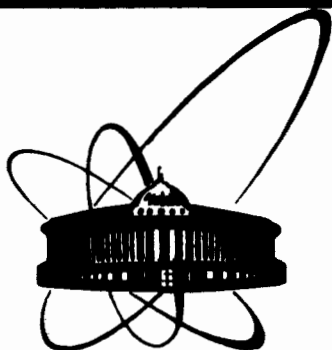


83-345



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

10-83-345

В.Б.Злоказов

У 222 / 83

МЕТОД АВТОМАТИЧЕСКОГО ПОИСКА
ДВУМЕРНЫХ ПИКОВ
В НЕЙТРОННО-ДИФРАКЦИОННЫХ СПЕКТРАХ

Направлено в журнал
"Nuclear Instruments and Methods"

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

Формально задача заключается в следующем. В результате проведения сеанса измерения получается двумерный спектр $s(t, a)$, где аргументы t - время пролета, a - угол регистрации. Обозначим эти аргументы как дискретные переменные i и j . Тогда имеем

$$s(i, j) = \sum_{k=1}^n p_k(i, j, \bar{q}_k) + b(i, j) + e(i, j), \quad /1.1/$$

где $p_k(i, j, \bar{q}_k)$ - двумерный пик - поверхность, определенная в плоскости (i, j) и зависящая от параметров \bar{q}_k , $b(i, j)$ - двумерный фон, $e(i, j)$ - двумерная ошибка измерения.

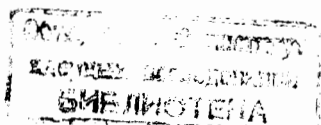
Если представление /1.1/ задано, тогда задача анализа спектра $s(i, j)$ состоит в определении параметров \bar{q}_k . Если используется параметризация, описанная в работе /1/, тогда эти параметры имеют ясный физический смысл: объем пика, т.е. сумма всех отсчетов, относящихся к данному пику; положения и полуширины по i - и j -координатам. Эти параметры могут быть оценены с помощью метода наименьших квадратов, например по программе DOMUS /1/. Однако большой объем спектрометрической информации, получаемой в дифракционных экспериментах, и существенно меньшая наглядность, чем в случае одномерных спектров, требуют создания полностью автоматизированной процедуры анализа таких спектров и, в частности, создания методов поиска двумерных пиков и построения интервалов для м.н.к.-анализа.

2. СГЛАЖИВАНИЕ ДВУМЕРНОГО СПЕКТРА

Первый этап поиска - это сглаживание всего спектра или выделенной его части. Сглаживание необходимо для подавления искажающего влияния помехи $e(i, j)$. Как и в одномерном случае, не годятся линейные фильтры с постоянными коэффициентами, поскольку они подавляют не только помеху, но и слабые пики. Поэтому был обобщен на двумерный случай подход, описанный в работе /2/.

Пусть $s(i, j)$ - исходный спектр. Тогда сглаженный спектр $t(i, j)$ получается из $s(i, j)$ минимизацией следующего выражения:

$$\sum_{i,j} W_{ij} \{ \Delta_i t(i, j) \}^2 + \sum_{i,j} W_{ij} \{ \Delta_j t(i, j) \}^2 + \frac{\lambda}{R} \sum_{i,j} \{ t(i, j) - s(i, j) \}^2. \quad /2.1/$$



Здесь

$$W_{ij} = 1/(1 + (s(i+1,j) - s(i-1,j))^2 + (s(i,j+1) - s(i,j-1))^2);$$

$$\Delta_i t(i,j) = t(i+1,j) - 2t(i,j) + t(i-1,j); \Delta_j t(i,j) = t(i,j+1) - 2t(i,j) + t(i,j-1);$$

λ - множитель Лагранжа, $R = 1/\sum_{i,j} W_{ij}$.

Смысл выражения /2.1/ состоит в следующем. Первые 2 члена определяют меру осцилляций дискретной гистограммы $t(i,j)$, эта мера прямо пропорциональна 2-й производной /разности/ по каждой координате и обратно пропорциональна площади элементарной поверхности. 3-й член в /2.1/ обеспечивает близость полученного выражения $t(i,j)$ к исходному $s(i,j)$. Множитель λ регулирует степень сглаживания и степень близости к исходному выражению. Качественно минимизация /2.1/ соответствует такому требованию: построить поверхность $t(i,j)$, которая была бы близка к грубому контуру исходной поверхности $s(i,j)$ и в то же время имела бы минимальную меру осцилляций. Фильтр /2.1/ подавляет очень эффективно помеху $e(i,j)$. При этом благодаря нормировке λ на глобальный фактор R не происходит подавления слабых пиков. Далее, благодаря этой же нормировке член $W_{ij} R$ почти не зависит от амплитуды спектров, и поэтому оптимальное значение λ для сглаживания может быть найдено с помощью следующего теста: это то значение, которое, обеспечивая хорошее качество сглаживания, не подавляет слабые /ниже определенной уровня/ пики.

Численная реализация фильтра /2.1/ может быть осуществлена с помощью алгоритма, описанного в /2/. Она требует большой памяти /в двумерном случае/. Поэтому целесообразнее использовать локальный фильтр. Его шаги следующие:

1/ рассчитывается глобальный фактор R ;

2/ при заданном λ выражение /2.1/ составляется последовательно для каждой 9 точек: $\{i = i_0 - 1, i_0, i_0 + 1; j = j_0 - 1, j_0, j_0 + 1\}$ и находится сглаженное значение во внутренней точке.

3. ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВЕРШИН

Обычно в качестве идентификаторов вершин при поиске пиков берут либо 2-ю производную, либо функцию корреляции /3,4/. Однако эффективность этих идентификаторов невелика из-за того, что большие значения, по которым идет опознавание вершин, они принимают не только в самих вершинах, но и в довольно большой их окрестности. Кроме того, они зависят от амплитуды пиков.

Поэтому в качестве идентификатора целесообразно выбрать описанную в работе /5/ квазикривизну

$$quac(i) = s''(i) / \sqrt{1 + s'(i)^2}; \quad /3.1/$$

здесь $s(i)$ - спектр, $s'(i)$ и $s''(i)$ - его 1-я и 2-я разности. Как идентификатор вершин выражение /3.1/ имеет следующие свойства:

а/ $quac(i)$ принимает большое отрицательное значение в вершине пика и почти равна нулю уже на небольшом расстоянии от нее;

б/ $quac(i)$ почти не зависит от амплитуды пика и линейной составляющей фона; поэтому слабые пики с ее помощью можно идентифицировать так же уверенно, как и сильные.

На двумерный случай /3.1/ может быть обобщено, например, так:

$$quac(i,j) = (d_{ii}^2 + d_{jj}^2) / (1 + s_i'^2 + s_j'^2), \quad /3.2/$$

где $d_{ii} = \min(0, s_{ii}'')$, $d_{jj} = \min(0, s_{jj}'')$, s_{ii}'' , s_{jj}'' - вторые разности по i и j , s_i' , s_j' - первые разности по i и j соответственно.

Обычная геометрическая кривизна является существенно менее устойчивым идентификатором вершин из-за зависимости от амплитуды.

Имея такой эффективный идентификатор вершин, как квазикривизна /например, в форме /3.2//, мы можем начать пробную идентификацию.

Для идентификации пика в вершине $\{i,j\}$ необходимо выполнение следующих условий:

1/ $quac(i,j) > const$, где $const$ определена по тестам;

2/ $s(i,j) - b(i,j) > sens$ как в вершине пика, так и в ближайшей окрестности вершины;

3/ $s(i,j) \geq s(i \pm 1, j \pm 1)$, при этом равенство допустимо лишь для части аргументов $\{i \pm 1, j \pm 1\}$.

Здесь величина $b(i,j)$ - фон в точке $\{i,j\}$, определяемый так:

$$b(i,j) = \min_{i,j \in \Gamma} \{s(i,j)\},$$

где Γ - контур, отстоящий от вершины пика на расстояние, равное полуширинам.

Величина $sens$ - чувствительность поиска; определяется так:

$$sens = k \sqrt{s(i,j) + b(i,j)},$$

где k - коэффициент, равный числу среднеквадратических отклонений /обычно $k = 1, 2$ или 3 /.

Далее производится слияние слишком близких вершин, а именно: если $\{P_i, P_j\}$ - положение одного пика, а $\{Q_i, Q_j\}$ - положение другого пика и расстояние между ними

$$r(\bar{P}, \bar{Q}) = \{(P_i - Q_i) / W_i\}^2 + \{(P_j - Q_j) / W_j\}^2 \quad /3.3/$$

/где W_i и W_j - полуширины по i - и j -координатам/

а/ минимально в списке найденных вершин,

б/ меньше некоторого уровня d , то пики \bar{P} и \bar{Q} сливаются в один пик \bar{T} :

$$t_i = r_1 P_i + r_2 Q_i, \quad r_1 = a_1 / (a_1 + a_2), \quad /3.4/$$

$$t_j = r_1 P_j + r_2 Q_j, \quad r_2 = a_2 / (a_1 + a_2),$$

a_1, a_2 - значения спектра в точках \bar{P} и \bar{Q} соответственно. Слияние позволяет отсеять локальные резкие изломы вблизи вершин, ошибочно идентифицированные как пики.

Оба названные условия для слияния необходимы. Если ограничиться сравнением /3.3/ с уровнем d , то при числе сливаемых вершин больше 3, разброс положения окончательно полученного пика, вычисляемого по /3.4/, будет довольно большим. Минимизация же, соответствующая в данном случае алгоритмам кластерного анализа^{6/}, гарантирует существенно меньший разброс этого положения.

На этом же шаге может быть осуществлено сравнение найденных вершин $\{\bar{P}_k\}$ пиков с вершинами $\{\bar{Q}_l\}$, вычисленными заранее, например по дифракционным формулам, а именно: для каждого пика \bar{P}_k ищется ближайший к нему /в смысле расстояния /3.3// пик из списка $\{\bar{Q}_l\}$ /пусть это будет \bar{Q}_m /, и если это расстояние от \bar{P}_k до \bar{Q}_m меньше заданного уровня R , то пик оставляется; иначе он уничтожается /как ошибочно идентифицированный/.

4. ФОРМИРОВАНИЕ УЧАСТКОВ

Эта процедура существенно сложнее в двумерном случае, чем в одномерном. Основное требование, предъявляемое к интервалу, состоит в том, что он должен содержать в центре изолированный пик или группу неразрешенных пиков и на краях - фон. Но здесь возникает проблема упорядочения пиков в плоскости и оптимального разбиения их на малые группы, причем при осуществлении этого требования желательно избегать полного перебора всех вариантов из-за большого количества операций, которые при этом требуются.

В данной работе эта типичная задача кластер-анализа решается в 2 этапа:

- 1/ разбиение всей области по координатному критерию;
- 2/ дальнейшее разбиение подобластей по критерию минимума расстояния.

Принцип кластеризации множества некоторых точек плоскости по критерию расстояния качественно формулируется так: разбить точки на группы так, чтобы сумма всех расстояний между точками внутри каждой группы была минимальной /максимальная однородность внутри каждого класса/, а сумма всех расстояний между группами была максимальной /максимальная разнородность между классами/. Математически этот принцип формулируется так: пусть даны n точек с координатами \bar{P}_i и $r(\bar{P}_i, \bar{P}_j)$ - расстояние /например, типа /3.3// между i -той и j -той точками; тогда оптимальным

в вышеозначенном смысле разбиением данного множества точек на m групп ($m < n$) будет такое разбиение, которое минимизирует функцию

$$\sum_{k=1}^m \sum_{i,j \in A_k} r(\bar{P}_i, \bar{P}_j), \quad /4.1/$$

где A_k - k -тая группа, и одновременно максимизирует функцию

$$\sum_{k,l=1}^{m-1} r(A_k, A_l), \quad /4.2/$$

где расстояние между классами может быть, например, определено как расстояние между центральными точками этих групп или между ближайшими точками из этих групп.

Можно /опуская доказательство/ указать следующий алгоритм решения задачи /4.1/, /4.2/: пусть X_{1i}, X_{2i} - координаты /не обязательно декартовы/ i -той точки на плоскости; тогда искомого m кластеров могут быть найдены последовательным разбиением одного из ранее найденных кластеров /первоначальным кластером служит само исходное множество/ на два подкластера по такому правилу: упорядочиваем координаты x_{1i} и x_{2i} точек данного кластера; находим $\max_{i,j} |x_{1i} - x_{1j}|$ /или $\max_{i,j} |x_{2i} - x_{2j}|$ / и все точки

с координатами x_{1k} /или x_{2k} /, меньшими чем /равными/ $x_{1i_{\max}}$ /или $x_{2i_{\max}}$ /, относим к одному подкластеру, а с большими - к другому. Продолжаем этот процесс, пока не будут построены все m подкластеров.

Если $\{x_1, x_2\}$ уже упорядочены, то процедура работает очень быстро /приблизительно $2n$ шагов/ и не требует большой дополнительной памяти.

Если используются декартовы координаты, то недостаток такого способа кластеризации применительно к спектрам состоит в том, что $\max |x_i - x_j|$ может стать слишком маленьким /меньше полуширины пика/ еще до того, как достигнуто m ; или при свободном m кластеры могут быть слишком велики для последующего м.н.к.-анализа.

Поэтому дальнейшее дробление кластеров производится уже по критерию минимума расстояния между пиками: пики с минимальными /при этом меньшими, чем полуширина/ взаимными расстояниями объединяются в одинаковые подкластеры; а с большими - в разные.

Эта процедура кластеризации требует уже числа операций, пропорционального n^2 /при n_i сортируемых точках/, и соответствующей дополнительной памяти, но благодаря предварительной кластеризации по описанному выше алгоритму числа n_i невелики.

По завершении формирования подкластеров процедура разбиения спектра на маленькие участки существенно упрощается: вся область, лежащая вне подкластеров, считается фоновой; для учета фоновой составляющей достаточно нарастить границы подкластеров, выбираемые по максимумам и минимумам координат точек этих подкластеров, - и участки готовы.

