

М.Л. Белов, В.А. Городничев, В.И. Козинцев, Ю.В. Федотов

Сравнительный анализ методов поиска спектральных каналов измерения для лазерного оптико-акустического газоанализатора

МГТУ им. Баумана, г. Москва

Поступила в редакцию 12.02.2002 г.

Дан анализ алгоритмов поиска спектральных каналов измерения для лазерного оптико-акустического газоанализатора, работающего в режиме дифференциального поглощения и предназначенного для количественного газоанализа многокомпонентных газовых смесей. Рассмотрены преимущества и недостатки различных алгоритмов. Показано, что разработанный авторами алгоритм поиска набора спектральных каналов измерения качественно учитывает основные факторы, влияющие на работу газоанализатора, требует небольшого объема вычислений и является наиболее предпочтительным с точки зрения оперативности газоанализа.

Набор спектральных каналов измерения (НСКИ) существенно влияет на точность лазерного оптико-акустического газоанализатора (ЛОАГ). Для многокомпонентных смесей при перекрытии спектров газов выбор НСКИ является сложной задачей, а при оперативном газоанализе требует решения в ограниченное время. В настоящее время известны различные критерии выбора НСКИ для анализа многокомпонентных смесей [1–14]. Однако не все они пригодны в задачах газоанализа с использованием ЛОАГ, работающего в режиме дифференциального поглощения (ДП). В статье проводится анализ критериев выбора НСКИ для многокомпонентного газоанализа с помощью ЛОАГ, работающего в режиме ДП.

Задача выбора НСКИ тесно связана с задачей восстановления концентраций газов (так как ошибка восстановления концентраций газов является наиболее существенным показателем качества НСКИ). Задача нахождения концентраций газов n компонентной газовой смеси из результатов измерений ЛОАГ (в случае, когда ширина лазерных линий много меньше ширины линий поглощения газов) сводится к решению системы из m ($m \geq n$) линейных алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases} \kappa_{11}N_1 + \kappa_{12}N_2 + \dots + \kappa_{1n}N_n + \beta_1 = y_1 \\ \dots \\ \kappa_{m1}N_1 + \kappa_{m2}N_2 + \dots + \kappa_{mn}N_n + \beta_m = y_m \end{cases}, \quad (1)$$

где κ_{ji} – показатель поглощения i -й газовой компоненты для j -го спектрального канала; N_i – искомая концентрация i -й газовой компоненты; β_j, y_j – показатель неселективного поглощения и измеренный приведенный сигнал для j -го спектрального канала измерения.

Для измерения методом ДП требуется $m = 2n$ спектральных каналов, которые в этом случае выбираются попарно (для каждого газа) достаточно близко друг от друга, так чтобы можно было исключить влияние неселективного поглощения, слабо зависящего от длины волны. Попарно вычитая уравнения системы (1) друг из друга, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \Delta\kappa_{11}N_1 + \Delta\kappa_{12}N_2 + \dots + \Delta\kappa_{1n}N_n = \tilde{y}_1 \\ \dots \\ \Delta\kappa_{n1}N_1 + \Delta\kappa_{n2}N_2 + \dots + \Delta\kappa_{nn}N_n = \tilde{y}_n \end{cases}, \quad (2)$$

где $\Delta\kappa_{ji} = \kappa_{(2j-1)i} - \kappa_{2ji}$; $\tilde{y}_j = y_{2j-1} - y_{2j}$.

Рассмотрим критерии выбора НСКИ для задачи многокомпонентного газоанализа.

Критерии, основанные на оптимизации характеристик газоанализаторов

В [5] были обобщены характеристики газоанализаторов. В качестве парциальной чувствительности γ_{ji} предлагается использовать производную сигнала y_j в j -м канале по изменению концентрации i -й компоненты смеси [5]: $\gamma_{ji} = \partial y_j / \partial N_i$.

Для системы уравнений (1) величина γ_{ji} равна показателю поглощения κ_{ji} . Суммарную чувствительность H предлагается определять как детерминант матрицы величин парциальной чувствительности [5, 7, 8]. Для систем (1), (2) величина H будет равна соответственно детерминанту матрицы показателей поглощения.

В качестве определения селективности (характеризующей возможность нахождения компонент смеси независимо друг от друга) предлагается величина Ξ , равная [5]:

$$\Xi = \min_{i=1..n} \left| \kappa_{ii} \left| \left(\sum_{k=1}^n |\kappa_{ik}| - |\kappa_{ii}| \right)^{-1} \right| \right| - 1. \quad (3)$$

Оптимизация этих характеристик может быть положена в основу выбора НСКИ [5].

Критерии, основанные на анализе расчетной матрицы Z

В работе [3] для выбора НСКИ описан ряд критериев, основанных на анализе расчетной матрицы Z , формируе-

мой в методе наименьших квадратов для вычисления вектора неизвестных концентраций:

$$\mathbf{N} = \mathbf{Z}\mathbf{y}, \quad (4)$$

где \mathbf{y} – вектор приведенных сигналов (правая часть системы (1)); $\mathbf{Z} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T$ – расчетная матрица; \mathbf{K} – матрица показателей поглощения, входящая в левую часть системы (1).

Для минимизации дисперсии и максимально возможной погрешности определения i -й компоненты смеси необходимо минимизировать, соответственно, функции D_i и Φ_i [1, 3] (на множестве всех возможных вариантов НСКИ):

$$D_i = \sum_{j=1}^m (z_j^i)^2; \quad \Phi_i = \sum_{j=1}^m |z_j^i|, \quad (5)$$

где z_j^i – элемент матрицы \mathbf{Z} , находящейся на пересечении i -й строки и j -го столбца.

Минимизация погрешности всех определяемых компонент осуществляется, соответственно, минимизацией функции D и Φ (D - и Φ -критерии) [3]:

$$D = \sum_{i=1}^n D_i; \quad \Phi = \sum_{i=1}^n \Phi_i. \quad (6)$$

Критерий, использующий число обусловленности

В [15] рассматривается обусловленность систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для определения оптимального НСКИ. Ошибка решения СЛАУ газоанализа (1) при неточно заданной правой части (т.е. в условиях шумов) определяется неравенством:

$$\|\mathbf{N}_{ERR}\| \|\mathbf{N}\|^{-1} \leq \text{cond}(\mathbf{K}) \|\mathbf{y}_{ERR}\| \|\mathbf{y}\|^{-1}, \quad (7)$$

где

$$\text{cond}(\mathbf{K}) = \|\mathbf{K}\|_M \|\mathbf{K}^{-1}\|_M; \quad (8)$$

$\|\bullet\|$ – некоторая векторная норма; $\|\bullet\|_M$ – некоторая матричная норма; \mathbf{K} – матрица показателей поглощения; \mathbf{y}_{ERR} – вектор ошибок задания правой части системы (1); \mathbf{N}_{ERR} – вектор ошибок решения; $\text{cond}(\mathbf{K})$ – число обусловленности матрицы \mathbf{K} .

Минимизируя (на множестве всех возможных вариантов НСКИ) выражение

$$\text{cond}(\mathbf{K}) \|\mathbf{y}_{ERR}\| \|\mathbf{y}\|^{-1}, \quad (9)$$

можно минимизировать максимальную ошибку восстановления концентраций газов.

Критерий, использующий максимизацию информационного расстояния

В работах [12–14] описаны алгоритмы выбора НСКИ, основанные на байесовском подходе. Для выбора НСКИ предлагается максимизировать информационное расстояние L в пространстве состояний исследуемого газового объекта [14]:

$$L = \sqrt{\sum_{i,j} (N_2 - N_1)_i (R^T V^{-1} R)_{ij} (N_2 - N_1)_j}, \quad (10)$$

где $(N_2 - N_1)_i$ – диапазон изменения концентраций i -й газовой компоненты; R – матрица размерности $n \times n$, $R_{ij} = W_0^j \eta \kappa_{ji}$; W_0^j – мощность излучения на входе в ячейку для j -го спектрального канала; η – константа калибровки; V – диагональная матрица с элементами $\sigma_j^2 = \sigma_v^2(j) + (\delta_w^2 + \delta_n^2) \eta^2 (W_0^j)^2 \left(\sum_i \kappa_{ji} N_{2i} + \beta_j \right)^2$; $\sigma_v^2(j)$ – дисперсия ошибки измерения акустического сигнала в j -м канале; $\delta_{w,\eta}$ – относительные погрешности измерений W_0^j , η .

Критерий, основанный на анализе вариационно-ковариационной матрицы

Вариационно-ковариационная матрица $V(\mathbf{N})$, связанная с вектором решения \mathbf{N} системы линейных уравнений газоанализа, определяется следующим образом [6]:

$$V(\mathbf{N}) = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \sigma_y^2, \quad (11)$$

где σ_y^2 – дисперсия ошибки измерения y (предполагается, что дисперсия ошибки измерения одинакова для всех спектральных каналов).

В качестве критерия выбора НСКИ предлагается [6] использовать минимизацию суммы диагональных элементов матрицы $V(\mathbf{N})$ (они определяют дисперсии компонент вектора решения \mathbf{N} , полученного методом наименьших квадратов):

$$\min \sum_i V(\mathbf{N})_{ii}. \quad (12)$$

Критерий, основанный на использовании коэффициента информативности

В [3, 9] для выбора НСКИ предлагается максимизировать коэффициент r_i^j , определяющий меру информации о i -й газовой компоненте в j -м спектральном канале:

$$r_i^j = \kappa_{ji} \bar{N}_i \left(\sum_{p=1}^n \kappa_{jp} \bar{N}_p \right)^{-1}, \quad (13)$$

где \bar{N}_i – средняя возможная по условиям задачи (ожидаемая по априорным данным) концентрация i -й компоненты в анализируемой газовой смеси.

Критерий $\cos \alpha_i^j$ выбора набора спектральных каналов измерения

В работах [11, 16] для выбора НСКИ предлагается максимизировать критерий $\cos \alpha_i^j$:

$$\cos \alpha_i^j = \kappa_{ji} (\bar{N}_i) \left(\sum_{p=1}^n (\kappa_{jp} \bar{N}_p)^2 \right)^{-1/2}. \quad (14)$$

Рассмотрим возможность применения описанных критериев для ЛОАГ в режиме ДП. Для ЛОАГ возможно построение критериев выбора НСКИ, основанных на максимизации различных характеристик газоанализаторов, однако они не будут удовлетворять практическим интересам, так как лишь косвенно связаны с наиболее важной характеристикой работы ЛОАГ – ошибкой восстановления концентраций газов.

Критерии D и Φ [формулы (6)] поиска НСКИ могут быть использованы для ЛОАГ, работающего в режиме ДП. Однако при этом они должны быть модифицированы:

$$D = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\Delta z_j^i)^2 \sigma_{\Delta z_j^i}^2; \quad \Phi = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |\Delta z_j^i| \Delta(\tilde{y}_j), \quad (15)$$

где Δz_j^i – элемент i -й строки j -го столбца матрицы $\Delta Z = \Delta K^{-1}$; $\sigma_{\Delta z_j^i}^2$ – дисперсия измерения разности приведенного сигнала в j -й паре спектральных каналов; $\Delta(\tilde{y}_j)$ – погрешность измерения разности приведенного сигнала в j -й паре спектральных каналов.

Критерий, основанный на числе обусловленности матрицы коэффициентов СЛАУ, для ЛОАГ, работающего в режиме ДП, записывается следующим образом:

$$\text{cond}(\Delta K) \|\tilde{y}_{ERR}\| \|\tilde{y}\|^{-1}. \quad (16)$$

Используя данный критерий, можно учесть неточность в задании показателей поглощения, интенсивность линий источника, уровень шумов в измерительных каналах.

Перспективным является критерий максимизации информационного расстояния: он учитывает интенсивность спектральных линий источника, ошибки информативного сигнала, мощности излучения и константы калибровки. Однако для анализа многокомпонентных смесей с перекрывающимися спектрами критерий (10) должен быть модифицирован.

Критерий (12) позволяет минимизировать дисперсию вектора концентраций, полученного методом наименьших квадратов, и, по сути, близок к D - и Φ -критериям.

Использование критериев максимизации коэффициентов информативности (13) и косинусов углов (14) связано со сложностью априорной оценки значений концентраций.

Как показывает проведенный анализ, при выборе НСКИ для ЛОАГ в режиме ДП можно использовать D - и Φ -критерии (15) и критерий (16). Однако они требуют полного перебора всех сочетаний спектральных каналов, что связано с большим объемом вычислений. Перспективным является использование генетического алгоритма (ГА) [17]. Однако и ГА требует большого объема вычислений (хотя гораздо меньшего, чем полный перебор).

Таким образом, для оперативного газоанализа возникает необходимость в методике выбора НСКИ, не требующего большого объема вычислений. Ниже описывается один из вариантов такой эвристической методики. Она не требует полного перебора всех возможных вариантов НСКИ и учитывает основные факторы (для каждой пары спектральных каналов разность показателя поглощения соответствующего газа максимальна; учитываются влияние других газов в анализируемой смеси и спектральная зависимость мощности излучения лазерного источника). Методика заключается в следующем:

1. На первом этапе для каждого газа осуществляется поиск возможных пар спектральных каналов. Для каждого

возможного спектрального канала с номером j_{on} (соответствующего максимуму поглощения анализируемой газовой компоненты) из некоей ограниченной спектральной области (вблизи спектрального канала j_{on}) выбирается второй спектральный канал с номером j_{off} (соответствующий минимуму поглощения анализируемой газовой компоненты), максимизирующий параметр стоимости F :

$$F(i, j_{on}, j_{off}) = (1-b) \left[w_0^{j_{on}} \kappa_{j_{on}i} - \kappa_{j_{off}i} / w_0^{j_{off}} \right] - b \left\{ \sum_{l \neq i}^n [\kappa_{j_{on}l} + \kappa_{j_{off}l}] + \sum_{l \neq i}^n |\kappa_{j_{on}l} - \kappa_{j_{off}l}| \right\}, \quad (17)$$

где i – номер анализируемой газовой компоненты; n – число компонент в газовой смеси; j_{on}, j_{off} – номера длин волн пары спектральных каналов измерения с большим и малым значениями показателей поглощения i -й газовой компоненты; w_0^j – относительная (нормированная на максимальную по всем линиям генерации лазерного источника) мощность лазерного излучения на входе в ячейку для j -спектрального канала; b – эмпирический коэффициент (определяемый по результатам предварительных тестовых испытаний), учитывающий влияние «помехи» от других газов, входящих в состав смеси (коэффициент b выбирается из диапазона 0–1, причем $b=0$ – соответствует случаю, когда влияние других газов полностью не учитывается, а $b=1$).

2. Пары ранжируются отдельно для каждого газа в соответствии с параметром стоимости F .

3. Выбирается такой набор пар длин волн, для которых параметр F максимален, при условии, что длины волн в наборе спектральных каналов измерения используются по одному разу.

Первый член в формуле (17) имеет вид

$$(1-b) (w_0^{j_{on}} \kappa_{j_{on}i} - \kappa_{j_{off}i} / w_0^{j_{off}}).$$

При максимизации этого члена, во-первых, надо максимизировать коэффициент поглощения анализируемого i -го газа на линии j_{on} и мощность лазерного источника на этой линии (для максимизации слагаемого $w_0^{j_{on}} \kappa_{j_{on}i}$) и, во-вторых, минимизировать коэффициент поглощения анализируемого j -го газа на линии j_{off} и максимизировать мощность излучения лазерного источника на этой линии (для минимизации слагаемого $\kappa_{j_{off}i} / w_0^{j_{off}}$). Мощность излучения лазерного источника должна максимизироваться как для линии «on», так и для линии «off», чтобы уменьшить относительную ошибку измерения приведенного сигнала на фоне присутствующих аддитивных шумов. Размерность обоих слагаемых соответствует размерности поглощения, так как w_0^j – относительная мощность.

Второй член в формуле (17), учитывающий влияние остальных газов смеси на результаты измерения на линиях j_{on}, j_{off} , имеет вид

$$-b \left\{ \sum_{l \neq i}^n [\kappa_{j_{on}l} + \kappa_{j_{off}l}] + \sum_{l \neq i}^n |\kappa_{j_{on}l} - \kappa_{j_{off}l}| \right\}.$$

При минимизации влияния этого отрицательного члена надо минимизировать коэффициенты остальных газов и разности коэффициентов поглощения остальных газов на линиях j_{on}, j_{off} .

Объем вычислений для описанного алгоритма небольшой даже при решении задач большой размерности.

Это достигается за счет вычисления параметра F не для всего возможного набора длин волн, а отдельно для каждой пары спектральных каналов измерения.

Для ЛОАГ, работающего в режиме ДП, с помощью математического моделирования для различных газовых смесей проводилось сравнение методики, основанной на выражении (17), и критериев (15), (16). Для критериев (15), (16) поиск проводился с использованием ГА.

Различные методы выбора спектральных каналов измерения сравниваются с точки зрения двух критериев:

1) ошибок восстановления концентрации газов для выбранных спектральных каналов измерения (для заданного уровня шума измерения);

2) объема вычислений, который характеризуется временем, затраченным на поиск набора спектральных каналов.

Авторы провели большой объем математического моделирования для различных газовых смесей, чтобы с точки зрения этих критериев оценить метод, предлагаемый ими, и известные методы выбора спектральных каналов измерения. Некоторые результаты математического моделирования приведены в статье.

Ниже представлены результаты моделирования для 8-компонентной смеси аммиак – хлоропрен – этилакрилат – этилен – гидразин – метанол – монометилгидразин (ММГ) – несимметричный диметилгидразин (НДМГ). На рис. 1 показан спектр газовых компонент анализируемой смеси.

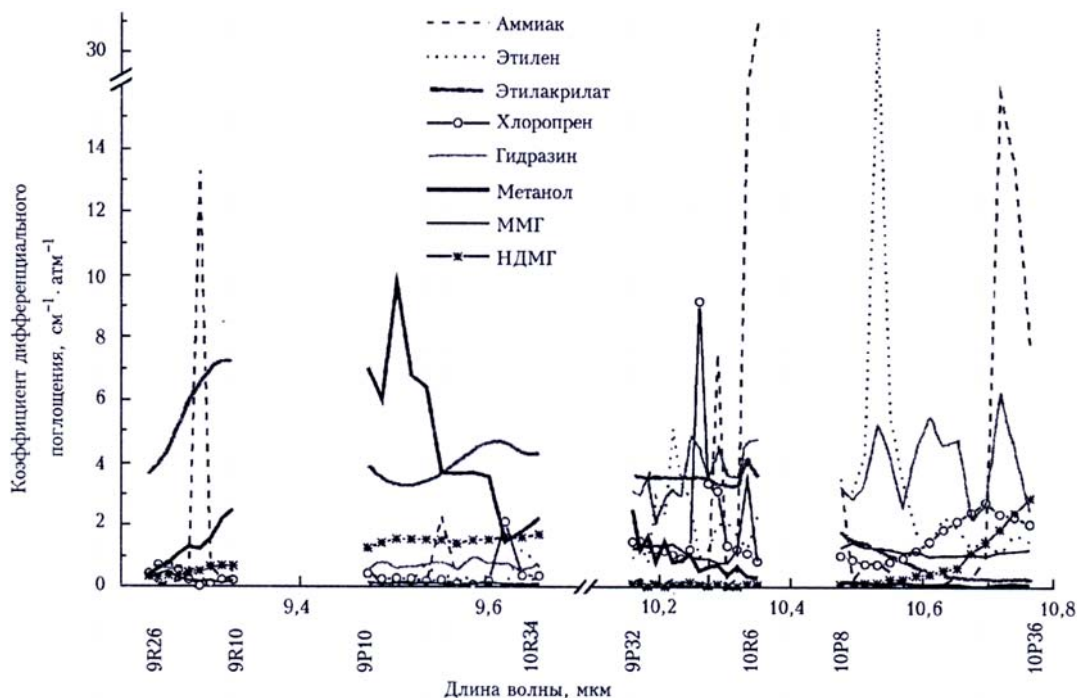


Рис. 1. Спектр газовых компонент анализируемой 8-компонентной смеси

Таблица 1

Значения соответствующих критериев оптимальности для выбранных спектральных каналов измерения					
Критерий выбора	НСКИ Длины волн пар спектральных каналов измерения, мкм	Значения критериев оптимальности			
		1. Критерий, основанный на числе обусловленности	2. Ф-критерий	3. D-критерий	4. Эвристический алгоритм
1. Критерий, основанный на числе обусловленности	9,294–9,282; 9,317–9,271; 9,536–9,604; 10,289–10,260; 10,476–10,274 10,532–10,591; 10,719–10,764; 10,741–10,675	0,16	0,2	0,71	0,35
2. Ф-критерий	9,294–9,250; 9,504–9,552; 10,260–10,303; 10,334–10,289; 10,349–10,318; 10,532–10,476; 10,571–10,611; 10,719–10,764	0,12	0,22	0,47	1,29
3. D-критерий	9,282–9,250; 9,504–9,552; 10,247–10,260; 10,334–10,289; 10,349–10,318; 10,611–10,551; 10,741–10,696; 10,719–10,764	0,15	0,20	0,72	0,84
4. Эвристический алгоритм	9,294–9,261; 9,305–9,250; 9,504–9,552; 10,260–10,233; 10,334–10,303 10,532–10,591; 10,696–10,632; 10,719–10,675	0,14	0,19	0,55	3,27

В табл. 1 приведены значения критериев оптимальности для выбранных (на основе этих критериев) НСКИ (первые три критерия при этом были модифицированы так,

чтобы свести задачу оптимизации к задаче максимизации критерия). Для D-, Ф-критериев и критерия, основанного на числе обусловленности, фиксировалось время счета –

10 мин. Для методики, основанной на выражении (17), время счета не ограничивалось и было меньше 1 с. Видно, что значения первых трех критериев близки друг к другу и при использовании одного из них можно получить НСКИ, имеющий хорошие значения других критериев. Однако для этих критериев не всегда можно получить подходящий (в смысле критериев оптимальности) НСКИ за приемлемое время счета. Критерий (17) в этом смысле предпочтительнее – для него время счета намного меньше.

Приведенные времена счета [10 мин для *D*-, *Ф*-критериев и критерия, основанного на числе обусловлен-

ности, и 1 с для методики, основанной на выражении (17)], во-первых, характеризуют не только вычислительные алгоритмы, но возможности методов выбора спектральных каналов измерения (предлагаемая методика, в отличие от других анализируемых критериев, не требует полного перебора по всем возможным вариантам наборов спектральных каналов измерения) и, во-вторых, дают не столько абсолютные времена счета для разных методов (зависящие от вида ЭВМ, вычислительных алгоритмов низкого уровня и т.д.), сколько их соотношение (зависящее от структуры критериев).

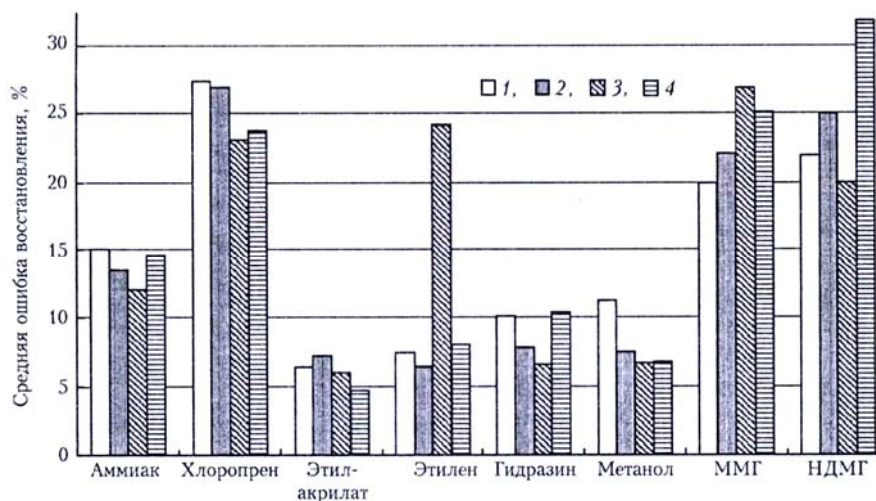


Рис. 2. Относительные ошибки восстановления концентраций газов для разных критериев выбора НСКИ

На рис. 2 приведены относительные ошибки восстановления концентраций газов для разных критериев выбора НСКИ (обозначения 1 – 4 соответствуют номерам критериев в табл. 1). Ошибка вычислялась как модуль разности заданного и восстановленного значений концентрации, деленный на заданное значение концентрации. Результаты соответствуют средней ошибке восстановления по 100 измерениям. Шум измерения задавался равным 2,5%. Восстановление концентраций газов проводилось методом нахождения квазирешений с использованием ГА поиска [18]. Из рис. 2 видно, что ошибки, соответствующие различным критериям, не особенно сильно отличаются между собой.

В табл. 2 приведено итоговое сравнение методов выбора НСКИ на примере рассмотренной 8-компонентной смеси. Из табл. 2 видно, что необходимая априорная информация качественно близка для всех методов (относительная интенсивность лазерного излучения позволяет судить о соотношении погрешностей излучения в различных каналах). Средняя (по всем газам) ошибка восстановления концентраций компонент смеси для всех методов имеет близкие значения (порядка 15%). Однако для *D*-, *Ф*-критериев и критерия, основанного на числе обусловленности, количество необходимых (для получения оптимального НСКИ, требующего полного перебора всех вариантов) вычислений целевой функции достигает $\sim 3 \cdot 10^{12}$.

Таблица 2

Сравнение методов выбора спектральных каналов измерения (на примере 8-компонентной смеси)				
Критерий выбора	Необходимая априорная информация	Количество вычислений целевой функции	Время счета, необходимое на вычисление целевой функции 1120 раз, с	Средняя ошибка восстановления, %
1. Критерий, основанный на числе обусловленности	1. Коэффициенты поглощения газов, входящих в анализируемую смесь. 2. Погрешность или дисперсия измерения разности приведенного сигнала.	$\sim 3 \cdot 10^{12}$	2	15
2. <i>Ф</i> -критерий				14,6
3. <i>D</i> -критерий				15,7
4. Эвристический алгоритм	1. Коэффициенты поглощения газов, входящих в анализируемую смесь. 2. Относительные интенсивности лазерного излучения на входе в ячейку.	1120	< 1	15,7

В то же время для эвристического алгоритма количество необходимых вычислений целевой функции на 9 порядков меньше. Более того, для него время счета, необходимое для вычисления целевой функции, в два раза меньше, чем для остальных критериев (так как целевая функция для эвристического алгоритма имеет более простой вид).

Таким образом, для поиска НСКИ для ЛОАГ, работающего в режиме ДП, могут быть использованы *D*-, *F*-критерии (15), критерий (16), основанный на числе обусловленности, и методика (17). Математическое моделирование для газовых смесей с различным количественным и качественным составом показывает, что использование этих критериев приводит к результатам, не особенно сильно отличающимся между собой. Однако для задач оперативного газоанализа методика (17) представляется предпочтительнее с точки зрения объема вычислений.

1. Берштейн И.Я. Выбор степени переопределения при спектрофотометрическом анализе многокомпонентных смесей // Ж. анал. химии. 1988. Т. 43. № 11. С. 1962–1967.
2. Берштейн И.Я., Каминский Ю.Л. Спектрофотометрический анализ в органической химии. Л.: Химия, 1986. 200 с.
3. Перьков И.Г., Дрозд А.В., Арцебаев Г.В. Выбор оптимальных длин волн и прогнозирование погрешностей в многокомпонентном спектрофотометрическом анализе. // Ж. анал. химии. 1987. Т. 42. № 1. С. 68–77.
4. Пилипенко А.Т., Савранский Л.И., Масько А.Н. Спектрофотометрический анализ многокомпонентных смесей с применением ЭВМ // Ж. анал. химии. 1983. Т. 38. № 8. С. 1455–1462.
5. Kaiser H. Zur Definition von Selektivitaet, Spezifitaet und Empfindlichkeit von Analysenverfahren // Z. Anal. Chem. 1972. Bd 260. H. 3. S. 252–260.
6. Frans S.D., Harris J.M. Selection of Analytical Wavelength for Multicomponent Spectrophotometric Determinations // Anal. Chem. 1985. V. 57. № 13. P. 2680–2684.
7. Junker A., Bergmann G. Auswahl, Vergleich, und Bewertung optimaler Arbeitsbedingungen fuer die quantitative Mehrkomponenten-Analyse // Z. Anal. Chem. 1974. Bd 272. H. 4. S. 267–275.
8. Bergmann G., Oepen B.V., Zinn P. Improvement in the Definitions of Sensivity and Selectivity // Anal. Chem. 1987. V. 59. № 20. P. 2522–2526.
9. Кац М.Д. О выборе аналитических позиций при анализе многокомпонентных смесей по спектрам поглощения // Завод. лаб. 1973. Т. 39. № 2. С. 160–163.
10. Кац М.Д., Розкин М.Я. О количественном критерии для выбора оптимальных спектральных позиций при анализе многокомпонентных смесей по спектрам поглощения // Завод. лаб. 1972. Т. 38. № 6. С. 688–690.
11. Васильев А.Ф., Панкова М.Б., Маркови Ю.М. Программа получения коэффициентов уравнений для расчета концентраций в неаддитивных многокомпонентных смесях по спектрам поглощения // Завод. лаб. 1973. Т. 39. № 9. С. 1073–1077.
12. Катаев М.Ю., Мицель А.А., Тарасова С.Р. Выбор информативных спектральных участков для решения задач газоанализа с помощью ОАД // Оптика атмосфер. 1990. Т. 3. № 8. С. 832–841.
13. Мицель А.А. Выбор оптимальных спектральных каналов для решения задач абсорбционного газоанализа и локации. Ч. 1 // Оптика атмосфер. и океана. 1992. Т. 5. № 9. С. 978–985.
14. Катаев М.Ю., Мицель А.А. Выбор оптимальных спектральных каналов для решения задач абсорбционного газоанализа и локации. Ч. 2 // Оптика атмосфер. и океана. 1992. Т. 5. № 9. С. 986–994.
15. Zscheile F.P., Murrey H.C., Baker G.A., Peddicord R.G. Instability of Linear Systems Derived from Spectrophotometric Analysis of Multicomponent Systems // Anal. Chem. 1962. V. 34. № 13. P. 1776–1780.
16. Применение ЭВМ в химических и биохимических исследованиях / Под ред. А.Ф. Васильева. Т. 1. М.: Химия, 1976. 294 с.
17. Schoeneburg E., Heinmann F., Feddersen S. Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien: Eine Einfuehrung in Theorie und Praxis der simulierten Evolution. Bonn; Paris; Reading; Mass. [u.a.]: Addison-Wesley, 1994. 321 s.
18. Белов М.Л., Городничев В.А., Козинцев В.И., Федотов Ю.В. Метод поиска квазирешений в задаче лазерного оптико-акустического газоанализа // Оптика атмосфер. и океана. 2002. Т. 15. № 4. С. 388–392.

M.L.Belov, V.A.Gorodnichev, V.I.Kozintsev, Yu.V. Fedotov. The comparative analysis of search methods of spectral measurement channels for laser photoacoustic gasanalyser.

The paper describes the comparative analysis of algorithms for search for spectral measurement channels for a laser photoacoustic differential absorption gasanalyser, intended for quantitative analysis of multicomponent gas mixtures. The advantages and lacks of various algorithms are considered. It is shown, that the algorithm for search for spectral channels of measurement, developed by the authors, takes into account major factors influencing the gasanalyser operation, requires little calculations and is most preferable from the point of view of the gasanalysis efficiency.