

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;

μ_k, β_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, μ_k, β_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 γ 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 γ , 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 δ -функцию [3]. На практике при реализации алгоритма мы имеем не точное совпадение $\gamma = \beta_1$, а останавливаемся на некотором значении $\gamma_{\text{ном}}$, при котором можно считать, что первый компонент отделился полностью. В качестве критерия выделения компонента может служить, например, достижение пробной функцией некоторого порогового уровня ν^0 (рис. I).

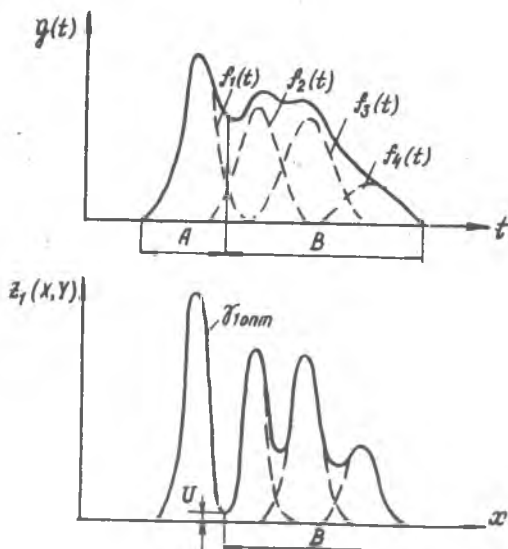
Рассмотрим далее оставшуюся после выделения первого компонента часть сигнала (участок B на рис. I). Для этого участка

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

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

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 γ , 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 $z_r(x, y)$

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

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

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

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

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

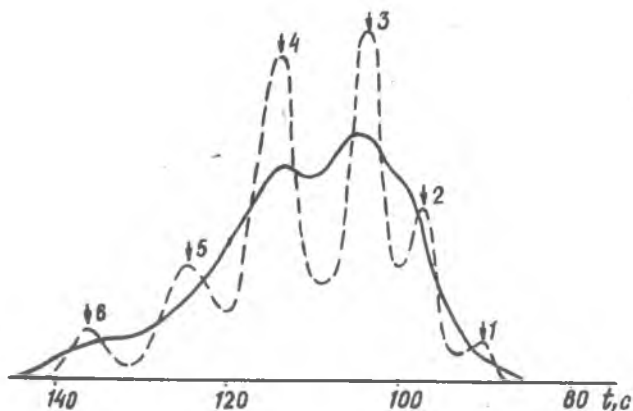
Погрешность E_2 возникает из-за численного решения интегрального уравнения (5). Оценка для E_2 равномерная, т.е. не зависящая от t и $E_2 \rightarrow 0$ при $m \rightarrow \infty$.

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 σ_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.: ЦНИИТЭнефтехим, 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. *Differential equations with approximate and imprecise data*, N.Y., 1955.
6. Czouzet P., Meztens A.J. *Chromatographie de perméation sur gel et analyse quantitative de condensats d'oxyde d'éthylène et (ou) de propylène et d'éthylène diamine à l'aide d'un programme d'ajustement de courbes de Gauss*, *Chromatographia*, V. 8, N12, 1975. 675-681.