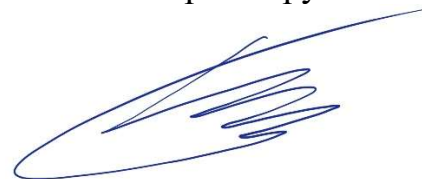


На правах рукописи



БОЧКАРЕВ АНДРЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ
В ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ
ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО АНАЛИЗА**

Специальность: 2.2.11. Информационно-измерительные и управляющие системы

АВТОРЕФЕРАТ

**диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук**

Самара - 2022

Работа выполнена на кафедре «Информационно-измерительная техника» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государственный технический университет» (ФГБОУ ВО «СамГТУ»)

- Научный руководитель: Доктор технических наук, профессор
Сайфуллин Раухат Талгатович
Профессор кафедры «Информационно-измерительная техника» ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет», г. Самара
- Официальные оппоненты: Доктор технических наук, доцент
Воловач Владимир Иванович
Заведующий кафедрой «Информационный и электронный сервис» ФГБОУ ВО «Поволжский государственный университет сервиса», г. Тольятти
Доктор технических наук, доцент
Печерская Екатерина Анатольевна
Заведующий кафедрой «Информационно-измерительная техника и метрология» ФГБОУ ВО «Пензенский государственный университет», г. Пенза
- Ведущая организация: ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», г. Самара

Защита состоится «27» декабря 2022 г. в 10.00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.377.04 (Д 212.217.07) ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» (СамГТУ) по адресу: Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244, главный корпус, аудитория 200.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Самарского государственного технического университета по адресу: 443100, г. Самара, ул. Первомайская, 18, а также на официальном сайте диссертационного совета по адресу: <http://d21221707.samgtu.ru/>.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просим направлять по адресу: Россия, 443100, г. Самара, Молодогвардейская ул. 244, СамГТУ, Главный корпус, ученому секретарю диссертационного совета 24.2.377.04 (Д 212.217.07), тел.: (846) 278-44-96, факс: (846) 278-44-00; e-mail: D24.2.377.04@yandex.ru.

Автореферат разослан « _ » _____ 20__ г.

Учёный секретарь
Диссертационного совета
24.2.377.04 (Д 212.217.07),
к.т.н., доцент



Е.Е. Ярославкина

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Актуальность темы исследования.

Для обеспечения качества промышленного сырья и продукции нефтехимических отраслей, а также при научных исследованиях используются информационно-измерительные системы хроматографического анализа (ИИСХА), позволяющие получать достоверную информацию о структуре смесей веществ. Принцип работы таких систем основывается на анализе хроматографических сигналов, хроматограмм, формируемых измерительными каналами.

Основными характеристиками хроматографических сигналов являются информативные параметры: а) координаты положений вершин отдельных хроматографических пиков на оси времени; б) площадь хроматографических пиков, зависящая от количества отдельных компонентов в анализируемой смеси. Для получения этих характеристик используются различные методы первичной обработки хроматографических сигналов.

Основная проблема при разработке ИИСХА заключается в том, что формируемые сигналы характеризуются неопределенностью информативных параметров, вызванной статическими и динамическими погрешностями. Источниками статических погрешностей являются наложенные на сигнал случайная помеха и базовая линия, последняя представляет собой зависящий от времени сигнал. Динамические погрешности являются следствием ошибочно подобранного режима работы хроматографического анализатора (температура пробоотборника и хроматографической колонки, выбор неподвижной фазы хроматографической колонки, скорость потока газа-носителя, время анализа и т.п.), а также воздействием аппаратной функции первичного преобразователя (хроматографического детектора), провоцирующей наиболее сложные для устранения последствия – искажение формы и снижение хроматографического разрешения (наложение пиков на хроматограмме). Таким образом, актуальным является вопрос разработки ИИСХА с усовершенствованным алгоритмом первичной обработки хроматографических сигналов, который обеспечивал бы уменьшение погрешности определения его информативных параметров.

Степень разработанности темы исследования.

Общие вопросы применения информационно-измерительных систем хроматографического анализа при первичной обработке сигналов рассматривались в работах зарубежных авторов: N. Dyson, M. Otto, J.P. Foley, V.R. Meyer, D.J. Huskins, L. Condal-Bosch, D.L. Ball, W.E. Harris, H.W. Nabgood, E. Proksch и других, и российских авторов: А.Л. Гуревич, К.И. Сакодынский, В.В. Бражников, Л.А. Русинов, Н.А. Сягаев, Р.Т. Сайфуллин, П.К. Ланге, М.С. Вигдергауз, И.В. Шафранский и других. В рамках первичной обработки хроматографических сигналов эти авторы рассматривали различные методы подавления помехи, коррекции базовой линии, разделения наложенных пиков, определения информативных параметров хроматографических сигналов.

Для подавления помехи чаще всего применялись цифровые фильтры, фильтр Савицкого-Голея, Калмана, Винера, сплайн-фильтр. Коррекция базовой линии осуществлялась ее аппроксимацией с дальнейшей коррекцией хроматограммы.

Для определения информативных параметров и разделения хроматографических пиков чаще всего применялось графическое интегрирование сигналов, характеризующееся существенной погрешностью, на оценку и снижение которой направлены исследования авторов Е. Proksch, J.P. Foley, A.N. Papas, L. Condal-Bosch, V.R. Meyer, D.L. Ball и других.

Устранение наложения хроматографических пиков деконволюцией в частотной области рассмотрено в работах D.W. Kirmse, A. Felinger, G. Westerberg, N.A. Wright, D.C. Villalanti, M.F. Burke, E. Kullik и других. Проблема регуляризации такой задачи исследована А.Н. Тихоновым. В работах А. Felinger, E. Marsy, J.A. Rice и других описана та же процедура во временной области с использованием производных хроматографических сигналов. В работах П.К. Ланге и К.Л. Куликовского предлагается использовать схожую методику, но с аппроксимацией производных хроматографических сигналов сплайнами.

В работах Е. Grushka, M.N. Meyers, J.C. Giddins, S.N. Chesler, S.P. Cram, T. Petitclerc, G. Guiochon и других описан метод разделения хроматографических пиков по статистическим моментам, который, однако, крайне чувствителен к шуму. В работах S.R. Gallant, S.P. Fraleigh, S.M.

Cramer, H. Miao, M. Yu, S. Hu, P.T. Сайфуллина, Т.З. Хабурзани и других описано применение нейросетевых технологий для разделения наложенных хроматографических пиков.

В работах K.R. Beebe, B.R. Kowalski, a N.J. D'Allur, R.S. Juvet, J.T. Lundeen, H.J. van der Linde, W.H. Press и других описано разделение пиков хроматограммы с помощью их аппроксимации различными функциями. В работах P.T. Сайфуллина, А.А. Наумова, В.В. Манойлова и Л.В. Новикова рассмотрено разделение пиков с помощью вейвлет-преобразования.

Несмотря на значительные достижения в методах и системах обработки первичной информации хроматографических сигналов, существует необходимость разработки единого подхода к решению задач первичной обработки измерительных сигналов в информационно-измерительных системах хроматографического анализа, приводящего к уменьшению погрешностей при получении информативных параметров.

Целью диссертационной работы является разработка и исследование информационно-измерительной системы хроматографического анализа с использованием новых аппроксимационных методов, позволяющих снизить погрешность определения первичных характеристик хроматографических сигналов для качественного определения концентраций исследуемых веществ.

Для достижения поставленной цели в диссертации сформулированы и решены основные задачи:

- аналитический обзор методов и алгоритмов первичной обработки сигналов в информационно-измерительных системах хроматографического анализа;
- разработка новых методов первичной обработки хроматографических сигналов;
- анализ метрологических характеристик разработанных методов обработки хроматографических сигналов;
- разработка обобщенной структуры информационно-измерительной системы хроматографического анализа, реализующей новые аппроксимационные методы первичной обработки хроматографических сигналов
- разработка алгоритмического обеспечения первичной обработки хроматографических сигналов;
- экспериментальное исследование информационно-измерительной системы хроматографического анализа.

Объект исследования – информационно-измерительные системы хроматографического анализа с использованием новых аппроксимационных методов первичной обработки хроматографических сигналов.

Предметом исследования являются структуры информационно-измерительных систем, методы и модели хроматографического анализа.

Научная новизна.

1. Метод аппроксимации хроматографических сигналов в базисе функций Чебышева-Эрмита, отличительной особенностью которого является предварительное разбиение сигналов на фрагменты, позволяющее ограничить порядок используемых при аппроксимации базисных функций, что приводит к уменьшению погрешности аппроксимации хроматографических сигналов.

2. Модель «комбинированная гауссиана» хроматографического пика, отличающаяся применением вейвлет-аппроксимации к асимметричным хроматографическим пикам и модификацией формы би-гауссианы, что приводит к уменьшению погрешности определения площади наложенных асимметричных хроматографических пиков.

3. Метод разделения наложенных асимметричных хроматографических пиков, отличающийся использованием совокупности моделей Грамма-Шарлье и комбинированной гауссианы, что приводит к уменьшению погрешности определения площадей наложенных асимметричных пиков.

4. Структурная и функциональная схемы, алгоритмическое обеспечение информационно-измерительной системы хроматографического анализа с высокими метрологическими характеристиками, позволяющие повысить достоверность определения количественных характеристик смесей веществ.

Теоретическая и практическая значимость.

Значимость теоретических результатов работы заключается в создании новых математических методов обработки хроматографических сигналов, которые позволяют достичь уменьшения погрешности вычисления их информативных параметров.

Практическая значимость разработанных аппроксимационных методов обработки хроматографических сигналов определяется перспективой использования этих методов в информационно-измерительных системах для анализа широкого спектра веществ в условиях помех и факторов, искажающих форму измерительных сигналов.

Методология и методы исследования.

В работе использованы методы математического анализа, статистических исследований, методы цифровой обработки сигналов, методы аналитического и имитационного моделирования. Все расчеты проводились с использованием программного продукта Wolfram Mathematica.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту:

1. Метод аппроксимации хроматографических сигналов в базисе функций Чебышева-Эрмита с предварительным разбиением сигналов на фрагменты, каждый из которых кодируется своим набором масштабированных и смещенных в зависимости от свойств фрагмента функций базиса Чебышева-Эрмита.

2. Модель «комбинированная гауссиана» хроматографического пика на основе применения вейвлет-аппроксимации к асимметричным хроматографическим пикам и модификацией формы би-гауссианы.

3. Метод разделения наложенных асимметричных хроматографических пиков с использованием совокупности моделей Грамма-Шарлье и комбинированной гауссианы.

4. Структурная и функциональная схемы информационно-измерительной системы хроматографического анализа, реализующей разработанные методы обработки хроматографических сигналов для определения информативных параметров хроматографических пиков.

Соответствие паспорту специальности.

Диссертационное исследование соответствует научной специальности 2.2.11. «Информационно-измерительные и управляющие системы».

Достоверность результатов исследования.

Достоверность научных положений, выводов и практических рекомендаций, полученных в диссертационной работе, обеспечивается корректным использованием математических методов и подтверждается результатами экспериментальных исследований. Полученные данные не противоречат известным положениям в данной области исследований.

Апробация результатов.

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 6 международных и всероссийских конференциях, в том числе на Всероссийской научной конференции с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи» (г. Самара, 2019 г.), Международной научной конференции «Проблемы управления и моделирования в сложных системах» (г. Самара, 2019 г.), Международной научно-технической конференции «Методы, средства и технологии получения и обработки информации» (г. Пенза, 2020 г.), Всероссийской научной конференции «Молодежь и наука: шаг к успеху» (г. Курск, 2021 г.), Международной конференции и молодежной школе «Информационные технологии и нанотехнологии» (г. Самара, 2021 г.), Международной мультидисциплинарной конференции по промышленному инжинирингу и современным технологиям «FarEastCon» (г. Владивосток, 2021 г.), Международной молодежной научной конференции «Будущее науки-2022» (г. Курск, 2022 г.), Международной научно-технической конференции «Перспективные информационные технологии» (г. Самара, 2022 г.).

Исследования выполнялись в рамках гранта РФФИ № 20-31-90014 «Разработка алгоритмов повышения разрешающей способности аналитических приборов на базе кодирования-декодирования сигналов в базисе функций Чебышева-Эрмита».

Работа по теме диссертационного исследования отмечена дипломом Министерства образования и науки Самарской области в рамках областного конкурса «Молодой ученый» в номинации «Аспирант» (г. Самара, 2020 г.).

Реализация результатов исследований.

Результаты теоретических и экспериментальных исследований нашли применение: при анализе состава трансформаторных масел и масел погружных электродвигателей, внедрены в ООО «АКСЕС автоматик» (г. Самара), при определении жирнокислотного состава, внедрены в испытательной лаборатории ФГБУ «Самарский ЦСМ» (г. Самара), в учебном процессе «Самарского государственного технического университета» (г. Самара) при подготовке бакалавров по направлению 12.03.01 «Приборостроение» по профилю «Информационно-измерительная техника и технологии».

Публикации.

По результатам выполненного исследования опубликовано 21 работа, в том числе 6 в российских рецензируемых изданиях из списка ВАК РФ, а также 3 в зарубежных изданиях, индексируемых наукометрической базой Scopus, две из которых также индексируются базой Web of Science.

Личный вклад автора.

Все результаты, определяющие научную новизну, получены автором лично. В публикациях, выполненных в соавторстве, лично автору принадлежат следующие результаты: [4-6,11, 15-18] – математическая реализация преобразований в базе используемых функций, [3,10] – реализация и применение алгоритма кодирования-декодирования, [2,9,13,14,19] – разработка алгоритмов для решения поставленных задач, [12] – исследование способов деления сигналов на фрагменты, [21] – вычисление погрешности по методу границ.

Структура диссертации.

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка сокращений и библиографического списка из 147 наименований, общим объемом 159 страниц печатного текста и 5 приложений на 24 страницах.

Благодарность.

Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность д.т.н., профессору П.К. Ланге, а также к.т.н., доценту Е.Е. Ярославкиной за оказанные консультационную и редакторскую поддержку на заключительных этапах подготовки работы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы исследования, формулируются цели и задачи исследования, характеризуется научная новизна полученных результатов, приводятся основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе проводится аналитический обзор факторов, влияющих на погрешность обработки хроматографических сигналов. Первичная обработка хроматографического сигнала $s(t)$ включает (см. рис.

1): подавление случайной помехи $n(t)$, коррекцию базовой линии $b(t)$, разделение наложенных пиков

$p_1(t)$ и $p_2(t)$, определение информативных параметров сигнала – площадей S_1, S_2 и положений вершин μ_1, μ_2 . Выявлено, что общая погрешность хроматографического анализа в существенной степени зависит от погрешностей первичной обработки.

В настоящее время наиболее распространены ИИСХА газового типа, содержащие источник газа-носителя, редуктор, регулятор давления, шприц для ввода пробы, блок ввода и испарения, хроматографическую колонку, детектор, предусилитель, АЦП и систему сбора данных. При

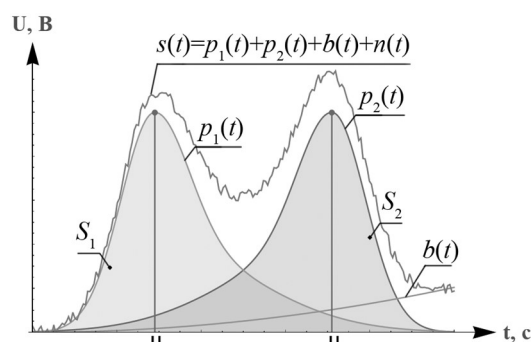


Рисунок 1 – Хроматографический сигнал

этом, блок ввода и испарения в них может заменяться автоматическим сэмплером, а регулятор давления может быть управляемым.

Рассматриваются распространенные методы первичной обработки хроматографических сигналов, анализируются их достоинства и недостатки. Методы подавления помехи (или сглаживания) зачастую вызывают либо ослабление полезной составляющей сигнала, либо появление осцилляций на сглаженном сигнале. В меньшей степени данными недостатками обладает аппроксимация сигнала $s(t)$ кодированием в базисе из $N+1$ ортогональных функций $\varphi_n(t)$:

$$\bar{s}(t) = \sum_{n=0}^N c_n \varphi_n(t), \quad (1)$$

причем

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} s(t) \varphi_n(t) dt, \quad n = 0, \dots, N \quad (2)$$

где $\bar{s}(t)$ – аппроксимация $s(t)$;

$\varphi_n(t)$ – функция n -го порядка выбранного базиса;

c_n – коэффициент кодирования сигнала n -ой базисной функцией, соответственно (2) называют кодированием;

t – время;

N – порядок кодирования.

Погрешность методов разделения наложенных пиков ($p_1(t)$ и $p_2(t)$ на рис. 1) существенно зависит от количества наложенных пиков, числа параметров аппроксимирующей модели и степени асимметрии пиков. Один из таких методов основан на вейвлет-преобразовании (вейвлет-аппроксимация), согласно ему для $s(t)$ вычисляются вейвлет-преобразования с вейвлетами Гаусса 1-4 порядка. Параметры аппроксимирующей модели, гауссианы, определяются по значениям вейвлет-преобразований в μ_1 для $p_1(t)$, он восстанавливается и вычитается из исходного сигнала. По вейвлет-преобразованиям полученной разности $s'(t)$ в μ_2 восстанавливается $p_2(t)$, он также вычитается из исходного сигнала. Процедура повторяется до достижения допустимого значения погрешности, которая с каждой итерацией уменьшается. Применение на практике этого метода ограничено, поскольку он использует симметричную модель пика. Но на его основе возможно разработать новый метод, обеспечивающий уменьшение погрешности разделения пиков за счет использования асимметричной модели пика.

Проведенный аналитический обзор показал необходимость разработки нового аппроксимационного подхода к обработке хроматографических сигналов, основанного на совместном использовании аппроксимации в базисе ортогональных функций для сглаживания, вейвлет-аппроксимации для разделения наложенных пиков и производных сигналов для обнаружения пиков.

Во второй главе описывается аппроксимация хроматографических сигналов в базисе ортогональных функций Чебышева-Эрмита, которые были выбраны, поскольку младшая функция данного базиса по форме подобна хроматографическому пику, что уменьшает число требуемых при аппроксимации базисных функций.

Функции Чебышева-Эрмита определяются выражением:

$$\varphi_n(t) = \frac{1}{\alpha_n} \cdot e^{-\frac{t^2}{2}} \cdot H_n(t), \quad (3)$$

где $\alpha_n = \sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}$ – нормирующая константа;

$$H_n(t) = (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n e^{-t^2}}{dt^n}.$$

Алгоритм реализации разработанного метода аппроксимации представлен на рис. 2. Он обладает сглаживающим свойством, а также автоматизирован за счет поставленных условий выхода из циклов.

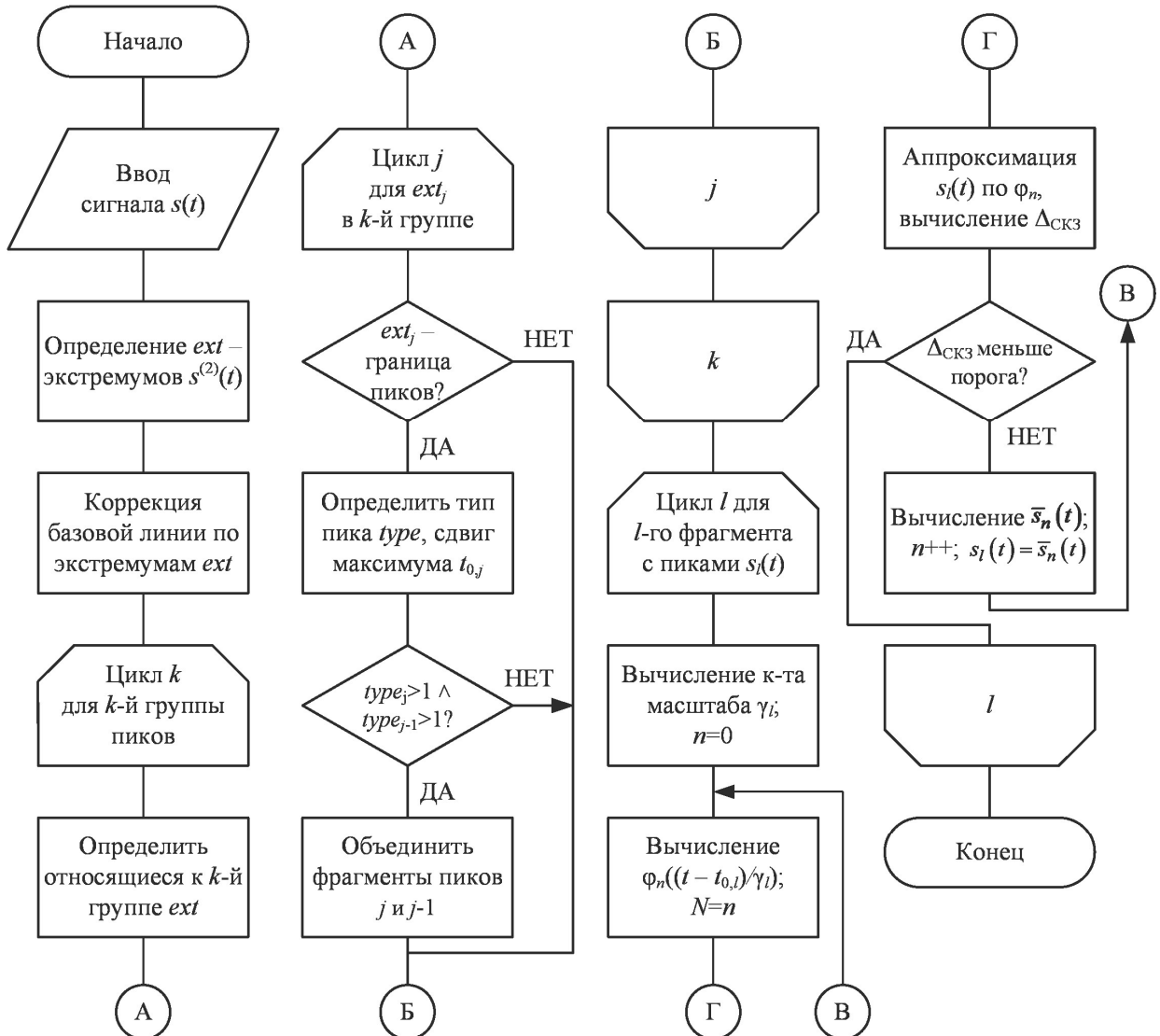


Рисунок 2 – Алгоритм реализации метода аппроксимации хроматографических сигналов

Согласно алгоритму, вначале вычисляется $s^{(2)}(t)$ – вторая производная $s(t)$, на интервале $0 \leq t \leq t_{\max}$, определяются экстремумы ext второй производной $s^{(2)}(t)$. По априорной информации о чередовании экстремумов ext второй производной $s^{(2)}(t)$ хроматографических пиков определяются области с пиками (группы), границы пиков в группе (совпадающие с некоторыми ext $s^{(2)}(t)$), а также области базовой линии $b(t)$ вне групп пиков. По областям базовой линии $b(t)$, она аппроксимируется и вычитается из исходного сигнала. Для каждой k -й группы пиков по ext_j определяется тип всех пиков в группе (1 – одиночный, 2 - наложенный) и положение максимума $t_{0,j}$. Соседние наложенные пики объединяются в один фрагмент, что уменьшает погрешность аппроксимации. Для l -го фрагмента $s_l(t)$ вычисляется коэффициент масштаба γ_l и сами базисные функции (3) с учетом сдвига и масштаба $\varphi_n\left(\frac{t-t_{0,l}}{\gamma_l}\right)$. Фрагмент $s_l(t)$

аппроксимируется кодированием с функцией $\varphi_n\left(\frac{(t-t_{0,l})}{\gamma_l}\right)$, определяются коэффициенты c_n по выражению (2) и вычисляется среднеквадратическое значение (СКЗ) остатка:

$$\Delta_{СКЗ} = \sqrt{\frac{1}{t_{\max}} \int_0^{t_{\max}} \left[s_l(t) - \sum_{n=0}^N c_n \varphi_n\left(\frac{t-t_{0,l}}{\gamma_l}\right) \right]^2 dt}. \quad (4)$$

Если (4) меньше порога (уровень шума), то алгоритм останавливается, иначе остаток, заданный выражением:

$$\bar{s}_n(t) = s_l(t) - \sum_{n=0}^N c_n \varphi_n\left(\frac{t-t_{0,l}}{\gamma_l}\right),$$

аппроксимируется $\varphi_{n+1}\left(\frac{(t-t_{0,l})}{\gamma_l}\right)$ и повторяется проверка условия.

В работе предложен процесс формирования базисов вычисления производных и вейвлет-преобразований (с вейвлетами Гаусса) из коэффициентов кодирования, полученных по алгоритму на рис. 2. Базис производных используется для определения границ пиков, а вейвлет-преобразование – при разделении пиков. Чтобы получить производную $s(t)$ k -го порядка $s^{(k)}(t)$ вычисляются коэффициенты c_n по формуле (2), которые подставляются в (1). При этом $\varphi_n(t)$ в (1) заменяется на свою производную:

$$s^{(k)}(t) = \sum_{n=0}^N \frac{c_n}{\gamma^k} \sum_{m=0}^{\min(k,n)} \left[C_k^m (-1)^{k-m} \sqrt{\frac{2^m n!}{(n-m)!}} He_{k-m}\left(\frac{t-t_0}{\gamma}\right) \varphi_{n-m}\left(\frac{t-t_0}{\gamma}\right) \right], \quad (5)$$

где $\min(k, n)$ – наименьшее из k и n ;

$$C_k^m = \frac{k!}{m!(k-m)!}, \quad He_q(t) = (-1)^q e^{\frac{t^2}{2}} \frac{d^q e^{-\frac{t^2}{2}}}{dt^q}.$$

Подобным образом, после определения c_n по формуле (2) для сигнала $s(t)$ вычисляется и вейвлет-преобразование $W_m(a, b)$ с вейвлетом Гаусса m -го порядка:

$$W_m^*(a, b) = \sum_{n=0}^N \frac{-e^{-\frac{(t_0-b)^2}{2d^2}} m! n! c_n}{\alpha_n \sqrt{a\gamma}} \sum_{k=0}^{n/2} \left\langle \lambda_k^n \cdot \left(\frac{2}{\gamma}\right)^{n-2k} \cdot \sum_{i=0}^{n-2k} \left\{ (-1)^i \cdot C_{n-2k}^i \cdot \gamma^{2i} \cdot p^i \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \sum_{j=0}^{m/2} \left[\lambda_j^m \left(\frac{1}{a}\right)^{m-2j} \left(\frac{1}{2}\right)^j \sum_{l=0}^{m-2j} \left(C_{m-2j}^l \cdot I_h \cdot a^{2l} \cdot p^l \right) \right] \right\} \right\rangle, \quad (6)$$

где a – масштаб вейвлета;
 b – сдвиг вейвлета;

$$h = n - 2k - i + m - 2j - l, \quad d = \sqrt{a^2 + \gamma^2}, \quad p = \frac{t_0 - b}{a^2 + \gamma^2} = \frac{t_0 - b}{d^2},$$

$$I_h = \begin{cases} \frac{\sqrt{2\pi} (a\gamma)^{n+1} \cdot (n-1)!!}{d^{n+1}}, & n \bmod 2 = 0, \\ 0, & n \bmod 2 = 1. \end{cases}$$

В третьей главе разрабатывается метод вейвлет-аппроксимации, а на его основе создается схема ИИСХА. Анализ показал, что для вейвлет-аппроксимации наилучшей является модель Грамм-Шарлье:

$$F(t, \mu, A, \sigma, \gamma_1, \gamma_2) = A \cdot e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}} \left[1 + \frac{\gamma_1}{6} He_3\left(\frac{t-\mu}{\sigma}\right) + \frac{\gamma_2}{24} He_4\left(\frac{t-\mu}{\sigma}\right) \right]. \quad (7)$$

где A – амплитуда пика;
 μ – положение вершины пика на оси времени;
 σ – среднеквадратическая ширина пика;
 γ_1 – коэффициент асимметрии;
 γ_2 – коэффициент эксцесса.

Она хорошо описывает пики с крутым передним фронтом, но не может описать с низкой погрешностью пики с длительным задним фронтом или симметричные пики. Для устранения этого недостатка пики восстанавливаются по вейвлет-аппроксимации двух моделей, и в качестве результата обработки выбирается пик с меньшей погрешностью в каждом случае.

Чтобы минимизировать погрешность аппроксимации пиков с длительным задним фронтом, в качестве второй модели, на основе би-гауссианы в диссертации автором разработана новая модель хроматографического пика (см. рис. 3) «комбинированная гауссиана»:

$$G(t, \mu, A, \sigma_1, \sigma_2) = \begin{cases} Ae^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma_1^2}}, & t \leq \mu, \\ Ae^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma_2^2}}, & t > \mu, \end{cases} \quad f(t, \mu, A, \sigma, \gamma_1, \gamma_2) = \begin{cases} Ae^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}}, & t \leq \mu, \\ A\gamma_2 e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}} + A(1-\gamma_2) e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\gamma_1^2}}, & t > \mu, \end{cases} \quad (8)$$

где $G(t)$ – модель би-гауссиана;
 $f(t)$ – разработанная модель;
 A – амплитуда пика;
 μ – положение вершины пика на оси времени;
 σ_1 – параметр ширины левой половины би-гауссианы;
 σ_2 – параметр ширины правой половины би-гауссианы;
 σ – параметр ширины компонента 1 на рис. 4;

γ_1 – параметр ширины компонента 3, $0 < \gamma_1 < \infty$;
 γ_2 – соотношение амплитуд компонентов 2 и 3, $0 \leq \gamma_2 \leq 1$.

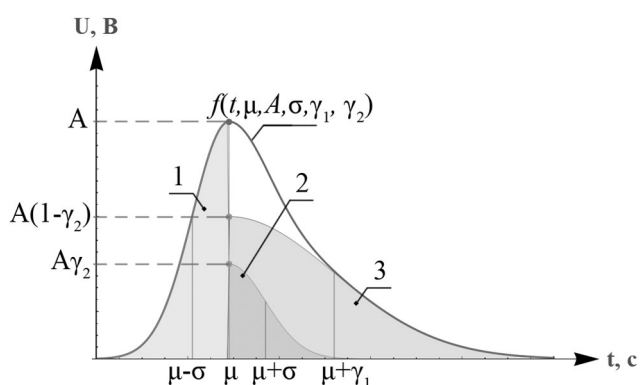


Рисунок 3 – Разработанная модель

При разделении пиков вейвлет-преобразование вычисляется отдельно для каждого пика на участке его локализации. Метод разделения наложенных пиков реализуется по алгоритму, представленному на рис. 4, согласно которому по экстремумам второй производной (5) сигнала определяются границы пиков. По коэффициентам c_n восстанавливается сигнал с пиками $s(t)$. По границам пиков восстанавливаются сигналы $P_i(t)$, содержащие по одному пику. Для этих сигналов по (6) вычисляются вейвлет-преобразования, на основе которых осуществляется вейвлет-аппроксимация по моделям (7) и (8). Ее результатом являются массив параметров модели $T = [A, \mu, \sigma, \gamma_1, \gamma_2]$ и приведенная погрешность аппроксимации определяется выражением:

$$\delta_A = \frac{\int_0^{t_{\max}} |s(t) - \hat{s}_i(t)| dt}{\max_t [s(t)]} \cdot 100\%, \quad (9)$$

где $\hat{s}_i(t)$ – восстановленный на i -й итерации сигнал;

$s(t)$ – исходный сигнал;

t_{\max} – длительность сигнала;

$\max_t [s(t)]$ – максимальное значение $s(t)$ при изменении $0 \leq t \leq t_{\max}$.

В качестве результата вейвлет-аппроксимации принимается пик по модели, имеющей меньшую погрешность (9). Этот пик вычитается из исходного сигнала, формируется разностный сигнал $s'(t)$. Алгоритм заканчивается, если погрешность итерации (9) для каждого пика перестала снижаться.

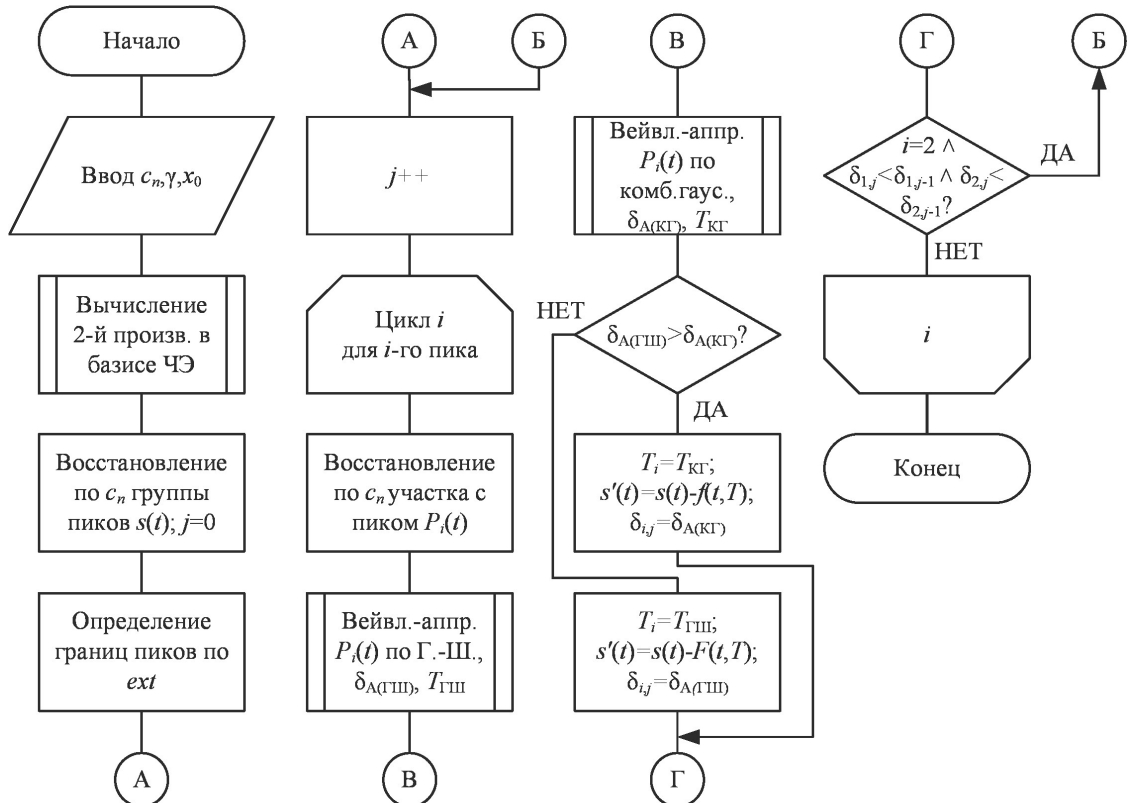


Рисунок 4 – Алгоритм реализации разработанного метода разделения наложенных пиков

Для моделей (7) и (8) положение вершины μ совпадает с максимумом вейвлет-преобразования (6) при $m=2$ и определяется в ходе вейвлет-аппроксимации, а площадь S можно вычислить путем интегрирования модели Грамм-Шарлье:

$$S_{ГШ} = \sqrt{2\pi} A \sigma - dS_{ГШ} (A, \mu, \sigma, \gamma_1, \gamma_2),$$

и комбинированной гауссианы:

$$S_{КГ} = [\tilde{\sigma}(1 + \tilde{\gamma}_2) + \gamma_1(1 - \tilde{\gamma}_2)] \sqrt{\frac{\pi}{2}} \tilde{A},$$

где $dS_{ГШ}$ – площадь фрагмента модели Грамм-Шарлье от начала пика до пересечения с нулем.

Разработанные методы аппроксимации и вейвлет-аппроксимации применяются к сигналу последовательно, в результате чего формируется выходная величина – массив информативных параметров $U = [(S_1, \mu_1), \dots, (S_L, \mu_L)]$, где L – число пиков в сигнале, (S_i, μ_i) – площадь и положение вершины i -го пика. Структура ИИСХА на основе разработанных методов представлена на рис. 5. Она подразделяется на хроматографическую и микропроцессорную части. В первой происходит химическое разделение веществ анализируемой смеси и формирование сигнала,

пропорционального концентрациям каждого вещества смеси. Во второй сигнал из хроматографической части усиливается, преобразуется в цифровую форму и обрабатывается согласно разработанным методам.

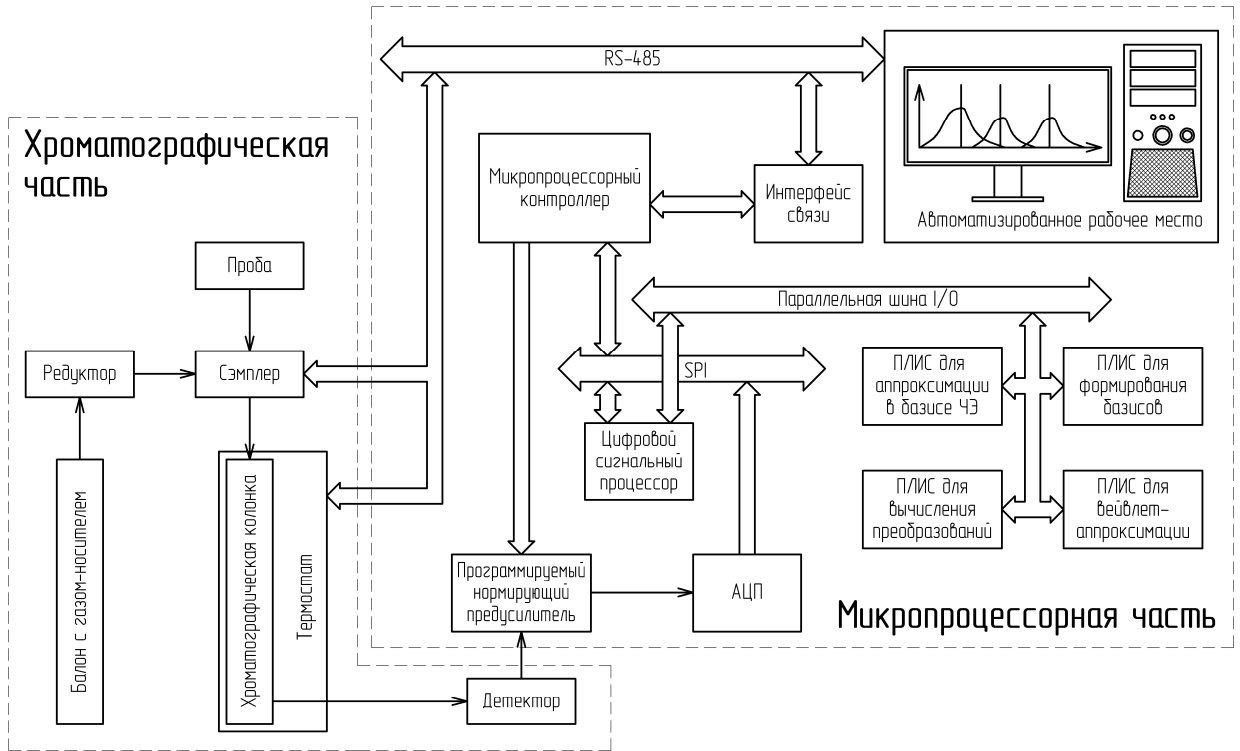


Рисунок 5 – Структурная схема ИИСХА

На рис. 6 представлена функциональная схема микропроцессорной части разработанной ИИСХА. Разработанный метод аппроксимации применяется к сигналу в цифровом сигнальном процессоре. Все трудоемкие вычисления, для ускорения обработки, осуществляются в программируемых интегральных логических схемах (ПЛИС). Процессом анализа и обменом данными с автоматизированным рабочим местом оператора управляет микропроцессорный контроллер.

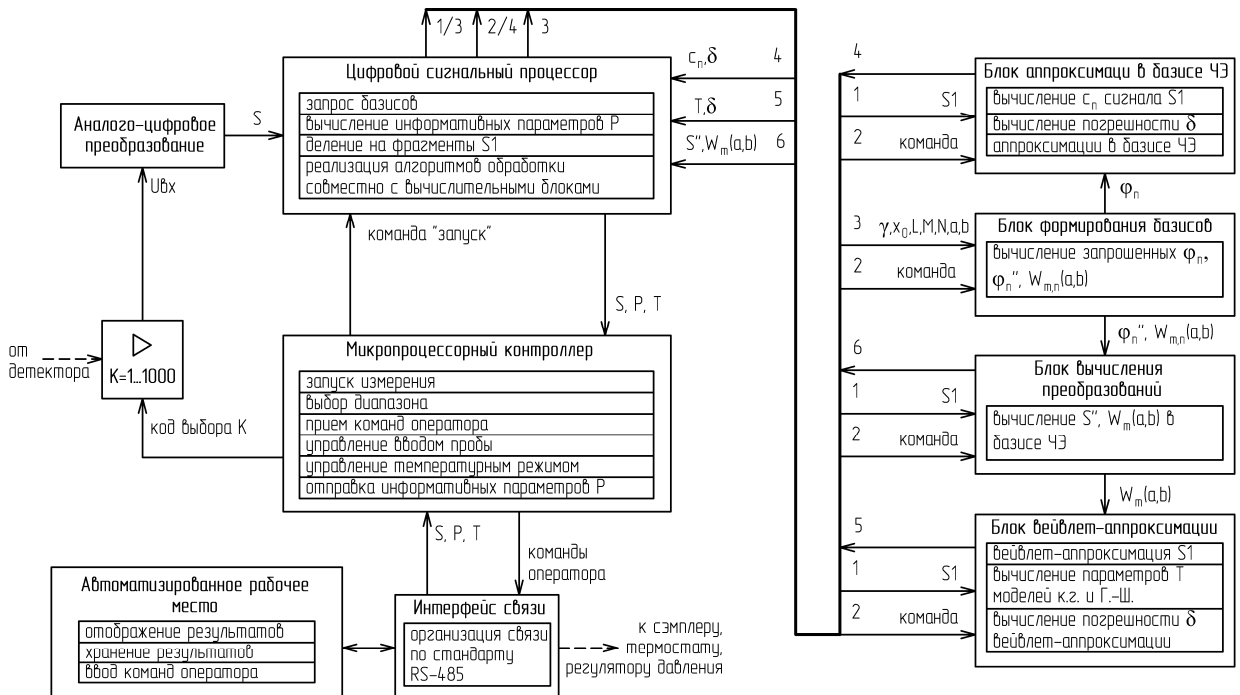


Рисунок 6 – Функциональная схема микропроцессорной части ИИСХА

В четвертой главе производится экспериментальное исследование разработанной ИИСХА. Для оценки источников искажений и погрешностей построена структурная модель измерительного канала ИИСХА (рис. 7). Вычислены с помощью модели и справочных данных абсолютная инструментальная погрешность ИИСХА $\Delta_{\Sigma} = 5,2 \cdot 10^{-5} \text{ В}$ и относительная $\delta_{\Sigma} = 10^{-3}\%$. Для оценки вклада инструментальной погрешности в результаты измерений по методу границ определены выражения для вычисления методической погрешности.

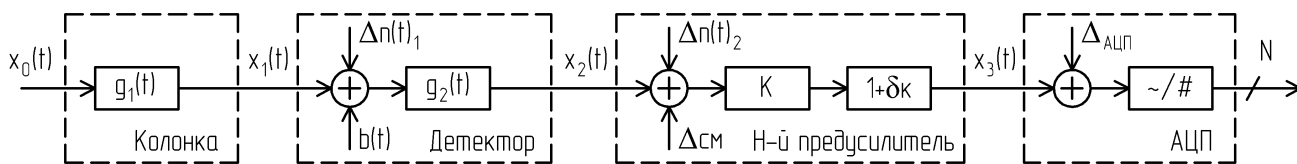


Рисунок 7 – Структурная модель измерительного канала ИИСХА

Для анализа погрешности сглаживания хромотографических сигналов (см. рис. 8) на интервале $0 \leq t \leq t_{\max}$ был задан сигнал по выражению:

$$s^*(t) = s(t) + n(t)$$

где $s(t)$ – заданный моделью (7) сигнал с различной степенью асимметрии γ_1 , $0 \leq \gamma_1 \leq 1,5$;

$n(t)$ – случайная помеха.

Сигнал $s^*(t)$ с различным уровнем отношения сигнал/шум (ОСШ), $12 \leq \text{ОСШ} \leq 32$, сглажен посредством аппроксимации по предложенному в диссертации методу и с помощью наиболее распространенного метода подавления помехи (цифровой фильтр скользящего среднего, далее «фильтр»). Результаты сглаживания оценены погрешностью по выражениям:

$$\delta_{\phi} = \min_M \left(\frac{\hat{s}_M(t) - s(t)}{\max_t(s(t))} 100\% \right),$$

$$\delta_c = \min_N \left(\frac{\bar{s}_N(t) - s(t)}{\max_t(s(t))} 100\% \right),$$

где M – порядок фильтра, $3 \leq M \leq 35$,

N – порядок кодирования (2) при аппроксимации $s'(t)$ (рис. 2), $3 \leq N \leq 35$,

$\max_t[s(t)]$ – максимальное значение $s(t)$ при изменении $0 \leq t \leq t_{\max}$;

$\min_Q[q]$ – минимальное значение q при изменении Q в диапазоне $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$;

$\hat{s}_M(t)$ – сглаженный фильтром $s^*(t)$;

$\bar{s}_N(t)$ – сглаженный разработанным методом $s^*(t)$.

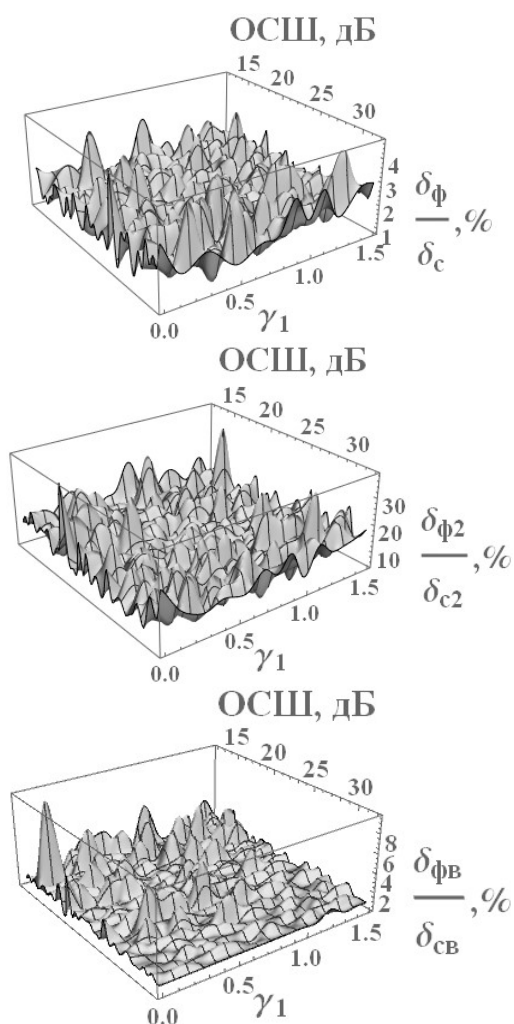


Рисунок 8 – Соотношение погрешностей при сглаживании сигнала

Исследовалась погрешность вычисленной для $s^*(t)$ по предложенному автором методу (5) сглаженной второй производной $s^{(2)}(t)$ в сравнении со сглаженной фильтром второй производной $s^*(t)$:

$$\delta_{\phi 2} = \min_M \left(\frac{\hat{s}_M^{(2)}(t) - s^{(2)}(t)}{\max_t (s^{(2)}(t))} 100\% \right), \quad \delta_{c2} = \min_N \left(\frac{\bar{s}_N^{(2)}(t) - s^{(2)}(t)}{\max_t (s^{(2)}(t))} 100\% \right),$$

где $\hat{s}_M^{(2)}(t)$ – сглаженная фильтром вторая производная $s^*(t)$;

$\bar{s}_N^{(2)}(t)$ – восстановленная по (5) вторая производная $s^*(t)$.

Анализировалась погрешность определения положения вершины μ сигнала $s^*(t)$ по его второй производной:

$$\delta_{\phi 6} = \min_M \left(\frac{\mu_M - \mu}{\mu} 100\% \right), \quad \delta_{c6} = \min_N \left(\frac{\mu_N - \mu}{\mu} 100\% \right),$$

μ_M – положение вершины $\hat{s}_M(t)$;

μ_N – положение вершины $\hat{s}_M(t)$.

Анализ представленных на рис. 8 графиков показывает, что разработанные методы обеспечивают погрешность δ_C в 2-4,7 раза меньше, $\delta_{\phi 2}$ в 9-38 раз меньше и $\delta_{\phi 6}$ в 1,5-9,6 раз меньше, чем у фильтра, традиционно используемого для получения сглаженных хроматографических сигналов.

На рис. 9 а и рис. 9 в представлены 2 из 9 фрагментов хроматограмм, которые были получены в виде массивов дискретных отсчетов с применением ИИСХА при исследовании веществ в испытательных лабораториях ФБУ «ЦСМ-Самарский» и кафедры «Газопереработка и водородные технологии» ФГБОУ ВО «СамГТУ». Фрагменты содержат по одному пику хлороформа, ди-хлорметана, четыреххлористого углерода, хлорметана, этанола, изопропанола, ацетона, метилена, толуола. Пики такой формы наиболее часто встречаются в реальных хроматограммах.

Все сигналы записаны с интервалом дискретизации 36 мс. Анализ полученных фрагментов позволяет сделать вывод об ограничениях разработанных методов. Их можно применять при по асимметрии пиков $\gamma_1 \leq \gamma_{1\max}$, $\gamma_{1\max} = 1,53$.

При оценке погрешности разделения из описанных пиков смоделированы сигналы S с тремя одинаковыми наложенными пиками в каждом (рис. 9 б и рис. 9 в). По каждой группе рассмотрены по два случая при наиболее часто встречаемых на практике разрешениях: $Rs = 1,25$ и $Rs = 0,8$. Разработанный метод разделения наложенных пиков сравнивался по погрешности с применяемыми на практике.

Относительная погрешность площади пиков определена по выражению:

$$\delta_{II} = \frac{|S - \tilde{S}|}{S} \cdot 100\%, \quad (10)$$

где S – определенная по методу трапеций площадь исходного пика;

\tilde{S} – площадь восстановленного пика.

Усредненные значения δ_{II} по всем конфигурациям пика приведены на рисунке 10, а зависимости δ_{II} от значения коэффициента асимметрии γ_1 каждого пика – на рисунке 11.

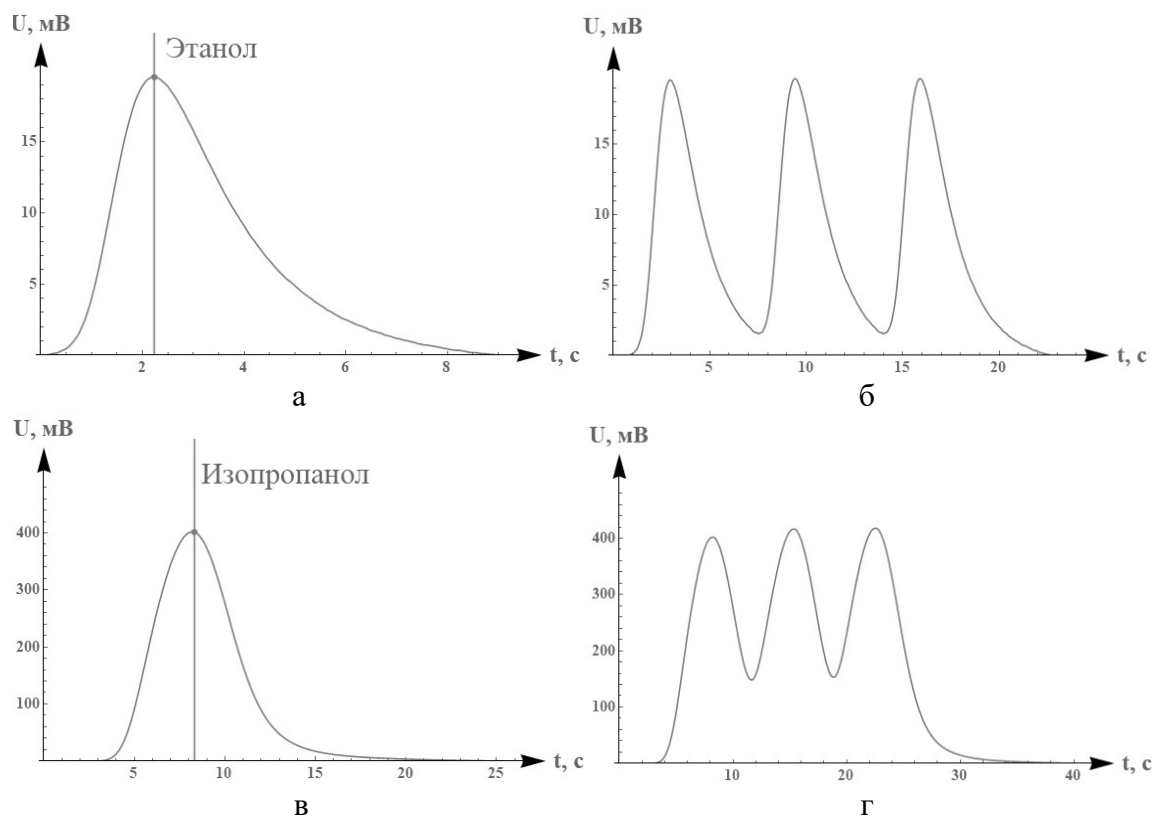


Рисунок 9 – Исследуемые сигналы

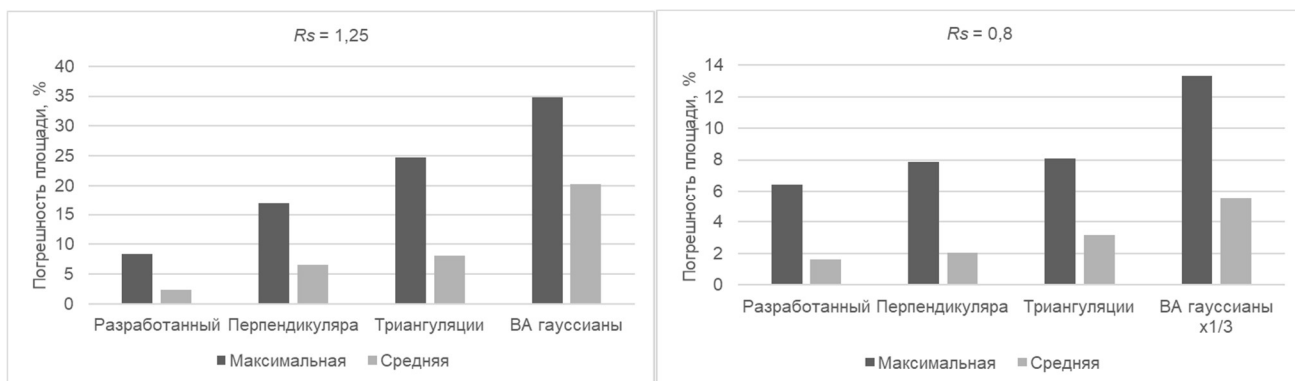


Рисунок 10 – Относительные погрешности площади для всех пиков

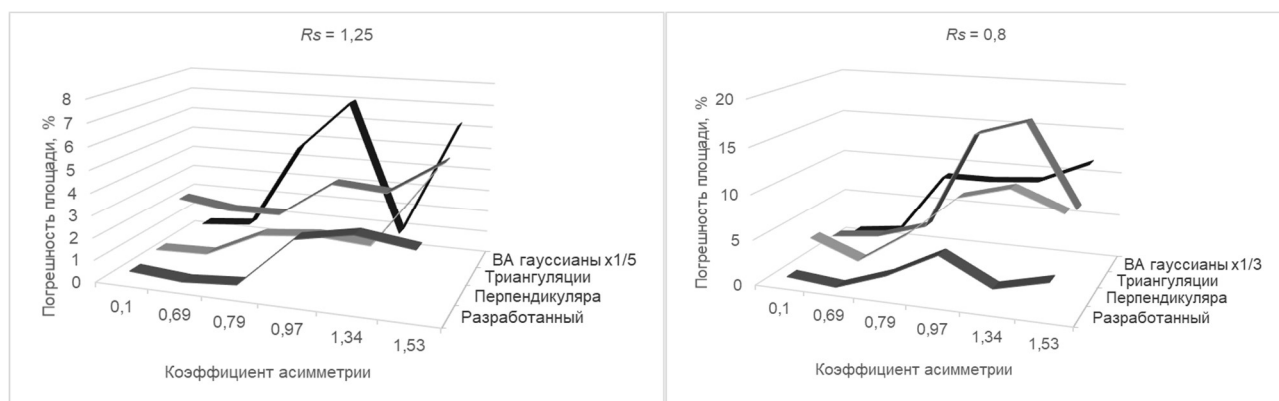
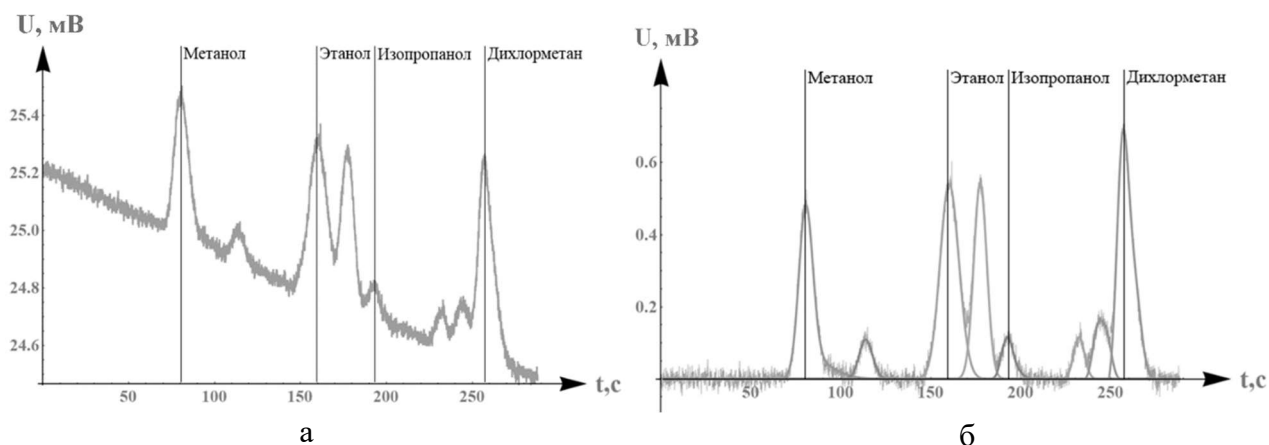


Рисунок 11 – Зависимость относительной погрешности площади пиков от коэффициента их асимметрии

Разработанные методы использованы для анализа хроматограммы (см. рис. 12 а). После применения описанных методов были получены результаты, приведенные в таблице 1, при этом δ_{II} вычислялось по выражению (10), а δ_A по выражению (9).

Аналогичной обработке были подвергнуты пять других хроматограмм с известными веществами в анализируемой смеси, в результате (по всем хроматограммам) в среднем: $\delta_A = 1,19\%$, $\delta_{II} = 0,18\%$; максимальные: $\delta_A = 3,8\%$, $\delta_{II} = 0,67\%$.



а – исходная хроматограмма; б – обработанная хроматограмма
Рисунок 12 – Исследуемая экспериментальная хроматограмма

Таблица 1 - Результаты обработки хроматограммы

№	Модель и ее параметры	Вершина, с	Площадь, В·с	δ_A , %	δ_{II} , %	Наложение
1	КГ ¹ , $A=0,48$, $\mu=80,54$, $\sigma=3,85$, $\gamma_1=12,75$, $\gamma_2=0,874$	80,54	5,35	1,34	0,05	нет
2	КГ, $A=0,11$, $\mu=113,70$, $\sigma=3,59$, $\gamma_1=3,82$, $\gamma_2=0$	113,7	1,01	0,89	0,04	нет
3	КГ, $A=0,54$, $\mu=160,11$, $\sigma=5,39$, $\gamma_1=4,87$, $\gamma_2=-0,5$	160,11	7,07	0,63	0,67	да
4	КГ, $A=0,54$, $\mu=177,39$, $\sigma=3,64$, $\gamma_1=3,64$, $\gamma_2=0$	177,39	4,96	0,47		
5	КГ, $A=0,11$, $\mu=192,44$, $\sigma=2,99$, $\gamma_1=5,16$, $\gamma_2=0,61$	192,44	1,00	0,97		
6	КГ, $A=0,12$, $\mu=232,30$, $\sigma=2,97$, $\gamma_1=4,28$, $\gamma_2=0,99$	232,30	0,87	0,87	0,03	да
7	ГШ ² , $A=0,19$, $\mu=244,91$, $\sigma=3,44$, $\gamma_1=0,14$, $\gamma_2=-1,18$	244,91	1,61	0,72		
8	ГШ, $A=0,69$, $\mu=258,81$, $\sigma=4,13$, $\gamma_1=0,80$, $\gamma_2=-0,79$	258,81	7,08	0,38		

¹ – комбинированная гауссиана, ² – Грамм-Шарлье

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Все поставленные задачи в работе выполнены. Теоретические и прикладные результаты, полученные в диссертационной работе ориентированы на практическое применение в первичной обработке хроматографических сигналов и позволяют достичь снижения погрешности определения площади наложенных хроматографических пиков.

В работе получены следующие основные результаты:

1. На основе аналитического обзора методов и алгоритмов первичной обработки хроматографических сигналов установлено, что наиболее проблемным местом современных информационно-измерительных систем хроматографического анализа являются методы первичной обработки, в особенности разделение и определение площади наложенных асимметричных хроматографических пиков. Обоснована возможность аппроксимации хроматографических сигналов в базисе функций Чебышева-Эрмита для осуществления их первичной обработки.

2. Разработаны базисы перехода от коэффициентов кодирования сигнала в базисе функций Чебышева-Эрмита к сглаженным производным и вейвлет-преобразованию с вейвлетами Гаусса для осуществления первичной обработки сигналов в ИИСХА.

3. Разработана новая модель хроматографического пика «комбинированная гауссиана», применяемая для аппроксимации по вейвлет-преобразованию асимметричных пиков с пологим задним фронтом.

4. Разработан метод разделения наложенных асимметричных хроматографических пиков в сигналах ИИСХА, основанный на вейвлет-аппроксимации с использованием совокупности моделей Грамм-Шарлье и комбинированной гауссианы, с последующим выбором модели с наименьшей погрешностью информативных параметров для каждого пика. Разработанный метод может применяться и для аппроксимации одиночных хроматографических пиков.

5. Представлен алгоритм, структура ИИСХА и ее функциональная схема, которая реализует разработанные методы для определения информативных параметров хроматографических пиков.

Абсолютная и относительная инструментальные погрешности ИИСХА составляют $5,2 \cdot 10^{-5}$ В и $10^{-3}\%$ соответственно. Поскольку измерение площади пика производится косвенно, инструментальная погрешность приводит к возникновению методической погрешности, значением которой можно пренебречь, так как ее вклад в общую погрешность не превышает 2,1%.

6. Проведен метрологический анализ ИИСХА на основе разработанных методов. Погрешность сглаживания при аппроксимации сигналов в выбранном базисе функций Чебышева-Эрмита ниже погрешности традиционно применяемого для сглаживания метода. Применение модели комбинированной гауссианы для аппроксимации одиночного асимметричного хроматографического пика с пологим задним фронтом обеспечивает погрешность определения его площади не более 0,1%. Разработанный в диссертации метод разделения асимметричных наложенных пиков обеспечивает снижение средней относительной погрешности площади пика до 6,2 раз, а максимальной относительной – до 10,5 раз, относительно методов графического интегрирования и существующего метода вейвлет-аппроксимации, применяемых в хроматографии для определения площадей наложенных хроматографических пиков. Средняя относительная погрешность разработанного метода ниже относительной погрешности известного нейросетевого метода в 1,7 раз.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в изданиях из перечня ВАК РФ:

1. **Бочкарев А.В.** Повышение точности количественного хроматографического анализа с помощью новой модели пика / **А.В. Бочкарев** // Автоматизация в промышленности, №7 (2022) – Москва: Издательский дом «ИнфоАвтоматизация», 2022. – с. 36-41.

2. **Бочкарев А.В.** Сглаживание хроматографических сигналов путем их аппроксимации в базисе функций Чебышева-Эрмита / **А.В. Бочкарев**, Р.Т. Сайфуллин // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Технические науки». Том 30. Выпуск №1 – Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2022. – с. 75 -89.

3. Сайфуллин Р.Т. Использование функций Чебышева – Эрмита в обработке сигналов аналитических приборов / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Технические науки». – 2019. – Выпуск №1(61). – с. 68-81.

4. Сайфуллин Р.Т. Вычисление непрерывного вейвлет-преобразования сигналов в базисе функций Чебышева-Эрмита / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Вестник Самарского

государственного технического университета. Серия «Технические науки». – 2019. – Выпуск №2(62). – с. 99-113.

5. Сайфуллин Р.Т. Алгоритм вычисления коэффициентов вейвлет-преобразования сигналов с использованием базиса функций Чебышева-Эрмита / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Технические науки». – 2019. – Выпуск №4(64). – с. 113-124.

6. Сайфуллин Р.Т. Вычисление коэффициентов асимметрии и эксцесса хроматографических пиков с применением функций Чебышева-Эрмита и рядов Грама-Шарлье / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Технические науки». – 2020. – т.28. Выпуск №4. – с. 89-105.

Публикации в журналах, индексируемых в международной наукометрической базе SCOPUS:

7. **Bochkarev A.V.** Resolving of Overlapping Asymmetrical Chromatographic Peaks by Using Wavelet-Transform and Gram-Charlier Peak Model / **A.V. Bochkarev** // Journal of Physics: Conference Series, International Conference on Automatics and Energy (ICAE 2021), 7-8 October 2021, Vladivostok. – Vladivostok, 2021 – vol. 2096. – p. 012068. – doi:10.1088/1742-6596/2096/1/012068

8. **Bochkarev A.V.** Deconvolution of signals of analytical devices in the basis of Chebyshev-Hermite functions / **A.V. Bochkarev** // 2021 International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT), 21-24 September 2021, Samara. – Samara, 2021. – pp. 1-4. – doi: 10.1109/ITNT52450.2021.9649090

9. Sayfullin R.T. Using of a Hierarchical Algorithm Based on Chebyshev-Hermite Functions for Analytical Device Signals Processing / R.T. Sayfullin, **A.V. Bochkarev** // 2019 XXI International Conference Complex Systems: Control and Modeling Problems (CSCMP). – 2019. – pp. 612-615. – doi: 10.1109/CSCMP45713.2019.8976622

Публикации в других изданиях:

10. Сайфуллин Р.Т. Выбор необходимого числа базисных функций в алгоритмах кодирования-декодирования сигналов аналитических приборов / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Информационно-измерительные и управляющие системы: межвуз. сб. науч. статей. – 2019. – Выпуск 1(17). – с. 35-42.

11. Сайфуллин Р.Т. Вычисление преобразования Фурье функций Чебышева-Эрмита с учетом сдвига и масштабирования. / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Информационно-измерительные и управляющие системы: межвуз. сб. науч. статей. – 2019. – Выпуск 1(17). – с. 13-17.

12. Сайфуллин Р.Т. Исследование целесообразности разделения сигналов аналитических приборов на фрагменты при кодировании в базисе функций Чебышева-Эрмита / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Информационно-измерительные и управляющие системы: межвуз. сб. науч. статей. – 2020. – Выпуск 1(18). – с. 169-176.

13. Сайфуллин Р.Т. Алгоритм разделения сигналов аналитических приборов на фрагменты / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Информационно-измерительные и управляющие системы: межвуз. сб. науч. статей. – 2020. – Выпуск 1(18). – с. 161-168.

14. Сайфуллин Р.Т. Алгоритм определения положения границ хроматографических пиков в сигналах аналитических приборов / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // МОЛОДЕЖЬ И НАУКА: ШАГ К УСПЕХУ: сборник научных статей 5-й Всероссийской научной конференции перспективных разработок молодых ученых (22-23 марта 2021 года), в 4-х томах. – 2021. – т.3. – с. 200-204.

15. Сайфуллин Р.Т. Вычисление производных аналитического сигнала в базисе функций Чебышева-Эрмита / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Материалы XI Всероссийской научной конференции с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи», 27-30 мая 2019, Самара. – Самара, 2019. – т.2. – с. 137-139.

16. Сайфуллин Р.Т. Обработка сигналов аналитических приборов в базисе функций Чебышева-Эрмита / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Методы, средства и технологии получения и обработки информации («Шляндинские чтения - 2020»). Материалы XII междунар. науч.-техн.

конф. с элементами науч. шк. и конкурсом науч.-исслед. работ для студентов, аспирантов и молодых ученых 15-18 марта 2020, Пенза. – Пенза, 2020. – с. 43-46.

17. Сайфуллин Р.Т. Рекуррентное представление базиса перехода от коэффициентов разложения по функциям Чебышева-Эрмита к вейвлет-преобразованию / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Международный научно-исследовательский журнал. – 2021. – №1(103). Часть 1. – с. 40-46. – doi: 10.23670/IRJ.2021.103.1.004

18. Сайфуллин Р.Т. Рекуррентный алгоритм перехода от коэффициентов кодирования в базисе функций Чебышева-Эрмита к вейвлет-преобразованию заданного порядка / Р.Т. Сайфуллин, **А.В. Бочкарев** // Информационно-измерительные и управляющие системы: межвуз. сб. науч. статей. – 2021. – Выпуск 1(19). – с. 140-148.

19. **Бочкарев А.В.** Алгоритм коррекции базовой линии в хроматографических сигналах по смене знака второй производной/ **А.В. Бочкарев**, Р.Т. Сайфуллин // Будущее науки-2022: сборник научных статей 10-й Международной научной молодежной научной конференции (21-22 апреля 2022 года), в 4-х томах, Том 3, Юго-Зап. гос. ун-т., Курск: Юго-Зап. гос. ун-т, 2022, – с. 396-399.

20. **Бочкарев А.В.** Аппроксимационный метод коррекции аппаратной функции хроматографических сигналов / **А.В. Бочкарев** // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2022) [Электронный ресурс]: труды Международной научно-технической конференции / под ред. С.А. Прохорова. – Электрон. текстовые и граф. дан. (12,5 Мбайт). – Самара: Издательство Самарского научного центра РАН, 2022. – с. 19-22.

21. **Бочкарев А.В.** Расчетная погрешность площади пиков при аппроксимационной обработке хроматограмм / **А.В. Бочкарев**, Р.Т. Сайфуллин // Будущее науки-2022: сборник научных статей 10-й Международной научной молодежной научной конференции (21-22 апреля 2022 года), в 4-х томах, Том 3, Юго-Зап. гос. ун-т., Курск: Юго-Зап. гос. ун-т, 2022, – с. 391-395.

Формат 60x84 1/16. Уч.изд.л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ №

Отпечатано в типографии Самарского государственного технического университета, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244, корпус 8.

e-mail: polygraph@samgtu.ru.

Автореферат отпечатан с разрешения диссертационного совета 24.2.377.04

(Д 212.217.07) ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет»

(протокол №4 от 21.10.2022 г.)