

М.Ю. Катаев, А.А. Мицель

ОБНАРУЖЕНИЕ ГАЗОВ С ПОМОЩЬЮ ОА-ГАЗОАНАЛИЗАТОРА

Приводятся два алгоритма обнаружения газов для оптико-акустического газоанализатора. Первый основан на байесовском критерии, минимизирующем средний риск, второй — на критерии Неймана-Пирсона. Приведены результаты обработки сигналов ОА-газоанализатора на CO₂-лазере. Результаты показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

Постановка задачи

Для интерпретации данных, полученных оптическими газоанализаторами, необходима разработка соответствующих математических алгоритмов. В зависимости от поставленной задачи алгоритмы могут быть ориентированы как на количественный анализ газовой смеси (задача измерения), так и на качественный, когда по измеренным оптическим характеристикам исследуемого объема газовой смеси необходимо дать ответ о наличии или отсутствии того или иного газа в смеси, либо отклонении его концентрации от некоторого заданного уровня (задача обнаружения). Задача обнаружения тесно связана с точностными характеристиками измерительной аппаратуры, а также со степенью перекрытия линий (полос) поглощения исследуемого газа с другими газами. Если отношение сигнал-шум мало, а влияние интерферирующих газов велико, то относительные погрешности полученных из оптических измерений оценок концентраций газов могут достигать ста и более процентов. В этом случае предпочтительнее проводить не количественный анализ газовой смеси, а определять вероятности появления или отсутствия газов в смеси.

В данной статье рассматриваются алгоритмы обработки для решения задачи обнаружения газов с помощью ОА-газоанализаторов. Для этой цели предложено использовать два критерия обнаружения — байесовский, основанный на минимизации среднего риска, и критерий Неймана-Пирсона. Приводятся результаты обработки сигналов ОА-газоанализатора на CO₂-лазере.

Рассмотрим газовую смесь, в которой исследуемым является только один компонент. Остальные газы в этой смеси будем считать посторонними. При использовании квазимонохроматического источника излучения связь измеряемого сигнала с концентрацией ρ исследуемого газа задается соотношением [1]:

$$\bar{y} = y_0 \eta [K\rho + \beta], \quad (1)$$

где \bar{y} — среднее значение измеренного ОА-сигнала; y_0 — мощность излучения на входе в ячейку ОАД; η — чувствительность ОАД; K — коэффициент поглощения на единицу концентрации газа; β — объемный коэффициент поглощения, определяемый поглощением другими газами смеси и неселективным поглощением стенками и окнами ОА-ячейки β_Φ .

Задача обнаружения сводится к проверке статистической гипотезы H_1 о том, что по измеренному параметру y принимается решение о принадлежности ρ к классу состояний X_1 против альтернативы H_2 , состоящей в том, что информационный параметр ρ принадлежит к классу X_2 [2].

Пусть классы состояний X_1 и X_2 задаются условными плотностями вероятностей $\tilde{P}(y|H_i) = \tilde{P}(y|\rho \in X_i)$, усредненными по мешающим параметрам y_0 , π и β .

Бейесовское решающее правило, минимизирующее средний риск, имеет вид [2]

$$l(y) \geq \Lambda, \rightarrow \rho \in \begin{cases} X_2 \\ X_1 \end{cases}, \quad (2)$$

с порогом λ , равным:

$$\Lambda = \ln \left[\frac{q(\Pi_{12} - \Pi_{11})}{p(\Pi_{21} - \Pi_{22})} \right], \quad (3)$$

где $l(y)$ — логарифм отношения правдоподобия,

$$l(y) = \ln \left[\frac{\tilde{P}(y|H_2)}{\tilde{P}(y|H_1)} \right], \quad (4)$$

q и $p = 1 - q$ — априорные вероятности того, что независимый параметр ρ принадлежит дополняющим друг друга интервалам X_1 и X_2 соответственно; Π_{ij} — элементы матрицы потерь.

Качество решающего правила определяется средним риском R [2]:

$$R = q\Pi_{11} + p\Pi_{21} + q(\Pi_{12} - \Pi_{11})\varepsilon_1 - p(\Pi_{21} - \Pi_{22})(1 - \varepsilon_2). \quad (5)$$

Правило обнаружения Неймана-Пирсона имеет такой же вид (2), при этом порог обнаружения λ определяется из условия:

$$\varepsilon_1 = \int_{\lambda}^{\infty} \tilde{P}(l|H_1) dl = \varepsilon_0, \quad (6)$$

при фиксированном значении ε_0 [2].

Вероятность правильного обнаружения для этого правила рассчитывается по формуле:

$$P = 1 - \varepsilon_2 = 1 - \int_{-\infty}^{\lambda} \tilde{P}(l|\rho \in X_2) dl, \quad (7)$$

где $P(l|\rho \in X_i) = P(l|H_i)$ — условные плотности вероятностей случайной величины l .

Расчет характеристик обнаружения λ , R , P

Для вычисления логарифма отношения правдоподобия $l(y)$, ошибок первого и второго рода ε_1 и ε_2 зададим вид распределений $P(y|H_i)$, $P(\eta)$, $P(\beta)$, $P(y_0)$: 1) $P(y|H_i)$ — нормальные в обеих гипотезах с параметрами $(M_{y_i}, \sigma_{y_i}^2)$, при этом $\sigma_{y_1} = \sigma_{y_2} = \sigma_y$; 2) $P(y_0)$ — нормальное $(M_0, \sigma_{y_0}^2)$; 3) $P(\eta)$, $P(\beta)$ — δ -функции. Тогда при выполнении условия $M_0 / \sqrt{2}\sigma_{y_0} \geq 3$ и предположения о независимости σ_y от ρ усредненные по параметрам y_0 , η , β условные плотности вероятностей $\tilde{P}(y|H_i)$ будут нормальными с параметрами (M_i, σ_i^2) , равными

$$\begin{aligned} M_1 &= M_0\eta(K\rho_1 + \beta); \quad \sigma_1 = \sqrt{\sigma_y^2 + \sigma_{y_0}^2\eta(K\rho_1 + \beta)^2}; \\ M_2 &= M_0\eta(K\rho_2 + \beta); \quad \sigma_2 = \sqrt{\sigma_y^2 + \sigma_{y_0}^2\eta(K\rho_2 + \beta)^2}, \end{aligned} \quad (8)$$

где ρ_1, ρ_2 — значения концентраций газов, соответствующие гипотезам H_1 и H_2 .

Элементы матрицы потерь и априорные вероятности примем равными: $\Pi_{11} = \Pi_{22} = 0$; $\Pi_{12} = \Pi_{21} = 1$; $p = q = 0,5$.

Для нормальных распределений $\tilde{P}(y|H_i)$ и принятых значений q, p, Π_{ij} можно получить следующие соотношения для вычисления порога λ , ошибок $\varepsilon_1, \varepsilon_2$, риска R и вероятности правильного обнаружения P .

А) Бейсовский критерий обнаружения

$$\lambda^B = 0, \quad (9)$$

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} [1 - \Phi(g_1^B)], \quad (10)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{2} [1 - \Phi(g_2^B)], \quad (11)$$

$$R = \frac{1}{2} [\varepsilon_1 + \varepsilon_2], \quad (12)$$

где

$$\Phi(g) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^g e^{-t^2} dt.$$

$$g_1^B = \frac{(-1)^{n+1} (V|\Lambda^B + d| - |\tilde{M}_1|)}{\sqrt{2}\tilde{\sigma}_1},$$

$$g_2^B = \frac{(-1)^{n+1} (|\tilde{M}_2| - V|\Lambda^B + d|)}{\sqrt{2}\tilde{\sigma}_2}. \quad (13)$$

В зависимости от соотношения между ρ_1 и ρ_2 параметр n принимает следующие значения:

а) $\rho_2 > \rho_1$, $n = 1$; б) $\rho_2 < \rho_1$, $n = 2$.

В формуле (13) параметры \tilde{M}_i , $\tilde{\sigma}_i^2$, d , $i = 1, 2$ связаны с параметрами M_i , σ_i^2 выражениями:

$$\tilde{M}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{M_2 - M_1}{V|\sigma_2^2 - \sigma_1^2|} \frac{\sigma_1}{\sigma_2}; \quad \tilde{M}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{M_2 - M_1}{V|\sigma_2^2 - \sigma_1^2|} \frac{\sigma_2}{\sigma_1}, \quad (14)$$

$$\tilde{\sigma}_1^2 = \frac{|\sigma_2^2 - \sigma_1^2|}{2\sigma_2^2}; \quad \tilde{\sigma}_2^2 = \frac{|\sigma_2^2 - \sigma_1^2|}{2\sigma_1^2}, \quad (15)$$

$$d = \frac{(M_2 - M_1)^2}{2(\sigma_2^2 - \sigma_1^2)} + \ln \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \quad (16)$$

Формулы (10)–(13) справедливы при выполнении следующих условий:

а) $\frac{M_0^2}{12\sigma_0^2} \geq \frac{|M_1|}{\sqrt{2}\sigma_1} \geq 3$; $\frac{|M_2|}{\sqrt{2}\sigma_2} \geq 3$; для $\sigma_2 > \sigma_1$,

б) $\frac{M_0^2}{12\sigma_0^2} \geq \frac{|M_2|}{\sqrt{2}\sigma_1} \geq 3$; $\frac{|M_1|}{\sqrt{2}\sigma_2} \geq 3$; для $\sigma_2 < \sigma_1$.

Б) Критерий Неймана–Пирсона

$$\Lambda^{N-P} = -d + (-1)^{n+1} [|\tilde{M}_1| + (-1)^{n+1} \sqrt{2} \Phi^{-1}(1 - 2\varepsilon_0)]^2, \quad (17)$$

а) $\rho_2 > \rho_1$, $n = 1$; б) $\rho_2 < \rho_1$, $n = 2$.

Вероятность правильного обнаружения для обоих случаев вычисляется по формуле

$$P = 1 - \varepsilon_2^{N-P} = \frac{1}{2} [1 + \Phi(g_2^{N-P})], \quad (18)$$

где g_2^{N-P} определяется выражением (13) для g_2^B , в котором Λ^B следует заменить на Λ^{N-P} .

Результаты обработки ОА-сигналов

Апробация предложенных алгоритмов обнаружения проводилась на экспериментальных данных, полученных Мейером и Зигристом [3]. Авторы [3] разработали лазерную оптико-акустическую систему на основе CO_2 -лазера для мониторинга газовых загрязнений атмосферы. Регистрация сигналов осуществлялась с помощью резонансной ОА-ячейки.

Приведем результаты обработки ОА-сигналов, возбуждаемых излучением CO_2 -лазера на двух переходах: 10Р (14), $\nu_L = 949,479$ и 10Р (20), $\nu_L = 944,194 \text{ см}^{-1}$. Первый переход используется для обнаружения этилена, второй – для углекислого газа. При обнаружении C_2H_4 посторонними газами будут H_2O и CO_2 , влиянием других газов можно пренебречь. Связь измеряемого сигнала с концентрацией этилена дается формулой (1). Коэффициент β для ОА-системы [3] имеет вид

$$\beta = -\left(\frac{\nu_{N_2}}{\nu_L} - 1\right) K_{\text{CO}_2} \rho_{\text{CO}_2}^{\text{ф}} + K_{\text{H}_2\text{O}} \rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ф}} + \alpha_K(\rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ф}}) + \beta_{\text{ф}}, \quad (19)$$

где ν_{N_2} – частота первой колебательной моды N_2 , равная 2330 см^{-1} ; ν_L – частота лазерного излучения; K_i , $\rho_i^{\text{ф}}$ – селективные коэффициенты поглощения и концентрации посторонних газов (CO_2 и H_2O); $\alpha_K(\rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ф}})$ – коэффициент континуального поглощения H_2O , рассчитываемый по эмпирической формуле [4]; $\beta_{\text{ф}}$ – коэффициент поглощения фонового сигнала.

При обнаружении CO_2 посторонними газами будут C_2H_4 и H_2O . Для этого случая измеряемый сигнал ОА-системы [3] связан с концентрацией CO_2 соотношением

$$\bar{y} = y_0 \eta \left[- \left(\frac{\nu_{N_2}}{\nu_{\lambda}} - 1 \right) K_{\text{CO}_2} \rho_{\text{CO}_2} + \beta \right], \quad (20)$$

где β определяется (19), в котором вместо первого слагаемого будет $K_{\text{C}_2\text{H}_4} \rho_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\phi}$.

Формулы для параметров M_i , σ_i , $i = 1, 2$, полученные для связи (20), будут отличаться от (8) тем, что вместо $K\rho_i$ появляется слагаемое $-(\nu_{N_2}/\nu_{\lambda} - 1)K \cdot \rho_i$. Поэтому в зависимости от величины ρ_1 и ρ_2 для CO_2 даже при $\rho_2 > \rho_1$ соотношение между σ_1 и σ_2 может быть различным, а именно могут наблюдаться ситуации: а) $\sigma_2 > \sigma_1$; б) $\sigma_2 < \sigma_1$; в) $\sigma_2 = \sigma_1$. Для первых двух ситуаций (а) и (б) формулы для вычисления характеристик обнаружения Λ , R , P нами уже получены (см. (9)–(17)). Для ситуации (в), когда $\sigma_2 = \sigma_1$, отличия будут только для выражений g_1^B , g_2^B и Λ^{N-P} . Приведем формулы для расчета g_i^B , $i = 1, 2$ и Λ^{N-P} в случае $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$

$$g_1^B = \frac{E + \Lambda^B}{2\sqrt{E}}; \quad g_2^B = \frac{E - \Lambda^B}{2\sqrt{E}}; \quad (21)$$

$$\Lambda^{N-P} = 2\sqrt{E}\Phi^{-1}(1 - 2\epsilon_0) - E,$$

где

$$E = \frac{(M_2 - M_1)^2}{2\sigma^2}. \quad (22)$$

При обработке сигналов использовались следующие параметры ОА-системы: $\eta/M_0 = 3,5 \text{ В} \cdot \text{см}/\text{Вт}$; $M_0 = 1 \text{ Вт}$; $\sigma_{y_0} = 0,05M_0$; $\sigma_y = 0,05\mu\text{В}$; $\beta_{\phi} = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}^{-1}$ [3].

Таблица 1

Коэффициенты поглощения в $\text{атм}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$

Частота перехода, см^{-1}	$K_{\text{H}_2\text{O}}$	K_{CO_2} [3]	$K_{\text{C}_2\text{H}_4}$ [3]
949,479	$2,443 \cdot 10^{-6}$	$3,20 \cdot 10^{-3}$	32,7
944,194	$2,322 \cdot 10^{-6}$	$4,00 \cdot 10^{-3}$	1,64

В табл. 1 приведены коэффициенты поглощения $K_{\text{H}_2\text{O}}$, K_{CO_2} и $K_{\text{C}_2\text{H}_4}$. Коэффициенты $K_{\text{H}_2\text{O}}$ рассчитаны нами по данным атласа [5]; коэффициенты K_{CO_2} и $K_{\text{C}_2\text{H}_4}$ заимствованы из работы [3]. Фоновые концентрации газов ρ^{ϕ} составляют следующие значения: $\rho_{\text{CO}_2}^{\phi} = 330 \text{ ppmV}$ [6], $\rho_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\phi} = 2 \cdot 10^{-2} \text{ ppmV}$ [3]. Фоновое значение $\rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\phi}$ взято из региональной модели [7], включающей географический район проведения эксперимента (Швейцария) авторами [3] для зимних условий: $\rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\phi} = 5,08 \text{ г}/\text{м}^3$, значение температуры для этой модели составляет 2°C . При проверке гипотез относительно этилена значения концентраций в гипотезах H_1 и H_2 , брались равными: $\rho_1 = 5 \text{ ppbV}$, $\rho_2 = 20 \text{ ppbV}$; для CO_2 — $\rho_1 = 330 \text{ ppmV}$, $\rho_2 = 360 \text{ ppmV}$.

Результаты обработки ОА-сигналов представлены в табл. 2, 3. Измерения [3] проводились 4.02.86 г. в течение дня вблизи автомагистрали.

Из табл. 2 следует, что только ранним утром и в вечернее время содержание этилена соответствует гипотезе H_1 . В остальное время суток оба алгоритма указывают на гипотезу H_2 . Это обстоятельство объясняется увеличением интенсивности движения автотранспорта в дневное время. Величина риска $R < 10^{-5}$, т.е. близка к нулю, а P равна единице с точностью до 10^{-4} . Столь малое значение R указывает на то, что классификация состояний X_1 и X_2 , соответствующая концентрациям $\rho_1 = 5 \text{ ppbV}$ и $\rho_2 = 20 \text{ ppbV}$, производится достаточно надежно. В последней строке табл. 2 приведены результаты измерения авторами [3] содержания этилена, которые в целом подтверждают работоспособность алгоритмов обнаружения. Из табл. 3 видно, что в течение всего дня содержание CO_2 соответствует гипотезе H_1 , $\rho_1 = 330 \text{ ppmV}$, величина риска при этом составляет 11%, а вероятность правильного обнаружения для критерия Неймана — Пирсона — 80%.

Таблица 2

Результаты обработки ЩФ-сигналов по обнаружению C_2H_4
 $H_1: \rho_1 = 5 \text{ ppbV}; H_2: \rho_2 = 20 \text{ ppbV}$

Номер гипотезы	Время суток, час																
	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
	ОА-сигнал [3] $\mu V/W$																
	-1,50	0,75	2,25	0,25	-0,75	-0,25	-0,25	-0,30	0,50	1,50	1,60	3,40	4,00	1,75	-0,20	-2,00	-2,00
$H_i^B, i = 1, 2$																	
$R=0,0$	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1
$H_i^{N-P}, i = 1, 2$																	
$\epsilon_0=0,05$	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1
$P=1,0$																	
Концентрация [3]	11	30	45	27	18	22	23	21	29	37	38	55	60	40	23	7	8
$\rho_{C_2H_4}, \text{ ppbV}$																	

Таблица 3

Результаты обработки ЩФ-сигналов по обнаружению CO_2
 $H_1: \rho_1 = 300 \text{ ppmV}; H_2: \rho_2 = 360 \text{ ppmV}$

Номер гипотезы	Время суток, час																
	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
	ОА-сигнал [3] $\mu V/W$																
	-3,10	-3,40	-3,3	-3,75	-3,50	-3,20	-3,50	-3,30	-3,50	-3,70	-3,50	-3,40	-3,50	-3,30	-3,30	-3,20	-3,30
$H_i^B, i = 1, 2$																	
$R=0,108$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$H_i^{N-P**}, i = 1, 2$																	
$\epsilon_0=0,05$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$P=0,799$																	

* Бейесовский критерий.

** Критерий Неймана — Пирсона.

Таким образом, результаты обработки ОА-сигналов позволяют сделать два вывода. Во-первых, сравнение с измеренными концентрациями C_2H_4 показывает, что оба алгоритма обнаружения могут успешно применяться при решении задач газоанализа с помощью ОАД. Во-вторых, оба алгоритма указывают на справедливость одной и той же гипотезы H_1 и H_2 , поэтому в дальнейшем можно использовать один из указанных алгоритмов.

В заключение авторы выражают благодарность Зигристу за любезно предоставленные материалы отчета [3], а также Ю.Н. Пономареву за обсуждение результатов работы.

1. Катаев М.Ю., Мицель А.А., Тарасова С.Р. // Оптика атмосферы. 1990. Т. 3. № 8. С. 832–840.
2. Левин Б.Р. Теоретические основы статистической радиотехники. Кн. 2. М.: Сов. радио, 1975. 392 с.
3. Meyer P.L., Sigrist M.W. Air-pollution monitoring with a mobile CO_2 -laser photoacoustic system. Final Report SNF/NEP 14. Project № 4.684.0.83.14. CH-8093. Zurich. Switzerland. 1988.
4. Арфьев В.Н. // Квантовая электроника. 1985. Т. 12. № 3. С. 631–634.
5. Chedin A., Husson N., Scott N.A. et al. The GEISA data bank 1984 version // Laboratoire de Meteorologie Dynamique du C. N. R. S. 1986.
6. Anderson G.P., Clough S.A., Kneezys F.X. et al. Atmospheric Consistent Profiles (0–120 km). AFGL-TR-86-0110. Hanscom AFB. MA01731. 1986.
7. Статистические характеристики полей температуры и влажности в атмосфере северного полушария: Справочник. Ч. IV. Локальные модели. Под ред. В.Г. Комарова. М.: Гидрометеоиздат, 1981. 87 с.

М. Ю. Катаев, А. А. Мицель. Detection of Gases with the Help of an Optoacoustic Gas Analyzer.

The two algorithms of detection of gases using an optoacoustic gas analyzer are presented. The first one is based on the use of Baye's criterion of minimization of the average risk and the second one is based on the use of Neumann-Pearson. criterion. The results of processing of actual signals of the CO₂-laser OA gas analyzer are presented. The results have shown good efficiency of the algorithms.