УДК 621.378:551.508

М. Л. Белов, Л. Н. Еременко,
В. И. Козинцев, Ю. В. Федотов

МЕТОД БАЙЕСОВСКИХ ОЦЕНОК В ЗАДАЧЕ ЛАЗЕРНОГО ГАЗОАНАЛИЗА

Рассмотрена задача определения концентраций газов из многоспектральных лазерных измерений. Описаны процедуры обработки сигналов, основанные на методе байесовских оценок решения системы уравнений лазерного газоанализа. Показано, что использование метода байесовских оценок решения обеспечивает достаточно низкий уровень ошибок определения концентраций газов даже при значительном шуме измерения и искаженной матрице коэффициентов поглощения.

Лазерные методы являются наиболее перспективными для оперативного дистанционного и локального газоанализа [1]. Одной из проблем, возникающих при использовании лазерных методов, является необходимость применения специальных алгоритмов обработки для определения концентраций газов при многокомпонентном (с числом компонент в газовой смеси более пяти) газоанализе [2–5].

Для решения задачи определения концентраций газов в многокомпонентных смесях может быть эффективно использован метод регуляризации Тихонова с применением различных способов (как детерминистических, так и статистических) выбора параметра регуляризации или метод поиска квазирешений (см., например, [6]). Однако оба метода имеют недостатки.

1. Метод регуляризации Тихонова при решении системы линейных алгебраических уравнений лазерного газоанализа для малокомпонентной (с числом компонент менее пяти) смеси дает ошибки при определении концентраций газов, как правило, существенно большие, чем соответствующие ошибки при использовании стандартных методов решения системы линейных алгебраических уравнений.

2. Метод поиска квазирешений свободен от указанного недостатка. Однако он требует большого объема вычислений даже при таком эффективном методе подбора решений, как генетический метод (см., например, [6]).

Настоящая статья посвящена перспективному для задач газоанализа (и свободному от указанных недостатков) методу, основанному на построении байесовской оценки решения. Описана процедура построения байесовской оценки для задачи определения концентраций газовых компонент по многоспектральным лазерным измерениям и приведены результаты математического моделирования определения концентраций газовых компонент данным методом.

Задача нахождения концентраций газов по результатам многоспектральных (дистанционных или локальных) лазерных измерений для узкополосного лазерного источника обычно сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений вида [5, 6] (если ширина лазерных линий излучения много меньше ширины линий поглощения анализируемых газов):

$$\begin{cases} K_a(\lambda_1) + \sum\limits_j^K N_j K_j(\lambda_1) = y(\lambda_1); \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ K_a(\lambda_M) + \sum\limits_j^K N_j K_j(\lambda_M) = y(\lambda_M), \end{cases} \tag{1}$$

где $y(\lambda_i)$ — приведенный измеряемый сигнал на длине волны λ_i (например, для оптико-акустического газоанализатора $y(\lambda_i) = \dfrac{U(\lambda_i)}{P_0(\lambda_i)k}$, где $U(\lambda_i)$ — сигнал, измеряемый оптико-акустическим детектором; $P_0(\lambda_i)$ — мощность излучения лазера; k — чувствительность оптико-акустического детектора); $K_a(\lambda_i)$ — коэффициент неселективного (фонового) поглощения на длине волны λ_i; $K_j(\lambda_i)$ — коэффициент поглощения j-й газовой компоненты смеси на длине волны λ_i; N_j — концентрация j-й газовой компоненты смеси; M — число спектральных каналов; K — полное число газовых компонент в анализируемой смеси.

Неизвестными величинами в системе уравнений (1) являются N_j и $K_a(\lambda_i)$.

В матричной форме систему уравнений (1) можно представить в виде [6]:

$$\mathbf{W}\vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{k}}_a + \mathbf{K}\vec{\mathbf{n}} = \vec{\mathbf{y}}, \tag{2}$$

где $\mathbf{W}$ — матрица системы (1) размера $M \times M$; $\vec{\mathbf{x}}$ — M-мерный искомый вектор (K компонент этого вектора соответствуют концентрациям газов); $\vec{\mathbf{k}}_a(\lambda_i)$ — M-мерный вектор коэффициентов неселективного поглощения; $\mathbf{K}$ — матрица коэффициентов поглощения компонент газовой смеси размерностью $M \times K$; $\vec{\mathbf{n}}$ — K-мерный вектор концентраций газов; $\vec{\mathbf{y}}$ — M-мерный вектор правых частей системы уравнений (1).

Величины $K_a(\lambda_i)$ 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 положить 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 уравнения для каждой пары друг из друга, приходим к следующему матричному уравнению [6]:

$$\Delta\mathbf{K} \cdot \vec{\mathbf{n}} = \Delta\vec{\mathbf{y}}, \tag{3}$$

где $\Delta\vec{\mathbf{y}}$ — K-мерный вектор с разностями приведенных сигналов $\Delta y_i = \Delta y(\lambda_i) = y(\lambda_{2i-1}) - y(\lambda_{2i})$; $\Delta\mathbf{K}$ — матрица размера $K \times K$ 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 $\Delta\vec{\mathbf{y}}$ имеем

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

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

Возможны также ошибки в значениях коэффициентов поглощения газов, приводящие к искажению матрицы $\Delta\mathbf{K}$.

В этих условиях попытки непосредственно обратить систему уравнений (3) приводят к тому, что найденный обратный оператор 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 [7, 8].

Формально оценку $\vec{\tilde{\mathbf{n}}}$ вектора $\vec{\mathbf{n}}$ можно представить в виде

$$\vec{\tilde{\mathbf{n}}} = T(\Delta\vec{\tilde{\mathbf{y}}}),$$

где T — оператор, возможно нелинейный, определенный на пространстве векторов измерений.

Точность построенной оценки характеризуется вектором

$$\vec{\boldsymbol{\varepsilon}}(T) = \vec{\tilde{\mathbf{n}}} - \vec{\mathbf{n}},$$

определяющим величину ошибки оценивания.

Существующие методы построения оценок можно разделить на два класса [7]. К первому классу относятся методы, для которых характерно использование так называемой функции потерь. Оценки, полученные этими методами, минимизируют (в определенном смысле) принятую функцию потерь. Второй класс объединяет методы, использующие известную формулу Байеса, и оценки, полученные этими методами, максимизируют апостериорную плотность вероятности.

При построении оценок на основе минимизации функции потерь для характеристики качества построенной оценки вводят так называемую функцию потерь $\Pi(\vec{\mathbf{n}}, \tilde{\vec{\mathbf{n}}})$.

Вектор измеряемых сигналов $\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}$ является случайным, поэтому оценка $\tilde{\vec{\mathbf{n}}}$, а следовательно, и значение функции потерь будут случайными величинами. Мерой качества построенной оценки может служить усредненное значение потерь. Вводится понятие среднего риска [7]:

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

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

Оценка, доставляющая минимум среднему риску, называется байесовской оценкой.

Большую роль при построении байесовских оценок играет так называемая апостериорная плотность вероятности $p(\vec{\mathbf{n}} \left| \Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}\right.)$ оцениваемого вектора $\vec{\mathbf{n}}$. Она определяет вероятность появления вектора $\vec{\mathbf{n}}$ при фиксированном векторе измерений $\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}$. Из формулы Байеса (см., например, [9]) следует

$$p(\vec{\mathbf{n}} \left| \Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}\right.) = \frac{p(\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}\, |\vec{\mathbf{n}}) p(\vec{\mathbf{n}})}{p(\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}})},$$

где $p(\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}})$ — априорная плотность вероятности вектора $\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}$.

Тогда для $R_{\text{ср}}(T)$ имеем

$$R_{\text{ср}}(T) = \int p(\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}) \int \Pi(\vec{\mathbf{n}}, \tilde{\vec{\mathbf{n}}}) p(\vec{\mathbf{n}} \left| \Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}\right.) d\Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}} d\vec{\mathbf{n}}. \tag{6}$$

Минимум $R_{\text{ср}}(T)$ можно найти из выражения (6), минимизируя внутренний интеграл, так как только он зависит от алгоритма построения оценки решения.

Если априорное распределение $p(\vec{\mathbf{n}})$ задано, но нельзя задать функцию потерь или отдать предпочтение какой-либо из них, то оценка решения определяется из условия максимума апостериорной плотности вероятности $p(\vec{\mathbf{n}} \left| \Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}\right.)$. Если апостериорная плотность вероятности $p(\vec{\mathbf{n}} \left| \Delta\tilde{\vec{\mathbf{y}}}\right.)$ 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 $\vec{\mathbf{n}}$ будем проводить при следующих предположениях.

1. Шум измерения $\vec{\boldsymbol{\xi}}$ подчиняется нормальному распределению, некоррелирован с $\Delta\vec{\tilde{\mathbf{y}}}$ и имеет нулевое среднее значение и корреляционную матрицу $\mathbf{V}_\xi$.

2. Априорное распределение искомого вектора $\vec{\mathbf{n}}$ также является нормальным со средним значением $\vec{\mathbf{n}}_0$ и корреляционной матрицей $\mathbf{N}_0$.

3. Матрицы $\mathbf{V}_\xi$ и $\mathbf{N}_0$ обратимы.

При сделанных предположениях показано [7], что апостериорное распределение $p(\vec{\mathbf{n}}\,\Big|\,\Delta\vec{\tilde{\mathbf{y}}})$ также является нормальным и байесовская оценка $\vec{\mathbf{n}}_{\text{Б}}$ вектора $\vec{\mathbf{n}}$ совпадает с оценкой, определяемой из максимума апостериорной плотности вероятности, и находится из следующего уравнения:

$$(\mathbf{N}_0^{-1} + \Delta\mathbf{K}^{\text{т}}\mathbf{V}_\xi^{-1}\Delta\mathbf{K})\vec{\mathbf{n}}_{\text{Б}} = \Delta\mathbf{K}^{\text{т}}V_\xi^{-1}\Delta\vec{\tilde{\mathbf{y}}} + \mathbf{N}_0^{-1}\vec{\mathbf{n}}_0. \qquad (7)$$

Здесь верхний индекс "т" означает транспонирование матрицы, верхний индекс "–1" — обратную матрицу.

Матрица системы уравнений (7) размера $K \times K$ положительно определена, и поэтому для любого вектора $\Delta\vec{\tilde{\mathbf{y}}}$ существует единственная байесовская оценка $\vec{\mathbf{n}}_{\text{Б}}$ [7]. Уравнение (7) может быть получено и как первый шаг алгоритма калмановской фильтрации [7].

Отметим, что устойчивость полученного решения достигается сужением класса возможных решений и это сужение основывается на априорной информации об искомом решении. Однако в отличие от метода регуляризации Тихонова форма введения априорной информации здесь иная (задается априорное нормальное распределение искомого решения и его первые два момента).

Для проверки работоспособности метода байесовских оценок в задаче газоанализа и оценки точности определения этим методом концентраций газовых компонент проводилось математическое моделирование для газовых смесей с числом компонент от трех до шести.

Математическое моделирование проводилось по замкнутой схеме. По заданным значениям концентраций газов и коэффициентов поглощения рассчитывались приведенные измеряемые сигналы — правые части системы уравнений (1). Полученные значения искажались случайными числами для имитации шума измерения. Шум моделировался случайным процессом с нормальным законом распределения, нулевым средним значением и заданной дисперсией. Полученные случайные значения сигналов использовались для определения концентраций газов по "данным измерений". При математическом моделировании корреляционные матрицы $\mathbf{V}_\xi$ и $\mathbf{N}_0$ задавались в следующем виде [7]:

$$\mathbf{V}_\xi = \begin{pmatrix} \sigma^2_{1\xi} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \sigma^2_{2\xi} & \ldots & 0 \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ 0 & 0 & \ldots & \sigma^2_{K\xi} \end{pmatrix},$$

$\sigma^2_{i\xi}$ — дисперсия шума измерения в i-м спектральном канале;

$$\mathbf{N}_0 = \begin{pmatrix} \sigma^2_{1n} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \sigma^2_{2n} & \ldots & 0 \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ 0 & 0 & \ldots & \sigma^2_{Kn} \end{pmatrix},$$

σ^2_{in} — дисперсия случайных изменений вектора $\vec{n}$.

Результаты математического моделирования приведены на рис. 1, 2.

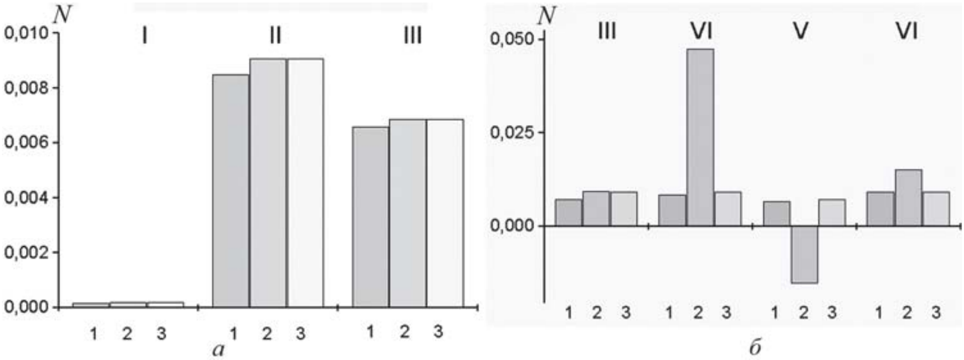

Рис. 1. Определение концентраций газовых компонент трехкомпонентной (*а*) и шестикомпонентной (*б*) смеси

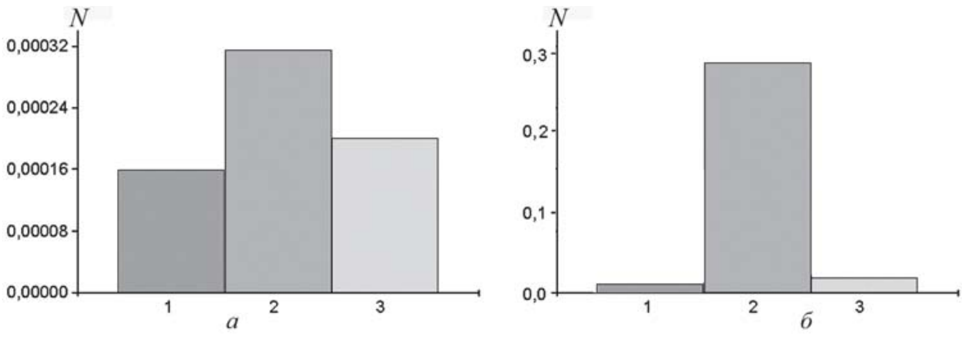

Рис. 2. Определение концентрации этилена (*а*) и углекислого газа (*б*) в шестикомпонентной смеси

На рис. 1, *а* приведены результаты определения концентраций газовых компонент в трехкомпонентной смеси этилен-метанол-этанол в случае относительного среднеквадратического значения шума измерения 3 % (шум измерения одинаков во всех спектральных каналах) и при неискаженной матрице коэффициентов поглощения газов (отсутствие ошибок в значениях коэффициентов поглощения газов, используемых при определении концентраций компонент из данных измерений). На рис. 1 обозначено: I — этилен, II — метанол, III — этанол; *1* — действительное (заданное при математическом моделировании) значение концентрации газа, *2* — значение концентрации, определенное из матричного уравнения (3), *3* — значение байесовской оценки концентрации, определенное из уравнения (7). Принималось, что относительное среднеквадратическое значение случайных изменений концентраций для всех компонент смеси равно 100 %, а средние значения концентраций компонент отличаются от действительных на 50. . . 100 %.

На рис. 1, *б* приведены результаты определения концентраций газовых компонент в шестикомпонентной смеси этилен-углекислый газ-аммиак-метанол-этанол-изопропанол в случае относительного среднеквадратического значения шума измерения 10 % и при неискаженной матрице коэффициентов поглощения газов (отсутствие ошибок в значениях коэффициентов поглощения газов, используемых при определении концентраций компонент их данных измерений). На рис. 1, *б* представлены концентрации аммиака (III), метанола (IV), этанола (V), изопропанола (VI). Принималось, что относительное среднеквадратическое значение случайных изменений концентраций для всех компонент смеси равно 100 %, а средние значения концентраций компонент отличаются от действительных на 50. . . 100 %. Обозначения столбцов на рис. 1, *б* те же, что и на рис. 1, *а*.

На рис. 2 приведены результаты определения концентраций этилена (*а*) и углекислого газа (*б*) в шестикомпонентной смеси этилен-углекислый газ-аммиак-метанол-этанол-изопропанол в случае среднеквадратического значения шума измерения 3 % и искаженной матрицы коэффициентов поглощения газов (считалось, что из-за ошибок в значениях коэффициентов поглощения газов один из элементов матрицы $\Delta\mathbf{K}$ меньше действительного на 5 % и эта искаженная матрица использовалась для определения концентраций компонент из данных измерений). Обозначения столбцов на рис. 3 те же, что и на рис. 1, *а*.

Из рисунков хорошо видно, что метод байесовских оценок позволяет с приемлемой точностью определять концентрации газов как в малокомпонентных, так и в многокомпонентных смесях в условиях больших ошибок измерения и искаженной матрицы коэффициентов поглощения газов. Хуже всех определена концентрация углекислого газа (порядка 50%), однако метод регуляризации Тихонова и метод квазирешений вообще не позволяют определить концентрацию углекислого газа в такой смеси [6].

Таким образом, в статье описаны процедуры обработки сигналов, основанные на методе байесовских оценок решения системы уравнений лазерного газоанализа. Показано, что использование метода байесовских оценок решения обеспечивает достаточно низкий уровень ошибок определения концентраций газов даже при значительном шуме измерения и искаженной матрице коэффициентов поглощения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Межерис Р. Лазерное дистанционное зондирование. – М.: Мир, 1987. – 550 с.
2. Макушкин Ю. С., Мицель А. А., Хмельницкий Г. С. Лазерная абсорбционная диагностика атмосферных газов // Журнал прикладной спектроскопии. – 1981. – Т. 35. – Вып. 5. – С. 785–790.
3. Иванов С. В., Панченко В. Я., Разумихина Т. Б. Лазерный газоанализ многокомпонентных смесей с перекрывающимися спектрами: теория и программа обработки экспериментальных данных // Оптика атмосферы и океана. – 1993. – Т. 6, № 8. – С. 1023–1029.
4. Пономарев Ю. Н. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия атмосферы // Оптика атмосферы и океана. – 1995. – Т. 8, № 1–2. – С. 224–241.
5. 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.
6. 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.
7. Воскобойников Ю. Э., Преображенский Н. Г., Седельников А. Н. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. – Новосибирск: Наука, 1984. – 238 с.
8. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979. – 288 с.
9. Справочник по теории вероятностей и математической статистике / В.С. Королюк, Н.И. Портенко, А.В. Скороход, А.Ф. Турбин. – М.: Наука, 1985. – 640 с.

Статья поступила в редакцию 2.10.2007

Михаил Леонидович Белов родился в 1950 г., окончил в 1973 г. Московский энергетический институт. Д-р. техн. наук, вед. науч. сотрудник НИИ радиоэлектроники и лазерной техники МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 150 научных работ в области лазерной локации и атмосферной оптики.

M.L.Belov (b.1950) graduated from the Moscow Energy Institute in 1973. D. Sc. (Eng.), head researcher of “Radioelectronics and Laser Technology” Research Institute of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 150 publications in the field of laser location and optic of atmosphere.

Валентин Иванович Козинцев родился в 1945 г., окончил в 1969 г. МВТУ им. Н.Э. Баумана. Д-р. техн. наук, зам. директора НИИ радиоэлектроники и лазерной техники МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 150 научных работ в области лазерной техники.

V.I. Kozintsev (b.1945) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical School in 1969. D. Sc. (Eng.), Deputy director of “Radioelectronics and Laser Technology” Research Institute of Moscow State Technical University n.a. Bauman. Author of more than 150 publications in the field of laser technology.

Людмила Николаевна Еременко родилась в 1957 г., окончила в 1980 г. МВТУ им. Н.Э. Баумана. Ассистент кафедры “Лазерные и оптико-электронные системы” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

L.N. Eremenko (b.1957) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical School in 1980. Assistant of “Laser and Optoelectronic Systems” department of the Bauman Moscow State Technical University.

Юрий Викторович Федотов родился в 1974 г., окончил в 1998 г. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Канд. техн. наук, научный сотрудник НИИ радиоэлектроники и лазерной техники МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 20 научных работ в области лазерной техники.

Yu.V. Fedotov (b.1974) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical University in 1998. Ph. D. (Eng.), researcher of “Radioelectronics and Laser Technology” Research Institute of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 20 publications in the field of laser technology.

КОНСТРУИРОВАНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ

УДК 621.88-192

Ф э н Л э й, Б. В. Б у к е т к и н,
А. Н. Ч е к а н о в

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТИ БЕССВИНЦОВЫХ ПРИПОЕВ

Рассмотрены основы расчетов механических параметров паяных соединений. Описана методика проведения эксперимента на растяжение. На основе экспериментальных данных исследовано влияние температуры пайки на предел прочности при растяжении паяных соединений.

С 1 июля 2006 г. свинец запрещен к использованию при производстве РЭА в ЕС, поэтому переход на бессвинцовую технологию пайки является главной проблемой изготовителей, которые направляют исследования на поиск оптимальных материалов для производства РЭА и соответствующей технологии.

Прочность паяных соединений при растяжении является одним из важных свойств используемых припоев.