Наука и Образование
МГТУ им. Н.Э. Баумана
Сетевое научное издание
ISSN 1994-0408

Наука и Образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2016. № 12. С. 98–109.

DOI: **10.7463/1216.0852463**

Представлена в редакцию: 01.11.2016
Исправлена: 15.11.2016

© МГТУ им. Н.Э. Баумана

УДК 621.378:551.508

Восстановление концентраций газов в многокомпонентных смесях из многоспектральных лазерных измерений в условиях выбросов сигнала методом Хьюбера

Городничев В. А.[1], **Белов М. Л.**[1,*], **Еременко Л. Н.**[1], **Назаров В. В.**[1]

*belov@bmstu.ru

[1]МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Статья посвящена задаче восстановления концентраций газовых компонент стационарных многокомпонентных газовых смесей из многоспектральных лазерных измерений робастными методами решения системы линейных уравнений лазерного газоанализа в условиях шумовых выбросов регистрируемых лазерных сигналов. Показано, что использование робастного метода Хьюбера позволяет в условиях шумовых выбросов регистрируемых лазерных сигналов получать устойчивые оценки концентраций газов в стационарных многокомпонентных газовых смесях и уменьшить в несколько раз погрешность измерения при количественном лазерном газоанализе.

Ключевые слова: количественный лазерный газоанализ, многокомпонентная газовая смесь, метод Хьюбера

Введение

В настоящее время одним из приоритетных направлений науки является контроль антропогенных загрязнений и охрана природной среды и, в первую очередь, земной атмосферы. Постоянно возрастающие объемы выбрасываемых в атмосферу загрязняющих веществ влияют на естественные природные процессы и представляют опасность для жизнедеятельности человека.

Для экологического контроля атмосферного воздуха и оперативного мониторинга выбросов источников антропогенных загрязнений (заводов, ТЭЦ и т.п.) необходима разработка и создание высокоточных газоаналитических приборов. Лазерные (как дистанционные, так и неконтактные) газоанализаторы являются наиболее перспективными для оперативного количественного анализа газовых загрязнений атмосферы [1-3].

Одной из проблем лазерного газоанализа является неустойчивость результатов восстановления концентраций компонент газовых смесей в реальных условиях шумов в регистрируемом лазерном сигнале.

Это приводит к необходимости использовать при анализе и интерпретации результатов лазерных измерений специальные алгоритмы обработки.

При восстановлении количественного состава многокомпонентных газовых смесей из многоспектральных лазерных измерений эффективно используются методы регуляризации Тихонова, поиска квазирешений и нахождения байесовских оценок (см., например, [1,4,5]). Эти методы дают возможность по результатам одиночных (для каждой длины волны зондирования) измерений определять количественный состав многокомпонентных газовых смесей в условиях шумов измерений.

При дистанционном зондировании стационарных газовых образований или лабораторном анализе ранее отобранных проб воздуха (когда газовая смесь стационарна) процедуры восстановления в условиях шумов измерений концентраций газов в многокомпонентных смесях могут быть существенно более простыми.

В статье рассматривается задача многоспектрального лазерного анализа стационарных газовых смесей, для которых возможно проведение серии измерений на каждой длине волны зондирования. Такая задача представляет практический интерес для оперативного мониторинга источников антропогенных загрязнений.

1. Постановка задачи

Если состав газовых компонент смеси известен (например, при рутинном газоанализе), то задача количественного газоанализа (определение концентраций компонент смеси) может быть решена путем измерения поглощения газовой смеси на специально выбранных длинах волн излучения (см., например, [1,5]).

Будем считать, что смесь содержит N газов, а измерение поглощения газовой смеси проводятся на M длинах волн излучения. Задача определения концентраций газовых компонент смеси по данным многоспектральных лазерных измерений сводится к решению системы уравнений лазерного газоанализа (полагаем, что ширина линий генерации лазера много меньше ширины линий поглощения анализируемых газов) [1,5]:

$$\begin{cases} k_a(\lambda_1) + \sum_j^N c_j k_j(\lambda_1) = y(\lambda_1) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ k_a(\lambda_M) + \sum_j^N c_j k_j(\lambda_M) = y(\lambda_M) \end{cases}, \qquad (1)$$

где

λ_i - длины волн излучения;

$y(\lambda_i)$ – измеряемый лазерный сигнал на длине волны излучения λ_i;

$k_a(\lambda_i)$ - показатель неселективного ослабления на длине волны излучения λ_i;

$k_j(\lambda_i)$ - показатель поглощения j-ой компоненты газовой смеси на длине волны излучения λ_i;

c_j - концентрация j-ой компоненты газовой смеси;

N - число компонент в газовой смеси.

Неизвестными в системе уравнений лазерного газоанализа (1) являются концентрации компоненты газовой смеси c_j и показатели неселективного ослабления $k_a(\lambda_i)$.

Для определения концентрации каждого газа измерения выполняются на паре лазерных длин волн: λ_{on} - длине волны, соответствующей максимуму линии поглощения данного газа, λ_{off} - длине волны, находящейся вне или на краю линии поглощения данного газа.

Трудность решения системы уравнений (1) заключается в том, что правые части уравнений, представляющие измеряемые лазерные сигналы, известны всегда с ошибкой. Поэтому непосредственное обращение системы уравнений лазерного газоанализа (1) приводят к тому, что восстановленные значения концентраций газов не обладают устойчивостью (малые изменения исходных данных приводят к большим изменениям концентраций). Чтобы обойти эту трудность приходится для восстановления концентраций газов из данных многоспектральных лазерных измерений использовать методы решения некорректных математических задач (см., например, [1,4-11]).

На сегодняшний день для восстановления концентраций газов из данных многоспектральных лазерных измерений (при одном измерении для каждой длины волны излучения) используют байесовский метод; метод регуляризации Тихонова при различных детерминистических и статистических способах выбора параметра регуляризации; метод поиска квазирешений (см., например, [1,4,5]).

Если существует возможность проведения нескольких измерений на каждой длине волны излучения (например, при дистанционном зондировании стационарных газовых образований или лабораторном анализе ранее отобранных проб воздуха), то можно использовать более простую процедуру восстановления концентраций газов в многокомпонентных смесях в условиях шумов измерений - метод наименьших квадратов (МНК), основанный на минимизации суммы квадратов некоторых функций от искомых концентраций газов.

Пусть c_j^l - концентрация *j*-ой компоненты газовой смеси, найденная по результатам *l*-ого измерения (одним из стандартных методов решения системы уравнений лазерного газоанализа (1)), n - количество измерений, $\hat{c}_j$ - оценка концентрации *j*-ой компоненты газовой смеси определенная методом наименьших квадратов; *d* – модуль вектора, компонентами которого являются $c_j^l - \hat{c}_j$.

Определим функцию невязки $E(d)$ следующим образом:

$$E(d) = \sum_{l=1}^{n} \left[c_j^l - \hat{c}_j \right]^2 . \qquad (2)$$

Значение концентрации *j*-ой компоненты газовой смеси $\hat{c}_j$, минимизирующее функцию невязки $E(d)$, будет оценкой концентрации *j*-ой компоненты смеси, определенной методом наименьших квадратов.

В более общем (чем формула (2)) виде функция невязки $E(d)$ имеет вид:

$$E(d)=\sum_{l=1}^{n}\rho(c_j^l-\hat{c}_j). \qquad (3)$$

Здесь $\rho(x)$ - выпуклая, симметричная, положительная функция.

Оценки величин, найденные МНК, являются эффективными, если закон распределения погрешностей измерений является нормальным. Однако, нормальность закона распределения погрешностей на практике часто нарушается, что может приводить к существенной потере эффективности оценок, полученных МНК [12,13].

Потеря эффективности оценок, полученных МНК, оказывается особенно большой происходит при наличии даже небольшой доли выбросов. В практических приложениях большим выбросам соответствуют данные измерений, погрешность которых существенно больше, чем приписываемое им среднеквадратическое отклонение. При этом как величина таких погрешностей, так и моменты появления выбросов, априорно не известны [12,13].

Поэтому актуальной является разработка методов восстановления концентраций газов в стационарных многокомпонентных смесях в условиях выбросов измеряемого сигнала.

В статье для восстановления концентраций газовых компонент в стационарных многокомпонентных газовых смесях в условиях выбросов измеряемого сигнала использован метод Хьюбера, ранее не использовавшийся для задач лазерного количественного газоанализа.

2. Определение концентраций газов в многокомпонентных стационарных смесях в условиях выбросов сигнала методом Хьюбера

При наличии шумовых выбросов в регистрируемом лазерном сигнале (и как следствие выбросов в определяемых по одиночным измерениям концентраций газов) необходимо использовать устойчивые (робастные) методы оценивания [12,13], позволяющие существенно уменьшить влияние выбросов на оценку искомых параметров.

Для того, чтобы оценка обладала устойчивостью и в то же время «не портила» измерения, которые не являются выбросами, функция $\rho(x)$ должна быть близка к квадратичной (2) при малых значениях $\left|c_j^l-\hat{c}_j\right|$ и существенно менее возрастающей (по сравнению с квадратичной) при больших значениях $\left|c_j^l-\hat{c}_j\right|$.

Одной из наиболее известных функций невязки $\rho(x)$ такого типа является функция Хьюбера [12,13]:

$$\rho(x)=\begin{cases} x^2/2, & |x|<K \\ -K^2/2+K|x|, & |x|>K \end{cases}, \qquad (4)$$

где K - параметр Хьюбера.

Значение параметра Хьюбера определяется характером конкретной задачи.

Численное нахождение самой устойчивой оценки искомого параметра (при решении задачи минимизации функции невязки $E(d)$) можно быть проведено любым стандартным методом.

4. Математическое моделирование и анализ результатов

Для оценки значения параметра Хьюбера и эффективности метода Хьюбера для нахождения устойчивых оценок концентраций газов в многокомпонентных стационарных смесей из лазерных измерений проводилось математическое моделирование.

При математическом моделировании полагалось, что смесь газов стационарная и для определения концентраций газовых компонент смеси проводится серия из n измерений (n задавалось от 2 до 6). Считалось, что количество газов в смеси от 4 до 6. Количественный состав газов при каждом единичном измерении c_j^l находился стандартным методом решения системы уравнений лазерного газоанализа (1). Для нахождения оценки $\hat{c}_j$ концентраций газов по серии из n измерениям использовалась функция невязки (4).

Найденные значения оценок концентраций газовых компонент $\hat{c}_j$ сравнивались с заданными (исходными) значениям концентраций газов c_j и вычислялась погрешность измерения концентраций газовых компонент:

$$\delta_j=\frac{\left|c_j-\hat{c}_j\right|}{c_j}.$$

Полагалось, что шум измерения имеет пуассоновское распределение, моделирующее редкие выбросы, с параметром распределения $\lambda=0{,}1$. Регистрируемый сигнал $\tilde{y}_k$ в k-ом спектральном канале представлялся как:

$$\tilde{y}_k=y_k(1+a\xi_{\text{ï}}),$$

где

y_k - значение сигнала при отсутствии шума измерения;

a - вес (в величине регистрируемого сигнала) пуассоновского шума $\xi_{\text{ï}}$.

На рисунках 1-6 приведены результаты математического моделирования для восстановления из многоспектральных лазерных измерений концентраций газов в шестикомпонентной смеси этилен-фреон-12-гидразин-аммиак-метанол-этилакрилат.

При математическом моделировании считалось, что для измерений были использованы следующие лазерные длины волн излучения: 10P14, 10P10, 10R18, 10R22, 10P22, 10P28, 10R6, 10R12, 9P14, 9P20, 9R14, 9R22 (эти длины волн соответствуют перестраиваемому по длине волны излучения CO_2-лазеру [14]). Концентрации газовых компонент задавались следующими: 10^{-4}; 2 – $4{,}6\ 10^{-3}$; 3 – $8\ 10^{-3}$; 4 – $8{,}5\ 10^{-3}$; 5 – $6{,}6\ 10^{-3}$; 6 – $9{,}2\ 10^{-3}$. Число измерений в серии n полагалось равным 6.

На рисунках 1-6 показаны средние (по серии из 1000 реализаций шума) погрешности δ (в процентах) восстановления концентраций компонент газовой смеси из многоспектральных лазерных измерений (для веса a пуассоновского шума, равного 0,3).

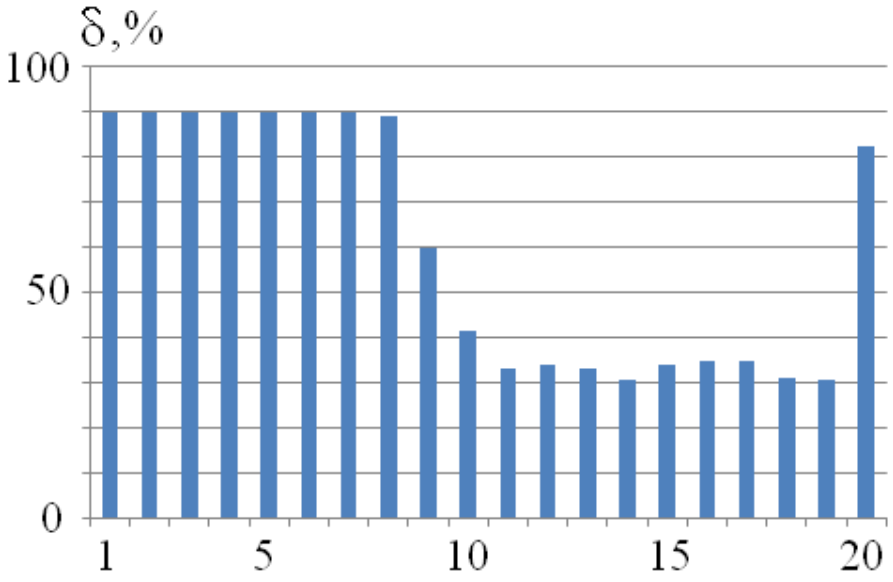


Рис.1 Погрешности определения концентрации этилена.

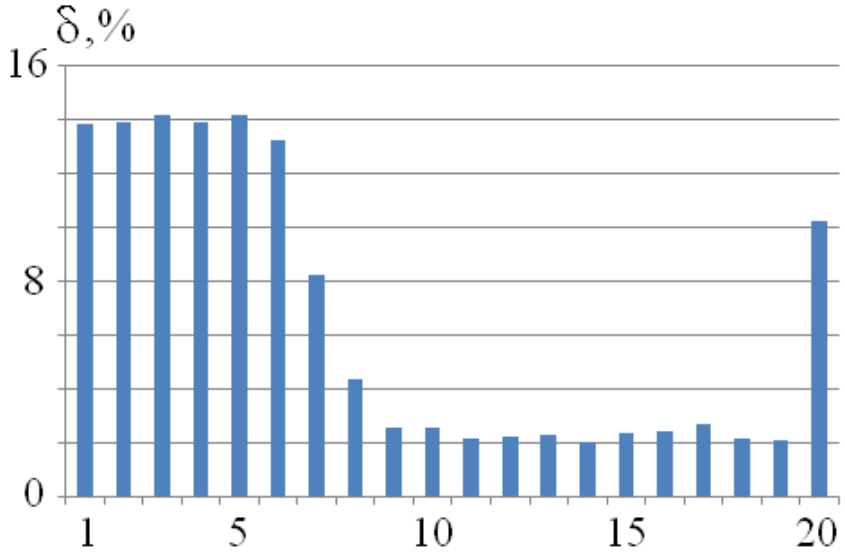


Рис.2 Погрешности определения концентрации фреона-12.

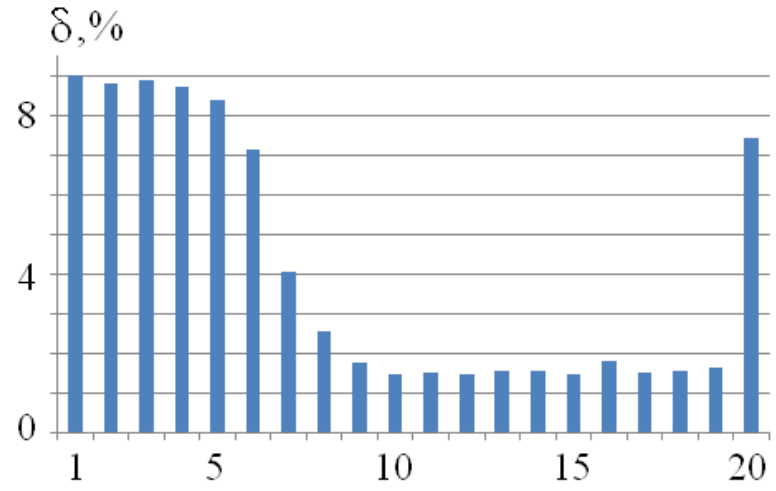


Рис.3 Погрешности определения концентрации гидразина.

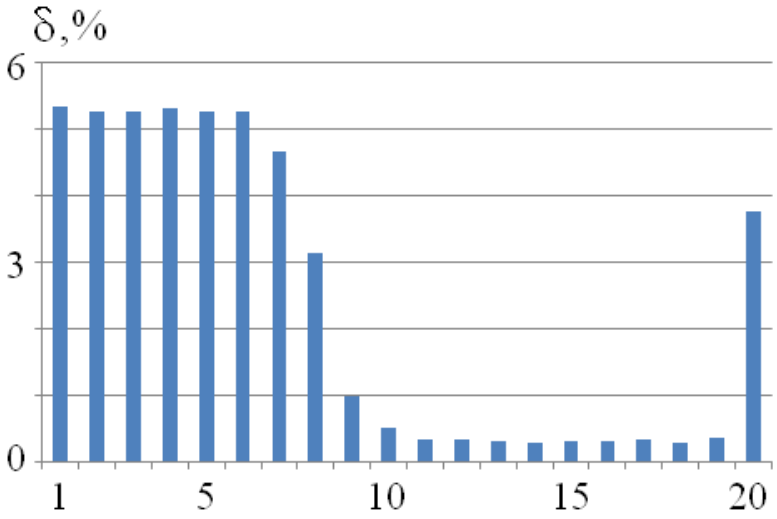


Рис.4 Погрешности определения концентрации аммиака.

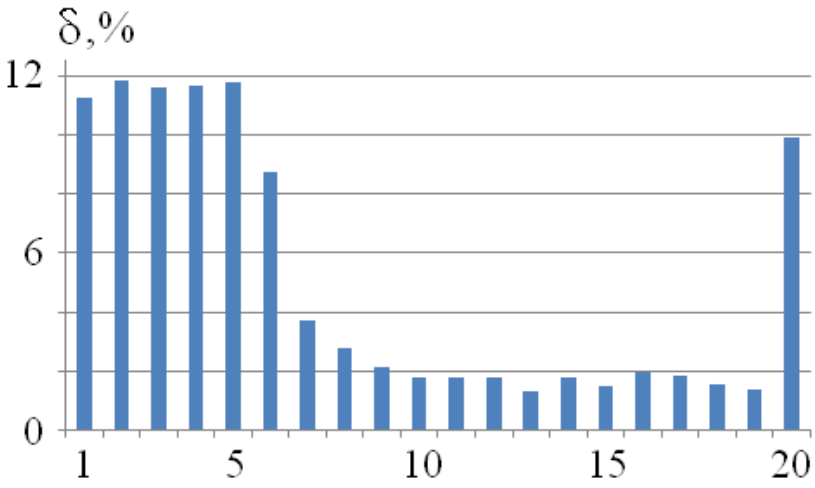


Рис.5 Погрешности определения концентрации метанола.

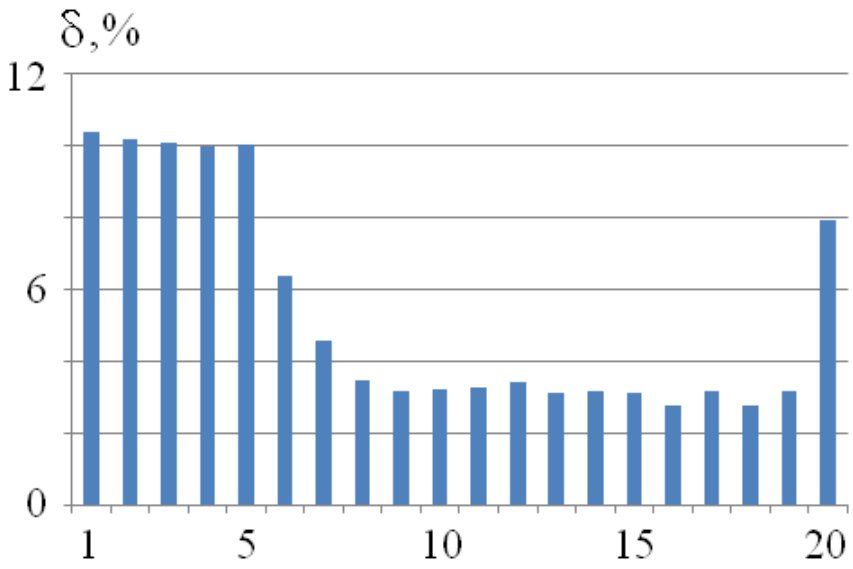


Рис.6 Погрешности определения концентрации этилакрилата.

На рисунках 1-6: столбец 1 соответствует восстановленной концентрации для параметра Хьюбера K равного 0,5; столбец 2 – 0,25; столбец 3 – 0,1; столбец 4 –0,05; столбец 5 – 0,025; столбец 6 – 0,01; столбец 7 – 0,005; столбец 8 – 0,0025; столбец 9 – 0,001; столбец 10 – 0,0005; столбец 11 – 0,00025; столбец 12 – 0,0001; столбец 13 – 0,00005; столбец 14 – 0,000025; столбец 15 – 0,00001; столбец 16 – 0,000005; столбец 17 – 0,0000025; столбец 18 – 0,000001; столбец 19 – 0,0000005; столбец 20 соответствует концентрации определенной по методу наименьших квадратов из результатов 6 измерений.

Из рисунков 1-6 хорошо видно, что, несмотря на значительное отличие между собой погрешностей газовых компонент смеси (погрешности измерения содержания этилена гораздо больше погрешностей измерения содержания остальных компонент, что связано с малым содержанием этилена в смеси), характер зависимости погрешностей от параметра Хьюбера для всех газовых компонент одинаковый – погрешности измерения концентраций газовых компонент уменьшаются начиная со значения параметра Хьюбера ~ 0,005…0,001. Видно также, что при оптимальном выборе параметра Хьюбера (~ 0,00025…0,000025) погрешности измерения концентраций для всех газовых компонент много меньше погрешностей измерения при использовании стандартного метода наименьших квадратов.

Заключение

В статье рассмотрена задача восстановления концентраций газов в стационарных многокомпонентных газовых смесях из многоспектральных лазерных измерений в условиях выбросов сигнала методом Хьюбера, ранее не использовавшимся для задач лазерного газоанализа. Показано, что использование метода Хьюбера позволяет в условиях выбросов измеряемого сигнала получать устойчивые оценки концентраций газовых компо-

нент и уменьшить в несколько раз погрешность измерения при количественном лазерном газоанализе.

Список литературы

1. Городничев В.А. Разработка методов и оптико-электронных средств лазерного оперативного контроля многокомпонентных газовых смесей составляющих ракетных топлив и других токсичных веществ: дисс. … докт. техн. наук. М., 2009. 307 с.
2. Степанов Е.В. Диодная лазерная спектроскопия и анализ молекул-биомаркеров. М.: Физматлит, 2009. 416 с.
3. Демтрёдер В. Современная лазерная спектроскопия: пер. с нем. Долгопрудный: Интеллект, 2014. 1071 с. [Demtroeder W. Laser spectroscopy. 4th ed. B.: Springer, 2008. Vol. 1-2].
4. Еременко Л.Н. Метод определения количественного состава сложных газовых смесей лазерным оптико-акустическим анализатором: дисс. … канд. техн. наук. М., 2010. 142 с.
5. Основы количественного лазерного анализа / В.И. Козинцев, М.Л. Белов, В.А. Городничев, Ю.В. Федотов; под ред. В.Н. Рождествина. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. 463 с.
6. Neubauer A. Inverse and Ill-Posed Problems. Режим доступа: http://www.impan.pl/BC/Arch/2008/08NeubauerCourse.pdf (дата обращения 20.09.2016).
7. Engl H.W., Hanke M., Neubauer A. Regularization of inverse problems. Dordrecht; Boston: Kluwer, 1996. 321 p.
8. Еременко Л.Н., Козинцев В.И., Городничев В.А. Метод байесовских оценок в задаче лазерного газоанализа // Известия вузов. Физика. 2008. № 9. С. 29-35.
9. Существующие подходы к решению некорректных задач. Режим доступа: http://pelbook.narod.ru/2004/02.htm (дата обращения 20.09.2016).
10. Катаев М.Ю., Бойченко И.В. Программное и методическое обеспечение задач лидарного зондирования атмосферы. Томск: STT, 2007. 236 с.
11. Городничев В.А. Методы восстановления концентраций газов для задачи лидарного контроля газовых загрязнителей атмосферы // Биомедицинская радиоэлектроника. 2003. № 9. С. 52-56.
12. Крянев А.В., Лукин Г.В. Математические методы обработки неопределенных данных. М.: Физматлит, 2003. 212 с.
13. Крянев А.В., Лукин Г.В. Метрический анализ и обработка данных. М.: Физматлит, 2010. 280 с.
14. Козинцев В.И., Белов М.Л., Городничев В.А., Федотов Ю.В. Лазерный оптико-акустический анализ многокомпонентных газовых смесей. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2003. 352 с.

Science & Education of the Bauman MSTU
Electronic journal
ISSN 1994-0408

Science and Education of the Bauman MSTU, 2016, no. 10, pp. 98–109.

DOI: **10.7463/1216.0852463**

Received: 01.11.2016
Revised: 15.11.2016

© Bauman Moscow State Technical Unversity

The Huber's Method-based Gas Concentration Reconstruction in Multicomponent Gas Mixtures from Multispectral Laser Measurements under Noise Overshoot Conditions

V.A. Gorodnichev[1], M.L. Belov[1,*], L.N. Eremenko[1], V.V. Nazarov[1]

*belov@bmstu.ru

[1]Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Keywords: quantitative laser gasanalysis, multicomponent gas mixture, Huber method

Laser gas analysers are the most promising for the rapid quantitative analysis of gaseous air pollution.

A laser gas analysis problem is that there are instable results in reconstruction of gas mixture components concentration under real noise in the recorded laser signal. This necessitates using the special processing algorithms.

When reconstructing the quantitative composition of multi-component gas mixtures from the multispectral laser measurements are efficiently used methods such as Tikhonov regularization, quasi-solution search, and finding of Bayesian estimators. These methods enable using the single measurement results to determine the quantitative composition of gas mixtures under measurement noise.

In remote sensing the stationary gas formations or in laboratory analysis of the previously selected (when the gas mixture is stationary) air samples the reconstruction procedures under measurement noise of gas concentrations in multicomponent mixtures can be much simpler.

The paper considers a problem of multispectral laser analysis of stationary gas mixtures for which it is possible to conduct a series of measurements.

With noise overshoots in the recorded laser signal (and, consequently, overshoots of gas concentrations determined by a single measurement) must be used stable (robust) estimation techniques for substantial reducing an impact of the overshoots on the estimate of required parameters.

The paper proposes the Huber method to determine gas concentrations in multicomponent mixtures under signal overshoot.

To estimate the value of Huber parameter and the efficiency of Huber's method to find the stable estimates of gas concentrations in multicomponent stationary mixtures from the laser measurements the mathematical modelling was conducted.

The mathematical modelling results show that despite the considerable difference among the errors of the mixture gas components themselves a character of the error dependence on the Huber parameter for all gas components is the same. When an optimal Huber parameter (~ 0.00025 - 0.000025 in case of the specific mixture used in mathematical modelling) is selected the measurement errors of concentrations for all gas components are much smaller than the measurement errors when using the standard method of least squares

References

1. Gorodnichev V.A. *Razrabotka metodov i optiko-elektronnykh sredstv lazernogo operativnogo kontrolia mnogokomponentnykh gazovykh smesej sostavliayuschikh raketnykh topliv i drugikh toksichnykh veschestv* [Development of methods and optical-electronic means of laser operational control of multicomponent gas mixtures the components of rocket propellants and other toxic substances. Doct. diss.]. Moscow, 2009. 307 p. (in Russ.).
2. Stepanov E.V. *Diodnaia lazernaia spektroskopiia i analiz molekul-biomarkerov* [Diode laser spectroscopy and analysis of biomarker molecules]. Moscow: Fizmatlit Publ., 2009. 416 p. (in Russ.).
3. Demtroeder W. *Laser spectroscopy*. 4th ed. B.: Springer, 2008. Vol. 1-2. (Russ. ed.: Demtroeder W. *Sovremennaia lazernaia spektroskopiia.* Dolgoprudnyj: Intellekt Publ., 2014. 1071 p.).
4. Eremenko L.N. *Metod opredeleniia kolichestvennogo sostava slozhnykh gazovykh smesej lazernym optiko-akustichekim analizatorom* [Method of determining the quantitative composition of complex gas mixtures laser opto-acoustic analyzer. Cand. diss.]. Moscow, 2010. 142 p. (in Russ.).
5. *Osnovy kolichestvennogo lazernogo analiza* [Fundamentals of quantitative laser analysis] / Ed. by V.N. Rozhdestvin. Moscow: BMSTU Publ., 2006. 463 p. (in Russ.).
6. Neubauer A. Inverse and Ill-Posed Problems. Available at: http://www.impan.pl/BC/Arch/2008/08NeubauerCourse.pdf, accessed 20.09.2016.
7. Engl H.W., Hanke M., Neubauer A. Regularization of inverse problems. Dordrecht; Boston: Kluwer, 1996. 321 p.
8. Eremenko L.N., Kozintsev V.I., Gorodnichev V.A. Method of Bayesian estimates in the problem of laser gas analysis. *Russian Physics Journal,* 2008, vol. 51, no. 9, pp. 912-918. DOI: 10.1007/s11182-009-9135-5
9. *Suschestvyyuschie podkhody k resheniyu nekorrektnykh zadach* [Existing approaches to solving ill-posed problems]. Available at: http://pelbook.narod.ru/2004/02.htm, accessed 20.09.2016.
10. Kataev M.Yu., Bojchenko I.V. *Programmnoe i metodicheskoe obespechenie zadach lidarnogo zondirovaniia atmosfery* [Software and methodological support of problems of lidar sensing of the atmosphere]. Tomsk: STT Publ., 2007. 236 p. (in Russ.).

11. Gorodnichev V.A. Methods of recovery of gas concentration for the problem of lidar monitoring of gaseous pollutants. *Biomedical Radioelectronics*, 2003, no. 9, pp. 52-56. (in Russ.).
12. Krianev A.V., Lukin G.V. *Matematicheskie metody obrabotki neopredelennykh dannykh* [Mathematical methods of processing of uncertain data]. Moscow: Fizmatlit Publ., 2003. 212 p. (in Russ.).
13. Krianev A.V., Lukin G.V. *Metricheskij analiz i obrabotka dannykh* [Metric analysis and data processing]. Moscow: Fizmatlit Publ., 2010. 280 p. 352 p. (in Russ.).
14. Kozintsev V.I., Belov M.L., Gorodnichev V.A., Fedotov Yu.V. *Lazernyj optiko-akusticheskij analiz mnogokomponentnykh gazovykh smesej* [Laser optical acoustic analysis of multicomponent gas mixtures]. Moscow: BMSTU Publ., 2003. (in Russ.).