

УДК 621.391.82

АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ ФИЛЬТРА ВИНЕРА ДЛЯ СГЛАЖИВАНИЯ МАСС-СПЕКТРОВ

Трубицын А.А., Червяков Р.С., Маннанов А.Ф.

Введение

Результаты физических измерений всегда содержат случайную погрешность, которая при определенных условиях может быть уменьшена до сколь угодно малой величины с помощью многократного повторения опыта. Однако в этом случае ужесточаются требования к степени влияния внешней среды, повышаются материальные и временные затраты. Более простой и надежный способ уменьшения погрешности, которая характеризуется уровнем *случайного* стационарного «шума», накладываемого на полезный *детерминированный* сигнал, заключается в использовании методов математической обработки.

Известный подход к подавлению шумовой составляющей заключается в переходе посредством преобразования Фурье к представлению исходного сигнала $r(k)$ в частотной области w и подавлении шумовых составляющих с помощью фильтров, в основе построения которых чаще всего лежат определенные предположения о частотных свойствах шума. Математически такой способ сглаживания выражается перемножением Фурье-образов $R(w)$ исходного сигнала $r(k)$ и амплитудной характеристики $H(w)$ фильтра

$$S(w) = R(w)H(w)$$

и последующим восстановлением (посредством обратного преобразования Фурье) сглаженного сигнала $s(k)$. Здесь $S(w)$ – Фурье-образ сглаженного сигнала.

Обычно фильтрация базируется на использовании экспериментальной информации о шуме. Для этого выделяется участок сигнала, содержащий лишь шумовую составляющую $g(k)$, определяется Фурье-образ шума $G(w)$, находят оценки спектральной плотности сигнала и шума и строится амплитудная характеристика фильтра $H(w)$.

Минимальное среднее значение погрешности аппроксимации искомой функции $s(k)$ дает фильтр Винера [1,2]

$$H(w) = \frac{\hat{R}_0^2(w)}{\hat{R}_0^2(w) + \hat{G}_0^2(w)},$$

где $\hat{R}_0^2(w)$ и $\hat{G}_0^2(w)$ – несмещенные выборочные оценки спектральной плотности зарегистрированного сигнала и шума соответственно.

Для винеровского фильтра в качестве оценок используют коэффициенты преобразования Фурье $R(w)$, если они больше уровня шума, и их экстраполяцию до определенного уровня, если они меньше уровня шума [2]. Однако такой способ математически не обоснован.

Предложен численный алгоритм построения амплитудной характеристики фильтра Винера и исследовано его применение к сглаживанию масс-спектров. Показано, что построенный предложенным образом фильтр в отличие от известных базируется на более строгих математических предпосылках, легко алгоритмируется и позволяет практически в автоматическом режиме регулировать глубину сглаживания.

Алгоритм построения фильтра Винера

Одна из наиболее часто используемых на практике сглаженных выборочных оценок спектральной плотности $\hat{R}^2(w_n)$ дискретного сигнала $r(k)$, $k=0,1, \dots, N-1$ с точностью до постоянного множителя для $w_n > 0$ определяется выражением [3]:

$$\hat{R}^2(w_n) = \sum_{k=0}^{N-1} h(k) c_{rr}(k) \exp\left(-i \frac{2\pi nk}{N}\right), \quad n=1, \dots, N-1, \quad (1)$$

где $h(k)$ – обеспечивающее требуемую глубину сглаживания корреляционное окно (например, Тьюки), $c_{rr}(k)$ – выборочная оценка автоковариационной функции сигнала $r(k)$.

Корреляционное окно $h(k)$ Тьюки имеет вид:

$$h(k) = \begin{cases} 0.5 \left(1 + \cos \frac{\pi k}{M}\right), & 0 \leq k \leq M; \\ 0, & k > M, \end{cases} \quad (2)$$

где $0 < M \leq N-1$ – ширина окна.

Часто используемая на практике оценка автоковариационной функции определяется с помощью последовательности формул:

$$c_{rr}(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-k-1} (r_i - \bar{r}_i)(r_{i+k} - \bar{r}_{i+k}),$$

$$\bar{r}_i = \frac{1}{N-k} \sum_{i=0}^{N-k-1} r_i, \quad \bar{r}_{i+k} = \frac{1}{N-k} \sum_{i=0}^{N-k-1} r_{i+k},$$

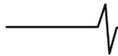
$k=0,1, \dots, N-1$.

Оценка (1) является асимптотически несмещенной оценкой спектральной плотности стационарного случайного процесса большой длительности, однако для записей конечной длины она становится смещенной [3], т.е.

$$\hat{R}^2(w_n) = \hat{R}_0^2(w_n) + b(w_n),$$

где $\hat{R}_0^2(w_n)$ – несмещенная оценка, $b(w_n)$ – смещение.

В соответствии с выражениями, полученными в работе [3] для окна Тьюки, величина смещения $b(w_n)$ ока-



зывается пропорциональной второй производной от неизвестного истинного значения спектральной плотности сигнала на данной частоте и обратно пропорциональной M^2 , что позволяет предположить, что

$$b(w_n) = f(w_n)/M^2 + C,$$

где $f(w_n)$ – некоторая неизвестная функция частоты, C – малая константа.

Далее представляется способ определения функции $f(w_n)$, константы C и нахождения с их помощью несмещенной оценки спектральной плотности сигнала.

Найдем оценки (1) спектральной плотности с двумя значениями $M_1 = N/m_1$ и $M_2 = N/m_2$ ширины корреляционного окна M в следующей форме:

$$\hat{R}_1^2(w_n) = \hat{R}_0^2(w_n) + m_1^2 f(w_n)/N^2 + C_1,$$

$$\hat{R}_2^2(w_n) = \hat{R}_0^2(w_n) + m_2^2 f(w_n)/N^2 + C_2.$$

Отметим, что если M_1 не сильно отличается от M_2 , то $C_2 - C_1$ есть ноль следующего порядка малости в разложении по $(M_2 - M_1)/N$. Выразим функцию частоты $f(w_n)$ из разности оценок спектральной плотности $\hat{R}_2^2(w_n)$ и $\hat{R}_1^2(w_n)$:

$$f(w_n) = N^2 (\hat{R}_2^2(w_n) - \hat{R}_1^2(w_n)) / (m_2^2 - m_1^2).$$

Подставляя полученное выражение в формулу для $\hat{R}_2^2(w_n)$, приходим к выражению:

$$\hat{R}_0^2(w_n) = \hat{R}_2^2(w_n) - (\hat{R}_2^2(w_n) - \hat{R}_1^2(w_n)) m_2^2 / (m_2^2 - m_1^2) - C_2.$$

Из физического смысла спектральной плотности как спектра мощности следует, что должно выполняться условие $\hat{R}_0^2(w \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Для сигналов с ограниченным спектром с учетом того факта, что оценка $\hat{R}_0^2(w)$ детерминированных сигналов на высоких частотах носит характер монотонно убывающей функции, можно положить $C_2 = \min\{V(w_n)\}$,

$$\text{где } V(w_n) = \hat{R}_2^2(w_n) - (\hat{R}_2^2(w_n) - \hat{R}_1^2(w_n)) m_2^2 / (m_2^2 - m_1^2).$$

Таким образом, несмещенная оценка, с точностью до первого порядка малости по отношению к $(M_2 - M_1)/N$, окажется равной:

$$\hat{R}_0^2(w_n) = V(w_n) - \min\{V(w_n)\}.$$

Для белого шума оценка вида (1), соответствующая выборочному спектру, является несмещенной для записей любой длины [3], т.е. можно положить

$$\hat{G}_0^2(w_n) = \sum_{k=0}^{N-1} h(k) c_{gg}(k) \exp\left(-i \frac{2\pi nk}{N}\right), n=1, \dots, N-1.$$

Выбор ширины M корреляционного окна в (2) является результатом компромисса между взаимно противоречивыми требованиями малой дисперсии и малого смещения спектральной оценки. На практике ширину окна уменьшают с $M=N-1$ до тех пор, пока не исчезнут случайные выбросы в функции оценки спектральной плотности.

Разработанный алгоритм построения амплитудной характеристики фильтра Винера использован для обработки реальных масс-спектров.

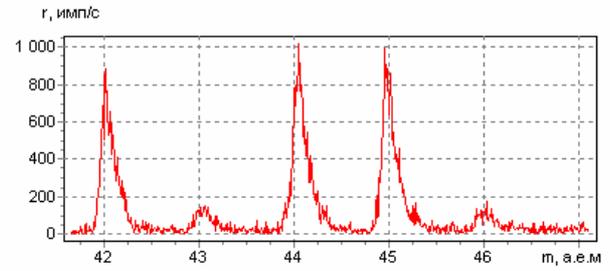


Рис.1. Масс-спектр

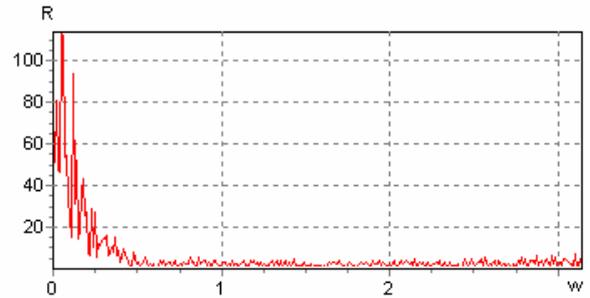


Рис.2. Модуль Фурье-образа масс-спектра.

На рис.1 показан участок масс-спектра остаточных газов в вакуумной камере масс-спектрометра [4] - исходный для обработки сигнал с отношением сигнал/шум ОСШ=65, на рис. 2 – модуль Фурье-образа сигнала, а на рис. 3 - зависимость между ОСШ и шириной корреляционного окна M_1 , выраженной в процентах от общей выборки N сигнала. При этом ширина окна при оценке спектральной плотности шума задавалась равной 5% от N , а величина M_2 принималась с минимально возможным отличием от M_1 , т.е. $M_2 = M_1 + 1$.

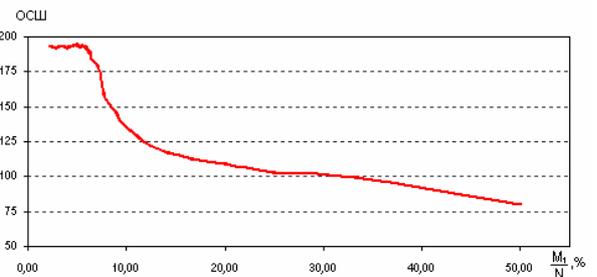


Рис.3. Зависимость ОСШ от ширины корреляционного окна.

Анализ последней зависимости позволил выбрать оптимальную (из соображений максимального подавления шумовой составляющей) ширину сглаживающего корреляционного окна $M_1 \approx 0.033N$.

На рис. 4 представлена оценка спектральной плотности исходного масс-спектра с $M_1 \approx 0.033N$, на рис. 5 показана построенная на указанных оценках амплитудная характеристика фильтра Винера, а на рис. 6 – результат обработки исходного масс-спектра таким фильтром (ОСШ=195), из которого следует заключение о трехкратном увеличении ОСШ по сравнению с исходным масс-спектром.

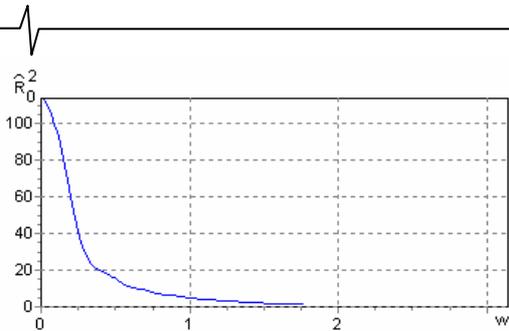


Рис.4. Оценка спектральной плотности масс-спектра с $M_1/N=3.3\%$, $M_2=M_1+1$.

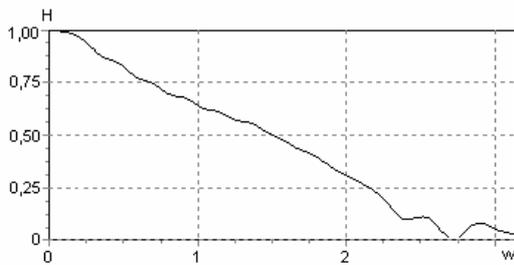


Рис.5. Амплитудная характеристика фильтра Винера.

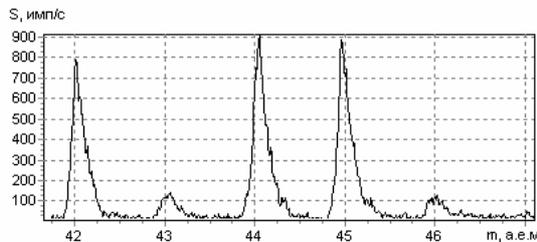


Рис.6. Сглаженный масс-спектр.

Заключение

Анализ результатов позволяет сделать вывод о том, что применение фильтра Винера, построенного на описанных оценках, к данным физических экспериментов (в том числе, к масс-спектрам) позволяет решить одну из основных задач обработки – увеличение отношения сигнал/шум без серьезного ухудшения разрешения и заметных нелинейных искажений.

Предложенный алгоритм расчета фильтра Винера ориентирован на обработку данных спектрального исследования вещества и, в отличие от известных [2], базируется на более строгих математических предпосылках и позволяет практически в автоматическом режиме регулировать глубину сглаживания шумов заданием ширины корреляционного окна.

Авторы благодарят О.В. Рожкова за предоставление данных, приведенных на рис. 1.

Литература

1. Левин Б.Р. Теоретические основы статистической радиотехники.- М.: Радио и связь, 1989.- 656 с.
2. Косарев Е.Л., Пантос Е..// ПТЭ.- 1985.- №3.- С.92-95.
3. Дженкинс Г., Ваттс Д. Спектральный анализ и его приложения.- М.: Мир, 1971.- Т. 1, 2. - 314 с.
4. Шеретов Э.П., Рожков О.В., Малютин А.Е. // Физика и радиоэлектроника в медицине и биотехнологии. Материалы III межд. науч.- техн. конф. / Под ред. Л.Т.Сушковой.- Гаврилов-Посад: Институт оценки земли, 1998.- С.288-289.

Уважаемые коллеги!

Со второго полугодия 2008 года вы можете подписаться на наш журнал в любом отделении связи. Подписной индекс издания по каталогу ОАО «Роспечать» - 82185.

Для тех, кто не успел оформить подписку на первое полугодие 2008 года через ОАО «Роспечать», сохраняется возможность приобретения журналов непосредственно в редакции по адресу: 107031, г. Москва, Рождественка, б\9\20, стр. 1, Российское научно-техническое общество радиотехники, электроники и связи им. А.С. Попова, или оформить Заказ в соответствии с требованиями, выставленными на сайте журнала: www.dsps.ru.

Справки по телефонам: (495) 621-71-08, 621-06-10.

Факс: (495) 621-16-39.

E-mail: nto.popov@mtu-net.ru

tor@rgta.ryazan.ru