

Количественный газоанализ сложных многокомпонентных смесей

10, октябрь 2013

DOI: 10.7463/1013.0615247

Белов М. Л.

УДК 621.378:551.508

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

belov@bmstu.ru

Введение

Для эффективного мониторинга атмосферы и оперативного контроля многокомпонентных газовых смесей требуется создание высокочувствительных быстродействующих газоанализаторов, способных дистанционно или локально контролировать содержание в атмосферном воздухе загрязняющих газовых компонент. Лазерные методы являются наиболее перспективными для оперативного газоанализа многокомпонентных смесей [1-6].

Если качественный состав газовой смеси известен, то измерение концентраций компонент смеси (количественный анализ смеси) может быть проведено путем проведения многоспектральных измерений (например, с помощью абсорбционного или оптико-акустического методов), используя набор лазерных излучателей или перестраиваемый по длине волны источник лазерного излучения [1-6].

Одной из проблем, возникающих в лазерном анализе при измерении количественного состава многокомпонентных газовых смесей, является необходимость применения (при определении концентраций газов смеси из многоспектральных лазерных измерений) специальных алгоритмов обработки [1-3, 7-9]. При этом трудность задачи измерения количественного состава газов существенно возрастает для сложных смесей газов, в которых концентрации компонент газовой смеси отличаются на несколько порядков или присутствуют газовые компоненты без ярко выраженных максимумов в спектрах поглощения [10, 11].

Данная статья посвящена сравнительному анализу алгоритмов восстановления концентраций газов в сложных многокомпонентных смесях из многоспектральных лазерных измерений.

1. Постановка задачи

Будем считать, что анализируемая газовая смесь содержит K газовых компонент и измерения проводятся на M длинах волн, а ширина линий генерации лазера много меньше ширины линий поглощения анализируемых газов. Тогда задача нахождения концентраций газов из результатов многоспектральных лазерных измерений сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений лазерного газоанализа [1-3]. В матричной форме система уравнений лазерного газоанализа имеет вид

$$\mathbf{W}\mathbf{x} = \mathbf{k}_a + \mathbf{K}\mathbf{c} = \mathbf{y}, \quad (1)$$

где

$\mathbf{W}$ - матрица системы (1) размерностью $M \times M$;

$\mathbf{x}$ - M -мерный искомый вектор (K компонент этого вектора соответствуют концентрациям газов);

$\mathbf{k}_a$ - M -мерный вектор коэффициентов неселективного ослабления;

$\mathbf{K}$ - матрица коэффициентов поглощения компонент газовой смеси размерностью $M \times K$;

$\mathbf{c}$ - K -мерный вектор концентраций газов;

$\mathbf{y}$ - M -мерный вектор приведенных измеряемых сигналов (показателей поглощения исследуемой смеси).

Неизвестными в (1) являются компоненты вектора $\mathbf{c}$ (парциальные концентрации газовых компонент) и компоненты вектора $\mathbf{k}_a$ (коэффициенты неселективного ослабления).

Коэффициенты неселективного ослабления слабо зависят от длины волны. Поэтому для устранения их влияния для определения концентрации одного газа обычно измерения выполняются на паре лазерных длин волн: λ_{on} - длине волны, на которой поглощение исследуемым газом максимально, λ_{off} - длине волны, на которой поглощение исследуемым газом практически отсутствует. Вычитая уравнения для каждой пары длин волн λ_{on} и λ_{off} друг из друга, приходим к следующему матричному уравнению [1-3]

$$\Delta\mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \Delta\mathbf{y}, \quad (2)$$

где

$\Delta\mathbf{y}$ - $M/2$ -мерный вектор разностей сигналов $\Delta y_i = \Delta y(\lambda_i) = y(\lambda_{2i-1}) - y(\lambda_{2i})$;

$\Delta \mathbf{K}$ - матрица размерностью $M/2 \times M/2$ с разностями коэффициентов поглощения $\Delta K_{ji} = \Delta K_j(\lambda_i) = K_j(\lambda_{2i-1}) - K_j(\lambda_{2i})$.

В идеальных условиях в случае отсутствия шума измерения точные значения концентраций компонент газовой смеси (или газовых загрязнителей атмосферного воздуха) можно найти непосредственно из решения уравнений лазерного газоанализа (1), (2), используя обратную матрицу (конечно, если детерминант матрицы не равен нулю). Однако, при регистрации результатов реальных измерений правая часть уравнений (1), (2) всегда известна со случайной ошибкой, обусловленной погрешностями измерения, шумами аппаратуры и т.п.

Таким образом, в (2) вместо $\Delta \mathbf{y}$ имеем

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

где

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

В этих условиях попытки непосредственно обратить уравнения (1), (2) приводят к тому, что найденный обратный оператор может не обладать свойством устойчивости, т.е. малые вариации данных измерений могут приводить к большим вариациям искомых величин. Такая ситуация характерна для многокомпонентных смесей (с числом компонент обычно более пяти, шести). Выход из этой трудности заключается в использовании (при определении концентраций газовых компонент по данным многоспектрального измерений) алгоритмов обработки, основанных на методах решения некорректных математических задач [12, 13].

В настоящее время для определения концентраций газов в многокомпонентных смесях по данным многоспектрального измерений эффективно используются метод поиска квазирешений или метод регуляризации Тихонова с применением различных способов (как детерминистических, так и статистических) выбора параметра регуляризации [1-3, 14-17].

Однако, для сложных газовых смесей, в которых концентрации компонент газовой смеси отличаются на несколько порядков или присутствуют компоненты без ярко выраженных максимумов в спектрах поглощения, эти методы дают большие (многие десятки и сотни процентов) погрешности (т.е. концентрации газовых компонент практически не восстанавливаются).

Единственными на сегодняшний день методами, которые используются для определения количественного состава сложных многокомпонентных смесей из многоспектральных измерений, являются метод, основанный на построении байесовской оценки решения [10], и проекционный метод [11].

В принципе, для решения этой задачи, видимо, могла бы быть создана и модификация метода поиска квазирешений. Однако, метод поиска квазирешений требует большого объема вычислений, даже при таком эффективном алгоритме подбора решений как генетический алгоритм [2].

Ниже методом математического моделирования проводится сравнительный анализ метода, основанного на построении байесовской оценки решения, и проекционного метода для задачи восстановления из многоспектральных измерений концентраций газов в сложных многокомпонентных смесях, в которых концентрации компонент газовой смеси отличаются на несколько порядков или присутствуют компоненты без ярко выраженных максимумов в спектрах поглощения.

2. Метод, основанный на построении байесовской оценки решения

Построение байесовской оценки искомого вектора $\mathbf{x}$ для уравнения лазерного газоанализа (1) многокомпонентной газовой смеси проводится при следующих предположениях:

1). Вектор шума измерения ξ подчиняется нормальному распределению, некоррелирован с измеряемым сигналом и имеет нулевое среднее значение и корреляционную матрицу $\mathbf{V}_\xi$.

2). Априорное распределение искомого вектора $\mathbf{x}$ также является нормальным с некоторым средним значением $\mathbf{x}_0$ и корреляционной матрицей $\mathbf{N}_0$.

3). Корреляционные матрицы $\mathbf{V}_\xi$ и $\mathbf{N}_0$ обратимы (существуют матрицы $\mathbf{V}_\xi^{-1}$ и $\mathbf{N}_0^{-1}$).

Для задачи лазерного многокомпонентного газоанализа трудно задать или отдать предпочтение какой-либо функции потерь. Поэтому оценку решения уравнения лазерного газоанализа будем определять из условия максимума апостериорной плотности вероятности $p(c|\Delta\tilde{y})$.

При сделанных предположениях показано [4], что апостериорное распределение $p(n|\Delta\tilde{y})$ является нормальным и байесовская оценка $\mathbf{x}_B$ вектора $\mathbf{x}$ совпадает с оценкой, определяемой из максимума апостериорной плотности вероятности.

Тогда для задачи лазерного газоанализа (при использовании матричного уравнения (1)) байесовская оценка $\mathbf{x}_B$ вектора $\mathbf{x}$ определяется следующим уравнением

$$\mathbf{x}_{\hat{A}} = (\mathbf{N}_0^{-1} + \mathbf{W}^T \mathbf{V}_{\xi}^{-1} \mathbf{W})^{-1} (\mathbf{W}^T \mathbf{V}_{\xi}^{-1} \tilde{\mathbf{y}} + \mathbf{N}_0^{-1} \mathbf{x}_0). \quad (3)$$

Здесь верхний индекс "Т" означает транспонирование матрицы, верхний индекс "-1" – обратную матрицу.

Матрица системы уравнений (1) размером положительно определена и для любого вектора измерения существует единственная байесовская оценка [4], которая дается выражением (3).

Байесовская оценка является несмещенной, эффективной и устойчивой (при уменьшении дисперсии шумов сходится в среднеквадратичном смысле к точному решению уравнения лазерного газоанализа).

Устойчивость полученного методом байесовской оценки решения достигается сужением класса возможных решений и это сужение основывается на вводимой (в решение) априорной информации об искомом решении - задается априорное нормальное распределение искомого решения и его первые два момента (среднее значение и корреляционная матрица). Такая априорная информация может быть вполне доступна во многих задачах, например, при рутинном газоанализе.

3. Проекционный метод

Исходным является уравнение (2), которое в другой форме записи имеет вид

$$\sum_j^{M/2} c_j \Delta K_{ji} = \Delta y_i, \quad i = 1, 2, \dots, M/2. \quad (4)$$

Величина $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_K)$ является вектором в $M/2$ -мерном пространстве (K – число газов в смеси), а каждое из $M/2$ уравнений в (4) рассматривается как гиперплоскость.

Выберем для вектора концентраций газов $\mathbf{C}$ начальное приближение - $\mathbf{c}^{(0)}$. Следующее приближение $\mathbf{c}^{(1)}$ находится как проекция $\mathbf{c}^{(0)}$ на первую гиперплоскость [9,10]

$$\mathbf{c}^{(1)} = \mathbf{c}^{(0)} - [(\mathbf{c}^{(0)} \cdot \vec{\Delta K}_1 - \Delta y_1) \vec{\Delta K}_1] / \vec{\Delta K}_1 \cdot \vec{\Delta K}_1, \quad (5)$$

где $\Delta K_1 = (\Delta K_{11}, \Delta K_{12}, \dots, \Delta K_{1K})$; точкой обозначено скалярное произведение векторов.

Затем вычисляется проекция $\mathbf{c}^{(2)}$, используя формулу (5), векторы $\mathbf{c}^{(1)}$ и $\Delta K_2 = (\Delta K_{21}, \Delta K_{22}, \dots, \Delta K_{2K})$.

Далее вычисляется проекция $c^{(3)}$ и т.д. до проекции $c^{(K)}$. На этом первый цикл итераций заканчивается. Далее проводится второй цикл итераций, который начинается с вектора $c^{(K)}$ и заканчивается вектором $c^{(2K)}$. После m итераций получим в качестве решения вектор $c^{(mK)}$.

Для задачи лазерного газоанализа многокомпонентных газовых смесей в качестве априорной информации может быть использовано среднее значение концентраций газов в качестве начального приближения $c^{(0)}$.

4. Математическое моделирование

Для сравнительного анализа алгоритмов восстановления концентраций газов в сложных многокомпонентных смесях из многоспектральных лазерных измерений проводилось математическое моделирование.

Найденные (с использованием разных алгоритмов обработки) значения концентраций газов $\tilde{c}_j$ сравнивались с исходными (заданными) значениям концентраций c_j и вычислялась погрешность определения концентраций газов

$$\delta_j = \frac{|c_j - \tilde{c}_j|}{c_j}.$$

Математическое моделирование проводилось для одиночных измерений и серии из 1000 единичных измерений. Определялись концентрации газов и средние погрешности δ_j по серии из 1000 измерений.

Результаты математического моделирования приведены на рисунках 1-10. На всех рисунках ряд 1 – метод прямого решения уравнения (1); ряд 2 – метод, основанный на построении байесовской оценки (3) (при построении байесовской оценки относительные среднеквадратические значения возможных изменений концентраций газов задавались равными 95 %); ряд 3 – проекционный метод, для которого в качестве начального приближения взят вектор со средними значениями концентраций газов. Средние значения концентраций газов отличались от заданных значений в большую или меньшую сторону на 80 %.

В практических задачах возникают ситуации, когда не только приближенные исходные данные, но и сама матрица коэффициентов поглощения $\mathbf{W}$ известна не точно (в задаче

газоанализа это соответствует, например, случаю, когда коэффициенты поглощения исследуемых газов известны с ошибками). Случайные ошибки в матрице коэффициентов поглощения (так же как и шум измерения) приводят к погрешностям определения концентраций газов.

На рисунках 1, 2 приведены примеры результатов математического моделирования для шестикомпонентной смеси (этилен-фреон-12-гидразин-аммиак-метанол-этилакрилат) при неточно известной матрице коэффициентов поглощения газов (которая использовалась для восстановления по данным лазерных измерений концентраций газовых компонент смеси). Относительное среднеквадратическое значение шума измерения полагалось равным 3 %.

На рисунке 1 показаны погрешности δ (в процентах) определения концентрации гидразина, для которого в матрице коэффициентов поглощения $\mathbf{W}$ было введено искажение; на рисунке 2 - погрешности определения концентрации одного из других газов смеси (аммиака). На рисунках 1 и 2 введены обозначения: 1- неискаженная матрица коэффициентов поглощения газовых компонент; для 2-4 вместо w_{24} в матрице коэффициентов поглощения стоят коэффициенты: 2 – $0,25 w_{24}$; 3 – $0,4 w_{24}$; 4 – $0,55 w_{24}$. Для проекционного метода использовались пять итераций.

Из рисунка 1 хорошо видно, что для метода прямого решения уравнения лазерного газоанализа с увеличением степени искажения матрицы коэффициентов поглощения газов погрешности определения концентрации гидразина сильно возрастают и становятся неприемлемо большими. Для байесовского и проекционного методов с увеличением степени искажения матрицы коэффициентов поглощения погрешности определения концентрации газов также возрастают, но гораздо медленнее. При этом погрешности для байесовского метода заметно меньше, чем для проекционного.

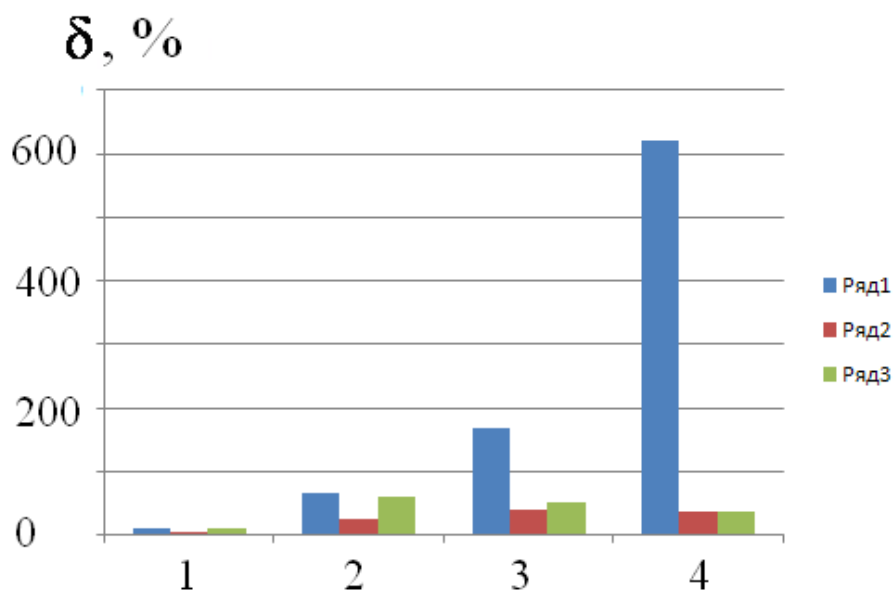


Рис. 1 - Зависимость погрешности определения концентрации гидразина от степени искажения матрицы коэффициентов поглощения газов

Для других газов смеси ситуация похожая, однако, сам уровень погрешностей для всех методов обработки остается небольшим (рисунок 2).

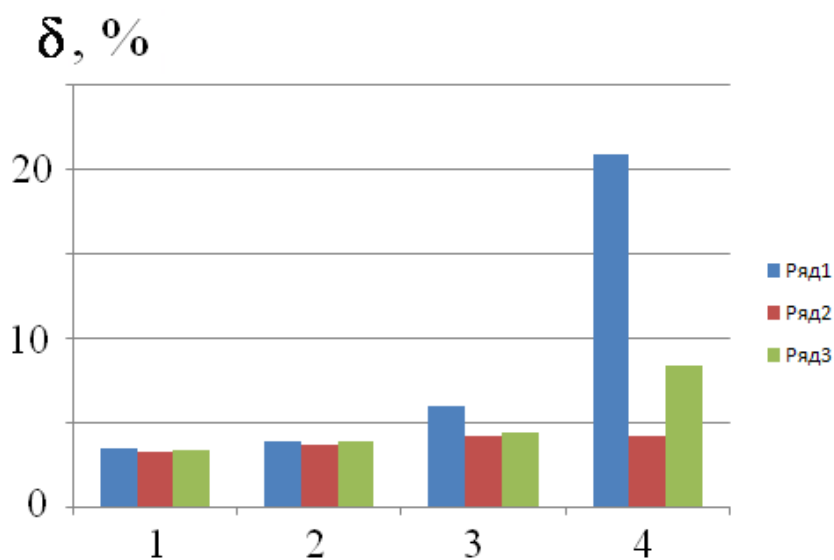


Рис. 2 - Зависимость погрешности определения концентрации аммиака от степени искажения матрицы коэффициентов поглощения газов

При математическом моделировании восстановления концентраций газов в смесях с компонентами без ярко выраженных максимумов в спектрах поглощения исследовались погрешности определения концентраций газовых компонент в шестикомпонентной смеси «этилен – фреон 12 – акролеин – аммиак – метанол – этилакрилат».

Для контроля количественного состава смеси были использованы следующие спектральные каналы измерения: 10P14, 10P10, 10R18, 10R22, 10P20, 10P22, 10R6, 10R12, 9P14, 9P22, 9R14, 9R22 (они соответствуют дискретно перестраиваемому по длине волны лазеру на углекислом газе [2]).

Показатели поглощения газовых компонент на длинах волн λ_{on} и λ_{off} приведены в Таблице 1.

Таблица 1

Показатели поглощения газовых компонент на длинах волн λ_{on} и λ_{off}

Газы	Этилен		Фреон 12		Акролеин	
Спектральные каналы	λ_{on}	λ_{off}	λ_{on}	λ_{off}	λ_{on}	λ_{off}
	10P14	10P10	10R18	10R22	10P22	10P20
Коэффициенты поглощения	32,14	3,09	9,15	0,93	1,75	1,41
Газы	Аммиак		Метанол		Этилакрилат	
Спектральные каналы	λ_{on}	λ_{off}	λ_{on}	λ_{off}	λ_{on}	λ_{off}
	10R6	10R12	9P14	9P22	9R14	9R24
Коэффициенты поглощения	32,5	0,06	9,75	3,65	7,02	4,02

Из таблицы 1 видно, что исследуемая смесь содержит одну газовую компоненту (акролеин), которая не имеет ярко выраженного максимума поглощения при выбранных спектральных каналах измерения.

Примеры результатов математического моделирования приведены на рисунке 3 (для акролеина) и на рисунке 4 (для метанола).

Относительное среднеквадратическое значение шума измерения изменялось при математическом моделировании от 0,5 % до 8 % (шум измерения одинаковый во всех спектральных каналах). Для проекционного метода использовались три итерации. На

рисунках 3 и 4: 1 соответствует среднеквадратическое значение шума измерения 0,5 %; 2 - 1 %; 3 - 2 %; 4 - 4 %; 5 - 8 %.

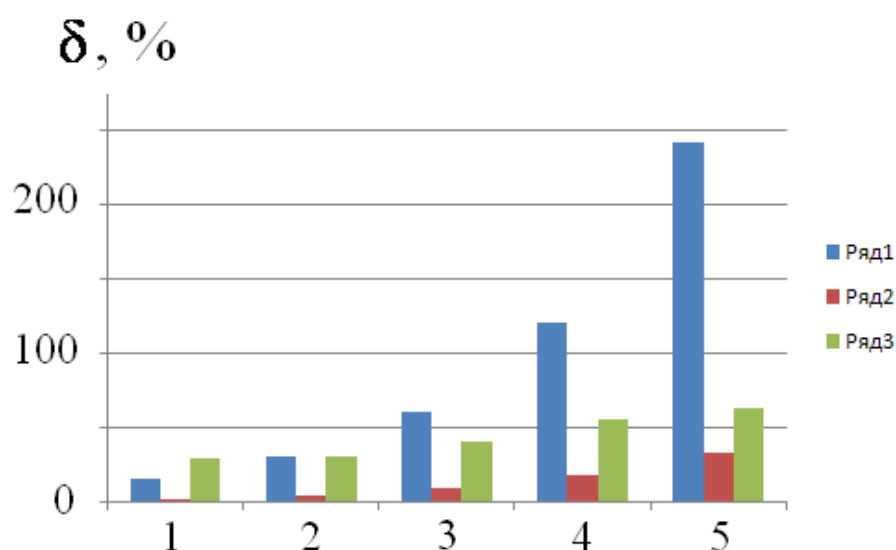


Рис. 3 - Погрешности определения концентрации акролеина, не имеющего ярко выраженного максимума поглощения для выбранных спектральных каналов

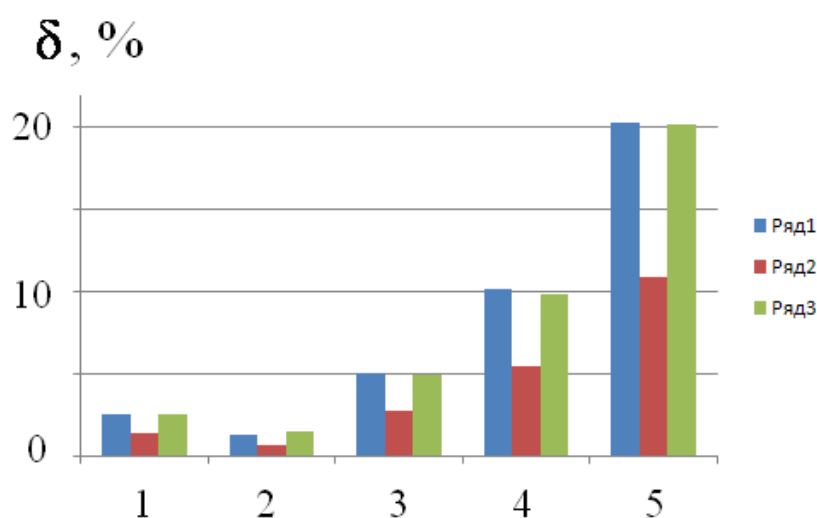


Рис. 4 - Погрешности определения концентрации метанола в смеси с компонентой, не имеющей ярко выраженного максимума поглощения

Из рисунков 3 и 4 видно, что с увеличением шума измерения погрешности определения концентрации газовых компонент стандартным методом решения (ряд 1), использующим обратную матрицу, увеличиваются. Причем, для компоненты, которая не имеет ярко

выраженного максимума поглощения (акролеин), эта погрешность может достигать более 100 % (т.е. концентрация компоненты не определяется) уже при шуме 4 % (ряд 1 на рисунке 3). При использовании байесовского и проекционного методов погрешности определения концентраций газов существенно меньше. При этом погрешности для байесовский метод обеспечивает заметно меньшие погрешности, чем проекционный метод.

Примеры результатов математического моделирования восстановления концентраций газов в смесях с сильно отличающимися концентрациями газов приведены на рисунках 5 – 10. Здесь показаны погрешности определения концентраций газовых компонент в шестикомпонентной смеси «этилен – фреон 12 – гидразин – аммиак – метанол – этилакрилат». Были использованы следующие спектральные каналы измерения: 10P14, 10P10, 10R18, 10R22, 10P22, 10P28, 10R6, 10R12, 9P14, 9P20, 9R14, 9R22 [2]. Относительное среднеквадратическое значение шума измерения в уравнении (1) полагалось равным 5 % (шум измерения одинаковый во всех спектральных каналах). Для проекционного метода использовались 2 итерации. Исходные концентрации газов имеют примерно один порядок: 1,6 10^{-2} ; 2 – 4,6 10^{-3} ; 3 – 8 10^{-3} ; 4 – 8,5 10^{-3} ; 5 – 6,6 10^{-3} ; 6 – 9,2 10^{-3} .

На рисунке 5 приведены погрешности δ определения концентрации этилена при изменении его концентрации в смеси (концентрации остальных компонент соответствуют исходным).

На рисунках 6 и 7 приведены погрешности δ определения концентрации соответственно фреона 12 и гидразина при изменении их концентрации в смеси (концентрации остальных компонент соответствуют исходным).

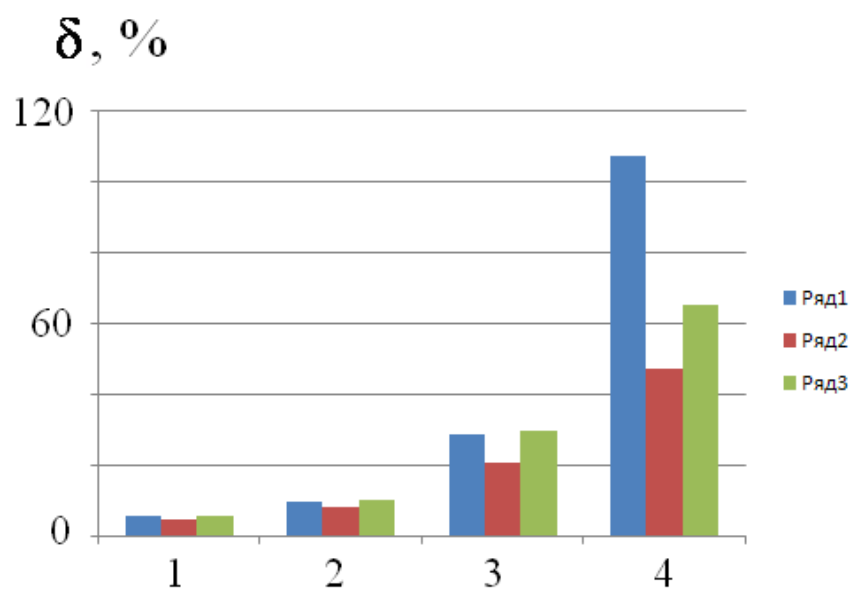


Рис. 5 - Погрешности определения концентрации этилена.

1 соответствует концентрации $1,6 \cdot 10^{-2}$; 2 - $4 \cdot 10^{-3}$; 3 - $1 \cdot 10^{-3}$; 4 - $2,5 \cdot 10^{-4}$.

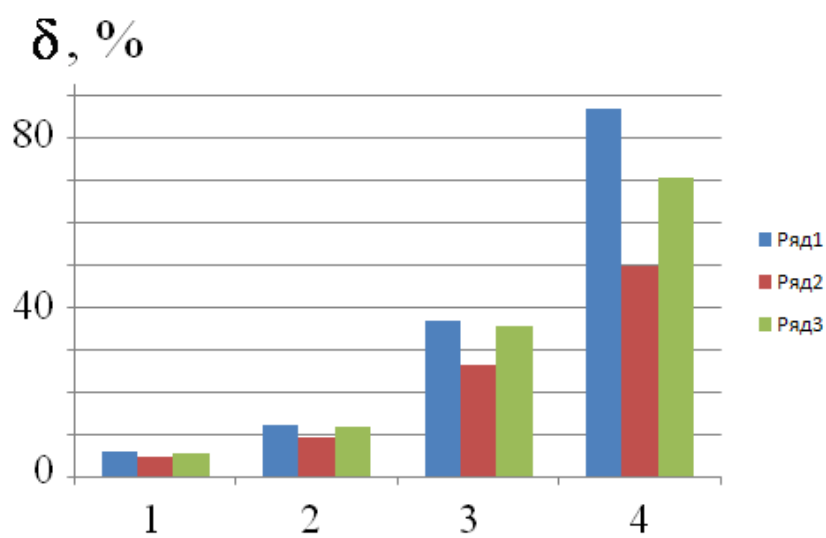


Рис. 6 - Погрешности определения концентрации фреона 12.

1 соответствует концентрации $4,6 \cdot 10^{-2}$; 2 - $1 \cdot 10^{-2}$; 3 - $2,5 \cdot 10^{-3}$; 4 - $1 \cdot 10^{-3}$.

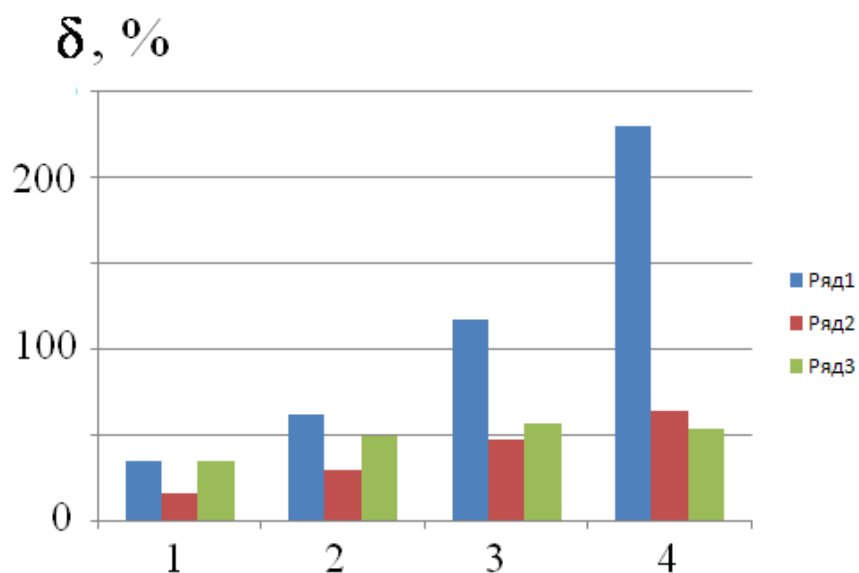


Рис. 7 - Погрешности определения концентрации гидразина.

1 соответствует концентрации $8 \cdot 10^{-3}$; 2 - $4 \cdot 10^{-3}$; 3 - $2 \cdot 10^{-3}$; 4 - 10^{-3} .

На рисунке 8 приведены погрешности δ определения концентрации аммиака при изменении его концентрации (концентрации остальных газов соответствуют исходным).

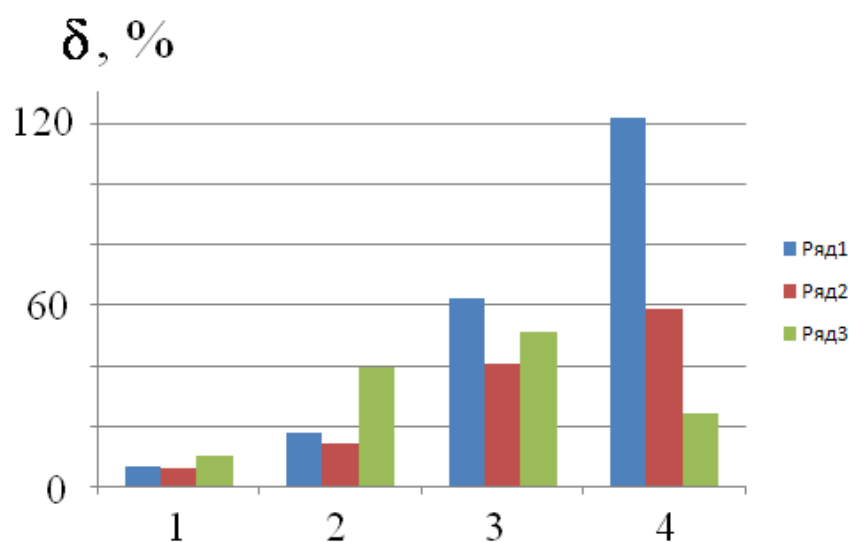


Рис. 8 - Погрешности определения концентрации аммиака.

1 соответствует концентрации $8,5 \cdot 10^{-3}$; 2 - $4 \cdot 10^{-3}$; 3 - $5 \cdot 10^{-4}$; 5 - $2,5 \cdot 10^{-4}$.

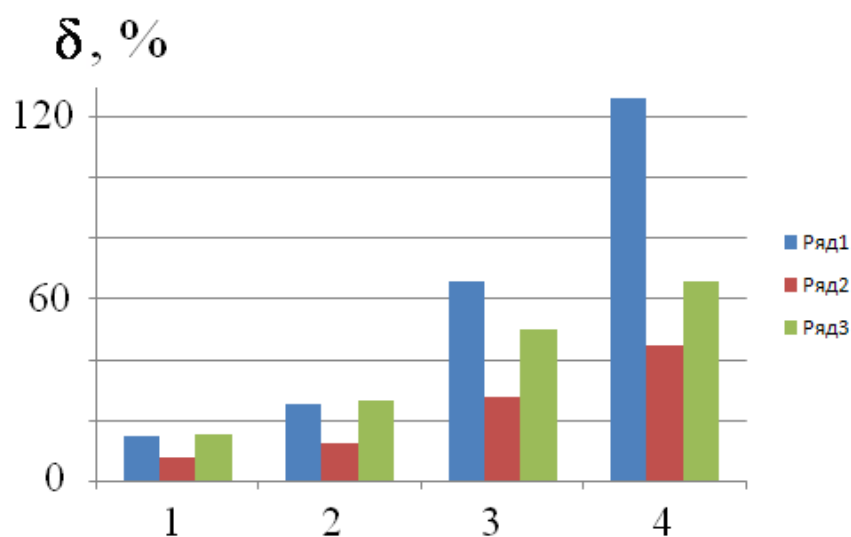


Рис. 9 - Погрешности определения концентрации этилена метанола.

1 соответствует концентрации $6,6 \cdot 10^{-3}$; 2 - $3 \cdot 10^{-3}$; 3 - 10^{-3} ; 4 - $5 \cdot 10^{-4}$.

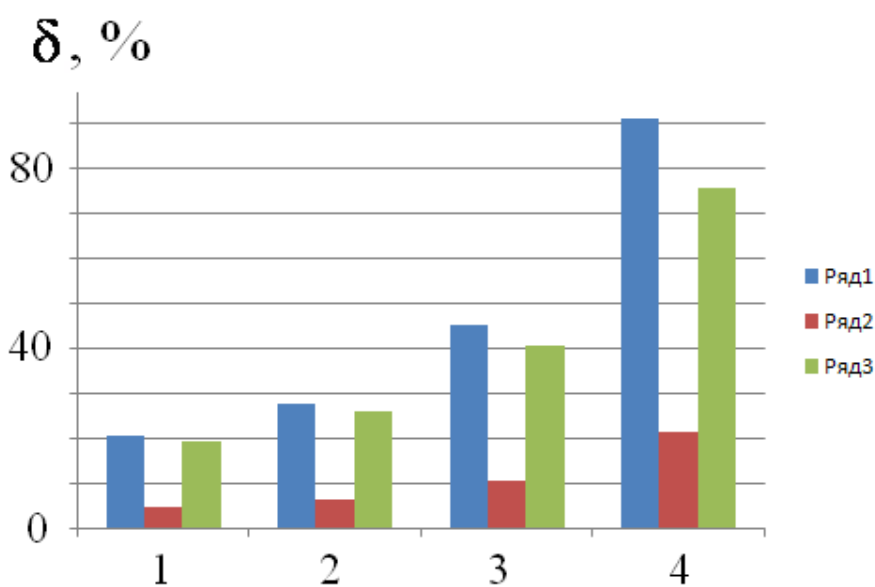


Рис. 10 - Погрешности определения концентрации этилакрилата.

1 соответствует концентрации $9,2 \cdot 10^{-3}$; 2 - $5 \cdot 10^{-3}$; 3 - $2,5 \cdot 10^{-3}$; 4 - 10^{-3} .

На рисунках 9 и 10 приведены погрешности δ определения концентрации соответственно метанола и этилакрилата при изменении их концентрации в смеси (концентрации остальных компонент соответствуют исходным).

Из рисунков 5-10 для всех газов смеси видно, что с уменьшением концентрации газовой компоненты погрешность ее определения стандартным методом решения (ряд 1 на рисунках 5-10), использующим обратную матрицу системы, увеличивается и может достигать сто процентов и более при уменьшении (на один или два порядка и более – в зависимости от газа) концентрации газовой компоненты по сравнению с исходной.

При использовании баессовского и проекционного методов (ряды 2 и 3 на рисунках 5-10) для определения концентрации газовой компоненты погрешность ее определения существенно меньше (чем при использовании стандартного метода решения). В большинстве случаев наименьшие погрешности определения концентраций газов обеспечивает метод, основанный на построении байесовской оценки решения уравнения лазерного газоанализа.

Заключение

В статье проведен сравнительный анализ алгоритмов восстановления концентраций газов из многоспектральных лазерных измерений в сложных многокомпонентных смесях, в которых концентрации компонент газовой смеси отличаются на несколько порядков или присутствуют компоненты без ярко выраженных максимумов в спектрах поглощения. Показано, что использование метода, основанного на построении байесовской оценки решения уравнения лазерного газоанализа, в большинстве случаев обеспечивает наименьшие погрешности определения концентраций газов.

Список литературы

1. Козинцев В.И., Белов М.Л., Городничев В.А., Федотов Ю.В. Основы количественного лазерного анализа. М.: Из-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. 464 с.
2. 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.
3. Оптико-электронные системы экологического мониторинга природной среды / В.И. Козинцев, В.М. Орлов, М.Л. Белов, В.А. Городничев, Б.В. Стрелков. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002. 528 с.
4. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия межмолекулярных взаимодействий в газах / Ю.Н. Пономарев, Б.Г. Агеев, М.В. Зигрист, В.А. Капитанов, Д. Куртуа, О.Ю. Никифорова. Томск: МГП «РАСКО», 2000. 200 с.

5. Пономарев Ю.Н. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия атмосферы // Оптика атмосферы и океана. 1995. Т. 8, № 1-2. С. 224-241.
6. Лазерная аналитическая спектроскопия / В.С. Антонов, Г.И. Беков, М.А. Большов, В.П. Жаров, В.С. Летохов, Ю.А. Курицын, Р.И. Персонов, А.Н. Шибанов. М.: Наука, 1986. 320 с.
7. Белов М.Л., Добрица Д.Б., Козинцев В.И., Городничев В.А. Восстановление концентраций компонент газовых смесей из многоспектральных лазерных измерений методом статистической регуляризации // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2001. № 3. С. 36-43.
8. 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. 2002. Т. 15, № 4. С. 388-392.
9. Еременко Л.Н., Козинцев В.И., Городничев В.А. Метод байесовских оценок в задаче лазерного газоанализа // Известия вузов. Физика. 2008. № 9. С. 29-35.
10. Козинцев В.И., Иден Г., Белов М.Л., Смирнова О.А., Городничев В.А., Еременко Л.Н., Федотов Ю.В. Определение концентраций газов в сложных многокомпонентных смесях методом байесовских оценок // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2009. № 4. С. 1-13.
11. Городничев В.А., Белов М.Л., Бусаргин А.Ю., Еременко Л.Н. Лазерный анализ многокомпонентных смесей газов с сильно отличающимися концентрациями // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2013. № 2. DOI: [10.7463/0213.0539070](https://doi.org/10.7463/0213.0539070)
12. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.
13. Воскобойников Ю.Э., Преображенский Н.Г., Седельников А.Н. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1984. 238 с.
14. 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.
15. 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.

16. Авдиенко В.В., Белов М.Л., Городничев В.А., Добрица Д.Б., Козинцев В.И. Мониторинг многокомпонентных газовых смесей с помощью лазерного оптико-акустического полигазоанализатора // Журнал прикладной спектроскопии. 1996. Т. 65, № 5. С. 755-759.
17. Белов М.Л., Добрица Д.Б., Городничев В.А., Козинцев В.И. 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.

Quantitative gas analysis of complex multicomponent mixtures

10, October 2013

DOI: 10.7463/1013.0615247

Belov M.L.

Bauman Moscow State Technical University, 105005, Moscow, Russian Federation

belov@bmstu.ru

This paper deals with a comparative analysis of algorithms for regenerating concentration of gases in complex multicomponent mixtures by means of multispectral laser measurements. Signal processing methods for complex multicomponent mixtures based on the Bayesian assessment of a solution and the projective method are described in this work. The results of the mathematical simulation show that usage of the Bayesian assessment for a solution of the laser gas analysis system of equations allows to solve a problem of regenerating concentration of gases for complex multicomponent mixtures with smaller errors than usage of the projective method.

Publications with keywords: [laser](#), [Bayesian estimator](#), [projective method](#), [quantified gas analysis](#), [complex multicomponent gas mixtures](#)

Publications with words: [laser](#), [Bayesian estimator](#), [projective method](#), [quantified gas analysis](#), [complex multicomponent gas mixtures](#)

References

1. Kozintsev V.I., Belov M.L., Gorodnichev V.A., Fedotov Iu.V. *Osnovy kolichestvennogo lazernogo analiza* [Fundamentals of quantitative analysis of the laser]. Moscow, Bauman MSTU Publ, 2006. 464 p.
2. Belov M.L., Gorodnichev V.A., Kozintsev V.I., Fedotov Iu.V. *Lazernyi optiko-akusticheskii analiz mnogokomponentnykh gazovykh smesei* [Laser optical-acoustic analysis of multicomponent gas mixtures]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2003. 352 p.
3. Kozintsev V.I., Orlov V.M., Belov M.L., Gorodnichev V.A., Strelkov B.V. *Optiko-elektronnye sistemy ekologicheskogo monitoringa prirodnoi sredy* [Optical-electronic systems of environmental monitoring of the natural environment]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2002. 528 p.

4. Ponomarev Iu.N., Ageev B.G., Zigris M.V., et al. *Lazernaia optiko-akusticheskaia spektroskopiia mezhmolekuliarnykh vzaimodeistvii v gazakh* [Laser optical-acoustic spectroscopy of intermolecular interactions in gases]. Tomsk, MGP «RASKO» Publ., 2000. 200 p.
5. Ponomarev Iu.N. Lazernaia optiko-akusticheskaia spektroskopiia atmosfery [Laser optical-acoustic spectroscopy of the atmosphere]. *Optika atmosfery i okeana*, 1995, vol. 8, no. 1-2, pp. 224-241.
6. Antonov V.S., Bekov G.I., Bol'shov M.A., Zharov V.P., Letokhov V.S., Kuritsyn Yu.A., Personov R.I., Shibanov A.N. *Lazernaya analiticheskaya spektroskopiya* [Laser analytical spectroscopy]. Moscow, Nauka, 1986. 320 p.
7. Belov M.L., Dobritsa D.B., Kozintsev V.I., Gorodnichev V.A. Vosstanovlenie kontsentratsiy komponent gazovykh smesey iz mnogospektral'nykh lazernykh izmereniy metodom statisticheskoy regulyarizatsii [Restoration of concentrations of the components of gas mixtures of multispectral laser measurement by the method of statistical regularization]. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Priborostroenie* [Herald of the Bauman MSTU. Ser. Instrument Engineering], 2001, no. 3, pp. 36-43.
8. Belov M.L., Gorodnichev V.A., Kozintsev V.I., Fedotov Iu.V. Metod poiska kvazireshenii v zadache lazernogo optiko-akusticheskogo gazoanaliza [The search method of quasi-solutions in the problem of laser optical-acoustic gas analysis]. *Optika atmosfery i okeana*, 2002, vol. 15, no. 4, pp. 388-392.
9. Eremenko L.N., Kozintsev V.I., Gorodnichev V.A. Metod baiesovskikh otsenok v zadache lazernogo gazoanaliza [The method of Bayesian estimators in the problem of laser gas analysis]. *Izvestiia VUZov. Fizika*, 2008, no. 9, pp. 29-35.
10. Kozintsev V.I., Iden G., Belov M.L., Smirnova O.A., Gorodnichev V.A., Eremenko L.N., Fedotov Yu.V. Opreделение kontsentratsiy gazov v slozhnykh mnogokomponentnykh smesyakh metodom bayesovskikh otsenok [Determination of the concentrations of gases in complex multi-component mixtures by the method of Bayesian estimates]. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Priborostroenie* [Herald of the Bauman MSTU. Ser. Instrument Engineering], 2009, no. 4, pp. 1-13.
11. Gorodnichev V.A., Belov M.L., Busargin A.Yu., Eremenko L.N. Lazernyy analiz mnogokomponentnykh smesey gazov s sil'no otlichayushchimisya kontsentratsiyami [Laser gas analysis for multicomponent gas mixtures with essentially different gas concentration]. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana* [Science and Education of the Bauman MSTU], 2013, no. 2. DOI: [10.7463/0213.0539070](https://doi.org/10.7463/0213.0539070)
12. Tikhonov A.N., Arsenin V.Ia. *Metody resheniia nekorrektnykh zadach* [Methods of solution of incorrect problems]. Moscow, Nauka, 1979, 288 p.
13. Voskoboinikov Iu.E., Preobrazhenskii N.G., Sedel'nikov A.N. *Matematicheskaya obrabotka eksperimenta v molekuliarnoi gazodinamike* [Mathematical treatment of the experiment in molecular gas dynamics]. Novosibirsk, Nauka, 1984, 238 p.
14. Makushkin Yu.S., Mitsel' A.A., Khmel'nitskiy G.S. Lazernaya absorbtionnaya diagnostika atmosferykh gazov [Laser absorption diagnosis of atmospheric gases]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*, 1981, vol. 35, iss. 5, pp. 785-790. (English Translation: *Journal of Applied Spectroscopy*, 1981, vol. 35, iss. 5, pp. 1192-1196. DOI: 10.1007/BF00624111)

15. Kozintsev V.I. Ob obrabotke signalov lazernogo optiko-akusticheskogo gazoanalizatora pri analize mnogokomponentnykh gazovykh smesey [On the signal processing of laser optical-acoustic gas analyzer at analysis of multi-component gas mixtures]. *Optika atmosfery i okeana*, 1996, vol. 9, no. 10, pp. 1373-1378.
16. Avdienko V.V., Belov M.L., Gorodnichev V.A., Dobritsa D.B., Kozintsev V.I. Monitoring mnogokomponentnykh gazovykh smesey s pomoshch'yu lazernogo optiko-akusticheskogo poligazoanalizatora [Monitoring of multicomponent gas mixtures by means of a laser optical-acoustic polygas analyzer]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*, 1996, vol. 65, no. 5, pp. 755-759. (English Translation: *Journal of Applied Spectroscopy*, 1996, vol. 63, iss. 5, pp. 631-635. DOI: 10.1007/BF02606852).
17. Belov M.L., Dobritsa D.B., Gorodnichev V.A., Kozintsev V.I. Sravnitel'nyy analiz metodov vosstanovleniya kontsentratsiy gazov v mnogokomponentnykh smesyakh iz dannykh izmereniy lazernogo optiko-akusticheskogo gazoanalizatora [Comparative analysis of methods of recovery concentrations of gases in multicomponent mixtures from the measurement data of the laser optical-acoustic gas analyzer]. *Optika atmosfery i okeana*, 2000, vol. 13, no. 2, pp. 146-150.