

информационно-управляющих систем.— Автоматика и телемеханика, 1976, № 9, с. 22.

11. Антипин В. В., Буймов А. Г. Быстрая имитация случайных изображений в базисе Адамара.— В кн.: Корреляционно-экстремальные системы обработки информации и управления. Томск: ТГУ, 1978, вып. 3, с. 74.
12. Буймов А. Г., Буймова Н. А. Исследование автокорреляции изображений по масштабированию, вращениям и сдвигам.— Автометрия, 1982, № 1, с. 84.

Поступила в редакцию
12 января 1983 г.

УДК 517.518.8

М. Ю. КАТАЕВ, А. А. МИЦЕЛЬ

(Томск)

ИДЕНТИФИКАЦИЯ СОСТАВА ГАЗОВОЙ СМЕСИ ПО СПЕКТРАМ ПОГЛОЩЕНИЯ

Введение. Решение задачи концентрационного анализа газового состава многокомпонентной смеси по спектрам поглощения можно условно разбить на два этапа: идентификация смеси и извлечение количественной информации о концентрациях газов. Математические аспекты извлечения количественной информации из решения обратной задачи абсорбционного газоанализа многокомпонентных смесей рассматривались в [1, 2]. В данной работе излагается математическая постановка задачи идентификации газовой смеси из данных эксперимента, приводятся результаты численного и натурального эксперимента в условиях «обучения с учителем».

Идентификация газовой смеси. В математическом плане задача идентификации газового состава многокомпонентных смесей по спектрам поглощения сводится к задаче классификации объектов по входному вектору измерений и по известным признакам. В качестве признаков могут использоваться характерные особенности спектров поглощения газов*. Для идентификации газовых объектов, под которыми будем понимать набор определенных газов, воспользуемся байесовым критерием [3].

Пусть из измерений получен вектор объемных коэффициентов поглощения $y = \{y_1, \dots, y_N\}^T$, который связан с вектором концентраций газов $x = \{x_1, \dots, x_m\}^T$ линейным преобразованием [1, 4]

$$y = Kx + \beta, \quad (1)$$

где K — матрица коэффициентов поглощения на единицу массы размерностью $(N \times m)$ (матрица эталонных спектров); β — N -мерный вектор неселективной (фоновой) составляющей поглощения. Пусть вектор наблюдений есть случайный вектор с заданной условной плотностью вероятности $P(y|\omega_l)$, характеризуемой параметрами: средним M_l и ковариационной матрицей V_l . Параметры M_l и V_l связаны с принадлежностью y к определенному классу газовых объектов ω_l , $l = 1, \dots, n$. Задача идентификации сводится к проверке статистических гипотез

$$H_l: y \in \omega_l. \quad (2)$$

Для простоты рассмотрим случай двух классов, т. е. $l = 1, 2$. Байесово решающее правило для случая двух классов имеет вид [3]

$$h(y) = \ln [P(y|\omega_1)/P(y|\omega_2)] \geq \ln [P(\omega_2)/P(\omega_1)] \rightarrow y \in \begin{cases} \omega_1 \\ \omega_2 \end{cases}. \quad (3)$$

* В данной работе не затрагивается вопрос о выборе информативных признаков.

Здесь $P(\omega_l)$ — вероятность принадлежности y к классу ω_l .

Таким образом, по входному вектору y и заданным распределениям $P(y|\omega_l)$ и вероятностям $P(\omega_l)$ можно определить в соответствии с решающим правилом (3), к какому из классов — ω_1 или ω_2 — принадлежит вектор y . Последний, в свою очередь, связан с вектором концентраций соотношением (1). Для оценки качества решающего правила (3) можно вычислить вероятность ошибки идентификации ε по формулам [3]

$$\begin{aligned}\varepsilon &= P(\omega_1)\varepsilon_1 + P(\omega_2)\varepsilon_2; \\ \varepsilon_l &= \int_{\Gamma_l} P(h(y|\omega_l)) dh,\end{aligned}\quad (4)$$

где Γ_l — область интегрирования для l -го класса.

В случае нормального закона распределения и равновероятной принадлежности $y \in \omega_l$ ($P(\omega_1) = P(\omega_2)$) выражение (4) примет вид

$$\varepsilon = 1 - 0,5[\Phi(\eta_1/\sigma_1) + \Phi(\eta_2/\sigma_2)] \quad (4a)$$

($\Phi(a)$ — интеграл ошибок, причем $\Phi(0) = 0,5$); $\eta_l = |E[h(y|\omega_l)]|$ — модуль среднего решающего правила (3) при условии $y \in \omega_l$, $l = 1, 2$; σ_l^2 — дисперсия решающего правила при условии $y \in \omega_l$.

Выпишем в явном виде выражение для параметров η_l , σ_l^2 :

$$\eta_1 = \frac{1}{2} \{ \Delta^T V_2^{-1} \Delta + \text{Sp} [V_1 V_2^{-1} - I] \} + \frac{1}{2} \ln \frac{|V_2|}{|V_1|}; \quad (5)$$

$$\eta_2 = \frac{1}{2} \{ -\Delta^T V_1^{-1} \Delta + \text{Sp} [I - V_2 V_1^{-1}] \} + \frac{1}{2} \ln \frac{|V_2|}{|V_1|}; \quad (5a)$$

$$\sigma_1^2 = \Delta^T V_2^{-1} V_1 V_2^{-1} \Delta + \frac{1}{2} \text{Sp} [V_1 V_2^{-1} - I]^2; \quad (6)$$

$$\sigma_2^2 = \Delta^T V_1^{-1} V_2 V_1^{-1} \Delta + \frac{1}{2} \text{Sp} [I - V_2 V_1^{-1}]^2; \quad (6a)$$

где $\text{Sp}[\cdot]$ — след матрицы; $\Delta = M_1 - M_2$; M_l , V_l — математическое ожидание и ковариационная матрица вектора y при условии $y \in \omega_l$.

Математическое ожидание M_l можно представить через вектор значений средних концентраций \bar{x} в виде

$$M_l = K S_l \bar{x} + \bar{\beta}_l. \quad (7)$$

Здесь S_l — матрица размерностью $(m \times m)$, по диагонали которой стоят единицы и нули, а недиагональные элементы равны нулю. Каждый класс газовых объектов ω_l задается чередованием единиц и нулей на диагонали матрицы S_l и своим средним фоновым поглощением $\bar{\beta}_l$.

Байесово решающее правило (3) позволяет ответить на вопрос, присутствует в смеси данный газ (группа газов) или нет в соответствии со знаком неравенства. При этом «да» означает, что концентрация данного газа (группы газов) превосходит некоторую пороговую величину (ПДК или фоновую концентрацию), которая считается известной. Пороговой величиной концентрации задается вектор математического ожидания M_l , а флуктуация концентраций газов, наряду с ошибкой измерения вектора y , определяет ковариационную матрицу V_l .

Теперь попытаемся построить такой алгоритм, который бы позволял для заданного уровня ошибки идентификации найти пороговую концентрацию.

Утверждение. Пусть для смеси из $(m-1)$ -газов задан уровень ошибки идентификации ε_{m-1} , а для m -компонентной смеси — ε_m — и пусть выполнены условия: 1) $V_1 = V_2 = V$; 2) $\varepsilon_m < \varepsilon_{m-1}$; 3) $\bar{\beta}_1 = \bar{\beta}_2$.

Тогда пороговая концентрация x_m m -го газа удовлетворяет соотно-

шению

$$x_m \geq \frac{1}{(u_m V^{-1} u_m)^{1/2}} \left[\sqrt{\frac{(u_m V^{-1} b_{m-1})^2}{u_m V^{-1} u_m} + 4(a_m^2 - a_{m-1}^2)} - \frac{u_m V^{-1} b_{m-1}}{(u_m V^{-1} u_m)^{1/2}} \right]; \quad b_0 \equiv 0; \quad a_0 \equiv 0, \quad (8)$$

где u_m — m -й вектор-столбец матрицы K ; b_{m-1} — математическое ожидание вектора y для $(m-1)$ -компонентной смеси, определяемое по формуле (7) (в матрице S_i m -й диагональный элемент равен нулю); a_m — аргумент функции ошибки идентификации.

Доказательство. Для случая $V_1 = V_2 = V$ из (4а), (5) и (6) получим

$$\varepsilon(a) = 1 - \Phi(a); \quad a = \sqrt{\eta/2}; \quad (4в)$$

$$\eta_1 = 1/2(M_1 - M_2)^T V^{-1} (M_1 - M_2) = \eta; \quad \eta_2 = -\eta; \quad (5в)$$

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 2\eta. \quad (6в)$$

За класс ω_1 примем смесь из m -газов, за класс ω_2 — смесь, в которой отсутствует хотя бы один из газов. Подставляя (7) в (5в), получим для m -компонентной смеси с учетом (4в) и условия 3:

$$\frac{1}{2} \eta_m = \frac{1}{4} [x_m^2 (u_m V^{-1} u_m) + 2x_m (u_m V^{-1} b_{m-1}) + (b_{m-1} V^{-1} b_{m-1})] \geq a_m^2,$$

откуда

$$x_m = \frac{1}{A_m^{1/2}} \left[\sqrt{\frac{B_m^2}{A_m} + 4\left(a_m^2 - \frac{1}{4} b_{m-1} V^{-1} b_{m-1}\right)} - \frac{B_m}{A_m^{1/2}} \right], \quad (9)$$

где $A_m = u_m V^{-1} u_m$; $B_m = u_m V^{-1} b_{m-1}$.

Если провести аналогичные рассуждения для смеси из $(m-1)$ -газов, то легко показать, что

$$(1/4) b_{m-1} V^{-1} b_{m-1} = (1/2) \eta_{m-1}. \quad (10)$$

Подставляя (10) в (4в) и затем в формулу (9), приходим к (8), что и требовалось доказать.

Из (8) нетрудно заметить, что результат, имеющий физический смысл, можно получить лишь при условии $a_m > a_{m-1}$, что эквивалентно условию $\varepsilon_m < \varepsilon_{m-1}$.

Из выражения (8) для $(m-1)$ следует*

$$x_1 \geq \frac{2a_1}{(u_1 V^{-1} u_1)^{1/2}} = \frac{2a_1}{A_1^{1/2}}. \quad (11)$$

Если положить, что $V = \sigma_y^2 I$, где I — единичная матрица, то (11) примет вид

$$x_1 \geq 2a_1 \sigma_y / (u_1 u_1)^{1/2}. \quad (11а)$$

Отсюда видно, что чем больше ошибка измерения вектора y , тем больше значение пороговой концентрации. С другой стороны, чем больше коэффициенты поглощения данного газа $K_i(\lambda_i)$, $i = 1, \dots, N$, тем меньше значение пороговой величины x_1 . Попутно заметим, что скалярная величина $A_j = u_j V^{-1} u_j$ представляет собой j -й диагональный элемент матрицы $K^T V^{-1} K$, которая получается при решении системы (1) методом наименьших квадратов.

* Такой же результат справедлив для любой j -й компоненты смеси, если за класс ω_1 принять смесь из j -газов, а за класс ω_2 — смесь из $(j-1)$ -газов; в этом случае $x_j \geq \frac{2a_j}{A_j^{1/2}}$.

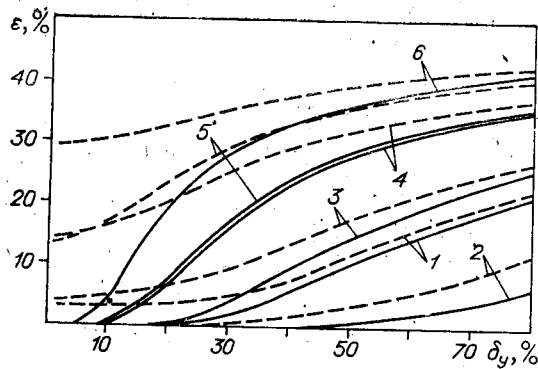


Рис. 1. Ошибка идентификации газов для $\delta_x = 0\%$ (сплошные кривые) и $\delta_x = 50\%$ (штриховые):
1 — H_2O ; 2 — CO_2 ; 3 — NH_3 ; 4 — O_3 ; 5 — C_2H_4 ; 6 — C_6H_6 .

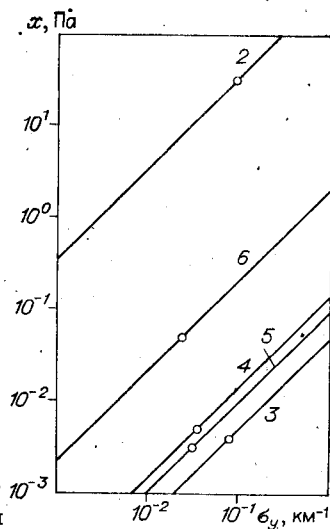


Рис. 2. Пороговые значения концентраций газов для $\varepsilon = 5\%$:
2 — CO_2 ; 3 — NH_3 ; 4 — O_3 ; 5 — C_2H_4 ; 6 — C_6H_6 .

Результаты численного эксперимента. Численное моделирование по идентификации газового состава смеси проводилось на следующей модельной задаче. Рассматривалась шестикомпонентная смесь (H_2O , CO_2 , NH_3 , O_3 , C_2H_4 , C_6H_6), для которой «измерены» объемные коэффициенты поглощения $\alpha(\lambda)$ на 16 длинах волн, соответствующих переходам перестраиваемого CO_2 -лазера в области спектра 10 мкм. Коэффициенты поглощения $K_j(\lambda_i)$ считаются известными. В качестве средних значений концентраций используются их фоновые значения. Длины волн и фоновые концентрации приводились в работе [1] (на рис. 2 фоновые концентрации отмечены кружками).

Для имитации флуктуации концентраций газов фоновые значения искажались случайными числами ξx_i с дисперсией $D[\xi x_i]/\{x_i\}^2 = \text{const} = \delta_x^2$. По полученным таким образом концентрациям газов рассчитывались объемные коэффициенты поглощения $\{y_i\}$. Для имитации погрешности измерений рассчитанные значения $\{y_i\}$ искажались также случайными числами ξy_i с дисперсией

$$D[\xi y_i]/\{y_i\}^2 = \text{const} = \delta_y^2.$$

Неселективная составляющая поглощения β полагалась равной нулю.

Для проверки гипотезы (2) рассматривались следующие варианты: за класс ω_1 принималась смесь, в которой находятся все шесть газов; за класс ω_2 — смесь, в которой отсутствует j -й газ соответственно для j -го варианта. Для всех вариантов решающее правило (3) указывало на присутствие в смеси всех шести газов для всех вариантов, однако ошибка идентификации ε оказалась различной. На рис. 1 приведены результаты расчета ошибки идентификации ε в зависимости от погрешности измерений δ_y для двух значений $\delta_x = 0$ (сплошные кривые) и $\delta_x = 50\%$ (штриховые). Номера кривых соответствуют номерам отсутствующих газов в классе ω_2 . Видно, что наибольший вклад в смесь дает CO_2 (минимальная ошибка), а наименьший вклад — C_6H_6 (ошибка максимальная). Увеличение дисперсии концентраций δ_x^2 , равно как и погрешности измерений δ_y^2 , приводит к увеличению ошибки идентификации ε .

На рис. 2 приведены значения пороговых концентраций $\{x_i\}$ в зависимости от σ_y , рассчитанные по формуле (11а) для уровня ошибки идентификации $\varepsilon = 5\%$ ($a = 1,7$). Нумерация кривых на рис. 2 соответствует рис. 1; кружками отмечены фоновые концентрации. Из рисунка следует, что для правильной идентификации газов O_3 , C_2H_4 , C_6H_6 (кри-

Результаты обработки натурального эксперимента

Диагональные элементы матри- цы S_2 для класса ω_2	$h(y)$		$\epsilon, \%$	
	$\bar{\beta}(\lambda)=0$	$\bar{\beta}(\lambda)=$ $=0,15 \text{ км}^{-1}$	$\bar{\beta}(\lambda)=0$	$\bar{\beta}(\lambda)=0,15 \text{ км}$
1,1,1,1,0	-0,63+1	-0,15+2	20	8
1,1,1,0,1	-0,37+1	-0,12+2	13	7
1,1,0,1,1	-0,89+1	-0,18+2	10	4
1,0,1,1,1	-0,86+1	-0,17+2	5	4
0,1,1,1,1	+0,69+4	+0,69+4	5	4
1,1,0,0,0	-0,17+2	-0,26+2	1	0,3
0,0,0,0,0	+0,14+5	+0,18+6	0,3	0,2

Примечание. Диагональные элементы матрицы S_2 для класса ω_2 равны $\{S_{ij}\}_{ii} = \{1,1,1,1,1\}$.

вые 4—6) необходимо иметь более точные измерения вектора y (значения σ_y меньше), чем для газов NH_3 и CO_2 (значения σ_y больше). Этот результат находится в соответствии с рис. 1 (кривые 4—6 расположены выше кривых 2, 3).

Результаты натурального эксперимента. Для проверки работоспособности предлагаемого метода идентификации газовой смеси была проведена обработка данных натурального эксперимента, выполненного в прибрежной зоне Черного моря в 1978 г. Г. С. Хмельницким [1]. В качестве исходных данных в ЭВМ вводились измеренные значения объемного коэффициента поглощения, значения дисперсий коэффициентов поглощения, матрица эталонных спектров, предполагаемых в смеси газов (CO_2 , NH_3 , O_3 , C_2H_4 , C_6H_6), средние фоновые значения концентраций этих газов (см. рис. 2), а также уровень флуктуаций концентраций $\delta_x = 0,5$. Во время эксперимента контролировалась влажность с помощью психрометра. Поэтому из вектора y исключались как селективное поглощение H_2O , так и континуальное поглощение водяным паром α_k . Последнее оценивалось по эмпирической формуле [5]: частотная зависимость $\alpha_k(\nu)$ заимствовалась из работы [6].

В таблице приведены результаты обработки данных эксперимента. Классом ω_1 считалась смесь, в которой находятся все пять газов (диагональные элементы матрицы S_1 в выражении (7) все равны единице). За класс ω_2 принималась смесь, в которой отсутствует какой-либо газ или группа газов (см. первый столбец таблицы). В таблице даны значения решающего правила $h(y)$, а также ошибка идентификации ϵ . Анализ данных таблицы свидетельствует о том, что в смеси присутствует только CO_2 (значение $h(y)$ положительно). Предположение о наличии фоновой составляющей $\bar{\beta}(\lambda) = \text{const} = 0,15 \text{ км}^{-1}$ приводит к уменьшению ошибки идентификации ϵ . В работе [1] решалась обратная задача. Найденные значения концентрации газов оказались меньше примерно в 5 раз их фоновых значений, за исключением CO_2 и H_2O . Кроме того, из решения обратной задачи было выявлено наличие фоновой составляющей. Это свидетельствует о том, что результаты, приведенные в таблице, вероятно, отражают реальную ситуацию в атмосфере на момент проведения эксперимента. Фоновая составляющая в данном случае обусловлена, по-видимому, только аэрозольным ослаблением, так как континуальное поглощение H_2O исключалось. В общем случае фоновая составляющая может быть обусловлена не только аэрозольным и континуальным поглощением H_2O , но также наличием неизвестного газа (группы газов).

В заключение отметим, что предложенный алгоритм идентификации газовой смеси может быть успешно использован для решения задачи абсорбционного газоанализа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Макушкин Ю. С., Мицель А. А., Хмельницкий Г. С. Лазерная абсорбционная диагностика атмосферных газов.—ЖПС, 1981, т. 35, вып. 5, с. 785—790.
2. Воскобойников Ю. Е., Мицель А. А. Построение устойчивого решения плохообусловленной системы алгебраических уравнений при случайных погрешностях в исходных данных.—Автометрия, 1982, № 2, с. 67—72.
3. Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов.—М.: Наука, 1979.
4. Применение ЭВМ в химических и биохимических исследованиях/Под ред. А. Ф. Васильева.—М.: Химия, 1976, т. 1, с. 247—292.
5. Арефьев В. Н., Дианов-Клоков В. И., Иванов В. М., Сизов Н. Н. Континуальное поглощение излучения 8—13 мкм водяным паром.—М., 1979. (Препринт АН СССР, ИФА).
6. Kneizys F. X. et al. Atmospheric Transmittance Radiance: Computer Code Lowtran 5.—AFCRL-TR-80-0067, 1980.

Поступила в редакцию
4 апреля 1984 г.

УДК 62-50

Ю. И. ПАЛАГИН

(Ленинград)

НЕГАРМОНИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ

При вероятностных исследованиях сложных информационно-измерительных и управляемых систем, оценке эффективности алгоритмов обработки статистических данных возникают задачи статистического моделирования случайных процессов и полей. Для отдельных классов случайных процессов известны простые и эффективные моделирующие алгоритмы, которые позволяют адекватно воспроизводить на ЭВМ заданные спектральные или корреляционные характеристики [1, 2]. В более сложных случаях, например при моделировании многомерных случайных полей, трудности моделирования и затрачиваемое машинное время резко возрастают. Важное значение имеет проблема разработки экономичных в вычислительном отношении математических моделей случайных процессов и полей и синтеза соответствующих моделирующих алгоритмов.

Алгоритмически простой метод моделирования стационарных случайных процессов дают параметрические (неканонические) представления [3—5]. В работах [6, 7] параметрические представления были обобщены на случай скалярных, а в [8, 9] — векторных случайных полей. Все известные модели параметрических представлений имеют идентичную структуру. Они основаны на тригонометрических гармониках (временной — для процессов — и пространственной — для полей), имеющих случайную частоту с выбранным априорно законом распределения.

Настоящая статья посвящена синтезу негармонических моделей параметрических представлений случайных процессов и полей.

Постановка задачи. Общая форма параметрических представлений. Рассмотрим задачу статистического моделирования гауссового случайного процесса или поля в следующей постановке. Пусть заданы математическое ожидание (МО) $M\xi(x)$ и матричная корреляционная функция (МКФ)

$$R_{\xi}(x+y, y) = M\xi(x+y)\xi^T(y) = \|M\xi_n(x+y)\xi_n(y)\| \quad (1)$$