

М.Ю. Катаев

## Методические основы обработки данных лазерного трассового газоанализа

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 15.07.2001 г.

Рассмотрены основные методические вопросы, связанные с восстановлением газового состава атмосферы из данных лазерного трассового газоанализа методом дифференциального поглощения. Определены основные факторы, влияющие на точность восстановления концентрации газов, например неточность знания коэффициентов поглощения и аэрозольного ослабления, модели континуального поглощения и др. Рассмотрен вопрос выбора оптимальных спектральных каналов зондирования и решения задачи обнаружения газов. Показаны способы учета конечной ширины линии излучения лазера и влияние ее на точность восстановления концентраций газов. Приведено описание программных продуктов, которые позволяют решать задачи моделирования и обработки данных измерений трассовых газоанализаторов различных типов.

### Введение

Для контроля газового состава атмосферы оптическими абсорбционными газоанализаторами необходимо иметь высокочувствительные к поглощению приборы, обладающие способностью измерять концентрации газов в большом динамическом диапазоне в многокомпонентных смесях. Одним из таких приборов является трассовый газоанализатор с различными видами лазерных источников излучения ( $\text{CO}_2$ , СО, ПГС и др.). Для анализа содержания исследуемых газов на трассе используется излучение, проходящее в атмосфере путь от лазерного источника до отражателя (зеркало или топографическая мишень) и обратно. Задача определения концентраций газов из измеренных сигналов в общем случае сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Точность решения возникающей системы уравнений зависит как от учета случайных погрешностей эксперимента, так и многочисленных систематических факторов (аэрозоль, поглощение газами смеси и др.). В настоящей статье рассмотрены основные этапы, необходимые при обработке данных лазерного трассового газоанализатора.

### 1. Метод дифференциального поглощения

Суть метода дифференциального поглощения [1–8] заключается в посылке лазерного излучения на двух длинах волн, одна из которых попадает в линию поглощения исследуемого газа ( $\lambda_{\text{on}}$ ), а вторая вне ее ( $\lambda_{\text{off}}$ ), где поглощение исследуемым газом мало (рис. 1). Измеряемые сигналы для выбранных длин волн описываются выражением

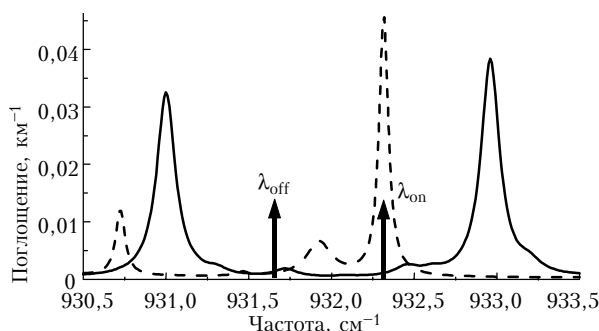


Рис. 1. Выбор длин волн зондирования в методе дифференциального поглощения  $\lambda_{\text{on}}$ ,  $\lambda_{\text{off}}$  исследуемого газа (спектр поглощения указан пунктиром) на фоне мешающего поглощения (сплошная линия)

$$I(\lambda_i) = I_0(\lambda_i) S_{\text{app}}(\lambda_i) \eta(\lambda_i) \times \exp \{-2LK_0(\lambda_i) x_0 - 2L\alpha_{\Sigma}(\lambda_i)\}, \quad (1)$$

$$i = \text{on, off},$$

где  $L$  — длина трассы зондирования от источника излучения до отражателя;  $S_{\text{app}}$  — аппаратная константа;  $I_0$  — излучение лазерного источника на выбранном переходе лазера;  $K_0$ ,  $x_0$  — коэффициент поглощения и концентрация исследуемого газа;  $\alpha_{\Sigma}(\lambda)$  — суммарное ослабление мешающими факторами:

$$\alpha_{\Sigma}(\lambda) = \alpha_a(\lambda) + \alpha_k(\lambda) + \alpha_g(\lambda). \quad (2)$$

В (2)  $\alpha_a(\lambda)$  — ослабление за счет аэрозоля;  $\alpha_k(\lambda)$  — ослабление за счет континуального поглощения водяным паром;  $\alpha_g(\lambda) = \sum_{j=1}^{N_g} K_j(\lambda)x_j$  — поглощение мешающими газами и  $N_g$  — число мешающих газов;  $\alpha_0(\lambda_i) = K_0(\lambda)x_0$  — объемный коэффициент поглощения исследуемым газом;  $S_{\text{app}} = q$  — при работе по зеркаль-

ному отражателю и  $S_{\text{app}} = \rho/\pi$  – при использовании в качестве отражателя тополишени (здание, деревья и др.);  $q$  – коэффициент эффективности приемной антенны;  $\rho$  – коэффициент отражения.

Константа калибровки  $\eta(\lambda)$  определяется пропусканьем передающей  $q_t$ , приемной  $q_r$  оптики и чувствительностью приемника  $\chi$ :

$$\eta(\lambda) = q_t(\lambda) q_r(\lambda) \chi (1 - q_l),$$

где  $q_l$  – прочие потери в приемопередающем тракте.

Средняя по трассе концентрация искомого газа в методе дифференциального поглощения определяется из выражения

$$x = \frac{1}{2\Delta KL} \ln \left[ C \frac{I(\lambda_{\text{off}}) I_0(\lambda_{\text{on}})}{I(\lambda_{\text{on}}) I_0(\lambda_{\text{off}})} \right] - \frac{\Delta\alpha_{\Sigma}(\lambda)}{2\Delta K}, \quad (3)$$

где  $\Delta\alpha_{\Sigma} = \alpha_{\Sigma}^{\text{on}} - \alpha_{\Sigma}^{\text{off}}$ ;  $\Delta K = K_0^{\text{on}} - K_0^{\text{off}}$ .

Погрешность определения концентрации газа можно найти из выражения [2]:

$$\sigma_x = \frac{1}{2L\Delta K} \left\{ \sum_{i=1}^2 \left[ \left( \frac{\sigma_i}{I_i} \right)^2 + \left( \frac{\sigma_{0i}}{I_{0i}} \right)^2 \right] + \left( \frac{\sigma_C}{C} \right)^2 \right\}^{1/2}, \quad (4)$$

$i = \{1 - \text{on}, 2 - \text{off}\},$

где  $\sigma_i$ ,  $\sigma_{0i}$ ,  $\sigma_C$  – погрешности измеренных сигналов на длинах волн  $\lambda_{\text{on}}$ ,  $\lambda_{\text{off}}$  и определения константы калибровки  $C = \eta(\lambda_{\text{off}}) S_{\text{app}}(\lambda_{\text{off}}) / [\eta(\lambda_{\text{on}}) S_{\text{app}}(\lambda_{\text{on}})]$ .

## 2. Многоволновый трассовый метод

В многоволновом трассовом методе дифференциального поглощения связь измеряемых сигналов с концентрацией искомого газа  $x_j$  определяется выражением

$$\tilde{y}_i = f[I(\lambda_i)] = \sum_{j=1}^{N_g} K_{ij} x_j, \quad i = 1, \dots, N_{\lambda}, \quad (5)$$

где  $\tilde{y}_i = \tilde{y}(\lambda_i)$  – объемный коэффициент ослабления, получаемый из измеренных сигналов ( $\tilde{y}_i = y_i + \varepsilon_i$ ,  $\varepsilon$  – погрешность измерений);  $f(\cdot)$  – некоторая функция от измеряемых сигналов:

$$f_i = \frac{1}{2L} \left\{ \ln \left[ C_i \frac{I(\lambda_i)}{I_0(\lambda_i)} \right] \right\} - z_i; \quad (6)$$

$K_{ij} = K_j(\lambda_i)$  – коэффициент поглощения  $j$ -го газа на  $i$ -й длине волны;  $N_g$ ,  $N_{\lambda}$  – число газов в смеси и число длин волн зондирования;  $z_i$  – неселективная составляющая поглощения, которая обусловлена аэрозольным ослаблением излучения, континуальным поглощением водяного пара и поглощением мешающих газов смеси.

Из решения системы уравнений (5), при  $N_g = N_{\lambda} = N$ , концентрации искомого газа определяются

$$\mathbf{x} = K^{-1} \tilde{\mathbf{y}}, \quad (7)$$

где  $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_{N_g}\}$  – вектор искоемых концентраций газов;  $K$  – матрица коэффициентов поглощения газов; величина  $\tilde{y}$  определяется выражением (6).

Погрешность определения концентраций газов по выражению (7) находится [9]:

$$\sigma_x^2(j) = \sum_{i=1}^{N_{\lambda}} K_{ij}^{-2} \sigma_y^2(i),$$

$$\sigma_y^2(\lambda_i) = \frac{1}{NL} \sqrt{\left( \frac{\sigma_{0i}}{I_{0i}} \right)^2 (1 + e^{2\bar{\alpha}(\lambda_i)}) + \left( \frac{\sigma_{C_i}}{C_i} \right)^2},$$

где  $\sigma_y(i)$  – погрешность величины  $\tilde{y}$  на длине волны  $\lambda_i$ ;  $\bar{\alpha}$  – среднее по  $N$  реализациям значение измеренного коэффициента ослабления.

При использовании большого числа длин волн зондирования, чем число определяемых газов  $N_g < N_{\lambda}$ , концентрации газов определяют методом наименьших квадратов (МНК) по одной из формул:

$$\mathbf{x} = (K^T K)^{-1} K^T \tilde{\mathbf{y}} \quad \text{или} \quad \mathbf{x} = (K^T W K)^{-1} K^T W \tilde{\mathbf{y}}. \quad (8)$$

Здесь  $W$  – весовые коэффициенты ( $W = 1/\sigma_y^2$ );  $T$  – операция транспонирования. Погрешности восстановления концентраций газов определяются выражениями:

$$\sigma_x^2 = [(K^T K)^{-1}]_{ii} \sigma_y^{-2}, \quad \text{или} \quad \sigma_x^2 = [(K^T W K)^{-1}]_{ii} \sigma_y^{-2},$$

$$\sigma_y^2 = \frac{1}{N_{\lambda}} \sum_{j=1}^{N_{\lambda}} \sigma_{yj}^2.$$

Системы уравнений (7), (8) являются некорректными. Трудность решения некорректных задач заключается в том, что малые погрешности измерений могут приводить к большим погрешностям в решении. Один из способов решения подобной задачи известен как метод А.Н. Тихонова (МРТ) [10]. В этом случае решение относительно вектора искоемых концентраций газов записывается в виде

$$\mathbf{x} = (K^T K + \gamma I)^{-1} K^T \tilde{\mathbf{y}},$$

или

$$\mathbf{x} = (K^T W K + \gamma G)^{-1} K^T W \tilde{\mathbf{y}}, \quad (9)$$

где  $\gamma$  – параметр регуляризации;  $E$  – единичная матрица;  $G$  – матрица-стабилизатор.

Однако в случае сильного искажения шумом данных измерений или слабого поглощения исследуемого газа ни МНК (8), ни МРТ (9) не гарантируют приемлемого решения, соответствующего физическим представлениям (решение должно быть положительным). В этом случае применяются методы линейного (МЛП)

$$C\mathbf{x} \rightarrow \min; \quad K\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{y}}; \quad x > 0; \quad C = \sum_i K_i$$

или нелинейного программирования (МНП), которые позволяют получать решение при наличии физических определенных ограничений (известный диапазон изменения концентрации исследуемого газа):

$$\{x^T K^T WKx - 2x^T K^T Wy\} \rightarrow \min$$

при ограничениях  $x_1 \leq x \leq x_2$ ;  $x \geq 0$ .

Результаты моделирования обратной задачи восстановления концентраций газов из данных зондирования многоволновым трассовым методом шести газов ( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $O_3$ ,  $NH_3$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_6H_6$ ) с помощью  $CO_2$ -лазера в области 9–11 мкм приведены на рис. 2, где

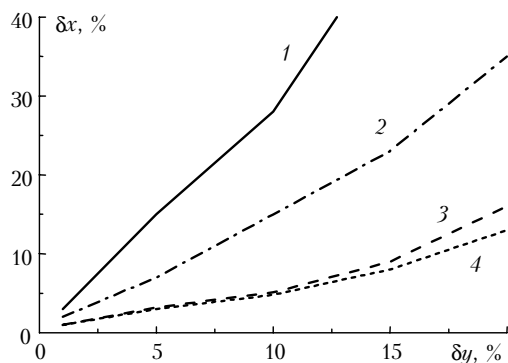


Рис. 2. Сравнение суммарной погрешности по всем измеряемым газам для рассматриваемых методов решения обратной задачи (кривая 1 – МНК, 2 – МЛП, 3 – МНП, 4 – МРТ)

указаны суммарные погрешности восстановления концентраций газов  $\delta x$  методами МНК, МЛП, МНП и МРТ в зависимости от погрешности измерений  $\delta y$ . Видно, что наблюдается существенная зависимость точности восстановления концентраций газов от погрешности измерений для МНК. Наименьшая погрешность восстановления наблюдается для МНП и МРТ. На наш взгляд, более удобным для применения на практике является МНП, так как по точности восстановления он не уступает МРТ вплоть до 15% погрешности измерений и нет необходимости вычислять параметр регуляризации (это важно при автоматизации измерений: не требуется вмешательства оператора в процесс обработки). Однако при погрешностях выше 15% более правильным будет применять МРТ.

### 3. Точность решения обратной задачи

Важным этапом, предворяющим измерения, является поиск оптимальных спектральных каналов. Так, например, при очень близком расположении длин волн зондирования  $\lambda_{on}$ ,  $\lambda_{off}$  нивелируются все

мешающие факторы, но при этом может быть малой величина  $\Delta K$ , что приводит к малой концентрационной чувствительности. С другой стороны, увеличение расстояния между  $\lambda_{on}$  и  $\lambda_{off}$  приводит к росту чувствительности, но при этом увеличивается и  $\Delta\alpha_{\Sigma}$ , что снижает эффективность.

На этапе предварительной обработки сигналов ошибки измерений определяются выбранным методом отбраковки, накопления и калибровки. Ошибки измерений являются случайными. К систематическим ошибкам можно отнести неточное знание состава смеси, спектрального хода коэффициента аэрозольного ослабления, температуры атмосферы и др. [11–14]. Влияние температурного фактора может быть уменьшено измерением температуры в ходе проведения эксперимента. Состав атмосферы на момент проведения измерений может быть получен в ходе независимых измерений или из модельных представлений.

Точность решения обратной задачи определяется также и погрешностью задания коэффициентов поглощения исследуемого и мешающих газов. В табл. 1 приведены рассчитанные коэффициенты поглощения на основе атласа спектроскопической информации HITRAN-92 и коэффициенты, взятые из различных литературных источников. Видно, что рассчитанные и измеренные коэффициенты в большинстве случаев значительно разнятся. Это может привести к тому, что концентрация газа будет отличаться в зависимости от того, какой коэффициент поглощения мы возьмем. Относительная погрешность восстановления концентрации газа, обусловленная погрешностью задания матрицы системы и погрешностью измерений, находится из выражения [15]:

$$\delta_x \leq \frac{\text{cond}(K)}{1 - \delta_K} \{\delta_K + \delta_y\}, \quad \delta_K < 1,$$

где  $\text{cond}(K)$  – число обусловленности матрицы системы;  $\delta_K$ ,  $\delta_y$  – относительные погрешности задания матрицы системы и измерений. Число обусловленности тем больше, чем слабее выражена селективная структура эталонных спектров поглощения и чем больше число газов в смеси.

Отсюда можно сделать вывод, что вопрос выбора коэффициентов поглощения необходимо тщательно прорабатывать до начала проведения эксперимента.

Рассмотрим, к каким погрешностям в решении обратной задачи может привести незнание модели

Таблица 1

Сравнение рассчитанных и измеренных коэффициентов поглощения,  $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$

Переход	Частота $CO_2$ -лазера	$H_2O$		$CO_2$		$O_3$	
		Расчет	[16]	Расчет	[17]	Расчет	[18]
9P24	1043,163	0,124e-5	0,820e-4	0,311e-2	0,270e-2	0,621e-0	0,830e-0
9P14	1052,196	0,149e-5	0,930e-4	0,332e-2	0,320e-2	0,119e+2	0,124e+2
9R30	1084,635	0,301e-3	0,130e-3	0,235e-2	0,170e-2	0,832e-1	0,173e-0
10P20	944,194	0,189e-5	0,910e-4	0,251e-2	0,220e-2	0,765e-3	0,270e-3
10P14	949,479	0,134e-5	0,850e-4	0,235e-2	0,180e-2	0,173e-2	0,290e-2
10R20	975,930	0,742e-3	0,800e-3	0,270e-2	0,210e-2	0,106e-0	0,148e-0

континуального поглощения газов. В табл. 2 приведены рассчитанные коэффициенты континуального поглощения водяного пара в зависимости от его содержания

Таблица 2

Коэффициенты континуального поглощения водяного пара,  $\text{км}^{-1}$  ( $\lambda = 10,591$  мкм,  $T = 293$  К,  $P = 1$  атм)

$\rho_{\text{H}_2\text{O}}, \text{г}/\text{м}^3$	[20]	[21]	[22]	[23]
1	5,05e-3	4,20e-3	3,91e-3	1,70e-3
5	4,65e-2	3,99e-2	3,48e-2	2,71e-2
10	1,46e-1	1,27e-1	1,07e-1	9,80e-1
15	2,99e-1	2,62e-1	2,18e-1	2,19e-1

для различных моделей [19]. Из табл. 2 видно, что значения континуального поглощения по величине сильно отличаются, что естественно может привести к некоторым погрешностям при решении как качественных, так и количественных задач.

Так, в работе [24] представлены результаты, показывающие влияние континуального поглощения на результаты решения обратной задачи восстановления концентрации некоторых газов атмосферного воздуха. Показано, что вследствие использования разных моделей континуального поглощения может возникать существенная разница в восстановленном значении концентрации (например, для  $\text{CO}_2$  от 60 до 120 ppm).

При обработке данных измерений необходимо также учитывать аэрозольное ослабление, так как его величина и спектральный ход могут являться дополнительным источником погрешностей. Использование модельных представлений о спектральном поведении аэрозольного ослабления конечно же позволяет во многом сократить влияние этого фактора, но не всегда. При измерениях в разных регионах, различных погодных условиях величина реального аэрозольного ослабления может существенно отличаться от модельного. В этом случае можно применить методику одновременного восстановления и концентраций газов, и коэффициентов сплошного ослабления [15]. При этом делается предположение, что сплошное поглощение в пределах спектрального диапазона между on- и off-линиями для каждого газа не меняется. Тогда матрицу системы (5) можно представить в виде

$$\check{K} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

В этом случае уже необходимо использовать  $N_\lambda + N_\lambda/2$  длин волн зондирования.

#### 4. Задача обнаружения

В отдельных задачах газоанализа нет необходимости измерять непосредственно концентрацию газа, а достаточно его обнаружить. Воспользуемся для решения этой задачи алгоритмом, описанным в [25, 26].

Рассмотрим газовую смесь, в которой исследуемым является только один газ, а остальные газы будем считать посторонними (мешающими). Перепишем выражение (1) в следующей форме [26]:

$$y = y_0 C \exp\{-2L\Delta Kx\} \exp\{-2L\Delta\alpha_\Sigma\}, \quad (10)$$

где  $y = I_{\text{он}}$ ,  $y_0 = I_{\text{офф}}$ .

Задача обнаружения газа сводится к проверке статистической гипотезы  $H_1$  о том, что по измеренным параметрам  $y$ ,  $y_0$ ,  $C$  принимается решение о принадлежности  $x$  к классу состояний  $x \in X_1$  против альтернативы  $x \in X_2$  (гипотеза  $H_2$ ).

Пусть классы состояний  $X_1$  и  $X_2$  задаются условными плотностями вероятностей  $f(y|H_i) \equiv f(y|x \in X_i)$ , а параметры  $y_0$ ,  $C$ ,  $\Delta\alpha_\Sigma$  описываются плотностями  $f_1(y_0)$ ,  $f_2(C)$ ,  $f_3(\Delta\alpha_\Sigma)$ . Для проверки гипотез  $H_1$  и  $H_2$  воспользуемся критерием Неймана – Пирсона. Решающее правило имеет вид [27]:

$$h(y) = \frac{1}{2\sigma_1^2} (y - M_1)^2 - \frac{1}{2\sigma_2^2} (y - M_2)^2 - \ln \frac{\sigma_2}{\sigma_1};$$

$$M_1 = M_0 C e^{-2L\Delta\alpha_\Sigma}; \quad \sigma_1^2 = \sigma_y^2 + \sigma_{y_0}^2 C^2 e^{-4L\Delta\alpha_\Sigma},$$

$$M_2 = M_0 C e^{-2L\Delta\alpha_\Sigma} e^{-2L\Delta Kx};$$

$$\sigma_2^2 = \sigma_y^2 + \sigma_{y_0}^2 C^2 e^{-4L\Delta\alpha_\Sigma} e^{-2L\Delta Kx}.$$

Для порога обнаружения имеем

$$\Lambda = -d - \{|\tilde{M}_1| - \sqrt{2} \tilde{\sigma}_1 \Phi^{-1}(1 - 2\epsilon_0)\}^2.$$

Вероятность правильного обнаружения вычисляется по формуле

$$P = \frac{1}{2} [1 + \Phi(g_2)];$$

$$g_2 = -\frac{1}{\tilde{\sigma}_2 \sqrt{2}} [|\tilde{M}_2| - |\tilde{M}_1| + \sqrt{2} \tilde{\sigma}_1 \Phi^{-1}(1 - 2\epsilon_0)],$$

где  $\Phi(g)$  – интеграл ошибок;  $\Phi^{-1}(*)$  – обратная функция от интеграла ошибок; значения остальных параметров определяются соотношениями:

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

$$\tilde{\sigma}_1^2 = \frac{|\sigma_2^2 - \sigma_1^2|}{2\sigma_2^2}, \quad \tilde{\sigma}_2^2 = \frac{|\sigma_2^2 - \sigma_1^2|}{2\sigma_1^2}.$$

Описанный выше алгоритм позволяет в автоматическом режиме проводить обнаружение газов, концентрации которых превышают заданную величину.

#### 5. Зондирование излучением конечной спектральной ширины

Рассмотрим лазерный трассовый газоанализатор, работающий по методу дифференциального поглощения для случая, когда источник лазерного излучения имеет конечную спектральную ширину  $\Delta\lambda$  (для параметрического генератора света  $\Delta\lambda \approx 0,1-0,3 \text{ см}^{-1}$  [28,

29]). Особенность решения обратной задачи газоанализа будет определяться нелинейной зависимостью измеряемой величины и анализируемой концентрации газа. Это связано с тем, что спектры поглощения атмосферных газов имеют селективную структуру и поэтому искажаются в приемном тракте при использовании лазерного источника с шириной линии  $\Delta\lambda$ , которая сравнима с шириной линии поглощения в приземных условиях. Измеряемые сигналы связаны в этом случае со средней по трассе концентрацией исследуемого газа соотношением

$$y(\lambda) = y(\lambda_0) S_{\text{ап}}(\lambda) \eta(\lambda) e^{-2L\Delta\alpha_{\text{а.к}}(\lambda)} \times \int_{\Delta\lambda} g(\lambda - \lambda') e^{-2L\sum_{j=1}^{N_g} K_j(\lambda)x_j} d\lambda', \quad (11)$$

где  $\alpha_{\text{а.к}}$  – коэффициент ослабления за счет аэрозоля и континуального поглощения;  $g(\lambda)$  – нормированный контур линии излучения лазера.

Для конечной ширины линии лазерного излучения объемный коэффициент поглощения газами определяется уже не выражением (5), а нелинейным выражением вида [30]:

$$\alpha_i^{\text{ef}} = -\frac{1}{2L} \ln \left\{ \int_{\Delta\lambda} g(\lambda - \lambda') \exp \left[ -2L \sum_{j=1}^{N_g} K_j(\lambda') x_j \right] d\lambda' \right\},$$

$i = \text{on, off.}$

Влияние конечной ширины линии излучения лазера сказывается на уменьшении восстанавливаемой концентрации анализируемого газа. Можно отметить, что для исследования веществ с гладкими спектрами (углеводороды) влияние аппаратной функции минимально. Для атмосферных газов данный эффект можно учитывать следующими способами.

Во-первых, из минимизации функционала:

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^N [\tilde{y}_i - y(\lambda_i, x_1, \dots, x_{N_g}, g, \Delta\lambda)]^2 \rightarrow \min_x \quad (12)$$

Минимизация (12) может проводиться различными методами (Ньютона, Левенберга–Маркуарта и др.).

И во-вторых, способом, предложенным в [31], который заключается в применении методов деконволюции к зарегистрированным спектрам. В настоящее время разработано множество способов деконволюции. Классический метод основан на идеях метода регуляризации А.Н. Тихонова [32]. Наиболее распространенным на практике является метод максимального правдоподобия [33].

Деконволюция методом максимального правдоподобия проводится с использованием итерационного выражения вида [31]:

$$y_k^{l+1} = y_k^l + \beta y_k^l \sum_{i=1}^N G_{ik} \left( \frac{\tilde{y}_i}{\sum_{j=1}^M G_{ij} y_j^l} - 1 \right)^\tau,$$

где  $G$  – алгебраизованный аналог аппаратной функции (линии лазерного излучения);  $\beta$ ,  $\tau$  – параметры,

определяющие сходимость итерационного процесса;  $l$  – номер шага итерационного процесса.

В табл. 3 приведены результаты решения обратной задачи восстановления концентрации метана ( $\text{CH}_4$ ) в области 3,3 мкм ПГС-газоанализатором для

Таблица 3

Сравнение методов решения обратной задачи

$x_{\text{CH}_4}$ , ppm	$x_{\text{CH}_4}$ после свертки	$\delta_x$ , %	$x_{\text{CH}_4}$ после деконволюции	$\delta_x$ , %	$\Delta\nu$ , см <sup>-1</sup>
1,7	1,598	5,8	1,636	3,5	0,1
1,7	1,521	10,5	1,582	7,1	0,3

случая сигнала, искаженного аппаратной функцией (ширина 0,1 и 0,3 см<sup>-1</sup>) и после применения метода максимального правдоподобия. Из таблицы видно, что применение деконволюции позволяет уменьшить ошибку восстановления концентрации исследуемого газа, но не полностью.

В любом случае для качественного учета влияния аппаратной функции необходимо знать контур линии лазерного излучения и его изменение во всем спектральном диапазоне исследований.

## 6. Программное обеспечение эксперимента

Одним из важных этапов в работе экспериментатора стало программное обеспечение, от качества которого зависит результат работы в целом. Это связано с тем, что многократно выросли объемы экспериментальной и архивной информации, сложность решаемых задач, физических моделей и методов обработки. Задачи выбора информативных длин волн являются важными в задачах газоанализа.

В качестве примера можно привести два пакета программ LPM и TRAG, которые позволяют решать задачи моделирования и обработки данных измерений трассовых газоанализаторов различных видов. Диалоговый пакет программ LPM [34] предназначен для имитационного моделирования лазерного зондирования газов ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ) трассовым методом с помощью лазерного газоанализатора с двумя перестраиваемыми  $\text{CO}_2$ -лазерами. В режиме моделирования программа определяет: оптимальные пары длин волн и ошибку восстановления концентрации газа, обусловленную погрешностью измерения сигналов и систематической ошибкой (последняя обусловлена погрешностью спектроскопических данных, влиянием мешающих газов и др.).

Выбор оптимальных условий эксперимента можно проводить на основе разработанных нами алгоритмов и программ, основанных на применении теории проверки статистических гипотез. За основу взят байесовский критерий обнаружения.

Пакет TRAG [30] выполняет все функции пакета LPM, но для трассового газоанализатора на основе ПГС. Пакет позволяет находить оптимальные длины волн зондирования, проводить деконволюцию измеренного спектра и затем решать обратную задачу.

1. *Лазерный контроль атмосферы* / Под ред. Е. Хинкли. М.: Мир, 1979. 416 с.
2. *Межерис Р.* Лазерное дистанционное зондирование. М.: Мир, 1987. 550 с.
3. *Бондаренко С.Л., Долгий С.И., Зуев В.Е., Катаев М.Ю. и др.* Лазерный многокомпонентный газоанализ приземного слоя атмосферы // *Оптика атмосфер.* 1992. Т. 5. № 6. С. 611.
4. *Костко О.К., Портасов В.С., Хаттатов В.У. и др.* Применение лазеров для определения состава атмосферы. Л.: Гидрометеоздат, 1983. 216 с.
5. *Захаров В.М., Костко О.К.* Метеорологическая лазерная локация. Л.: Гидрометеоздат, 1977. 222 с.
6. *Зуев В.Е., Зуев В.В.* Дистанционное оптическое зондирование атмосферы. Л.: Гидрометеоздат, 1992. 232 с.
7. *Самохвалов И.В., Копытин Ю.Д. и др.* Лазерное зондирование тропосферы и подстилающей поверхности. Новосибирск: Наука, 1987. 262 с.
8. *Захаров В.М., Костко О.К., Хмелевцов С.С.* Лидары и исследование климата. Л.: Гидрометеоздат, 1996. 320 с.
9. *Долгий С.И., Кудинова Л.П., Мицель А.А. и др.* Система для определения концентрации газов с помощью перестраиваемого CO<sub>2</sub>-лазера // *Системы автоматизации эксперимента по оптике атмосферы.* Томск, 1980. С. 67–78.
10. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Д.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.
11. *Иванов А.П., Бриль А.И., Кабашиков В.П. и др.* Влияние неопределенности состояния атмосферы на точность измерения концентрации газов методом дифференциального поглощения в спектральных диапазонах 9–11 и 4,5–5,6 мкм // *Оптика атмосфер. и океана.* 2000. Т. 13. № 2. С. 154–160.
12. *Johansson J., Marthinsson Bo G., Eng S.T.* Computer automation and error analysis of a CO<sub>2</sub> laser long-path absorption system for air pollution monitoring // *IEEE Trans. on Instrum. and Measur.* 1978. V. IM27. № 4. P. 358.
13. *Ahlberg H., Lundqvist S. et al.* Analysis of errors caused by optical interference effects in wavelength-diverse CO<sub>2</sub> laser long-path systems // *Appl. Opt.* 1985. V. 24. № 22. P. 3917.
14. *Rosengren L.R.* Analysis of a long-distance system measuring the concentration of atmospheric gaseous pollutants // *IEEE Trans. Aerosp. and Electron. Syst.* 1973. V. AES-9. № 5. P. 725.
15. *Катаев М.Ю., Мицель А.А., Тинчурина Э.Г.* Анализ многокомпонентных газовых смесей по спектрам поглощения. Деп. ВИНТИ. 1984. № 4676. 32 с.
16. *Shumate M.S., Menzies R.T. et al.* // *Appl. Opt.* 1976. V. 15. № 10. P. 2480–2488.
17. *Mayer P.L., Sigrist M.W.* Air-pollution monitoring with a mobile CO<sub>2</sub>-lidar PA system // *Final report SNF/NFP-14.* Zurich, 1988. 121 p.
18. *Mayer A., Comera J. et al.* Absorption coefficients of various pollutant gases at CO<sub>2</sub>-laser wavelengths; application to the remote sensing of those pollutants // *Appl. Opt.* 1978. V. 17. № 3. P. 391.
19. *Mitsel' A.A., Ponomarev Yu.N., Firsov K.M. et al.* The computer codes LARA and AIRA for simulating the atmospheric transmittance and radiance: current status // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1995. V. 54. № 3. P. 559–571.
20. *Hinderling J., Sigrist M.W., Kneubuhl F.* // *Infrared Phys.* 1987. V. 27. P. 63–120.
21. *Арефьев В.Н., Вишератин К.Н.* // *Труды ИЭМ.* 1982. Вып. 12. С. 121–124.
22. *Bosher J., Schafer G., Wiesenann W.* Gaseferanalyse mit CO<sub>2</sub>-laser // *Report BF-R-63,* Batelle, institute, 1979. 118 p.
23. *Abrew L.W., Kneizys F.X., Anderson G.P. et al.* Modtran/Lowtran: current status // *Proc. IV-th Ann. conf. on Atmosph. Transmission models.* Hanscom AFB, 1991. P. 65–72.
24. *Зигрист М., Катаев М.Ю., Мицель А.А., Пономарев Ю.Н.* Исследование погрешностей лазерного ОА-газоанализатора // *Оптика атмосфер. и океана.* 1994. Т. 7. № 11–12. С. 1471–1477.
25. *Катаев М.Ю., Мицель А.А.* Обнаружение газов с помощью ОА-газоанализатора // *Оптика атмосфер.* 1991. Т. 4. № 7. С. 705–712.
26. *Катаев М.Ю., Мицель А.А.* Выбор оптимальных спектральных каналов для решения задач абсорбционного газоанализа и локации. Ч. II. Алгоритмы поиска // *Оптика атмосфер. и океана.* 1992. Т. 5. № 9. С. 986–995.
27. *Горелик А.Л., Скрипкин В.А.* Методы распознавания образов. М.: Высшая школа, 1984. 208 с.
28. *Городничев В.А., Козинцев В.И., Сильницкий А.Ф.* Лидар на основе параметрического генератора света для определения атмосферных загрязнений // *Оптика атмосфер.* 1988. Т. 1. № 12. С. 33–35.
29. *Мигулин А.В., Разумихина Т.Б., Холодных А.И.* Лидар с излучателем на F<sub>2</sub><sup>+</sup>-центрах окраски для трассовой спектроскопии атмосферы в диапазоне 0,9–1 мкм // *Оптика атмосфер.* 1988. Т. 1. № 12. С. 36–41.
30. *Быков И.В., Катаев М.Ю., Мицель А.А., Холодных А.И.* Программное обеспечение лазерного газоанализатора для многокомпонентного газоанализа атмосферы // *Автоматизированные системы управления экспериментом.* Томск: ТУСУР, 2000. С. 59–65.
31. *Катаев М.Ю.* Особенности решения обратной задачи газоанализа при измерениях ПГС спектрометром // VII Межд. симп. «Оптика атмосферы и океана». Томск, 2000. С. 111.
32. *Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.* Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.
33. *Бейтс Р., Мак-Донелл М.* Восстановление и реконструкция изображений. М.: Мир, 1989. 336 с.
34. *Firsov K.M., Kataev M.Yu., Mitsel' A.A. et al.* Imitative modeling of gas analysis of the atmosphere by long path method: computer code LPM // *J. Comput. Phys.* 1995. № 10. P. 649–656.

***М.Ю. Катаев. Methodical foundations for processing data of laser path gas-analysis.***

Principal methodical problems associated with reconstruction of gas composition of the atmosphere from data of laser path gas-analysis by the differential absorption method are treated in the paper. Main factors affecting the accuracy of gas concentration reconstruction are determined, for example, such as inadequate knowledge of absorption coefficients, aerosol attenuation coefficients, continual absorption models, etc. The problems of choice of optimum spectral sensing channels and detection of gases are also examined. Ways of taking into account the final line width of laser radiation and its influence on the accuracy of gas concentration reconstruction are demonstrated. The programs for solving these problems are described.