

УДК 543.423

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВОГО ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗА ДЛЯ СГЛАЖИВАНИЯ ШУМОВ И СНИЖЕНИЯ ПРЕДЕЛОВ ОБНАРУЖЕНИЯ В АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

А.В.Аграфенин
ЗАО «Найтек инструментс»
127486, Россия, Москва, Коровинское ш., 10, стр.2, офис 37
agrafenin@mail.ru

Поступила в редакцию 25 апреля 2007 г.

Предложен метод цифровой обработки спектрального сигнала, эффективно подавляющий шум и позволяющий снижать пределы обнаружения элементов.

Ключевые слова: спектрометрия, пределы обнаружения, цифровая фильтрация.

**Аграфенин Алексей Владимирович - техни-
ческий директор ЗАО «Найтек инструментс».**
**Область научных интересов – атомный
спектральный анализ, криминалистика**
Автор более 50 публикаций

Введение

Вейвлет (wavelet) дословно означает «всплеск» или «маленькая волна». В последнее время функции этого типа успешно используются в различных областях цифрового спектрального анализа вместо синусоидальных (длинных) волн.

Вейвлет-анализ является успешной альтернативой анализу Фурье, благодаря более гибкой технике обработки сигналов. Одно из наиболее интересных преимуществ вейвлет-анализа состоит в том, что он позволяет выделить хорошо локализованные изменения сигнала на фоне случайного шума (например, так называемые «спектральные пики» в атомно-эмиссионной спектрометрии).

В простейшей модели предполагается, что зашумленный сигнал имеет вид $s(n) = f(n) + \sigma e(n)$, где $s(n)$ – полезный сигнал, σ – уровень шума и $e(n)$ – гауссов белый шум, т.е. стационарная случайная некоррелированная последовательность с нулевым математическим ожиданием и дисперсией, равной единице [1].

С помощью вейвлет-анализа сигнал раскладывается на аппроксимирующие и детализирующие коэффициенты. Аппроксимирующие коэф-

фициенты описывают сглаженный сигнал, а детализирующие – колебания, в которых отражается шумовая компонента. Как правило, величина шума меньше, чем величина сигнала. Поэтому простейший способ удаления шума состоит в установлении некоторого порогового значения и приравнивании нулю всех коэффициентов меньших, чем это значение. От правильного выбора типа вейвлета и порогового значения зависит качество шумоподавления, оцениваемое, как соотношение сигнал/шум: при малых значениях порога чувствительности это соотношение увеличивается незначительно, при больших – имеется риск существенно подавить и сигнал тоже. На рис. 1 показан пример выделения гауссовских спектральных пиков на фоне равного им по интенсивности случайного шума (случай «предела обнаружения»).

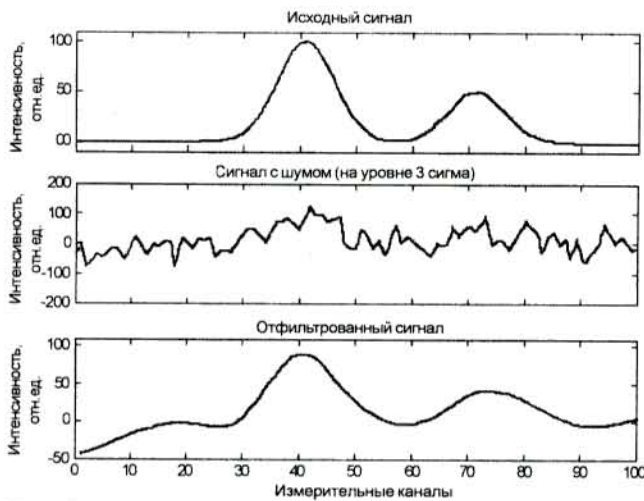


Рис.1. Пример восстановления с помощью вейвлет-анализа суммы двух спектральных пиков гауссовой формы на фоне сравнимого по величине шума (моделирование «предела обнаружения»)

На рис. 2 показано окно программы вейвлет-анализа зашумленного сигнала с подбором по-

роговых значений коэффициентов, а в таблице – результаты практического применения сглаживания с помощью вейвлетов для улучшения воспроизводимости анализа высокооловянистых бронз и сплава Fe–Nd–B в микроволновой плазме (спектрометр МФС-8 с детектором на линейках ПЗС производства ООО «МОРС», г.Троицк) [2].

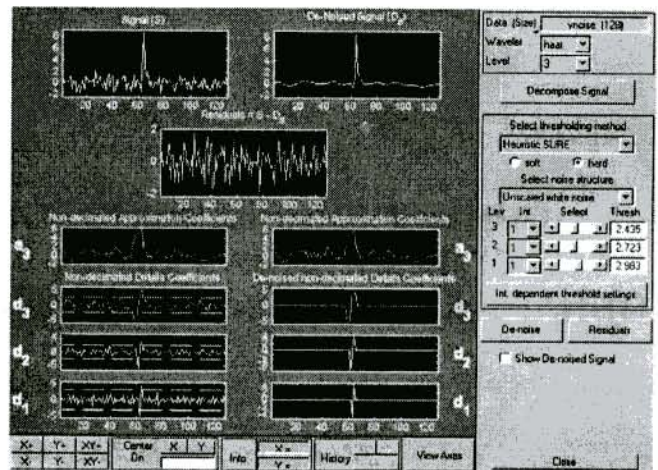


Рис.2. Пример обработки зашумленного сигнала в системе MATLAB

Прекрасный пример снижения шумов в спектрометрии радиочастотного тлеющего разряда был показан в сотрудничестве с фирмой HORIBA Jobin Yvon [3]. Автор выражает особую признательность сотрудникам фирмы Патрику Шапон и Эммануэлю Фретель за разработку программного обеспечения и проведение экспериментов.

Выводы

В данной статье и работах [2-4] показано преимущество применения вейвлет-анализа перед преобразованием Фурье для сглаживания шумов в атомно-эмиссионном спектральном анализе и снижения пределов обнаружения.

Таблица

Улучшение прецизионности (воспроизводимости) по относительному стандартному квадратическому отклонению (ОСКО) для микроволновой плазмы с помощью вейвлет-сглаживания

Элемент	Матрица	Диапазон содержания, % масс.	ОСКО без сглаживания, %	ОСКО со сглаживанием, %
Sn	Cu	10–20	5	0,5
B	Fe-Nd-B	0,3–1,8	6	0,7
Nd	Fe-Nd-B	20–40	1,4	0,6
Co	Fe-Nd-B	1–6	1,7	0,8
Ti	Fe-Nd-B	0,2–1,2	1,0	0,5
Al	Fe-Nd-B	0,2–1,2	1,7	0,7
Dy	Fe-Nd-B	1–6	0,6	0,6

До сих пор процедура выбора вейвлета и порога шумоподавления носит полуэмпирический характер. Однако, теория вейвлет-анализа бурно развивается и можно ожидать в ближайшее время появления работ с более четким теоретическим обоснованием.

В ближайшее время нами предполагается продолжить успешное сотрудничество ЗАО «Найтек инструментс» с фирмой HORIBA Jobin Yvon в продвижении на практику современных методов обработки данных в эмиссионном спектральном анализе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Смоленцев Н.К. Основы теории вейвлетов. Вейвлеты в MATLAB. М.: ДМК Пресс, 2005. 304 с.
2. Agrafenin A.V. Improving the reproducibility and detection limits for the component analysis of the Cu-Sn and Fe-Nd-Ti alloys using the microwave plasma optical emission spectrometer with CCD detector / A.V.Agrafenin, V.A.Kouchoumov, E.G.Silkis // 2003 European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry (12-17 January 2003, Garmish-Partenkirchen, Germany). 2003. P. 186.
3. Шапон П. Определение валового содержания элементов и анализ слоев с помощью оптической спектроскопии радиочастотного тлеющего разряда // Аналитика и контроль. 2007. Т.11, № 1. С. .
4. Wavelet smoothing applied to the determination of trace arsenic, lead, antimony and selenium in environmental water by ICP-OES / Xiaoguo Ma, Zhanxia Zhang // J. Anal. At. Spectrom. 2004. V. 19, № 6. P. 738-742.

* * * * *

APPLICATION OF THE NUMERICAL ANALYSIS BASED ON WAVELETS FOR NOISE SMOOTHING AND IMPROVING OF THE LIMITS OF DETECTION FOR ATOMIC EMISSION SPECTROSCOPY

A.V.Agrafenin

The method of the numerical analysis of the spectral signal is developed for the efficient smoothing of the noise and improving the limits of detection.

Keywords: spectrometry, limits of detection, numerical filtering
