

ПРИЛАДИ

УДК 681.785.588

DOI <https://doi.org/10.32838/2663-5941/2019.3-1/08>

Єгоров А.Д.

Інститут радіофізики та електроніки імені О.Я. Усикова
Національної академії наук України

Єгоров В.А.

Інститут радіофізики та електроніки імені О.Я. Усикова
Національної академії наук України

Єгоров С.А.

Інститут радіофізики та електроніки імені О.Я. Усикова
Національної академії наук України

Сінельников І.Є.

Інститут радіофізики та електроніки імені О.Я. Усикова
Національної академії наук України

УДОСКОНАЛЕНІ МЕТОДИКИ ОБРОБКИ ДАНИХ В ОПТИЧНИХ СПЕКТРОМЕТРАХ

Для обробки даних під час вимірювання оптичних спектрів у режимі реального часу часто доводиться застосовувати удосконалені під вирішення певних задач методи фільтрації. У цій роботі представлені такі алгоритми, які враховують специфіку реєстрації оптичних спектрів багатоканальними фотоприймачами. Вони дають змогу досить коректно здійснювати оцінку постійного складника спектра, його згладжування та спрощений пошук оптимального значення параметрів спектра методом максимальної правдоподібності. Розглянуто дію цих алгоритмів у застосуванні до синтезованої числової моделі і до результатів реальних вимірювань.

Ключові слова: оптичний спектр, багатоканальні фотоприймачі, метод максимальної правдоподібності, аналітичний параметр.

Постановка проблеми. Прогрес у створенні багатоканальних напівпровідникових фотоприймачів призводить до все більшого їх використання в спектральній апаратурі. Зараз для реєстрації спектрів використовують фоточутливі прилади із зарядовим зв'язком (ПЗЗ), прилади із зарядовою інжекцією (ПЗІ), декілька модифікацій технологій активних пікселів. Залежно від типу дисперсійної системи спектрометра застосовують прилади лінійної чи матричної структури. Незважаючи на різноманіття технологій виготовлення і схем використання фотодетекторів, їх поєднує декілька особливостей, пов'язаних з дискретною регулярною структурою фотоприймачів у разі реєстрації спектральних ліній. У цій статті представлені удосконалення деяких алгоритмів програмного забезпечення на прикладі атомно-емісійного спектрального аналізу. Завдяки унікальній точ-

ності і чутливості цей тип аналізу дуже поширений у лабораторній та виробничій практиці. Однією з особливостей цього типу аналізу є велика насиченість спектрів спектральними лініями, що потребує реєстрації ліній, ширина яких є близькою до розміру фоточутливих пікселів [1]. Для ототожнювання та інтерпретації спектрів є декілька спеціалізованих програм [2; 3], але вони здебільшого потребують втручання оператора в процес ідентифікації спектра і вимірювання параметрів спектральних ліній, що привносить деяку суб'єктивність у результати вимірювань.

Постановка завдання. У статті представлені доопрацювання алгоритмів обробки спектральних даних, у тому числі:

1. Згладжування масиву даних довільним ядром.
2. Компенсація фону.
3. Визначення параметрів спектральних ліній.

Виклад основного матеріалу дослідження.**Згладжування масиву даних довільним ядром.**

Програма знаходить масив згладжених даних $S(i)$:

$$S(i) = \frac{1}{\sum_{j=-m}^m g(j)} \cdot \sum_j s(i-j) \cdot g(j),$$

де $s(i)$ – вхідні дані при $0 \leq i \leq (N-1)$;

N – кількість членів масиву;

$g(j)$ – ядро згладжування при $-m \leq j \leq m$.

Вигляд ядра згладжування зумовлює, як правило, апаратною функцією спектрографа. Кількість членів масиву згладжених даних на $2m+1$ менше кількості вхідних даних.

Задачу згладжування в такій постановці можна вирішувати із застосуванням стандартних математичних програмних пакетів, але для випадку обробки спектральних вимірювань алгоритм доцільно дещо удосконалити. Справа в тому, що розмір пікселя детектора спектрографа такого ж порядку, що й півширина спектральної лінії. В таких умовах, як показано в роботі авторів [1], значно ускладнюється алгоритм подальшої обробки даних. Тому ми пропонуємо табуляцію ядра згладжування проводити з меншим у декілька разів кроком, ніж вхідні дані. Це дає змогу в стільки ж разів збільшити кількість відліків вихідного масиву. Тобто така процедура, крім згладжування, здійснює ще і функцію інтерполяції. Для прикладу на рис. 1 зображений результат згладжування експериментальних даних прямокутним ядром.

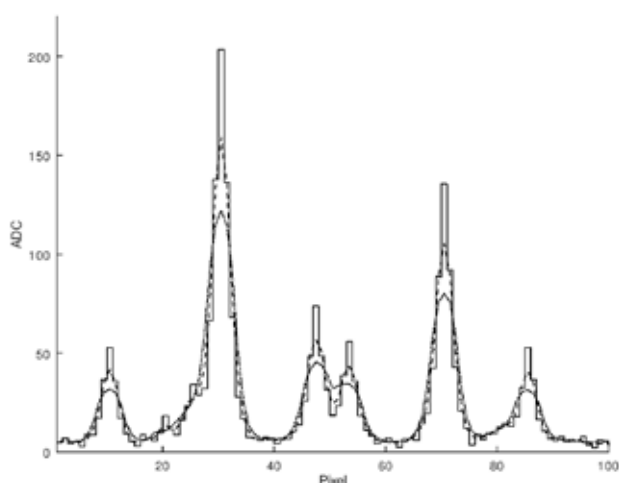


Рис. 1. Згладжування гест-функцією (прямокутним ядром згладжування).

Ступінчастий графік – зареєстрований спектр, результат згладжування прямокутним ядром розміром 3 пікселі (-----) і 5 пікселів (.....)

Компенсація фону.

На ділянках спектра, де відсутні спектральні лінії, часто реєструються позитивні значення спектра, які називаються фоном. Фон, поміряний на виході спектрометра, може бути зумовлений властивостями джерела світла або недосконаlostями спектрометра чи схемотехнічними особливостями електронних блоків. На лінійчатий спектр плазових утворень може накладатися як фоторекомбінаційний континуум, що несе корисну інформацію про дослідний зразок, так і постійний спектр від розігрітих електродів та пилових часток у проміжку між електродами генератора плазми, розсіяне світло в оптичному блоці та інші чинники. Це є першою і головною компонентою фону.

Друга компонента фону пов'язана з темновим струмом детектора та апаратними настройками електронних блоків. За такого поділу є можливість визначити величину цієї компоненти її реєстрацією у разі закритого оптичного входу спектрографа. Якщо поміряну таким чином другу компоненту відняти від зареєстрованого сигналу, то отримаємо різницю без постійного складника. Такий спосіб позбавлення від постійного складника рекомендується в декількох розробках [4; 5; 6]. Він може бути легко реалізований і апаратно, і програмно, але може призвести до спотворених результатів. Це буває в спектрах з малим рівнем першої компоненти, коли згадана вище різниця стає знакозмінною. У цьому разі вирахована таким чином величина світлового потоку може набувати від'ємних значень, що в принципі не має фізичного сенсу. Це призводить до порушення закону взаємозамінності яскравості лінії та тривалості експозиції, що викликає нелінійність світлосигнальної передавальної функції каналу реєстрації за малих амплітуд спектральних ліній [7].

Для запобігання цьому та для покращення читабельності спектра пропонується такий алгоритм визначення фону:

- вхідний масив даних розбивається на ділянки (розмір кожної ділянки значно більший ширини спектральної лінії);
- в межах кожної ділянки відшукується мінімальний член масиву;
- через мінімальні члени масивів із застосуванням інтерполяційного алгоритму проводиться лінія, яка є фоном.

Різниця між вхідним масивом і фоном являє собою масив даних після компенсації фону. Якщо такий масив має від'ємні значення, то методом

послідовних наближень знаходиться мінімальний доданок, що зміщує нульову лінію спектра. Величина цього доданку враховується у подальшій обробці експериментальних даних.

Визначення параметрів спектральних ліній.

У спектральному аналізі основна спектрофотометрична інформація міститься в амплітудній величині спектральних ліній хімічних елементів, що аналізуються. Для ототожнювання ліній важливо знати ще й позицію ліній. У зв'язку з цим ми обмежились розглядом задачі про знаходження двох незалежних параметрів спектральних ліній: амплітуди та фази. Співвідношення амплітуд відповідних спектральних ліній зумовлене процентним складом речовини, що аналізується. Фаза визначає положення максимуму спектральної лінії на багатоелементному детекторі. Вважаємо, що номер пікселя детектора жорстко зумовлений довжиною хвилі зареєстрованого світлового сигналу.

У зв'язку з тим, що в спектральному аналізі широко застосовується калібрування і відносні вимірювання, виникла можливість дещо спростити математичну обробку даних. Згідно з нашими оцінками в умовах реального експерименту нехтування деякою суворістю математичного підходу суттєво не впливає на кінцевий результат. Наприклад, ми не враховували асиметрію апаратної функції спектрографа і залежність її від довжини хвилі та поляризації. Ми вважали, що абераційні характеристики спектрографа такі, що завжди дають гаусів профіль лінії на його виході:

$$G(i, A, \phi, r) = A \cdot \exp\left[-\frac{(i - \phi)^2}{2 \cdot r^2}\right],$$

де i – поточна координата пікселя,
 A – амплітуда спектральної лінії,
 ϕ – фаза, тобто положення максимуму спектральної лінії,
 r – половина ширини апаратної функції спектрографа.

Якщо вхідна діафрагма спектрографа має велику ширину, за профіль спектральної лінії приймалась суперпозиція гаусових кривих.

Для практичного застосування здебільшого досить суперпозиції трьох гаусових кривих. Згідно з методикою, що представлена в [8], найбільш імовірні значення параметрів знаходимо по мінімуму функції правдоподібності $L(i, A, \phi)$, що дорівнює:

$$L(i, A, \phi) = \sum_i [G(i, A, \phi) - s(i)]^2$$

Сукупність параметрів, за якої $L(i, A, \phi)$ досягає мінімуму, знаходиться прирівнюванням нулю її першої похідної по відповідних параметрах. Для

знаходження найбільш імовірної амплітуди і фази розв'язується така система рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial A} L(i, A, \phi) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial \phi} L(i, A, \phi) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Характеристикою точності визначення параметрів служить дисперсійна матриця, яка є зворотною такої матриці других похідних функції правдоподібності по відповідних параметрах:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial A^2} L(i, A, \phi) & \frac{\partial^2}{\partial A \partial \phi} L(i, A, \phi) \\ \frac{\partial^2}{\partial \phi \partial A} L(i, A, \phi) & \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} L(i, A, \phi) \end{pmatrix}$$

Беручи до уваги, що стосовно незалежних параметрів A і ϕ змішані похідні $L(i, A, \phi, r)$ тотожно дорівнюють нулю, зворотна матриця буде такою:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\partial^2}{\partial A^2} L(i, A, \phi) & 1 \\ 0 & \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} L(i, A, \phi) \end{pmatrix}$$

Середня квадратична похибка визначення амплітуди σ_A зв'язана з похибкою вхідного масиву σ так:

$$\sigma_A = \frac{\sigma}{\frac{\partial^2}{\partial A^2} L(i, A, \phi)}$$

Відповідно, похибка фази σ_ϕ дорівнює:

$$\sigma_\phi = \frac{\sigma}{\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} L(i, A, \phi)}$$

Для деяких профілів спектральних ліній система (1) має аналітичні рішення. Для прикладу розглянемо гаусів профіль спектральної лінії. Результати точних числових розрахунків для цього випадку представлені на рис. 2 і рис. 3. На рис. 2 представлена залежність функції $L(i, A, \phi, r)$, а також її похідних від параметру A .

На рис. 3 відображена залежність функції $L(i, A, \phi, r)$ та її похідних від параметру ϕ .

Графік першої похідної на обох рисунках у досить малій близькості від переходу через нуль мало відрізняється від прямої. Тому, якщо параметри представити у вигляді $A=A_0 + \Delta A$, $\phi=\phi_0 + \Delta \phi$, можемо з точністю до квадратичного члена написати:

$$\frac{\partial L(i, A_0, \phi_0, r)}{\partial A} + \Delta A \frac{\partial^2}{\partial A^2} L(i, A_0, \phi_0, r) = 0 ;$$

$$\frac{\partial L(i, A_0, \phi_0, r)}{\partial \phi} + \Delta \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} L(i, A_0, \phi_0, r) = 0 ,$$

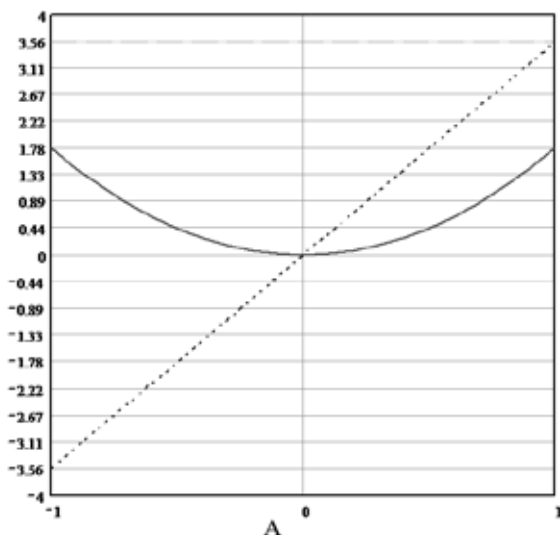


Рис. 2. Графік функції $L(i, A, \varphi, r)$ (—), а також її похідних $\frac{\partial L(i, A, \varphi, r)}{\partial A}$ (·····) та $\frac{\partial^2 L(i, A, \varphi, r)}{\partial A^2}$ (---) від параметру A

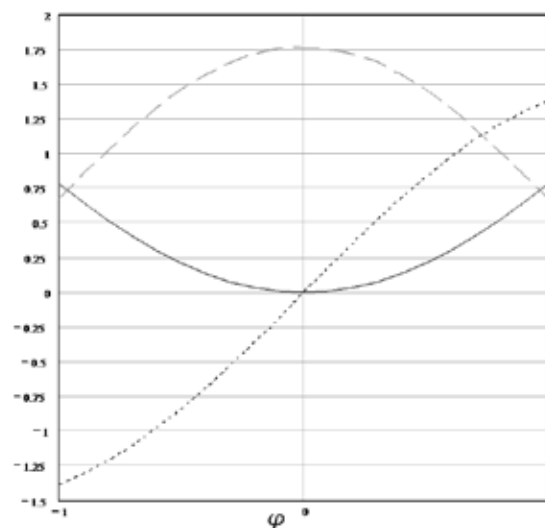


Рис. 3. Графік функції $L(i, A, \varphi, r)$ (—) та її похідних $\frac{\partial L(i, A, \varphi, r)}{\partial \varphi}$ (·····) та $\frac{\partial^2 L(i, A, \varphi, r)}{\partial \varphi^2}$ (---) від параметру φ

де A_0 та φ_0 – приблизні величини параметрів поблизу точки мінімуму функції $L(i, A, \varphi, r)$. Змішані похідні $\frac{\partial^2}{\partial \phi \partial A} L(i, A_0, \phi_0, r)$, $\frac{\partial^2}{\partial A \partial \phi} L(i, A_0, \phi_0, r)$ тотожно дорівнюють нулю, тому що A і φ – незалежні параметри.

Тобто система двох рівнянь розпадається на два незалежні рівняння. Для нашого випадку, коли розподіл світлової енергії відповідає гаусовій кривій, аналітичний вираз для ΔA і $\Delta \varphi$ буде такий:

$$\Delta A = \frac{\sum_i \frac{\partial}{\partial A} G(i, A_0, \phi_0, r) [s(i) - G(i, A_0, \phi_0, r)]}{\sum_i [\frac{\partial}{\partial A} G(i, A_0, \phi_0, r)]^2}$$

$$\Delta \varphi = \frac{\sum_i \frac{\partial}{\partial \phi} G(i, A_0, \phi_0, r) [s(i) - G(i, A_0, \phi_0, r)]}{\sum_i [\frac{\partial}{\partial \phi} G(i, A_0, \phi_0, r)]^2}$$

Результати вимірювань.

Експериментальні оцінки σ_A були одержані в процесі побудови графіків калібрування для стандартних зразків. Вони співпадають з аналітичними і лежать у межах декількох відсотків. Величина σ_φ для ліній помірної амплітуди становить декілька процентів відносно півширини спектральної лінії r . Для ілюстрації цього в таблиці 1 приведені дані розрахунків фази для декількох реалізацій ряду спектральних ліній при величині $r = 0.3 \text{ \AA}$.

Таблиця 1

Дані розрахунків фази спектральних ліній

λ табл лексп.	3227,75	3286,75	3358,49	3370,78	3413,13	3414,77	3450,33	3485,34
$\lambda 1$ експ.	3227,697	3286,601	3358,377	3370,695	3413,139	3414,76	3450,456	3485,548
$\lambda 2$ експ.	3227,691	3286,597	3358,38	3370,696	3413,142	3414,766	3450,46	3485,573
$\lambda 3$ експ.	3227,688	3286,597	3358,38	3370,691	3413,137	3414,763	3450,454	3485,575
$\lambda 4$ експ.	3227,689	3286,601	3358,369	3370,69	3413,137	3414,759	3450,448	3485,557
$\lambda 5$ експ.	3227,688	3286,603	3358,375	3370,689	3413,134	3414,762	3450,448	3485,562
$\lambda 6$ експ.	3227,685	3286,604	3358,362	3370,694	3413,14	3414,763	3450,449	3485,559
$\lambda 7$ експ.	3227,688	3286,603	3358,365	3370,695	3413,14	3414,763	3450,446	3485,553
$\lambda 8$ експ.	3227,686	3286,599	3358,372	3370,69	3413,138	3414,761	3450,449	3485,564
$\lambda 9$ експ.	3227,69	3286,611	3358,368	3370,7	3413,145	3414,769	3450,448	3485,558
$\lambda 10$ експ.	3227,687	3286,607	3358,372	3370,697	3413,142	3414,766	3450,452	3485,566
λ середня	3227,689	3286,602	3358,372	3370,694	3413,139	3414,763	3450,451	3485,562
σ	0,003348	0,004373	0,00611	0,003592	0,003134	0,003048	0,004422	0,008396

У ній застосовані такі позначення:

λ табл. – довжина хвилі по довідкових таблицях;

λ к експ. – довжина хвилі, що одержана з к-го експерименту із застосуванням описаного алгоритму;

λ середня – осереднена по 10 експериментах довжина хвилі;

σ – похибка визначення λ .

Всі дані наведені в Ангстремах.

Висновки. За результатами доопрацювання алгоритмів обробки експериментальних даних з урахуванням потреб спектрального аналізу одержані такі висновки:

1. Фільтрацію зареєстрованого масиву спектральних вимірів доцільно виконувати з ядром згладжування, що задається з меншим у декілька разів кроком, ніж вхідні дані. Це збільшує кількість членів вихідного масиву та спро-

щує послідуочу інтерполяцію і загалом сприйняття спектра.

2. Урахування постійного складника фону спектрограми відніманням її від зареєстрованого сигналу може призводити до від'ємних значень світлового потоку та порушення закону взаємозамінності яскравості лінії і тривалості експозиції. Тому проблема компенсації фону вимагає ретельного аналізу і методик із застосуванням відносних вимірювань. У цій статті пропонується інтерполяційний алгоритм із використанням мінімальних точок спектрограми.

3. Алгоритм пошуку оптимальних параметрів спектральних ліній пропонується доповнити застосуванням пошуку екстремуму функції правдоподібності розкладанням у ряд. Згідно з результатами попередніх оцінок для досягнення необхідної точності вимірювань амплітуди й фази реальних спектрів досить лінійного наближення.

Список літератури:

1. Егоров А.Д., Егоров В.А., Егоров С.А., Здор Е.В. Фотометрирование эмиссионных оптических спектров фотодиодными линейками. *Радиофизика и электроника*. 2002. Т.7. №2. С. 422–425.
2. Программное обеспечение «АТОМ». URL: http://www.vmk.ru/product/programmnoe_obespechenie/atom.html (дата звернення: 03.05.2019).
3. SpecLine software. URL: https://www.plasus.de/index.php?page=software_specline&lang=en (дата звернення: 10.05.2019).
4. Васильева И.Е., Кузнецов А.М., Васильев И.Л., Шабанова Е.В. Градуировка методик атомно-эмиссионного анализа с компьютерной обработкой спектров. *Журнал аналитической химии*. 1997. Т. 52. № 12. С. 1238–1248.
5. Программное обеспечение атомно-эмиссионного спектрального анализа (программа «АТОМ») / В.Г. Гаранин, О.А. Неклюдов, Д.В. Петроченко и др. *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2012. Т. 78. № 1. ч. II. С. 69–74.
6. Jian-kang Zhou, Wei-min Shen, Min-xue Tang. Extended dynamic range techniques of CCD measurements. *Opto-Electronic Engineering J.* 2006. Vol. 33. No. 10. P. 96–114.
7. Егоров А.Д., Егоров В.А., Егоров С.А. Динамический диапазон ПЗС-фотоприемников атомно-эмиссионных анализаторов. *Журнал прикладной спектроскопии*. 2019. Т. 86. № 3. С. 410–416.
8. Косарев Е.Л. Методы обработки экспериментальных данных. Москва : Физматлит, 2008. 208 с.

УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЕ МЕТОДИКИ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ В ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОМЕТРАХ

Для обработки данных при измерении оптических спектров в режиме реального времени часто приходится применять усовершенствованные под решение конкретных задач методы фильтрации. В данной работе представлены такие алгоритмы, которые учитывают специфику регистрации оптических спектров многоканальными фотоприемниками. Они позволяют достаточно корректно осуществлять оценку постоянной составляющей спектра, его сглаживание и упрощенный поиск оптимального значения параметров спектра методом максимального правдоподобия. Рассмотрено действие этих алгоритмов в применении к синтезированной числовой модели и результатам реальных измерений.

Ключевые слова: оптический спектр, многоканальные фотоприемники, метод максимального правдоподобия, аналитический параметр.

IMPROVED METHODS OF DATA PROCESSING IN OPTICAL SPECTROMETERS

It is often necessary to apply improved methods for solving certain problems of filtration, in order to process data in the measurement of optical spectra in real-time. The algorithms that take into account the specifics of the multichannel photodetectors optical spectra registration are presented in this paper. They allow fairly accurate estimate of the background of the spectrum. It simplifies the search for the optimal value of the parameters of the spectrum by the method of maximum likelihood. The effect of these algorithms in application to the synthesized numerical model and to the results of real measurements is considered.

Key words: optical spectrum, multichannel photodetectors, maximum likelihood method, analytical parameter.