

АНАЛИЗ И СИНТЕЗ СИГНАЛОВ И ИЗОБРАЖЕНИЙ

УДК 53.088.7

ОТДЕЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ ОТ ШИРОКОПОЛОСНОГО ФОНА И ФИЛЬТРАЦИЯ ШУМА МЕТОДОМ МОДИФИЦИРОВАННОЙ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ТИХОНОВА

© И. А. Ларкин¹, А. В. Вагов², В. И. Корепанов¹

¹Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН,
142432, г. Черноголовка Московской обл., ул. Академика Осипьяна, 6

²Московский институт электроники и математики им. А. Н. Тихонова,
Национальный исследовательский университет

«Высшая школа экономики»,
123458, Москва, ул. Таллинская, 34
E-mail: korepanov@iptm.ru

Предложена методика обработки зашумлённых спектральных данных, позволяющая реализовать математически обоснованную селекцию острых пиков сигнала на неизвестном гладком фоне, для которого отсутствует достоверная теоретическая модель. Основная идея методики состоит в построении оптимизирующего функционала, дающего наиболее вероятные параметры спектральных линий. В отличие от метода регуляризации Тихонова, где из зашумлённого сигнала выделяется гладкая неизвестная функция, в нашем случае рассматривается задача регуляризации суперпозиции гладкой функции фона с острыми пиками. Предлагаемый подход даёт алгоритм обработки экспериментальных данных, позволяющий отфильтровывать случайный шум и определять как параметры пиков, так и функцию фона с хорошей точностью. Нахождение оптимальных параметров регуляризации основано на априорных предположениях о гладкости функции фона и статистических свойствах случайного шума.

Ключевые слова: комбинационное рассеяние, регуляризация Тихонова, обработка данных.

DOI: 10.15372/AUT20230612

EDN: FLGBYJ

Введение. Одной из основных задач обработки сигналов является разделение узких и широких спектральных структур или пиков в ситуации сильного зашумления [1–3]. Эта проблема имеет особое значение в спектроскопии комбинационного рассеяния (КР), где относительно узкие спектральные колебательные полосы могут накладываться на интенсивный широкий флуоресцентный фон с шумом [4–6]. Среди современных подходов к выделению таких широких спектральных структур (базовой линии) можно отметить морфологические алгоритмы [5, 7], методы на основе вейвлетов [1, 8] и ряд вариантов регуляризации Тихонова (так называемый асимметричный метод наименьших квадратов) [3, 9–11]. Эти методы используют тот факт, что базовая линия является фоном, а полезный сигнал строго положителен и добавляется к базовой линии. Отметим ещё простой алгоритм, использованный в [12], где базовая линия находилась в виде многочлена пятой степени, который строился так, чтобы все экспериментальные точки лежали строго выше базовой линии, но суммарное отклонение экспериментальных данных от базовой линии было минимальным.

Цель предлагаемой работы состоит в обобщении метода регуляризации Тихонова, которое позволяет находить не только базовую линию, но и параметры спектральных пиков μ_i . Для ясности изложения в работе рассмотрен только простой случай, когда регуляризация Тихонова зависит от одного параметра Λ , и предложено математическое обоснование выбора этого параметра. Такой подход [13] позволяет избежать использования асимметричных весовых функций для поиска параметров пиков методом наименьших квадратов:

$$T[y(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} \{\Lambda[y''(x)]^2 + [y(x) + F(x, \boldsymbol{\mu}) - f(x)]^2\} dx, \quad (1)$$

где $f(x)$ — исходный (экспериментальный) спектр, содержащий шум; $y(x)$ — базовая линия (широкая спектральная структура); $F(x, \boldsymbol{\mu})$ — аналитическая функция, описывающая спектральные пики, которые определяются вектором параметров $\boldsymbol{\mu}$; Λ — параметр сглаживания (называемый также штрафом за вторую производную). При $\Lambda = 0$ и $y(x) = 0$ задача минимизации (1) сводится к поиску параметров функции $F(x, \boldsymbol{\mu})$ методом наименьших квадратов по зашумлённым экспериментальным данным.

Ключевой проблемой использования регуляризации Тихонова для определения базовой линии является выбор параметра регуляризации Λ , управляющего гладкостью базовой линии. Выбор Λ в текущих реализациях содержит определённую степень произвольности и часто выбирается визуально, чтобы базовая линия находилась в некотором балансе между «слишком плоской» и «слишком гибкой» [14, 15].

Для определения минимума интеграла (1) найдём его вариацию по $y(x)$ и по каждой компоненте μ_i вектора параметров $\boldsymbol{\mu}$ функции $F(x, \boldsymbol{\mu})$. В результате получаем систему уравнений, содержащую линейное дифференциальное уравнение для $y(x)$

$$\Lambda y^{(4)}(x) + y(x) + F(x, \boldsymbol{\mu}) - f(x) = 0 \quad (2)$$

и систему нелинейных уравнений

$$\int_{-\infty}^{\infty} (y(x) + F(x, \boldsymbol{\mu}) - f(x)) \frac{\partial F(x, \boldsymbol{\mu})}{\partial \mu_i} dx = 0. \quad (3)$$

В данной работе предложен подход к решению этих уравнений, который позволяет избежать асимметрии (взвешивания), а регуляризация Тихонова управляется одним параметром Λ . В представленном подходе даётся математическое обоснование выбора такого параметра регуляризации.

Систематические и случайные отклонения. Пусть точный спектр системы (без шума) $f_0(x)$ состоит из пиков известной формы $F(x, \boldsymbol{\mu}_0)$, и базовой функции $y_0(x)$, так что $F(x, \boldsymbol{\mu}_0) + y_0(x) = f_0(x)$. Отклонение $\delta f(x) = f(x) - f_0(x)$ описывает случайный шум, приводящий к отклонениям $\delta \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}_0$ и $\delta y(x) = y(x) - y_0(x)$ в параметрах пиков и базовой функции соответственно. Если эти отклонения малы, то можно найти решения уравнений минимизации, пользуясь теорией возмущений. Для данной реализации случайного шума $\delta f(x)$ и малого отклонения $\delta \boldsymbol{\mu}$ уравнения (3) и (2) дают соответственно

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\delta y(x) + (F(x, \boldsymbol{\mu}) - F(x, \boldsymbol{\mu}_0)) - \delta f(x)) \frac{\partial F(x, \boldsymbol{\mu})}{\partial \mu_i} dx = 0 \quad (4)$$

и

$$\Lambda(\delta y^{(4)}(x) + y_0^{(4)}(x)) + \delta y(x) + \nabla_{\mu} F(x, \boldsymbol{\mu}) \cdot \delta \boldsymbol{\mu} - \delta f(x) = 0, \quad (5)$$

где была использована малость отклонения $\delta \boldsymbol{\mu}$. Применяя теорему Парсеваля для уравнения (4) и преобразование Фурье $x \leftrightarrow k$ к уравнению (5), будем иметь

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\delta y(k) + \nabla_{\mu} F(k, \boldsymbol{\mu}) \cdot \delta \boldsymbol{\mu} - \delta f(k)) \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu})}{\partial \mu_i} dk = 0, \quad (6)$$

$$\Lambda k^4 (\delta y(k) + y_0(x)) + \delta y(k) + \nabla_{\mu} F(k, \boldsymbol{\mu}) \cdot \delta \boldsymbol{\mu} - \delta f(k) = 0. \quad (7)$$

Решая уравнение (7), получаем

$$\delta y(k) = \frac{-\nabla_{\mu} F(k, \boldsymbol{\mu}) \cdot \delta \boldsymbol{\mu} + \delta f(k) - \Lambda k^4 y_0(x)}{\Lambda k^4 + 1}. \quad (8)$$

Затем, подставляя результат (8) в уравнение (6), имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4}{\Lambda k^4 + 1} \left(\sum_j \frac{\partial F(k, \boldsymbol{\mu})}{\partial \mu_j} \delta \mu_j - \delta f(k) - y_0(k) \right) \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu})}{\partial \mu_i} dk = 0. \quad (9)$$

Решение системы уравнений (9) представляется в виде

$$\delta \mu_j = (\alpha^{-1})_{ij} (\beta_i + \delta \beta_i), \quad (10)$$

где

$$\alpha_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_j} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_i} dk, \quad (11)$$

$$\beta_i = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4 y_0(k)}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_i} dk, \quad (12)$$

$$\delta \beta_i = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4 \delta f(k)}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_i} dk. \quad (13)$$

Предполагается, что шум $\delta f(x)$ — случайная, некоррелированная в разных точках пространства функция с нулевым средним $\langle \delta f(x) \rangle = 0$. Это предположение позволяет вычислить статистическое среднее для отклонения параметров пика в зависимости от (малого) шума как $\langle \delta \mu_j \rangle = (\alpha^{-1})_{ij} \beta_i$. Заметим, что в реальных измерениях спектральная переменная $x = x_n$ является дискретной, где n — целочисленный индекс. Для большого количества точек спектра случайный вектор параметров $\boldsymbol{\mu}$ имеет многомерное распределение Гаусса с центром тяжести $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \boldsymbol{\mu}_0 + \hat{\alpha}^{-1} \boldsymbol{\beta}$, где $\hat{\alpha}$ — матрица с компонентами (11), а $\boldsymbol{\beta}$ — вектор

с компонентами (12). Ковариационная функция отклонения от среднего получается при использовании уравнения (13) как $\varkappa_{ij} = \langle (\mu_i - \langle \mu_i \rangle)(\mu_j - \langle \mu_j \rangle) \rangle = \langle (\hat{\alpha}^{-1} \cdot \delta \boldsymbol{\beta})_i (\hat{\alpha}^{-1} \cdot \delta \boldsymbol{\beta})_j \rangle$. Для вычисления компонент матрицы $\hat{\varkappa}$ в явном виде используем тот факт, что $\delta f(x)$ в разных точках $x = n$ является некоррелированной, т. е. $\langle \delta f(n) \delta f(n') \rangle = \langle \delta f^2 \rangle \delta_{nn'}$, где δ_{ml} — дельта-символ Кронекера. Предполагается, что плотность точек спектра достаточна, чтобы описать функцию узких пиков $F(x, \boldsymbol{\mu})$ и, следовательно, $\delta \beta_i$ с разумной точностью. Тогда мы можем переписать фурье-образ шума в (13) в виде суммы

$$\delta \beta_i^{int} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta f(n) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4 e^{-ikn}}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_i} dk, \quad (14)$$

а

$$\begin{aligned} \varkappa_{ij} &= (\hat{\alpha}^{-1})_{il} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta f(n) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4 e^{-ikn}}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_l} dk \right) \times \\ &\times (\hat{\alpha}^{-1})_{jm} \left(\sum_{n'=-\infty}^{\infty} \delta f(n') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4 e^{ikn'}}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_m} dk \right) = \langle \delta f^2 \rangle (\hat{\alpha}^{-1})_{il} \gamma_{lm} (\hat{\alpha}^{-1})_{jm}, \end{aligned} \quad (15)$$

где мы также подразумеваем суммирование по совпадающим индексам и определяем γ_{lm} :

$$\gamma_{lm} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\Lambda k^4}{\Lambda k^4 + 1} \right)^2 \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_l} \frac{\partial F(k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_m} dk. \quad (16)$$

В матричных обозначениях ковариационная функция записывается как $\hat{\varkappa} = \hat{\alpha}^{-1} \hat{\gamma} (\hat{\alpha}^{-1})^\top$. Это даёт функцию распределения вероятностей $P(\boldsymbol{\mu})$ через матрицу $\hat{\varkappa}$ [16]:

$$P(\boldsymbol{\mu}) = (2\pi)^{-N_t/2} (\det [\varkappa])^{-1/2} e^{-(\boldsymbol{\mu} - \langle \boldsymbol{\mu} \rangle)^\top \hat{\varkappa}^{-1} (\boldsymbol{\mu} - \langle \boldsymbol{\mu} \rangle) / 2}, \quad (17)$$

где N_t — общее количество параметров пиков или размерность вектора $\boldsymbol{\mu}$.

Чтобы проиллюстрировать работу алгоритма нахождения параметров, выберем лоренциан $F(x, \boldsymbol{\mu}) = 2\mu_1 \mu_2 / (\pi(\mu_1^2 + 4x^2))$ для описания спектрального пика, задаваемого полушириной $\mu_1 = \mu_{10}$ и амплитудой $\mu_2 = \mu_{20}$. Пик находится на фоне гладкой базовой линии. Кроме того, к этому сигналу добавлен некоррелированный случайный шум с гауссовым распределением. Используя этот сигнал в качестве $f(x)$, найдём оценку для значений μ_1 и μ_2 путём минимизации функционала (1).

На рис. 1 точками показаны значения μ_1 и μ_2 , полученные для различных реализаций случайного шума с постоянной среднеквадратичной амплитудой после минимизации функционала (1) с различными значениями веса Λ регуляризатора Тихонова. Результаты такого моделирования показывают, что рост Λ уменьшает дисперсии оценки для μ_1 и μ_2 , а отклонение μ_{10} , μ_{20} от точных значений этих параметров увеличивается с ростом Λ . Расчёты по формулам теории возмущений (13) и (15) также подтверждают эту тенденцию. На рис. 2 показано среднеквадратичное отклонение нормированных величин параметров $\boldsymbol{\mu}_1 = \mu_1/\mu_{10}$ и $\boldsymbol{\mu}_2 = \mu_2/\mu_{20}$ в зависимости от Λ .

Заметим, что при малом Λ основной вклад в отклонение полученных оценок μ_1 и μ_2 от их точных значений вносит случайный разброс со среднеквадратичными отклонениями

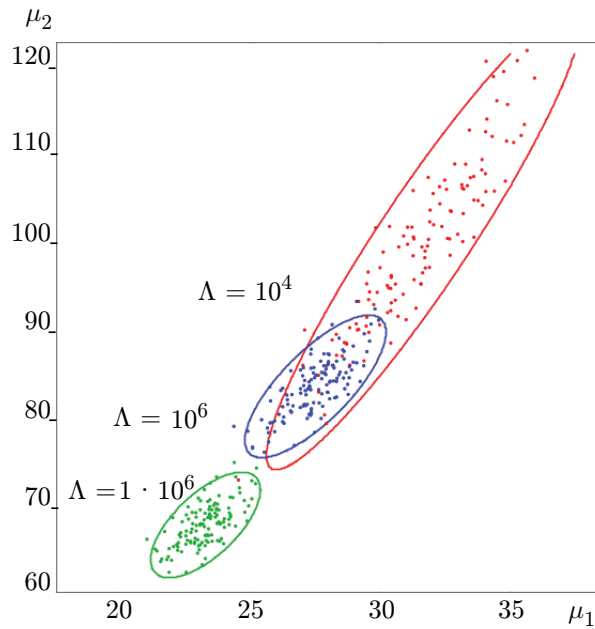


Рис. 1. Результат минимизации функционала (1) для $\Lambda = 10^4$, $\Lambda = 10^6$ и $\Lambda = 5 \cdot 10^6$. Точки соответствуют моделированию 128 различных реализаций шума $\delta f(n)$. В качестве эталонных параметров выбрано $\mu_{10} = 32$ и $\mu_{20} = 32\pi$. Размер эллипса соответствует области достоверности 95 %

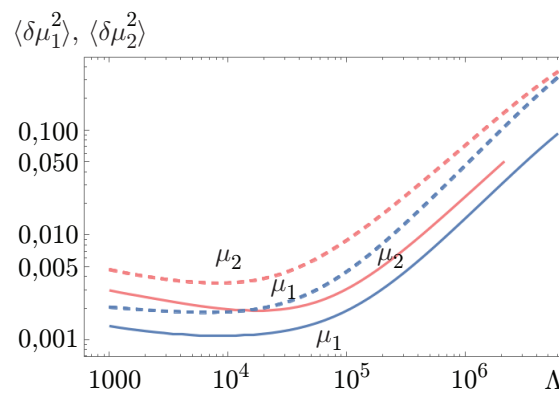


Рис. 2. Дисперсии μ_1 и μ_2 в зависимости от Λ . Сплошные кривые показывают результат, рассчитанный на основе численного моделирования 128 случайных реализаций, пунктирные кривые рассчитаны с использованием уравнений теории возмущений (12) и (15) как $(\alpha_{ij}^{-1}\beta_j)^2 + \varkappa_{ii}^{-1}$

σ_1, σ_2 . Однако с ростом Λ главный вклад в отклонение происходит из-за среднего смещения оценки $\langle \mu_1, \mu_2 \rangle$. Пользуясь результатами теории возмущений, можно оценить это смещение с помощью формул (12) и (15) как $(\alpha_{ij}^{-1} \beta_j)^2 + \varkappa_{ii}^{-1}$. Сравнение результатов численного моделирования и теории возмущений показано на рис. 2.

Коррекция с одной итерацией. На рис. 1 видно, что основная погрешность при большом Λ приходится на систематическую ошибку смещения $\langle \delta \boldsymbol{\mu} \rangle = \hat{\alpha}^{-1} \boldsymbol{\beta}$. Её можно учесть, чтобы получить более точную оценку для μ_1, μ_2 . Однако вычисление смещения согласно (12) и (11) требует знания базовой функции $y_0(x)$, а она *a priori* неизвестна. Минимизация функционала (1) даёт её оценку $y(x) = y_0(x) + \delta y(x)$, которую можно использовать для вычисления смещения в уравнении (12). При более точных расчётах нужно учитывать уравнение (8), которое примет вид

$$y_0(k) = y(k) - \frac{-\nabla_{\boldsymbol{\mu}} F(k, \boldsymbol{\mu}) \delta \boldsymbol{\mu} + \delta f(k) - \Lambda k^4 y_0(k)}{\Lambda k^4 + 1}, \quad (18)$$

и вытекающие из него поправки. При небольших значениях Λ можно считать, что $\Lambda k^4 y_0(k) \ll \nabla_{\boldsymbol{\mu}} F(k, \boldsymbol{\mu}) \delta \boldsymbol{\mu}$, и пренебречь y_0 в правой части уравнения (18). Тогда уравнение (12) сводится к виду

$$\beta_i^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\Lambda k^4 y(k)}{\Lambda k^4 + 1} + \frac{\Lambda k^4 \nabla_{\boldsymbol{\mu}} F(k, \boldsymbol{\mu})}{(\Lambda k^4 + 1)^2} \right) \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_1)}{\partial \mu_i} dk, \quad (19)$$

где временно пренебрегается $\delta f(k)$. Используя уравнение $\hat{\alpha} \langle \delta \boldsymbol{\mu} \rangle = \boldsymbol{\beta} \approx \boldsymbol{\beta}^{(1)}$, перенесём второй член в скобках уравнения (19) в правую сторону и получим

$$\alpha_{ij}^{(1)} \langle \delta \mu_j \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4 y(k)}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_1)}{\partial \mu_i} dk, \quad (20)$$

$$\alpha_{ij}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\Lambda k^4}{\Lambda k^4 + 1} \right)^2 \frac{\partial F(k, \boldsymbol{\mu}_1)}{\partial \mu_j} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_1)}{\partial \mu_i} dk. \quad (21)$$

Таким образом, получение оценки для $\boldsymbol{\mu}$ выполняется в два шага: сначала путём минимизации функционала (1) вычисляем $\boldsymbol{\mu}^{(1)}$, а затем получаем скорректированное значение $\boldsymbol{\mu}^{(2)}$, используя

$$\mu_j^{(2)} = \mu_j^{(1)} - \frac{1}{\alpha_{ij}^{(1)}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda k^4 y(k)}{\Lambda k^4 + 1} \frac{\partial F(-k, \boldsymbol{\mu}_0)}{\partial \mu_i} dk. \quad (22)$$

На рис. 3 показан результат расчёта оценки параметров μ_1 и μ_2 для различных реализаций случайного шума. Результат первого шага ($\mu_j^{(1)}$ после минимизации функционала (1) с различными Λ) показан точками слева внизу графика, окружёнными непрерывными эллипсами. После второго шага (применения сдвига (22)) $\mu_j^{(2)}$ дают точки, сдвинутые вправо и вверх, окружённые пунктирными эллипсами, обозначающими тот же интервал достоверности. После коррекции оценка обоих параметров μ_j оказывается близкой к правильным значениям μ_{j0} . Дисперсия разбросов оценки увеличивается, но незначительно.

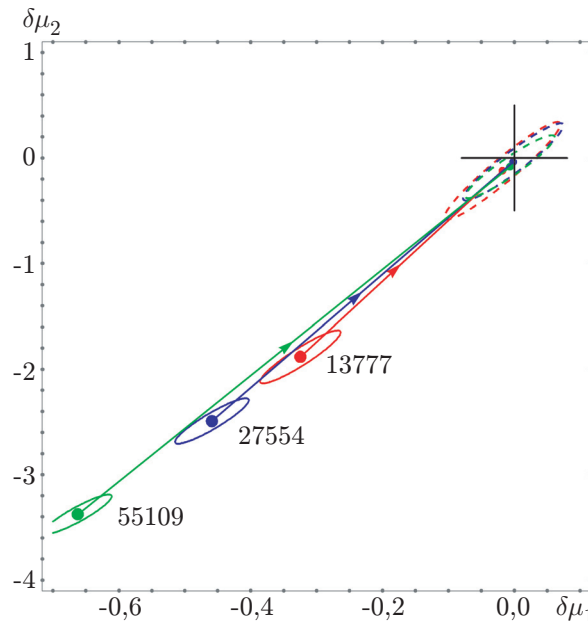


Рис. 3. Расчёт коррекции оценки μ_1 и μ_2 для трёх значений параметра регуляризации Λ . Цифры около сплошных эллипсов показывают величину Λ , линии со стрелками обозначают направление коррекции, точки в центре пунктирных эллипсов — оценку после коррекции. Размеры эллипсов вокруг точек соответствуют областям достоверности 95 %

Вычислительная процедура. В задачах спектроскопии $F(x, \boldsymbol{\mu})$ представляет собой суперпозицию пиков $L_j(x)$:

$$F(x, \boldsymbol{\mu}) = \sum_{j=1}^{N_{peaks}+2} \mu_j L_j(x, \mu_{jp}), \quad (23)$$

где N_{peaks} — число пиков. Кроме того, была добавлена к $F(x, \boldsymbol{\mu})$ линейная функция с $L_1 = 1$ и $L_2 = x$, чтобы обеспечить условие $y(x) = 0$ на концах интервала (это условие упрощает минимизацию). Пики характеризуются набором параметров μ_j и μ_{jp} . Замена (3) выражением (23) уменьшает число нелинейных уравнений и даёт набор $N_{peaks}+2$ линейных уравнений для амплитуд μ_j :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(y(x) + \sum_{j=1}^{N_{peaks}+2} \mu_j L_j(x, \mu_{jp}) - f(x) \right) L_j(x, \mu_{jp}) dx = 0. \quad (24)$$

Алгоритм минимизации функционала (1) теперь упрощается до нахождения глобального минимума по внутренним параметрам μ_{jp} при условиях (2) и (24).

Для вычисления поправок по формулам (21) и (22) вместо $\Lambda k^4 / (\Lambda k^4 + 1)$ в k пространстве используется линейный оператор $(\Lambda \Delta^{(4)} + \hat{1})^{-1} (\Lambda \Delta^{(4)})$, действующий в дискретном пространстве, когда x берётся в целочисленных точках n , $\hat{1}$ — единичная матрица, а $\Delta^{(4)}$ — дискретный аналог четвёртой производной — ленточная матрица с компонентами $\{1, -4, 6, -4, 1\}$ вокруг главной диагонали.

Заключение. Подход, описанный в данной работе, позволяет определить параметры острых спектральных пиков на априорно неизвестном широкополосном фоне — гладкой базовой спектральной зависимости. Он основан на модифицированном методе регуляризации Тихонова и позволяет найти базовую линию и параметры спектроскопических пиков одновременно. Главная идея состоит в построении оптимизирующего функционала, дающего наиболее вероятные параметры спектральных пиков. Предложенная методика даёт математически обоснованный алгоритм обработки экспериментальных данных, позволяющий отфильтровать случайный шум. Построение оптимальных параметров регуляризации базируется на априорных предположениях о гладкости главной функции и статистических свойствах случайного шума.

Основное отличие предложенного подхода от метода Тихонова, выделяющего из зашумлённого сигнала гладкую неизвестную функцию с ограниченной второй производной, состоит в искусственном выделении с помощью теоретической модели сигнала с острыми пиками, который имеет большую вторую производную, причём амплитуда пиков может быть как положительной, так и отрицательной. При стандартной реализации метода Тихонова такой сигнал был бы отфильтрован вместе со случайным шумом.

Для уточнения оценки параметров пиков предложен метод одноитерационной коррекции, который существенно уменьшает систематическую ошибку однократной регуляризации. Однократное применение минимизации функционала (1) приводит к заметной систематической ошибке параметров спектра сигнала, поскольку часть амплитуды сигнала при минимизации поглощается базовой функцией. Тем не менее в случае априорного предположения о гладкости базовой функции метод позволяет реализовать коррекцию параметров с помощью одной итерации. Метод также позволяет определить область достоверности и вероятностное распределение искомым параметров. Для предложенного подхода разработан алгоритм с программным кодом на языке Python, доступный на портале GitHub [17].

Финансирование. Работа выполнена при поддержке государственного задания № 075-01304-23-00 и Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schmidt M. N., Alstrom T. S., Svendstorp M., Larsen J. Peak detection and baseline correction using a convolutional neural network // Proc. of the ICASSP, IEEE Int. Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing — Proceedings, Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc. Brighton, UK, 12–17 May, 2019. P. 2757–2761. DOI: 10.1109/ICASSP.2019.8682311.
2. Li H., Wang R., Cao S. et al. A method for low-frequency noise suppression based on mathematical morphology in microseismic monitoring // Geophysics. 2016. **81**, N 3. P. V159–V167. DOI: 10.1190/geo2015-0222.1.
3. Oller-Moreno S., Pardo A., Jimenez-Soto J. M. et al. Adaptive asymmetric least squares baseline estimation for analytical instruments // Proc. of the IEEE 11th Int. Multi-Conference on Systems, Signals and Devices, SSD 2014, IEEE Computer Society. Barselona, Spain, 11–14 Febr., 2014. DOI: 10.1109/SSD.2014.6808837.
4. Guo S., Bocklitz T., Popp J. Optimization of Raman-spectrum baseline correction in biological application // Analyst. 2016. **141**, N 8. P. 2396–2404. DOI: 10.1039/C6AN00041J.
5. Koch M., Suhr C., Roth B., Meinhardt-Wollweber M. Iterative morphological and mollifier-based baseline correction for Raman spectra // Journ. Raman Spectroscopy. 2017. **48**, N 2. P. 336–342. DOI: 10.1002/jrs.5010.
6. He S., Fang S., Liu X. et al Investigation of a genetic algorithm based cubic spline smoothing for baseline correction of Raman spectra // Chemometrics and Intell. Lab. Syst. 2016. **152**. P. 1–9. DOI: 10.1016/j.chemolab.2016.01.005.

7. **González-Vidal J. J., Pérez-Pueyo R., Soneira M. J.** Automatic morphology-based cubic p-spline fitting methodology for smoothing and baseline-removal of Raman spectra // Journ. Raman Spectrosc. 2017. **48**, N 6. P. 878–883. DOI: 10.1002/jrs.5130.
8. **René de Cotret L. P., Siwick B. J.** A general method for baseline-removal in ultrafast electron powder diffraction data using the dual-tree complex wavelet transform // Struct. Dynamics. 2017. **4**, N 4. P. 044004. DOI: 10.1063/1.4972518.
9. **Eilers P. H. C.** A perfect smoother // Anal. Chem. 2003. **75**, N 14. P. 3631–3636. DOI: 10.1021/ac034173t.
10. **Eilers P., Boelen H.** Baseline correction with asymmetric least squares smoothing // Leiden University Medical Centre Report. 2005. **1**, Iss. 1. P. 5.
11. **Korepanov V. I.** Baseline search in Raman spectroscopy by modified Tikhonov regularization with automatic choice of both parameters // Journ. Phys. Chem. B. 2023. **127**, N 5. P. 1287–1290. DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c08870.
12. **Larkin I., Vagov A.** Spectrum and tunneling in self-assembled quantum dots // Phys. Rev. B. 2003. **67**, N 11. P. 115318. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.115318.
13. **Тихонов А. Н.** О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации // ДАН: Математика. 1963. **151**, № 3. С. 501–504.
14. **Zhang Z.-M., Chen S., Liang Y.-Z.** Baseline correction using adaptive iteratively reweighted penalized least squares // Analyst. 2010. **135**, N 5. P. 1138. DOI: 10.1039/b922045c.
15. **Gu C.** Smoothing noisy data via regularization: Statistical perspectives // Inverse Problems. 2008. **24**, N 3. P. 034002. DOI: 10.1088/0266-5611/24/3/034002.
16. **Krzanowski W. J.** Principles of multivariate analysis: A user's perspective // Oxford statistical science series. Oxford: Clarendon Press, 1988. 608 p.
17. **Larkin I. A., Korepanov V.** Modified Tikhonov regularization: Multippeak fit algorithm. URL: https://github.com/the-different-name/multippeak_fit_with_baseline (дата обращения: 15.07.2023).

Поступила в редакцию 15.07.2023

После доработки 05.09.2023

Принята к публикации 10.08.2023
