

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЛЬТРОВ БЕССЕЛЯ ДЛЯ ХРОМАТОГРАФИИ

Получение результатов хроматографического анализа представляется в виде трех этапов [1]: 1) анализ - хроматографическое разделение анализируемой смеси на компоненты и регистрация выходного сигнала детектора; 2) первичная обработка - получение формализованного спектра; 3) вторичная (полная) обработка - получение по формализованному спектру окончательных результатов количественного и качественного анализа.

Наиболее существенным этапом при автоматизации хроматографического анализа является первичная обработка, в которой осуществляется фильтрация сигнала. Метрологические характеристики электронных систем вносят основной вклад в результаты анализа. Выполняется переход от реальной хроматограммы к формализованной. Каждый компонент анализируемой смеси представляется в многомерном формализованном спектре линией с характеризующей его совокупностью определяющих параметров: временем удерживания, амплитудой и (или) площадью. При решении задач идентификации основным параметром пика компонента является время удерживания.

Выходной сигнал включает смесь полезного сигнала, несущего информацию о составе или качестве анализируемого вещества; базисного сигнала, равного значению сигнала при отсутствии полезного сигнала; помех, указанные три составляющие считают аддитивными [1]. Полезный сигнал содержит низкочастотные составляющие: при граничных условиях (ширина пика по базисной линии равна 1 с для систем детектирования по теплопроводности и пламенно-ионизационных) отношение спектральной плотности $g(\omega)$ пика компонента на частоте 3 Гц к $g(0)$ составляет порядка 100 дБ [2]. Поэтому для фильтрации высокочастотных помех задача состоит в проектировании фильтра низких частот (ФНЧ) с частотой среза 3 Гц.

Получение ФНЧ, обладающего амплитудно-частотной характеристикой (АЧХ), равной единице в полосе пропускания и нулю в полосе задержания, и линейной фазо-частотной характеристикой (ФЧХ) в заданной полосе частот, - очень сложно. Так, аппроксимации АЧХ (например, по Баттерворту, Чебышеву, Кауэру) не обеспечивают заданный вид ФЧХ. Применение фильтров с нелинейной ФЧХ в реальном масштабе времени приводит к тому, что пики различной ширины задерживаются на различное время.

Проектирование фильтра $H(j\omega)$, обладающего линейной фазовой характеристикой в заданной полосе частот, совпадает с требованиями постоянства функции группового времени $\tau(\omega)$ [3]

$$\tau(\omega) = d\varphi(\omega)/d\omega = -(d/d\omega) \arctg X(\omega)/R(\omega) = \frac{X(\omega)R'(\omega) - R(\omega)X'(\omega)}{|H(j\omega)|^2}, \quad (1)$$

где $X(\omega) = \text{Im}(H(j\omega))$ - мнимая часть передаточной функции фильтра, $R(\omega) = \text{Re}(H(j\omega))$ - действительная часть.

При проектировании ФНЧ с максимально плоской характеристикой группового времени сначала записывается общий вид (структура) передаточной функции. Если передаточная функция имеет только полюсы, то задача нахождения параметров фильтра сводится к нахождению полиномов Бесселя n -го порядка [3]. Фильтр Бесселя характеризуется передаточной функцией вида

$$H(p) = k/B_n(p), \quad (2)$$

где $B_n(p)$ - полином Бесселя n -й степени, $k = B_n(0)$. Зная полиномы Бесселя $B_1(p) = p+1$ и $B_2(p) = p^2 + 3p + 3$, можно найти полином Бесселя n -го порядка с помощью рекуррентного соотношения: $B_n(p) = (2n-1)B_{n-1}(p) + p^2 B_{n-2}(p)$ [3]. Фильтр Бесселя с передаточной функцией (2) дает единичное групповое время замедления $\tau(0) = 1$ с; для получения $\tau(0) = \tau_0 \neq 1$ с, необходимо выполнить преобразование $p \rightarrow \tau_0 p$, тогда

$$H(p) = k/B_n(\tau_0 p), \quad k = B_n(0). \quad (3)$$

Степень знаменателя (3) зависит от требований, предъявляемых к фильтру: чем больше порядок фильтра, тем лучше будет аппроксимировано групповое время величиной τ_0 единиц в

пределах широкой полосы частот. На рисунке в приложении 1 приведены графики ФЧХ фильтров разных порядков при $\tau_0=1$. Для аналогового фильтра для обеспечения $\tau(\omega)=\text{const}$ в диапазоне частот 0-3Гц достаточно было бы фильтра Бесселя 22-го порядка при $\tau_0=1\text{с}$, однако, при уменьшении τ_0 до 0,1с удовлетворительным будет фильтр 4-го порядка.

Для реализации цифрового фильтра необходимо преобразовать функцию $N(p)$ в соответствующую передаточную функцию $N(z)$ одним из известных методов. В приложении 2 приведены АЧХ и производная ФЧХ фильтров Бесселя 12-го порядка ($\tau_0=1\text{с}$) в цифровой области при применении различных процедур перехода. Из рисунка приложения 2 видно, что методы численного интегрирования и инвариантности импульсной характеристики достаточно сильно искажают фазовую характеристику в интересующей полосе частот. Более того, использование метода инвариантности импульсной характеристики ухудшает фильтрацию высокочастотных шумов, поскольку АЧХ не спадает до нуля (в общем случае это случается в случае систем с существенно не ограниченной аналоговой АЧХ [3]). Хотя билинейное преобразование и приводит к нелинейности соотношения между аналоговой ω и цифровой θ частотами, но в данном случае результаты существенно лучше двух предыдущих. При уменьшении величины группового времени τ_0 полоса частот, при которых производная ФЧХ фильтра Бесселя 12-го порядка остаётся постоянной увеличивается.

Однако, при $\tau_0 < 0,4\text{с}$ характеристика группового времени замедления начинает претерпевать нелинейные изменения, а при дальнейшем уменьшении величины группового времени τ_0 характеристика изменяется до неузнаваемости. Следовательно, билинейное преобразование искажает характеристику группового времени фильтров Бесселя, начиная с некоторого $\tau_0 = \tau_{\text{окр}} < 1$. Условие $\tau(\omega) = \text{const}$ при $\omega = 0 \dots 2\pi \cdot 3$ для фильтра 12-го порядка не выполняется, поэтому нужно увеличить порядок фильтра.

Пусть изменения характеристики группового времени замедления, вносимые уменьшением величины времени замедления, не должны превышать 1% в полосе частот $0 \dots 6\pi$ рад/с, тогда находим, что порядок фильтра Бесселя должен быть не меньше 14. Основные характеристики такого фильтра приведены на рис. 1.

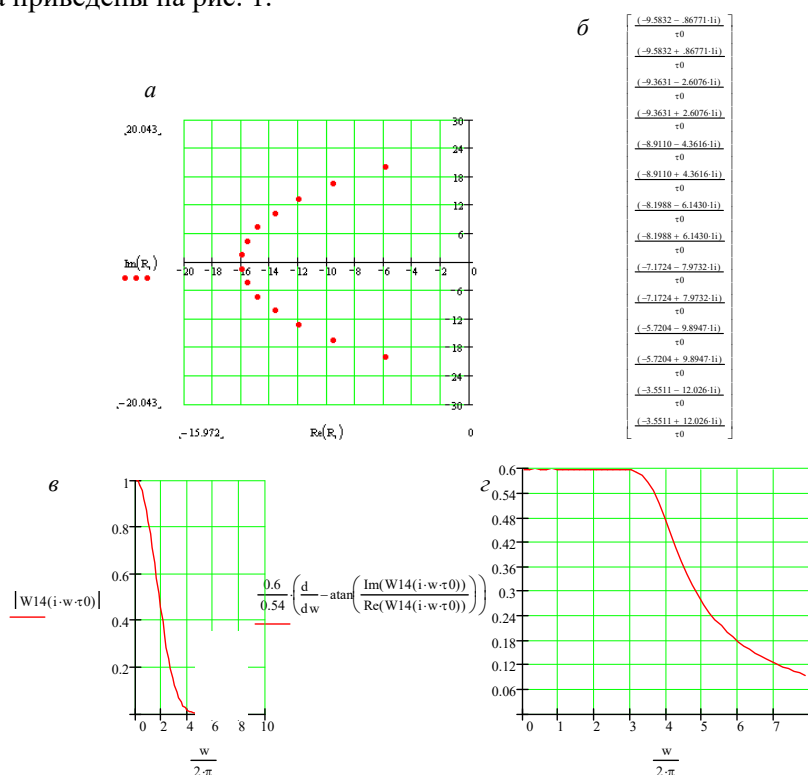


Рис. 1. Характеристики аналогового фильтра Бесселя 14-го порядка ($\tau_0=0,6\text{с}$): а - расположение корней характеристического уравнения и их выражения через τ_0 ; б; в - АЧХ; г - характеристика группового времени замедления

Основные характеристики цифрового фильтра приведены на рис. 2

Разностное уравнение, которое связывает входную x_n и выходную y_n последовательности фильтра

$$y_n = \sum_{i=0}^{14} a_i x_{n-i} + \sum_{i=1}^{14} -b_i y_{n-i} \quad (4)$$

Коэффициенты a_i и b_i определяются периодом дискретизации и групповым временем задержки.

Из рис. 2б видно, что АЧХ цифрового фильтра не равна единице в интересующей полосе частот, в результате чего амплитуда и площадь пика окажутся заниженными.

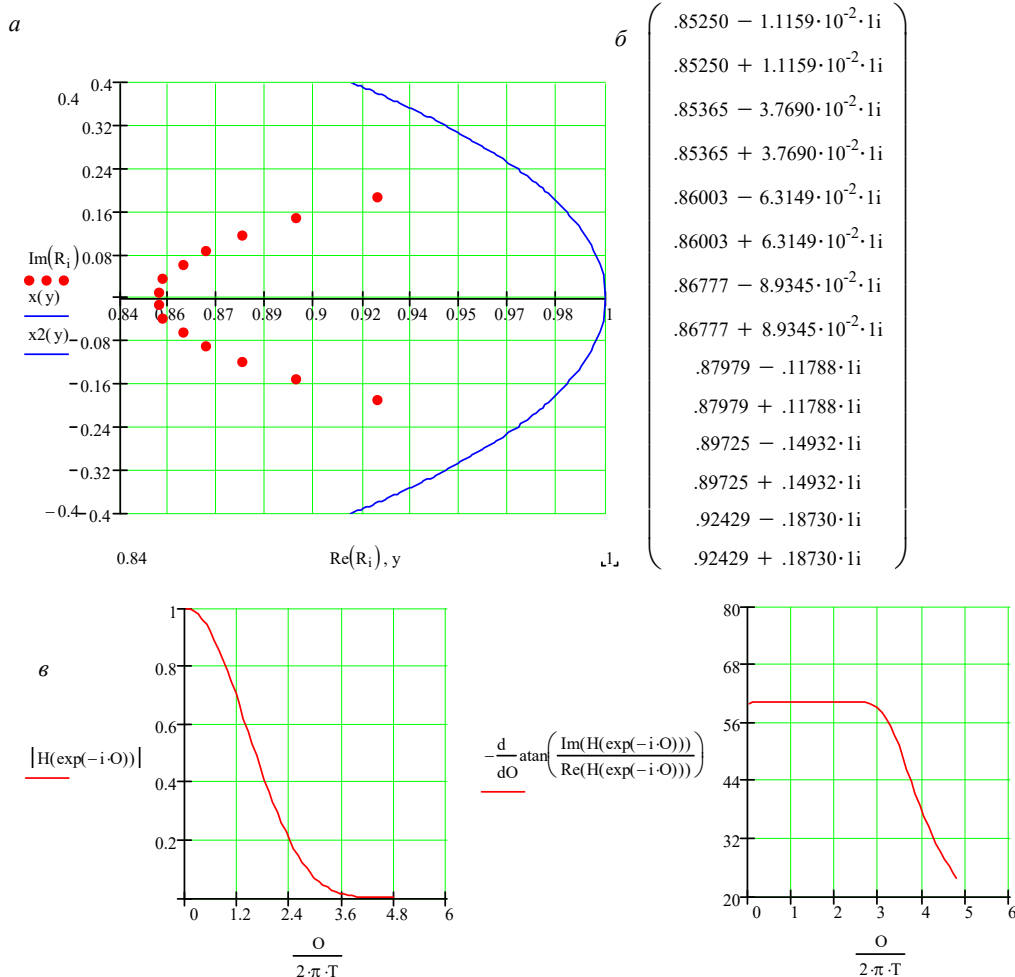


Рис. 2. Характеристики цифрового фильтра Бесселя 14-го порядка ($\tau_0=0,6$, $T=0,01$ с): *a* - расположение полюсов; *б* - АЧХ; *в* - характеристика группового времени задержки

Поэтому предлагается ввести коррекцию на коэффициент усиления цифрового фильтра следующим образом. Во время фильтрации происходит обнаружение начала и конца пика (в массиве отфильтрованных значений сигнала) одним из алгоритмов, например, по превышению производной сигнала некоторого порогового значения (в таком случае обнаружение нечувствительно к неизменному базисному сигналу) [1].

Затем проводится дискретное преобразование Фурье (ДПФ) пика. Значения ДПФ пика на частотах (f_k , $k = 2T/\sigma_o$, где σ_o ширина пика по уровню базисного сигнала) сопоставляются со значениями коэффициента усиления $|H(e^{j2\pi f_k})|$ фильтра на тех же частотах, для каждой частоты f_k вводится поправочный коэффициент

$$D_k = \left(-1 + \frac{1}{|H(e^{j2\pi f_k})|} \right) \cdot \frac{|SF_k|}{|SF_0|}, \quad (5)$$

где SF_k – значение ДПФ отфильтрованного пика на частоте f_k . Далее отфильтрованный сигнал в диапазоне пика умножается на коэффициент

$$1 + \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N D_k \quad (6)$$

Рассматривая фильтрацию пиков различной ширины ($\sigma = 0,3-20$ с) было установлено, что число N частот, участвующих в определении коэффициента D следует брать не более 5-8: иначе для пиков с $\sigma < 1$ с ввиду присутствия в их ДПФ более высоких частот получим завышенные оценки площадей и амплитуд.

Применение алгоритма (5) для коррекции амплитуды и площади отфильтрованного пика компонента позволяет уменьшить ошибку по амплитуде с 2-4 до 0,6-1% для пиков с шириной по оси времени 2,5 и более секунд, скорректированный сигнал остаётся меньше идеального. Если (5) немного изменить для тех частот, для которых АЧХ фильтра больше 0,9, то ошибку удастся уменьшить ещё в 2-5 раз

$$D_k = -1 + \frac{1}{|H(e^{j2\pi f_k})|} \text{ при } |H(e^{j2\pi f_k})| > 0,9; \quad D_k = \left(-1 + \frac{1}{|H(e^{j2\pi f_k})|} \right) \cdot \frac{|SF_k|}{|SF_0|} \text{ при } |H(e^{j2\pi f_k})| \leq 0,9 \quad (7)$$

При моделировании работы фильтра Бесселя 14-го порядка с групповым временем замедления 0,6 с для хроматографических пиков различной ширины по уровню базисного сигнала без коррекции выходного сигнала, с коррекцией по (5) и с коррекцией по (7) на идеальный сигнал, описываемый суммой гауссовых пиков с различными площадями, среднеквадратическими отклонениями и временами удерживания [2], накладывался высокочастотный шум уровнем – 30,5дБ. Для удобства сравнения результатов фильтрации и коррекции выходной сигнал фильтра сдвинут по оси времени на $-\tau_0 = -0,6$ с (на 60 тактов при частоте дискретизации 100 Гц). Имитационное моделирование в системе математических вычислений MathCAD 2000 Professional на ПК Pentium II 450МГц 64М ОЗУ дало такие результаты:

подавление высокочастотных помех (более 20 Гц) более, чем на 120 дБ;

искажения времени удерживания пиков компонент составили 0,6 с для пиков всего диапазона ширины по оси времени;

коррекция отфильтрованного сигнала по (5) позволила уменьшить искажения амплитуды пика с 6 до 3,25 % и его площади с 3,3 до 2 % для пиков с шириной по оси времени 1,8 с и с 1,778 до 1,765 %, с 2,06 до 0,62 % для пиков с шириной по оси времени 16,5 с;

коррекция (7) уменьшила искажения соответственно до 1,670 и 0,95 % для пика с шириной по временной оси 1,8 с и до 0,753 и 0,461 % для пика с шириной 16,5 с.

Список литературы

1. Гуревич А. Л., Русинов Л. А., Сягаев Н. А. Автоматический хроматографический анализ. – Л.: Химия, 1980. – 192с, ил
 2. Attila Felinger. Fourier Analysis of Multicomponent Chromatograms. Theory of Nonconstant Peak Widths Models. Anal. Chem. 1991, 63, 2627-2633.
 3. Лэм Г. Аналоговые и цифровые фильтры. Расчет и реализация. – М.: Мир, 1984.
- Рукопись поступила в редакцию 10.04.12

УДК 622.28.044

В.А. КАЛИНИЧЕНКО, д-р техн. наук, ГВУЗ «Криворожский национальный университет»
И.А. ГОРБАТЕНКО, аспирант, ПАО «Марганецкий ГОК»

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ АНКЕРНОЙ КРЕПИ НА ВЫСОТУ ВЫЕМОЧНЫХ ШИРЕКОВ

Рассмотрена зависимость высоты выработок и скорости опускания кровли на сопряжениях очистных выработок от параметров анкерной крепи.

Проблема и ее связь с научными и практическими задачами. Доработка оставшихся запасов руды на марганцевых шахтах с циклично-поточным производством сопровождается повышенным горным давлением, неудовлетворительным состоянием горных выработок и низкой производительностью очистных забоев. Возобновилась дискуссия о направлениях дальнейшего развития подземно-