

ГОЛЯК Игорь Семенович

**МОДЕЛИ И АЛГОРИТМЫ ПРОЦЕССА ВОССТАНОВЛЕНИЯ
СПЕКТРОВ ВТОРИЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ, РЕГИСТРИРУЕМОГО
СТАТИЧЕСКИМ ФУРЬЕ-СПЕКТРОМЕТРОМ**

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Golyak', is centered on the page. The signature is stylized with a large initial 'G' and a series of loops.

Москва – 2015

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном
образовательном учреждении высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет
имени Н. Э. Баумана»

Научный доктор физико-математических наук, профессор
руководитель: **Морозов Андрей Николаевич**

Официальные **Потапов Александр Алексеевич**
оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор, действительный член РАЕН, академик Академии инженерных наук им. А. М. Прохорова федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук», главный научный сотрудник

Мачихин Александр Сергеевич
кандидат физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Научно-технологический центр уникального приборостроения Российской академии наук», старший научный сотрудник лаборатории акустооптической спектроскопии

Ведущая федеральное государственное бюджетное учреждение
организация: науки «Институт энергетических проблем химической физики имени В. Л. Тальрозе Российской академии наук»

Защита диссертации состоится «___» _____ 2015 года в ___ час. ___ мин. на заседании диссертационного совета Д 212.141.15 при Московском государственном техническом университете имени Н. Э. Баумана по адресу: Москва, Рубцовская наб., 2/18, ауд. 1006 л.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте (www.bmstu.ru) Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана.

Автореферат разослан «___» _____ 2015 г.

Учёный секретарь диссертационного совета,
кандидат технических наук, доцент

 **Аттетков**
Александр Владимирович

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В настоящее время в задачах химического мониторинга, промышленного контроля, медицинской диагностики и др. требуется дистанционный беспробоотборный экспресс-анализ. Среди методов дистанционного анализа наиболее широкое развитие получили спектральные методы, одним из которых является Фурье-спектрометрия. В сравнении с другими спектральными методами, Фурье-спектрометрия обладает преимуществами в светосиле и мультиплекс-факторе, что позволяет проводить более точный анализ.

Развитие микроэлектроники, появление фоточувствительных матриц в ближнем ультрафиолетовом (УФ) диапазоне позволили создавать компактные портативные системы для экспресс-анализа на основе метода Фурье-спектрометрии в ближней УФ области. Вместе с тем, существуют и сложности при проведении экспресс-анализа с помощью таких портативных систем.

Особенностью Фурье-спектрометрии является то, что регистрируемое линейкой или матрицей сенсоров изображение интерференционной картины (так называемая интерферограмма) не является напрямую распределением энергии по длинам волн. Для получения энергетического спектра необходимо выполнить ряд численных процедур, которые невозможны без применения современных вычислительных систем.

Регистрируемые двумерные интерференционные картины со статических Фурье-спектрометров представляют собой достаточно большие массивы данных. Так, например, для макета статического Фурье-спектрометра, имеющего разрешение 0,6 нм и рабочий диапазон 300–700 нм, размер одного ч/б кадра с разрешением 1936 на 1456 занимает десятки мегабайт при разрядности АЦП – 14 бит. Кроме того, в процессе регистрации интерференционной картины с целью её дальнейшего преобразования в спектр возникают и другие трудности. Регистрируемая интерферограмма практически всегда содержит искажения различного характера, которые приводят к существенному снижению интенсивности и разрешения в восстанавливаемом спектре.

Среди наиболее существенных искажений стоит отметить отклонения, вызванные несовершенством оптической системы, засветку от внешних источников света, фоновые искажения и нелинейные искажения. Ещё одним критичным фактором при выполнении экспресс-анализа играет время одного цикла измерений, которое не должно превышать 1 секунды. Такой фактор ограничивает время экспозиции на фотоприёмнике, из-за чего получаемая интерферограмма становится сильно зашумлённой.

На сегодняшний день существует большое количество методов и алгоритмов, применяемых в обработке изображений, многие из которых применимы и при обработке интерферограмм. Наиболее полные обзоры существующих методов обработки изображений приведены в работах авторов: У. Прэтта, Л. П. Ярославского А. А. Потапова; применительно к обработке интерференционных картин выделим работы Д. В. Робинсона, Дж. Малакара. Вопросы, связанные с дискретизацией и квантованием сигналов отражены в исследованиях В. А. Котельникова и К. Э. Шеннона, выборки интерферограммы – в исследованиях К. Х. Вомака. Большое количество исследований посвящено выделению контуров интерференционных полос, а также методам и алгоритмам сглаживания интерферограмм, среди которых наиболее известны работы Г. Т. Рейда, А. Прата, В. Х. Пресса. Вопросы восстановления изображений подробно отражены у А. Н. Тихонова, А. В. Оппенгейма и Р. Шафера. В области цифровой фильтрации изображений наиболее известны работы Т. С. Хуанга, Дж. В. Кули и Дж. В. Тьюки, Х. Дж. Нуссбауэра, Н. Винера, С. Баттерворта. Методы и алгоритмы экстраполяции значений интерферограммы за пределы видимости приведены в трудах К. Роддиера и Ф. Роддиера, Р. У. Герчберга. Многочисленные исследования посвящены актуальной и на сегодняшний день проблеме устранения шума, среди которых стоит отметить работы Ж. Конн, описавшей проблематику шума, работу Х. Сакая, посвящённую отношению сигнал/шум в Фурье-спектрометрии, более общим трудам А. С. Захора, Е. Е. Белла и др. Также стоит отметить исследования авторов, посвящённые анализу шума и отношению сигнал/шум в Фурье-спектрометрии видимого и ближнего ультрафиолетового диапазонов: М. Дж. Милано и др., Е. Войгтмана, М. Л. Джунтилли. Методы устранения неравномерности фона на интерферограммах представлены в работах М. О. Манзардо, Ч. Чжана и др. В работах Г. Гуелашвили, В. В. Мейси, М. Такеды отражены исследования аберраций.

Среди отмеченных выше работ слабо отражены вопросы обработки интерферограмм в ближнем ультрафиолетовом и видимом диапазонах. Также не освещены вопросы эффективности использования существующих методов и алгоритмов в программных комплексах для работы в режиме реального времени в условиях, отличных от лабораторных.

Таким образом, возникает задача разработки моделей и алгоритмов процесса восстановления энергетического спектра из искажённой и зашумлённой двумерной интерферограммы в ближнем ультрафиолетовом и видимом диапазонах.

Цель диссертационной работы – разработка математической модели, алгоритмов и программного комплекса процесса восстановления спектров вторичного излучения химических соединений в ближнем ультрафиолетовом и видимом диапазонах длин волн по искажённой двумерной интерференционной картине.

Для достижения поставленной цели потребовалось решение **следующих основных задач**:

1. Анализ типов искажений двумерных интерференционных картин.
2. Построение математической модели и разработка численных алгоритмов процесса восстановления спектра вторичного излучения из искажённой двумерной интерференционной картины.
3. Определение возможностей программного комплекса на основе предложенной модели и численных алгоритмов для восстановления спектров вторичного излучения в ближнем ультрафиолетовом и видимом диапазонах.

Научная новизна. В диссертации получены следующие новые научные результаты, выносимые на защиту:

1. Математическая модель процесса восстановления спектра из искажённой двумерной интерференционной картины в ближнем ультрафиолетовом и видимом диапазонах.
2. Численные алгоритмы процесса восстановления спектра вторичного излучения из двумерной интерферограммы.
3. Программный комплекс, реализующий разработанные алгоритмы процесса восстановления спектра.

Практическая значимость полученных результатов состоит в том, что разработанные алгоритмы позволяют восстанавливать спектр вторичного излучения из сильно искажённых двумерных интерференционных картин при малых значениях экспозиции, при этом обеспечивая отношение сигнал/шум, достаточное для распознавания химического соединения. Программный комплекс, реализующий разработанные алгоритмы, позволяет обрабатывать экспериментальные данные в режиме реального времени, осуществляя полный цикл от регистрации спектра вторичного излучения до идентификации целевого химического соединения менее чем за 1 с. Программный комплекс использован в макетах и образцах химических анализаторов.

Методы исследования. При решении задач, возникших в ходе написания диссертационной работы, использовались методы цифровой обработки изображений, методы вычислительной математики, а также методы математического и компьютерного моделирования, и визуализации.

Достоверность и обоснованность полученных результатов обеспечена использованием проверенных численных математических методов; апробацией разработанных алгоритмов и программного комплекса в сериях вычислительных и лабораторных экспериментов, а также сравнением спектров, восстановленных при помощи разработанных алгоритмов и программного комплекса на базе статического Фурье-спектрометра со спектрами, полученными на дифракционном спектрометре.

Диссертация является составной частью фундаментальных исследований, проведённых в рамках гранта РФФИ (проект № 14-32-50869).

Апробация работы. Основные результаты и отдельные положения диссертационной работы докладывались и обсуждались на Общеуниверситетской научно-технической конференции «Студенческая научная весна» (Москва, 2007, 2008); IV, VI–VIII Всероссийских конференциях «Необратимые процессы в природе и технике» (Москва, 2007, 2011, 2013, 2015); Актуальные проблемы фундаментальных наук. III и IV научно-методических конференциях аспирантов и молодых исследователей (Москва, 2009, 2010); Конференции-конкурсе молодых физиков (Москва, 2009, 2010); XXII Всероссийской межвузовской научно-технической конференции «Электромеханические и внутрикамерные процессы в энергетических установках, струйная акустика и диагностика, приборы и методы контроля природной среды, веществ, материалов и изделий» (Казань, 2010); IV–VII Международных конференциях «Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации» (Суздаль, 2011–2014); Научно-технической конференции «Гиперспектральные приборы и технологии» (Красногорск, 2013).

Публикации. Основные результаты работы опубликованы в 19 научных работах, в том числе в 5 статьях из Перечня ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, и 14 трудах и тезисах докладов Международных и Всероссийских конференций.

Личный вклад соискателя. Соискателем разработана математическая модель двумерной интерференционной картины, содержащей искажения и шумы статического Фурье-спектрометра, которая была реализована в вычислительных алгоритмах. Предложена математическая модель и разработаны алгоритмы процесса восстановления спектра вторичного излучения из искажённой двумерной интерференционной картины статического Фурье-спектрометра ближнего ультрафиолетового и видимого диапазонов. Разработанные алгоритмы применены в программном комплексе на базе статического Фурье-

спектрометра и протестированы в вычислительных и лабораторных экспериментах.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы и приложения. Диссертация изложена на 137 страницах, содержит 61 иллюстрацию, 13 таблиц и 1 приложение. Список литературы включает 152 наименования.

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи работы, научная новизна, практическая значимость работы, основные положения, выносимые на защиту, и описана структура диссертации.

Первая глава носит обзорный характер и посвящена обзору средств регистрации, формирования, и обработки изображений со статического Фурье-спектрометра (СФС). Описан принцип работы Фурье-спектрометра, показана связь интерференционной картины с энергетическим спектром излучения. Отражена актуальность применения подобных систем, проведён обзор современного состояния разработки статических Фурье-спектрометров, а также область применения. Описан процесс регистрации и формирования изображения со статического Фурье-спектрометра. Приведено описание искажений, с которыми приходится сталкиваться в процессе восстановления спектра из изображения, также рассмотрены существующие методы обработки изображений. На основании проведённого анализа сформулированы цель и задачи диссертационной работы.

Вторая глава посвящена постановке задачи процесса восстановления спектра из искажённой двумерной интерференционной картины со статического Фурье-спектрометра и численному её решению. Приведены алгоритмы и методы решения задачи, проведена оценка полученных результатов.

Под истинным спектром понимается такой спектр $B(\nu)$, восстановленный из двумерной интерференционной картины $J(x, y)$, если бы она была бесконечно протяжённой, бесконечного разрешения, без оптических, геометрических, яркостных искажений и шума, а $B(\nu)$ не отрицателен и интегрируем.

Для решения задачи восстановления спектра рассмотрим процедуру формирования идеальной двумерной интерференционной картины по заданному спектру. Идеальная двумерная интерферограмма $J(x, y)$ представляет собой двумерную функцию, заданную на бесконечной плоскости без оптических, геометрических, яркостных искажений и не содержащую шум.

Модель такой двумерной интерферограммы представляется следующим уравнением:

$$J(x, y) = I(x) = \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} B(v) e^{i\varphi(v)} e^{-2\pi i v x} dv, \quad (1)$$

где $J(x, y)$ – идеальная двумерная интерферограмма, $I(x)$ – идеальная одномерная интерферограмма; $B(v)$ – истинный спектр, $\varphi(v)$ – функция фазовых искажений; v – волновое число; x, y – пространственные координаты.

Уравнение (1) можно рассматривать как операторное уравнение, в котором оператор A истинному спектру $B(v)$ ставит в соответствие идеальную двумерную интерферограмму:

$$AB(v) = I(x) = J(x, y). \quad (2)$$

В реальной задаче двумерная интерферограмма имеет конечную протяжённость и конечный шаг, то есть вместо точно заданной идеальной двумерной интерференционной картины $J(x, y)$, известен конечный набор значений $J = \{J(x_k, y_l), k = 1, \dots, N, l = 1, \dots, M\}$, где интервал изменения координат x, y определяется размером матрицы фотоприёмного устройства (ФПУ). Кроме того, измеряемая интерферограмма включает погрешности вследствие оптических, геометрических и яркостных искажений, а также содержит шум. Модель такой двумерной интерферограммы может быть представлена в виде

$$\tilde{J} = DJ + N, \quad (3)$$

где $N = \{N(x_k, y_l), k = 1, \dots, N, l = 1, \dots, M\}$ – аддитивный шум, а оператор искажений D включает:

- 1) влияние геометрических искажений, вносимых оптической системой;
- 2) внесение яркостных аддитивных и мультипликативных искажений;
- 3) проектирование двумерной функции на конечное множество дискретных точек.

Введём обозначение $\mathbf{r} = (x, y)$ для координаты на регистрируемой интерферограмме, тогда искажённая дискретная двумерная интерферограмма представляется в виде

$$\tilde{J}(\mathbf{r}_{kl}) = P_{kl}\{M(\mathbf{r})J(G\mathbf{r}) + S(\mathbf{r})\},$$

где $M(\mathbf{r})$ – функция мультипликативных искажений яркости; $S(\mathbf{r})$ – функция аддитивных искажений яркости; P_{kl} – оператор проектирования двумерной функции на множество точек $\mathbf{r}_{kl} = (x_k, y_l), k = 1, \dots, N, l = 1, \dots, M$; оператор геометрических искажений G сопоставляет точке $\mathbf{r}$ регистрируемой интерферограммы точку $G\mathbf{r}$ на неискажённой (идеальной) интерферограмме (1). В работе рассматриваются геометрические искажения, описывающие аберрации оптиче-

ской системы, малый поворот изображения как целого и особые искажения, связанные с несовершенством конструкции оптической системы.

Таким образом, вместо операторного уравнения (2) получаем

$$\hat{A}B(v) = \tilde{J},$$

где $\hat{A} = DA$; D – оператор искажений.

В результате задача восстановления спектра может быть сформулирована следующим образом: по заданному дискретному набору точек $\tilde{J}$, содержащему яркостные и геометрические искажения и случайный шум, необходимо восстановить спектр $B(v)$, то есть построить оператор T , преобразующий дискретный набор точек $\tilde{J}$ в набор спектральных точек $\tilde{B} = \{\tilde{B}_j, j = 1, \dots, N\}$, такой что

$$\|B(v) - \tilde{B}\| < \varepsilon, \quad (4)$$

где $\|\cdot\|$ – евклидова норма; ε – заданная погрешность; $B(v) = \{B(v_i), i = 1, \dots, N\}$ – истинный спектр.

Поскольку яркостные искажения имеют как аддитивный, так и мультипликативный характер, что не позволяет восстановить амплитуду спектра, в качестве критерия восстановления спектра вместо (4) естественно пользоваться целевой функцией критерия, не зависящей от абсолютной амплитуды спектра, а именно

$$f = \min_s \|sB(v) - \tilde{B}\| < \varepsilon, \quad (5)$$

где s – константа; ε – заданная погрешность.

Можно показать, однако, что вычисление (5) сводится к нахождению коэффициента корреляции. Поиск минимума в (5) приводит к величине $s = \frac{(B(v), \tilde{B})}{\|B(v)\|^2}$. Подстановка этого значения s в (5) даёт для функции f

$$\begin{aligned} f &= \left\| \frac{(B(v), \tilde{B})B(v)}{\|B(v)\|^2} - \tilde{B} \right\|^2 = \frac{(B(v), \tilde{B})^2 \|B(v)\|^2}{\|B(v)\|^4} - 2 \frac{(B(v), \tilde{B})^2}{\|B(v)\|^2} + \|\tilde{B}\|^2 \\ &= \|\tilde{B}\|^2 (1 - \rho^2); \\ \rho &= \frac{(B(v), \tilde{B})}{\|B(v)\| \|\tilde{B}\|} \rightarrow \max, \end{aligned}$$

где ρ – коэффициент корреляции.

Таким образом, в качестве целевой функции критерия восстановления спектра далее будем использовать значение коэффициента корреляции восстановленного спектра с истинным спектром.

В результате задача восстановления спектра требует решения двух последовательных задач. *Первая задача* состоит в построении оператора прямой за-

дачи $\hat{A}$, сопоставляющего известному спектру аналог экспериментально определяемой двумерной интерферограммы:

$$\hat{A}B(v) = \tilde{J}, \quad (6)$$

где $\hat{A} = DA$; D – оператор искажений.

Вторая задача заключается в приближенном решении операторного уравнения (6), то есть в отыскании оператора T , такого, что

$$\tilde{B} = T\tilde{J}, \quad (7)$$

где $\tilde{B}$ – восстановленный спектр. Оператор T может быть представлен в виде $T = \tilde{A}\tilde{D}$; где $\tilde{A}$ – оператор восстановления спектра (обращение преобразования Фурье (1)), а $\tilde{D}$ – оператор устранения искажений.

Для решения первой задачи построен оператор, реализующий характерные для двумерных интерферограмм в ближнем ультрафиолетовом и видимом диапазоне искажения. Для этого были рассмотрены уравнения (6) и (7) с учётом искажений. Оператор искажений D может быть представлен в виде суперпозиции нескольких различных видов искажений:

$$\hat{D} = \prod_k \hat{D}_k.$$

Операторы различных искажений, вообще говоря, некоммутативны, однако для малых искажений можно представить их в виде

$$\hat{D}_k = (\hat{E} + \hat{d}_k),$$

где $\hat{E}$ – единичный оператор; $\hat{d}_k$ – собственно искажение.

Введём оценку величины искажений d_k как

$$d_k = \max_{\|x\| < \varepsilon} \frac{\|\hat{d}_k x\|}{\|x\|},$$

где ε – малый конечный интервал.

Если d_k существуют и малы ($d_k \ll 1$), то

$$\prod_{k=1}^M (\hat{E} + \hat{d}_k) = \hat{E} + \sum_{k=1}^M \hat{d}_k + O(d_k^2), \max_k |d_k| \rightarrow 0,$$

и, следовательно, порядок воздействия искажений не столь важен. Таким образом, малые искажения (в частности, геометрические искажения оптической системы) могут рассматриваться в произвольном порядке.

В работе рассмотрены и моделируются следующие виды искажений: фоновые искажения, искажения оптической системы СФС, нелинейные геометрические искажения, шум. Продемонстрировано влияние каждого вида искажений на восстановленный спектр, а также сделан вывод о необходимости их устранения. Построен оператор D , включающий следующие искажения:

1) фоновые искажения; 2) искажения оптической системы; 3) геометрические искажения.

При моделировании интерферограмм после воздействия оператора D , к двумерной интерферограмме добавляется аддитивный шум в соответствии с моделью (3).

Для решения *второй задачи* построен оператор исправления искажений. С этой целью исправление искажений было разделено на 2 части: 1) исправление искажений непосредственно из двумерной интерферограммы; 2) исправление искажений путём калибровки на тестовых интерферограммах, и создание соответствующего калибровочного файла. Описаны алгоритмы исправления каждого типа искажений, приведены соответствующие графики восстановленных спектров, демонстрирующих эффективность исправления искажений.

Разработанные алгоритмы численного восстановления спектра апробированы в сериях вычислительных экспериментов, где исследуется совместное влияние искажений на двумерную интерферограмму и восстанавливаемый спектр. Модельная двумерная интерферограмма подвергается совместному воздействию искажений (Рис. 1,а), после чего к ней применяется оператор исправления искажений (Рис. 1,б). Затем проводится восстановление спектра.

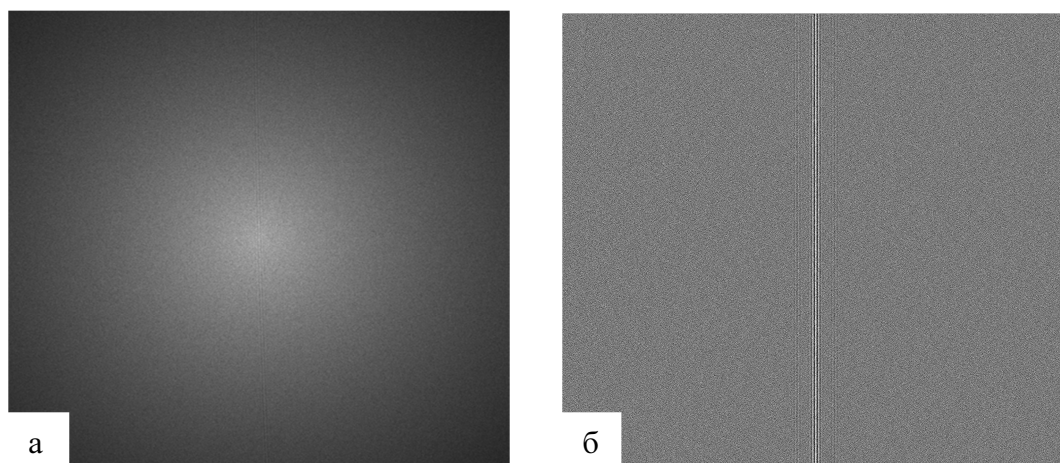


Рис. 1. Искраженная двумерная интерферограмма (а) и исправленная двумерная интерферограмма (б)

Приведены результаты апробации методики решения задачи в сериях вычислительных экспериментов, в результате чего исследовано влияния малых искажений и шумов двумерной интерференционной картины на ошибки решения задачи, а также определены границы применимости разработанной методики в зависимости от уровня шума.

На Рис. 2 представлен график зависимости коэффициента корреляции восстановленного спектра от среднеквадратичного шума искажённой двумерной интерферограммы.

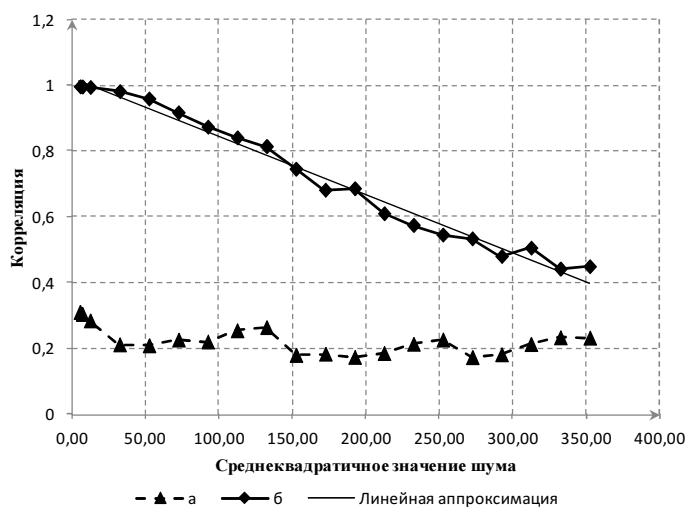


Рис. 2. График зависимости коэффициента корреляции от среднеквадратичного значения шума: а – без использования алгоритмов процесса восстановления спектра; б – при использовании алгоритмов процесса восстановления спектра

Из Рис. 2 видно, что при использовании разработанных алгоритмов коррекции значение коэффициента корреляции восстановленного спектра снижается практически линейно от 1 до 0,4 при увеличении среднеквадратического значения шума от 0 до 350. При отсутствии алгоритмов коррекции значение коэффициента корреляции не превышало величины 0,4.

Третья глава посвящена описанию работы основных модулей разработанного программного комплекса (ПК) на основе разработанных алгоритмов. Представлены архитектура ПК, блок-схемы основных алгоритмов и диаграмма состояний. Отражены задачи, решаемые программным комплексом. Программный комплекс, схема которого представлена на Рис. 3, состоит из двух основных блоков: логического модуля (ЛМ) и программы управления (ПУ).

Программный комплекс решает следующие задачи:

1. Управление аппаратурой СФС: включение-выключение источников возбуждающего излучения, приём цифровых данных от статического Фурье-спектрометра или с накопителя ПЭВМ.
2. Предварительная обработка изображений, представляющих собой двумерные интерференционные картины.
3. Преобразование обработанной двумерной интерферограммы в энергетический спектр вторичного излучения в заданном интервале частот.

4. Обработка спектров, идентификация присутствующих веществ, входящих в базу данных приложения и вычисление их концентраций.

5. Вывод полученной и обработанной информации в текстовом и графическом виде.

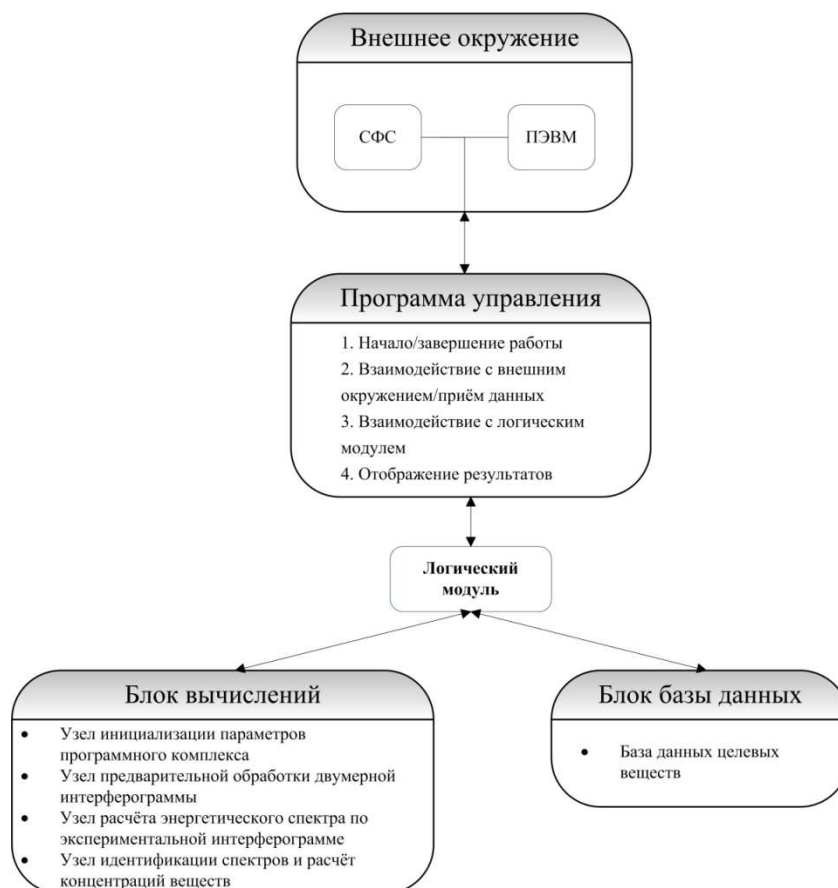


Рис. 3. Структура программного комплекса

Блок вычислений выполняет инициализацию/деинициализацию приложения, обмен данными с программой управления, а также отвечает за предварительную обработку двумерных интерференционных картин, идентификацию спектров и расчёт концентраций веществ. Блок вычислений включает в себя набор узлов, связь между которыми осуществляется за счёт общих структур данных. Каждый узел выполняет отдельно возложенную на него задачу обработки и представления информации, и вместе они отвечают за эффективное функционирование программного комплекса.

Блок базы данных исполнен в виде класса и осуществляет следующие задачи: инициализация спектров базы данных с помощью конфигурационных файлов для каждого источника излучения; обеспечение непрерывного доступа к спектрам базы данных; выполнение деинициализации при завершении работы программного комплекса.

Программа управления осуществляет чтение двумерных интерферограмм с физического носителя или со СФС, производит инициализацию логического модуля, взаимодействует с пользователем посредством графического интерфейса, управляет аппаратной частью СФС, задаёт режим сбора данных, выводит на экран графическую и текстовую информацию о результатах анализа, а также экспортирует новые и импортирует ранее полученные спектральные данные. В главе приведены структуры основных классов, форматы конфигурационных файлов, описаны основные алгоритмы работы и интерфейсы, представлены форматы отчётов по работе программного комплекса и примеры работы программного комплекса.

В **четвертой главе** приведено описание макета статического Фурье-спектрометра, представлена постановка лабораторных экспериментов. Описана процедура определения параметров макета в программном комплексе. Проведён анализ шума двумерных интерферограмм, в результате которого подтверждена обоснованность выбора аддитивной модели шума. Показана эффективность восстановления спектров вторичного излучения веществ с макета СФС в сравнении со спектрами, полученными с дифракционного спектрометра.

Приведено сравнение результатов обработки данных лабораторных экспериментов с результатами обработки тех же данных без применения разработанных алгоритмов (Таблица 1 и Таблица 2).

Сравнение Таблиц 1 и 2 показывает, что использование разработанных алгоритмов процесса восстановления спектра повысило эффективность идентификации веществ на подстилающих поверхностях.

Таблица 1.

Результаты дистанционного распознавания веществ для различных длин волн возбуждающего излучения при использовании разработанных алгоритмов процесса восстановления спектра

№ п/п	База данных Вещество	Антрацен 1	Стильбен 2	Триптофан 3
$\lambda = 280$ нм, расстояние 50 мм, экспозиция 100 мс				
1	Антрацен	0,99	0,35	0,12
2	Стильбен	0,29	0,98	0,46
3	Триптофан	0,14	0,50	0,99
$\lambda = 266$ нм, расстояние 800 мм, экспозиция 10 мс				
1	Антрацен	0,90	0,64	0,29
2	Стильбен	0,47	0,73	0,45
3	Триптофан	0,23	0,41	0,87

Таблица 2.

Результаты дистанционного распознавания веществ для различных длин волн возбуждающего излучения без использования алгоритмов процесса восстановления спектра

№ п/п	База данных Вещество	Антрацен 1	Стильбен 2	Триптофан 3
$\lambda = 280$ нм, расстояние 50 мм, экспозиция 100 мс				
1	Антрацен	0,73	0,17	0,07
2	Стильбен	0,40	0,80	0,29
3	Триптофан	0,36	0,56	0,89
$\lambda = 266$ нм, расстояние 800 мм, экспозиция 10 мс				
1	Антрацен	0,31	0,29	0,31
2	Стильбен	0,29	0,36	0,25
3	Триптофан	0,49	0,46	0,45

Проведена экспериментальная проверка быстродействия обнаружения тестовых веществ на основе разработанных алгоритмов (Таблица 3). В результате проведения сравнительного анализа сделаны выводы о применимости разработанных алгоритмов и их преимуществах.

Таблица 3.

Результаты быстродействия обнаружения тестовых веществ на основе разработанных алгоритмов процесса восстановления спектра

	Экспозиция, с	Время обработки, с	Коеф. схожести / Результат распознавания
С предложенными алгоритмами процесса восстановления спектра	0,1	0,67	0,98 / Триптофан
Без алгоритмов процесса восстановления спектра	0,1	0,56	Не обнаружено
	1		Не обнаружено
	5		Не обнаружено
	6		0,80 / Возможно триптофан
	7		0,84 / Возможно Триптофан
	8		0,94 / Триптофан

В **приложении** приведены: описание структуры классов программного комплекса, описание основных структур, классов, и конфигурационных файлов, применяемых в программном комплексе.

Основные результаты диссертационной работы

1. Построена математическая модель процесса восстановления спектра вторичного излучения в ближней УФ и видимой области спектра из разработанной модели искажённой двумерной интерференционной картины.

2. Разработаны численные алгоритмы процесса восстановления спектра вторичного излучения вещества из искажённой двумерной интерференционной картины. На основе разработанной модели и алгоритмов решена задача восстановления спектра вторичного излучения для широкого круга веществ ближнего УФ и видимого диапазонов длин волн.

3. Разработанные модели и алгоритмы протестированы сериях вычислительных экспериментов. Показано, что при восстановлении спектра из исправленной двумерной интерферограммы зависимость коэффициента корреляции восстановленного спектра с истинным имеет линейный характер в зависимости от среднеквадратичного уровня шума. При отношении сигнал/шум = 5 и среднеквадратичном отклонении $\sigma = 172$ коэффициент корреляции составил 0,6807.

4. Разработан программный комплекс, обладающий возможностью работы как в автономном режиме, так и совместно со статическим Фурье-спектрометром в режиме реального времени. Показано, что применение разработанных численных алгоритмов позволяет восстанавливать спектр вторичного излучения веществ с бóльшим отношением сигнал/шум, чем без них. Также продемонстрировано, что использование разработанных алгоритмов позволяет восстанавливать спектр для последующей идентификации веществ с меньшей экспозицией, вплоть до 9 мс, при этом экспериментальная кривая зависимости коэффициента корреляции от экспозиции имеет линейный характер до 100 мс. Использование разработанных алгоритмов сократило время от получения двумерной интерференционной картины до распознанного вещества с 8 с до 1 с.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Статический Фурье-спектрометр видимого и ближнего ультрафиолетового диапазонов спектра / И. С. Голяк [и др.] // Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер.: Естественные науки. 2009. № 3. С. 10–28 (2,0 п.л/0,69 п.л.).

2. Голяк И. С. Обработка изображений интерферограмм, полученных с помощью статического Фурье-спектрометра // Актуальные проблемы фундаментальных наук: сборник трудов III научно-методической конференции аспирантов и молодых исследователей. М., 2009. С. 89–93. (0,4 п.л/0,4 п.л.).

3. Голяк И. С. Обработка изображений интерферограмм, полученных с помощью статического Фурье-спектрометра // Приложение к журналу «Физическое образование в вузах»: труды конференции конкурса молодых физиков. 2009. Т. 15, № 1. С. П17–П19. (0,13 п.л/0,13 п.л.).

4. Статический Фурье-спектрометр видимого диапазона / И. С. Голяк [и др.] // Известия РАН. Энергетика. 2010. № 2. С. 12–21. (2,0 п.л/0,69 п.л.).

5. Статический Фурье-спектрометр для исследования вторичного излучения видимого диапазона спектра / И. С. Голяк [и др.] // Электромеханические и внутрикамерные процессы в энергетических установках, струйная акустика и диагностика, приборы и методы контроля природной среды, веществ, материалов и изделий: сборник материалов XXII Всероссийской межвузовской научно-технической конференции. Казань, 2010. Ч. 2. С. 265–267. (0,25 п.л/0,15 п.л.).

6. Методика получения и обработки спектральной информации, полученной с помощью статического Фурье-спектрометра / И. С. Голяк [и др.] // Оптика и спектроскопия. 2011. Т. 110, № 3. С. 486–492. (1,3 п.л/0,45 п.л.).

7. Голяк И. С. Алгоритм и программный комплекс для обработки интерферограмм, полученных со статического Фурье-спектрометра // Труды конференции – конкурса молодых физиков. М., 2011. Т. 17, № 1. С. П33. (0,13 п.л/0,13 п.л.).

8. Методика получения интерферограмм со статического Фурье-спектрометра / И. С. Голяк [и др.] // Необратимые процессы в природе и технике: труды VI Всероссийской конференции. М., 2011. Ч. 3. С. 101–104. (0,25 п.л/0,15 п.л.).

9. Голяк И. С. Методика обработки интерферограмм со статического Фурье-спектрометра // Необратимые процессы в природе и технике: труды VI Всероссийской конференции. М., 2011. Ч. 3. С. 104–108. (0,25 п.л/0,25 п.л.).

10. Голяк И. С. Алгоритм и программный комплекс для обработки интерференционных картин со статического Фурье-спектрометра // Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации: труды IV Международной конференции Российского научно-технического общества радиотехники, электроники и связи имени А. С. Попова. Суздаль, 2011. С. 108–110. (0,25 п.л/0,25 п.л.).

11. Голяк И. С., Есаков А. А. К обработке интерферограмм со статического Фурье-спектрометра // Наука и Образование. Электронное научно-техническое издание. 2012. № 6. С. 135–138. DOI: 10.7463/0612.0432616. (0,69 п.л/0,50 п.л.).

12. Голяк И. С. Повышение качества получаемых интерференционных картин со статического Фурье-спектрометра // Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации: труды V Международной конференции Российского научно-технического общества радиотехники, электроники и связи имени А. С. Попова. Суздаль, 2012. С. 180–183. (0,25 п.л/0,25 п.л.).

13. Голяк И. С., Морозов А. Н. Методы оптимизации алгоритма обработки двумерных интерферограмм получаемых статическим Фурье-спектрометром // Физические основы приборостроения. 2013. Т. 2, № 4. С. 69–76. (0,94 п.л/0,80 п.л.).

14. Голяк И. С. Оптимизации обработки двумерных интерферограмм получаемых со статического Фурье-спектрометра // Необратимые процессы в природе и технике: труды VII Всероссийской конференции. М., 2013. Ч. 3. С. 43–46. (0,25 п.л/0,25 п.л.).

15. Голяк И. С., Морозов А. Н. К улучшению двумерных интерференционных картин, получаемых со статического Фурье-спектрометра // Гиперспектральные приборы и технологии: сборник докладов научно-технической конференции. Красногорск, 2013. С. 89–90. (0,13 п.л/0,10 п.л.).

16. Голяк И. С., Морозов А. Н. Численные методы и алгоритмы процесса восстановления спектра по двумерной интерферограмме со статического Фурье-спектрометра // Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации: труды VI Международной конференции Российского научно-технического общества радиотехники, электроники и связи имени А. С. Попова. Суздаль, 2013. С. 216–220. (0,25 п.л/0,20 п.л.).

17. Голяк И. С. Операторный способ описания коррекции двумерных интерференционных картин со статического Фурье-спектрометра // Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации: труды VII Международной конференции Российского научно-технического общества радиотехники, электроники и связи имени А. С. Попова. Суздаль, 2014. С. 218–220. (0,25 п.л/0,25 п.л.).

18. Статический Фурье-спектрометр для проведения экспресс-анализа химических веществ / И. С. Голяк [и др.] // Приборы и техника эксперимента. 2015. № 1. С. 181–182. (0,25 п.л/0,06 п.л.).

19. Голяк И. С. Экспериментальная апробация программного комплекса для восстановления спектров вторичного излучения веществ со Статического Фурье-спектрометра // Необратимые процессы в природе и технике: труды VIII Всероссийской конференции. М., 2015. Ч. 1. С. 26–29. (0,25 п.л/0,25 п.л.).

Подписано к печати . Заказ №
Объём 1, печ.л. Тираж 100 экз.
Типография МГТУ им. Н. Э. Баумана
105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д.5
(499) 263-62-01