Определение параметров цифровых спектров и их анализ

Ю. С. Воротынцева

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

yuvorotynceva@yandex.ru

Е. С. Сулоева

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

suloewa@list.ru

***Аннотация.* В данной работе рассмотрен подход многомерной оптимизации цифровых спектров с целью определения основных параметров спектральных линий при помощи программного ресурса. Так как профиль линии описывается функцией Гаусса, далее проводится многомерная оптимизация. Результатом работы программ являются значения основных параметров спектральной линии и определение величин стандартных ошибок. Для этого применяется статистический метод, позволяющий определять стандартные ошибки по сгенерированным случайным выборкам. Также в работе рассматриваются различные факторы, влияющие на суммарную ошибку параметров.**

Ключевые слова: многомерная оптимизация, обработка спектров, определение параметров, вероятностные методы

I. Введение

Описание данных, представленных в виде цифровых спектров, профилем определенной формы, включающим ряд характерных параметров, происходит практически во всех областях научных исследований. Для этих целей применяются различные разработанные подходы и методы, с различными модификациями. Результатом оптимизации таких данных является получение значений основных параметров спектральных линий – параметры амплитуды a, полуширины b и центральной частоты линии ν_0.

Однако, помимо основных параметров, при любом анализе важным аспектом является оценка величины ошибки соответствующего параметра. В данном докладе описан подход решения этой проблемы, на основе рассматриваемых методов реализована программа оптимизации, определяющая параметры спектральных линий, и программа вычисления ошибок определенных параметров.

II. Методы

Подход обработки цифровых спектров, в общем случае, подразделяется на два этапа:

a) оптимизация данных цифрового спектра с определением основных параметров (a, b, ν_0) ,

b) вычисление величины стандартной ошибки для каждого из определяемых параметров (σ_a, σ_b, $\sigma_{\nu 0}$).

Ниже приводится описание методов, которые применяются в данном подходе.

A. Симплекс-метод Нелдера–Мида многомерной оптимизации

Для оптимизации цифровых данных спектра применяется симплекс-метод Нелдера–Мида [1]. Одним из главных преимуществ данного метода является то, что в нем не используется вычисление градиента функции, а также не вычисляются производные функции, что существенно упрощает работу программы. Важным преимуществом метода Нелдера–Мида перед другими методами, которые часто используются для оптимизации, является значительное снижение времени вычислений, что позволяет увеличить количество параметров для оптимизации. В случае спектральных линий многомерная оптимизация необходима ввиду большого количества параметров, особенно, если осуществлять обработку асимметричного или многокомпонентного спектра.

Спектральные линии, в простейшем случае, аналитически описываются функцией Гаусса. В более сложном случае, когда профиль линии асимметричный, или, когда линия состоит из нескольких четко разделенных отдельных компонент, он описывается суммой нескольких функций Гаусса. Это позволяет применить критерий минимума χ^2, и, таким образом, работа программы оптимизации сводится к минимизации χ^2 при помощи применения метода Нелдера–Мида, описанного в [2]:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{(f_i - f_i')^2}{\sigma^2},$$

где N_c – число каналов в спектре, от $i = 1 \ldots N_c$ (размер выборки), $\sigma = \overline{n}$, f – наблюдаемое значение в спектре, f' – значение аналитической функции, которая описывает профиль спектральной линии и подбираемое программой оптимизации. Аналитическая функция представлена в простейшем случае гауссовой кривой:

$$G(\nu) = \frac{a}{\sqrt{\pi} b} \exp\left[-\frac{(\nu - \nu_0)^2}{b^2} \right].$$

Стоит отметить, что оптимизация считается корректной, если значение χ^2 меньше или порядка единицы. При достижении такого значения определяются основные параметры спектральной линии – параметр амплитуды a, соответствующей пиковой интенсивности линии $I = a/b\sqrt{\pi}$; параметр полуширины b (доплеровская ширина, соответствующая уровню интенсивности $1/e$), этот параметр имеет связь с шириной линии по половинному уровню FWHM = $1.6651b$, и центральной частоты линии ν_0.

Перед началом работы программы, на вход, помимо цифрового спектра, подаются некоторые априори известные данные: величина шума $\overline{n}$, количество компонент в профиле линии (если линия симметрична, количество компонент – 1) и начальные приближенные значения основных параметров. После завершения работы, программа выводит оценки значений параметров a', b'и ν_0', соответствующих минимальному значению χ^2, величина которого также контролируется.

В случае асимметричного спектра необходимо подбирать оптимальное количество гауссовых компонент (от j = 2, 3…m), которыми можно было бы описать такой профиль. В этом случае, соответственно, количество параметров увеличивается, и профиль описывается суммой гауссовых кривых:

$$\sum_{j=2}^{j=m} G_j(\nu_j) = \frac{a_j}{\sqrt{\pi} b_j} \exp\left[-\frac{(\nu_j - \nu_{0j}{}^2)}{b_j^2} \right].$$

Однако необходимо отметить, что в предельном приближении, профиль любой формы возможно описать бесконечным количеством гауссовых функций, поэтому одним из требований является минимальное количество гауссовых компонент m, которыми можно было бы описать асимметричный или многокомпонентный профиль, при выполнении условия χ^2 меньше или порядка 1.

B. Статистический метод определения стандартных ошибок параметров

Актуальной проблемой, при любой обработке данных, является определение ошибок тех или иных величин. Итогом работы программы оптимизации являются величины параметров без каких-либо отклонений. В случае, когда необходимо получить результаты в виде значения параметра с величиной ошибки, только для конкретного набора данных (цифрового спектра, для которого определяются параметры), применяется статистический метод, который использует генерирование случайных выборок. Это широко применяемый компьютерно-ориентированный статистический инструмент, который может давать оценки, которые другими способами было бы трудно получить. Данный метод широко используется при статистических обработках. На основе данного метода реализовано несколько программ, результатом работы которых является оценка величины ошибки для каждого из основных параметров. Обобщенно в программе определяются параметры λ для которых необходимо оценить ошибки σ_λ.

По формуле, описывающей наилучшим образом профиль исходного спектра (параметры которого определяются), строится кривая, которая, по сути, представляет собой незашумленный спектр. Затем к нему добавляется некоторая величина, масштабированная на $\overline{n}$, распределенная по нормальному закону. Таким образом будет создан спектр, аналогичный исходному – с таким же отношением сигнала к шуму. Так создается, по крайней мере, B = 200 спектров, для каждого из них снова определяются параметры λ с применением программы оптимизации симплекс-методом Нелдера–Мида, а затем вычисляется среднеквадратичное отклонение, которое является величиной стандартной ошибки:

$$\sigma_\lambda = \left\{ \sum_{b=1}^{B} \frac{(\hat{\lambda}_b - \bar{\hat{\lambda}})^2}{B-1} \right\}^{1/2},$$

где

$$\bar{\hat{\lambda}} = \sum_{b=1}^{B} \frac{\hat{\lambda}_b}{B}$$

– среднее значение параметра.

Окончательный результат работы программ оптимизации и вычисления ошибок – определенные основные параметры спектральной линии: $a\pm \sigma_a$, $b\pm \sigma_b$, $\nu_0\pm \sigma_{\nu 0}$.

III. Факторы, влияющие на величину ошибок

Необходимо отметить, что цифровой спектр представляет собой дискретный набор частот $\{\nu_i\}$, где каждая частота соответствует конкретному измерительному каналу, и каждой частоте сопоставляются измеренные величины интенсивности $\{f_i\}$. Точность таких измерений зависит от многих факторов, главным образом, от отношения сигнала к шуму *SNR* (signal-to-noiseratio) и ширины канала Δ_ν (спектральное разрешение). Из-за наличия этих факторов, любой спектр содержит в себе, помимо полезной, аддитивную шумовую составляющую, т. е.:

$$f_i = s_i + n_i.$$

Таким образом, каждому значению f_i сопоставляется некоторая неопределенность σ_i. Шум в канале можно охарактеризовать величиной $\overline{n}$. Для ее определения в спектре выбираются свободные от спектральных линий диапазоны, и вычисляется среднее значение интенсивностей в соответствующих каналах. Полученное значение присваивается всему спектру.

Другим важным моментом является ширина канала Δ_ν. Чем меньше это значение, тем выше точность измерений. Особенно важно это для определения центров линий (центральной частоты ν_0). Другой пример, где спектральное разрешение становится основным фактором – узкие многокомпонентные линии (например, сверхтонкое расщепление). В случаях, когда расстояние между отдельными компонентами $\Delta\nu$ значительно меньше, чем ширина канала, эти компоненты становятся неразрешимыми и сливаются в одну компоненту, или, в случае меньшей ширины канала, показывают асимметричный профиль линии.

Как отношение сигнал/шум, так и ширина канала имеют решающее значение при обработке спектров, поскольку они определяют конечную неопределенность положения линии. Ожидаемая статистическая неопределенность σ центра линии связана с величиной $\overline{n}$, разрешением Δ_ν и шириной линии по половинному уровню FWHM [3]:

$$\sigma = K\cdot \bar{n}/I\ (\Delta_\nu\cdot \mathrm{FWHM})^{1/2},$$

где K – фактор порядка единицы, зависящий от формы линии. $K = 1$ для симметричного профиля Гаусса.

На правильность определения параметров влияют следующие факторы:

- интенсивности отсчитываются в центре канала (это может происходить в любой области в диапазоне ширины канала);
- количество интервалов дискретизации и ширина одного интервала дискретизации (канала);
- эффект площади профиля;
- каналы имеют одинаковые ширины (разбиение каналов неравномерно);
- интенсивности не коррелированы;
- эффекты калибровки.

Первые 3 фактора (эффекты дискретизации) подробно рассматриваются в [4]. В этой работе исследуются зависимости ошибок определения FWHM и центра линии, от каждого из этих факторов и демонстрируется эффективность коррекции Шеппарда [5].

Другой вид неопределенностей – неопределенности, которые можно отнести к трем основным параметрам (амплитуда, центральная частота и ширина), связанным с оптимизацией профилей модельных линий к данным наблюдений. Эти ошибки определения параметров можно вычислить при помощи применения различных статистических методов (описывается в разделе II).

IV. Анализ и результаты

Для того чтобы проверить правильность работы программы, были созданы так называемые эталонные спектры путем генерации гауссовых профилей с заданными параметрами a, b, v_0 и уровнем шума $\bar{n}$ (шум гауссовский, распределение по нормальному закону). После работы программ определяются параметры a', b' и v_0', и их соответствующие ошибки σ_a,σ_b и σ_{v0}. Считается, что параметры определяются правильно (с требуемой достоверностью), если выполняются 2 условия:

$$\Delta a = |a - a'| \le \sigma_a,$$
$$\Delta v_0 = |v_0 - v_0'| \le \sigma_{v0},$$
$$\Delta b = |b - b'| \le \sigma_b.$$

и

$$\chi^2 \le 1.$$

Данные условия являются критериями достоверности.

A. Однокомпонентный симметричный профиль

Для оценки правильности определения параметров для однокомпонентного симметричного профиля, были созданы 3 спектра с различными параметрами и уровнем шума. На рис. 1 показаны эти спектры.

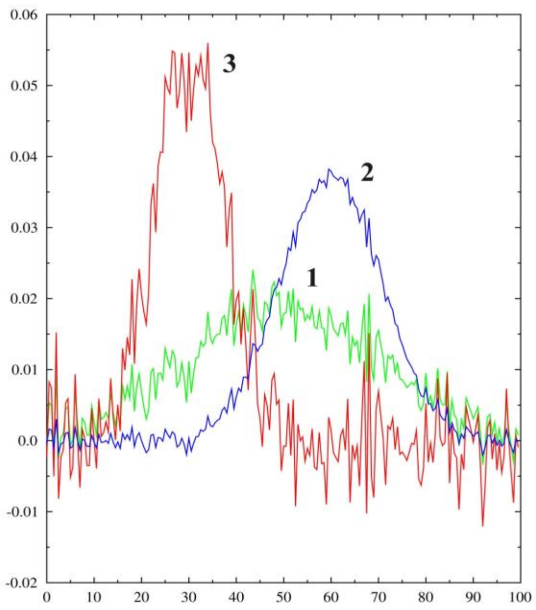

Рис. 1. Спектральные линии с различными значениями параметров a, b, v_0 и уровнем шума $\bar{n}$. По вертикали отложены значения антенной температуры (в Кельвинах), по горизонтали – значение частоты $\nu = 25100 - \nu$ (в МГц)

К каждому из спектров применялись программы оптимизации для определения параметров и программа вычисления ошибок. В табл. 1 сведена информация о спектрах. В первой колонке указан номер спектра (рис. 1), во второй-четвертой колонках – параметры a, b, v_0 соответственно, в пятой – уровень шума.

ТАБЛИЦА I.

№	A	b	v_0	$\bar{n}$
1	1	30	50	0,002
2	1	15	60	0,001
3	1	10	30	0,005

В табл. 2, во второй-четвертой колонках отображены значения модулей разности между эталонными a, b, v_0 и определенными параметрами a', b'и v_0', соответственно, в пятой-седьмой – величины ошибок для каждого из параметров, в восьмой – значение χ^2.

ТАБЛИЦА II.

№	Δa	Δb	Δv_0	σ_a	σ_b	σ_{v0}	χ^2
1	0,018	0,60	0,20	0,02	0,7	0,4	0,95
2	0,007	0,20	0,12	0,02	0,3	0,2	0,93
3	0,0004	0,07	0,03	0,006	0,1	0,06	0,95

Данные результаты показывают, что для рассматриваемых случаев критерии достоверности выполняются.

B. Асимметричный профиль

Здесь создан асимметричный профиль спектральной линии. Для этого применялась та же процедура генерации, создающая двухкомпонентный спектр различных параметров без четкого расщепления (рис. 2). Параметры задавались следующие: a_1, b_1, v_{01} и a_2, b_2, v_{02}.

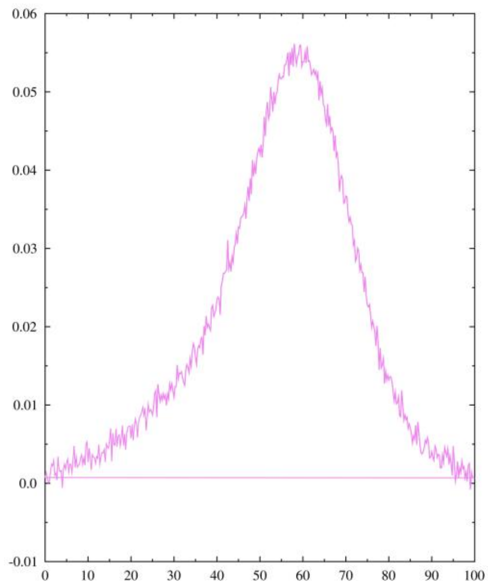

Рис. 2. Асимметричный профиль спектральной линии. По вертикали отложены значения антенной температуры (в Кельвинах), по горизонтали – значение частоты ν = 25100 – ν (в МГц)

Так как при обработке спектров в случае асимметричных линий априори неизвестно количество компонент, в данном исследовании предполагалось, что линия содержит от m = 1 до m = 4 компонент. В табл. 3 занесены соответствующий номер числа компонент (в первой колонке) и значение χ^2 (вторая колонка).

ТАБЛИЦА III.

Количество компонент m	χ^2
1	9,03
2	1,09
3	1,09
4	1,09

Результаты анализа показывают, что предположение о том, что рассматриваемая спектральная линия – однокомпонентна и симметрична – недостаточное. В случае с 2, 3 и 4 компонентами значение χ^2 удовлетворяет условию достоверности. Однако необходимо отметить, что при оптимизации не рекомендуется использовать большее количество компонент, т. к. в бесконечном приближении ($m \to \infty$) можно описать профиль любой формы. Кроме того, в случаях рассмотрения более 2 компонент, программа оптимизации определяла параметры полуширины и центральной частоты «лишних» компонент таким образом, что, либо эти компоненты повторяли профили второй или первой, либо параметры полуширины и центральной частоты имели значения, уходящие к бесконечности. Поэтому, для рассматриваемого примера, случай двухкомпонентной линии является оптимальным.

V. Заключение

По результатам данной работы была проверена правильность работы программы оптимизации, суть которой сводится к минимизации χ^2 симплекс-методом Нелдера–Мида, для определения основных параметров спектральных линий – параметров амплитуды a, полуширины b и центральной частоты линии ν_0. Так как при оптимизации спектров возникают некоторые неопределенности параметров, была реализована программа вычисления ошибок определяемых параметров, применяющая статистические методы. Для проверки правильности работы программы были выдвинуты два критерия достоверности определения параметров и сгенерированы эталонные спектры с различными значениями параметров. Анализ показывает, что программа работает корректно и критерии достоверности выполняются.

Список литературы

[1] Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование, Москва: Мир, 1975.

[2] Press W.H. Numerical Recipes in C / 2nd ed., Cambridge University Press, 271 p. 1992.

[3] Landman D.A. et al., On the statistical uncertainties associated with the line profile fitting, ApJ, 261, 732, 1982.

[4] Valentine J.D., Rana A.E. Centroid and Full-Width at Half Maximum Uncertainties of Histogrammed Gaussian Distribution – The Moments Method // IEEE Transactions on Nuclear Science, 43, 5, 1996.

[5] Sheppard W.F. On the application of the Theory of Error to cases of normal distribution and normal correlations // Phil. Trans., A192, 101, 1898.