

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОГО МЕТОДА ОБРАБОТКИ МУЛЬТИПЛЕКСНЫХ ХРОМАТОГРАММ

**Сайфулин М.Ж.**

Самарский государственный технический университет,  
Россия, 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244.  
Тел.: (846) 337-0865., факс: (846) 278-4400,  
E-mail: [ims@samgtu.ru](mailto:ims@samgtu.ru).

Важнейшая проблема хроматографических измерений – повышение качества хроматографической информации до проведения её первичной обработки. Один из путей решения этой проблемы – применение мультиплексной хроматографии. При этом на вход хроматографа подается последовательность проб  $\{x\}$ , причем ввод каждой последующей пробы осуществляется, не дожидаясь выхода хроматограммы от предыдущего ввода пробы. Обработка хроматографических данных связана с вычислением оценок автокорреляционной функции входного сигнала и взаимно – корреляционной функции входного и выходного мультиплицированного сигнала. При дискретном представлении информации алгоритм корреляционной обработки данных эквивалентен методу наименьших квадратов и все результаты регрессионного анализа могут быть использованы при обработке хроматографических данных. Точность оценивания усредненного сигнала определяется ковариационной матрицей оценок.

Выбор входной последовательности ввода проб производится на основе критерия  $D$  – оптимальности. Для многократного ввода проб используется псевдослучайная последовательность Лежандра [1], позволяющая упростить вычисления и анализ точности оценок усредненной хроматограммы. При исследовании различий компонентного состава двух образцов, для определения усредненной дифференциальной хроматограммы, входные последовательности, управляющие вводом проб первого и второго образцов, являются дополнительными: если проба первого образца в данный момент времени не вводится, вводится проба второго образца, и наоборот.

Для подтверждения теоретических результатов получения усредненных хроматограмм проведено имитационное моделирование работы портативного газового хроматографа с автоматическим дозирующим устройством.

Методика проведения имитационного эксперимента заключается в моделировании хроматографического сигнала при однократном и многократном вводе проб с наложенной помехой, генерирование входных последовательностей ввода проб, вычислении усредненной хроматограммы и её сопоставление с заданным сигналом.

## **Литература**

1. Сайфулин М.Ж. Моделирование псевдослучайных последовательностей Лежандра с асимметричным алфавитом / Материалы XII Всероссийской научной конференции с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи». Том 2. – Самара: СамГТУ, 2024. – с. 104-106.