М.Л.Белов, В.А.Городничев, В.И.Козинцев
НИИ радиоэлектроники и лазерной техники, г.Москва
Ю.В.Федотов
Московский технический университета им. Н.Э.Баумана

УДК 621.378:551.508

ВЫБОР СПЕКТРАЛЬНЫХ КАНАЛОВ ИЗМЕРЕНИЯ ДЛЯ КОНТРОЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ АТМОСФЕРЫ

Статья посвящена выбору спектральных каналов измерения для лазерного газоанализатора, предназначенного для контроля газовых загрязнителей атмосферы. Авторами предложена методика выбора спектральных каналов измерения, качественно учитывающая все основные факторы, влияющие на работу газоанализатора, и более предпочтительная с точки зрения оперативности анализа.

This paper is dedicated to the selection of analytical wavelengths for laser gasanalyzer, for atmospheric pollution monitoring. The developed technique has been shown to qualitatively take into account all basic factors that influence on the gas-analyzer and to be efficiency preferable.

Определение оптимального набора спектральных каналов измерения (НСКИ) для лазерного газоанализатора является сложной и неоднозначной задачей, особенно при оперативном анализе многокомпонентных смесей. Под оптимальным НСКИ в большинстве случаев понимается такой, при использовании которого в данных условиях ошибки измерения (восстановления по данным измерений) концентраций компонентов анализируемой смеси наименьшие. Для решения задачи определения НСКИ необходима разработка аналитического критерия поиска набора, а также программного обеспечения, позволяющего производить этот поиск оперативно и согласно выбранному критерию.

Будем считать, что качественный состав газовой смеси известен либо на основе некоторых априорных данных, либо в результате дополнительных предварительных исследований.

Если компоненты смеси характеризуются индивидуальными разделенными полосами поглощения, то концентрации газов многокомпонентной смеси легко вычисляются аналогично концентрациям однокомпонентных смесей. Если полосы поглощения компонентов смеси перекрываются, то для восстановления концентраций газов необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений лазерного газоанализа (в случае, когда ширина лазерных линий много меньше спектральной ширины линий поглощения газов).

В матричном виде система уравнений лазерного газоанализа имеет вид

$$KC + A = Y$$

где K – матрица коэффициентов поглощения k_i^j C вектор-столбец неизвестных концентраций c_i компонентов смеси; A – вектор-столбец неизвестных коэффициентов неселективного поглощения α_j; Y – вектор столбец значений измеряемого сигнала y_j.

Как правило, коэффициенты неселективного поглощения слабо зависят от длины волны и для устранения их влияния используется режим дифференциального поглощения. При этом измерение проводится в $M = 2N$ спектральных каналах (здесь N – число компонентов газовой смеси), соответствующих анализируемым компонентам смеси. Спектральные каналы измерения выбираются попарно, и так, чтобы спектральные каналы пары находились близко друг от друга (тогда коэффициенты неселективного

поглощения в каждой паре каналов можно считать одинаковыми) и чтобы коэффициент поглощения соответствующего анализируемого компонента изменялся существенно. Таким образом, вычитая уравнения, соответствующие каждой паре спектральных каналов друг из друга, можно устранить влияние неселективного поглощения. В результате получается система разностных уравнений

$$\Delta K C = \Delta Y$$

где ΔK – матрица разностей коэффициентов поглощения Δk_i^j ΔY – вектор столбец разностей измеряемого сигнала Δy_j

Выбор спектральных каналов измерения существенно влияет на точность определения концентраций компонентов смеси.

Выбор НСКИ может быть осуществлен оператором вручную. Однако для многокомпонентных смесей, состоящих из веществ с перекрывающимися между собой спектрами, такой выбор становится проблематичным и неоднозначным.

В настоящее время существует большое число различных критериев и алгоритмов автоматизированного выбора НСКИ для задач количественного анализа многокомпонентных смесей. Однако в большинстве случаев они не годятся для газоанализа с использованием режима дифференциального поглощения. Это связано с большими затратами времени при использовании известных критериев, и с тем, что лазерный газоанализатор, работающий в режиме дифференциального поглощения, обладает рядом особенностей, которые необходимо учитывать при выборе оптимального НСКИ.

Для корректного выбора НСКИ для лазерного газоанализатора, работающего в режиме дифференциального поглощения, на основе описанных в литературе критериев, необходимо их модифицировать, чтобы оперировать уже с парами спектральных каналов, а не с отдельными спектральными каналами (как в известных критериях). Необходимо также учесть, что элементы матрицы ΔK и элементы вектора ΔY в общем случае могут быть как отрицательными, так и положительными, что может быть недопустимо для известных критериев автоматизированного выбора оптимального НСКИ. Еще одной особенностью лазерного газоанализатора является разный уровень дисперсии шумов в спектральных каналах измерения. Кроме того, для обработки результатов измерений для многокомпонентных смесей необходимы специальные методы, позволяющие получать устойчивые решения при наличии шумов в спектральных каналах измерения и относительно плохой обусловленности системы уравнений. Большинство же известных критериев разрабатывалось с учетом того, что системы уравнений лазерного газоанализа решаются с помощью метода наименьших квадратов.

Для лазерного газоанализатора, работающего в режиме дифференциального поглощения, при выборе оптимального НСКИ эффективны следующие модифицированные критерии: D- и Ф-критерии, минимизирующие погрешность восстановления концентраций анализируемой смеси, и критерий, основанный на минимизации числа обусловленности, позволяющий минимизировать максимально возможную относительную ошибку восстановления концентраций компонентов смеси. Однако использование этих критериев требует достаточно большого объема вычислений.

Одним из факторов, определяющих эффективность методики выбора спектральных каналов измерения (особенно при оперативном газоанализе), является время вычислений. Применение генетического алгоритма позволяет его существенно сократить. Наиболее оперативный выбор оптимального НСКИ осуществляется с помощью критериев, не требующих перебора всех возможных сочетаний спектральных каналов измерения.

Более перспективно построение для лазерного газоанализатора, работающего в режиме дифференциального поглощения, некоего эвристического критерия и алгоритма выбора НСКИ, учитывающего все необходимые факторы и позволяющего производить поиск НСКИ с высокой оперативностью.

Авторами разработана инженерная методика поиска оптимального НСКИ по критерию, не требующему полного перебора всех возможных вариантов. Эта методика учитывает все основные факторы и требует небольшого объема вычислений.

На первом этапе для каждого газа проводится поиск пар спектральных каналов измерения. Для каждого возможного спектрального канала с номером j_{on} (принимаемого за канал с бóльшим значением поглощения анализируемого компонента), выбирается из некой ограниченной по длине волны области второй спектральный канал с номером j_{off} (принимаемый за канал с малым значением поглощения анализируемого компонента), максимизирующий параметр стоимости F:

$$F(i, j_{on}, j_{off}) = (1-\beta)\left[W_0^{j_{on}} k^i_{j_{on}} - k^i_{j_{off}} / W_0^{j_{off}}\right] -$$

$$-\beta\left(\sum_{l\neq i}^{N}\left[W_0^{j_{on}} k^l_{j_{on}} + W_0^{j_{off}} k^l_{j_{off}}\right] +\right.$$

$$\left.+\sum_{l\neq i}^{N}\left[W_0^{j_{on}} k^l_{j_{on}} - W_0^{j_{off}} k^l_{j_{off}}\right]\right),$$

где i – номер анализируемого газового компонента; N – число компонентов в смеси; j_{on}, j_{off} – номера длин волн пары соответственно с максимальным и минимальным значением коэффициента поглощения W i-го анализируемого компонента, k^i_j коэффициент поглощения i-го компонента на j-й длине волны; β – коэффициент учета влияния «помехи» от других газов в смеси.

Затем отобранные пары ранжируются отдельно для каждого газа в соответствии с параметром стоимости F

На следующем этапе для анализируемой смеси выбирается такой набор пар длин волн, для которых параметр F максимален, при условии, что длины волн в наборе спектральных каналов измерения используются по одному разу. Объем вычислений по этой методике небольшой, даже при решении задач большой размерности. Это достигается за счет вычисления параметра оптимизации не для всего набора длин волн, а отдельно для каждой исследуемой пары.