

ОПРЕДЕЛЕНИЕ CO₂ И ПАРОВ ВОДЫ В АТМОСФЕРЕ

Кугейко М.М., Лынько А.В.

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: kugeiko@bsu.by

Используя базу данных HITRAN проведено моделирование спектра поглощения паров воды и углекислого газа в атмосфере. Получены регрессионные соотношения, связывающие процентное содержание определяемых газовых компонент с главными компонентами, выделенными из спектральных значений их коэффициентов поглощения, для фиксированных значений температур и давления атмосферы, что является основой нового метода контроля парниковых газов атмосферы, позволяющего более эффективно учитывать уширение их спектральных линий даже в условиях сильного перекрытия.

Ключевые слова: коэффициенты поглощения; концентрация газов; перекрытие спектральных линий; регрессионная связь; главные компоненты.

Задача нахождения концентрации газовых компонент из результатов измерений относится к классу некорректных математических. Решение таких задач может быть неустойчивым по отношению к малым вариациям (погрешностям) измеряемых данных, приводит к большим погрешностям в определении компонентного состава смеси. Задача контроля многокомпонентных газовых сред еще больше усложняется когда их спектральные линии сильно перекрываются. В этом случае использование выбранных спектральных каналов измерения, соответствующих линиям поглощения исследуемых компонент, требует учета вклада их перекрытия, что в настоящее время является актуальной задачей.

Ниже рассматривается регрессионный метод решения обратных задач, предполагающий, что искомые параметры среды (в частности, концентрация газовых компонент) могут быть найдены при помощи некоторой статистической функции от измеряемых оптических характеристик. В качестве функциональной связи использовались линейные множественные регрессии: между процентной концентрацией M паров воды и CO₂ и главными компонентами ς_i , $j=1,2$, выделенными из спектральных значений их коэффициентов поглощения $\varepsilon(\lambda_i)$ в интервале 2660-2840 нм с шагом 20 нм:

$$M = a + \sum_i^N b_i \varsigma_i, \quad \varsigma_i = \sum_j^{\Delta\lambda/20} c_{ij} \varepsilon(\lambda_i), \quad (1)$$

где N – количество главных компонент, a и b_i – коэффициенты регрессии, вычисляемые на основе выборки с использованием метода наименьших квадратов [1].

Для решения задачи было проведено моделирование спектра поглощения паров воды и углекислого газа используя базу данных HITRAN [2]. Рассчитывались величины поглощения $\varepsilon(\lambda_i)$ в диапазоне 2640 – 2840 нм с шагом 20 нм для случайных значений концентраций паров H_2O и CO_2 из диапазона от 0,2% до 1% для H_2O и от 0,5% до 2% для CO_2 . Измерительная база задавалась длиной 10 м. При расчете моделируемой выборки $\varepsilon(\lambda_i)$ для каждой температуры и давления учитывалось уширение спектральных линий от их величины. Используя полученные значения $\varepsilon(\lambda_i)$ были выделены главные компоненты ζ_i для каждой из температур и давления, равного 1 атм. Объем каждой из выборок составлял 2500 состояний. Приведённые ниже результаты получены для двух главных компонент ζ_i , которые покрывают 99,9% вариативности данных. Множители при коэффициентах поглощения для главных компонент приведены в табл. 1. Коэффициенты линейной регрессии (1) в табл. 2.

Таблица 1.

Множители при коэффициентах поглощения для главных компонент ζ_i

Длины волн, нм	Значения C_{1i}	Значения C_{2i}
2660	0,3218	-0,2689
2680	0,3263	0,2245
2700	0,2504	0,6195
2720	0,3285	0,1991
2740	0,3155	-0,3217
2760	0,3336	-0,1175
2780	0,3122	0,3449
2800	0,3348	0,0888
2820	0,3152	-0,3232
2840	0,3151	-0,3240

Оценка погрешности восстановления концентраций паров H_2O и CO_2 была проведена на новой выборке $\varepsilon(\lambda_i)$ при наложении на каждое значение из нее погрешности 5% (объем выборки – 500) и составила для паров H_2O и CO_2 соответственно менее двух и трех процентов.

Ранее коэффициенты регрессии и главные компоненты определялись для задаваемого диапазона давления и температуры атмосферы. Установление таких коэффициентов для фиксированных значений температуры и давления является основой нового метода контроля парниковых газов атмосферы даже в условиях сильного перекрытия спектральных линий, позволяющего более эффективно учитывать их уширение, что приводит, при этом, к повышению точности и оперативности метода.

Таблица 2.

Коэффициенты линейной регрессии (1) для H₂O и CO₂.

Т	Коэффициенты линейной регрессии для значений температур для H ₂ O			Коэффициенты линейной регрессии для значений температур для молекул CO ₂		
	a	b1	b2	a	b1	b2
253	-0,01591	0,01548	-0,01927	0,042950	-0,000958	0,025467
255	-0,01283	0,01553	-0,01933	0,038169	-0,000945	0,025525
256	-0,01274	0,01555	-0,01934	0,038805	-0,000941	0,025499
257	-0,01358	0,01559	-0,01936	0,039573	-0,000954	0,025508
258	-0,01103	0,01562	-0,01944	0,034634	-0,000930	0,025545
259	-0,00909	0,01563	-0,01942	0,034975	-0,000943	0,025562
260	-0,00754	0,01570	-0,01953	0,037257	-0,000999	0,025604
261	-0,01278	0,01571	-0,01950	0,031896	-0,000951	0,025655
262	-0,01353	0,01577	-0,01963	0,033959	-0,000966	0,025661
263	-0,01173	0,01580	-0,01961	0,029959	-0,000956	0,025633
264	-0,00969	0,01582	-0,01964	0,031653	-0,000989	0,025703
265	-0,01039	0,01584	-0,01970	0,034543	-0,000956	0,025655
266	-0,01503	0,01590	-0,01975	0,035360	-0,000995	0,025784
267	-0,01173	0,01592	-0,01976	0,031765	-0,000990	0,025735
268	-0,01283	0,01595	-0,01975	0,036097	-0,001000	0,025702
269	-0,00822	0,01598	-0,01993	0,033670	-0,000963	0,025739
270	-0,01015	0,01599	-0,01990	0,034238	-0,000970	0,025791
271	-0,01212	0,01604	-0,01993	0,032681	-0,000982	0,025808
272	-0,00907	0,01605	-0,01996	0,027837	-0,000953	0,025812
273	-0,01186	0,01611	-0,01997	0,036248	-0,000999	0,025724
274	-0,00755	0,01613	-0,02005	0,030166	-0,001010	0,025881
275	-0,01324	0,01613	-0,01999	0,033355	-0,000963	0,025811
276	-0,01425	0,01616	-0,02000	0,038693	-0,000978	0,025806
277	-0,01089	0,01620	-0,02009	0,037693	-0,001002	0,025823
278	-0,01123	0,01623	-0,02012	0,035073	-0,000998	0,025887
279	-0,00892	0,01628	-0,02016	0,030693	-0,001045	0,026008
280	-0,01780	0,01635	-0,02017	0,036686	-0,001040	0,025933

T	Коэффициенты линейной регрессии для значений температур для H ₂ O			Коэффициенты линейной регрессии для значений температур для молекул CO ₂		
	a	b1	b2	a	b1	b2
281	-0,00951	0,01631	-0,02022	0,034097	-0,000987	0,025935
282	-0,00863	0,01636	-0,02033	0,030306	-0,000982	0,025983
283	-0,01002	0,01639	-0,02034	0,033097	-0,001032	0,026098
284	-0,01106	0,01639	-0,02028	0,034419	-0,000995	0,025973
285	-0,00919	0,01646	-0,02036	0,028907	-0,001017	0,026053
286	-0,01394	0,01651	-0,02040	0,031775	-0,001028	0,026046
288	-0,01225	0,01652	-0,02042	0,032759	-0,000993	0,026068
289	-0,01019	0,01657	-0,02051	0,034284	-0,001022	0,026106
290	-0,01387	0,01661	-0,02054	0,036189	-0,001030	0,026151
291	-0,01262	0,01664	-0,02053	0,034649	-0,001051	0,026126
293	-0,00924	0,01668	-0,02066	0,035237	-0,001048	0,026238

Таким образом, для определения количественных значений концентрации каждого компонента газовой смеси предлагаемым методом не требуется сравнений результатов измерения с функцией, описывающей связь регистрируемых сигналов с параметрами исследуемой среды, использования калибровочных сравнительных моделей, устанавливаемых заранее эмпирически (экспериментально), методов решения некорректных обратных задач. При расчете величины поглощения учитываются все перекрытия спектральных линий с учетом их уширения при разных температурах и давлении, что позволяет использовать метод в многокомпонентных средах с перекрывающимися спектральными линиями.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Кугейко М.М., Лысенко С.А. Лазерная спектрофелометрия аэродисперсных сред. Минск: БГУ, 2012. С. 208.
2. Hitranonline [Электронный ресурс]. URL: <https://hitran.org/>.