

элементами, далее путем обработки пространственного спектра в системе МСИ-78 вычислялся УС. Условия эксперимента: число отсчетов при усреднении пространственного спектра по радиусу $\rho \in [\rho_1, \rho_2]$ 100; число отсчетов по углу $\beta \in [0, \pi]$ 100; $\rho_2/\rho_1 = 10$. Для сравнения с результатом когерентно-оптического эксперимента УС, полученный в вычислительном эксперименте, сглаживался по 7 угловым отсчетам.

Для определения коэффициента роста учтем, что теоретическая зависимость $\ln \bar{I}_\beta$ от угла β имеет вид периодической последовательности импульсов треугольной формы. Выполняя аппроксимацию экспериментальных графиков так, как показано на рис. 3, получаем

$$\varphi_{\text{ко}} \approx 82^\circ, \varphi_{\text{д}} \approx 72^\circ. \quad (11)$$

Разброс в значениях угла φ , по-видимому, соответствует известной неопределенности при интерпретации структуры исходного изображения рис. 1 как спиральной. Для сравнения укажем, что по [1] среднее значение параметра φ для спиральных галактик составляет $(73,4 \pm 6)^\circ$.

Отмеченные в работе особенности УС спиральных структур могут быть использованы также для поиска объектов с подобной структурой на изображениях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рольфе К. Лекции по теории волн плотности/Пер. с англ.— М.: Мир, 1980.
2. Бакрунов А. О., Сладков О. С., Шабанов М. Ф., Шукин И. В. Некоторые возможности применения когерентной оптики для обработки снимков, получаемых в первичном фокусе 6-метрового телескопа.— Астроном. циркуляр, 1981, № 1195, с. 1—3.
3. Сладков О. С., Шукин И. В. Возможности классификации биологических объектов по морфологическим признакам методами фурье-микроскопии и оптической обработки информации.— Автометрия, 1982, № 1, с. 69—75.
4. Бакрунов А. О., Шукин И. В. Исследование статистических свойств пространственных спектров точечных моделей структуры изображений.— В кн.: Обработка изображений и дистанционные исследования.— Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1981, с. 19—20.
5. Бакрунов А. О., Шукин И. В. Методы проверки статистических свойств псевдослучайных точечных изображений при испытании алгоритмов анализа структуры.— Автометрия, 1984, № 6, с. 53—57.

Поступило в редакцию 10 июля 1984 г.

УДК 681.3

С. П. ВЕСНОВСКИЙ, Б. П. САВАНИН, Г. М. ТРУБАЧЕВ

(Москва)

ОБОБЩЕННО-ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНАЯ КУСОЧНАЯ ФУНКЦИЯ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ОДИНОЧНЫХ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ПИКОВ

Одним из важнейших этапов организации автоматической обработки спектрометрической информации является выбор аналитической функции для аппроксимации одиночного экспериментального пика [1—5]. Наибольшую точность аппроксимации обеспечивает кусочная функция, составленная из функции Гаусса $y = a \exp\langle -(1/2)((x-b)/c)^2 \rangle$, простой $y = a \exp\langle (x-b)/c \rangle$ или двойной $y = a_0 \exp\langle a_1 \exp\langle (x-b)/c \rangle \rangle$ экспоненты; точки сшивки при этом произвольные [6]. Аналитическая запись кусочной функции существенно упрощается, если точки сшивки выбраны в точках перегиба гауссианов:

$$y = \begin{cases} a \exp\left\langle \frac{1}{2} - \left(\frac{b-x}{c_1}\right)^2 \right\rangle, & x \leq b - c_1; \\ a \exp\left\langle -\frac{1}{2} \left(\frac{b-x}{c_1}\right)^2 \right\rangle, & b - c_1 < x \leq b; \\ a \exp\left\langle -\frac{1}{2} \left(\frac{x-b}{c_2}\right)^2 \right\rangle, & b < x \leq b + c_2; \\ a \exp\left\langle \frac{1}{2} - \left(\frac{x-b}{c_2}\right)^2 \right\rangle, & b + c_2 < x \end{cases}$$

(рис. 1). Для пиков с затянутым левым хвостом («столиком») вместо простой целесообразно использовать двойную экспоненту

$$y = a_0 \exp\langle T \exp\langle (1-S)/T \rangle \rangle, \quad x \leq b - c_1,$$

где

$$S = (b-x)/c_1; \quad T = -\ln(a_0/a) - 1/2.$$

Работа с такими функциями обеспечивает высокую точность аппроксимации: отношение усредненного отклонения расчетных значений от экспериментальных к амплитуде пика составляет 1–2%. Вместе с тем графический анализ качества аппроксимации показывает, что ход экспериментальных точек в ряде случаев заметно отличается от экспоненциального или гауссового. В частности, хвосты пиков зачастую спадают быстрее, чем по экспоненциальному закону, хотя и медленнее, чем в случае закона Гаусса; иногда вершины пиков заметно острее, чем у гауссиана. В силу этого для описания пика целесообразно ввести обобщенно-экспоненциальную функцию с произвольным показателем скорости спада

$$y = a \exp\langle K_m + L_m((x-b)/c)^m \rangle.$$

При $m = 2$ эта функция переходит в гауссиан, при $m = 1$ — в обычную экспоненту. Коэффициенты K_m и L_m определяются из условий сшивки (см. ниже).

Аппроксимируемый пик разделяется на четыре области (см. рис. 1): 1) левый хвост $x \leq l$; 2) левый склон вершины $l < x \leq b$; 3) правый склон вершины $b < x \leq r$; 4) правый хвост $r < x$. Здесь $l = b - c_1$; $r = b + c_2$; b — положение вершины пика; c_i — параметры, задающие ширину пика: c_1 — слева, c_2 — справа от вершины. Каждая из четырех областей характеризуется собственным параметром m , который снабжается соответствующим индексом m_i , $i = 1, 4$. Коэффициенты K_m и L_m для вершины пика (области 2 и 3) выбираются так, чтобы перегиб функции имел место в точках с абсциссами $b - c_1$ и $b + c_2$; при этом на параметры m_2 и m_3 накладывается ограничение $m_2, m_3 > 1$. Для хвостов (области 1 и 4) коэффициенты K_m и L_m определяются из условия непрерывности функции и ее первой производной в точках сшивки $b - c_1$ и $b + c_2$; параметры m_1 и m_4 должны быть строго положительны; $m_1, m_4 > 0$. В точке $x = b$ непрерывность функции и ее первой производной соблюдается автоматически. В итоге аппроксимирующая функция имеет следующий окончательный вид:

$$y = \begin{cases} a \exp \left\langle (m_2 - 1) \left[\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} - \frac{1}{m_1} \left(\frac{b-x}{c_1} \right)^{m_1} \right] \right\rangle, & x \leq b - c_1; \\ a \exp \left\langle - \left(1 - \frac{1}{m_2} \right) \left(\frac{b-x}{c_1} \right)^{m_2} \right\rangle, & b - c_1 < x \leq b; \\ a \exp \left\langle - \left(1 - \frac{1}{m_3} \right) \left(\frac{x-b}{c_2} \right)^{m_3} \right\rangle, & b < x \leq b + c_2; \\ a \exp \left\langle (m_3 - 1) \left[\frac{1}{m_4} - \frac{1}{m_3} - \frac{1}{m_4} \left(\frac{x-b}{c_2} \right)^{m_4} \right] \right\rangle, & b + c_2 < x. \end{cases} \quad (1)$$

Для пиков с затянутым левым хвостом (например, α -пики) вместо одинарной вводится двойная обобщенная экспонента

$$y = a_0 \exp \langle a_1 \exp [K_m + L_m((x-b)/c)^m] \rangle.$$

С учетом условий сшивки аппроксимирующая функция при $x \leq b - c_1$ принимает вид

$$y = a_0 \exp \left\langle (m_2 - 1) T \exp \left(\frac{1 - S^{m_1}}{m_1 T} \right) \right\rangle. \quad (2)$$

Здесь

$$S = (b-x)/c_1; \quad T = -(1/(m_2 - 1)) \ln(a_0/a) - 1/m_2;$$

a_0 — высота столбика. Таким образом, одиночный пик описывается набором из восьми параметров $\theta = (a, b, c_1, c_2, m_1, m_2, m_3, m_4)$; для пиков с затянутым хвостом вводится девятый параметр a_0 .

Возможность функций (1) и (2) иллюстрируют рис. 1, 2. На рис. 1 показана серия пиков, правые хвосты которых рассчитаны по формуле (1) при следующих

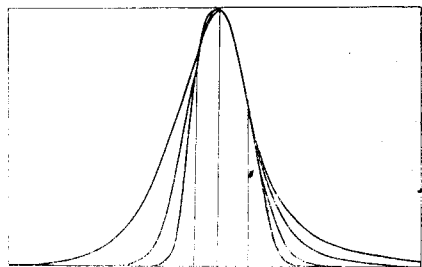


Рис. 1. Иллюстрация функции (1) — хвосты.

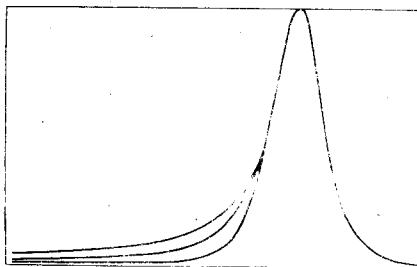


Рис. 2. Иллюстрация функции (2) — левый хвост.



Рис. 3. Аппроксимация одиночного пика хроматограмм функцией (1).

$m_2 = m_3 = 2$, $m_4 = 1$, $a_0 = 10$. Параметр m_1 пробегает три значения: $1/2$, 1 и 2 . Из рис. 2 следует, что вариацией m_1 достигается любая степень вогнутости на левом «хвосте» пика.

Аппроксимация экспериментальных пиков функциями (1) и (2) осуществлялась итерационным методом Ньютона — Гаусса с регулировкой шага [7]. Погрешность аппроксимации оценивалась с помощью величины

$$\delta = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \langle f(\theta, x_i) - y_i \rangle^2}{n}} 100\%,$$

где n — число экспериментальных точек; $f(\theta, x)$ — аппроксимирующая функция. На рис. 3 показаны результаты аппроксимации одиночного пика α -спектра; погрешность аппроксимации составляет $0,7\%$. Аналогичные результаты могут быть получены и при работе с экспериментальными пиками другой физической природы.

Таким образом, обобщенно-экспоненциальная функция значительно лучше функции Гаусса или простой экспоненциальной зависимости аппроксимирует одиночные спектрометрические пики как в области вершины, так и на «хвостах». Использование обобщенно-экспоненциальной функции позволяет снизить уровень погрешности аппроксимации до $0,3 \div 1\%$; при этом расчетная кривая хорошо воспроизводит закономерности хода экспериментальных точек.

ЛИТЕРАТУРА

1. Басова Б. Г. и др. Автоматическая обработка сложных альфа-спектров с использованием ЭВМ.— Радиохимия, 1979, т. 21, № 3, с. 430.
2. Розенблит А. Б. и др. Расчет площадей неразделенных хроматографических пиков на ЦВМ.— ЖАХ, 1973, т. 28, № 1, с. 22.
3. Гавриков И. А., Трубочев Г. М. Аппроксимация пика фотомасс-спектрограммы функцией Гипер — Гаусс.— Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики, 1981, вып. 2(8), с. 42.
4. Cuso E. e. a. Nonlinear fitting method for recorded chromatographic peaks.— J. Chromatography, 1974, v. 95, N 2, p. 147—157.
5. Ciftcioglu O. An analytic approximation to the peaks obtained from Ge(Li) and Si(Li) detectors used in gamma spectrum analysis.— Nucl. Instr. Meth., 1980, v. 174, N 1-2, p. 209.
6. Blok H. P., de Lange J. C., Schotman J. W. A new peak search method for an automatic spectrum program.— Nucl. Instr. Meth., 1975, v. 128, N 3, p. 545.
7. Пшеничный Б. Н., Данилин Ю. М. Численные методы в экстремальных задачах.— М.: Наука, 1975.

Поступило в редакцию 19 сентября 1983 г.