

УДК 517.983.54

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО ФИЛЬТРА ВИНЕРА ДЛЯ ДЕКОНВОЛЮЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ

© Б.В. Бардин, В.Д. Белов, Л.В. Новиков, Ю.В. Чижов*

*Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург.
Санкт-Петербургский государственный университет

Поступила в редакцию 23 декабря 1998г.

Предложена линейная модель формирования сигнальных и шумовых процессов при регистрации электронных спектров. Получены соотношения для расчета спектральных плотностей энергии сигнала и шума, используемых в выражении для стационарного оптимального фильтра Винера, который используется в данной работе для деконволюции (обратной свертки) спектров с целью разделения наложившихся пиков. Предложена нестационарная модификация оптимального фильтра Винера и получены соотношения для расчета его параметров. Численное моделирование показало, что применение нестационарного фильтра позволяет существенно повысить разрешающую способность операции деконволюции и повысить ее достоверность, обусловленную значительным снижением величины остаточных колебаний решения, которые могут приводить к идентификации ложных спектральных пиков.

1. ВВЕДЕНИЕ

Энергетическое разрешение электронных спектров ограничивается величиной уширения спектральных пиков, которая определяется различными физическими процессами и характеристиками электронного спектрометра. При этом последние могут оказывать преобладающее влияние. Функцию, характеризующую процесс уширения, принято называть аппаратной функцией.

Регистрируемый на приборе спектр $u(x)$ равен свертке или конволюции (convolution) «истинного» (т.е. неискаженного) спектра $s(x)$ и аппаратной функции спектрометра $h(x)$ с добавлением шума измерения $n(x)$

$$\int_a^b h(x-y)s(y)dy + n(x) = u(x). \quad (1)$$

Здесь x и y — энергия электронов.

Энергетическое разрешение прибора может быть улучшено математической обработкой регистрируемых данных $u(x)$, задачей которой является разделение наложившихся пиков с целью определения спектральных компонент, т.е. расшифровки спектра. Для решения этой задачи необходимо решить интегральное уравнение (1) относительно $s(x)$. Процесс решения такой задачи часто называется обратной сверткой или деконволюцией. Задача деконволюции спектральной информации является некорректной математической задачей, что обусловлено сингулярностями аппаратной функции $h(x)$ и наличием шума $n(x)$ и, поэтому, может быть решена только приближенно.

Наиболее мощным методом решения некорректных задач является метод регуляризации по

Тихонову [1, 2]. Этот метод предназначен для решения широкого класса некорректных задач, однако при решении интегральных уравнений типа свертки (что имеет место в нашем случае (1)) непосредственно автором показано [1], что предельной возможностью метода (в том смысле, что не могут быть получены лучшие результаты) является оптимальный фильтр Винера. Фильтр Винера реализуется с использованием более простых алгоритмов и меньшими временными затратами, чем метод Тихонова, в связи с чем в настоящей работе рассмотрим возможности оптимального фильтра Винера.

2. ТЕОРИЯ

Частотная характеристика оптимального фильтра Винера для стационарных процессов описывается следующим выражением [1, 3]

$$G(\omega) = \frac{H^*(\omega)}{|H(\omega)|^2 + \frac{P_N(\omega)}{P_S(\omega)}}, \quad (2)$$

где $H(\omega)$ — Фурье-образ аппаратной функции $h(x)$, $H^*(\omega)$ — сопряженная величина, а $P_S(\omega)$ и $P_N(\omega)$ — спектральные плотности энергии соответственно сигнала и шума.

Возможности фильтра Винера могут быть реализованы в полной мере, только если известны спектральные плотности сигнала и шума, что не всегда имеет место на практике. В таком случае целесообразнее пользоваться методом Тихонова, так как он не требует подобной априорной информации. Однако во многих практических задачах такая информация может быть получена. Рас-

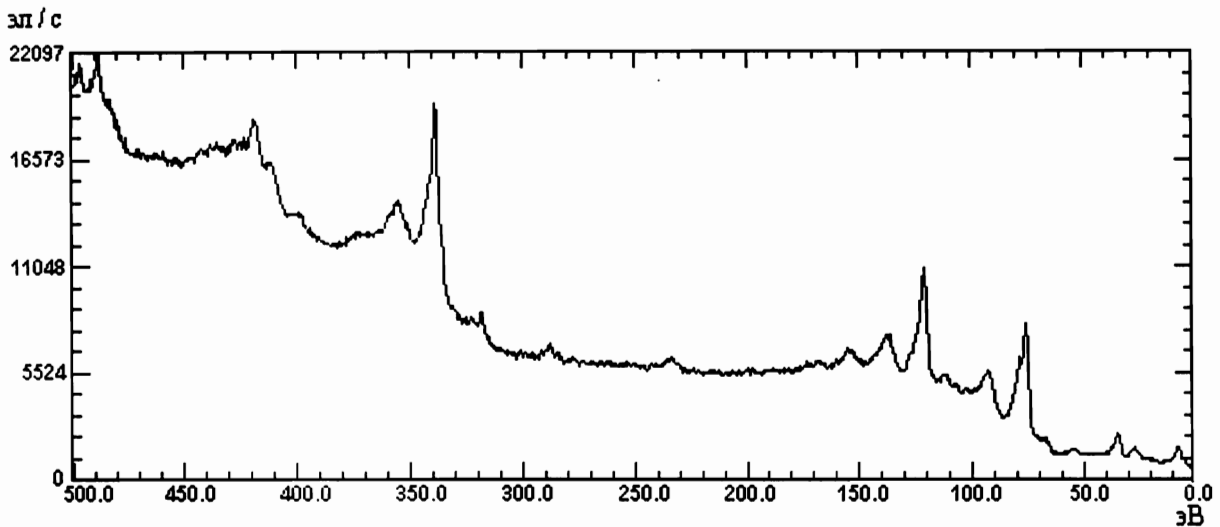


Рис. 1. Обзорный рентгено-электронный спектр.

смотрим применение фильтра Винера в задачах электронной спектроскопии.

Электронный спектрометр, как и любой измерительный прибор, может быть аттестован по шумовым характеристикам точно также, как и по метрологическим, т. е. спектральная плотность шума $P_M(\omega)$ может быть определена заранее, до эксперимента. Однако на практике в этом часто даже нет необходимости. Так, например, если канал регистрации электронного спектрометра работает в режиме счета электронов при низкой интенсивности их потока, в шуме регистрируемого сигнала преобладает компонента дробового шума потока, которая полностью определяется средним значением измеряемого сигнала. Этот шум является белым шумом, подчиняющийся распределению Пуассона, со среднеквадратическим значением, пропорциональным корню квадратному из величины измеряемого сигнала $u(x)$ [4]. Остальными составляющими шума в этом случае в реальном приборе часто можно пренебречь. Однако, если они оказываются ощутимыми, то здесь следует выделить аддитивный шум, который может возникать в канале энергоанализа и регистрации, и мультипликативный шум, в виде которого на выходе проявляется шум источника излучения — электронной пушки или рентгеновского источника. Спектральную плотность сигнала при некото-

рых допущениях обычно также можно оценить.

Определение аппаратной функции прибора является самостоятельной задачей, выходящей за рамки настоящей работы. Здесь мы будем считать аппаратную функцию известной.

На рис. 1 в качестве примера приведен обзорный рентгенофотоэлектронный спектр, из которого видны три основные составляющие:

- спектральные компоненты — пики;
- фоновая составляющая или базовая линия;
- шум.

Спектральные пики представляют основную полезную информацию, характеризующую исследуемый образец, и интерпретируются как исходные спектральные линии — «истинный» спектр $s(x)$, искаженные аппаратной функцией. Поэтому перед решением задачи деконволюции из снятого на приборе спектра должен быть устранен фон и оставшийся сигнал использован в уравнении (1) в качестве $u(x)$. Это необходимо потому, что плавная фоновая составляющая может интерпретироваться формальными математическими алгоритмами как большое количество близких, наложившихся спектральных пиков, что противоречит физике формирования фона. Кроме того, при определении $P_S(\omega)$ в выражении (2) фон не должен учитываться, так как он не представляет полезного сигнала. Устранение фона, являющееся нетривиальной задачей, как могло бы показаться на первый взгляд, исследовано в ряде работ (см. например [5, 6]), и здесь рассматриваться не будет. Однако, необходимо отметить, что величины Пуассоновского и мультипликативного шума определяются полным сигналом, зарегистрированным на приборе, поэтому информация о величине фона должна использоваться при определении спектральной плотности шума $P_M(\omega)$.

На рис. 2 отображены процессы формирования сигналов в рассматриваемой задаче в соответствии с приведенными выше соображениями. Здесь $b(x)$

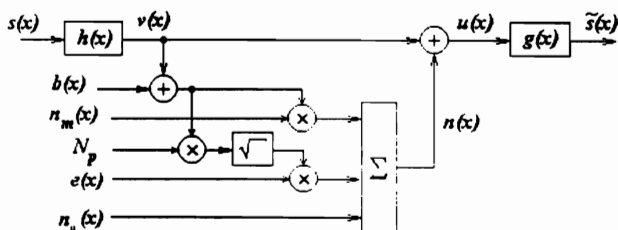


Рис. 2. Модель формирования шумовых процессов в электронном спектрометре.

- вычтенная из зарегистрированного сигнала компонента фона, $n_a(x)$ — аддитивный шум, $e(x)$ — белый шум единичной мощности с нулевым средним, $n_m(x)$ — база мультипликативного шума, $\bar{s}(x)$ — оценка исходного спектра, формируемая в результате решения задачи деконволюции. Коэффициент N_p задает масштаб дробового шума. Для счетного канала регистрации $N_p = 1/T$, где T — время счета в каждой точке спектра.

$$P_N(\omega) = P_{Na}(\omega) + P_{Nm}(\omega) + P_{Np}(\omega). \quad (3)$$

В дальнейшем, там, где это необходимо, будем различать два типа оценки спектральных плотностей сигнала и шума — статистическая оценка, соответствующая среднему по множеству реализаций случайного процесса (ее будем обозначать

$\tilde{P}(\omega)$), и оценка конкретной реализации или ограниченного количества реализаций, имеющихся в распоряжении экспериментатора, (обозначение

$\hat{P}(\omega)$). В общем случае, эти оценки могут существенно различаться. Очевидно, что в выражении (2) могут использоваться только оценки одного типа. В данной работе для этой цели используются статистические оценки.

Спектральная плотность аддитивного шума $\tilde{P}_{Na}(\omega)$ предполагается известной (см. выше). Кроме того, предполагается, что он имеет нулевое среднее. В противном случае его среднее значение можно отнести к фону и не учитывать при оценке $n(x)$. Мультипликативный шум, который, как отмечалось выше, определяется шумом источника излучения, для электронной пушки, например, имеет в своем составе дробовой шум катода который является белым — $N_m e(x)$, медленный дрейф тока пушки, проявляющийся как изменение фона и его можно не учитывать в $n(x)$, и наводки с частотой питающей сети, которые легко устраняются путем выбора времени счета T в канале регистрации, кратным целому числу периодов этой частоты. Тогда в соответствии с рис. 2 выражение (3) после необходимых преобразований примет вид

$$\begin{aligned} \tilde{P}_N(\omega) = \tilde{P}_{Na}(\omega) + \frac{N_m^2}{4\pi^2} \cdot \overline{|F[b(x) + v(x)]|^2} + \\ + \frac{N_p}{4\pi^2} \cdot \overline{|F[\sqrt{b(x) + v(x)}]|^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $F[\dots]$ — преобразование Фурье, а усреднение $\overline{|\dots|^2}$ здесь производится по частоте ω .

Если учесть, что шум $n(x)$ имеет нулевое среднее, и если пренебречь дисперсией $n(x)$ по сравнению с квадратом суммы $b(x)$ и $v(x)$ при переходе от $v(x)$ к $u(x)$ во втором слагаемом выражения (4),

тогда на основании теоремы Парсеваля это выражение приводится к виду

$$\begin{aligned} \tilde{P}_N(\omega) = \tilde{P}_{Na}(\omega) + \frac{N_m^2}{2\pi} \cdot \overline{(b(x) + u(x))^2} + \\ + \frac{N_p}{2\pi} \cdot \overline{(b(x) + u(x))}, \end{aligned} \quad (5)$$

в котором усреднение $\overline{\dots}$ производится по «времени» (энергии) x .

Таким образом, имея необходимую априорную информацию о шуме ($\tilde{P}_{Na}(\omega)$, N_m), информацию о параметрах эксперимента ($b(x)$, N_p) на основании экспериментальных данных $u(x)$ можно определить спектральную плотность энергии шума $\tilde{P}_N(\omega)$. Рассмотрим теперь спектральную плотность сигнала.

Обычно для точного определения спектральной плотности сигнала $P_S(\omega)$ имеющейся информации бывает недостаточно, поэтому можно сделать только ее оценку при некоторых дополнительных предположениях. Положим, что на исследуемом участке спектра механизмы уширения всех пиков одинаковы, что для большинства практических применений можно допустить. Тогда все эти механизмы можно описать некоторой одной обобщенной аппаратной функцией. В этом случае сигнал $s(x)$ будет представляться набором δ -функций, имеющих равномерный спектр плотности энергии при $\omega > 0$. Тогда оценка спектральной плотности сигнала будет [4]

$$\tilde{P}_S(\omega) = S^2 + 2\pi \overline{s(x)^2} \delta(\omega), \quad (6)$$

где S^2 — спектральная плотность сигнала при $\omega > 0$ (константа). На основании этой оценки может быть получена статистическая оценка спектральной плотности сигнала $u(x)$

$$\tilde{P}_U(\omega) = S^2 |H(\omega)|^2 + 2\pi \overline{s(x)^2} H^2(0) + \tilde{m}_N(\omega). \quad (7)$$

Так как, как правило, $H(0) = 1$ (это только вопрос нормировки) и шум $n(x)$ имеет нулевое среднее, средние значения или постоянные составляющие сигналов $s(x)$, $v(x)$ и $u(x)$ равны и выражение (7) приводится к виду

$$\tilde{P}_U(\omega) = S^2 |H(\omega)|^2 + 2\pi \overline{u(x)^2} + \tilde{m}_N(\omega). \quad (8)$$

Если бы была известна оценка $\tilde{P}_U(\omega)$, то из уравнения (8) можно было бы определить S , и тогда все параметры, необходимые для решения задачи, были бы найдены. Однако при деконволюции конкретного спектра на основании экспериментальных данных может быть определена только оценка $\hat{P}_U(\omega)$, которая, как отмечалось выше, может отличаться от $\tilde{P}_U(\omega)$. Поэтому может быть

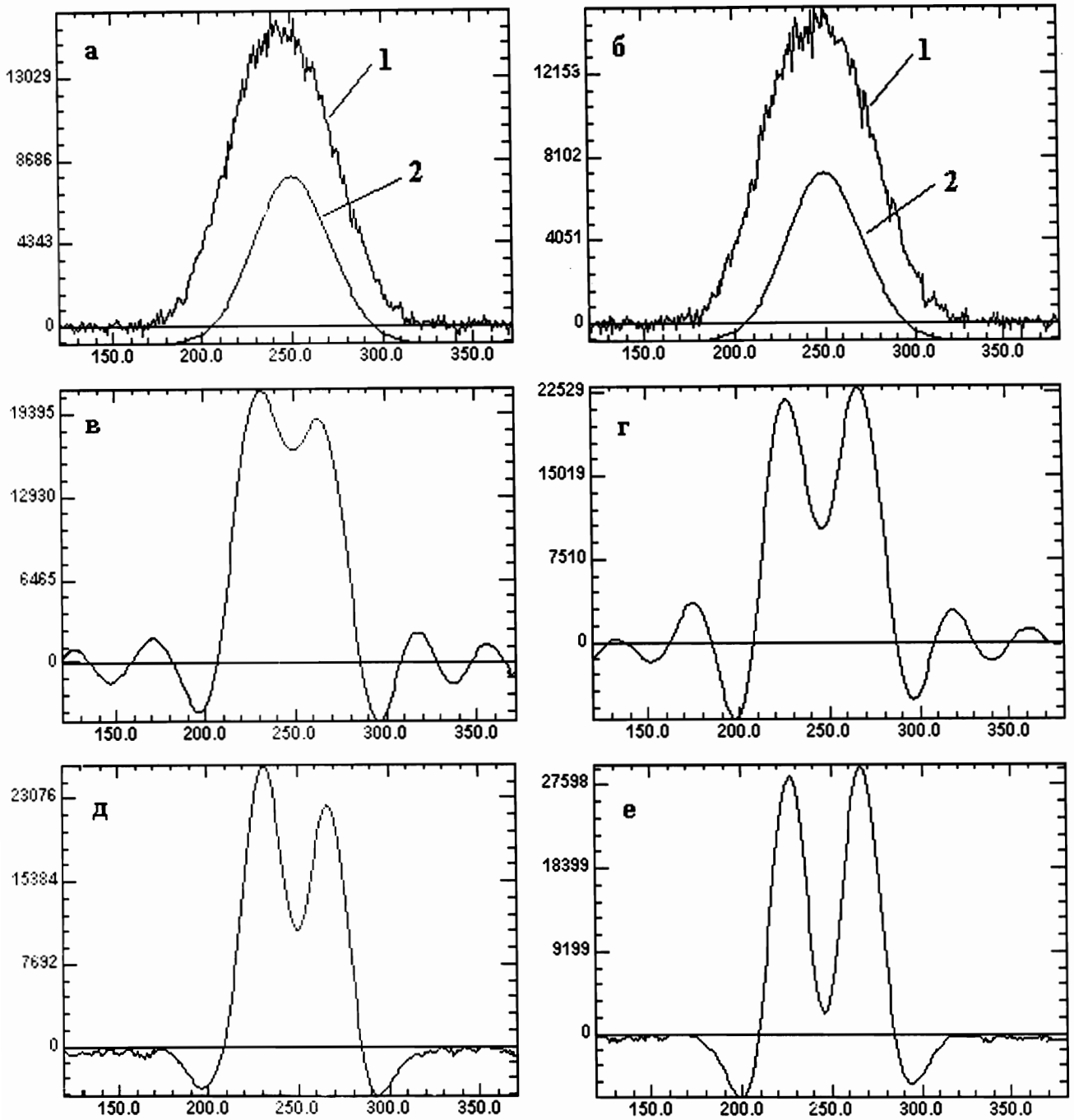


Рис. 3. Иллюстрация решения задачи деконволюции двух модельных спектров (а, б) стационарным (в, г) и нестационарным (д, е) фильтрами Винера.

найден только приближенные значения параметра S , соответствующие, например, критерию наименьших квадратов

$$\Delta(S) = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{P}_i(\omega) - \tilde{P}_i(\omega, S))^2 d\omega. \quad (9)$$

Минимизация Δ по S (при $d\Delta/dS = 0$) дает

$$S^2 = \frac{\overline{\hat{P}_U(\omega)} - 2\pi i(x) - \overline{\tilde{P}_N(\omega)}}{|H(\omega)|^2}. \quad (10)$$

Таким образом, при известной S на основании выражения (8) вычисляется $\tilde{P}_S(\omega)$, которая совместно с $\tilde{P}_N(\omega)$ используется в (2) для вычисле-

ния $G(\omega)$, и решение задачи деконволюции будет

$$\tilde{s}(x) = F^{-1}[G(\omega) \cdot U(\omega)], \quad (11)$$

где $U(\omega)$ — преобразование Фурье от $u(x)$, а $F^{-1}[\dots]$ — обратное преобразование Фурье.

На рис. 3 представлены результаты двух модельных экспериментов по решению задачи деконволюции. Модельные спектры (кривые 1 на рис. 3 а, б) состоят из двух пиков Гаусса шириной 50 и амплитудой 10000, на которые наложен шумовой сигнал, моделирующий дробовой шум, соответствующий $N_n = 25$ (т.е. время счета на точку в канале регистрации равно 0,04 сек) и $b(x) = 2000$. Расстояние между пиками на рис. 3 а равно 30, а на рис. 3 б — 35. Аппаратной функцией также является пик Гаусса шириной 50 (кривые 2). Результаты деконволюции этих спектров рассмотренным выше способом приведены на рис. 3 в, г.

Рис. 3 в иллюстрирует случай, близкий к пределу разрешения. На рис. 3 г пики уже достаточно разрешены. Обращают на себя внимание большие колебания решения за пределами разрешенных спектральных пиков, которые могут приводить к выявлению ложных (несуществующих) пиков в спектре. Это вызывается усилением той части спектра шумов, которая совпадает с полосой сигнала, а также реакцией на резкие изменения сигнала. Все это является следствием того, что фильтр Винера (2) предполагает стационарность процессов. Однако, если обратиться к реальному электронному спектру (рис. 1), то становится очевидной необоснованность стационарной модели процессов в рассматриваемом приложении. Процесс на рис. 1 не обладает стационарностью как на больших масштабах «времени» (в данном случае — энергии) из-за фоновой составляющей, так и на сравнительно малых масштабах, связанных со спектральными пиками. Второе обстоятельство более существенно, так как деконволюция обычно производится на ограниченных участках спектра. Поэтому оптимальным решением нашей задачи должен быть нестационарный фильтр.

Будем искать такое решение в виде, аналогичном оптимальному стационарному фильтру Винера (2), причем аппаратная функция по-прежнему предполагается инвариантной к сдвигу.

$$G(x_0, \omega) = \frac{H^*(\omega)}{|H(\omega)|^2 + \frac{P_N(x_0, \omega)}{P_S(x_0, \omega)}}. \quad (12)$$

Предположим, что в некоторой окрестности точки x_0 можно считать процесс стационарным, а шум имеющим нулевое среднее. Локализуем эту окрестность при помощи оконной функции $w(x - x_0)$, инвариантной к сдвигу x_0 , умножив на нее обе части уравнения (1)

$$[s(x) \otimes h(x)] \cdot w(x - x_0) + n(x) \cdot w(x - x_0) = u(x) \cdot w(x - x_0). \quad (13)$$

Здесь символ \otimes означает свертку. Второе слагаемое левой части этого уравнения дает локальное значение шума. Для определенности будем считать аддитивный шум также белым, т.е. $n_a(x) = N_a e(x)$. Тогда аналогично выводу выражения (5) получим

$$\begin{aligned} \tilde{P}_N(x_0, \omega) &= \\ &= \frac{N_a^2}{2\pi} \cdot \frac{1}{w^2(x - x_0)} + \frac{N_m^2}{2\pi} \cdot \frac{1}{(b(x) + u(x))^2 \cdot w^2(x - x_0)} + \\ &+ \frac{N_p}{2\pi} \cdot \frac{1}{(b(x) + u(x)) \cdot w^2(x - x_0)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Правая часть уравнения (13) представляет локализованные около x_0 экспериментальные данные, спектральная плотность которых будет

$$\hat{P}_U(x_0, \omega) = |F[u(x) \cdot w(x - x_0)]|^2. \quad (15)$$

Статистическая оценка спектральной плотности сигнала

$$\tilde{P}_S(x_0, \omega) = S^2(x_0) + 2\pi \overline{s(x_0, x)^2} \delta(\omega). \quad (16)$$

Статистическая оценка локальной спектральной плотности выходного сигнала на основе (13), (15) и (16)

$$\begin{aligned} \tilde{P}_U(x_0, \omega) &= \\ &= (\tilde{P}_S(x_0, \omega) \cdot |H(\omega)|^2) \otimes |W(\omega)|^2 + \tilde{m}_N(x_0, \omega) = \\ &= S^2(x_0) \cdot P_{HW}(\omega) + 2\pi \overline{s(x_0, x)^2} \cdot H^2(0) \cdot |W(\omega)|^2 + \\ &+ \tilde{P}_N(x_0, \omega). \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь

$$P_{HW}(\omega) = |H(\omega)|^2 \otimes |W(\omega)|^2 = |F[h(x) \cdot w(x)]|^2. \quad (18)$$

Минимизация ошибки

$$\Delta(S) = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{P}(x_0, \omega) - \tilde{P}_U(x_0, \omega, S(x_0)))^2 d\omega \quad (19)$$

дает

$$\begin{aligned} S^2(x_0) &= \\ &= \frac{\hat{P}(x_0, \omega) - 2\pi \cdot \overline{u(x_0, x)^2} \cdot |W(\omega)|^2 - \tilde{P}_N(x_0, \omega)}{P_{HW}(\omega)}. \end{aligned} \quad (20)$$

Таким образом, в некоторой точке x_0 исследуемого спектра могут быть определены $\tilde{P}_N(x_0, \omega)$ и

$\tilde{P}_S(x_0, \omega)$ и аналогично (11) вычислена оценка входного сигнала $\tilde{f}(x_0, x)$ в этой точке. Сдвигая окно $w(x - x_0)$, т.е. изменяя параметр x_0 , находится решение задачи для всех точек исследуемого спектра.

На рис. 3 д, е приведены примеры решения задачи деконволюции при помощи нестационарного фильтра Винера. Условия проведения модельного эксперимента соответствуют условиям решения задачи при помощи стационарного фильтра Винера — рис. 3 в, г. В качестве оконной функции $w(x - x_0)$ использовано прямоугольное окно шири-

ной 15. Результаты эксперимента показывают, что применение нестационарного фильтра Винера позволяет повысить разрешение и существенно уменьшить паразитные колебания, а в данном эксперименте — практически полностью устранить.

Как отмечалось выше, оптимальный фильтр Винера (стационарный) определяет предельную возможность решения задачи деконволюции на основе использования линейной стационарной модели процессов. Можно предположить, что, разработанный в настоящей работе нестационарный фильтр Винера, вероятно, близок к оптимальному для линейной модели вообще — стационар-

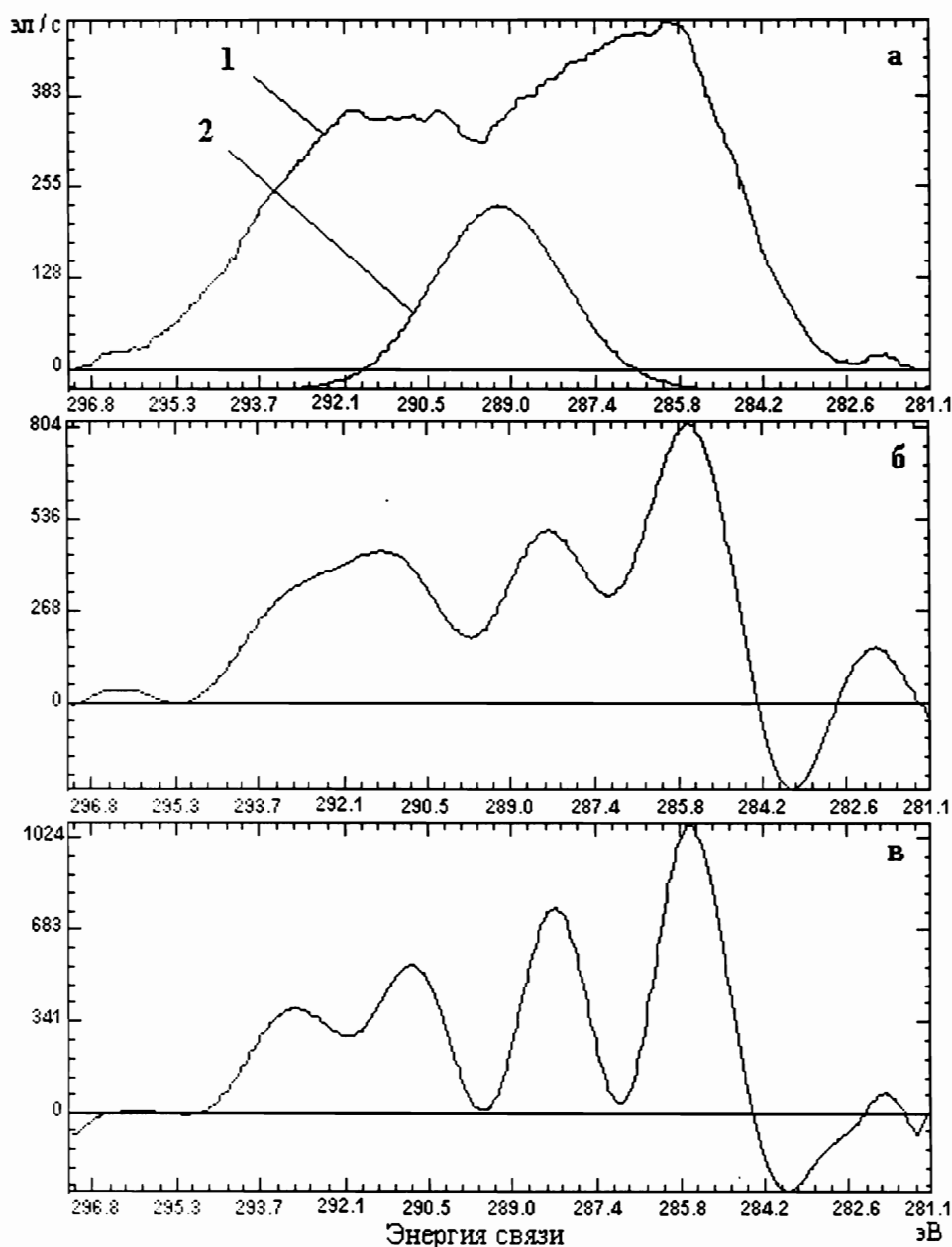


Рис. 4. Деконволюция спектра углерода фторсодержащего полимера (а) с помощью стационарного (б) и нестационарного (в) фильтров Винера.

ной или нестационарной.

3. ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ

На рис. 4 приведены результаты решения задачи деконволюции для экспериментального рентгенофотоэлектронного спектра, снятого на приборе ЭС2402. На рис. 4 а показан спектр углерода фторсодержащего полимера (кривая 1) и аппаратная функция (кривая 2).

Спектр снимался в режиме счета электронов с временем счета 0,5 сек на точку. Из спектра предварительно вычтен постоянный фон, который составлял 120 электронов в секунду. Аппаратная функция прибора по результатам его предварительного исследования была аппроксимирована кривой Гаусса с шириной на полувысоте 2,9 эВ.

На рис. 4 б приведен результат решения задачи деконволюции стационарным фильтром Винера, а на рис. 4 в — нестационарным фильтром с шириной окна, составляющей 1/4 ширины аппаратной функции.

В этом эксперименте стационарный фильтр не позволяет уверенно разрешить все спектральные составляющие и, кроме того, колебание в правой части спектра может быть интерпретировано как решение. В данном случае это будет ложное решение. Нестационарный фильтр выявляет четыре спектральные компоненты, что согласуется с теорией, и не дает явно выраженных ложных решений.

Следует отметить, что отрицательные значения интенсивности, появляющиеся в преобразованных

спектрах на рис. 3 и 4, являются следствием линейной фильтрации и не имеют физического смысла. Их можно отсечь, но, в любом случае, они не препятствуют идентификации спектра.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что конкретные математические выражения, полученные в настоящей работе, применимы не только в электронной спектроскопии, но и в других областях аналитической физики, в таких, как масс-спектрометрия, фото-спектрометрия и др., там, где процесс получения входной информации связан с измерениями потоков частиц, в частности, с подсчетом частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. 1986. М. Наука. 288 с.
2. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. 1983. М. Наука. 198 с.
3. Применение цифровой обработки сигналов. Ред. Э. Оппенгейм. 1980. М. Мир. 550 с.
4. Букингем М. Шумы в электронных приборах и системах. 1986. М. Мир. 408 с.
5. Анализ поверхности методами ОЖЭ- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Ред. Д. Бриггс и М.П. Сих. 1987. М. Мир. 598 с.
6. Раев А.Н., О.В. Русаков. Алгоритмы и математическое обеспечение для физических задач. 1986. Л. ФТИ. 160 с.

Electron Spectra Deconvolution Using an Optimal Wiener Filter

B.V. Bardin, V.D. Belov, L.V. Novikov, Yu.V. Chizhov*

Institute for Analytical Instrumentation RAS, St. Petersburg

**Saint-Petersburg State University, St. Petersburg*

A linear model of signal and noise processes generated during electron spectrum measurements is proposed. The relationships are derived for estimation of signal and noise spectral power densities which are used in the expression for the stationary optimal Wiener filter applied for spectrum deconvolution to separate overlapping peaks. A nonstationary version of the optimal Wiener filter is suggested and formulas for its parameters calculation are obtained. Numerical modeling results have shown that the non-stationary filter leads to significant resolution enhancement and increase in reliability of results due to substantial residual oscillation of the solution, that may result in spurious spectral peak identification.