

Нейросеть для автоматизации подгонки контуров колебательно-вращательных линий в спектрах высокого разрешения

А.П. Щербаков✉*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 19.04.2024;
после доработки 02.07.2024;
принята к печати 09.09.2024

Статья посвящена проблеме автоматизации подгонки параметров линий в спектрах высокого разрешения, зарегистрированных на современных спектрометрах. При подгонке модельного контура, в силу наличия множества локальных минимумов у минимизируемого среднеквадратичного отклонения, требуется достаточно точное начальное приближение параметров контура линии. Предлагается метод нахождения достаточно точного начального приближения параметров контура линий, основанный на использовании нейронной сети Кохонена. Проведены тесты и сравнение других алгоритмов и сетей для решения данной задачи. Описанный метод может использоваться для обработки колебательно-вращательных спектров и получения баз данных, необходимых для решения задач атмосферного зондирования, молекулярной физики и технических задач.

Ключевые слова: параметры линии поглощения, Фурье-спектрометр, профиль Фойгта, автоматическая обработка, нейронная сеть; absorption line parameters, Fourier transform spectrometer, Voigt profile, automatic processing, neural network.

Введение

Спектры, получаемые на современных Фурье-спектрометрах, содержат десятки и сотни тысяч линий, соответствующих квантовым переходам между колебательно-вращательными состояниями молекул. Анализ таких спектров невозможен без специальных средств автоматизации. Необходимость их разработки связана с атмосферными измерениями [1–3] и изучением физики молекул. Но для

автоматической обработки такие системы автоматизации должны быть устойчивы к самым разным случаям, таким как шум, выход амплитуды за пределы шкалы или перекрывание линий, и принимать взвешенные решения подобно эксперту в данной области.

Самым первым этапом обработки является обнаружение пиков в спектральной кривой. Пример фрагмента спектра молекулы H_2O изображен на рис. 1. Для поиска пиков применяются различные

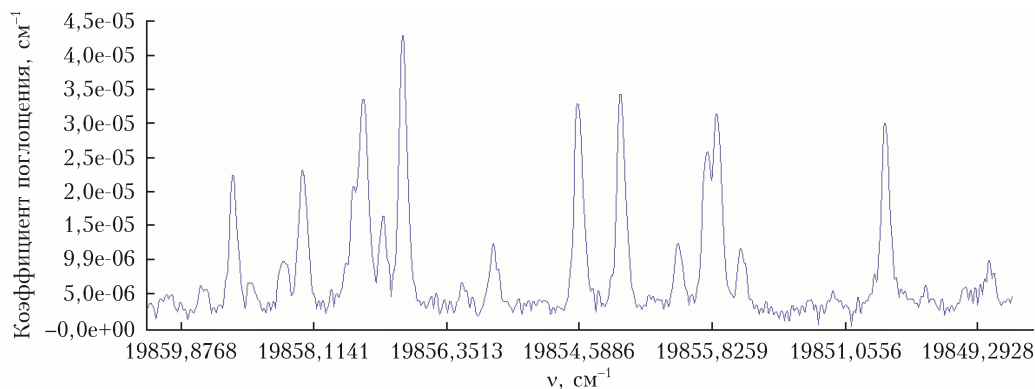


Рис. 1. Фрагмент спектра высокого разрешения молекулы H_2O (см. цветные рисунки на сайте <http://iao.ru/ru/content/vol.37-2024/iss.11>)

* Анатолий Петрович Щербаков (molnija2@inbox.ru).

методы в зависимости от характера обрабатываемого спектра. В работах [4, 5] описываются использование методов нейронинформатики для автоматизации поиска линий и созданная на их основе автоматизированная система. Распознавание пиков производится перемещением сканирующего окна вдоль спектральной кривой, как это показано на рис. 2. Количество точек в сканирующем окне одинаковое независимо от разрешения спектра. Точки располагаются эквидистантно по частоте с применением процедуры интерполяции. Полученные значения в точках интерполяции используются в качестве вектора признаков для автоматического классификатора. Этот вектор нормируется по величине с помощью общего для всех его компонент множителя и общей аддитивной добавки так, чтобы его наибольшая и наименьшая компоненты уместались в диапазон $[-1; +1]$. Этим устраняется зависимость от изменяющихся от линии к линии абсолютных величин коэффициента поглощения в спектре. Тогда классификатором целенаправленно анализируется только форма сигнала. Интеллектуальная система, описанная в работах [4, 5], обучается на примерах, указываемых пользователем. Методы обнаружения пиков через анализ значений производных, в отличие от описанного в этих работах подхода, не учитывают форму контура линии и поэтому не способны различать шумовые пики.

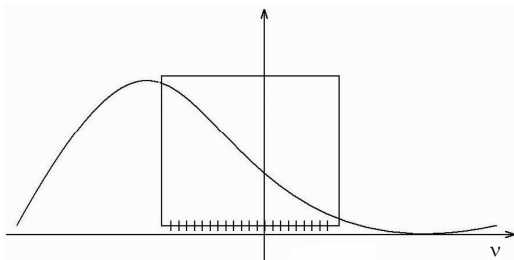


Рис. 2. Пример сканирующего окна

После обнаружения пиков необходимо их объединение по группам, в которые входят близко расположенные линии, влияющие друг на друга и поэтому требующие совместной подгонки их параметров. Группировка реализуется с помощью обычного процедурного программирования с использованием величин расстояния между центрами спектральных линий или по «провалу» значений спектральной кривой между ними.

После описанных этапов обработки необходима подгонка модельных контуров спектральных линий к обнаруженным в спектре группам. Тогда мы получим максимально точные значения частот центров линий, их интенсивность, полуширину и прочие параметры, используемые для уточнения моделей молекул и в задачах атмосферного зондирования.

Поскольку применяемые на практике модели контуров спектральных линий нелинейны по перечисленным искомым параметрам, их подгонка по методу наименьших квадратов (МНК) производится итерационными процедурами. В силу наличия мно-

жества локальных минимумов у минимизируемого среднеквадратичного отклонения с целью нахождения глобального минимума требуется достаточно точное начальное приближение параметров контура. Вторым препятствием является сложное взаимное влияние между параметрами модели, приводящее к нестабильному, иногда расходящемуся процессу подгонки. Такие задачи относятся к классу *некорректных* [6] и решаются с привлечением априорной информации, например в виде стабилизирующего функционала, прибавляемого к основному минимизируемому функционалу среднеквадратичной ошибки.

Цель работы — создание алгоритма для получения начального приближения параметров центров линий и их полуширин для обеспечения дальнейшего устойчивого сходящегося процесса подгонки по МНК.

По перечисленным выше причинам начальное приближение параметров линии должно производиться без использования итерационных процедур, имеющих вероятность расходимости. Наличие в пространстве искомым параметров *потенциальных барьеров* локальных минимумов среднеквадратичного отклонения исключает применение итерационных процедур градиентного типа.

Методики построения систем искусственного интеллекта находят все большее применение в самых разных областях науки и техники. При решении задач автоматизации в каждом конкретном случае приходится делать выбор наиболее подходящего метода или алгоритма. Этот выбор определяется специфическими условиями задачи, имеющимися техническими возможностями и средствами разработки. В настоящей работе был проведен сравнительный анализ результатов использования некоторых методов теории распознавания образов [7, 8] и моделей нейронных сетей [9, 10] при решении описанной выше спектроскопической задачи.

Общее описание алгоритма

Предлагаемый алгоритм работает отдельно с каждой линией и состоит из нескольких этапов:

- 1) вычисление начального приближения положения центра линии;
- 2) вычисление начального приближения полуширины линии и ее интенсивности;
- 3) уточнение полученных оценок положения линии, ее полуширины и интенсивности.

Перед началом работы со спектром пользователю необходимо задать ширину искомым линий. Для этого используется любая сильная одиночная линия в спектре, контур которой не искажен шумами и соседними линиями. Простым перебором отсчетов спектра в ограниченном интервале можно найти вершину пика и частоты, соответствующие ширине линии на половине ее высоты слева и справа от вершины (рис. 3). Согласно принятому стандарту в спектроскопии применяется *полуширина* — половина ширины линии на половине ее высоты.

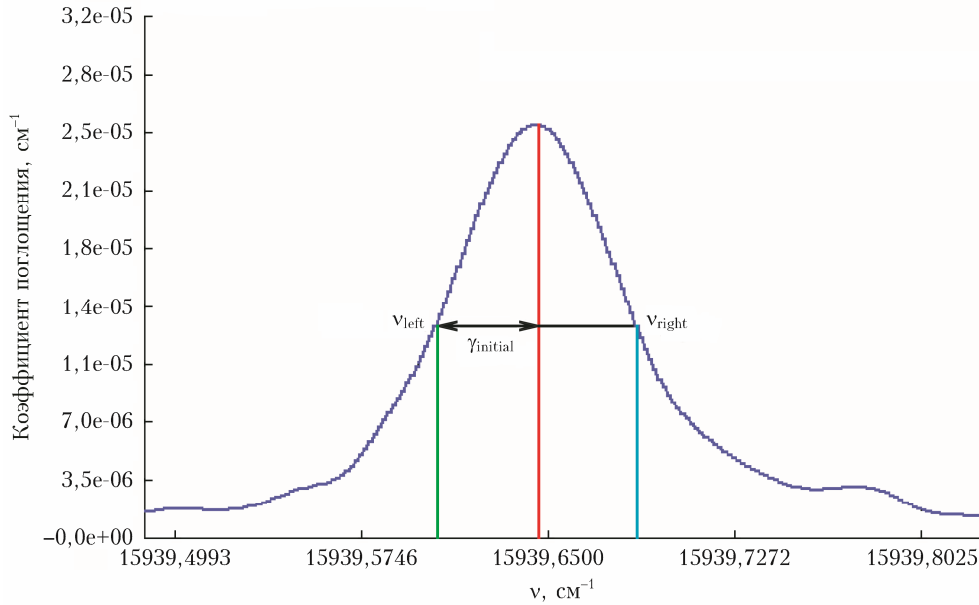


Рис. 3. Фрагмент спектра, иллюстрирующий полуширину на полувысоте

Задать полуширины искоемых линий достаточно один раз, в самом начале обработки спектра, используя сильную одиночную линию. Далее эту величину мы будем обозначать символом

$$\gamma_{\text{initial}} = \frac{|v_{\text{left}} - v_{\text{right}}|}{2}, \quad (1)$$

где v_{left} , v_{right} — частоты правой и левой метки на половине высоты линии согласно рис. 3.

Как уже отмечалось, после нахождения и разметки линий в спектре, например с помощью методов, описанных в работах [4, 5], или вручную, следует подгонка к ним модельных контуров, успешное завершение которой зависит от начального приближения для главных параметров, имеющих наибольшее влияние на контур линии, — это частота центра линии, *лоренцевская полуширина линии* и ее интенсивность. В реализованном и испытанном варианте процедуры использовался контур Фойгта (Voigt), представляющий собой свертку контура Доплера и контура Лоренца. Уширение линий из-за эффекта Доплера обычно принимается постоянным в достаточно узком диапазоне спектра (когда доплеровская полуширина много меньше частоты центра линии). Лоренцевская полуширина является одним из искоемых параметров при подгонке модельного контура.

В предлагаемом алгоритме оценка начального приближения начинается с нахождения более точного положения центра линии (первый этап). Это делается простым алгоритмом поиска пика второй производной в окрестности отмеченного пика. Перебор точек осуществляется по сетке с шагом в одну сотую от частотного шага между отсчетами спектра.

Вторым этапом является оценка полуширины линии с помощью нейросети Кохонена. Примененный алгоритм позволяет одновременно оценить и интенсивность линии.

На третьем этапе производится уточнение всех трех найденных оценок. Для этого используются процедура подгонки, комбинирующая итерационный метод наименьших квадратов с другими поисковыми методами. Таким методом может быть последовательный перебор одного из параметров контура по сетке с некоторым шагом. При этом в каждом узле сетки производится подгонка модельного контура к спектральной кривой по МНК при фиксированном значении полуширины линии в качестве константы.

Ниже приведен общий вид используемой модели Фойгта, описывающей одновременно группу из нескольких линий:

$$f(\nu) = \sum_{i=1}^L A_i \cdot G(\nu - \nu_i^0, \gamma_i^l) + B_0 + B_1 \cdot \nu, \quad (2)$$

где ν — частота; ν_i^0 , γ_i^l , A_i — центр, лоренцевская полуширина и интенсивность линии под номером i под общим контуром, состоящим из L линий; B_0 , B_1 — высота и наклон фоновой линии; G — контур Фойгта. Здесь опущены прочие параметры контура, отвечающие за те или иные физические процессы, влияющие на форму линий.

Определение полуширины линий производилось отдельно для каждой линии в группе (2) с использованием модели контура Фойгта для одиночной линии без фоновых слагаемых B_0 , B_1 :

$$f^{\gamma}(\nu | \nu^0, \gamma^l) = A^{\text{Norm}} \cdot G(\nu - \nu^0, \gamma^l), \quad (3)$$

где ν^0 , γ^l — центр и лоренцевская полуширина; $A^{\text{Norm}} = 1/(G(0, \gamma^l))$ — множитель, нормирующий (3) на единичное значение в пике линии (в точке $\nu = \nu^0$), зависящий от полуширины γ^l .

Сеть Кохонена в оценке полуширины и интенсивности линии

Сеть Кохонена представляет собой группу элементов, выходное значение которых определяется выражением

$$y_j(\mathbf{x}) = w_{j0} + \sum_{k=1}^N w_{jk} \cdot x_k, \quad (4)$$

где $w_{j0}, w_{j1}, w_{j2}, \dots, w_{jN}$ — весовые коэффициенты; $\mathbf{x}$ — вектор N -мерного пространства $X = \{x\}$ значений признаков распознаваемого объекта,

$$X \equiv \{\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)\}. \quad (5)$$

Сеть Кохонена работает по принципу «победитель забирает все». На вход сети подается вектор признаков $\mathbf{x}$. Ответом считается номер нейрона с максимальным значением. Этому выходу присваивается значение «0», остальные выходы принимают значение «1». При наличии нескольких максимальных значений на выходах $y_j(\mathbf{x})$ всем им присваивается значение «1». В некоторых реализациях «единичным» назначается первый выходной элемент из назначенного списка.

Векторы признаков $\mathbf{x}$ в нашей задаче являются массивами значений спектральной кривой в точках, расположенных эквидистантно в некотором фиксированном интервале, пропорциональном принятой выше начальной полуширине (1). В настоящей работе использовался интервал $\Gamma = \gamma_{\text{initial}} \cdot \frac{3}{2}$. При этом

центр интервала помещается в точку центра линии, найденного перед этим с использованием второй производной. Количество точек N всегда одинаково, а значения между отсчетами вычисляются путем интерполяции. В данной задаче было использовано количество признаков $N = 21$. Эти числа содержат информацию о форме кривой анализируемого участка и тем самым позволяют оценить полуширину линии. Во избежание влияния наклона фоновой линии она вычитается из входных векторов сети, как показано на рис. 4. Здесь видно, что правый и левый края линии отличаются по высоте. По этим значениям определяется линейная модель фона, при вычитании которой входной образ выравнивается, как показано на нижнем графике рис. 4.

При оценке полуширин линий в настоящей работе использовалась *геометрическая* схема сети Кохонена (карты Кохонена), где под «победителем» понимается «ближайший» из эталонных векторов $\mathbf{w}_j$ к входному вектору $\mathbf{x}$:

$$\gamma_j^{\min} = \arg \min_j \|\mathbf{x} - \mathbf{w}_j\|. \quad (6)$$

Здесь в прямых скобках указывается Евклидово расстояние

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j) = \|\mathbf{x} - \mathbf{w}_j\| = \sqrt{\sum_{k=1}^N (w_{jk} - x_k)^2}. \quad (7)$$

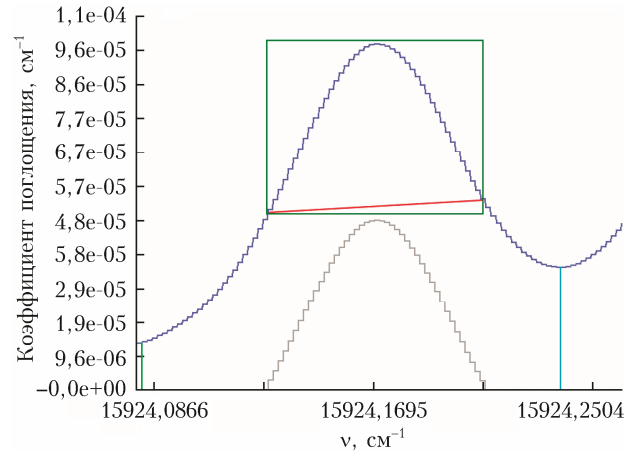


Рис. 4. Пример вычисления наклонного фона и его вычитания из входного вектора нейросети

Схема (4) аналитически выводится из (6) через раскрытие скобок в правой части (7). Мы получим слагаемое, соответствующее пороговым добавкам w_{j0} в формуле (4), и еще одно слагаемое, которое одинаково для всех нейронов и поэтому может быть опущено. В форме (6) эта сеть и была использована для оценки полуширин линий. Эталонные векторы $\mathbf{w}_j$, минуя стохастические процедуры обучения, заполняются значениями модели (3) при заданной полуширине $\gamma_j^{\text{паттем}}$. По аналогии с вектором $\mathbf{x}$ значения компонент векторов $\mathbf{w}_j$ располагаются эквидистантно в интервале шириной (7). Центр интервала при этом помещается в пике модели (3), т.е. $\nu = \nu^0$.

Выходом сети является номер эталона $\mathbf{w}_j$ с заранее известной полушириной $\gamma_j^{\text{паттем}}$, ближайшего к подаваемому на вход вектору признаков $\mathbf{x}$ вида (5), содержащему величины поглощения на обрабатываемом фрагменте спектра. Обучение нейросети в нашем случае отличается от стандартного алгоритма и имеет более простой сценарий. Количество эталонных векторов и соответствующих им полуширин определяет количество нейронов в используемой нами сети Кохонена. Это количество полностью совпадает с длиной обучающей последовательности. В данной работе использовался набор из 200 эталонных векторов, вычисленных с помощью (3), с полушириной, задаваемой сеткой значений

$$\gamma_j^{\text{паттем}} = \gamma_{\min} + \left(\frac{j \cdot (\gamma_{\max} - \gamma_{\min})}{200} \right), \quad (8)$$

где $\gamma_{\min}, \gamma_{\max}$ — интервал, в котором находится искомая полуширина; j — номер эталона. В настоящей работе использовались граничные значения $\gamma_{\min} = \gamma_{\text{initial}} \cdot 0,1$, $\gamma_{\max} = \gamma_{\text{initial}} \cdot 2$. Величина γ_{initial} определена ранее в (1). Примеры четырех различных эталонов изображены на рис. 5. Если точки, соответствующие этим величинам для всех компонент эталона, соединить прямыми отрезками, то полученная кривая будет иметь форму вершины эталонного (обучающего) контура соответствующей полуширины. Исходя из этого, векторы $\mathbf{w}_j$ содержат информацию о форме вершины эталонного контура.

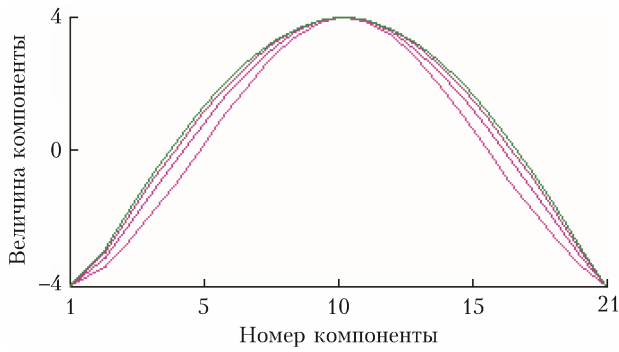


Рис. 5. Примеры четырех эталонных векторов для линий различной полуширины

Таким образом решается проблема составления обучающей последовательности образов и ответов «учителя». Совокупность эталонных векторов $\mathbf{w}_j$ генерируется заранее благодаря имеющейся **точной** априорной информации в модели (1) для каждого выходного нейрона, соответствующего полуширине $\gamma_j^{\text{паттерн}}$. Это исключает субъективный фактор оператора и влияние шумов на тренировочной спектральной кривой, избавляет от затрат времени на построение и настройку стохастических алгоритмов обучения. Схема (6) использует в качестве критерия квадратичное расстояние (7), идентичное критерию из МНК, и, по сути, является его неитерационным аналогом, заранее гарантируя наилучшее соответствие решаемой задаче. В результате такое решение показало себя наилучшим и простым в повторении.

Компоненты $\mathbf{x}$ и $\mathbf{w}_j$ нормируются на диапазон $[-4; +4]$ для устранения зависимости от абсолютных значений поглощения в спектре. Выбор диапазона обусловлен удобством контроля, отладки и исследования других типов нейросетей, требующих подобную нормировку. В силу формы контура, вычисляемого по формуле (1), максимальные по величине компоненты находятся посередине массива, а минимальные — на границах массивов, как это видно на рис. 5. Значения функции контура (3) на границах интервала зависят от пропорции между полушириной $\gamma_j^{\text{паттерн}}$ и шириной интервала Γ . Так, более узкие линии сравнительно большей частью умещаются в заданный интервал и поэтому имеют на краях меньшие значения. Следовательно, для линий с разной полушириной будут различаться и пропорции между значениями по краям интервала Γ и значениями в максимуме пика. Эта пропорция позволяет получать одновременно с полушириной оценку интенсивности линии. Для вычисления интенсивности линии достаточно умножить разницу между максимумом и минимумом в интервале шириной Γ для линии в спектре на коэффициент, связанный с упомянутой пропорцией для эталона, указанного сетью, который оказался ближайшим по расстоянию (7) к данному пику. Полученное значение необходимо умножить на нормировочный коэффициент $A^{\text{норм}}$, используемый в (3).

Таким образом мы получаем оценки начального приближения для полуширины и интенсивности линии.

Другие сети и алгоритмы

Для получения оценки полуширины линий были опробованы другие типы нейросетей. Сеть «обратного распространения ошибки», подробнее описанная в [9, 10], показала работоспособность в данной задаче, но потребовала более длительного процесса обучения: порядка нескольких минут против нескольких долей секунд для реализованной сети Кохонена. При этом по устойчивости к шумам в спектре эта сеть существенно уступала сети Кохонена.

Также была испытана *перцептронная* схема *метода потенциальных функций*. Она имеет некоторые сходства со схемой Кохонена (6), если заменить меру расстояния (7) на меру «близости» $K(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j)$, используя, например, экспоненту

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j) = \exp\left(-\frac{\rho(\mathbf{x} - \mathbf{w}_j)}{h_x}\right), \quad (9)$$

где h_x — некоторый параметр ширины «потенциальной функции» $K(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j)$. Если взять $K(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j)$ в виде разложения в ряд по ортогональному базису

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j) = \sum_{i=0}^M \psi_i(\mathbf{x})\psi_i(\mathbf{w}_j), \quad (10)$$

где M — длина ряда; $\psi_i(\mathbf{x})$ — ортогональный набор функций на пространстве X (5), то после аналитического преобразования, описанного в [7, 8], выходные функции нейросети могут быть записаны в виде разложения по этому же базису:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^M c_i \psi_i(\mathbf{x}) \quad (11)$$

(c_i — коэффициенты разложения). В этом случае пошаговый процесс обучения сводится к рекуррентной процедуре, преобразующей коэффициенты c_i , с использованием обучающего примера и ответа «учителя». Базисные функции $\psi_i(\mathbf{x})$ на N -мерном пространстве представляют собой все произведения вида

$$\psi_i(\mathbf{x}) = \prod_{k_1 + k_2 + \dots + k_N \leq L_0} \phi_{k_1}(x_1) \cdot \phi_{k_2}(x_2) \cdot \dots \cdot \phi_{k_N}(x_N), \quad (12)$$

суммарная степень которых не превышает некоторый предел L_0 ; $\phi_i(\xi)$ — полный ортонормированный базис функций одной переменной. Обучение такой схемы подробно описано в [7, 8].

В качестве обучающих значений (ответов «учителя»), необходимых для определения параметров c_i выходной функции (11), использовались значения полуширин (8), соответствующие подаваемым на вход сети эталонным образам, вычисленным

по формуле (1). Такой алгоритм показал более быструю сходимость процесса обучения, порядка 0,5–1 мин, но уступал сети Кохонена как по скорости обучения, так и по устойчивости к шумам в спектре. Кроме того, компоненты входных векторов этого классификатора приходится нормировать к нулевому среднему и одинаковой амплитуде с целью обеспечения корректного диапазона входных величин для базисных функций. Для использованных в настоящей работе функций Эрмита оптимальный диапазон изменения входных данных находится в интервале $[-2,5; +2,5]$. Зависимость этой реализации от диапазона входных значений требует дополнительных алгоритмов настроек входных данных при переходе от одного спектра к другому. Это затрудняет использование схемы (11) и делает ее менее надежной.

Вторичное приближение. Уточнение центра, полуширины и интенсивности линии

Полученные в предыдущих разделах оценки могут быть уточнены благодаря предлагаемому в настоящей работе подходу, в основе которого лежит комбинирование итерационного алгоритма МНК с альтернативными поисковыми методами. Для этого в подгонке по МНК те искомые параметры, включение которых с большой вероятностью приводит к расходимости подгонки, фиксируются как константы. В данной задаче такими параметрами являются центры и полуширины линий. При этом каждый из таких параметров изменяется поочередно простым перебором по сетке с некоторым шагом в определенном интервале вокруг полученной ранее оценки. В данной задаче необходимо осуществлять вычисления с использованием схемы для группы линий под одним контуром в виде (2) вместо одиночных линий (3), тем самым учитывая в подгонке общий фон и влияние интенсивностей всех линий в этой группе. На каждом шаге перебора производится подгонка по МНК интенсивностей линий, параметров высоты фона и угла его наклона. Минимальная среднеквадратичная ошибка дает искомое значение параметра, по которому проводится перебор. Одновременный перебор по двум и более параметрам контура (2) требует существенно больше времени и поэтому не использовался. Поскольку при переборе взаимное влияние параметров центра и полуширины между соседними линиями ослабевает, одновременный перебор параметров одного и того же типа для двух и более линий становится нецелесообразным.

В настоящей работе вторичное приближение осуществляется в два шага. Первый шаг состоит в поочередном переборе параметра *центра* каждой из линий в группе с подгонкой интенсивностей всех линий и параметров фона. При подгонке центры и ширины всех линий фиксируются как константы. По одному из центров идет перебор. В результате поочередно определяются частоты центров, дающие минимум среднеквадратичной ошибки.

Вторым шагом алгоритма уточнения является поочередный перебор *полуширин* линий контура (2) по аналогичному принципу с подгонкой интенсивностей всех линий и параметров фона. Центры и ширины всех линий в подгонке по МНК фиксируются как константы. Поочередно по одной из линий из группы (2) идет перебор значений *полуширины*.

В качестве оценки доверительного интервала для полученных на этом этапе оценок центров и полуширин могут быть взяты величины шагов сетки перебора, нормированные (деленные) на простую оценку производной от среднеквадратичной ошибки в найденной точке минимума.

На рис. 6 представлена общая блок-схема алгоритма получения начального приближения параметров контура.

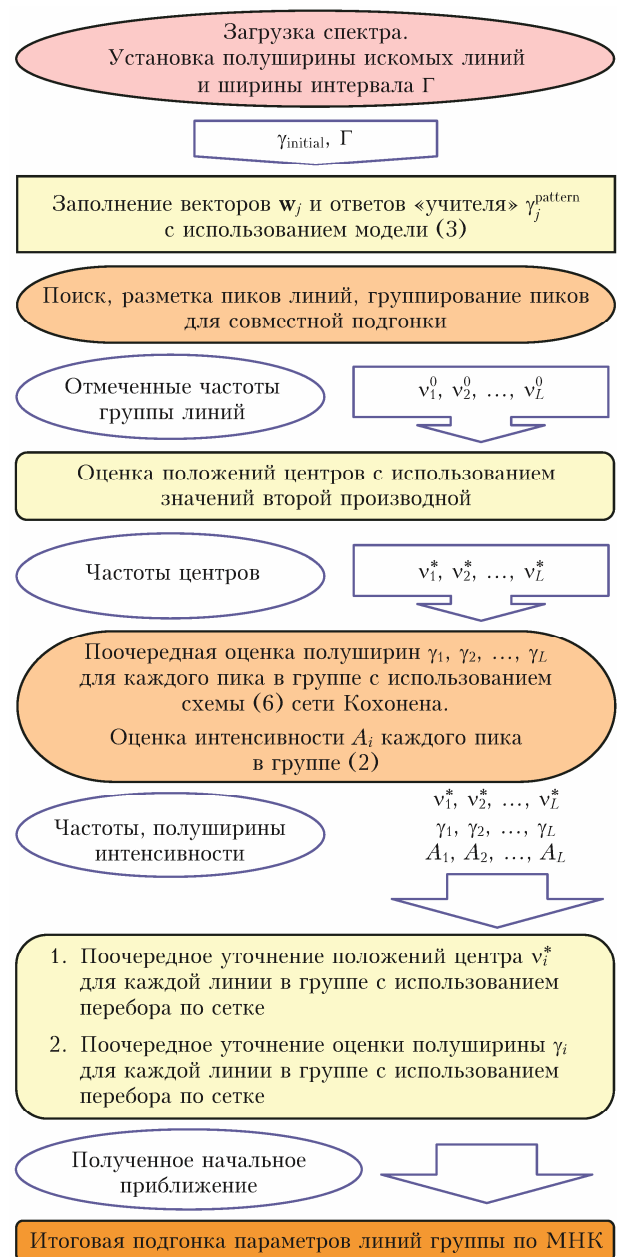


Рис. 6. Общая блок-схема алгоритма

На рис. 6 представлены все этапы обработки спектра. После установки ширины искоемых линий определяются векторы w_j сети Кохонена. Затем поиск и разметка пиков линий, группирование пиков для совместной подгонки производятся ранее разработанными процедурами, описанными в [4, 5]. Далее с помощью сети Кохонена происходит непосредственно вычисление начальных приближений положения линий, их полуширин и интенсивностей.

Завершается обработка уточнением положений и полуширин линий с помощью описанного перебора по сетке. На заключительном этапе начальные значения параметров линий передаются для процедуры подгонки по МНК с целью получения итоговых оценок. Эти значения могут использоваться как начальное приближение при подгонке и одновременно как априорная информация для применения регуляции, описанной в [5, 6].

Практика показала целесообразность возможности для пользователя отключать процедуру вторичного приближения в случаях, когда время имеет приоритетное значение. При учете аппаратной функции спектрометра эта процедура требует значительно большего времени, поскольку при этом многократно вычисляется свертка контура Фойгта с аппаратной функцией прибора.

Проведенные испытания показали, что после вторичного уточнения параметры близки к значениям последующей итоговой подгонки по МНК. Отличия в большинстве случаев слишком малы и их трудно увидеть на графиках функций (2) до и после итоговой подгонки. Среднее различие соответствующих расчетных кривых после оценки начального приближения и полной итоговой подгонки составляет около 2%. Для начального приближения это избыточная точность.

Без вторичного приближения сеть Кохонена (6) обеспечивает оценку начального приближения полуширины и интенсивности линий с точностью 3–5%. Этого достаточно для сходимости процесса подгонки параметров спектральных линий. Вероятность сходимости повышается при использовании полученного начального приближения для регуляризации по методу из [6], реализованному в работах [4, 5].

Заключение

Точность получаемых оценок параметров линий указывает на целесообразность использования сети Кохонена по схеме (6). Как уже было отмечено ранее, описанный алгоритм обучения, использующий для определения параметров сети имеющуюся точную априорную информацию о классах опознаваемых объектов, выигрывает по сравнению с другими методами в точности, надежности, простоте реализации и легкости повторения. Это зако-

номерно, поскольку сетью используется критерий квадратичного расстояния (7), отвечающий МНК («учителю»). Важно, что при этом алгоритм не содержит итерационный процесс — в этом главная идея настоящей работы.

Испытания алгоритма проходили на группах линий, подгонка которых расходилась и требовала вмешательства специалиста и ручного управления режимами подгонки, чтобы направить итерационный процесс к искомому решению. Для каждой такой группы линий могут требоваться десятки минут кропотливого ручного труда. Получаемое разработанным алгоритмом начальное приближение позволяет значительно уменьшить вероятность расходимости процесса подгонки и сократить эти трудозатраты.

Дальнейшим планируемым этапом развития автоматической обработки спектров является повышение устойчивости процедуры итоговой подгонки. Это особенно актуально при использовании современных, более сложных моделей контуров линий.

Благодарности. Настоящая статья не могла бы состояться без поддержки специалистов по молекулярной спектроскопии А.Д. Быкова, Л.Н. Синицы и других сотрудников Лаборатории молекулярной спектроскопии Института оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения РАН.

Финансирование. Работа выполнена в рамках госзадания ИОА СО РАН.

Список литературы

1. Куряк А.Н., Тихомиров Б.А. Влияние водяного пара на поглощение излучения 266 нм алюминиевым оптическим зеркалом // Оптика атмосф. и океана. 2018. Т. 31, № 10. С. 791–793. DOI: 10.15372/AOO20181003.
2. Василенко И.А., Науменко О.В. Экспертный список линий поглощения молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в диапазоне 2000–3000 cm^{-1} // Оптика атмосф. и океана. 2020. Т. 33, № 5. С. 342–346. DOI: 10.15372/AOO20200503; Vasilenko I.A., Naumenko O.V., Horneman V.-M. Expert list of absorption lines of the SO_2 molecule in the 2000–3000 cm^{-1} spectral region // Atmos. Ocean. Opt. 2020. V. 33, N 5. P. 443–448.
3. Ромашенко О.П., Корнев А.С., Зон Б.А. Поглощение лазерного излучения в атмосфере Титана // Оптика атмосф. и океана. 2020. Т. 33, № 5. С. 329–333. DOI: 10.15372/AOO20200501; Romashenko O.P., Kornev A.S., Zon B.A. Laser radiation absorption in the atmosphere of Titan // Atmos. Ocean. Opt. 2020. V. 33, N 5. P. 439–442.
4. Shcherbakov A.P., Pshenichnicov A.M. Computer-aided system for automatic peak searching and contour fitting in molecular spectra // Proc. SPIE. 2000. N 4341. P. 60–63. DOI: 10.1117/12.411924.
5. Круглова Т.В., Шербаков А.П. Автоматический поиск линий в молекулярных спектрах на основе методов непараметрической статистики. Регуляризация в оценке параметров спектральных линий // Опт. и спектроскоп. 2011. Т. 111, № 3. С. 383–386.
6. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1979. 285 с.

7. *Левин Л.Л.* Введение в теорию распознавания образов: учеб. пособие. Томск: ТГУ, 1982, 2004, 2008. 97 с.
8. *Айзерман М.А., Браверман Э.И., Розоноэр Л.И.* Метод потенциальных функций в задачах обучения машин. М.: Наука, 1970. 384 с.
9. *Хайкин С.* Нейронные сети: полный курс / пер. с англ. М.: Вильямс, 2008. 1103 с.
10. *Fausett Laurene V.* Fundamentals of Neural Networks: Architectures, Algorithms and Applications. Pearson Education, 2006. 467 p.

***A.P. Shcherbakov.* Neural network for fitting vibrational-rotational line contours in high-resolution spectra.**

The article is devoted to the problem of automation of fitting lines parameters in high-resolution spectra recorded at modern spectrometers. When fitting a model contour, due to the presence of many local minima in the minimized standard deviation, a sufficiently accurate initial approximation of line profile parameters is required. The article proposes a method for finding a sufficiently accurate initial approximation of line profile parameters for the convergence of the fitting process. The method is based on the Kohonen neural network. Tests and comparison of other algorithms and networks for solving this problem are carried out. The suggested method can be used to process vibrational-rotational spectra and obtain databases for solving problems of atmospheric optics, molecular physics, and engineering problems.