

СЗУЧ.1ш
А-394

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



659/4-78



P11 - 11053

П.Г.Акишин, Г.А.Ососков

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ
РАЗРЕШЕНИЯ ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ ПИКОВ

1977

P11 - 11053

П.Г.Акишин, Г.А.Ососков

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ
РАЗРЕШЕНИЯ ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ ПИКОВ

Общественный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Акишин П.Г., Ососков Г.А.

P11 - 11053

Об одном методе разрешения перекрывающихся пиков

Дана постановка и методы решения задачи об определении расстояния между пиками подобной формы по данным измерения суммарной функции $g(x) = f(x) + \lambda f(x-\tau)$, где $f(x)$ и параметр подобия могут быть неизвестны заранее. Даны методы решения задач для случаев разнесенных и перекрывающихся пиков и результаты расчетов по модельным задачам, возникающим во времяпролетной методике.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Akishin P.G., Ososkov G.A.

P11 - 11053

On a Solving Method for Overlapping Peaks

The problem and its solving method are given which concern the determination of the distance between two peaks with similar shapes by using the measurement data of the summarized function $g(x) = f(x) + \lambda f(x-\tau)$. The similarity parameter and $f(x)$ can be unknown. Solutions are given for cases of peaks overlapped and laying apart as well as computation results of models appeared in the time-of-flight method.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

Обработка данных физического эксперимента нередко приводит к задаче разрешения перекрывающихся пиков, т.е. отделения их один от другого, определения их параметров, расстояния между ними и т.д.

Для некоторых задач ядерной электроники, как, например, при определении времени пролета частицы между двумя детекторами по данным регистрации их сигналов, характерно подобие формы пиков, отличающихся сдвигом по времени и числовым множителем. В общем случае неизвестной заранее может оказаться и сама форма пика как функция времени. Общеизвестны методы быстрой электроники для определения времени пролета $1/\tau$, однако представляет интерес также использование и цифровой техники с точки зрения возможного повышения точности. Предполагается, что суммарный сигнал от обоих детекторов оцифрован каким-либо способом и передан в ЭВМ для определения интересующих нас величин.

Так возникла математическая задача, которая в формализованной постановке выглядит следующим образом.

Имеется выборка из n косвенных измерений функции $g(x)$, наблюдаемой в эксперименте,

$$g_k = f(x_k) + \lambda f(x_k - \tau) + \Delta_k, \quad k = \overline{1, n}, \quad (I)$$

выполненных в точках x_k интервала измерений $(0, T)$ и зависящих от интересующих нас величин сдвига по времени τ , коэффициента подобия λ , формы сигнала $f(x)$ и невязки k -го измерения

Δ_k , которая складывается из ошибок регистрирующих приборов, измерительного устройства, а также из ошибок в описании нашей модели.

Модель эта, помимо зависимости (I), предполагает неизвестную функцию $f(x)$ неотрицательной и финитной, т.е. отличной от нуля только на ограниченном интервале $(0, A)$, $A < T$

$$f(x) > 0, \quad x \in (0, A); \quad f(x) = 0, \quad x \notin (0, A). \quad (2)$$

Относительно Δ_k предположим, что они независимы и распределены по нормальному закону с нулевым средним и одинаковой дисперсией σ .

Естественным является также ограничение

$$0 < x_1 \leq \tau < A, \quad \ell \leq \lambda \leq L. \quad (3)$$

Задача состоит в определении параметра сдвига τ при известных λ и $f(x)$. Определение вида $f(x)$ может также представлять самостоятельный интерес (например, с точки зрения проведения классификации, после которой сама задача определения τ при известном $f(x)$ становится много более простой).

Сделаем обычное предположение о постановке шага дискретизации Δx :

$$x_k = k \cdot \Delta_k \quad (k = \overline{1, n})$$

и введем обозначения

$$f_k = \begin{cases} 0 & k \leq 0 \\ f(x_k), & k = \overline{1, n_A} \\ 0 & k > n_A \end{cases} \quad (n_A = [\frac{A}{\Delta x}]) \quad (4)$$

$$t = [\frac{\tau}{\Delta x}] \quad (5)$$

([] - символ целой части).

При известном виде функции $f(x)$ задача определения τ может быть сравнительно просто решена с помощью описанного ниже приема, аналогичного применению быстрого преобразования Фурье^{/2/} (которое также может быть использовано при наличии соответствующей программы или специализированной ЭВМ). Пусть точности Δx достаточно для определения τ , т.е. $\tau = t$.

Обозначим:

$$G(\omega) = \sum_{k=1}^n g_k 2^{-k\omega}, \quad (6)$$

$$F(\omega) = \sum_{k=1}^{n_A} f_k 2^{-k\omega},$$

$$D(\omega) = \sum_{k=1}^n \Delta_k 2^{-k\omega}.$$

Умножая (I) на $2^{-k\omega}$ и суммируя по k , получим с учетом (4)

$$G(\omega) = [1 + \lambda 2^{-(t-1)\omega}] F(\omega) + D(\omega).$$

Повторяя эту операцию дважды с разными ω_1 и ω_2 , можно исключить λ и получить выражение

$$2^{-(t-1)(\omega_1 - \omega_2)} = \frac{F(\omega_2)}{F(\omega_1)} \cdot \frac{G(\omega_1) - F(\omega_1) - D(\omega_1)}{G(\omega_2) - F(\omega_2) - D(\omega_2)} = F(\omega_1, \omega_2) \cdot Z(\omega_1, \omega_2),$$

откуда при $\omega_2 = \omega_1 - 1$

$$t = 1 - \log_2 Z - \log_2 F. \quad (7)$$

Заметим, что при известной $f(x)$ постоянная величина $\log_2 F(\omega)$ может быть вычислена заранее.

Щумовой член $D(\omega)$ имеет нулевое математическое ожидание и дисперсию

$$\sigma_D^2 = \sigma^2 \sum_{k=1}^n 2^{-2k\omega} < \frac{\sigma^2}{2^{2\omega} - 1},$$

так что в обычных случаях ($\sigma \sim 1+2\%$) влияние $D(\omega)$ пренебрегаемо мало уже при $\omega \gg 1$.

Выбор преобразования (6) обусловлен простотой его реализации на современных ЭВМ, работающих в двоичной системе. Например, при $\omega_1 = 2$ вычисления по формуле (7) сводятся к серии команд сдвига и сложения над последовательностью $\{g_k - f_k\}$, и при наличии программы быстрого вычисления двоичного логарифма (см. например, /3/) могут быть выполнены за очень короткое время.

Формула (7) может быть использована и при неизвестной $f(x)$ в случае разделенных пиков, когда

$$A \leq \frac{T}{2}, \quad \tau \geq A,$$

поскольку в этом случае хорошей оценкой $F(\omega)$ может служить величина

$$\hat{F}(\omega) = \sum_{k=1}^{n_A} g_k 2^{-k\omega}.$$

Если точность определения τ должна быть выше Δx , то следует заменить суммы в (6) соответствующим интегральным преобразованием, например,

$$G(\omega) = \int_0^T g(x) 2^{-k\omega} dx,$$

где $g(x)$ - по-прежнему функция, наблюдаемая в эксперименте и оцифрованная в точках x_k , $g(x_k) = g_k$, ($k = \overline{1, n}$).

С помощью любой квадратурной формулы интеграл может быть представлен опять в виде суммы, аналогичной (6)

$$G(\omega) \approx \sum_{k=1}^{n_A} C_k g_k 2^{-k\omega},$$

где C_k - коэффициенты, равные, например, в случае квадратурной формулы Симпсона 2 или 2^2 .

Таким образом, и в этом случае формула (7) также справедлива, хотя входящие в нее суммы вычисляются немного сложнее.

Однако в самом общем случае, когда определению подлежат τ , λ и $f(x)$, а они могут и перекрываться, вышеприведенный способ неприменим.

Для того, чтобы найти подход к решению общей задачи, исследуем зависимость от $f(x)$, λ и τ функционала

$$F(f; \lambda, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} [g(x) - f(x) - \lambda f(x-\tau)]^2 dx, \quad (8)$$

где функция $g(x)$ предполагается известной, $f(x)$ по-прежнему удовлетворяет условию (2), а λ и τ - ограничениям (3).

По своему построению этот функционал достигает своего абсолютного минимума на таких функциях $f(x) = \hat{f}(x)$ и параметрах $\lambda = \hat{\lambda}$ и $\tau = \hat{\tau}$, что выполняется условие

$$g(x) = \hat{f}(x) + \hat{\lambda} \hat{f}(x - \hat{\tau}), \quad (9)$$

если при заданной $g(x)$ и ограничениях (2) и (3) они вообще существуют. Можно построить пример функции $g(x)$, для которой представление (9) неосуществимо ни при каких $f(x)$, λ и τ . Поэтому будем называть решением нашей общей задачи при данной $g(x)$ такие $\hat{f}(x)$, $\hat{\lambda}$ и $\hat{\tau}$, при которых функционал (8) достигает значения

$$F(\hat{f}; \hat{\lambda}, \hat{\tau}) = \inf_{\tau} \inf_{\lambda} \inf_{f} F(f; \lambda, \tau).$$

Зафиксируем некоторые допустимые значения λ и τ и рассмотрим задачу минимизации функционала (8) на финитных функциях $f(x)$.

Прежде всего, используя эту финитность, сократим область интегрирования до отрезка $(0, T)$, разбивая который на участки длины τ и обозначая

$$r = \left[\frac{T}{\tau} \right] + 1,$$

получим опять-таки с учетом (2) для (8) выражение

$$F(f; \lambda, \tau) = \int_0^T [f(x) - g(x)]^2 dx + \sum_{i=2}^r \int_{(i-2)\tau}^{i\tau} [f(x) - \lambda f(x-\tau) - g(x)]^2 dx + \int_{(r-1)\tau}^{r\tau} [\lambda f(x-\tau) - g(x)]^2 dx. \quad (10)$$

Уравнения Эйлера для нахождения экстремумов этого функционала получаются путем приравнивания нулю его первой вариации.

$$\begin{cases} (\lambda^2 + 1)f(x) + \lambda f(x + \tau) = g(x) + \lambda g(x + \tau), & (0 \leq x \leq \tau) \\ \lambda f(x - \tau) + (\lambda^2 + 1)f(x) + \lambda f(x + \tau) = g(x) + \lambda g(x + \tau), & (\tau \leq x \leq (r-2)\tau) \\ \lambda f(x - \tau) + (\lambda^2 + 1)f(x) = g(x) + \lambda g(x + \tau), & ((r-2)\tau \leq x \leq (r-1)\tau). \end{cases} \quad (11)$$

Можно показать, что и при наличии фиксированного сдвига в аргументе неизвестной функции $f(x)$ решение уравнений (II) дает минимум квадратичного по $f(x)$ функционала (10) и этот минимум единственный.

Вид уравнений (II) упрощается, если свести все к промежутку $(0, \tau)$ с помощью обозначений, вводящих вспомогательный набор функций

$$f_i(x) = f(x + (i-1)\tau); \quad x \in (0, \tau) \quad i = \overline{1, (r-1)}, \quad (12)$$

$$g_i(x) = g(x + (i-1)\tau); \quad x \in (0, \tau) \quad i = \overline{1, r},$$

после чего получим систему

$$\begin{cases} f_1(x) - g_1(x) + \lambda(f_2(x) + \lambda f_1(x) - g_2(x)) = 0 \\ (f_2(x) + \lambda f_1(x) - g_2(x)) + \lambda(f_3(x) + \lambda f_2(x) - g_3(x)) = 0 \\ \dots \\ (f_{r-1}(x) + \lambda f_{r-2}(x) - g_{r-1}(x)) + \lambda(f_r(x) - g_r(x)) = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Рекуррентная природа этих уравнений подсказывает следующий прием: пользуясь обозначениями (I2), разбиваем невязку, стоящую под интегралом в нашем функционале, на части, соответствующие последовательным промежуткам длины τ , и выражаем их через набор функций (I2):

$$\begin{aligned} \Delta_1(x) &= f_1(x) - g_1(x) \\ \Delta_2(x) &= f_2(x) + \lambda f_1(x) - g_2(x) \\ \dots & \dots \dots \dots \\ \Delta_{r-1}(x) &= f_{r-1}(x) + \lambda f_{r-2}(x) - g_{r-1}(x) \\ \Delta_r(x) &= \lambda f_{r-1}(x) - g_r(x). \end{aligned} \quad (I4)$$

Система (I3) сводится с помощью этих частных невязок к простой рекуррентной формуле

$$\Delta_i(x) + \lambda \Delta_{i+1}(x) = 0, \quad i = \overline{1, (r-1)},$$

откуда можно выразить любую из Δ_i через $\Delta_1(x)$ в виде

$$\Delta_i(x) = (-\lambda)^{-(i-1)} \Delta_1(x), \quad i = \overline{2, r}. \quad (I5)$$

Еще одно уравнение получается, если каждую i -ю строку в (I4) умножить на $(-\lambda)^{r-i}$ и сложить их все:

$$-\sum_{i=1}^r \Delta_i(x) \cdot (-\lambda)^{r-i} + \sum_{i=1}^r g_i(x) \cdot (-\lambda)^{r-i} = 0. \quad (I6)$$

Выражая теперь все $\Delta_i(x)$ в (I6) с помощью (I5) через $\Delta_1(x)$, находим $\Delta_1(x)$, а после этих и все остальные $\Delta_i(x)$. Подставляя их в (II), получаем значения нашего функционала в минимуме по $f(x)$ как функцию фиксированных λ и τ

$$\Phi(\lambda, \tau) = \min_f F(f; \lambda, \tau) = \frac{\int_0^\tau G^2(x, \lambda) dx}{\sum_{i=1}^r \lambda^{2(i-1)}}, \quad (I7)$$

где через $G(x, \lambda)$ обозначена правая часть уравнения (I6)

$$G(x, \lambda) = \sum_{i=1}^r g_i(x) (-\lambda)^{r-i}. \quad (I8)$$

Таким образом нам удалось доказать, что если при фиксированных λ и τ выполняются условия (2) и (9), то это позволяет одно-

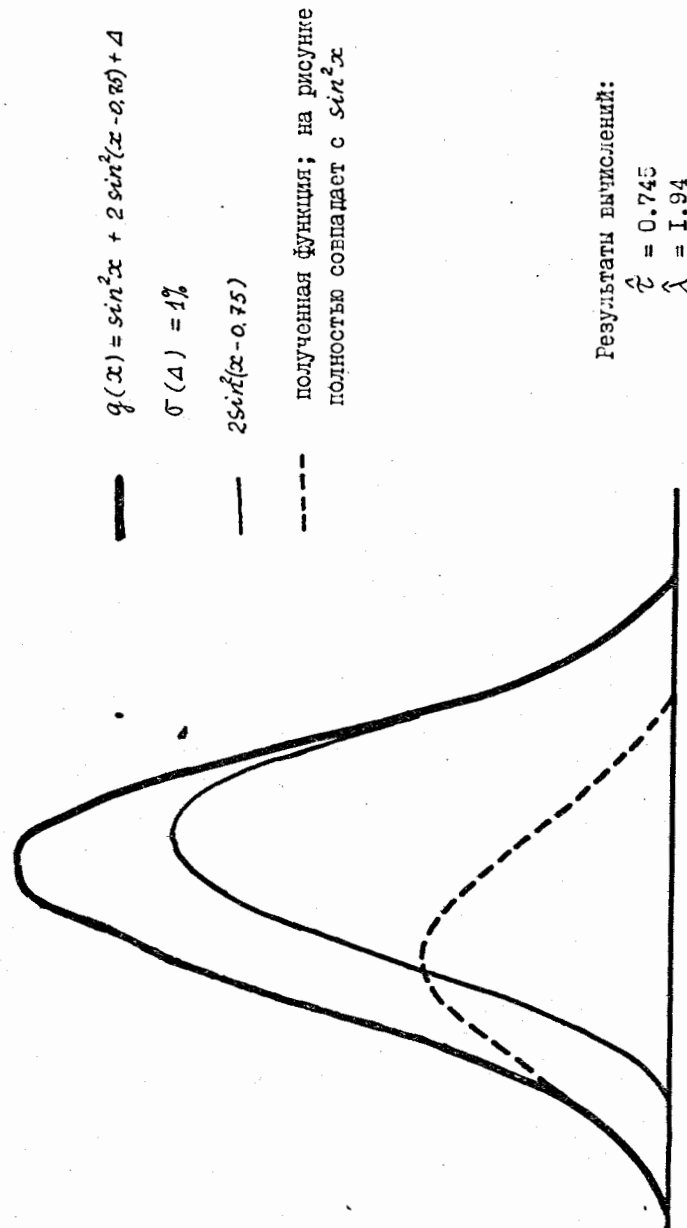


Рис. I.

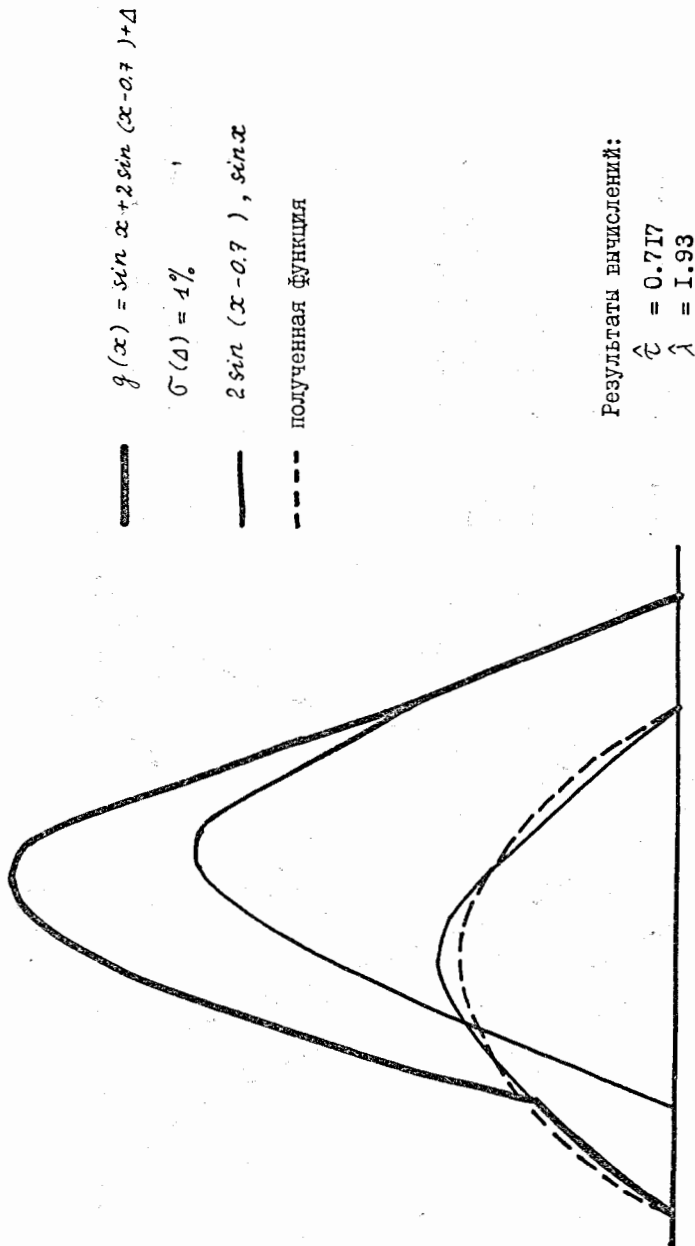


Рис.2.

значно определить вид функции $\hat{f}(x)$, дающей минимум функционалу (II).

Исходная задача свелась к минимизации функции $\Phi(\lambda, \tau)$ при ограничениях (3). При этом необходимо вспомнить, что измеряемая функция $g(x)$ задана на дискретной сетке с шагом Δx , который может оказаться несоизмеримым с искомым значением $\tau = \hat{c}$. Поэтому был использован следующий метод. Перебирались все допустимые значения τ , т.е. x_1, \dots, x_{n_A} и для каждого находились

$$\Phi_k = \min_{\lambda} \Phi(\lambda, x_k), \quad k = \overline{1, n_A}. \quad (19)$$

Из-за того, что нелинейная по λ функция $\Phi(\lambda, x_k)$ может иметь несколько минимумов, в качестве Φ_k брался наименьший из них, абсолютный минимум. После этого находились $\min \Phi_k$, который достигался при каком-то $k = k_0$. Значение $\tau = \hat{c}$ получалось как точка минимума параболы, проведенной по трем точкам Φ_{k_0-1}, Φ_{k_0} и Φ_{k_0+1} . Зависимость λ и $f(x)$ от \hat{c} обозначим $\hat{\lambda}(\hat{c})$ и $\hat{f}(\hat{c}, x)$.

В предположении, что $\hat{\lambda}(\tau), \hat{f}(\tau, x)$ функции гладкие по τ , устраивается параболическая аппроксимация $\lambda_k(\tau), f_p(\tau, x)$. В качестве искомого $\hat{\lambda}, \hat{f}(x)$ берется $\lambda_p(\hat{c}), f_p(\hat{c}, x)$.

Расчеты при различных вариантах формы $g(x)$ и значений параметров λ, τ и σ показали, что метод работает в большинстве случаев удовлетворительно и позволяет разделить пики даже при унимодальной $g(x)$ (см. рис.1,2), хотя следует отметить также появление ошибки при определении Φ_k в (19) в некоторых вариантах, вызванной сменой локального и абсолютного минимумов из-за шумов и ошибок аппроксимации интегралов.

Ведутся исследования по регуляризации этой неустойчивости в определении минимума функционала (8) по λ .

ЛИТЕРАТУРА

1. Акимов Ю.К. Быстродействующая электроника для регистрации ядерных частиц. М., Атомиздат, 1970.
2. Cooley J., Tukey J. Math of Comput., April 1965, v.19, pp 267.
3. Ососков Г.А. ЭВМ и МЭ, 7, №3, 1967.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 ноября 1977 года.