

вычислительного процесса. АСЭИ предназначается для использования на этапах проектирования математического обеспечения СРВ и на этапах разработки и выдачи документации по математическому обеспечению.

#### Л и т е р а т у р а

И. Л и п а е в В.В. Проектирование математического обеспечения АСУ. - М.: Советское радио, 1977.

УДК 681.3:621.391.26

Р.Т.С а й ф у л л и н

#### НЕПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАЗДЕЛЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ АНАЛИТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

В прикладных задачах возникает необходимость анализа многокомпонентных сигналов, образованных линейным наложением отдельных компонент. Подобные сигналы часто встречаются в физике, химии, биологии и т.д., причем основные компоненты этих сигналов могут описываться самыми разнообразными функциями: экспонентами, функциями Лоренца, Гаусса и т.д. В статье рассматривается метод выявления отдельных составляющих многокомпонентного сигнала, представляющего собой результат линейного наложения компонент, одинаковых по форме, но различающихся положением, длительностями и амплитудами.

Существующие алгоритмы решения этой задачи основаны на получении оценок параметров (или оценок некоторых функций от параметров) математических моделей аналитического сигнала методами наименьших квадратов и максимального правдоподобия [1]. Указанные алгоритмы оказываются малоэффективными в случае большого числа наложенных компонент, так как связаны с подбором большого числа параметров, входящих нелинейно в функционал, подлежащий минимизации.

Предлагаемый метод (непараметрический) предусматривает неко-

торые преобразования многокомпонентного сигнала, приводящие к сужению составляющих компонентов при сохранении их площадей, в результате чего повышается степень их разделения. Метод не требует априорной информации о составе сигнала, легко и эффективно реализуется на ЦВМ, допускает возможность автоматизации.

Формальный аспект задачи состоит в следующем. В результате эксперимента получен набор точек многокомпонентного сигнала  $y(t)$ , который можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} y(t) &= g_N(t) + n(t); \\ g(t) &= \sum_{k=1}^N p_k f(t - \mu_k, \beta_k); \\ B_1 &< \beta_1 < \beta_2 < \dots < \beta_N < B_2, \end{aligned} \quad (I)$$

где  $f(t - \mu_k, \beta_k)$  - математическая модель составляющих компонент сигнала, в качестве которой в дальнейшем используется известная в теории сигналов и широко распространенная на практике функция Гаусса;

$\mu_k, \beta_k, p_k$  - параметры, соответственно, положения, ширины и амплитуды  $k$ -го компонента;

$N$  - число компонент;

$n(t)$  - случайный процесс с независимыми приращениями и нулевым математическим ожиданием.

По значениям сигнала  $y(t)$  требуется определить число  $N$  компонент и значения параметров  $p_k, \mu_k, \beta_k$ .

Основой метода выявления отдельных составляющих многокомпонентного сигнала является построение пробной функции  $Z(x, \gamma)$  [2], соответствующей исходному сигналу:

$$Z(x, \gamma) = \sum_{k=1}^N p_k f(x - \mu_k, \beta_k - \gamma) \quad (2) \\ (0 < \gamma \leq \beta_1)$$

При  $\gamma = 0$   $Z(x) = g(t)$ . Придавая  $\gamma$  последовательно возрастающие значения при  $\gamma \rightarrow \beta_1$ , получим функции  $Z(x, \gamma)$  со все более узкими и лучше разделенными компонентами, число которых при достаточно хорошем разделении определяет  $N$ , а положение и форма составляющих компонентов определяют остальные параметры. Значение  $\gamma$ , при котором достигается наилучшее разделение заранее неизвестно, поэтому необходимо получить ряд реализаций  $Z(x, \gamma)$ .

Если для исходного многокомпонентного сигнала (I) при  $\gamma \rightarrow \beta_1$  полного разделения всех компонентов достичь не удалось, а нам необходимо полное разделение, то в этом случае процедуру построения пробной функции необходимо произвести в несколько этапов следующим образом.

Согласно выражению (2)

$$z_1(x, \gamma) = \sum_{k=1}^N \rho_k \frac{e^{-\frac{(x-\mu_k)^2}{2(\beta_k-\gamma)}}}{\sqrt{2\pi(\beta_k-\gamma)}}$$

Если  $0 < \gamma < \beta_1$ , то

$$\lim_{\gamma \rightarrow \beta_1} z_1(x, \gamma) = \rho_1 \delta(x - \mu_1) + \sum_{k=2}^N \rho_k \frac{e^{-\frac{(x-\mu_k)^2}{2(\beta_k-\beta_1)}}}{\sqrt{2\pi(\beta_k-\beta_1)}}$$

т.е. функция  $\rho_1 f(x - \mu_1, \beta_1)$  при  $\gamma \rightarrow \beta_1$  вырождается в точке  $x = \mu_1$  в  $\delta$ -функцию [3]. На практике при реализации алгоритма мы имеем не точное совпадение  $\gamma = \beta_1$ , а останавливаемся на некотором значении  $\gamma_{\text{отм}}$ , при котором можно считать, что первый компонент отделился полностью. В качестве критерия выделения компонента может служить, например, достижение пробной функцией некоторого порогового уровня  $\nu^0$  (рис. I).

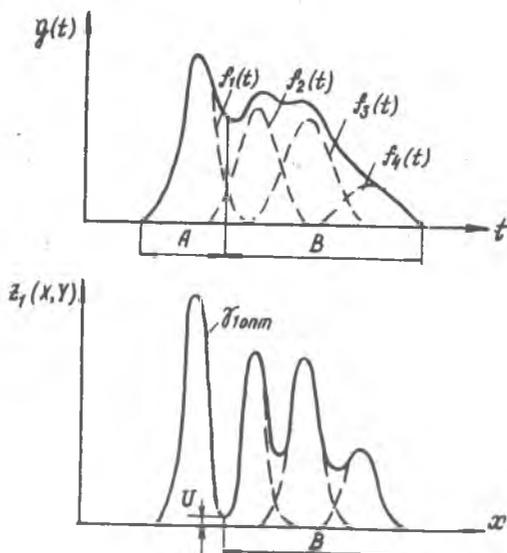
Рассмотрим далее оставшуюся после выделения первого компонента часть сигнала (участок B на рис. I). Для этого участка

$$z_2(x, \gamma_2) = \sum_{k=2}^N \rho_k \frac{e^{-\frac{(x-\mu_k)^2}{2(\beta_k-\gamma_2)}}}{\sqrt{2\pi(\beta_k-\gamma_2)}}$$

где  $\gamma_{\text{отм}} < \gamma_2 < \beta_2$ .

Находится  $\lim_{\gamma_2 \rightarrow \beta_2} z_2(x, \gamma_2)$ , в результате чего выделяется второй компонент. Дальнейшие шаги, направленные на выделение третьего, четвертого и т.д. компонентов, осуществляются аналогично. Поскольку пробные функции  $z_2(x, \gamma_2)$ ,  $z_3(x, \gamma_3)$  и т.д. отличаются лишь областью изменения параметра  $\gamma$ , то в дальнейшем будем рассматривать только пробную функцию  $z_1(x, \gamma) = Z(x, \gamma)$ .

Рассмотрим теперь, как можно получить  $Z(x, \gamma)$ , исходя из  $g(t)$ . Для этого запишем преобразование Фурье  $\psi[f(t - \mu_k, \beta_k); u]$  компонента  $f(t - \mu_k, \beta_k)$  [4]:



Р и с. 1. Исходный сигнал  $g(t)$  и соответствующая ей пробная функция  $z_r(x, \gamma)$

$$\psi[f(t - \mu_k, \beta_k); u] = e^{i u \mu_k} \Psi^{\beta_k}(u),$$

где  $u$  - вещественное число,  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\Psi(u) = e^{-u^2}$ .  
 Преобразование Фурье  $\Psi[f(t - \mu_k, \beta_k - \gamma); u]$  для компонентов  $f(x - \mu_k, \beta_k - \gamma)$  из выражения (2) имеет вид

$$\psi[f(t - \mu_k, \beta_k - \gamma); u] = e^{i u \mu_k} \Psi^{\beta_k - \gamma}(u) = \frac{\psi[f(t - \mu_k, \beta_k); u]}{\Psi^{\gamma}(u)}.$$

Следовательно

$$\psi[z(x, \gamma); u] = \frac{1}{\Psi^{\gamma}(u)} \psi[g(t); u]. \quad (3)$$

Поскольку  $\psi[f(t, \gamma); u] = \Psi^{\gamma}(u)$ , из уравнения (3) имеем:

$$g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t - x, \gamma) z(x, \gamma) dx, \quad (4)$$

т.е.  $z(x, \gamma)$  есть решение интегрального уравнения Фредгольма первого рода.

Интегральное уравнение (4) с ядром

$$f(t-x, \gamma) = \frac{e^{-\frac{(t-x)^2}{2\gamma}}}{\sqrt{2\pi\gamma}}$$

согласно теореме Джона [5] может быть переписано следующим образом:

$$z(t, \gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, \gamma) g(t+ix) dx. \quad (5)$$

Будем искать аппроксимированное решение  $\tilde{z}_\gamma(t)$  уравнения (5) в следующем виде:

$$\tilde{z}_\gamma(t) = \sum_{j=-m}^m f_j(\gamma) g(t+jh),$$

где  $h$  - интервал дискретизации;

$f_j(\gamma)$  - коэффициенты.

Поскольку точные значения функции  $g(t)$  неизвестны, приходится воспользоваться формулой

$$\hat{z}_\gamma(t) = \sum_{j=-m}^m f_j(\gamma) y(t+jh). \quad (6)$$

Погрешность решения (6) имеет вид

$$E = |z_\gamma(t) - \hat{z}_\gamma(t)| \leq E_1 + E_2,$$

$$\text{где } E_1 = \left| \sum_{j=-m}^m f_j(\gamma) n(t+jh) \right|;$$

$$E_2 = |z_\gamma(t) - \tilde{z}_\gamma(t)|.$$

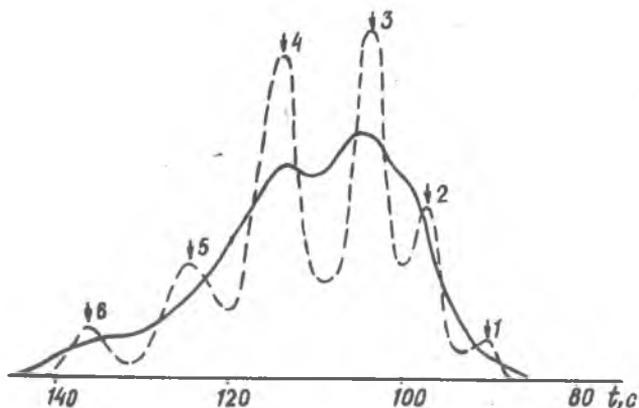
Погрешность  $E_2$  возникает из-за численного решения интегрального уравнения (5). Оценка для  $E_2$  равномерная, т.е. не зависящая от  $t$  и  $E_2 \rightarrow 0$  при  $m \rightarrow \infty$ .

Поскольку величины  $n(t+jh)$ ,  $j=0, \pm 1, \dots, \pm m$  некоррелированы,

$$ME_1^2 = \sigma_n^2 \sum_{j=-m}^m [f_j(\gamma)]^2,$$

где  $\sigma_n^2$  - дисперсия помехи.

Экспериментальная проверка разработанного метода проведена на модельных и реальных сигналах. В качестве примера практической реализации описываемого метода рассмотрим его применение для обра-



Р и с. 2. Реальная хроматограмма, представляющая собой анализ конденсатов при получении твердых пористых полиуретанов

работки результатов хроматографического анализа. На рис. 2 сплошной линией показана реальная хроматограмма, представляющая собой анализ конденсатов при получении твердых пористых полиуретанов. Описание процедуры хроматографического анализа конденсатов приводится в работе [6]. Как следует из рис. 2, хроматографические методы не позволяют полностью разделить сложные смеси анализируемых веществ. Хроматограмма в целом имеет две моды. Построение пробной функции позволяет отчетливо выявить все скрытые компоненты (аналитические пики), что доказывает эффективность использования рассмотренного метода.

#### 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.: ЦНИИТнефтехим, 1979. - 49 с.
2. Сайфуллин Р.Т., Ланге П.К., Гликман И.Я. Метод повышения разрешенности хроматографических спектров. "Хроматографические процессы и автоматизация измерений". Тезисы докладов II Всесоюзной конференции. - М.: 1979. - 27 с.

3. К о р н Г., К о р н Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. - М.: Наука, 1973, -794 с.
4. У и л к с С. Математическая статистика. - М.: Наука, 1967.
5. Jhon F. *Diffezential equations with appzoximate and impzopez data*, N.Y., 1955.
6. Czouzet P., Meztens A.J. *Chzomatogzaphie de pez-méation sur gel et analyse quantitative de condensats d'oxyde d'éthyléme et (ou) de propulé'ne et d'éthylene diamine a'laide d'um pzogramme d'ajustement de couzbes de Gauss*, *Chzomatogzaphia*, V. 8, N12, 1975. 675-681.