

В.И. Козинцев

ОБ ОБРАБОТКЕ СИГНАЛОВ ЛАЗЕРНОГО ОПТИКО-АКУСТИЧЕСКОГО ГАЗОАНАЛИЗАТОРА ПРИ АНАЛИЗЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Рассмотрены алгоритмы восстановления концентраций газов в задачах анализа многокомпонентных газовых смесей. Для лазерного метода дифференциального поглощения описаны процедуры обработки сигналов, основанные на методах построения регуляризованных решений некорректных математических задач. Приведены результаты численного моделирования восстановления концентраций газов многокомпонентной смеси и результаты обработки сигналов лазерного оптико-акустического газоанализатора. Показано, что использование регуляризующих процедур обработки обеспечивает достаточно низкий уровень ошибок восстановления концентраций газов при различных способах выбора параметра регуляризации. Выбор параметра регуляризации на основе модифицированного принципа невязки в большинстве случаев приводит к сглаживанию больших ошибок восстановления, которые могут возникать при выборе параметра регуляризации на основе принципа невязки или выбора квазиоптимального значения параметра.

Лазерные методы являются наиболее перспективными для дистанционного и локального газоанализа многокомпонентных смесей и представляют значительный интерес для задач контроля чистоты атмосферы [1–8]. Ниже описываются процедуры восстановления концентраций газовых компонент из локальных лазерных измерений и приводится их сравнение по результатам численного моделирования и обработки реальных сигналов лазерного оптико-акустического газоанализатора (ЛОАГ).

Задача нахождения концентраций газов из результатов измерений сигналов ЛОАГ сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений вида [5]:

$$\begin{cases} K_a(\lambda_1) + \sum_j^N C_j K_j(\lambda_1) = y(\lambda_1), \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ K_a(\lambda_m) + \sum_j^N C_j K_j(\lambda_m) = y(\lambda_m), \end{cases} \quad (1)$$

где $y(\lambda_i)$ – приведенный измеряемый сигнал на длине волны λ_i ; $K_a(\lambda)$ – коэффициент неселективного поглощения на длине волны λ ; $K_j(\lambda)$ – коэффициент поглощения j -й газовой компоненты смеси на длине волны λ ; C_j – концентрация j -й газовой компоненты смеси; N – полное число газовых компонент в анализируемой смеси.

Неизвестными величинами в системе уравнений (1) являются C_j и $K_a(\lambda_i)$. Величины $K_a(\lambda_i)$ слабо зависят от длины волны. Поэтому обычно считают, что если спектральные каналы измерений выбраны попарно достаточно близко, то для каждой пары каналов коэффициенты K_a можно положить равными константе. В этом случае из M спектральных каналов, необходимых для зондирования газовой смеси, информация $M/2$ каналов требуется для определенных коэффициентов K_a .

Трудность решения системы уравнений (1) заключается в том, что правая часть уравнения всегда известна со случайной ошибкой, обусловленной погрешностями измерения, шумами аппаратуры и т.п. В этих условиях попытки непосредственно обратить систему уравнений (1) приводят к тому, что найденный обратный оператор не обладает свойством устойчивости и малые вариации данных измерений приводят к большим вариациям искомым величин. Выходом из этой ситуации является привнесение в процедуру обработки сигналов дополнительной априорной информации о гладкости искомым функций и построение регуляризованных решений [6,9].

Регуляризованное решение для системы уравнений (1) определяется следующим выражением [1,6,9]:

$$(\mathbf{W}^T \mathbf{W} + \alpha \mathbf{E}) \mathbf{x}_\alpha = \mathbf{W}^T \mathbf{y}, \quad (2)$$

где α – параметр регуляризации; \mathbf{x}_α – регуляризованное решение уравнения (1);

$$\mathbf{W} = \mathbf{K}_a + \mathbf{K} \mathbf{x},$$

\mathbf{K} – матрица коэффициентов поглощения компонент газовой смеси; \mathbf{x} – вектор концентраций газов; \mathbf{y} – вектор правых частей системы уравнений (1); \mathbf{K}_a – вектор коэффициентов неселективного поглощения; \mathbf{E} – единичная матрица. Значок “ T ” означает транспонирование матрицы.

Регуляризованное решение, найденное из (2), устойчиво к возмущениям правой части уравнения и сходится к точному решению при уменьшении возмущений правой части уравнения.

Решение \mathbf{x}_α системы уравнений (2) имеет вид

$$\mathbf{x}_\alpha = (\mathbf{W}^T \mathbf{W} + \alpha \mathbf{E})^{-1} \mathbf{W}^T \mathbf{y}, \quad (3)$$

где $(\mathbf{W}^T \mathbf{W} + \alpha \mathbf{E})^{-1}$ – матрица, обратная матрице $\mathbf{W}^T \mathbf{W} + \alpha \mathbf{E}$.

Основная сложность при практическом построении регуляризованных решений заключается в выборе параметра регуляризации α .

Для получения регуляризованного решения использовалось несколько способов выбора параметра регуляризации.

Пусть вместо точной правой части уравнения (1) \mathbf{y} задано ее значение $\tilde{\mathbf{y}}$, удовлетворяющее условию

$$\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}\| \leq \delta,$$

где $\|\mathbf{y}\|$ – норма вектора.

В методе определения α на основе принципа невязки величина δ – это отклонение правой части (1) от его точного значения, но приближенно можно считать, что δ имеет смысл корня квадратного из дисперсии шума правой части уравнения (1).

Введем функцию [6,9]

$$r(\alpha) = \rho(\mathbf{W} \mathbf{x}_\alpha, \tilde{\mathbf{y}}). \quad (4)$$

Численное решение уравнения

$$r(\alpha) = \delta^2 \quad (5)$$

дает значение параметра регуляризации, найденное на основе принципа невязки.

По второму способу квазиоптимальный параметр регуляризации находился из условия [6]

$$\inf_{\alpha} \|\alpha [(d \mathbf{x}_\alpha)/(d\alpha)]\|^2. \quad (6)$$

В качестве третьего способа выбора параметра использовалась модификация метода невязки. При перестройке в широком спектральном диапазоне шумы измерения в различных спектральных каналах могут сильно отличаться между собой, поэтому при восстановлении концентрации каждой газовой компоненты использовался свой параметр регуляризации. Он определялся в два этапа. На первом этапе для каждой газовой компоненты параметр регуляризации α_i находился из уравнения (5), записанного для спектрального канала, в котором данная газовая компонента имеет пик поглощения. На втором этапе в окрестности найденного значения α_i (в интервале между α_i и α , найденном из (5) для всех спектральных каналов) из условия (6) находилось окончательное значение параметра регуляризации.

Для выбора параметра регуляризации использовался также метод отношений [6] и более строгое выражение для выбора квазиоптимального параметра регуляризации, при котором α находится из условия [6]:

$$\inf_{\alpha} \sup_y \left\| \alpha [(d \mathbf{x}_{\alpha}) / (d \alpha)] \right\|^2,$$

где \sup_y определяется по набору реализаций (вычисления проводились по 10 реализациям) правой части (1). Чтобы не загромождать рисунки близкими кривыми, результаты расчетов по двум последним методам не показаны на приводимых ниже рисунках, однако выводы, которые делаются на основании приводимых графиков, относятся и к этим методам.

Процедуры обработки сигнала ЛОАГ, основанные на построении регуляризованного решения системы (1), представлены в виде комплекса программ на персональной ЭВМ типа IBM PC. Сечения поглощения газов рассчитывались с использованием прикладной программы HITRAN, в основу которой был положен атлас спектральных линий «HITRAN-91» [10]. Результатом обработки являются концентрации составляющих газовой смеси. Для проверки работоспособности алгоритмов обработки и оценки точности восстановления концентраций газовых компонент смеси проводилось численное моделирование и обработка реальных сигналов лазерного оптико-акустического газоанализатора.

Результаты обработки реальных сигналов и результаты численного моделирования показывают, что для двух трех- и четырехкомпонентных газовых смесей ошибки восстановления концентраций газовых компонент обычно небольшие и использование регуляризирующих процедур обработки не дает повышения точности восстановления. Для пятикомпонентной смеси наблюдается небольшое повышение точности, а для шести-(и более) компонентной смеси точность восстановления концентраций газовых компонент значительно увеличивается при использовании регуляризирующих процедур обработки.

Математическое моделирование проводилось для газовых смесей с числом компонент от 2 до 8. На рис. 1 приведены результаты численного эксперимента по восстановлению концентраций газовых компонент восьмикомпонентной смеси, полученные с использованием регуляризирующих процедур обработки. Численный эксперимент проводился по замкнутой схеме. По заданным значениям концентраций газов и коэффициентов поглощения рассчитывались значения $y(\lambda_i)$ – правые части системы уравнений (1). Полученные значения y искажались случайными числами для имитации шума измерения. Шум измерения моделировался случайным процессом с равномерным законом распределения, нулевым средним значением и заданной дисперсией. Значения K_a полагались равными нулю. На рис. 1 величина 1 дает заданное значение концентраций; 2, 3, 4 – дают восстановленное значение концентраций при выборе параметра регуляризации соответственно на основе модифицированного принципа невязки, принципа невязки (5) и выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации (6). Расчеты проводились для восьмикомпонентной газовой смеси аммиак–хлоропропен–этилен–трихлорэтилен–изопропанол–винилхлорид–этилмеркаптан–1, 2-дихлорэтан (для спектральных каналов 9,441; 9,550; 9,567; 9,601; 10,156; 10,192; 10,204; 10,230; 10,258; 10,346; 10,455; 10,492; 10,529; 10,588; 10,603; 10,716 мкм). На рис. 1 показаны восстановленные концентрации газовых компонент винилхлорида и этилмеркаптана.

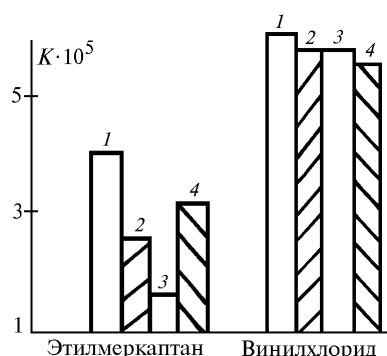


Рис. 1. Результаты численного эксперимента по восстановлению концентраций этилмеркаптана и винилхлорида из 8-компонентной газовой смеси

Обработка реальных сигналов лазерного оптико-акустического газоанализатора проводилась для газовых смесей с числом компонент от 3 до 6. На рис. 2 показаны результаты восстановления концентраций аммиака и этанола после обработки экспериментальных данных для

шестикомпонентной газовой смеси этилен – углекислый газ – аммиак – метанол – этанол – изопропанол (для спектральных каналов 10,140; 10,200; 9,100; 9,180; 9,120; 9,160; 9,320; 9,340; 9,420; 9,400; 10,120; 10,300 мкм). Обозначения на рис. 2 те же, что и на рис. 1.

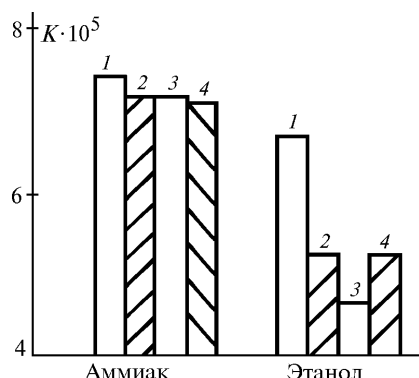


Рис. 2. Результаты восстановления концентраций аммиака и этанола из экспериментальных данных для 6-компонентной газовой смеси

Концентрация компонент газовой смеси контролировалась по результатам измерения парциальных давлений. Методика измерений и лазерный оптико-акустический газоанализатор описаны в [11]. Относительные дисперсии шума измерения в спектральных каналах статистически оценивались по результатам серии тестовых измерений в соответствующих каналах. Результаты восстановления концентраций газовых компонент обычным методом решения системы алгебраических линейных уравнений не показаны на рисунках, т.к. очень сильно отличаются по величине (на 1–2 порядка) от действительного и восстановленных значений концентрации газовых компонент.

На рис. 3 показаны относительные ошибки восстановления концентраций (модуль разности действительного и восстановленного значения концентрации, деленный на действительное значение концентрации) этилена (I), аммиака (II), метанола (III), этанола (IV) и изопропанола (V) после обработки экспериментальных данных для шестикомпонентной газовой смеси этилен – углекислый газ – аммиак – метанол – этанол – изопропанол (ошибки восстановления концентрации углекислого газа очень большие и на рисунке не показаны). 1, 2, 3 – относительные ошибки восстановления концентраций при выборе параметра регуляризации соответственно на основе модифицированного принципа невязки, принципа невязки (5) и выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации (6).

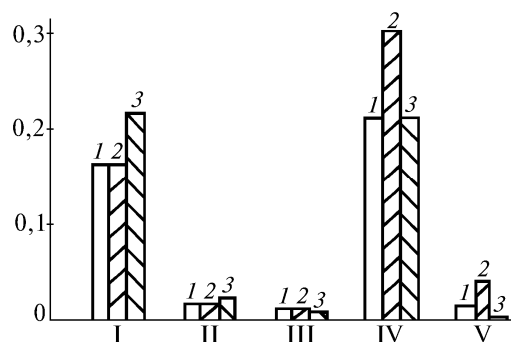


Рис. 3. Относительные ошибки восстановления (из экспериментальных данных) концентраций компонент 6-компонентной газовой смеси

Из рисунков видно, что использование регуляризирующих процедур обработки для шести- и восьмикомпонентных газовых смесей обеспечивает в большинстве случаев достаточно низкий уровень ошибок восстановления концентраций газов при различных способах выбора параметра регуляризации. Использование модифицированного метода невязки для выбора параметра регуляризации обеспечивает для всех газов уровень ошибок восстановления концентраций газовых компонент более низкий, чем метод выбора параметра регуляризации на

основе принципа невязки (5), или тот же. Если обозначить относительные ошибки восстановления концентраций при выборе параметра регуляризации на основе модифицированного принципа невязки, принципа невязки (5) и выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации соответственно через Δ_1 , Δ_2 , Δ_3 , то для всех газов $\Delta_2 \leq \Delta_1 \leq \Delta_3$ или $\Delta_3 \leq \Delta_1 \leq \Delta_2$. Выбор параметра регуляризации на основе модифицированного принципа невязки в большинстве случаев приводит к сглаживанию больших ошибок восстановления при выборе параметра регуляризации на основе принципа невязки (5) или выборе квазиоптимального значения параметра регуляризации (6).

1. Макушкин Ю.С., Мицель А.А., Хмельницкий Г.С. // Журнал прикладной спектроскопии. 1981. Т. 35. Вып. 5. С. 785–790.
2. Межерис Р. Лазерное дистанционное зондирование. М.: Мир, 1987. 550 с.
3. Иванов С.В., Панченко В.Я., Разумихина Т.Б. // Оптика атмосферы и океана. 1993. Т. 6. N 8. С. 1023–1029.
4. Пономарев Ю.Н. // Оптика атмосферы и океана. 1995. Т. 8. N 1–2. С. 224–241.
5. Зигрист М., Катаев М.Ю., Мицель А.А. и др. // Оптика атмосферы и океана. 1994. Т. 7. N 11–12. С. 1471–1477.
6. Воскобойников Ю.Э., Преображенский Н.Г., Седельников А.Н. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1984. 238 с.
7. Воскобойников Ю.Э., Катаев М.Ю., Мицель А.А. // Оптика атмосферы. 1991. Т. 4. N 2. С. 177–184.
8. Бондаренко С.Л., Долгий С.Н., Зуев В.В. // Оптика атмосферы и океана. 1992. Т. 5. N 6. С. 611–634.
9. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.
10. Rothman L.S., Gamache R.R., Tipping R.H. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1992. V. 48. P. 469–507.
11. Козинцев В.И. // Оптика атмосферы и океана. 1996. Т. 9. N 8. С. 1087–1091.

Научно-исследовательский институт радиоэлектроники и лазерной техники
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

Поступила в редакцию
12 января 1996 г.

V. I. Kozintsev. Processing of Laser Photoacoustic Gas-Analyser Signals in Analysis of Multicomponent Gas Mixtures.

The algorithms for reconstruction of gases concentration in multicomponent gaseous mixtures are analyzed in the paper. For the differential absorption laser photoacoustic experiments, the procedures of the signals processing are designed based on the regularization methods of incorrect mathematical problems solution. The results of numerical simulation and of the laser photoacoustic gas-analyzer signals processing are presented. It is shown, that the use of the regularization algorithms guarantees the low level of errors for the reconstruction of gaseous admixtures concentration in the multicomponent mixtures at different ways of the regularization parameter choice. The choice of the regularization parameter based on the modified principle of the residual leads in most cases to smoothing of great errors, which can arise if the regularization parameter is chosen based on the principle of the residual or if the quasioptimal value of the parameter is chosen.