

УДК 681.3.06 : 621.384.8

**Измерение и коррекция параметров спектральных пиков при автоматической обработке спектров. Б е с-
ч а с т н о в О. Н., З д а н о в и ч В. В. — В кн.: Научное приборостроение. Теоретические и эксперимен-
тальные исследования. Л.: Наука, 1984, с. 125—128.**

При обработке спектральной информации решающее значение для интерпретации спектров имеет правильный выбор параметрических моделей пиков (спектральных линий), присутствующих в сигнале. Исследуется случай, когда число приходящихся на один пик отсчетов невелико и присутствуют шумы прибора. Показывается, что в этих условиях целесообразно аппроксимировать пик по совокупности нескольких измерений. При этом известная аппаратная функция измерительного канала учитывается детерминированным способом. Параметры аппаратной функции, обусловленной физическим прибором, учитываются совместно с информационными параметрами пика. Так как параметры этой аппаратной функции медленно меняются в процессе эксперимента, то их коррекция производится методом потенциальных функций по совокупности измерений спектра. Приводятся результаты численного эксперимента, показывающие удовлетворительную сходимость предложенного метода. Лит. — 4 назв., ил. — 2.

ИЗМЕРЕНИЕ И КОРРЕКЦИЯ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПИКОВ ПРИ АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ СПЕКТРОВ

При анализе спектров основной задачей является измерение параметров пиков (спектральных линий). Решение этой задачи возможно при условии достаточно точного задания формы пиков спектра, которая зависит от физических процессов, происходящих в спектрометре, и от свойств электроизмерительных устройств канала измерения. В ряде случаев форма пика зависит от его амплитуды и положения, что сильно осложняет анализ спектров.

Наиболее распространенный метод задания формы пиков состоит в определении семейства функций, зависящих от заданного вектора параметров. Обычно ограничиваются рассмотрением пиков гауссовской или лоренцевой форм, при этом параметрами являются амплитуда, ширина и смещение пика. Однако при

этом удовлетворительно описываются только физические процессы, происходящие в спектрометре. Свойства измерительного канала должны быть описаны путем использования пиков более сложной формы. Стандартным приемом, который используется для этих целей, является задание пика в следующей форме:

$$\varphi(t) = \int_L g(u-t) \varphi_0(u, a) du, \quad (1)$$

где $\varphi(t)$ — наблюдаемый пик; $g(u)$ — аппаратная функция измерительного канала; $\varphi_0(u, a)$ — пик, определяемый физическими характеристиками прибора; a — вектор неизвестных параметров.

Аппаратная функция определяется только свойствами прибора и не зависит от характера проводимого эксперимента. Функция $\varphi_0(u)$ содержит необходимую информацию об исследуемом физическом процессе и подлежит определению. Наблюдаемый пик может иметь сложную несимметричную форму. Параметрическое описание такого пика часто затруднительно. Для упрощения параметризации пика и повышения разрешающей способности прибора целесообразно устранить влияние аппаратной функции алгоритмическим путем.

Алгоритмы, устраняющие влияние аппаратной функции, связаны с решением уравнения (1), которое является интегральным уравнением первого рода. Некорректность этой задачи приводит к сильной зависимости решения от шумов, неизбежно присутствующих в спектре. Конструктивный метод регуляризации задачи состоит в следующем.

В функции $g(u)$ учитывается не вся аппаратная функция, а только ее существенная часть. При этом некоторая часть аппаратной функции остается в сигнале $\varphi_0(u, a)$, и в результате решения уравнения (1) происходит фактическое увеличение разрешающей способности прибора [1]. Форма пика $\varphi_0(u, a)$ остается довольно сложной из-за присутствия части аппаратной функции. Параметры аппаратной функции являются постоянными в пределах одного эксперимента и медленно изменяются в процессе эксплуатации прибора. Учитывая это, предлагается разделить параметры, определяющие форму пика, на две группы: быстро меняющиеся параметры, содержащие информацию об исследуемом процессе, и медленно меняющиеся параметры, определяющие аппаратную функцию. Таким образом, вектор параметров a разбивается на два подвектора:

$$a = \{b, c\},$$

где b — вектор параметров, изменяющихся от пика к пику; c — вектор медленно изменяющихся параметров.

Векторы b определяются при каждом измерении для всех пиков; векторы c могут определяться и корректироваться по большой совокупности измерений.

Предлагается следующая процедура измерения параметров пика, состоящая из трех этапов: компенсации влияния аппаратной функции, определения переменных параметров, коррекции медленно меняющихся параметров.

Начнем с рассмотрения первого этапа. Введем шаг дискретизации по времени Δt . Тогда из (1) для значений функции $\varphi(t)$ в точках $t_p = p\Delta t$, $p=1, 2, \dots$ получим выражение

$$\varphi(t_p) = \sum_{l=1}^p w_l \varphi_{0l}, \quad (2)$$

где

$$w_l = \int_{(l-1)\Delta t}^{l\Delta t} g(u-t_p) du.$$

Шаг дискретизации в большинстве приборов определяется структурой измерительного канала. В некоторых случаях может быть выбран из условия

$$\Delta t = \frac{\delta}{\max_p \max_{\Gamma_p} |\varphi'_{0l}(u, a)|},$$

где $\Gamma_p = [(p-1)\Delta t, p\Delta t]$; δ — допустимая погрешность дискретного представления функции $\varphi(u, a)$.

Значения констант φ_{0i} при известной аппаратной функции предлагается определять с помощью рекуррентного соотношения:

$$\eta_i = \varphi(t_i) - \sum_{i=1}^{i-1} w_i \varphi_{0i}, \quad \varphi_{0i} = \frac{\eta_i}{w_i}, \quad w_i \neq 0. \quad (3)$$

Отметим, что алгоритм применим для любых ядер w_i , не равных нулю. Случай $\varphi_{0i} \in \{-1, 1\}$, рассмотренный в [2], не обеспечивает нулевой погрешности аппроксимации в точках отсчета даже при отсутствии шумов.

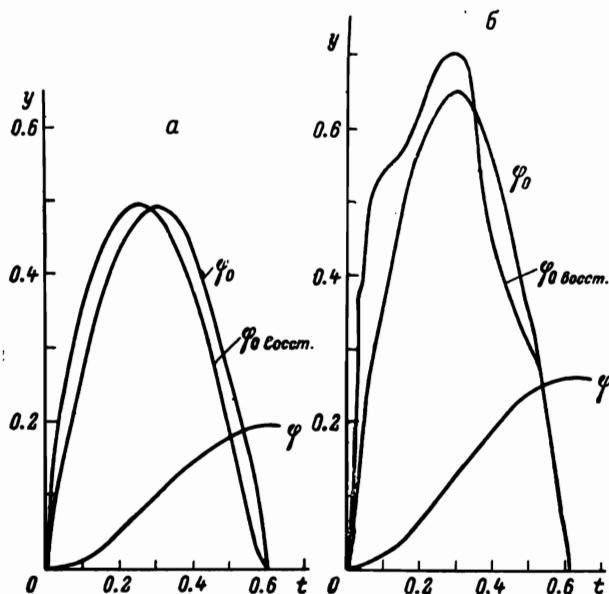


Рис. 1. Результаты численного эксперимента коррекции пика по аппаратной функции измерительного канала в отсутствие шумов физического прибора (а) и при их наличии (б).

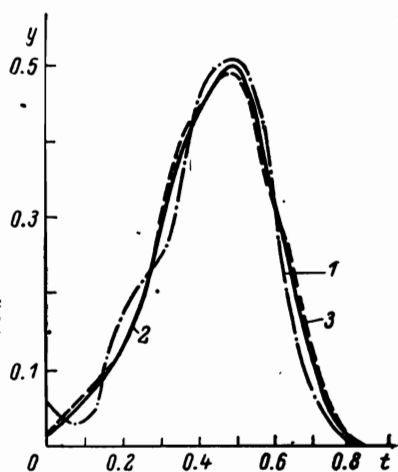


Рис. 2. Результаты численного эксперимента восстановления формы пика по совокупности измерений спектра.

1 — измеренный пик, 2 — истинный пик, 3 — пик после аппроксимации (500 итераций).

Перейдем к рассмотрению последних двух этапов измерения параметров пика. В качестве модели пика, полученного после компенсации влияния аппаратной функции $g(t)$, предлагается принять следующую функцию:

$$\Delta \bar{\varphi}_0 \left(\frac{u - u_0}{M} \right), \quad b = \{A, u_0, M\},$$

где A — амплитуда пика; u_0 — смещение пика; M — масштаб (ширина) пика.

Функцию $\bar{\varphi}_0(x)$ предлагается задавать в виде таблицы ее значений, которые являются составляющими вектора s . Так как вектор s предполагается медленно изменяющимся в процессе эксперимента, то предлагается корректировать таблицу значений функции $\bar{\varphi}_0(x)$ по совокупности измерений спектра.

После получения последовательности φ_{0i} , $i=1, 2, \dots$ вектор a определяется путем минимизации функционала

$$J(a) = \sum_{i=1}^m \left[\varphi_{0i}^{(n)} - A \bar{\varphi}_0^{(n)} \left(\frac{u_i - u_0}{M} \right) \right]^2 = \sum_{i=1}^m \Delta_{i,n}^2,$$

где u_i — значения аргумента, при которых определены величины φ_{0i} ; m — число табличных значений функции $\bar{\varphi}_0(x)$, n — номер измерения. Функция $\bar{\varphi}_0$ вычис-

ляется линейной интерполяцией по таблице ее значений (вектору c). Затем вектор c корректируется методом потенциальных функций [3]:

$$c_j^{(n+1)} = c_j^{(n)} + e_j^{(n)} \sum_{i=1}^m \Delta_{i,n} r_1 \left(\frac{u_i - u_0 - u_j}{M} \right),$$

$$e_j^{(n)} = \frac{|e_j^{(n)}|}{A}, \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

$$e_j^{(n+1)} = e_j^{(n)} + \eta \sum_{i=1}^m (\Delta_{i,n} - e_i^{(n)}) |\Delta_{i,n} - e_i^{(n)}| r_2 \left(\frac{u_i - u_0 - u_j}{M} \right),$$

где $r_1(x)$, $r_2(x)$ — потенциальные функции, η — малая положительная константа; u_i — значения аргумента, при которых определены φ_{0i} ; u_j — значения аргумента, при которых определены c_j .

Аналогичный метод задания формы пика без коррекции вектора c предложен в работе [4]. Предлагаемая процедура требует задания начальных значений величин $c_j^{(0)}$ и $e_j^{(0)}$, $j=1, 2, \dots, m$. Величины следует определять, используя процедуру калибровки. В качестве величин $e_j^{(0)}$ могут быть использованы произвольные положительные константы, меньшие единицы.

В заключение приведем результаты численного эксперимента. Сначала был проведен эксперимент в предположении гауссового пика (функция φ_0) и экспоненциальной аппаратной функции ($g(t) = e^{-at}$), что соответствует фильтру нижних частот первого порядка, (рис. 1, а), затем при тех же условиях, но с добавлением помехи, распределенной по равномерному закону (рис. 1, б). Как видно из рисунков, восстановление функции произведено с достаточной для практики точностью. Эксперимент по определению параметров пика по совокупности измерений спектра в предположении несимметричного гауссового пика (функции φ_0) показывает удовлетворительную сходимость аппроксимации по методу потенциальных функций (рис. 2).

ЛИТЕРАТУРА

1. Кучеров А. П. — Журн. прикл. спектроскоп., 1980, т. 32, вып. 1, с. 137.
2. Меньшиков Г. Г. Двоячная аппроксимация: Основы теории, применение к вопросам передачи сообщений. Л., 1968.
3. Айзерман М. А., Браверман Э. М., Розоноэр Л. И. Метод потенциальных функций в теории обучения машин. М., 1970.
4. Статистические пределы разделения близко расположенных пиков в спектральных характеристиках рентгеновского излучения: Препр. № Е7-12219/Г. Мюллер, Д. Лемани, Г. Музиол, Г. Зшорнаск. Дубна, 1979.