



УДК 535.338:519.6

## СОВРЕМЕННЫЕ УСТОЙЧИВЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ПРОГРАММНЫЕ МЕТОДЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ИСКАЖЕННЫХ СПЕКТРОВ

В.С. Сизиков<sup>а</sup>, А.В. Лавров<sup>а</sup><sup>а</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

Адрес для переписки: sizikov2000@mail.ru

**Информация о статье**

Поступила в редакцию 24.09.18, принята к печати 25.10.18

doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-6-911-931

Язык статьи – русский

**Ссылка для цитирования:** Сизиков В.С., Лавров А.В. Современные устойчивые математические и программные методы восстановления искаженных спектров // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2018. Т. 18. № 6. С. 911–931. doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-6-911-931**Аннотация**

Выполнен сравнительный анализ различных методов и алгоритмов восстановления тонкой структуры спектров, сглаженных аппаратной функцией спектрометра и (или) имеющих перекрытие близких спектральных линий. Рассматриваются непрерывные и дискретные спектры. Успешное восстановление спектров повышает разрешающую способность спектрометров математически. В случае сглаживания *непрерывного спектра* аппаратной функцией задача восстановления спектра сводится к решению интегральных уравнений I рода. Эта задача является некорректной (существенно неустойчивой), поэтому для получения устойчивого решения интегральных уравнений используются методы регуляризации Тихонова, фильтрации Винера, Калмана–Бьюси и т.п. Однако в случае перекрытия близких линий в спектре эти методы позволяют восстановить лишь суммарный спектр, но не профили каждой линии. Для разделения профилей искомые линии моделируются гауссианами или лоренцианами, суммарный спектр дифференцируется с использованием сглаживающих сплайнов, число и параметры линий оцениваются по результатам дифференцирования. Для уточнения параметров линий выполняется минимизация функционала невязки методом координатного спуска и для сравнения – методом Нелдера–Мида. Выполнено сравнение также с методом фурье-самодеконволюции, в котором ширина линий искусственно уменьшается за счет аподизации (усечения интерферограммы), в результате чего истинные профили линий искажаются ради их разрешения. В оригинальном методе свертки параметры линий-пиков определяются по сверткам экспериментального спектра с производными от модельного спектра. Если *дискретный спектр* сглажен аппаратной функцией, то задача его восстановления описывается системой линейно-нелинейных уравнений и решается алгоритмом интегральной аппроксимации, более эффективным, чем методы Прони, переменных проекций Голуба–Муллен–Хегланда и др. По результатам анализа различных математических методов предлагается создать новый комплексный алгоритм восстановления искаженных спектров, позволяющий устранить действие аппаратной функции, шумов, перекрытия линий и т.д. Разработано программное обеспечение в среде MATLAB и выполнена обработка ряда спектров. Представленная методика может быть использована для повышения разрешающей способности спектрометров путем математико-компьютерной обработки спектров.

**Ключевые слова**

непрерывный и дискретный искаженный спектр, восстановление спектра, интегральное уравнение, разделение (сепарация) линий спектра, дифференцирование спектра, минимизация функционала, гауссианы, лоренцианы, метод координатного спуска, сплайн, система линейно-нелинейных уравнений, программное обеспечение, MATLAB

**Благодарности**

Работа поддержана грантом МФКТУ ИТМО (проект № 617026 «Технологии киберфизических систем: управление, вычисления, безопасность»).

## MODERN STABLE MATHEMATICAL AND SOFTWARE-BASED METHODS FOR DISTORTED SPECTRA RESTORATION

V.S. Sizikov<sup>а</sup>, A.V. Lavrov<sup>а</sup><sup>а</sup>ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

Corresponding author: sizikov2000@mail.ru

**Article info**

Received 24.09.18, accepted 25.10.18

doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-6-911-931

Article in Russian

**For citation:** Sizikov V.S., Lavrov A.V. Modern stable mathematical and software-based methods for distorted spectra restoration. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2018, vol. 18, no. 6, pp. 911–931 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-6-911-931

### Abstract

The paper presents analysis and comparison of various methods and algorithms for restoration of the spectra fine structure smoothed by the instrumental spectrometer function and/or having the overlapping of close spectral lines. Continuous and discrete spectra are considered. Successful spectra restoration enhances mathematically the resolution of spectrometers. In the case of a *continuous spectrum* smoothing by the instrumental function, the problem of restoration is reduced to solving integral equations of the first kind. This problem is ill-posed (essentially unstable). Therefore, to obtain a stable solution of integral equations, the Tikhonov regularization, Wiener filtering, Kalman–Bucy and other methods are used. However, in the case of close lines overlapping in the spectrum, these methods make it possible to restore only the total spectrum, but not the profiles of each line. To separate line profiles, the desired lines are modeled by the Gaussians or Lorentzians; the total spectrum is differentiated using smoothing splines; the number and parameters of the lines are estimated from the results of differentiation. To refine the line parameters, minimization of the discrepancy functional by the coordinate descent method and for comparison by the Nelder–Mead method is performed. A comparison is also made with the Fourier-self-deconvolution method, in which the line widths are artificially reduced due to apodization (the interferogram truncation), and, as a result, the true line profiles are distorted for their resolution. In the original convolution method, the parameters of lines (peaks) are determined from convolutions of experimental spectrum with model spectrum derivatives. If a *discrete spectrum* is smoothed by the instrumental function, then the problem of spectrum restoration is described by a system of linear-non-linear equations (SLNE) and solved by the integral approximation algorithm that is more efficient than the Prony method, the Golub–Mullen–Hegland variable projection method, and other methods. Based on the results of the review of various mathematical methods, it is proposed to create a new complex algorithm for distorted spectra restoration, which makes it possible to remove the effect of instrumental function, noise, lines overlapping and other effects. The software in MATLAB is developed and the processing of a number of spectra is performed. The stated technique can be used to enhance the spectrometer resolution via mathematical and computer processing of spectra.

### Keywords

continuous and discrete distorted spectrum, spectrum restoration, integral equation, spectral lines separation, spectrum differentiation, functional minimization, Gaussians, Lorentzians, coordinate descent method, spline, system of linear-non-linear equations, software, MATLAB

### Acknowledgements

This work was performed in ITMO University and was supported by the MFKTU ITMO grant (Project No. 617026 "Technologies of cyberphysical systems: control, computations, security").

## Введение

Спектральный анализ [1, с. 702–713] дает обширную информацию о состоянии вещества (химическом составе, температуре, давлении и т.д.). Но часто спектры не обладают достаточным разрешением [2]. Во-первых, в случае широкой аппаратной функции (АФ) спектрометра могут не разрешаться близкие линии и быть невидимыми слабые линии [2–6]. Во-вторых, линии могут накладываться друг на друга (перекрываться) [7–10]. В-третьих, на них может накладываться шум (как внешний, так и инструментальный). Некоторые из отмеченных факторов можно нивелировать технически – уменьшить ширину АФ и т.д. Но, например, эффект наложения линий нельзя устранить чисто технически. Это говорит о том, что следует использовать также математический путь для повышения разрешения спектров [2–17].

Цель данной работы – сравнить математические и программные методы и алгоритмы восстановления искаженных спектров. Внедрив эти методы в программное обеспечение спектральных приборов (спектрометров), можно повысить их разрешающую способность без изменения технической части последних, что экономически выгодно. Комплексный подход к рассмотрению методов предоставляет специалистам принципиально новые комплексные алгоритмы с учетом их применимости.

Проиллюстрируем сказанное. На рис. 1 [18] представлен измеренный спектр, сглаженный аппаратной функцией (кривая 1) и зашумленный (точки), а также непрерывный, восстановленный математически (2), и полученный на его основе дискретный спектр (3). Видим, что соответствующая обработка позволила восстановить тонкую структуру спектра.

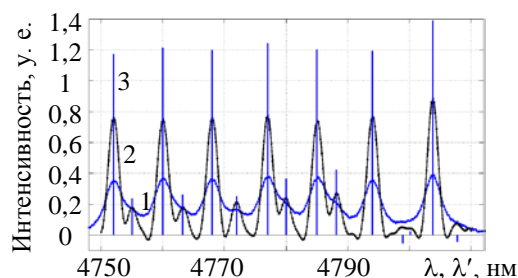


Рис. 1. Пример восстановления спектра математическим путем

### Кратко о спектральном анализе

Напомним некоторые известные положения [1].

Под *спектром* подразумевается зависимость интенсивности излучения от длины волны или частоты (часто вместо частоты  $\nu = c/\lambda$  используют  $k = 1/\lambda$  – *волновое число* [1, с. 85]).

Для разложения излучения в спектр и его регистрации используются оптические *спектральные приборы* [1, 4, 19, 20]:

- *спектроскопы* (с визуальной регистрацией);
- *спектрометры* (например, интерферометр Фабри–Перо [20]) и др.

Спектр может быть получен по разложению проходящего через призму луча света (в призмных спектрометрах), путем вычисления преобразования Фурье от двух интерферирующих лучей (в фурье-спектрометрах) и т.д.

Спектры бывают [1, с. 712; 20, с. 647]:

- *непрерывные*, или *сплошные* (примеры: спектры расплавленного металла, горячего газового потока в сопле ракеты и т.д.) – это спектры от веществ с повышенной плотностью;
- *дискретные*, или *линейчатые*, состоящие из почти монохроматических спектральных линий с дискретными значениями длины волны  $\lambda$  или частоты  $\nu$  (примеры: спектры веществ в глубоком вакууме, в частности, спектры рассеянных межзвездных туманностей);
- *полосатые*, состоящие из ряда полос, каждая из которых, в свою очередь, состоит из набора близких дискретных линий (пример: спектры веществ, находящихся в неглубоком вакууме, в частности, спектры люминесцентных ламп и ламп «дневного света»);
- *сложные*, или *комбинированные*, состоящие, например, из непрерывного спектра и ряда дискретных линий.

Для качественного и количественного исследования веществ широко используется *спектральный анализ* [1, 21–23]. Он заключается в определении состава вещества (а также его температуры, плотности, давления и т.д.) на основе анализа спектров излучения (эмиссии), поглощения (абсорбции) и др. [1, 21].

Спектральный анализ можно разделить на *широкополосный* (изучение спектра в широкой полосе частот) и *узкополосный* (изучение тонкой структуры одной линии), а также атомный, молекулярный, эмиссионный, абсорбционный, качественный, количественный и т.д.

Области применения спектрального анализа:

- *физика* (изучение спектров газов, жидкостей, металлов, плазмы);
- *астрофизика* (изучение спектров планет, звезд, галактик, комет);
- *металлургия* (определение по спектру состояния расплавленного металла в домне);
- *химия и ядерно-магнитно-резонансная (ЯМР) спектроскопия* (определение по ЯМР-спектру химического состава);
- *геофизика* (разведка руд, минералов, нефти, газа) и т.д.

В данной работе будут рассмотрены следующие три задачи.

1. Устранение сглаживающего влияния аппаратной функции на непрерывный спектр.
2. Разделение (сепарация) близких непрерывных перекрывающихся линий.
3. Восстановление дискретных спектров.

#### Устранение влияния АФ на непрерывный спектр

Задачи спектрального анализа бывают:

- прямыми – моделирование или измерение спектров;
- обратными – восстановление спектров путем устранения искажений.

Перейдем к математическому описанию прямой и обратной задач спектроскопии для случая, когда спектр является непрерывным [2, 4, 6, 12–14, 24]. Введем следующие важные понятия: АФ спектрометра, истинный и измеренный спектры и др.

**Определение.** *Аппаратной функцией* [2] (спектральной чувствительностью, инструментальным контуром, функцией пропускания, функцией щели)  $K(\lambda, \lambda')$  будем называть измеренную спектрометром интенсивность дискретной линии единичной интенсивности и частоты  $\lambda'$  при настройке спектрометра на частоту  $\lambda$  (рис. 2).

В зависимости от типа щели, дифракции, aberrаций и т.д. аппаратная функция спектрометра может быть [2, 15] щелеобразной (прямоугольной), треугольной, дифракционной Рэлея, гауссовой, дисперсионной, экспоненциальной, Фойхта. В *узкополосной спектроскопии* форма АФ практически одинакова при различных  $\lambda$ , изменяющихся в малых пределах. В этом случае АФ называется разностной (частотно-инвариантной):  $K = K(\lambda - \lambda')$ . В случае *широкополосной спектроскопии* (когда исследуется спектр, например, во всем видимом диапазоне) форма АФ зависит от  $\lambda$  (становится шире с ростом  $\lambda$ ).


 Рис. 2. Аппаратная функция спектрометра  $K(\lambda, \lambda')$ 

**Истинный и измеренный спектры.** Обозначим через  $z(\lambda)$  *истинный спектр* – зависимость интенсивности излучения от длины волны  $\lambda$ , не искаженную артефактами (конечной шириной АФ спектрометра, наложением линий, шумами и т.д.), а через  $\tilde{u}(\lambda)$  – *измеренный* (экспериментальный) *спектр*, полученный в результате сканирования по длине волны  $\lambda$  (в некотором диапазоне длин волн) спектрометром, а именно, с учетом его АФ  $K(\lambda, \lambda')$  и при наличии различных артефактов (погрешностей измерений, турбулентностей в среде, через которую идет излучение). Измеренный спектрометром спектр  $\tilde{u}(\lambda)$  обычно более сглажен, чем  $z(\lambda)$  (в  $\tilde{u}(\lambda)$  не разрешены близкие линии, заглажена тонкая структура некоторых линий), и зашумлен (в результате слабые линии «тонут» в шуме). Рис. 3 иллюстрирует сказанное (АФ неразностная).

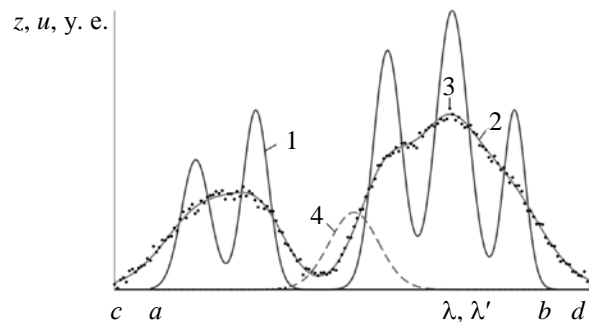


Рис. 3. 1 – истинный спектр  $z(\lambda)$ ; 2 – измеренный  $u(\lambda)$ ,  
сглаженный аппаратной функцией, но без шума; 3 – измеренный с шумом  $\tilde{u}(\lambda)$ ;  
4 – сечение аппаратной функции  $K(\lambda, \lambda')$  в функции  $\lambda'$  при некотором значении  $\lambda$

Из рис. 3 видно, что в истинном спектре  $z(\lambda)$  пять линий, но в измеренном  $\tilde{u}(\lambda)$  меньше – они не разрешились из-за широкой АФ, а также зашумлены.

Возникает задача: по экспериментальному спектру  $\tilde{u}(\lambda)$  и АФ  $K(\lambda, \lambda')$  путем математической и программной обработки восстановить истинный спектр  $z(\lambda)$ . Успешное решение этой задачи позволит повысить разрешающую способность несовершенного спектрометра, а значит, качество спектрального анализа.

Задача определения истинного спектра  $z(\lambda)$  на основе экспериментального  $\tilde{u}(\lambda)$  и АФ  $K(\lambda, \lambda')$  называется *задачей редукции* (приведения) *профиля спектра к идеальному спектральному прибору* (другое название: *исключение АФ*) [2, 25].

Чтобы повысить разрешающую способность спектрометра, можно использовать [4, с. 27] более совершенный (а значит – более дорогой) спектрометр. Но можно выполнить математическую обработку (с помощью компьютера) результатов измерений путем решения соответствующего уравнения. Это – один из вариантов известной *редукционной проблемы Рэлея* [24].

**Прямая и обратная задачи спектроскопии.** Опишем математически *прямую задачу* (моделирование экспериментального искаженного спектра). Полагаем, что АФ является неразностной (частотно неинвариантной). Измеренное значение интенсивности  $\tilde{u}(\lambda)$  при настройке спектрометра на длину волны  $\lambda$  равно сумме (интегралу) всех интенсивностей  $z(\lambda')$  с весовой функцией  $K$ , т.е. [4, с. 25]

$$\tilde{u}(\lambda) = \int_a^b z(\lambda') K(\lambda, \lambda') d\lambda' + \delta u, \quad c \leq \lambda \leq d, \quad (1)$$

где  $[a, b]$  – пределы спектра  $z(\lambda')$ ;  $[c, d]$  – пределы  $\tilde{u}(\lambda)$  (обычно более широкие, чем  $[a, b]$ );  $\delta u$  – погрешность измерений.

Математически в (1) задаются истинный спектр  $z(\lambda')$  (рис. 3, кривая 1) и АФ  $K(\lambda, \lambda')$  (кривая 4), а рассчитывается (моделируется) экспериментальный (сглаженный) спектр  $\tilde{u}(\lambda)$  (кривая 2) и добавляется погрешность  $\delta u$  (кривая 3).

Теперь опишем математически *обратную задачу*: восстановление истинного спектра  $z(\lambda)$ . Поменяем местами левую и правую части в (1):

$$Az \equiv \int_a^b K(\lambda, \lambda') z(\lambda') d\lambda' = \tilde{u}(\lambda), \quad c \leq \lambda \leq d, \quad (2)$$

где  $A$  – оператор,  $K(\lambda, \lambda')$  – ядро (АФ),  $z(\lambda')$  – искомая функция (истинный спектр),  $\tilde{u}(\lambda)$  – правая часть (измеренный спектр). В соотношении (2) известны (измерены или заданы)  $\tilde{u}(\lambda)$  и  $K(\lambda, \lambda')$ , а  $z(\lambda')$  является искомой функцией. Соотношение (2) есть *интегральное уравнение* (ИУ) Фредгольма I рода относительно  $z(\lambda')$ .

Задача решения уравнения (2) является *некорректной* (решение может не существовать или быть не единственным и, главное – быть существенно неустойчивым). На рис. 4 приведен результат численного решения ИУ (2) методом квадратур без дополнительного использования некоторого устойчивого метода (о методах решения ИУ см. дальше).

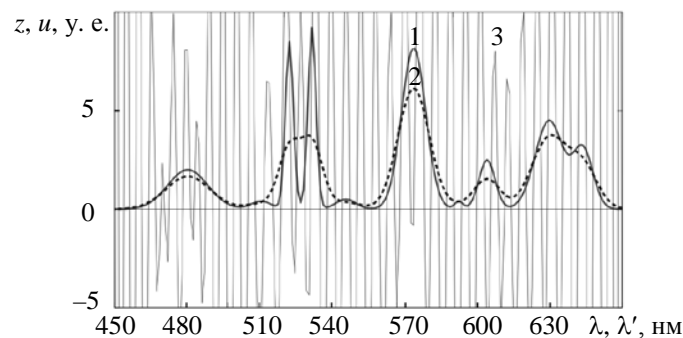


Рис. 4. 1 – точный спектр  $\bar{z}(\lambda)$ ; 2 – сглаженный (измеренный) спектр  $\tilde{u}(\lambda)$ , зашумленный 1%-ным шумом ( $\delta = 0,03$ ); 3 – полученный численно спектр

Решение получилось чрезвычайно неустойчивым – в виде так называемой «пилы» большой амплитуды – ничего общего не имеющим с  $\bar{z}(\lambda)$  (ср. [6, с. 88], [13, с. 182], [26, с. 162]).

Поэтому для устойчивого решения ИУ (2) нужно привлекать методы регуляризации Тихонова, фильтрации Винера, фильтрации Калмана–Бьюси и др. [6, 13, 26–29]. Мы будем использовать, главным образом, метод регуляризации Тихонова [6, 13].

**Метод регуляризации Тихонова.** Интегральное уравнение (2) запишем в виде операторного уравнения:

$$Az = u. \quad (3)$$

При численном решении ИУ (2), например, методом квадратур [13, с. 180] будет получаться система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) типа (3):  $\mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{u}$ , в которой  $\mathbf{A}$  – матрица, состоящая из элементов  $K$ ,  $\mathbf{z}$  – искомый вектор,  $\mathbf{u}$  – правая часть. Решение СЛАУ неустойчиво (рис. 4).

Полагаем, что в операторном уравнении (3) вместо точных  $u$  и  $K$  известны  $\tilde{u}$  и  $\tilde{K}$ , такие, что  $\|\tilde{u} - u\| \leq \delta$ ,  $\|\tilde{K} - K\| \leq \xi$ , где  $\delta$  и  $\xi$  – погрешности правой части  $u$  и ядра  $K$ .

В методе регуляризации нулевого порядка Тихонова вместо (3) решается СЛАУ [6, с. 235]:

$$(\alpha \mathbf{E} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}) \mathbf{z}_\alpha = \mathbf{A}^T \mathbf{u}, \quad (4)$$

где  $\alpha > 0$  – параметр регуляризации (при правильном выборе которого получается устойчивое решение, близкое к точному),  $\mathbf{E}$  – единичная, а  $\mathbf{A}^T$  – транспонированная матрица. Регуляризованное решение  $\mathbf{z}_\alpha$  можно записать в виде:

$$\mathbf{z}_\alpha = (\alpha \mathbf{E} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{u}. \quad (5)$$

В среде MATLAB нами разработана m-функция Tikh0.m [6].

**О способе выбора параметра регуляризации  $\alpha$ .** Важной задачей является выбор параметра регуляризации  $\alpha$  в решении (5) и оценка погрешности регуляризованного решения  $z_\alpha$ . Для выбора  $\alpha$  обычно используются: принцип невязки, обобщенный принцип невязки и др. В работах [15, 16] предложено использовать *способ обучающих примеров-спектров* (способ модельных спектров), в котором используются обучающие модельные спектры, «близкие» к восстанавливаемому. Этот способ позволяет оценить погрешность восстановления спектра, не зная истинного спектра [16]. Пусть дан измеренный спектр  $u(\lambda)$  (рис. 5).

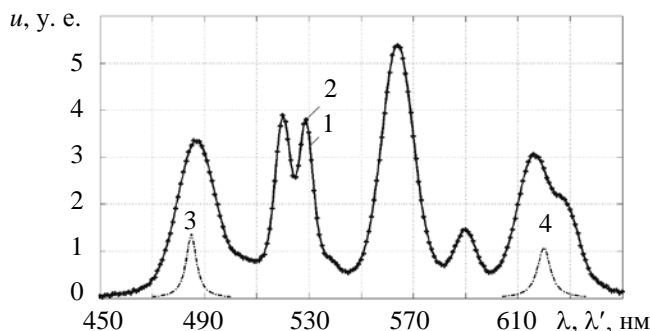


Рис. 5. Спектр  $P$ . 1 – незашумленный спектр  $\bar{u}(\lambda)$ ; 2 – зашумленный спектр  $\tilde{u}(\lambda)$ ; два сечения аппаратной функции: 3 –  $10K(485, \lambda')$  и 4 –  $10K(620, \lambda')$

АФ спектрометра в данном примере взята дисперсионной [2, 15, 16]:

$$K(\lambda, \lambda') = \frac{w(\lambda)/2\pi}{(\lambda - \lambda')^2 + [w(\lambda)/2]^2}, \quad (6)$$

где  $w(\lambda) = q\lambda$  – ширина АФ по уровню 0,5, причем  $q = 0,015$ . Обозначим этот вариант спектра  $P$ . Анализ рис. 5 показывает, что в спектре  $P$  имеется предположительно 8–10 линий, но не все они видны.

Поэтому в качестве второго (модельного, обучающего) примера (или нескольких примеров)  $Q$  моделируем «близкий» к оригиналу  $P$ , истинный спектр которого состоит из 8–10 спектральных линий (в виде гауссиан), а АФ вида (6).

В работах [6, 13–16, 27] показано, что

$$\sigma_{\text{rel}}(\alpha) \equiv \frac{\|\Delta z_\alpha\|}{\|z\|} \leq \varepsilon(\alpha), \quad (7)$$

где

$$\varepsilon(\alpha) = \frac{\|A\|}{2\sqrt{\alpha}} \eta + \frac{\alpha}{\alpha + g}, \quad (8)$$

$\eta = \delta_{\text{rel}} + \xi_{\text{rel}}$ ,  $\delta_{\text{rel}} = \delta / \|u\|$ ,  $\xi_{\text{rel}} = \xi / \|A\|$  – относительные погрешности исходных данных,  $\sigma_{\text{rel}}(\alpha) = \|\Delta z_\alpha\| / \|z\|$  – относительная погрешность восстановления спектра, а  $\varepsilon(\alpha)$  – огибающая погрешности  $\sigma_{\text{rel}}(\alpha)$ , причем  $g$  определяется из условия  $\sigma_{\text{rel}}(\alpha) = \varepsilon(\alpha)$ . Оценки  $\sigma_{\text{rel}}(\alpha)$  и  $\varepsilon(\alpha)$  для примеров  $P$  и  $Q$  одинаковы, так как у них одинаковы  $\|A\|$  и  $\eta$ .

На рис. 6 представлены полученные зависимости  $\sigma_{\text{rel}}(\alpha)_Q$  для ряда «близких» модельных примеров и ряда значений погрешности  $\eta$  (область между кривыми 1 и 2). Заметим, что кривая 3 смоделирована: она приведена лишь для иллюстрации.

На рис. 6 представлено также несколько огибающих  $\varepsilon(\alpha)$  согласно (8) при  $\|A\| = 0,843$  и  $\eta = \delta_{\text{rel}} + \xi_{\text{rel}} = 2 \cdot 10^{-2}$  для  $g = 0 - 0,1$ . Выбрано  $g = 0,045$ , при этом значении одна из кривых  $\varepsilon(\alpha)$  касается набора кривых  $\sigma_{\text{rel}}(\alpha)_Q$ , т.е. в (7) положено:  $\varepsilon(\alpha) = \sigma_{\text{rel}}(\alpha)_Q$ . Этому соответствует значение параметра регуляризации  $\alpha = \alpha_g = 10^{-2,2}$ . Из рис. 6 видно, что, несмотря на разброс кривых  $\sigma_{\text{rel}}(\alpha)_Q$  и  $\varepsilon(\alpha)$ , значение  $g$  и, как следствие,  $\alpha$  оценивается надежно.

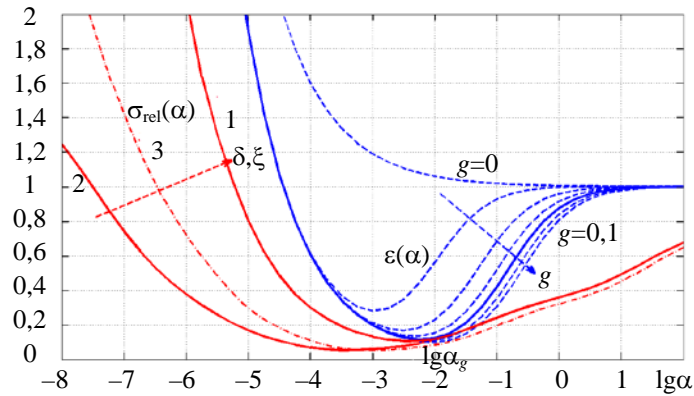


Рис. 6. Относительные погрешности  $\sigma_{rel}(\alpha)_Q$  для нескольких примеров  $Q$  (1 и 2 – ограничения сверху и снизу, а 3 –  $\sigma_{rel}(\alpha)_P$ ) и огибающие  $\varepsilon(\alpha)$  для ряда значений параметра  $g$

На рис. 7 – приведен восстановленный спектр  $z_{\alpha P}(\lambda)$  при  $\alpha = \alpha_g = 10^{-2,2}$ . Относительная погрешность восстановления  $\sigma_{rel}(\alpha_g) = 0,073 = 7,3 \%$ . Из рис. 7 видно, насколько точно восстановился спектр: разрешились близкие линии и выделились слабые.

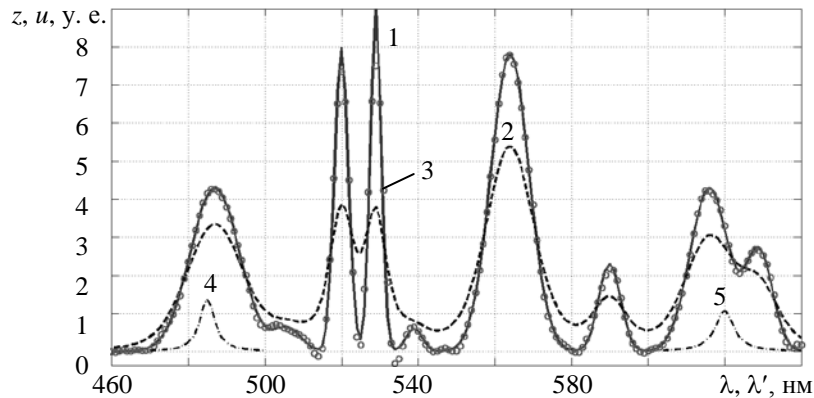


Рис. 7. Спектр  $P$ . 1 – истинный спектр  $z_P(\lambda)$ ; 2 – измеренный  $u_P(\lambda)$ ; 3 – восстановленный  $z_{\alpha P}(\lambda)$  при  $\alpha = \alpha_g = 10^{-2,2}$  и два сечения аппаратной функции: 4 –  $10K(485, \lambda')$  и 5 –  $10K(620, \lambda')$

### Разделение перекрывающихся спектральных линий

**Постановка задачи.** Рассмотрим еще одну актуальную обратную задачу спектроскопии – разделение (сепарацию) непрерывных перекрывающихся спектральных линий [7, 8, 10, 11, 30–32]. Перекрывание может возникнуть из-за близости линий или вследствие воздействия на излучающее вещество магнитного или электрического поля, в результате чего каждая линия расщепляется (эффект Зеемана или Штарка) на ряд близких пиков-компонент. Перекрывание спектральных линий может возникнуть также из-за взаимодействия молекул вещества, что ведет к движению молекул и к доплеровскому уширению линий и, как следствие, к их (частичному) наложению.

Особенностью данной задачи является то, что линии невозможно разделить технически, даже используя спектрометр с повышенной разрешающей способностью (с узкой аппаратной функцией). Линии (их профили) можно разделить лишь математико-компьютерным путем. Данная задача относится к так называемым обратным задачам второго типа (когда в принципе невозможно восстановить искомую функцию без математической обработки) [6].

Проиллюстрируем задачу рис. 8. На нем отображены  $z_j(\lambda)$ ,  $j = \overline{1, N}$  – профили  $N = 3$  перекрывающихся линий.

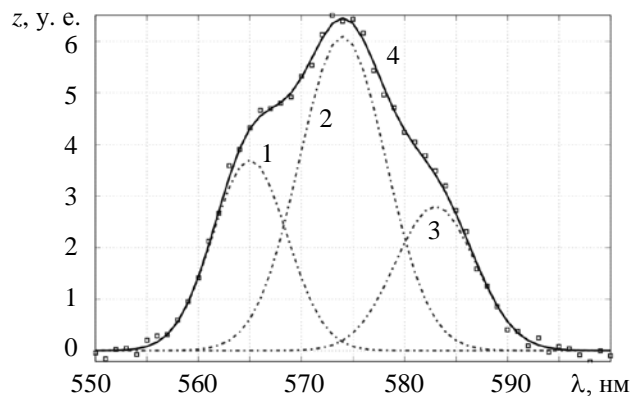


Рис. 8. Исходные спектры. 1, 2, 3 – истинные перекрывающиеся линии (гауссианы)  $z_1(\lambda)$ ,  $z_2(\lambda)$ ,  $z_3(\lambda)$ ; 4 – суммарный спектр  $Z(\lambda) = z_1(\lambda) + z_2(\lambda) + z_3(\lambda)$  незашумленный (непрерывная линия) и зашумленный 5 %-ным шумом (квадратики) ( $\delta z = 0,1$ ) [31]

Однако сами профили  $z_j(\lambda)$  неизвестны, а известен лишь суммарный измеренный спектр-профиль

$$Z(\lambda) = \sum_{j=1}^N z_j(\lambda), \quad a \leq \lambda \leq b. \quad (9)$$

Требуется на основе суммарного (обычно зашумленного) измеренного спектра  $Z(\lambda)$  согласно (9) определить число линий  $N$  и восстановить профили отдельных линий-компонент  $z_j(\lambda)$ . При этом можно моделировать профили линий некоторыми функциями (гауссианами, лоренцианами и т.д.), используя дополнительную информацию (начальные приближения профилей линий, пределы изменения  $\lambda$  и т.д.).

Строго говоря, данная задача является некорректной (может не существовать решения, оно может быть не единственным или неустойчивым) [26, 27, 29, 33, 34]. Однако за счет использования дополнительной информации и, например, метода регуляризации Тихонова задача может стать условно корректной [34].

**Существующие решения.** В методе фурье-самодеконволюции спектра (Fourier self-deconvolution) [8] для разрешения перекрывающихся линий используется *аподизация* – усечение интерферограммы, по которой с помощью преобразования Фурье вычисляется спектр в фурье-спектрометрах [6, с. 224]. За счет аподизации ширина линий искусственно уменьшается (до 5 раз). В результате истинные профили линий-компонент искажаются ради их разрешения. Этот метод позволяет определить количество линий-компонент и их центральные длины волн, но не параметры их профилей (амплитуду и полуширину).

Отметим также метод генетических алгоритмов [35–37], метод «полуслепой» деконволюции [38], способ вычислительных экспериментов [6] – методы разложения суммарного спектра на составляющие. В работах [10, 31, 32] предложена методика, включающая дифференцирование суммарного спектра, использование сглаживающего сплайна и минимизацию функционала. Это – методика разрешения линий, в принципе, без искажения их профилей.

**Моделирование линий и оценка их числа.** Используем моделирование линий гауссианами и лоренцианами. При этом для оценки числа линий  $N$  используем известный *метод производных* суммарного спектра  $d^l Z(\lambda)/d\lambda^l$ , где обычно  $l = \overline{1,4}$ , т.е. используются производные от 1-го до 4-го порядков [7, 9–11, 30].

**Моделирование линий гауссианами.** В работе [7] впервые предложен *метод производных* с использованием производной лишь 1-го порядка, а в [10, 11, 30] использованы производные вплоть до 4-го порядка.

Моделируем каждую линию  $z_j(\lambda)$  *гауссианой* (гауссовой функцией):

$$z_j(\lambda) = A_j \exp\left(-\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{2\sigma_j^2}\right), \quad j = \overline{1, N}, \quad (10)$$

где  $A_j$  – амплитуда линии,  $\bar{\lambda}_j$  – координата максимума,  $\sigma_j^2$  – дисперсия, при этом  $\tau_j = \sqrt{2 \ln 2} \sigma_j = 1,1773 \sigma_j$  – полуширина гауссианы по уровню 0,5 [33].



Производные порядков  $l = 1-4$  от  $z_j(\lambda)$  по  $\lambda$  равны [9, 10, 30–32]

$$z_j^I(\lambda) = -\frac{A_j}{\sigma_j} \exp\left(-\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) \cdot \left(\frac{\lambda - \bar{\lambda}_j}{\sigma_j}\right), \quad (11)$$

$$z_j^{II}(\lambda) = -\frac{A_j}{\sigma_j^2} \exp\left(-\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) \cdot \left(-\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{\sigma_j^2} + 1\right), \quad (12)$$

$$z_j^{III}(\lambda) = \frac{A_j}{\sigma_j^3} \exp\left(-\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) \cdot \left(-\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{\sigma_j^2} + 3\right) \cdot \left(\frac{\lambda - \bar{\lambda}_j}{\sigma_j}\right), \quad (13)$$

$$z_j^{IV}(\lambda) = \frac{A_j}{\sigma_j^4} \exp\left(-\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) \cdot \left(\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^4}{\sigma_j^4} - 6\frac{(\lambda - \bar{\lambda}_j)^2}{\sigma_j^2} + 3\right). \quad (14)$$

Из формул (11)–(14) следует, что

$$z_j^I(\bar{\lambda}_j) = 0, \quad z_j^{II}(\bar{\lambda}_j) = -\frac{A_j}{\sigma_j^2} < 0, \quad z_j^{III}(\bar{\lambda}_j) = 0, \quad z_j^{IV}(\bar{\lambda}_j) = 3\frac{A_j}{\sigma_j^4} > 0, \quad (15)$$

т.е. отрицательный экстремум 2-й производной и положительный экстремум 4-й производной соответствуют максимуму  $j$ -й линии, а нулевые значения 1-й и 3-й производных (при  $z_j^{II}(\bar{\lambda}_j) < 0$ ,  $z_j^{IV}(\bar{\lambda}_j) > 0$ ) также указывают на  $j$ -ю линию.

Из выражений  $z_j^{II}(\bar{\lambda}_j)$  и  $z_j^{IV}(\bar{\lambda}_j)$  в (15) можно получить систему двух уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{A_j}{\sigma_j^2} &= -z_j^{II}(\bar{\lambda}_j), \\ \frac{A_j}{\sigma_j^4} &= \frac{1}{3} z_j^{IV}(\bar{\lambda}_j). \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Решая систему (16), определим  $A_j$  и  $\sigma_j$

$$A_j = 3 \frac{[z_j^{II}(\bar{\lambda}_j)]^2}{z_j^{IV}(\bar{\lambda}_j)}, \quad \sigma_j = \sqrt{3 \frac{-z_j^{II}(\bar{\lambda}_j)}{z_j^{IV}(\bar{\lambda}_j)}}, \quad j = \overline{1, N}. \quad (17)$$

Однако реальный (не модельный) измеренный спектр обычно зашумлен, и его численное дифференцирование (не по аналитическим формулам (11)–(14)) выполняется со значительными погрешностями [10, 31] и это породит погрешности  $A_j$  и  $\sigma_j$  согласно (17). Можно отфильтровать шумы, например, фильтром Савицкого–Голея с помощью  $m$ -функции `sgolayfilt.m` в среде MATLAB [39, с. 193]. Можно также аппроксимировать спектр *сглаживающим сплайном* [13, 33] и дифференцировать сплайн, как это успешно сделано в [6, с. 323], [10, 31, 32].

Кроме того, невозможно дифференцировать непосредственно линии  $z_j(\lambda)$ , а можно дифференцировать только суммарный спектр  $Z(\lambda)$ . В результате параметры отдельных линий будут определяться по производным суммарного спектра и это породит погрешности отдельных линий, а ряд линий может вообще не проявиться по некоторым производным согласно критериям (15). Поэтому нужно использовать все производные порядков 1–4, а также использовать более точные методы сепарации линий (модифицированный метод координатного спуска [10, 31] и др.), полагая в качестве начальных приближений значения  $N$ ,  $A_j$ ,  $\bar{\lambda}_j$  и  $\sigma_j$ , оцененные методом производных.

В работе [10] выведены также формулы для производных порядков 1–4, когда линии аппроксимируются лоренцианами.

**Степень наложения линий.** В работе [30] введен удобный параметр, характеризующий *степень наложения пиков* (в наших обозначениях):

$$D = \frac{\tau}{\Delta}, \quad (18)$$

где  $\tau$  – полуширина пиков-линий по уровню 0,5,  $\Delta$  – расстояние между пиками. Однако формула (18) применима лишь, когда полуширина обоих пиков одинакова. А для разной полуширины предлагаем следующую формулу:

$$D = \frac{\bar{\tau}}{\Delta}, \quad (19)$$

где  $\bar{\tau} = (\tau_1 + \tau_2)/2$  – средняя полуширина двух пиков. Но формула (19) не учитывает возможного различия амплитуд  $A$  пиков и случая, когда  $N > 2$ . Предлагается следующая формула для случая, вообще говоря, разных амплитуд  $A_j$ ,  $j = \overline{1, N-1}$ , и  $N \geq 2$ :

$$D_{j,j+1} = \frac{\bar{\tau}_{j,j+1}}{\Delta_{j,j+1}} \left( 1 + \frac{|A_j - A_{j+1}|}{A_j + A_{j+1}} \right), \quad j = \overline{1, N-1}, \quad (20)$$

где  $\bar{\tau}_{j,j+1} = (\tau_j + \tau_{j+1})/2$  – средняя полуширина соседних пиков, а  $\Delta_{j,j+1} = \bar{\lambda}_{j+1} - \bar{\lambda}_j$  – расстояние между соседними ( $j$  и  $j+1$ ) пиками.

Если амплитуды линий одинаковы, т.е.  $A_j = A_{j+1}$ , то формула (20) переходит в формулу  $D_{j,j+1} = \bar{\tau}_{j,j+1}/\Delta_{j,j+1}$ , а при  $N = 2$  – в (19). А если  $A_{j+1} \ll A_j$ , то  $D_{j,j+1} = 2\bar{\tau}_{j,j+1}/\Delta_{j,j+1}$ . Следовательно (формула (20) это подтверждает), чем шире пики, а также чем они ближе друг к другу и чем больше различаются их амплитуды, тем больше степень наложения пиков  $D$ , а значит, тем сложнее разделить пики при решении обратной задачи.

Можно использовать также среднее значение степени наложения всех  $N$  пиков-линий:

$$\bar{D} = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} D_{j,j+1}. \quad (21)$$

Выражение (21) дает общую информацию о нескольких пиках.

**Сепарация спектральных линий.** Рассмотрим задачу о разделении перекрывающихся спектральных линий на примере, представленном на рис. 8.

В приложении к работе [17] приведены разработанная программа `Overlap_gauss3.m`, а также  $m$ -функции `gauss.m`, `Deriv_z.m`, `Codesc.m`, `F1.m`, `deltap.m`, предназначенные для сепарации трех гауссовых спектральных линий (см. рис. 8–11).

Сначала оценим число компонент  $N$  в примере на рис. 8, для чего используем *метод производных*. Численно с помощью  $m$ -функции `diff.m` находим производные по  $\lambda$  1-го порядка  $Z'(\lambda)$  и 2-го порядка  $Z''(\lambda)$  суммарного спектра  $Z(\lambda)$ . На рис. 9, а, приведен спектр (исходная функция)  $Z(\lambda)$ , зашумленный 5 %-ным шумом.

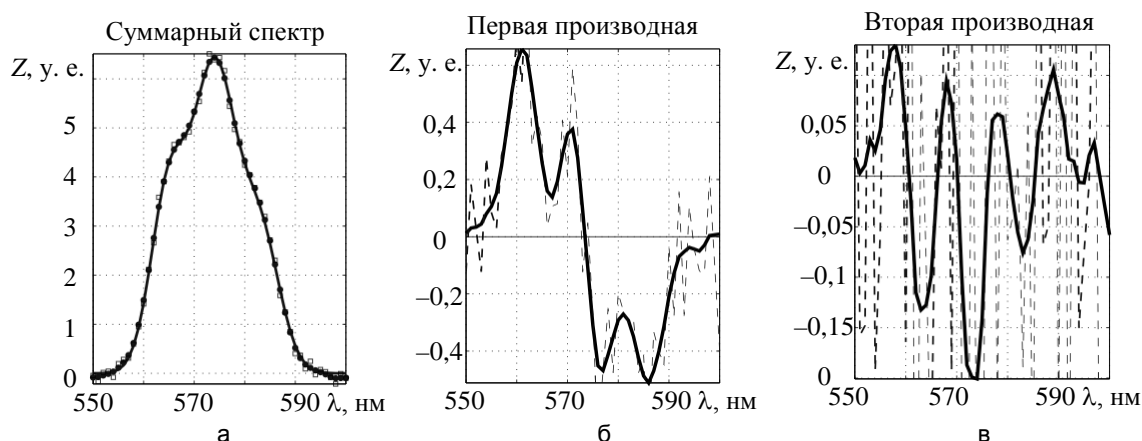


Рис. 9. Метод производных. а – суммарный спектр  $Z(\lambda)$  незашумленный (непрерывная линия), зашумленный (квадраты) и сглаживающий сплайн (точки); б – 1-я производная  $Z'(\lambda)$  от зашумленной функции  $Z(\lambda)$  (пунктир) и от сплайна (сплошная кривая); в – 2-я производная  $Z''(\lambda)$  от зашумленной  $Z(\lambda)$  (пунктир) и от сплайна (сплошная)

Первая производная  $Z'(\lambda)$  от зашумленного спектра  $Z(\lambda)$  дает очень неустойчивый результат, еще более неустойчивый результат дает вторая производная  $Z''(\lambda)$ .

Чтобы сделать процедуру дифференцирования устойчивой, зашумленный спектр  $Z(\lambda)$  аппроксимирован сглаживающим кубическим сплайном [13, 33] с помощью  $m$ -функции `csaps.m` [40, 41] и затем сплайн дважды дифференцирован. Заметим, что степень сглаживания сплайна регулируется параметром сглаживания  $P \in [0, 1]$ , причем при  $P=0$  сплайн получается максимально гладким, а при  $P=1$  сглаживание отсутствует, и сплайн становится интерполирующим (неустойчивым).

Подбором найден параметр сглаживания:  $P = 0,4$ . Первая производная от сплайна (рис. 9, б) имеет одно нулевое значение при  $\lambda = 574$  нм, а вторая производная (рис. 9, в) – три отрицательных экстремума при  $\lambda = 563, 573, 583$  нм. Сделан вывод, что число линий  $N = 3$  и их центральные длины волн  $\bar{\lambda} = 563, 573, 583$  нм (заметим, что точные значения  $\bar{\lambda} = 565, 574, 583$  нм).

**Уточнение параметров линий.** После оценки числа компонент  $N$  на основе 1-й и 2-й производных переходим к уточнению параметров компонент. Компоненты  $z_j(\lambda)$ ,  $j = \overline{1, N}$ , суммарного спектра  $Z(\lambda)$  моделируем гауссианами согласно (10), у каждой по три искомым параметра: амплитуда  $A_j$ , координата максимума  $\bar{\lambda}_j$  и среднее квадратическое отклонение (СКО)  $\sigma_j$ .

Далее  $3N$  параметров объединяем в вектор  $\mathbf{p}$  длиной  $3N$ :

$$\mathbf{p} = [A_1, \bar{\lambda}_1, \sigma_1, A_2, \bar{\lambda}_2, \sigma_2, A_3, \bar{\lambda}_3, \sigma_3]. \quad (22)$$

Значения  $p_j$ ,  $J = \overline{1, 3N}$ , находим путем минимизации функционала невязки

$$F = \sum_{i=1}^n (\tilde{Z}_i - Z_i)^2 \quad (23)$$

с ограничениями на параметры  $p_j$  в виде:

$$p_{\min_j} \leq p_j \leq p_{\max_j}, \quad J = \overline{1, 3N}, \quad (24)$$

где  $\tilde{Z}_i = \tilde{Z}(\lambda_i)$  – измеренные значения суммарного спектра, а  $Z_i = Z_i(p)$  – рассчитанные значения суммарного спектра.

Для минимизации функционала (23) используем метод координатного спуска (method of coordinate descent) с использованием сначала широких, а потом сужающихся ограничений на параметры [31]. В этом методе ограничения не позволяют выходить решению за пределы «коридора», даваемого неравенствами (24), тем самым обеспечивая устойчивость и сходимость решения. В работах [10, 31] приведен псевдокод метода координатного спуска, а в приложении к работе [17] –  $m$ -функция `Codesc.m` для его реализации.

Параметры трех линий-гауссиан уточним путем минимизации функционала (23) методом координатного спуска (КС) с ограничениями типа (24):  $p_{\min} = [3,3; 560; 3,3; 5,6; 572; 4; 2,6; 580; 3,7]$ ,  $p_{\max} = [4; 568; 3,9; 6,5; 576; 4,3; 3,1; 586; 4,3]$ . Методом КС выполнено 18 итераций и получено следующее решение:  $\mathbf{p} = [3,715; 565,0; 3,666; 6,068; 574,0; 4,163; 2,862; 582,9; 3,880]$ . При этом достигнуто значение функционала:  $F = 0,457$ .

Согласно [31] вычислена среднеквадратическая погрешность

$$\delta \mathbf{p} = \left[ \frac{1}{3N} \sum_{J=1}^{3N} w_J (p_J - \bar{p}_J)^2 \right]^{1/2}, \quad (25)$$

где  $p_j$  – вычисленные значения параметров линий,  $\bar{p}_j$  – точные параметры (известные лишь при обработке модельных спектров), а  $w_j = 1/p_{\text{mid}_j}^2$  – весовые коэффициенты, причем  $p_{\text{mid}_j} = (p_{\min_j} + p_{\max_j})/2$ . Погрешность  $\delta \mathbf{p}$  решения  $\mathbf{p}$  методом КС по формуле (25) получилась равной 0,0103, т.е. 1 %.

На рис. 10 представлен результат восстановления трех линий-гауссиан методом КС.

Для сравнения параметры трех линий-гауссиан уточнялись путем минимизации функционала (23) симплекс-методом Нелдера–Мида (НМ) [42], реализованным в  $m$ -функции `fminsearch.m` [43, с. 399]. Специфика метода НМ состоит в том, что он использует не ограничения, как метод КС, а начальные приближения для параметров. Кроме того, метод НМ (как и КС) не требует вычисления градиентов.

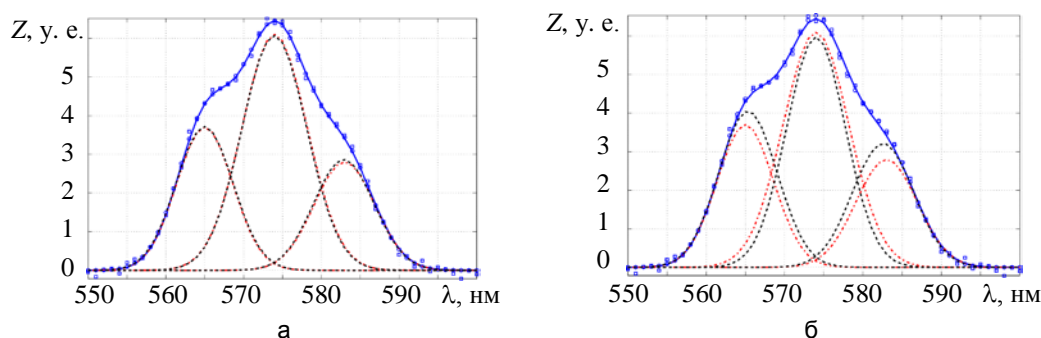


Рис. 10. а – определение параметров трех линий методом координатного спуска, б – определение параметров трех линий-гауссиан путем минимизации функционала  $F$  методом Нелдера–Мида: сплошная кривая – точный суммарный профиль  $Z(\lambda)$ ; квадратики – зашумленный суммарный профиль; пунктир – найденные профили трех линий, кружки – суммарный найденный профиль, красный штрихпунктир – точные профили линий

В методе НМ использовано начальное приближение для вектора  $\mathbf{p}$  согласно (22):  $\mathbf{p} = [3; 563; 3,3; 6; 573,5; 4,4; 3; 583; 3,8]$ . После 1098 итераций получено уточненное решение:  $\mathbf{p} = [4,053; 565,3; 3,728; 5,981; 574,0; 3,755; 3,215; 582,5; 3,890]$ . При этом  $F = 0,372$ , а погрешность решения  $\delta p = 0,0697$  (примерно в 6–7 раз больше, чем методом КС). На рис. 10, б, приведен результат восстановления трех линий-гауссиан методом НМ.

Методом сепарации были обработаны также другие спектры в случаях, когда даны  
 – (без шума) три спектральных перекрывающихся линии, суммарный спектр которых сглажен АФ; в результате сначала устраняется сглаживание, а потом разделяются линии [32];  
 – (с шумом) две линии-гауссианы, а также лоренцианы; для разделения линий используются производные от суммарного спектра вплоть до 4-го порядка [10].

Решение всех рассмотренных вариантов [10, 31, 32] показало эффективность методики разделения линий на основе дифференцирования спектра с использованием сглаживающих сплайнов и последующего уточнения параметров линий путем минимизации функционала.

Методика разделения перекрывающихся спектральных линий может быть использована для разрешения близких линий в спектре, для восстановления тонкой структуры отдельных линий и т.д., для повышения разрешающей способности спектрометров за счет математической и компьютерной обработки спектров.

**Метод свертки.** Рассмотрим еще один метод разделения линий. В работе [9] для разделения перекрывающихся спектральных линий предложен так называемый «Метод свертки экспериментальных спектров с производными гауссовой функции». Он заключается в следующем. Искомые (восстанавливаемые) пики-линии аппроксимируются гауссианами, что характерно для масс-спектрометрических пиков (в наших обозначениях):

$$z(\lambda) = A \exp\left[-\frac{(\lambda - \lambda_{\max})^2}{2\sigma^2}\right], \quad (26)$$

где  $A$  – амплитуда пика;  $\sigma$  – СКО, причем  $\mu = \sqrt{2 \ln 2} \sigma = 1,1773 \sigma$  – полуширина пика по уровню 0,5;  $\lambda_{\max}$  – положение вершины пика. Суммарный (измеренный) спектр равен суперпозиции отдельных пиков (26):

$$Z(\lambda) = \sum_{j=1}^N z_j(\lambda), \quad a \leq \lambda \leq b, \quad (27)$$

где  $j$  – номер пика,  $N$  – число пиков.

Далее вводится *гауссова функция* (модельный спектр) с единичной амплитудой, СКО  $\sigma_0$  (и полушириной  $\mu_0$ ) и нулевым смещением (положением вершины пика):

$$z_0(\lambda) = \exp\left[-\frac{\lambda^2}{2\sigma_0^2}\right] = \exp\left[-\frac{1}{2}(\lambda/\sigma_0)^2\right]. \quad (28)$$

Гауссова функция  $z_0(\lambda)$  играет роль *базисной*, заданной аналитически.

Затем вычисляются *аналитически* производные 2-го и 4-го порядков от  $z_0(\lambda)$  согласно (28) по  $\lambda/\sigma_0$  [9, 30]:

$$z_0^{\text{II}}(\lambda) = \frac{d^{(2)}z_0(\lambda)}{d(\lambda/\sigma_0)^{(2)}} = -\left[1 - (\lambda/\sigma_0)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}(\lambda/\sigma_0)^2\right], \quad (29)$$

$$z_0^{\text{IV}}(\lambda) = \frac{d^{(4)}z_0(\lambda)}{d(\lambda/\sigma_0)^{(4)}} = \left[3 - 6(\lambda/\sigma_0)^2 + (\lambda/\sigma_0)^4\right] \exp\left[-\frac{1}{2}(\lambda/\sigma_0)^2\right]. \quad (30)$$

Далее выполняются *свертки* (convolution) производных  $z_0^{\text{II}}(\lambda)$  и  $z_0^{\text{IV}}(\lambda)$  согласно (29) и (30) с пиком (26):

$$c_2(\lambda) = -A \int_{-\infty}^{\infty} z_0^{\text{II}}(\lambda-l) \exp\left(-\frac{l^2}{2\sigma^2}\right) dl, \quad (31)$$

$$c_4(\lambda) = -A \int_{-\infty}^{\infty} z_0^{\text{IV}}(\lambda-l) \exp\left(-\frac{l^2}{2\sigma^2}\right) dl. \quad (32)$$

Вычислив аналитически интегралы, получим:

$$c_2(\lambda) = \frac{A\sigma\sqrt{\pi}}{\left[1 + (\sigma/\sigma_0)^2\right]^{3/2}} \left(1 - \frac{\lambda^2}{\sigma^2 + \sigma_0^2}\right) \exp\left(-\frac{\lambda^2}{\sigma^2 + \sigma_0^2}\right), \quad (33)$$

$$c_4(\lambda) = \frac{A\sigma\sqrt{\pi}}{\left[1 + (\sigma/\sigma_0)^2\right]^{5/2}} \left(3 - \frac{6\lambda^2}{\sigma^2 + \sigma_0^2}\right) + \frac{\lambda^4}{(\sigma^2 + \sigma_0^2)^2} \exp\left(-\frac{\lambda^2}{\sigma^2 + \sigma_0^2}\right). \quad (34)$$

Из формул (33) и (34) следует, что при  $\lambda = 0$ :

$$c_2(0) = c_{2\text{max}} = \frac{A\sigma\sqrt{\pi}}{\left[1 + (\sigma/\sigma_0)^2\right]^{3/2}}, \quad (35)$$

$$c_4(0) = c_{4\text{max}} = \frac{3A\sigma\sqrt{\pi}}{\left[1 + (\sigma/\sigma_0)^2\right]^{5/2}}. \quad (36)$$

Используя значения  $c_2(0) \equiv C_2$  и  $c_4(0) \equiv C_4$ , согласно (35) и (36), можно найти параметры  $\sigma$  и  $A$  пика (26):

$$\sigma = \sigma_0 \left(3 \frac{C_2}{C_4} - 1\right)^{1/2}, \quad (37)$$

$$A = \frac{C_2 \left[1 + (\sigma/\sigma_0)^2\right]^{3/2}}{\sqrt{\pi} \sigma}. \quad (38)$$

Практическую реализацию метода рассмотрим на примере из [9] (рис. 11).

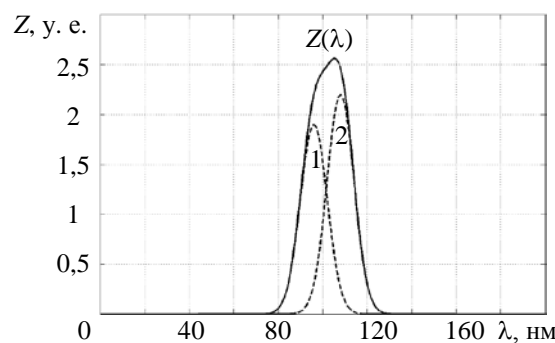


Рис. 11. Суммарный спектр  $Z(\lambda)$  согласно (27), состоящий из двух пиков.

1 –  $z_1(\lambda)$ ,  $A = 1,9$ ,  $\lambda_{\text{max}} = 96$ ,  $\sigma = 6$ ; 2 –  $z_2(\lambda)$ ,  $A = 2,2$ ,  $\lambda_{\text{max}} = 108$ ,  $\sigma = 6$

На практике отдельные пики  $z(\lambda)$  не измеряются и свертки (31) и (32) не реализуются, а измеряется суммарный спектр  $Z(\lambda)$  согласно (27), поэтому делаем свертки  $z_0^{\text{II}}(\lambda)$  и  $z_0^{\text{IV}}(\lambda)$  с  $Z(\lambda)$ :

$$c_2(\lambda) = -\int_{-\infty}^{\infty} z_0^{\text{II}}(\lambda-l) Z(l) dl, \quad (39)$$

$$c_4(\lambda) = - \int_{-\infty}^{\infty} z_0^{IV}(\lambda - l) Z(l) dl . \quad (40)$$

На рис. 12, а, б, приведены результаты сверток (39) и (40).

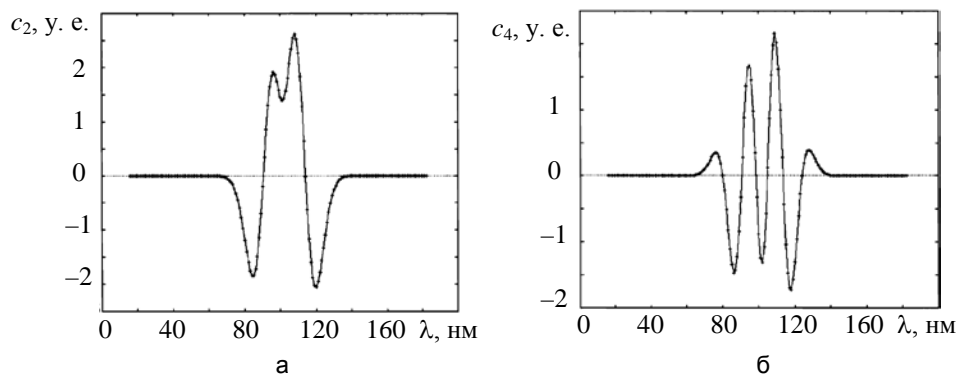


Рис. 12. а – свертка второй производной  $z_0^{II}(\lambda)$  с  $Z(\lambda)$ ,  
 б – свертка четвертой производной  $z_0^{IV}(\lambda)$  с  $Z(\lambda)$

Видим, что свертки 2-й и 4-й производных дают по два положительных экстремума при практически точных значениях  $\lambda_{\max}$  (высокая точность обусловлена неучетом шумов).

Далее определялись параметры  $\sigma$  и  $A$  обоих пиков по формулам (37) и (38). В заключение эти параметры уточнялись с помощью итерационной процедуры, использующей последовательные вычеты найденных пиков из суммарного спектра  $Z(\lambda)$  (см. [44]). На рис. 13 – окончательный результат разделения пиков.

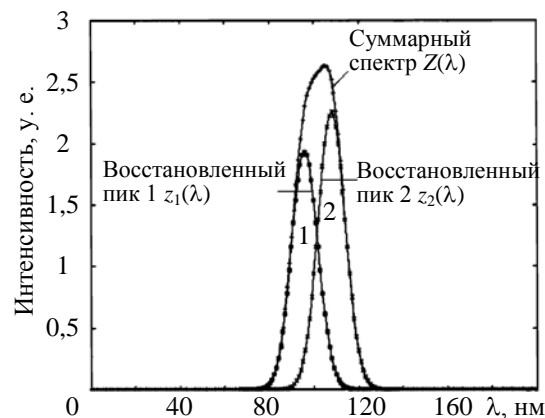


Рис. 13. Восстановленные пики

Отметим следующие достоинства метода свертки [9, 30]:

- не нужно численно дифференцировать экспериментальный спектр  $Z(\lambda)$ , тем более зашумленный  $\tilde{Z}(\lambda)$ , что связано обычно с большими погрешностями (если не применять специальные процедуры, например, сглаживающие сплайны [10, 31]). Вместо этого нужно брать аналитически производные (2-го и 4-го порядков) от базисной аналитической функции  $z_0(\lambda)$  [9, 30], что выполняется точно;
- экспериментальный спектр  $Z(\lambda)$  через свертку входит под интегралы (39) и (40), а интегрирование (в противоположность дифференцированию) обладает сглаживающими свойствами, другими словами, фильтрует шумы, что продемонстрировано в [44, рис. 9];
- итерационная процедура [9] позволяет уточнять параметры  $A$  и  $\sigma$  пиков путем последующих вычетов найденных пиков из суммарного спектра  $Z(\lambda)$ .

Отметим и некоторые положения методике, требующие дальнейшей проработки:

- не использованы производные 1-го и 3-го порядков, которые также указывают на пики (при  $c_1(\lambda) = c_3(\lambda) = 0$ );
- в методике не учтено, что при числе пиков  $N \geq 2$  свертка получается не от отдельных пиков, а от суммарного спектра  $Z(\lambda)$ , что ведет к погрешности параметра  $\lambda_{\max}$ , который требует дополнительного уточнения.

### Восстановление дискретных спектров

Рассмотрим математическую обработку *дискретных* (линейчатых) *спектров* [1], когда спектр  $z(\nu)$  состоит из отдельных дискретных (почти монохроматических) линий, характеризуемых их частотой  $\nu$  и интенсивностью (амплитудой)  $z$ . Такой спектр имеют рассеянные межзвездные туманности, низкотемпературная газоразрядная плазма и т.д. – вещество в вакууме.

На рис. 14 представлен схематически вид дискретного спектра. На схеме  $\nu'_j$  и  $z_j$  – частота и амплитуда линий,  $n$  – их число,  $\nu$  – частота настройки спектрометра,  $u(\nu)$  – измеренная интенсивность,  $K(\nu, \nu')$  – аппаратная функция спектрометра.

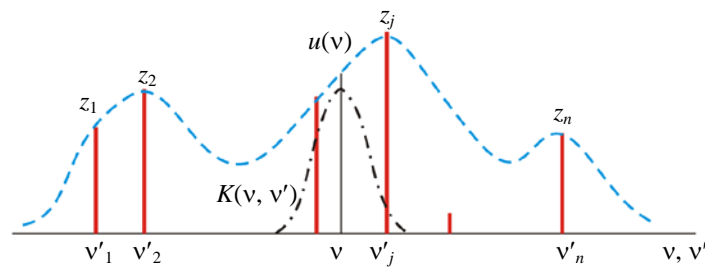


Рис. 14. Схема дискретного спектра (без шума)

Задача восстановления истинного дискретного спектра описывается следующими соотношениями [6, 13, 45, 46]:

$$\sum_{j=1}^n K(\nu_i, \nu'_j) z_j + F = \tilde{u}(\nu_i), \quad i = \overline{1, m}, \quad c \leq \nu_i \leq d, \quad (41)$$

где  $z_j$  – интенсивность (амплитуда)  $j$ -й линии;  $\nu'_j$  – ее частота;  $n$  – число линий;  $\nu_i$  – дискретный отсчет частоты настройки спектрометра;  $m$  – число таких отсчетов;  $\tilde{u}(\nu_i) = u(\nu_i) + \delta u(\nu_i)$  – измеренный с шумом спектр,  $\delta u$  – случайная компонента шума измерений;  $F$  – детерминированная компонента шума (фон) (рис. 15).

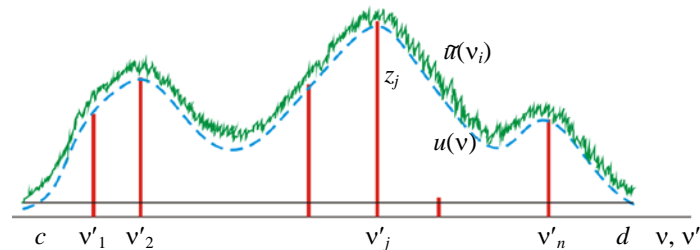


Рис. 15. Схема дискретного спектра (с шумом)

В (41) известны значения  $\tilde{u}(\nu_i)$ ,  $K(\nu, \nu')$ ,  $\nu_i$ ,  $c$ ,  $d$ ,  $m$ , а искомыми являются  $z_j$ ,  $\nu'_j$ ,  $n$ ,  $F$  – амплитуды и частоты линий, их число, а также детерминированная компонента шума.

Система (41) может рассматриваться и как система нелинейных уравнений (СНУ). В этом случае ее можно решать методом Ньютона–Канторовича, градиента, хорд, проекций градиента и др. [47, 48]. Однако эти методы не учитывают специфику системы (41). В результате потребуется повышенное компьютерное время и память для ее решения, повысится вероятность появления ложных линий – корней нелинейной системы и т.д. и останется открытым вопрос о числе линий  $n$ .

Соотношение (41) образует *систему линейно-нелинейных уравнений* (СЛНУ), поскольку часть неизвестных ( $z_j$  и  $F$ ) входит линейно, а часть ( $\nu'_j$ ) – нелинейно.

Для решения системы (41) можно воспользоваться методом Прони [49], алгоритмами Пиблза–Берковица [50], и Фальковича–Коновалова [51], но они либо ориентированы на специальный тип СЛНУ, либо весьма неточны, либо слишком громоздки (подробнее в [6, с. 255]). Можно использовать так называемый метод переменных проекций (the variable projection method) Голуба–Муллен–Хегланда [52–54], в котором также решается СЛНУ типа (41), однако для отыскания частот он использует нелинейный метод (типа Гаусса–Ньютона).

Для эффективного решения СЛНУ (41), учитывающего ее специфику, воспользуемся *алгоритмом интегральной аппроксимации* [6, 13, 45, 46], который учитывает особенности этой системы и который уже продемонстрировал свою эффективность в обработке сигналов [45] и в спектроскопии [6, 18]. Суть алгоритма состоит в следующем.

Для решения интегральных уравнений часто используется метод квадратур, в котором интеграл аппроксимируется конечной суммой, т.е. непрерывная задача дискретизируется. В алгоритме интегральной аппроксимации предлагается использовать обратную операцию, а именно аппроксимировать СЛНУ интегральным уравнением, т.е. заменить дискретную задачу на непрерывную, а затем решать интегральное уравнение методом квадратур, но на другой, очень частой сетке узлов. Это позволит оценить частоты по абсциссам пиков в решении, используя лишь линейные операции, с погрешностью, зависящей от мелкого шага дискретизации. Данный алгоритм выполняется в 4 этапа.

1. Вместо СЛНУ (41) решается линейное интегральное уравнение Фредгольма I рода

$$\int_a^b K(v, v') z(v') dv' = \tilde{u}(v), \quad c \leq v \leq d, \quad (42)$$

методом квадратур и регуляризации Тихонова [13] (см. (4)) с пониженным значением параметра регуляризации  $\alpha$  (это необходимо для разрешения близких линий). В результате будет получено решение  $z_\alpha(v')$  в дискретном виде, в котором близкие линии могут разрешиться, но из-за малого значения  $\alpha$  могут быть и ложные линии. При этом число дискретных отсчетов  $N$  по  $v'$  должно быть  $N \gg n$ , где  $n$  – предполагаемое число линий. Тогда шаг дискретизации  $\Delta v' = (b - a)/(N - 1)$  будет очень мал и будет считаться погрешностью определения частот линий  $v'_j$ .

2. В полученном решении  $z_\alpha(v')$  выделяется ограниченное количество  $L \leq N$  наиболее мощных максимумов и фиксируются их частоты  $\tilde{v}'_j, j = \overline{1, L}$ .

3. Решается уточняющая система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$\sum_{j=1}^L r_j K(v_i, v'_j) \tilde{z}_j + \tilde{F} = \tilde{u}(v_i), \quad i = \overline{1, m}, \quad c \leq v_i \leq d, \quad (43)$$

методом наименьших квадратов Гаусса относительно  $L$  интенсивностей  $\tilde{z}_j$  и фона  $\tilde{F}$  (здесь  $r_j$  – квадратурные коэффициенты).

4. Оставляются лишь те линии, значения интенсивностей которых  $\tilde{z}_j$  преодолели некоторый априори заданный барьер  $Z$ , т.е.  $\tilde{z}_j > Z$ .

Достоинством алгоритма является то, что наиболее сложная часть задачи – определение частот линий  $v'_j$ , входящих в СЛНУ (41) нелинейно – решается линейно, а именно, путем решения линейного ИУ (42) (подробности алгоритма – в [18, 45]).

Разработана программа AlgIntApp.m [6, с. 261] в системе MATLAB.

**Пример (обработка дискретного спектра).** В примере истинный спектр – семь дискретных спектральных линий с амплитудами (в условных единицах):  $z_1 = 4,4, z_2 = 4,6, z_3 = 1,1, z_4 = 3,2, z_5 = 3,2, z_6 = 2,8, z_7 = 3,6$  и частотами (также в условных единицах):  $v'_1 = 2,28, v'_2 = 2,36, v'_3 = 2,95, v'_4 = 3,02, v'_5 = 3,56, v'_6 = 3,64, v'_7 = 3,69$ .

Аппаратная функция спектрометра – гауссова частотно-неинвариантная функция, ширина которой уменьшается с увеличением частоты настройки спектрометра  $v$  (ср. [15]):

$$K(v, v') = \frac{g}{\sqrt{2\pi} \sigma(v)} \exp\left(-\frac{(v - v')^2}{2\sigma^2(v)}\right), \quad (44)$$

где  $\sigma(v) = \sigma_0 \sqrt{1 - 0,16v}$ ,  $\sigma_0 = 0,05$ ,  $g = 0,075$  – в усл. ед. Значение детерминированной компоненты шума (фона)  $F = 0,2$ , а случайная компонента шума измерений имеет среднеквадратическое отклонение  $0,05$  ( $\approx 2\%$ -ный шум).

Еще параметры:  $a = c = 2, b = d = 4; m = 101$  – число экспериментальных отсчетов  $v$ ;  $N = 401$  – число задаваемых отсчетов по  $v'$  при решении СЛАУ (4); шаг дискретизации  $\Delta v' = (b - a)/(N - 1) = 0,005$ . Однако при решении СЛАУ (4) для  $m = 101, N = 401, \alpha = 10^{-6}$  и матрицы  $\mathbf{A}$ , состоящей из элементов  $K(v_i, v'_j)$  вида (44), получилось недостаточное разрешение (не разрешились 6-я и 7-я линии). Поэтому число экспериментальных отсчетов  $m$  было увеличено до  $m = N = 401$  с помощью сплайна.

На рис. 16 приведены точный дискретный спектр  $z(v)$  и измеренный спектр  $u(v)$ , число отсчетов в котором увеличено с помощью сплайна.



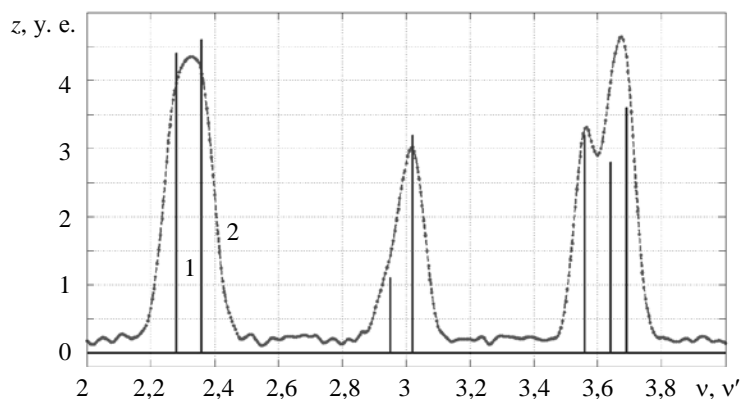


Рис. 16. 1 – точный спектр  $z(v')$ , 2 – измеренный спектр  $u(v)$  длины  $m = 401$

Далее решаем ИУ (42) методом регуляризации Тихонова согласно (4) при  $\alpha = 10^{-6}$ . Полученное регуляризованное решение  $z_\alpha(v')$  приведено на рис. 17.

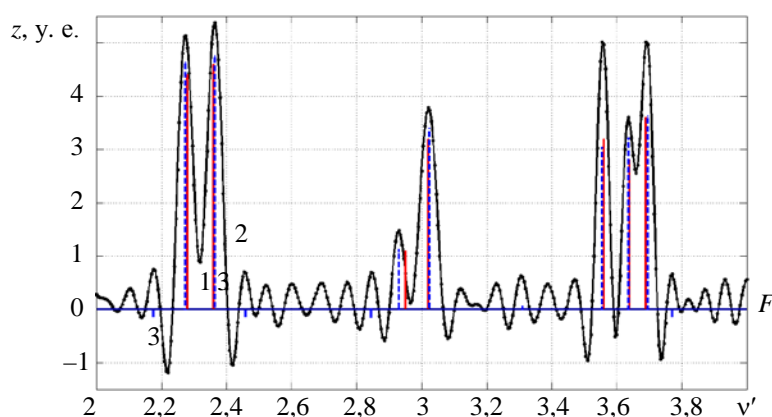


Рис. 17. 1 – точный спектр  $z(v')$ , 2 – регуляризованное решение  $z_\alpha(v')$ , 3 – восстановленный спектр  $z(\tilde{v}'_j)$

В  $z_\alpha(v')$  разрешились все истинные линии, но появилось много ложных. Берем в решении  $L = 12$  наибольших максимумов с их частотами  $\tilde{v}'_j$ ,  $j = \overline{1, L}$ .

Решаем уточняющую СЛАУ (43) относительно  $L$  амплитуд  $\tilde{z}_j$  и фона  $F$  методом наименьших квадратов Гаусса (без регуляризации). Из рис. 17 видно, что все пять ложных максимумов получили значения отрицательные или близкие к нулю.

Конечный результат: все семь дискретных спектральных линий разрешились и определились с приемлемой точностью их частоты  $\tilde{v}'_j$  и интенсивности  $\tilde{z}_j$ .

Заметим, что в работе [18] выполнена обработка реального дискретного спектра угарного газа алгоритмом интегральной аппроксимации (см. рис. 1).

### Заключение

В работе сопоставлены методы восстановления искаженных спектров, а именно метод регуляризации Тихонова, метод моделирования спектральных линий гауссианами или лоренцианами, метод производных суммарного спектра с использованием сплайнов, методы координатного спуска и Нелдера–Мида минимизации функционала невязки, метод фурье-самодеконволюции, метод сверток экспериментального спектра с производными гауссовых функций и алгоритм интегральной аппроксимации. Каждый из методов имеет свои возможности и области применения:

- метод регуляризации Тихонова эффективно восстанавливает измеренный непрерывный спектр, сглаженный аппаратной функцией спектрометра, но не разрешает перекрывающиеся линии;
- спектральные линии адекватно моделируются гауссианами или лоренцианами, что упрощает их численную обработку;
- метод производных (дифференцирования) суммарного спектра позволяет оценить количество и параметры линий, но только при использовании сглаживающих сплайнов. Кроме того, этот метод диффе-

ренцирует суммарный спектр, а не отдельные линии, поэтому требуется дополнительное уточнение параметров линий;

- методы координатного спуска и Нелдера–Мида успешно уточняют параметры линий при использовании результатов дифференцирования в качестве начальных приближений;
- метод фурье-самодеконволюции может использоваться только для оценки количества линий в суммарном спектре и для нахождения их центральных длин волн, но он не пригоден для определения параметров профилей линий (амплитуды и полуширины), так как заужает профили линий вследствие аподизации (усечения интерферограммы);
- метод сверток экспериментального спектра с производными модельного спектра удобен тем, что не требует дифференцирования суммарного экспериментального, а значит, зашумленного спектра. Вместо этого дифференцируется модельный аналитический спектр;
- алгоритм интегральной аппроксимации хорошо подходит для восстановления заглаженных дискретных спектров, когда для получения параметров линий спектра требуется решать систему линейно-нелинейных уравнений. Достоинством алгоритма является то, что наиболее сложная часть задачи – определение частот линий, входящих в систему уравнений нелинейно, решается линейно, а именно, путем решения линейного интегрального уравнения.

Предлагается следующий *комплексный алгоритм* для восстановления спектров.

1. Если измеренный непрерывный спектр сглажен аппаратной функцией, то следует восстановить истинный суммарный спектр методом регуляризации Тихонова.
2. Если в спектре присутствуют перекрывающиеся линии, то они моделируются гауссианами или лоренцианами и их параметры оцениваются по результатам дифференцирования суммарного спектра с использованием сглаживающих сплайнов.
3. Далее эти оценки используются в качестве начальных приближений при уточнении параметров линий методами координатного спуска и Нелдера–Мида.
4. Если спектр дискретный, то для восстановления параметров дискретных линий (амплитуд и частот) требуется решить систему линейно-нелинейных уравнений. Для этой цели эффективен алгоритм интегральной аппроксимации.

#### Литература

1. Физический энциклопедический словарь / Под ред. А.М. Прохорова. М.: Советская энциклопедия, 1984. 944 с.
2. Раутиан С.Г. Реальные спектральные приборы // УФН. 1958. Т. 66. № 3. С. 475–517.
3. Stewart J.E. Resolution enhancement of X-ray fluorescence spectra with a computerized multichannel analyzer // *Applied Spectroscopy*. 1975. V. 29. N 2. P. 171–174.
4. Старков В.Н. Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации. Киев: Наук. думка, 2002. 264 с.
5. Fleckl T., Jäger H., Obernberger I. Experimental verification of gas spectra calculated for high temperatures using the HITRAN/HITEMP database // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2002. V. 35. N 23. P. 3138–3144. doi: 10.1088/0022-3727/35/23/315
6. Сизиков В.С. Прямые и обратные задачи восстановления изображений, спектроскопии и томографии с MatLab. СПб: Лань, 2017. 412 с.
7. Giese A.T., French C.S. The analysis of overlapping spectral absorption bands by derivative spectrophotometry // *Applied Spectroscopy*. 1955. V. 9. N 2. P. 78–96. doi: 10.1366/000370255774634089
8. Kauppinen J.K., Moffatt D.J., Mantsch H.H., Cameron D.G. Fourier self-deconvolution: a method for resolving intrinsically overlapped bands // *Applied Spectroscopy*. 1981. V. 35. N 3. P. 271–276. doi: 10.1366/0003702814732634
9. Сирвидас С.И., Заруцкий И.В., Ларионов А.М., Манойлов В.В. Обнаружение, разделение и оценка параметров масс-спектрометрических пиков методом свертки экспериментальных данных с производными гауссовых функций // *Научное приборостроение*. 1999. Т. 9. № 2. С. 71–75.
10. Сизиков В.С., Лавров А.В. Сравнение различных методов разделения непрерывных перекрывающихся спектральных линий // *Оптика и спектроскопия*. 2018. Т. 124. № 6. С. 723–731. doi: 10.21883/OS.2018.06.46071.28-18
11. Михайленко В.И., Михальчук В.В. Методы разложения спектров с неразрешенной структурой // *Журнал*

#### References

1. *Encyclopedic Dictionary of Physics*. Ed. A.M. Prokhorov. Moscow, Sovetskaya Entsiklopediya Publ., 1984, 944 p. (in Russian)
2. Rautian S.G. Real spectral apparatus. *Soviet Physics Uspekhi*, 1958, vol. 66, no. 2, pp. 245–273. doi: 10.1070/PU1958v001n02ABEH003099
3. Stewart J.E. Resolution enhancement of X-ray fluorescence spectra with a computerized multichannel analyzer. *Applied Spectroscopy*, 1975, vol. 29, no. 2, pp. 171–174.
4. Starkov V.N. *Constructive Methods of Computational Physics in Problems of Interpretation*. Kiev, Naukova Dumka, 2002, 264 p. (in Russian)
5. Fleckl T., Jäger H., Obernberger I. Experimental verification of gas spectra calculated for high temperatures using the HITRAN/HITEMP database. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2002, vol. 35, no. 23, pp. 3138–3144. doi: 10.1088/0022-3727/35/23/315
6. Sizikov V.S. *Direct and Inverse Problems of Image Restoration, Spectroscopy and Tomography with MatLab*. St. Petersburg, Lan' Publ., 2017, 412 p. (in Russian)
7. Giese A.T., French C.S. The analysis of overlapping spectral absorption bands by derivative spectrophotometry. *Applied Spectroscopy*, 1955, vol. 9, no. 2, pp. 78–96. doi: 10.1366/000370255774634089
8. Kauppinen J.K., Moffatt D.J., Mantsch H.H., Cameron D.G. Fourier self-deconvolution: a method for resolving intrinsically overlapped bands. *Applied Spectroscopy*, 1981, vol. 35, no. 3, pp. 271–276. doi: 10.1366/0003702814732634
9. Sirvidas S.I., Zarutsky I.V., Larionov A.M., Manoilov V.V. The convolution of a signal with derivatives of gaussians as an approach suitable for detection, separation and estimation of mass spectrometer peaks. *Scientific Instrumentation*, 1999, vol. 9, no. 2, pp. 71–75.
10. Sizikov V.S., Lavrov A.V. A comparison of different methods of separation of continuous overlapping spectral lines. *Optics and Spectroscopy*, 2018, vol. 124, no. 6, pp. 753–762. doi: 10.1134/S0030400X1806022X
11. Mikhailenko V.I., Mikhail'chuk V.V. Method of expanding spectra with unresolved structure. *Journal of Applied Spectroscopy*, 1987,

- прикладной спектроскопии. 1987. Т. 46. № 4. С. 535–543.
12. Кочиков И.В., Курамшина Г.М., Пентин Ю.А., Ягола А.Г. Обратные задачи колебательной спектроскопии. М.: МГУ, 1993. 204 с.
  13. Сизиков В.С. Математические методы обработки результатов измерений. СПб: Политехника, 2001. 240 с.
  14. Сизиков В.С. Обратные прикладные задачи и MatLab. Учеб. пособие. СПб: Лань, 2011. 256 с.
  15. Сизиков В.С., Кривых А.В. Восстановление непрерывных спектров методом регуляризации с использованием модельных спектров // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 117. № 6. С. 1040–1048. doi: 10.7868/S0030403414110166
  16. Сизиков В.С., Степанов А.В. Способ обучающих примеров в решении обратных некорректных задач спектроскопии // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2015. Т. 15. № 6. С. 1147–1154. doi: 10.17586/2226-1494-2015-15-6-1147-1154
  17. Сизиков В.С., Лавров А.В. Устойчивые методы математико-компьютерной обработки изображений и спектров. СПб: Университет ИТМО, 2018. 70 с.
  18. Sizikov V., Sidorov D. Discrete spectrum reconstruction using integral approximation algorithm // Applied Spectroscopy. 2017. V. 71. N 7. P. 1640–1651. doi: 10.1177/0003702817694181
  19. Bousquet P. Spectroscopy and Its Instrumentation. London: Adam Hilger, 1971. 239 p.
  20. Ландсберг Г.С. Оптика. Учеб. пособие для вузов. 6-е изд. М.: Физматлит, 2006. 848 с. Bousquet P. Spectroscopy and Its Instrumentation. London: Adam Hilger, 1971. 239 p.
  21. Tourin R.H., Krakow B. Applicability of infrared emission and absorption spectra to determination of hot gas temperature profiles // Applied Optics. 1965. V. 4. N 2. P. 237–242. doi: 10.1364/ao.4.000237
  22. Workman J., Springsteen A. Applied Spectroscopy: A Compact Reference for Practitioners. San Diego: Academic Press, 1998. 539 p.
  23. Chalmers J.M., Griffiths P.R., eds. Handbook of Vibrational Spectroscopy. New York: Wiley, 2002. 4000 p. doi: 10.1002/0470027320
  24. Глазов М.В., Болохова Т.А. Решение редуцированной проблемы Рэлея с использованием различных модификаций метода регуляризации // Оптика и спектроскопия. 1989. Т. 67. № 3. С. 533–537.
  25. Василенко Г.И. Теория восстановления сигналов: О редукиции к идеальному прибору в физике и технике. М.: Сов. радио, 1979. 272 с.
  26. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. 3-е изд. М: Наука, 1986. 288 с.
  27. Верлянь А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Наук. думка, 1986. 544 с.
  28. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М: Наука, 1990. 232 с.
  29. Engl H., Hanke M., Neubauer A. Regularization of Inverse Problems. Dordrecht: Kluwer, 1996. 328 p.
  30. Манойлов В.В., Заруцкий И.В. Возможности алгоритма свертки с производными для оценки параметров масс-спектров, содержащих наложившиеся пики // Научное приборостроение. 2009. Т. 19. № 4. С. 103–108.
  31. Сизиков В.С., Лавров А.В. Исследование погрешностей некоторых методов разделения перекрывающихся спектральных линий в условиях воздействия помех // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2017. Т. 17. № 5. С. 879–889. doi: 10.17586/2226-1494-2017-17-5-879-889
  32. Сизиков В.С., Лавров А.В. Сепарация непрерывных линий, взаимно перекрывающихся и сглаженных аппаратной функцией // Оптика и спектроскопия. 2017. Т. 123. № 5. С. 678–688. doi: 10.7868/S0030403417110216
  33. Воскобойников Ю.Е., Преображенский Н.Г., Седельников А.И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1984. 240 с.
  34. Петров Ю.П., Сизиков В.С. Корректные, некорректные и промежуточные задачи с приложениями. СПб: Политехника, 2003. 261 с.
  35. Goldberg D.E. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. Addison-Wesley, 1989. 412 p.
  36. Kincaid D., Cheney W. Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing. 3<sup>rd</sup> ed. Providence, AMS, 2009. 788 p.
  37. vol. 46, no. 4, pp. 327–335. doi: 10.1007/BF00660037
  12. Kochikov I.V., Kuramshina G.M., Pentin Yu.A., Yagola A.G. Inverse Problems of Vibrational Spectroscopy. Moscow, MGU Publ., 1993, 204 p. (in Russian)
  13. Sizikov V.S. Mathematical Methods for Processing the Results of Measurements. St. Petersburg, Polytechnica Publ., 2001, 240 p. (in Russian)
  14. Sizikov V.S. Inverse Applied Problems and MatLab. St. Petersburg, Lan' Publ., 2011, 256 p. (in Russian)
  15. Sizikov V.S., Krivykh A.V. Reconstruction of continuous spectra by the regularization method using model spectra. Optics and Spectroscopy, 2014, vol. 117, no. 6, pp. 1010–1017. doi: 10.1134/S0030400X14110162
  16. Sizikov V.S., Stepanov A.V. Method of training examples in solving inverse ill-posed problems of spectroscopy. Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2015, vol. 15, no. 6, pp. 1147–1154. doi: 10.17586/2226-1494-2015-15-6-1147-1154
  17. Sizikov V.S., Lavrov A.V. Stable Methods for Mathematical and Computerized Processing the Images and Spectra. Tutorial. St. Petersburg, ITMO Publ., 2018, 70 p. (in Russian)
  18. Sizikov V., Sidorov D. Discrete spectrum reconstruction using integral approximation algorithm. Applied Spectroscopy, 2017, vol. 71, no. 7, pp. 1640–1651. doi: 10.1177/0003702817694181
  19. Bousquet P. Spectroscopy and Its Instrumentation. London, Adam Hilger, 1971, 239 p.
  20. Landsberg G.S. Optics. Tutorial. 6<sup>th</sup> ed. Moscow, Fizmatlit Publ., 2006, 848 p. (in Russian)
  21. Tourin R.H., Krakow B. Applicability of infrared emission and absorption spectra to determination of hot gas temperature profiles. Applied Optics, 1965, vol. 4, no. 2, pp. 237–242. doi: 10.1364/ao.4.000237
  22. Workman J., Springsteen A. Applied Spectroscopy: A Compact Reference for Practitioners. San Diego, Academic Press, 1998, 539 p.
  23. Chalmers J.M., Griffiths P.R., eds. Handbook of Vibrational Spectroscopy. New York, Wiley, 2002, 4000 p. doi: 10.1002/0470027320
  24. Glazov M.V., Bolokhova T.A. Solution of the Rayleigh reduction problem using different modifications of the regularization method. Optics and Spectroscopy, 1989, vol. 67, no. 3, pp. 312–314.
  25. Vasilenko G.I. The Theory of Signal Reconstruction: On Reduction to Ideal Device in Physics and Technics. Moscow, Soviet Radio Publ., 1979, 272 p. (in Russian)
  26. Tikhonov A.N., Arsenin V.Ya. Solutions of Ill-Posed Problems. New York, Wiley, 1977, 258 p.
  27. Verlan' A.F., Sizikov V.S. Integral Equations: Methods, Algorithms, Programs. Kiev, Naukova Dumka, 1986, 544 p. (in Russian)
  28. Tikhonov A.N., Goncharsky A.N., Stepanov V.V., Yagola A.G. Numerical Methods for the Solution of Ill-Posed Problems. Dordrecht, Kluwer, 1995, 254 p. doi: 10.1007/978-94-015-8480-7
  29. Engl H., Hanke M., Neubauer A. Regularization of Inverse Problems. Dordrecht, Kluwer, 1996, 328 p.
  30. Manoylov V.V., Zarutsky I.V. Capability of the algorithm on the base convolution processing signals form for the estimation of mass-spectra peak parameters in multiplets. Scientific Instrumentation, 2009, vol. 19, no. 4, pp. 103–108. (in Russian)
  31. Sizikov V.S., Lavrov A.V. Study of errors of some methods for separating overlapped spectral lines under noise effect. Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2017, vol. 17, no. 5, pp. 879–889 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2017-17-5-879-889
  32. Sizikov V.S., Lavrov A.V. Separation of continuous lines mutually overlapping and smoothed by the instrumental function. Optics and Spectroscopy, 2017, vol. 123, no. 5, pp. 682–691. doi: 10.1134/S0030400X17110200
  33. Voskoboinikov Yu.E., Preobrazhensky N.G., Sedel'nikov A.I. Mathematical Processing of Experiment in Molecular Gas Dynamics. Novosibirsk, Nauka Publ., 1984, 240 p. (in Russian)
  34. Petrov Yu.P., Sizikov V.S. Well-Posed, Ill-Posed, and Intermediate Problems with Applications. Leiden-Boston, VSP, 2005, 234 p.
  35. Goldberg D.E. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. Addison-Wesley, 1989, 412 p.
  36. Kincaid D., Cheney W. Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing. 3<sup>rd</sup> ed. Providence, AMS, 2009, 788 p.

36. Kincaid D., Cheney W. *Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing*. 3<sup>rd</sup> ed. Providence: AMS, 2009. 788 p.
37. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Cambridge: MIT Press, 1992. 232 p.
38. Yan L., Liu H., Zhong S., Fang H. Semi-blind spectral deconvolution with adaptive Tikhonov regularization // *Applied Spectroscopy*. 2012. V. 66. N 11. P. 1334–1346. doi: 10.1366/11-06256
39. Дьяконов В., Абраменкова И. *MATLAB. Обработка сигналов и изображений. Специальный справочник*. СПб: Питер, 2002. 608 с.
40. Сизиков В.С. Инфракрасная томография горячего газа: математическая модель активно-пассивной диагностики // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2013. № 6(88). С. 1–17.
41. Sizikov V.S., Evseev V., Fateev A., Clausen S. Direct and inverse problems of infrared tomography // *Applied Optics*. 2016. V. 55. N 1. P. 208–220. doi: 10.1364/AO.55.000208
42. Nelder J.A., Mead R. A simplex method for function minimization // *The Computer Journal*. 1965. V. 7. N 4. P. 308–313. doi: 10.1093/comjnl/7.4.308
43. Дьяконов В. *MATLAB 6: Учебный курс*. СПб: Питер, 2001. 592 с.
44. Манойлов В.В., Заруцкий И.В. Отбраковка «выбросов» и оценка параметров масс-спектрометрических сигналов для прецизионного изотопного анализа // *Научное приборостроение*. 2002. Т. 19. № 3. С. 38–46.
45. Sizikov V. Use of an integral equation for solving special systems of linear-non-linear equations / In: *Integral Methods in Science and Engineering*. Vol. 2: Approximation Methods / C. Constanda, J. Saranen, S. Seikkala (eds.). Harlow: Longman, 1997. P. 200–205.
46. Кривых А.В., Сизиков В.С. Обработка дискретных спектров с помощью алгоритма интегральной аппроксимации // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2011. № 5(75). С. 14–18.
47. Химмельблау Д. *Прикладное нелинейное программирование*. М.: Мир, 1975. 536 с.
48. Rheinboldt W.C. *Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations*. 2<sup>nd</sup> ed. Rhiladelphia: SIAM, 1998. 148 p.
49. Kay S.M., Marple S.L. Spectrum analysis – a modern perspective // *Proceedings of the IEEE*. 1981. V. 69. N 11. P. 1380–1420. doi: 10.1109/PROC.1981.12184
50. Peebles P.Z., Berkowitz R.S. Multiple-target monopulse radar processing techniques // *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*. 1968. V. AES-4. N 6. P. 845–854. doi: 10.1109/TAES.1968.5409051
51. Фалькович С.Е., Коновалов Л.Н. Разрешение неизвестного числа сигналов // *Радиотехника и электроника*. 1982. Т. 27. № 1. С. 92–97.
52. Golub G.H., Pereyra V. The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares whose variables separate // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. 1973. V. 10. N 2. P. 413–432. doi: 10.1137/0710036
53. Mullen K.M., van Stokkum I.H.M. The variable projection algorithm in time-resolved spectroscopy, microscopy and mass spectrometry applications // *Numerical Algorithms*. 2009. V. 51. N 3. P. 319–340. doi: 10.1007/s11075-008-9235-2
54. Hegland M. Error bounds for spectral enhancement which are based on variable Hilbert scale inequalities // *Journal of Integral Equations and Applications*. 2010. V. 22. N 2. P. 285–312. doi: 10.1216/JIE-2010-22-2-285
37. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Cambridge, MIT Press, 1992, 232 p.
38. Yan L., Liu H., Zhong S., Fang H. Semi-blind spectral deconvolution with adaptive Tikhonov regularization. *Applied Spectroscopy*, 2012, vol. 66, no. 11, pp. 1334–1346. doi: 10.1366/11-06256
39. D'yakonov V., Abramenkova I. *MATLAB. Processing of Signals and Images*. St. Petersburg, Piter Publ., 2002, 608 p. (in Russian)
40. Sizikov V.S. Infrared tomography of hot gas: mathematical model of active-passive diagnosis. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2013, no. 6, pp. 1–17. (in Russian)
41. Sizikov V.S., Evseev V., Fateev A., Clausen S. Direct and inverse problems of infrared tomography. *Applied Optics*, 2016, vol. 55, no. 1, pp. 208–220. doi: 10.1364/AO.55.000208
42. Nelder J.A., Mead R. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal*, 1965, vol. 7, no. 4, pp. 308–313. doi: 10.1093/comjnl/7.4.308
43. D'yakonov V. *MATLAB 6: Training Course*. St. Petersburg, Piter Publ., 2001, 592 p. (in Russian)
44. Manoilov V.V., Zarutsky I.V. Outlier rejection and parameter estimation of mass spectrometric signals for high precision isotopic analysis. *Scientific Instrumentation*, 2002, vol. 12, no. 3, pp. 38–46. (in Russian)
45. Sizikov V. Use of an integral equation for solving special systems of linear-non-linear equations. In *Integral Methods in Science and Engineering*. Vol. 2. Approximation Methods. Eds. C. Constanda, J. Saranen, S. Seikkala. Harlow, Longman, 1997, pp. 200–205.
46. Krivykh A.V., Sizikov V.S. Discrete spectra processing by an integral approximation algorithm. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2011, no. 5, pp. 14–18. (in Russian)
47. Himmelblau D.M. *Applied Nonlinear Programming*. New York, McGraw-Hill, 1972, 416 p.
48. Rheinboldt W.C. *Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations*. 2<sup>nd</sup> ed. Rhiladelphia. SIAM, 1998, 148 p.
49. Kay S.M., Marple S.L. Spectrum analysis – a modern perspective. *Proceedings of the IEEE*, 1981, vol. 69, no. 11, pp. 1380–1420. doi: 10.1109/PROC.1981.12184
50. Peebles P.Z., Berkowitz R.S. Multiple-target monopulse radar processing techniques. *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*, 1968, vol. AES-4, no. 6, pp. 845–854. doi: 10.1109/TAES.1968.5409051
51. Falkovich S.E., Kononov L.N. Estimation for unknown numbers of signals. *Journal of Communications Technology and Electronics*, 1982, vol. 27, no. 1, pp. 92–97.
52. Golub G.H., Pereyra V. The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares whose variables separate. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1973, vol. 10, no. 2, pp. 413–432. doi: 10.1137/0710036
53. Mullen K.M., van Stokkum I.H.M. The variable projection algorithm in time-resolved spectroscopy, microscopy and mass spectrometry applications. *Numerical Algorithms*, 2009, vol. 51, no. 3, pp. 319–340. doi: 10.1007/s11075-008-9235-2
54. Hegland M. Error bounds for spectral enhancement which are based on variable Hilbert scale inequalities. *Journal of Integral Equations and Applications*. 2010, vol. 22, no. 2. pp. 285–312. doi: 10.1216/JIE-2010-22-2-285

### Авторы

**Сизиков Валерий Сергеевич** – доктор технических наук, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, Scopus ID: 6603236516, ORCID ID: 0000-0002-4618-8753, sizikov2000@mail.ru

**Лавров Алексей Валерьевич** – ст. преподаватель, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, Scopus ID: 57188714913, ORCID ID: 0000-0002-5315-8915, lavrov@corp.ifmo.ru

### Authors

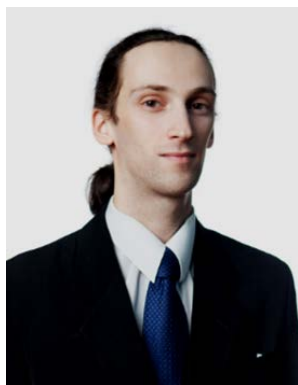
**Valery S. Sizikov** – D.Sc., Full Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, Scopus ID: 6603236516, ORCID ID: 0000-0002-4618-8753, sizikov2000@mail.ru

**Aleksei V. Lavrov** – Senior lecturer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, Scopus ID: 57188714913, ORCID ID: 0000-0002-5315-8915, lavrov@corp.ifmo.ru



**Валерий Сергеевич Сизиков** родился 21.10.1939 г. в Горно-Алтайске. В 1964 г. закончил Уральский (Свердловский) государственный университет, физический факультет по специальности физика, специализация астрофизика. В 1967 г. закончил аспирантуру Ленинградского государственного университета по специальности астрофизика и небесная механика. В 1970 г. защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по теме «Некоторые модели распределения масс в галактиках». В 1989 г. в Институте проблем моделирования в энергетике (Киев) защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора технических наук по теме «Обобщенный метод редукции измерений». С 1968 по 1992 г. работал научным сотрудником в ЦНИИ «Морфизприбор» по обработке сигналов. Преподавал в Лесотехнической академии, в Горном институте, в Политехническом университете, а с 1992 г. по настоящее время он профессор Университета ИТМО. Член Американского математического общества (AMS), референт журнала «Mathematical Reviews» (MR), член диссертационного совета ИТМО. Области научных интересов: математическая обработка спектров и изображений, томография (РКТ, МРТ, ИКТ), астрофизика, гидроакустика, гравиметрия, прикладная математика, интегральные уравнения, некорректные задачи и регулярные методы их решения. Автор 5 монографий, 5 учебников/уч. пособий, 5 свидетельств и более 150 статей.

**Valery S. Sizikov** was born on October 21, 1939 in Gorno-Altaysk. In 1964, he graduated from the Ural (Sverdlovsk) State University, Faculty of Physics, specialty "Physics", specialization "Astrophysics". In 1967, he completed postgraduate studies at Leningrad State University in the specialty "Astrophysics and celestial mechanics". In 1970, he defended his thesis for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences on the theme "Some models of mass distribution in galaxies". In 1989, at IPME (Kiev), he defended his thesis for the degree of Doctor of Technical Sciences on the topic "Generalized method of measurement reduction". From 1968 to 1992, he worked as scientific collaborator in the CRI "Morfizpribor" by signal processing. He taught at the Forestry Academy, at the Mining Institute, at the Polytechnic University, and from 1992 to the present he is Professor at ITMO University. He is a member of the American Mathematical Society (AMS), a referent of the journal "Mathematical Reviews" (MR), a member of the ITMO Dissertation Council. Areas of scientific interests: mathematical processing of spectra and images, tomography (CT, MRT, IRT), astrophysics, hydroacoustics, gravimetry, applied mathematics, integral equations, ill-posed problems and regular methods for their solution. He is the author of 5 monographs, 5 textbooks/manuals, 5 certificates and more than 150 articles.



**Алексей Валерьевич Лавров** родился 03.07.1986 г. в Ленинграде. В 2008 г. закончил естественнонаучный факультет Санкт-Петербургского национального исследовательского университета информационных технологий, механики и оптики (Университет ИТМО) по специальности «Профессиональное обучение», профиль «Информатика, вычислительная техника и компьютерные технологии». В настоящее время работает старшим преподавателем факультета Программной инженерии и компьютерной техники в Университете ИТМО. Преподает дисциплины «Математические основы проектирования баз данных», «Методы обработки экспериментальных данных», «Технологии визуального программирования», «Технологии захвата движений» и др. Область научных интересов включает в себя методы обработки спектров, математическое моделирование, информационные технологии в образовании, методы исследования человеко-компьютерного взаимодействия. Имеет более 40 научных публикаций.

**Aleksei V. Lavrov** was born on July 3, 1986 in Leningrad. In 2008, he graduated from Saint Petersburg State University of Information Technologies, Mechanics and Optics (Russia) with specialization "Professional Education". At present, he works as a Senior Lecturer at ITMO University. He teaches disciplines "Mathematical bases of designing databases", "Methods of processing experimental data", "Technologies of visual programming", "Motion capture technologies", etc. His scientific research interests cover methods of spectra processing, mathematical modeling, information technologies in education, research methods in human-computer interaction. He is the author and coauthor of more than 40 scientific publications.