ПОДАВЛЕНИЕ ШУМОВОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ В ТОНКОСТРУКТУРНЫХ СПЕКТРАХ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ ДИСКРЕТНОГО ОДНОМЕРНОГО ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Дьяченко Г.Г., Петухов В.А., Семенов М.А.

Физический Институт им. П.Н.Лебедева РАН, г.Москва

Проблема очистки спектров от шумов существовала всегда. Особую актуальность она приобретает с развитием экспериментальной техники, позволяющим измерять спектры следовых количеств веществ. В нашей работе на примере тонкоструктурного спектра флуорена рассмотрены преимущества сравнительно недавно появившегося метода подавления шумовой составляющей на основе дискретного одномерного вейвлет-преобразования [1].

Тонкоструктурный спектр возбуждения флуорена (рис. 1) получался путем возбуждения лазерным излучением с перестраиваемой длиной волны молекул флуорена, охлажденных до единиц градусов Кельвина, и измерения интенсивности возникающей люминесценции и опорного сигнала при 20 отсчетах на каждой длине волны, окончательное значение интенсивности получалось путем обработки данных по методу наименьших квадратов. Охлаждение осуществлялось при адиабатическом истечении паров флуорена в вакуум сквозь маленькое отверстие, схема установки описана в работе [2]. Вследствие маленькой концентрации молекул в истекающей струе сигналы с фотоприемника необходимо значительно усиливать, поэтому спектры получаются зашумленные, и возникает проблема очистки от шумов и выделения слабых спектральных линий. Спектр шумов измерялся в тех же условиях при отсутствии струи.

До недавнего времени мы в основном пользовались методами сглаживания кривых, встроенными в систему Origin [3]. На рис. 2 приведен пример такого сглаживания участка спектра методами скользящего среднего (S5AA) и с применением Фурье фильтра (S5FT) встроенными в систему Origin. В глаза бросаются недостатки такого сглаживания: пропадает тонкая структура спектра, изменяется высота интенсивных линий, а применение Фурье фильтра приводит к дополнительным осцилляциям вблизи интенсивных линий (эффект Гиббса).

Упомянем также, что с помощью локальной полиномиальной регрессии, также встроенной в Origin, тонкая структура спектра сохраняется, однако заметного сглаживания не происходит.

Применение дискретного одномерного вейвлет-преобразования для сглаживания кривых позволяет в значительной мере избежать перечисленных выше недостатков.

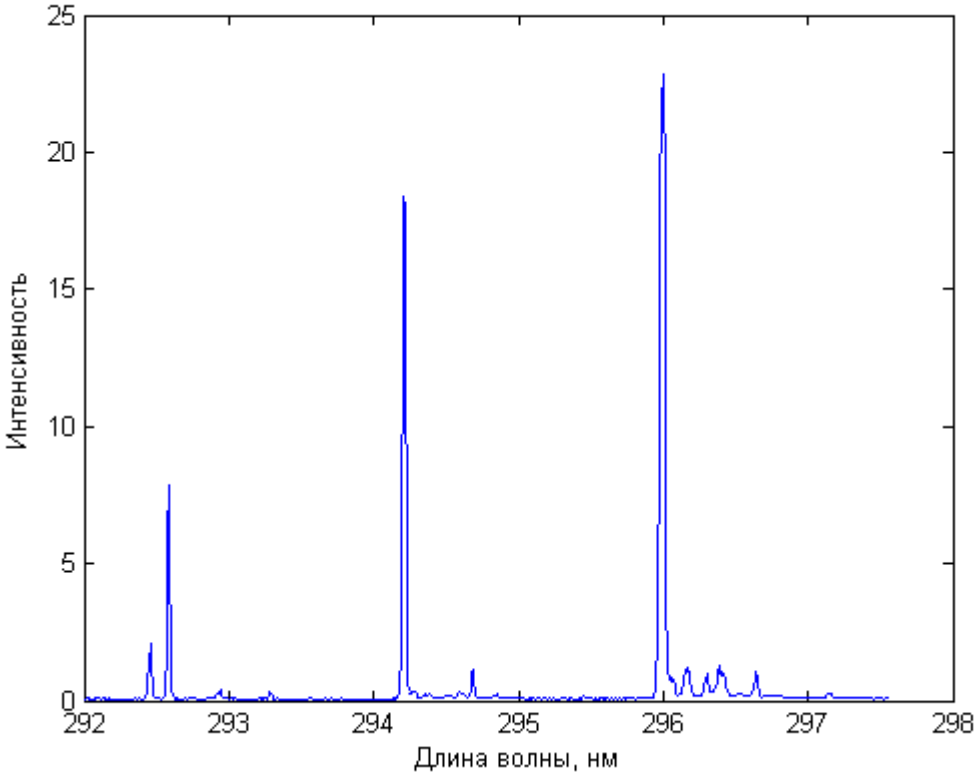

Рис.1. Спектр возбуждения флуорена

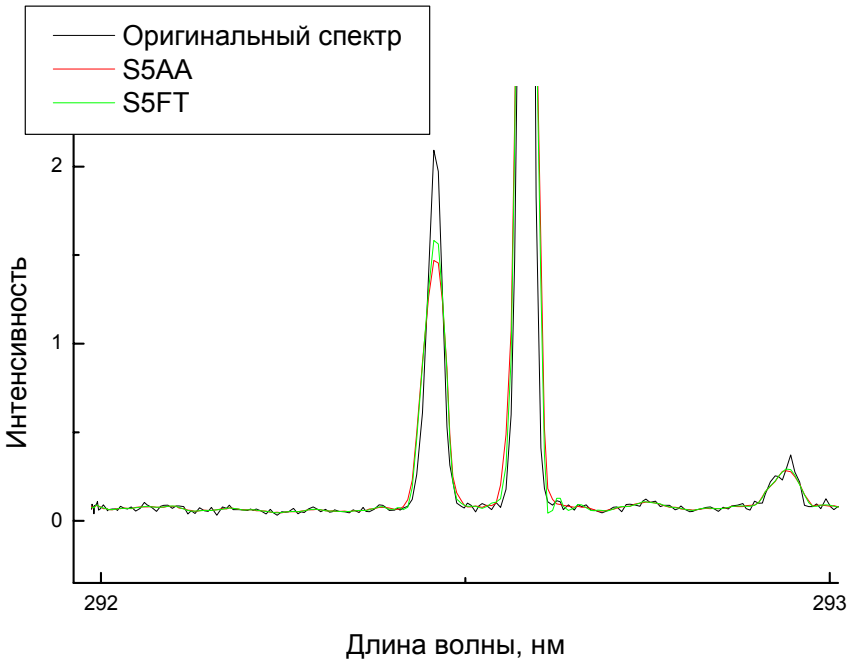

Рис.2. Спектр возбуждения флуорена и его сглаживание в системе Origin

Дело в том, что техника вейвлет-преобразований как раз приспособлена для выявления локальных особенностей спектров, одновременно с этим позволяет убирать шумовую составляющую без заметного искажения интенсивных линий. Эта техника обладает большой гибкостью в связи с тем, что существует большое количество вейвлетов, поэтому необходим предварительный анализ для выяснения, какой тип в наших условиях дает наилучшие результаты.

С нашей точки зрения такой анализ удобно проводить на основе измеренного спектра шумовой составляющей. В качестве инструмента исследования нами выбрана система компьютерной математики (СКМ) MATLAB 6.5 с пакетом расширения Wavelet Toolbox. По обилию типов вейвлетов и функций для обработки сигналов этот пакет является лучшим среди пакетов расширения для СКМ в этой области [1]. Очистка спектров проводится с помощью "штрафного" метода Бирге-Массарта, с подробным описанием всех параметров можно ознакомиться по книге [1], немного переделанный текст примера из этой работы представлен ниже:

```
clear all
fname='tst17.dat' %Исходные данные
[xx,yy,sh,xxi,s2y]=spexmnk(fname); %Обработка спектра по методу наименьших квадратов
yd=[]; %Массив, накапливающий очищенные от шумов спектры
wname='sym5'; %Имя вейвлета
for i=4:6
   lev=i; %Уровень вейвлет-разложения
   [c,l]=wavedec(yy,lev,wname); %Структура вейвлет разложения
   sigma=wnoisest(c,l,1); %Стандартное отклонение белого шума Гаусса
   alpha=1; %Параметр настройки штрафного метода
   thr=wbmpen(c,l,sigma,alpha); %Глобальный порог для удаления шумов
   sorh='s'; %Установка жесткого порога
   keepapp=1; %Коэффициенты аппроксимации не могут ограничиваться
   yd=[yd;wdencmp('gbl',yy,wname,lev,thr,sorh,keepapp)]; %Очищенные от шума векторы
% Отрисовка результатов
   subplot(410+i-3), plot(sh,yd(i-3,:)),
   title(['Очищенный спектр (wname=',wname,' lev=',int2str(lev),')']);
   ylabel('Инт.');ylim([.1 .4]);
   set(gca,'XTickLabel',[]);
end
subplot(414), plot(sh,yy),title('Исходный спектр шумов');
xlabel('шаг');ylabel('Инт.');ylim([.1 .4]);
```

В результате исследования всех типов ортогональных вейвлетов (Добеши и симлет) до уровня разложения lev=6 было выделено два типа вейвлетов sym5 и sym7, использование которых дает наилучшие результаты, представленные на рисунках 3 и 4. Наилучший результат среди приведенных дает вейвлет sym7 на уровне разложения 6. Этот вариант мы использовали для обработки спектров возбуждения флуорена. Поскольку при измерении длины волны в общем случае сетка получается квазиравномерной из-за особенностей механической части, мы предварительно перешли к равномерной сетке с помощью кусочной Эрмитовой кубической интерполяции, которая сохраняет монотонность и форму данных. Это связано с тем, что быстрое дискретное вейвлет-преобразование работает только на равномерной сетке. Далее мы использовали ту же технику, как при очистке спектра шумов. Текст программы представлен ниже.

```
clear all
fname='fl05.dat'
[xx,yy,sh,xxi,s2y]=spexmnk(fname);
m=length(yy);
xxi=xxi/2000;
linx=xxi(1):(xxi(end)-xxi(1))/(m-1):xxi(end);
liny=interp1(xxi,yy,linx,'cubic');
wname='sym7';
lev=6;
[c,l]=wavedec(liny,lev,wname);
sigma=wnoisest(c,l,1);
alpha=1;
thr=wbmpen(c,l,sigma,alpha);
sorh='s';
keepapp=1;
x=liny;
xd=wdencmp('gbl',x,wname,lev,thr,sorh,keepapp);
indx=1:length(x);
xmin=292;
xmax=293;
xyaxis=[xmin xmax 0 .2];
subplot(211), plot(linx,x),
title('Исходный спектр');xlabel('Длина волны, нм');
ylabel('Интенсивность');axis(xyaxis)
subplot(212), plot(linx,xd),
title(['Очищенный спектр (wname=',wname,' lev=',int2str(lev),')']);
xlabel('Длина волны, нм');ylabel('Интенсивность');axis(xyaxis)
```

Результаты вычислений представлены на рисунках 5 и 6. Можно заметить, что наряду с заметным уменьшением уровня шумов изменения форма интенсивных линий не изменяется, а это очень важно при исследовании тонкоструктурных спектров. Подавление шумовой компоненты на основе дискретного одномерного вейвлет-преобразования может в дальнейшем оказать неоценимую помощь при изучении спектров флуоресценции, в которых шумовая составляющая намного больше, чем в спектрах возбуждения.

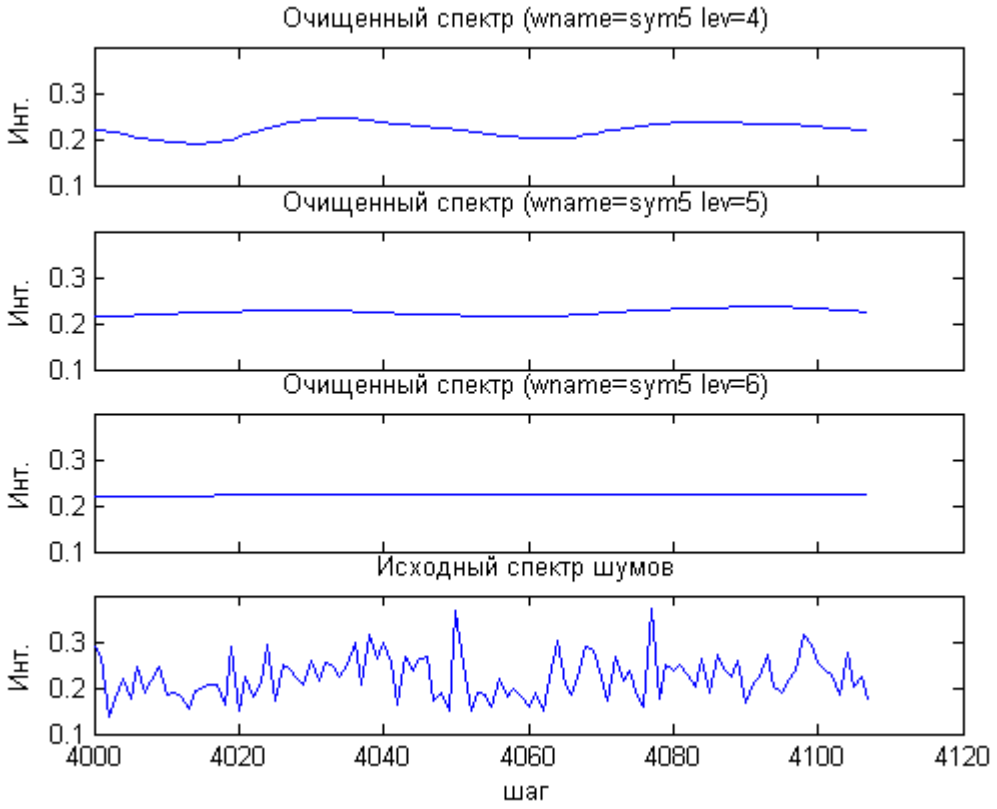

Рис.3. Очистка спектра от шума с помощью вейвлета sym5 для разных уровней разложения

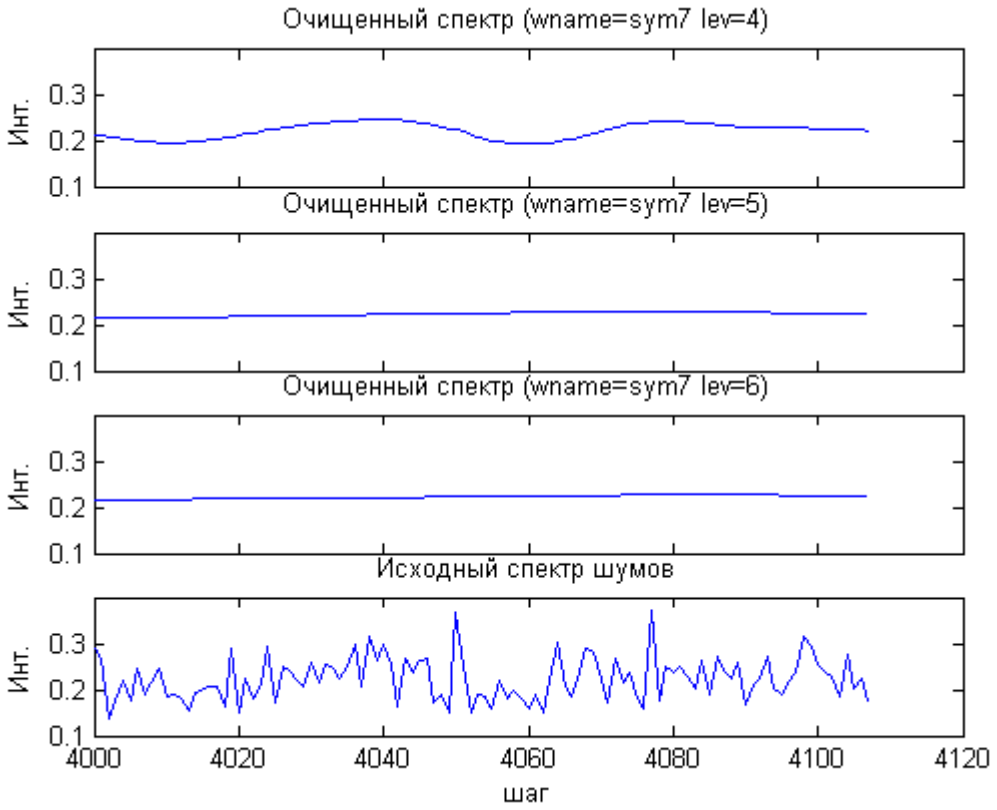

Рис.4. Очистка спектра от шума с помощью вейвлета sym7 для разных уровней разложения

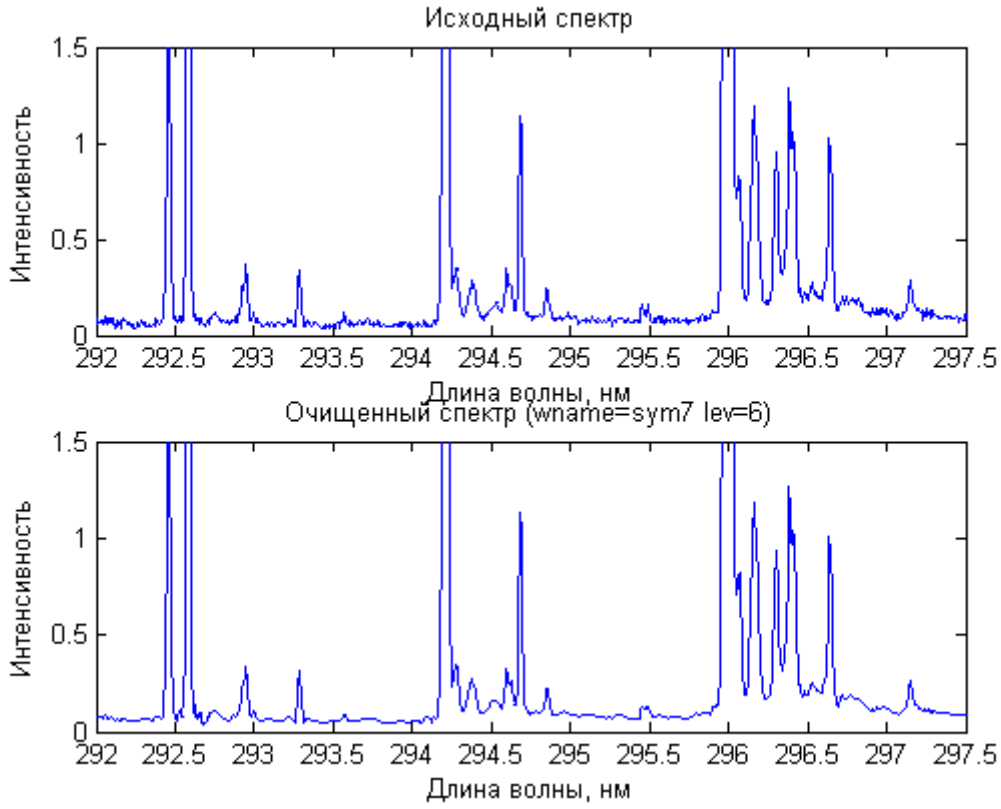

Рис.5. Сравнение исходного спектра флуорена с очищенным

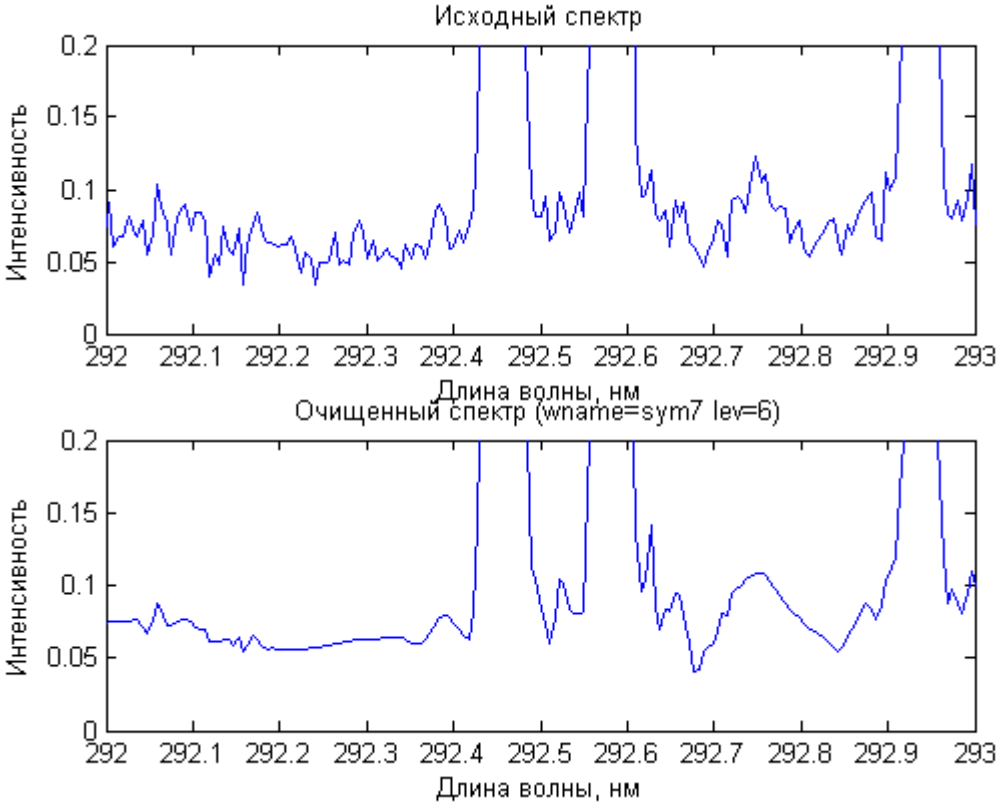

Рис.6. Сравнение исходного и очищенного спектров флуорена в увеличенном масштабе

Литература

1. *Дьяконов В.П.* Вейвлеты. От теории к практике. М.: СОЛОН-Р, 2002.
2. *Борисевич Н.А., Водоватов Л.Б., Дьяченко Г.Г., Петухов В.А., Семенов М.А.* Спектры возбуждения и флуоресценции пирена, охлажденного в сверхзвуковой струе // Опт. и спектроск. 1995. Т.78. №2. С.241–248.
3. http//www.OriginLab.com.