

В матричной форме выражение (2) имеет вид

$$\Delta K \mathbf{C} = \Delta \mathbf{Y}, \quad (3)$$

где $\Delta \mathbf{Y}$ – вектор с разностями приведенных сигналов Δy_j ; ΔK – матрица с разностями коэффициентов поглощения Δk_i^j ; \mathbf{C} – вектор искомым концентраций c_i .

Широко распространенным в вычислительной практике способом приближенного решения некорректно поставленных задач является метод подбора решений [8]. Этот метод может быть эффективно использован для решения системы уравнений лазерного оптико-акустического газоанализа в случае, когда вместо точного значения правой части $\Delta \mathbf{Y}$ уравнения (3) известно только ее приближенное значение и (или) матрица коэффициентов поглощения задана неточно.

Для таких задач вводится понятие квазирешения и метод подбора позволяет найти приближение к квазирешению. Метод подбора в этом случае состоит в том, что для элементов \mathbf{C} (в некоторой ограниченной области D , удовлетворяющей физическому смыслу) решается прямая задача (вычисляется оператор $\Delta K \mathbf{C}$) и элемент $\tilde{\mathbf{C}} \in D$, минимизирующий невязку между $\Delta K \tilde{\mathbf{C}}$ и $\Delta \mathbf{Y}$, называется квазирешением уравнения (3), т.е. квазирешение находится по формуле

$$\rho(\Delta K \tilde{\mathbf{C}}, \Delta \mathbf{Y}) = \inf_{\mathbf{C} \in M} \rho(\Delta K \mathbf{C}, \Delta \mathbf{Y}) \quad (4)$$

при условии, что $0 \leq \tilde{c}_i \leq 1$; $\sum_{i=1}^N \tilde{c}_i \leq 1$.

Перспективным вычислительным алгоритмом подбора, позволяющим находить квазирешение уравнения (3), является эволюционно-генетический метод (ЭГМ) [15, 16]. Преимуществом этого поискового алгоритма является возможность эффективного решения сложных оптимизационных задач. Функционал невязки хоть и имеет один экстремум (минимум), однако в случае плохо обусловленных задач принимает «овражный» вид (сильно вытянут вдоль некоего направления), в этом случае применение традиционных алгоритмов поиска минимума становится малоэффективным [17].

В данной статье была реализована модификация алгоритма эволюционно-генетической стратегии, описанного в [6]. Введем необходимую терминологию: хромосома – некоторая реализация вектора неизвестных концентраций, на хромосомы накладываются условия области определения и физического смысла искомого решения. Популяция – набор хромосом.

В качестве целевой (оптимизируемой) функции, вычисляемой для каждой хромосомы, возьмем функционал невязки

$$F(\tilde{\mathbf{C}}) = \rho(\Delta K \tilde{\mathbf{C}}, \Delta \mathbf{Y}).$$

Алгоритм программы поиска квазирешения состоит из следующих этапов:

1. На начальном этапе работы алгоритма случайным образом формируется стартовая популяция предков

из P хромосом, т.е. задается P вариантов векторов начальных концентраций газов: $\mathbf{C}_0^p (c_{01}^p, c_{02}^p, \dots, c_{0i}^p, \dots, c_{0N}^p)$, $p = 1 \dots P$. По заданным концентрациям c_{0i}^p вычисляются по системе уравнений (2) величины Δy_i . Стартовая популяция сортируется по убыванию целевой функции $F(\mathbf{C}_0^p)$ (наименьший индекс p соответствует наименьшему значению целевой функции).

2. На следующем этапе проводится репродукция. На этапе репродукции вместо P начальных векторов концентраций формируется L новых векторов: каждый новый вектор концентрации \mathbf{C}_{1r}^l ($l = 1 \dots L$) образуется из двух случайно выбранных старых \mathbf{C}_0^{p1} , \mathbf{C}_0^{p2} ($p1, p2$ – величины из диапазона $1 \dots P$), причем с большей вероятностью берутся векторы с меньшим значением целевой функции $F(\mathbf{C}_0^p)$. Формирование компонент векторов осуществляется следующим образом:

$$c_{1ri}^l = \begin{cases} c_{0i}^{p1}, & \text{если } s = 0, \\ c_{0i}^{p2}, & \text{если } s = 1, \end{cases}$$

где c_{1ri}^l – значения концентраций после первой репродукции; s – случайная величина, принимающая значения 0, 1.

3. Далее проводится мутация полученных в результате репродукции векторов. На этом этапе изменяются векторы концентраций \mathbf{C}_{1r}^l . Число вариантов векторов концентраций остается L , а сами концентрации изменяются по закону

$$c_{1mi}^l = \begin{cases} c_{1ri}^l, & \text{если } s_1 = 0, \\ c_{1ri}^l + w, & \text{если } s_1 = 1, \end{cases}$$

где c_{1mi}^l – значения концентраций после первой мутации; s_1 – случайная величина, принимающая значения 0, 1; w – случайная величина, распределенная по нормальному закону с математическим ожиданием, равным 0, и дисперсией, равной σ^2 . По полученным концентрациям c_{1i}^m вычисляются по системе уравнений (2) величины Δy_i и новые значения целевой функции $F(\mathbf{C}_{1m}^l)$.

4. Из L вариантов концентраций \mathbf{C}_{1m}^l выбирается P наилучших (с точки зрения малости целевой функции), которые на следующем этапе принимаются за исходные для мутации и репродукции.

5. Далее цикл репродукции и мутации повторяется фиксированное количество раз (поколений) G . Причем в процессе работы цикла значение дисперсии σ^2 случайной величины w изменяется в процессе эволюции в зависимости от частоты уменьшения целевой функции, посчитанной за несколько итераций.

6. По окончании цикла единственный лучший (с точки зрения наименьшего значения целевой функции) вектор концентраций \mathbf{C}_{Gm}^l выбирается за квазирешение.

Для сравнения работы метода ЭГМ с методом регуляризации Тихонова и стандартным методом

решения системы линейных алгебраических уравнений проводились математическое моделирование и обработка экспериментальных данных ЛОАГ. В качестве метода решения системы линейных алгебраических уравнений использовался метод Гаусса с постолбцовым выбором главного элемента [17] (далее в статье он называется «метод прямого решения»). При построении регуляризованного решения для выбора параметра регуляризации использовался метод невязки [13].

Математическое моделирование проводилось по замкнутому циклу: задавался количественный и качественный состав газовой смеси, для которой рассчитывался вектор приведенных сигналов системы уравнений (1), компоненты вектора искажались аддитивным шумом, распределенным по нормальному закону с заданным относительным значением среднеквадратического отклонения. Из полученных смоделированных данных измерения проводилось восстановление концентраций компонент смеси. Измеренные данные были получены ЛОАГ на основе перестраиваемого CO₂-лазера низкого давления и нерезонансной измерительной ячейки, описанным в [10].

На рис. 1 представлены результаты работы алгоритмов при небольшом количестве компонент смеси $N = 3$ (1 – метод прямого решения; 2 – метод поиска квазирешений с использованием ЭГМ с поиском по 1000 поколений; 3 – метод регуляризации).

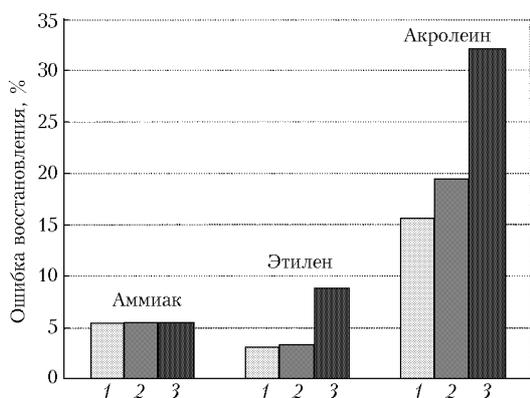


Рис. 1. Ошибки восстановления газов в 3-компонентной смеси аммиак – акролеин – этилен

Смесь была выбрана следующая: аммиак – этилен – акролеин, количественный состав (концентрации компонент): $10^{-3} - 5 \cdot 10^{-3} - 9 \cdot 10^{-4}$ соответственно. Пары спектральных каналов измерения: 10R24 – 10R18, 10P34 – 10P30, 10P6 – 10P4. Данные «измерения» получены математическим моделированием. Число обусловленности матрицы разности коэффициентов поглощения составило 5,3. Относительное среднеквадратическое значение шума во всех каналах измерения – 10%. Восстановление производилось по данным, полученным при усреднении серии из 10 измерений. Моделирование было повторено 10 раз, на основе чего было рассчитано значение средней ошибки по 10 сериям экспериментов.

Из рис. 1 видно, что при малом количестве компонент смеси применение алгоритмов обработки на

основе метода регуляризации малоэффективно (на это указывалось и в [13]). Средняя ошибка восстановления при использовании поиска квазирешений приблизительно одного уровня со средней ошибкой метода прямого решения, а ошибка восстановления методом регуляризации существенно больше.

Рис. 2, 3 иллюстрируют зависимость ошибки восстановления концентраций компонент газовой смеси от качественного состава анализируемой смеси (при неизменном количестве компонент смеси). На рис. 2, 3

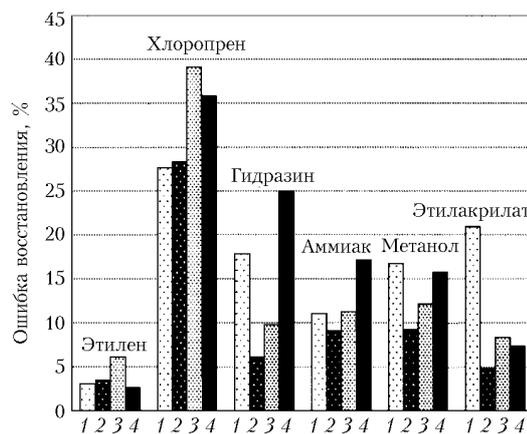


Рис. 2. Ошибки восстановления газов в 6-компонентной смеси этилен – хлоропрен – гидразин – аммиак – метанол – этилакрилат

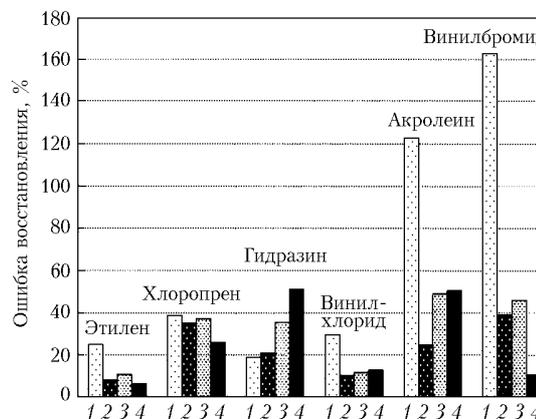


Рис. 3. Ошибки восстановления газов в 6-компонентной смеси этилен – хлоропрен – гидразин – винилхлорид – акролеин – винилбромид

приведены результаты математического моделирования восстановления концентраций газов в двух 6-компонентных смесях (1 – метод прямого решения, 2 – метод поиска квазирешений с ЭГМ – 1000 поколений, 3 – метод поиска квазирешений с ЭГМ – 200 поколений, 4 – метод регуляризации). Относительное среднеквадратическое значение шума 5%, измерения одиночные. Приведена ошибка восстановления, рассчитанная по серии из 10 одиночных измерений.

На рис. 2 представлены результаты восстановления смеси: этилен – хлоропрен – гидразин – аммиак – метанол – этилакрилат количественного состава $5 \cdot 10^{-4} - 9 \cdot 10^{-5} - 4 \cdot 10^{-4} - 10^{-4} - 2 \cdot 10^{-4} - 3 \cdot 10^{-4}$ соответственно. Пары спектральных каналов

измерения: 10R6 – 10R12, 10P14 – 10P10, 10R18 – 10R22, 9P14 – 9P22, 10P22 – 10P18, 9R14 – 9R22.

На рис. 3 представлены результаты восстановления смеси: этилен – хлоропрен – гидразин – винилхлорид – акролеин – винилбромид количественного состава $10^{-4} - 9 \cdot 10^{-5} - 2 \cdot 10^{-4} - 5 \cdot 10^{-4} - 4 \cdot 10^{-4} - 3 \cdot 10^{-4}$ соответственно. Пары спектральных каналов измерения: 10P14 – 10P10, 10P22 – 10P18, 10R18 – 10R22, 10P32 – 10P28, 9P14 – 9P12, 9R20 – 9R12.

Для смеси, представленной на рис. 2, ошибки восстановления концентраций газов не особенно большие и применение специальных алгоритмов восстановления не дает существенного преимущества по сравнению с методом прямого решения. Однако и здесь метод поиска квазирешений с ЭГМ с поиском по 1000 поколений является предпочтительным по сравнению с методами регуляризации и прямого решения.

Для смеси, представленной на рис. 3, две компоненты (акролеин и винилбромид) вообще не удается восстановить методом прямого решения (ошибки больше 100%) и здесь для большинства газов заметно существенное снижение уровня средней ошибки восстановления при применении метода регуляризации и метода поиска квазирешений (ошибки для этих методов одного порядка). Увеличение ошибки восстановления смеси для ЭГМ при уменьшении числа поколений с 1000 до 200 (при этом время вычислений уменьшалось в 5 раз) не очень значительное, что связано с неравномерной скоростью сходимости этого алгоритма. При дальнейшем уменьшении числа поколений средняя ошибка восстановления возрастала катастрофически и на рис. 2, 3 не показана из-за сильной разности величин.

Отметим, что число обусловленности матрицы разности коэффициентов поглощения газовой смеси для рис. 2 равняется 17,8, а для рис. 3 – 1176. Это число является величиной, характеризующей максимально возможный коэффициент передачи ошибки правой части или ошибки задания матрицы левой части в ошибку решения системы линейных уравнений [18]. Таким образом (и это видно из рис. 2, 3), значение числа обусловленности может служить качественным критерием необходимости применения специальных алгоритмов решения уравнений лазерного газоанализа.

На рис. 4 приведены результаты обработки экспериментальных данных ЛОАГ. Проводился анализ 6-компонентной смеси: этилен – углекислый газ – аммиак – метанол – этанол – изопропанол, количественного состава: $1,6 \cdot 10^{-4} - 9,6 \cdot 10^{-2} - 7,3 \cdot 10^{-3} - 8,5 \cdot 10^{-3} - 6,6 \cdot 10^{-3} - 9,2 \cdot 10^{-3}$ (результаты восстановления углекислого газа не показаны, так как он не восстановился во всех случаях). Пары спектральных каналов измерения: 10P14 – 10P20, 9R18 – 9R10, 9R16 – 9R12, 9P34 – 9P32, 9P40 – 9P42, 10R12 – 10R30. Относительное среднеквадратическое значение шума в спектральных каналах измерения при одиночных измерениях составило от 1 до 9%. Восстановление производилось из усредненных (по 10 измерениям) данных. Число обусловленности матрицы разности коэффициентов поглощения – $4,7 \cdot 10^4$. Для моделиро-

вания влияния ошибок в задании коэффициентов поглощения искажалась матрица системы (для длины волны 10R30 были введены неточные значения коэффициентов поглощения изопропанола и углекислого газа). Введенные искажения матрицы коэффициентов поглощения были небольшие:

$$\frac{\|\Delta K_{ERR}\|_M}{\|\Delta K\|_M} = 0,34\%,$$

где $\|\bullet\|_M$ – матричная норма; ΔK – матрица разностей коэффициентов поглощения; ΔK_{ERR} – матрица ошибок задания разностей коэффициентов поглощения.

Число обусловленности искаженной матрицы составило $2,4 \cdot 10^5$.

На рис. 4 показаны ошибки восстановления с использованием искаженной (1 – метод прямого решения, 2 – метод поиска квазирешений с ЭГМ по 1000 поколений, 3 – метод регуляризации) и действительной матриц коэффициентов поглощения газов (4 – метод прямого решения, 5 – поиска квазирешений с ЭГМ по 1000 поколений, 6 – метод регуляризации).

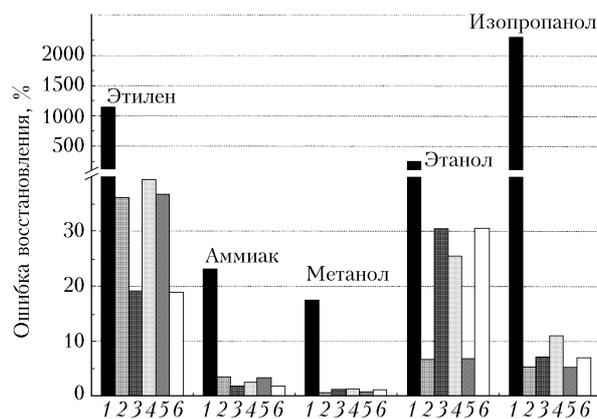


Рис. 4. Ошибки восстановления газов в 6-компонентной смеси этилен – углекислый газ – аммиак – метанол – этанол – изопропанол

Из рис. 4 видно, что для искаженной матрицы метод прямого решения приводит для большинства газов к очень большим ошибкам – сотням и тысячам процентов (восстановленные концентрации могут не только на несколько порядков отличаться от действительных, но и принимать физически бессмысленные значения), в то же время как для действительной матрицы коэффициентов поглощения газов ошибки восстановления не особенно велики (хотя могут достигать 40%).

Интересно отметить, что уровень ошибок восстановления методом поиска квазирешений и методом регуляризации практически не зависит от ошибок в задании матрицы коэффициентов поглощения газов – оба метода позволяют восстанавливать концентрации газовых компонент с приемлемой точностью (ошибки для обоих методов одного порядка).

Таким образом, результаты математического моделирования и обработки данных измерений показывают, что метод поиска квазирешений (использующий

эволюционно-генетический алгоритм подбора решений) позволяет эффективно решать задачу восстановления концентрации газов при лазерном оптико-акустическом газоанализе как для малокомпонентных, так и для многокомпонентных газовых смесей. Этот метод не требует обязательной дополнительной информации об уровне шума в измерительных каналах.

К недостатку метода поиска квазирешений можно отнести относительно большое (по сравнению с методом регуляризации) время счета. Однако при использовании современной вычислительной техники этот недостаток становится незаметным. Кроме того, при использовании ЭГМ имеется возможность в определенных пределах регулировать с помощью числа поколений время вычисления. Для повышения быстродействия ЭГМ возможны распараллеливание данного алгоритма и использование многопроцессорных систем [15, 16].

В заключение отметим еще одно существенное достоинство метода поиска квазирешений – он позволяет находить решение не только системы линейных алгебраических уравнений (1), но и более общей (без условий малости спектральной ширины линии излучения лазерного источника по сравнению с шириной линий поглощения газов) системы интегральных уравнений лазерного газоанализа.

1. Антатов А.Б., Капитанов В.А., Пономарев Ю.Н., Сапожников В.А. Оптико-акустический метод в лазерной спектроскопии молекулярных газов. Новосибирск: Наука, 1984. 128 с.
2. Жаров В.П., Летохов В.С. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия. М.: Наука, 1984. 320 с.
3. Лазерная аналитическая спектроскопия / В.С. Антонов, Г.И. Беков, М.А. Большов, В.П. Жаров, В.С. Летохов, Ю.А. Курицын, Р.И. Персонов, А.Н. Шибанов. М.: Наука, 1986. 320 с.
4. Пономарев Ю.Н. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия атмосферы // Оптика атмосфер. и океана. 1995. Т. 8. № 1–2. С. 224–241.
5. Зуев В.Е., Макушкин Ю.С., Пономарев Ю.Н. Спектроскопия атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1987. 247 с.
6. Катаев М.Ю., Мицель А.А. Идентификация состава га-

зовой смеси по спектрам поглощения // Автотметрия. 1985. № 4. С. 15–20.

7. Катаев М.Ю., Мицель А.А., Тарасова С.Р. Выбор информативных спектральных участков для решения задач газоанализа с помощью ОАД // Оптика атмосфер. и океана. 1990. Т. 3. № 8. С. 832–841.
8. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.
9. Макушкин Ю.С., Мицель А.А., Хмельницкий Г.С. Лазерная абсорбционная диагностика атмосферных газов // Ж. прикл. спектроскопии. 1981. Т. 35. Вып. 5. С. 785–790.
10. Козинцев В.И. Лазерный оптико-акустический газоанализатор для контроля состава многокомпонентных газовых смесей // Оптика атмосфер. и океана. 1996. Т. 9. № 8. С. 1087–1091.
11. Козинцев В.И. Об обработке сигналов лазерного оптико-акустического газоанализатора при анализе многокомпонентных газовых смесей // Оптика атмосфер. и океана. 1996. Т. 9. № 10. С. 1373–1378.
12. Авдченко В.В., Белов М.Л., Городничев В.А., Козинцев В.И., Добрица Д.Б. Мониторинг многокомпонентных газовых смесей с помощью лазерного оптико-акустического полигазоанализатора // Ж. прикл. спектроскопии. 1996. Т. 63. № 5. С. 755–759.
13. Белов М.Л., Городничев В.А., Козинцев В.И., Добрица Д.Б. Сравнительный анализ методов восстановления концентраций газов в многокомпонентных смесях из данных измерений лазерного оптико-акустического газоанализатора // Оптика атмосфер. и океана. 2000. Т. 13. № 2. С. 146–150.
14. Зигрист М., Катаев М.Ю., Мицель А.А., Пономарев Ю.Н., Тонн А. Исследование погрешностей лазерного оптико-акустического газоанализатора // Оптика атмосфер. и океана. 1994. Т. 7. № 11–12. С. 1471–1477.
15. Schoeneburg E., Heinmann F., Feddersen S. Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien: Eine Einfuehrung in Theorie und Praxis der simulierten Evolution. Bonn; Paris; Reading; Mass. [u.a.]: Addison-Wesley, 1994. 321 p.
16. Курейчик В.М. Генетические алгоритмы. Таганрог: Изд-во ТРТУ, 1998. 117 с.
17. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченкова Н.В. Вычислительные методы для инженеров. М.: Высшая школа, 1994. 544 с.
18. Вержбицкий В.М. Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения. М.: Высшая школа, 2000. 266 с.

M.L. Belov, V.A. Gorodnichev, V.I. Kozintsev, Yu.V. Fedotov. Technique for search of quasisolutions in multicomponent laser photoacoustic gas-analysis.

The paper describes the problem of gas reconstruction in laser photoacoustic gas-analysis. Signal processing procedures based on search of quasisolutions for incorrect mathematical problems are described for the differential absorption method. The results of mathematical modeling and processing of experimental data are presented. Using of the quasisolution search based on neural network algorithms was shown to efficiently solve the problem of gas reconstruction for both low- and multicomponent gas mixtures.