

УДК 519.6, 543.42

ПРИМЕНЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОГО ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ФОРМЫ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ

© 2012 А.К. Чернышов, Е.А. Чернышова

Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН

Поступила в редакцию 25.01.2012

В работе описана методика обработки сигнала прямой абсорбционной спектроскопии с помощью непрерывного вейвлет-преобразования. Данный подход позволяет идентифицировать основные типы профилей спектральных линий, а для доплеровского и лоренцевского контуров оценивать их ширину без непосредственного измерения. Продемонстрирована работоспособность метода при исследовании зашумленного сигнала спектрометра.

Ключевые слова: контур спектральной линии, непрерывное вейвлет-преобразование, фильтрация шумов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Форма профиля спектральной линии представляет важную информацию, например, о силе и характере взаимодействий между молекулами [1], концентрации и температуре газов при дистанционном зондировании земной и планетарных атмосфер [2]. На практике точный профиль спектральной линии обычно определяют аппроксимацией экспериментальных данных с помощью доплеровского, фойгтовского или лоренцевского контуров при учете давления в газовой смеси [3]. Подобная процедура достаточно трудоемка, поэтому поиск более простых методик определения формы спектральной линии продолжается.

В работе [4] продемонстрирован подход на основе непрерывного вейвлет-преобразования (НВП), позволяющий идентифицировать модельные контуры Доплера и Лоренца причем без предварительной информации о давлении. В данной работе подход [4] расширяется на контур Фойгта и исследуется возможность обработки сигнала прямой абсорбционной спектроскопии на фоне сильных гармонических помех.

2. ИДЕНТИФИКАЦИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ С ПОМОЩЬЮ ВЕЙВЛЕТОВ

Вначале приведем, для облегчения понимания, краткое описание подхода [4]. Непрерывное вейвлет-преобразование произвольного сигнала $f(x)$ имеет вид

$$D(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\psi^*(x,a,b)dx, \quad (1)$$

где $D(a,b)$ – вейвлет-проекция исходного сигнала; $\psi(x,a,b)$ – вейвлет; x – отстройка от центра линии; a и b – частотный масштаб и сдвиг. Согласно [4] для идентификации контура линии, необходимо построить зависимость значений сдвига b_0 от масштаба a , при которых вейвлет-проекция $D(a,b_0) = 0$. Можно показать аналитически (см. приложение А), что для доплеровского контура $f_d(x)$ в виде

$$f_d(x) = \exp\left(-\frac{\ln(2)\cdot(x)^2}{\sigma^2}\right), \quad (2)$$

где σ – полуширина контура на полувысоте (рис. 1а) и доплеровского вейвлета $\psi_d(x,a,b)$, построенного на основе второй производной от (2),

$$\psi_d(x,a,b) = a \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\exp\left(-\frac{\ln(2)\cdot(x-b)^2}{a^2}\right) \right] \quad (3)$$

зависимость нулевых точек b_0 от масштаба a должна удовлетворять выражению

$$b_0^2 = 0,72(a^2 + \sigma^2), \quad (4)$$

которое задает характеристическую прямую в координатах (a^2, b_0^2) рис. 1в. Важным свойством выражения (4) является то, что по величине отрезка, отсекаемого прямой на оси ординат можно оценить полуширину σ без прямых измерений контура. Отметим, что угол наклона характеристической прямой отличается от значения приводимого в [4], поскольку здесь определяется полуширина σ на полувысоте, как обычно принято в эксперименте. На рис. 1в также построены численно определенные нулевые точки для НВП от контура (2) идеально совпадающие с характеристикской прямой

Чернышов Александр Константинович, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник лаборатории ЛМАЛС. E-mail: chak@fian.smr.ru
Чернышова Екатерина Александровна, инженер лаборатории ЛМАЛС. E-mail: cat.chernyshova@fian.smr.ru

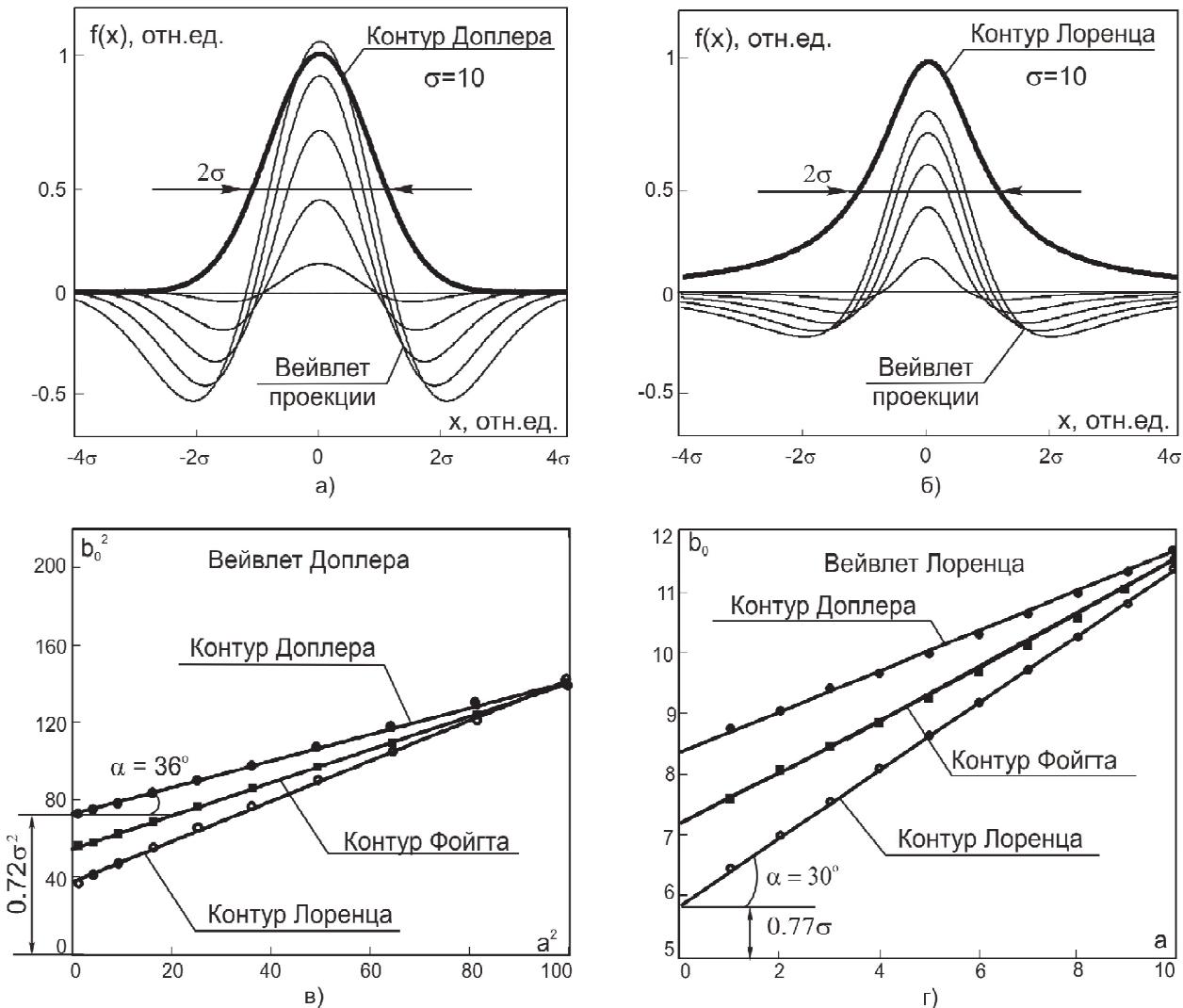


Рис. 1. Идентификация идеального спектрального контура:

а – контур Доплера и его вейвлет-проекции; б – тоже для контура Лоренца; в – характеристические зависимости для координат b_0 нулевых точек НВП модельных контуров от масштаба a для вейвлета Доплера; г – тоже для вейвлета Лоренца

(4), что и позволяет идентифицировать доплеровский тип контура.

Выполним в качестве сравнения аналогичный расчет нулевых точек НВП для контура Лоренца $f_l(x)$, в форме

$$f_l(x) = \left(\frac{\sigma^2}{x^2 + \sigma^2} \right), \quad (5)$$

и доплеровского вейвлета (3). Получить аналитическую зависимость координат b_0 нулевых точек от масштаба a в данном случае не удалось. Значения b_0 , полученные в компьютерных расчетах нулевых точек НВП контура Лоренца при изменении масштаба вейвлета a хотя и располагаются на линии, но не совпадают с характеристикской прямой (4) рис. 1в. Кроме того, угол наклона линии нулевых точек изменяется при вариации ширины контура (5). В результате, идентифицировать лоренцевский контур с помощью вейвлета Доплера (3), по-видимому, невозможно.

Для идентификации лоренцевского контура в [4] предлагается использовать вейвлет в форме

$$\psi_\ell(x, a, b) = a \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{1}{(x-b)^2 + a^2} \right]. \quad (6)$$

Аналитический расчет (см. приложение В) характеристической зависимости нулевых точек b_0 НВП контура (5) от масштаба вейвлета (6) задает в координатах (a, b_0) прямую линию

$$b_0 = 0.577(\sigma + a). \quad (7)$$

с углом наклона $a=30^\circ$ и пересекающую ось ординат в точке 0.577σ . Результаты численных расчетов с помощью вейвлета (6) координат нулевых точек НВП лоренцевского (5) и доплеровского (2) контуров представлены на рис. 1г. Видно, что численные результаты для

контура Лоренца точно ложатся на характеристическую прямую (7). Таким образом, вейвлет (6) позволяет однозначно идентифицировать спектральный контур Лоренца и определить его полуширину. Кроме того, точки,

рассчитанные для контура Доплера находятся на линии отличной от (7), и угол наклона этой линии варьируется в зависимости от ширины исходного контура (2).

Распространим описанный алгоритм идентификации на контур Фойгта $f_v(x)$, определяемый выражением

$$f_v(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-\ln(2)t^2}{\sigma^2}\right] \cdot \frac{\sigma^2}{(x-t)^2 + \sigma^2} dt. \quad (8)$$

Трудность здесь связана с тем, что указанный контур нельзя задать аналитически и поэтому невозможно определить соответствующий ему вейвлет. В данном случае предлагается исследуемый контур последовательно проанализировать при помощи вейвлетов (3) и (6), проверяя тем самым сходство с контурами Доплера и Лоренца. Если численно рассчитанные наборы нулевых точек вейвлет-проекций не будут совпадать с соответствующими характеристическими пря-

мыми для додлеровского и лоренцевского контуров, то профиль линии является контуром Фойгта (8) рис. 1в,г. К сожалению, при таком подходе не удается оценить полуширину исследуемого контура, что является недостатком.

Применим теперь вейвлет-анализ [4] для обработки сигнала спектрометра в присутствии сильных шумов. Для этого к модельным сигналам (2) и (5) добавлен шум $f_n(x)$ в виде набора гармонических функций с различными частотами и амплитудами

$$f_n(x) = 0,4\sin(7x) + 0,4\sin(11x) + 0,002\sin(x) + 0,03\sin(60x) + 0,01\sin(19x). \quad (9)$$

Амплитуды гармонических помех в (9) подбирались так, чтобы отношение сигнал/шум в результате сигнале было порядка 2 (рис. 2а,б). Результаты численных расчетов для зашумленных контуров Додлера и Лоренца представлены на рис. 2в,г. Видно, что в этом случае для вейвлетов небольших масштабов ($a < 4$) наблюдается отклонение координат нулевых точек НВП

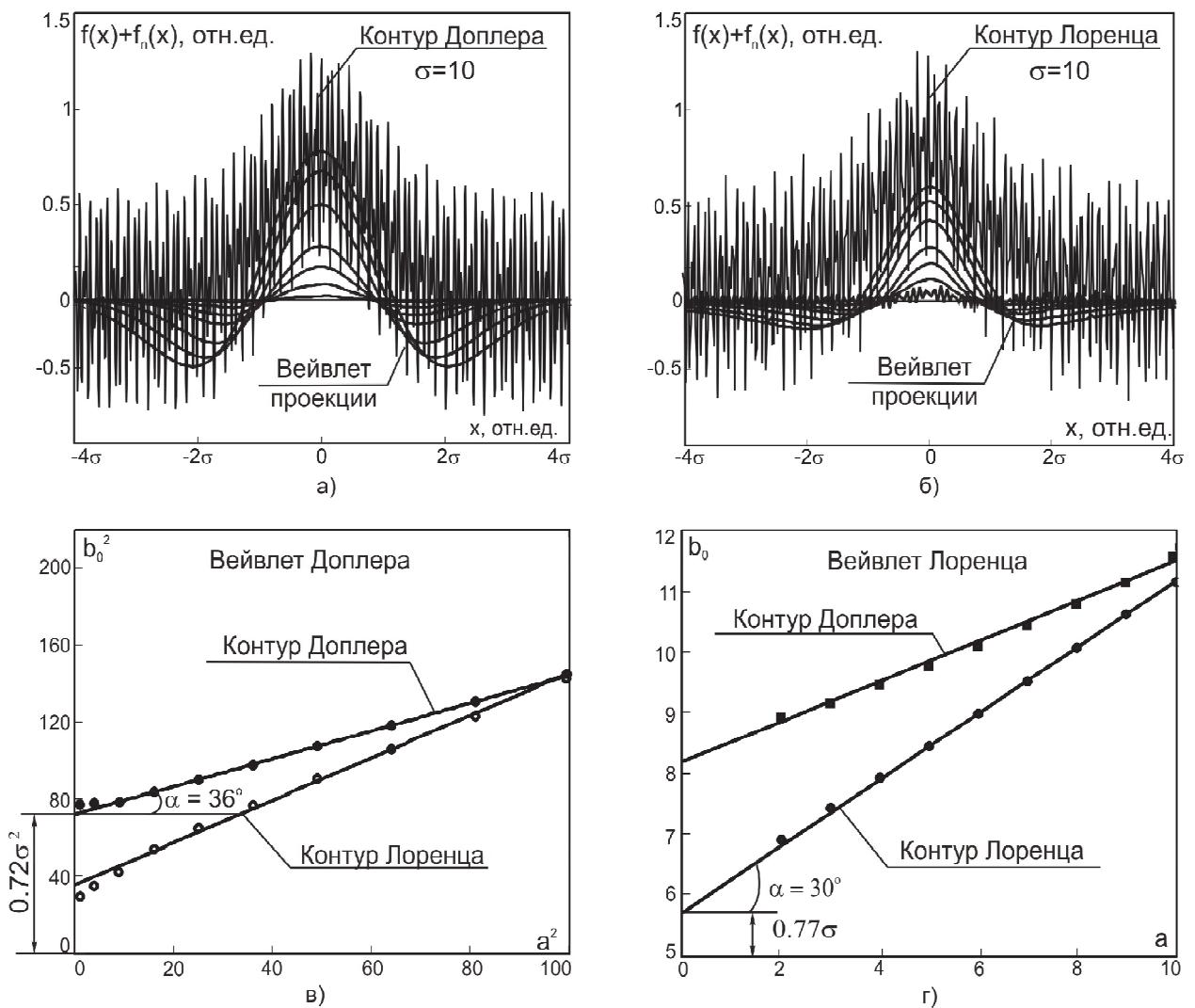


Рис. 2. Идентификация профиля модельного контура при наличии помех:

а – зашумленный сигнал с профилем Додлера; б – тоже с профилем Лоренца; в – зависимости координат b_0 нулевых точек НВП модельных сигналов с шумом от масштаба a для вейвлета Додлера; г – тоже для вейвлета Лоренца

от характеристических прямых. Этот эффект объясняется тем, что как известно высокочастотные шумы, присутствующие в сигнале, оказывают заметное влияние на формы вейвлет-проекций для небольших масштабов a [5]. Следовательно, необходимо ввести ограничение снизу на интервал изменения масштаба a , что позволит отсечь влияние высокочастотных шумовых компонент и правильно идентифицировать тип спектрального контура. Сопоставляя формы численно рассчитанных НВП зашумленного сигнала было установлено, что качественным критерием для выбора минимально допустимого масштаба вейвлета может являться отсутствие заметных высокочастотных осцилляций у вейвлет-проекции (рис. 2б).

После того, как были отброшены искаженные вейвлет-проекции малых масштабов, тип зашумленного спектрального контура мог быть легко определен по наклону соответствующей характеристической прямой рис. 2в,г. Более того, несмотря на фактическую невозможность прямых измерений ширины контура при заданном отношении сигнал/шум, по точке пересечения характеристической прямой с осью ординат можно оценить этот важный параметр с большей точностью.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложено расширение методики идентификации профиля спектральной линии на основе непрерывного вейвлет-преобразования [4] на случай контура Фойгта. Предложенный способ расширения позволяет идентифицировать контур Фойгта только качественно, без численной оценки его параметров. В отличие от работы [4] определены значения коэффициентов характеристической прямой для контура Доплера, которые соответствуют экспериментально определяемым параметрам. Продемонстрирована применимость НВП-методики для обработки модельных зашумленных сигналов прямой аборбционной спектроскопии с низким отношением сигнал/шум (≈ 2). Сформулирован критерий, позволяющий определить минимально допустимый масштаб вейвлета, который дает не искаженную шумами проекцию спектрального контура.

В заключение авторы благодарят д.ф.-м.н. Абрамочкина Е.Г. за помощь в проведении расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Goto M., Sawada K., Fujii K., et.al. Evaluation of neutral hydrogen density in the plasma core region based on the Balmer a-line profile // Books of abstract 20th International conference on spectral line shapes, 6-11 June 2010, P.23
2. Lepere M. Diode laser spectroscopy: infrared absorption line profile study// Books of abstract 20th International conference on spectral line shapes, 6-11 June 2010, P. 41
3. Капров П.О., Артемов В.Г. и др. Диодно-лазерный спектрометр для измерения орто/пара состава водяного пара // ПТЭ. 2008. №6. С.123-126.
4. Галлимулин Д.З., Воробьев А.Ю. и др. Определение структуры сложного контура с учетом влияния случайного шума // Сборник статей 9-ой международной молодежной школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия". 2005. №9. С. 197-200.
5. Добеш И. 10 лекций по вейвлетам. Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика". 2001. 464 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ А. ДОПЛЕРОВСКАЯ ЛИНИЯ

Для решения уравнения $D(a,b_0) = 0$ зададим функциональную последовательность $\{g\}$, члены которой определяются выражением

$$g_n(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-\ln 2 \cdot (x)^2}{\sigma^2}\right) \cdot \frac{d^n}{dx^n} \exp\left(\frac{-\ln 2 (x-b)^2}{a^2}\right) dx , \quad (A1)$$

так, что справедливо равенство $D(a,b) = g_2(a,b)$. Чтобы найти явный вид членов последовательности $\{g\}$ введем производящую функцию $G(a,b,s)$

$$G(a,b,s) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(a,b) \frac{s^n}{n!} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \exp\left(\frac{-\ln 2 \cdot (x)^2}{\sigma^2}\right) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n}{dx^n} \exp\left(\frac{-\ln 2 (x-b)^2}{a^2}\right) \cdot \frac{s^n}{n!} . \quad (A2)$$

Сумма под интегралом представляет собой разложение экспоненциальной функции в ряд, поэтому выражение (A2) может быть преобразовано к виду

$$G(a,b,s) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-\ln 2 \cdot (x)^2}{\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{-\ln 2 (x+s-b)^2}{a^2}\right) dx . \quad (A3)$$

Интеграл (A3) является табличным, что позволяет легко получить производящую функцию

$$G(a,b,s) = \frac{a\sigma\sqrt{\pi}}{\sqrt{(a^2+\sigma^2)\ln 2}} \cdot \exp\left[\frac{-(s-b)^2 \ln 2}{a^2+\sigma^2}\right] . \quad (A4)$$

Члены исходной функциональной последовательности $\{g\}$ могут быть найдены путем дифференцирования производящей функции

$$g_n(a,b) = \left. \frac{d^n G(a,b,s)}{ds^n} \right|_{s=0} = \frac{a\sigma\sqrt{\pi}}{\sqrt{(a^2+\sigma^2)\ln 2}} \left(\frac{-\ln 2}{\sqrt{a^2+\sigma^2}} \right)^n \cdot \exp\left(\frac{-b^2 \ln 2}{a^2+\sigma^2}\right) \cdot H_n\left(\frac{-b\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{a^2+\sigma^2}}\right) , \quad (A5)$$

где H_n – полином Эрмита n -го порядка. Тогда приравнивая к нулю член $g_2(a, b_0)$ получаем искомое соотношение между координатой b_0 нулевой точки НВП и масштабом вейвлета a

$$b_0^2 = 0,72(a^2 + \sigma^2). \quad (A6)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В. ЛОРЕНЦЕВСКАЯ ЛИНИЯ

По аналогии с приложением А зададим функциональную последовательность $\{h\}$

$$h_n(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2 + \sigma^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(\frac{1}{(x - b)^2 + a^2} \right) dx, \quad (B1)$$

для которой выполняется условие $D(a, b) = h_2(a, b)$. Определим производящую функцию последовательности $\{h\}$

$$\begin{aligned} L(a, b, s) &= \sum_{n=0}^{\infty} h_n(a, b) \frac{s^n}{n!} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \frac{1}{x^2 + \sigma^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n}{dx^n} \left(\frac{1}{(x - b)^2 + a^2} \right) \frac{s^n}{n!}. \end{aligned} \quad (B2)$$

Учитывая, что сумма под интегралом является разложением функции Лоренца в ряд Тейлора, выражение (B2) принимает вид

$$L(a, b, s) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2 + \sigma^2} \frac{1}{(x + s - b)^2 + a^2} dx. \quad (B3)$$

Для вычисления интеграла (B3) воспользуемся теоремой вычетов, согласно которой

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(x)}{Q(x)} dx = 2\pi i \sum_{z_k} \text{res}_{z=z_k} \frac{P(z)}{Q'(z)}, \quad (B4)$$

где $P(x), Q(x)$ – полиномы и суммирование производится по всем нулям функции $Q(z)$, расположенным в верхней комплексной полуплоскости. Из (B3) и (B4) следует, что

$$P(x) = 1 \quad \text{и} \quad Q(x) = (x^2 + \sigma^2) \cdot [(x + s - b)^2 + a^2]. \quad (B5)$$

Нули полинома $Q(z)$ являются простыми и находятся в точках $z_1 = i\sigma$ и $z_2 = b - s + ia$, поэтому вычеты определяются по формуле

$$\text{res}_{z=z_k} \frac{P(z)}{Q(z)} = \frac{P(z_k)}{Q'(z_k)}. \quad (B6)$$

С учетом (B4) и (B6), получаем явный вид производящей функции

$$\begin{aligned} L(a, b, s) &= 2\pi i (\text{res}_{z_1} + \text{res}_{z_2}) = \\ &= \frac{\pi}{s - b + i(\sigma + a)} \left(\frac{1}{\sigma(s - b + i(\sigma + a))} + \frac{1}{a(s - b - i(\sigma + a))} \right). \end{aligned} \quad (B7)$$

Тогда n -ый член исходной функциональной последовательности $\{h\}$ равен

$$\begin{aligned} h_n(a, b) &= \frac{d^n L(a, b, s)}{ds^n} \Big|_{s=0} = \\ &= \frac{\pi n!}{[b + i(\sigma + a)]^{2(n+1)}} \frac{\sigma + a}{a \sigma}. \end{aligned} \quad (B8)$$

$$\cdot \sum_{k=0}^n (b + i(\sigma + a))^{n-k} (b - i(\sigma + a))^k$$

С учетом условия $h_2(a, b_0) = 0$, выражение (B8) может быть преобразовано к квадратному уравнению относительно b_0 , решением которого является искомая зависимость координаты b_0 нулевой точки НВП от масштаба вейвлета a

$$b_0 = 0,57(\sigma + a). \quad (B9)$$

SPECTRAL LINE IDENTIFICATION BY CONTINUOUS WAVELET TRANSFORM

© 2012 A.K. Chernyshov, E.A. Chernyshova

Russian Academy of Sciences, P.N. Lebedev Physical Institute, Samara Branch

The signal processing of direct absorption spectroscopy by continuous wavelet transformation is described in work. Such approach allows identifying the basic spectral line profiles. Also the widths for Doppler and Lorenz spectral profiles are evaluated without direct measurement. The method applicability was demonstrated at investigation of noisy spectrometer signal.

Key words: spectral line profile, continuous wavelet transform, noise filtration.

Aleksandr Chernyshov, Candidate of Physics and Mathematics, Senior Research Fellow at the LMALS laboratory. E-mail: chak@fian.smr.ru
Ekaterina Chernyshova, Engineer of LMALS Laboratory. E-mail: cat.chernyshova@fian.smr.ru