

基于遗传算法的星族合成参数估计*

韩金姝[†]

(德州学院计算机系 德州 253023)

摘要 对于星系这类恒星复合天体, 快速、准确地估计星族合成参数, 是利用星族合成方法有效处理海量星系光谱的关键. 将遗传算法与模拟退火算法相结合, 在模拟退火算法的基础上, 发挥遗传算法全局搜索能力强、收敛速度快的优势, 两种算法互补. 实验结果表明, 在星族合成参数估计的速度与准确度方面, 遗传-模拟退火结合算法优于单一的模拟退火算法.

关键词 星系: 基本参数, 星系: 星族, 技术: 光谱, 方法: 数据分析

中图分类号: P157; **文献标识码**: A

1 引言

星系的观测光谱包含星系的形成、运动、结构与演化等丰富信息, 是揭示宇宙的起源、演化、宇宙大尺度结构等物理性质的基础. 对于星系这类恒星复合天体, 星族合成方法是分析星系光谱的有效方法之一. 星族合成方法利用恒星演化轨迹与恒星光谱库, 对星系观测光谱进行拟合, 通过对拟合参数的估计与比较, 分析星系光谱的星族成分, 不仅可以得到星系自身的性质, 如年龄、金属丰度、恒星形成历史、质光比等, 而且可以作为研究其他天文问题(如活动星系核)的辅助手段^[1-5].

目前, 随着越来越多光谱巡天项目的实施, 如SDSS^[6-7](Sloan Digital Sky Survey)、LAMOST^[8-10](Large Sky Area Multi-Object Fiber Spectroscopic Telescope)等, 星系的观测光谱资源日益丰富. 对于海量星系光谱, 采用自动处理算法快速、准确地估计星族合成参数, 是发挥星族合成方法有效性的关键. 估计星族合成参数的实质是: 在参数空间中搜索, 使得模型光谱与被拟合的观测光谱之间的 χ^2 最小. 已有的方法^[11-13]采用Metropolis模拟退火算法(SA, Simulated Annealing)与Markov链^[14]. 尽管文献[15]证明, 模拟退火算法从任意初始点开始, 若按照一定条件产生足够长的Markov链, 则算法以概率1.0收敛于全局极小点. 但是, 实际运行时, 由于Markov链的长度与运算时间都是有限的, 因此, 算法通常表现为较强的局部搜索能力, 而全局搜索能力较差, 且最终的收敛结果受初始值影响较大.

2014-05-09收到原稿, 2014-10-08收到修改稿

*山东省自然科学基金项目(ZR2012AM008)及国家自然科学基金项目(11203006, 11303003) 资助

[†]hanjs72@sina.cn

另一方面, 遗传算法^[16-19](GA, Genetic Algorithm)模拟自然界中生物的遗传与进化过程, 从参数空间中的多点出发, 并行搜索, 通过选择、交叉与变异, 能够快速收敛至全局最优解的90%左右, 且便于硬件的并行实现. 但是, 之后收敛速度变慢, 需要较多的迭代次数与时间, 才能达到真正的最优解. 因此, 遗传算法是一种全局搜索能力强, 而局部搜索能力较差的算法.

本文将遗传算法与模拟退火算法相结合, 应用于星族合成参数估计. 两种算法互补, 在SA算法的基础上, 发挥GA全局搜索能力强、收敛速度快的优势. 实验结果显示, 在星族合成参数估计的速度与准确度方面, GA-SA结合算法优于单一的SA算法. 本文结构如下: 首先陈述星族合成方法、基于SA算法的星族合成参数估计, 之后陈述GA算法及GA-SA结合算法原理与步骤, 最后是实验与讨论.

2 星族合成方法与参数估计

星族合成方法, 是利用光谱特征信息^[20-21], 例如不同波长覆盖、不同分辨率条件下的星系中恒星成分给出的谱能量分布, 或利用整条光谱信息, 通过光谱拟合来估计星族合成参数. 具体来说, 对于一条观测光谱 $\mathbf{S}_{\text{OBS}\lambda}$, 星族合成方法利用 k 条来自于演化星族合成模型的、具有不同年龄与金属丰度的简单星族(SSP, Simple Stellar Population), 构建模型光谱, 使得模型光谱逼近观测光谱. 模型光谱 $\mathbf{S}_{\text{M}\lambda}$ 表示为:

$$\mathbf{S}_{\text{M}\lambda} = \mathbf{S}_{\text{M}\lambda_0} \left(\sum_{i=1}^k \omega_i P_{i,\lambda} r_\lambda \right) \otimes \mathbf{L}(\nu, \sigma), \quad (1)$$

其中, λ 是光谱波长, λ_0 是光谱归一化波长, $\mathbf{S}_{\text{M}\lambda_0}$ 是在 λ_0 处的合成流量, $P_{i,\lambda}$ 是第 i 条已经在 λ_0 处归一化的SSP在 λ 处的值. 消光项 $r_\lambda \equiv 10^{-0.4(A_\lambda - A_{\lambda_0})}$, 是用前景尘埃的消光建模, 用 v 波段的 A_v 参数表示^[22]. 权重 ω 是星族合成参数向量, 每一个 $\omega_i (i = 1, 2, \dots, k)$ 表示年龄为 g_i 、金属丰度为 Z_i 的SSP在 λ_0 处对模型光谱流量的贡献率. 高斯分布 $\mathbf{L}(\nu, \sigma)$ 表示以速度 ν 为中心, 并被致宽 σ 的视向恒星运动模型. 星族合成参数估计时, 首先令 ν 与 σ 取某值, 如 $\nu = 0$, $\sigma = 150 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$, 然后估计 ω 与 A_v . 之后, 可以根据所研究的具体问题的需要, 在已估计的 ω 与 A_v 基础上, 对 ν 与 σ 优化, 或者也可以省略这一步, 则是一种相对理想化的情况. 本文的测试实验采用后者.

星族合成参数估计的实质是: 在参数空间中搜索, 使得模型光谱与被拟合的观测光谱之间的 χ^2 最小. χ^2 表示为:

$$\chi^2 = \sum_{\lambda} [(\mathbf{S}_{\text{M}\lambda} - \mathbf{S}_{\text{OBS}\lambda}) \alpha_\lambda]^2, \quad (2)$$

其中, α_λ 是光谱中每个采样波长处的权重, 一般用 $\mathbf{S}_{\text{OBS}\lambda}$ 在波长 λ 处的流量误差的倒数表示. 当 χ^2 最小时, (ω, A_v) 记为估计的星族合成参数向量, 且满足物理约束:

$$\sum_{i=1}^k \omega_i = 1, 0 \leq \omega_i \leq 1, A_v > 0, \quad (3)$$

同时, 以 χ^2 的最小值衡量参数估计的准确程度, 及 $\mathbf{S}_{\text{M}\lambda}$ 与 $\mathbf{S}_{\text{OBS}\lambda}$ 的拟合逼近程度.

文献[11–13]采用SA算法估计星族合成参数. SA算法借鉴固体退火原理. 物理中, 退火过程由加温、等温与冷却3部分组成. 首先将固体加温, 固体内部粒子热运动增强, 呈现无序状, 内能增大. 之后, 随着温度逐步降低, 粒子逐渐趋于有序, 在每个温度都达到平衡状态. 最后, 在常温下, 内能降至最小, 得到晶体结构. SA算法将退火原理应用于组合优化问题, 其中, 内能对应目标函数值, 即星族合成算法中的 χ^2 , 内能最小时, 得到最优解. 温度对应控制参数, 加温过程对应设定的初始温度, 冷却过程模拟参数下降, 等温过程模拟算法的Metropolis抽样过程. 算法运行由初始解和温度初值开始, 之后, 对于当前解, 循环操作: 产生新解、计算目标函数差、放弃或者接受的步骤. SA基本原理与步骤如下:

(1)初始化. 设定初始温度 T_0 , 令 $T = T_0$. 在参数空间中随机产生任意星族合成参数向量 $(\vec{\omega}, A_v)$, 作为初始的当前解 s_1 . 设定在每个温度 T 时的链长 L_{sa} .

(2)从 $(\vec{\omega}, A_v)$ 中随机抽取1个分量, 对其随机添加 $[-\epsilon, \epsilon]$ 范围内的扰动, 产生新解 s_2 . s_2 需要满足(3)式.

(3)计算 s_2 、 s_1 时的 χ^2 值, 记为 $\chi_{s_2}^2$, $\chi_{s_1}^2$. 令 $\Delta = \chi_{s_2}^2 - \chi_{s_1}^2$, 根据Metropolis准则, 当 $\Delta < 0$ 时, 接受 s_2 为当前解, 并令 $s_1 = s_2$; 当 $\Delta > 0$ 时, 在 $(0, 1)$ 区间产生随机数, 若该随机数小于接受概率 $e^{-\Delta/(kT)}$, 则接受 s_2 为当前解, 否则, 维持 s_1 为当前解.

(4)根据 L_{sa} , 重复步骤(2)与(3).

(5)根据退火方案逐渐降低 T , 重复步骤(2)、(3)、(4). 目前存在多种退火方案, 例如, $T_{i+1} = \beta T_i$, 其特点是高温区降温快, 而在低温区降温慢, 以便精细搜索, 提高精度. 通过实验调整 β 值, 可以改善退火曲线形态.

当经过设定的迭代次数, s_1 没有被更新, 或者 T 达到结束温度时, 算法终止, s_1 记为星族合成参数的估计值.

在实际运行时, 上述SA算法由于运算时间有限, 通常难以产生足够长的Markov链, 达到以概率1.0收敛于全局极小点的理论值. 因此, 算法通常表现为较强的局部搜索能力, 而全局搜索能力较差, 且最终的收敛结果受初始值影响较大. 此外, 同一温度下充分退火、状态的迂回搜索, 导致耗时过多. 因此, SA算法在速度与准确度方面均需改进.

3 利用遗传算法估计星族合成参数

遗传算法^[16–19](以下简称GA)是一种借鉴了生物学中遗传变异理论与进化论的启发式搜索算法, 提供了一种求解复杂系统问题的通用框架, 广泛应用于多学科. 求解组合优化问题是其主要应用领域之一. GA的基本思想是: 将解空间的每一个候选解称为个体, 一定数量的个体组成种群. 为了便于交叉与变异操作, 个体通常不用解空间中解的形式直接表示, 而是映射到遗传空间, 由基因组成串结构数据表示个体, 这个过程称为基因编码. 算法运行时, 首先随机产生初始种群, 之后, 计算种群中个体的适应度函数值, 根据适应度函数值, 选择优良的部分个体直接进入下一代, 其余个体按照一定概率进行交叉、变异操作, 生成新一代个体, 组成新一代种群. 对新种群重复上述过程, 直至达到算法终止条件, 如达到预设的代数, 或者适应度函数值达到设定的阈值.

GA的特点恰好弥补了第2节陈述的SA的缺陷. 因为GA从参数空间中的多点出发, 并行搜索, 通过选择、交叉与变异, 能够快速收敛至全局最优解的90%左右, 且便于硬件

的并行实现. 与SA局部搜索能力较强的特点相结合, 两种算法互补, 可以更充分发挥它们的优势, 快速、准确地估计星族合成参数.

3.1 遗传算法

GA^[16-19]应用于星族合成参数估计, 需要明确以下基本要素.

(1) 个体的基因编码, 是把解空间的每一个解向量表示成遗传空间的个体. 本文采用实数编码, 将待求的具有 $k+1$ 个分量的星族合成参数 $(\vec{\omega}, A_v)$, 看作 $k+1$ 个实数顺序排列而成的个体, 个体的编码长度为 $k+1$.

(2) 种群大小 Pop . 种群过大, 增加计算复杂性, 导致耗时过多; 种群过小, 则可能丢失有效的个体, 导致无法收敛至全局最优解. 一般取 $Pop \in [20, 50]$.

(3) 适应度函数 F . 它是区分种群中个体优劣的标准, 即评价星族合成参数估计值的标准. 以(2)式中 χ^2 的倒数作为 F , 则适应度函数值越大, 相应的个体越优.

(4) 选择概率. 个体的适应度函数值越大, 被选中进入下一代的概率越大. 采用轮盘赌法, 根据个体 i 的适应度函数值 F_i , 计算其被选中的概率 Ps_i .

$$Ps_i = F_i / \sum_{i=1}^{Pop} F_i. \quad (4)$$

(5) 交叉概率 Pc 与交叉方法. $Pc \in [0.65, 0.85]$, Pc 决定随机选择的两个个体是否进行交叉. 设第 x 个个体 a_x 与第 y 个个体 a_y 交叉, 从长度为 $k+1$ 的基因编码中随机产生交叉位置, 记为第 j 位. 设 r 为 $[0, 1]$ 区间的随机数, 交叉方法如下:

$$\begin{aligned} a_{xj} &= a_{xj}(1-r) + a_{yj}r, \\ a_{yj} &= a_{yj}(1-r) + a_{xj}r. \end{aligned} \quad (5)$$

(6) 变异概率 Pm 与变异方法. 变异操作是模仿生物进化中的变异, 其目的是维持种群多样性, 避免种群过早收敛于局部最优解. Pm 不宜过大, 一般小于0.05. 变异方法是从种群中随机选择一个个体, 随机产生变异位置, 进行变异.

(7) 遗传代数 G_n . 实验表明, GA一般在约20代即可收敛至全局最优解的90%左右, 之后收敛速度变慢, 需要较多的迭代次数与时间. 对于这一缺点, 通过GA与SA结合, 发挥SA局部搜索能力较强的特点, 可以克服. 因此, 取 $G_n = 20$.

3.2 遗传算法结合模拟退火算法估计星族合成参数

本文将遗传算法与模拟退火算法相结合, 应用于星族合成参数估计. 两种算法互补, 在SA算法的基础上, 发挥GA全局搜索能力强、收敛速度快的优势. GA-SA结合算法流程图, 如图1所示.

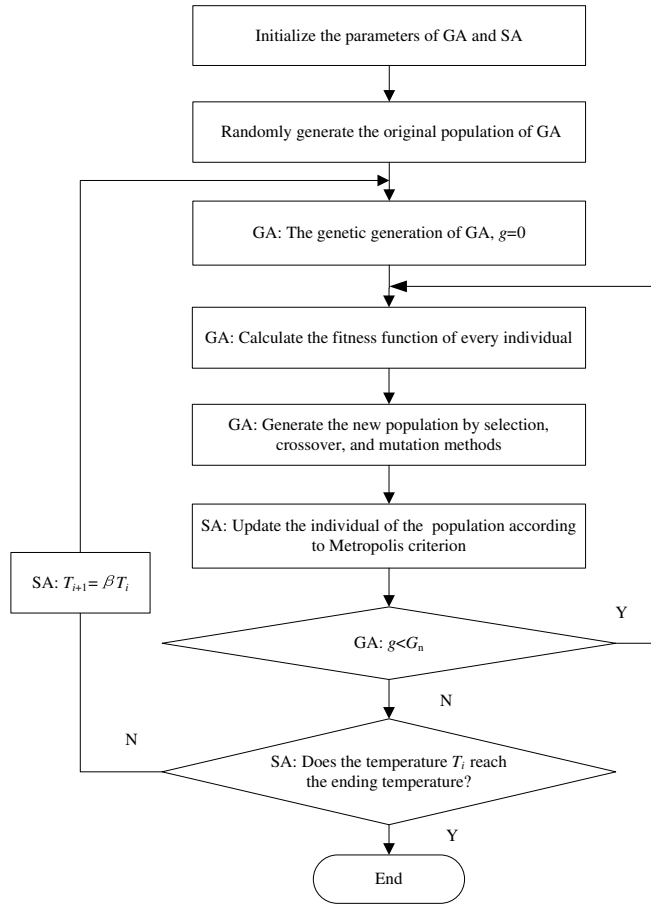


图 1 GA-SA结合算法流程图

Fig. 1 The flow diagram of GA-SA algorithm in this paper

4 实验与讨论

实验目的: 在星族合成参数估计的准确度与速度方面, 测试GA-SA结合算法与单一SA算法的性能.

实验中使用的光谱: 文献[12]中的SA算法, 使用来自BC03^[23]的45条光谱作为SSP. 为了比较实验结果, 本文使用这45条光谱, 即跨越[1 Myr, 13 Gyr]范围的15个年龄、3个金属丰度 $Z = 0.2 Z_{\odot}$, $1 Z_{\odot}$, $2.5 Z_{\odot}$ 的光谱. 算法的测试光谱集1, 包含10组(每组100条)模拟星系光谱. 每条模拟星系光谱由45条SSP组合而成, 其星族合成参数是在参数空间中随机生成的, 且符合(3)式的约束. 测试光谱集2, 包含1 000条信噪比大于10、红移小于0.5的SDSS观测星系光谱. 测试光谱集3, 由LAMOST观测星系光谱组成. 所有光谱的波长限定为[3800, 8000] Å, 步长值为2.5 Å, 采样点数是 $N_{\lambda} = 1681$. 以[4010, 4060] Å的流量中值作为归一化因子, 对光谱归一化预处理.

其他参数设置: 星族合成参数估计值的允许平均误差范围 $\frac{\sum_{i=1}^{k+1} err_i}{k+1} \in [-0.01, 0.01]$, 其中, 每个参数的允许误差范围 $err_i \in [-0.03, 0.03]$, 准确率记为 η . SA的 ϵ 值为0.005, 退火方案采用 $T_{i+1} = \beta T_i$, 分为12个阶段. GA个体编码由45+1个实数组成, $Pop = 20$, $G_n = 20$.

实验环境: i3-3220CPU, 3.30 GHz, 系统内存4.0 GB. MATLAB软件开发环境.

实验1: 对测试光谱集1, 分别用GA-SA结合算法、单一SA算法处理. 实验中, 对SA算法, 通过增大其链长 L_{sa} , 来提高星族合成参数估计值的准确度, 使估计的参数值达到允许平均误差 ± 0.01 以内, 且每个参数达到允许误差范围 ± 0.03 . 实验结果如下: 单一SA算法处理每条光谱平均用时约285 s. GA-SA结合算法平均用时约31 s, 在速度方面优于单一SA算法近10倍.

如果限定 $L_{sa} = 7$, 实验结果是GA-SA结合算法的 $\eta = 98.3\%$. 单一SA算法的 $\eta = 76.8\%$, 有232条光谱的星族合成参数估计值超出允许误差范围, 主要原因是随机生成的初始解向量与真实解偏离较多, 而链长有限, 不能提供足够多的迭代次数与时间, 使得单一SA算法逐渐搜索至全局最优解附近. 因此, 初始值影响SA的最终收敛结果.

相比而言, GA-SA结合算法不是从单一的随机初始解出发, 而是合理设定种群大小, 采用多点寻优的并行搜索, 增大了跳出局部极小点的概率, 更容易收敛至全局最优解. 因此, 在 L_{sa} 值较小时, 也能比较准确地估计星族合成参数, 准确率 η 值高. 同时, 这也解决了单一SA算法需要Markov链足够长、迭代次数足够多、在同一温度下状态的迂回搜索等问题, 并避免了由此所带来的大计算量问题, 节省了时间. 因此, 虽然GA-SA结合算法因增加了GA的种群与遗传代数, 而增加了部分计算量, 但是, 总体上GA-SA结合算法的速度比单一SA算法快近10倍.

实验2: 对测试光谱集2, 首先将光谱的坏像素点、发射线、天光线等屏蔽, 然后用GA-SA结合算法处理. 由于实测光谱的星族合成参数未知, 因此, 无法使用允许平均误差 ± 0.01 评价星族合成参数估计值的准确性, 进而评价算法性能. 通常, 可以采用 χ^2/N_λ 作为评价标准. 当 $\chi^2/N_\lambda < 1$ 时, 认为模型光谱与观测光谱拟合良好, 星族合成参数估计准确.

图2是利用MATLAB绘制的对SDSS 54208-1820-048 实测光谱的处理结果. 在图2上图中, 蓝色绘制的是归一化后的观测光谱, 在r波段的信噪比为67.1. 红色线是星族合成方法拟合的模型光谱. 图2右下图绘制的是不同年龄的SSP的星族合成参数 ω_i 的值, 表示SSP的光度贡献比. 某些年龄的SSP的 ω_i 近似为零, 则图中未显示. 拟合的 $\chi^2/N_\lambda = 0.186$, $A_v = 0.78$. 图2左下图是观测光谱与合成的模型光谱之间的残差谱, 清晰地显示出发射线, 便于后续工作对发射线参数的测量. 使用GA-SA结合算法, 对测试光谱集2的1 000条光谱星族合成, 实验结果是: $\eta = 94.6\%$. 在不满足 $\chi^2/N_\lambda < 1$ 的54条光谱中, 噪声是影响准确拟合的主要因素. 因此, 在对观测光谱星族合成之前, 需要降噪预处理, 降噪必须考虑物理意义, 避免误删除谱线与减少谱线的流量值.

测试实验结果说明, 在星族合成参数估计的速度与准确度方面, GA-SA结合算法优于单一SA算法. 注意到, SSP的数量是影响算法速度的一个重要因素. 同时, 如图2右下图所示, 部分SSP的 ω_i 事实上近似为零, 如果在算法运行过程中, 尽早识别并抛弃这些与被拟合的光谱无关的SSP, 则算法的速度会进一步提高, 而准确度几乎不受影响. 这是下

一步对算法改进的一个方面.

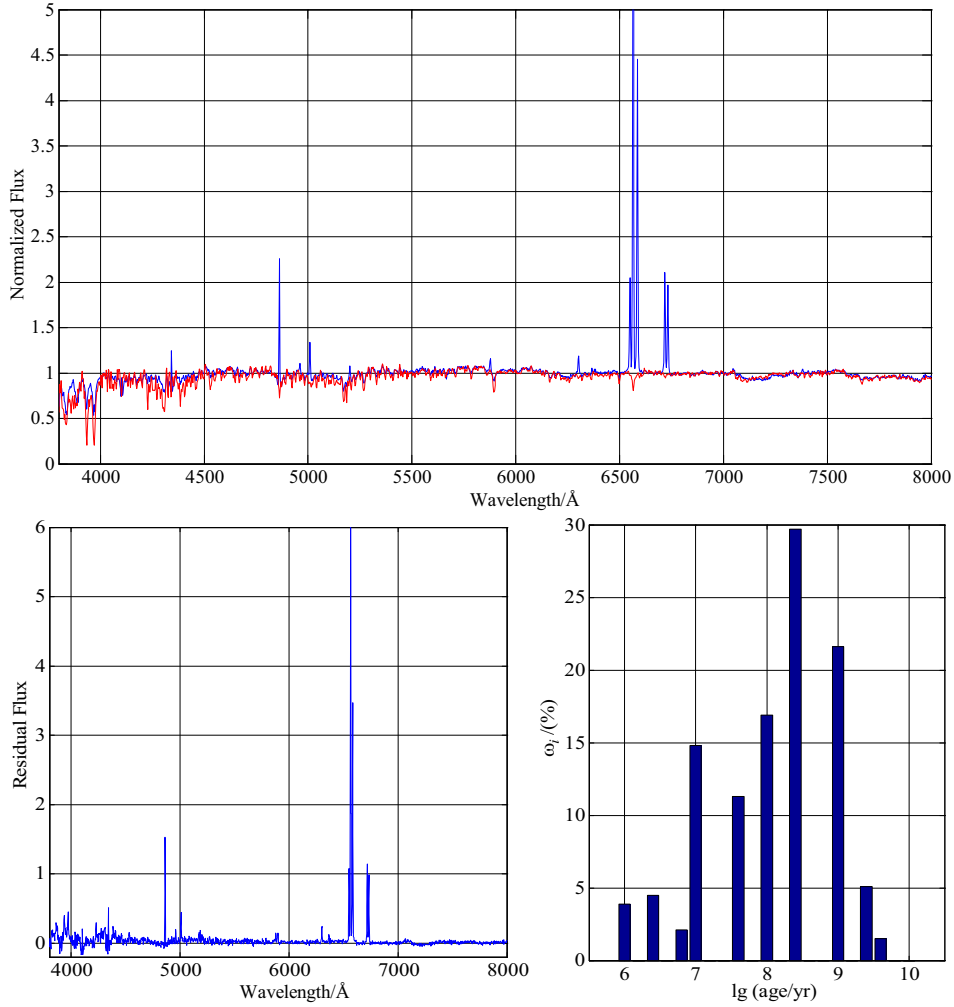


图 2 使用GA-SA结合算法对SDSS 54208-1820-048实测光谱星族合成处理结果. 上图蓝线是观测光谱, 红线是星族合成光谱. 左下图是观测光谱与星族合成光谱之间的残差谱. 右下图纵轴表示星族合成参数向量 $\vec{\omega}$ 的各分量所占的百分比.

Fig. 2 Results of the population synthesis for the observed spectrum of SDSS 54208-1820-048 using the GA-SA algorithm. Upper panel: the observed spectrum (the blue line) and the synthetic spectrum (the red line); Lower-left panel: the residual spectrum between the observed and the synthetic spectra; Lower-right panel: the population vector.

我们还进行了测试实验3. 测试光谱是LAMOST实测光谱. 至2013年底, LAMOST发布的信噪比大于10的星系光谱中, 有22条光谱红移大于0.2, 红移在 $[0.1, 0.2)$ 之间的有451条, 红移小于0.1的有920条, 其余为红移未知光谱. 对红移已知的451 + 920条LAMOST光谱, 采用GA-SA结合算法进行星族合成. 实验结果是: $\eta = 45.3\%$. 准确率偏低的主要原因是, 因流量定标误差较大、仪器效率曲线干扰等因素, 目前的LAMOST光谱存在连续谱畸变、谱线流量强度不准等失真现象^[24]. 可见, 准确进行星族合成的前提是光谱失真小, 这需要通过光谱预处理进行光谱信号恢复, 包括去红移

使光谱移回静止波长、噪声抑制、抑制仪器效率曲线干扰等.

5 结束语

快速、准确地估计星族合成参数, 是利用星族合成方法有效处理海量星系光谱的关键. 本文将遗传算法与模拟退火算法相结合, 在模拟退火算法的基础上, 发挥遗传算法全局搜索能力强、收敛速度快、易于并行实现的优势, 两种算法互补. 在星族合成参数估计的速度与准确度方面, 遗传-模拟退火结合算法优于单一的模拟退火算法. 探索有效的光谱信号恢复技术、合理删减SSP的数量, 可以进一步提高算法在星族合成准确度和速度方面的性能.

参 考 文 献

- [1] Mouldaka J, Boisson C, Joly M, et al. *A&A*, 2004, 420: 459
- [2] Chen Y M, Kauffmann G, Heckman T M, et al. *MNRAS*, 2013, 429: 2643
- [3] Torres-Papaqui J P, Coziol R, Ortega-Minakata R A, et al. *ApJ*, 2012, 754: 144
- [4] Koleva M, Bouchard A, Prugniel P, et al. *MNRAS*, 2013, 428: 2949
- [5] Canalizo G, Stockton A. *AJ*, 2013, 772: 132
- [6] Eisenstein D J, Weinberg D H, Agol E, et al. *AJ*, 2011, 142: 72
- [7] Bolton A S, Schlegel D J, Aubourg E, et al. *AJ*, 2012, 144: 144
- [8] Luo A L, Zhang H T, Zhao Y H, et al. *RAA*, 2012, 12: 1243
- [9] Cui X Q, Zhao Y H, Chu Y Q, et al. *RAA*, 2012, 12: 1197
- [10] 王生, 朱张勤, 祝佳, 等. *天文学报*, 2011, 52: 413
- [11] Cid Fernandes R, Sodré L, Schmitt H R, et al. *MNRAS*, 2001, 325: 60
- [12] Cid Fernandes R, Mateus A, Sodré L, et al. *MNRAS*, 2005, 358: 363
- [13] Koleva M, Prugniel P, Bouchard A, et al. *A&A*, 2009, 501: 1269
- [14] Metropolis N, Rosenbluth A, Rosenbluth M, et al. *The Journal of Chemical Physics*, 1953, 21: 1087
- [15] Stuart G, Donald G. *ITPAM*, 1984, 6: 721
- [16] 汪定伟. *智能优化方法*. 北京: 高等教育出版社, 2007
- [17] 斯蒂伯, 徐玉秀. *非线性系统手册*. 第5版. 北京: 电子工业出版社, 2013
- [18] 史峰, 王辉, 郁磊, 等. *MATLAB智能算法30个案例分析*. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2011
- [19] 林丹, 李敏强, 寇纪淞. *计算机研究与发展*, 2000, 37: 1321
- [20] Boisson C, Joly M, Mouldaka J, et al. *A&A*, 2000, 357: 850
- [21] Kauffmann G, Heckman T M, White S D M, et al. *MNRAS*, 2003, 341: 33
- [22] Calzetti D, Kinney A L, Storchi-Bergmann T. *ApJ*, 1994, 429: 582
- [23] Bruzual G, Charlot S. *MNRAS*, 2003, 344: 1000
- [24] 韩金姝. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33: 2259

Parameter Estimation of Stellar Population Synthesis Using Genetic Algorithm

HAN Jin-shu

(Department of Computer Science, Dezhou University, Dezhou 253023)

ABSTRACT For the galaxies composed of all kinds of stars, it is important to estimate the parameters of stellar population synthesis quickly and accurately from the massive data of galactic spectra. It is presented in this paper that the genetic-simulated annealing (GA-SA) combined algorithm with a complementary advantage of the good global searching-ability and the fast convergence-ability of GA, as well as the strong local searching-ability of SA. In the aspect of the speed and the accuracy of the parameter estimation of stellar population synthesis, the experimental results show that the presented GA-SA combined algorithm is better than the single SA algorithm.

Key words galaxies: fundamental parameters, galaxies: stellar content, techniques: spectroscopic, methods: data analysis