Разделение смеси экспонент методом z-преобразования

И. Мисюченко.

СПб.

18.04.2017

Постановка задачи: Пусть исходно имеем последовательность экспериментальных данных, описываемых моделью:

(1) $X(t_i) = Ae^{-t_i/\tau_1} + Be^{-t_i/\tau_2}$

Причём показатели экспонент достаточно близки, а временной интервал ограничен, так что затруднительно просто прологарифмировать данные и найти две линейные функции-асимптоты, соответствующие двум постоянным времени. Требуется восстановить по экспериментальным данным параметры модели A, B, τ_1 и τ_2.В таком случае, как правило, используют нелинейный метод наименьших квадратов и решают соответствующую систему нелинейных уравнений численно (например, методом Ньютона-Рафсона). Этот метод, во-первых, требует больших вычислительных затрат, а во-вторых, непредсказуемых затрат. Поскольку сходимость метода заранее неизвестна и может на порядки изменяться при изменениях параметров исходного сигнала, то работа в реальном времени по такому методу крайне затруднена.

Требуется: разработать метод, занимающий заранее известное вычислительное время и дающий приемлемый по точности результат.

Общая идея метода: подвергнуть и исходные данные и модель Z-преобразованию. Т.е. перейти в z-пространство. При этом экспоненциальные функции превращаются в полиномиальные дроби и задача нахождения параметров становится линейной задачей.

Решение задачи:

Вначале для удобства переобозначим временн***ы***е постоянные модели. Пусть $a = e^{-1/\tau_1}$ и $b = e^{-1/\tau_2}$. Тогда (1) можно записать в виде:

(2) $X(t_i) = Aa^{t_i} + Bb^{t_i}$

Поскольку мы имеем дело с равномерно дискретизированными данными, то:

(3) $t_i = \Delta t \cdot i$,

Где Δt – период дискретизации. Внеся заранее известный нам период дискретизации Δt в коэффициенты a и b, получим:

(4) $a = e^{-\Delta t/\tau_1}$ и $b = e^{-\Delta t/\tau_2}$.

Тогда (2) примет вид:

(5) $X_i = X(t_i) = Aa^i + Bb^i$

Такой вид максимально удобен для z-преобразования. Выпишем аналитический результат Z-преобразования $Z(z) = \sum_{i=0}^{\infty} X_i z^{-i}$ от (5):

Таблица 15.1

Изображения решетчатых функций

Производящая непрерывная функция		Несмещенная решетчатая функция	z-преобразование	
оригинал	преобразование Лапласа		простое	смещенное
$f(t)=\begin{cases}1 \text{ при } t=0\\ 0 \text{ при } t\neq 0\end{cases}$	—	$\delta_0[n]$	1	0
$\mathbf{1}(t)-\mathbf{1}(t-T)$	$\frac{1-e^{-pT}}{p}$	$-\Delta\mathbf{1}[n]=\nabla\mathbf{1}[n-1]$	1	1
$\mathbf{1}(t)$	$\frac{1}{p}$	$\mathbf{1}[n]$	$\frac{z}{z-1}$	$\frac{z}{z-1}$
t	$\frac{1}{p^2}$	nT	$\frac{Tz}{(z-1)^2}$	$Tz\left[\frac{\varepsilon}{z-1}+\frac{1}{(z-1)^2}\right]$
$\frac{t^2}{2!}$	$\frac{1}{p^3}$	$\frac{(nT)^2}{2!}$	$\frac{T^2z(z+1)}{2!(z-1)^3}$	$\frac{T^2z}{2!}\left[\frac{\varepsilon^2}{z-1}+\frac{2\varepsilon}{(z-1)^2}+\frac{z+1}{(z-1)^3}\right]$
$\frac{t^3}{3!}$	$\frac{1}{p^4}$	$\frac{(nT)^3}{3!}$	$\frac{T^3z(z^2+4z+1)}{3!(z-1)^4}$	$\frac{T^3z}{3!}\left[\frac{\varepsilon^3}{z-1}+\frac{3\varepsilon^2}{(z-1)^2}+\frac{3\varepsilon(z+1)}{(z-1)^3}+\frac{z^2+4z+1}{(z-1)^4}\right]$
$\frac{t^k}{k!}$	$\frac{1}{p^{k+1}}$	$\frac{(nT)^k}{k!}$	$\frac{T^kzR_k(z)}{k!(z-1)^{k+1}}$	$\frac{T^kz}{k!}\sum_{\nu=0}^{k}C_k^{\nu}\frac{R_\nu(z)}{(z-1)^{\nu+1}}\varepsilon^{k-\nu}$
$e^{-\alpha t}$	$\frac{1}{p+\alpha}$	$e^{-\alpha nT}=d^n$	$\frac{z}{z-d}$, $d=e^{-\alpha T}$	$\frac{zd^{\varepsilon}}{z-d}$, $d=e^{-\alpha T}$
$1-e^{-\alpha t}$	$\frac{\alpha}{p(p+\alpha)}$	$1-e^{-\alpha nT}$	$\frac{(1-d)z}{(z-1)(z-d)}$	$\frac{z}{z-1}-\frac{zd^{\varepsilon}}{z-d}$
$te^{-\alpha t}$	$\frac{1}{(p+\alpha)^2}$	$nTe^{-\alpha nT}$	$\frac{zd}{(z-d)^2}$	$\frac{zd^{\varepsilon}\varepsilon}{z-d}+\frac{zd^{\varepsilon+1}}{(z-d)^2}$

(6) $$Z(z)=\frac{Az}{z-a}+\frac{Bz}{z-b}=\frac{Az^2-bAz+Bz^2-Baz}{z^2-az-bz+ab}=\frac{(A+B)z^2-(bA+Ba)z}{z^2-(a+b)z+ab}$$

Если полагать, что размер исходной выборки данных настолько велик, что сумма ограниченного по числу членов N ряда практически равна сумме бесконечного ряда, то аналитическое выражение (6) должно быть достаточно точно равно дискретному численному z-преобразованию ряда экспериментальных данных. В таком случае, решение задачи сводится к решению уравнения:

(7) $$Z=\sum_{i=0}^{\infty}X_iz^{-i}=\frac{(A+B)z^2-(bA+Ba)z}{z^2-(a+b)z+ab}$$

Вообще говоря, z – любое комплексное число, однако для наших функций существуют ограничения на область допустимости z, например, $z>\max(a,b)$. Понятно, что для нахождения 4-х неизвестных коэффициентов требуется система как минимум 4-х уравнений вида (7).

Чтобы из (7) найти параметры (a,A,b,B) надо выбрать как минимум 4 различные значения z и подогнать (a,A,b,B) так, чтобы равенство (7) удовлетворялось бы для всех 4-х значений. Однако, в начальный момент времени нам известна сумма амплитуд экспонент: $(A+B)=X_0$. Это уменьшает нужное число уравнений до трёх. $(A+B)z^2-(bA+Ba)z-Zz^2+Z(a+b)z-Zab=0$, откуда:

(8) $$(A+B-Z)z^2+(Z(a+b)-bA-Ba)z-Zab=0$$

Введём обозначения:

$U=Z/(A+B)$; $\alpha=(bA+Ba)/(A+B)$; $\beta=ab$; $\gamma=a+b$

Тогда из (8) можно записать уравнение:

(9) $$z^2(1-U)-z(\alpha-U\gamma)-\beta U=0$$

Задавшись тремя значениями z_{1-3} и, вычислив для каждого из них результат z-преобразования экспериментальных данных Z_{1-3} (и соответственно U_{1-3}), получим систему уравнений:

$$(10)\begin{cases} z_1^{\,2}(1-U_1)-z_1(\alpha-U_1\gamma)-\beta U_1=0 \\ z_2^{\,2}(1-U_2)-z_2(\alpha-U_2\gamma)-\beta U_2=0 \\ z_3^{\,2}(1-U_3)-z_3(\alpha-U_3\gamma)-\beta U_3=0 \end{cases}$$

Остаётся найти решение этой системы уравнений в виде набора величин (α,β,γ), и затем из них восстановить нужные нам параметры (a,A,b,B).

Справочная информация:

Системы трёх линейных уравнений с тремя неизвестными

Системы трёх линейных уравнений с тремя неизвестными.
Основные методы решения: подстановка, сложение или вычитание.
Определители третьего порядка. Правило Крамера.

Системы трёх линейных уравнений с тремя неизвестными имеют вид:

$$\begin{cases} ax+by+cz=d, \\ ex+fy+gz=h\,, \\ px+qy+rz=s\,, \end{cases} \qquad (1)$$

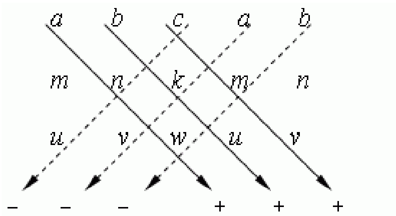
где *a*, *b*, *c*, *d*, *e*, *f*, *g*, *h*, *p*, *q*, *r*, *s* – заданные числа; *x*, *y*, *z* – неизвестные.Числа *a*, *b*, *c*, *e*, *f*, *g*, *p*, *q*, *r* – *коэффициенты при неизвестных*; *d*, *h*, *s* –*свободные члены*. Решение этой системы может быть найдено теми же двумя основными методами, рассмотренными выше: ***подстановки*** и ***сложения или вычитания.*** Мы же рассмотрим здесь подробно только ***метод Крамера.***

Во-первых, введём понятие ***определителя третьего порядка***. Выражение

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ m & n & k \\ u & v & w \end{vmatrix} = anw+bku+mvc-cnu-bmw-akv \qquad (2)$$

называется ***определителем третьего порядка.***

Запоминать это выражение не нужно, так как его легко получить, если переписать таблицу (2), добавив справа первые два столбца. Тогда оно вычисляется путём перемножения чисел, расположенных на диагоналях, идущих от *a*, *b*, *c* – направо (со знаком « + ») и от *c*, *a*, *b* – налево (со знаком « – »), и затем суммированием этих произведений:



(3)

Используя определитель третьего порядка (2), можно получить решениесистемы уравнений (1) в виде:

$$x=\frac{\begin{vmatrix} d & b & c \\ h & f & g \\ s & q & r \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a & b & c \\ e & f & g \\ p & q & r \end{vmatrix}}; \quad y=\frac{\begin{vmatrix} a & d & c \\ e & h & g \\ p & s & r \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a & b & c \\ e & f & g \\ p & q & r \end{vmatrix}}; \quad z=\frac{\begin{vmatrix} a & b & d \\ e & f & h \\ p & q & s \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a & b & c \\ e & f & g \\ p & q & r \end{vmatrix}}. \qquad (4)$$

Эти формулы и есть ***правило Крамера*** *для решения системы трёх линейных уравнений с тремя неизвестными.*

П р и м е р . Решить методом Крамера систему трёх линейных уравнений с тремя неизвестными:

$$\begin{cases} 2x - 3y + z = -1\,, \\ 5x + 2y - z = 0\,, \\ x - y + 2z = 3\,. \end{cases}$$

Р е ш е н и е . Введём следующие обозначения: *D* - знаменатель в формулах (4),

Dx, *Dy*, *Dz* – числители в выражениях для *x*, *y*, *z* –соответственно.

Тогда используя схему (3), получим:

$$D = \begin{vmatrix} 2 & -3 & 1 \\ 5 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{vmatrix} = 2\cdot 2\cdot 2 + (-3)\cdot(-1)\cdot 1 + 1\cdot 5\cdot(-1) - -1\cdot 2\cdot 1 - 2\cdot(-1)\cdot(-1) - (-3)\cdot 5\cdot 2 = 32;$$

$$Dx = \begin{vmatrix} -1 & -3 & 1 \\ 0 & 2 & -1 \\ 3 & -1 & 2 \end{vmatrix} = (-1)\cdot 2\cdot 2 + (-3)\cdot(-1)\cdot 3 + 1\cdot 0\cdot(-1) - -1\cdot 2\cdot 3 - (-1)\cdot(-1)\cdot(-1) - (-3)\cdot 0\cdot 2 = 0;$$

$$Dy = \begin{vmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 5 & 0 & -1 \\ 1 & 3 & 2 \end{vmatrix} = 2\cdot 0\cdot 2 + (-1)\cdot(-1)\cdot 1 + 1\cdot 5\cdot 3 - -1\cdot 0\cdot 1 - 2\cdot(-1)\cdot 3 - (-1)\cdot 5\cdot 2 = 32;$$

$$Dz = \begin{vmatrix} 2 & -3 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & -1 & 3 \end{vmatrix} = 2\cdot 2\cdot 3 + (-3)\cdot 0\cdot 1 + (-1)\cdot 5\cdot(-1) - -(-1)\cdot 2\cdot 1 - 2\cdot 0\cdot(-1) - (-3)\cdot 5\cdot 3 = 64;$$

отсюда по формулам Крамера (4): *x* = *Dx* / *D* = 0 / 32 = 0;
y = *Dy* / *D* = 32 / 32 = 1; *z* = *Dz* / *D* = 64 / 32 = 2 .

Применяем метод Крамера для решения системы (10). Т.е. считаем решения прямо через определители. Для этого можно переписать систему (10) в виде, удобном для решения по формулам Крамера:

$$(11)\begin{cases} z_1(\alpha - U_1\gamma) + \beta U_1 = z_1^{\,2}(1-U_1) \\ z_2(\alpha - U_2\gamma) + \beta U_2 = z_2^{\,2}(1-U_2) \\ z_3(\alpha - U_3\gamma) + \beta U_3 = z_3^{\,2}(1-U_3) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} z_1\alpha + \beta U_1 - z_1U_1\gamma = z_1^{\,2}(1-U_1) \\ z_2\alpha + \beta U_2 - z_2U_2\gamma = z_2^{\,2}(1-U_2) \\ z_3\alpha + \beta U_3 - z_3U_3\gamma = z_3^{\,2}(1-U_3) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a\alpha + b\beta + c\gamma = d \\ e\alpha + f\beta + g\gamma = h \\ p\alpha + q\beta + r\gamma = s \end{cases}$$

Здесь введены обозначения Крамера:

$$(12)\begin{cases} a = z_1, b = U_1, c = -z_1U_1, d = z_1^2(1-U_1) \\ e = z_2, f = U_2, g = -z_2U_2, h = z_2^2(1-U_2) \\ p = z_3, q = U_3, r = -z_3U_3, s = z_3^2(1-U_3) \end{cases}$$

Решение системы получаем по формулам Крамера как:

$$(13)\begin{cases} \alpha = \dfrac{\det\begin{vmatrix} dbc \\ hfg \\ sqr \end{vmatrix}}{\det\begin{vmatrix} abc \\ efg \\ pqr \end{vmatrix}}, \beta = \dfrac{\det\begin{vmatrix} adc \\ ehg \\ psr \end{vmatrix}}{\det\begin{vmatrix} abc \\ efg \\ pqr \end{vmatrix}}, \gamma = \dfrac{\det\begin{vmatrix} abd \\ efh \\ pqs \end{vmatrix}}{\det\begin{vmatrix} abc \\ efg \\ pqr \end{vmatrix}} \end{cases}$$

Затем восстанавливаем из полученного решения искомый набор нужных нам величин (a, A, b, B). Вспомним связь между найденными по формулам Крамера величинами (α, β, γ) и искомыми величинами (a, A, b, B):

$$(14)\ \begin{cases} A+B=X_0 \\ bA+Ba=(A+B)\cdot\alpha=X_0\alpha \\ a+b=\gamma \\ ab=\beta \end{cases}$$

Систему решаем методом последовательной подстановки. Из самого нижнего уравнения имеем:

$b=\beta/a$,

Подставляем во второе снизу уравнение и получаем:

$a+\beta/a=\gamma$

Домножаем обе части на a и получаем квадратное уравнение для нахождения a:

$a^2-\gamma a+\beta=0$

Дискриминант этого уравнения:

$D=\gamma^2-4\beta$

Тогда корни уравнения:

$$(15)\ a_{1,2}=\frac{\gamma\pm\sqrt{\gamma^2-4\beta}}{2}$$

Из корней квадратного уравнения берём только первый корень $a=a_1$, поскольку один Аллах знает, какая экспонента первая, а какая – вторая. Математике это всё равно. Тогда дальнейшее нахождение оставшихся величин тривиально:

$$(16)\ \begin{cases} b=\dfrac{\beta}{a} \\ A=\dfrac{X_0\alpha-X_0a}{b-a} \\ B=X_0-A \end{cases}$$

Теперь вспоминаем, что в (4) мы положили $a=e^{-\Delta t/\tau_1}$ и $b=e^{-\Delta t/\tau_2}$ и вычисляем показатели экспонент:

$$(17)\ \begin{cases} -\Delta t/\tau_1=\ln(a) \\ -\Delta t/\tau_2=\ln(b) \end{cases}$$

А постоянные времени (τ_1,τ_2) через показатели экспонент:

(18) $\tau_1=-\Delta t/\ln(a)$ и $\tau_2=-\Delta t/\ln(b)$.

Делаем теперь всё вышеизложенное в виде программы в Матлабе. Текст программы ниже:

Приложение 1

Исходный текст программе в Matlab R15

```
%Разделение двух экспонент в смеси методом Мисюченко
%Сумма экспонент y=a*exp(b*x)+c*exp(d*x)
%Метод основан на переходе из t-пространства в z-пространство
%В z-пространстве сумма экспонент выглядит как дробно-рациональный полином
%Остаётся найти коэффициенты при степенях в этом полиноме и по ним
%Вычислить параметры исходных экспонент

close all
clear all

%Зададим число экспериментальных точек
N=15;

%Запишем вектор временных отсчётов, в первый момент время нулевое
```

```
x=[0:N-1]';

%Зададим амплитуды и показатели каждой из 2-х экспонент (могут быть
%комплексными!)
a=2+i; b=-0.5+i;
c=1-i; d=-0.57-i; %+0.25;

%Вычислим сумму экспонент - это и есть измеряемый нами сигнал
y=a*exp(b*x)+c*exp(d*x);
%Добавим шум, если надо
%y=y+0.00001*randn(1,N)';
%Запомним времена и сумму экспонент для последующего сравнения с
%аналитическим решением
xx=x;
yy=y;

%Теперь перейдём к методу z-преобразования
K=10;          %Зададим число точек z-преобразования
z=[2:K+1];     %Действительные положительные z
z=-[2:K+1];    %Действительные отрицательные z
z=i*[2:K+1];   %Мнимые положительные z
z=-i*[2:K+1]; %Мнимые отрицательные z

z=(i*[2:K+1]+[2:K+1])/1; %Комплексные z
%Все виды z работают нормально!

%Обнулим массив, выделенный под результаты Z-преобразования
Z=zeros(1,K);
%Произведём численный расчёт Z по ограниченному ряду
for j=1:K,
for i=0:K-1,
    Z(j)=Z(j)+y(i+1)*z(j)^(-i);
end
end
%Запомним в служебные переменные и сами z-точки и результат
%Z-преобразования в этих точках
ZP2=Z(1);
T=Z;
t=z;

%Переобозначим коэффициенты просто для удобства последующих вычислений
A=a;
B=c;
a=exp(b);
b=exp(d);
%Вычислим аналитическое выражение Z-преобразования суммы экспонент
Zz=((A+B)*z.^2-(b*A + B*a)*z)./(z.^2-(a+b)*z+a*b);
%Сравнение численного и аналитического значений Z
%Обратим внимание, что аналитическое и численное значения очень близки
%несмотря на ограниченность ряда (при условии, что z>2)
figure('Units', 'normalized', 'OuterPosition', [0 0 1 1]);
subplot(1,2,1); plot(z,Z); grid on;
hold on; plot(z,Zz,'r'); hold off;
title('Z-преобразование суммы экспонент аналитическое и численное');
xlabel('Значение параметра z');
ylabel('Результат Z-преобразования');
legend('Аналитическое Z-преобразование','Численное Z-преобразование', 4);

%Для того, чтобы восстановить амплитуды и показатели экспонент, приравняем
%аналитическое выражение для z-преобразования суммы двух экспонент
%вычисленным по экспериментальным данным численным z-преобразованиям
%Получим систему уравнений вида:
```

```
%a*x+b*y+c*z=d
%e*x+f*y+g*z=h
%p*x+q*y+r*z=s
%где x,y b z сложные выражения от A, B, a, b - параметров экспонент

%Решение системы уравнений для коэффициентов по методу Крамера
U0=A+B; %Сумма амплитуд экспонент известна из измерений в первый же момент
времени (одну точку использовали, чем сократили число уравнений до трёх)
U=T/(A+B); %Нормируем Z-преобразование на сумму амплитуд
%Осталось найти три неизвестных
%Для этого составим и решим систему уравнений
%Коэффициенты системы 3-х линейных уравнений вычисляем:

%Вначале выберем 3 точки в z-пространстве (есть удачные и неудачные выборы)

k1=2;
k2=5;
k3=8;

%Теперь вычислим коэффициенты системы линейных уравнений, связывающих
%коэффициенты дробно-полиномиальной модели (т.е. аналитический результат
%z-преобразования сумму экспонент) и численные значения z-преобразования в 3
точках.
a=t(k1);
b=U(k1);
c=-U(k1)*t(k1);
e=t(k2);
f=U(k2);
g=-U(k2)*t(k2);
p=t(k3);
q=U(k3);
r=-U(k3)*t(k3);
%Свободные члены системы уравнений
d=t(k1)^2*(1-U(k1));
h=t(k2)^2*(1-U(k2));
s=t(k3)^2*(1-U(k3));
%Определители Крамера и решение системы методом Крамера
D=det([a b c; e f g; p q r]);
x=det([d b c; h f g; s q r])/D; %Альфа
y=det([a d c; e h g; p s r])/D; %Бета
z=det([a b d; e f h; p q s])/D; %Гамма

%Теперь восстановим коэффициенты дробно-рационального полинома и уже по по
ним -
%коэффициенты собственно экспоненциальной модели

U=yy(1); %Сумма амплитуд равна первому отсчёту в экспериментальном ряду
E=x*U;   %bA+Ba
D=z;     %a+b
C=y;     %a*b

%А теперь по коэффициентам z-модели вычислим показатели и амплитуды экспонент
в их сумме

%Для нахождения первого показателя решаем квадратное уравнение
a=(D+sqrt(D*D-4*C))/2; %Нам достаточно одного корня, второй корень -
симметричен, ибо неведомо никому какая из экспонент первая, а какая- вторая
%Показатель при второй экспоненте, соответственно:
b=D-a;

%Теперь вычисляем амплитуды этих экспонент
A=(E-U*a)/(b-a)
```

```
B=U-A
%И показатели в исходном виде, а не в экспоненцированном
a=log(a)
b=log(b)

%Теперь вспоминаем исходные экспериментальные данные
y=yy;
x=xx;

%Ну вот, исходная сумма экспонент и восстановленное по ней решение. Рисуем
%их. Сравниваем.
subplot(1,2,2); plot(x,y); hold on; plot(x, A*exp(a*x)+B*exp(b*x),'r'); grid;
hold off
title('Исходная сумма экспонент и восстановленная программой');
xlabel('Отсчёты сигнала');
ylabel('Величина сигнала (сумма экспонент)');
legend('исходные данные','восстановленные данные', 4);
```

Замечаем экспериментируя с программой, что метод прекрасно восстанавливает (по точным данным!) не только действительные экспоненты, но и мнимые и комплексные, причём даже и с комплексными амплитудами. Небольшого шума в исходных данных достаточно, чтобы всё развалилось. Зато имея точные данные можно восстановить даже крайне близкие (по показателям) экспоненты, причём без итерационных процедур, очень быстро и с гарантией результата.

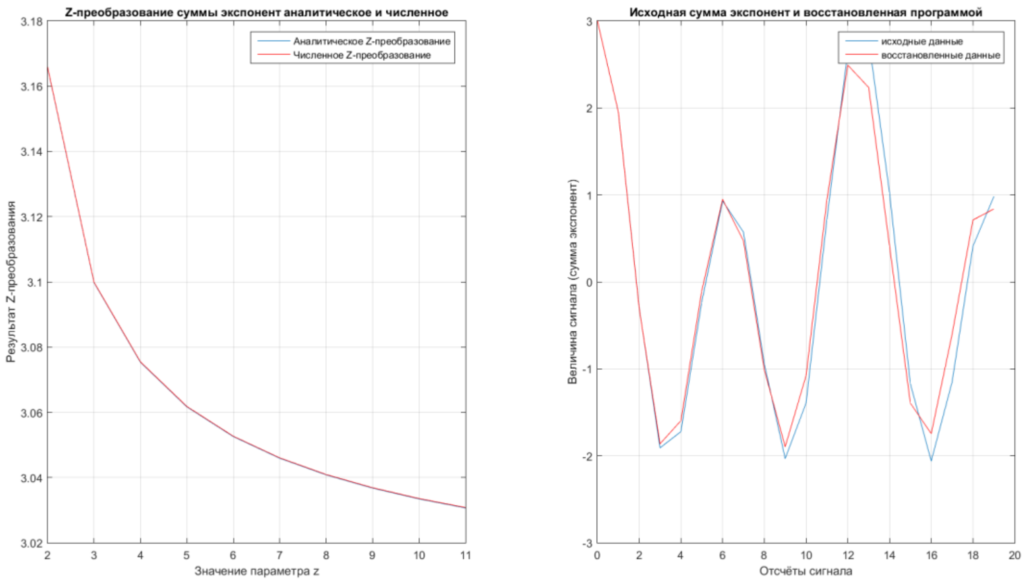


Рис. 1. *Пример работы программы по смеси комплексных экспонент*