

М.Ю. Катаев, О.Ю. Никифорова

Погрешность восстановления параметров линий из спектра поглощения. Часть 1. Влияние фона и шума измерений

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 8.09.2003 г.

Проведены расчеты параметров контура спектральной линии из фрагмента модельного спектра поглощения и его производной по частоте с использованием различных методов подгонки и удаления фоновой составляющей. Проанализировано влияние величины шума измерений и фона на точность восстановления параметров линий поглощения.

Введение

Сведения о параметрах спектральных линий поглощения широко применяются при решении различных задач атмосферной оптики. Наряду с результатами теоретических расчетов [1] основным источником информации о параметрах линий являются экспериментальные данные. Обычно это Фурье-спектры, спектры пропускания и спектры поглощения [2]. Определение параметров линий из спектров разного вида имеет особенности. С помощью численного моделирования нами проанализировано влияние фоновой составляющей и шума измерений на точность восстановления центра линии, ее полуширины и интенсивности из фрагмента спектра поглощения.

Моделирование фрагмента спектра

В общем случае измеренный спектр поглощения можно представить в виде

$$\tilde{f}(x_i) = f(x_i) + \xi(x_i), \quad (1)$$

$$f(x_i) = b(x_i) + \sum_{j=1}^{N_L} k_{\max j} F(x_i, \nu_{0j}, \gamma_j),$$

$$i = 1, \dots, N; \quad j = 1, \dots, N_L,$$

где $b(x)$ – фоновая составляющая измерений; k_{\max} – коэффициент поглощения в центре линии; F – тип контура линии поглощения; ν_0 и γ – центр и полуширина контура; N – число точек в измеренном спектре; N_L – число спектральных линий, поглощение которых существенно на рассматриваемом участке спектра; ξ – шум измерения.

Фоновая составляющая имеет различную природу и в основном определяется характеристиками приемного тракта (АЦП, пропускание оптики, спектральная чувствительность приемника и др.). В основном на практике рассматриваются три вида фоновой составляющей [3]:

$$b(x) = a_0 + a_1 x, \quad (2)$$

$$b(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2, \quad (3)$$

$$b(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3.$$

Здесь a_0, a_1, a_2, a_3 – неизвестные параметры модели фона.

В расчетах мы использовали доплеровский контур спектральной линии при моделировании фрагмента спектра или его производной. Ширина модельного фрагмента составляла 30 полуширин γ линии поглощения, центр линии поглощения ν_0 располагался в средней части фрагмента. Для имитации реального эксперимента к рассчитанному коэффициенту поглощения добавлялись фоновая составляющая и шум. Шум моделировался с помощью датчика случайных чисел, распределенных нормально, величина шума в расчетах варьировалась от 0 до 20% при нормировке на коэффициент поглощения в центре линии k_{\max} .

При обработке данных реального эксперимента не всегда известен тип фона. Для изучения влияния неточности выбора модели фона на точность восстановления параметров нами были произведены 3 серии модельных расчетов – без фоновой составляющей, с линейной фоновой составляющей (2) и квадратичной фоновой составляющей (3). Коэффициенты a_0, a_1 и a_2 подбирались таким образом, чтобы величина фоновой составляющей в центре линии была не более 8% от k_{\max} и наклон фоновой составляющей обеспечивал разницу значений на ширине линии не более 0,2% от k_{\max} . Наличие соседних линий в расчетах не учитывалось.

Примеры модельного спектра поглощения с фоновой составляющей и без нее представлены на рис. 1. Спектр поглощения содержит 1%-й шум, производная спектра представлена без шума, так как даже при зашумлении в 1% наличие фона скрадывается.

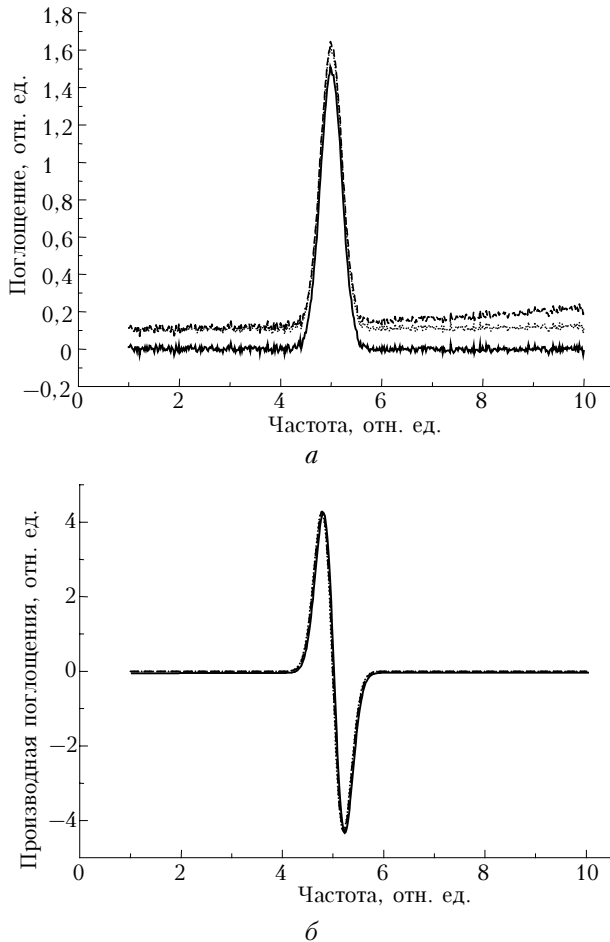


Рис. 1. Модельные фрагменты спектра поглощения (а) и его производной (б)

Методы определения параметров спектральных линий

Большинство методов обработки данных эксперимента опирается на минимизацию тем или иным методом невязки между рассчитанной моделью спектра и измерениями:

$$\Delta = \sqrt{\frac{1}{N-M} \sum_{i=1}^N (\tilde{y}(x_i) - f(x_i, p))^2};$$

$$\{p_j\} = p_1, \dots, p_M, \quad N > M,$$

где \tilde{y} , f – измеренный и модельный спектры; $\{p_j\}$, $j = 1, \dots, M$ – искомые параметры спектральных линий, M – число искоемых параметров (для доплеровского контура $M = 3$).

Нахождение оценок вектора p сводится к решению системы уравнений:

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial p_j} = 0, \quad j = 1, \dots, M.$$

Получаемая при этом система уравнений нелинейна и может быть решена как методами перебора (прямыми), так и методами нелинейной оптимизации [4, 5].

Среди прямых методов самым распространенным является метод перебора, суть которого состоит в поиске минимального значения невязки в узлах сетки по искомым параметрам:

$$\Delta \rightarrow \min, \quad p_j = p_j^0 + n\Delta p_j, \quad n = 0, \dots, n_{\max},$$

где $\{p_j^0\}$ и $\{\Delta p_j\}$ – начальное значение и шаг по сетке для каждого из параметров.

Качество решения, полученного методом перебора (и с помощью различных его вариантов, например методом случайного поиска), зависит от величины шага $\{\Delta p_j\}$, а необходимое для поиска время – от точности задания начального приближения $\{p_j^0\}$.

Нелинейные методы опираются в основном на известные подходы к минимизации нелинейных уравнений (например, методы Ньютона–Рафсона, Левенберга–Маркуарта и др. [4–7]). В первом случае решают уравнение

$$p_{n+1} = p_n + B^T [V^2 \chi(p_n)]^{-1};$$

$$\chi_i(p) = [y(x_i) - f(x_i, p)]^2,$$

а второй связан с решением уравнений вида

$$\delta p = (B^T W B + \alpha I)^{-1} B^T W \delta y,$$

где $\delta p_j = p_j - p_j^0$; $\delta y_i = \tilde{y}_i - f(x_i, p_j)$, $i = 1, \dots, N$; W – матрица весовых коэффициентов, определяемая погрешностью измерений; $B_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial p_j}$; $\alpha > 0$ –

параметр, определяемый условиями задачи; I – единичная матрица; символ T означает транспонирование.

Метод (4) эффективно работает при условии, что задано достаточно близкое к точному начальное значение параметров $\{p_j^0\}$ и при незначительном шуме. Если эти условия не соблюдаются, тогда применяют метод Левенберга–Маркуарта (5).

Рассмотренные выше методы основаны на использовании первых и/или вторых производных от функции невязки. Однако на практике применение этих методов не всегда возможно, исходя из сложности дифференцируемой функции (например, при использовании контура Галатри [8] или др.). Хорошей альтернативой этим методам являются методы прямого поиска, когда информация о производных не используется вообще.

Мы проводили восстановление параметров линий из модельных спектров пятью способами: подгонкой параметров доплеровского контура с помощью пакета Origin (метод нелинейной оптимизации второго порядка), двумя модификациями метода прямого поиска, методом Ньютона–Рафсона (метод нелинейной оптимизации первого порядка) и с помощью разработанного нами ранее пакета программ RELIP [9].

Поскольку в модельном спектре присутствовала фоновая составляющая, мы проводили обработку с ее учетом. При обработке с помощью пакета Origin предполагалось наличие линейного фона,

параметры которого подгонялись одновременно с параметрами контура. При использовании обоих методов прямого поиска и метода Ньютона—Рафсона предварительно удалялся линейный или квадратичный фон с помощью одной и той же процедуры. Еще одна процедура предварительного удаления линейной фоновой составляющей предусмотрена в пакете RELIP.

Если моделировалась производная спектра поглощения, то в пакете RELIP перед подгонкой предварительно проводилось интегрирование, что обусловило большие погрешности восстановления параметров контура. В остальных случаях при подгонке производная доплеровского контура использовалась в качестве модельной функции.

Результаты расчетов и обсуждение

Первая серия расчетов была проведена для модельной функции без фона. На рис. 2 и 3 приведены относительные погрешности восстановления центра линии, ее полуширины, максимального коэффициента поглощения и интенсивности из спектра поглощения и его производной. Поскольку при моделировании в качестве частоты использовались

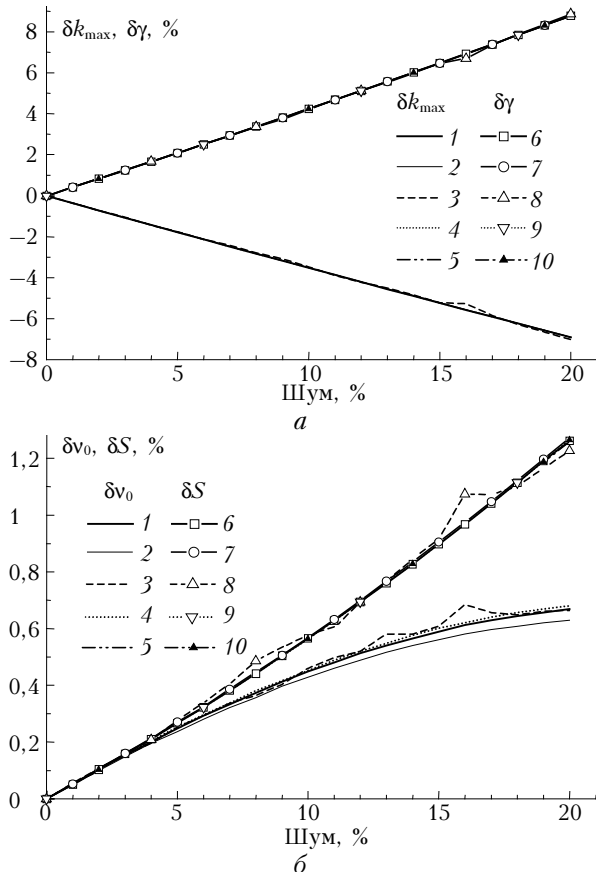


Рис. 2. Относительная погрешность определения коэффициента поглощения в максимуме (1–5) и полуширины (6–10) (а); центра линии поглощения (1–5) и ее интенсивности (6–10) (б) из спектра без фона с помощью пакета Origin (1, 6), двух модификаций метода прямого поиска (2, 7) и (3, 8), метода Ньютона—Рафсона (4, 9) и пакета RELIP (5, 10)

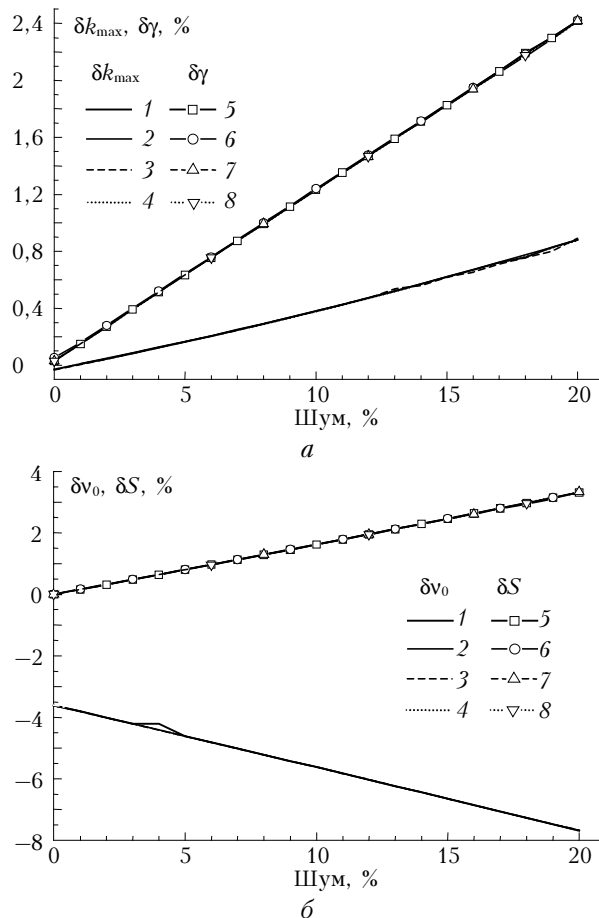


Рис. 3. Относительная погрешность определения коэффициента поглощения в максимуме (1–4) и полуширины (5–8) (а); центра линии поглощения (1–4) и ее интенсивности (5–8) (б) из производной спектра без фона с помощью пакета Origin (1, 5), двух модификаций метода прямого поиска (2, 6) и (3, 7) и метода Ньютона—Рафсона (4, 8)

величины в произвольных единицах, относительная погрешность восстановления центра линии приведена в процентах от полуширины. Интенсивность линии не являлась подгоняемым параметром, а была рассчитана с использованием восстановленных значений k_{\max} и γ . Следует отметить, что в пакете RELIP для определения параметров линий реализовано два метода, это метод случайного поиска и Левенберга—Маркуарта. Расчеты проводились обоими методами, но во всех обработанных ситуациях их результаты совпадали с точностью до 5–6-й значащей цифры, поэтому они изображены на рис. 2, 3 одной линией. На рис. 3 результаты подгонки с помощью пакета RELIP не представлены.

Из рис. 2 и 3 видно, что при отсутствии фоновой составляющей все использованные методы определения параметров дают близкие результаты. Погрешность восстановления центра линии не превосходит 0,5% полуширины для сигнала и 8% для производной даже при 20%-м шуме. Хотя с ростом уровня шума погрешности определения k_{\max} и γ растут и достигают 7–10% при использовании спектра с 20%-м шумом, погрешность определения интен-

сивности не превосходит 1–1,5%. Это связано с тем, что погрешности определения k_{\max} и γ имеют разные знаки и их влияние компенсируется. При анализе производной спектра точность определения k_{\max} и γ значительно выше, чем для спектра. В зависимости от уровня шума погрешности определения всех параметров растут, и этот рост имеет приблизительно линейный характер.

Такие же расчеты были проведены для модельного сигнала с линейным фоном с удалением линейного фона при обработке. Их результаты представлены на рис. 4 и 5.

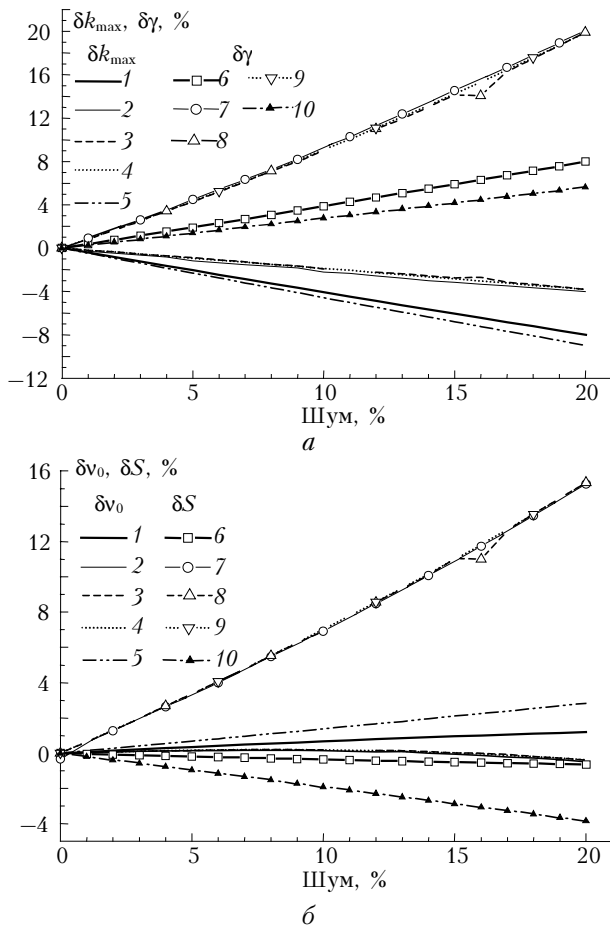


Рис. 4. Погрешность определения параметров линии из спектра с линейным фоном. Обозначения те же, что на рис. 2

Из рис. 4 и 5 видно, что хотя в обработке использован фон такого же типа, что и при моделировании сигнала, погрешности определения параметров линии возросли, хотя и сохранили линейную зависимость от уровня шума. Результаты, полученные при различных способах обработки, отличаются. Так как результаты, полученные обоими методами прямого поиска и методом Ньютона–Рафсона, близки и при использовании этих методов использовалась одна и та же процедура удаления фона, различие погрешностей определения параметров линий, вероятно, вызвано именно неточностью удаления фоновой составляющей. Результаты

восстановления центра линии и ее интенсивности из спектра оказались наилучшими при использовании пакета Origin (т.е. при одновременной подгонке параметров линии и фона), хотя точность определения полуширины выше для пакета RELIP, а коэффициент поглощения в центре линии наиболее точно определен тремя остальными методами.

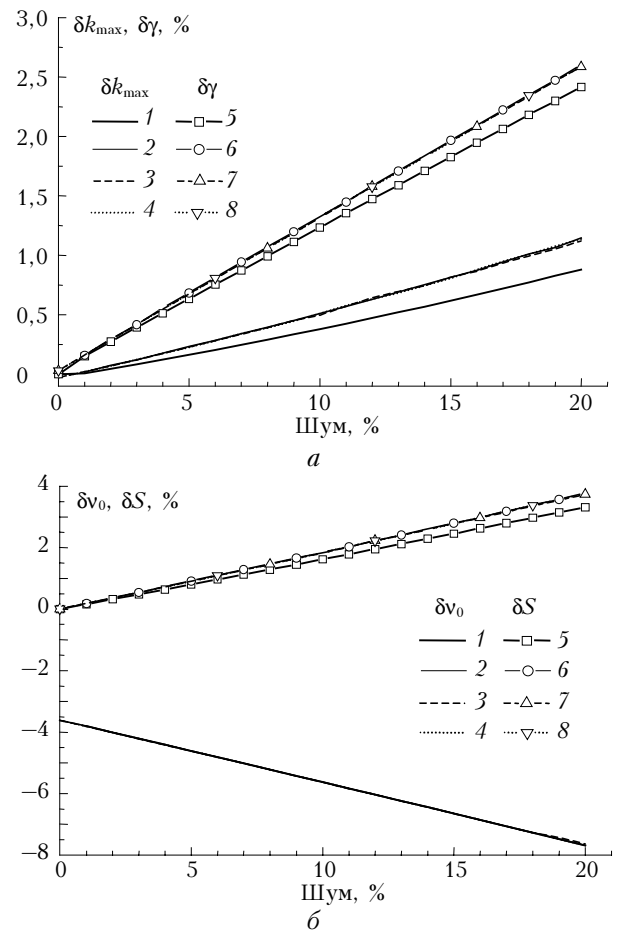


Рис. 5. Погрешность определения параметров линии из производной спектра с линейным фоном. Обозначения те же, что на рис. 3

При использовании производной спектра (рис. 5) наличие фоновой составляющей не привело к существенному росту погрешностей определения параметров линии. Как и для случая отсутствия фона, наибольшая погрешность для центра линии составляет 6–7% полуширины, погрешности восстановления остальных параметров остаются в рамках 2–3% даже при 20%-м шуме.

Поскольку в эксперименте не всегда точно известен характер фона, в следующей серии расчетов проведено определение параметров линии тремя из перечисленных выше способов (одним из методов прямого поиска, методом Ньютона–Рафсона и с использованием пакета Origin) из модельных спектров, рассчитанных для линейного и квадратичного фона или отсутствия фоновой составляющей вообще. При обработке предполагалось, что фон линейный, квадратичный или отсутствует независимо от используемого

модельного спектра. Относительные погрешности восстановления параметров линий приведены на рис. 6.

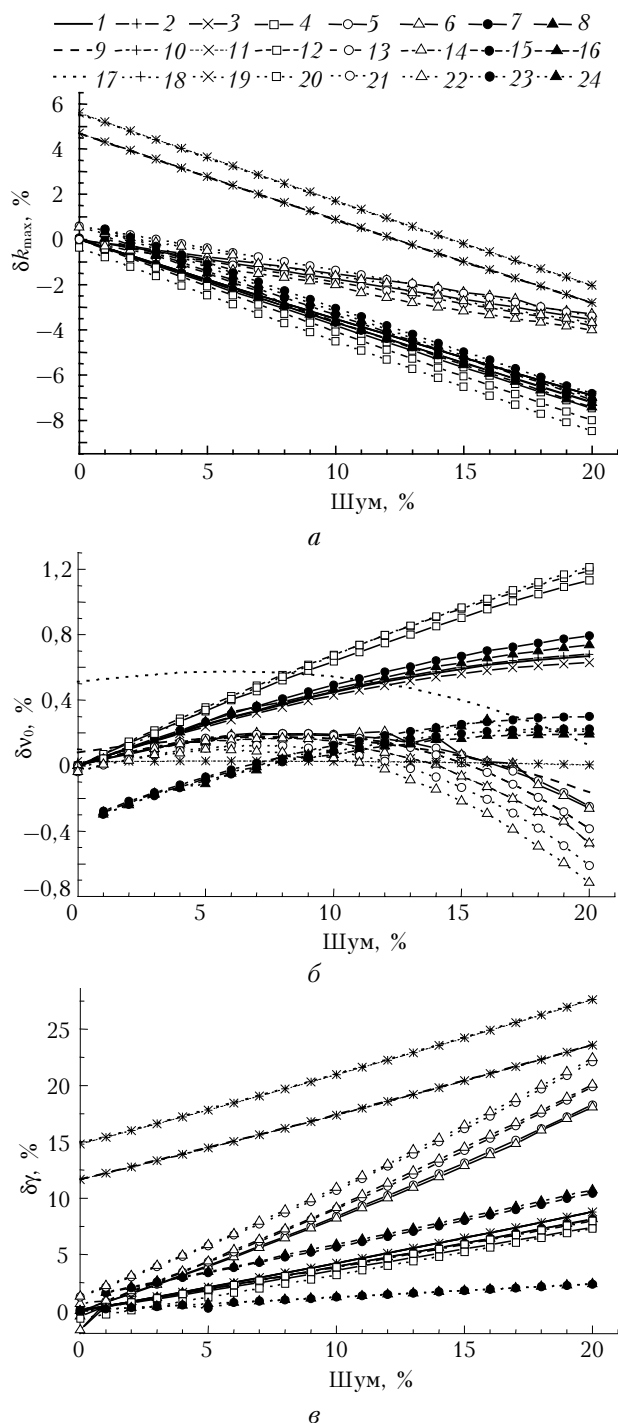


Рис. 6. Сравнение погрешностей восстановления коэффициента поглощения в центре линии (а), центра (б) и полуширины (в) линии поглощения в различных ситуациях: восстановление параметров без учета фоновой составляющей (1–3, 9–11, 17–19), с учетом линейного (4–6, 12–14, 20–22) или квадратичного (7, 8, 15, 16, 23, 24) фона из модельного фрагмента спектра без фона (1–8), с линейным (9–16) и квадратичным (17–24) фоном с помощью пакета Origin (1, 4, 9, 12, 17, 20), методом Ньютона–Рафсона (2, 5, 7, 10, 13, 15, 18, 21, 23) и методом прямого поиска (3, 6, 8, 11, 14, 16, 19, 22, 24)

Из рисунка видно, что при незнании характера фона можно ожидать погрешность восстановления центра линии около 1% полуширины даже для 20%-го шума. Неточность восстановления k_{\max} не превосходит 8%, а погрешность в определении полуширины в самом неблагоприятном случае может превосходить 20% (при неучете наличия фона вообще), но остается в рамках 5–7% при использовании квадратичной фоновой составляющей при обработке.

Заключение

Проведенные расчеты показали, что зависимость погрешности восстановления параметров спектральной линии от уровня шума имеет приблизительно линейный характер, по крайней мере при уровне шума не более 20%, при использовании как спектра поглощения, так и его производной.

Наличие даже незначительного (менее 8% от максимальной величины сигнала) фона приводит к увеличению погрешностей восстановления параметров линии, но это увеличение при использовании производной менее значительно, чем при использовании спектра поглощения.

При анализе спектра поглощения предварительное удаление квадратичного по частоте фона (даже если его характер в действительности не известен) приводит к улучшению качества восстановления параметров спектральной линии.

Все представленные результаты получены при отсутствии фоновой составляющей в модельном спектре или соответствуют одному ее уровню – 8% от максимального значения сигнала. Зависимость погрешности восстановления параметров линий от различных параметров фона будет предметом наших дальнейших исследований. Мы планируем рассмотреть также влияние соседних линий, центры которых расположены за пределами модельного фрагмента спектра, на качество определения параметров исследуемой линии.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 00-15-98589 «Школа» и поддержана Программой отделения физических наук РАН № 2.10 «Оптическая спектроскопия и стандарты частоты».

1. Strong K., Taylor F.W., Calcutt S.B., and Remedios J.J. Spectral parameters of self- and hydrogen-broadened methane from 2000 to 9500 cm^{-1} for remote sounding of the atmosphere of Jupiter // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1993. V. 50. N 4. P. 363–429.
2. Зуев В.Е., Макушкин Ю.С., Пономарев Ю.Н. Спектроскопия атмосферы. Л.: Гидрометеониздат, 1987. 247 с.
3. Horak M. and Vitek A. Interpretation and processing of vibrational spectra – A WI publications. 1978. 383 p.
4. Волков Е.А. Численные методы. М.: Наука, 1987. 248 с.

5. *Фиакко А., Мак-Кормик Г.* Нелинейное программирование. Методы последовательной оптимизации. М.: Мир, 1972. 240 с.
6. *Vucelic M. and Mijovic S.* Regularization method and applications in spectroscopy // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1996. V. 56. N 4. P. 617–621.
7. *Benner D.C., Rinsland C.P., Devi V.M., Smith M.A.H., and Atkins D.* A multispectrum nonlinear least squares fitting technique // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1995. V. 53. N 6. P. 705–721.
8. *Varghese P.L. and Hanson R.K.* Collisional narrowing effects on spectral line shapes measured at high resolution // Appl. Opt. 1984. V. 23. N 14. P. 2376–2385.
9. *Катаев М.Ю., Никифорова О.Ю.* Пакет программ RELIP и его применение для определения параметров спектральных линий из оптико-акустических измерений // Оптика атмосф. и океана. 2001. Т. 14. № 1. С. 49–52.

M.Yu. Kataev, O.Yu. Nikiforova. Error of retrieval of spectral line parameters from the absorption spectrum. Part 1. Effect of background and measurement noise.

Parameters of a spectral line profile are calculated from the fragment of a model absorption spectrum and its frequency derivative using different methods for fitting and removal of the background component. The effect of measurement noise and background on the accuracy of retrieval of absorption line parameters is analyzed.