УДК 681.391:543/545

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

Р.Т. Сайфуллин

Самарский государственный технический университет
Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Рассматривается алгоритм вычисления фрактальных характеристик многокомпонентных сигналов хроматографических анализаторов. Индекс фрактальности используется в качестве идентификатора многокомпонентных хроматографических сигналов. Он характеризует хроматограмму в целом и позволяет упорядочивать анализируемые сигналы по свойствам хаотичности или сложности и таким образом классифицировать, разделять их. Для конкретной многокомпонентной хроматограммы на основе анализа изменения индекса фрактальности во времени делается вывод о соответствии хроматограммы конкретному классу.

Ключевые слова: *многокомпонентная хроматограмма, фрактальный сигнал, фрактальные характеристики.*

В основе формирования структуры фрактального сигнала лежит гипотеза самоподобия. Будем рассматривать многокомпонентный хромотографический сигнал, состоящий из наложений множества хроматографических пиков разных размеров, как фрактальный. Такие многокомпонентные хроматограммы характерны при анализе сложных смесей загрязнений различной природы [1], контроле загрязнений окружающей среды, определении загрязнений в воздухе, воде и т. д.

В связи со спецификой формирования фрактального сигнала возникает необходимость использования методов анализа и обработки таких сигналов, позволяющих оценивать специфические параметры фрактального сигнала, к которым относится, в частности, фрактальная размерность [1]. Познавательная сила фрактальной размерности состоит в том, что с ее помощью можно упорядочивать исследуемые сигналы по свойствам хаотичности или сложности и таким образом классифицировать, разделять их. Таким образом, фрактальный анализ многокомпонентных хроматографических сигналов позволит поставить в соответствие хроматограмме некоторые фрактальные показатели, характеризующие всю хроматограмму в целом, и использовать их в задачах контроля, оценки экологического состояния и т. д.

Фрактальная размерность обычно вычисляется через клеточную размерность D_c. Представим выходной сигнал аналитического прибора в виде графика вещественной функции одной переменной $y = f(t)$, определенной на некотором отрезке $[a,b]$.

Определение фрактальной размерности с помощью клеточного покрытия сигнала состоит из следующих этапов.

1. Плоскость, на которой определен график, разбивается на клетки

Раухат Толгатович Сайфуллин (д.т.н., проф.), профессор кафедры «Информационно-измерительная техника».

размером δ, и подсчитывается число клеток $N(\delta)$, через которые проходит хотя бы одна точка этого графика.

2. Производятся вычисления $N(\delta)$ для различных длин стороны $\delta(\delta_1 = \delta, \delta_2 = \frac{\delta_1}{2}, \delta_3 = \frac{\delta_1}{4}, \ldots)$. Из определения фрактальной размерности [2] число элементов покрытия $N(\delta)$ должно вести себя как $\sim e^{-D_c}$, следовательно, $\ln N(\delta) = -D_c \ln \delta$. По полученным данным строится зависимость $\ln N(\delta)$ от $\ln \delta$.

3. С помощью метода наименьших квадратов (МНК) эта зависимость аппроксимируется прямой, угол наклона которой и определяет клеточную размерность D_c.

По сравнению с клеточным существует более точное покрытие графика функции $y = f(t)$ из класса прямоугольников [3]. Введем равномерное разбиение отрезка $[a,b]:[a = t_0, t_1, \ldots t_m = b]$, где $t = t_0 + i\delta$, $\delta = \frac{(b-a)}{m}$, $i = 1,2,\ldots$ Построим покрытие функции $f(t)$ прямоугольниками с основанием δ (см. рисунок).

Высота прямоугольника на отрезке $[t_{i-1}, t_i]$ будет равна разности между максимальным и минимальным значениями функции $f(t)$ на этом отрезке. Обозначим эту величину $A_i(\delta)$ (см. рисунок). Тогда величина

$$V(\delta) = \sum_{i=1}^{m} A_i(\delta) \qquad (1)$$

является амплитудной вариацией функции $f(t)$ [3], соответствующей масштабу разбиения δ на отрезке $[a,b]$.

Полную площадь покрытия $S(\delta)$ можно записать в виде $S(\delta) = V(\delta) \cdot \delta$. Таким образом, $S(\delta)$ является площадью покрытия графика функции из класса прямоугольников. Такое покрытие называют минимальным [3].

Пусть D_μ – размерность минимального покрытия, тогда

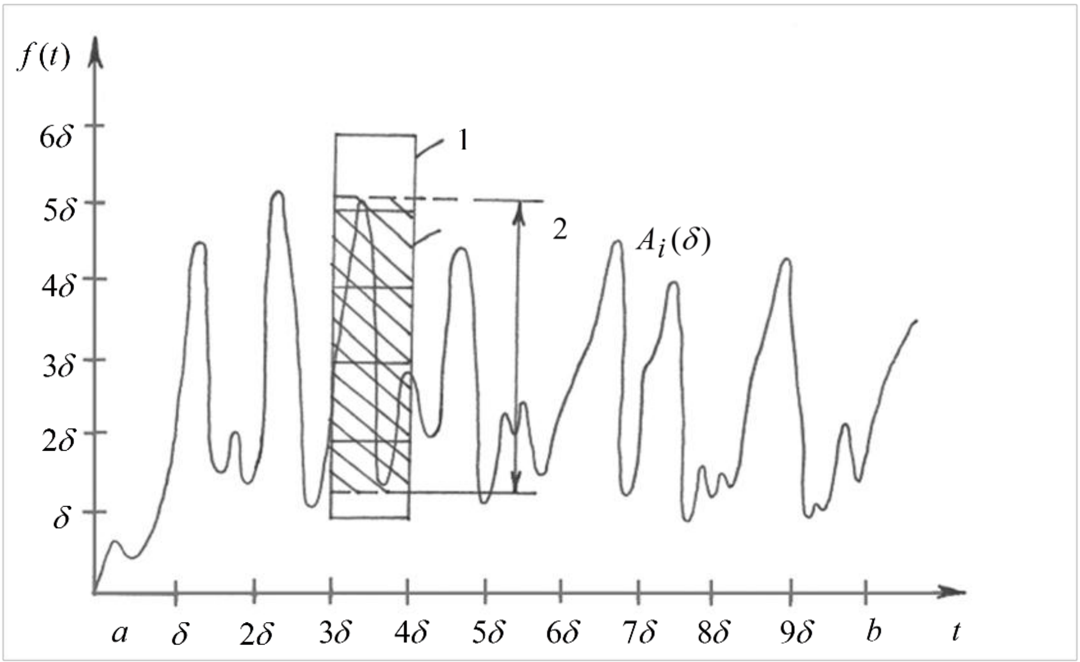
$$D_\mu = \lim_{\delta \to 0} \frac{\ln V(\delta) \cdot \delta}{\ln\left(\frac{1}{\delta}\right)}.$$

Следовательно, $V(\delta) \sim \delta^{D_\mu - 1}$, где показатель $\mu = D_\mu - 1$ – индекс фрактальности.

Главным преимуществом индекса μ по сравнению с другими фрактальными показателями является то, что соответствующая ему величина $V(\delta)$ имеет быстрый выход на степенной асимптотический режим. Это приводит к возможности использовать μ в качестве локальной характеристики, определяющей динамику исходного сигнала.

Индекс фрактальности μ и размерность минимального покрытия D_μ являются основными величинами, подлежащими оценке.

При вычислении индекса μ используется последовательность m вложенных разбиений отрезка $[a,b]$, где $m = 2^n$, $n = 0,1,2,\ldots$. Таким образом, как и в случае клеточного покрытия, $\delta_1 = \delta, \delta_2 = \frac{\delta_1}{2}, \delta_3 = \frac{\delta_1}{4}, \ldots$.



Организация покрытия многокомпонентного сигнала:
1 – клеточное покрытие; 2 – покрытие прямоугольником

Для каждого такого разбиения вычисляется амплитудная вариация $V(\delta)$ (1). Здесь $A_i(\delta)$ равна разности между максимальным и минимальным значениями сигнала на соответствующем интервале $[t_{i-1}, t]$. По аналогии с клеточным покрытием строится зависимость $V(\delta)$ от δ в двойных логарифмических координатах. Для определения значения индекса фрактальности μ по этим данным следует найти линию регрессии $y = b_0 + b_1 t$ (b_0, b_1 – константы) и положить $b_1 = -\mu$.

Чтобы соотнести значения индекса фрактальности μ с поведением сигнала, необходимо определить функцию $\mu(t)$ как значение индекса μ, полученное на некотором минимальном интервале, предшествующем t. Чем больше μ, тем выше стабильность. С помощью функции $\mu(t)$ можно протестировать многокомпонентные хроматограммы с тем, чтобы выделить в них фрагменты стабильности.

Таким образом, функцию $\mu(t)$ можно рассматривать в качестве идентификатора многокомпонентных хроматографических сигналов. Для этого с помощью МНК рассчитываются значения μ, а также нижняя $\mu_н$ и верхняя $\mu_в$ границы доверительного интервала, в который истинное значение μ попадает с заданной вероятностью. Выделяются временные интервалы, где $\mu_в < c$, $\mu_н > c$,

$\mu_н < c < \mu_в$, c – константа (обычно $c = 0{,}5$). Для конкретной многокомпонентной хроматограммы с помощью функции $\mu(t)$ выделяются интервалы стабильности, и по ним делается вывод о соответствии хроматограммы конкретному классу.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Другов Ю.С.* Экологическая аналитическая химия. – М., 2000. – 432 с.
2. *Короленко П.В., Маганова М.С., Меснянкин А.В.* Новационные методы анализа стохастических процессов и структур в оптике. Фрактальные и мультифрактальные методы, вейвлет-преобразования. – М.: МГУ, 2004. – 82 с.
3. *Дубовиков М.М., Крянев А.В., Старченко Н.В.* Размерность минимального покрытия и локальный анализ фрактальных временных рядов. // Вестник РУДН. – 2004. – Т. 3. – № 1. – С. 81-95.

Статья поступила в редакцию 15 января 2014 г.

DETERMINATION OF MULTI-FRACTAL CHARACTERISTICS OF THE CHROMATOGRAPHIC SIGNALS

R.T. Saifullin

Samara State Technical University
244, Molodogvardeyskaja st., Samara, 443100, Russian Federation

An algorithm for determining the fractal characteristics of multicomponent signals of GC analyzers is considered. Fractal index is used as an identifier fir multicomponent chromatographic signals. For specific multicomponent chromatogram based on the analysis of the fractal index changing over time the compliance of chromatogram to the specific class is concluded.

Keywords: *multicomponent chromatogram, fractal signals, fractal characteristics.*

Rauhat T. Saifullin (Dr. Sci. (Techn.)), Professor.