

ными функциями  $I/(I + ST)$ ,  $ST/(I + ST)$ . В этом случае частотные характеристики, более сложным образом связаны с коэффициентами  $C_1$  и  $C_2$ , но однозначно определяются ими.

Задача разложения процесса  $Z_0(t)$  в ряд известных функций  $Z_1(t), Z_2(t), \dots, Z_K(t)$  решается приведенной схемой практически так же, как и задача идентификации. В этом случае  $Z_0(t)$  - экспериментально наблюдаемый стационарный процесс,  $Z_1(t), Z_2(t), \dots, Z_K(t)$  - процессы на выходах генераторов базисных функций. Коэффициенты разложения  $C_1, C_2, \dots, C_K$  получаются так же, как и параметры объекта идентификации путем подачи вместо  $Z_i(t)$  эталонных напряжений.

Среди других возможных применений модуля ортогонализации в системах обработки данных отметим задачу формирования адаптивных полиномиальных фильтров [5].

## Л и т е р а т у р а

1. Коллатц Л. Функциональный анализ и вычислительная математика. - М.: Мир, 1969, - 448 с.
2. Цыпкин Я.Э. Адаптация и обучение в автоматических системах. - М.: Наука, 1968. - 400 с.
3. Катковник В.Я. Линейные оценки и стохастические задачи оптимизации. - М.: Наука, 1976. - 488 с.
4. Алберт А. Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание. - М.: Наука, 1977. - 224 с.
5. Даннэ А.А. Оптимальный синтез линейных электрических цепей. - М.: Связь, 1969. - 292 с.

УДК 621.391.1

Р.Т.Сайфуллин

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА  
НЕПОЛНОСТЬЮ РАЗРЕШЕННЫХ СПЕКТРОВ  
(г. Куйбышев)

Разделение сильно перекрывающихся пиков - одна из основных задач математической обработки спектрограмм (спектры ядерного магнит-

ного резонанса, хроматографические спектры, массоанализаторский спектро- скопия и т.д.). Типичный спектр состоит из нескольких частично перекрывающихся пиков, и задача состоит в определении их индивидуальных характеристик. Экспериментальный сигнал  $g(x)$  есть сумма

$$g(x) = g_1(x) + \dots + g_N(x). \quad (1)$$

Параметр  $x$  называется разворачивающим параметром. В хроматографии им является время с момента ввода в поток носителя анализируемой пробы, в полярографии — потенциал электрода в электрической ячейке, в оптико- и рентгеноспектральном анализе — длина волны электромагнитного излучения и т.д.

Предполагается, что каждый пик  $g_k(x)$  по форме близок к некоторому стандартному пику, отличающемся от него прежде всего положением и интегральной интенсивностью  $\int g_k(x) dx$ . Обычно такие задачи решаются методом наименьших квадратов (м.н.к) [1]. Однако алгоритмы, реализующие м.н.к., оказываются малоэффективными при большом числе параметров, входящих нелинейно в функционал, подлежащий минимизации. Если число пиков  $N$  велико или неверно оценено, задача становится плохо обусловленной, поэтому на практике редко удается определить более одного параметра формы на каждый пик. Отсюда естественен вопрос об использовании в задачах разделения методов иной природы.

Предлагаемый метод решения этой задачи предусматривает искусственное сужение пиков спектрограммы, благодаря которому исходный спектр становится более "контрастированным".

Пусть модель отдельного пика  $g_k(x) = \rho_k f(x - \mu_k, \beta_k)$ , где  $f$  — известная функция, а параметры  $\rho_k, \mu_k, \beta_k$  у каждого пика свои. При надлежащей нормировке  $f$  параметр  $\rho_k$  — интегральная интенсивность пика,  $\mu_k$  — его положение,  $\beta_k$  — параметр ширины пика. Через

$$\hat{f}(\omega, \beta_k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, \beta_k) e^{-i\omega x} dx$$

обозначим преобразование Фурье (ПФ) функции  $f$ . Пусть  $f$  такая, что

$$\hat{f}(\omega, 0) = 1; \quad \frac{\hat{f}(\omega, \beta_k)}{\hat{f}(\omega, \gamma)} = \text{ПФ} \left\{ f(z, \beta_k - \gamma) \right\} \quad (0 \leq \gamma < \beta_k).$$

В основе метода разделения перекрывающихся пиков лежит построение вспомогательной функции  $\psi(z, \tau)$ , соответствующей исходной спектрограмме  $g(x)$ :

$$\psi(z, \tau) = \sum_{k=1}^N p_k S(z - \mu_k, \beta_k - \tau), \quad (2)$$

$$\text{где } S(z, \beta_k - \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} f(z-x, \beta_k - \tau) \psi(x, \varepsilon) dx.$$

Здесь  $\hat{\psi}(\omega, \varepsilon) = \Pi\Phi\{\psi(x, \varepsilon)\}$  — стабилизирующий множитель [ $2$  ( $\varepsilon > 0$ )]. Поскольку

$$\frac{\hat{f}(\omega, \beta_k)}{\hat{f}(\omega, \tau)} \hat{\psi}(\omega, \varepsilon) = \Pi\Phi\{S(z, \beta_k - \tau)\},$$

имеем

$$\hat{\psi}(\omega, \tau) = \frac{\hat{\psi}(\omega, \varepsilon)}{\hat{f}(\omega, \tau)} \hat{g}(\omega).$$

Пусть  $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\hat{\psi}(\omega, \varepsilon)}{\hat{f}(\omega, \tau)} \right| d\omega < \infty$ , тогда можно считать, что

$$\frac{\hat{\psi}(\omega, \varepsilon) d\omega}{\hat{f}(\omega, \tau)} = \Pi\Phi\{K(x, \tau, \varepsilon)\}. \quad (3)$$

На основании предыдущих соотношений имеем

$$S(z, \beta_k - \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, \tau, \varepsilon) f(z-x, \beta_k) dx$$

и соответственно

$$\psi(z, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, \tau, \varepsilon) g(z-x) dx. \quad (4)$$

Таким образом, задача разделения перекрывающихся пиков сводится к преобразованию типа свертки исходной спектрограммы  $g(x)$ .

Будем искать аппроксимированное решение  $\bar{y}(z, \tau)$  в следующем виде:

$$\bar{y}(z, \tau) \approx h \sum_{\nu=-m}^m K(\nu h) q(z - \nu h), \quad (5)$$

где  $h$  - интервал дискретизации,  
 $K(\nu h)$  - коэффициенты.

Погрешность численного решения уравнения свертки (4) может быть оценена согласно [3].-

Пусть, например,  $f$  - функция Лоренца:

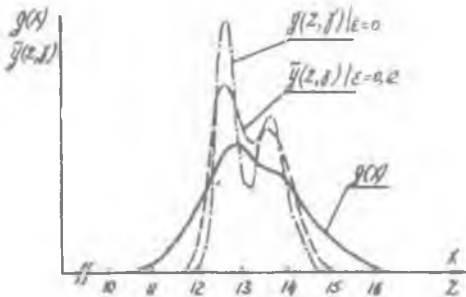
$$f(x, \beta_k) = \frac{1}{\pi} \frac{\beta_k}{\beta_k^2 + x^2}. \quad (6)$$

Тогда  $\hat{f}(\omega, \beta_k) = e^{-\beta_k |\omega|}$ . В качестве стабилизирующего множителя возьмем  $\hat{g}(\omega, \epsilon) = \tilde{e}^{\epsilon^2 \omega^2}$  ([2], с. 175). На основании соотношения (3) для данного примера имеем

$$K(x, \tau, \epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix\omega} e^{-\tau|\omega|} e^{-\epsilon^2 \omega^2} d\omega.$$

Значения функции  $K(x, \tau, \epsilon)$  могут быть рассчитаны численными методами для соответствующих значений параметров  $x, \tau, \epsilon$  и использованы в соотношении (5).

Экспериментальная проверка разработанного метода произведена на модельных спектрах (рисунок) - сплошной линией показан спектр с совмещенными пиками. В качестве математической модели пика использовалась функция Лоренца (6). В результате расчета получена кривая  $\bar{y}(z, \tau)$ , которая описывает "контрастированный" спектр, содержащий две хорошо разрешенные линии.



Р и с. Повышение разрешения спектра с совмещенными пиками:  $g(x)$  - исходный спектр,  $y(z, \tau)$  - преобразованный спектр

Таким образом, можно утверждать, что применяемый метод разделения позволяет надежно восстановить истинный спектр.

### Л и т е р а т у р а

1. Ланге П.К., Сайфуллин Р.Т., Шафранский И.В. Применение ЦВМ в системах автоматизации хроматографического анализа. - М.: ЦНИИТЭНефтехим, 1979.
2. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1979.
3. Бахвалов М.С. Численные методы. - М.: Наука, 1973.