

11. R. E. Neiman, D. G. Fisher, D. E. Seborg. A review of process identification and parameter estimation techniques.—“Int. J. Control”, 1971, vol. 13, № 2.
12. K.—J. Åström, P. Eykhoff. System identification.—“Automatica”, 1971, № 7.
13. A. V. Balakrishnan, V. Peterka. Identification in automatic control system.—“Automatica”, 1969, № 5.
14. К. Б. Норкин. Понсковые методы настройки управляемых моделей в задачах определения параметров объектов.—«Автоматика и телемеханика», 1968, № 11.
15. E. V. Bohn, R. E. Butler, M. R. Mukerjee. Parameter-tracking models for adaptive control systems.—“Proc. Inst. Electr. Eng”, 1966, vol. 113, № 2.
16. В. Н. Петров, В. Ю. Рутковский, И. Н. Крутова. Основные свойства и некоторые вопросы динамики самонастраивающейся системы с моделью.—В кн.: Теория самонастраивающихся систем управления (Труды II Междунар. симп. ИФАК по самонастраивающимся системам). М., «Наука», 1969.
17. А. О. Егоршин, В. А. Иванов. О регуляризации в задаче автоматической настройки параметров модели.—«Автоматика», 1974, № 2.
18. В. Ф. Турчин, В. З. Нозик. Статистическая регуляризация решения некорректных задач.—«Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана», 1969, № 1.
19. Ф. Р. Гантмахер. Теория матриц. М., «Наука», 1966.
20. Д. К. Фаддеев, В. Н. Фаддеева. Вычислительные методы линейной алгебры. М.—Л., Физматгиз, 1963.
21. М. Дж. Кендалл, А. Стьюарт. Статистические выводы и связи. М., «Наука», 1973.
22. К.-Ж. Остром, Т. Болин. Цифровая идентификация линейных динамических систем на основе данных о нормальном режиме работы.—В кн.: Теория самонастраивающихся систем управления. (Труды II Междунар. симп. ИФАК по самонастраивающимся системам). М., «Наука», 1969.

*Поступила в редакцию
17 ноября 1975 г.*

УДК 543.422.519.23

Н. Л. АРЮТКИНА, А. Ф. ВАСИЛЬЕВ, А. А. КИСЕЛЕВА
(Москва)

ВОЗМОЖНОСТИ ОБЪЕДИНЕНИЯ АЛГОРИТМОВ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ И АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ КОРРЕКЦИИ ФОНА В КОЛИЧЕСТВЕННОМ АНАЛИЗЕ ПО СПЕКТРАМ ПОГЛОЩЕНИЯ

Для достижения более точных результатов количественного анализа аддитивных многокомпонентных смесей не полностью известного состава по спектрам поглощения в работе [1] нами была выдвинута идея последовательной обработки экспериментальных данных по методу линейного программирования (МЛП) и алгебраической коррекции фона (АКФ).

В общем случае спектрального анализа с неизвестным фоновым поглощением каждый из этих методов в отдельности не гарантирует получения правильных результатов. Метод АКФ, предложенный еще в 1949 г. [2], дает неопределенный результат, если в используемом аналитическом интервале крутизна фонового спектра оказывается больше, чем у спектра анализируемой смеси. Иначе говоря, применение этого метода возможно, если многочлен, аппроксимирующий фон, имеет меньший порядок, чем алгебраический многочлен, аппроксимирующий спектр анализируемой смеси. Очевидно, это условие не выполняется, если в аналитический интервал попадает полоса поглощения неидентифицированных примесей. С подобным явлением приходится сталкиваться довольно часто, так как обычно аналитические интервалы выбираются только из соображений максимального отличия в спектрах анализируемых компонентов, что минимизирует случайную ошибку определе-

Таблица 1

Аналитические полосы в спектрах μ - и π -изомеров для анализа с помощью МЛП

Компоненты	π -изомер				μ -изомер		
Частоты, см^{-1}	1496	1203	1168	1020	925	1156	682

аналитические полосы в местах наибольшей прозрачности в спектре мешающих примесей и не требует предварительного знания этого спектра. Однако получаемое решение оказывается точным только в том случае, если в «окнах прозрачности» поглощение фона лежит в пределах уровня шумов и если в этих же интервалах имеются аналитические полосы определяемых компонентов, коэффициенты поглощения которых дают матрицу K с определителем, отличным от нуля: $|K| \neq 0$.

Легко показать, что совместное использование этих методов на основе последовательного применения позволяет взаимно устранить их недостатки и получить наиболее достоверные результаты анализа.

Действительно, если положение аналитических интервалов определять с помощью МЛП, а их пределы ограничивать средним значением ширины полосы для жидкости, то эти спектральные интервалы будут гарантированы от попадания в них максимумов полос поглощения неидентифицированных примесей и применение метода АКФ в этих участках даст результат, свободный от влияния спектра фона.

В качестве наглядной иллюстрации достоинств и недостатков МЛП и АКФ и необходимости их объединения приводим результаты анализа π - и μ -крезиловых эфиров *N*-метилкарбаминовой кислоты в техническом продукте, содержащем компоненты неизвестного состава.

Для анализа по МЛП [4] выбиралось семь аналитических полос, коэффициенты поглощения которых наиболее сильно отличались в спектрах изомеров (табл. 1).

Во всех пяти технических смесях применение этого МЛП позволило выбрать в качестве базисных аналитические полосы с частотами 1203 и 1156 см^{-1} , соответствующие наименьшему поглощению в спектре примесей. Далее эти полосы анализировались с помощью модифицированного нами метода АКФ [5].

Из табл. 2 видно, что применение АКФ с линейной функцией фона оказалось достаточным для получения наиболее достоверного результата, хорошо совпадающего с хроматографическими данными, и повышение степени аппроксимирующего полинома не внесло в него статистически значимого изменения.

Улучшение результата анализа после применения АКФ свидетельствует о наличии некоторого мешающего поглощения в интервалах частот, выбранных МЛП, и, следовательно, об ограниченности послед-

Таблица 2

Результаты анализа μ - и π -изомеров различными методами

Метод	МЛП	МНК	АКФ с линейной базисной линией	АКФ с квадратичной базисной линией	ГЖХ
μ -изомер, %	71,75	68,18	63,460	58,08	64,89
π -изомер, %	28,25	31,82	36,54	14,92	35,11
S^2		19,7355	6,0508	7,5103	

него метода, а достаточность линейной функции для учета влияния фона подтверждает эффективность МЛП при выборе аналитических участков с наименьшим поглощением примесей.

Для рассмотрения возможности видоизменения алгоритмов МЛП и АКФ с целью их объединения и использования как единого метода, вместо последовательного применения, запишем и проанализируем математическую формулировку использовавшихся до сих пор методов МЛП, АКФ и метода наименьших квадратов (МНК).

Без коррекции фона МНК требует минимизации суммы квадратов отклонений синтетического спектра от экспериментального:

$$\min \left(\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n K_j^i C^j - D^i \right)^2 \right). \quad (1)$$

В случае МЛП необходимо, чтобы синтетический спектр $\sum_{j=1}^n K_j^i C^j$ нигде не превосходил экспериментальный больше, чем на заданную величину уровня шумов при условии наилучшего совпадения синтетического спектра и экспериментального для $C^j \geq 0$, т. е. при условии максимальной синтетического спектра:

$$D^i - \sum_{j=1}^n K_j^i C^j \geq -t S_{D^i}, \quad i = 1, 2, \dots, m; * \quad (2a)$$

$$C^j \geq 0; \quad (2б)$$

$$\max \left(z = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m K_j^i \right) C^j \right). \quad (2в)$$

Условие для АКФ имеет вид

$$\min \left(\sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=0}^s a_j \varphi^j(v^i) + \sum_{j=1}^n K_j^i C^j - D^i \right)^2 \right), \quad (3)$$

т. е. минимизируется сумма квадратов отклонений суммы фонового спектра и синтетического от экспериментального. Однако попытка объединения алгоритмов МЛП и АКФ по аналогии с (1) и (2) приводит к неопределенным результатам:

$$D^i - \sum_{j=1}^n K_j^i C^j - \sum_{j=0}^s a_j \varphi^j(v^i) \geq -t S_{D^i}; \quad (4a)$$

$$C^j \geq 0; \quad (4б)$$

$$\max \left(z = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m K_j^i \right) C^j + \sum_{j=0}^s \left(\sum_{i=1}^m \varphi^j(v^i) \right) a_j \right). \quad (4в)$$

В самом деле, ограниченность целевой функции z сверху не гарантирует ограниченности сверху значений получаемых концентраций (неограниченному возрастанию синтетического спектра $0 < \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m K_j^i \right) C^j \rightarrow +\infty$ может соответствовать неограниченное увеличение по абсолютной величине отрицательного спектра фона $0 > \sum_{j=0}^s \left(\sum_{i=1}^m \varphi^j(v^i) \right) a_j \rightarrow -\infty$).

Так как в общем случае свойства базисных функций $\varphi^j(v)$ специально не оговариваются и характер фонового поглощения неизвестен, то

* Вся система обозначений соответствует работам [1, 3]: D^i — оптическая плотность i -й аналитической точки; K_j^i — коэффициент поглощения i -го компонента для i -й аналитической точки; C^j — концентрация j -го компонента; S_x и S_x^2 — как всегда, выборочные значения стандартного отклонения и дисперсии случайной величины X ; t — коэффициент Стьюдента; S^2 — выборочное значение дисперсии пропускания, определенное из остаточной суммы квадратов разностей.

введение ограничений $a_i \geq 0$ на коэффициенты a_i не устраняет этой неопределенности, но может привести к невозможности аппроксимации фонового поглощения. Для устранения этого явления необходима дополнительная система ограничений, учитывающая неотрицательность спектра фона:

$$\sum_{j=0}^s a_j \varphi^j(v^i) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (4г)$$

Условия (4а), (4б) вместе с (4г) уже достаточны для определения концентраций и для учета фона с помощью объединенного метода (АКФ и МЛП).

Рассмотрим построение исходной таблицы (матрицы МЛП) коэффициентов для объединенного метода (МЛП и АКФ) и проанализируем структуру алгоритма МЛП в этом случае и в обычном МЛП без АКФ. Таблицу исходных данных для МЛП без АКФ в блочном виде можно записать следующим образом [3]:

Так как $\bar{C} \geq 0$ и $\bar{D} \geq 0$, то в МЛП без АКФ сразу можно приступить к последнему этапу: отысканию оптимального решения, что значительно уменьшает объем вычислений [5].

В соответствии с (4а) — (4г) таблицу исходных данных в блочном виде для объединенного метода (МЛП и АКФ) можно представить так:

	\approx $-\bar{C}$	\approx $-\bar{a}$	
$\Delta \bar{D}$	K	v	\bar{D}
$\bar{0}$	0	$-v$	$\bar{0}$

$$\max z \quad \bar{K} = \left\{ -\sum_{i=1}^m K_i^i \right\} \bar{v} = \left\{ -\sum_{i=0}^m \psi_i(v_i) \right\} \quad 0$$

Вид матрицы v дан в работе [1]; \bar{a} — столбец коэффициентов алгебраического многочлена, аппроксимирующего фон. Поскольку на эти коэффициенты в общем случае не налагается никаких ограничений, то первым этапом расчетов по объединенному алгоритму (МЛП с АКФ) должно быть исключение координат, соответствующих этим коэффициентам. В обычном алгоритме МЛП при таком исключении на выбор разрешающих элементов не налагается никаких ограничений, кроме условия отличия их от нуля. Для нашего частного случая можно легко сформулировать правило выбора разрешающих элементов, значительно сокращающее объем вычислений.

Действительно, если первоначальная функция фона будет проходить через точки с минимальными значениями оптических плотностей, то остаточный спектр будет неотрицательным. Это позволяет сразу перейти к поиску оптимального решения, минуя этап отыскания опорного решения. Если при этом в столбце оптических плотностей появятся отрицательные элементы, то этап отыскания опорного решения становится обязательным. Следовательно, при выборе опорного элемента в столбце, соответствующем исключаемому коэффициенту, опорный элемент следует брать из строки с наименьшим положительным отношением элемента из столбца свободных членов к коэффициенту в этом столбце.

В результате указанных преобразований получим столбец свободных членов, в котором первые m элементов будут соответствовать $m-n-(s+1)$ значениям разностного спектра, следующие n элементов — значениям концентраций ($n+s+1$ элементов разностного спектра равны нулю), а m последующих значений — спектру фона. Послед-

	\approx $-\bar{C}$	
$\Delta \bar{D}$	K	\bar{D}
$\max z$	$\bar{K} = \left\{ -\sum_{i=1}^m K_i^i \right\}$	0

Вид матрицы v дан в работе [1]; \bar{a} — столбец коэффициентов алгебраического многочлена, аппроксимирующего фон. Поскольку на эти коэффициенты в общем случае не налагается никаких ограничений, то первым этапом расчетов по объединенному алгоритму (МЛП с АКФ) должно быть ис-

ний элемент дает максимальное значение целевой функции. Если известны дисперсии коэффициентов поглощения, то можно вычислить дисперсии концентраций. В соответствии с работой [1] запишем

$$S_{C_i}^2 = \sum_{j=1}^{n+s+1} [S_{M_j^i}^2 (D^j)^2 + (M_j^i)^2 S_{D^j}^2], \quad (5)$$

где

3 компонента с помощью разработанной в институте программы (с помощью) универсальной программы МЛП. Для расчета использовались данные работы [3].

В отличие от этой работы к фоновому спектру, которым служил спектр четвертого компонента, нами дополнительно вводилось серое поглощение с оптической плотностью 0,1000.

Для сравнения первоначальные данные [3] обрабатывались разработанной нами специально для количественного анализа программой МЛП.

Расчеты в обоих случаях проводились без учета уровня шумов*.

Рассмотрение результатов, полученных двумя методами, показывает, что объединенный метод (МЛП с АКФ) добавил к аналитическим точкам, выбранным МЛП (без АКФ), точку для учета серого фона. Расчетное значение оптической плотности серого фона оказалось равным 0,1079. Следовательно, объединенный метод (МЛП и АКФ) не только позволяет выбирать аналитические полосы в минимумах поглощения спектра примеси, но, и учитывает остаточное поглощение в этих точках.

В табл. 3 приведены значения концентраций и процент ошибки, полученные двумя методами.

Необходимо особо подчеркнуть принципиальное отличие метода АКФ и объединенного метода (МЛП и АКФ). Метод АКФ основан на статистической аппроксимации спектра фона с помощью той или иной системы базисных функций, например, полиномов. Разностный спектр в пределах случайного уровня шумов должен совпадать со спектром фона.

В объединенном методе (МЛП и АКФ) с помощью алгебраического многочлена, меньшего порядка по сравнению с АКФ, аппроксимируется не весь спектр фона, а только поглощение в $n+s+1$ базисных аналитических точках, соответствующих $n+s+1$ минимумам в спектре поглощения мешающих примесей. При этом n соответствует числу определяемых компонентов, а $s+1$ — числу отличающихся от нуля коэффициентов используемого алгебраического многочлена.

Таблица 3
Результаты расчетов по МЛП и МЛП с АКФ

№ компонент- тов	Без серого фона		С серым фоном $D=0,1000$		
	МЛП		МЛП с АКФ		
	вес, %	отн. ошибка, %	вес, %	отн. ошибка, %	
1	3,3	7,1	115	3,0	-9
2	4,7	6,7	42	4,6	-3
3	5,0	10,0	100	4,6	-8

* Влияние шумов на результаты применения МЛП будут обсуждаться в одной из последующих работ.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Васильев, Н. Л. Арюткина. О методе алгебраической коррекции фона в количественном анализе по спектрам поглощения.— «Заводская лаборатория», 1975, № 3.
2. D. D. Tunnicliff, R. S. Rasmussen, M. L. Morse. Correction for interfering absorption in spectrophotometric analyses.— "Anal. Chem.", 1949, vol. 21, p. 895—900.
3. А. Ф. Васильев, М. Б. Панкова. О возможности применения линейного и выпуклого программирования для количественного анализа по спектрам поглощения.— «Заводская лаборатория», 1972, № 9.
4. А. Ф. Васильев, А. А. Киселева, Г. В. Головкин, Г. А. Косминская. Количественный анализ технического дикрезила методами ИК-спектроскопии и ГЖХ.— «Заводская лаборатория», 1974, № 9.
5. С. И. Зуховицкий, Л. И. Авдеева. Линейное и квадратичное программирование. М., «Наука», 1964.

*Поступила в редакцию
28 марта 1974 г.,
окончательный вариант —
23 января 1975 г.*

УДК 621.391

А. М. ЯКУБОВИЧ

(Москва)

ОПТИМАЛЬНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ ФИЛЬТРЫ ДЛЯ ОЦЕНОК СИГНАЛОВ, МАЛОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ К ОТКАЗАМ ИСТОЧНИКОВ ИНФОРМАЦИИ

Для оценки дискретных сигналов весьма часто используются дискретные рекуррентные фильтры (фильтры Винера—Калмана) [1]. Оптимальные по квадратичному критерию алгоритмы этих фильтров найдены в предположении об исправности источников информации. При этом сбои и отказы источников информации могут привести к значительным ошибкам в оценках сигналов. В статье находятся и исследуются алгоритмы фильтров, оценки сигналов на выходе которых в существенно меньшей степени зависят от показаний неисправных источников информации (приборов). Это достигается за счет учета вероятностных характеристик приборов в состояниях исправности и отказа, при обработке информации. Рассматриваемая задача относится к байесовским задачам оценки сигналов в случае негауссовых ошибок измерения [2].

Результаты работы могут быть использованы при создании высоконадежных информационных и управляющих систем.

Постановка задачи. Пусть производится измерение n -мерного вектора состояния $\{X_i\}$ объекта, динамические уравнения которого имеют вид

$$X_{i+1} = \Phi_{i+1, i} X_i + \xi_i, \quad (1)$$

где $i=1, 2, \dots, k$ — номер такта измерения; $\Phi_{i+1, i}$ — матрица перехода размерности $n \times n$; ξ_i — n -мерный вектор дискретного белого шума с математическим ожиданием $E[\xi_i] = 0$ и корреляционной матрицей $E[\xi_i \xi_j^T] = L_{ij} \delta_{ij}$, $\delta_{ij} = 0$ при $j \neq i$, $\delta_{ij} = 1$ при $i = j$ (τ — операция транспонирования матрицы). Вектор состояния измеряется $m \geq n$ приборами. Приборы в количестве $s \leq m$ с номерами j_1, j_2, \dots, j_s могут находиться