I(x) = \cos(2\pi\tilde{\nu}_0 x) \quad (2.24)$$

Setzt man dieses in die Definition der Autokorrelationsfunktion $R_f(x)$ ein, so ist weder die Bedingung (2.22) erfüllt, noch ist der Ausdruck $R_f(x)$ definiert. Für diese Klasse von Funktionen verwendet man eine etwas modifizierte Definition der Autokorrelationsfunktion, nämlich

$$\tilde{R}_f(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L \overline{I(t)} I(t+x) dt. \quad (2.25)$$

Das entsprechende Autokorrelationstheorem lautet

$$\mathcal{F}\tilde{R}_f(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \overline{\int_{-L}^L I(x) e^{-2\pi i x \tilde{\nu}} dx} \cdot \int_{-L}^L I(x) e^{-2\pi i x \tilde{\nu}} dx = \tilde{P}(\tilde{\nu}). \quad (2.26)$$

Bevor ich auf die Eigenschaften der Autokorrelationsfunktion $R(x)$ eingehe, werde ich sie und ihr Powerspektrum $P(\tilde{\nu})$ für verschiedene Interferogramme $I(x)$ anschreiben. In den ersten 3 Fällen handelt es sich dabei um das Interferogramm beziehungsweise das abgeschnittene Interferogramm des monochromatischen Lichtes mit Wellenlänge $\tilde{\nu}_0$. Die Fälle 4 und 5 erhält man aus der Fouriertransformation einer Lorentzfunktion, im letzten Fall wurde eine Gaußfunktion fouriertransformiert.

| $I(x)$ | $R(x)$ | $P(\tilde{\nu})$ |
|--|--|---|
| $e^{2\pi i \tilde{\nu}_0 x}$ | $e^{2\pi i \tilde{\nu}_0 x}$ | $\delta(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)$ |
| $e^{2\pi i \tilde{\nu}_0 x} I_{[a,b]}$ | $(b - a - x) e^{2\pi i \tilde{\nu}_0 x} I_{[a-b, b-a]}$ | $\frac{\sin^2(\pi(b-a)(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0))}{\pi^2(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)^2}$ |
| $\cos(2\pi \tilde{\nu}_0 x)$ | $\frac{\cos(2\pi \tilde{\nu}_0 x)}{2}$ | $\frac{\delta(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0) + \delta(\tilde{\nu} + \tilde{\nu}_0)}{2}$ |
| $e^{-2\sigma\pi x }$ | $\frac{e^{-2\pi\sigma x + 2\pi\sigma x }}{2\pi\sigma}$ | $\frac{\sigma^2}{\pi^2} \frac{1}{(\tilde{\nu}^2 + \sigma^2)^2}$ |
| $e^{-2\sigma\pi x} I_{[0,a]}$ | $\frac{e^{-2\pi\sigma a} \sinh(2\pi\sigma(a - x))}{2\pi\sigma} I_{[-a,a]}$ | $\frac{(e^{-2\pi\sigma a} - 1)^2}{4\pi^2(\tilde{\nu}^2 + \sigma^2)} + \frac{e^{-2\pi\sigma a} \sin^2(2\pi a \tilde{\nu})}{\pi^2(\tilde{\nu}^2 + \sigma^2)}$ |
| $e^{-\frac{(\pi\sigma x)^2}{\ln 2}}$ | $\sqrt{\frac{\ln 2}{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(\pi\sigma x)^2}{2 \ln 2}}$ | $\frac{\ln 2}{\pi\sigma^2} e^{-\frac{\tilde{\nu}^2 \ln 2}{\sigma^2}}$ |

Anhand obiger Tabelle lassen sich folgende Eigenschaften der Autokorrelationsfunktion $R_f(x)$ überprüfen:

- $R_f(-x) = \overline{R_f(x)} \quad \forall x \in R$

- $|R_f(x)| \leq R_f(0) \quad \forall x \in R$
- $R_f(x)$ unterscheidet sich von einer stetigen Funktion höchstens auf einer Menge mit Maß 0.
- Wenn $R_f(x)$ stetig ist in 0, dann ist sie überall stetig.
- $R_f(x)$ ist positiv definit, d. h.

$$\sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N R_f(x_m - x_n) a_m \bar{a}_n \geq 0 \quad \forall (x_n)_{n=1(1)N} \in R$$

$$\forall (a_n)_{n=1(1)N} \in C \quad (2.27)$$

Die Beweise sind nicht sonderlich schwer und finden sich z. B. bei [2].

Nun ist es in der Praxis nicht möglich, das Interferogramm eines Spektrums als stetige Funktion gegeben zu haben. Messungen mit Interferometern liefern lediglich eine Reihe von äquidistanten Meßpunkten, die durch eine Digitalisierungslänge Δt voneinander getrennt liegen. Es ist für die Anwendung obiger Theoreme notwendig, sie in eine diskrete Form überzuführen.

Nehmen wir also an, unser Interferogramm sei gegeben durch die Funktionswerte x_n an äquidistanten Stützstellen mit Digitalisierungsabstand der Länge Δt . Die diskrete Autokorrelationsfunktion $\Phi(m)$ ist dann definiert als Autokorrelation zweier Punkte mit Abstand $m\Delta t$.

$$\Phi(m) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L+1} \sum_{n=-L}^L \bar{x}_n x_{n+m} \quad -\infty < m < \infty \quad (2.28)$$

Dieser Fall ist rein theoretischer Natur, da ein durch Messungen erhaltenes Interferogramm nicht an unendlich vielen Stellen bekannt sein kann. Sollten $N+1$ Stützstellen x_0, x_1, \dots, x_N bekannt sein, so verwendet man folgenden Schätzer $\hat{\Phi}(m)$

$$\hat{\Phi}(m) = \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N \bar{x}_n x_{n+m} \quad |m| \leq N, \quad (2.29)$$

wobei für $n \notin [0, N]$ $x_n = 0$ gesetzt wird. Warum gerade dieser Ausdruck verwendet wird, werden wir im Kapitel über Entropie erkennen. Eine wichtige Eigenschaft dieses Schätzers, die in den folgenden Kapiteln unentwegt

angewandt werden wird, ist

$$\hat{\Phi}(-m) = \overline{\hat{\Phi}(m)}. \quad (2.30)$$

Trotz diskreter Autokorrelationsfunktion ist das zugehörige Powerspektrum eine kontinuierliche Funktion.

$$P(\tilde{\nu}) = \Delta t \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Phi(m) e^{-2\pi i \tilde{\nu} m \Delta t} \quad (2.31)$$

2.4 Entropie

Unter der Entropie versteht man den Erwartungswert für den Informationsgehalt eines Zeichens einer Nachricht. Sie wurde in der Informatik zum ersten Mal von *Claude Shannon* wie folgt definiert:

$$H = \sum_{i=1}^n p_i h_i = \sum_{i=1}^n p_i \log_2 \frac{1}{p_i} = - \sum_{i=1}^n p_i \log_2 p_i \quad (2.32)$$

p_i bezeichnet die relative Häufigkeit des i -ten Zeichens, h_i ist dessen Informationsgehalt in Bit. Je seltener ein bestimmtes Zeichen auftritt, desto größer ist dessen Informationsgehalt.

Die Entropie ist stets positiv. Minimal, und damit gleich 0, wird sie, wenn ein bestimmtes Zeichen mit Wahrscheinlichkeit 1 auftritt. Der Informationsgehalt dieses Zeichens ist dann gleich 0. Im Gegensatz dazu läßt es sich leicht zeigen, daß maximale Entropie genau dann erreicht wird, wenn alle Zeichen mit gleicher Wahrscheinlichkeit $p_i = \frac{1}{n}$ auftreten. Ihr Wert beträgt dann $H = \log_2 n$.

Analog zu (2.32) kann die Entropie sowohl im Reellen, als auch im Komplexen für eine Dichtefunktion $p(x)$ definiert werden. Dazu ersetzt man die diskreten Wahrscheinlichkeiten p_i durch die Funktion $p(x)$, und die Summe entsprechend durch ein Integral. Das Ersetzen des 2er Logarithmus durch den natürlichen Logarithmus bewirkt lediglich die Multiplikation mit einem Faktor.

$$H_r(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln p(x) dx \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned}
H_c(x) &= H(u + \hat{iv}) = \\
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} p(u + \hat{iv}) \ln p(u + \hat{iv}) du dv \quad (2.34)
\end{aligned}$$

Wir werden nun versuchen aus den Entropiebegriffen (2.33) und (2.34) entsprechende Entropiebegriffe für Zeitreihen herzuleiten. Nehmen wir also an, es wären $N + 1$ Werte $(x_n)_{n=0(1)N}$ einer experimentellen, äquidistanten Zeitreihe mit Digitalisierungslänge Δt gegeben. Diese Zeitreihe interpretieren wir als einen *Gauß'schen* Prozeß mit Mittelwert 0. Das heißt, wir interpretieren sie als Folge von $N + 1$ reellen oder komplexen Gauß'schen Normalverteilungen mit Mittelwert 0

$$p_r(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.35)$$

$$p_c(x) = p_c(u + \hat{iv}) = \frac{1}{\pi\sigma^2} e^{-\frac{(u-\mu_u)^2 + (v-\mu_v)^2}{\sigma^2}}, \quad (2.36)$$

wobei $\mu = \mu_u + \hat{i}\mu_v = 0$ gilt. Die x_n sind Stichproben dieser Normalverteilungen.

Jetzt sind diese Normalverteilungen in der Regel nicht unabhängig voneinander. Sind beispielsweise einige Stichproben der n -ten Verteilung bekannt, so können unter Umständen bereits Aussagen über die $n + 1$ -sten Verteilung gemacht werden. Die Dichtefunktion der multivariaten Gauß'schen Normalverteilung mit Mittelwert μ lautet

$$p_r(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^M |\mathbf{C}|}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu)^T \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x}-\mu)} \quad (2.37)$$

$$p_c(\mathbf{x}) = p_c(\mathbf{u} + \hat{i}\mathbf{v}) = \frac{1}{\pi^M |\mathbf{C}|} e^{-(\mathbf{x}-\mu)^H \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x}-\mu)}, \quad (2.38)$$

wobei \mathbf{x} ein Vektor ist, dessen Komponenten reell beziehungsweise komplex normalverteilt mit Mittelwert μ sind. Bei \mathbf{C} handelt es sich um die Kovarianzmatrix, die die Abhängigkeiten der einzelnen Verteilungen voneinander angibt. Sie ist bekanntlich wie folgt definiert:

$$\mathbf{C} = \mathcal{E}((\mathbf{x} - \mu)(\mathbf{x} - \mu)^H) = (c_{ij})_{i=0(1)M, j=0(1)M} \quad (2.39)$$

Schätzen wir die Kovarianz zweier Verteilungen, die k Punkte voneinander

getrennt liegen durch das arithmetische Mittel aller gegebenen Konstellationen, so folgt

$$\hat{c}_{i,i\pm k} = \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N \overline{x_n x_{n\pm k}}, \quad (2.40)$$

wobei für $n \notin [0, N]$ $x_n = 0$ gesetzt wird. Dieser Ausdruck deckt sich jedoch mit dem Schätzer $\hat{\Phi}(k)$ der diskreten Autokorrelationsfunktion (2.29). So erhält man bei gegebenem M letztendlich folgende multivariate Normalverteilungen

$$p_r(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^M |\mathbf{C}|}} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}} \quad (2.41)$$

$$p_c(\mathbf{x}) = p_c(\mathbf{u} + \hat{i} \mathbf{v}) = \frac{1}{\pi^M |\mathbf{C}|} e^{-\mathbf{x}^H \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}} \quad (2.42)$$

mit

$$\mathbf{x} = (x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+M-1})^T \quad (2.43)$$

und

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \hat{\Phi}(0) & \overline{\hat{\Phi}(1)} & \dots & \overline{\hat{\Phi}(M-1)} \\ \hat{\Phi}(1) & \hat{\Phi}(0) & \dots & \overline{\hat{\Phi}(M-2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Phi}(M-1) & \hat{\Phi}(M-2) & \dots & \hat{\Phi}(0) \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

Eingesetzt in die Entropieformeln (2.33) beziehungsweise (2.34) erhält man weiters

$$\begin{aligned} H_r &= - \int_{R^M} p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty}}_M \frac{\ln(2\pi)^M + \ln |\mathbf{C}| + \mathbf{x}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}}{2\sqrt{(2\pi)^M |\mathbf{C}|}} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}} d\mathbf{x} \quad (2.45) \end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\begin{aligned}
H_c &= - \int_{C^M} p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\
&= \underbrace{\int_C \int_C \dots \int_C}_M \frac{\ln \pi^M + \ln |\mathbf{C}| + \mathbf{x}^H \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}}{\pi^M |\mathbf{C}|} e^{-\mathbf{x}^H \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (2.46)
\end{aligned}$$

Die Kovarianzmatrix ist eine hermitesche Matrix. Dasselbe gilt auch für die Inverse der Kovarianzmatrix. Es existiert also eine $M \times M$ -Matrix \mathbf{A} , sodaß

$$\mathbf{A}^H \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} = \mathbf{E}, \quad e_{ij} = \delta_{ij}, \quad i, j = 1(1)M. \quad (2.47)$$

Die Koordinatentransformation

$$\mathbf{y} = \mathbf{A} \mathbf{x} \quad (2.48)$$

liefert unter Berücksichtigung

$$d\mathbf{x} = |\mathbf{A}| d\mathbf{y} = \sqrt{|\mathbf{C}|} d\mathbf{y} \quad (2.49)$$

folgende Vereinfachungen:

$$\begin{aligned}
H_r &= \int_{R^M} \frac{\ln(2\pi)^M + \ln |\mathbf{C}| + \mathbf{y}^T \mathbf{y}}{2\sqrt{(2\pi)^M}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T \mathbf{y}} d\mathbf{y} = \\
&= \left(\frac{\ln(2\pi)^M}{2} + \frac{\ln |\mathbf{C}|}{2} \right) \int_{R^M} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^M}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T \mathbf{y}} d\mathbf{y} + \\
&\quad + \int_{R^M} \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{y}}{2\sqrt{(2\pi)^M}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T \mathbf{y}} d\mathbf{y} = \\
&= \frac{\ln(2\pi)^M}{2} + \frac{\ln |\mathbf{C}|}{2} + \frac{M}{2} \int_{R^M} \frac{y_1^2}{\sqrt{\ln(2\pi)^M}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T \mathbf{y}} d\mathbf{y} = \\
&= \frac{\ln(2\pi e)^M}{2} + \frac{\ln |\mathbf{C}|}{2} \quad (2.50) \\
H_c &= \int_{C^M} \frac{\ln \pi^M + \ln |\mathbf{C}| + \mathbf{y}^H \mathbf{y}}{\pi^M} e^{-\mathbf{y}^H \mathbf{y}} d\mathbf{y} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (\ln \pi^M + \ln |\mathbf{C}|) \int_{\mathcal{C}^M} \frac{1}{\pi^M} e^{-\mathbf{y}^H \mathbf{y}} d\mathbf{y} + \\
&\quad + \int_{\mathcal{C}^M} \frac{\mathbf{y}^H \mathbf{y}}{\pi^M} e^{-\mathbf{y}^H \mathbf{y}} d\mathbf{y} = \\
&= \ln \pi^M + \ln |\mathbf{C}| + M \int_{\mathcal{C}^M} \frac{|y_1|^2}{\ln \pi^M} e^{-\mathbf{y}^H \mathbf{y}} d\mathbf{y} = \\
&= \ln(\pi e)^M + \ln |\mathbf{C}| \tag{2.51}
\end{aligned}$$

Dieser Ausdruck wächst mit steigendem M sehr schnell gegen unendlich. Für $M \rightarrow \infty$ verwendet man deshalb folgende alternative Definition der Entropie([12], S. 125):

$$h_r = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{H_r}{M} = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\ln(2\pi e)}{2} + \frac{\ln \sqrt[M]{|\mathbf{C}|}}{2} \tag{2.52}$$

$$h_c = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{H_c}{M} = \lim_{M \rightarrow \infty} \ln(\pi e) + \ln \sqrt[M]{|\mathbf{C}|} \tag{2.53}$$

Um einen Zusammenhang mit dem Powerspektrum $P(\tilde{\nu})$ (2.31) herstellen zu können benötigt man nun ein recht weitreichendes Theorem, welches nach seinem Entdecker *Gabor Szegö* benannt wurde.

Theorem von G. Szegö (1920) [15]: Sei $\mathbf{C}_{M \times M}$ eine *Toeplitz*-Matrix der Form

$$\mathbf{C}_{M \times M} = \begin{pmatrix} c_0 & c_{-1} & \cdots & c_{-(M-1)} \\ c_1 & c_0 & \cdots & c_{-(M-2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{M-1} & c_{M-2} & \cdots & c_0 \end{pmatrix}, \tag{2.54}$$

$P(\tilde{\nu})$ die diskrete Fouriertransformation der Folge $(c_i)_{i \in \mathbb{Z}}$ mit Digitalisierung Δt

$$P(\tilde{\nu}) = \Delta t \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m e^{-2\pi i \tilde{\nu} m \Delta t} \tag{2.55}$$

und $g(x)$ eine auf einem kompakten Intervall $[a, b]$ gegebene stetige Funktion. Dann gilt

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} g(\lambda_m)}{M} = \frac{1}{2\nu_N} \int_{-\nu_N}^{\nu_N} g(2\nu_N P(\tilde{\nu})) d\tilde{\nu}, \tag{2.56}$$

wobei die $(\lambda_i)_{i=0(1)(M-1)}$ die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{C}_{M \times M}$ sind und $\nu_N = \frac{1}{2\Delta t}$ die sogenannte *Nyquist Frequenz* bezeichnet.

Durch die Substitution $\nu = \frac{\tilde{\nu}}{2\nu_N} = \tilde{\nu}\Delta t$ können im Ausdruck (2.56) ν_N und Δt eliminiert werden.

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} g(\lambda_m)}{M} = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} g \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \Phi(m) e^{-2\pi i \nu m} \right) d\nu \quad (2.57)$$

Der Beweis dieses Ausdrucks erfordert zunächst mehrere aus der linearen Algebra bereits bekannte Hilfssätze, die ich jedoch dennoch vollständig anschreiben werde. Damit kann das Theorem für alle jene Fälle gezeigt werden, für die $g(x)$ eine Polynomfunktion ist. Mit Hilfe des *Weierstraß'schen Approximationssatzes* [4] kann letztendlich der Übergang zu beliebigen, stetigen Funktionen durchgeführt werden.

Hilfssatz 1: Die Spur einer quadratischen Matrix \mathbf{C} ist gleich der Summe ihrer Eigenwerte.

Das charakteristische Polynom der Matrix $\mathbf{C} = (c_{i,j})_{i,j=1(1)N}$ lautet

$$|\mathbf{C} - \lambda \mathbf{E}| = \sum_{n=0}^{N-2} a_n \lambda^n + (-1)^{N-1} \left(\sum_{i=1}^N c_{i,i} \right) \lambda^{N-1} + (-1)^N \lambda^N. \quad (2.58)$$

Da die Lösungen dieses Polynoms gleich der Eigenwerte der Matrix sind, folgt unmittelbar aus dem Satz von *Vieta*

$$\sum_{n=1}^N \lambda_n = \sum_{i=1}^N c_{i,i}. \quad (2.59)$$

Hilfssatz 2: Hat die quadratische Matrix \mathbf{C} die Eigenwerte $(\lambda_n)_{n=1(1)N}$, so hat die Matrix \mathbf{C}^k die Eigenwerte $(\lambda_n^k)_{n=1(1)N}$.

Ist λ_n ein Eigenwert der Matrix $\mathbf{C} = (c_{i,j})_{i,j=1(1)N}$ und \mathbf{x}_n der zugehörige Eigenvektor, dann gilt

$$\mathbf{x}_n \mathbf{C}^k = \lambda_n \mathbf{x}_n \mathbf{C}^{k-1} = \lambda_n^k \mathbf{x}_n. \quad (2.60)$$

Hilfssatz 3 : Ist \mathbf{C} eine *Toeplitz*-Matrix (2.54), welche durch die Zahlenfolge $(c_i)_{i=-(M-1)(1)(M-1)}$ gegeben ist, so lauten die Elemente der Matrix $\mathbf{C}^k = (c_{i,j}^{(k)})_{i,j=0(1)(M-1)}$

$$\begin{aligned}
c_{i,j}^{(k)} &= \sum_{(n_m)_{m=1(1)(k-1)}=0}^{M-1} c_{i-n_1} \left(\prod_{m=1}^{k-2} c_{n_m-n_{m+1}} \right) c_{n_{k-1}-j} = \\
&= \sum_{n_1=0}^{M-1} \sum_{n_2=0}^{M-1} \cdots \sum_{n_{k-1}=0}^{M-1} c_{i-n_1} c_{n_2-n_1} c_{n_3-n_2} \cdots c_{n_{k-1}-n_{k-2}} c_{n_{k-1}-j}.
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Diesen Hilfssatz zeigt man am besten durch rekursives Ausmultiplizieren. Da es sich dabei lediglich um Schreibearbeit handelt verzichte ich darauf.

Um den Ausdruck (2.57) zu zeigen, nimmt man zunächst $g(x) = x^k, k \in N_0$ an. Im Fall $k = 0$ liefert das die triviale Behauptung $1 = 1$. Auch der Fall $k = 1$ ist nicht sonderlich kompliziert.

$$\begin{aligned}
\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} \lambda_m}{M} &= \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Phi(m) e^{-2\pi i \nu m} d\nu \\
\iff \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{M\Phi(0)}{M} &= \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \Phi(0) d\nu \\
\iff \Phi(0) &= \Phi(0)
\end{aligned} \tag{2.62}$$

Im allgemeinen Fall benötigt man obige Hilfssätze. $\Phi_{i,j}^{(k)}$ sind die Elemente der Matrix \mathbf{C}^k .

$$\begin{aligned}
\text{l.S.} &= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} \Phi_{m,m}^{(k)}}{M} = \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m,n_1,n_2,\dots,n_{k-1}=0}^{M-1} \Phi(m-n_1)\Phi(n_1-n_2)\cdots\Phi(n_{k-1}-m)}{M} = \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n_1,n_2,\dots,n_{k-1}=-m}^{M-1-m} \Phi(-n_1)\Phi(n_1-n_2)\cdots\Phi(n_{k-1})}{M} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n_1, n_2, \dots, n_{k-1} = -\infty}^{\infty} \Phi(-n_1) \Phi(n_1 - n_2) \dots \Phi(n_{k-1}) = \\
&= \sum_{m_1 + m_2 + \dots + m_{k-1} = 0, m_i \in \mathbb{Z}} \Phi(m_1) \Phi(m_2) \dots \Phi(m_{k-1}) \quad (2.63) \\
\text{r.S.} &= \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{-\infty}^{\infty} \Phi(m) e^{-2\pi i \nu m} \right)^k d\nu = \\
&= \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_k = -\infty}^{\infty} \Phi(m_1) \Phi(m_2) \dots \Phi(m_k) e^{-2\pi i \nu (m_1 + m_2 + \dots + m_k)} d\nu = \\
&= \sum_{m_1 + m_2 + \dots + m_{k-1} = 0, m_i \in \mathbb{Z}} \Phi(m_1) \Phi(m_2) \dots \Phi(m_{k-1}) \quad (2.64)
\end{aligned}$$

Da sich jedes Polynom als Linearkombinationen der Funktionen $g(x) = x^k$ darstellen läßt, ist der Satz für beliebige Polynomfunktionen gezeigt. Nach dem *Approximationssatz von Weierstraß* existiert zu jeder auf einem kompakten Intervall $[a, b]$ gegebenen stetigen Funktion $f(x)$ und jeder positiven Zahl ϵ ein Polynom $p(x)$ mit $|p(x) - f(x)| \leq \epsilon \forall x$. Folglich gilt

$$\begin{aligned}
&\forall g(x) \in C[a, b], \forall \epsilon > 0 : \\
&\exists p_1(x) \in P[a, b] : \left| p_1(x) - \left(g(x) - \frac{\epsilon}{2} \right) \right| \leq \frac{\epsilon}{2} \\
\implies &g(x) - \epsilon \leq p_1(x) \leq g(x) \\
\implies &\liminf_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} g(\lambda_m)}{M} \geq \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} p_1(P(\nu)) d\nu \geq \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} g(P(\nu)) d\nu - \epsilon. \quad (2.65)
\end{aligned}$$

Analog funktioniert die Abschätzung nach unten:

$$\begin{aligned}
&\forall g(x) \in C[a, b], \forall \epsilon > 0 : \\
&\exists p_2(x) \in P[a, b] : \left| p_2(x) - \left(g(x) + \frac{\epsilon}{2} \right) \right| \leq \frac{\epsilon}{2} \\
\implies &g(x) \leq p_2(x) \leq g(x) + \epsilon \\
\implies &\limsup_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} g(\lambda_m)}{M} \leq \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} p_2(P(\nu)) d\nu \leq \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} g(P(\nu)) d\nu + \epsilon \quad (2.66)
\end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\forall \epsilon > 0 : \liminf_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} g(\lambda_m)}{M} + \epsilon > \limsup_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} g(\lambda_m)}{M} - \epsilon \quad (2.67)$$

und damit

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=0}^{M-1} g(\lambda_m)}{M} = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} g(P(\nu)) d\nu, \quad (2.68)$$

womit das *Theorem von Szegö* bewiesen wäre.

Setzt man für die Funktion $g(x)$ den natürlichen Logarithmus erhält man die Identität

$$\begin{aligned} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\ln \lambda_0 + \ln \lambda_1 + \dots + \ln \lambda_{M-1}}{M} &= \frac{1}{2\nu_N} \int_{-\nu_N}^{\nu_N} \ln(2\nu_N P(\tilde{\nu})) d\tilde{\nu} \\ \iff \lim_{M \rightarrow \infty} \ln \sqrt[M]{|\mathbf{C}|} &= \ln(2\nu_N) + \frac{1}{2\nu_N} \int_{-\nu_N}^{\nu_N} \ln(2\nu_N P(\tilde{\nu})) d\tilde{\nu}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Damit gilt letztendlich

$$\begin{aligned} h_r &= \frac{\ln(2\pi e)}{2} - \frac{\ln \Delta t}{2} + \frac{\Delta t}{2} \int_{-\frac{1}{2\Delta t}}^{\frac{1}{2\Delta t}} \ln\left(\frac{1}{\Delta t} P(\tilde{\nu})\right) d\tilde{\nu} = \\ &= \frac{\ln(2\pi e)}{2} + \frac{\ln(2\nu_N)}{2} + \frac{1}{4\nu_N} \int_{-\nu_N}^{\nu_N} \ln(2\nu_N P(\tilde{\nu})) d\tilde{\nu} \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} h_c &= \ln(\pi e) - \ln \Delta t + \Delta t \int_{-\frac{1}{2\Delta t}}^{\frac{1}{2\Delta t}} \ln\left(\frac{1}{\Delta t} P(\tilde{\nu})\right) d\tilde{\nu} = \\ &= \ln(\pi e) + \ln(2\nu_N) + \frac{1}{2\nu_N} \int_{-\nu_N}^{\nu_N} \ln(2\nu_N P(\tilde{\nu})) d\tilde{\nu}, \end{aligned} \quad (2.71)$$

wobei es sich bei $P(\tilde{\nu})$ um das Powerspektrum (2.31) handelt.

Erwartungsgemäß sind die beiden Ausdrücke h_r und h_c proportional, woraus folgt, daß es theoretisch ohne Bedeutung ist ob ein reelles oder komplexes Interferogramm vorliegt.

2.5 Die entscheidende Idee

Wir wissen nun, daß die Entropie eines reellen *Gauß*'schen Prozesses durch den Ausdruck (2.70) beziehungsweise die Entropie eines komplexen

Gauß'schen Prozesses durch (2.71) gegeben ist. Die entscheidende Idee besteht darin, eine Zahl $M \leq N$ festzulegen, für die man die Annahme trifft, daß für alle Zahlen m mit $|m| \leq M$ der Schätzer $\hat{\Phi}(m)$ (2.29) mit dem theoretisch exakten Wert $\Phi(m)$ (2.28) übereinstimmt.

$$\Phi(m) = \hat{\Phi}(m) \quad |m| \leq M < N \quad (2.72)$$

Für alle anderen m werden die $\hat{\Phi}(m)$ derart interpoliert, daß die Entropie h maximal wird. Bei der Maximum Entropie Methode handelt es sich also um eine Extremwertaufgabe der Bauart

$$H\left(\Phi(M+1), \Phi(M+2), \dots\right) \rightarrow \max \quad (2.73)$$

in den Variablen $\Phi(M+1), \Phi(M+2), \dots$. Wie diese gelöst werden kann werden ich im nächsten Kapitel ausführen.

2.6 Maximierung der Entropie

Gesucht wird also eine Funktion $P_{ME}(\nu)$

$$P_{ME}(\nu) = \Delta t \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Phi(m) e^{-2\pi i \tilde{\nu} m \Delta t}, \quad (2.74)$$

für welche die Entropie maximal ist. Δt ist wieder der Digitalisierungsabstand des Interferogramms, ME steht für Maximum Entropie. Substituiert man in (2.70) oder (2.71) $P(\tilde{\nu})$ durch (2.74) erhält man die Proportion

$$h \propto h_{ME} = \int_{-\nu_N}^{\nu_N} \ln \left(\Delta t \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Phi(m) e^{-2\pi i m \nu \Delta t} \right) d\nu, \quad (2.75)$$

wobei es sich bei

$$\nu_N = \frac{1}{2\Delta t} \quad (2.76)$$

wieder um die bereits früher angesprochene *Nyquist Frequenz* handelt. Auf Grund der gegebenen Digitalisierungslänge enthält die Zeitreihe außerhalb des Intervalls $[-\nu_N, \nu_N]$ keine zusätzliche relevante Information mehr. Da es sich um ein Extremwertproblem handelt gilt

$$\frac{\partial h_{ME}}{\partial \Phi(m)} = 0, \quad |m| > M. \quad (2.77)$$

Aus (2.75) und (2.77) folgt

$$\int_{-\nu_N}^{\nu_N} \frac{e^{-2\pi i \nu \Delta t}}{P_{ME}(\nu)} d\nu = 0 \quad |m| > M. \quad (2.78)$$

Zur Berechnung von $P_{ME}(\nu)$ verwendet man den Fourierreihenansatz

$$\frac{1}{P_{ME}(\nu)} = \frac{1}{P_M \Delta t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \gamma_n e^{-2\pi i n \nu \Delta t}, \quad \gamma_{-n} = \overline{\gamma_n}, \quad \gamma_0 = 1. \quad (2.79)$$

Eingesetzt in (2.78) erhält man damit

$$\frac{1}{P_M \Delta t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \gamma_n \int_{-\nu_N}^{\nu_N} e^{-2\pi i (n+m) \nu \Delta t} d\nu = 0, \quad |m| > M. \quad (2.80)$$

Setzt man in (2.80) der Reihe nach $m = -(M+1), -(M+2), \dots$, so folgt unmittelbar $\gamma_{M+1} = \gamma_{M+2} = \dots = 0$. Es ist leicht einzusehen, daß

$$\int_{-\nu_N}^{\nu_N} e^{-2\pi i n \nu \Delta t} d\nu = 0, \quad n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}. \quad (2.81)$$

Mit Hilfe von (2.74) und (2.81) kann man $\hat{\Phi}(m)$ als Funktion von $P_{ME}(\nu)$ darstellen.

$$\begin{aligned} \Phi(m) = \hat{\Phi}(m) &= \int_{-\nu_N}^{\nu_N} P_{ME}(\nu) e^{2\pi i m \nu \Delta t} d\nu = \\ &= P_M \Delta t \int_{-\nu_N}^{\nu_N} \frac{e^{2\pi i m \nu \Delta t}}{\sum_{n=-M}^M \gamma_n e^{-2\pi i n \nu \Delta t}} d\nu = \\ &= \frac{P_M}{2\pi i} \oint_B \frac{z^{m-1}}{\sum_{n=-M}^M \gamma_n z^{-n}} dz \quad 0 \leq m \leq M \end{aligned} \quad (2.82)$$

Dabei wurde $z = e^{2\pi i \nu \Delta t}$ substituiert. Integriert wird entlang des Einheitskreises B in mathematisch positiver Richtung. Da wir in (2.79) die γ_n hermitisch angenommen haben², können wir folgende Zerlegung durchführen:

$$\begin{aligned} \sum_{n=-M}^M \gamma_n z^{-n} &= \frac{1}{P_M \Delta t} \left(1 + \sum_{n=1}^M c_n z^{-n} \right) \cdot \left(1 + \sum_{n=1}^M \overline{c_n} z^n \right) = \\ &= \frac{1}{P_M \Delta t} C_M(z) \cdot \overline{C_M\left(\frac{1}{\bar{z}}\right)} \end{aligned} \quad (2.83)$$

²Das ist notwendig, damit $P_{ME}(\nu)$ eine reelle Funktion ist.

Für $P_{ME}(\nu)$ gilt demnach

$$\begin{aligned}
P_{ME}(\nu) &= \frac{P_M \Delta t}{\left(1 + \sum_{n=1}^M c_n z^{-n}\right) \cdot \left(1 + \sum_{n=1}^M \overline{c_n z^{-n}}\right)} = \\
&= \frac{P_M \Delta t}{\left|1 + \sum_{n=1}^M c_n e^{-2\pi i n \nu \Delta t}\right|^2}.
\end{aligned} \tag{2.84}$$

Dabei können die Koeffizienten $(c_n)_{n=1(1)M}$ so gewählt werden, daß die Nullstellen von $C_M(z)$ innerhalb des Einheitskreises B , die Nullstellen von $\overline{C_M(\frac{1}{\bar{z}})}$ dagegen außerhalb von B liegen. Diese Forderung hilft uns, den Ausdruck hinter dem Kurvenintegral so zu modifizieren, daß er holomorph innerhalb des Einheitskreises wird. Nach dem Residuensatz der komplexen Funktionentheorie ist dann dieses Kurvenintegral gleich 0.

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^M c_n \hat{\Phi}(m-n) &= \frac{P_M}{2\pi i} \oint_B \frac{z^{m-1} \sum_{n=0}^M c_n z^{-n}}{C_M(z) \cdot \overline{C_M(\frac{1}{\bar{z}})}} dz = \\
&= \frac{P_M}{2\pi i} \oint_B \frac{z^{m-1}}{\overline{C_M(\frac{1}{\bar{z}})}} dz = \\
&= 0, \quad m = 1(1)M
\end{aligned} \tag{2.85}$$

Für $m = 0$ erhält man unter Verwendung des Residuensatzes

$$\sum_{n=0}^M c_n \hat{\Phi}(-n) = \frac{P_M}{c_0}. \tag{2.86}$$

Die Koeffizienten c_i lassen sich also aus dem nichtlinearen Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}(0) & \overline{\hat{\Phi}(1)} & \cdots & \overline{\hat{\Phi}(M)} \\ \hat{\Phi}(1) & \hat{\Phi}(0) & \cdots & \hat{\Phi}(M-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Phi}(M) & \hat{\Phi}(M-1) & \cdots & \hat{\Phi}(0) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{P_M}{c_0} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.87}$$

errechnen. Dieses Gleichungssystem wird *Yule-Walker-Gleichung* genannt. Wie es gelöst werden kann, wird Inhalt des nächsten Kapitels sein.

2.7 Berechnung der Koeffizienten $(c_n)_{n=0(1)M}$

An und für sich ist die Lösung der *Yule-Walker*-Gleichung kein Problem. Streicht man die erste Zeile des Gleichungssystems (2.87), und nimmt man c_0 konstant an, so erhält man

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}(0) & \overline{\hat{\Phi}(1)} & \cdots & \overline{\hat{\Phi}(M-1)} \\ \hat{\Phi}(1) & \hat{\Phi}(0) & \cdots & \overline{\hat{\Phi}(M-2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Phi}(M-1) & \hat{\Phi}(M-2) & \cdots & \hat{\Phi}(0) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -c_0\Phi(1) \\ -c_0\Phi(2) \\ \vdots \\ -c_0\Phi(M) \end{pmatrix} \quad (2.88)$$

Dieses Gleichungssystem hat die Lösung $(c_i)_{i=1(1)M}$ mit $c_i = c_0 c_i^*$, wobei $(c_i^*)_{i=1(1)M}$ die Lösung für $c_0 = 1$ ist. Aus der ersten Zeile der Gleichung (2.87) folgt dann

$$|c_0|^2 = \frac{P_M}{\Phi(0) + \sum_{i=1}^M \overline{\Phi(i)} c_i^*} \quad (2.89)$$

Setzt man o.B.d.A. $c_0 = 1$, so ergibt sich genau ein Wert für P_M .

$$P_M = \Phi(0) + \sum_{i=1}^M \overline{\Phi(i)} c_i^* \quad (2.90)$$

Dieses Lösungsverfahren ist linearer Natur. Der *Levinson*-Algorithmus liefert die entsprechenden Lösungen. Es gibt auch ein nichtlineares Verfahren, den *Burg*-Algorithmus, den wir im Anschluß besprechen werden.

2.7.1 Der *Levinson*-Algorithmus

Beim *Levinson*-Algorithmus handelt es sich um ein rein rekursives Verfahren. Ist die Lösung $(P_{n-1}; c_1^{(n-1)}, \dots, c_{n-1}^{(n-1)})$ der ersten n Zeilen und Spalten bekannt

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}(0) & \overline{\hat{\Phi}(1)} & \cdots & \overline{\hat{\Phi}(n-1)} \\ \hat{\Phi}(1) & \hat{\Phi}(0) & \cdots & \overline{\hat{\Phi}(n-2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Phi}(n-1) & \hat{\Phi}(n-2) & \cdots & \hat{\Phi}(0) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ c_1^{(n-1)} \\ \vdots \\ c_{n-1}^{(n-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{n-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.91)$$

so folgt für die ersten $n + 1$ Zeilen und Spalten

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}(0) & \overline{\hat{\Phi}(1)} & \cdots & \overline{\hat{\Phi}(n-1)} & \overline{\hat{\Phi}(n)} \\ \hat{\Phi}(1) & \hat{\Phi}(0) & \cdots & \hat{\Phi}(n-2) & \hat{\Phi}(n-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \hat{\Phi}(n-1) & \hat{\Phi}(n-2) & \cdots & \hat{\Phi}(0) & \overline{\hat{\Phi}(1)} \\ \hat{\Phi}(n) & \hat{\Phi}(n-1) & \cdots & \hat{\Phi}(1) & \hat{\Phi}(0) \end{pmatrix} \cdot \left(\left(\begin{pmatrix} 1 \\ c_1^{(n-1)} \\ \vdots \\ c_{n-1}^{(n-1)} \\ 0 \end{pmatrix} \right) + c_n^{(n)} \left(\begin{pmatrix} 0 \\ \overline{c_{n-1}^{(n-1)}} \\ \vdots \\ \overline{c_1^{(n-1)}} \\ 1 \end{pmatrix} \right) \right) = \left(\left(\begin{pmatrix} P_{n-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ Q_n \end{pmatrix} \right) + c_n^{(n)} \left(\begin{pmatrix} \overline{Q_n} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ P_{n-1} \end{pmatrix} \right) \right), \quad (2.92)$$

wobei

$$Q_n = \hat{\Phi}(n) + \sum_{k=1}^{n-1} \hat{\Phi}(n-k) c_k^{(n-1)}. \quad (2.93)$$

Wegen der letzten Zeile der Gleichung (2.92) muß gelten

$$Q_n + c_n^{(n)} \cdot P_{n-1} = 0. \quad (2.94)$$

Wir können annehmen, daß $P_{n-1} \neq 0$, da sonst die Matrix von (2.91) singulär wäre. $c_n^{(n)}$ läßt sich damit sofort hinschreiben.

$$c_n^{(n)} = -\frac{Q_n}{P_{n-1}} \quad (2.95)$$

Nach dem n -ten Rekursionsschritt erhalten wir demnach folgende Werte für $(c_i)_{i=1(1)(n-1)}$

$$\begin{pmatrix} c_1^{(n)} \\ c_2^{(n)} \\ \vdots \\ c_{n-1}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1^{(n-1)} \\ c_2^{(n-1)} \\ \vdots \\ c_{n-1}^{(n-1)} \end{pmatrix} + c_n^{(n)} \begin{pmatrix} \overline{c_{n-1}^{(n-1)}} \\ \overline{c_{n-2}^{(n-1)}} \\ \vdots \\ \overline{c_1^{(n-1)}} \end{pmatrix} \quad (2.96)$$

Ferner gilt

$$P_n = P_{n-1} + c_n^{(n)} \overline{Q_n} \quad (2.97)$$

und damit

$$P_n = P_{n-1}(1 - |c_n^{(n)}|^2). \quad (2.98)$$

Als Startwert verwendet man $P_0 = \hat{\Phi}(0)$.

Zählt man die verwendeten Rechenoperationen, um vom $n - 1$ -ten Rekursionsschritt zum n -ten zu gelangen, so erhält man $2n - 2$ Additionen, $2n$ Multiplikationen, zwei Subtraktionen und eine Division. Bei einer gegebenen $M \times M$ Matrix werden also insgesamt etwa je M^2 Additionen und Multiplikationen benötigt. Der Gesamtaufwand ist damit von der Ordnung $O(M^2)$. Verglichen mit dem allgemeinen Gauß'schen Eliminationsverfahren, wo bekanntlich der Rechenaufwand bei $O(M^3)$ liegt, ist dieser Algorithmus wesentlich schneller.

Ein weiterer Vorteil liegt darin, daß der benötigte Speicherverbrauch lediglich von der Ordnung $O(M)$ ist, verglichen mit $O(M^2)$ beim herkömmlichen Eliminationsverfahren.

Der gesamte Algorithmus noch einmal in Kurzform:

$$\begin{aligned} P &= \hat{\Phi}(0) \\ c_i &= 0 \quad i = 1(1)M \end{aligned}$$

Für $n = 1(1)M$

$$\begin{aligned} Q &= \hat{\Phi}(n) + \sum_{k=0}^{n-1} \hat{\Phi}(n-k)c_k \\ c_n &= -\frac{Q}{P} \\ P &= P(1 - |c_n|^2) \\ c_i &= c_i + c_n \overline{c_{n-i}} \quad i = 1(1)(n-1) \end{aligned}$$

2.7.2 Der Burg-Algorithmus

Dieser erstmals von *J. P. Burg* [1] vorgestellte Algorithmus zur Lösung der *Yule-Walker*-Gleichung (2.87) ist das nichtlineare Gegenstück zum *Levinson*-Algorithmus. Wir nehmen zunächst an, daß der Erwartungswert für den

nachfolgenden bzw. für den vorhergehenden Wert von M Punkten einer Zeitreihe gegeben ist durch

$$\hat{x}_n^{(f)} = - \sum_{k=1}^M c_k^{(M)} x_{n-k} \quad n = M, \dots, N-1 \quad (2.99)$$

$$\hat{x}_n^{(b)} = - \sum_{k=1}^M \overline{c_k^{(M)}} x_{n+k} \quad n = 0, \dots, N-1-M \quad (2.100)$$

Zur Ermittlung der $c_k^{(M)}$ kann man nach Einführung von Fehlertermen ε_n die erste Gleichung auch folgendermaßen darstellen:

$$x_n + \sum_{k=1}^M c_k^{(M)} x_{n-k} = \varepsilon_n \quad (2.101)$$

Danach multipliziert man beide Seiten mit $\overline{x_{n-m}}$ und bildet den Erwartungswert.

$$\mathcal{E}(x_n \overline{x_{n-m}}) + \sum_{k=1}^M c_k^{(M)} \mathcal{E}(x_{n-k} \overline{x_{n-m}}) = \mathcal{E}(\varepsilon_n \overline{x_{n-m}}) \quad (2.102)$$

ε_n und x_{n-m} sind für $m \neq 0$ unkorreliert und der Erwartungswert ihres Produkts daher 0. Für $m = 0$ erhält man

$$\mathcal{E}(\varepsilon_n x_n) = \mathcal{E}((x_n - \mathcal{E}x_n)x_n) = \mathcal{E}x_n^2 - (\mathcal{E}x_n)^2 = \varepsilon^2. \quad (2.103)$$

ε^2 ist die Varianz von x_n , und damit das Quadrat des vorhergesagten Fehlers (*prediction error power, PEP*). Für die Erwartungswerte $\mathcal{E}(x_n \overline{x_{n-m}})$ können wir unsere bereits bewährten Schätzer $\hat{\Phi}(m)$ (2.29) setzen.

$$\hat{\Phi}(m) + \sum_{k=1}^M c_k^{(M)} \hat{\Phi}(m-k) = \delta_{0,m} \varepsilon^2 \quad (2.104)$$

In Matrixschreibweise erkennt man sofort, daß es sich hier im Prinzip um die Yule-Walker-Gleichung (2.87) handelt.

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}(0) & \overline{\hat{\Phi}(1)} & \dots & \overline{\hat{\Phi}(M)} \\ \hat{\Phi}(1) & \hat{\Phi}(0) & \dots & \overline{\hat{\Phi}(M-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Phi}(M) & \hat{\Phi}(M-1) & \dots & \hat{\Phi}(0) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ c_1^{(M)} \\ \vdots \\ c_M^{(M)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.105)$$

Die *Burg*-Methode verwendet jetzt jedoch nicht obiges Gleichungssystem als Ausgangsbasis, sondern berechnet die Koeffizienten $c_n^{(M)}$ derart, daß die Summe der Fehler, die bei Schätzung von nachfolgenden bzw. vorhergehenden Datenpunkten auftritt, minimal wird.

$$\begin{aligned}
(\varepsilon^{(M)})^2 &= \sum_{n=M+1}^N \left(|x_n - \hat{x}_n^{(f)}|^2 + |x_{n-M} - \hat{x}_{n-M}^{(b)}|^2 \right) = \\
&= \sum_{n=M+1}^N \left| x_n + \sum_{k=1}^M c_k^{(M)} x_{n-k} \right|^2 + \\
&\quad + \sum_{n=M+1}^N \left| x_{n-M} + \sum_{k=1}^M \overline{c_k^{(M)}} x_{n+k-M} \right|^2 \rightarrow \min \quad (2.106)
\end{aligned}$$

Wie der *Levinson*-Algorithmus ist auch der *Burg*-Algorithmus rekursiv. Ist die Lösung $(c_1^{(m-1)}, \dots, c_{m-1}^{(m-1)})$ der ersten m Zeilen und Spalten bekannt, so verwendet man folgenden, dem *Levinson*-Algorithmus sehr ähnlichen, Ansatz zur Berechnung von $c_m^{(m)}$.

$$\begin{aligned}
(\varepsilon^{(m)})^2 &= \sum_{n=m+1}^N \left| x_n + \left(\sum_{k=1}^{m-1} (c_k^{(m-1)} + c_m^{(m)} \overline{c_{m-k}^{(m-1)}}) x_{n-k} \right) + c_m^{(m)} x_{n-m} \right|^2 + \\
&\quad + \sum_{n=m+1}^N \left| x_{n-m} + \left(\sum_{k=1}^{m-1} (\overline{c_k^{(m-1)}} + \overline{c_m^{(m)}} c_{m-k}^{(m-1)}) x_{n+k-m} \right) + \overline{c_m^{(m)}} x_n \right|^2 \\
&\rightarrow \min \quad (2.107)
\end{aligned}$$

Nach folgenden Substitutionen

$$f_n^{(m-1)} = x_{n+m} + \sum_{k=1}^{m-1} c_k^{(m-1)} x_{n+m-k} \quad (2.108)$$

$$b_n^{(m-1)} = x_n + \sum_{k=1}^{m-1} \overline{c_k^{(m-1)}} x_{n+k} \quad (2.109)$$

läßt sich obiger Ausdruck vereinfachen zu

$$(\varepsilon^{(m)})^2 = \sum_{n=m+1}^N \left(\left| f_{n-m}^{(m-1)} + c_m^{(m)} b_{n-m}^{(m-1)} \right|^2 + \left| b_{n-m}^{(m-1)} + \overline{c_m^{(m)}} f_{n-m}^{(m-1)} \right|^2 \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=1}^{N-m} \left(|f_n^{(m-1)} + c_m^{(m)} b_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)} + \overline{c_m^{(m)}} f_n^{(m-1)}|^2 \right) = \\
&= \left(\frac{1}{c_m^{(m)}} \right)^T \cdot \\
&\quad \left(\begin{array}{cc} \sum_{n=1}^{N-m} \left(|f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right) & 2 \sum_{n=1}^{N-m} \overline{f_n^{(m-1)}} b_n^{(m-1)} \\ 2 \sum_{n=1}^{N-m} f_n^{(m-1)} \overline{b_n^{(m-1)}} & \sum_{n=1}^{N-m} \left(|f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right) \end{array} \right) \\
&\cdot \left(\frac{1}{c_m^{(m)}} \right) \rightarrow \min \tag{2.110}
\end{aligned}$$

Die Lösung lautet

$$c_m^{(m)} = - \frac{2 \sum_{n=1}^{N-m} f_n^{(m-1)} \overline{b_n^{(m-1)}}}{\sum_{n=1}^{N-m} \left(|f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right)}. \tag{2.111}$$

So erhält man nach dem m -ten Rekursionsschritt folgende Werte für die $c_i^{(m)}$:

$$\begin{pmatrix} c_1^{(m)} \\ c_2^{(m)} \\ \vdots \\ c_{n-1}^{(m)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1^{(m-1)} \\ c_2^{(m-1)} \\ \vdots \\ c_{n-1}^{(m-1)} \end{pmatrix} + c_m^{(m)} \begin{pmatrix} \overline{c_{m-1}^{(m-1)}} \\ \overline{c_{m-2}^{(m-1)}} \\ \vdots \\ \overline{c_1^{(m-1)}} \end{pmatrix} \tag{2.112}$$

Für die $f_i^{(m)}$ bzw. $b_i^{(m)}$ erhält man demnach

$$\begin{aligned}
f_n^{(m)} &= x_{n+m+1} + \sum_{k=1}^m c_k^{(m)} x_{n+m+1-k} = \\
&= x_{n+m+1} + \sum_{k=1}^m (c_k^{(m-1)} + c_m^{(m)} \overline{c_{m-k}^{(m-1)}}) x_{n+m+1-k} = \\
&= x_{n+m+1} + \sum_{k=1}^{m-1} c_k^{(m-1)} x_{n+m+1-k} + c_m^{(m)} \left(x_{n+1} + \sum_{k=1}^{m-1} \overline{c_k^{(m-1)}} x_{n+m+k} \right) =
\end{aligned}$$

$$= f_{n+1}^{(m-1)} + c_m^{(m)} b_{n+1}^{(m-1)} \quad n = 1(1)(N - m - 1) \quad (2.113)$$

$$\begin{aligned} b_n^{(m)} &= x_n + \sum_{k=1}^m \overline{c_k^{(m)}} x_{n+k} = \\ &= x_n + \sum_{k=1}^m (\overline{c_k^{(m-1)}} + \overline{c_m^{(m)}} c_{m-k}^{(m-1)}) x_{n+k} = \\ &= x_n + \sum_{k=1}^{m-1} \overline{c_k^{(m-1)}} x_{n+k} + \overline{c_m^{(m)}} \left(x_{n+m} + \sum_{k=1}^{m-1} c_k^{(m-1)} x_{n+m-k} \right) = \\ &= b_n^{(m-1)} + \overline{c_m^{(m)}} f_n^{(m-1)}, \quad n = 1(1)(N - m) \end{aligned} \quad (2.114)$$

Ebenfalls rekursiv errechnet sich der Gesamtfehler $(\varepsilon^{(M)})^2$ (2.106). Es gilt namlich

$$(\varepsilon^{(0)})^2 = 2N\hat{\Phi}(0) \quad (2.115)$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon^{(m)})^2 &= (1 + |c_m^{(m)}|^2) \left(\sum_{n=1}^{N-m} |f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right) + \\ &+ \overline{c_m^{(m)}} \left(2 \sum_{n=1}^{N-m} f_n^{(m-1)} \overline{b_n^{(m-1)}} \right) + c_m^{(m)} \left(2 \sum_{n=1}^{N-m} \overline{f_n^{(m-1)}} b_n^{(m-1)} \right) = \\ &= \left(1 + \frac{\left(2 \sum_{n=1}^{N-m} f_n^{(m-1)} \overline{b_n^{(m-1)}} \right) \left(2 \sum_{n=1}^{N-m} \overline{f_n^{(m-1)}} b_n^{(m-1)} \right)}{\left(\sum_{n=1}^{N-m} |f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right)^2} \right) \cdot \\ &\cdot \left(\sum_{n=1}^{N-m} |f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right) - \\ &- 2 \frac{\left(2 \sum_{n=1}^{N-m} f_n^{(m-1)} \overline{b_n^{(m-1)}} \right) \left(2 \sum_{n=1}^{N-m} \overline{f_n^{(m-1)}} b_n^{(m-1)} \right)}{\sum_{n=1}^{N-m} |f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2} = \\ &= \left(\sum_{n=1}^{N-m} |f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left(1 - \frac{\left(2 \sum_{n=1}^{N-m} f_n^{(m-1)} \overline{b_n^{(m-1)}} \right) \left(2 \sum_{n=1}^{N-m} \overline{f_n^{(m-1)}} b_n^{(m-1)} \right)}{\left(\sum_{n=1}^{N-m} |f_n^{(m-1)}|^2 + |b_n^{(m-1)}|^2 \right)^2} \right) \\
& = (\varepsilon^{(m-1)})^2 \left(1 - |c_m^{(m)}|^2 \right)
\end{aligned} \tag{2.116}$$

und damit

$$(\varepsilon^{(M)})^2 = \hat{\Phi}(0) \prod_{m=1}^M \left(1 - |c_m^{(m)}|^2 \right). \tag{2.117}$$

Der *Burg*-Algorithmus zur Berechnung der Koeffizienten $(c_i^{(M)})_{i=1(1)M}$ schaut in Kurzform also so aus:

$$\begin{aligned}
c_i &= 0 & i &= 1(1)M \\
f_n &= x_{n+1} & n &= 1(1)(N-1) \\
b_n &= x_n & n &= 1(1)(N-1) \\
(\varepsilon^{(0)})^2 &= \hat{\Phi}(0)
\end{aligned}$$

Für $m = 1(1)M$

$$\begin{aligned}
c_m &= -2 \cdot \frac{\sum_{n=1}^{N-m} f_n \overline{b_n}}{\sum_{n=1}^{N-m} (|f_n|^2 + |b_n|^2)} \\
(\varepsilon^{(m)})^2 &= (\varepsilon^{(m-1)})^2 \left(1 - |c_m^{(m)}|^2 \right) \\
c_i &= c_i + c_m \overline{c_{m-i}} & i &= 1(1)(m-1) \\
f'_i &= f_{i+1} + c_m b_{i+1} & i &= 1(1)(N-m-1) \\
b_i &= b_i + \overline{c_m} f_i & i &= 1(1)(N-m-1) \\
f_i &= f'_i & i &= 1(1)(N-m-1)
\end{aligned}$$

2.8 Optimale Anzahl der Koeffizienten c_i

Die optimale Anzahl der Rekursionsschritte, die beim *Burg*-Algorithmus durchgeführt werden sollen, hängt selbstverständlich von mehreren Faktoren ab. Bei einem kleinen Datensatz beispielsweise wird eine große Polzahl

M wenig bringen, da für große m keine vernünftigen Schätzwerte für $\Phi(m)$ angegeben werden können. Auch bei einem sehr glatten Spektrum mit nur einer oder zwei Banden wird eine zu große Polzahl lediglich das Rauschen aufpuschen, selbst wenn eine sehr große Anzahl von Datenpunkten gegeben ist. Andererseits erhält man bei wachsender Polzahl M durch die wachsende Anzahl von Parametern immer bessere Möglichkeiten das Powerspektrum zu beschreiben. Ich werde im Folgenden einige Methoden angeben, wie abgeschätzt werden kann, bis zu welchem Rekursionschritt der *Burg-Algorithmus* tatsächlich neue relevante Information für das Powerspektrum liefert.

2.8.1 Akaike Information Criterion

Bezeichnet $\mathbf{x} = (x_n)_{n=1(1)N}$ einen Datensatz von N unabhängigen Punkten und θ einen Parametersatz, so ist die *Kullback-Leibler-Distanz* (*Kullback-Leibler information measure*) $I(\theta_0, \theta)$

$$I(\theta_0, \theta) = \int p(\mathbf{x}; \theta_0) \ln \frac{p(\mathbf{x}; \theta_0)}{p(\mathbf{x}; \theta)} d\mathbf{x} \quad (2.118)$$

ein Maß für die Abweichung der Plausibilitätsfunktion $p(\mathbf{x}; \theta)$ mit einem geschätzten Parametersatz θ

$$p(\mathbf{x}; \theta) = \prod_{n=1}^N p(x_n | \theta) \quad (2.119)$$

von der Plausibilitätsfunktion $p(\mathbf{x}; \theta_0)$ mit den tatsächlichen Parametern θ_0 , wobei θ und θ_0 nicht notwendigerweise gleiche Dimension haben müssen. $I(\theta_0, \theta)$ ist genau dann gleich 0, wenn $p(\mathbf{x}; \theta) = p(\mathbf{x}; \theta_0)$, ansonsten aber immer echt positiv. Nachdem $p(\mathbf{x}; \theta_0)$ als fix gegeben angenommen werden kann, genügt es den Ausdruck $I_1(\theta_0, \theta)$

$$I_1(\theta_0, \theta) = - \int p(\mathbf{x}; \theta_0) \ln p(\mathbf{x}; \theta) d\mathbf{x} \quad (2.120)$$

zu minimieren.

Die plausible Schätzfunktion (*Maximum Likelihood Estimation, MLE*) $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ ist bekanntlich jener Schätzer von θ , für den $p(\mathbf{x}; \theta)$ maximal wird.

Gehen wir davon aus, daß sich sämtliche relevanten θ nicht viel von $\hat{\theta}$ unterscheiden. Dann können wir den Logarithmus der Plausibilitätsfunktion $p(\mathbf{x}; \theta)$ durch einen Taylorreihenansatz um die Stelle $\hat{\theta}$ approximieren.

$$\begin{aligned} \ln p(\mathbf{x}; \theta) &\approx \ln p(\mathbf{x}; \hat{\theta}) + \left[\frac{\partial \ln p(\mathbf{x}; \theta)}{\partial \theta} \right]_{\theta=\hat{\theta}} (\theta - \hat{\theta}) + \\ &+ \frac{1}{2} (\theta - \hat{\theta})^T \left[\frac{\partial^2 \ln p(\mathbf{x}; \theta)}{\partial \theta^2} \right]_{\theta=\hat{\theta}} (\theta - \hat{\theta}) \end{aligned} \quad (2.121)$$

Definitionsgemäß muß der Gradient von $\ln p(\mathbf{x}; \theta)$ an der Stelle θ_0 der Nullvektor werden. Wegen der Unabhängigkeit der Daten gilt für die *Hessische* Matrix

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \frac{\partial^2 \ln p(\mathbf{x}; \theta)}{\partial \theta^2} &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\partial^2 \ln p(x_n; \theta)}{\partial \theta^2} \rightarrow \\ &\rightarrow \mathcal{E} \left(\frac{\partial^2 \ln p(x_n; \theta)}{\partial \theta^2} \right) = \\ &= \frac{1}{N} \mathcal{E} \left(\frac{\partial^2 \ln p(\mathbf{x}; \theta)}{\partial \theta^2} \right) = \\ &= -\frac{1}{N} \mathcal{E} \left(\left(\frac{\partial \ln p(\mathbf{x}; \theta)}{\partial \theta} \right) \left(\frac{\partial \ln p(\mathbf{x}; \theta)}{\partial \theta} \right)^T \right) = \\ &= -\frac{1}{N} I_\theta \quad N \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (2.122)$$

wobei I_θ die *Fisher'sche* Informationsmatrix genannt wird. Damit gilt

$$\ln p(\mathbf{x}; \theta) \approx \ln p(\mathbf{x}; \hat{\theta}) - \frac{1}{2} (\theta - \hat{\theta})^T I_\theta (\theta - \hat{\theta}) \quad (2.123)$$

Wurde der Parametersatz θ richtig gewählt, so folgt aus der Wahrscheinlichkeitstheorie (siehe z. B. [10]), daß für sehr große Datensätze die plausible Schätzfunktion $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ normalverteilt mit Mittelwert θ und Kovarianzmatrix I_θ^{-1} ist. Ist θ ein Vektor der Länge k , dann gilt deshalb

$$(\hat{\theta} - \theta)^T I_\theta (\hat{\theta} - \theta) \sim \chi_k^2 \quad (2.124)$$

$$\mathcal{E}_{\theta_0} \left((\hat{\theta} - \theta)^T I_\theta (\hat{\theta} - \theta) \right) = k \quad (2.125)$$

Wiederum vorausgesetzt, das Modell wurde richtig angenommen, folgt weiters aus der Unabhängigkeit der Datenpunkte x_n und der Konvergenz der plausiblen Schätzfunktion gegen den wahren Parameteratz bei wachsenden N

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln p(\mathbf{x}; \hat{\theta}) &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln p(x_n; \hat{\theta}) \rightarrow \\ &\rightarrow \mathcal{E}_{\theta_0} \left(\ln p(x_n; \hat{\theta}) \right) = \frac{1}{N} \mathcal{E}_{\theta_0} \left(\ln p(\mathbf{x}; \hat{\theta}) \right). \end{aligned} \quad (2.126)$$

Letztendlich ist also

$$I_1(\theta_0, \theta) = -\ln p(\mathbf{x}; \hat{\theta}) + \frac{k}{2} \quad (2.127)$$

zu minimieren. *Akaike* multipliziert diesen Ausdruck mit 2 und addiert ein zusätzliches k dazu, welches lediglich den Sinn hat, kleinere Parametersätze zu bevorzugen. Das *Akaike Information Criterion* lautet demnach

$$AIC(k) = -2 \ln p(\vec{x}; \hat{\theta}) + 2k \quad (2.128)$$

und ist zu minimieren.

In unserem Fall ist

$$\theta = \left(c_1^{(M)}, c_2^{(M)}, \dots, c_M^{(M)}, (\varepsilon^{(M)})^2 \right). \quad (2.129)$$

Es läßt sich überlegen, daß für großes N die Plausibilitätsfunktion annähernd gegeben ist durch

$$p(\mathbf{x}; c_1^{(M)}, c_2^{(M)}, \dots, c_M^{(M)}, (\varepsilon^{(M)})^2) = \frac{1}{(2\pi(\varepsilon^{(M)})^2)^{\frac{N}{2}}}, \quad (2.130)$$

also genau dann maximal ist, wenn $(\varepsilon^{(M)})^2$ minimal wird. Daher gilt

$$-2 \ln p(\mathbf{x}; \hat{\theta}) = -2 \ln p((\varepsilon^{(M)})^2) \propto N \ln(\varepsilon^{(M)})^2 \quad (2.131)$$

und

$$AIC(M) = N \ln(\varepsilon^{(M)})^2 + 2M. \quad (2.132)$$

Obige Herleitung ist in keinsten Weise als mathematisch exakt anzusehen, sondern vielmehr ein heuristischer Versuch die Formel plausibel zu machen.

2.8.2 Final Prediction Error

Die zweite Möglichkeit eines Abbruchkriterium für den *Burg*-Algorithmus ist den *Final Prediction Error* zu minimieren.

$$FPE(M) = \frac{N + M}{N - M} (\varepsilon^{(M)})^2 \quad (2.133)$$

Wegen

$$\ln \frac{1+x}{1-x} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{2n+1} \quad |x| < 1 \quad (2.134)$$

gilt

$$N \ln \frac{1 + \frac{M}{N}}{1 - \frac{M}{N}} \rightarrow 2M \quad N \rightarrow \infty. \quad (2.135)$$

Daher weiters

$$\frac{AIC(M)}{N \ln FPE(M)} = \frac{N \ln(\varepsilon^{(M)})^2 + 2M}{N \ln(\varepsilon^{(M)})^2 + N \ln \frac{1 + \frac{M}{N}}{1 - \frac{M}{N}}} \rightarrow 1, \quad N \rightarrow \infty \quad (2.136)$$

$$AIC(M) \simeq N \ln FPE(M) \quad (2.137)$$

Für große N sind die beiden Kriterien also proportional.

$$AIC(M) \propto FPE(M) \quad (2.138)$$

2.9 Ermittlung des verbesserten Spektrums

$$S'(\nu)$$

Die letzte noch offene Frage ist, wie das verbesserten Spektrum $S'(\nu)$ aus dem Powerspektrum $P(\nu)$ (2.84) berechnet werden kann. Gehen wir dazu von einer festen Nyquistfrequenz ν_N und einer fix gegebenen Anzahl N von Datenpunkten aus. Die Digitalisierungslänge des Interferogramms beträgt somit gemäß (2.76) $\frac{1}{2\nu_N}$, und die Gesamtlänge des Trägers des Interferogramms ist $\frac{N}{2\nu_N}$.

Nach genauerer Betrachtung und Einbeziehung der Trägerlänge des Interferogramms ist der Schätzer $\hat{\Phi}(m)$ (2.29) kein Schätzer für $R_f(x)$ (2.19) sondern vielmehr für $\frac{2\nu_N}{N} R_f(x)$. Wegen

$$\mathcal{F}R_f(x) = P(\tilde{\nu}) \quad (2.139)$$

gilt daher

$$P_{ME}(\nu) = \frac{2\nu_N}{N} P(\tilde{\nu}) \quad (2.140)$$

und aus (2.23)

$$|S(\tilde{\nu})|^2 = P(\tilde{\nu}) \quad (2.141)$$

folgt

$$S'(\nu) = \sqrt{\frac{N \cdot P_{ME}(\nu)}{2\nu_N}}. \quad (2.142)$$

Das ist auch das Endergebnis der Maximum Entropie Methode.

2.10 Zusammenfassung

Aufgrund der Komplexität der Maximum Entropie Methode ist es sehr schwierig, in wenigen Sätzen eine umfassende Zusammenfassung zu liefern. Die folgenden Punkte sind nur eine Auflistung jener Operationen, die insgesamt durchgeführt werden müssen.

- Zunächst wird ein gegebenes Spektrum in seinen Zeitreihenbereich fouriertransformiert.
- Diese Zeitreihe wird durch ein geschätztes Linienprofil dividiert. In der Regel handelt es sich dabei um ein Lorentzprofil mit zu schätzender Halbwertsbreite.
- Aus dieser neuen Zeitreihe werden mit Hilfe des *Burg*-Algorithmus oder ähnlicher Verfahren die Koeffizienten des Powerspektrums ermittelt, wobei
 - das AIC Kriterium minimiert wird und
 - für die daraus resultierende Polzahl die Entropie der Zeitreihe maximiert wird.

- Aus dem Powerspektrum erhält man schließlich das gesuchte, verbesserte Spektrum.

Betrachten wir die Maximum Entropie Methode nochmals genauer, so werden wir feststellen, daß es bislang lediglich eine Annahme zu treffen gibt, nämlich die Festlegung des zu dividierenden Linienprofils. Sollte das AIC Kriterium aus welchem Grund auch immer versagen, so ist es zusätzlich notwendig, eine günstige Polzahl eigenständig zu bestimmen.

Wir werden in den nächsten Kapiteln erkennen, daß aus verschiedenen Gründen noch weitere Annahmen getroffen werden müssen, die zwar nicht direkt mit der Theorie der Maximum Entropie Methode zusammenhängen, jedoch für die mathematische Durchführbarkeit erforderlich sind.

Kapitel 3

Theoretische Beispiele zur Maximum Entropie Methode

In diesem Kapitel wird für einige synthetische Spektren die Maximum Entropie Methode mathematisch exakt durchexerziert. Die Spektren sind durchwegs stetig, unbeschränkt und symbolisch gegeben. Alle auftretenden Operationen werden, sofern möglich, symbolisch durchgeführt. Die Anzahl der Datenpunkte wird als unendlich vorausgesetzt. Da die Maximum Entropie Methode, den Frequenzbereich des Spektrums betreffend, translationsunabhängig ist, wird das Spektrum gewöhnlich in einen Frequenzbereich um 0 verschoben, um es mathematisch besser behandeln zu können.

3.1 Einbandenspektren

3.1.1 Division durch das exakte Linienprofil

Der am einfachsten zu behandelnde Fall eines Spektrums ist ein Einbandenspektrum, mit Lorentzprofil an der Stelle $\tilde{\nu}_0$ mit zugehörigem Interferogramm

$$I(x) = e^{-2\pi\sigma|x|}e^{2\pi i\tilde{\nu}_0x}, \quad (3.1)$$

beziehungsweise wenn ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\tilde{\nu}_0 = 0$ gesetzt wird

$$I(x) = e^{-2\pi\sigma|x|}. \quad (3.2)$$

Vor Maximierung der Entropie wird bekanntlich das Interferogramm durch die geschätzte Linienprofilfunktion dividiert. Wenn dieses Linienprofil in Form und Halbwertsbreite mit der ursprünglichen Bande übereinstimmt, kann es vollständig eliminiert werden. Man hat dann den *Burg*-Algorithmus auf die Funktion

$$I'(x) = \frac{I(x)}{I_0(x)} = \frac{e^{-2\pi\sigma|x|} e^{2\pi i \tilde{\nu}_0 x}}{e^{-2\pi\sigma|x|}} = e^{2\pi i \tilde{\nu}_0 x}, \quad (3.3)$$

oder entsprechend

$$I'(x) = \frac{I(x)}{I_0(x)} = \frac{e^{-2\pi\sigma|x|}}{e^{-2\pi\sigma|x|}} \equiv 1, \quad (3.4)$$

anzuwenden. In beiden Fällen werden sämtliche f_i und b_i bereits nach dem ersten Rekursionsschritt 0, und der Algorithmus kann nicht mehr fortgesetzt werden. In diesem Fall ist $M = 1$ die größtmögliche Polzahl und liefert den Autokorrelationskoeffizienten $c_1 = -e^{2\pi i \tilde{\nu}_0 \Delta t}$ beziehungsweise $c_1 = -1$. Eingesetzt in die Formel (2.84) erhält man für das Powerspektrum

$$\begin{aligned} P_{ME}(\nu) &= \frac{P_{\tilde{\nu}_0} \Delta t}{|1 - e^{-2\pi i (\nu - \tilde{\nu}_0) \Delta t}|^2} = \\ &= \frac{P_{\tilde{\nu}_0} \Delta t}{2 - 2 \cos(2\pi (\nu - \tilde{\nu}_0) \Delta t)} = \\ &= \frac{P_{\tilde{\nu}_0} \Delta t}{4 \sin^2(2\pi (\nu - \tilde{\nu}_0) \Delta t)}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

und für das verbesserte Spektrum

$$S'(\nu) = \frac{C_{\tilde{\nu}_0}}{|\sin(\pi(\nu - \tilde{\nu}_0)\Delta t)|} \quad (3.6)$$

beziehungsweise

$$S'(\nu) = \frac{C_0}{|\sin(\pi\nu\Delta t)|}. \quad (3.7)$$

Befindet sich an der Stelle $\nu = \tilde{\nu}_0$ ein Datenpunkt, so ist C nach Normierung eine infinitesimal kleine Größe, und das Spektrum ist ein Strichspektrum an der Stelle $\nu = \tilde{\nu}_0$. Leider ist die Halbwertsbreite 2σ in der Regel nicht bekannt. Das folgende Kapitel wird zeigen, was für Auswirkungen eine falsch geschätzte Halbwertsbreite mit sich ziehen kann.

3.1.2 Division durch ein Linienprofil mit falscher Halbwertsbreite

Bislang sind wir davon ausgegangen, daß das Linienprofil $I_0(x)$ zur Gänze bekannt ist. Nun nehmen wir an, daß zwar bekannt ist, daß es sich bei der Bande um eine Lorentzfunktion handelt, deren Halbwertsbreite 2σ jedoch unbekannt ist. Wir haben im letzten Kapitel gesehen, daß die Position der Bande nicht von Bedeutung ist und nehmen deshalb ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\tilde{\nu}_0 = 0$ an. Bezeichnet $2\sigma_1$ die tatsächliche und $2\sigma_0$ die im Linienprofil geschätzte Halbwertsbreite, so hat man den *Burg*-Algorithmus auf die Funktion

$$I'(x) = \frac{I(x)}{I_0(x)} = \frac{e^{-2\pi\sigma_1|x|}}{e^{-2\pi\sigma_0|x|}} = e^{-2\pi(\sigma_1-\sigma_0)|x|} \quad (3.8)$$

anzuwenden. Bei einem Digitalisierungsabstand Δt und $2n+1$ Datenpunkten ist diese Funktion $I'(x)$ gegeben durch

$$I'(\Delta tx) = e^{-2\pi(\sigma_1-\sigma_0)\Delta t|x|}, \quad x = (-n)(1)(n). \quad (3.9)$$

Substituiert man

$$\lambda = e^{-2\pi(\sigma_1-\sigma_0)\Delta t}, \quad (3.10)$$

so folgt

$$c_1 = -\frac{2\lambda - 2\lambda^{2n+1}}{1 + \lambda^2 - \lambda^{2n} - \lambda^{2n+2}}. \quad (3.11)$$

Unabhängig davon, ob $\sigma_1 > \sigma_0$ oder $\sigma_1 < \sigma_0$, beziehungsweise $\lambda < 1$ oder $\lambda > 1$ gilt, konvergiert dieser Ausdruck gegen $-\frac{2\lambda}{1+\lambda^2}$ für $n \rightarrow \infty$. Für große n kann man demnach die Vereinfachung

$$c_1 = -\frac{2\lambda}{1 + \lambda^2} \quad (3.12)$$

treffen. Bei gegebener Polzahl $M = 1$ erhält man so für das verbesserte Spektrum $S'_1(\nu)$ nach mehreren Umformungen den Ausdruck

$$S'_1(\nu) = \frac{C}{\sqrt{1 - \frac{4\lambda}{1+\lambda^2} \cos(2\pi\nu\Delta t) + \left(\frac{2\lambda}{1+\lambda^2}\right)^2}}. \quad (3.13)$$

Diese Funktion hat am Intervall $[-\frac{1}{2\Delta t}, \frac{1}{2\Delta t}]$ genau ein Maximum an der Stelle $\nu = 0$. Je näher λ bei 1 liegt, also je kleiner die Differenz zwischen σ_0 und σ_1 ist, desto schmaler ist die entsprechende Bande.

Setzt man den *Burg*-Algorithmus fort, so erhält man als nächsten Koeffizienten

$$c_2 = \frac{\lambda^2 (2\lambda^{2n} - \lambda^2 (\lambda^2 + 1))}{\lambda^{2n} (\lambda^4 + 1) - \lambda^2 (\lambda^2 + 1)} \quad (3.14)$$

und approximiert diesen Ausdruck für genügend großes n durch

$$c_2 = \lambda^2, \quad \lambda < 1 \quad (3.15)$$

$$c_2 = \frac{2\lambda^2}{\lambda^4 + 1}, \quad \lambda > 1. \quad (3.16)$$

Daraus folgen schließlich die neuen Werte für c_1

$$c_1 = -2\lambda, \quad \lambda < 1 \quad (3.17)$$

$$c_1 = -\frac{2\lambda(\lambda^2 + 1)}{\lambda^4 + 1}, \quad \lambda > 1. \quad (3.18)$$

Für $M = 2$ lautet das verbesserte Spektrum mit allgemeinen Koeffizienten

$$S'_2(\nu) = \frac{C}{\sqrt{(1 + c_1^2 + c_2^2) + (2c_1(1 + c_2)) \cos(2\pi\nu\Delta t) + 2c_2 \cos(4\pi\nu\Delta t)}}. \quad (3.19)$$

Führt man eine Kurvendiskussion durch, so erhält man neben der Extremwertstelle $\nu = 0$ auch noch die Gleichung

$$\cos(2\pi\nu\Delta t) = -\frac{2c_1(1 + c_2)}{8c_2} \quad (3.20)$$

zur Ermittlung weiterer Minima und Maxima. Während sich für $\lambda < 1$ an der Stelle $\nu = 0$ ein Maximum befindet und der Ausdruck

$$\left| -\frac{2c_1(1 + c_2)}{8c_2} \right| = \left| \frac{\lambda(1 + \lambda^2)}{2\lambda^2} \right| > 1, \quad \lambda < 1 \quad (3.21)$$

keine weiteren reellen Extrema liefert, erhält man für $\lambda > 1$ an der Stelle $\nu = 0$ überraschend ein Minimum. Setzt man die ermittelten Werte für c_1 und c_2 in die Formel (3.20) ein, so folgt daraus

$$\cos(2\pi\nu\Delta t) = \frac{(\lambda^2 + 1)^3}{4\lambda(\lambda^4 + 1)}, \quad \lambda > 1. \quad (3.22)$$

Nach genauerer Analyse wird man feststellen, daß sich für $\lambda \in]1, 2[$ tatsächlich links und recht symmetrisch von $\nu = 0$ je ein Maximum der Funktion $S'_2(\nu)$ befindet. Für $\lambda = 1.1$ erhält man beispielsweise $\nu = \pm \frac{0.0150096}{\Delta t}$.

Eine zu groß gewählte Halbwertsbreite $2\sigma_0$ ($\lambda > 1$) führt also dazu, daß sich das Peak zum Teilen beginnt und so zu 2 symmetrischen Peaks führt, während bei einer zu klein gewählten Halbwertsbreite ($\lambda < 1$), wie sich im nächsten Kapitel zeigen wird, lediglich die Bande breiter wird.

Der Fall $\sigma_0 < \sigma_1$

In diesem Kapitel wird sich zeigen, daß eine Vergrößerung der Polzahl M auf einen Wert größer gleich 3 im Fall $\lambda < 1$ keine weiteren Auswirkungen auf die Beschaffenheit des verbesserten Spektrums $S'(\nu)$ hat. Als Ausgangsbasis für den *Burg*-Algorithmus wählt man dazu am besten

$$\begin{aligned} f_i^{(0)} &= \lambda^{|i+1|} & \forall i \in Z \\ b_i^{(0)} &= \lambda^{|i|} & \forall i \in Z, \end{aligned} \quad (3.23)$$

wobei wiederum $\lambda = e^{-2\pi(\sigma_1 - \sigma_0)\Delta t}$. Aus $c_1^{(1)} = -\frac{2\lambda}{1+\lambda^2}$ errechnen sich die $f_i^{(1)}$ und die $b_i^{(1)}$ nach dem ersten Rekursionsschritt.

$$\begin{aligned} f_i^{(1)} &= \lambda^{|i+2|} - \frac{2\lambda}{1+\lambda^2} \lambda^{|i+1|} & \forall i \in Z \\ b_i^{(1)} &= \lambda^{|i|} - \frac{2\lambda}{1+\lambda^2} \lambda^{|i+1|} & \forall i \in Z \end{aligned} \quad (3.24)$$

Unter Zuhilfenahme der Beziehung

$$f_i^{(1)} = b_{-2-i}^{(1)} \quad i \in Z \quad (3.25)$$

lassen sich die Koeffizienten $c_1^{(2)}$ und $c_2^{(2)}$ ohne großen Aufwand ermitteln.

$$\begin{aligned} c_1^{(2)} &= -2\lambda \\ c_2^{(2)} &= \lambda^2 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Setzt man den *Burg*-Algorithmus fort, erhält man als nächstes

$$\begin{aligned} f_i^{(2)} &= \lambda^{|i+3|} - \lambda^{|i+2|+1} + \lambda^{|i+1|+2} \\ b_i^{(2)} &= \lambda^{|i|} - \lambda^{|i+1|+1} + \lambda^{|i+2|+2}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Man kann nun die Vermutung aufstellen, daß die Koeffizienten $c_m^{(m)}$ für $m \geq 3$ stets 0 sind. Für $m = 3$ gilt $f_i^{(2)} = b_{-3-i}^{(2)}$. Es gilt also zu zeigen, daß

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} f_i^{(2)} b_i^{(2)} = 2 \sum_{i=0}^{\infty} b_i^{(2)} b_{-3-i}^{(2)} + 2b_{-1}^{(2)} b_{-2}^{(2)} = 0. \quad (3.28)$$

Für $i \leq -2$ gilt

$$b_i^{(2)} = \lambda^{-i} - 2\lambda^{-i} + \lambda^{-i} = 0, \quad (3.29)$$

und demnach stimmt (3.28). Nimmt man für i einen Wert größer gleich 0, so gilt

$$b_i^{(2)} = \lambda^i - 2\lambda^{i+2} + \lambda^{i+4} = \lambda^i (1 - \lambda^2)^2 \neq 0, \quad \lambda < 1, \quad (3.30)$$

womit gewährleistet ist, daß der Algorithmus nicht abbricht. Die weitere Vorgangsweise ist rein induktiv. Den m -ten Induktionsschritt führt man durch mit den Werten

$$\begin{aligned} f_i^{(m-1)} &= f_{i+1}^{(m-2)} = f_{i+m-3}^{(2)} = b_{-m-i}^{(2)} \\ b_i^{(m-1)} &= b_i^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Daraus folgt, daß die Koeffizienten $c_m^{(m)}$ tatsächlich alle gleich 0 sind, daß aber stets ein i existiert mit $b_i^{(m)} \neq 0$. Das verbesserte Spektrum $S'(\nu)$ lautet demnach für beliebige Polzahl $M \geq 2$

$$S'(\nu) = \frac{C}{1 - 2\lambda \cos(2\pi\nu\Delta t) + \lambda^2}. \quad (3.32)$$

$S'(\nu)$ ist eine $\frac{2\pi}{\Delta t}$ -periodische Funktion mit einzigem Maximum bei $\nu = 0$ und 2 symmetrischen Wendepunkten pro Periode. Als Vergleichskriterium zwischen $S'_1(\nu)$ (3.13) und $S'(\nu)$ empfiehlt es sich die Halbwertsbreiten der Banden der Funktionen herzunehmen. In folgender Tabelle sind für verschiedene λ -Werte die entsprechenden Halbwertsbreiten angeführt.

| λ | $2\sigma_{s_1} \Delta t$ | $2\sigma_{s'} \Delta t$ |
|-----------|--------------------------|-------------------------|
| 0.5 | 0.124064 | 0.230053 |
| 0.6 | 0.069187 | 0.166258 |
| 0.7 | 0.034372 | 0.114756 |
| 0.8 | 0.013615 | 0.071325 |
| 0.9 | 0.003054 | 0.033568 |
| 0.95 | 0.000725 | 0.016331 |
| 0.99 | 0.000028 | 0.003199 |
| 0.999 | 0.0000003 | 0.000318 |

Die Banden haben sich also deutlich verbreitert. Die beiden Abbildungen auf der nächsten Seite zeigen das ziemlich deutlich. Es ist jedoch, wie ersichtlich, in beiden Fällen eine Auflösungserhöhung eingetreten.

| Bild | $\sigma_1 \Delta t$ | $\sigma_0 \Delta t$ | λ | M |
|----------|---------------------|---------------------|-----------|----------|
| Bild 3.1 | 0.05 | 0.04 | 0.939 | 1 |
| Bild 3.2 | 0.05 | 0.04 | 0.939 | ≥ 2 |

Bild 3.1: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M = 1$

Bild 3.2: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M \geq 2$

Der Fall $\sigma_0 > \sigma_1$

Die Berechnung der Werte $f_i^{(2)}$ und $b_i^{(2)}$ ist sehr rechenaufwendig, und ich werde mich deshalb auf die Ergebnisse beschränken.

$$\begin{aligned}
f_i^{(2)} &= \lambda^{|i+3|} - 2\frac{\lambda^2+1}{\lambda^4+1}\lambda^{|i+2|+1} + \frac{2}{\lambda^4+1}\lambda^{|i+1|+2} = \\
&\quad \lambda^{i+3} \frac{(\lambda^2-1)^2}{\lambda^4+1} && i \geq -1 \\
&\quad \lambda \frac{\lambda^4-1}{\lambda^4+1} && i = -2 \\
&\quad \lambda^{-i-3} \frac{(\lambda^2-1)^2}{\lambda^4+1} && i \leq -3
\end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
b_i^{(2)} &= \lambda^{|i|} - 2\frac{\lambda^2+1}{\lambda^4+1}\lambda^{|i+1|+1} + \frac{2}{\lambda^4+1}\lambda^{|i+2|+2} = \\
&\quad \lambda^i \frac{(\lambda^2-1)^2}{\lambda^4+1} && i \geq 0 \\
&\quad \lambda \frac{\lambda^4-1}{\lambda^4+1} && i = -1 \\
&\quad \lambda^{-i} \frac{(\lambda^2-1)^2}{\lambda^4+1} && i \leq -2
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Für $c_3^{(3)}$ erhält man daraus

$$c_3^{(3)} = -\frac{2\lambda^3(\lambda^2-1)(\lambda^{2n}+\lambda^6)}{\lambda^{2n}(\lambda^2-1)(\lambda^6+1)+\lambda^4(3\lambda^4+1)}, \tag{3.35}$$

woraus sich für genügend großes n folgende Näherungswerte der Koeffizienten $c_i^{(3)}$ ergeben:

$$c_1^{(3)} = -\frac{2\lambda(\lambda^4+\lambda^2+1)}{\lambda^6+1} \tag{3.36}$$

$$c_2^{(3)} = \frac{2\lambda^2(\lambda^4+\lambda^2+1)}{(\lambda^4+1)(\lambda^4-\lambda^2+1)} \tag{3.37}$$

$$c_3^{(3)} = -\frac{2\lambda^3}{\lambda^6+1} \tag{3.38}$$

Das Powerspektrum läßt sich mit allgemeinen Koeffizienten umformen zu

$$\begin{aligned}
P_{ME}(\nu) &= \frac{C}{a_0 + a_1 \cos(2\pi\nu\Delta t) + a_2 \cos(4\pi\nu\Delta t) + a_3 \cos(6\pi\nu\Delta t)} \\
a_0 &= 1 + (c_1^{(3)})^2 + (c_2^{(3)})^2 + (c_3^{(3)})^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_1 &= 2 \left(c_1^{(3)} + c_1^{(3)} c_2^{(3)} + c_2^{(3)} c_3^{(3)} \right) \\
a_2 &= 2 \left(c_1^{(3)} c_3^{(3)} + c_2^{(3)} \right) \\
a_3 &= 2c_3^{(3)}.
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Eine Kurvendiskussion des daraus resultierenden verbesserten Spektrums liefert beim Nullsetzen der ersten Ableitung neben $\sin(2\pi\nu\Delta t) = 0$ zusätzlich die quadratische Gleichung

$$\begin{aligned}
12c_3^{(3)} \cos^2(2\pi\nu\Delta t) + 4(c_1^{(3)} c_3^{(3)} + c_2^{(3)}) \cos(2\pi\nu\Delta t) + \\
+c_1^{(3)} c_2^{(3)} + c_1^{(3)} + c_2^{(3)} c_3^{(3)} - 3c_3^{(3)} = 0,
\end{aligned} \tag{3.40}$$

welche letztendlich zu den zwei Lösungen

$$\begin{aligned}
\cos(2\pi\nu\Delta t) &= \frac{(\lambda^4 + \lambda^2 + 1)(\lambda^8 + 3\lambda^6 + 3\lambda^2 + 1)}{6\lambda(\lambda^6 + 1)(\lambda^4 + 1)} \pm \\
&\pm \frac{(\lambda^2 - 1)^2 (\lambda^2 + 1)^2 \sqrt{-2\lambda^{16} + 3\lambda^{12} + 6\lambda^{10} + 11\lambda^8 + 6\lambda^6 + 3\lambda^4 - 2}}{6\lambda(\lambda^6 + 1)(\lambda^4 + 1)}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

führt. Für $\lambda = 1.1$ erhält man daraus am Intervall $]-\frac{1}{2\Delta t}, \frac{1}{2\Delta t}[$ zwei Tiefpunkte an den Stellen $\nu = \pm \frac{0.019605}{\Delta t}$ und neben dem Hauptpeak an der Stelle $\nu = 0$ noch zwei kleinere Nebenpeaks an den Stellen $\nu = \pm \frac{0.033242}{\Delta t}$. Das ‘‘verbesserte‘‘ Spektrum besitzt also 2 symmetrische Peaks, die in Wirklichkeit nicht existieren.

Ein weiteres Vergrößern der Polzahl M ist symbolisch nur mehr sehr schwer zu bewerkstelligen. Ich werde mich deshalb auf numerische Werte beschränken, wobei jetzt selbstverständlich nicht mehr von unendlich vielen Datenpunkten ausgegangen werden kann. Auf den nächsten Seiten finden sich eine Anzahl von Ergebnissen der Maximum Entropie Methode, wobei die Polzahl M variiert wurde. Die Halbwertsbreiten $2\sigma_1$ und $2\sigma_0$ der tatsächlichen und der geschätzten Linienprofilfunktion wurden gleich gelassen, um Vergleiche anstellen zu können. Der optimale Wert für die Polzahl nach dem *Akaike Information Kriterium* ist sehr stark von der Anzahl der Datenpunkte abhängig und variiert fast zufällig. Unabhängig von der Anzahl der Datenpunkte ist jedoch zu erkennen, daß das errechnete Spektrum bei größerwerdenden Polzahlen wieder glatter wird. Allerdings bringt das in der

Praxis sehr wenig, da bei Polzahlen in dieser Größenordnung der Effekt des Rauschens bereits zu groß ist.

| Bild | $\sigma_1 \Delta t$ | $\sigma_0 \Delta t$ | λ | M |
|-----------|---------------------|---------------------|-----------|-----|
| Bild 3.3 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 1 |
| Bild 3.4 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 2 |
| Bild 3.5 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 3 |
| Bild 3.6 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 4 |
| Bild 3.7 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 7 |
| Bild 3.8 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 8 |
| Bild 3.9 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 15 |
| Bild 3.10 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 16 |
| Bild 3.11 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 31 |
| Bild 3.12 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 32 |
| Bild 3.13 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 47 |
| Bild 3.14 | 0.05 | 0.06 | 1.065 | 48 |

Bild 3.3: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 1$

Bild 3.4: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 2$

Bild 3.5: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 3$

Bild 3.6: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 4$

Bild 3.7: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 7$

Bild 3.8: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 8$

Bild 3.9: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 15$

Bild 3.10: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 16$

Bild 3.11: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 31$

Bild 3.12: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 32$

Bild 3.13: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 47$

Bild 3.14: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 48$

3.2 Zweibandenspektren

3.2.1 Zwei Banden mit gleichen Halbwertsbreiten und gleichen Intensitäten

Zur Behandlung des einfachsten Falles, nämlich zweier Banden mit gleicher Halbwertsbreite und gleichen Intensitäten, nehme ich ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, daß sich die beiden Banden links und rechts symmetrisch in einem Abstand $\tilde{\nu}_0$ zum Nullpunkt befinden. Daraus erhält man für das verbesserte Interferogramm

$$I'(x) = \frac{I(x)}{I_0(x)} = 2e^{-2\pi(\sigma_1 - \sigma_0)|x|} \cos(2\pi x \tilde{\nu}_0 \Delta t). \quad (3.42)$$

Selbst für den Fall $\sigma_1 = \sigma_0$ benötigt man einige mathematische Hilfsmittel, die ich der Reihe nach vorstellen werde. Eines dieser Hilfsmittel ist die *Eulersche* Summenformel [4].

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n f(k) &= \int_0^n f(x) dx + \frac{f(0) + f(n)}{2} + \\ &+ \sum_{p=0}^q \frac{B_{2p}}{(2p)!} (f^{(2p-1)}(n) - f^{(2p-1)}(0)) + \\ &+ \frac{1}{(2q+1)!} \int_0^n B_{2p+1}(x - [x]) f^{(2p+1)}(x) dx \end{aligned} \quad (3.43)$$

Dabei bezeichnet B_i die *i*-te *Bernoullische* Zahl und $B_i(x)$ das *i*-te *Bernoullische* Polynom [4]. Eine interessante Eigenschaft der *Bernoullischen* Zahlen ist

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} t^n = \frac{t}{e^t - 1} \quad |t| < 2\pi, \quad (3.44)$$

womit sich unter der Voraussetzung

$$f^{(n)}(x) < (2\pi)^n \quad \forall n \in N \quad (3.45)$$

die *Eulersche* Summenformel reduziert zu

$$\sum_{k=0}^n f(k) = \int_0^n f(x) dx + \frac{f(0) + f(n)}{2} + C, \quad (3.46)$$

wobei C eine Konstante ist. Substituiert man $\mu = 2\pi\tilde{\nu}_0\Delta t$, so errechnet sich im Fall $\sigma_1 = \sigma_0$ der Koeffizient $c_1^{(1)}$ durch

$$\begin{aligned} c_1^{(1)} &= -2 \frac{\sum_{k=-n}^{n-1} \cos(\mu k) \cos(\mu(k+1))}{\sum_{k=-n}^{n-1} \cos^2(\mu k) + \cos^2(\mu(k+1))} = \\ &= -\frac{\sum_{k=0}^{n-1} 2 \cos(\mu k) \cos(\mu(k+1))}{\sum_{k=0}^{n-1} 2 \cos^2(\mu k)}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Da

$$[2 \cos(\mu x) \cos(\mu(x+1))]' = -2\mu \sin(\mu(2x+1)) \quad (3.48)$$

und damit

$$\left| [2 \cos(\mu x) \cos(\mu(x+1))]^{(n)} \right| < (2\mu)^n \quad (3.49)$$

sowie

$$[2 \cos^2(\mu x)]' = -2\mu \sin(2\mu x) \quad (3.50)$$

und damit wiederum

$$\left| [2 \cos^2(\mu x)]^{(n)} \right| < (2\mu)^n \quad (3.51)$$

gilt, kann für $\tilde{\nu}_0 < \frac{1}{2\Delta t}$ der Koeffizient $c_1^{(1)}$ weiter umgeformt werden zu

$$\begin{aligned} c_1^{(1)} &= -\frac{\int_0^{n-1} 2 \cos(\mu x) \cos(\mu(x+1)) dx}{\int_0^{n-1} 2 \cos^2(\mu x) dx + 1 + \cos^2(\mu n) + C_2} - \\ &\quad \frac{\cos \mu + \cos(\mu(n-1)) \cos(\mu n) + C_1}{\int_0^{n-1} 2 \cos^2(\mu x) dx + 1 + \cos^2(\mu n) + C_2} = \\ &= -\frac{(n-1) \cos \mu - \frac{\sin \mu}{2\mu} + \frac{\sin(\mu(2n-1))}{2\mu} + C_1'}{n-1 + \frac{\sin(2\mu(n-1))}{2\mu} + C_2'} = \\ &= -\frac{(n-1) \cos \mu + C_1''}{n-1 + C_2''}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Für großes n geht dieser Ausdruck offensichtlich gegen

$$c_1^{(1)} = -\cos \mu, \quad |\mu| < \pi. \quad (3.53)$$

Für Polzahl $M = 1$ ist dann das verbesserte Spektrum

$$S_1'(\nu) = \frac{C}{\sqrt{1 + \cos^2 \mu - 2 \cos \mu \cos(2\pi\nu\Delta t)}} \quad (3.54)$$

nach Substitution $\cos \nu = \frac{2\lambda}{1+\lambda^2}$ äquivalent mit (3.13). Je näher $\tilde{\nu}_0$ bei 0 liegt, desto schmaler wird die Bande. Es ist jedoch unter keinen Umständen möglich, beide Banden aufzulösen. Deshalb muß die Polzahl auf alle Fälle größer gleich 2 gewählt werden.

Setzt man den *Burg*-Algorithmus fort, so erhält man bei schnell zunehmendem Rechenaufwand unter Verwendung der *Eulerschen* Summenformel für $n \rightarrow \infty$ das überraschend einfache Ergebnis

$$c_2^{(2)} = 1. \quad (3.55)$$

Aus dem neuen Wert für c_1

$$c_1^{(2)} = -2 \cos \mu \quad (3.56)$$

folgt für das verbesserte Spektrum $S_2'(\nu)$

$$\begin{aligned} S_2'(\nu) &= \frac{C}{|\cos(2\pi\nu\Delta t) - \cos(2\pi\tilde{\nu}_0\Delta t)|} = \\ &= \frac{C}{|\sin(\pi(\nu - \tilde{\nu}_0)\Delta t) \sin(\pi(\nu + \tilde{\nu}_0)\Delta t)|}, \end{aligned} \quad (3.57)$$

wobei in diesem Fall die Konstante C bei Normierung wie schon gehabt infinitesimal klein wird und das verbesserte Spektrum damit zu einem Zwei-strichspektrum wird.

Versucht man den Algorithmus fortzusetzen, so erhält man

$$\begin{aligned} f_i^{(2)} &= \cos(\mu(i+3)) - \cos \mu \cos(\mu(i+2)) + \\ &\quad + \cos(\mu(i+1)) \cos \mu \cos(\mu(i+2)) = 0 \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned} b_i^{(2)} &= \cos(\mu i) - \cos \mu \cos(\mu(i+1)) + \\ &\quad + \cos(\mu(i+2)) \cos \mu \cos(\mu(i+1)) = 0 \end{aligned} \quad (3.59)$$

und der Algorithmus muß abgebrochen werden.

Nun ist in der Regel jedoch, analog dem Fall mit einer Bande, die exakte Breite auf halber Höhe der Linienprofilfunktion nicht bekannt. Man muß diese wiederum durch einen Wert σ_0 schätzen. So erhält man für das verbesserte Spektrum diesmal

$$\begin{aligned} I'(x) = \frac{I(x)}{I_0(x)} &= e^{-2\pi(\sigma_1 - \sigma_0)|x|} \cos(2\pi x \tilde{\nu}_0 \Delta t) = \\ &= \lambda^{|x|} \cos(\mu x). \end{aligned} \quad (3.60)$$

μ ist ein Maß dafür, wie weit die beiden Banden auseinanderliegen, λ ist ein Fehlerfaktor, der auf einer falschen Schätzung der Halbwertsbreiten beruht.

Auf den folgenden Seiten findet sich eine Versuchsserie, bei der im Wesentlichen die Polzahl M und die Positionen $\pm\tilde{\nu}_0$ der beiden Banden variiert wurde. Es wurde jeweils von einem dividierten Interferogramm ausgegangen, welches durch 1024 Datenpunkte gegeben ist. Beim oberen Bild wurde stets die Polzahl $M = 2$ gewählt, wogegen beim unteren Bild die Polzahl mit Hilfe des *AIC* geschätzt wurde. Es sei vermerkt, daß das *AIC* vor allem bei überschätzter Halbwertsbreit extrem von der Anzahl der Datenpunkte abhängt.

Der Fall $\sigma_0 < \sigma_1$

Wurde $\sigma_0 < \sigma_1$ gewählt, so läßt sich feststellen, daß bei Wahl einer Polzahl $M > 2$ kaum eine Veränderung des Resultats gegenüber dem Fall $M = 2$ eintritt. Es läßt sich numerisch nachvollziehen, daß die Halbwertsbreiten ein wenig zunehmen. Darauf werde ich jedoch hier verzichten.

| Bild | $\sigma_1\Delta t$ | $\sigma_0\Delta t$ | $\tilde{\nu}_0\Delta t$ | λ | M | <i>AIC</i> |
|-----------|--------------------|--------------------|-------------------------|-----------|-----|------------|
| Bild 3.15 | 0.05 | 0.04 | 0.05 | 0.939 | 2 | nein |
| Bild 3.16 | 0.05 | 0.04 | 0.05 | 0.939 | 12 | ja |
| Bild 3.17 | 0.05 | 0.04 | 0.03 | 0.939 | 2 | nein |
| Bild 3.18 | 0.05 | 0.04 | 0.03 | 0.939 | 5 | ja |
| Bild 3.19 | 0.05 | 0.04 | 0.01 | 0.939 | 2 | ja |
| Bild 3.20 | 0.05 | 0.04 | 0.01 | 0.939 | 3 | nein |

Bild 3.15: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M = 2$

Bild 3.16: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M = 12$

Bild 3.17: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.03}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M = 2$

Bild 3.18: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.03}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M = 5$

Bild 3.19: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.01}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M = 2$

Bild 3.20: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.04}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.01}{\Delta t}$, $\lambda = 0.939$, $M = 3$

Der Fall $\sigma_0 > \sigma_1$

Der Fall $\sigma_0 > \sigma_1$ ist wiederum unangenehmer. Je nach Polzahl M entsteht eine Anzahl von nichtexistenten Peaks und Artefakten. Besonders bei zwei sehr nahe liegenden Banden kann bei dieser falschen Parameterwahl und bei Unkenntnis dieser zwei Banden keinerlei Aussage über etwaige vorhandene Banden getroffen werden.

| Bild | $\sigma_1 \Delta t$ | $\sigma_0 \Delta t$ | $\tilde{\nu}_0 \Delta t$ | λ | M | AIC |
|-----------|---------------------|---------------------|--------------------------|-----------|-----|-------|
| Bild 3.21 | 0.05 | 0.06 | 0.05 | 1.065 | 2 | nein |
| Bild 3.22 | 0.05 | 0.06 | 0.05 | 1.065 | 61 | ja |
| Bild 3.23 | 0.05 | 0.06 | 0.03 | 1.065 | 2 | nein |
| Bild 3.24 | 0.05 | 0.06 | 0.03 | 1.065 | 40 | ja |
| Bild 3.25 | 0.05 | 0.06 | 0.01 | 1.065 | 2 | nein |
| Bild 3.26 | 0.05 | 0.06 | 0.01 | 1.065 | 32 | ja |

Bild 3.21: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 2$

Bild 3.22: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 61$

Bild 3.23: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.03}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 2$

Bild 3.24: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.03}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 40$

Bild 3.25: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.01}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 2$

Bild 3.26: $\sigma_1 = \frac{0.05}{\Delta t}$, $\sigma_0 = \frac{0.06}{\Delta t}$, $\tilde{\nu}_0 = \frac{0.01}{\Delta t}$, $\lambda = 1.065$, $M = 32$

3.2.2 Zwei Banden mit gleichen Halbwertsbreiten und verschiedenen Intensitäten

In diesem Fall ist das zu analysierende Spektrum die Summe von zwei Lorentzfunktionen mit den Intensitäten α_1 und α_2 . Die Peaks befinden sich ohne Beschränkung der Allgemeinheit an den Positionen $\pm\tilde{\nu}_0$.

$$S(\nu) = \alpha_1 \frac{\frac{\sigma_1}{\pi}}{\sigma_1^2 + (\nu + \tilde{\nu}_0)^2} + \alpha_2 \frac{\frac{\sigma_1}{\pi}}{\sigma_1^2 + (\nu - \tilde{\nu}_0)^2} \quad (3.61)$$

Das Interferogramm davon lautet

$$I(x) = \alpha_1 e^{-2\pi\sigma_1|x|} e^{-2\pi i x \tilde{\nu}_0 \Delta t} + \alpha_2 e^{-2\pi\sigma_1|x|} e^{2\pi i x \tilde{\nu}_0 \Delta t}, \quad (3.62)$$

beziehungsweise nach Division durch eine Lorentzsche Linienprofilfunktion $I_0(x)$ mit Halbwertsbreite $\sigma_0 = \sigma_1$

$$I'(x) = (\alpha_1 + \alpha_2) \cos(2\pi x \tilde{\nu}_0 \Delta t) + \hat{i}(\alpha_2 - \alpha_1) \sin(2\pi x \tilde{\nu}_0 \Delta t). \quad (3.63)$$

Der *Burg*-Algorithmus gestaltet sich nur ein wenig aufwendiger als im Fall mit gleicher Bandenintensität.

$$f_k = (\alpha_1 + \alpha_2) \cos(\mu(k+1)) + \hat{i}(\alpha_2 - \alpha_1) \sin(\mu(k+1)) \quad (3.64)$$

$$b_k = (\alpha_1 + \alpha_2) \cos(\mu k) + \hat{i}(\alpha_2 - \alpha_1) \sin(\mu k) \quad (3.65)$$

$$\mu = 2\pi \tilde{\nu}_0 \Delta t \quad (3.66)$$

$$f_k \bar{b}_k = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \cos \mu + 2\alpha_1 \alpha_2 \cos(\mu(2k+1)) + \hat{i}(\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_1 + \alpha_2) \sin \mu \quad (3.67)$$

$$|b_k|^2 = \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + 2\alpha_1 + 2\alpha_1 \alpha_2 \cos(2\mu k) \quad (3.68)$$

$$\begin{aligned} c_1^{(1)} &= -2 \frac{\sum_{k=-n}^{n-1} f_k \bar{b}_k}{\sum_{k=-n}^{n-1} |f_k|^2 + |b_k|^2} = \\ &= - \frac{\sum_{k=0}^{n-1} f_k \bar{b}_k}{\sum_{k=0}^{n-1} |b_k|^2} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Da sowohl

$$|\cos(\mu(2x+1))^{(n)}| < (2\mu)^n \quad (3.70)$$

als auch

$$|\cos(2\mu x)^{(n)}| < (2\mu)^n \quad (3.71)$$

lassen sich die entsprechenden Summen mit Hilfe der *Eulerschen* Summenformel abschätzen.

$$\begin{aligned} \left| \sum_{k=0}^{n-1} \cos(\mu(2k+1)) \right| &< \left| \int_0^{n-1} \cos(\mu(2x+1)) dx + \frac{\cos \mu + \cos((2n-1)\mu)}{2} + C \right| < \\ &< \left| \frac{1}{\mu} + 1 + C \right| < \infty \end{aligned} \quad (3.72)$$

$$\begin{aligned} \left| \sum_{k=0}^{n-1} \cos(2k\mu) \right| &< \left| \int_0^{n-1} \cos(2x\mu) dx + \frac{\cos \mu + \cos((2n-2)\mu)}{2} + C \right| < \\ &< \left| \frac{1}{\mu} + 1 + C \right| < \infty \end{aligned} \quad (3.73)$$

Damit gilt weiters

$$c_1^{(1)} = -\frac{n(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \cos \mu + C_1 + i(\alpha_2^2 - \alpha_1^2) \sin \mu}{n(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) + C_2}. \quad (3.74)$$

Für genügend großes n führt man den Grenzübergang durch und erhält

$$c_1^{(1)} = -\cos \mu - i \frac{\alpha_2^2 - \alpha_1^2}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \sin \mu. \quad (3.75)$$

Das daraus resultierende verbesserte Spektrum $S'_1(\nu)$

$$S'_1(\nu) = \frac{C}{\sqrt{1 + \cos^2 \mu + \alpha^2 \sin^2 \mu - 2 \cos \mu \cos(2\pi\nu\Delta t) - 2\alpha \sin \mu \sin(2\pi\nu\Delta t)}} \quad (3.76)$$

mit

$$\alpha = \frac{\alpha_2^2 - \alpha_1^2}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \quad (3.77)$$

besitzt erwartungsgemäß wiederum nur einen Hochpunkt, woraus folgt, daß auch in diesem Fall die Polzahl M größer gleich 2 zu wählen ist. Der besagte Hochpunkt befindet sich übrigens an der Stelle

$$\nu = \frac{1}{2\pi\Delta t} \arctan(\alpha \tan \mu), \quad (3.78)$$

befindet sich also auf der Seite mit der größeren Bandenintensität.

Der nächste Schritt im *Burg*-Algorithmus ist wieder sehr rechenaufwendig. Man kann das Ergebnis zunächst numerisch ermitteln und dann mit Hilfe von symbolischen Formelumwandlungsprogrammen verifizieren. So erhält man überraschend wieder

$$c_2^{(2)} = 1 \quad (3.79)$$

beziehungsweise

$$c_1^{(2)} = -2 \cos \mu, \quad (3.80)$$

und das verbesserte Spektrum ist äquivalent mit (3.57). Außerdem werden sämtliche $f_k^{(2)}$ und $b_k^{(2)}$ gleich 0, und der Algorithmus kann damit nicht weiter fortgesetzt werden.

Dieses Ergebnis ist deshalb äußerst interessant, weil es zeigt, daß die Maximum Entropie Methode zwar die Positionen der Peaks liefert, daß sie allerdings keinerlei Aufschluß über die Intensitäten der Banden gibt. Im ersten Moment könnte man glauben, dieses Ergebnis mit Hilfe von Stetigkeitsüberlegungen widerlegt zu können. Dem ist nicht so. Nimmt man nämlich die erste Intensität α_1 fix an und läßt die zweite Intensität α_2 gegen 0 gehen, so gehen gleichzeitig auch die $f_k^{(1)}$ und $b_k^{(1)}$ stetig gegen 0. Folglich muß die zweite Intensität α_2 stets echt größer als 0 sein, da sonst der *Burg*-Algorithmus bereits nach dem ersten Rekursionsschritt abbricht.

3.3 Mehrbandenspektren

Gegeben ist ein Spektrum, welches sich zusammensetzt aus M verschiedenen Lorentzbanden an den Positionen $(\tilde{\nu}_m)_{m=1(1)M}$ mit verschiedenen Intensitäten $(\alpha_m)_{m=1(1)M}$ und gleichen Halbwertsbreiten $2\sigma_1$.

$$S(\nu) = \frac{\sigma_1}{\pi} \sum_{m=1}^M \frac{\alpha_m}{\sigma_1^2 + (\nu - \tilde{\nu}_m)^2} \quad (3.81)$$

$$I(x) = e^{-2\pi\sigma_1|x|} \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{2\pi i x \tilde{\nu}_m \Delta t} \quad (3.82)$$

Dividiert man, wie gehabt, durch die Linienprofilfunktion $I_0(x)$ mit der Halbwertsbreite $2\sigma_0 = 2\sigma_1$ und substituiert $\mu_m = 2\pi\tilde{\nu}_m\Delta t$, so erhält man

$$I'(x) = \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{\hat{\mu}_m x} \quad (3.83)$$

als Ausgangsbasis für den *Burg*-Algorithmus.

Ich habe nun mit Hilfe eines *BASIC*-Programms die Positionen und Intensitäten der Banden variiert und für eine genügend feine Digitalisierung im Spektralbereich folgende Ergebnisse festgestellt:

1. Die $c_m^{(M)}$ nach dem M -ten Rekursionsschritt sind unabhängig von den Intensitäten α_m , sofern diese durchwegs echt positiv sind und die Positionen der Banden $\tilde{\nu}_m$ paarweise verschieden sind.
2. Die $c_m^{(M)}$ sind gegeben durch

$$c_m^{(M)} = (-1)^m \sum_{1 \leq k_1 < k_2 < \dots < k_m \leq N} e^{i \sum_{l=1}^m \mu_{k_l}} \quad (3.84)$$

3. Spätestens nach dem M -ten Rekursionsschritt sind sämtliche f_k und b_k gleich 0, und der Algorithmus bricht ab.

Ich werde diese Aussagen nun beweisen. Geht man davon aus, daß das Interferogramm aufgrund genügend feiner Digitalisierung des Spektrums gegeben ist durch eine beliebig große Anzahl von Datenpunkten x_n mit

$$x_n = \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{i \mu_m n} \quad n \in Z, \quad (3.85)$$

so reicht es zu zeigen, daß $(\varepsilon^{(M)})^2$ für obige Werte von $c_m^{(M)}$ gleich 0 wird, daß jedoch $(\varepsilon^{(K)})^2$ für $K < M$ nicht 0 werden kann. Aus der Herleitung des *Burg*-Algorithmus geht nämlich hervor, daß der minimale Fehler $(\varepsilon^{(M)})^2$ genau durch die eindeutig bestimmten Koeffizienten $c_m^{(M)}$, welche der Algorithmus liefert, erreicht wird.

Gilt $(\varepsilon^{(M)})^2 = 0$ so sind folglich auch alle $f_n^{(M)}$ und $b_n^{(M)}$ gleich 0, und der Algorithmus kann aufgrund der Singlurität bei Berechnung eines zusätzlichen Koeffizienten nicht mehr fortgesetzt werden. Es gilt

$$(\varepsilon^{(M)})^2 = 0 \iff x_n = \hat{x}_n^{(f)} \wedge x_n = \hat{x}_n^{(b)}, \quad \forall n \in Z. \quad (3.86)$$

Setzt man ein, erhält man

$$x_n - \hat{x}_n^{(f)} = \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{i \mu_m n} - \sum_{k=1}^K c_k \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{i \mu_m (n-k)} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{\hat{i}\mu_m n} \left(1 + \sum_{k=1}^K c_k e^{-\hat{i}\mu_m k} \right) = \\
&= 0 \quad \forall n \in \mathbb{Z}.
\end{aligned} \tag{3.87}$$

beziehungsweise

$$\begin{aligned}
x_n - \hat{x}_n^{(b)} &= \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{\hat{i}\mu_m n} - \sum_{k=1}^K \bar{c}_k \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{\hat{i}\mu_m (n+k)} = \\
&= \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{\hat{i}\mu_m n} \left(1 + \sum_{k=1}^K \bar{c}_k e^{\hat{i}\mu_m k} \right) = \\
&= 0 \quad \forall n \in \mathbb{Z}
\end{aligned} \tag{3.88}$$

Wegen der linearen Unabhängigkeit der Funktionen $e^{\hat{i}\mu_m n}$ reduziert sich das Problem auf das Lösen des Gleichungssystems

$$1 + \sum_{k=1}^K c_k e^{-\hat{i}\mu_m k} = 0 \quad m = 1(1)(M). \tag{3.89}$$

Betrachtet man für den Fall $K = M$ die Gleichung M -ter Ordnung

$$1 + \sum_{k=1}^M c_k x^k = 0, \tag{3.90}$$

so hat diese genau die M Lösungen $e^{-\hat{i}\mu_m}$. Aus den Sätzen von *Vieta* folgt damit

$$c_m^{(M)} = (-1)^m \sum_{1 \leq k_1 < k_2 < \dots < k_m \leq M} e^{\hat{i} \sum_{l=1}^m \mu_{k_l}}. \tag{3.91}$$

Da die einzelnen Spalten von (3.89) linear unabhängig sind, ist das Gleichungssystem für $K < M$ überbestimmt, und somit nicht lösbar. M ist damit der kleinste Wert K , für welchen $(\varepsilon^{(K)})^2$ gleich 0 wird, und der Beweis ist erbracht.

Wie sich gezeigt hat sind die $e^{\hat{i}\mu_m}$, $m = 1(1)M$ Lösungen eines Polynoms M -ter Ordnung und das verbesserte Spektrum kann demnach in lineare Faktoren zerlegt werden:

$$S'(\nu) = \frac{C_1}{\left| 1 + \sum_{n=1}^N c_n^{(N)} e^{-2in\nu\Delta t} \right|} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{C_1}{\prod_{n=1}^N |1 - e^{i(\mu_n - 2\pi\nu\Delta t)}|} = \\
&= \frac{C_1}{\prod_{n=1}^N \sqrt{|(2 - 2\cos(\mu_n - 2\pi\nu\Delta t))|}} = \\
&= \frac{C}{\left| \prod_{n=1}^N \sin \frac{\mu_n - 2\pi\nu\Delta t}{2} \right|} = \\
&= \frac{C}{\left| \prod_{n=1}^N \sin (\pi(\tilde{\nu}_n - \nu)\Delta t) \right|} \tag{3.92}
\end{aligned}$$

Man erhält also wieder eine Funktion mit Polen genau an den Positionen der einzelnen Banden.

Es hat sich gezeigt, daß die Maximum Entropie Methode ein Verfahren ist, daß zwar Information über Anzahl und Positionen der Banden gibt, jedoch keinerlei Aufschluß über deren Intensitäten geben muß. Es gibt jedoch eine kombinierte Methode aus FSD und MEM, die sogenannte LOMEF Methode, die sehr wohl auch die Intensitäten der Banden liefert. Sie wird in einem späteren Kapitel vorgestellt werden.

Kapitel 4

Numerische Durchführung

4.1 Voraussetzungen und Definitionen

Während sich die letzten zwei Kapitel fast ausschließlich mit der Theorie der Maximum Entropie Methode und mit theoretisch konstruierten Beispielen befaßt haben, wird sich das folgenden Kapitel mit der praktischen Durchführung der Methode befassen. Es wird sich zeigen, daß die allgemeine numerische Durchführung doch ein wenig von der theoretischen Durchführung abweicht.

Zunächst geht man davon aus, daß das Spektrum $S(\tilde{\nu})$ an N äquidistanten Stützstellen $(\tilde{\nu}_i)_{i=1(1)N}$ in Form von Funktionswerten $(S(\tilde{\nu}_i))_{i=1(1)N}$ gegeben ist. Mathematisch interpretiert man das Spektrum als eine periodische Funktion mit Periodenlänge 1, die auf dem Intervall $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[$ gegeben ist.

$$S^* \left(-\frac{1}{2} + \frac{i-1}{N} \right) \simeq S(\tilde{\nu}_i) \quad i = 1(1)N \quad (4.1)$$

$$S^*(y) = S^*(y+k) \quad \forall k \in Z \quad (4.2)$$

Es läßt sich leicht überlegen, daß dann das zugehörige Interferogramm $I^*(x)$ ebenfalls eine periodische Funktion und zwar mit Periodenlänge N und Digitalisierungsdistanz 1, ist.

Die Annahme der Periodizität des Spektrums ist notwendig, um eine diskrete Fouriertransformation durchführen zu können. Bei allen weiteren Überlegungen wird von diesen Annahmen ausgegangen. In diesem Kapitel werden die Funktionen $S^*(y)$ und $I^*(x)$ kurz als $S(y)$ und $I(x)$ bezeichnet.

4.2 Die diskrete Fouriertransformation

Die diskrete Fouriertransformation und die inverse diskrete Fouriertransformation für eine 1-periodische, am Intervall $[0, 1[$ gegebenen Funktion lassen sich sofort anschreiben.

$$I(x) = I_x = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} S_n e^{\frac{2\pi i x n}{N}} \quad x = 0(1)(N-1) \quad (4.3)$$

$$S\left(\frac{k}{N}\right) = S_k = \sum_{n=0}^{N-1} I_n e^{-\frac{2\pi i k n}{N}} \quad k = 0(1)(N-1) \quad (4.4)$$

Diese Summen sind, wie sich bald zeigen wird, mit bestimmten Algorithmen besonders schnell zu berechnen.

Da das Spektrum jedoch definitionsgemäß als eine am Intervall $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[$ gegebene Funktion interpretiert wird, ist eine geringfügige Anpassung des Interferogramms notwendig.

$$S_{[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[}\left(-\frac{1}{2} + \frac{k}{N}\right) = S_{[0, 1[}\left(\frac{k}{N}\right) = S_k \quad k = 0(1)(N-1) \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} I_{[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[}(x) &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} S_n e^{2\pi i x (-\frac{1}{2} + \frac{n}{N})} = \\ &= (-1)^x \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} S_n e^{\frac{2\pi i x n}{N}} = \\ &= (-1)^x I_{[0, 1[}(x) \quad x = 0(1)(N-1) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Im Normalfall wäre der Rechenaufwand für eine derartige Problemstellung von der Größenordnung $O(N^2)$. Ist jedoch die Anzahl der gegebenen Datenpunkte eine Potenz von 2 ($N = 2^l$), so gibt es eine Anzahl von Methoden mit denen die Anzahl der benötigten Operationen auf bis zu $O(N \log_2 N)$ gedrückt werden kann. Diese Methoden bezeichnet man als Fast Fourier Transformationsalgorithmen (FFT). Einige dieser Methoden finden sich unter anderem bei [11].

Um 2^l Datenpunkte zu erhalten geht man so vor, daß das Spektrum beidseitig mit Werten aufgefüllt wird. Diese Werte können beispielsweise konstant 0 oder die linken und rechten Randwerte des Spektrums sein (siehe

dazu ebenfalls [11]). Wurde eine Basislinienkorrektur durchgeführt sind der linke und rechte Randwert gleich 0.

Die meisten FFT-Algorithmen erfordern ein abschließendes Umordnen der Datenpunkte. Ich habe deshalb eine Variante hergeleitet, bei der dieses Umordnen nicht mehr durchgeführt werden muß.

4.2.1 Ein FFT-Algorithmus ohne Umordnen der Datenpunkte

In diesem Unterkapitel wird ein FFT-Algorithmus vorgestellt, bei dem durch geschicktes Abspeichern der Zwischenresultate das übliche abschließende Umordnung der Datenpunkte wegfällt. Der Algorithmus liefert die Summen

$$I_x = \sum_{n=0}^{N-1} S_n e^{\frac{2\pi i x n}{N}} \quad x = 0(1)(N-1). \quad (4.7)$$

FFT-Algorithmus:

$$f_i^{(l)} = S_i \quad i = 0(1)(N-1) \\ N = 2^l$$

$$\text{Für } k = l(-1)1 \quad I = 2^{l-k} \quad J = 2^{k-1}$$

$$\text{Für } i = 0(1)(I-1) \text{ und } j = 0(1)(J-1)$$

$$f_{iJ+j}^{(k-1)} = f_{2iJ+j}^{(k)} + f_{(2i+1)J+j}^{(k)} \\ f_{(i+I)J+j}^{(k-1)} = \left(f_{2iJ+j}^{(k)} - f_{(2i+1)J+j}^{(k)} \right) e^{\frac{2\pi i j}{2J}}$$

$$I_i = f_i^{(0)} \quad i = 0(1)(N-1)$$

Es versteht sich von selbst, daß die Sinus und Cosinus Werte von $e^{\frac{2\pi i j}{2J}}$ im vorhinein berechnet und in einem Speicher gesichert werden. Dadurch wird eine mehrmalige Berechnung vermieden und die Geschwindigkeit der FFT in der Regel deutlich vergrößert.

Daß dieser Algorithmus tatsächlich obige Summen liefert läßt sich unmittelbar zeigen. Sei $n = n_0 + 2n_1 + \dots + 2^{l-1}n_{l-1}$ mit $n_i \in \{0, 1\}$, $i = 0(1)(l-1)$. Dann gilt

$$\begin{aligned}
f_n^{(0)} &= f_{n_0+2n_1+\dots+2^{l-1}n_{l-1}}^{(0)} = \\
&= f_{2n_0+4n_1+\dots+2^{l-1}n_{l-2}}^{(1)} e^{\pi i 0 n_{l-1}} + \\
&\quad + f_{1+2n_0+4n_1+\dots+2^{l-1}n_{l-2}}^{(1)} e^{\pi i 1 n_{l-1}} = \\
&= f_{4n_0+8n_1+\dots+2^{l-1}n_{l-3}}^{(2)} e^{\pi i \frac{0}{2} n_{l-2}} e^{\pi i 0 n_{l-1}} + \\
&\quad + f_{2+4n_0+8n_1+\dots+2^{l-1}n_{l-3}}^{(2)} e^{\pi i \frac{2}{2} n_{l-2}} e^{\pi i 0 n_{l-1}} + \\
&\quad + f_{1+4n_0+8n_1+\dots+2^{l-1}n_{l-3}}^{(2)} e^{\pi i \frac{1}{2} n_{l-2}} e^{\pi i 1 n_{l-1}} + \\
&\quad + f_{3+4n_0+8n_1+\dots+2^{l-1}n_{l-3}}^{(2)} e^{\pi i \frac{3}{2} n_{l-2}} e^{\pi i 1 n_{l-1}} = \dots = \\
&= \sum_{k=0}^{N-1} f_k^{(l)} e^{\pi i \frac{k \bmod 2^l}{2^{l-1}} n_0} e^{\pi i \frac{k \bmod 2^{l-1}}{2^{l-2}} n_1} \dots e^{\pi i \frac{k \bmod 2}{2^0} n_{l-1}} = \\
&= \sum_{k=0}^{N-1} f_k^{(l)} e^{2\pi i \frac{n_0(k \bmod 2^l) + 2n_1(k \bmod 2^{l-1}) + \dots + 2^{l-1}n_{l-1}(k \bmod 2)}{N}} = \\
&= \sum_{k=0}^{N-1} f_k^{(l)} e^{\frac{2\pi i k n}{N}}.
\end{aligned}$$

Pro Algorithmusschritt sind je 3 komplexe Additionen, Subtraktionen und Multiplikationen notwendig. Insgesamt gibt es $l = \log_2 N$ Schritte durchzuführen. Damit ist der Algorithmus von der Größenordnung $N \log_2 N$.

4.3 Die numerische Durchführung der Maximum Entropie Methode

Ausgangsbasis für die Maximum Entropie Methode ist ein Satz Datenpunkte, die Spektralwerte äquidistanter Stützstellen eines Spektrum auf einem gegebenen Wellenlängenbereich representieren. Es ist darauf zu achten, daß der Satz Datenpunkte meist von der kleinsten zur größten Wellenzahl gegeben ist, das Spektrum jedoch gewöhnlich von der größten zur kleinsten

Wellenzahl graphisch dargestellt wird. Es müssen also unter Umständen die Datenpunkte in umgekehrter Reihenfolge eingelesen werden.

Ist das Spektrum ein künstlich erzeugtes Spektrum (das heißt, es werden bekannte Banden aufaddiert) so ist es naheliegend eine Digitalisierungslänge zu wählen, sodaß man eine 2er Potenz von Datenpunkten erhält. Bei gemessenen Spektren ist dies in der Regel nicht möglich. Um eine Fast Fourier Transformation durchführen zu können, muß das Spektrum beidseitig auf eine 2er Potenz von Datenpunkten aufgefüllt werden. Bei einer ungeraden Anzahl von Datenpunkten wird beim im Anhang beschriebenen Programm links mit einem Datenpunkt mehr aufgefüllt als rechts. Das Auffüllen kann, wie bereits früher angesprochen, mit Randwerten oder mit 0en erfolgen.

Manchmal kommt es vor, daß das Lösungsmittel, in dem die Substanz gelöst ist, deren Spektrum wir untersuchen, die Basislinie beeinflusst. In diesem Fall empfiehlt es sich, eine Basislinienkorrektur durchzuführen. Dabei wird eine beliebige Funktion als neue Basislinie definiert. Der einfachste Fall ist eine lineare Basislinienkorrektur. Dabei wird der am weitesten links liegende und der am weitesten rechts liegende Spektralwert durch eine Gerade verbunden. Diese Gerade ist die neue Basislinie. Die neuen Randwerte sind somit beidseitig 0. Das beidseitige Auffüllen des Spektrums mit 0en bis zu einer 2er-Potenz von Daten ist in diesem Fall nicht bedenklich.

Auch wenn der linke oder der rechte Randwert eines Spektrums deutlich verschieden von 0 sind empfiehlt es sich eine lineare Basislinienkorrektur durchzuführen, wodurch am Rand des Spektrums die Wahrscheinlichkeit der Artefaktbildung vermindert wird. Wir werden im Kapitel 5 sehen, welche Effekte eine Basislinienkorrektur auf das Ergebnis des *Burg*-Algorithmus ausübt.

Naturbedingt liegt ein gemessenes Spektrum mehr oder weniger verrauscht vor. Es ist also ratsam, ein synthetisch durch Addition von gegebenen Banden erzeugtes Spektrum künstlich zu verrauschen, um möglichst realistische Ergebnisse zu erhalten. Diese können dann mit Ergebnissen von gemessenen Spektren verglichen werden. Genaueres dazu findet sich auch im Kapitel 5.

Hier ist die Vorbereitung des Spektrums abgeschlossen. Nun wird mit Hilfe des im letzten Kapitel vorgestellten FFT Algorithmus eine inverse diskrete Fouriertransformation durchgeführt. Das daraus resultierende Interferogramm ist in der Regel keine rein reelle Funktion mehr, sondern besitzt zusätzlich einen Imaginärteil.

4.3.1 Division durch eine Linienprofilfunktion

Wir werden sehen, daß bereits bei dieser scheinbar einfachen Operation die ersten größeren Probleme auftauchen können.

Betrachtet wir dazu ein diskretes Lorentzlinienprofil mit Halbwertsbreite 2σ und Digitalisierungslänge $\frac{1}{N}$, wobei N die Anzahl der Datenpunkte des zu untersuchenden Spektrums ist.

$$S(\nu_n) = \frac{\frac{\sigma}{\pi}}{\sigma^2 + \nu_n^2} \quad (4.8)$$

Diesem Linienprofil entspricht das Interferogramm $I(x)$

$$I(x) = e^{-2\sigma\pi|x|}, \quad (4.9)$$

wobei x nun eine ganze Zahl ist. Man darf nicht vergessen, daß die Halbwertsbreite 2σ analog dem Spektrum proportioniert werden muß. Ist also ein Spektrum auf einem Intervall der Länge 200cm^{-1} gegeben, und wurde eine Halbwertsbreite von beispielsweise 10cm^{-1} gewählt, so folgt $2\sigma = 0.05$.

Ist das Spektrum durch insgesamt N Datenpunkte auf einem Bereich von $a\text{cm}^{-1}$ gegeben, und lautet die geschätzte Halbwertsbreite $b\text{cm}^{-1}$, so schaut das Interferogramm, durch das dividiert werden soll, folgendermaßen aus:

$$I(x) = e^{-\frac{b}{a}\pi|x|} \quad x = 0(1)(N-1) \quad (4.10)$$

Man erkennt, daß der Ausdruck $I(x)$ für betragsmäßig große x ziemlich schnell gegen 0 geht. Die Division durch ein Linienprofil im Zeitreihenbereich ist also ein Problem, welches leicht zu Singularitäten führt. Dieses Problem wird noch dadurch verstärkt, daß bei Anwendung des FFT-Algorithmus oft ein leichtes Ausschwingen des Interferogramms beobachtet werden kann¹. Dieses Schwingen wird bei Division durch einen Wert nahe bei 0 derart verstärkt, daß falsche Resultate zu erwarten sind.

Man hilft sich deshalb mit sogenannten Filtern. Ein Filter ist ein Wert f aus dem Intervall $]0, 1]$. Das Interferogramm wird nur auf dem Intervall $[0, [fN]]$ als korrekt angesehen und ansonsten gleich 0 gesetzt². Die Wahl

¹Die numerische Stabilität des FFT-Algorithmus ist in der Regel sehr gut, doch kann es beispielsweise durch Datenungenauigkeiten, Rundungsfehler oder ungünstiges Auffüllen auf eine 2er Potenz von Datenpunkten sehr wohl zu Abweichungen kommen.

²Eine Ausnahme ist die LOMEPE Methode, bei der die abgeschnittenen Punkte neu interpoliert werden.

eines solchen Filters erfolgt nach genauerer Betrachtung des dividierten Interferogramms. Er sollte so groß gewählt werden, daß die offensichtlich bereits verfälschten Daten gerade noch abgeschnitten werden. Bei einem 512 Punkte Spektrum liegt dieser Wert erfahrungsgemäß deutlich unter 0.1. Das heißt, daß zur Durchführung des *Burg*-Algorithmus lediglich maximal 52 Datenpunkte der Zeitreihe verwendet werden.

4.3.2 Der *Burg*-Algorithmus

Nach Division der Zeitreihe durch ein Linienprofil und Abschneiden mit einem Filter kann der *Burg*-Algorithmus zur Bestimmung der Autoregressionskoeffizienten durchgeführt werden. Das wesentlichste Problem beim *Burg*-Algorithmus ist die Bestimmung der optimalen Polzahl M , also der Anzahl der zu berechnenden Koeffizienten. Dabei kann für M jener Wert genommen, für den der Ausdruck $AIC(M)$ (siehe Kapitel 2.8.1) minimal wird.

Die Funktion $AIC(M)$ ist für $M \geq 2$ grob gesehen annähernd konkav. Doch gerade bei ihrem Minimum ist sie des öfteren leicht gewellt, womit das Minimum nicht immer sofort eindeutig erkennbar ist. Zahlreich Versuche haben jedoch gezeigt, daß, falls

$$AIC(M) < AIC(m) \quad \forall m < M \quad (4.11)$$

und

$$AIC(M) < AIC(M + k) \quad k = 1, 2 \quad (4.12)$$

das Minimum an der Stelle M liegt. Beim Programm wird sicherheitshalber $AIC(M) < AIC(M + 3)$ ebenfalls getestet.

Vor allem bei Division durch ein zu breites Linienprofil wird der optimale Wert von M ziemlich groß (bis zu $M = 100$). Das bringt zwei Probleme mit sich. Erstens ist eine große Anzahl von Rechenschritten notwendig, was nicht nur die Rechendauer verlängert, sondern bei einer niedrigen Rechnerpräzision auch Rundungsfehler liefert. Es ist deshalb zu empfehlen, den *Burg*-Algorithmus mit größtmöglicher Rechnergenauigkeit zu implementieren und etwas längere Rechenzeiten in Kauf zu nehmen. Das zweite Problem ist, daß für 100 Iterationsschritte zumindest 101 Datenpunkte erforderlich sind. Wurde ein relativ kleiner Filter gewählt, so ist das unter Umständen nicht mehr der Fall, und die Parameterwahl sollte noch einmal überdacht werden.

4.3.3 Berechnung des verbesserten Spektrums

Aus den mit dem *Burg*-Algorithmus berechneten Autoregressionskoeffizienten kann nun das verbesserte Spektrum stellenweise bestimmt werden. Der Wert P_M aus Gleichung (2.84) wird zunächst konstant angenommen. Das so erhaltene Spektrum wird danach derart normiert, daß das maximale Peak des verbesserten Spektrums die selbe Intensität hat, wie das maximale Peak des ursprünglichen Spektrums. Ist der Ausdruck

$$\left| 1 + \sum_{n=1}^M c_n e^{-2\pi i n \nu} \right| \quad (4.13)$$

für eine Stützstelle ν nur unwesentlich verschieden von 0, so muß mit einem sehr großen Faktor normiert werden, und das normierte verbesserte Spektrum wird fast zu einem Strichspektrum. Mit größer werdender Polzahl M wächst auch die Anzahl der Summanden im Ausdruck (4.13) und damit die Wahrscheinlichkeit von Rundungsfehlern. Aus diesen Gründen empfiehlt es sich alle Operationen mit doppelter Genauigkeit durchzuführen.

Kapitel 5

Datenmanipulationen und Rauschen

In diesem Kapitel werden Untersuchungen durchgeführt, wie sich Datenungenauigkeiten und Rauschen auf das Ergebnis der Maximum Entropie Methode auswirken. Ferner werden auch jene Effekte studiert, die bei einer diskreten Fouriertransformation, insbesondere durch das Auffüllen auf eine Zweierpotenz, auftreten können.

5.1 Definition von Rauschen

Unter Rauschen verstehen wir stets sogenanntes komplexes weißes Rauschen. Dabei handelt es sich um eine Folge unabhängiger komplex normalverteilter Zufallsvariablen mit Mittelwerten gleich 0, die stellenweise zu einer Folge von Daten addiert werden.

Bezeichnet $R_I(\frac{k}{N})$ mit $k = 0(1)(N - 1)$ ein komplexes weißes Rauschen und $R_S(x)$ mit $x = 0(1)(N - 1)$ das entsprechende Rauschen im Frequenzbereich, so gilt

$$I(x) + R_I(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left(S\left(\frac{n}{N}\right) + R_S\left(\frac{n}{N}\right) \right) e^{\frac{2\pi i x n}{N}}, \quad x = 0(1)(N - 1) \quad (5.1)$$

und folglich

$$R_I(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} R_S\left(\frac{n}{N}\right) e^{\frac{2\pi i x n}{N}}, \quad x = 0(1)(N-1) \quad (5.2)$$

beziehungsweise

$$R_S\left(\frac{n}{N}\right) = \sum_{x=0}^{N-1} R_I(x) e^{-\frac{2\pi i x n}{N}}, \quad n = 0(1)(N-1). \quad (5.3)$$

Bezeichnet \mathbf{x} einen Vektor der Dimension N , der stellenweise (reell oder komplex) normalverteilt ist und \mathbf{C} die Kovarianzmatrix der einzelnen Komponenten, so führt die Koordinatentransformation

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (5.4)$$

die ursprünglichen Dichtefunktionen

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^M |\mathbf{C}|}} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}} \quad (\text{reell}) \quad (5.5)$$

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\pi^M |\mathbf{C}|} e^{-\mathbf{x}^H \mathbf{C}^{-1} \mathbf{x}} \quad (\text{komplex}) \quad (5.6)$$

über in

$$p(\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^M |\mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{A}^T|}} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{y}^T (\mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{y}} \quad (5.7)$$

beziehungsweise

$$p(\mathbf{y}) = \frac{1}{\pi^M |\mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{A}^H|} e^{-\mathbf{y}^H (\mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{A}^H)^{-1} \mathbf{y}}. \quad (5.8)$$

Ein spezieller Fall so einer Koordinatentransformation ist die diskrete Fouriertransformation von komplexen weißen Rauschen. Dabei gilt

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & e^{-\frac{2\pi i}{N}} & \cdots & e^{-\frac{2\pi i(N-1)}{N}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & e^{-\frac{2\pi i(N-1)}{N}} & \cdots & e^{-\frac{2\pi i(N-1)^2}{N}} \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

\mathbf{A}^H ist die Matrix der inversen Fouriertransformation.

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^H \quad (5.10)$$

Für komplexes weißes Rauschen sind die einzelnen Komponenten paarweise unabhängig und \mathbf{C} demnach eine Diagonalmatrix. Daraus folgt

$$\mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{A}^H = \mathbf{C}. \quad (5.11)$$

Die diskrete Fouriertransformation von komplexen weißen Rauschen ist also wieder komplexes weißes Rauschen.

Die Intensität des Rauschens gibt man am besten mit dem sogenannten *Signal Noise Ratio* (SNR) an. In dieser Arbeit handelt es sich dabei um das Verhältnis des Wertes der Zeitreihe an der Stelle 0 zur Standardabweichung des weißen Rauschens im Zeitreihenbereich. Geht man beispielsweise von einem normierten Spektrum aus, dessen Flächeninhalt gleich 1 ist, so ist die Fouriertransformierte an der Stelle 0 gleich 1, und ein SNR von 100 bedeutet demnach ein Verrauschen der Zeitreihe mit einer Zufallsvariablen, welche $\text{CN}(0, \frac{1}{100})$ verteilt ist. Es gibt jedoch auch alternative Definitionen des SNR.

5.2 Theoretische Beispiele zum Rauschen

In diesem Abschnitt wird theoretisch untersucht, wie sich Rauschen im Interferogrammbereich auf das Ergebnis der Maximum Entropie Methode auswirken kann. Es wird auch jene Stelle der Zeitreihe errechnet, an der abgeschnitten werden muß, um noch eine bestimmte Verbesserung zu erhalten.

Gewöhnlich wird das Spektrum, wie schon mehrmals erwähnt, als eine Funktion am Intervall $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[$ interpretiert. Bei N Datenpunkten beträgt die Digitalisierungslänge $\frac{1}{N}$. Nach diskreter Fouriertransformation erhält man das entsprechende Interferogramm, wobei dieses ebenso durch N Datenpunkte gegeben ist, diese sich jedoch an den Stellen $0, 1, \dots, N-1$ befinden. Während im dritten Kapitel die Anzahl der Datenpunkte als unbeschränkt angenommen werden konnte, ist nun das Interferogramm sehr wohl beschränkt.

5.2.1 Einbandenspektren

Fouriertransformiert man eine symmetrisch zum 0-Punkt gelegene Lorentzbande mit Halbwertsbreite 2σ so erhält man im exakten Fall eine abklin-

gende Exponentialfunktion als Interferogramm. Da, wie sich bereits gezeigt hat, die diskrete Fouriertransformierte von unabhängigem weißen Rauschen wieder weißes Rauschen ist, kann das Rauschen direkt zur Exponentialfunktion addiert werden. Das so erhaltene verrauschte Interferogramm lautet demnach in diskreter Form

$$I(x) = e^{-2\sigma\pi x} + \varepsilon_x, \quad x = 0(1)(N-1) \quad (5.12)$$

wobei

$$\varepsilon_x \sim \text{CN}\left(0, \frac{1}{\text{SNR}}\right), \quad x = 0(1)(N-1). \quad (5.13)$$

Nach Division durch die Linienprofilfunktion $I_0(x)$

$$I_0(x) = e^{-2\sigma\pi x}, \quad x = 0(1)(N-1) \quad (5.14)$$

erhält man so das verbesserte Interferogramm $I'(x)$.

$$I'(x) = 1 + e^{2\sigma\pi x} \varepsilon_x, \quad x = 0(1)(N-1) \quad (5.15)$$

Damit kann nun der *Burg*-Algorithmus durchgeführt werden. Da die Verteilung der nun stochastischen Variablen $c_1^{(1)}$ sehr kompliziert ist, berechne ich nur deren Erwartungswert.

$$\begin{aligned} \mathcal{E}c_1^{(1)} &= \mathcal{E} - 2 \frac{\sum_{n=0}^{N-2} (1 + \varepsilon_n e^{2\sigma\pi n})(1 + \overline{\varepsilon_{n+1}} e^{2\sigma\pi(n+1)})}{\sum_{n=0}^{N-2} |1 + \varepsilon_n e^{2\sigma\pi n}|^2 + \sum_{n=1}^{N-1} |1 + \varepsilon_n e^{2\sigma\pi n}|^2} = \\ &= - \frac{2(N-1)}{2(N-1) + \frac{1}{\text{SNR}^2} \left(e^{4\sigma\pi(N-1)} - 1 + 2 \sum_{n=0}^{N-2} e^{4\sigma\pi n} \right)} = \\ &= - \frac{-2(N-1)}{2(N-1) + \frac{1}{\text{SNR}^2} \left(e^{4\sigma\pi(N-1)} - 1 + 2 \frac{e^{4\sigma\pi(N-1)} - 1}{e^{4\sigma\pi} - 1} \right)} = \\ &= - \frac{1}{1 + \frac{\coth(2\sigma\pi) e^{4\sigma\pi(N-1)} - 1}{\text{SNR}^2 \cdot 2(N-1)}} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Das verbesserte, an der Stelle 0 zu 1 normiert Spektrum $S'(\nu)$, lautet

$$\begin{aligned} S'(\nu) &= \frac{1 + c_1^{(1)}}{|1 + c_1^{(1)} e^{-2\pi i \nu}|} = \\ &= \frac{1 + c_1^{(1)}}{\sqrt{1 + 2c_1^{(1)} \cos(2\pi\nu) + (c_1^{(1)})^2}}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Je mehr $c_1^{(1)}$ von -1 abweicht, desto breiter wird die Bande des verbesserten Spektrums. Jener Wert $c_1^{(1)}$, für welchen die zu erwartende Verschmälerung der ursprünglichen Bande genau K beträgt, läßt sich aus folgender Gleichung berechnen:

$$\frac{1 + c_1^{(1)}}{\sqrt{1 + 2c_1^{(1)} \cos \frac{2\pi\sigma}{K} + c_1^{(1)}}} = \frac{1}{2}$$

$$(c_1^{(1)})^2 + 2c_1^{(1)} \left(2 - \cos \frac{2\pi\sigma}{K}\right) + 1 = 0$$

$$c_1^{(1)} = -2 + \cos \frac{2\pi\sigma}{K} + \sqrt{\left(2 - \cos \frac{2\pi\sigma}{K}\right)^2 - 1}. \quad (5.18)$$

Durch Gleichsetzen von (5.16) und (5.18) läßt sich für verschiedene Werte σ , K und SNR jene zu erwartende Anzahl N von Datenpunkten ermitteln, die aufgrund des Rauschens nicht überschritten werden darf. In den folgenden Tabellen findet sich eine Auswahl von Lösungen dieser Gleichung.

$2\sigma = 0.04$

| $K \backslash \text{SNR}$ | 10 | 20 | 50 | 100 | 200 | 500 | 1000 |
|---------------------------|----|----|----|-----|-----|-----|------|
| 1 | 10 | 14 | 18 | 21 | 24 | 28 | 31 |
| 2 | 8 | 12 | 16 | 19 | 22 | 26 | 29 |
| 4 | 6 | 10 | 14 | 18 | 21 | 25 | 28 |
| 8 | 4 | 8 | 13 | 16 | 19 | 23 | 26 |
| 16 | 2 | 6 | 11 | 14 | 18 | 22 | 25 |
| 32 | 1 | 4 | 9 | 13 | 16 | 20 | 23 |

$2\sigma = 0.05$

| $K \backslash \text{SNR}$ | 10 | 20 | 50 | 100 | 200 | 500 | 1000 |
|---------------------------|----|----|----|-----|-----|-----|------|
| 1 | 9 | 11 | 15 | 17 | 20 | 23 | 25 |
| 2 | 7 | 10 | 13 | 16 | 18 | 22 | 24 |
| 4 | 6 | 9 | 12 | 15 | 17 | 20 | 23 |
| 8 | 4 | 7 | 11 | 13 | 16 | 19 | 21 |
| 16 | 2 | 6 | 9 | 12 | 15 | 18 | 20 |
| 32 | 1 | 4 | 8 | 11 | 13 | 17 | 19 |

$$2\sigma = 0.06$$

| $K \backslash \text{SNR}$ | 10 | 20 | 50 | 100 | 200 | 500 | 1000 |
|---------------------------|----|----|----|-----|-----|-----|------|
| 1 | 8 | 10 | 13 | 15 | 17 | 19 | 21 |
| 2 | 6 | 9 | 12 | 14 | 16 | 18 | 20 |
| 4 | 5 | 8 | 10 | 13 | 15 | 17 | 19 |
| 8 | 4 | 6 | 9 | 11 | 14 | 16 | 18 |
| 16 | 2 | 5 | 8 | 10 | 12 | 15 | 17 |
| 32 | 1 | 4 | 7 | 9 | 11 | 14 | 16 |

Diese Werte sind durchwegs abgerundet. Der Abbruchpunkt ist völlig unabhängig von der Datenanzahl beziehungsweise der Digitalisierungslänge des Originalspektrums. Für schmalere Banden kann (und muß) ein verhältnismäßig größerer Abbruchpunkt gewählt werden als für breitere Banden.

Jetzt steht natürlich nicht fest, daß für eine einzelne Bande genau ein Autokorrelationskoeffizient das beste Ergebnis liefert. Da eine Berechnung der Erwartungswerte der einzelnen c_i bei mehr als einem Iterationsschritt beim *Burg*-Algorithmus kaum mehr möglich ist, empfiehlt es sich Ergebnisse über Versuchsserien zu erlangen.

Noch komplizierter gestaltet sich der Fall mit mehreren Banden. Hier ist es in der Regel bei einer endlichen Anzahl von Datenpunkten nicht einmal mehr möglich einen vernünftigen Schätzwert für den Erwartungswert von $c_1^{(1)}$ anzugeben.

Im Kapitel 5.4 werden eine große Anzahl von Versuchsserien für ein Einbandenspektrum und ein Dreibandenspektrum durchgeführt.

5.3 Berechnung von normalverteilten Zufallsgrößen

Die einfachste Methode normalverteilte Zufallsgrößen zu konstruieren geht mit Hilfe folgender Transformation

$$g_1 = \sqrt{-2 \ln n_1} \cos(2\pi n_2) \quad (5.19)$$

$$g_2 = \sqrt{-2 \ln n_1} \sin(2\pi n_2) \quad (5.20)$$

Sind n_1 und n_2 zwei unabhängige, im Intervall $[0, 1]$ gleichverteilte, Zufallsvariablen, so sind die Werte g_1 und g_2 jeweils $N(0, 1)$ -verteilt und unkorreliert. Diese Transformation empfiehlt sich besonders zur Konstruktion von komplexen, normalverteilten Zufallsgrößen. Sowohl Realteil als auch Imaginärteil einer komplexen, normalverteilten Zufallsgröße sind nämlich folgendermaßen, voneinander unabhängig, normalverteilt:

$$p(u + \hat{v}) = \frac{1}{\pi\sigma^2} e^{-\frac{(u-\mu_u)^2 + (v-\mu_v)^2}{\sigma^2}} \quad (5.21)$$

$$u \sim N\left(\mu_u, \frac{\sigma^2}{2}\right) \quad (5.22)$$

$$v \sim N\left(\mu_v, \frac{\sigma^2}{2}\right) \quad (5.23)$$

Damit liefert der Ausdruck

$$g = \sqrt{-\ln n_1} e^{2\pi \hat{v} n_2} \quad (5.24)$$

eine $CN(0, 1)$ -verteilte Zufallsvariable.

5.4 Statistische Untersuchungen

Das Verrauschen einer Datenfolge ist ein rein zufälliger Vorgang, bei dem sich das Ergebnis von Mal zu Mal ändert. Um die Effekte des Rauschen zu untersuchen empfiehlt es sich daher eine große Anzahl von Versuchen durchzuführen und diese anschließend statistisch auszuwerten.

Da die diskrete Fourtransformation von weißem Rauschen, wie sich gezeigt hat, wieder weißes Rauschen ist, ist es unerheblich, ob im Frequenzbereich oder im Zeitreihenbereich verrauscht wird. Nachdem jedoch das Interferogramm abgeschnitten wird, reicht es im Zeitreihenbereich bis zum Filterabbruchspunkt zu verrauschen. Dadurch sind wesentlich weniger Zufallszahlen notwendig, und es kann Rechenzeit gespart werden. Für die nun folgenden Spektren werden Testserien zu jeweils 1000 Versuchen durchgeführt, wobei auf folgende 3 Arten verrauscht wird:

- Verrauschen des theoretisch exakten Interferogramms,
- Verrauschen des durch diskrete Fouriertransformation erhaltenen Interferogramms,
- Verrauschen des durch diskrete Fouriertransformation erhaltenen Interferogramms, wobei das Spektrum jedoch linear basislinienkorregiert wurde.

Es wird also immer im Zeitreihenbereich verrauscht.

In den folgenden Versuchsserien ist der Filter nicht wie gewöhnlich ein Wert aus $]0, 1]$, sondern die Anzahl der verbleibenden Punkte nach Abschneiden des Interferogramms. Dividiert man diesen Wert durch die Gesamtpunkteanzahl nach dem Auffüllen, so erhält man den entsprechenden Filterwert aus $]0, 1]$.

Die nun folgenden Versuchsspektren werden zur mathematischen Behandlung wie schon früher in den Frequenzbereich $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[$ verschoben. Die Digitalisierungslänge beträgt danach im Frequenzbereich $\frac{1}{N}$, wobei N die Anzahl der Datenpunkte nach Auffüllen auf eine 2er Potenz ist, beziehungsweise im Zeitreihenbereich 1.

5.4.1 Einbandenspektrum

Das 1. Versuchsspektrum ist der einfachste mögliche Fall, nämlich ein Lorentzlinienprofil mit bekannter Halbwertsbreite, dessen Peak in der Mitte des Frequenzbereichs (also nach Translation an der Stelle 0) angenommen wird. Aus nachstehender Tabelle lassen sich die bereits normierten Daten ablesen:

| | |
|--------------|---------------|
| Intervall | $[-0.5, 0.5[$ |
| Peakposition | 0 |
| 2σ | 0.05 |
| Bandenprofil | 100% Lorentz |
| SNR | 100 |
| Datenpunkte | 256 |

Zu jeder Testserie finden sich 3 Tabellen. In der ersten Tabelle wird die Verteilung der durch das AIC-Kriterium ermittelten Polzahlen gezeigt. Senkrecht sind die Abbruchpunkte angeführt, waagrecht die Polzahlen. In der ersten Spalte neben den Abbruchpunkten findet sich jene Polzahl, die ohne Verrauschen des Interferogramms errechnet wurde, in der Spalte rechts daneben stehen die Mittelwerte der errechneten Polzahlen und in der anschließenden Spalte sind die Anzahl der Fälle angeführt, bei denen das AIC Kriterium, aus welchem Grund auch immer, versagt. Wird die Polzahl größer als Filterabbruchspunkt -3 geschätzt, so wird sie ebenfalls verworfen. In der zweiten Tabelle findet sich die Anzahl der Peaks mit Mindestintensität 5% des größten Peaks, die sich im Intervall $[-\sigma, \sigma] = [-0.025, 0.025]$ befindet. Die dritte Tabelle schließlich gibt die Gesamtanzahl der Peaks mit Mindestintensität 5% des größten Peaks an. Ein Datenpunkt wird dann als Peak interpretiert, wenn die 5 Datenpunkte vor und nach ihm kleiner sind. Das enthält jedoch die Gefahr, daß graphisch eindeutig auszumachende Sattelpunkte teilweise nicht mitgezählt werden.

Auf der nächsten Seite findet sich ein Beispiel eines Einbandenspektrums, welches normiert dem Spektrum der oberen Tabelle entspricht. Es wurden zwei Auswertungen vorgenommen, wobei im zweiten Fall eine lineare Basislinienkorrektur durchgeführt wurde.

Bild 5.1: 1 Bande, 256 Datenpunkte

Bild 5.2: 1 Bande, 256 Datenpunkte, linear basislinienkorregiert

1. Testserie

Das exakte Interferogramm wird verrauscht.

Mit *AIC* geschätzte Polzahlen:

| Flt. | ex. | Schnitt | err. | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|------|-----|---------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|
| 6 | 1 | 1.483 | 615 | 220 | 144 | 21 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | 1 | 1.817 | 448 | 218 | 238 | 75 | 21 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 8 | 1 | 2.072 | 321 | 204 | 290 | 128 | 46 | 11 | - | - | - | - | - | - | - |
| 9 | 1 | 2.360 | 214 | 185 | 300 | 175 | 94 | 23 | 9 | - | - | - | - | - | - |
| 10 | 1 | 2.521 | 140 | 145 | 333 | 226 | 117 | 24 | 14 | 1 | - | - | - | - | - |
| 11 | 1 | 2.669 | 79 | 141 | 326 | 260 | 120 | 51 | 12 | 10 | 1 | - | - | - | - |
| 12 | 1 | 2.845 | 52 | 111 | 307 | 285 | 154 | 61 | 19 | 7 | 3 | 1 | - | - | - |
| 13 | 1 | 2.963 | 40 | 107 | 283 | 277 | 181 | 78 | 21 | 6 | 5 | 2 | 0 | - | - |
| 14 | 1 | 3.165 | 9 | 84 | 262 | 290 | 211 | 89 | 32 | 13 | 6 | 2 | 1 | 1 | - |
| 15 | 1 | 3.211 | 4 | 68 | 275 | 290 | 194 | 116 | 33 | 12 | 4 | 1 | 2 | 1 | 0 |
| 16 | 1 | 3.406 | 2 | 69 | 215 | 299 | 201 | 137 | 44 | 21 | 9 | 1 | 1 | 0 | 1 |
| 17 | 1 | 3.475 | 0 | 54 | 207 | 288 | 228 | 145 | 52 | 19 | 2 | 5 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | 1 | 3.505 | 0 | 41 | 209 | 298 | 222 | 149 | 54 | 23 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 19 | 1 | 3.538 | 1 | 46 | 197 | 277 | 247 | 149 | 59 | 20 | 2 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 20 | 1 | 3.591 | 0 | 43 | 202 | 267 | 238 | 153 | 66 | 23 | 6 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| 21 | 1 | 3.693 | 0 | 36 | 180 | 278 | 235 | 156 | 77 | 28 | 5 | 5 | 0 | 0 | 0 |
| 22 | 1 | 3.824 | 0 | 34 | 163 | 257 | 236 | 168 | 97 | 33 | 12 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 23 | 1 | 3.984 | 0 | 25 | 146 | 240 | 239 | 189 | 102 | 42 | 14 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 24 | 1 | 4.052 | 0 | 17 | 134 | 244 | 250 | 186 | 102 | 47 | 16 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 1 | 4.161 | 0 | 19 | 130 | 216 | 251 | 189 | 120 | 49 | 15 | 9 | 1 | 1 | 0 |
| 26 | 1 | 4.207 | 0 | 21 | 126 | 210 | 236 | 205 | 111 | 65 | 21 | 4 | 1 | 0 | 0 |
| 27 | 1 | 4.250 | 0 | 26 | 117 | 219 | 207 | 221 | 116 | 61 | 23 | 8 | 1 | 1 | 0 |
| 28 | 1 | 4.353 | 0 | 26 | 114 | 198 | 218 | 202 | 140 | 57 | 29 | 10 | 4 | 2 | 0 |
| 29 | 1 | 4.612 | 0 | 18 | 92 | 174 | 213 | 208 | 153 | 86 | 39 | 11 | 3 | 2 | 0 |
| 30 | 1 | 4.654 | 0 | 20 | 84 | 172 | 210 | 211 | 158 | 78 | 48 | 13 | 6 | 0 | 0 |
| 31 | 1 | 4.740 | 0 | 24 | 88 | 151 | 221 | 178 | 170 | 90 | 50 | 19 | 7 | 2 | 0 |
| 32 | 1 | 4.830 | 0 | 16 | 92 | 142 | 203 | 202 | 164 | 86 | 71 | 14 | 8 | 2 | 0 |
| 33 | 1 | 4.796 | 0 | 21 | 101 | 138 | 200 | 200 | 160 | 92 | 52 | 24 | 9 | 3 | 0 |
| 34 | 1 | 5.049 | 0 | 20 | 78 | 126 | 192 | 194 | 161 | 114 | 72 | 24 | 10 | 8 | 0 |
| 35 | 1 | 5.043 | 0 | 25 | 79 | 124 | 182 | 189 | 167 | 123 | 70 | 26 | 8 | 6 | 1 |
| 36 | 1 | 4.949 | 0 | 25 | 91 | 139 | 164 | 199 | 168 | 111 | 64 | 24 | 8 | 4 | 2 |
| 37 | 1 | 5.192 | 0 | 31 | 79 | 124 | 146 | 179 | 171 | 129 | 86 | 29 | 17 | 5 | 3 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-\sigma, \sigma] = [-0.025, 0.025]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 |
|--------|-----|----|------|---|
| 6 | 1 | 0 | 385 | 0 |
| 7 | 1 | 0 | 552 | 0 |
| 8 | 1 | 0 | 679 | 0 |
| 9 | 1 | 0 | 786 | 0 |
| 10 | 1 | 0 | 860 | 0 |
| 11 | 1 | 0 | 921 | 0 |
| 12 | 1 | 0 | 948 | 0 |
| 13 | 1 | 0 | 960 | 0 |
| 14 | 1 | 0 | 991 | 0 |
| 15 | 1 | 0 | 996 | 0 |
| 16 | 1 | 0 | 998 | 0 |
| 17 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 18 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 19 | 1 | 0 | 999 | 0 |
| 20 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 21 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 22 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 23 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 24 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 25 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 26 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 27 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 28 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 29 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 30 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 31 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 32 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 33 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 34 | 1 | 1 | 998 | 1 |
| 35 | 1 | 4 | 996 | 0 |
| 36 | 1 | 3 | 997 | 0 |
| 37 | 1 | 14 | 986 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.5, 0.5[$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|--------|-----|---|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|---|----|
| 6 | 1 | 0 | 381 | 4 | 0 | – | – | – | – | – | – | – |
| 7 | 1 | 0 | 541 | 10 | 1 | 0 | – | – | – | – | – | – |
| 8 | 1 | 0 | 664 | 6 | 7 | 2 | 0 | – | – | – | – | – |
| 9 | 1 | 0 | 760 | 15 | 6 | 5 | 0 | 0 | – | – | – | – |
| 10 | 1 | 0 | 828 | 21 | 6 | 4 | 1 | 0 | 0 | – | – | – |
| 11 | 1 | 0 | 888 | 20 | 4 | 3 | 5 | 0 | 1 | 0 | – | – |
| 12 | 1 | 0 | 917 | 20 | 7 | 0 | 2 | 1 | 1 | 0 | 0 | – |
| 13 | 1 | 0 | 928 | 22 | 5 | 1 | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 14 | 1 | 0 | 948 | 27 | 9 | 1 | 1 | 1 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 15 | 1 | 0 | 940 | 41 | 10 | 4 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 1 | 0 | 930 | 50 | 10 | 4 | 1 | 2 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 17 | 1 | 0 | 905 | 65 | 20 | 8 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | 1 | 0 | 866 | 87 | 32 | 12 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 19 | 1 | 0 | 850 | 92 | 46 | 7 | 2 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 20 | 1 | 0 | 834 | 105 | 51 | 4 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 21 | 1 | 0 | 811 | 115 | 48 | 19 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 22 | 1 | 0 | 752 | 143 | 63 | 25 | 14 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 23 | 1 | 0 | 710 | 149 | 74 | 42 | 22 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 1 | 0 | 695 | 149 | 87 | 44 | 21 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 1 | 0 | 670 | 171 | 78 | 54 | 19 | 5 | 2 | 0 | 1 | 0 |
| 26 | 1 | 0 | 642 | 163 | 107 | 44 | 25 | 15 | 2 | 2 | 0 | 0 |
| 27 | 1 | 0 | 635 | 180 | 94 | 55 | 14 | 15 | 6 | 1 | 0 | 0 |
| 28 | 1 | 0 | 569 | 229 | 92 | 62 | 28 | 11 | 5 | 4 | 0 | 0 |
| 29 | 1 | 0 | 471 | 258 | 120 | 82 | 42 | 20 | 4 | 3 | 0 | 0 |
| 30 | 1 | 0 | 353 | 292 | 168 | 92 | 59 | 27 | 8 | 0 | 1 | 0 |
| 31 | 1 | 0 | 261 | 303 | 214 | 124 | 57 | 32 | 6 | 2 | 1 | 0 |
| 32 | 1 | 0 | 163 | 290 | 271 | 147 | 84 | 30 | 14 | 1 | 0 | 0 |
| 33 | 1 | 0 | 119 | 238 | 291 | 186 | 113 | 35 | 16 | 2 | 0 | 0 |
| 34 | 1 | 0 | 71 | 168 | 299 | 241 | 129 | 52 | 33 | 5 | 1 | 1 |
| 35 | 1 | 0 | 57 | 146 | 265 | 249 | 184 | 55 | 36 | 7 | 1 | 0 |
| 36 | 1 | 0 | 58 | 135 | 248 | 245 | 194 | 84 | 25 | 6 | 4 | 1 |
| 37 | 1 | 0 | 45 | 116 | 214 | 233 | 196 | 136 | 48 | 11 | 1 | 0 |

2. Testserie

Das durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird ver-
rauscht.

Mit *AIC* geschätzte Polzahlen:

| Flt. | ex. | Schnitt | err. | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|------|-----|---------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|
| 6 | 1 | 1.303 | 481 | 372 | 137 | 10 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | 1 | 1.580 | 372 | 329 | 240 | 53 | 6 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 8 | 1 | 1.873 | 269 | 270 | 320 | 110 | 26 | 5 | - | - | - | - | - | - | - |
| 9 | 1 | 2.073 | 215 | 231 | 347 | 145 | 45 | 15 | 2 | - | - | - | - | - | - |
| 10 | 1 | 2.305 | 148 | 177 | 378 | 193 | 74 | 25 | 4 | 1 | - | - | - | - | - |
| 11 | 1 | 2.465 | 74 | 169 | 374 | 241 | 90 | 34 | 13 | 5 | 0 | - | - | - | - |
| 12 | 1 | 2.742 | 57 | 118 | 333 | 278 | 144 | 41 | 20 | 6 | 2 | 1 | - | - | - |
| 13 | 1 | 2.879 | 28 | 124 | 299 | 289 | 155 | 67 | 20 | 13 | 2 | 3 | 0 | - | - |
| 14 | 1 | 3.075 | 26 | 98 | 280 | 262 | 202 | 81 | 30 | 15 | 3 | 1 | 2 | 0 | - |
| 15 | 1 | 3.250 | 9 | 73 | 252 | 289 | 222 | 95 | 33 | 13 | 7 | 3 | 3 | 0 | 1 |
| 16 | 1 | 3.288 | 7 | 66 | 233 | 291 | 250 | 92 | 37 | 15 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | 1 | 3.392 | 3 | 57 | 225 | 281 | 247 | 119 | 40 | 21 | 4 | 2 | 0 | 0 | 1 |
| 18 | 1 | 3.458 | 3 | 47 | 224 | 278 | 234 | 141 | 46 | 19 | 4 | 3 | 1 | 0 | 0 |
| 19 | 1 | 3.606 | 0 | 40 | 195 | 292 | 221 | 148 | 70 | 25 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 20 | 1 | 3.641 | 0 | 47 | 173 | 274 | 251 | 150 | 76 | 21 | 6 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| 21 | 1 | 3.687 | 0 | 53 | 169 | 273 | 225 | 169 | 72 | 21 | 11 | 5 | 2 | 0 | 0 |
| 22 | 1 | 3.902 | 0 | 38 | 141 | 261 | 235 | 167 | 102 | 43 | 9 | 1 | 3 | 0 | 0 |
| 23 | 1 | 3.987 | 0 | 43 | 119 | 263 | 220 | 178 | 114 | 48 | 9 | 5 | 1 | 0 | 0 |
| 24 | 1 | 4.006 | 0 | 38 | 142 | 237 | 236 | 156 | 117 | 48 | 23 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 1 | 4.200 | 0 | 26 | 108 | 234 | 241 | 179 | 123 | 58 | 26 | 5 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | 1 | 4.184 | 0 | 31 | 125 | 198 | 246 | 197 | 120 | 58 | 14 | 9 | 1 | 1 | 0 |
| 27 | 1 | 4.218 | 0 | 36 | 123 | 197 | 227 | 196 | 134 | 54 | 25 | 5 | 3 | 0 | 0 |
| 28 | 1 | 4.369 | 0 | 33 | 110 | 196 | 200 | 204 | 145 | 71 | 30 | 9 | 2 | 0 | 0 |
| 29 | 1 | 4.517 | 0 | 21 | 101 | 186 | 201 | 217 | 147 | 76 | 34 | 12 | 2 | 3 | 0 |
| 30 | 1 | 4.550 | 0 | 23 | 110 | 185 | 185 | 211 | 139 | 85 | 42 | 11 | 6 | 3 | 0 |
| 31 | 1 | 4.746 | 0 | 15 | 86 | 163 | 196 | 221 | 153 | 97 | 49 | 11 | 6 | 3 | 0 |
| 32 | 1 | 4.789 | 0 | 19 | 108 | 144 | 178 | 203 | 168 | 99 | 48 | 24 | 7 | 1 | 0 |
| 33 | 1 | 4.867 | 0 | 17 | 97 | 142 | 183 | 205 | 162 | 102 | 54 | 28 | 7 | 3 | 0 |
| 34 | 1 | 4.916 | 0 | 19 | 90 | 149 | 185 | 192 | 156 | 107 | 54 | 32 | 11 | 5 | 0 |
| 35 | 1 | 4.977 | 0 | 28 | 89 | 134 | 182 | 180 | 157 | 121 | 48 | 45 | 13 | 3 | 0 |
| 36 | 1 | 5.056 | 0 | 31 | 82 | 122 | 188 | 182 | 150 | 121 | 66 | 39 | 8 | 7 | 2 |
| 37 | 1 | 5.182 | 0 | 32 | 73 | 123 | 182 | 161 | 155 | 120 | 88 | 41 | 18 | 5 | 2 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-\sigma, \sigma] = [-0.025, 0.025]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 |
|--------|-----|----|------|---|
| 6 | 1 | 0 | 519 | 0 |
| 7 | 1 | 0 | 628 | 0 |
| 8 | 1 | 0 | 731 | 0 |
| 9 | 1 | 0 | 785 | 0 |
| 10 | 1 | 0 | 852 | 0 |
| 11 | 1 | 0 | 926 | 0 |
| 12 | 1 | 0 | 943 | 0 |
| 13 | 1 | 0 | 972 | 0 |
| 14 | 1 | 0 | 974 | 0 |
| 15 | 1 | 0 | 991 | 0 |
| 16 | 1 | 0 | 993 | 0 |
| 17 | 1 | 0 | 997 | 0 |
| 18 | 1 | 0 | 997 | 0 |
| 19 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 20 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 21 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 22 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 23 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 24 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 25 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 26 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 27 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 28 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 29 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 30 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 31 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 32 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 33 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 34 | 1 | 1 | 999 | 0 |
| 35 | 1 | 3 | 997 | 0 |
| 36 | 1 | 6 | 994 | 0 |
| 37 | 1 | 19 | 981 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.5, 0.5[$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|--------|-----|---|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|---|----|
| 6 | 1 | 0 | 517 | 2 | 0 | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | 1 | 0 | 618 | 8 | 1 | 1 | - | - | - | - | - | - |
| 8 | 1 | 0 | 724 | 3 | 4 | 0 | 0 | - | - | - | - | - |
| 9 | 1 | 0 | 768 | 10 | 6 | 0 | 0 | 1 | - | - | - | - |
| 10 | 1 | 0 | 837 | 11 | 1 | 2 | 1 | 0 | 0 | - | - | - |
| 11 | 1 | 0 | 899 | 17 | 5 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 | - | - |
| 12 | 1 | 0 | 917 | 14 | 6 | 2 | 1 | 2 | 1 | 0 | 0 | - |
| 13 | 1 | 0 | 942 | 22 | 3 | 0 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 14 | 1 | 0 | 933 | 29 | 7 | 3 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 15 | 1 | 0 | 931 | 42 | 4 | 9 | 2 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 |
| 16 | 1 | 0 | 913 | 58 | 14 | 4 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | 1 | 0 | 896 | 73 | 20 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 18 | 1 | 0 | 886 | 78 | 22 | 8 | 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 19 | 1 | 0 | 858 | 97 | 34 | 8 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 20 | 1 | 0 | 846 | 99 | 32 | 18 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 21 | 1 | 0 | 792 | 128 | 49 | 26 | 3 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 22 | 1 | 0 | 764 | 125 | 67 | 28 | 11 | 4 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 23 | 1 | 0 | 743 | 136 | 65 | 42 | 9 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 1 | 0 | 740 | 136 | 61 | 38 | 16 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 1 | 0 | 687 | 146 | 84 | 53 | 20 | 7 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | 1 | 0 | 666 | 152 | 88 | 60 | 24 | 9 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 27 | 1 | 0 | 638 | 175 | 90 | 64 | 17 | 12 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 28 | 1 | 0 | 568 | 178 | 119 | 76 | 38 | 12 | 7 | 2 | 0 | 0 |
| 29 | 1 | 0 | 483 | 241 | 132 | 82 | 38 | 16 | 6 | 2 | 0 | 0 |
| 30 | 1 | 0 | 410 | 272 | 159 | 83 | 43 | 23 | 8 | 2 | 0 | 0 |
| 31 | 1 | 0 | 286 | 280 | 201 | 113 | 76 | 27 | 14 | 3 | 0 | 0 |
| 32 | 1 | 0 | 182 | 290 | 255 | 145 | 77 | 34 | 14 | 2 | 1 | 0 |
| 33 | 1 | 0 | 103 | 253 | 309 | 181 | 94 | 42 | 13 | 4 | 1 | 0 |
| 34 | 1 | 0 | 78 | 204 | 300 | 204 | 129 | 55 | 22 | 7 | 1 | 0 |
| 35 | 1 | 0 | 60 | 167 | 276 | 227 | 159 | 60 | 37 | 12 | 2 | 0 |
| 36 | 1 | 0 | 61 | 129 | 240 | 244 | 165 | 100 | 43 | 17 | 1 | 0 |
| 37 | 1 | 0 | 48 | 98 | 226 | 238 | 202 | 110 | 57 | 20 | 1 | 0 |

3. Testserie

Das nach linearer Basislinienkorrektur durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird verrauscht.

Mit *AIC* geschätzte Polzahlen:

| Flt. | ex. | Schnitt | err. | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|------|-----|---------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|
| 6 | 1 | 1.204 | 111 | 732 | 133 | 24 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | 1 | 1.365 | 107 | 620 | 227 | 39 | 7 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 8 | 1 | 1.534 | 91 | 519 | 314 | 58 | 17 | 1 | - | - | - | - | - | - | - |
| 9 | 1 | 1.701 | 78 | 452 | 352 | 76 | 28 | 12 | 2 | - | - | - | - | - | - |
| 10 | 1 | 1.900 | 66 | 358 | 392 | 126 | 41 | 12 | 4 | 1 | - | - | - | - | - |
| 11 | 1 | 2.157 | 41 | 273 | 406 | 194 | 53 | 19 | 5 | 7 | 2 | - | - | - | - |
| 12 | 1 | 2.359 | 37 | 200 | 397 | 252 | 76 | 22 | 9 | 3 | 3 | 1 | - | - | - |
| 13 | 1 | 2.496 | 25 | 164 | 404 | 249 | 99 | 42 | 13 | 2 | 1 | 1 | 0 | - | - |
| 14 | 1 | 2.690 | 10 | 128 | 363 | 291 | 145 | 38 | 18 | 3 | 1 | 1 | 2 | 0 | - |
| 15 | 1 | 2.916 | 8 | 96 | 332 | 295 | 165 | 65 | 23 | 9 | 5 | 0 | 1 | 0 | 1 |
| 16 | 1 | 3.024 | 5 | 78 | 314 | 297 | 178 | 95 | 21 | 5 | 2 | 2 | 3 | 0 | 0 |
| 17 | 1 | 3.153 | 1 | 74 | 277 | 287 | 222 | 88 | 35 | 10 | 3 | 1 | 2 | 0 | 0 |
| 18 | 1 | 3.365 | 1 | 60 | 229 | 290 | 227 | 128 | 42 | 15 | 6 | 0 | 1 | 1 | 0 |
| 19 | 1 | 3.441 | 0 | 54 | 224 | 284 | 223 | 142 | 49 | 13 | 4 | 2 | 5 | 0 | 0 |
| 20 | 1 | 3.576 | 0 | 47 | 194 | 279 | 246 | 146 | 51 | 27 | 5 | 1 | 2 | 1 | 0 |
| 21 | 1 | 3.597 | 0 | 40 | 203 | 265 | 247 | 146 | 66 | 23 | 9 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 22 | 1 | 3.747 | 0 | 36 | 171 | 259 | 247 | 171 | 80 | 24 | 10 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| 23 | 1 | 3.928 | 0 | 32 | 149 | 239 | 264 | 165 | 83 | 48 | 15 | 4 | 1 | 0 | 0 |
| 24 | 1 | 3.981 | 0 | 30 | 141 | 229 | 250 | 197 | 100 | 34 | 14 | 3 | 2 | 0 | 0 |
| 25 | 1 | 4.158 | 0 | 26 | 120 | 221 | 253 | 185 | 107 | 64 | 17 | 5 | 1 | 1 | 0 |
| 26 | 1 | 4.105 | 0 | 27 | 131 | 216 | 250 | 198 | 101 | 51 | 20 | 5 | 1 | 0 | 0 |
| 27 | 1 | 4.353 | 0 | 17 | 114 | 182 | 238 | 234 | 112 | 67 | 27 | 7 | 2 | 0 | 0 |
| 28 | 1 | 4.447 | 0 | 17 | 117 | 175 | 219 | 213 | 142 | 74 | 32 | 8 | 1 | 2 | 0 |
| 29 | 1 | 4.397 | 0 | 21 | 111 | 176 | 230 | 218 | 139 | 71 | 25 | 6 | 2 | 1 | 0 |
| 30 | 1 | 4.624 | 0 | 15 | 97 | 176 | 210 | 211 | 143 | 84 | 41 | 14 | 7 | 2 | 0 |
| 31 | 1 | 4.686 | 0 | 16 | 87 | 174 | 204 | 208 | 162 | 81 | 44 | 17 | 4 | 2 | 1 |
| 32 | 1 | 4.729 | 0 | 26 | 99 | 154 | 190 | 200 | 158 | 99 | 47 | 14 | 6 | 4 | 3 |
| 33 | 1 | 4.901 | 0 | 14 | 104 | 146 | 161 | 202 | 169 | 110 | 56 | 30 | 3 | 5 | 0 |
| 34 | 1 | 4.923 | 0 | 24 | 94 | 141 | 178 | 196 | 146 | 109 | 73 | 26 | 6 | 5 | 2 |
| 35 | 1 | 4.968 | 0 | 27 | 85 | 126 | 183 | 196 | 157 | 121 | 64 | 32 | 8 | 0 | 1 |
| 36 | 1 | 5.118 | 0 | 18 | 82 | 133 | 176 | 175 | 150 | 140 | 73 | 39 | 12 | 1 | 1 |
| 37 | 1 | 5.218 | 0 | 27 | 76 | 118 | 159 | 181 | 165 | 121 | 92 | 41 | 18 | 2 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-\sigma, \sigma] = [-0.025, 0.025]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 |
|--------|-----|----|------|---|
| 6 | 1 | 0 | 889 | 0 |
| 7 | 1 | 0 | 893 | 0 |
| 8 | 1 | 0 | 909 | 0 |
| 9 | 1 | 0 | 922 | 0 |
| 10 | 1 | 0 | 934 | 0 |
| 11 | 1 | 0 | 959 | 0 |
| 12 | 1 | 0 | 963 | 0 |
| 13 | 1 | 0 | 975 | 0 |
| 14 | 1 | 0 | 990 | 0 |
| 15 | 1 | 0 | 992 | 0 |
| 16 | 1 | 0 | 995 | 0 |
| 17 | 1 | 0 | 999 | 0 |
| 18 | 1 | 0 | 999 | 0 |
| 19 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 20 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 21 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 22 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 23 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 24 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 25 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 26 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 27 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 28 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 29 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 30 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 31 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 32 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 33 | 1 | 0 | 1000 | 0 |
| 34 | 1 | 1 | 999 | 0 |
| 35 | 1 | 3 | 997 | 0 |
| 36 | 1 | 3 | 997 | 0 |
| 37 | 1 | 11 | 989 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.5, 0.5[$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|--------|-----|---|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|---|----|
| 6 | 1 | 0 | 889 | 0 | 0 | – | – | – | – | – | – | – |
| 7 | 1 | 0 | 892 | 0 | 1 | 0 | – | – | – | – | – | – |
| 8 | 1 | 0 | 907 | 1 | 1 | 0 | 0 | – | – | – | – | – |
| 9 | 1 | 0 | 919 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | – | – | – | – |
| 10 | 1 | 0 | 927 | 5 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | – | – | – |
| 11 | 1 | 0 | 949 | 5 | 3 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | – | – |
| 12 | 1 | 0 | 955 | 6 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | – |
| 13 | 1 | 0 | 958 | 13 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 14 | 1 | 0 | 972 | 11 | 3 | 2 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 15 | 1 | 0 | 959 | 25 | 3 | 2 | 1 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 |
| 16 | 1 | 0 | 949 | 28 | 10 | 3 | 2 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 17 | 1 | 0 | 944 | 32 | 14 | 6 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | 1 | 0 | 895 | 76 | 15 | 7 | 4 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 19 | 1 | 0 | 864 | 86 | 33 | 12 | 3 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 20 | 1 | 0 | 837 | 102 | 43 | 12 | 3 | 1 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 21 | 1 | 0 | 802 | 121 | 44 | 25 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 22 | 1 | 0 | 778 | 131 | 55 | 25 | 8 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 23 | 1 | 0 | 739 | 137 | 71 | 30 | 15 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 1 | 0 | 718 | 130 | 86 | 44 | 15 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 1 | 0 | 693 | 133 | 92 | 49 | 27 | 4 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 26 | 1 | 0 | 665 | 159 | 83 | 47 | 35 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 27 | 1 | 0 | 612 | 168 | 88 | 83 | 34 | 12 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 28 | 1 | 0 | 571 | 185 | 127 | 60 | 32 | 19 | 4 | 0 | 2 | 0 |
| 29 | 1 | 0 | 491 | 245 | 130 | 75 | 34 | 17 | 8 | 0 | 0 | 0 |
| 30 | 1 | 0 | 401 | 262 | 159 | 93 | 47 | 24 | 9 | 5 | 0 | 0 |
| 31 | 1 | 0 | 294 | 293 | 210 | 119 | 47 | 25 | 11 | 1 | 0 | 0 |
| 32 | 1 | 0 | 169 | 305 | 268 | 139 | 71 | 28 | 15 | 1 | 3 | 1 |
| 33 | 1 | 0 | 114 | 271 | 275 | 174 | 100 | 37 | 24 | 3 | 2 | 0 |
| 34 | 1 | 0 | 72 | 215 | 259 | 238 | 122 | 68 | 19 | 6 | 1 | 0 |
| 35 | 1 | 0 | 57 | 150 | 251 | 278 | 152 | 77 | 26 | 7 | 2 | 0 |
| 36 | 1 | 0 | 42 | 118 | 249 | 243 | 201 | 97 | 36 | 11 | 3 | 0 |
| 37 | 1 | 0 | 47 | 94 | 232 | 224 | 203 | 127 | 52 | 19 | 2 | 0 |

Für zwei (annähernd normalverteilte) Meßreihen X und Y mit n_x beziehungsweise n_y Stichproben, kann mit Hilfe der t -Verteilung der Test auf Gleichheit der Mittel durchgeführt werden.

$$Z = \frac{\bar{x} - \bar{y}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n_x} + \frac{1}{n_y}\right) \frac{(n_x-1)S_x^2 + (n_y-1)S_y^2}{n_x+n_y-2}}} \sim t_{n_x+n_y-2} \quad (5.25)$$

mit

$$m_x = \bar{x} = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} x_i \quad (5.26)$$

$$m_y = \bar{y} = \frac{1}{n_y} \sum_{i=1}^{n_y} y_i \quad (5.27)$$

$$S_x^2 = \frac{1}{n_x - 1} \sum_{i=1}^{n_x} (x_i - \bar{x})^2 \quad (5.28)$$

$$S_y^2 = \frac{1}{n_y - 1} \sum_{i=1}^{n_y} (y_i - \bar{y})^2 \quad (5.29)$$

Da die t_n -Verteilung für wachsendes n gegen die $N(0, 1)$ -Verteilung konvergiert, können für großes n ($n \geq 1000$) zum Test auf Gleichheit der Mittelwerte die Quartile der Normalverteilung genommen werden. Bei einem Signifikanzlevel von 99% ist das Konfidenzintervall $[-2.33, 2.33]$.

Geht man davon aus, daß die Polzahlen annähernd normalverteilt sind, so kann man mit dem vorliegenden Testmaterial untersuchen, ob der Erwartungswert der Polzahlen signifikant davon abhängt, welche der 3 Möglichkeiten des Verrauschens gewählt wurde. Es zeigt sich, daß nur dann eine Abhängigkeit besteht, wenn ein kleiner Abbruchpunkt gewählt wurde. In der folgenden Tabelle sind jene Abbruchpunkte angeführt, für die der absolute Z -Wert größer wird als 2.33.

| Testserien | Abbruchpunkte |
|-----------------------|---------------|
| 1. gegen 2. Testserie | 6(1)11 |
| 1. gegen 3. Testserie | 6(1)18 |
| 2. gegen 3. Testserie | 6(1)17 |

Da für Abbruchpunkte größer als 17 die Anzahl der Fälle, in denen genau eine Bande in der Mitte des Spektrums gefunden wird, für alle 3 Testserien zunehmend abnimmt, empfiehlt sich ein kleiner Filterpunkt. Dabei liefert die 3. Testserie die durchschnittlich kleinsten Polzahlen und gleichzeitig auch die größte Anzahl von korrekten Lösungen. Je kleiner der Abbruchpunkt genommen wird, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit ein richtiges Ergebnis zu erhalten (sofern natürlich 6 Punkte nicht unterschritten werden). Gleichzeitig steigt damit jedoch die Gefahr, daß das AIC-Kriterium versagt.

Dieses Einbandenspektrum ist jedoch ein Spezialfall, und es ist daher nicht zweckmäßig, allgemeine Aussagen für beliebige Spektren abzuleiten. Das im nächsten Kapitel behandelte Dreibandenspektrum dagegen ist bereits derart komplex, daß bei seiner Auswertung Qualitäten und Schwächen der Maximum Entropie Methode abgelesen werden können.

5.4.2 Dreibandenspektrum

Das zweite Versuchsspektrum ist die Summe dreier Lorentzprofile mit gleichen Halbwertsbreiten und verschiedenen Intensitäten. Verrauscht wird ausschließlich im Frequenzbereich.

Die Digitalisierung beträgt stets 0.25cm^{-1} . Der Frequenzbereich des Spektrums wird in das Intervall $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}[$ übergeführt. Der mittlere Peak befindet sich, sofern nicht anders angegeben, in der Mitte des Spektralbereichs an der Stelle 1210cm^{-1} , beziehungsweise nach Transformation an der Stelle 0. Die Abkürzung *DB* steht für Datenpunkte. Aus folgenden Tabellen sind die Daten zu diesem Spektrum vor und nach mathematischer Normierung zu entnehmen.

Daten vor Normierung:

| | |
|-------------------|-----------------------------|
| Maximale Frequenz | $1210 + DP/8cm^{-1}$ |
| Minimale Frequenz | $1210 - DP/8 + 0.25cm^{-1}$ |

| | Position | FWHH | Intensität |
|----------|---------------|------------|------------|
| 1. Bande | $1214cm^{-1}$ | $8cm^{-1}$ | 0.80 |
| 2. Bande | $1210cm^{-1}$ | $8cm^{-1}$ | 0.60 |
| 3. Bande | $1206cm^{-1}$ | $8cm^{-1}$ | 0.40 |

Daten nach Normierung:

| | |
|------------------|--------------|
| Linker Randwert | -0.5 |
| Rechter Randwert | $0.5 - 1/DP$ |

| | Position | FWHH | Intensität |
|----------|----------|---------|------------|
| 1. Bande | $-16/DP$ | $32/DP$ | $4/9$ |
| 2. Bande | 0 | $32/DP$ | $3/9$ |
| 3. Bande | $16/DP$ | $32/DP$ | $2/9$ |

Da das Rauschen bei diesem Dreibandenspektrum wesentlich mehr Einfluß auf das Ergebnis der Maximum Entropie Methode hat als bei dem Einbandenspektrum des vorangegangenen Kapitels, wird bei den 3 folgenden Versuchsserien lediglich mit $SNR = 1000$ verrauscht. Die Spektren sind jeweils mit 256 Datenpunkten gegeben. Daher läßt sich der relative Abbruchspunkt ermitteln, indem der Filterabbruchspunkt durch 256 dividiert wird.

Bild 5.3: 3 Banden, 256 Datenpunkte

Bild 5.4: 3 Banden, 384 Datenpunkte

1. Testserie

Das exakte Interferogramm wird verrauscht.

Mit *AIC* geschätzte Polzahlen:

| Flt. | ex. | Schnitt | err. | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|------|-----|---------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|----|
| 6 | - | 2.002 | 556 | 0 | 443 | 1 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | - | 2.998 | 520 | 0 | 17 | 447 | 16 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 8 | - | 3.629 | 447 | 0 | 3 | 214 | 321 | 15 | - | - | - | - | - | - | - |
| 9 | - | 4.110 | 410 | 0 | 6 | 91 | 342 | 134 | 17 | - | - | - | - | - | - |
| 10 | - | 4.354 | 212 | 0 | 18 | 76 | 350 | 303 | 35 | 6 | - | - | - | - | - |
| 11 | - | 4.364 | 86 | 0 | 43 | 70 | 384 | 359 | 46 | 10 | 2 | - | - | - | - |
| 12 | - | 4.159 | 36 | 0 | 136 | 73 | 344 | 343 | 51 | 15 | 2 | 0 | - | - | - |
| 13 | - | 4.000 | 12 | 0 | 236 | 71 | 268 | 314 | 73 | 21 | 5 | 0 | 0 | - | - |
| 14 | - | 3.785 | 7 | 0 | 317 | 128 | 185 | 219 | 114 | 20 | 9 | 0 | 1 | 0 | - |
| 15 | - | 3.989 | 5 | 2 | 251 | 233 | 120 | 165 | 138 | 61 | 20 | 4 | 1 | 0 | 0 |
| 16 | 10 | 3.922 | 2 | 22 | 173 | 369 | 130 | 90 | 91 | 69 | 46 | 8 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | - | 3.875 | 5 | 103 | 92 | 373 | 161 | 67 | 60 | 57 | 51 | 15 | 11 | 2 | 2 |
| 18 | - | 3.520 | 2 | 177 | 117 | 287 | 217 | 66 | 34 | 31 | 29 | 20 | 13 | 4 | 3 |
| 19 | - | 3.196 | 1 | 221 | 181 | 197 | 227 | 82 | 21 | 23 | 23 | 15 | 7 | 1 | 0 |
| 20 | - | 3.052 | 1 | 200 | 244 | 198 | 191 | 98 | 27 | 11 | 11 | 11 | 4 | 1 | 3 |
| 21 | - | 2.954 | 8 | 164 | 289 | 230 | 158 | 98 | 34 | 4 | 3 | 7 | 0 | 4 | 0 |
| 22 | - | 2.913 | 12 | 154 | 279 | 259 | 153 | 94 | 43 | 3 | 2 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 23 | - | 2.938 | 23 | 179 | 237 | 242 | 185 | 85 | 31 | 10 | 5 | 1 | 1 | 1 | 0 |
| 24 | - | 2.828 | 29 | 208 | 227 | 249 | 163 | 79 | 29 | 12 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 16 | 2.903 | 12 | 204 | 212 | 259 | 162 | 103 | 37 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | - | 2.986 | 1 | 179 | 232 | 269 | 158 | 101 | 37 | 15 | 5 | 1 | 2 | 0 | 0 |
| 27 | - | 2.968 | 1 | 176 | 236 | 252 | 190 | 90 | 39 | 12 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 28 | 20 | 3.120 | 1 | 173 | 206 | 244 | 189 | 111 | 49 | 21 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 29 | - | 3.092 | 1 | 148 | 238 | 257 | 189 | 96 | 48 | 16 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 30 | 25 | 3.231 | 0 | 142 | 219 | 235 | 205 | 111 | 56 | 24 | 6 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 31 | - | 3.380 | 0 | 129 | 188 | 242 | 207 | 123 | 80 | 25 | 4 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 32 | 21 | 3.455 | 1 | 124 | 186 | 236 | 205 | 130 | 72 | 29 | 12 | 3 | 2 | 0 | 0 |
| 33 | 15 | 3.499 | 1 | 114 | 193 | 234 | 208 | 116 | 77 | 41 | 12 | 3 | 1 | 0 | 0 |
| 34 | 22 | 3.534 | 0 | 116 | 173 | 252 | 186 | 139 | 81 | 39 | 8 | 6 | 0 | 0 | 0 |
| 35 | - | 3.667 | 0 | 103 | 164 | 224 | 222 | 143 | 85 | 34 | 17 | 5 | 1 | 2 | 0 |
| 36 | - | 3.716 | 0 | 81 | 180 | 230 | 208 | 150 | 96 | 32 | 11 | 7 | 3 | 2 | 0 |
| 37 | - | 3.800 | 0 | 96 | 156 | 209 | 224 | 143 | 90 | 56 | 16 | 6 | 4 | 0 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.125, 0.125] \cong [1218\text{cm}^{-1}, 1202\text{cm}^{-1}]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|--------|-----|-----|-----|-----|-----|---|---|
| 6 | – | 0 | 0 | 444 | 0 | – | – |
| 7 | – | 0 | 0 | 461 | 19 | 0 | – |
| 8 | – | 0 | 0 | 153 | 400 | 0 | 0 |
| 9 | – | 0 | 0 | 83 | 507 | 0 | 0 |
| 10 | – | 0 | 0 | 95 | 693 | 0 | 0 |
| 11 | – | 0 | 0 | 120 | 792 | 2 | 0 |
| 12 | – | 0 | 4 | 214 | 745 | 1 | 0 |
| 13 | – | 0 | 4 | 363 | 620 | 1 | 0 |
| 14 | – | 0 | 15 | 529 | 448 | 0 | 1 |
| 15 | – | 0 | 37 | 555 | 402 | 1 | 0 |
| 16 | 2 | 0 | 105 | 620 | 269 | 4 | 0 |
| 17 | – | 0 | 202 | 571 | 222 | 0 | 0 |
| 18 | – | 0 | 384 | 487 | 126 | 1 | 0 |
| 19 | – | 0 | 543 | 380 | 75 | 1 | 0 |
| 20 | – | 5 | 644 | 306 | 43 | 1 | 0 |
| 21 | – | 9 | 749 | 217 | 17 | 0 | 0 |
| 22 | – | 59 | 745 | 181 | 3 | 0 | 0 |
| 23 | – | 138 | 690 | 145 | 4 | 0 | 0 |
| 24 | – | 240 | 623 | 108 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 3 | 306 | 574 | 105 | 3 | 0 | 0 |
| 26 | – | 340 | 544 | 112 | 3 | 0 | 0 |
| 27 | – | 373 | 531 | 93 | 2 | 0 | 0 |
| 28 | 3 | 398 | 499 | 97 | 5 | 0 | 0 |
| 29 | – | 383 | 532 | 82 | 2 | 0 | 0 |
| 30 | 3 | 382 | 540 | 72 | 6 | 0 | 0 |
| 31 | – | 361 | 516 | 115 | 8 | 0 | 0 |
| 32 | 3 | 373 | 511 | 105 | 10 | 0 | 0 |
| 33 | 3 | 360 | 527 | 105 | 7 | 0 | 0 |
| 34 | 3 | 362 | 533 | 100 | 5 | 0 | 0 |
| 35 | – | 341 | 550 | 96 | 13 | 0 | 0 |
| 36 | – | 352 | 523 | 113 | 12 | 0 | 0 |
| 37 | – | 343 | 525 | 119 | 12 | 1 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.5, 0.5] \cong [1242\text{cm}^{-1}, 1178\text{cm}^{-1}]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
|--------|-----|---|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|---|---|----|----|
| 6 | - | 0 | 0 | 444 | 0 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | - | 0 | 0 | 461 | 19 | 0 | - | - | - | - | - | - | - |
| 8 | - | 0 | 0 | 153 | 400 | 0 | 0 | - | - | - | - | - | - |
| 9 | - | 0 | 0 | 83 | 507 | 0 | 0 | 0 | - | - | - | - | - |
| 10 | - | 0 | 0 | 95 | 693 | 0 | 0 | 0 | 0 | - | - | - | - |
| 11 | - | 0 | 0 | 120 | 792 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | - | - | - |
| 12 | - | 0 | 4 | 214 | 745 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | - | - |
| 13 | - | 0 | 3 | 362 | 612 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | - |
| 14 | - | 0 | 15 | 503 | 454 | 19 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15 | - | 0 | 37 | 475 | 416 | 58 | 5 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 2 | 0 | 101 | 353 | 432 | 82 | 25 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | - | 0 | 180 | 177 | 441 | 126 | 39 | 23 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | - | 0 | 271 | 178 | 296 | 165 | 40 | 28 | 11 | 6 | 2 | 1 | 0 |
| 19 | - | 0 | 301 | 240 | 198 | 169 | 43 | 19 | 21 | 7 | 1 | 0 | 0 |
| 20 | - | 0 | 255 | 311 | 192 | 152 | 52 | 14 | 15 | 5 | 2 | 0 | 1 |
| 21 | - | 0 | 210 | 341 | 245 | 111 | 65 | 8 | 6 | 2 | 3 | 0 | 1 |
| 22 | - | 0 | 190 | 324 | 270 | 126 | 64 | 12 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 23 | - | 2 | 205 | 278 | 286 | 130 | 57 | 14 | 2 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | - | 6 | 230 | 285 | 248 | 135 | 45 | 19 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 3 | 6 | 228 | 275 | 260 | 142 | 59 | 16 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | - | 4 | 217 | 298 | 257 | 136 | 57 | 21 | 6 | 2 | 0 | 1 | 0 |
| 27 | - | 5 | 214 | 291 | 253 | 165 | 47 | 19 | 3 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 28 | 3 | 9 | 193 | 287 | 257 | 149 | 72 | 25 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 29 | - | 9 | 190 | 307 | 252 | 159 | 54 | 19 | 6 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 30 | 3 | 4 | 177 | 291 | 245 | 183 | 69 | 20 | 7 | 2 | 2 | 0 | 0 |
| 31 | - | 4 | 163 | 248 | 300 | 161 | 86 | 30 | 5 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 32 | 3 | 5 | 150 | 261 | 277 | 182 | 74 | 30 | 16 | 3 | 1 | 0 | 0 |
| 33 | 3 | 5 | 145 | 272 | 257 | 177 | 85 | 40 | 16 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 34 | 3 | 4 | 143 | 243 | 284 | 179 | 95 | 40 | 9 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 35 | - | 7 | 127 | 241 | 271 | 196 | 104 | 30 | 18 | 3 | 2 | 1 | 0 |
| 36 | - | 4 | 115 | 272 | 267 | 194 | 101 | 32 | 8 | 4 | 1 | 1 | 1 |
| 37 | - | 5 | 123 | 240 | 274 | 180 | 112 | 47 | 12 | 5 | 2 | 0 | 0 |

2. Testserie

Das durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird ver-
rauscht.

Mit *AIC* geschätzte Polzahlen:

| Flt. | ex. | Schnitt | err. | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|------|-----|---------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|----|
| 6 | 2 | 2.000 | 4 | 0 | 996 | 0 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | 2 | 2.005 | 3 | 0 | 992 | 5 | 0 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 8 | 4 | 2.854 | 54 | 0 | 545 | 0 | 395 | 6 | - | - | - | - | - | - | - |
| 9 | 4 | 3.595 | 51 | 0 | 220 | 0 | 693 | 16 | 20 | - | - | - | - | - | - |
| 10 | 4 | 4.039 | 214 | 0 | 41 | 0 | 651 | 77 | 15 | 2 | - | - | - | - | - |
| 11 | 4 | 4.057 | 155 | 0 | 101 | 2 | 544 | 152 | 40 | 4 | 2 | - | - | - | - |
| 12 | 4 | 4.118 | 87 | 0 | 171 | 6 | 372 | 279 | 80 | 3 | 2 | 0 | - | - | - |
| 13 | 4 | 3.956 | 37 | 0 | 281 | 31 | 249 | 268 | 121 | 11 | 2 | 0 | 0 | - | - |
| 14 | 4 | 3.880 | 11 | 0 | 302 | 147 | 144 | 214 | 148 | 20 | 11 | 1 | 1 | 1 | - |
| 15 | 4 | 3.804 | 15 | 3 | 266 | 290 | 99 | 127 | 122 | 57 | 11 | 8 | 2 | 0 | 0 |
| 16 | 5 | 3.939 | 10 | 33 | 159 | 388 | 107 | 82 | 85 | 81 | 36 | 11 | 6 | 1 | 1 |
| 17 | 5 | 3.870 | 5 | 87 | 117 | 361 | 185 | 47 | 55 | 58 | 53 | 18 | 7 | 5 | 1 |
| 18 | 6 | 3.438 | 2 | 201 | 98 | 266 | 231 | 72 | 45 | 36 | 27 | 11 | 7 | 3 | 1 |
| 19 | 6 | 3.152 | 0 | 232 | 133 | 232 | 237 | 95 | 19 | 20 | 17 | 9 | 3 | 2 | 1 |
| 20 | 6 | 3.068 | 0 | 203 | 253 | 178 | 178 | 122 | 23 | 15 | 10 | 9 | 5 | 2 | 0 |
| 21 | 6 | 2.960 | 6 | 174 | 288 | 210 | 155 | 111 | 36 | 7 | 6 | 2 | 3 | 0 | 0 |
| 22 | 6 | 2.846 | 23 | 167 | 280 | 251 | 158 | 85 | 23 | 6 | 1 | 4 | 2 | 0 | 0 |
| 23 | 8 | 2.897 | 22 | 191 | 247 | 241 | 160 | 78 | 49 | 8 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 6 | 2.957 | 17 | 200 | 218 | 239 | 175 | 85 | 50 | 12 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 6 | 2.894 | 11 | 211 | 241 | 228 | 156 | 96 | 42 | 6 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | 7 | 2.939 | 5 | 187 | 240 | 243 | 165 | 104 | 46 | 8 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 27 | 7 | 2.962 | 3 | 162 | 261 | 237 | 202 | 81 | 38 | 12 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 28 | 10 | 3.127 | 2 | 153 | 224 | 237 | 211 | 108 | 42 | 18 | 1 | 3 | 0 | 0 | 1 |
| 29 | 10 | 3.227 | 1 | 155 | 190 | 257 | 193 | 119 | 52 | 27 | 5 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 30 | 10 | 3.170 | 1 | 134 | 227 | 259 | 205 | 103 | 43 | 18 | 8 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 31 | 12 | 3.333 | 0 | 140 | 194 | 248 | 192 | 111 | 81 | 24 | 8 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 32 | 10 | 3.444 | 0 | 117 | 187 | 250 | 208 | 125 | 75 | 21 | 10 | 3 | 2 | 2 | 0 |
| 33 | 11 | 3.509 | 1 | 117 | 177 | 236 | 215 | 127 | 88 | 19 | 15 | 3 | 1 | 0 | 0 |
| 34 | 6 | 3.637 | 0 | 100 | 181 | 211 | 222 | 146 | 85 | 34 | 14 | 6 | 1 | 0 | 0 |
| 35 | 11 | 3.699 | 1 | 122 | 144 | 223 | 193 | 157 | 90 | 47 | 19 | 2 | 2 | 0 | 0 |
| 36 | 7 | 3.722 | 0 | 98 | 152 | 223 | 231 | 141 | 91 | 48 | 9 | 3 | 3 | 1 | 0 |
| 37 | 4 | 3.806 | 1 | 88 | 171 | 189 | 234 | 151 | 92 | 41 | 23 | 9 | 1 | 0 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.125, 0.125] \cong [1218\text{cm}^{-1}, 1202\text{cm}^{-1}]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|--------|-----|-----|-----|-----|-----|---|
| 6 | 2 | 0 | 0 | 996 | 0 | – |
| 7 | 2 | 0 | 0 | 997 | 0 | 0 |
| 8 | 3 | 0 | 0 | 737 | 209 | 0 |
| 9 | 3 | 0 | 0 | 391 | 558 | 0 |
| 10 | 3 | 0 | 0 | 73 | 713 | 0 |
| 11 | 3 | 0 | 0 | 136 | 709 | 0 |
| 12 | 3 | 0 | 0 | 198 | 715 | 0 |
| 13 | 3 | 0 | 3 | 369 | 591 | 0 |
| 14 | 3 | 0 | 10 | 516 | 462 | 1 |
| 15 | 3 | 0 | 56 | 595 | 332 | 2 |
| 16 | 3 | 0 | 99 | 616 | 274 | 1 |
| 17 | 3 | 0 | 211 | 577 | 206 | 1 |
| 18 | 3 | 0 | 393 | 485 | 120 | 0 |
| 19 | 3 | 0 | 505 | 435 | 60 | 0 |
| 20 | 3 | 4 | 648 | 306 | 41 | 1 |
| 21 | 3 | 13 | 725 | 241 | 15 | 0 |
| 22 | 3 | 62 | 740 | 170 | 5 | 0 |
| 23 | 3 | 145 | 684 | 146 | 2 | 1 |
| 24 | 3 | 218 | 622 | 141 | 1 | 1 |
| 25 | 3 | 329 | 552 | 106 | 2 | 0 |
| 26 | 3 | 369 | 525 | 100 | 1 | 0 |
| 27 | 3 | 386 | 523 | 83 | 4 | 1 |
| 28 | 3 | 375 | 537 | 80 | 6 | 0 |
| 29 | 3 | 390 | 522 | 82 | 5 | 0 |
| 30 | 3 | 373 | 532 | 87 | 6 | 1 |
| 31 | 3 | 378 | 525 | 91 | 6 | 0 |
| 32 | 3 | 378 | 522 | 92 | 7 | 1 |
| 33 | 3 | 365 | 509 | 119 | 5 | 1 |
| 34 | 4 | 319 | 560 | 115 | 6 | 0 |
| 35 | 3 | 357 | 505 | 127 | 9 | 1 |
| 36 | 2 | 350 | 515 | 126 | 8 | 1 |
| 37 | 1 | 330 | 528 | 132 | 8 | 1 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.5, 0.5] \cong [1242\text{cm}^{-1}, 1178\text{cm}^{-1}]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
|--------|-----|----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|---|---|----|----|
| 6 | 2 | 0 | 0 | 996 | 0 | – | – | – | – | – | – | – | – |
| 7 | 2 | 0 | 0 | 997 | 0 | 0 | – | – | – | – | – | – | – |
| 8 | 3 | 0 | 0 | 737 | 209 | 0 | 0 | – | – | – | – | – | – |
| 9 | 3 | 0 | 0 | 391 | 558 | 0 | 0 | 0 | – | – | – | – | – |
| 10 | 3 | 0 | 0 | 73 | 713 | 0 | 0 | 0 | 0 | – | – | – | – |
| 11 | 3 | 0 | 0 | 136 | 709 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | – | – | – |
| 12 | 3 | 0 | 0 | 198 | 715 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | – | – |
| 13 | 3 | 0 | 3 | 368 | 591 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | – |
| 14 | 3 | 0 | 9 | 492 | 467 | 19 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15 | 3 | 0 | 56 | 500 | 383 | 39 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 3 | 0 | 96 | 363 | 404 | 85 | 32 | 8 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | 3 | 0 | 182 | 207 | 413 | 116 | 46 | 20 | 8 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 18 | 3 | 0 | 277 | 179 | 287 | 165 | 46 | 23 | 17 | 2 | 2 | 0 | 0 |
| 19 | 3 | 0 | 289 | 229 | 225 | 180 | 43 | 19 | 10 | 2 | 2 | 0 | 1 |
| 20 | 3 | 0 | 261 | 323 | 182 | 146 | 55 | 12 | 9 | 8 | 2 | 2 | 0 |
| 21 | 3 | 0 | 238 | 329 | 221 | 116 | 67 | 12 | 6 | 1 | 2 | 0 | 1 |
| 22 | 3 | 0 | 223 | 336 | 227 | 135 | 43 | 9 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 23 | 4 | 1 | 223 | 290 | 257 | 141 | 48 | 14 | 1 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 4 | 7 | 223 | 276 | 239 | 164 | 52 | 17 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 3 | 8 | 234 | 291 | 238 | 131 | 64 | 14 | 3 | 5 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | 3 | 7 | 218 | 296 | 255 | 135 | 67 | 13 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 27 | 3 | 5 | 198 | 319 | 269 | 138 | 47 | 16 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 28 | 4 | 8 | 183 | 290 | 276 | 148 | 69 | 17 | 4 | 2 | 0 | 1 | 0 |
| 29 | 4 | 4 | 186 | 265 | 267 | 167 | 81 | 23 | 4 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 30 | 4 | 3 | 172 | 287 | 292 | 164 | 54 | 16 | 8 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 31 | 4 | 8 | 170 | 260 | 289 | 147 | 81 | 30 | 11 | 2 | 1 | 1 | 0 |
| 32 | 4 | 10 | 147 | 264 | 294 | 160 | 76 | 31 | 12 | 3 | 1 | 2 | 0 |
| 33 | 3 | 4 | 145 | 262 | 273 | 186 | 84 | 25 | 14 | 3 | 2 | 0 | 1 |
| 34 | 2 | 7 | 132 | 232 | 265 | 200 | 112 | 35 | 9 | 7 | 1 | 0 | 0 |
| 35 | 4 | 6 | 153 | 198 | 270 | 206 | 101 | 41 | 17 | 6 | 1 | 0 | 0 |
| 36 | 2 | 3 | 137 | 224 | 280 | 194 | 105 | 38 | 11 | 3 | 3 | 1 | 1 |
| 37 | 1 | 3 | 118 | 246 | 246 | 212 | 104 | 34 | 29 | 4 | 3 | 0 | 0 |

3. Testserie

Das nach linearer Basislinienkorrektur durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird verrauscht.

Mit *AIC* geschätzte Polzahlen:

| Flt. | ex. | Schnitt | err. | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|------|-----|---------|------|-----|------|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|----|
| 6 | 2 | 2.000 | 0 | 0 | 1000 | 0 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 7 | 2 | 2.000 | 0 | 0 | 1000 | 0 | 0 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 8 | 2 | 2.000 | 0 | 0 | 1000 | 0 | 0 | 0 | - | - | - | - | - | - | - |
| 9 | 2 | 2.002 | 0 | 0 | 999 | 0 | 1 | 0 | 0 | - | - | - | - | - | - |
| 10 | 2 | 2.442 | 6 | 0 | 778 | 0 | 213 | 0 | 2 | 1 | - | - | - | - | - |
| 11 | 4 | 2.663 | 5 | 0 | 671 | 0 | 313 | 10 | 1 | 0 | 0 | - | - | - | - |
| 12 | 4 | 3.118 | 8 | 0 | 503 | 4 | 371 | 94 | 19 | 1 | 0 | 0 | - | - | - |
| 13 | 4 | 3.226 | 8 | 0 | 493 | 51 | 238 | 156 | 52 | 0 | 1 | 1 | 0 | - | - |
| 14 | 4 | 3.459 | 13 | 0 | 383 | 169 | 153 | 176 | 96 | 8 | 1 | 1 | 0 | 0 | - |
| 15 | 4 | 3.596 | 17 | 5 | 266 | 350 | 89 | 121 | 102 | 33 | 11 | 4 | 2 | 0 | 0 |
| 16 | 4 | 3.799 | 21 | 28 | 157 | 426 | 98 | 76 | 91 | 62 | 31 | 6 | 0 | 3 | 1 |
| 17 | 4 | 3.718 | 7 | 84 | 103 | 424 | 161 | 62 | 52 | 39 | 39 | 16 | 10 | 1 | 2 |
| 18 | 4 | 3.301 | 4 | 211 | 110 | 288 | 205 | 72 | 35 | 26 | 31 | 10 | 5 | 3 | 0 |
| 19 | 5 | 3.117 | 2 | 263 | 162 | 192 | 208 | 86 | 23 | 18 | 16 | 16 | 5 | 8 | 1 |
| 20 | 5 | 3.051 | 2 | 177 | 265 | 194 | 195 | 113 | 14 | 17 | 10 | 8 | 1 | 2 | 2 |
| 21 | 5 | 3.000 | 4 | 177 | 268 | 210 | 163 | 121 | 38 | 8 | 5 | 2 | 0 | 2 | 2 |
| 22 | 6 | 2.967 | 21 | 159 | 266 | 243 | 159 | 96 | 39 | 13 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 |
| 23 | 6 | 2.911 | 36 | 175 | 244 | 246 | 169 | 74 | 42 | 7 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 6 | 2.877 | 18 | 195 | 246 | 246 | 163 | 78 | 37 | 13 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 6 | 2.896 | 16 | 180 | 266 | 227 | 167 | 92 | 40 | 7 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | 6 | 2.939 | 6 | 188 | 240 | 244 | 181 | 86 | 39 | 11 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 27 | 7 | 2.944 | 4 | 188 | 234 | 259 | 170 | 87 | 36 | 12 | 7 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 28 | 8 | 3.129 | 2 | 157 | 208 | 252 | 210 | 108 | 39 | 15 | 7 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 29 | 7 | 3.168 | 1 | 144 | 226 | 246 | 191 | 122 | 44 | 18 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 30 | 9 | 3.285 | 1 | 138 | 195 | 236 | 224 | 122 | 55 | 22 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 31 | 7 | 3.397 | 0 | 122 | 182 | 250 | 216 | 134 | 58 | 29 | 6 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 32 | 10 | 3.373 | 1 | 126 | 194 | 241 | 213 | 124 | 58 | 33 | 8 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 33 | 8 | 3.541 | 1 | 119 | 190 | 220 | 193 | 131 | 97 | 30 | 12 | 7 | 0 | 0 | 0 |
| 34 | 12 | 3.585 | 0 | 114 | 187 | 210 | 206 | 140 | 86 | 35 | 18 | 3 | 0 | 1 | 0 |
| 35 | 9 | 3.695 | 0 | 121 | 143 | 213 | 222 | 147 | 85 | 45 | 17 | 6 | 0 | 1 | 0 |
| 36 | 11 | 3.769 | 1 | 93 | 167 | 214 | 204 | 152 | 98 | 47 | 17 | 5 | 1 | 0 | 1 |
| 37 | 10 | 3.734 | 0 | 100 | 165 | 203 | 218 | 158 | 94 | 38 | 17 | 4 | 2 | 1 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.125, 0.125] \cong [1218\text{cm}^{-1}, 1202\text{cm}^{-1}]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|--------|-----|-----|-----|------|-----|---|
| 6 | 2 | 0 | 0 | 1000 | 0 | – |
| 7 | 2 | 0 | 0 | 1000 | 0 | 0 |
| 8 | 2 | 0 | 0 | 1000 | 0 | 0 |
| 9 | 2 | 0 | 0 | 999 | 1 | 0 |
| 10 | 2 | 0 | 0 | 806 | 188 | 0 |
| 11 | 3 | 0 | 2 | 729 | 264 | 0 |
| 12 | 3 | 0 | 7 | 576 | 409 | 0 |
| 13 | 3 | 0 | 9 | 645 | 337 | 1 |
| 14 | 3 | 0 | 17 | 637 | 333 | 0 |
| 15 | 3 | 0 | 52 | 663 | 268 | 0 |
| 16 | 3 | 0 | 107 | 630 | 241 | 1 |
| 17 | 3 | 0 | 194 | 629 | 170 | 0 |
| 18 | 3 | 0 | 411 | 484 | 101 | 0 |
| 19 | 3 | 0 | 544 | 383 | 71 | 0 |
| 20 | 3 | 2 | 646 | 316 | 34 | 0 |
| 21 | 3 | 16 | 725 | 242 | 13 | 0 |
| 22 | 3 | 70 | 725 | 176 | 8 | 0 |
| 23 | 3 | 160 | 659 | 143 | 2 | 0 |
| 24 | 3 | 253 | 615 | 111 | 2 | 1 |
| 25 | 3 | 321 | 552 | 106 | 5 | 0 |
| 26 | 3 | 366 | 534 | 92 | 1 | 1 |
| 27 | 3 | 421 | 492 | 79 | 4 | 0 |
| 28 | 3 | 397 | 499 | 94 | 7 | 1 |
| 29 | 3 | 386 | 531 | 76 | 6 | 0 |
| 30 | 3 | 360 | 552 | 83 | 4 | 0 |
| 31 | 3 | 345 | 562 | 86 | 7 | 0 |
| 32 | 3 | 359 | 530 | 105 | 4 | 1 |
| 33 | 3 | 326 | 540 | 120 | 13 | 0 |
| 34 | 3 | 353 | 522 | 115 | 10 | 0 |
| 35 | 3 | 337 | 554 | 103 | 6 | 0 |
| 36 | 3 | 327 | 561 | 100 | 11 | 0 |
| 37 | 3 | 343 | 520 | 128 | 9 | 0 |

Peaks ($\geq 5\%$) im Intervall $[-0.5, 0.5] \cong [1242\text{cm}^{-1}, 1178\text{cm}^{-1}]$:

| Filter | ex. | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
|--------|-----|----|-----|------|-----|-----|-----|----|----|----|---|----|----|
| 6 | 2 | 0 | 0 | 1000 | 0 | – | – | – | – | – | – | – | – |
| 7 | 2 | 0 | 0 | 1000 | 0 | 0 | – | – | – | – | – | – | – |
| 8 | 2 | 0 | 0 | 1000 | 0 | 0 | 0 | – | – | – | – | – | – |
| 9 | 2 | 0 | 0 | 999 | 1 | 0 | 0 | 0 | – | – | – | – | – |
| 10 | 2 | 0 | 0 | 806 | 188 | 0 | 0 | 0 | 0 | – | – | – | – |
| 11 | 3 | 0 | 2 | 729 | 264 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | – | – | – |
| 12 | 3 | 0 | 7 | 576 | 409 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | – | – |
| 13 | 3 | 0 | 9 | 645 | 337 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | – |
| 14 | 3 | 0 | 17 | 616 | 339 | 13 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15 | 3 | 0 | 51 | 560 | 333 | 32 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 3 | 0 | 103 | 347 | 424 | 73 | 19 | 10 | 2 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 17 | 3 | 0 | 169 | 220 | 427 | 121 | 32 | 19 | 3 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | 3 | 0 | 302 | 184 | 305 | 137 | 36 | 25 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 19 | 3 | 0 | 345 | 212 | 200 | 136 | 62 | 18 | 13 | 10 | 1 | 0 | 1 |
| 20 | 3 | 0 | 241 | 306 | 203 | 161 | 51 | 19 | 4 | 12 | 1 | 0 | 0 |
| 21 | 3 | 0 | 236 | 303 | 225 | 145 | 58 | 21 | 3 | 3 | 1 | 1 | 0 |
| 22 | 3 | 0 | 209 | 291 | 262 | 133 | 53 | 24 | 5 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 23 | 3 | 3 | 207 | 285 | 262 | 137 | 43 | 24 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 3 | 5 | 229 | 297 | 258 | 119 | 50 | 16 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 3 | 5 | 209 | 321 | 226 | 153 | 49 | 18 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | 3 | 12 | 216 | 313 | 242 | 129 | 57 | 18 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 27 | 3 | 4 | 226 | 297 | 248 | 131 | 63 | 13 | 12 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 28 | 4 | 6 | 193 | 280 | 278 | 156 | 53 | 24 | 4 | 3 | 1 | 0 | 0 |
| 29 | 3 | 5 | 176 | 272 | 280 | 171 | 72 | 13 | 8 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 30 | 3 | 9 | 166 | 261 | 295 | 157 | 74 | 25 | 10 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 31 | 4 | 4 | 155 | 256 | 283 | 184 | 82 | 28 | 7 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 32 | 4 | 4 | 160 | 262 | 276 | 178 | 75 | 35 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 33 | 3 | 6 | 144 | 255 | 268 | 188 | 81 | 39 | 13 | 5 | 0 | 0 | 0 |
| 34 | 4 | 7 | 147 | 251 | 266 | 169 | 94 | 46 | 15 | 4 | 0 | 1 | 0 |
| 35 | 4 | 12 | 144 | 217 | 275 | 197 | 88 | 47 | 13 | 5 | 1 | 1 | 0 |
| 36 | 4 | 3 | 123 | 229 | 265 | 211 | 103 | 44 | 11 | 9 | 1 | 0 | 0 |
| 37 | 3 | 9 | 127 | 244 | 242 | 200 | 116 | 43 | 13 | 4 | 2 | 0 | 0 |

Es ist möglich, daß die hier ermittelten exakten Werte sich von den Werten, welche das im Anhang beschriebene Programm liefert, unterscheiden. Das ist auf variierende Rechnergenauigkeiten zurückzuführen. In der Regel ist das Endergebnis jedoch dennoch annähernd ident.

Bei der 1. Versuchsserie, bei der vom exakten Interferogramm ausgegangen wird, versagt das AIC-Kriterium, wenn nicht verrauscht wird, fast immer. Das ist darauf zurückzuführen, daß der *Burg*-Algorithmus bei theoretisch unbegrenzter Datenanzahl bereits nach dem 3. Rekursionsschritt abbricht. Da jedoch die Anzahl der Datenpunkte beschränkt ist, erhält man extrem kleine Werte für die b_i und f_i , mit denen der Algorithmus weiterrechnet. Dadurch wird der Wert des AIC Kriteriums instabil und nahezu zufällig. Für eine andere Rechnergenauigkeit erhält man deshalb ein völlig verschiedenes Ergebnis.

Auch für dieses Spektrum ist es möglich die Polzahlen als annähernd normalverteilt zu interpretieren und die Mittelwerte der einzelnen Testserien untereinander zu vergleichen. In folgender Tabelle sind wieder jene Abbruchstellen angeführt, für welche die Mittelwerte der Polzahlen signifikant verschieden sind, ausgehend von einem Signifikanzlevel von 99%:

| Testserien | Abbruchpunkte |
|-----------------------|---------------|
| 1. gegen 2. Testserie | 7(1)11, 15 |
| 1. gegen 3. Testserie | 7(1)15 |
| 2. gegen 3. Testserie | 7(1)15, 18 |

Wie aus den 3 Tabellen, in denen die Anzahl der Peaks im Intervall $[-0.125, 0.125]$ angeführt sind, hervorgeht, liefern Abbruchpunkte größer als 15 ohnehin falsche Ergebnisse und können deshalb ignoriert werden. Vergleicht man für kleinere Abbruchstellen die Anzahl der richtigen Ergebnisse der 2. und der 3. Testserie, so zeigt sich, daß ohne Basislinienkorrektur die Anzahl der korrekten Resultate deutlich höher ist, als mit Basislinienkorrektur. Das ist vor allem darauf zurückzuführen, daß bei Basislinienkorrektur die Polzahl mit dem AIC Kriterium im Schnitt zu klein geschätzt wird. Andererseits sind, selbst wenn man vom exakten Interferogramm ausgeht (1. Testserie), die Ergebnisse kaum besser als bei der Testserie ohne Basislinienkorrektur (2. Testserie).

Bei der Behandlung eines derart beschaffenen Dreibandenspektrums empfiehlt es sich daher entweder auf eine Basislinienkorrektur zu verzichten, oder

eine Basislinienkorrektur durchzuführen, dann aber die Polzahl selbstständig ein wenig zu erhöhen.

Auf den folgenden Seiten findet sich eine Anzahl von graphisch aufbereiteten Ergebnissen der Maximum Entropie Methode für dieses Dreibandenspektrum. Zur Erstellung dieser Graphiken wurde das im Anhang beschriebene Programm verwendet. Dabei wurde die Polzahl nicht nur mit dem AIC Kriterium bestimmt, sondern fallweise auch im vorhinein festgelegt. Steht in der Spalte AIC *Ja* ist die Polzahl die mit dem AIC Kriterium geschätzte. BLK steht für Basislinienkorrektur.

| Bild | M | AIC | Filter | BLK | SNR |
|------------|-----|------|----------|------|------|
| Bild 5.5 | 4 | Ja | 0.04(11) | Nein | Nein |
| Bild 5.6 | 2 | Ja | 0.04(11) | Ja | Nein |
| Bild 5.7 | 6 | Nein | 0.04(11) | Nein | Nein |
| Bild 5.8 | 6 | Nein | 0.04(11) | Ja | Nein |
| Bild 5.9 | 8 | Nein | 0.04(11) | Nein | Nein |
| Bild 5.10 | 8 | Nein | 0.04(11) | Ja | Nein |
| Bild 5.11 | 4 | Ja | 0.05(13) | Nein | Nein |
| Bild 5.12 | 4 | Ja | 0.05(13) | Ja | Nein |
| Bild 5.13 | 6 | Nein | 0.05(13) | Nein | Nein |
| Bild 5.14 | 6 | Nein | 0.05(13) | Ja | Nein |
| Bild 5.15 | 8 | Nein | 0.05(13) | Nein | Nein |
| Bild 5.16 | 8 | Nein | 0.05(13) | Ja | Nein |
| Bild 5.17 | 4 | Ja | 0.06(16) | Nein | Nein |
| Bild 5.186 | 4 | Ja | 0.06(16) | Ja | Nein |
| Bild 5.19 | 6 | Nein | 0.06(16) | Nein | Nein |
| Bild 5.20 | 6 | Nein | 0.06(16) | Ja | Nein |
| Bild 5.21 | 8 | Nein | 0.06(16) | Nein | Nein |
| Bild 5.22 | 8 | Nein | 0.06(16) | Ja | Nein |

Bild 5.5

Bild 5.6

Bild 5.7

Bild 5.8

Bild 5.9

Bild 5.10

Bild 5.11

Bild 5.12

Bild 5.13

Bild 5.14

Bild 5.15

Bild 5.16

Bild 5.17

Bild 5.18

Bild 5.19

Bild 5.20

Bild 5.21

Bild 5.22

Für die 3 getesteten Abbruchpunkte 0.04, 0.05 und 0.06 liefert der mittlere eindeutig die besten Ergebnisse. Das läßt die Vermutung zu, daß es eine Abbruchsstelle geben muß bis zu der das Ergebnis besser wird, darüber hinaus die Qualität der Berechnung jedoch wieder abnimmt. Die Basislinienkorrektur hat den Effekt, daß die rekonstruierten Banden breiter werden und ist deshalb nicht zu empfehlen. Es darf jedoch nicht vergessen werden, daß die Spektren der letzten 3 Seiten unverrauscht waren und daß bei verrauschten Spektren fallweise eine Basislinienkorrektur dennoch bessere Resultate bringen kann.

Obwohl das AIC Kriterium die Polzahl fast durchwegs mit 4 schätzt, liefert $M = 8$ wesentlich bessere Ergebnisse.

Auf den folgenden Seiten finden sich Serien von Spektren, die verrauscht wurden. Dabei wurde dreimal verschieden zufällig mit $SNR = 200$ verrauscht (a, b und c). Die 3 linken Spektren einer jeden Seite sind nicht basislinienkorregiert, die rechten schon, wobei das Rauschen das selbe des linken Bildes ist. Die Bilder a, b und c unterscheiden sich untereinander nur durch verschiedenes Rauschen. Die Polzahl wird im vorhinein festgelegt. In allen Fällen wird das Interferogramm durch diskrete Fouriertransformation erhalten.

| Bild | M | AIC | Filter | BLK | SNR |
|-----------|-----|------|----------|------|-----|
| Bild 5.23 | 8 | Nein | 0.04(11) | Nein | 200 |
| Bild 5.24 | 8 | Nein | 0.04(11) | Ja | 200 |
| Bild 5.25 | 8 | Nein | 0.05(13) | Nein | 200 |
| Bild 5.26 | 8 | Nein | 0.05(13) | Ja | 200 |
| Bild 5.25 | 8 | Nein | 0.06(16) | Nein | 200 |
| Bild 5.26 | 8 | Nein | 0.06(16) | Ja | 200 |

Die nachstehenden Abbildungen zeigen, daß die Maximum Entropie Methode numerisch sehr instabil ist und deshalb stark durch Datenungenauigkeiten oder Rauschen beeinflußt werden kann. Verschiedenes Rauschen, auch wenn es von der Struktur her gleich ist, liefert völlig verschiedene Ergebnisse. Es zeigt sich ferner, daß bei ungeeigneter Parameterwahl (insbesondere bei einem zu großen Filterabbruchpunkt oder einer zu kleinen Polzahl) die Methode falsche Resultate liefern kann. Die drei verwendeten Rauschen a, b und c finden sich im Anhang B.

Bild 5.23a

Bild 5.24a

Bild 5.23b

Bild 5.24b

Bild 5.23c

Bild 5.24c

Bild 5.25a

Bild 5.26a

Bild 5.25b

Bild 5.26b

Bild 5.25c

Bild 5.26c

Bild 5.27a

Bild 5.28a

Bild 5.27b

Bild 5.28b

Bild 5.27c

Bild 5.28c

Ein immer wieder auftretendes Problem ist die Anzahl der Datenpunkte. Bei den bisherigen Versuchsserien wurde stets von einer 2er Potenz von Datenpunkten ausgegangen. Ist die Anzahl der Datenpunkte keine reine 2er Potenz, so wird die diskrete Fouriertransformation derart rechenaufwendig, daß sie in absehbarer Zeit nicht mehr durchgeführt werden kann. Darum hilft man sich damit, indem man beidseitig auf eine 2er Potenz von Datenpunkten auffüllt. Dieses Auffüllen kann entweder mit den entsprechenden Randwerten oder mit 0en geschehen. Bei den folgenden Ausdrucken wurde zwar die Digitalisierungslänge weiter konstant 0.25cm^{-1} belassen, das Spektrum jedoch beidseitig zu einem Spektrum mit 384 Punkten verlängert. Daher muß vor diskreter Fouriertransformation auf 512 Punkte aufgefüllt werden. *R* bedeutet, daß mit den Randwerten aufgefüllt wurde, *0*, daß mit 0en aufgefüllt wurde. Wird eine Basislinienkorrektur durchgeführt, so sind beide Arten des Auffüllens ident. Was das Auffüllen für Effekte liefert werden die folgenden Seiten zeigen.

| Bild | <i>M</i> | AIC | Filter | BLK | Fill | SNR |
|-----------|----------|------|--------|------|------|------|
| Bild 5.29 | 7 | Ja | 0.04 | Nein | R | Nein |
| Bild 5.30 | 16 | Nein | 0.04 | Nein | R | Nein |
| Bild 5.31 | 5 | Ja | 0.04 | Nein | 0 | Nein |
| Bild 5.32 | 16 | Nein | 0.04 | Nein | 0 | Nein |
| Bild 5.33 | 2 | Ja | 0.04 | Ja | – | Nein |
| Bild 5.34 | 16 | Nein | 0.04 | Ja | – | Nein |
| Bild 5.35 | 7 | Ja | 0.05 | Nein | R | Nein |
| Bild 5.36 | 16 | Nein | 0.05 | Nein | R | Nein |
| Bild 5.37 | 6 | Ja | 0.05 | Nein | 0 | Nein |
| Bild 5.38 | 16 | Nein | 0.05 | Nein | 0 | Nein |
| Bild 5.39 | 3 | Ja | 0.05 | Ja | – | Nein |
| Bild 5.40 | 16 | Nein | 0.05 | Ja | – | Nein |
| Bild 5.41 | 8 | Ja | 0.06 | Nein | R | Nein |
| Bild 5.42 | 16 | Nein | 0.06 | Nein | R | Nein |
| Bild 5.43 | 5 | Ja | 0.06 | Nein | 0 | Nein |
| Bild 5.44 | 16 | Nein | 0.06 | Nein | 0 | Nein |
| Bild 5.45 | 5 | Ja | 0.06 | Ja | – | Nein |
| Bild 5.46 | 16 | Nein | 0.06 | Ja | – | Nein |

Bild 5.29

Bild 5.30

Bild 5.31

Bild 5.32

Bild 5.33

Bild 5.34

Bild 5.35

Bild 5.36

Bild 5.37

Bild 5.38

Bild 5.39

Bild 5.40

Bild 5.41

Bild 5.42

Bild 5.43

Bild 5.44

Bild 5.45

Bild 5.46

Wie die Abbildungen der vorangegangenen Seiten zeigen liefert die Methode trotz Auffüllen auf eine 2er Potenz ein recht brauchbares Ergebnis. Dabei sei allerdings vermerkt, daß es sich ausschließlich um unverrauschte Spektren gehandelt hat.

Es wird nun getestet, wie stark das Rauschen sein darf, damit die Maximum Entropie Methode noch ein zufriedenstellendes Ergebnis liefern kann. Um die Empfindlichkeit der Methode für Änderungen des Rauschens zu demonstrieren, werden für jeden Wert von SNR je drei Versuche mit unterschiedlichem Rauschen durchgeführt. Für die Polzahl und den Filterpunkt werden experimentell gute Werte ermittelt. Das selbe gilt auch für die Basislinienkorrektur.

| Bild | M | AIC | Filter | BLK | SNR |
|------------|-----|------|--------|------|------|
| Bild 5.47a | 8 | Nein | 0.06 | Nein | 1000 |
| Bild 5.48a | 8 | Nein | 0.05 | Nein | 500 |
| Bild 5.49a | 9 | Nein | 0.05 | Nein | 200 |
| Bild 5.50a | 8 | Nein | 0.04 | Nein | 100 |
| Bild 5.51a | 10 | Nein | 0.045 | Nein | 50 |
| Bild 5.52a | 6 | Nein | 0.03 | Nein | 20 |
| Bild 5.47b | 8 | Nein | 0.06 | Nein | 1000 |
| Bild 5.48b | 6 | Nein | 0.045 | Nein | 500 |
| Bild 5.49b | 7 | Nein | 0.045 | Nein | 200 |
| Bild 5.50b | 8 | Nein | 0.045 | Nein | 100 |
| Bild 5.51b | 9 | Nein | 0.045 | Nein | 50 |
| Bild 5.52b | 10 | Nein | 0.045 | Nein | 20 |
| Bild 5.47c | 10 | Nein | 0.06 | Nein | 1000 |
| Bild 5.48c | 8 | Nein | 0.05 | Nein | 500 |
| Bild 5.49c | 9 | Nein | 0.05 | Nein | 200 |
| Bild 5.50c | 10 | Nein | 0.05 | Nein | 100 |
| Bild 5.51c | 9 | Nein | 0.045 | Nein | 50 |
| Bild 5.52c | 9 | Nein | 0.04 | Nein | 20 |

Bild 5.47a

Bild 5.48a

Bild 5.49a

Bild 5.50a

Bild 5.51a

Bild 5.52a

Bild 5.47b

Bild 5.48b

Bild 5.49b

Bild 5.50b

Bild 5.51b

Bild 5.52b

Bild 5.47c

Bild 5.48c

Bild 5.49c

Bild 5.50c

Bild 5.51c

Bild 5.52c

Das hier behandelte Dreibandenspektrum ist zwar nur ein Representant für alle möglichen Spektren, doch ist es genügend allgemein gehalten, als daß auch generelle Rückschlüsse auf die Verwendbarkeit der Maximum Entropie Methode gemacht werden können. Ich möchte deshalb abschließend alle gemachten Beobachtungen zusammenfassen.

Die 3 Testserien am Anfang haben gezeigt, daß im Allgemeinen auch bei nur mäßig verrauschten Spektren die durch das AIC Kriterium geschätzte Polzahl deutlich zu klein ist. Insbesondere bei einem basislinienkorregierten Spektrum ist dieser Effekt besonders extrem zu beobachten. Das hat zur Folge, daß in sehr vielen Fällen nicht alle Banden aufgelöst werden können.

Die Bilder 5.5 bis 5.22 zeigen, daß auch bei unverrauschten Spektren die Polzahl zu klein geschätzt wird. Auch hier ist zu beobachten, daß ein nicht basislinienkorregiertes Spektrum besser aufgelöst wird als ein linear basislinienkorregiertes.

Wie verschiedenartig sich Rauschen auf das Ergebnis der Maximum Entropie Methode auswirken haben die Vergleiche der Bilder 5.23 bis 5.28 gezeigt. Bei Spektren, welche nicht durch eine 2er Potenz von Datenpunkten vorgegeben sind ist es gelegentlich notwendig beidseitig aufzufüllen. Die Bilderserie 5.29 bis 5.46 zeigt empirisch, daß das Auffüllen mit Randpunkten dem Auffüllen mit 0en vorzuziehen ist.

Zuguterletzt wurde zu einer Anzahl verschieden stark verrauschter Spektren eine gute Parameterwahl gesucht. Je stärker ein Spektrum verrauscht ist, desto kleiner muß der Filterpunkt gewählt werden, um das verfälschte Interferogramm abzuschneiden. Gleichzeitig muß jedoch die Polzahl vergrößert werden, um mit Hilfe des *Burg*-Algorithmus genügend viel Rauschen herausfiltern zu können. Da eine Verkleinerung des Filterabbruchpunktes gleichzeitig eine Beschränkung der Polzahl mit sich zieht, wird es immer schwieriger ein Spektrum korrekt aufzulösen, je stärker es verrauscht ist. Es hat sich gezeigt, daß ab einer gewissen Rauschstärke kein eindeutig interpretierbares Ergebnis erzielt werden konnte.

Kapitel 6

Die LOME P Methode

Diese Methode zur Auflösungserhöhung von IR-Spektren wurde erstmals 1991 von J. K. Kauppinen, D. J. Moffatt, M. R. Hollberg und H. H. Mantsch [7, 8, 9] vorgestellt. LOME P steht für *Line Shape Optimized Maximum Entropy Linear Prediction* und ist eine Kombination aus Fourier Self-Deconvolution (FSD) und Maximum Entropie Methode (MEM). *Linear Prediction* steht für die Interpolation der Zeitreihe auf deren unbekanntem Bereich mit Hilfe der durch den *Burg*-Algorithmus ermittelten Autokorrelationskoeffizienten.

6.1 Theorem der LOME P Methode

Geht man von einem im Frequenzbereich gegebenen Spektrum $S(\nu)$ aus, so wird zunächst, wie gehabt, durch inverse diskrete Fouriertransformation das entsprechende Interferogramm $I(x)$ ermittelt und dieses wie in Kapitel 2.2 besprochen durch das Interferogramm $I_0(x)$ eines geschätzten Linienprofils $S_0(\nu)$ mit Halbwertsbreite 2σ dividiert. Das so erhaltene Interferogramm $I'(x)$ besitzt eine Stelle L_t für die gilt, daß sämtliche Datenpunkte links von L_t relevante Informationen des Spektrums enthalten, wogegen bei den Datenpunkten rechts von L_t das Rauschen des Spektrums jede brauchbare Information überlagert. Bezeichnet Δx die Digitalisierungslänge des Interferogramms, so läßt sich aus

$$L_t = M\Delta x \tag{6.1}$$

die Anzahl der Datenpunkte M links vom Abbruchpunkt L_t bestimmen. Aus diesen Datenpunkten $I_n, n = 0(1)(M - 1)$ werden mit Hilfe des *Burg*-Algorithmus die Autokorrelationskoeffizienten $c_i, i = 1(1)(M)$ bestimmt, mit denen gemäß

$$I_n^{(f)} = - \sum_{k=1}^M c_k^{(M)} I_{n-k} \quad n = M, \dots, N - 1 \quad (6.2)$$

die Datenpunkte rechts vom Abbruchpunkt L_t interpoliert werden. Das so erhaltene "verlängerte" Interferogramm wird schließlich wie bei der FSD Methode (siehe [5, 6]) mit einer Apodisationsfunktion multipliziert, wobei sich besonders die Besselfunktion anbietet.

$$A(x) = I_{[-L_f; L_f]}(x) \left(1 - \left(\frac{x}{L_f} \right)^2 \right)^2 \quad (6.3)$$

$$\mathcal{F}A(\nu) = 16L_f \left(-\frac{\sin(2\pi\nu L_f)}{(2\pi\nu L_f)^3} - 3\frac{\cos(2\pi\nu L_f)}{(2\pi\nu L_f)^4} + 3\frac{\sin(2\pi\nu L_f)}{(2\pi\nu L_f)^5} \right) \quad (6.4)$$

$$\Delta_{\nu_{\frac{1}{2}}} \approx \frac{1.904}{2L_f} \quad (6.5)$$

Dabei ist $\Delta_{\nu_{\frac{1}{2}}}$ die Halbwertsbreite der Funktion $\mathcal{F}A(\nu)$. Daraus ergibt sich für den Bandenverschmälerungsfaktor K der Bruch

$$K = \frac{2\sigma}{\Delta_{\nu_{\frac{1}{2}}}} = \frac{2\sigma}{\frac{1.904}{2L_f}}, \quad (6.6)$$

wobei 2σ die geschätzte Halbwertsbreite der Banden des unverbesserten Spektrums $S(\nu)$ ist. Durch Umformung erhält man daraus L_f .

$$L_f = \frac{0.952K}{2\sigma}. \quad (6.7)$$

Im Gegensatz zur FSD Methode, wo der Bandenverschmälerungsfaktor K mit zirka 5 begrenzt ist, können bei der LOMEF Methode K -Wert bis über 20 verwendet werden. Das apodisierte verbesserte Interferogramm muß letztendlich noch durch eine diskrete Fouriertransformation in den Frequenzbereich zurückgeführt werden.

Wie die Theorie der LOMEPE Methode zeigt, ist es lediglich notwendig zwei Parameter zu schätzen, den Abbruchpunkt L_f und den Bandenverschmälerungsfaktor K , aus dem sich letztendlich die zu interpolierende Gesamtlänge L_f des Interferogramms ergibt. Während ein optimales K verhältnismäßig schwer zu bestimmen ist, gibt es für den Abbruchpunkt L_f ein recht brauchbares Kriterium. Dabei werden die nach rechts hin errechneten Datenpunkte $I_n^{(f)}$, $n = M(1)(2M - 1)$ verwendet, um die bekannten Datenpunkte links von L_f zu interpolieren.

$$I_n^{(b)} = - \sum_{k=1}^M \overline{c_k^{(M)}} x_{n+k} \quad n = 0(1)(M - 1) \quad (6.8)$$

Je kleiner der Fehler zwischen den ursprünglichen I_n , $n = 0(1)(M - 1)$ und den interpolierten $I_n^{(b)}$, $n = 0(1)(M - 1)$ ist, desto besser wurde M gewählt. Als Qualitätsfaktor q der LOMEPE Methode empfiehlt sich daher folgender normalisierter Ausdruck:

$$q = 1 - \frac{\sqrt{\frac{\sum_{n=1}^{M-1} |I_n^{(b)} - I_n|^2}{M}}}{\sqrt{\frac{\sum_{n=1}^{M-1} |I_n|^2}{M}}} = 1 - \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^{M-1} |I_n^{(b)} - I_n|^2}{\sum_{n=1}^{M-1} |I_n|^2}} \quad (6.9)$$

Je näher q bei 1 liegt, desto besser wurde interpoliert. Es gilt also q zu maximieren. Das dies nicht immer einfach ist, zeigt das nächste Kapitel.

6.2 Der LOMEPE Qualitätsfaktor q

Ich habe für verschiedene Spektren jeweils drei Versuchsserien zu je 1000 Versuchen durchgeführt, wobei wie in den vorangegangenen Kapiteln sowohl das exakte, als auch das durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm verrauscht wurde. Im Fall der diskreten Fouriertransformation wurde die Versuchsserie ein zweites Mal mit Basislinienkorrektur durchgeführt. In den folgenden Tabellen finden sich neben Mittelwert m und Standardabweichung s des Qualitätsfaktors q auch dessen minimaler und maximaler Wert. In der letzten Spalte steht die Anzahl der Fälle, für die bei gegebenem M q den maximalen Wert über alle möglichen Polzahlen bis einschließlich 60 annimmt.

6.2.1 Einbandenspektrum

Der erste Fall zur Untersuchung des Qualitätsfaktors q ist wieder eine einfache Lorentzbande. Die Daten dazu sind die selben wie in Kapitel 5.4.1.

| | |
|--------------|---------------|
| Intervall | $[-0.5, 0.5[$ |
| Peakposition | 0 |
| 2σ | 0.05 |
| Bandenprofil | 100% Lorentz |
| SNR | 100 |
| Punkteanzahl | 256 |

Die exakten Ergebnisse, welche ohne Verrauschen der entsprechenden Interferogramme zustandekommen, lauten:

| Versuchsserie | M | q |
|------------------|------|-----|
| 1. Versuchsserie | 1 | 1 |
| 2. Versuchsserie | > 60 | 1 |
| 3. Versuchsserie | > 60 | 1 |

Es ist zu beachten, daß in der 1. Versuchsserie, dem Fall des exakten Interferogramms, der *Burg*-Algorithmus bereits nach dem ersten Iterationsschritt abbricht und deshalb keine Polzahl größer als 1 erreicht werden kann.

1. Testserie

Das exakte Interferogramm wird verrauscht.

| M | m | s | min q | max q | Opt. |
|------|----------|----------|----------|----------|------|
| 1 | 0.999886 | 0.000162 | 0.998828 | 1 | 248 |
| 2 | 0.998207 | 0.002498 | 0.982201 | 1 | 62 |
| 3 | 0.997920 | 0.002697 | 0.982098 | 1 | 66 |
| 4 | 0.997961 | 0.002310 | 0.985890 | 1 | 37 |
| 5 | 0.997882 | 0.002334 | 0.982860 | 1 | 39 |
| 6 | 0.997873 | 0.002272 | 0.987041 | 1 | 31 |
| 7 | 0.997954 | 0.002279 | 0.983651 | 1 | 34 |
| 8 | 0.997700 | 0.002797 | 0.977214 | 1 | 40 |
| 9 | 0.997502 | 0.002874 | 0.979020 | 1 | 24 |
| 10 | 0.997473 | 0.002962 | 0.980767 | 1 | 40 |
| 11 | 0.997184 | 0.003261 | 0.973690 | 1 | 36 |
| 12 | 0.996907 | 0.003548 | 0.971391 | 1 | 32 |
| 13 | 0.996437 | 0.004043 | 0.966342 | 1 | 32 |
| 14 | 0.995727 | 0.004877 | 0.960104 | 1 | 26 |
| 15 | 0.994852 | 0.005439 | 0.967579 | 1 | 20 |
| 16 | 0.994244 | 0.006569 | 0.956564 | 1 | 22 |
| 17 | 0.992530 | 0.008132 | 0.933193 | 1 | 14 |
| 18 | 0.992430 | 0.008216 | 0.947276 | 1 | 18 |
| 19 | 0.990286 | 0.010182 | 0.927397 | 1 | 18 |
| 20 | 0.988964 | 0.011353 | 0.934230 | 1 | 20 |
| 21 | 0.986189 | 0.014059 | 0.918474 | 1 | 13 |
| 22 | 0.983591 | 0.016086 | 0.910665 | 1 | 8 |
| 23 | 0.980498 | 0.018904 | 0.884782 | 0.999999 | 4 |
| 24 | 0.977179 | 0.022655 | 0.870536 | 1 | 13 |
| 25 | 0.973383 | 0.025505 | 0.847899 | 1 | 7 |
| 26 | 0.969298 | 0.031863 | 0.817489 | 1 | 8 |
| 27 | 0.962244 | 0.035510 | 0.803528 | 0.999999 | 5 |
| 28 | 0.957874 | 0.038093 | 0.756931 | 1 | 6 |
| 29 | 0.950433 | 0.045111 | 0.725964 | 1 | 9 |
| 30 | 0.941063 | 0.051973 | 0.705974 | 1 | 9 |
| > 30 | | | | | 59 |

2. Testserie

Das durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird ver-
rauscht.

| M | m | s | $\min q$ | $\max q$ | Opt. |
|------|----------|----------|----------|----------|------|
| 1 | 0.998499 | 0.000804 | 0.995488 | 0.999930 | 4 |
| 2 | 0.983448 | 0.009460 | 0.955458 | 0.999996 | 5 |
| 3 | 0.991140 | 0.007729 | 0.963701 | 1 | 44 |
| 4 | 0.995312 | 0.005259 | 0.975493 | 1 | 49 |
| 5 | 0.997221 | 0.003405 | 0.982520 | 1 | 61 |
| 6 | 0.997875 | 0.002356 | 0.981393 | 1 | 69 |
| 7 | 0.998124 | 0.002084 | 0.983107 | 1 | 65 |
| 8 | 0.998046 | 0.002168 | 0.981860 | 1 | 52 |
| 9 | 0.997812 | 0.002407 | 0.982497 | 1 | 57 |
| 10 | 0.997606 | 0.002674 | 0.982903 | 1 | 63 |
| 11 | 0.997314 | 0.002994 | 0.982096 | 1 | 40 |
| 12 | 0.996952 | 0.003365 | 0.976928 | 1 | 47 |
| 13 | 0.996575 | 0.003719 | 0.976158 | 1 | 34 |
| 14 | 0.996034 | 0.004521 | 0.959869 | 1 | 36 |
| 15 | 0.995546 | 0.005047 | 0.965493 | 1 | 31 |
| 16 | 0.994617 | 0.006029 | 0.954082 | 1 | 35 |
| 17 | 0.993036 | 0.007369 | 0.952538 | 1 | 31 |
| 18 | 0.992166 | 0.008361 | 0.940037 | 1 | 23 |
| 19 | 0.991002 | 0.009586 | 0.940695 | 1 | 37 |
| 20 | 0.989156 | 0.011673 | 0.934169 | 1 | 21 |
| 21 | 0.987591 | 0.013236 | 0.916700 | 1 | 26 |
| 22 | 0.984316 | 0.015765 | 0.904710 | 1 | 16 |
| 23 | 0.981509 | 0.019103 | 0.858280 | 1 | 16 |
| 24 | 0.977628 | 0.021866 | 0.883132 | 1 | 10 |
| 25 | 0.972331 | 0.027822 | 0.837877 | 1 | 13 |
| 26 | 0.969140 | 0.028875 | 0.823446 | 0.999999 | 10 |
| 27 | 0.964242 | 0.033652 | 0.812139 | 1 | 10 |
| 28 | 0.957875 | 0.039218 | 0.799010 | 0.999999 | 10 |
| 29 | 0.952023 | 0.043381 | 0.764961 | 0.999999 | 12 |
| 30 | 0.942233 | 0.050484 | 0.697268 | 1 | 6 |
| > 30 | | | | | 67 |

3. Testserie

Das nach linearer Basislinienkorrektur durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird verrauscht.

| M | m | s | $\min q$ | $\max q$ | Opt. |
|------|----------|----------|----------|----------|------|
| 1 | 0.994869 | 0.001578 | 0.988130 | 0.999244 | 0 |
| 2 | 0.956596 | 0.009892 | 0.925451 | 1 | 1 |
| 3 | 0.970832 | 0.011066 | 0.945221 | 0.999998 | 0 |
| 4 | 0.980650 | 0.010629 | 0.954957 | 0.999996 | 3 |
| 5 | 0.987312 | 0.009160 | 0.963930 | 1 | 9 |
| 6 | 0.992136 | 0.007254 | 0.969880 | 1 | 34 |
| 7 | 0.995085 | 0.005229 | 0.974228 | 1 | 47 |
| 8 | 0.996978 | 0.003632 | 0.977421 | 1 | 67 |
| 9 | 0.997573 | 0.002698 | 0.984822 | 1 | 61 |
| 10 | 0.997733 | 0.002374 | 0.983880 | 1 | 70 |
| 11 | 0.997452 | 0.002597 | 0.984396 | 1 | 52 |
| 12 | 0.997266 | 0.002907 | 0.982312 | 1 | 49 |
| 13 | 0.996972 | 0.003292 | 0.978626 | 1 | 55 |
| 14 | 0.996637 | 0.003610 | 0.975022 | 1 | 53 |
| 15 | 0.995908 | 0.004570 | 0.967047 | 1 | 48 |
| 16 | 0.995062 | 0.005390 | 0.965266 | 1 | 38 |
| 17 | 0.994325 | 0.006430 | 0.943320 | 1 | 34 |
| 18 | 0.993283 | 0.007626 | 0.943217 | 1 | 37 |
| 19 | 0.991956 | 0.008965 | 0.940120 | 1 | 35 |
| 20 | 0.990220 | 0.010873 | 0.936743 | 1 | 31 |
| 21 | 0.987676 | 0.013121 | 0.914447 | 0.999999 | 24 |
| 22 | 0.986150 | 0.015431 | 0.904159 | 1 | 37 |
| 23 | 0.982865 | 0.017963 | 0.879786 | 1 | 21 |
| 24 | 0.979842 | 0.020320 | 0.882070 | 1 | 18 |
| 25 | 0.975114 | 0.025412 | 0.848333 | 1 | 18 |
| 26 | 0.970983 | 0.028050 | 0.840169 | 0.999998 | 12 |
| 27 | 0.965449 | 0.032358 | 0.822779 | 1 | 10 |
| 28 | 0.960630 | 0.037327 | 0.808971 | 1 | 11 |
| 29 | 0.951328 | 0.043711 | 0.752059 | 1 | 12 |
| 30 | 0.944401 | 0.050702 | 0.747618 | 1 | 6 |
| > 30 | | | | | 107 |

Der Erwartungswert von q wird mit wachsender Polzahl immer kleiner. Die Maximalwerte von q sind hingegen für fast alle Werte M sehr nahe bei 1. Das beweist, daß die LOMEPEP Methode extrem empfindlich auf Rauschen reagiert. Allein die Zufälligkeit des Rauschens bewirkt, daß jeder mögliche M -Wert als optimaler M -Wert in Frage kommt. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein M -Wert der optimale ist, nimmt ab einem gewissen Wert für wachsendes M ab.

6.2.2 Dreibandenspektrum

Auch zur Untersuchung eines Dreibandenspektrums empfiehlt es sich jenes Spektrum herzunehmen, anhand dessen bereits der Einfluß des Rauschens auf das Ergebnis der Maximum Entropie Methode untersucht worden ist. Die genauen Daten dazu finden sich am Anfang des Kapitels 5.4.2. Auch zu diesem Spektrum wurden wieder 3 Versuchsreihen durchgeführt.

Die exakten Ergebnisse, welche ohne Verrauschen der entsprechenden Interferogramme zustandekommen, lauten:

| Versuchsserie | M | q |
|------------------|-----|----------|
| 1. Versuchsserie | 3 | 1 |
| 2. Versuchsserie | 15 | 0.999622 |
| 3. Versuchsserie | 13 | 0.999498 |

Genau wie beim Einbandenspektrum kann im ersten Fall die Polzahl nicht größer als die Bandenanzahl geschätzt werden, da der *Burg*-Algorithmus abbricht. Die anderen Ergebnisse wurden mit maximaler Rechnergenauigkeit erzielt.

1. Testserie

Das exakte Interferogramm wird verrauscht.

| M | m | s | $\min q$ | $\max q$ | Opt. |
|------|----------|----------|-----------|----------|------|
| 1 | 0.997508 | 0.001315 | 0.991870 | 0.999929 | 83 |
| 2 | 0.976742 | 0.006560 | 0.964443 | 0.999926 | 3 |
| 3 | 0.983090 | 0.016449 | 0.912820 | 1 | 74 |
| 4 | 0.991482 | 0.011525 | 0.914067 | 1 | 160 |
| 5 | 0.988963 | 0.013068 | 0.904369 | 1 | 115 |
| 6 | 0.982455 | 0.019865 | 0.848811 | 1 | 76 |
| 7 | 0.978390 | 0.024980 | 0.829285 | 1 | 89 |
| 8 | 0.974519 | 0.030189 | 0.732128 | 1 | 65 |
| 9 | 0.969043 | 0.035843 | 0.771896 | 1 | 47 |
| 10 | 0.959141 | 0.050014 | 0.619859 | 1 | 51 |
| 11 | 0.945258 | 0.061021 | 0.505380 | 1 | 38 |
| 12 | 0.937084 | 0.066557 | 0.588887 | 1 | 37 |
| 13 | 0.905807 | 0.092244 | 0.425320 | 1 | 31 |
| 14 | 0.875407 | 0.119427 | 0.270284 | 1 | 20 |
| 15 | 0.838372 | 0.154129 | 0.108979 | 0.999995 | 15 |
| 16 | 0.790900 | 0.187559 | 0.070999 | 1 | 9 |
| 17 | 0.757951 | 0.199704 | 0.028659 | 0.999999 | 11 |
| 18 | 0.711946 | 0.219340 | -0.104153 | 1 | 15 |
| 19 | 0.661807 | 0.232776 | -0.114211 | 1 | 7 |
| 20 | 0.617816 | 0.249210 | -0.088282 | 0.999999 | 7 |
| 21 | 0.597798 | 0.238646 | -0.035703 | 0.999998 | 11 |
| 22 | 0.563058 | 0.238019 | -0.136462 | 0.999978 | 3 |
| 23 | 0.542482 | 0.241379 | -0.014827 | 0.999995 | 5 |
| 24 | 0.532612 | 0.237602 | -0.184119 | 0.999904 | 1 |
| 25 | 0.517746 | 0.233441 | -0.115980 | 0.999354 | 1 |
| 26 | 0.516788 | 0.224924 | -0.224250 | 0.999998 | 5 |
| 27 | 0.505505 | 0.238041 | -0.193689 | 0.999997 | 2 |
| 28 | 0.504998 | 0.233585 | -0.133821 | 0.999450 | 0 |
| 29 | 0.484942 | 0.233007 | -0.152218 | 0.999999 | 3 |
| 30 | 0.472564 | 0.216227 | -0.236809 | 1 | 1 |
| > 30 | | | | | 15 |

2. Testserie

Das durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird ver-
rauscht.

| M | m | s | $\min q$ | $\max q$ | Opt. |
|------|----------|----------|-----------|----------|------|
| 1 | 0.997362 | 0.001344 | 0.991157 | 0.999997 | 90 |
| 2 | 0.970808 | 0.005071 | 0.956961 | 0.988807 | 0 |
| 3 | 0.968472 | 0.023856 | 0.885304 | 0.999999 | 36 |
| 4 | 0.973266 | 0.025477 | 0.884163 | 1 | 70 |
| 5 | 0.982915 | 0.019085 | 0.906999 | 1 | 79 |
| 6 | 0.986696 | 0.015238 | 0.893491 | 1 | 127 |
| 7 | 0.979095 | 0.023087 | 0.859270 | 1 | 91 |
| 8 | 0.974967 | 0.028289 | 0.777535 | 1 | 73 |
| 9 | 0.970541 | 0.035081 | 0.678146 | 1 | 67 |
| 10 | 0.959690 | 0.048073 | 0.617621 | 1 | 66 |
| 11 | 0.952982 | 0.055560 | 0.664700 | 1 | 49 |
| 12 | 0.936036 | 0.073332 | 0.558837 | 1 | 52 |
| 13 | 0.905721 | 0.092948 | 0.462459 | 0.999999 | 33 |
| 14 | 0.877044 | 0.124700 | 0.289164 | 1 | 25 |
| 15 | 0.823067 | 0.161603 | 0.163611 | 1 | 20 |
| 16 | 0.793743 | 0.187718 | 0.023719 | 1 | 27 |
| 17 | 0.739330 | 0.204599 | 0.040151 | 0.999959 | 11 |
| 18 | 0.715314 | 0.217271 | -0.013477 | 0.999991 | 12 |
| 19 | 0.667826 | 0.233554 | -0.129229 | 1 | 8 |
| 20 | 0.632513 | 0.236940 | -0.098559 | 1 | 9 |
| 21 | 0.590339 | 0.243740 | -0.152928 | 0.999996 | 7 |
| 22 | 0.562066 | 0.242555 | -0.150236 | 1 | 3 |
| 23 | 0.540940 | 0.241497 | -0.139394 | 0.999994 | 5 |
| 24 | 0.529208 | 0.229769 | -0.150402 | 0.999996 | 3 |
| 25 | 0.502653 | 0.231365 | -0.247838 | 0.999981 | 2 |
| 26 | 0.500282 | 0.233506 | -0.175896 | 1 | 3 |
| 27 | 0.503817 | 0.236753 | -0.114517 | 0.999997 | 6 |
| 28 | 0.492988 | 0.232241 | -0.222790 | 0.999958 | 2 |
| 29 | 0.487744 | 0.225868 | -0.142787 | 0.999511 | 0 |
| 30 | 0.493002 | 0.224788 | -0.172559 | 0.999974 | 2 |
| > 30 | | | | | 22 |

3. Testserie

Das nach linearer Basislinienkorrektur durch diskrete Fouriertransformation erhaltene Interferogramm wird verrauscht.

| M | m | s | $\min q$ | $\max q$ | Opt. |
|------|----------|----------|-----------|----------|------|
| 1 | 0.979681 | 0.003830 | 0.965581 | 0.990259 | 0 |
| 2 | 0.993483 | 0.005819 | 0.971082 | 1 | 133 |
| 3 | 0.990220 | 0.005983 | 0.968928 | 1 | 40 |
| 4 | 0.956853 | 0.028250 | 0.865230 | 0.999999 | 23 |
| 5 | 0.955852 | 0.036203 | 0.849075 | 1 | 47 |
| 6 | 0.979941 | 0.022883 | 0.880483 | 1 | 94 |
| 7 | 0.981637 | 0.021333 | 0.858294 | 1 | 105 |
| 8 | 0.975151 | 0.028250 | 0.797760 | 1 | 110 |
| 9 | 0.967158 | 0.037521 | 0.594119 | 1 | 63 |
| 10 | 0.959471 | 0.048220 | 0.674358 | 1 | 73 |
| 11 | 0.946617 | 0.059926 | 0.577639 | 1 | 61 |
| 12 | 0.935496 | 0.067945 | 0.601124 | 1 | 51 |
| 13 | 0.903568 | 0.095111 | 0.449186 | 1 | 26 |
| 14 | 0.873132 | 0.128900 | 0.263053 | 1 | 36 |
| 15 | 0.819004 | 0.165035 | 0.127312 | 0.999998 | 20 |
| 16 | 0.793789 | 0.180963 | 0.029180 | 0.999999 | 17 |
| 17 | 0.745447 | 0.212021 | -0.028770 | 0.999988 | 12 |
| 18 | 0.681668 | 0.230251 | -0.167602 | 1 | 11 |
| 19 | 0.671399 | 0.232213 | -0.045651 | 1 | 9 |
| 20 | 0.620495 | 0.245518 | -0.139472 | 0.999973 | 7 |
| 21 | 0.578032 | 0.243118 | -0.143252 | 0.999998 | 6 |
| 22 | 0.569416 | 0.243154 | -0.198098 | 0.999997 | 8 |
| 23 | 0.535361 | 0.235582 | -0.108931 | 0.999857 | 1 |
| 24 | 0.525725 | 0.242432 | -0.163229 | 0.999908 | 2 |
| 25 | 0.513016 | 0.242635 | -0.123533 | 0.999997 | 4 |
| 26 | 0.527536 | 0.230191 | -0.071271 | 0.999956 | 2 |
| 27 | 0.506928 | 0.229119 | -0.183292 | 0.999997 | 4 |
| 28 | 0.497631 | 0.229089 | -0.221784 | 0.999986 | 3 |
| 29 | 0.476616 | 0.230555 | -0.240650 | 0.999962 | 4 |
| 30 | 0.480176 | 0.215328 | -0.096603 | 0.999973 | 2 |
| > 30 | | | | | 26 |

Für das Dreibandenspektrum gilt grundsätzlich alles, was bereits für das Einbandenspektrum festgestellt worden ist. Daß der minimale Wert für q in vielen Fällen negativ ist, ist nicht weiter bedenklich.

Diese bislang durchgeführten Testserien geben zwar Aufschluß über das Verhalten des Qualitätsfaktors und über die Verteilung der optimalen Polzahlen, nicht jedoch über das Ergebnis selbst.

Auf den folgenden Seiten finden sich mehrere Ergebnisse der LOMEPE Methode. Bei Versuchen mit dem im Anhang A beschriebenen Programm hat sich gezeigt, daß die über den Qualitätsfaktor q geschätzte Polzahl M tatsächlich das beste Ergebnis liefert. Deshalb wird durchwegs dieser Wert verwendet.

Die ersten Bilder zeigen die Veränderung des Ergebnissen bei Variation des Bandenverschmälerungsfaktors K .

| Bild | K | M | BLK | SNR |
|-----------|------|-----|------|------|
| Bild 6.1 | 2 | 14 | Nein | Nein |
| Bild 6.2 | 4 | 14 | Nein | Nein |
| Bild 6.3 | 6 | 14 | Nein | Nein |
| Bild 6.4 | 7 | 14 | Nein | Nein |
| Bild 6.5 | 7.05 | 14 | Nein | Nein |
| Bild 6.6 | 7.1 | 14 | Nein | Nein |
| Bild 6.7 | 2 | 13 | Ja | Nein |
| Bild 6.8 | 4 | 13 | Ja | Nein |
| Bild 6.9 | 6 | 13 | Ja | Nein |
| Bild 6.10 | 7 | 13 | Ja | Nein |
| Bild 6.11 | 7.05 | 13 | Ja | Nein |
| Bild 6.12 | 7.1 | 13 | Ja | Nein |

Bild 6.1

Bild 6.2

Bild 6.3

Bild 6.4

Bild 6.5

Bild 6.6

Bild 6.7

Bild 6.8

Bild 6.9

Bild 6.10

Bild 6.11

Bild 6.12

Bei basislinienkorrigierten Spektren liefert die LOMEF Methode ein wenig ruhigere Ergebnisse als bei den entsprechenden Originalspektren. Die Auflösungserhöhung ist jedoch in beiden Fällen deutlich ersichtlich.

Viel interessanter ist jedoch die Tatsache, daß eine Erhöhung des Bandenverschmälerungsfaktors K sich lange nur sehr wenig auf das Ergebnis auswirkt, ab einem bestimmten Wert das Rauschen jedoch explosionsartig zunimmt. In diesem Fall liefern beispielsweise K -Wert zwischen 4 und 7 sehr schöne Ergebnisse und lösen die drei Banden eindeutig auf, beim Wert $K = 7.1$ ist das Ergebnis jedoch bereits aufgrund von Datenungenauigkeiten (durch die diskrete Fouriertransformation verursacht) derart verfälscht, daß keinerlei Aussagen über das ursprüngliche Spektrum gemacht werden können.

Als nächstes wird äquivalent zum 5. Kapitel das gegebene Spektrum ver-rauscht. Dabei werden wieder genau jene drei verschiedenen Rauschen a, b und c verwendet, die bereits bei der Maximum Entropie Methode verwendet wurden und die im Anhang B aufgelistet sind.

| Bild | K | M | BLK | SNR |
|------------|-----|-----|------|-----|
| Bild 6.13a | 2 | 8 | Nein | 500 |
| Bild 6.13b | 2 | 12 | Nein | 500 |
| Bild 6.13c | 2 | 14 | Nein | 500 |
| Bild 6.14a | 3 | 8 | Nein | 500 |
| Bild 6.14b | 3 | 12 | Nein | 500 |
| Bild 6.14c | 3 | 14 | Nein | 500 |
| Bild 6.15a | 4 | 8 | Nein | 500 |
| Bild 6.15b | 4 | 12 | Nein | 500 |
| Bild 6.15c | 4 | 14 | Nein | 500 |
| Bild 6.16a | 5 | 8 | Nein | 500 |
| Bild 6.16b | 5 | 12 | Nein | 500 |
| Bild 6.16c | 5 | 14 | Nein | 500 |

Bild 6.13a

Bild 6.14a

Bild 6.13b

Bild 6.14b

Bild 6.13c

Bild 6.14c

Bild 6.15a

Bild 6.16a

Bild 6.15b

Bild 6.16b

Bild 6.15c

Bild 6.16c

Erwartungsgemäß muß bei einem verrauschten Spektrum der Bandenverschmälerungsfaktor und damit der Filterabbruchspunkt gegenüber dem unverrauschten Spektrum verkleinert werden. Als Faustregel kann man annehmen, daß bei jeder Reduktion des Rauschens um einer 10er Potenz der K -Wert um 1 vergrößert werden kann.

Es ist zu beobachten, daß bei günstiger Wahl des Bandenverschmälerungsfaktors K die Banden sowohl an den richtigen Stellen, als auch, im Gegensatz zur Maximum Entropie Methode, mit den richtigen Intensitäten aufgelöst werden. Zuletzt folgt noch eine Bildserie, in der die Intensität der drei gegebenen Rauschen variiert wird.

| Bild | K | M | BLK | SNR |
|------------|-----|-----|------|------|
| Bild 6.17a | 4.5 | 10 | Nein | 1000 |
| Bild 6.18a | 4.1 | 8 | Nein | 500 |
| Bild 6.19a | 3.7 | 14 | Nein | 200 |
| Bild 6.20a | 3.7 | 12 | Nein | 100 |
| Bild 6.21a | 3.7 | 11 | Nein | 50 |
| Bild 6.22a | 3.7 | 4 | Nein | 20 |
| Bild 6.17b | 4.5 | 12 | Nein | 1000 |
| Bild 6.18b | 4.1 | 128 | Nein | 500 |
| Bild 6.19b | 4.1 | 6 | Nein | 200 |
| Bild 6.20b | 3.7 | 11 | Nein | 100 |
| Bild 6.21b | 2.1 | 4 | Nein | 50 |
| Bild 6.22b | 1.9 | 3 | Nein | 20 |
| Bild 6.17c | 4.5 | 9 | Nein | 1000 |
| Bild 6.18c | 4.1 | 14 | Nein | 500 |
| Bild 6.19c | 4.1 | 15 | Nein | 200 |
| Bild 6.20c | 3.7 | 11 | Nein | 100 |
| Bild 6.21c | 2.6 | 6 | Nein | 50 |
| Bild 6.22c | 3.7 | 10 | Nein | 20 |

Bild 6.17a

Bild 6.18a

Bild 6.19a

Bild 6.20a

Bild 6.21a

Bild 6.22a

Bild 6.17b

Bild 6.18b

Bild 6.19b

Bild 6.20b

Bild 6.21b

Bild 6.22b

Bild 6.17c

Bild 6.18c

Bild 6.19c

Bild 6.20c

Bild 6.21c

Bild 6.22c

Wird dieses Spektrum als genügend allgemein angesehen, so ist folgende Zusammenfassung der LOMEPE Methode zulässig:

Solange sich das Rauschen in Grenzen hält ($\text{SNR} \geq 1000$), hat die LOMEPE Methode keinerlei Probleme gute und richtige Ergebnisse zu liefern. Bei stärkerem Rauschen ist es zwar möglich durch Variation der diversen Parameter (einschließlich der Polzahl M) ein zufriedenstellendes Ergebnis zu erhalten. Das ist jedoch in der Praxis keine zulässige Methode. Typische Beispiele dafür sind vor allem die Bilder 6.19a und 6.21c, wo mit der mit dem Qualitätsfaktor q geschätzten Polzahl M einmal 4 und einmal nur 2 Banden gefunden werden, obwohl für andere Polzahlen sehr wohl jeweils 3 Banden gefunden werden können. Um die Polzahl M selbstständig schätzen zu können, müßte die Anzahl der Banden a-priori bekannt sein, was in der Regel jedoch nicht der Fall ist.

Ähnlich der Maximum Entropie Methode sind die Ergebnisse der LOMEPE Methode extrem abhängig vom Rauschen. Das zeigen die Bilder 6.17 bis 6.22 deutlich.

Letztendlich sollte jedoch erwähnt werden, daß das in der Praxis auftretende Rauschen ein Nebeneffekt der Meßgeräte ist, mit denen die IR-Spektren gemessen werden. Aus dem Aufbau solcher Geräte geht jedoch hervor, daß das Rauschen nicht völlig unabhängig ist. Dadurch ist es möglich zeitweilig auch stärker verrauschte Spektren mit den in dieser Arbeit besprochenen Methoden aufzulösen.

Anhang A

Das Programm

A.1 Allgemeines

Das Programm `Self-Deconvolution` ist eine `WINDOWS 3.1` Applikation, welche in der Programmiersprache `BORLAND C++ 3.1` unter Zuhilfenahme der darin definierten objektorientierten `Object Windows Language (OWL)` geschrieben wurde. Das bedeutet, daß das Programm nur unter `WINDOWS 3.1` oder einer neueren Version ausgeführt werden kann, nicht jedoch unter `MS-DOS`.

Aufgrund der hohen Rechenintensitäten, die bei gegebener Problemstellung auftreten, wird entweder ein 486er Prozessor, oder zumindest ein 386er mit Co-Prozessor dringendst empfohlen. Sollte ein Co-Prozessor installiert sein, so erkennt `WINDOWS` diesen automatisch.

Da das Programm zur Reduktion der Rechendauer einige Berechnungen im Hauptspeicher ablegt, ist ein Hauptspeicher von mindestens 6MB, besser jedoch von 8MB, erforderlich. Dadurch wird das zeitraubende Auslagern von Daten auf die Festplatte vermieden.

Das Programm besteht lediglich aus der Datei `SD.EXE`, welche 740032 Byte groß ist. Der gesamte Source Text ohne kompilierter Objectdateien, ohne `RES`-Datei und ohne von `BORLAND C++ 3.1` zur Verfügung gestellter Header-Dateien beträgt 266577 Byte. Eine genaue Aufzählung und Beschreibung der einzelnen Source Dateien findet sich im Abschnitt A.5.

Besteht Verwendung für das Programm, so ist es am besten beim Autor direkt beziehbar.

A.2 Installation und Starten

Um das Programm zu starten ist keine maschinenabhängige Programminstallation durchzuführen. Das Programm kann deshalb auch von Diskette aus aufgerufen werden.

Da dem Programm auch keinerlei Parameter übergeben werden müssen, kann es von WINDOWS unmittelbar durch Anklicken des Programmicons oder, sofern dieses noch in keinem Menüfenster aufgenommen worden ist, beispielsweise vom Dateimanager aus gestartet werden. Beim Aufnehmen des Programms in ein Menüfenster werden mehrere Icons zur Verfügung gestellt.

A.3 Eingabewerte

In diesem Abschnitt werden die zur Durchführung von Berechnungen notwendigen Parameter und Schalter erklärt.

FWHH

FWHH steht für *Full Width at Half High*. In mathematischen Formeln wird sie gewöhnlich mit 2σ bezeichnet. Dieser Parameter gibt die volle Breite auf halber Höhe der Linienprofilfunktion $I_0(x)$ an, durch die im Interferogramm-bereich dividiert werden soll, gemessen in cm^{-1} . Gibt man den Wert 0 ein, so wird ein passender Wert interpoliert.

Lorentzanteil

Mit diesem Parameter kann ein gewisser Prozentsatz des Lorentzlinienprofils, durch das dividiert werden soll, durch ein gaußsches Linienprofil ersetzt werden. Lorentzanteil ist ein Wert zwischen 0 und 1. 1 bedeutet reines Lorentzlinienprofil, 0 reines Gaußlinienprofil. Gemischt wird prozentuell additiv. Der vorgegebene Standardwert ist 1.

Bandenvershmälerungsfaktor K

Dieser Wert gibt an, um das wievielfache die Banden bei FSD und LOMEPP verkleinert werden sollen. Jede Erhöhung von K verstärkt die durch Rauschen zu erwartenden Artefakte. Aus K , der gewählten Apodisationsfunktion

und aus der Halbwertsbreite 2σ ergibt sich nach der Formel

$$L_f = \frac{2aK}{2\sigma} \quad (\text{A.1})$$

die Stelle L_f , bei der das Interferogramm abgebrochen wird. Wird dieser Wert L_f durch die Gesamtlänge des Interferogramms dividiert, erhält man den Filter, einen Wert aus $[0, 1[$. $2a$ ist eine Konstante, die nur von der Apodisationsfunktion abhängt.

| Apodisationsfunktion | $2a$ |
|----------------------|----------|
| Besselfunktion | 1.904 |
| Dreiecksfunktion | 1.771786 |
| Cosinusfunktion | 2.000 |
| Rechtecksfunktion | 1.206710 |

In der Regel ist bei der FSD Methode $K \leq 5$. Bei der LOMEF Methode können auch größere Werte für den Bandenverschmälerungsfaktor K verwendet werden.

Polzahl M

Die Polzahl M gibt bei der Maximum Entropie Methode die Anzahl der Autokorrelationskoeffizienten $(c_i)_{i=1(1)M}$ an, die mit dem *Burg*-Algorithmus berechnet werden sollen. Es handelt sich dabei um eine positive, ganze Zahl kleiner als 100. Wird 0 gewählt, so wird die optimale Polzahl zwischen 1 und 97 mit Hilfe des AIC Kriteriums ermittelt.

Minimale Polzahl, Maximale Polzahl

Diese beiden Parameter geben das Intervall an, aus dem bei der LOMEF Methode jene Polzahl ermittelt werden soll, für die der Qualitätsfaktor q einen maximalen Wert annimmt. Wird die minimale Polzahl gleich der maximalen Polzahl gesetzt, so wird mit diesem Wert die LOMEF Methode durchgeführt, unabhängig vom Qualitätsfaktor q .

Apodisationsfunktion

Unter diesem Punkt kann jene Funktion ausgesucht werden, mit der das Interferogramm vor Rücktransformation multipliziert werden soll, um Artefakte im Wellenlängenbereich zu unterdrücken. Zur Verfügung stehen neben

der Besselfunktion auch noch die Dreiecksfunktion, die Cosinusfunktion und die Rechtecksfunktion. In der Regel liefert die Besselfunktion das beste Ergebnis. Sie findet sich in Kapitel 6.1. Die drei anderen Apodisationsfunktionen können in [11] nachgeschlagen werden. Dieser Programmpunkt ist nur bei der FSD Methode verfügbar, bei der LOMEF Methode wird automatisch die Besselfunktion gewählt.

Filter

Der Wert Filter ist eine Zahl aus dem Intervall $[0, 1[$ und gibt jene Position im Verhältnis zur Gesamtlänge des Interferogramms an, bei der es abgeschnitten werden soll. Bei der MEM muß dieser Abbruchpunkt geschätzt werden, wogegen bei FSD und LOMEF der Filter aus dem Bandenversmälerrungsfaktor K , der gewählten Apodisationsfunktion und der Halbwertsbreite 2σ berechnet wird (siehe Bandenversmälerrungsfaktor K).

Bereichsstart, Bereichsende

Bei der Berechnung eines Interferogramms geben diese beiden Werte an, auf welchem Bereich das Interferogramm gezeichnet werden soll. Sie sind gegeben im Verhältnis zur Gesamtlänge des Interferogramms, und damit Werte aus dem Intervall $[0, 1[$.

Auffüllen

Mit diesem Schalter kann ausgewählt werden, ob bei einem Spektrum, welches nicht durch eine 2er Potenz von Datenpunkten gegeben ist, beidseitig mit 0en oder mit den entsprechenden Randwerten aufgefüllt werden soll, um eine diskrete Fouriertransformation durchführen zu können. Ist das Spektrum durch eine gerade Anzahl von Punkten gegeben, so wird beidseitig mit gleichvielen Datenpunkten auf eine 2er Potenz aufgefüllt, bei einer ungeraden Anzahl wird links mit einem Datenpunkt mehr aufgefüllt.

Basislinienkorrektur

Damit kann angegeben werden, ob vor einer Berechnung eine lineare Basislinienkorrektur des Spektrums durchgeführt werden soll. Wird eine lineare Basislinienkorrektur durchgeführt, so wird das Spektrum unabhängig vom Schalter *Auffüllen* beidseitig mit 0en aufgefüllt.

SNR

SNR steht für *Signal to Noise Ration* und gibt die Intensität an, mit der verrauscht werden soll. Verrauscht wird stets das Interferogramm mit komplexen weißen Rauschen. SNR ist das Verhältnis des Interferogramms an der Stelle 0 zur Standardabweichung des komplexen weißen Rauschens. Damit tatsächlich verrauscht wird, muß in der Dialogbox *Verrauschen* der Schalter auf *Ja* gesetzt werden.

A.4 Menüpunkte

Die Menüpunkte können durchgehend durch Anklicken mit der linken Maustaste ausgewählt werden. Genaueres über den Aufbau von **WINDOWS** Programmen findet sich im **WINDOWS** Handbuch. Unter anderem besteht die Möglichkeit Fenster zu vergrößern, zu verkleinern, oder sie als Icons übersichtlich anzuordnen.

Das Programm ist eine sogenannte **Multi Document Interface** (MDI) Anwendung. Das bedeutet, daß über dem Hauptfenster beliebig viele Unterfenster eröffnet werden können. Diese Unterfenster zeigen Spektren, Interferogramme, Vergrößerungen und mehr. Für alle Fenster gibt es jedoch nur eine Menüzeile vom Hauptfenster. Wird ein Menüpunkt ausgewählt, so bezieht sich dieser stets auf das aktuelle Fenster, welches durch einen blauen Rahmen gekennzeichnet ist.

Datei

Neu

Mit diesem Menüpunkt kann ein synthetisches Spektrum erstellt werden, daß in ein neu eröffnetes Fenster gezeichnet wird. Es ist darauf zu achten, daß sich bei der minimalen Wellenzahl kein Datenpunkt mehr befindet. Wird als Wellenlängenbereich beispielsweise $[1100\text{cm}^{-1}, 900\text{cm}^{-1}]$ und als Anzahl der Datenpunkt 100 angegeben, so beträgt die Digitalisierungslänge exakt 2cm^{-1} .

Öffnen

Hier wird ein in einer Datei gespeichertes Spektrum in ein neues Fenster

geladen. Die Syntax einer solchen Datei muß zeilenweise streng eingehalten werden, und lautet wie folgt:

| Beschreibung | Beispiel |
|------------------------------|-----------------------------|
| Spektrrenbezeichnung | Et3PO in CH Pkt. 2 (IFS 88) |
| maximale Wellenzahl | 1230.00 |
| minimale Wellenzahl | 1130.00 |
| Digitalisierungsintervall | 0.24096 |
| Schichtdicke | 0.0280 |
| Konzentration 1 | 0.32450 |
| Konzentration 2 | 0.0000 |
| Ordinatendehnungskoeffizient | 1 |
| 1. Datenpunkt | .0024000 |
| 2. Datenpunkt | .0024800 |
| 3. Datenpunkt | .0026000 |
| : | : |
| 414. Datenpunkt | 0.0131600 |
| 415. Datenpunkt | 0.0132000 |
| 416. Datenpunkt | 0.0132800 |
| Gerät | IFS 88 |
| Auflösung | 2.0 |
| Apodisierung | NB |
| Zerofilling | 8 |
| Scans | 2000 |
| Zellmaterial | CaF2 |
| Datum | 20.2.91 |

Um eine Berechnung durchführen zu können benötigt man jedoch lediglich maximale und minimale Wellenzahl, Digitalisierungsintervall und die Datenpunkte. Alle anderen Zeilen können beliebig beschrieben werden, müssen jedoch vorhanden sein. Die Anzahl der Datenpunkte errechnet sich aus der Differenz der maximalen und minimalen Wellenzahl, dividiert durch das Digitalisierungsintervall, plus 1. Die Syntax der gelesenen Datei wird nicht überprüft.

Sichern

Unter diesem Punkt kann ein synthetisch erstelltes Spektrum oder ein errechnetes Interferogramm gespeichert werden. Wird versucht ein geladenes

Spektrum zu speichern kommt eine Fehlermeldung. Es wird nicht überprüft, ob der gewählte Dateiname bereits existiert.

Drucken

Mit diesem Punkt besteht die Möglichkeit das aktuelle Spektrum auszudrucken. Dafür stehen folgende Optionen zur Verfügung:

Berechnung : Mit diesem Schalter kann bestimmt werden, ob die Berechnung zusätzlich zum Spektrum ausgedruckt werden soll. Ist keine Berechnung vorhanden, so wird dieser Punkt ignoriert. Das Originalspektrum wird standardmäßig ausgedruckt.

Gitterlinien : Bestimmt, ob Gitterlinien gezeichnet werden sollen. Die Standardvorgabe ist der aktuelle Wert des Bildschirmfensters.

Rand : Damit wird festgelegt, ob ein Rand um den gesamten Ausdruck gezeichnet werden soll.

Querformat : Ist dieser Schalter ausgewählt, so wird das Spektrum im Querformat gedruckt. Die linke obere Blattecke entspricht der linken unteren Ecke des Ausdrucks. Andernfalls wird im gewöhnlichen Hochformat gedruckt.

Spek Info : Dieser Schalter liefert, sofern er aktiviert ist, die maximale Information zum Spektrum und zur aktuellen Berechnung. Bei einem geladenen Spektrum gehören dazu u. a. sämtlichen in der Datei gespeicherten Daten, bei einem synthetischen Spektrum die ersten 4 eingegebenen Banden. Dieser Schalter inkludiert auch sämtliche Daten, die durch Auswahl von *Spek Calc* geliefert werden.

Spek Calc : Wird dieser Schalter gewählt und ist gleichzeitig *Spek Info* deaktiviert, so wird unter dem Spektrum eine kurze, zweizeilige Zusammenfassung der Berechnung ausgegeben.

Überschrift : Bestimmt, ob über dem Spektrum eine Überschrift angebracht werden soll. Bei einem geladenen Spektrum ist diese Überschrift der Dateiname mit vollständigem Pfad, im Fall eines synthetischen Spektrums die Anzahl der Banden.

Peaks : Ist dieser Schalter aktiviert, so werden sämtliche, am Bildschirm beschrifteten Peaks auch beim Ausdruck beschriftet.

Schriftfaktor : Gibt jenen Faktor an, mit dem die errechnete Größe der Beschriftung der Wellenzahlen, der Intensitäten und der Peaks multipliziert werden soll. Die Unterteilung der Beschriftung wird für die neue Schriftgröße neu errechnet. Dieser Faktor ist vor allem dann von Nutzen, wenn ein Spektrum für eine Publikation extrem verkleinert werden soll und dadurch die Beschriftung zu klein wird. Ein Schriftfaktor von beispielsweise 1.50 macht diese Beschriftung um die Hälfte größer. Andererseits ist für große Ausdrücke mit einem Schriftfaktor kleiner als 1 auch eine Verkleinerung der Schrift möglich. Dadurch wird u. a. die Unterteilung der Beschriftung feiner.

Positionieren : Das Programm enthält die Möglichkeit, den Ausdruck beliebig am Blatt zu positionieren, zu strecken und zu stauchen. *Bildposition horiz.* und *Bildposition vert.* geben dabei die relative Position der linken oberen Ecke (bei Querformat der linken unteren Ecke) des Ausdrucks im Verhältnis zur Blattbreite beziehungsweise Blattlänge an. *Bildlänge horizontal* und *Bildlänge vertikal* schließlich geben die relative Größe des Ausdrucks in die jeweilige Blattrichtung an, wieder im Verhältnis zur Gesamtblattgröße.

Bei einem mit \LaTeX geschriebenen Text empfiehlt es sich pro Seite 2 Spektren im Hochformat zu drucken. Nimmt man die Positionierungen der anschließenden Tabelle, so besteht die Möglichkeit unter beide Spektren jeweils folgendermaßen eine Textzeile in \LaTeX zu schreiben.

```
\newpage
~
\vspace{77mm}\\
Text zum 1.~Spektrum
\vspace{88mm}\\
Text zum 2.~Spektrum
\newpage
```

| | 1. Spektrum | 2. Spektrum |
|----------------------|-------------|-------------|
| Bildposition horiz. | 0.17 | 0.17 |
| Bildposition vert. | 0.15 | 0.475 |
| Bildlänge horizontal | 0.70 | 0.70 |
| Bildlänge vertikal | 0.275 | 0.275 |

Die Werte des 1. Spektrum sind die Standardwerte.

Berechnung

Die diversen Parameter und Schalter wurden bereits früher erklärt. Hier werden die Methoden noch einmal schlagwortartig zusammengefaßt.

Deconvolution

Durchführung einer Fourier Self-Deconvolution.

- Inverse Fouriertransformation eines Spektrums in sein Interferogramm.
- Division des Interferogramms durch ein Linienprofil.
- Multiplikation des dividierten Interferogramms mit einer Apodisationsfunktion.
- Fouriertransformation des apodisierten Interferogramms zurück in den Spektralbereich.
- Normierung des verbesserten Spektrums.

Maximum Entropie Methode

Durchführung einer Maximum Entropie Methode.

- Inverse Fouriertransformation eines Spektrums in sein Interferogramm.
- Division des Interferogramms durch ein Linienprofil.
- Bestimmung der Autokorrelationskoeffizienten mit Hilfe des *Burg*-Algorithmus. Dabei wird gegebenenfalls die optimale Polzahl mit Hilfe des AIC-Kriteriums bestimmt.
- Ermittlung des Powerspektrums aus den Autokorrelationskoeffizienten.

- Ermittlung des verbesserten Spektrums aus dem Powerspektrum.
- Normierung des verbesserten Spektrums.

LOMEP Methode

Durchführung einer Line Shape Optimized Maximum Entropy Linear Prediction Methode.

- Inverse Fouriertransformation eines Spektrums in sein Interferogramm.
- Division des Interferogramms durch ein Linienprofil.
- Bestimmung jener Polzahl M , für die der Qualitätsfaktor q maximal wird.
- Bestimmung der M Autokorrelationskoeffizienten aus den ersten $M + 1$ Punkten des dividierten Interferogramms.
- Interpolation der restlichen Punkte des Interferogramms mit Hilfe der Autokorrelationskoeffizienten.
- Multiplikation des interpolierten Interferogramms mit einer Apodisationsfunktion.
- Fouriertransformation des apodisierten Interferogramms zurück in den Spektralbereich.
- Normierung des verbesserten Spektrums.

Interferogramm

Mit diesem Menüpunkt wird das Interferogramm des im aktuellen Fenster ersichtlichen Spektrums gezeichnet. Dabei wird ein neues Fenster geöffnet. Die aktuelle Berechnung wird gelöscht.

Dividiertes Interferogramm

Mit diesem Menüpunkt wird das durch eine Linienprofilfunktion dividierte Interferogramm des im aktuellen Fenster ersichtlichen Spektrums gezeichnet. Dabei wird ein neues Fenster geöffnet. Die aktuelle Berechnung wird gelöscht.

Löschen

Bei Auswahl dieses Punktes wird die aktuelle Berechnung gelöscht. Das letzte berechnete Interferogramm bleibt jedoch intern gespeichert.

Sichern

Mit diesem Menüpunkt kann die aktuelle Berechnung in eine Datei geschrieben werden. Es wird nicht überprüft, ob der gewählte Dateiname bereits existiert.

Bearbeiten

Gitterlinien

Schaltet Gitterlinien ein und aus. Die Skalierung der Gitterlinien erfolgt automatisch.

Basislinienkorrektur

Unter diesem Punkt wird eine lineare Basislinienkorrektur durchgeführt. Wurde diese bereits vorgenommen, wird das ursprüngliche Spektrum rekonstruiert.

Zoom

Mit diesem Menüpunkt kann das Spektrum oder die Berechnung vergrößert werden. Nach Anklicken dieses Punktes erscheint ein Dialogfenster, in das sowohl die Position eingegeben wird, um die vergrößert werden soll, als auch der Faktor, um den vergrößert werden soll. Sofern möglich passiert das so, daß sich die angegebene Position in der Mitte der Vergrößerung befindet. Wurde diese Position nahe dem Rand oder außerhalb des zu vergrößernden Spektrums gewählt, so wird eine geeignete Position automatisch bestimmt. Mit dem Schalter *Spektrum* kann ausgewählt werden, ob das Originalspektrum oder die Berechnung vergrößert werden soll. Das vergrößerte Spektrum erscheint in einem neuen Fenster.

Peaks suchen

Mit diesem Menüpunkt können Peaks automatisch beschriftet werden. Zunächst erscheint eine Dialogbox, in der die maximale und minimale Frequenz eingegeben wird, zwischen denen Peaks gesucht werden sollen. Der

Schalter *Spektrum* legt fest, ob beim Originalspektrum oder der Berechnung gesucht werden soll. *Mindestintensität* gibt die minimale Intensität eines Peaks im Verhältnis zum größten Peak an, bei der das Peak noch beschriftet werden soll. Das Programm anerkennt den Spektralwert einer Stützstelle als Peak, wenn er größer ist als die Spektralwerte der 5 Punkte vor und nach der entsprechenden Stelle. Es ist darauf zu achten, daß ein Peak nur dann als solches gefunden werden kann, wenn das Intervall zwischen maximaler und minimaler Frequenz jeweils 5 Stützstellen links und rechts vom Peak enthält.

Peak löschen

Durch Anklicken dieses Punktes erscheint ein Dialogfenster, in dem ausgewählt werden kann, welche bereits beschrifteten Peaks wieder gelöscht werden sollen. Das Beschriften von Peaks erfolgt durch Doppelklick der linken oder rechten Maustaste (siehe entsprechende Punkte) oder durch den Menüpunkt *Peaks suchen*.

Fenster

Überlappend

Alle geöffneten Fenster werden überlappend angeordnet.

Nebeneinander

Alle geöffneten oder zu Icons verkleinerten Fenster werden derart angeordnet, daß sie zur Gänze sichtbar sind und das gesamte Hauptfenster ausfüllen.

Symbole anordnen

Die zu Icons verkleinerten Fenster werden am unteren Rand des Hauptfensters angeordnet.

Alle schließen

Alle geöffneten Unterfenster werden geschlossen. Sollten Fenster mit nicht-gesicherten, synthetischen Spektren geöffnet sein, so können diese in Dateien gespeichert werden.

Info

Spektrum

Damit können alle bekannten Informationen des im aktuellen Fenster gegebenen Spektrums abgerufen werden.

Berechnung

Mit diesem Punkt können alle Informationen der letzten im aktuellen Fenster durchgeführten Berechnung abgerufen werden.

Hilfe

Hilfe

In Ermangelung eines aufwendigen Hilfesystems eine kleine Unterstützung für alle jene, die am Programm verzweifeln.

About

Copyrightinformationen zum Programm

Linke Maustaste Doppelclick

Durch Doppelclick der linken Maustaste kann ein Peak des Originalspektrums beschriftet werden. Das Programm anerkennt ein Peak als solches, wenn das Maximum der Spektralwerte von 5 Punkten vor bis 5 Punkten nach der angeklickten Stelle innerhalb von 3 Punkten vor und 3 Punkten nach derselben sich befindet. Beschriftet wird dann jene Stelle innerhalb von 3 Punkten vor und 3 Punkten nach der angeklickten Stelle, für die der Spektralwert am größten ist. Befindet sich im Umkreis von drei Punkten um die angeklickten Stelle kein Peak, so wird keine Beschriftung vorgenommen und eine Fehlermeldung ausgegeben. Wird ein Peak ein weiteres mal angeklickt erkennt das Programm dies und gibt eine entsprechende Meldung aus. Es können maximal 16 Peaks pro Spektrum beschriftet werden.

Rechte Maustaste Doppelclick

Damit werden die Peaks der Berechnung beschriftet. Ansonsten besteht kein Unterschied zum Doppelclick der linken Maustaste.

A.5 Die Source Dateien

Da das Programmlisting extrem umfangreich und aufgrund vieler programmtechnischer Feinheiten sehr unübersichtlich ist, wurde darauf verzichtet es in dieser Arbeit abzdrukken. Der Autor dieser Arbeit ist jedoch gerne bereit es weiterzugeben und zu erläutern. Im Folgenden findet sich eine Kurzbeschreibung aller Source Dateien und jener Programmdateien, die nicht von der OWL zur Verfügung gestellt werden.

Headerdateien

SD.H

Umfang: 15361 Byte

Umfaßt die Definitionen aller Klassen, Funktionen und nichtkonstanten Variablen.

SDDEFS.H

Umfang: 13230 Byte

Umfaßt die Definitionen aller Konstanten, Identitäten und Datenstrukturen.

Programmdateien

SD.CPP

Umfang: 4061 Byte

Umfaßt das Hauptprogramm, die Klasse `SDApplikation` sowie alle globalen Funktionen. `SDApplikation` ist die unterste Programmklasse und wird direkt vom Hauptprogramm gestartet.

SDCALC.CPP

Umfang: 16047 Byte

Umfaßt die Klasse `SDCalc`, in welcher Funktionen zur Durchführung von Berechnungen definiert sind. Dazu gehört insbesondere auch die Fast Fourier Transformation.

SDDLK.CPP

Umfang: 33225 Byte

Umfaßt alle Dialogklassen. Hier wird auch die Syntax der meisten Eingaben überprüft.

SDFRAME.CPP

Umfang: 13706 Byte

Umfaßt die Klasse `SDMDIFrame`, welche das Hauptfenster (Frame Window) repräsentiert. Weiters existiert auch eine Klasse `SDMDIClient`, welche für den Inhalt des Hauptfensters verantwortlich ist.

SDHLP.CPP

Umfang: 4835 Byte

Umfaßt jene Klasse, die für das Fenster verantwortlich ist, welches bei Auswahl des Menüpunktes *Hilfe* erscheint.

SDIFG.CPP

Umfang: 16716 Byte

Umfaßt jene Klasse, die für ein Fenster mit Interferogramm verantwortlich ist.

SDWIN.CPP

Umfang: 119840 Byte

Umfaßt jene Klasse, die für ein Fenster mit Spektrum verantwortlich ist.

SDZOOM.CPP

Umfang: 7827 Byte

Umfaßt jene Klasse, die für ein Fenster mit einer Vergrößerung eines Spektrums verantwortlich ist.

Resourcendateien

SD.RC

Umfang: 21472 Byte

Umfaßt Menüs und Dialogboxen.

SD.ICO

Umfang: 766 Byte

Dieses Icon soll verwendet werden, falls das Programm in ein Menü aufgenommen wird.

SDCHILD.ICO

Umfang: 766 Byte

Dieses Icon erscheint, falls ein Kindfenster der Applikation zu einem Icon verkleinert wird.

SDFRAME.ICO

Umfang: 766 Byte

Dieses Icon erscheint, falls das Programm zu einem Icon verkleinert wird.

SDHLP.BMP

Umfang: 90358 Byte

Jene Bitmap, die beim Aufrufen des Hilfemenüs erscheint.

sonstige Dateien**SD.DEF**

Umfang: 257 Byte

Definitionsdatei für das Linken eines WINDOWS-Programms.

SD.DSK

Umfang: 3070 Byte

BORLAND C++ Datei zur Projektverwaltung.

SD.PRJ

Umfang: 10391 Byte

BORLAND C++ Projektdatei.

Anhang B

Verwendete Hilfsmittel

B.1 Software

Um diese Arbeit schreiben zu können, war eine Vielfalt von Hilfssoftware, größtenteils selbst erstellt, notwendig. Um alle Ergebnisse dieser Dissertation nachvollziehen zu können, möchte ich abschließend alle verwendeten Hilfsmittel zitieren.

Die Arbeit selbst ist, mit Ausnahme der meisten Graphiken, in em $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$, einer frei verfügbaren Version von $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$, geschrieben.

Die Graphiken des 3. Kapitels sind mit einer eigens dafür geschriebenen WINDOWS -Applikation, welche mit BORLAND C++ Version 3.1 geschrieben wurde, erstellt worden. Dieses Programm druckt die Bilder ohne Einwirkungen diverser Datenverfälschungen (wie zum Beispiel einer diskrete Fouriertransformation) derart, daß sie sich dem $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ Schriftbild anpassen. Insbesondere kann der Wert für λ von Fall zu Fall variiert werden. WINDOWS sorgt für eine optimale Druckerauflösung.

Die Graphiken aller anderen Kapitel sind mit dem im Anhang A beschriebenen Programm erstellt worden. Die Bildpositionen jener Seiten, auf denen 6 Spektren abgebildet sind lauten horizontal 0.17 und 0.53 beziehungsweise vertikal 0.15, 0.37 und 0.59. Die Bildgröße ist konstant 0.34×0.18 .

Die Testserien der Kapitel 5 und 6 wurden in der Programm-IDE von BORLAND C++ Version 3.1 geschrieben. Eine Testserie mit 1000 Versuchen dauert bei einem 386er Computer mit 387er Coprozessor etwa zwischen 2 und 6 Stunden. Alle weiteren Berechnungen wurden entweder eben-

falls in BORLAND C++ oder, sofern die Rechenzeit zu vernachlässigen war, in QuickBasic 2.01 durchgeführt.

Zusätzlich sind im Laufe dieser Arbeit ein APL2 Workspace mit mehreren brauchbaren Funktionen, sowie mehrere MathLab Prozeduren entstanden.

Die gesamte in diesem Anhang erwähnte Hilfssoftware ist archiviert und kann vom Verfasser dieser Arbeit bezogen werden.

B.2 Rauschen

Im 5. und 6. Kapitel wurde bei einigen Ausdrücken dreimal zufällig verrauscht (a, b, c). Spektren mit dem selben Buchstabenindex wurden in beiden Kapiteln stets mit dem selben Rauschen versehen. Verschiedene SNR Werte haben lediglich die Multiplikation mit verschiedenen Faktoren zur Folge. Um gegebenenfalls meine Untersuchungen nachvollziehen zu können, liste ich in folgender Tabelle diese drei Rauschen als CN(0,1)-verteilte Zufallsvariablen, also für SNR=1, auf. Da im Interferogrammbereich verrauscht wurde und der Abbruchpunkt zumeist kleiner als 0.25 gewählt wurde, müssen nicht alle 256 Stellen des Rauschens angegeben werden.

| Pkt | Rauschen a | Rauschen b | Rauschen c |
|-----|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| 0 | 0.574570 - 0.348001i | -0.105359 - 0.045584i | -0.651773 - 0.296807i |
| 1 | -0.145210 + 1.061124i | 0.549118 - 0.247839i | -1.271102 - 1.086557i |
| 2 | 0.226282 + 0.037346i | 0.460484 + 0.452453i | -0.332015 + 0.782678i |
| 3 | 1.122117 + 0.597594i | -0.435570 + 0.515173i | -0.371362 + 0.453506i |
| 4 | 0.719764 + 0.783846i | 0.879838 + 1.381292i | 0.583179 - 0.064562i |
| 5 | 2.150011 - 0.730008i | 0.289222 + 0.634390i | 0.495641 + 0.064900i |
| 6 | 0.468354 - 1.246219i | -1.128639 + 0.419172i | -0.002179 - 0.121840i |
| 7 | -1.104912 + 0.985197i | 1.122821 + 0.304025i | 0.240230 + 0.455762i |
| 8 | -0.328048 + 0.041964i | 0.755897 - 0.740722i | 0.214776 - 1.497785i |
| 9 | 0.008095 - 0.623104i | -0.355326 + 0.032420i | -0.117485 + 0.934442i |
| 10 | -0.182402 + 0.493809i | 1.379731 - 1.428811i | 0.447907 - 0.668717i |
| 11 | -0.406504 + 0.257044i | -1.252959 - 0.685426i | -0.725916 - 0.115020i |
| 12 | -0.134665 + 0.449418i | 0.250385 - 0.036848i | 0.109865 + 1.559655i |
| 13 | -0.525973 - 0.566119i | -0.391104 + 0.643993i | -1.313536 - 0.725452i |
| 14 | -0.445992 + 0.334711i | -1.936133 + 0.547226i | -0.645222 - 0.275789i |
| 15 | -0.256212 + 1.337205i | 0.902243 - 0.699703i | 0.635135 - 0.261095i |
| 16 | 0.150417 - 1.800136i | 1.301802 + 0.549213i | 0.073367 - 0.492794i |
| 17 | -0.087492 - 0.623322i | 1.408488 - 0.701567i | -1.140981 - 1.056100i |
| 18 | 1.053015 - 0.574082i | -0.105717 - 0.379383i | 1.224220 + 0.712580i |
| 19 | 0.830654 - 0.252332i | 0.027050 + 0.759119i | 0.187123 + 0.022825i |
| 20 | 0.697238 + 0.260397i | 0.062851 + 0.682717i | 0.806105 + 0.071289i |
| 21 | -0.931198 + 2.079921i | 1.046409 + 0.534304i | -0.486025 + 0.217066i |
| 22 | 1.223703 + 1.583088i | 1.052189 + 0.461840i | -0.023293 + 0.428442i |
| 23 | 0.042398 - 0.008105i | 0.970828 - 0.213715i | 0.072550 + 0.273179i |
| 24 | 0.230898 + 0.232865i | 0.935111 - 1.093404i | -0.690314 - 0.647367i |

| Pkt | Rauschen a | Rauschen b | Rauschen c |
|-----|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| 25 | -0.448589 + 0.530984i | 0.223522 - 0.806025i | 0.408745 + 0.024955i |
| 26 | 1.202886 - 1.419130i | 0.609215 - 0.017762i | -0.071296 - 0.314314i |
| 27 | 0.238423 - 0.471003i | 0.613822 - 0.854446i | 0.265460 + 0.356379i |
| 28 | 0.520312 + 0.342075i | 1.763413 - 0.111396i | -0.057543 - 0.112629i |
| 29 | -0.712411 - 2.083411i | -1.272987 + 0.302711i | -0.459713 + 0.124618i |
| 30 | 1.095484 + 0.748223i | -0.832497 - 2.194039i | -0.517798 - 0.214661i |
| 31 | 0.918935 - 0.238634i | 0.834061 + 0.941845i | -0.160379 - 0.333727i |
| 32 | -0.152703 + 0.742158i | -0.762415 + 0.875547i | -0.470024 - 2.073971i |
| 33 | 0.414254 - 0.636529i | -1.047638 - 1.414644i | 0.552807 - 1.210087i |
| 34 | -1.344544 + 0.477179i | -0.880039 + 0.424845i | -0.038314 - 0.532973i |
| 35 | -0.883626 + 0.755923i | 0.197089 + 0.213895i | -1.243006 + 0.307949i |
| 36 | 1.079713 - 1.098140i | 1.490201 + 0.887796i | -0.695165 + 0.663282i |
| 37 | -1.309516 + 0.652112i | -0.478398 - 0.088172i | -1.203972 + 0.029903i |
| 38 | 0.939698 + 0.321475i | -1.119532 - 0.107126i | 0.908998 - 0.184262i |
| 39 | 0.861319 - 0.361824i | -0.602220 + 0.133964i | 0.040010 + 0.234646i |
| 40 | 0.238833 + 0.482789i | 1.089107 - 0.940240i | -0.448550 - 1.107863i |
| 41 | -0.027427 + 0.631790i | 0.495915 - 0.138779i | -0.273846 + 0.578620i |
| 42 | 0.472212 + 1.086130i | 0.627437 - 0.495511i | -0.648737 + 0.822349i |
| 43 | 1.292463 + 1.262636i | 1.094509 - 0.369287i | -0.507964 - 0.528765i |
| 44 | -1.440321 - 0.333469i | 0.449844 + 0.095686i | 0.095608 - 0.031321i |
| 45 | 1.279748 - 0.034609i | 0.289636 + 0.352528i | 0.144942 + 0.997169i |
| 46 | -1.205606 + 0.342249i | -0.441031 + 0.615288i | -0.730413 - 0.547946i |
| 47 | -0.354008 - 0.460799i | 0.894836 + 0.465815i | 0.173808 - 1.147787i |
| 48 | 0.829024 - 1.043252i | 0.645750 - 0.856246i | -0.092328 + 0.530124i |
| 49 | -0.711760 + 0.131606i | 1.246084 - 0.353095i | -0.856891 - 0.388233i |
| 50 | -0.670125 - 1.114962i | -0.279587 + 0.380575i | 0.519101 - 0.816339i |
| 51 | -0.112902 - 0.005449i | 0.838889 + 1.153212i | -0.404647 + 0.986893i |
| 52 | 0.027395 - 0.573902i | 0.982613 - 0.858882i | 0.007908 - 0.617830i |
| 53 | -0.393473 - 0.325399i | 0.464895 - 0.451734i | 1.324712 + 0.368524i |
| 54 | -0.056034 + 1.746609i | -1.529136 - 0.171810i | 1.299558 + 0.969663i |
| 55 | 0.007721 - 0.096872i | 0.453140 + 0.055274i | 0.076047 + 0.208892i |
| 56 | -0.166636 + 0.235514i | -0.244907 - 0.404662i | 0.259349 + 0.705240i |
| 57 | 0.420875 - 0.004842i | -0.593176 - 0.137934i | -0.076378 + 1.000733i |
| 58 | -1.056191 + 0.621982i | -0.269629 - 0.982154i | -1.178719 + 0.751044i |
| 59 | 0.951749 - 0.829975i | -0.809472 + 0.225941i | 0.243259 + 0.070749i |
| 60 | -0.137373 - 0.147973i | 1.191462 + 0.994015i | -0.804206 - 0.359171i |
| 61 | 0.851409 + 0.350002i | 0.414756 - 0.274847i | 0.615416 - 0.315129i |
| 62 | 0.196410 - 0.911553i | -0.137542 - 1.127131i | -0.468283 + 0.034137i |
| 63 | 0.130951 - 1.031159i | 1.805348 + 2.538657i | 0.435871 + 0.640866i |
| 64 | -0.402146 - 0.075874i | -0.991265 - 0.487241i | 0.853424 + 0.027011i |
| : | : | : | : |

Literaturverzeichnis

- [1] John Parker BURG, **Maximum Entropy Spectral Analysis**, *Stanford University, Ph. D.*, (1975)
- [2] D. C. CHAMPENEY, **A Handbook of Fourier Theorems**, *Cambridge University Press*, (1987)
- [3] Simon HAYKIN, **Topics in Applied Physics**, *Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York*, (1979)
- [4] H. HEUSER, **Lehrbuch der Analysis**, *B. G. Teuber Stuttgart*, (1988)
- [5] Jyrki K. KAUPPINEN, Douglas J. MOFFATT, Henry H. MANTSCH, and David G. CAMERON, **Fourier Self-Deconvolution: A Method for Resolving Intrinsically Overlapped Bands**, *Applied Spectroscopy*, Vol. 35, No. 3, 271 (1981)
- [6] Jyrki K. KAUPPINEN, Douglas J. MOFFATT, Henry H. MANTSCH, and David G. CAMERON, **Smoothing of spectral data in the Fourier domain**, *Applied Optics*, Vol. 21, No. 10, 1866 (1982)
- [7] Jyrki K. KAUPPINEN, Douglas J. MOFFATT, M. R. HOLLBERG, and H. H. MANTSCH, **A New Line-Narrowing Procedure Based on Fourier Self-Deconvolution, Maximum Entropy, and Linear Prediction**, *Applied Spectroscopy*, Vol. 45, No. 3, 441 (1991)
- [8] Jyrki K. KAUPPINEN, Douglas J. MOFFATT, M. R. HOLLBERG, and H. H. MANTSCH, **Characteristics of the LOMEPA Line-Narrowing Method**, *Applied Spectroscopy*, Vol. 45, No. 9, 1516 (1991)

- [9] Jyrki K. KAUPPINEN, Douglas J. MOFFATT, and H. H. MANTSCH, **Nonlinearity of the maximum entropy method in resolution enhancement**, *Can. J. Chem.*, Vol. 70, 2887 (1992)
- [10] Steven M. KAY, **Modern Spectral Estimation**, *Prentice Hall*, (1988)
- [11] Michael KENN, **Anwendungen der diskreten Fouriertransformation zur Verbesserung der Auflösung von Infrarotspektren**, *Diplomarbeit, TU Wien*, (1992)
- [12] S. Lawrence MARPLE, Jr. , **Digital Spectral Analysis With Applications**, *Prentice Hall*, (1987)
- [13] Feng NI and Harold A. SCHEREGA, **Resolution Enhancement in Spectroscopy by Maximum Entropy Fourier Self Deconvolution, with Applications to Raman Spectra of Peptides and Proteins**, *Journal of Raman Spectroscopy*, Vol. 16, No. 5, 337 (1985)
- [14] J. PITHA and R. Norman JONES, **A Comparison of Optimization Methods for Fitting Curves to Infrared Band Envelopes**, *Canadian Journal of Chemistry*, Vol. 44, 3031 (1966)
- [15] G. POLYA, G. SZEGÖ, **Problems and Theorems in Analysis**, *Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York*, Vol. II, 110
- [16] D. E. SMYLLIE, G. K. C. CLARKE, and T. J. ULRYCH, **Analysis of Irregularities in the Earth's Rotation**, *Methods in Computational Physics*, R. Alder et al.,eds., Vol. 13, 391-430 (1973)
- [17] Norbert WIENER, **The Fourier Integral and certain of its Applications**, *Dover Publications, Inc. New York*, (1933)
- [18] Norbert WIENER, **Extrapolation, Interpolation, and Smoothing of Stationary Time Series**, *The M. I. T. Press*, (1949)