

М.Ю. Катаев, А.А. Мицель, С.Р. Тарасова

ВЫБОР ИНФОРМАТИВНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ УЧАСТКОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОАНАЛИЗА С ПОМОЩЬЮ ОАД

Приводится алгоритм выбора информативных спектральных участков для оптико-акустического газоанализатора. Алгоритм основан на байесовском риске. Определены оптимальные спектральные участки для различных газовых компонент в области генерации CO₂-лазера. Дается сравнение с литературными данными.

Введение

При проектировании и разработке оптических устройств и приборов для целей газоанализа необходимо выбрать оптимальные спектральные участки. В задачах газоанализа по спектрам поглощения участки выбирают в полосах поглощения для обеспечения максимальной чувствительности и селекции по газам. Благодаря появлению средств записи и хранения информации о спектрах поглощения газов на магнитных носителях, а также развитию вычислительной техники, стало возможным автоматизировать работу поиска информативных спектральных участков. Однако без соответствующих математических алгоритмов это весьма трудоемкая и непроизводительная работа.

В статье описывается математический алгоритм выбора оптимальных спектральных участков для оптико-акустического газоанализатора и приводятся результаты моделирования вероятности ошибки обнаружения газовых составляющих с помощью ОАД на различных длинах волн генерации CO₂-лазера. Проводится сравнение рассчитанных минимально обнаружимых концентраций газов для различных условий с литературными данными.

Постановка задачи

Рассмотрим газовую смесь, в которой исследуемым является только один компонент. Остальные газы этой смеси будем считать посторонними (фоновыми). Измерения спектра поглощения выполняются оптико-акустическим детектором (ОАД), в качестве источника используется лазер с квазимонохроматическим спектром излучения (ширина линии излучения много меньше ширины линии поглощения).

Связь измеряемого сигнала с концентрацией газа задается соотношением [1]

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

где \bar{y} — среднее значение измеренного ОА-сигнала; y_0 — поглощенная в ячейке ОАД мощность излучения; η — чувствительность ОАД; K — коэффициент поглощения на единицу концентрации газа; ρ — концентрация исследуемого газа; β — объемный коэффициент поглощения других газов, присутствующих в газовой смеси (сюда же может входить и аэрозольная компонента ослабления). Кроме того, в β входит также β_f , соответствующий фоновому сигналу (в отсутствие поглощающих газов в ячейке ОАД).

В математическом плане задачу выбора информативных спектральных участков можно рассматривать как задачу различения газовых объектов по измеренным ОА-сигналам.

Байесовский критерий обнаружения. Общий алгоритм

Алгоритм обработки сигналов будем строить для сигналов на выходе ОА-детектора (последетекторное обнаружение).

Кроме измеряемого сигнала y будем также считать случайными величинами чувствительность ОАД η (которая измеряется в независимом эксперименте), концентрацию газа ρ и объемный коэффициент поглощения β . Это обстоятельство определяет статистический подход к решению поставленной задачи. Ранее [2–4] мы рассматривали эту задачу в плане идентификации газового состава смеси по измеренным спектрам поглощения. В [5–6] решалась задача лидарного обнаружения малых газовых составляющих по измеренным спектрам комбинационного рассеяния. В отличие от указанных задач в данной статье основное внимание будет уделено исследованию функции риска или ошибки обнаруже-

ния. Само же отношение правдоподобия, для вычисления которого требуются значения измеренных сигналов, рассматриваться здесь не будет, так как поставленная задача связана с определением информативных участков и минимально обнаружимых концентраций на этапе проектирования ОА-газоанализатора (до процесса измерения сигналов).

Рассмотрим общий алгоритм байесовского критерия обнаружения. Пусть имеется два класса состояний Y_1 и Y_2 , к одному из которых может принадлежать y . Задача обнаружения сводится к проверке статистической гипотезы H_1 о том, что измеренный параметр y принадлежит к классу состояний $Y_{H_1} \equiv Y_1$, против альтернативы H_2 , состоящей в том, что измеренный параметр y принадлежит к классу $Y_{H_2} \equiv Y_2$. Классы состояний Y_1 и Y_2 задаются условными плотностями вероятностей $P(y|H_1)$ и $P(y|H_2)$. Принадлежность сигнала y к классу исходов Y_1 связана, в свою очередь, с принадлежностью концентрации газа ρ к классу состояний X_i , $i = 1, 2$.

Одной из основных характеристик, определяющих качество решающего правила, является средний риск (либо ошибка классификации). Выражение для среднего риска имеет вид [7]

$$R = q\Pi_{11} + p\Pi_{21} + q(\Pi_{12} - \Pi_{11}) \cdot \varepsilon_1 - p(\Pi_{21} - \Pi_{22}) \cdot (1 - \varepsilon_2), \quad (2)$$

где Π_{ij} — элементы матрицы потерь (Π_{11} , Π_{22} — платы за правильное решение при принятии гипотезы H_1 и H_2 соответственно; Π_{12} — плата за ошибку первого рода, т. е. принятие решения $y \in Y_2$, когда в действительности $y \in Y_1$; Π_{21} — плата за ошибку второго рода); q и $p = 1 - q$ — априорные вероятности того, что неизвестный параметр ρ принадлежит непересекающимся классам состояний X_1 и X_2 . Вероятности ошибок первого ε_1 и второго ε_2 рода, входящие в (2), определяются следующими формулами [7]:

$$\varepsilon_1 = \int_{X_1} \omega_1(\rho) \int_{Y_2} P(y|\rho \in X_1) \iint v(\eta) \varphi(\beta) d\eta d\beta d\rho dy, \quad (3)$$

$$\varepsilon_2 = \int_{X_2} \omega_2(\rho) \int_{Y_1} P(y|\rho \in X_2) \iint v(\eta) \varphi(\beta) d\eta d\beta d\rho dy, \quad (4)$$

где $v(\eta)$, $\varphi(\beta)$ — плотности распределения случайных величин η и β ; $\omega_1(\rho)$, $\omega_2(\rho)$ — априорные распределения случайной величины ρ в гипотезе H_1 и H_2 соответственно. Поскольку η и β являются «мешающими» параметрами, то распределения $v(\eta)$ и $\varphi(\beta)$ в обеих гипотезах берутся одинаковыми.

Для вычисления вероятностей ошибок ε_1 и ε_2 по формулам (3), (4) необходимо определить границу дополняющих друг друга областей Y_1 и Y_2 или, другими словами, найти интервалы Y_1 и Y_2 . Интервал Y_1 (или Y_2) определяется из условия минимума среднего риска R и находится из следующего уравнения [7, 8]:

$$\begin{aligned} q(\Pi_{12} - \Pi_{11}) \int_{X_1} \omega_1(\rho) \iint v(\eta) \varphi(\beta) P(y|\rho \in X_1) d\eta d\beta d\rho = \\ = p(\Pi_{21} - \Pi_{22}) \int_{X_2} \omega_2(\rho) \iint v(\eta) \varphi(\beta) P(y|\rho \in X_2) d\eta d\beta d\rho. \end{aligned} \quad (5)$$

Значение $y = u$, удовлетворяющее этому уравнению, является границей интервалов Y_1 , Y_2 .

Таким образом, зная распределения $\omega_i(\rho)$, $p(y|\rho \in X_i)$, $i = 1, 2$, $v(\eta)$, $\varphi(\beta)$ по формулам (2)–(5) можно вычислить средний риск, обусловленный принятием одной из гипотез: $H_1 - y \in Y_1$, или $H_2 - y \in Y_2$ (соответственно $\rho \in X_1$ или $\rho \in X_2$). Следует подчеркнуть при этом, что для расчета риска по формулам (2)–(5) не требуются сами измеренные сигналы, и, следовательно, вычисления могут быть проведены до момента измерений.

Критерий поиска оптимальных спектральных участков

Перейдем теперь к определению критерия поиска информативных спектральных участков. Плотности распределения $p(y|\rho \in X_i)$ являются функциями массового коэффициента поглощения K , который, в свою очередь, определяется спектроскопической информацией и зависит от длины волны. От длины волны зависит также коэффициент поглощения β мешающих газов.

Таким образом, средний риск R является функцией длины волны λ . С изменением длины волны в выбранном спектральном диапазоне для заданных значений $\bar{\rho}_1$, $\bar{\rho}_2$, $\sigma_{\rho_1}^2$, $\sigma_{\rho_2}^2$ (определяющих априорные распределения $\omega_1(\rho)$ и $\omega_2(\rho)$) и концентраций посторонних газов, которые входят в β , значение риска также будет меняться. Та длина волны λ_0 , для которой величина риска R минимальна в некотором диапазоне длин волн, и будет оптимальной для исследуемого газа ρ . Критерий оптимальности запишется в виде

$$R(\lambda) \rightarrow \min_{\lambda}, \quad (6)$$

либо

$$R(\lambda) \leq R_0, \quad (6a)$$

где R_0 — пороговое значение среднего риска.

Для перестраиваемых по длине волны лазеров (например, CO₂-лазеры и др.), минимизацию R удобнее проводить не по λ , а по известным значениям $K_i = K(\lambda_i)$.

Вычисление среднего риска

Расчет среднего риска R сводится к вычислению вероятностей ошибок ε_1 и ε_2 первого и второго рода. Для аналитического вычисления интегралов ε_1 и ε_2 необходимо задать вид распределений вероятностей всех входящих в (3) и (4) параметров. Рассмотрим эти распределения.

1. Условные распределения $p(y|H_i)$ в обеих гипотезах примем нормальными с параметрами $\tilde{M}_i, \sigma_{yi}^2$, где $\tilde{M}_i, \sigma_{yi}^2$ — средние значения и дисперсии ($i = 1, 2$).

2. Распределение $v(\eta)$ — нормальное с параметрами $M(\eta), \sigma_{\eta}^2$.

3. Априорное распределение $\omega_1(\rho)$ будем аппроксимировать следующими типами распределений: а) дельта-функцией $\omega_1(\rho) = \delta(\rho - \bar{\rho})$; б) нормальным распределением с параметрами $\bar{\rho}, \sigma_{\rho}^2$; в) гамма-распределением $\Gamma(a, b)$ с параметрами $a = \bar{\rho} / \sigma_{\rho}^2, b = \bar{\rho}^2 / \sigma_{\rho}^2$.

4. Плотность распределения $\omega_2(\rho)$ примем δ -функцией $\omega_2(\rho) = \delta(\rho - \bar{\rho}_2)$ с параметром $\bar{\rho}_2 = 0$.

5. Распределение $\phi(\beta)$ — δ -функция.

В результате получим следующие выражения для ошибки ε_1
Случай (а)

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} [1 - \Phi(g_1)]. \quad (7)$$

Случай (б)

$$\varepsilon_1 = \frac{c}{\sqrt{2\pi} \sigma_{\rho}} \int_0^{\infty} \exp\left\{-\frac{(\rho - \bar{\rho})^2}{2\sigma_{\rho}^2}\right\} \frac{1}{2} [1 - \Phi(g_1(\rho))] d\rho. \quad (8)$$

Случай (в)

$$\varepsilon_1 = \frac{a^b}{\Gamma(b)} \int_0^{\infty} \rho^{b-1} e^{-a\rho} \frac{1}{2} [1 - \Phi(g_1(\rho))] d\rho. \quad (9)$$

Ошибка ε_2 для всех случаев вычисляется по формуле

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{2} [1 - \Phi(g_2)]. \quad (10)$$

В (7)–(10) $\Phi(g)$ — интеграл ошибок $\left(\Phi(g) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^g e^{-t^2} dt\right)$; $\Gamma(b)$ — гамма-функция; c — константа нормировки ($c = 2 / (1 + \Phi(\bar{\rho} / \sqrt{2}\sigma_{\rho}))$), при $\bar{\rho} / \sigma_{\rho} > 3, c = 1$. Значения параметров $g_1, g_1(\rho)$ и g_2 равны

$$g_1 = \frac{M_1 - u}{\sqrt{2}\sigma_1}; \quad g_1(\rho) = \frac{E_1 - u}{\sqrt{2}\Sigma_1}; \quad g_2 = \frac{u - M_2}{\sqrt{2}\sigma_2}, \quad (11)$$

где

$$M_1 = M_{\tau} y_0 (K_{\bar{\rho}} + \beta), \quad M_2 = M_{\tau} y_0 \beta, \quad E_1 = M_1 + M_{\tau} y_0 v, \quad (12)$$

$$\Sigma_1 = \sigma_1 \left\{ 1 + \frac{1}{\sigma_1^2} \sigma_{y_0}^2 (K\bar{\rho} + \beta)^2 \left[\left(1 + \frac{v}{K\bar{\rho} + \beta} \right)^2 - 1 \right] \right\}^{1/2}, \quad (13)$$

$$\sigma_1 = \{\sigma_{y_1}^2 + \sigma_{y_0}^2 (K\bar{\rho} + \beta)^2\}^{1/2}, \quad \sigma_2 = \{\sigma_{y_2}^2 + \sigma_{y_0}^2 \beta^2\}^{1/2}, \quad v = K(\rho - \bar{\rho}), \quad (14)$$

u – граница интервалов Y_1 и Y_2 , определяемая из решения уравнения (5), которое примет следующий вид после подстановки в него заданных выше распределений $p(y|\rho \in X_i)$, $v(\eta)$, $\varphi(\beta)$ и выполнения интегрирования по $d\eta$ и $d\beta$:

$$\begin{aligned} q(\Pi_{12} - \Pi_{11}) \int_{X_1} \omega_1(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Sigma_1} \exp\left\{-\frac{1}{2\Sigma_1^2}(y - E_1(\rho))^2\right\} d\rho = \\ = p(\Pi_{21} - \Pi_{22}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_2^2}(y - M_2)^2\right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Для $\omega_1(\rho) = \delta(\rho - \bar{\rho})$, $\Sigma_1 \rightarrow \sigma_1$, $E_1 \rightarrow M_1$.

Отметим, что формулы (7)–(10) и уравнение (15) справедливы при выполнении следующих условий:

$$\frac{M_\eta}{\sqrt{2}\sigma_\eta} \frac{\sigma_{y_2}}{\sigma_2} > 3, \quad \frac{M_\eta}{\sqrt{2}\sigma_\eta} \frac{\sigma_{y_1}}{\Sigma_1} > 3. \quad (16)$$

Полученные формулы позволяют определять информативные спектральные участки для решения задачи обнаружения при проверке двух гипотез: H_2 – газ отсутствует, H_1 – газ присутствует в смеси. Выбор именно таких гипотез, на наш взгляд, наилучшим образом соответствует решению поставленной задачи. В самом деле, если величина риска для некоторой длины волны λ $R(\lambda) \leq R_0(\lambda)$, где $R_0(\lambda)$ – пороговое значение, то прибор должен «почувствовать» наличие газа в смеси, когда он в действительности присутствует, и наоборот, прибор не будет «чувствовать» газ, когда его в действительности нет в смеси или его концентрация много меньше принятой в гипотезе H_1 . Значение концентрации газа, для которой $R(\lambda, \rho) = R_0$ можно рассматривать как минимально-обнаружимую на заданной длине волны λ при заданных характеристиках ОАП.

Поиск информативных длин волн в спектральном диапазоне генерации CO₂-лазера

В качестве примера рассмотрим спектральный диапазон, в котором генерирует перестраиваемый CO₂-лазер. В табл. 1 приведены переходы CO₂-лазера, длины волн и коэффициенты поглощения 6 газов. Длины волн генерации взяты из справочника [9]. Коэффициенты поглощения H₂O, CO₂ и O₃ рассчитывались нами с помощью пакета LARA [10] на основе данных атласа [11]. Данные по коэффициентам поглощения остальных газов заимствованы из литературных источников [9, 12–15].

Коэффициент поглощения β для j -го исследуемого газа рассчитывался по формуле

$$\beta_j = \sum_{l \neq j}^4 K_l \rho_l^\phi + K_{\text{H}_2\text{O}} \rho_{\text{H}_2\text{O}} + \alpha_k + \alpha_a + \beta_\phi, \quad (17)$$

где ρ_l^ϕ – фоновые значения концентраций, приведенные в табл. 2; α_k – коэффициент континуального поглощения H₂O, рассчитываемый по эмпирической формуле [17], α_a – аэрозольный коэффициент ослабления, заимствуемый из [18]. Коэффициенты селективного поглощения $K_{\text{H}_2\text{O}}$ даны в табл. 1. Значения влажности задавались равными 3,0 и 14 г/м³ для имитации различного уровня «мешающего» поглощения. Величина фонового коэффициента поглощения β_ϕ , определяющего фоновый сигнал в отсутствие поглощающих газов в ячейке ОАД, принималась равной 10⁻⁷ см⁻¹ [19].

Расчеты сигналов y выполнялись для типичных значений параметров лазерной оптико-акустической системы: $y_0 = 0,1$ Вт, $\eta = 100$ В/(Вт · см⁻¹). Ошибка измерения величин y и η принималась равной 5%, т.е. $\sigma_{y_i} = 0,05M_i$ ($i = 1, 2$), где M_i определены выражениями (12), $\sigma_\eta = 0,05M_\eta$.

Вычисления риска выполнялись при следующих значениях элементов матрицы потерь: $\Pi_{11} = \Pi_{12} = 0$; $\Pi_{21} = \Pi_{22} = 1$. Величины априорных вероятностей задавались равными $q = p = 0,5$. Распределение $\omega_1(\rho)$ аппроксимировалось нормальным законом с параметрами $\bar{\rho}$ и $\sigma_\rho = 0,1\bar{\rho}$.

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

Переход	Длина волны, мкм	H ₂ O*	CO ₂ *	NH ₃ [12–14]	O ₃ *	C ₂ H ₄ [9]	C ₆ H ₆ [15]
9R(30)	9,220	2,905–6	1,999–3	7,25+1	8,787–2	1,50–1	9,3 –4
9R(20)	9,271	1,966–6	3,358–3	2,70–2	9,367–2	1,13–1	9,3 –4
9P(10)	9,473	1,231–4	2,844–3	3,60–1	5,725+0	4,27–1	6,33–1
9P(12)	9,488	1,614–6	3,046–3	9,40–1	1,054+1	1,88–1	5,53–1
9P(14)	9,504	3,603–6	3,174–3	3,10–1	1,171+1	1,76–1	7,54–1
9P(24)	9,586	1,223–6	2,661–3	4,30–1	4,403–1	4,52–1	4,52–1
9P(26)	9,603	1,621–6	2,385–3	1,00–1	5,244+0	3,02–1	5,03–1
9P(28)	9,621	5,689–5	2,092–3	6,00–2	7,966+0	2,36–1	1,13+0
9P(30)	9,639	9,758–7	1,793–3	8,20–2	5,084+0	1,26+0	2,01+0
10R(20)	10,247	6,665–4	2,532–3	3,60–1	8,687–2	1,34+0	3,02–3
10R(18)	10,260	4,406–6	2,661–3	2,30–1	7,486–2	1,01+0	3,52–3
10R(10)	10,318	7,063–7	2,294–3	6,30–1	2,382–2	1,63+0	1,76–3
10R(8)	10,333	1,284–6	2,018–3	2,46+0	1,631–2	1,26+0	1,38–3
10P(12)	10,513	7,656–7	2,275–3	5,70–1	7,106–4	5,03+0	8,29–4
10P(14)	10,532	3,145–6	2,404–3	8,10–1	7,086–5	3,27+1	6,80–1
10P(16)	19,551	1,689–5	2,440–3	5,30–1	1,553–5	8,04+0	6,30–4
10P(30)	10,697	8,031–7	1,359–3	8,50–1	2,280–7	1,59+0	3,77–4
10P(32)	10,718	1,254–7	1,148–3	1,58+1	3,400–7	1,38+0	2,51–4

*Коэффициенты поглощения H₂O, CO₂, O₃ рассчитаны нами по данным [11].

Таблица 2

Фоновые значения концентраций газов в ppbv

Газ	CO ₂ [16]	NH ₃ [16]	O ₃ [16]	C ₂ H ₄ * [9]	C ₆ H ₆ [9]
ρ_{Φ} , ppbv	330	5,0–4	2,66–2	2,0–2	5,0–3

*В таблице приведены типичные значения концентраций C₂H₄ и C₆H₆. Согласно данным [9], собранным из различных литературных источников, ожидаемые значения концентраций газов C₂H₄ и C₆H₆ в городской местности составляют (1–100) ppbv и (5–150) ppbv соответственно.

Проведем анализ полученных результатов. В табл. 3 приведены значения концентраций газов, для которых величина риска R составляет 0,05. Из табл. 2 и 3 видно, что обнаружение фоновых концентраций по измеренным ОА-сигналам с риском 0,05 возможно лишь для CO₂ на всех переходах CO₂-лазера при низкой влажности исследуемого объема; при высокой влажности обнаружение фонового CO₂ возможно лишь на 10 переходах. Нетрудно заметить, что основным «мешающим» газом для обнаружения CO₂ является H₂O. Это видно из табл. 1 – на тех переходах CO₂ лазера, для которых $K_{\text{H}_2\text{O}}$ имеет наибольшие значения, ρ_{CO_2} также принимают наибольшие значения.

Для обнаружения NH₃, O₃, C₂H₄, C₆H₆ основными мешающими газами являются H₂O и CO₂. Единственным газом из четырех оставшихся, который может быть обнаружен на уровне фонового содержания, является C₂H₄ (переход 10P(14)). На переходах 10P(12) и 10P(16) значения обнаружимых концентраций C₂H₄ составляют (75,8÷196) ppbv и (51÷133) ppbv при влажности воздуха (3÷14) г/м³; для C₆H₆ можно указать переход 9P(30), на котором обнаружимые концентрации составляют (200÷438) ppbv.

Перейдем к сравнению полученных результатов с литературными данными. В [20] приводится описание оптико-акустической системы и даны величины достигнутой чувствительности по поглощению $\beta_{\Phi} = 8,42 \cdot 10^{-9} \text{см}^{-1}$. Однако реальная чувствительность будет ограничена присутствием в газовой смеси «мешающих» газов, H₂O, CO₂, а также аэрозольной компоненты.

Значения концентраций газов в ppm для $R = 0,05$, $\delta_y = \delta_n = 5\%$, $\delta_p = 10\%$,
 $\beta_\Phi = 10^{-2} \text{ км}^{-1}$; 1 - $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 3 \text{ г/м}^3$; 2 - $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 14 \text{ г/м}^3$

Переход	CO ₂		NH ₃		O ₃		C ₂ H ₄		C ₆ H ₆	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
9 R (30)	0,956+2	0,317+3	0,505-2	0,111-1	—	—	—	—	—	—
9 R (20)	0,541+2	0,186+3	—	—	—	—	—	—	—	—
9 P (10)	0,119+3	0,414+3	—	—	0,979-1	0,245+0	—	—	0,952+0	0,228+1
9 P (12)	0,884+2	0,240+3	—	—	0,451-1	0,890-1	—	—	0,100+1	0,184+1
9 P (14)	0,884+2	0,237+3	—	—	0,418-1	0,820-1	—	—	0,764+0	0,138+1
9 P (24)	0,743+2	0,252+3	—	—	—	—	—	—	0,987+0	0,203+1
9 P (26)	0,980+2	0,297+3	—	—	0,796-1	0,170+0	—	—	0,907+0	0,185+1
9 P (28)	0,144+3	0,454+3	—	—	0,549-1	0,136+0	—	—	0,439+0	0,101+1
9 P (30)	0,133+3	0,399+3	—	—	0,724-1	0,166+0	0,316+0	0,695+0	0,200+0	0,438+0
10 R (20)	0,290+3	0,134+4	—	—	—	—	—	—	—	—
10 R (18)	0,671+2	0,282+3	—	—	—	—	0,418+0	0,983+0	—	—
10 R (10)	0,776+2	0,326+3	—	—	—	—	0,235+0	0,584+0	—	—
10 R (8)	0,875+2	0,371+3	0,148+0	0,381+0	—	—	0,284+0	0,739+0	—	—
10 P (12)	0,862+2	0,351+3	—	—	—	—	0,758-1	0,196+0	—	—
10 P (14)	0,147+3	0,403+3	—	—	—	—	0,121-1	0,308-1	—	—
10 P (16)	0,932+2	0,363+3	—	—	—	—	0,510-1	0,133+0	—	—
10 P (30)	0,130+3	0,600+3	—	—	—	—	0,186+0	0,587+0	—	—
10 P (32)	0,155+3	0,713+3	0,179-1	0,585-1	—	—	0,214+0	0,706+0	—	—

В табл. 4 приведены ρ_{min}^p для 6 газов, рассчитанных при наличии двух основных мешающих газов — H₂O и CO₂ (6-й и 7-й столбцы) (влиянием остальных можно пренебречь) и в присутствии в исследуемом объеме атмосферного аэрозоля (4-й и 5-й столбцы). Для адекватного сопоставления результатов ρ_{min}^p мы использовали коэффициенты поглощения K из [20]. Поскольку в [20] не указана концентрация основного «мешающего» газа H₂O, то в табл. 4 даны ρ_{min}^p для $\rho_{\text{H}_2\text{O}}$, равного 3 и 14 г/м³. Видно, что ρ_{min}^a [20] практически для пяти газов (NH₃, O₃, C₂H₄, C₆H₆, O₂) попадают в интервал рассчитанных нами ρ_{min}^p при $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 3$ и 14 г/м³ и наличии аэрозольной компоненты (4-й и 5-й столбцы).

Таблица 4

Минимально-обнаружимые концентрации газов, $\delta_y = \delta_n = 5\%$, $\delta_p = 10\%$,
 $R = 0,05$, $\beta = \alpha_{\text{H}_2\text{O}} + \epsilon_{\text{CO}_2} + \beta_\Phi$, $\beta_\Phi = 10^{-3} \text{ км}^{-1}$

Газ	Линия ОКГ	K , см ⁻¹ × × атм ⁻¹ [20]	ρ_{min}^p , ppm*		ρ_{min}^p , ppm		ρ_{min}^a , ppm [20]
			$\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 3 \text{ г/м}^3$	$\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 14 \text{ г/м}^3$	$\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 3 \text{ г/м}^3$	$\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 14 \text{ г/м}^3$	
1	2	3	4	5	6	7	8
NH ₃	9 R (30)	75	0,453-2	0,104-1	0,305-2	0,895-2	0,110-1
O ₃	9 P (8)	12,7	0,326-1	0,703-1	0,229-1	0,605-1	0,665-1
C ₂ H ₄	10 P (14)	29,1	0,127-1	0,338-1	0,967-2	0,308-1	0,263-1
C ₆ H ₆	9 P (28)	2,0	0,204+0	0,529+0	0,144+0	0,468+0	0,423+0
SO ₂	9 R (30)	0,11	0,309+1	0,712+1	0,208+1	0,610+1	0,770+1
SF ₆	9 R (30)	563,5	0,603-3	0,139-2	0,405-3	0,119-2	0,150-2

* Значение ρ_{min}^p получены при $\beta^* = \beta + \alpha_a$, где α_a — аэрозольный коэффициент ослабления, взятый из [18].

В [9] приводятся предельно-обнаружимые концентрации газов, определенные из соотношения $\rho_{\min}^p [9] = \beta_{\phi}/K$, где ρ_{\min}^p — эксперимент; β_{ϕ} — фоновый коэффициент поглощения. Значения β_{ϕ} , измеренные авторами [9] для синтетического воздуха (N_2+O_2) составили $(1\div 3) \cdot 10^{-8} \text{ см}^{-1}$. В табл. 5 представлены рассчитанные нами ρ_{\min}^p в сравнении с данными [9]. Расчеты сигналов проводились для следующих параметров: $M_{\eta}/y_0 = 3,5 \text{ В} \cdot \text{см}/\text{Вт}$ [9], $\beta = \beta_{\phi} = 10^{-3}$, $3 \cdot 10^{-3} \text{ км}^{-1}$. В табл. 5 приводятся также коэффициенты поглощения K из [9], которые использовались для вычисления ρ_{\min}^p . Анализ данных табл. 5 показывает, что предельные возможности оптико-акустической системы [9] на самом деле выше (даже для высокоэффективного режима обнаружения ($R = 1\%$) $\rho_{\min}^p < \rho_{\min} [9]$).

Таблица 5

Предельно-обнаружимые концентрации газов в сравнении с данными [9], $\delta_y = \delta_{\eta} = 5\%$, $\delta_p = 10\%$, $\beta = \beta_{\phi}$

Газ	Переход	Длина волны, мкм	K , $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ [9]	$\rho_{\min}^p (R=1\%), \text{ppb}$		$\rho_{\min}^p (R=5\%), \text{ppb}$		$\rho_{\min}^p, \text{ppb}$ [9]
				$\beta_{\phi} = 1 \cdot 10^{-3}$	$\beta_{\phi} = 3 \cdot 10^{-3}$	$\beta_{\phi} = 1 \cdot 10^{-3}$	$\beta_{\phi} = 3 \cdot 10^{-3}$	
C_2H_4	10 P (14)	10,532	32,6	0,15	0,44	0,08	0,25	0,7
H_2O	10 R (20)	10,246	$7,96 \cdot 10^{-4}$	$6,05 \cdot 10^3$	$1,82 \cdot 10^4$	$3,50 \cdot 10^3$	$1,07 \cdot 10^4$	$2,0 \cdot 10^4$
C_3H_6	9 P (22)	9,569	7,54	0,64	1,92	0,36	1,11	2,7
C_3H_3Cl	10 P (22)	10,611	7,29	0,66	1,98	0,38	1,14	2,6
C_6H_6	9 P (30)	9,639	1,81	2,66	7,99	1,53	4,61	10,0
C_7H_8	9 P (36)	9,695	1,13	4,26	12,8	2,45	7,38	20,0
CH_3OH	9 P (34)	9,676	18,1	0,27	0,79	0,15	0,46	1,4
C_2H_5OH	9 R (26)	9,239	3,77	1,18	3,83	0,73	2,21	6,0

Выводы

Предложенный алгоритм позволяет выбирать информативные для целей ОА-газоанализа длины волн. Результаты моделирования не противоречат физической природе решаемой задачи: наиболее информативными в ОАП-методе измерения концентраций газов являются спектральные участки с наибольшими величинами коэффициентов поглощения. Однако выбор длины волны с наибольшим коэффициентом поглощения еще не является достаточным условием обнаружения газа в эксперименте. Алгоритм позволяет определить условия эксперимента, при которых газ может быть обнаружен: концентрации «мешающих» газов β , точность измерения сигналов σ_y , диапазон обнаружимой концентрации измеряемого газа.

Выполненный численный эксперимент показал, что минимально-детектируемый с риском 5% коэффициент поглощения исследуемого газа α_l составляет $\sim 0,3 (\beta_m + \beta_{\phi})$ при $\delta_y = \delta_{\eta} = 5\%$, $\delta_p = 10\%$, где β_m — объемный коэффициент «мешающих» газов, β_{ϕ} — коэффициент фонового поглощения.

Авторы выражают благодарность Г.Н. Глазову и С.Д. Творогову за плодотворную дискуссию на начальном этапе этой работы и Б.Г. Агееву за консультации по методике измерений концентраций газов с помощью ОАД.

1. Антипов А. Б. Оптико-акустический метод в лазерной спектроскопии // Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Томск, 1980. 179 с.
2. Катаев М. Ю., Мицель А. А. // Автотметрия, 1985. № 4. С. 15–20.
3. Катаев М. Ю., Мицель А. А. // Тезисы докладов 8 Всесоюз. симпозиума по лазерному и акустическому зондированию атмосферы. Томск: ИОА СО АН СССР, 1984. Ч. 1. С. 331–333.
4. Катаев М. Ю., Мицель А. А., Тинчурин Э. Г. // Изв. вузов. Физика. Деп. в ВИНТИ. Рег. № 4063-85.
5. Глазов Г. Н., Дубягин В. М. // Оптико-метеорологические исследования земной атмосферы. Новосибирск: Наука, 1987. С. 119–131.
6. Дубягин В. М. // Там же. С. 131–137.
7. Левин Б. Р. Теоретические основы статистической радиотехники. Кн. 2. М.: Сов. радио, 1975. 392 с.
8. Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. М.: Наука, 1979. 368 с.
9. Mayer P. L., Sigrist M. W. Air-pollution monitoring with a mobile CO_2 -laser photoacoustic system. Final Report SNFINFP 14. Project NO 4.684.0.83.14 CH-8093. Zurich. Switzerland. 1988.
10. Мицель А. А., Руденко В. П. Пакет прикладных программ для расчета энергетических потерь оптического излучения в атмосфере LARA (версия 1988). Томск: ТФ СО АН СССР. 1988. 55 с. (Препринт/ИОА СО АН СССР, № 57).

11. Rothman L. S. et al. // *Appl. Opt.* 1983. V. 22. № 15. P. 2247–2256.
12. Mayer A. et al. // *Appl. Opt.* 1978. V. 17. № 3. P. 391–393.
13. Patty R. et al. // *Appl. Opt.* 1974. V. 13. № 12. P. 2850–2854.
14. Robinson J. et al. // *J. Spectr. Lett.* 1973. № 6(9). P. 569–583.
15. Хмельницкий Г. С. Зондирование газов в атмосфере по молекулярному поглощению излучения перестраиваемого CO₂-лазера. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Томск, 1979. 241 с.
16. Anderson G. P., Clough S. A., Kneuzys F. X. et al. AFGL Atmospheric Consistent Profiles (0–120 km). AFGL-TR-86-0110. Hanscom AFB, MA 01731. 1986.
17. Арефьев В. Н. // *Квантовая электроника.* 1985. Т. 12. № 3. С. 631–634.
18. Креков Г. М., Рахимов Р. Ф. Оптические модели атмосферного аэрозоля. Томск: ТФ СО АН СССР, 1986. 294 с.
19. Жаров В. П., Летохов В. С. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия. М.: Наука, 1984.
20. Adamowicz R. F., Koop K. P. // *Appl. Opt.* 1979. V. 18. № 17. P. 2398–2946.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,
Томск

Поступила в редакцию
16 марта 1990 г.

M. Yu. Kataev, A. A. Mitsel, S. R. Tarasova. Selection of Spectral Intervals Informative in the Gaseous Analysis with an Optoacoustic Detector.

An algorithm for selection of informative spectral intervals for optoacoustic gas analyzer is discussed. The algorithm uses the Bayes risk. Spectral intervals optimal for detecting different gas components in the range of CO₂-laser emission are determined in the paper. The results obtained in this paper are compared with the literature data.