

УДК 681.391:543/545

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ АСИММЕТРИИ И ЭКСЦЕССА ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ ПИКОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ФУНКЦИЙ ЧЕБЫШЕВА – ЭРМИТА И РЯДОВ ГРАМА – ШАРЛЬЕ**Р.Т. Сайфуллин, А.В. Бочкарев*Самарский государственный технический университет
Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Аннотация. Цель работы заключается в разработке алгоритма, позволяющего по коэффициентам разложения в базисе функций Чебышева – Эрмита оценить коэффициенты асимметрии и эксцесса для хроматографического пика, заданного рядом Грама – Шарлье. Исследуется возможность прямого перехода от коэффициентов кодирования в базисе функций Чебышева – Эрмита к весам при членах ряда Грама – Шарлье с дальнейшим выражением интересующих коэффициентов асимметрии и эксцесса. С помощью алгоритма кодирования сигналов в базисе функций Чебышева – Эрмита применительно к рядам Грама – Шарлье формируется линейное уравнение относительно коэффициентов асимметрии и эксцесса, система таких уравнений решается методом Крамера для вычисления значений искоемых коэффициентов. Приводятся примеры вычисления искоемых коэффициентов для сигнала, заданного рядом Грама – Шарлье. Производится анализ погрешностей алгоритма, зависимости погрешностей вычисленных коэффициентов асимметрии и эксцесса от погрешностей определения сдвига и среднеквадратической ширины исследуемого хроматографического пика. Благодаря использованию полученных формул расчета коэффициентов асимметрии и эксцесса удастся построить быстрые вычислительные алгоритмы обработки, в том числе решение задачи разделения совмещенных хроматографических пиков. Для вычислений и графического представления результатов моделирования использована система компьютерной алгебры *Wolfram Mathematica 11.3*.

Ключевые слова: функции Чебышева – Эрмита, ряд Грама – Шарлье, асимметрия, эксцесс, хроматографический пик, преобразование сигналов, разделение совмещенных сигналов, хроматография.

Введение

Одним из подходов к созданию алгоритмов обработки сигналов аналитических приборов является кодирование сигнала в базисе функций Чебышева – Эрмита с последующим декодированием по другим, предварительно рассчитанным базисам; причем в зависимости от выбора базиса возможно получить сам сигнал [1–3], его производную различных порядков [3, 4], вейвлет-преобразование [5, 6] и т. п. Функции Чебышева – Эрмита находят широкое распространение в различ-

* Работа выполнена при финансовой поддержке гранта аспирантов ФГБОУ ВО «СамГТУ».

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

Бочкарев Андрей Владимирович, аспирант, преподаватель кафедры «Информационно-измерительная техника».

ных областях науки и техники [7–14], а также обладают сглаживающим свойством [14].

Составляющие сигналы аналитических приборов отдельные пики (далее *хроматографические пики*) с высокой степенью точности описываются теми же функциями, что и законы распределения, близкие по форме кривой к гауссиану либо к его асимметричным аналогам [15]. В этой связи для анализа формы хроматографических пиков применяются модели, заимствованные из статистики, в частности связанные с моментами случайной величины [15, 16]. Одной из таких моделей являются ряды Грама – Шарлье и производные от них ряды Эджворта – Крамера, для которых известны результаты исследований, указывающие на связь весов при членах ряда с параметрами процесса хроматографического разделения [17, 18].

В настоящий момент при обработке сигналов аналитических приборов не имеется единого подхода к разделению совмещенных хроматографических пиков, что дополнительно усложняется наличием асимметрии [19], в связи с чем актуальным является вопрос разработки новых вычислительных алгоритмов, направленных на решение данной задачи. В рамках данной работы рассматривается возможность вычисления параметров формы отдельных асимметричных хроматографических пиков, закодированных в базисе функций Чебышева – Эрмита, с применением рядов Грама – Шарлье. Результаты работы направлены на дальнейшее применение при разделении совмещенных асимметричных хроматографических пиков.

1. Ряды Грама – Шарлье и их связь с функциями Чебышева – Эрмита

Из [15] известно, что любой асимметричный хроматографический пик можно представить в виде разложения в следующий ряд, названный рядом Грама – Шарлье типа А:

$$F(x) = A \cdot f\left(\frac{x - \mu_0}{\sigma}\right) + \sum_{v=3}^V a_v \cdot \frac{\partial^v f\left(\frac{x - \mu_0}{\sigma}\right)}{\partial \left(\frac{x - \mu_0}{\sigma}\right)^v}, \quad (1)$$

где A – амплитуда пика;

σ – среднеквадратическая ширина пика;

V – число используемых элементов ряда, в общем случае равно ∞ ;

$f\left(\frac{x - \mu_0}{\sigma}\right) = e^{-\frac{(x - \mu_0)^2}{2\sigma^2}}$ – выражение для симметричного аналитического пика;

a_v – функции моментов v порядка, в частности [15]:

$$a_3 = -\gamma_1 = -\frac{\mu_3}{\sigma^3}, \quad a_4 = \gamma_2 = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3,$$

где μ_3, μ_4 – моменты третьего и четвертого порядка соответственно.

Величины γ_3 и γ_4 названы соответственно коэффициентами асимметрии (скошенности, skew) и эксцесса (островершинности, excess) и имеют соответствующий названию геометрический смысл, что делает их значимыми с точки зрения обработки сигналов аналитических приборов, в частности при решении

некорректно поставленной задачи разделения совмещенных хроматографических пиков [15].

Известно выражение для полиномов Эрмита [20]:

$$He_v(x) = (-1)^v e^{\frac{x^2}{2}} \cdot \frac{d^v e^{-\frac{x^2}{2}}}{dx^v},$$

что при замене $\frac{x-\mu_0}{\sigma} = x$ дает

$$He_v\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) = (-1)^v e^{\frac{(x-\mu_0)^2}{2\sigma^2}} \cdot \frac{d^v e^{-\frac{(x-\mu_0)^2}{2\sigma^2}}}{d\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^v}. \quad (2)$$

Выражая из (2) $\frac{\partial^v f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)}{\partial\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^v}$, получим:

$$\frac{\partial^v f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)}{\partial\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^v} = (-1)^v f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) He_v\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right). \quad (3)$$

Выполняя замену (3) в (1), получаем следующее представление ряда (1):

$$F(x) = A \cdot f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) \left[1 + \sum_{v=3}^V \frac{a_v (-1)^v}{v!} \cdot He_v\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) \right]. \quad (4)$$

Поскольку для обработки сигналов аналитических приборов интерес представляют коэффициенты при членах ряда 3-го и 4-го порядка, вычислим (4) при $V=4$ с заменой согласно указанным выше соотношениям, $\gamma_1 = -a_3$ и $\gamma_2 = a_4$:

$$F(x) = A \cdot f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) \left[1 + \frac{\gamma_1}{6} He_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + \frac{\gamma_2}{24} He_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) \right]. \quad (5)$$

При разложении произвольного сигнала $s(x)$ в базисе функций Чебышева – Эрмита [20] его можно представить в следующем виде [13, 3]:

$$s(x) = \sum_{n=3}^N c_n \cdot \varphi_n(x),$$

причем $s(x)$ можно представить в виде

$$s(x) = \sum_{n=3}^N \frac{c_n}{\alpha_n} \cdot H_n(x) \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (6)$$

поскольку

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\alpha_n} \cdot H_n(x) \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad \alpha_n = \sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}, \quad (7)$$

где $H_n(x)$ – полином Эрмита отличного от $He_n(x)$ типа, заданный выражением [20]:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \cdot \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n}.$$

Ограничившись по аналогии с (5) порядком $N=4$ суммы (6), получим:

$$s(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \left[\frac{c_0}{\alpha_0} \cdot H_0(x) + \frac{c_1}{\alpha_1} \cdot H_1(x) + \frac{c_2}{\alpha_2} \cdot H_2(x) + \frac{c_3}{\alpha_3} \cdot H_3(x) + \frac{c_4}{\alpha_4} \cdot H_4(x) \right],$$

или, с учетом $H_0(x)=1$:

$$s(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \left[\frac{c_0}{\alpha_0} + \frac{c_1}{\alpha_1} \cdot H_1(x) + \frac{c_2}{\alpha_2} \cdot H_2(x) + \frac{c_3}{\alpha_3} \cdot H_3(x) + \frac{c_4}{\alpha_4} \cdot H_4(x) \right]. \quad (8)$$

Можно видеть, что выражения (5) и (8) не только задают один и тот же сигнал $s(x)=F(x)$, но и близки по структуре: множитель за скобками – гауссиан, в скобках – сумма полиномов Эрмита различных порядков с некоторыми весами. Если структурное сходство указывает на возможность перехода через некоторую функцию $\chi(x, \mu_0, \sigma)$ от i -го члена ряда Грама – Шарлье для некоторого сигнала к i -му члену разложения того же сигнала по функциям Чебышева – Эрмита, то коэффициенты при членах ряда Грама – Шарлье могут быть выражены через c_n , что позволяет при кодировании сигналов в базисе функций Чебышева – Эрмита одновременно вычислять параметры γ_1 и γ_2 . Из-за того, что данные коэффициенты представляют интерес при обработке сигналов аналитических приборов, ниже проверим возможность формирования такой функции $\chi(x, \mu_0, \sigma)$.

2. Исследование возможности формирования функции для перехода от коэффициентам разложения в базисе функций Чебышева – Эрмита к коэффициентам разложения в ряд Грама – Шарлье

Одним из отличий между (5) и (8) является использование полиномов Эрмита различных типов. Между двумя типами полиномов известна зависимость:

$$He_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right). \quad (9)$$

Подставляя (9) в (5), получим:

$$F(x) = A \cdot f\left(\frac{x - \mu_0}{\sigma}\right) \left[1 + \frac{\gamma_1}{12\sqrt{2}} H_3\left(\frac{x - \mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{\gamma_2}{96} H_4\left(\frac{x - \mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right]. \quad (10)$$

С учетом того, что $H_0\left(\frac{x - \mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) = 1$, получим следующий вид (10):

$$F(x) = A \cdot f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) \left[H_0\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{\gamma_1}{12\sqrt{2}} H_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{\gamma_2}{96} H_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right]. \quad (11)$$

Поскольку у полиномов в скобках в качестве аргумента используется $\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}$, выразим $f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)$ через $f\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)$:

$$f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) = f^2\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right). \quad (12)$$

Также нельзя не заметить схожесть $f\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)$ и $\varphi_n(x)$, поскольку $f\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)$ можно выразить через $\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)$:

$$f\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) = \alpha_n \frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}. \quad (13)$$

Подставляя (13) в (12), получим:

$$f\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) = \alpha_n^2 \frac{\varphi_n^2\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n^2\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}. \quad (14)$$

Подставляем (14) в (11) и вносим $\frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}$ в скобки:

$$F(x) = A\alpha_n^2 \frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)} \left[\frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) H_0\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)} + \right. \\ \left. + \frac{\gamma_1}{12\sqrt{2}} \frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) H_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)} + \frac{\gamma_2}{96} \frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) H_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)} \right]. \quad (15)$$

Поскольку в (15) соотношение $\frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}$ справедливо при любых n , для

находящихся в скобках дробей берем n , соответствующее степени полинома-множителя:

$$F(x) = A\alpha_n^2 \frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)} \left[\varphi_0\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{\gamma_1}{12\sqrt{2}} \varphi_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{\gamma_2}{96} \varphi_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right]. \quad (16)$$

Выполняем обратную подстановку согласно (13)

$$F(x) = Af\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) \left[\varphi_0\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{\gamma_1}{12\sqrt{2}} \varphi_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{\gamma_2}{96} \varphi_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right]$$

и переносим $f\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)$ в левую часть выражения, раскрывая скобки:

$$\frac{F(x)}{f\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)} = A\varphi_0\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{A\gamma_1}{12\sqrt{2}} \varphi_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \frac{A\gamma_2}{96} \varphi_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right). \quad (17)$$

Выражение (17) совпадает по форме с (6), коэффициенты при каждой базисной функции можно интерпретировать как c_n соответствующей степени при разложении сигнала $\frac{F(x)}{f\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}$ в базисе функций Чебышева – Эрмита, и дальней-

шие преобразования не позволяют представить разложение самого сигнала $F(x)$.

Иначе заменить $He_n(x)$ на $H_n(x)$ можно с помощью разности:

$$He_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) = \frac{H_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)}{4} - \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^3,$$

$$He_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) = \frac{H_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)}{4} - 3\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^4 + 6\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^2,$$

что при подстановке в (5) с учетом (13) (при $\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma} \rightarrow \frac{x-\mu_0}{\sigma}$) дает:

$$F(x) = A\alpha_n \cdot \frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)} \left[1 + \frac{\gamma_1}{24} H_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + \frac{\gamma_2}{96} H_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + \left(-\frac{\gamma_1}{6} \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^3 - \frac{\gamma_2}{8} \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^4 + \frac{\gamma_2}{4} \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^2 \right) \right]. \quad (18)$$

Раскрывая скобки в (18) и подставляя для каждой дроби $\frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)}$ значение n , соответствующее степени полинома-множителя, где он присутствует, получим выражение

$$F(x) = A\alpha_n\varphi_0\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + A\alpha_n\frac{\gamma_1}{24}\varphi_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + A\alpha_n\frac{\gamma_2}{96}\varphi_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + A\alpha_n\frac{\varphi_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)}{H_n\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)}\left(-\frac{\gamma_1}{6}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^3 - \frac{\gamma_2}{8}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^4 + \frac{\gamma_2}{4}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^2\right),$$

в котором выполняем обратную подстановку согласно (13) и переносим последнее слагаемое из правой части выражения в левую:

$$F(x) - Af\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)\left(-\frac{\gamma_1}{6}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^3 - \frac{\gamma_2}{8}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^4 + \frac{\gamma_2}{4}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^2\right) = A\alpha_n\varphi_0\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + A\alpha_n\frac{\gamma_1}{24}\varphi_3\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right) + A\alpha_n\frac{\gamma_2}{96}\varphi_4\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right). \quad (19)$$

Выражение (19) совпадает по форме с (6), коэффициенты при каждой базисной функции можно интерпретировать как c_n соответствующей степени при разложении в базисе функций Чебышева – Эрмита сигнала

$$F(x) - Af\left(\frac{x-\mu_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)\left(-\frac{\gamma_1}{6}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^3 - \frac{\gamma_2}{8}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^4 + \frac{\gamma_2}{4}\left(\frac{x-\mu_0}{\sigma}\right)^2\right),$$

и дальнейшие преобразования не позволяют представить разложение самого сигнала $F(x)$. Таким образом, можно заключить, что сигнал, заданный в виде ряда Грама – Шарлье, не может быть представлен как разложение того же сигнала в базисе функций Чебышева – Эрмита. Рассмотрим далее иной подход для вычисления коэффициентов γ_1 и γ_2 при кодировании сигнала в данном базисе.

3. Разложение заданного рядом Грама – Шарлье сигнала по функциям Чебышева – Эрмита

Для вычисления коэффициентов асимметрии и эксцесса на основе разложения сигнала в базисе функций Чебышева – Эрмита можно подставить ряд Грама – Шарлье в качестве кодируемого сигнала в выражение для расчета c_n :

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} F(x)\varphi_n(x)dx. \quad (20)$$

При этом следует учесть два обстоятельства:

1) между сигналом и n -й базисной функцией может существовать сдвиг x_0 [6];

2) при кодировании сами базисные функции могут быть подвергнуты масштабированию на величину γ [3].

С учетом описанных переменных (20) примет вид

$$c_n = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \varphi_n \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right) dx. \quad (21)$$

Подставим (5) и (8) в (21):

$$c_n = \frac{A}{\alpha_n \gamma} \int_{-\infty}^{\infty} f \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) \left[1 + \frac{\gamma_1}{6} He_3 \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) + \frac{\gamma_2}{24} He_4 \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) \right] H_n \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right) \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right)^2} dx,$$

а также $f \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) = e^{-\frac{(x-\mu_0)^2}{2\sigma^2}}$:

$$c_n = \frac{A}{\alpha_n \gamma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-\mu_0)^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right)^2} H_n \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right) \times \left[1 + \frac{\gamma_1}{6} He_3 \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) + \frac{\gamma_2}{24} He_4 \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) \right] dx. \quad (22)$$

Выделив в степени экспоненты полный квадрат $\left(x - \frac{\gamma^2 \mu_0}{\gamma^2 + \sigma^2} \right)^2$

$$-\frac{(x-\mu_0)^2}{2\sigma^2} - \frac{x^2}{2\gamma^2} = -\frac{\gamma^2 + \sigma^2}{2\gamma^2 \sigma^2} \left[\left(x - \frac{\gamma^2 \mu_0}{\gamma^2 + \sigma^2} \right)^2 + \frac{\gamma^2 \mu_0^2 \sigma^2}{(\gamma^2 + \sigma^2)^2} \right]$$

и введя переменные

$$r = \sqrt{\gamma^2 + \sigma^2}, \quad t = x - \frac{\gamma^2 \mu_0 + x_0 \sigma^2}{r^2} \rightarrow x = t + \frac{\gamma^2 \mu_0 + x_0 \sigma^2}{r^2}, \quad (23)$$

получим

$$-\frac{(x-\mu_0)^2}{2\sigma^2} - \frac{(x-x_0)^2}{2\gamma^2} = -\frac{r^2}{2\gamma^2 \sigma^2} t^2 - \frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}. \quad (24)$$

Подставив (24) в (22), получим:

$$c_n = \frac{A e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}}}{\alpha_n \gamma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2 \left(\frac{r}{\sqrt{2}\gamma\sigma} \right)^2} H_n \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right) \times \left[1 + \frac{\gamma_1}{6} He_3 \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) + \frac{\gamma_2}{24} He_4 \left(\frac{x-\mu_0}{\sigma} \right) \right] dx. \quad (25)$$

Поскольку была выполнена замена (23), следует перейти от x к t во всех частях выражения, для чего выполним замены:

$$p = \frac{x_0 - \mu_0}{r^2}, \quad \frac{x - x_0}{\gamma} = \frac{1}{\gamma}(t - \gamma^2 p), \quad \frac{x - \mu_0}{\sigma} = \frac{1}{\sigma}(t + \sigma^2 p),$$

с учетом которых получим следующий вид (25):

$$c_n = \frac{Ae^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}}}{\alpha_n \gamma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2 \left(\frac{r}{\sqrt{2}\gamma\sigma}\right)^2} H_n \left[\frac{1}{\gamma}(t - \gamma^2 p) \right] \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{\gamma_1}{6} He_3 \left[\frac{1}{\sigma}(t + \sigma^2 p) \right] + \frac{\gamma_2}{24} He_4 \left[\frac{1}{\sigma}(t + \sigma^2 p) \right] \right\} dx. \quad (26)$$

Рассмотрим выражение для полинома Эрмита $H_n \left[\frac{1}{\gamma}(t - \gamma^2 p) \right]$, который в явном виде может быть задан следующим образом:

$$H_n \left[\frac{1}{\gamma}(t - \gamma^2 p) \right] = n! \sum_{k=0}^{n/2} \lambda_k^n \left(\frac{2}{\gamma} \right)^{n-2k} (t - \gamma^2 p)^{n-2k}, \quad (27)$$

где $\lambda_k^n = \frac{(-1)^k}{k!(n-2k)!}$.

Очевидно, что $(t - \gamma^2 p)^{n-2k}$ – бином Ньютона степени $n-2k$, который можно представить в виде

$$(t - \gamma^2 p)^{n-2k} = \sum_{i=0}^{n-2k} C_{n-2k}^i (-1)^i t^{n-2k-i} \cdot (\gamma^2 p)^i, \quad (28)$$

где $(-1)^i$ характеризует тот факт, что основание бинома представлено разностью;

$$C_{n-2k}^i = \frac{(n-2k)!}{i!(n-2k-i)!}.$$

Подставив (28) в (27), получим:

$$H_n \left[\frac{1}{\gamma}(t - \gamma^2 p) \right] = n! \sum_{k=0}^{n/2} \lambda_k^n \left(\frac{2}{\gamma} \right)^{n-2k} \sum_{i=0}^{n-2k} C_{n-2k}^i (-1)^i t^{n-2k-i} \cdot (\gamma^2 p)^i. \quad (29)$$

В свою очередь, полином $He_3 \left[\frac{1}{\sigma}(t + \sigma^2 p) \right]$ в явном виде может быть представлен следующим образом:

$$He_m \left[\frac{1}{\sigma}(t + \sigma^2 p) \right] = m! \sum_{j=0}^{m/2} \lambda_j^m \frac{(t + \sigma^2 p)^{m-2j}}{2^j \sigma^{m-2j}}. \quad (30)$$

Очевидно, что $(t + \sigma^2 p)^{m-2j}$ – бином Ньютона степени $m-2j$, который можно представить в виде

$$(t + r)^{m-2j} = \sum_{l=0}^{m-2j} C_{m-2j}^l \cdot t^{m-2j-l} \cdot (\sigma^2 p)^l. \quad (31)$$

Подставив (31) в (30), получим:

$$He_m \left[\frac{1}{\sigma} (t + \sigma^2 p) \right] = m! \sum_{j=0}^{m/2} \lambda_j^m \frac{1}{2^j \sigma^{m-2j}} \sum_{l=0}^{m-2j} C_{m-2j}^l \cdot t^{m-2j-l} \cdot (\sigma^2 p)^l. \quad (32)$$

Согласно (29) и (32) можно представить произведение $H_{m,n}^*(t) = H_n \left[\frac{1}{\gamma} (t - \gamma^2 p) \right] He_m \left[\frac{1}{\sigma} (t + \sigma^2 p) \right]$, внося под знак суммы выражение для $He_m \left[\frac{1}{\sigma} (t + \sigma^2 p) \right]$ за счет дистрибутивности суммы:

$$H_{m,n}^*(t) = n! m! \sum_{k=0}^{n/2} \left\langle \lambda_k^n \left(\frac{2}{\gamma} \right)^{n-2k} \sum_{i=0}^{n-2k} \left\{ C_{n-2k}^i (-1)^i t^{n-2k-i} \times \right. \right. \\ \left. \left. \times (\gamma^2 p)^i \sum_{j=0}^{m/2} \left[\lambda_j^m \frac{1}{2^j \sigma^{m-2j}} \left(\sum_{l=0}^{m-2j} C_{m-2j}^l \cdot t^{m-2j-l} \cdot (\sigma^2 p)^l \right) \right] \right\} \right\rangle,$$

где, в свою очередь, под знак внутренней суммы вносим все множители, окончательно приводя подобные члены:

$$H_{m,n}^*(t) = n! m! \sum_{k=0}^{n/2} \left\langle \sum_{i=0}^{n-2k} \left\{ \sum_{j=0}^{m/2} \left[\sum_{l=0}^{m-2j} \left(\lambda_k^n \cdot \lambda_j^m \cdot C_{n-2k}^i \cdot (-1)^i \cdot C_{m-2j}^l \times \right. \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times \gamma^{2(i+k)-n} \cdot \sigma^{2(l+j)-m} \cdot t^{m+n-2(j+k)-l-i} \cdot p^{l+i} \cdot 2^{n-2k-j} \right) \right] \right\} \right\rangle. \quad (33)$$

Представление (33) выгодно потому, что известен интеграл [21]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^n \cdot e^{-t^2 q} dt = \begin{cases} \frac{(n-1)!!}{\sqrt{2^n q^n}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{q}}, & n \bmod 2 = 0, \\ 0, & n \bmod 2 = 1, \end{cases}$$

который применим к (26) с учетом (33).

При известном $q = \left(\frac{r}{\sqrt{2}\gamma\sigma} \right)^2$ данное выражение примет вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^n \cdot e^{-t^2 \left(\frac{r}{\sqrt{2}\gamma\sigma} \right)^2} dt = \begin{cases} \sqrt{2\pi} \left(\frac{\gamma\sigma}{r} \right)^{n+1} (n-1)!!, & n \bmod 2 = 0, \\ 0, & n \bmod 2 = 1. \end{cases} \quad (34)$$

Введем следующее обозначение:

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} t^n \cdot e^{-\frac{t^2 x_0}{2\gamma^2 r}} dt, \quad \text{или} \quad I_n = \begin{cases} \sqrt{2\pi} \left(\frac{\gamma\sigma}{r} \right)^{n+1} (n-1)!!, & n \bmod 2 = 0, \\ 0, & n \bmod 2 = 1, \end{cases}$$

а также соответствующее ему

$$H_{m,n}^*(I) \stackrel{def}{=} H_{m,n}^*(t), \quad (35)$$

при замене $I_n = t^n$.

Стоит отметить, что при $\mu_0 = 0$ и $x_0 = 0$ множитель p^{l+i} может принимать вид неопределенного выражения 0^0 . Так как в этом случае $(t - \gamma^2 p) = t$ и $(t + \sigma^2 p) = t$, раскрывать степень суммы в полиномах Эрмита через бином Ньютона не требуется, то есть произведение полиномов примет вид

$$H_{m,n}^*(t) = H_n\left(\frac{t}{\gamma}\right) He_m\left(\frac{t}{\sigma}\right) = n!m! \sum_{k=0}^{n/2} \left[\sum_{j=0}^{m/2} \left(\lambda_j^m \cdot \lambda_k^n \cdot 2^{n-2k-j} \frac{t^{m+n-2(j+k)}}{\sigma^{m-2j} \gamma^{n-2k}} \right) \right]. \quad (36)$$

Следовательно, при $\mu_0 = 0$ и $x_0 = 0$ для вычисления $H_{m,n}^*(t)$ следует использовать выражение (36), в противном случае – (33).

После интегрирования (26) можно записать следующим образом:

$$c_n = \frac{Ae^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}}}{\alpha_n \gamma} \left(H_{0,n}^*(I) + \frac{\gamma_1}{6} H_{3,n}^*(I) + \frac{\gamma_2}{24} H_{4,n}^*(I) \right). \quad (37)$$

Путем простых преобразований представим (37) следующим образом:

$$-c_n \alpha_n \gamma e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}} A^{-1} + \frac{H_{3,n}^*(I)}{6} \gamma_1 + \frac{H_{4,n}^*(I)}{24} \gamma_2 = -H_{0,n}^*(I). \quad (38)$$

Выражение (38) представляет собой линейное уравнение относительно неизвестных коэффициентов A^{-1} (обратно пропорционален амплитуде), γ_1 (асимметрия) и γ_2 (эксцесс). Для нахождения коэффициентов составим систему из трех уравнений (число уравнений совпадает с числом неизвестных) при различных n . Для простоты примем наименьшие порядки $n=0, 1, 2$:

$$\begin{cases} -c_0 \alpha_0 \gamma e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}} A^{-1} + \frac{H_{3,0}^*(I)}{6} \gamma_1 + \frac{H_{4,0}^*(I)}{24} \gamma_2 = -H_{0,0}^*(I). \\ -c_1 \alpha_1 \gamma e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}} A^{-1} + \frac{H_{3,1}^*(I)}{6} \gamma_1 + \frac{H_{4,1}^*(I)}{24} \gamma_2 = -H_{0,1}^*(I). \\ -c_2 \alpha_2 \gamma e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}} A^{-1} + \frac{H_{3,2}^*(I)}{6} \gamma_1 + \frac{H_{4,2}^*(I)}{24} \gamma_2 = -H_{0,2}^*(I). \end{cases} \quad (39)$$

Для нахождения A , γ_1 и γ_2 воспользуемся методом Крамера. Составим из системы (39) матрицы вида:

$$a = \begin{pmatrix} -c_0 \alpha_0 \gamma e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}} & \frac{H_{3,0}^*(I)}{6} & \frac{H_{4,0}^*(I)}{24} \\ -c_1 \alpha_1 \gamma e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}} & \frac{H_{3,1}^*(I)}{6} & \frac{H_{4,1}^*(I)}{24} \\ -c_2 \alpha_2 \gamma e^{-\frac{(x_0 - \mu_0)^2}{2r^2}} & \frac{H_{3,2}^*(I)}{6} & \frac{H_{4,2}^*(I)}{24} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -H_{0,0}^*(I) \\ -H_{0,1}^*(I) \\ -H_{0,2}^*(I) \end{pmatrix}.$$

Подставив вектор b в качестве первого столбца a , получим матрицу dA^{-1} , в качестве второго – матрицу $d\gamma_1$, в качестве третьего – матрицу $d\gamma_2$. Тогда, согласно методу Крамера, искомые параметры могут быть найдены по следующим выражениям:

$$A = \frac{|a|}{|dA^{-1}|}, \quad \gamma_1 = \frac{|d\gamma_1|}{|a|}, \quad \gamma_2 = \frac{|d\gamma_2|}{|a|}, \quad (40)$$

где $|\cdot|$ – определитель матрицы.

Очевидно, что полученный алгоритм подразумевает наличие сведений о параметрах γ , σ и μ_0 , и если γ задаются при кодировании сигнала в базисе функций Чебышева – Эрмита, то σ и μ_0 необходимо предварительно определить, поскольку два этих параметра не могут быть выражены в (38) в виде линейной зависимости.

4. Вычисление коэффициентов асимметрии и эксцесса для тестового сигнала по сформированному алгоритму

Вычислим коэффициенты асимметрии и эксцесса для сигнала, заданного выражением (5), в котором в качестве примера зададим следующие значения параметров: $A=1,75$, $\sigma=1,15$, $\mu_0=-0,85$, $\gamma_1=0,65$, $\gamma_2=-0,35$. Вид полученного сигнала представлен на рис. 1.

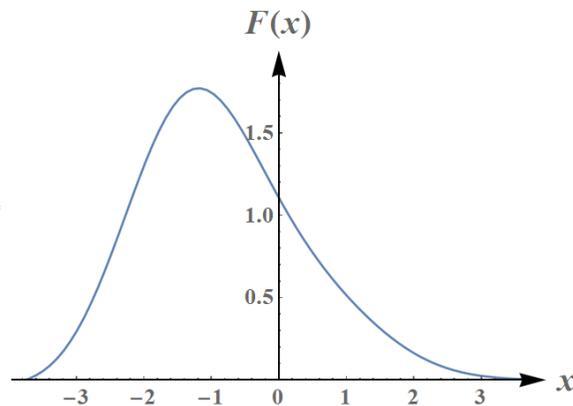


Рис. 1. Тестовый сигнал

Применив полученные в предыдущем разделе выражения (4), получим следующие оценки искомых коэффициентов: $\tilde{\gamma}_+ = 9$, $\tilde{\gamma}_- = 418$, $\tilde{\gamma}_0 = 392$. Относительная погрешность данных оценок составляет, соответственно, $\delta_A = 0,005\%$, $\delta_{\gamma_1} = 0,643\%$, $\delta_{\gamma_2} = 0,094\%$.

На практике параметры σ и μ_0 оцениваются приближенно, из-за чего найденные значения обладают некоторыми погрешностями δ_σ и δ_{μ_0} соответственно. Как следствие, важно иметь представление о зависимости δ_A , δ_{γ_1} , δ_{γ_2} от δ_σ и δ_{μ_0} . Рассмотрим данные зависимости по отдельности для δ_{μ_0} и δ_σ в диапазонах $\delta_{\mu_0} = -2\dots 2\%$ и $\delta_\sigma = -2\dots 2\%$ (рис. 2).

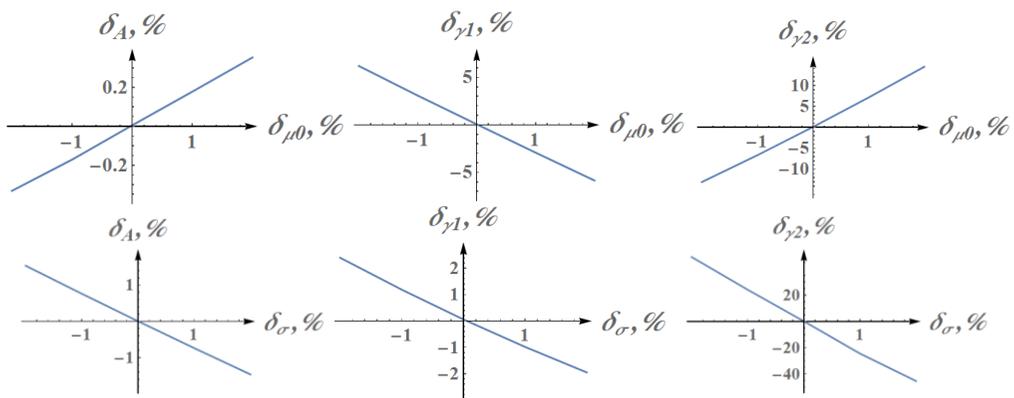


Рис. 2. Зависимости погрешностей вычисления коэффициентов

Максимальные значения погрешностей δ_A , δ_{γ_1} , δ_{γ_2} по модулю в зависимости от δ_σ достигаются при $\delta_\sigma = -2\%$ и составляют $\delta_A = 1,54\%$, $\delta_{\gamma_1} = 2,41\%$, $\delta_{\gamma_2} = 49\%$; в зависимости от δ_{μ_0} достигаются при $\delta_{\mu_0} = 2\%$ для $\delta_A = 0,35\%$ и $\delta_{\gamma_2} = 14,5\%$, и при $\delta_{\mu_0} = -2\%$ для $\delta_{\gamma_1} = 6,2\%$.

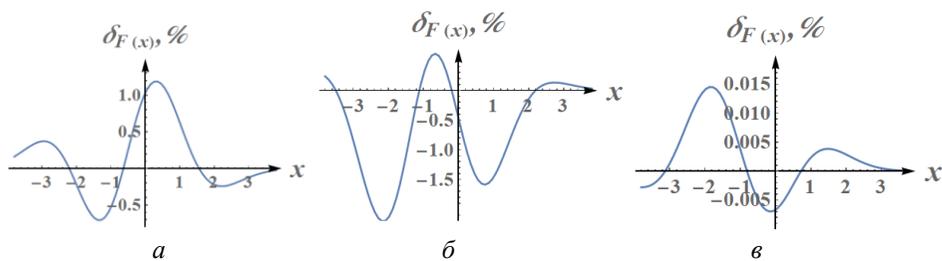


Рис. 3. Зависимости погрешностей формы оценки сигнала:

a – при $\delta_{\mu_0} = 2\%$, b – при $\delta_\sigma = 2\%$, v – при $\delta_\sigma = \delta_{\mu_0} = 0$

Рассмотрим, как δ_σ и δ_{μ_0} влияют на отклонение формы полученного по оценкам $\tilde{f}_1, \tilde{f}_2, \tilde{f}_3$ сигнала \tilde{f} , от формы исходного сигнала $F(x)$. Для этого использовать в качестве меры отклонения относительную погрешность не следует, поскольку сигнал $F(x)$ в окрестностях границ имеет близкие к нулю значения, вследствие чего относительная погрешность будет принимать большие значения даже при малых разностях исходного сигнала и его оценки. Воспользуемся следующим выражением приведенной погрешности в качестве меры точности:

$$\delta_{F(x)} = \frac{\tilde{f} - F(x)}{\max[F(x)]} \cdot 100\%,$$

где $\max[F(x)]$ – максимальное значение сигнала.

На рис. 3 отражены графики данной погрешности для максимальных δ_σ и δ_{μ_0} и при $\delta_\sigma = \delta_{\mu_0} = 0$.

Несмотря на большие погрешности $\delta_A, \delta_{\gamma_1}, \delta_{\gamma_2}$ при тех же δ_σ и δ_{μ_0} форма оценки сигнала меняется слабо, на графике сигнал практически совпадает со своей оценкой. Визуально заметное несовпадение графиков сигнала и его оценки начинается приблизительно при $\delta_\sigma = \delta_{\mu_0} = 5\%$ (рис. 4).

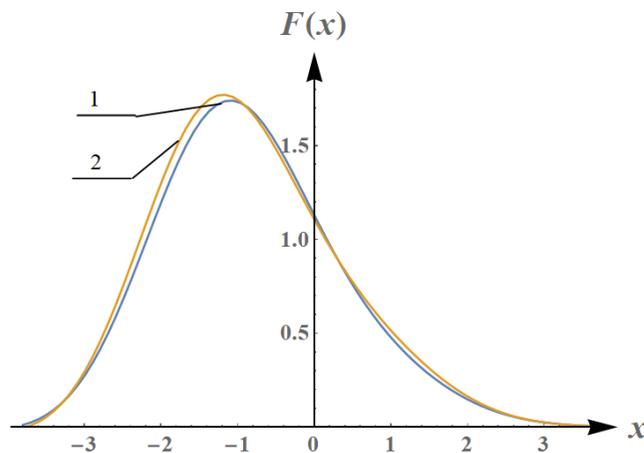


Рис. 4. Оценка сигнала при $\delta_\sigma = \delta_{\mu_0} = 5\%$:

1 – \tilde{f} , 2 – $F(x)$

Выводы

Благодаря использованию полученных выражений для расчета коэффициентов асимметрии и эксцесса в базисе функций Чебышева – Эрмита удастся построить быстрые вычислительные алгоритмы обработки выходных сигналов аналитических приборов, в частности при решении задачи разделения совмещенных хроматографических пиков. Для этого можно построить систему из $3K$ линейных уравнений, подобных (37), где K – количество совмещенных хроматографических пиков, после чего любым известным методом, например, использованным здесь методом Крамера, получить оценки искомых коэффициентов для каждого из пиков. Помимо прочего, анализ погрешностей работы алгоритма по-

казывает, что δ_σ и δ_{μ_0} существенно влияют на погрешность определения коэффициентов асимметрии и эксцесса, но на форму восстановленного по оценкам коэффициентов сигнала влияние значительно слабее. Тем не менее для практического применения рассмотренного алгоритма требуется предварительная оценка μ_0 и σ , причем с погрешностью не более нескольких процентов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Сайфуллин Р.Т., Бочкарев А.В. Выбор необходимого числа базисных функций в алгоритмах кодирования-декодирования сигналов аналитических приборов // Информационно-измерительные и управляющие системы: межвуз. сб. науч. статей. – 2019. – Вып. 1(17). – С. 35–42.
2. Сайфуллин Р.Т., Бочкарев А.В. Иерархическое кодирование при обработке сигналов аналитических приборов // Проблемы управления и моделирования в сложных системах: Труды XXI Международной конференции. – Самара: Самарский научный центр РАН, ИПУ СС РАН, 2019. – Т. 1. – С. 467–470.
3. Сайфуллин Р.Т., Бочкарев А.В. Использование функций Чебышева – Эрмита в обработке сигналов аналитических приборов // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Технические науки. – 2019. – № 1(61). – С. 68–81.
4. Сайфуллин Р.Т., Бочкарев А.В. Вычисление производных аналитического сигнала в базе функций Чебышева – Эрмита // Материалы XI Всероссийской научной конференции с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи» (27–30 мая 2019 г., Самара, Россия). Т. 2. – 2019. – С. 137–139.
5. Сайфуллин Р.Т., Бочкарев А.В. Вычисление непрерывного вейвлет-преобразования сигналов в базе функций Чебышева – Эрмита // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Технические науки. – 2019. – № 2(62). – С. 99–113.
6. Сайфуллин Р.Т., Бочкарев А.В. Алгоритм вычисления коэффициентов вейвлет-преобразования сигналов с использованием базиса функций Чебышева – Эрмита // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Технические науки. – 2019. – № 4(64). – С. 113–124.
7. Xue Luo. Spectral viscosity method with generalized Hermite functions for nonlinear conservation laws // *Applied Numerical Mathematics*, Volume 123, 2018. P. 256–274.
8. Martens J.B. The Hermite transform – applications // *IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, 1990. Vol. 38. No. 9. P. 1607–1618.
9. Павельева Е.А., Крылов А.С. Поиск и анализ ключевых точек радужной оболочки глаза методом преобразования Эрмита // Информатика и ее применения. – 2010. – № 1. – Т. 4. – С. 79–82.
10. Estudillo-Romero A., Escalante-Ramirez B. The Hermite transform: An alternative image representation model for iris recognition // *LNCS*, 2008. No. 5197. P. 86–93.
11. Мамаев Н.В. Алгоритм нелокального среднего на основе разложения по функциям Эрмита в задачах компьютерной томографии // Мамаев Н.В., Лукин А.С., Юрин Д.В., Глазкова М.А., Сеницин В.Е. – ГРАФИКОН'2013. Труды конференции, 2013. – С. 254–258.
12. Горлов В.А., Паршин Д.С., Разложение функции с экспоненциальным ростом в ряд Фурье по ортогональным полиномам Чебышева – Эрмита // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. – 2015. – Т. 3. – № 8–3 (19–3). – С. 245–248.
13. Нейросетевой анализ и сопоставление частотно-временных векторов на основе краткосрочного спектрального представления и адаптивного преобразования Эрмита / Ю.М. Баяковский, А.О. Жирков, Д.Н. Корчагин, А.С. Крылов, А.С. Лукин. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2001, 087.
14. Балакин Д.А., Штыков В.В. Построение ортогонального банка фильтров на основе преобразований Эрмита для обработки сигналов // Журнал радиоэлектроники. – 2014. – № 9. – С. 1–15.
15. Felinger A. *Data Analysis and Signal Processing in Chromatography (Volume 21) (Data Handling in Science and Technology, Volume 21) 1st Edition*. Amsterdam, Elsevier, 1998. 334 p.
16. McQuarrie D.A. On the Stochastic Theory of Chromatography // *J. Chem. Phys.* 1963, vol. 38. Pp. 437–445.

17. Dondi F., Remelli M. Characterization of Extracolumn and Concentration-Dependent Distortion of Chromatographic Peaks by Edgeworth-Cramer Series // *J. Chromatogr.* 1984, vol. 315. Pp. 67–73.
18. Dondi F., Pulidori F. Applicability Limits of the Edgeworth-Cramer Series in Chromatographic Peak Shape Analysis // *J. Chromatogr.* 1984, vol. 284. Pp. 293–301.
19. Dubrovkin J. Mathematical Methods for Separation of Overlapping Asymmetrical Peaks in Spectroscopy and Chromatography. Case study: One-Dimensional Signals // *International J. of Emerging Technologies in Computational and Applied Sciences.* 2015, vol. 11(1) . Pp. 1–8.
20. Суетин П.К. Классические ортогональные многочлены / 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Физматлит, 2007. – 480 с.
21. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. – М.: Физматгиз, 1963. – 1100 с.

Статья поступила в редакцию 21 сентября 2020 г.

CALCULATING OF ASYMMETRY AND EXCESS COEFFICIENTS FOR CHROMATOGRAPHIC PEAKS BY USING CHEBYSHEV – HERMITE FUNCTIONS AND GRAM – CHARLIER SERIES

R.T. Sayfullin, A.V. Bochkarev

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

Abstract. *The paper deals with the development of an algorithm for computation of excess and asymmetry coefficients for chromatographic peak, given by Gram-Charlier series. Investigation of possibility using direct transformation of coefficients of signal decoding in Chebyshev-Hermite basis to terms of the Gram-Charlier series weights are described. By applying coding in Chebyshev-Hermite basis algorithm to Gram-Charlier series system of linear equations that depend of excess and asymmetry coessicients are formed. Solution of this system of equations is sought coefficients. Errors of formed algorithm are described in dependence to errors of estimation shift and RMS width. The computer algebra system Wolfram Mathematica 11.3 was used for calculations and graphical presentation of the simulation results.*

Keywords: *Chebyshev – Hermite functions, Gram – Charlier series, asymmetry, excess, chromatographic peak, signal transform, resolving overlapping signals, chromatography.*

REFERENCES

1. Saifullin R.T., Bochkarev A.V. Selection of the required number of basis functions in the coding-decoding algorithms of signals of analytical instruments // Information and measuring and control systems: mezhvuz. Sat scientific articles. Issue 1 (17). – 2019, p. 35–42.
2. Saifullin R.T., Bochkarev A.V. Hierarchical coding for signal processing of analytical instruments // Problems of control and modeling in complex systems. Proceedings of the XXI International Conference. Samara Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, IPU SS RAS. Volume 1. – 2019, p. 467–470.

*Rauhat T. Sayfullin (Dr. Sci. (Techn.)), Professor.
Andrey V. Bochkarev, Postgraduate Student.*

3. *Saifullin R.T., Bochkarev A.V.* The use of Chebyshev-Hermite functions in signal processing of analytical instruments // Bulletin of the Samara State Technical University. Series: technical sciences, No. 1 (61). – 2019, p. 68–81.
4. *Saifullin R.T., Bochkarev A.V.* Calculation of derivatives of the analytical signal in the basis of Chebyshev – Hermite functions // Materials of the XI All-Russian scientific conference with international participation "Mathematical modeling and boundary value problems" (May 27–30, 2019, Samara, Russia). Volume 2. – 2019, p. 137–139.
5. *Saifullin R.T., Bochkarev A.V.* Calculation of the continuous wavelet transform of signals in the basis of Chebyshev – Hermit functions // Bulletin of the Samara State Technical University. Series: Engineering, No. 2 (62). – 2019, p. 99–113.
6. *Saifullin R.T., Bochkarev A.V.* Algorithm for calculating the wavelet-transform of the signals using the Chebyshev – Hermit functions // Bulletin of the Samara State Technical University. Series: Engineering, No. 4 (64). – 2019, p. 113–124.
7. *Xue Luo.* Spectral viscosity method with generalized Hermite functions for nonlinear conservation laws // *Applied Numerical Mathematics*, Volume 123, 2018. P. 256–274.
8. *Martens J.B.* The Hermite transform – applications // *IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, 1990. Vol. 38. No. 9. P. 1607–1618.
9. *Paveleva E.A., Krylov A.S.* Search and analysis of key points of the iris by the Hermite transformation method // *Informatics and its applications*. 2010. № 1. v. 4. Pp. 79–82.
10. *Estudillo-Romero A., Escalante-Ramirez B.* The Hermite transform: An alternative image representation model for iris recognition // *LNCS*, 2008. No. 5197. P. 86–93.
11. *Mamaev N.V.* The non-local average algorithm based on the expansion of Ermit functions in computed tomography problems // *Mamaev N.V., Lukin A.S., Yurin D.V., Glazkova M.A., Sinitin V.E.* – GRAPHICON'2013. Conference proceedings, 2013, p. 254–258.
12. *Gorlov V.A., Parshin D.S.* Expansion of a function with exponential growth in a Fourier series in orthogonal Chebyshev – Hermite polynomials // *Actual directions of scientific research of the XXI century: theory and practice*. 2015. Vol. 3. No. 8–3 (19–3). Pp. 245–248.
13. Neural network analysis and comparison of time-frequency vectors based on the short-term spectral representation and adaptive Hermite transform. Yu.M. Bayakovskiy, A.O. Zhirkov, D.N. Korchagin, A.S. Krylov, A.S. Lukin. Preprints IPM them. M.V. Keldysh, 2001, 087.
14. *Balakin D.A., Shtykov V.V.* Construction of an orthogonal filter bank based on Hermite transformations for signal processing // *Journal of Radio Electronics*, 2014, № 9, p. 1–15.
15. *Felinger A.* Data Analysis and Signal Processing in Chromatography (Volume 21) (Data Handling in Science and Technology, Volume 21) 1st Edition. Amsterdam, Elsevier, 1998. 334 p.
16. *McQuarrie D.A.* On the Stochastic Theory of Chromatography // *J. Chem. Phys.* 1963, vol. 38. Pp. 437–445.
17. *Dondi F., Remelli M.* Characterization of Extracolumn and Concentration-Dependent Distortion of Chromatographic Peaks by Edgeworth – Cramer Series // *J. Chromatogr.* 1984, vol. 315. Pp. 67–73.
18. *Dondi F., Pulidori F.* Applicability Limits of the Edgeworth – Cramer Series in Chromatographic Peak Shape Analysis // *J. Chromatogr.* 1984, vol. 284. Pp. 293–301.
19. *Dubrovkin J.* Mathematical Methods for Separation of Overlapping Asymmetrical Peaks in Spectroscopy and Chromatography. Case study: One-Dimensional Signals // *International J. of Emerging Technologies in Computational and Applied Sciences*. 2015, vol. 11(1). Pp. 1–8.
20. *Suetin P.K.* Classical orthogonal polynomials. M.: Fizmatlit, 2005. – 480 p.
21. *Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M.* Tables of integrals, sums, series and products. – M.: Fizmatgiz, 1963. – 1100 p.