

УДК 621.384.8

© А. Абденби, А. И. Солодовников, В. В. Манойлов, И. В. Заруцкий

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ В ПРИСПОСОБЛЕННОМ БАЗИСЕ ДЛЯ РАЗДЕЛЕНИЯ "НАЛОЖИВШИХСЯ" ПИКОВ И ФИЛЬТРАЦИИ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

Рассмотрены возможности использования спектральных преобразований в приспособленном базисе для повышения разрешающей способности и фильтрации масс-спектрометрических сигналов. В качестве эталонных сигналов для построения базиса используются различные функции, описывающие масс-спектрометрические пики. В простейшем случае для описания пика масс-спектрометрического сигнала используется гауссова функция. Кроме того, используются функции, описывающие масс-спектрометрические пики с плоской вершиной, и функции, описывающие масс-спектрометрические сигналы, искаженные инерционностью системы регистрации с электрометрическим усилителем с большой постоянной времени. Показывается, что использование прямого и обратного спектральных преобразований в базисе, "приспособленном" к форме пика, дает возможность достоверного восстановления параметров отдельных пиков в смешанном сигнале в том случае, когда отдельные пики описываются одинаковыми функциями, отличающимися только амплитудой и положением на оси независимой переменной. Качество восстановления не зависит от параметра — ширины пика и количества данных в выборке. В результате фильтрации шумов с помощью спектральных преобразований получаются хорошо сглаженные сигналы, в которых имеется возможность с высокой точностью оценить положение пика при отношении сигнал/шум три и выше.

ВВЕДЕНИЕ

Во многих научно-технических областях, в которых применяются масс-спектрометрические приборы, в основе решения прикладных задач лежит обработка сигналов, поскольку через их анализ как носителей информации раскрывается информативное содержание, связанное с решаемой задачей. Получение достоверной информации из масс-спектрометрических сигналов в ряде случаев осложняется недостаточным разрешением приборов и наличием нежелательных шумов и наводок. Применение в программном обеспечении масс-спектрометров алгоритмов, позволяющих снизить их влияние, является актуальным в настоящее время. Во многих практических задачах, связанных с обработкой сигналов, нашли применение ортогональные преобразования, и в частности те из них, которые имеют быстрый вычислительный алгоритм, обеспечивающий возможность оперативного анализа данных. В этой области в последнее время активно развиваются параметрически перестраиваемые ортогональные преобразования с быстрыми алгоритмами, предложенные в работах [1–8], которые позволяют изменением параметров приспособлять оператор преобразования к характеру исходных данных. Настоящая работа посвящена решению задачи разделения и фильтрации масс-спектрометрических сигналов. В процедурах обработки сигналов предлагается применить аппарат ортогональных преобразова-

ний с параметрически перестраиваемыми по форме базисными функциями, что создает возможность приспособлять такое преобразование к анализируемому данным. Целью данной работы являются разработка, теоретическое и экспериментальное исследование алгоритмов разделения и фильтрации масс-спектрометрических сигналов, обеспечивающих повышение достоверности их оценивания.

ВЫБОР МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОСНОВЫ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ АЛГОРИТМА

Предварительные замечания

В данной работе рассмотрен метод анализа сигналов, представленных в дискретной форме, что соответственно относится и к представлению ортогональных преобразований. В основе метода лежит быстрый алгоритм преобразования. Возможность приспособления к обрабатываемым данным базисных функций используется для существенного сокращения размерности их представления в спектральной области, в которой сохраняется исходная информативность данных, благодаря чему можно не только упрощать вычисления в процедуре анализа, но и существенно повысить достоверность ее результата.

Задача по выявлению информативных признаков в масс-спектрометрических сигналах может быть представлена как задача нахождения

вектора \mathbf{Y}

$$\mathbf{Y} = F\mathbf{X},$$

$$\sum_{j=1}^N h_{ij} h_{kj} = 0.$$

где $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_N]^T$ — вектор исходных данных преобразования; T — означает транспонирование матрицы или вектора; F — оператор преобразования; $\mathbf{Y} = [y_1, y_2, \dots]^T$ — вектор признаков, который должен адекватно характеризовать вектор исходного описания с точки зрения задачи оценки параметров масс-спектрометрического пика, а размерность пространства признаков могла бы быть существенно меньше размерности исходных данных. При решении этой задачи возникает вопрос выбора класса оператора преобразования F . Известно [9–13], что общий подход к отысканию процедур оценки признаков (параметров масс-спектрометрических сигналов) основан на линейных преобразованиях. Среди них наибольшее распространение получили ортогональные преобразования [14]. При использовании ортогональных преобразований имеется возможность выбора систем базисных функций, наиболее приспособленных к решаемой задаче. При этом может обеспечиваться высокая вычислительная эффективность таких преобразований, которые могут выполняться по быстрым алгоритмам.

Ортогональные преобразования, основные свойства

В рамках теории цифровой обработки сигналов понятие ортогонального преобразования может быть представлено в виде матричного уравнения

$$\mathbf{Y} = \mathbf{H}\mathbf{X},$$

где \mathbf{H} — матрица ортогонального преобразования; $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_N]^T$ — вектор анализируемого сигнала; $\mathbf{Y} = [y_1, y_2, \dots, y_N]^T$ — вектор спектральных коэффициентов (является отображением \mathbf{X} в спектральной области).

Оператор преобразования \mathbf{H} включает в себя систему базисных функций и имеет структуру

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [h_{11} \cdots h_{1N}] \\ [h_{21} \cdots h_{2N}] \\ \vdots \\ [h_{M1} \cdots h_{MN}] \end{bmatrix},$$

где $[h_{i1}, h_{i2}, \dots, h_{iN}]$ — вектор дискретных значений i -й базисной функции.

Система функций $\{h_i\}$ является базисной, если все функции ортогональны друг другу, т. е. для любых $1 \leq i \leq N$, $1 \leq k \leq N$ ($i \neq k$)

При этом образуют полную систему, для которой не существует ни одной другой функции, ортогональной ко всем остальным, что выполняется, если для любого $1 \leq i \leq M$

$$\sum_{j=1}^N h_{ij} g_j = 0 \Rightarrow g_j = 0.$$

При выполнении условия полноты имеет место равенство $M = N$.

Система ортогональных базисных функций является нормированной (или ортонормированной), если норма каждой базисной функции в пространстве L_2 равна единице, т. е. для любого $1 \leq i \leq N$

$$\sum_{j=1}^N h_{ij}^2 = 1.$$

В геометрической интерпретации результатом ортогонального преобразования исходного вектора являются его проекции на оси ортогональной координатной системы. Аналогами этих проекций при ортогональном преобразовании являются спектральные коэффициенты. Отсюда для спектральных коэффициентов вытекает важное свойство, которое выражается в их взаимной независимости. Для преобразований по системам ортонормированных базисных функций справедливо равенство Парсеваля

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k^2 = \sum_{k=1}^M y_k^2.$$

При этом исходный вектор \mathbf{X} и его спектр \mathbf{Y} информационно эквивалентны [4, 15]. Это свойство особенно важно для решаемой в работе задачи. Отмеченные свойства означают, что существует обратное преобразование, т. е. возможно восстановление исходного вектора из спектра \mathbf{Y} :

$$\mathbf{X} = \mathbf{H}^* \mathbf{Y},$$

где \mathbf{H}^* — комплексно-сопряженная матрица оператора в общем случае. Для вещественного базиса $\mathbf{H}^* = \mathbf{H}^T$.

Выбор той или иной базисной системы производится по требованиям конкретной задачи анализа сигналов. При решении задачи оценки параметров "наложившихся" пиков базис должен обеспечивать получение пространства информативных признаков невысокой размерности и выражаться в факторизованной форме, которая ведет к возможности оперативного выполнения ортогонального преобразования по быстрому алгоритму. Сокращение размерности при этом заключается

в том, что при ортогональном преобразовании основная информативная (релевантная) часть исходной информации концентрируется в k спектральных коэффициентах ($k \ll N$). За счет исключения остальных спектральных коэффициентов как неинформативных размерность вектора информативных признаков существенно уменьшается. Таким образом, следует выбирать ту базисную систему, которая обеспечивает максимальное уменьшение размерности вектора информативных признаков при минимальных информационных потерях. В работе [16] предложен новый подход к построению ортогональных преобразований с параметрически перестраиваемыми по форме базисными функциями с сохранением их ортогональности и полноты. Рассмотрим аппарат таких преобразований более подробно.

Перестраиваемые ортогональные преобразования

Существо метода перестраиваемых ортогональных преобразований состоит в таком факторизованном представлении матрицы спектрального оператора, в котором ненулевые элементы факторизованных матриц взаимосвязаны условиями ортонормированности и полноты и имеют степени свободы, обеспечивающие параметрическое формирование множества базисов с алгоритмами быстрых преобразований. В основе построения алгоритма лежит представление оператора преобразования \mathbf{H} в виде произведения слабозаполненных (факторизованных) далее неразложимых матриц

$$\mathbf{H} = \mathbf{G}_n \mathbf{G}_{n-1} \cdots \mathbf{G}_1, \quad (1)$$

$\mathbf{G}_i(\varphi_{i1}, \dots, \varphi_{iN/2})$ — факторизованные (слабозаполненные далее неразложимые) матрицы, ненулевые элементы которых зависят от параметров φ_{ij} , $i=1, \dots, n$; $j=1, \dots, \frac{N}{2}$, где n — число факторизованных матриц \mathbf{G}_i , в частности при $N=2^n$, равно $\log_2 N$ (N — размерность оператора \mathbf{H}). При этом каждая из матриц \mathbf{G}_i содержит $\frac{N}{2}$ элементарных матричных блоков, обобщенная модель которых имеет параметрическую форму и названа в силу неразложимости спектральным ядром. Для операторов размерности $N=2^n$ факторизованные матрицы \mathbf{G}_i состояются из параметрических элементов ядер

$$V_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_{ij} & \cdots & \gamma_{ij} \\ \beta_{ij} & \cdots & \delta_{ij} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Пример структуры факторизованной матрицы \mathbf{G}_i имеет вид

$$\mathbf{G}_i = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{i1} & 0 & \cdots & 0 & \gamma_{i1} \\ \beta_{i1} & 0 & \cdots & 0 & \delta_{i1} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & \begin{bmatrix} \alpha_{i2} & 0 & \cdots & 0 & \gamma_{i2} \\ \beta_{i2} & 0 & \cdots & 0 & \delta_{i2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \cdots & 0 \\ \cdots & 0 \end{bmatrix} \\ \vdots & \vdots \\ \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & \begin{bmatrix} \alpha_{iN/2} & 0 & \cdots & 0 & \gamma_{iN/2} \\ \beta_{iN/2} & 0 & \cdots & 0 & \delta_{iN/2} \end{bmatrix} \\ 0 & \cdots & 0 & \begin{bmatrix} \beta_{iN/2} & 0 & \cdots & 0 & \delta_{iN/2} \end{bmatrix} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

В этом случае параметрические элементы матриц-ядер (2) вычисляются следующим образом:

$$V_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_{ij} & \cdots & \gamma_{ij} \\ \beta_{ij} & \cdots & \delta_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi_{i,j}) & \cdots & w_{i,j} \sin(\varphi_{i,j}) \\ \sin(\varphi_{i,j}) & \cdots & -w_{i,j} \cos(\varphi_{i,j}) \end{bmatrix},$$

$$w_{i,j} = \exp(j\theta_{i,j}), \quad \varphi \in [0, 2\pi], \quad \theta \in [0, 2\pi].$$

Задавая параметры элементов ядер $\varphi_{i,j}$ и $\theta_{i,j}$, можно формировать спектральные операторы \mathbf{H} с комплекснозначными и при $\theta_{i,j}=0$ вещественными базисными функциями по условию решаемой задачи.

СИНТЕЗ ПРИСПОСОБЛЕННОГО БАЗИСА ОРТОГОНАЛЬНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Как отмечено в предыдущем разделе, факторизованное представление матричного оператора \mathbf{H} может быть использовано для синтеза произвольных систем дискретных функций путем задания элементов ядер. Конструктивная основа синтеза спектральных операторов в ортогональных базисах дана в работе [17], в которой получено аналитическое выражение обобщенного спектрального ядра для класса полных ортонормированных систем функций. В данной работе для решения поставленных задач использован один из предложенных в работе [8] вариантов синтеза приспособленного оператора. Систему приспособленных базисных функций, отвечающих требованиям ортонормированности и полноты, предлагается строить на основе заданного эталона $\hat{\mathbf{R}}_{sm}$. Оператор ортогонального преобразования полагаем приспособленным к $\hat{\mathbf{R}}_{sm}$, если выполняется условие

$$\frac{1}{N} \mathbf{H}_n \hat{\mathbf{R}}_{sm} = \mathbf{Y}_u = [y_{u1}, 0, \dots, 0]^T. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{H}_n — приспособленный оператор; \mathbf{Y}_y — целевой вектор, принимаемый в качестве критерия настройки оператора; $\hat{\mathbf{R}}_{эм} = [r_{эм,1}, \dots, r_{эм,N}]^T$ — вектор обучающего эталона, который должен быть нормирован, т. е. удовлетворять условию

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_{эм,i}^2 = 1.$$

При соблюдении соотношения Парсеваля

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_{эм,i}^2 = \sum_{i=1}^M y_{y,i}^2 = 1$$

целевой вектор также будет получен в нормированной форме $\mathbf{Y}_y = [1, 0, \dots, 0]^T$.

В [4] изложен подход для настройки оператора \mathbf{H} по заданному нормированному эталону $\hat{\mathbf{R}}_{эм}$ класса анализируемых сигналов. Суть состоит в отыскании угловых параметров $\varphi_{i,j}$ спектрального оператора \mathbf{H}_n , удовлетворяющих условию (4). Число угловых параметров зависит от длины вектора анализируемого сигнала. В настоящей работе использован алгоритм, описанный в [8], в котором факторизованные матрицы оператора \mathbf{H}_n принимаются одинаковой структуры.

Пусть вектор эталона $\hat{\mathbf{R}}_{эм}$ имеет размерность N . Требуется найти параметры оператора \mathbf{H}_n , удовлетворяющего условию (4). Как и в (1), представим \mathbf{H}_n в факторизованном виде. При этом можно записать:

$$\frac{1}{N} \mathbf{H}_n \hat{\mathbf{R}}_{эм} = \mathbf{Y}_y \Leftrightarrow \frac{1}{N} \mathbf{G}_n \mathbf{G}_{n-1} \dots \mathbf{G}_1 = \mathbf{Y}_y,$$

где $n = \log_2 N$. Факторизованные матрицы \mathbf{G}_i принимаем следующей структуры:

$$\mathbf{G}_i = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{i1} & 0 & \dots & 0 & s_{i1} \end{bmatrix} & 0 & \dots & 0 \\ \begin{bmatrix} s_{i1} & 0 & \dots & 0 & -c_{i1} \end{bmatrix} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} c_{i2} & 0 & \dots & 0 & s_{i2} \end{bmatrix} & \dots & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} s_{i2} & 0 & \dots & 0 & -c_{i2} \end{bmatrix} & \dots & 0 \\ & & \ddots & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & \begin{bmatrix} c_{iN/2} & 0 & \dots & 0 & s_{iN/2} \end{bmatrix} \\ 0 & \dots & 0 & \begin{bmatrix} s_{iN/2} & 0 & \dots & 0 & -c_{iN/2} \end{bmatrix} \end{bmatrix},$$

где $c_{ij} = \cos(\varphi_{ij})$; $s_{ij} = \sin(\varphi_{ij})$; $i = 1, \dots, n$; $j = 1, \dots, N/2$.

Соотношение (4) удовлетворяется при определенных параметрах φ_{ij} факторизованных матриц \mathbf{G}_i . В работе [8] определены правила вычисления этих параметров, обеспечивающих выполнение условия (4), и описана итерационная процедура построения приспособленного базиса. В соответствии с [8], покажем подход по проведению итерационной процедуры. Поясним его на примере векторов $\hat{\mathbf{R}}_{эм}$ с размерностями $N = 2$ и $N = 4$.

Для случая $N = 2$ имеем:

$$\begin{bmatrix} c_1 & s_1 \\ s_1 & -c_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} c_1 r_1 + s_1 r_2 = y_1, \\ s_1 r_1 - c_1 r_2 = y_2, \end{cases}$$

где $\begin{cases} c_1 = \cos(\varphi_1), \\ s_1 = \sin(\varphi_1). \end{cases}$

Необходимо обеспечить равенство $\mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}_y$, что выполняется при $y_2 = s_1 r_1 - c_1 r_2 = 0$, откуда получаем:

$$\frac{s_1}{c_1} = \frac{r_2}{r_1} \Rightarrow \varphi_1 = \arctg\left(\frac{r_2}{r_1}\right).$$

Для случая $N = 4$ имеем:

$$\mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \hat{\mathbf{R}}_{эм} = \mathbf{Y}.$$

Рассмотрим первый шаг в процедуре произведения $\mathbf{G}_1 \hat{\mathbf{R}}_{эм} = \mathbf{Y}_1$:

$$\begin{bmatrix} c_{11} & 0 & s_{11} & 0 \\ s_{11} & 0 & -c_{11} & 0 \\ 0 & c_{12} & s_{12} & 0 \\ 0 & s_{12} & -c_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{14} \end{bmatrix},$$

где

$$\begin{cases} y_{11} = c_{11} r_1 + s_{11} r_3, \\ y_{12} = s_{11} r_1 - c_{11} r_3, \\ y_{13} = c_{12} r_2 - s_{12} r_4, \\ y_{14} = s_{12} r_2 - c_{12} r_4. \end{cases}$$

Обратим внимание на зависимость элементов \mathbf{Y}_1 . Можно видеть, что элементы y_{11} и y_{12} этого вектора определяются произведением первого ядра матрицы \mathbf{G}_1 на элементы r_1 и r_3 , и соответственно y_{13} и y_{14} находятся аналогично через произведение второго ядра на элементы r_2 и r_4 . Эту особенность можно отразить поядерной записью:

$$\begin{bmatrix} c_{11} & s_{11} \\ s_{11} & -c_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ r_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{11} \\ y_{12} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} c_{12} & s_{12} \\ s_{12} & -c_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_2 \\ r_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{13} \\ y_{14} \end{bmatrix},$$

из которой вытекают выражения для вычисления двух искомым параметров:

$$\varphi_{11} = \arctg\left(\frac{r_1}{r_3}\right), \quad \varphi_{12} = \arctg\left(\frac{r_2}{r_4}\right),$$

что приводит вектор \mathbf{Y}_1 к виду

$$\mathbf{Y}_1 = [y_{11}, 0, y_{13}, 0]^T.$$

По аналогии для второго шага произведения $\mathbf{G}_2 \mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}_2$ имеем:

$$\begin{bmatrix} c_{21} & 0 & s_{21} & 0 \\ s_{21} & 0 & -c_{21} & 0 \\ 0 & c_{12} & s_{12} & 0 \\ 0 & s_{12} & -c_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{11} \\ 0 \\ y_{13} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{21} \\ y_{22} \\ y_{23} \\ y_{24} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{21} & s_{21} \\ s_{21} & -c_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{11} \\ y_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{21} \\ y_{22} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} c_{12} & s_{12} \\ s_{12} & -c_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{23} \\ y_{24} \end{bmatrix}.$$

Откуда находим параметры

$$\varphi_{21} = \arctg\left(\frac{y_{11}}{y_{13}}\right), \quad \varphi_{22} = 0,$$

при которых достигается искомое равенство

$$\mathbf{Y}_2 = \mathbf{Y}_u = [y_{21}, 0, 0, 0]^T.$$

Рассмотрим случай отыскания параметров φ_{ij} для произвольной размерности $N = 2^n$ факторизованного оператора $\mathbf{H} = \mathbf{G}_n \mathbf{G}_{n-1} \dots \mathbf{G}_1$.

В процедуре вычисления φ_{ij} выделим промежуточную итерацию $\mathbf{G}_i \mathbf{Y}_{i-1} = \mathbf{Y}_i$:

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{i1} & 0 & \dots & 0 & s_{i1} \\ s_{i1} & 0 & \dots & 0 & -c_{i1} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & \begin{bmatrix} c_{i2} & 0 & \dots & 0 & s_{i2} \\ s_{i2} & 0 & \dots & 0 & -c_{i2} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \begin{bmatrix} c_{iN/2} & 0 & \dots & 0 & s_{iN/2} \\ s_{iN/2} & 0 & \dots & 0 & -c_{iN/2} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \bullet$$

$$\bullet \begin{bmatrix} y_{i-1,1} \\ y_{i-1,2} \\ \vdots \\ y_{i-1,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{i,1} \\ y_{i,2} \\ \vdots \\ y_{i,N} \end{bmatrix}$$

(здесь \bullet — знак умножения матрицы на вектор).

По аналогии с рассмотренным выше можно записать:

$$\begin{bmatrix} c_{i1} & s_{i1} \\ s_{i1} & -c_{i1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{i-1,1} \\ y_{i-1,1+N/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{i,1} \\ y_{i,2} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{i2} & s_{i2} \\ s_{i2} & -c_{i2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{i-1,2} \\ y_{i-1,2+N/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{i,3} \\ y_{i,4} \end{bmatrix},$$

\vdots

$$\begin{bmatrix} c_{iN/2} & s_{iN/2} \\ s_{iN/2} & -c_{iN/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{i-1,N/2} \\ y_{i-1,1+N/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{i,N-1} \\ y_{i,N} \end{bmatrix}.$$

Требуемый результат на i -й итерации

$$\mathbf{Y}_i = [y_{i,N-1}, 0, \dots, 0]^T \Rightarrow \begin{bmatrix} c_{iN/2} & s_{iN/2} \\ s_{iN/2} & -c_{iN/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{i-1,N/2} \\ y_{i-1,1+N/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{i,N-1} \\ 0 \end{bmatrix}$$

обеспечивается при

$$\begin{cases} \varphi_{iN/2} = \arctg\left(\frac{y_{i-1,N/2}}{y_{i-1,1+N/2}}\right), \\ \varphi_{iN/2} = 0, \text{ если } y_{i-1,N/2} = y_{i-1,1+N/2} = 0. \end{cases}$$

Можно утверждать, что для любого $i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, \frac{N}{2}$ требуемый результат

$$\begin{bmatrix} c_{ij} & s_{ij} \\ s_{ij} & -c_{ij} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{i-1,j} \\ y_{i-1,j+N/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{i,2j-1} \\ 0 \end{bmatrix}$$

выполняется при

$$\begin{cases} \varphi_{ij} = \arctg \left(\frac{y_{i-1,j}}{y_{i-1,j+\frac{N}{2}}} \right), \\ \varphi_{ij} = 0, \text{ если } y_{i-1,j+\frac{N}{2}} = y_{i-1,j} = 0. \end{cases}$$

Рассмотренные итерационные процедуры можно пояснить схемой, показанной на рис. 1, где длина черной полоски обозначает число ненулевых элементов вектора.

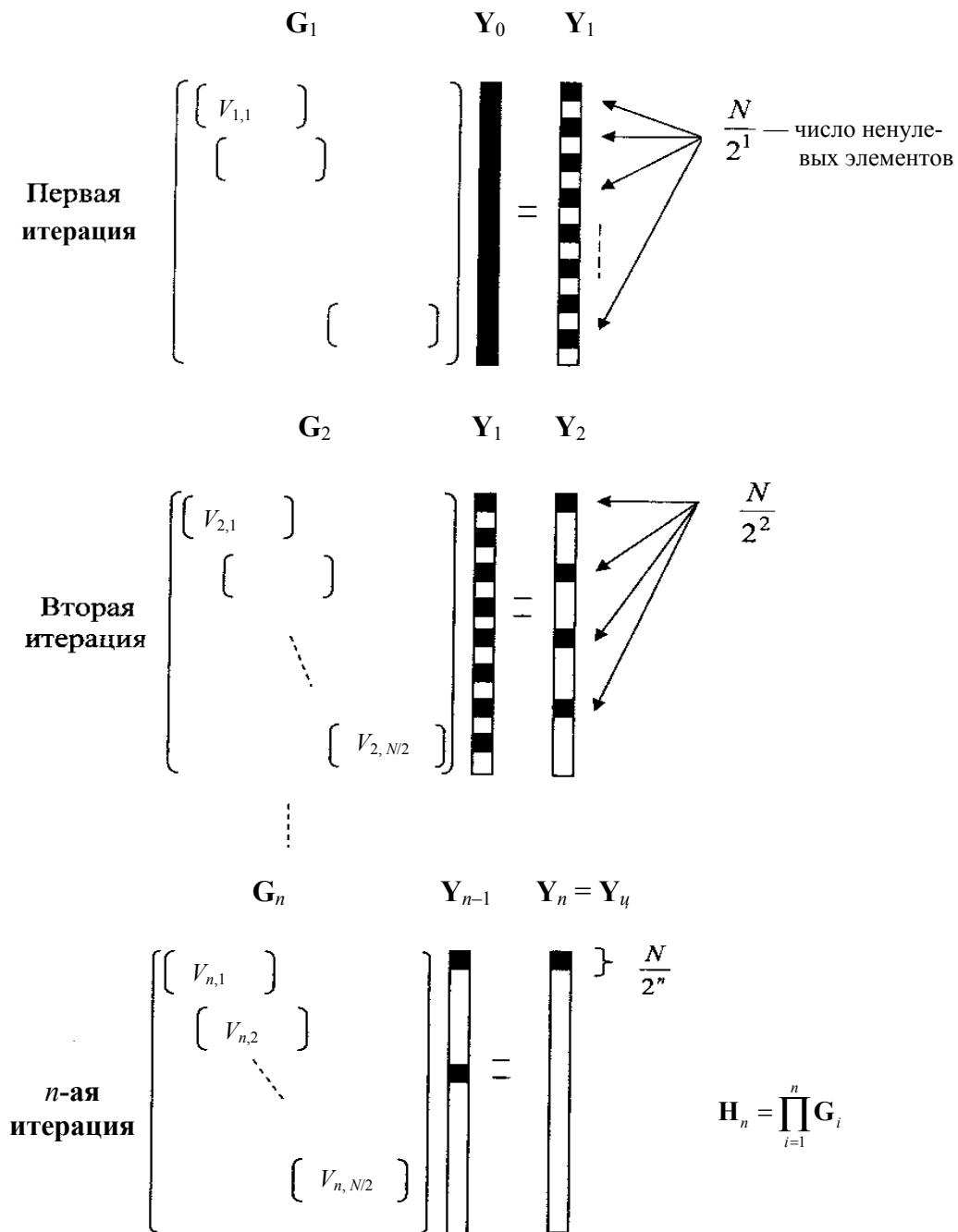


Рис. 1. Итерационная процедура синтеза приспособленного оператора ортогонального преобразования

**ПРИМЕНЕНИЕ ПРИСПОСОБЛЕННОГО
ОРТОГОНАЛЬНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ
ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ "НАЛОЖИВШИХСЯ"
МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ПИКОВ
РАЗЛИЧНОЙ ФОРМЫ**

**Масс-спектрометрические пики
гауссовой формы**

Рассмотрим масс-спектрометрический сигнал, представляющий собой смесь двух пиков одинаковой ширины, но различной амплитуды и разным положением на оси массовых чисел. Математически такой сигнал описывается выражением:

$$S = F_1 + F_2,$$

$$F_1 = A_1 \exp \left[- \left(\frac{t - t_1}{\sigma} \right)^2 \right], \quad (5)$$

$$F_2 = A_2 \exp \left[- \left(\frac{t - t_2}{\sigma} \right)^2 \right].$$

Сигнал S и его составляющие F_1 и F_2 представлены в виде графиков на рис. 2.

Алгоритм восстановления "наложившихся" пиков гауссовой формы представляется в виде последовательности следующих операций.

1) Находим матрицу ортогонального преобразования в приспособленном базисе \mathbf{H} в соответствии с формулой (1) для одиночного пика с помощью алгоритма, описанного выше.

2) Находим вектор преобразованного сигнала в приспособленном базисе для одиночного пика F_1 в соответствии с формулой

$$\mathbf{Y} = \mathbf{H} \mathbf{F}_1^T. \quad (6)$$

3) Находим вектор преобразованного сигнала в приспособленном базисе для суммарного сигнала $F_1 + F_2$ в соответствии с формулой

$$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{H} (\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2)^T. \quad (7)$$

4) Находим разность преобразованных сигналов

$$\mathbf{Y}_2 = \mathbf{Y}_1 - \mathbf{Y}. \quad (8)$$

5) Выполняем обратное преобразование

$$y_1 = (\mathbf{H}^T \mathbf{Y}_1) / N, \quad (9)$$

N — количество отсчетов в сигнале. Деление на количество отсчетов необходимо для согласования энергий сигнала в соответствии с равенством Парсевала.

На рис. 3 представлен сигнал после ортогонального преобразования в приспособленном базисе в соответствии с формулой (6).

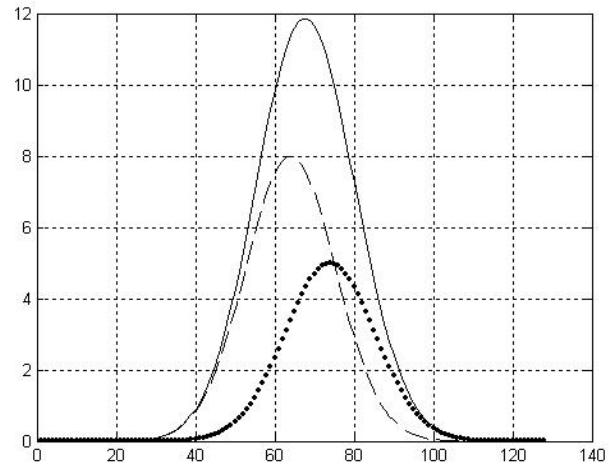


Рис. 2. "Наложившиеся" пики гауссовой формы. Сплошная линия — суммарный сигнал; пунктирная линия — сигнал F_1 ; линия из точек — F_2

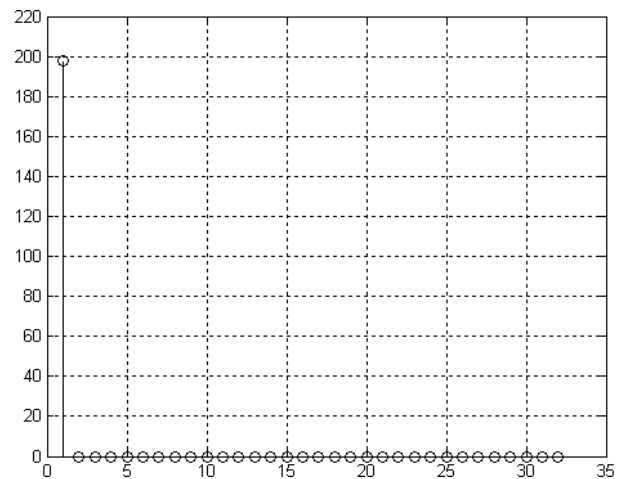


Рис. 3. Сигнал одиночного пика гауссовой формы после спектрального преобразования в приспособленном базисе для $N = 32$

На рис. 4 — сигнал после спектрального преобразования в приспособленном базисе для суммы $F_1 + F_2$; на рис. 5 — сигнал после обратного спектрального преобразования в приспособленном базисе для разности сигналов $\mathbf{Y}_2 = \mathbf{Y}_1 - \mathbf{Y}$.

Как показала проверка программы, реализующей описанный выше алгоритм, качество восстановления не зависит от количества отсчетов в сигнале. Проверка проводилась для $N = 16, 32, 64, 128$ и 256 и для эталонных сигналов, имеющих разную амплитуду и положение на оси независимой переменной.

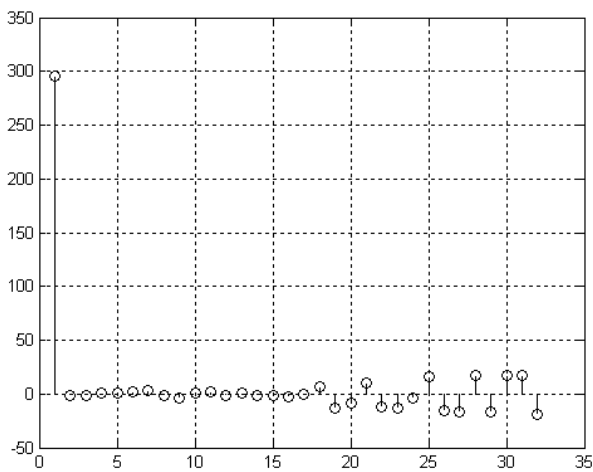


Рис. 4. Сигнал суммы $F_1 + F_2$ пиков гауссовой формы после спектрального преобразования в приспособленном базисе для $N = 32$

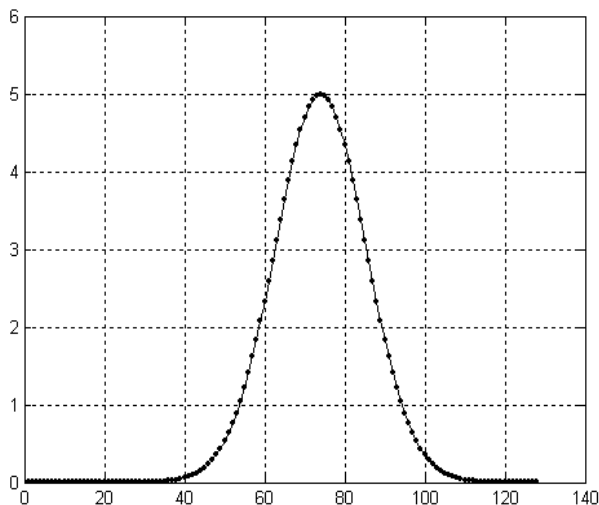


Рис. 5. Сигнал после обратного спектрального преобразования в приспособленном базисе для разности сигналов $Y_2 = Y_1 - Y$. Сплошная линия — исходный сигнал F_2 ; линия из точек — восстановленный сигнал

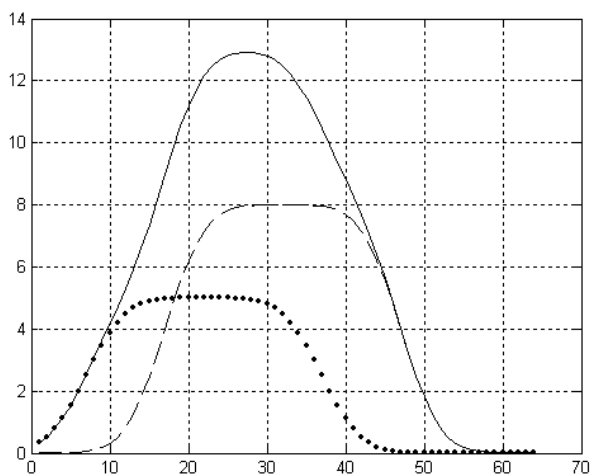


Рис. 6. "Наложившиеся" пики для масс-спектрометров с широкой щелью. Сплошная линия — суммарный сигнал, пунктирная линия — сигнал F_1 , линия из точек — F_2

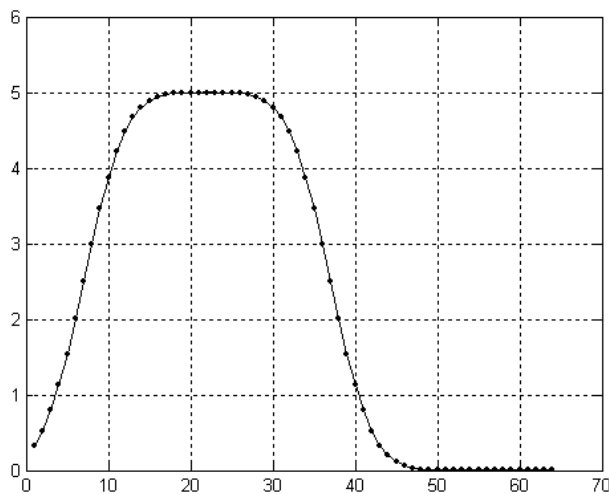


Рис. 7. Сигнал после обратного спектрального преобразования в приспособленном базисе для сигналов масс-спектрометров с широкой щелью. Сплошная линия — исходный сигнал F_2 ; линия из точек — восстановленный сигнал

Масс-спектрометрические пики, отличные от гауссовой формы

Пусть

$$F_1 = A_1 \left(\Phi \left(\frac{t_2 - t}{\sigma\sqrt{2}} \right) + \Phi \left(\frac{t - t_1}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right), \tag{9}$$

где Φ — функция Лапласа. Такая форма пика получается в результате операции свертки пика гауссовой формы и прямоугольной функции, представляющей собой модель выходной щели масс-спектрометра; $t_2 - t_1$ — ширина щели.

В качестве F_2 используем (9), но со смещением по оси независимой переменной на величину $centr$:

$$F_2 = A_2 \left(\Phi \left(\frac{t_2 - t - centr}{\sigma\sqrt{2}} \right) + \Phi \left(\frac{t - t_1 - centr}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right). \quad (10)$$

Суммарный сигнал — $S = F_1 + F_2$. Сигнал S и его составляющие F_1 и F_2 представлены в виде графиков на рис. 6. Аналогично сигналам гауссовой формы выполняем преобразования по алгоритму, описанному выше. В качестве эталонного сигнала для нахождения матрицы преобразования \mathbf{H} используем сигнал, описанный формулой (9). Так же как и для сигналов гауссовой формы, ортогональное преобразование сигнала (9) в приспособленном базисе дает одну линию, аналогичную представленной на рис. 3.

Выполнив прямое преобразование сигнала S с помощью матрицы \mathbf{H} , а затем обратное преобразование для разности преобразованных сигналов, получаем восстановленный сигнал F_2 . На рис. 7 представлены исходный и восстановленный сигналы.

Рассмотрим теперь сигналы, описываемые формулой (9), но искаженные динамическими свойствами регистрации. Как показано в работах [18–20], такие сигналы описываются в следующем виде:

$$F_1 = \text{conv}[\exp(-\alpha t) \sin \omega t, s_{\text{mod}}], \quad (11)$$

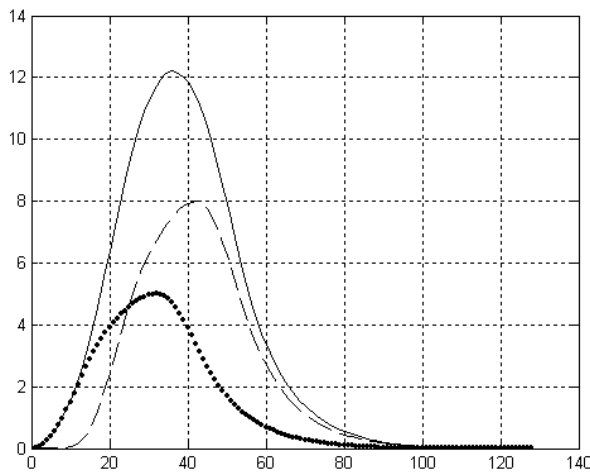


Рис. 8. "Наложившиеся" пики для сигналов масс-спектрометров с широкой щелью, искаженных динамическими свойствами регистрирующей системы.

Сплошная линия — суммарный сигнал; пунктирная линия — сигнал F_1 ; линия из точек — F_2

где s_{mod} — сигнал, описываемый формулой (9), а conv — операция свертки сигналов в квадратных скобках, разделенных запятой. Параметр α характеризует инерционное звено системы регистрации, а ω — колебательное звено. Характерной особенностью данных сигналов является относительно быстрый подъем на пик и медленный спад, что говорит о значительной постоянной времени регистрирующей системы. Сигнал F_2 — аналогичный сигналу F_1 , но смещенный на величину $centr$ так же, как в формуле (10). Суммарный сигнал: $S = F_1 + F_2$. Сигнал S и его составляющие F_1 и F_2 представлены в виде графиков на рис. 8. Восстановление сигналов данной формой производим по рассмотренному выше алгоритму. На рис. 9 представлены исходный и восстановленный сигналы.

ПРИМЕНЕНИЕ ПРИСПОСОБЛЕННОГО ОРТОГОНАЛЬНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ФИЛЬТРАЦИИ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

Рассмотрим возможности применения ортогонального преобразования в приспособленном базисе для фильтрации масс-спектрометрических сигналов на примере сигналов гауссовой формы.

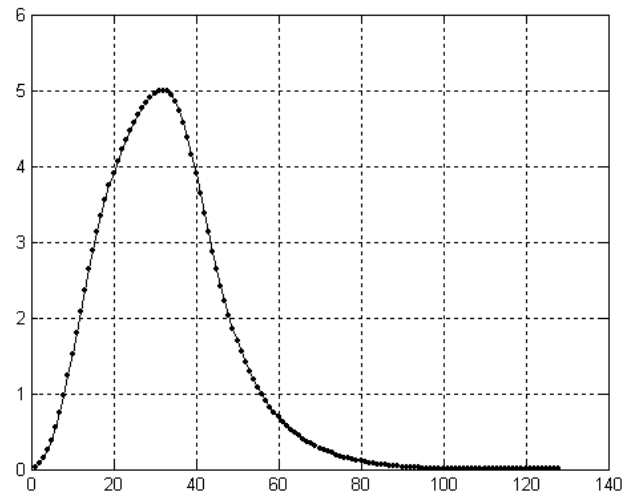


Рис. 9. Сигнал после обратного спектрального преобразования в приспособленном базисе для сигналов масс-спектрометров с широкой щелью, искаженных динамическими свойствами регистрирующей системы.

Сплошная линия — исходный сигнал F_2 ; линия из точек — восстановленный сигнал

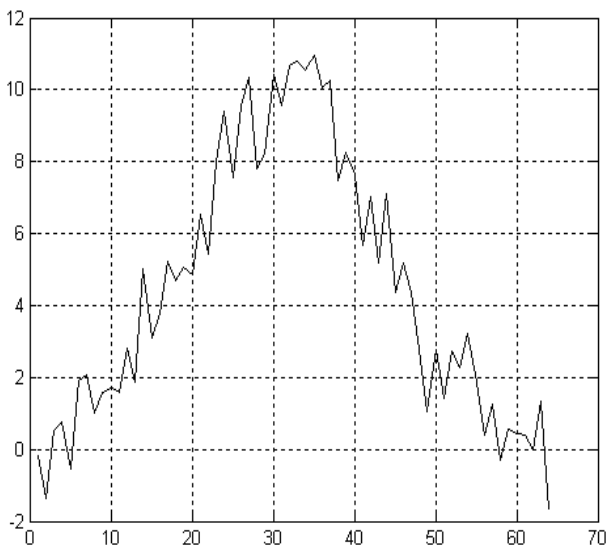


Рис. 10. Сигнал после добавления к пику гауссовой формы амплитудой 10 шума с нулевым средним и средним квадратичным отклонением, равным 1

Пусть $F_3 = F_1 + Ns$, где F_1 — сигнал гауссовой формы, описываемый формулой (5); Ns — шум с нормальной плотностью распределения и нулевым средним значением. На рис. 10 представлен график сигнала F_1 с $A_1=10$ и средним квадратичным отклонением шума, равным 1.

Алгоритм фильтрации имеет следующую последовательность операций.

1. Находим матрицу приспособленного преобразования \mathbf{H} для сигнала известной формы F_1 и амплитудой, равной 1.

2. Находим вектор преобразованного сигнала в приспособленном базисе для одиночного пика F_1 в соответствии с формулой (6).

3. Применяем полученную матрицу преобразования для исходного сигнала F_3 , но нормированного по среднему значению на вершине F_{3N} :

$$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{H}\mathbf{F}_{3N}^T.$$

4. Находим разность преобразованных сигналов в соответствии с формулой (8).

5. Выполняем обратное преобразование в соответствии с формулой (9).

6. Производим вычитание из полученного сигнала y_1 его среднего значения, умноженного на нормирующий коэффициент, вычисляемый при получении сигнала F_{3N} (см. п. 3), и находим шумовой сигнал Ns_1 .

7. Вычитаем полученный шумовой сигнал Ns_1

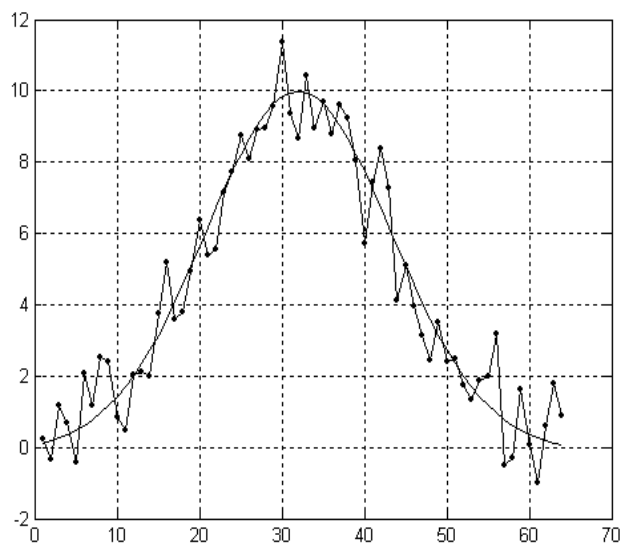


Рис. 11. Сигнал после фильтрации с помощью обратного спектрального преобразования в приспособленном базисе для гауссова сигнала. Сплошная линия — восстановленный сигнал; линия из точек — исходный сигнал

из исходного сигнала F_3 .

Получается хорошо сглаженный сигнал, но его амплитуда отличается от исходного. Ошибки различия тем меньше, чем больше отношение сигнала к шуму. Точность оценки амплитуды и качество сглаживания не зависят от количества точек в исходном сигнале.

На рис. 11 представлены исходный сигнал и сигнал после фильтрации с использованием ортогонального преобразования в приспособленном базисе.

ВЫВОДЫ

Рассмотренные алгоритмы разделения "наложившихся" пиков на основе ортогональных преобразований в приспособленном базисе имеют следующие основные преимущества:

- 1) независимость от формы исходного сигнала;
- 2) простота реализации;
- 3) точность восстановления параметров пиков

при использовании в качестве эталонного сигнала одиночного пика с известными параметрами.

В практических применениях некоторые параметры одиночного пика могут быть неизвестны, и поэтому в качестве эталонного сигнала пика целесообразно использовать пик известной формы и нормированной амплитуды. В этом случае рассмотренные алгоритмы могут быть использованы для решения следующих задач:

1) нахождения начального приближения параметров "наложившихся" пиков для их отыскания методом наименьших квадратов;

2) принятия решения о том, что в оцениваемом сигнале содержится несколько пиков (см. рис. 3 и 4).

Фильтрация сигналов с использованием преобразования в приспособленном базисе дает хорошо сглаженный сигнал, но точность восстановления параметров пиков зависит от отношения сигнала к шуму в исходном сигнале.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алексеев А.А., Солодовников А.И., Спиваковский А.М., Кноте К. Адаптивный спектральный анализ сигналов на основе перестраиваемых базисов // Известия СПбГЭТУ: Системы обработки информации и управления. 1996. Вып. 490. С. 60–65.
2. Алексеев А.А., Солодовников А.И., Спиваковский А.М., Кноте К. Использование адаптивных быстрых алгоритмов спектральных преобразований // Оперативная обработка экспериментальной информации (Инновации, новые технологии, маркетинг, инвестиции, внедрение). 1996. № 1. С. 4–5.
3. Солодовников А.И., Кноте К. Метод адаптивного получения информационных признаков в задаче классификации биосигналов // Известия СПбГЭТУ. 1998. Вып. 1. С. 26–29.
4. Солодовников А.И., Спиваковский А.М. Основы теории и методы спектральной обработки информации: Учебн. пособие. Л.: Изд-во Ленингр. университета, 1986. 272 с.
5. Алексеев А.А., Солодовников А.И., Спиваковский А.М., Кноте К. Адаптивный метод формирования диагностических признаков в информационно-измерительных системах // Оборонная техника: Ежемесячный научно-технический сборник. 1998. № 6-7. С. 66–69.
6. Солодовников А.И., Канатов И.И., Спиваковский А.М. Синтез ортогональных базисов на основе обобщенного спектрального ядра // Межвуз. сб. Ленингр. университет, 1976. Вып. 2. С. 99–112.
7. Солодовников А.И. Синтез полных систем ортонормированных функций, имеющих алгоритм быстрого преобразования // Межвуз. сб.: Вопросы теории систем автоматического управления. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1978. Вып. 4. С. 94–105.
8. Абденби А. Разработка и исследование метода и алгоритмов классификации сигналов на основе приспособляемых спектральных ортогональных преобразований. Дис. ... канд. техн. наук. СПбГЭТУ, 2005. 120 с.
9. Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. М.: Наука, 1979. 368 с.
10. Биргер И.А. Техническая диагностика. М.: Машиностроение, 1978. 240 с.
11. Andrew H.C. Multidimensional rotation in feature selection // IEEE Trans. 1971. V. C-20. P. 1045–1051.
12. Carl I.M., Half C.F. The application of filtered transform to general classification problem // IEEE Trans. 1972. V. C-21. P. 785–790.
13. Неймарк Ю.И., Басин Ю.Г. Алгоритмы приспособленного базиса в задачах распознавания образов // Изв. АН СССР: Техническая кибернетика. 1970. № 2. С. 145–161.
14. Ахмед Н.Д., Рао К.Р. Ортогональные преобразования при обработке цифровых сигналов. М.: Связь, 1980. 248 с.
15. Свириденко В.А. Анализ систем со сжатием данных. М.: Связь, 1977. 184 с.
16. Солодовников А.И. Синтез полных ортонормированных функций, имеющих алгоритм быстрого преобразования // Межвуз. сб.: Вопросы теории систем автоматического управления. Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1978. Вып. 4. С. 94–105.
17. Солодовников А.И., Канатов И.И., Спиваковский А.М. Методы обобщенных спектральных преобразований в задачах оперативного сжатия информации // Автоматизация экспериментальных исследований. М., 1979. Т. 62. С. 19–35.
18. Манойлов В.В., Заруцкий И.В. Отбраковка "выбросов" и оценка параметров масс-спектрометрических сигналов для прецизионного изотопного анализа // Научное приборостроение. 2002. Т. 12, № 3. С. 67–73.
19. Манойлов В.В., Заруцкий И.В. Алгоритмы первичной обработки масс-спектрометрических сигналов для прецизионного изотопного анализа // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Техническая физика и автоматизация. М.: Центральный научно-исследовательский институт информации и технико-экономических исследований в атомной науке и технике, 2002. Вып. 56. С. 52–74.
20. Манойлов В.В., Заруцкий И.В. Алгоритмы обработки масс-спектрометрических сигналов для изотопного и химического анализа // Труды LVII научной сессии, посвященной Дню радио. М.: Российское научно-техническое общество радиотехники, электроники и связи им. А.С. Попова, 2002. Т. 1. С. 274–277.

*Санкт-Петербургский государственный электро-
технический университет (Абденби А., Солодовни-
ков А.И.)*

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург (Манойлов В.В., Заруцкий И.В.)*

Материал поступил в редакцию 13.09.2006.

ADAPTED-BASIS SPECTRAL TRANSFORMATIONS FOR "SUPERIMPOSED" PEAKS SEPARATION AND MASS SPECTROMETRIC SIGNAL FILTRATION

A. Abdenby, A. I. Solodovnikov, V. V. Manoilov*, I. V. Zarutsky*

Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI" (ETU)

**Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg*

The paper considers the problem of using adapted-basis spectral transformation in order to improve the spectrum resolution and filter mass spectrometric signals. As reference signals necessary to construct the basis, various functions fitting the mass spectrometric peaks are used. The simplest function used to fit mass spectrometric signals is Gaussian. In addition, mass spectrometric peaks can be fit with flat-top functions and functions describing signals distorted by the detection system with an electrometric amplifier having a large time constant. The paper demonstrates that the direct and inverse spectral transformations in the basis "adapted" to the peak shape make it possible to reliably recover parameters of individual peaks contained in a mixed signal in case different peaks can be fit by similar functions different only in the amplitude and position on the independent variable axis. The recovery quality does not depend on the peak width and number of data in the sample. When filtering noise by spectral transformation, one can obtain well smoothed peaks whose positions can be precisely estimated in case the signal/noise ratio is no less than three.