

В. А. Городничев

## ВЫБОР МЕТОДА ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ЛАЗЕРНОГО ГАЗОАНАЛИЗА

*Рассмотрена задача восстановления концентраций газов по результатам лазерных измерений. Описана процедура выбора метода обработки результатов измерений с использованием числа обусловленности матрицы системы уравнений лазерного газоанализа. Показано, что при небольшом числе обусловленности (десятки и менее) для системы уравнений газоанализа можно использовать стандартные методы решения систем линейных алгебраических уравнений. При большой величине числа обусловленности (сотни и более) необходимо использовать методы решения некорректных математических задач.*

Охрана окружающей среды и, в том числе, атмосферы — одна из важнейших задач на сегодняшний день. Для экологического мониторинга атмосферы и оперативного контроля уровня вредных газовых загрязнителей, например, на производстве требуются быстродействующие, автоматизированные и недорогие приборы, позволяющие проводить анализ газовых смесей с высокой точностью. К одному из классов таких приборов относятся лазерные оптико-акустические газоанализаторы (ЛОАГ) [1–5].

Если задача определения качественного состава газовой смеси решена (она рассмотрена, например, в работах [6, 7]) или состав анализируемой газовой смеси заранее известен (например, при рутинном газоанализе), основной задачей обработки результатов измерений является восстановление количественной информации о концентрациях компонентов газовой смеси.

Задача восстановления концентрации газов  $N$ -компонентной смеси по данным измерений с помощью ЛОАГ (в случае, если ширина лазерных линий много меньше спектральной ширины линий поглощения газов) сводится к решению системы из  $M > N$  линейных алгебраических уравнений лазерного газоанализа вида [8]

$$\begin{aligned} k_1^1 c_1 + k_2^1 c_2 + \dots + k_N^1 c_N + \alpha_1 &= y_1, \\ k_1^2 c_1 + k_2^2 c_2 + \dots + k_N^2 c_N + \alpha_2 &= y_2, \\ &\dots \end{aligned} \quad (1)$$

$$k_1^M c_1 + k_2^M c_2 + \dots + k_N^M c_N + \alpha_M = y_M,$$

где  $k_i^j$  — коэффициент поглощения  $i$ -го компонента газовой смеси для  $j$ -го спектрального канала измерения;  $c_i$  — искомая концентрация



Для многокомпонентных смесей (с числом компонентов шесть и более) обратный оператор для систем уравнений (1)–(4) не обладает свойством устойчивости к малым изменениям правой части уравнения; матрица  $K$  (или  $\Delta K$ ) называется в таких случаях плохо обусловленной. Для плохо обусловленных матриц сколь угодно малые вариации результатов измерений могут привести к сколь угодно большим вариациям искомых величин концентраций газов (т.е. задача восстановления концентраций компонентов газовой смеси путем решения системы уравнений лазерного газоанализа является некорректной математической задачей [9]). В этом случае для восстановления концентраций газов по данным лазерных измерений используют различные методы решения некорректных математических задач, например метод регуляризации Тихонова с применением различных способов выбора параметра регуляризации [10–13], метод поиска квазирешений [14] или другие методы построения устойчивых решений обратных задач [15].

Использовать при любом количестве компонентов в газовой смеси методы решения некорректных математических задач не всегда приемлемо. Например, в случае малокомпонентной смеси при использовании метода регуляризации для решения системы линейных алгебраических уравнений лазерного газоанализа ошибки восстановления концентраций газов могут быть больше соответствующих ошибок при использовании стандартных методов решения системы линейных алгебраических уравнений. Кроме того, для выбора параметра регуляризации, как правило, необходимо использовать или априорную информацию (например, об уровне шумов измерения), или набор независимых измеренных сигналов (что нереально при контроле в режиме реального времени). Метод поиска квазирешений не только требует разработки специализированного сложного программного обеспечения, но и может приводить к необходимости большого объема вычислений (что может быть неприемлемо для оперативного газоанализа).

Таким образом, весьма желательно, особенно при оперативном газоанализе, проводить предварительную оценку возможности использования различных методов восстановления концентраций газов по данным лазерных измерений (и по возможности использовать стандартные методы решения системы линейных алгебраических уравнений).

Однако возможность использования того или иного метода определяется не только количеством компонентов, но и качественным составом смеси, выбранным набором спектральных каналов измерения, шумами измерения и качеством исходной информации о коэффициентах поглощения газов.

Для характеристики матрицы коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений предложены различные количественные характеристики, называемые числами обусловленности. Одной из таких характеристик является, например,  $N$ -число Тюринга [16]:

$$N = \frac{1}{n} \|K\| \|K^{-1}\|,$$

где

$$\|K\| = \sqrt{\sum_{i,j} |\kappa_{ij}^j|^2}$$

— матричная норма.

Числа обусловленности не дают исчерпывающей характеристики обусловленности матрицы, но они имеют вполне определенный вероятностный смысл. Так,  $N$ -число обусловленности показывает, во сколько раз отношение среднеквадратического значения ошибок неизвестных к среднеквадратическому значению самих неизвестных превосходит отношение среднеквадратического значения ошибок коэффициентов системы к среднеквадратическому значению самих коэффициентов.

В работе [17] для оценки влияния погрешности  $\Delta \vec{Y}$  задания правой части  $\vec{Y}$  на погрешность  $\Delta \vec{C}$  решения системы линейных алгебраических уравнений  $\vec{C}$  используют следующее неравенство:

$$\frac{\|\Delta \vec{C}\|}{\|\vec{C}\|} \leq \|K\| \|K^{-1}\| \frac{\|\Delta \vec{Y}\|}{\|\vec{Y}\|}, \quad (6)$$

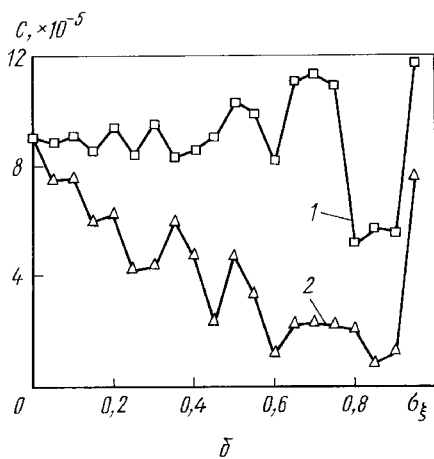
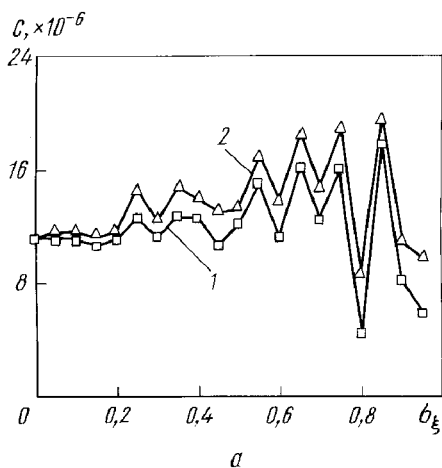
где  $\|\vec{C}\|$ ,  $\|K\|$  — норма вектора и матрицы соответственно.

Положительное число  $\|K\| \|K^{-1}\|$  называют числом обусловленности матрицы  $K$  и обозначают  $\text{cond}(K)$  [17].

Неравенство (6) показывает, что чем больше число обусловленности  $\text{cond}(K) = \|K\| \|K^{-1}\|$ , тем сильнее ошибка в исходных данных влияет на решение системы линейных уравнений.

На рис. 1 приведены результаты численного эксперимента по восстановлению концентраций компонентов газовых смесей исходя из результатов измерений. Шум измерения моделировался случайным процессом с нормальным законом распределения, нулевым средним значением и заданной дисперсией. Значения коэффициентов неселективного поглощения полагались равными нулю. На рис. 1 по оси ординат отложены восстановленные значения  $C$  концентрации компонентов газовой смеси, а по оси абсцисс  $\sigma_\varepsilon$  — среднеквадратическое относительное значение шума измерения.

Расчеты на рис. 1, а проведены для спектральных каналов измерения (линий генерации  $\text{CO}_2$ -лазера) 10P14, 10P22, 10P36 (на рисунке показаны результаты восстановления концентрации этилена), на рис. 1, б



**Рис. 1.** Восстановление концентрации этилена в двухкомпонентной газовой смеси этилен–фреон-12 (а) и в четырехкомпонентной газовой смеси аммиак–хлоропропен–этилен–трихлорэтилен (б):

1 — обычный метод решения системы линейных алгебраических уравнений (использовался гауссов метод исключения с частичным выбором ведущего элемента); 2 — метод регуляризации Тихонова (параметр регуляризации выбирался на основе принципа невязки)

— для спектральных каналов измерения 9P6, 9P20, 9P22, 9P26, 10R18, 10P6, 10P14, 10P20 (на рисунке показаны результаты восстановления концентрации аммиака).

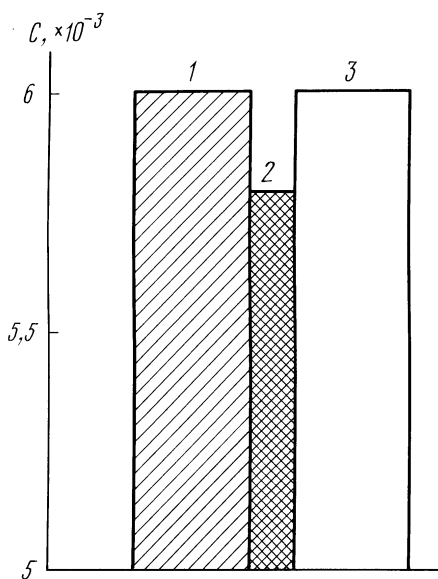
Числа обусловленности матриц коэффициентов систем уравнений лазерного газоанализа для смесей этилен–фреон-12 и аммиак–хлоропропен–этилен–трихлорэтилен (для приведенных выше спектральных каналов измерения) довольно малы и равны 2,25 и 15,87 соответственно. Из рис. 1 видно, что концентрации компонентов в исследуемых смесях с достаточной точностью восстанавливаются обычным методом решения системы линейных алгебраических уравнений. Использование метода регуляризации Тихонова не дает преимуществ в точности восстановления. Более того, ошибки при использовании метода регуляризации могут быть даже больше, чем при использовании обычных методов решения системы линейных уравнений.

Однако возможны случаи, когда для малого количества компонентов возникают трудности при восстановлении концентраций газов.

На рис. 2 приведены результаты восстановления концентрации аммиака исходя из лазерных оптико-акустических измерений для трехкомпонентной смеси этилен — углекислый газ — аммиак (экспериментальные исследования по восстановлению концентраций газов исходя из данных лазерного оптико-акустического газоанализатора проводились с помощью измерительного комплекса на основе перестраиваемого

**Рис. 2. Результаты восстановления концентрации аммиака из лазерных оптико-акустических измерений для трехкомпонентной смеси этилен — углекислый газ — аммиак:**

1 — действительное значение концентрации компонента в анализируемой газовой смеси; 2 — восстановленное значение концентрации газа с использованием регулирующих процедур обработки (использовался метод регуляризации Тихонова с выбором параметра регуляризации на основе принципа невязки); 3 — восстановленное значение концентрации с использованием обычного метода решения системы линейных алгебраических уравнений (использовался гауссов метод исключения с частичным выбором ведущего элемента)



мого  $\text{CO}_2$ -лазера, описанного в работе [18]). По оси ординат на рис. 2 отложено значение концентрации газа. Действительные значения концентраций компонентов в анализируемой газовой смеси контролировались по результатам измерения парциальных давлений газов при заполнении оптико-акустической кюветы. Измерения проводились на спектральных каналах 10P14, 10P20, 9R18, 9R10, 9R16, 9R12. Дисперсии шума измерения в спектральных каналах оценивались по результатам серии предварительных тестовых измерений. Относительные среднеквадратические значения шума в измерительных каналах лазерного оптико-акустического газоанализатора составляли приблизительно 1–3 %.

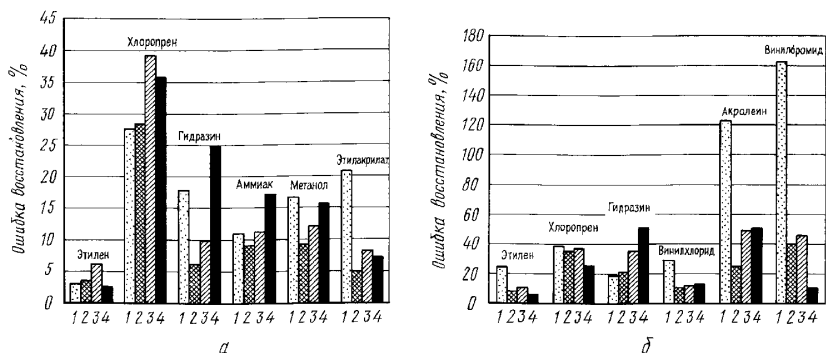
Из рис. 2 видно, что концентрация аммиака восстановлена с достаточной точностью (отметим, что ошибки при использовании регулирующих процедур снова больше, чем при использовании обычных методов решения системы линейных уравнений). По результатам обработки экспериментальных данных были восстановлены концентрации всех компонентов анализируемой смеси кроме углекислого газа — относительные ошибки измерения для него составили несколько порядков (это связано с тем, что для углекислого газа в используемом для измерений спектральном диапазоне спектр поглощения гладкий, без заметных максимумов и минимумов). Анализ числа обусловленности для рассматриваемой газовой смеси показал, что число обусловленности матрицы коэффициентов системы уравнений газоанализа для смеси этилен — углекислый газ — аммиак (при указанных выше спек-

тральных каналах измерения) составляет приблизительно 40000. При такой величине числа обусловленности восстановить концентрацию углекислого газа в анализируемой трехкомпонентной смеси невозможно ни стандартными методами решения системы линейных уравнений, ни методами решения некорректных математических задач.

В многокомпонентных смесях (с числом компонентов шесть и более) использование методов решения некорректных математических задач для восстановления концентраций газов сильно зависит от качественного состава смеси.

На рис. 3 представлена зависимость ошибки восстановления концентраций газов в анализируемой многокомпонентной газовой смеси от ее качественного состава. На рисунках приведены результаты математического моделирования восстановления концентраций газов в двух разных шестикомпонентных смесях. Относительное среднеквадратическое значение шума измерения задано равным 5%. Измерения считались одиночными. На рис. 3 представлена ошибка восстановления концентраций газов в анализируемой смеси, рассчитанная для 10 одиночных измерений.

На рис. 3, а представлены результаты восстановления концентрации газов в шестикомпонентной смеси этилен–хлоропрен–гидразин–аммиак–метанол–этилакрилат с количественным составом  $5 \cdot 10^{-4} : 9 \cdot 10^{-5} : 4 \cdot 10^{-4} : 10^{-4} : 2 \cdot 10^{-4} : 3 \cdot 10^{-4}$  соответственно. Пары спектральных каналов измерения (линии генерации CO<sub>2</sub>-лазера) были выбраны следующие: 10R6–10R12, 10P14–10P10, 10R18–10R22, 9P14–9P22, 10P22–10P18, 9R14–9R22.



**Рис. 3. Ошибки восстановления концентраций газов в шестикомпонентных смесях этилен–хлоропрен–гидразин–аммиак–метанол–этилакрилат (а) и этилен–хлоропрен–гидразин–винилхлорид–акролеин–винилбромид (б):**

1 — стандартный метод решения системы линейных алгебраических уравнений; 2 — метод поиска квазирешений при использовании генетического метода с остановкой поиска через 1000 поколений; 3 — метод поиска квазирешений при использовании генетического метода с остановкой поиска через 200 поколений; 4 — метод регуляризации Тихонова (для выбора параметра регуляризации использовался метод невязки)

На рис. 3, б представлены результаты восстановления концентрации газов в шестикомпонентной смеси этилен–хлоропрен–гидразин–винилхлорид–акролеин–винилбромид с количественным составом  $10^{-4} : 9 \cdot 10^{-5} : 2 \cdot 10^{-4} : 5 \cdot 10^{-4} : 4 \cdot 10^{-4} : 3 \cdot 10^{-4}$  соответственно. Пары спектральных каналов измерения были выбраны следующие: 10P14–10P10, 10P22–10P18, 10R18–10R22, 10P32–10P28, 9P14–9P12, 9R20–9R12.

Из рис. 3 видно, что ошибки восстановления концентраций компонентов в газовых смесях существенно зависят от качественного состава анализируемой смеси.

Для анализируемой шестикомпонентной газовой смеси, представленной на рис. 3, а, ошибки восстановления концентраций газов всеми рассматриваемыми методами невелики. Применение специальных алгоритмов восстановления концентраций газов, основанных на методах решения некорректных математических задач, не дает существенного преимущества по сравнению с методом прямого решения (для всех компонентов газовой смеси в среднем).

Для другой анализируемой газовой смеси, представленной на рис. 3, б, два газовых компонента (акролеин и винилбромид) вообще невозможно восстановить стандартным методом решения системы линейных алгебраических уравнений (ошибки больше 100 %), и в данном случае для большинства газов средняя ошибка восстановления существенно снижается при использовании метода регуляризации и метода поиска квазирешений (ошибки для этих методов одного порядка).

Отметим, что число обусловленности матрицы разности коэффициентов поглощения газовой смеси составляет 17,8 для рис. 3, а и 1176 для рис. 3, б.

Из приведенных результатов видно, что значение числа обусловленности может служить критерием необходимости применения специальных алгоритмов решения уравнений лазерного газоанализа.

Таким образом, число обусловленности матрицы коэффициентов системы уравнений лазерного газоанализа является более надежным критерием для выбора метода восстановления концентраций газов, чем не очень определенные термины “малокомпонентная” или “многокомпонентная” смесь.

Предварительная оценка числа обусловленности позволяет определить, можно ли использовать для восстановления концентраций газов стандартные методы решения систем линейных алгебраических уравнений. Небольшое число обусловленности (десятки и менее) показывает, что для решения системы уравнений газоанализа (независимо от



числа компонентов газовой смеси) можно использовать стандартные методы решения систем линейных алгебраических уравнений. Большая величина числа обусловленности (сотни и более) показывает, что для решения системы уравнений газоанализа необходимо использовать методы решения некорректных математических задач (в большинстве случаев это относится к многокомпонентным газовым смесям с числом компонентов более пяти). Возможен случай, когда в используемом для измерений спектральном диапазоне спектры поглощения некоторых газов в газовой смеси не имеют заметных максимумов и минимумов. Для такой смеси число обусловленности даже при малом числе компонентов может быть очень велико (десятки тысяч), и восстановить концентрации газов с такими спектрами поглощения невозможно никакими методами. Однако концентрации остальных газов в смеси могут быть восстановлены (для малокомпонентных смесей — стандартными методами решения систем линейных алгебраических уравнений, для многокомпонентных — с использованием методов решения некорректных математических задач).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антипов А. Б., Капитанов В. А., Пономарев Ю. Н., Сапожников В. А. Оптико-акустический метод в лазерной спектроскопии молекулярных газов. – Новосибирск: Наука, 1984. – 128 с.
2. Жаров В. П., Летохов В. С. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия. – М.: Наука, 1984. – 320 с.
3. Л а з е р н а я аналитическая спектроскопия / В. С. Антонов, Г. И. Беков, М. А. Большов и др. – М.: Наука, 1986. – 320 с.
4. Пономарев Ю. Н. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия атмосферы // Оптика атмосферы и океана. – 1995. – Т. 8. – № 1–2. – С. 224–241.
5. Зуев В. Е., Макушкин Ю. С., Пономарев Ю. Н. Спектроскопия атмосферы. – Л.: Гидрометеиздат, 1987. – 247 с.
6. Катаев М. Ю., Мицель А. А. Идентификация состава газовой смеси по спектрам поглощения // Автометрия. – 1985. – № 4. – С. 15–20.
7. Катаев М. Ю., Мицель А. А. Обнаружение газов с помощью ОА-газоанализатора // Оптика атмосферы и океана. – 1991. – Т. 4. – № 7. – С. 705–712.
8. Зигрист М., Катаев М. Ю., Мицель А. А., Пономарев Ю. Н., Тонн А. Исследование погрешностей лазерного оптико-акустического газоанализатора // Оптика атмосферы и океана. – 1994. – Т. 7. – № 11–12. – С. 1471–1477.
9. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979. – 288 с.
10. 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.

11. Козинцев В. И. Об обработке сигналов лазерного оптико-акустического газоанализатора при анализе многокомпонентных газовых смесей // Оптика атмосферы и океана. – 1996. – Т. 9. – № 10. – С. 1373–1378.
12. Авдиенко В. В., Белов М. Л., Городничев В. А., Козинцев В. И., Добрица Д. Б. Мониторинг многокомпонентных газовых смесей с помощью лазерного оптико-акустического полигазоанализатора // Журнал прикладной спектроскопии. – 1996. – Т. 63. – № 5. – С. 755–759.
13. Белов М. Л., Городничев В. А., Козинцев В. И., Добрица Д. Б. Сравнительный анализ методов восстановления концентраций газов в многокомпонентных смесях из данных измерений лазерного оптико-акустического газоанализатора // Оптика атмосферы и океана. – 2000. – Т. 13. – № 2. – С. 146–150.
14. Белов М. Л., Городничев В. А., Козинцев В. И., Федотов Ю. В. Метод поиска квазирешений в задаче лазерного оптико-акустического газоанализа // Оптика атмосферы и океана. – 2000. – Т. 15. – № 14. – С. 388–392.
15. Воскобойников Ю. Э., Преображенский Н. Г., Седельников А. Н. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. – Новосибирск: Наука, 1984. – 238 с.
16. Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. – М.–Л.: Изд-во физ.-мат. литературы, 1963. – 678 с.
17. Вержибицкий В. М. Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения. – М.: Высш. шк., 2000. – 266 с.
18. Козинцев В. И. Лазерный оптико-акустический газоанализатор для контроля состава многокомпонентных газовых смесей // Оптика атмосферы и океана. – 1996. – Т. 9. – № 8. – С. 1087–1091.

Статья поступила в редакцию 29.05.2003

Виктор Александрович Городничев родился в 1952 г., окончил в 1976 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд. техн. наук, начальник отдела НИИ “Радиоэлектроника и лазерная техника” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 90 научных работ в области лазерной техники.

V.A. Gorodnichev (b. 1952) graduated from Moscow State University n.a. M.V. Lomonosov in 1976. Ph. D. (Eng.), head of section of “Radio-electronics and Laser Technology” research institute of the Bauman Moscow State Technical University. Author of over 90 publications in the field of laser technology.

