© И.Б. Мовчан, А.А. Яковлева, 2005

УДК 550.831

И.Б. Мовчан, А.А. Яковлева

АЛГОРИТМИКА АДАПТИВНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ЦИФРОВЫХ ХРОМАТОГРАММ

Семинар № 9

1. Постановка задачи

Актуальность темы определяется разработкой нового типа переносного газового хроматографа, конструкция которого не предполагает газового баллона. Устройство дает на выходе сигнал с низко-высоко-частотными помехами. Последние обладают меньшими и сопоставимыми амплитудами по сравнению с амплитудой полезного сигнала (апериодичных вещественных пиков). Источники помех: собственные температурные и электромагнитные колебания измерительного контура, изменение скорости подачи многокомпонентного газа. Невозможность полного технического решения проблемы определила разработку способа исключения этих помех, позволяющего выделять вещественные пики с минимумом их искажения по амплитуде и по фазе. Задача усложняется тем, что в условиях неидеального покомпонентного разделения газовой смеси вещественные пики накладываются друг на друга. Это дает значимые погрешности в оценках концентраций соответствующих газовых компонент. Алгоритмическая реализация указанного способа должна быть частью аппаратурного комплекса, т.е. ориентирована на полностью автоматизированное выделение вещественных пиков.

2. Основные проблемы в решении задачи

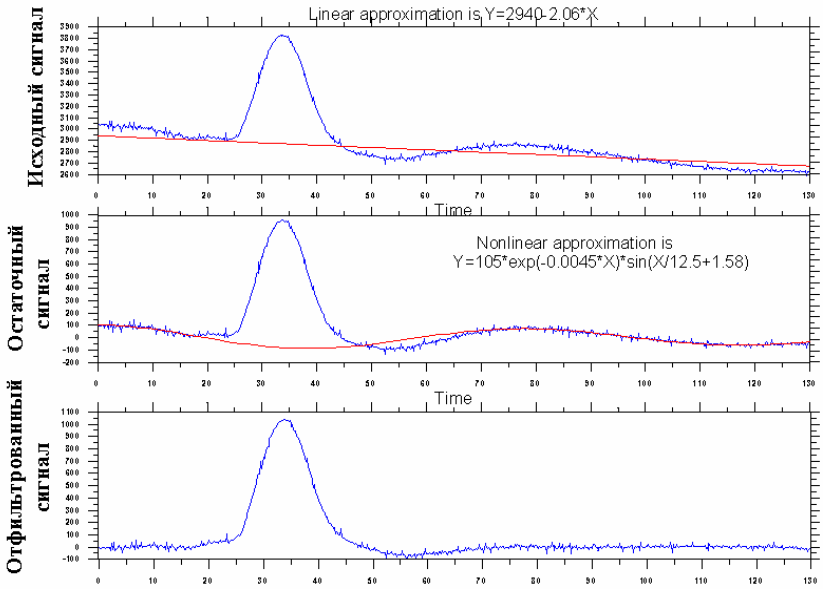
Формально разделение сложного сигнала, составленного квазипериодической и непериодической высоко- и низкоамплитудными компонентами сводится к стандартной фильтрации:

$f_{res}(t) = H(\tau) * f(t)$ или

$F_{res}(\omega) = H(\omega) \cdot F(\omega)$,

где $f(t)$ и $f_{res}(t)$ - исходный и остаточный сигнал, $H(\tau)$ - передаточная функция, $F(\omega), F_{res}(\omega)$ и $H(\omega)$ - их Фурье-образы, t и τ - параметры времени, ω - частота. Для формирования передаточной функции, выделяющей вещественные пики оптимально в смысле соотношения сигнал/шум, необходимо предварительное исследование амплитудно-частотного состава хроматограммы. Невозможность аппроксимации ее квазипериодической компоненты упрощенной моделью гармонической функции (рис. 1, *а, б*) или белого шума, недетерминированность частотных диапазонов определяют интерактивное выделение частотных диапазонов помехи. Временн*а*я нестационарность хроматограммы, обусловленная изменением во времени амплитудно-частотных характеристик помехи, амплитуд и ширины вещественных пиков, приводит к значительным амплитудным и фазовым погрешностям при применении любого унифицированного фильтра (рис. 1, *в*). Сопоставимость помехи и полезного сигнала по амплитуде делает неприменимыми известные методы энергетической фильтрации.

Простейший подход к разделению наложенных вещественных пиков в услови-



а.

б.

в.

Рис. 1. Аппроксимация фона хроматограммы: а – линейная; б – нелинейная; в – остаточный сигнал

ях фона, близкого к нулевому, основан на аналитической аппроксимации этих пиков гауссианой:

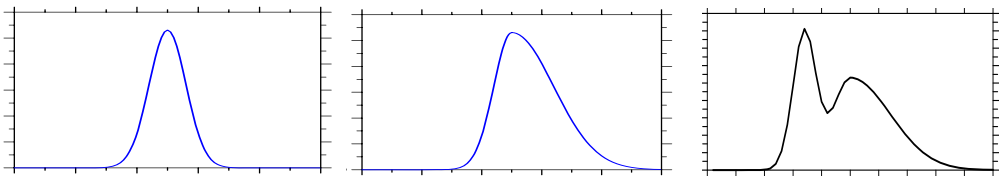
$$f(t) = (1/(2\pi\eta)) \cdot \exp\left(-(\theta - t)^2 / \left(2\eta^2\right)\right),$$

где θ - временной отсчет точки экстремума вещественного пика, η - величина разности между отсчетом θ и отсчетом по времени для точки перегиба в графике вещественного пика, t - текущее значение времени. На практике гауссиана (рис. 2, *а*) - часто встречающаяся, но не единственная форма вещественных пиков: они могут иметь вид сочетания двух полугауссиан (рис. 2, *б*), а также представлять не максимумы, а минимумы (инверсия вещественного пика). При наложении вещественные пики формируют аддитивный сигнал (рис. 2, *в*), в условиях которого положение точек перегибов полугауссиан и истинная амплитуда вещественных пиков определяются с большой погрешностью.

3. Автоматизированный алгоритм адаптивной фильтрации

Две части алгоритма (сведение многокомпонентной помехи хроматограммы к уровню, близкому к нулевому; разделение

Рис. 2. Аппроксимация вещественного пика: а – гауссианой, б – двумя полугауссианами в – аддитивное наложение вещественных пиков



а. б. в.

в разной степени наложенных вещественных пиков) сформированы как самонастраивающиеся итерационные процедуры. Основные элементы итерации первой части: *а.* исключение из исходной хроматограммы вещественных пиков; *б.* оценка автокорреляционной функции (АКФ) хроматограммы без учета области разрыва в окрестности исключенных вещественных пиков; *в.* расчет радиуса автокорреляции r_{acf} ; *г.* сглаживание хроматограммы, полученной на стадии «а», в предметной плоскости без учета указанной области разрыва; *д.* заполнение этой области разрыва в сглаженной хроматограмме посредством сплайн-интерполяции; *е.* вычитание итоговой сглаженной хроматограммы из исходной хроматограммы. Ниже следует краткое пояснение к каждой из процедур.

а. Распознавание и исключение вещественных пиков реализуется в задаче расчета низкочастотной (гладкой и квазипериодической) составляющей хроматограммы и основано на эталонной выборке. Она сформирована первыми пятнадцатью значениями хроматограммы, по которым вычисляем среднее $\langle f(t)\rangle$ и дисперсию σ_f , образующие критерий распознавания. Он состоит в том, что любое значение хроматограммы $f(t)$, не попадающее в исходную эталонную выборку, отсеивается, если оно находится за пределами интервала $\langle f(t)\rangle \pm \Lambda \cdot \sigma_f$. Если данное значение попадает в указанный интервал, то оно включается в эталонную выборку. Стандартная в статистике величина $\Lambda = 3$ заменено нами на $\Lambda = 15$ и остается неизменным, если исследуемая помеха, кроме высокочастотной низкоамплитудной компоненты, содержит высокоамплитудную составляющую, аппроксимируемую линейной или квадратической функцией. Если эта высокоамплитудная составляющая является квазипериодической, то Λ итерационно увеличивается, пока число значений итоговой хроматограммы $f_a(t)$ не совпадет с числом значений исходной хроматограммы $f(t)$.

б. В расчете автокорреляционной функции использован интеграл свертки, где бесконечные пределы интегрирования заменены на конечные, определяемые размером интервала задания хроматограммы $f_a(t)$:

$$R_f(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_a(t) f_a(t-\tau)\,\mathrm{d}t\,.$$

в. Если $R_f(\tau)$ - знакопостоянная функция, то r_{acf} равен величине смещения вдоль оси абсцисс, которому соответствует первое относительно $\tau = 0$ значение $R_f = 0{,}3(R_f)_{\max}$. В случае знакопеременной АКФ r_{acf} определяется величиной смещения τ , при котором имеем первое пересечение графика $R_f(\tau)$ с осью абсцисс [1].

г. Сглаживание представлено операцией свертки: $f_г(t) = H(m) * f_a(t)$, где $m = 2r_{acf} + 1$ - величина интервала задания передаточной функции H , представленной куполообразной функцией Хэннинга [2].

д. Пропуски в интервалах регистрации вещественных пиков заполняются с помощью кубического сплайна $(f_д(t))_j = a_j + b_j(t - t_{j-1}) + c_j(t - t_{j-1})^2 + d_j(t - t_{j-1})^3$, определенного в интервале $t \in [t_{j-1}, t_j]$.

е. Процедуры а-д в совокупности с операцией вычитания $f_e(t) = f(t) - f_д(t)$ формируют отдельную итерацию, в конце которой выполнено переприсваивание: исходной хроматограммой $f(t)$ считается остаточный сигнал $f_e(t)$. На этапе подбора низкочастотной составляющей помехи хроматограммы запланировано

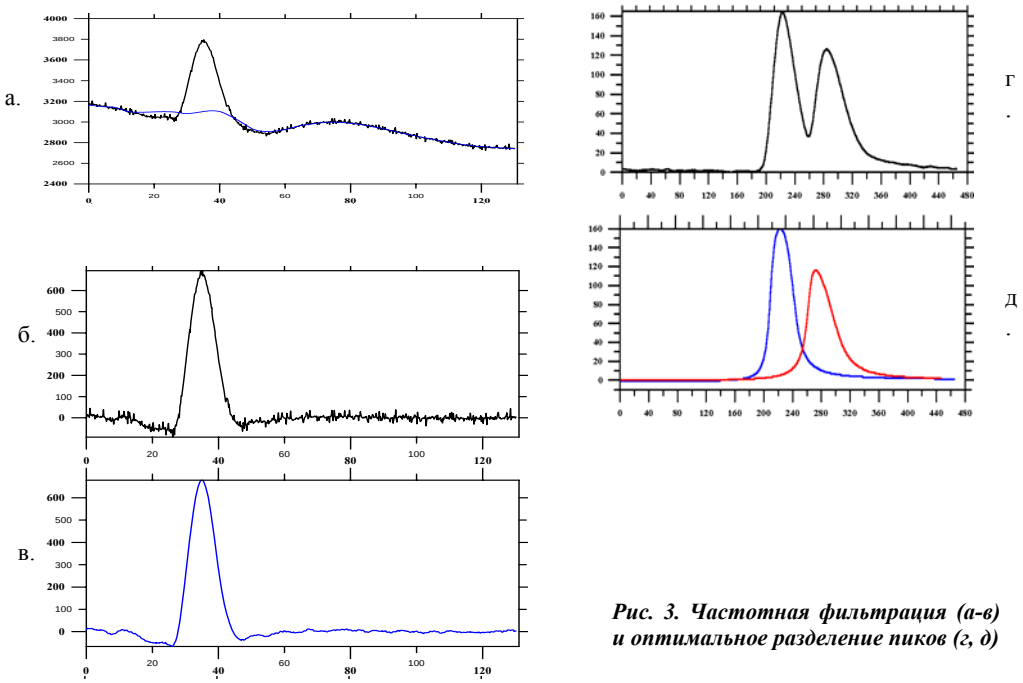


Рис. 3. Частотная фильтрация (а-в) и оптимальное разделение пиков (г, д)

три итерации, а при подборе высокочастотной составляющей - две итерации.

Во второй части алгоритма задача разделения вещественных пиков переформулирована нами как обратная задача теории потенциала. Вещественный пик формально рассматриваем как аномальный эффект в наблюденном потенциальном поле от источника, скрытого от непосредственного наблюдения. Начальное задание источника состоит в выборе его геометрии и физических параметров (горизонтальный стержень единичной длины и нулевой плотности), а также пространственного положения (стержень располагается в полупространстве, ограниченном осью абсцисс, в окрестности точки экстремума вещественного пика). Критерий корректности подбора параметров источника состоит в минимизации отклонения поля рассчитанного Q от поля наблюденного f. При этой минимизации и переходе от одной итерации к другой организовано вращение каждого источника, изменение его размеров и плотности по определенным нелинейным пространственной и параметрической сеткам (авторская разработка [2]). На каждой итерации осуществляется решение прямой задачи с расчетом общего для всех источников аддитивного поля (методика Цирульского А.В. [3]).

Применение описанного алгоритма демонстрирует исключение многокомпонентной помехи из хроматограммы вплоть до слабо дифференцированного близкого к нулевому фона. Исключенная высокочастотная составляющая помехи не меняет своих амплитудно-частотных характеристик как в области высокоамплитудного вещественного пика, так и за ее пределами, что является косвенным критерием оптимальности фильтрации (рис. 3, *а-в*). Разделение наложенных вещественных пиков реализуется с отсутствием погрешности по фазе и с 5 %-й погрешностью (оценка на эталонах) по амплитуде (рис. 3, *г, д*).

4. Резюме

Разработан способ исключения сложной многокомпонентной недетерминированной помехи из цифрового сигнала, представленного в данной задаче хроматограммой. Способ включает метод оптимального разделения в разной степени наложенных вещественных пиков. В алгоритмической реализации способ полностью автоматизирован в смысле оценок структуры хроматограммы и выделения изолированных вещественных пиков. Способ представляет дополнительный интерес при оптимальном выделении и интерпретации любых изолированных геофизических аномалий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Серкеров С.А.* Спектральный анализ в гравиразведке и магниторазведке. М., 1991.

2. *Мовчан И.Б.* Методика линеаментно-спектрального анализа грави-магнитных данных при картировании геологических структур. СПб., 1995, с. 64, 82-87.

3. *Цирульский А.В.* Функции комплексного переменного в теории и методах потенциальных геофизических полей. Свердловск, 1990.

Коротко об авторах

Мовчан И.Б. – кандидат геолого-минералогических наук, доцент, кафедра геоэкологии,
Яковлева А.А. – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математики,

Санкт-Петербургский государственный горный институт (технический университет) (СПГГИ ТУ).

Д И С С Е Р Т А Ц И И

ТЕКУЩАЯ ИНФОРМАЦИЯ О ЗАЩИТАХ ДИССЕРТАЦИЙ ПО ГОРНОМУ ДЕЛУ И СМЕЖНЫМ ВОПРОСАМ

Автор	*Название работы*	*Специальность*	*Ученая степень*
ИНСТИТУТ УГЛЯ И УГЛЕХИМИИ СО РАН			
ГЕРИКЕ Павел Борисович	Разрушение горных пород дисковым инструментом машин для послойного фрезерования	25.00.20	к.т.н.
ШУРАКОВ Александр Владимирович	Разработка технологических требований к техническим средствам подземной гидравлической выемки угля в сложных горно-геологических условиях	25.00.22	к.т.н.