

Алгоритм обработки сигналов мультidetекторного хроматографа методом границ

Р.Т. Сайфуллин, С.С. Александров

Самарский государственный технический университет, Самара

Рассматривается задача формирования многомерного сигнала в мультidetекторном хроматографе. Приведен алгоритм метода границ для обработки многоканальных сигналов с целью повышения достоверности определения качественного состава сложных многокомпонентных смесей.

Ключевые слова: многомерный сигнал, мультidetекторный хроматограф, метод границ.

Мультidetекторный хроматографический анализатор имеет на выходе ряд детекторов, имеющих различную чувствительность к одному и тому же веществу, но не являющиеся селективными. В качестве таких детекторов могут применяться детекторы разного принципа действия (катарометр, ДИП, плотномер и т.д.), либо детекторы одного принципа, но работающие в различных режимах [1].

Рассмотрим пример восстановления пиков двухкомпонентной смеси, при этом достаточно использовать два детектора, имеющих различную чувствительность к определяемым компонентам. Значения отсчетов индивидуальных пиков совмещенного сигнала определяют по формулам:

$$Y_2^A = Y_2 \frac{R_{1,2}^B - R_{1,2}}{R_{1,2}^B - R_{1,2}^A}; \quad Y_2^B = Y_2 \frac{R_{1,2}^A - R_{1,2}}{R_{1,2}^A - R_{1,2}^B}.$$

Здесь Y_1 и Y_2 - выходные сигналы соответственно первого и второго детекторов, $R_{1,2}$ - отношение сигналов Y_1 к Y_2 , $R_{1,2}^A$ и $R_{1,2}^B$ - отношения сигналов Y_1 к Y_2 по компоненту A и B соответственно.

Применим метод границ для разделения хроматографического сигнала Y_2^A . Найдем строгие границы значения Y_2^A : $НГY_2^A$ и $ВГY_2^A$ при

известных границах значений $НГΥ_1 < Y_1 < ВГΥ_1$ и $НГΥ_2 < Y_2 < ВГΥ_2$ (Рис. 1), где $НГ$ и $ВГ$ обозначения нижней и верхней границ значений параметров.

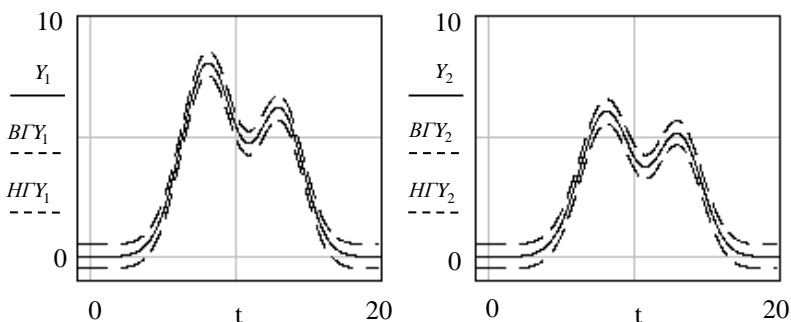


Рис. 1. Границы хроматографических сигналов детекторов Y_1 и Y_2 .

Для этого рассмотрим основные вычислительные действия, которому подвергается сигнал с выхода второго детектора, для получения сигнала, соответствующего компоненту А.

Границы отношения $R_{1,2}$ определяются следующим образом:

$$НГR_{1,2} = \frac{НГΥ_1}{ВГΥ_2}, \quad ВГR_{1,2} = \frac{ВГΥ_1}{НГΥ_2}.$$

Результат представлен на рис. 2.

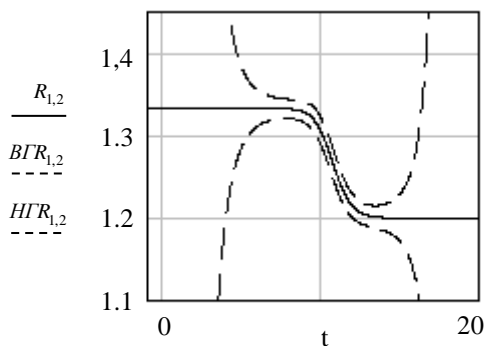


Рис. 2. Границы отношения сигналов детекторов $R_{1,2}$.

Значения границ Y_2^A вычисляются следующим образом:

$$HGY_2^A = \frac{HGY_2 \cdot (HGR_{1,2}^B - BGR_{1,2})}{BGR_{1,2}^B - HGR_{1,2}^A}; \quad BGY_2^A = \frac{BGY_2 \cdot (BGR_{1,2}^B - HGR_{1,2})}{HGR_{1,2}^B - BGR_{1,2}^A}.$$

Результат вычисления значений границ Y_2^A представлен на рис. 3. Если заранее известен качественный состав анализируемой смеси, то коэффициенты отношения сигналов можно определить заранее, пропуская через детектор чистые вещества.

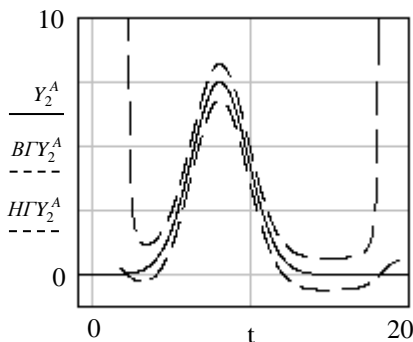


Рис. 3. Границы HGY_2^A , BGY_2^A компоненты Y_2^A .

Способ границ связан со способом строгого учета предельных абсолютных погрешностей следующим образом. Примем \hat{Y}_2^A равным значению $\hat{Y}_2^A = \frac{HGY_2^A + BGY_2^A}{2}$, тогда абсолютная погрешность этого приближения будет заведомо не больше полуразности $\Delta = \frac{BGY_2^A - HGY_2^A}{2}$, что дает оценку $\hat{Y}_2^A \pm \Delta$. При реализации вычислений по методу границ можно осуществлять либо пооперационную, либо итоговую регистрацию значений HG и BG результатов.

Библиографический список:

1. Сайфуллин Р.Т., Александров С.С. Моделирование мультидетекторной хроматографической ИИС // Моделирование и

анализ информационных систем: Тр. Междунар. науч. конф.
– Ярославль. - 2012. – С. 64-66.

Algorithm of signals processing of the multidetector chromatograph by method of borders

R. T. Saifullin, S. S. Alexandrov

Samara state technical university, Samara

The problem of formation of a multidimensional signal in the multidetector chromatograph is considered. The algorithm of a method of borders for processing of multichannel signals for the purpose of increase of reliability of definition of qualitative composition of difficult multicomponent mixes is given.

Keywords: multidimensional signal, multidetector chromatograph, method of borders.

References

1. Saifullin R. T., Alexandrov S. S. Modelirovanie multidetektornoy chromatograficheskoy IIS. Modelirovanie i analiz informatsionnykh system. Trudy Mezhdunarodn. nauchn. konf. [Modeling of Multidetector chromatographic IIS]. *Proc. of Int. Sc. Conf. Modelling and Analysis of Information Systems*, Yaroslavl, 2012, pp. 64–66.