УДК 621.378:551.508

Л. Н. Еременко, М. Л. Белов,
В. И. Алехнович, В. А. Городничев

МЕТОД БАЙЕСОВСКИХ ОЦЕНОК В ЗАДАЧЕ ЛАЗЕРНОГО ОПТИКО-АКУСТИЧЕСКОГО ГАЗОАНАЛИЗА

Описаны процедуры обработки сигналов, основанные на методе байесовских оценок решения задачи восстановления концентраций газов при лазерном оптико-акустическом газоанализе. Приведены результаты обработки экспериментальных данных. Показано, что использование метода байесовских оценок позволяет эффективно решать задачу восстановления концентраций газов как для мало-, так и для многокомпонентных газовых смесей даже в случае газов, имеющих гладкий спектр поглощения без заметных максимумов.

E-mail: ekomonit@bmstu.ru

Ключевые слова: *лазер, оптико-акустика, газоанализ, байесовские оценки.*

Лазерные методы являются наиболее перспективными для оперативного локального газоанализа [1—3]. Одной из проблем, возникающих при этом, является необходимость применения специальных алгоритмов обработки для определения концентраций газов при многокомпонентном газоанализе.

Для определения концентраций газов в многокомпонентных смесях используется метод регуляризации Тихонова с применением различных способов (как детерминистических, так и статистических) выбора параметра регуляризации или метод поиска квазирешений [3]. Однако оба этих метода не позволяют восстановить концентрацию газового компонента смеси, имеющего для выбранных спектральных каналов измерения гладкий спектр поглощения без заметных максимумов. Кроме того, метод поиска квазирешений требует большого объема вычислений (даже при таком эффективном методе подбора решений, как генетический метод [3]).

Данная работа посвящена методу определения концентраций газов в многокомпонентных смесях, основанному на построении байесовской оценки решения. Описывается процедура построения байесовской оценки, приводятся результаты обработки данных измерений лазерного оптико-акустического газоанализатора (ЛОАГ) и сравнение методов регуляризации Тихонова и поиска квазирешений.

Задача определения концентраций газов по результатам многоспектральных измерений ЛОАГ для узкополосного лазерного источника сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений [2, 3] вида

$$k_a(\lambda_1)+\sum_j^K n_j K_j(\lambda_1)=y(\lambda_1);$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \qquad (1)$$

$$k_a(\lambda_M)+\sum_j^K n_j K_j(\lambda_M)=y(\lambda_M),$$

где $k_a(\lambda_i)$ — коэффициент неселективного поглощения на длине волны λ_i; K — полное число газовых компонент в анализируемой смеси; n_j — концентрация *j*-й газовой компоненты смеси; $K_j(\lambda_i)$ — коэффициент поглощения *j*-й газовой компоненты смеси на длине волны λ_i; M — число спектральных каналов; $y(\lambda_i)$ — приведенный измеряемый сигнал на длине волны λ_i. Неизвестными величинами в системе уравнений (1) являются n_j и $k_a(\lambda_i)$.

В матричной форме система уравнений (1) [3] имеет вид

$$W\mathbf{x}=\mathbf{k}_a+K\mathbf{n}=\mathbf{y}, \qquad (2)$$

где W — матрица системы (1); $\mathbf{x}$ — искомый вектор (компоненты этого вектора соответствуют концентрациям газов); $\mathbf{k}_a$ — векторы коэффициентов неселективного поглощения; K — матрица коэффициентов поглощения компонентов газовой смеси; $\mathbf{n}$ — вектор концентраций газов; $\mathbf{y}$ — вектор правых частей системы уравнений (1).

Значения $k_a(\lambda_i)$ слабо зависят от длины волны. Поэтому обычно для устранения влияния неселективного поглощения используют режим дифференциального поглощения и считают, что если спектральные каналы измерений выбраны попарно достаточно близко, то для каждой пары каналов коэффициенты k_a можно принять равными константе. В этом случае из M спектральных каналов, необходимых для контроля газовой смеси, информация $M/2$ каналов требуется для определения коэффициентов k_a. Вычитая попарно уравнения [3], получаем следующее матричное уравнение:

$$\Delta K\mathbf{n}=\Delta\mathbf{y}, \qquad (3)$$

где $\Delta\mathbf{y}$ — K-мерный вектор с разностями приведенных сигналов $\Delta y_i = \Delta y(\lambda_i)=y(\lambda_{2i-1})-y(\lambda_{2i})$; ΔK — матрица размерностью $K\times K$ с разностями коэффициентов поглощения $\Delta K_{ji} = \Delta K_j(\lambda_i) = K_j(\lambda_{2i-1}) - K_j(\lambda_{2i})$.

Трудность решения системы уравнений (3) заключается в том, что правая часть уравнения всегда известна со случайной ошибкой, обусловленной погрешностями измерения, шумами аппаратуры и т. п. Таким образом, в уравнении (3) вместо $\Delta\mathbf{y}$ запишем

$$\Delta\tilde{\mathbf{y}} = \Delta\mathbf{y} + \boldsymbol{\xi}, \tag{4}$$

где $\boldsymbol{\xi}$ — K-мерный вектор шума (погрешностей измерения $\Delta\mathbf{y}$).

В условиях шумов измерения обратный оператор для системы уравнений (3) не обладает свойством устойчивости и малые вариации данных измерений приводят к большим вариациям искомых величин. Выходом из этой ситуации является привнесение в процедуру обработки сигналов дополнительной априорной информации об искомых функциях и построение оценок решений [4, 5].

Существующие методы построения оценок можно разделить на два класса [4]. К первому классу относятся методы, для которых характерно использование так называемой функции потерь. Оценки, полученные этими методами, минимизируют принятую функцию потерь. Второй класс объединяет методы построения оценок, которые максимизируют апостериорную плотность вероятности.

При построении оценки $\tilde{n}$ вектора $\mathbf{n}$ на основе минимизации функции потерь для характеристики качества оценки вводят функцию потерь $\Pi(n, \tilde{n})$. Так как вектор измеряемых сигналов $\Delta\mathbf{y}$ является случайным, то оценка $\tilde{n}$ и значение функции потерь будут случайными величинами. Поэтому мерой качества построенной оценки может служить усредненное значение потерь. Вводят [4] понятие среднего риска

$$R_{\text{ср}} = \int p(n) \int \Pi(n, \mathbf{n}) p(\Delta\mathbf{y} | n) d\Delta\mathbf{y} dn, \tag{5}$$

где $p(n)$ — априорная плотность вероятности оцениваемого вектора $\mathbf{n}$; $p(\Delta\mathbf{y} | n)$ — плотность вероятности вектора $\Delta\mathbf{y}$ при фиксированном векторе $\mathbf{n}$.

Оценка, обеспечивающая минимум среднего риска, называется байесовской оценкой.

Большую роль при построении оценок играет так называемая апостериорная плотность вероятности $p(n | \Delta\tilde{y})$ оцениваемого вектора $\mathbf{n}$. Она определяет вероятность появления вектора $\mathbf{n}$ при фиксированном векторе $\Delta\mathbf{y}$. Если априорное распределение $p(n)$ задано, но нельзя задать или отдать предпочтение какой-либо функции потерь, то оценка решения определяется из условия максимума апостериорной плотности вероятности $p(n|\Delta\mathbf{y})$. Если апостериорная плотность вероятности $p(n|\Delta\mathbf{y})$ унимодальна и симметрична, то полученная (из условия максимума апостериорной плотности вероятности) оценка одновременно является байесовской оценкой.

Построение байесовской оценки для K-мерного вектора концентраций газов $\mathbf{n}$ будем проводить при следующих предположениях.

1. Шум измерения ξ подчиняется нормальному распределению, некоррелирован с $\Delta\mathbf{y}$ и имеет нулевое среднее значение и корреляционную матрицу V_ξ.

2. Априорное распределение искомого вектора $\mathbf{n}$ также является нормальным со средним значением n_0 и корреляционной матрицей N_0.

3. Матрицы V_ξ и N_0. обратимы.

При сделанных предположениях [4] апостериорное распределение $p(n|\Delta\tilde{y})$ также является нормальным и байесовская оценка $n_б$ вектора $\mathbf{n}$ совпадает с оценкой, определяемой из максимума апостериорной плотности вероятности, и находится из следующего уравнения:

$$(N_0^{-1} + \Delta K^{\mathrm{т}} V_\xi^{-1} \Delta K)\mathbf{n}_б = \Delta K^{\mathrm{т}} V_\xi^{-1} \Delta\mathbf{y} + N_0^{-1}\mathbf{n}_0. \qquad (6)$$

Здесь верхний индекс «т» означает транспонированную матрицу, верхний индекс «–1» — обратную матрицу.

Матрица системы уравнений (6) размерностью $K \times K$ положительно определена, и поэтому для любого вектора $\Delta\mathbf{y}$ существует единственная байесовская оценка $n_б$ [4].

Отметим, что устойчивость полученного решения достигается сужением класса возможных решений, и это сужение основано на априорной информации об искомом решении. В качестве априорной информации здесь задается априорное нормальное распределение искомого решения и два его первых момента. Такая априорная информация может быть вполне доступна при решении многих задач, например, при рутинном газоанализе.

Для проверки работоспособности метода байесовских оценок проводили обработку данных измерений ЛОАГ (ЛОАГ на основе перестраиваемого CO_2-лазера низкого давления и нерезонансной измерительной ячейки описан в работе [3]) для газовых смесей с числом компонентов от трех до шести.

При обработке данных измерений корреляционные матрицы V_ξ и N_0 задавали [4] в виде

$$V_\xi = \begin{pmatrix} \sigma_{1\xi}^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_{2\xi}^2 & \dots & 0 \\ . & . & . & . \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{K\xi}^2 \end{pmatrix}; \quad N_0 = \begin{pmatrix} \sigma_{1n}^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_{2n}^2 & \dots & 0 \\ . & . & . & . \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{Kn}^2 \end{pmatrix},$$

где σ_{jn}^2 — дисперсия возможных изменений концентрации j-й газовой компоненты смеси; $\sigma_{i\xi}^2$ — дисперсия шума измерения в i-м спектральном канале.

На рис. 1 приведены результаты определения концентраций газов (кроме углекислого газа) в шестикомпонентной смеси, где 1 — ошибки, полученные при использовании прямого решения уравнения (3); 2 — ошибки байесовской оценки концентраций, найденных из уравнения (6); 3, 4 — ошибки определения концентраций газов, полученные при использовании метода квазирешений и метода регуляризации Тихонова (параметр регуляризации определялся методом невязки) [3]. Ошибки δ, %, определяли как модуль разности между найденным и действительным значениями концентраций, деленный на действительное значение. При построении байесовской оценки для всех компонентов смеси относительные среднеквадратические значения возможных изменений концентраций задавали равными 80 %, а средние значения концентраций — большими или меньшими действительных значений на 30 %.

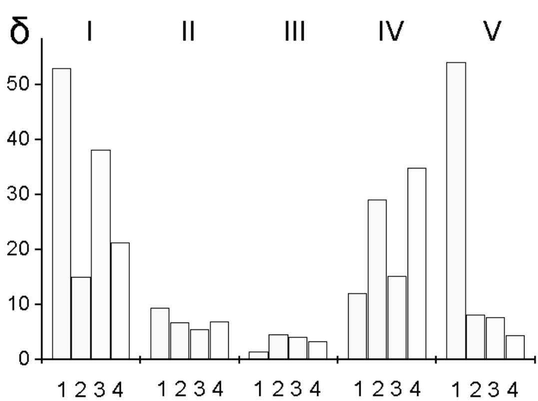

Рис. 1. Ошибки определения концентраций газов в шестикомпонентной смеси:
I — этилен; II —аммиак; III — метанол; IV — этанол; V — изопропанол (углекислый газ на рис. не приведен)

Действительные значения концентраций контролировали по результатам измерения парциальных давлений газов при заполнении оптико-акустической кюветы. В экспериментах для шестикомпонентной смеси использовали спектральные каналы измерения 10P20-10P14, 10R12-10R30, 9P42-9P40, 9P34-9P32, 9R10-9R18, 9R12-9R16.

Видно, что для пяти газов смеси (имеющих пики поглощения в используемых спектральных каналах измерения) ошибки методов определения байесовской оценки, квазирешения и метода регуляризации Тихонова примерно одинаковые и для всех компонентов смеси имеют приемлемые значения. Ошибки, полученные при использовании прямого решения уравнения (3) для трех компонентов смеси имеют приемлемые значения, а для двух очень велики (более 50 %). Отметим, что для трехкомпонентной смеси ошибки определения концентрации этилена и аммиака всеми методами примерно одинаковые и небольшие — не более 1…2 %.

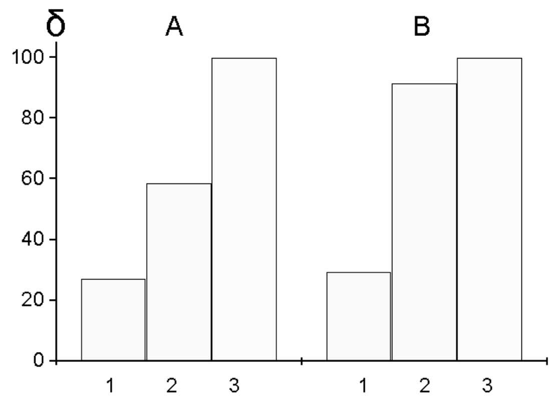

Рис. 2. Ошибки определения концентрации углекислого газа в трех- и шестикомпонентной смесях

На рис. 2 приведены ошибки δ, %, определения концентрации углекислого газа (не имеющего пика поглощения в используемых спектральных каналах измерения) в трех (A)- и шести (B)-компонентной смеси, где 1 — ошибки байесовской оценки концентраций, определенной из уравнения (6); 2, 3 — ошибки оценки концентраций газов, полученные при использовании метода квазирешений и метода регуляризации Тихонова. Ошибки, полученные при использовании решения уравнения (3) на рис. 2 не показаны, так они очень велики (тысячи процентов). Видно, что метод байесовских оценок позволяет с приемлемой точность определять концентрацию газа даже в том случае, когда газовая компонента смеси имеет гладкий спектр поглощения без заметных максимумов (как в случае углекислого газа в проведенном эксперименте).

Таким образом, использование метода байесовских оценок позволяет эффективно решать задачу восстановления концентраций газов как для мало-, так и для многокомпонентных газовых смесей даже в случае газов, имеющих гладкий спектр поглощения без заметных максимумов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пономарев Ю. Н. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия атмосферы // Оптика атмосферы и океана. 1995. Т. 8. № 1, 2. С. 224–241.
2. Исследование погрешностей лазерного оптико-акустического газоанализатора / М. Зигрист, М. Ю. Катаев, А. А. Мицель и др. // Оптика атмосферы и океана. 1994. Т. 7. № 11, 12. С. 1471–1477.
3. Белов М. Л., Городничев В. А., Козинцев В. И., Федотов Ю. В. Лазерный оптико-акустический анализ многокомпонентных газовых смесей. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. 352 с.
4. Воскобойников Ю. Э., Преображенский Н. Г., Седельников А. Н. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1984. 238 с.
5. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.

Статья поступила в редакцию 26.09.2012.