

На правах рукописи



Фуфурин Игорь Леонидович

**РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ И АЛГОРИТМА ПРОЦЕССА
РАСПОЗНАВАНИЯ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ ПО ЕДИНИЧНОМУ
ИЗМЕРЕНИЮ ФУРЬЕ-СПЕКТРОРАДИОМЕТРА**

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2010

Работа выполнена на кафедре «Физика» Московского государственного
технического университета имени Н.Э. Баумана

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Морозов Андрей Николаевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Волков Игорь Куприянович

кандидат физико-математических наук
Бравый Борис Григорьевич

Ведущая организация Научно-технологический центр уникального
приборостроения Российской академии наук

Защита диссертации состоится «___» _____ 2010 года в ___ час. ___
мин. на заседании диссертационного совета Д 212.141.15 при Московском
государственном техническом университете имени Н.Э. Баумана по адресу:
105005, г. Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью
организации, просим выслать по адресу: 105005, г. Москва, 2-я Бауманская ул.,
д.5, МГТУ им. Н.Э. Баумана, ученому секретарю совета Д 212.141.15.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского
государственного технического университета имени Н.Э. Баумана.

Автореферат разослан «___» _____ 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета, кандидат технических наук,
старший научный сотрудник, доцент



Аttetkov A.V.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. В настоящее время существует ряд актуальных научных и технологических приложений, где необходимо проводить дистанционный беспробоотборный газоанализ: экологический мониторинг состояния атмосферы; контроль за вредными выбросами промышленных предприятий, утечками на газопроводах; обнаружение токсичных и ядовитых веществ; обнаружение веществ в условиях повышенных температур и давлений, в быстро меняющихся условиях. По этим причинам необходима разработка методик и аппаратуры дистанционного контроля состава атмосферы, позволяющих работать в режиме реального времени в сочетании с высокой мобильностью. Перспективным направлением среди оптических методов контроля за составом атмосферы являются фурье-спектрорадиометрические комплексы, которые получили наибольшее распространение в качестве систем пассивного типа, которые регистрируют собственное тепловое излучение и не требуют (в отличие, например, от лидарных комплексов) применения мощного источника подсветки, что значительно снижает энергопотребление, массу, габаритные размеры и стоимость комплексов. Для наибольшей эффективности работы в пассивном режиме фурье-спектрорадиометрические комплексы работают в диапазоне 7-14 мкм, на который приходится максимум собственного теплового излучения и окно прозрачности атмосферы.

Ключевым звеном фурье-спектрорадиометрических систем является система сбора и обработки информации, основой которой служат алгоритмы и программный комплекс интерпретации экспериментальной информации. Принципы обработки экспериментальной информации и реализующие их численные процедуры обуславливают характеристики работы программного комплекса и области применения фурье-спектрорадиометрических систем.

Для идентификации веществ в открытой атмосфере может применяться математическое моделирование переноса излучения в атмосфере на основе уравнения переноса излучения в среде с использованием спектральных баз данных типа HITRAN или GEISHA и численных методов полинейного счета. Проведение подобных процедур требует достаточно высокой квалификации исследователя, наличия метеорологической информации о трассе наблюдения и занимает значительное время, что делает невозможным работу в натуральных условиях в режиме реального времени. Подобные подходы применяются совместно со спектрометрами высокого разрешения в аналитических целях.

Альтернативным подходом является экспресс-анализ нормированных спектров искомых веществ среднего разрешения, которые рассчитываются на основе фонового спектра трассы наблюдения и спектра трассы при наличии на ней исследуемого вещества. При таком подходе к распознаванию веществ не требуется метеорологическая информация, но необходима предварительная регистрация фонового спектра трассы наблюдения. Однако в ряде случаев, когда нет принципиальной возможности зарегистрировать фоновый спектр (начальное загрязнение трассы наблюдения, длительное сопровождение облака целевых веществ, медленное изменение концентраций и т.п.), требуется разработать модель процесса распознавания веществ по единичному измерению фурье-спектрометра (ФСР).

Таким образом, актуальность темы обусловлена необходимостью разработки модели и алгоритмов процесса интерпретации экспериментальной информации для качественного и количественного анализа веществ в открытой атмосфере в тех случаях, когда нет возможности зарегистрировать фоновый спектр трассы наблюдения, но необходима работа в режиме реального времени. В этих случаях хорошо зарекомендовавший себя метод экспресс-анализа экспериментальных данных ФСР, требующий наличия фонового спектра, можно дополнить предлагаемым в диссертационной работе подходом, что расширит области применения ФСР комплексов для дистанционного беспроботборного газоанализа веществ в открытой атмосфере в режиме реального времени. Корректное сочетание двух подходов позволит разработать более универсальную систему интерпретации экспериментальной информации, получаемой с инфракрасного (ИК) ФСР среднего спектрального разрешения.

Цель работы – разработка модели и алгоритмов процесса идентификации веществ в открытой атмосфере и определения их интегральных концентраций по единичному измерению фурье-спектрометра.

Задачи исследования:

1. Разработка математической модели процесса прохождения ИК излучения в атмосфере, не требующей сторонней метеорологической информации и предназначенной для моделирования атмосферных спектров за существенно ограниченное время.

2. Разработка модели и алгоритмов процесса идентификации веществ в открытой атмосфере и восстановления их интегральных концентраций, которые не требуют предварительной регистрации фонового спектра трассы наблюдения.

3. Разработка программного комплекса на основе предложенных моделей и алгоритмов.

4. Апробация разработанных алгоритмов и программного комплекса в сериях вычислительных, лабораторных и натуральных экспериментов.

5. Сравнительный анализ результатов распознавания, полученных с помощью разработанных в диссертационной работе алгоритмов и программного комплекса, с результатами, полученными на основе альтернативных подходов к распознаванию веществ в атмосфере.

Методы исследования:

Для разработки моделей и алгоритмов процесса распознавания веществ предполагается применение современных численных методов решения обратных задач спектроскопии: методы линеаризации обратных задач, методы корреляционного анализа, регуляризации, поиска квазирешений. Кроме того, в диссертации применяются методы цифровой фильтрации сигналов, методы компьютерного моделирования и визуализации. Для решения задачи спектрального анализа используются банки данных, содержащие спектроскопическую информацию в инфракрасной области спектра для широкого круга веществ.

Достоверность и обоснованность полученных результатов обеспечена апробацией алгоритмов и программного комплекса в сериях вычислительных экспериментов; сопоставлением результатов обработки данных лабораторных экспериментов с результатами, полученными с помощью альтернативных моделей распознавания веществ, а также с результатами, полученными на контрольно-измерительной аппаратуре; апробацией разработанных алгоритмов и программного комплекса в натуральных экспериментах.

Научная новизна:

1. Предложена математическая модель процесса переноса ИК излучения в атмосфере, позволяющая рассчитывать спектры открытых атмосферных трасс. Математическая модель реализована в алгоритмах и комплексе программ, предназначенном для работы в режиме реального времени и не требующем метеорологической информации о трассе наблюдения.

2. Разработана новая модель процесса распознавания веществ, которая позволяет на основе единичного экспериментального энергетического спектра трассы наблюдения идентифицировать вещества в открытой атмосфере и определять их интегральные концентрации. Применение разработанных моделей и алгоритмов не предусматривает предварительной регистрации фонового спектра трассы наблюдения.

3. Разработанная модель и алгоритмы процесса распознавания веществ апробированы в серии вычислительных экспериментов. Показано, что ошибка восстановления концентраций веществ и ее среднеквадратическое значение линейно зависят от уровня шума в экспериментальном энергетическом спектре; минимальный рабочий температурный контраст составляет величину порядка 1° , а относительная ошибка восстановления концентраций веществ для рабочего уровня шума составляет величину порядка 30 %.

4. В серии лабораторных испытаний показано, что для условий начальной загрязненности трассы наблюдения или условий медленного изменения концентраций веществ предложенная модель процесса распознавания веществ позволяет как значительно эффективнее и надежнее идентифицировать вещества, так и с меньшей погрешностью восстанавливать их концентрации, относительно метода экспресс-анализа, требующего предварительную регистрацию фоновых спектров.

Практическая значимость. Разработанные алгоритмы реализованы в программном комплексе, предназначенном для качественного и количественного анализа веществ в открытой атмосфере на основе экспериментальной информации, получаемой с ИК ФСР среднего спектрального разрешения. Для работы программного комплекса не требуется предварительной регистрации фонового спектра трассы наблюдения, а также метеорологической информации о трассе наблюдения. Разработанные алгоритмы и программный комплекс предназначены для работы в режиме реального времени.

Разработанные алгоритмы и программный комплекс расширяют области применения методик экспресс-анализа веществ, предусматривающих предварительную регистрацию фоновых спектров, что делает ИК ФСР системы универсальными средствами беспроботборного газоанализа пассивного типа.

Разработанные алгоритмы и программный комплекс совместно с ИК ФСР среднего спектрального разрешения предназначены для проведения в пассивном режиме беспроботборного мониторинга утечек на газопроводах, выбросов на промышленных предприятиях, появления отравляющих веществ в ходе террористических актов либо военных действий и других задач. Разработанные алгоритмы и программный комплекс можно применять в условиях начальной загрязненности трассы наблюдения, а также для длительного сопровождения облака целевых веществ.

Работоспособность и применимость разработанных алгоритмов и программного комплекса продемонстрирована в сериях лабораторных и натуральных экспериментов.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Математическая модель процесса переноса ИК излучения в атмосфере, не требующая априорной метеорологической информации о трассе наблюдения и реализованная в алгоритмах и комплексе программ, работающем в режиме реального времени.

2. Модель и алгоритмы процесса идентификации и восстановления концентраций веществ в открытой атмосфере, не требующие предварительной регистрации фонового спектра трассы наблюдения.

3. Программный комплекс, реализующий разработанные алгоритмы и предназначенный для интерпретации в режиме реального времени экспериментальной информации, регистрируемой на ИК ФСР среднего спектрального разрешения.

4. Результаты апробации разработанных алгоритмов в вычислительных экспериментах, результаты исследования влияния шумов во входных данных на ошибки решения обратной задачи, а также границы применимости предложенной модели процесса распознавания по концентрациям целевых веществ и температурному контрасту трассы наблюдения.

5. Результаты апробации алгоритмов и программного комплекса в сериях лабораторных и натуральных экспериментов, а также сравнительный анализ результатов работы предлагаемых алгоритмов процесса распознавания веществ с результатами работы альтернативных алгоритмов, позволяющий оценить применимость, эффективность и надежность работы предлагаемой модели и алгоритмов для решения задачи распознавания веществ.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались на научно-методических конференциях аспирантов и молодых исследователей «Актуальные проблемы фундаментальных наук» (Москва, 2008 – 2010); Bauman annual post graduate conference (Moscow, 2008); конкурсе-конференции научных работ в области физики студентов и аспирантов (Москва, 2009); V Всероссийской конференции «Необратимые процессы в природе и технике» (Москва, 2009); Всероссийских научных конференциях студентов-физиков и молодых ученых (Кемерово, 2009; Волгоград, 2010); III Международной конференции «Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации» (Суздаль, 2009); конкурсе-конференции молодых физиков (Москва, 2010) (лауреат 1-ой степени в секции «Прикладная физика»).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 13 работах, в том числе в 2-х статьях из Перечня рецензируемых ведущих научных журналов и изданий [3, 5] и 11 тезисах докладов и трудах конференций [1, 2, 4, 6 – 13].

Личный вклад соискателя. Соискателем разработана математическая модель прохождения ИК излучения в атмосфере, которая была реализована в вычислительных алгоритмах. Алгоритмы позволяют моделировать спектры пропускания открытых атмосферных трасс, для чего используется созданная соискателем атмосферная база экспериментальных спектров открытых атмосферных трасс и ряда отдельных атмосферных поглотителей. Предложена модель и алгоритмы процесса распознавания веществ и восстановления их концентраций. Разработанные алгоритмы реализованы в программном комплексе и апробированы в сериях вычислительных, лабораторных и натуральных экспериментов. При разработке программного комплекса, соискатель преобразовал структуру существующего программного обеспечения ФСР, разработал ряд дополнительных вычислительных модулей и расчетно-аналитических процедур, а также доработал интерфейс управляющей программы. Изменения проведены с целью реализации разработанных в диссертации алгоритмов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 4-х глав, заключения, списка литературы и приложения. Диссертационная работа изложена на **151** странице, содержит **31** иллюстрацию и **7** таблиц. Библиография включает **111** наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи работы, научная новизна, практическая значимость работы, основные положения, выносимые на защиту, и описана структура диссертации.

Первая глава носит обзорный характер и посвящена современным методикам и системам газоанализа, а также математическим моделям, численным методам и программным комплексам, применяемым для решения задач спектрального анализа. Проанализирована актуальность применения подобных систем, продемонстрированы ситуации, в которых существующие методики экспресс-анализа неэффективны, а предлагаемые альтернативные подходы не дают желаемого результата. На основании проведенного анализа сформулированы цель и задачи диссертационной работы.

Приведен обзор ФСР систем по областям их применения в зависимости от спектрального разрешения, длительности цикла обработки спектров, дальности обнаружения веществ и других параметров. Выявлены актуальные области применения ФСР систем, требующие разработки новых подходов к обработке экспериментальной информации, в частности, разработки методики и алгоритмов интерпретации единичного измерения ИК ФСР, что является целью настоящего исследования. Показаны подходы, применяемые в настоящее время в мире к решению данной задачи, выявлены возможности для дальнейшего исследования в данной области.

Приведена классификация методик интерпретации спектральной информации, применяемых в ИК ФСР системах. Показано, что наибольшая точность достигается при использовании методик, основанных как на анализе отдельных линий и полос поглощения в спектре (данный подход ориентирован на определенное вещество, а переход к другому веществу предполагает проведение дополнительного исследования), так и на использовании математических моделей переноса излучения в среде (FASCODE, MODTRAN, DISORT и др.). Каждая из подобных математических моделей имеет свою специфику, и только корректный выбор модели обеспечит необходимое качество и точность спектрального анализа. При этом, хотя данный подход и позволяет интерпретировать единичный энергетический спектр, применение подобных математических моделей предполагает наличие метеорологической информации о трассе наблюдения, высокой квалификации исследователя, а также занимает значительные временные и вычислительные ресурсы, что делает их неприменимыми для работы в режиме реального времени и сужает области применения. Далее рассмотрены современные методы и алгоритмы экспресс-анализа (анализ в режиме реального времени) экспериментальных спектральных данных, и показано что для решения задачи диссертационного исследования наиболее целесообразно применять методы, основанные на экспресс-анализе нормированных спектров среднего разрешения.

Рассмотрены численные методы, применяемые при обработке экспериментальной информации и решении обратных задач спектроскопии, выявлены основные особенности получаемых решений, а также определены подходы к численному решению поставленной в диссертации задачи: корреляционный анализа, метод регуляризации, метод поиска квазирешений.

Приведен обзор спектральных баз данных, на основании которых проводят расчеты с применением как численных методов полинейного счета (базы HITRAN, EPA USA, IBC SPECTRA и др.), так и методов экспресс-

анализа (базы референтных спектров среднего спектрального разрешения). Показано, что для решения поставленных в диссертации задач наиболее целесообразно применять базы данных референтных спектров целевых веществ среднего разрешения. Проведен обзор программных комплексов анализа спектральной информации, проанализирована их базовая структура. На основании опыта практической реализации алгоритмов анализа экспериментальной информации, определены подходы к проектированию и созданию комплекса программ, реализующего разрабатываемые в диссертационной работе математические модели и алгоритмы.

Вторая глава посвящена постановке и численному решению задачи идентификации веществ в открытой атмосфере и восстановлению их интегральных концентраций на основе единичного энергетического спектра трассы наблюдения. Описаны алгоритмы решения задачи, а также исследованы свойства полученных решений.

Рассматривается методика пассивного мониторинга, когда регистрируется только собственное излучение изучаемых объектов, находящихся на линии обзора ФСР. Пренебрегая рассеянием излучения, и разбивая трассу прохождения излучения на несколько плоских слоев со схожими оптическими свойствами, уравнение переноса излучения в среде можно записать следующим образом:

$$B(\nu) = \Phi_0(\nu)e^{-D_1(\nu)}e^{-D_2(\nu)} + P(T_1, \nu)(1 - e^{-D_1(\nu)}) + P(T_2, \nu)(1 - e^{-D_2(\nu)})e^{-D_1(\nu)}.$$

Здесь T – температура; $D(\nu)$ – оптическая толщина газового слоя; $\Phi_0(\nu)$ – спектр излучения подстилающей поверхности; индекс 1 относится к атмосфере, а 2 – к целевым веществам; T_0 – температура подстилающей поверхности; $P(T, \nu)$ – функция излучения абсолютно черного тела (АЧТ). Далее, полагая, что приземные слои атмосферной трассы и примесей находятся при близких температурах ($T_1 \cong T_2$), что характерно для приземных трасс наблюдения, а также, что подстилающая поверхность излучает подобно АЧТ, уравнение переноса излучения в среде запишем в следующем виде $B(\nu) = P(T_0, \nu)e^{-(D_1(\nu)+D_2(\nu))} + P(T_{eff}, \nu)(1 - e^{-(D_1(\nu)+D_2(\nu))})$, где T_0 и T_{eff} – эффективные температуры подстилающей поверхности и газовой составляющей соответственно. Поскольку точное значение температур неизвестно, то для исключения температурной зависимости нормируется энергетический спектр $B(\nu)$. Для этого ранжируются спектр $B(\nu)$ и две функции излучения АЧТ вида: $P^*(T, \nu) = (1 + \eta \cdot \nu) \cdot P(T + \Delta T, \nu)$, где η и ΔT – параметры модификации, которые варьируются в заданных пределах. Нормированный спектр

пропускания трассы наблюдения $\tau_{\Sigma}(\nu) = \frac{B(\nu) - P(T_1, \nu)}{P(T_0, \nu) - P(T_1, \nu)}$ не зависит от температуры и содержит сигнатуры всех веществ на трассе наблюдения. Поскольку оптическая толщина аддитивна для невзаимодействующих веществ, переходим к анализу спектров оптической толщины газовой составляющей трассы наблюдения $\tau_{\Sigma}(\nu) = e^{-D_{\Sigma}(\nu)}$. В итоге, задача преобразуется к системе линейных уравнений:

$$\begin{cases} K^h C = D_{\Sigma}^{\delta}, \\ C \geq 0, \end{cases}$$

где C – вектор искоемых концентраций веществ; D_{Σ} – спектр оптической толщины трассы наблюдения; K – матрица референтных спектров веществ, зарегистрированных в лабораторных условиях и записанных в базу данных; h и δ – погрешности измерения референтных и экспериментальных спектров соответственно.

Укажем свойства полученной линейной системы: во-первых, нет априорной информации о качественном составе газовой смеси; во-вторых, непосредственное решение нормальной системы вида $\tilde{C} = (K_h^T K_h)^{-1} K_h^T D_{\delta}$ может не удовлетворять условию неотрицательности концентраций из-за ошибок регистрации спектров; в-третьих, предложенное решение может быть неустойчивым из-за вырожденности матрицы $K^T K$ нормальной точной системы; в-четвертых, даже если формально решение $\tilde{C} = (K_h^T K_h)^{-1} K_h^T D_{\delta}$ устойчиво, обусловленность матрицы точной системы может быть крайне низкой, что приведет к сильному разбросу полученных значений концентраций при небольших ошибках во входных данных и значительно снизит достоверность полученных решений.

Применение стандартных вариантов метода регуляризации к решению задачи в исходной постановке не позволяет получить решение корректное с физической точки зрения, описывающее химический состав исследуемой смеси, из-за отсутствия достаточной априорной информации об искомом решении задачи обратной задачи. Вместо этого в диссертационной работе предлагается решение исходной обратной задачи разбить на три этапа.

Этап 1. Математическое моделирование процесса прохождения ИК излучения в атмосфере, на основе экспериментального нормированного спектра $\tau_{\Sigma}(\nu)$ и атмосферной базы данных, без использования метеорологической информации о трассе наблюдения. Полученный атмосферный спектр $\tau_{atm}(\nu)$

позволяет затем удалить из исходного спектра $\tau_{\Sigma}(\nu)$ сигнатуры основных атмосферных поглотителей. Моделирование прохождения ИК излучения в атмосфере осуществляется на основании атмосферной базы данных. Расчет спектра осуществляется минимизацией функционала вида:

$$\Phi(\Gamma) = \int_{\nu_{\min}}^{\nu_{\max}} \left(\rho^2(\Gamma, \tau_{\Sigma}(\nu)) + \alpha \Omega(\Gamma, \tau_{\Sigma}(\nu)) \right) w_{\tau_{\Sigma}}(\nu) d\nu \rightarrow \min_{\Gamma},$$

$$\rho(\Gamma, \tau_{\Sigma}(\nu)) = \exp\left(-\sum_{k=1}^M \gamma_k D_k(\nu)\right) - \tau_{\Sigma}(\nu), \quad \Omega(\Gamma, \tau_{\Sigma}(\nu)) = \exp[-\rho(\Gamma, \tau_{\Sigma}(\nu))],$$

где M – число спектров базы данных, используемых в оптимизации функционала; $\Gamma = \{\gamma^j\}^{j=1..M}$ – коэффициенты пропорциональности; $w_{\tau_{\Sigma}}(\nu)$ – весовая функция; ρ – невязка расчетного и экспериментального спектров; Ω – стабилизирующий функционал, позволяющий проводить минимизацию на множестве $\tau_{\Sigma}(\nu) \leq \tau_{atm}(\nu), \nu \in [\nu_{\min}, \nu_{\max}]$; α – весовой множитель. Итоговые значения коэффициентов Γ не представляют интереса в контексте решаемой задачи, поэтому на первом этапе нет проблем, связанных с некорректностью задачи. Поскольку функционал дифференцируем по Γ , для оптимизации применяется метод градиентного спуска.

Этап 2. После моделирования атмосферного спектра вычисляется нормированный спектр искомым целевым веществ, исходя из зависимости $\tau_{\Sigma}(\nu) = \tau_{atm}(\nu) \cdot \tau_{sub}(\nu), \tau(\nu) \in [0, 1]$. Для идентификации вещества проводится корреляционный анализ полученного спектра целевых веществ $\tau_{sub}(\nu)$ и со всеми элементами базы данных референтных спектров веществ. Для этого, предварительно в лабораторных условиях регистрируются референтные спектры веществ с известными значениями концентраций. Для спектра $\tau_{sub}(\nu)$ и каждого i -го вещества базы данных со спектром $\tau_{db}^i(\nu)$ последовательно рассчитывается коэффициент корреляции

$$r_i(\tau_{sub}, \tau_{db}^i) = \frac{\langle \tau_{sub} - \bar{\tau}_{sub}, \tau_{db}^i - \bar{\tau}_{db}^i \rangle}{\sqrt{\langle (\tau_{sub} - \bar{\tau}_{sub})^2 \rangle \langle (\tau_{db}^i - \bar{\tau}_{db}^i)^2 \rangle}}.$$

Если для определенного вещества из базы данных коэффициент корреляции оказался наибольшим и превысил заданное пороговое значение, то данное вещество идентифицировано в данном эксперименте. Пороги обнаружения определяются эмпирически. Этот критерий получен из предположения, что на линии обзора находится только одно вещество, и основывается на предположении, что для вещества, находящегося на линии обзора,

коэффициент корреляции экспериментального спектра с его референтным спектром будет всегда больше, чем коэффициент корреляции экспериментального спектра со спектром любого другого вещества из базы данных.

Этап 3. После идентификации i -го вещества базы данных решаемую задачу можно записать в виде $D_{db}^i(\nu) \frac{C}{C_0^i} = D_{sub}(\nu)$, где $D_{db}^i(\nu)$ – оптическая плотность i -го вещества базы данных, полученная для концентрации C_0^i ; C – искомая концентрация, $D_{sub}(\nu)$ – экспериментальный спектр. Задача численно решается минимизацией функционала невязки на отрезке $C \in [0, C_i^{\max}]$,

$$\Phi(Z) = \int_{\nu_{\min}}^{\nu_{\max}} \left(e^{-D_{db}^i(\nu)z_i} - \tau_{sub}(\nu) \right)^2 w_{sub}(\nu) d\nu \rightarrow \min_{z_i}. \quad \text{Далее сигнатуры найденного}$$

вещества в пересчете на полученную концентрацию удаляются из спектра $\tau_{sub}(\nu)$ и процедура идентификации (этап 2) повторяется заново, для случая распознавания нескольких веществ. Поскольку функционал $\Phi(Z)$ дифференцируем по Z , оптимизация проводится методом сопряженных градиентов с простыми ограничениями.

Разработанный алгоритм численного решения обратной задачи апробирован в ходе вычислительных экспериментов, где моделировалась спектральная яркость $B(\nu)$ для ряда веществ и различных типов атмосферных трасс. На модельные спектры $B(\nu)$ накладывался аддитивный белый шум с нормальным распределением, соответствующий шумовой составляющей, выдаваемой регистрирующей аппаратурой ИК ФСР. В серии вычислительных экспериментов определены границы применимости предлагаемой модели и алгоритмов процесса распознавания веществ по концентрациям и по температурному контрасту трассы наблюдения. Показано, что ошибки восстановления концентраций линейно возрастают с ростом среднеквадратичного значения шума во входном спектре. В серии вычислительных экспериментов для ряда веществ продемонстрировано, что абсолютные значения относительной ошибки восстановления концентрации для рабочего уровня шумов не превышают 30%, что является допустимым рабочим значением для беспроботборных газоаналитических систем.

Третья глава посвящена описанию работы основных модулей разработанного программного комплекса (ПК), реализующего разработанные алгоритмы. Рассмотрена архитектура ПК, а также представлены цифровые

интерфейсы программного комплекса. На рис. 1 приведена схема, отражающая базовую структуру ПК.

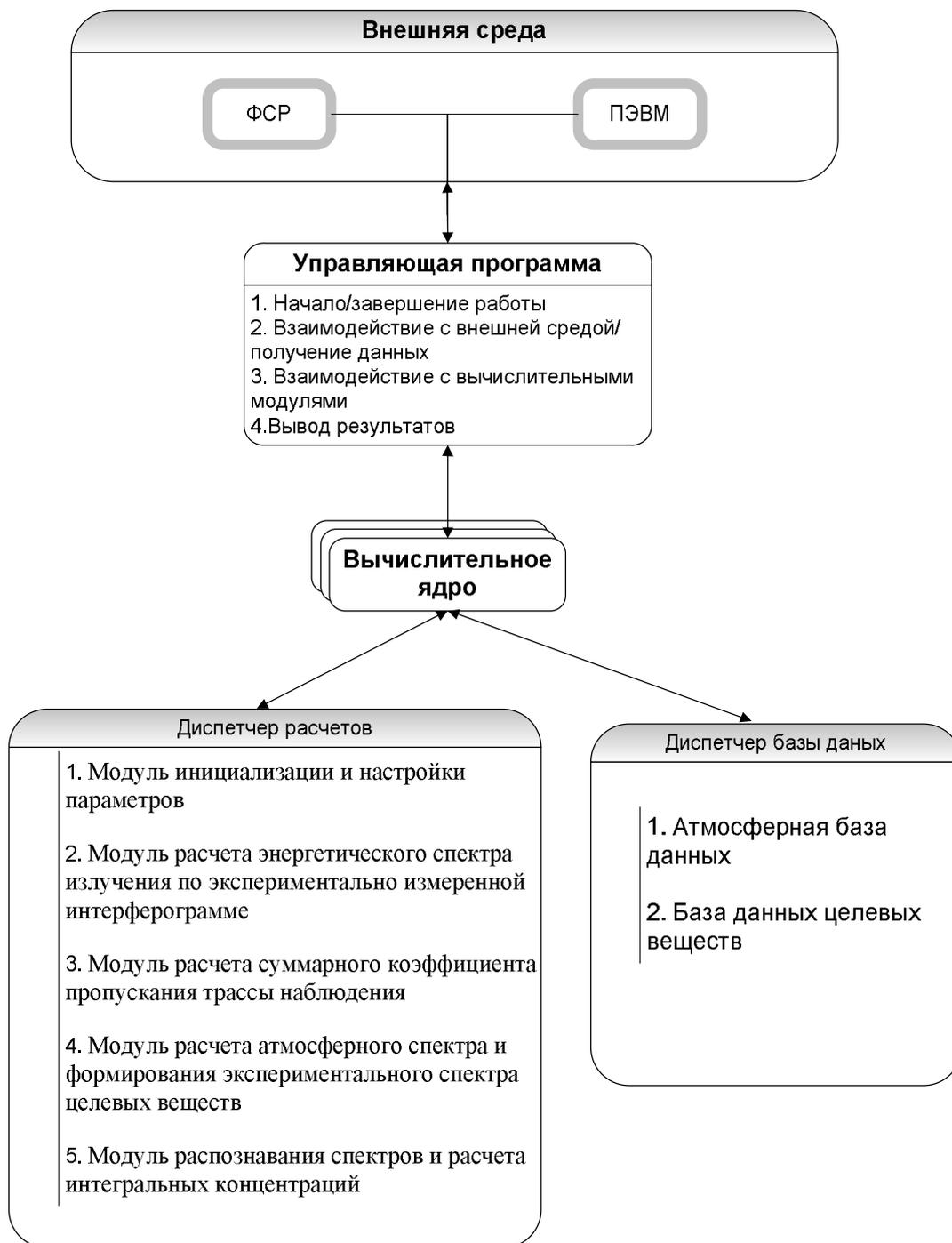


Рис. 1. Блок-схема базовой структуры ПК

Программный комплекс решает следующие задачи:

- Получение исходной информации от ФСР либо с диска ПЭВМ.
- Преобразование исходной интерферограммы в инфракрасный энергетический спектр $B(\nu)$ в заданном интервале частот.
- Коррекция спектра с учётом собственного излучения прибора.

- Вычисление спектра пропускания $\tau_{\Sigma}(\nu)$ трассы наблюдения.
- Моделирование атмосферного спектра $\tau_{atm}(\nu)$ и определение спектра пропускания целевых веществ $\tau_{sub}(\nu)$.
- Идентификация веществ и расчет их концентраций на основе спектра $\tau_{sub}(\nu)$ и базы данных целевых веществ.
- Представление полученной и обработанной информации в графическом, числовом и цифровом виде.

Диспетчер расчётов осуществляет инициализацию/деактивацию программы, а также обмен данными с управляющей программой. Во взаимодействии с другими элементами он обеспечивает функционирование процедур обработки и распознавания спектров. Диспетчер расчетов состоит из модулей, каждый из которых является автономной функционально законченной программой, связанной с другими модулями с помощью использования общих структур данных. Каждый модуль отвечает за выполнение отдельных процедур обработки и интерпретации спектров.

Диспетчер базы данных реализован в виде отдельного класса. Класс вычислительного модуля в качестве членов имеет два экземпляра класса диспетчера базы данных, один из которых управляет базой данных спектров целевых веществ, а второй – базой данных атмосферных спектров. Диспетчер базы данных выполняет задачи инициализации базы данных; доступа к спектрам базы данных и их параметрам; очищения занятой памяти при завершении работы программы.

Управляющая программа получает интерферограммы от ИК ФСР либо считывает данные с диска ПЭВМ, заполняет ими входную структуру, инициализирует работу вычислительного ядра, а также, по завершении работы, получает результаты работы в виде выходной структуры. Управляющая программа предоставляет интерфейс пользователя, позволяет управлять началом и завершением работы, задавать начальные параметры работы, а также представлять результаты работы ПК в числовом и графическом виде. Приведены форматы входных/выходных данных, конфигурационных файлов, описание и структуры основных классов, описание основных алгоритмов и расчетно-аналитических процедур, а также форматы отчетов по работе программного комплекса.

В четвертой главе представлена постановка лабораторных и натуральных экспериментов, приведено описание лабораторной установки, испытуемого макетного образца ИК ФСР и контрольно-измерительной аппаратуры.

Приведены сводные результаты обработки данных лабораторных экспериментов. Проведен сравнительный анализ результатов распознавания веществ и расчета концентраций, полученных, во-первых, с применением разработанных алгоритмов, во-вторых, полученных с применением модели процесса распознавания веществ, предусматривающей предварительную регистрацию фонового спектра и, в-третьих, на контрольно-измерительной аппаратуре. По итогам сравнительного анализа сделаны выводы о применимости разработанной модели процесса распознавания веществ, ее преимуществах, а также о необходимых доработках.

Проведен анализ результатов натуральных экспериментов, в ходе которых были систематизированы основные типы открытых атмосферных трасс, и для всех основных типов трасс продемонстрирована работоспособность разработанных алгоритмов и программного комплекса по распознаванию веществ в открытой атмосфере.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Построена математическая модель прохождения ИК излучения в атмосфере, применение которой не предусматривает знания априорной метеорологической информации о трассе наблюдения.

2. Разработаны модель и алгоритмы процесса распознавания веществ в открытой атмосфере на основе единичного измерения ФСР. На основе разработанной модели и алгоритмов решена задача распознавания для широкого круга веществ.

3. Разработан программный комплекс, реализующий предложенные модель и алгоритмы. Программный комплекс позволяет работать как в автономном режиме, так и совместно с ИК ФСР среднего разрешения в масштабе реального времени.

4. Проведена апробация разработанной модели и алгоритмов в сериях вычислительных экспериментов. Показано, что ошибка восстановления концентраций веществ и ее среднеквадратическое значение линейно зависят от уровня шума в экспериментальном энергетическом спектре; минимальный рабочий температурный контраст трассы наблюдения составляет величину порядка 1° ; относительная ошибка восстановления концентраций веществ для рабочего уровня шума составляет величину порядка 30%.

5. Проведены лабораторные испытания разработанных алгоритмов и программного комплекса на статической газовой камере. Проведен сравнительный анализ результатов распознавания, полученных с применением

двух моделей процесса распознавания веществ, а также на контрольно-измерительной аппаратуре. Продемонстрирована работоспособность предлагаемой модели и алгоритма, высокая надежность и целесообразность применения для ряда условий измерений (начальное присутствие вещества на трассе наблюдения; медленное изменение концентраций веществ). Показано, что для подавляющего большинства экспериментов применение разработанной модели позволяет уменьшить ошибку восстановления концентраций веществ.

6. Проведены натурные испытания разработанных алгоритмов и программного комплекса, в результате чего продемонстрирована работоспособность разработанной модели и алгоритмов процесса распознавания веществ в атмосфере для широкого круга веществ и основных типов открытых атмосферных трасс.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОТРАЖЕНЫ В РАБОТАХ

1. Фуфурин И.Л. Разработка методов распознавания и идентификации паров и аэрозолей химических соединений в открытой атмосфере с целью экологического мониторинга окружающей среды над промышленными объектами. Математическое моделирование распознавания ИК-излучения в атмосфере и решение обратной задачи Фурье-спектроскопии // Студенческая научная весна-2005: Тез. докл. общеуниверситетской научно-технической конф. М., 2005. Т. 2. С.221.

2. Морозов А.Н., Фуфурин И.Л. Численное решение задачи распознавания состава газовой смеси с помощью пассивной ИК фурье-спектрометриии // Необратимые процессы в природе и технике: Сборник научных трудов IV Всероссийской конф. М., 2007. Ч. 2. С. 515-518.

3. Морозов А.Н., Светличный С.И., Фуфурин И.Л. Численное решение задачи распознавания состава газовой смеси по результатам обработки спектров, зарегистрированных на Фурье-спектрометриии // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. 2007. № 2 С. 3-13.

4. Фуфурин И.Л. Численное решение задачи распознавания состава газовой смеси по результатам обработки спектров, зарегистрированных на Фурье-спектрометриии // Актуальные проблемы фундаментальных наук: Сборник трудов. М., 2008. С. 143-144.

5. Распознавание веществ в открытой атмосфере по единичной интерферограмме фурье-спектрометриии / И.Л. Фуфурин [и др.] // Оптика и спектроскопия. 2009. Т. 106, №5. С. 743-749.

6. Фуфурин И.Л. Численное решение обратной задачи распознавания веществ в открытой атмосфере по единичному измерению фурье-спектрометра // Физическое образование в ВУЗах (Приложение). 2009. Т. 15, № 1. С. 57-59 .

7. Методика идентификации веществ в открытой атмосфере по единичному измерению фурье-спектрометра / И.Л. Фуфурин [и др.] // Необратимые процессы в природе и технике: Сборник научных трудов V Всероссийской конференции. М., 2009. Ч. 3. С. 46-49.

8. Фуфурин И.Л. Распознавание веществ в открытой атмосфере по единичному измерению фурье-спектрометра // Актуальные проблемы фундаментальных наук: Сборник трудов III научно-методической конференции аспирантов и молодых исследователей. М., 2009. С. 124-126.

9. Фуфурин И.Л. Пассивная локация веществ в открытой атмосфере по единичному измерению фурье-спектрометра // XV Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: Материалы конференции. Кемерово-Томск, 2009. С. 556-557.

10. Фуфурин И.Л., Морозов А.Н. Методика пассивного мониторинга веществ в открытой атмосфере по единичному измерению Фурье-спектрометра // Труды Российского научно-технического общества радиотехники, электроники и связи им. А.С. Попова. Сер.: Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации. М., 2009. Вып. 3. С. 133-137.

11. Фуфурин И.Л., Морозов А.Н. Алгоритм и программный комплекс идентификации и восстановления концентраций веществ в газовой фазе путем численного анализа единичного спектра собственного теплового излучения // Физическое образование в ВУЗах (Приложение). 2010. Т. 16, № 1. С. 32-33.

12. Фуфурин И.Л. Разработка алгоритмов и программного комплекса идентификации и восстановления концентраций веществ в открытой атмосфере по единичному измерению фурье-спектрометра // Актуальные проблемы фундаментальных наук: Сборник трудов IV научно-методической конференции аспирантов и молодых исследователей. М., 2010. С. 88-89.

13. Фуфурин И.Л. Методика идентификации и восстановления концентраций веществ в газовой фазе путем численного анализа единичного спектра собственного теплового излучения // XVI Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: Материалы конференции. Волгоград, 2010. С. 524-525.