УДК 543.5;543.26

DOI 10.21685/2307-4205-2017-3-2

ЭМПИРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИДЕНТИФИКАЦИИ ВЕЩЕСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПАРОГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

А. И. Белозерцев, С. З. Эль-Салим

Надежность измерений, проводимых с помощью газоаналитических систем, определяется факторами, зависимыми от ряда технических и математических параметров:

– технологии изготовления первичного преобразователя;

– совместимостью схемотехнического решения и первичного преобразователя;

– алгоритма управления и обработки результатов измерения;

– стабильностью аналитических характеристик [1].

В современном газовом анализе приведенные факторы составляют задачу 3S: чувствительность, стабильность и селективность [2].

Цель настоящей работы – разработка программно-алгоритмического аппарата, позволяющего повысить качество работы газоаналитической системы. Результатом исследований, проводимых в рамках работы, является алгоритм управления и обработки результатов прямых измерений, позволяющий с высокой достоверностью идентифицировать вещества-аналиты и поднять точность количественного анализа реальных многокомпонентных паровоздушных смесей.

Полупроводниковые сенсоры, изготовленные на основе диоксида олова (SnO_2), легированного электроуправляющими и каталитическими примесями, наиболее полно удовлетворяют требованиям современного газового анализа [1, 2].

Действительно, стабильность электрофизических и аналитических характеристик достигается разработанной групповой технологией их изготовления, в которую входит методика синтеза дисперсных полупроводников и метод внесения добавок, снижающих температуру спекания газочувствительного материала.

Введение каталитических примесей, нагрев до заданных температур в полной мере не снимают основной вопрос селективной идентификации веществ в многокомпонентных смесях. Для повышения селективности предложен метод формирования мультисенсорных систем, составленных из сенсоров различного химического состава – сенсоров, основу которых составляет диоксид олова и различные каталитические примеси [3].

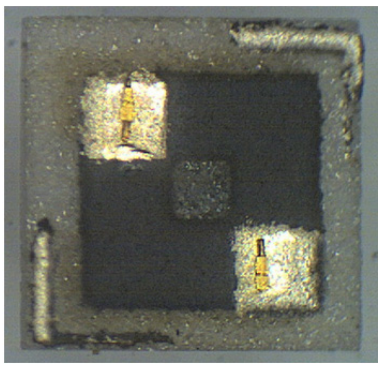
Разработанные схемотехнические устройства позволяют включать одновременно две 4-канальных микросборки с последующим попарным клонированием. Таким образом, при необходимости можно одновременно подключить до $4n$ сенсоров, имеющих различный химический состав и возможность работы при разных температурах. Такой подход позволяет достичь высокой степени селективности. На рис. 1 приведены изображения сенсоров, эскизов микросборок и варианты размещения микросборок в аналитических камерах различного типа.

На рис. 2 приведены схемотехнические решения для подключения двух 4-канальных микросборок с различными интерфейсами.

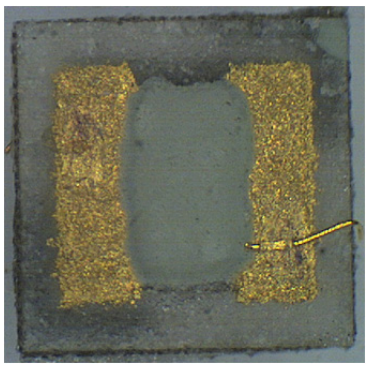
Обнаружение примесей паров и газов в воздухе, проводимое с применением полупроводниковых адсорбционных датчиков резистивного типа, основано на измерении падения напряжения на газочувствительном элементе при его нагреве до температуры, определяемой подводимой к нагревательному элементу мощностью, регулируемой в диапазоне от 50 до 1000 мВт. Изменение падения напряжения зависит от изменения сопротивления газочувствительного слоя в результате адсорбции молекул примеси исследуемого вещества при прокачке потока воздуха с расходом в диапазоне от 0,7 до 5 л/мин. Объем газовой камеры фиксирован и позволяет проводить обнаружение примесей паров и газов в воздухе в режиме полного перемешивания [3].

Применение вейвлет-преобразования обусловлено частотно-временной локализацией как аналогового, так и цифрового массива полученной при измерении информации. Разложение спектра по базису вейвлет-образующих функций позволяет раскрыть тонкую структуру спектра в реальном масштабе времени и устранить неопределенность, характерную для Фурье-преобразования. Неопределенность Фурье образа обусловлена принципом Гейзенберга, который не позволяет локализовать высокочастотные составляющие спектра (рис. 3). Вейвлет-преобразование свободно от

неопределенности в частотно-временной области в силу возможности деформации и сдвига вейвлет-базиса на любую величину, принадлежащую $\mathbb{R}^2$ [4].



Нагревательный элемент сенсора



Газочувствительный элемент сенсора

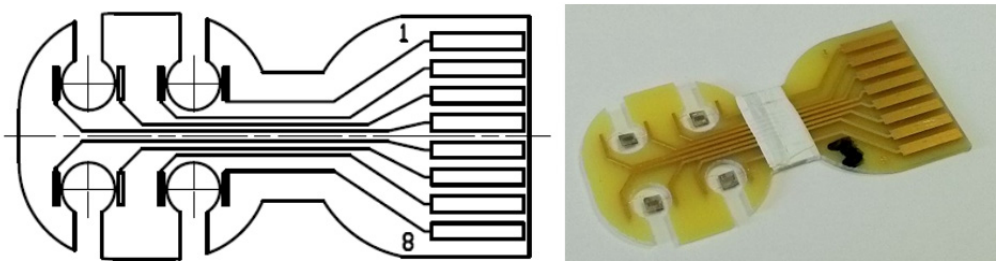


Схема микросборки и собранная 4-канальная плата-носитель

Варианты размещения микросборок в аналитических камерах

Рис. 1. Сенсоры и 4-канальные микросборки

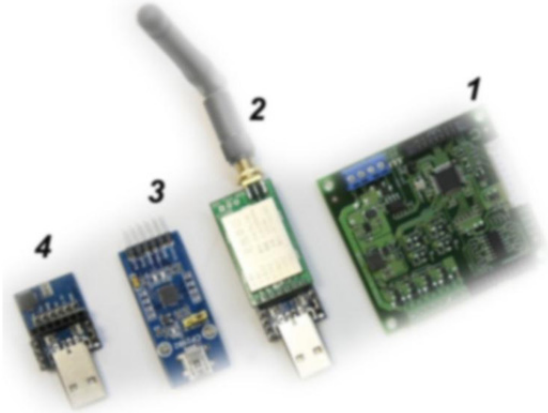


Рис. 2. Схемотехническое решение управления 8-канальной аналитической системой:
1 – модуль управления 8-канальной аналитической системой, интерфейсы коммутации с сервером;
2 – радиоканал; *3* – RS 485; *4* – UART/USB 2.0

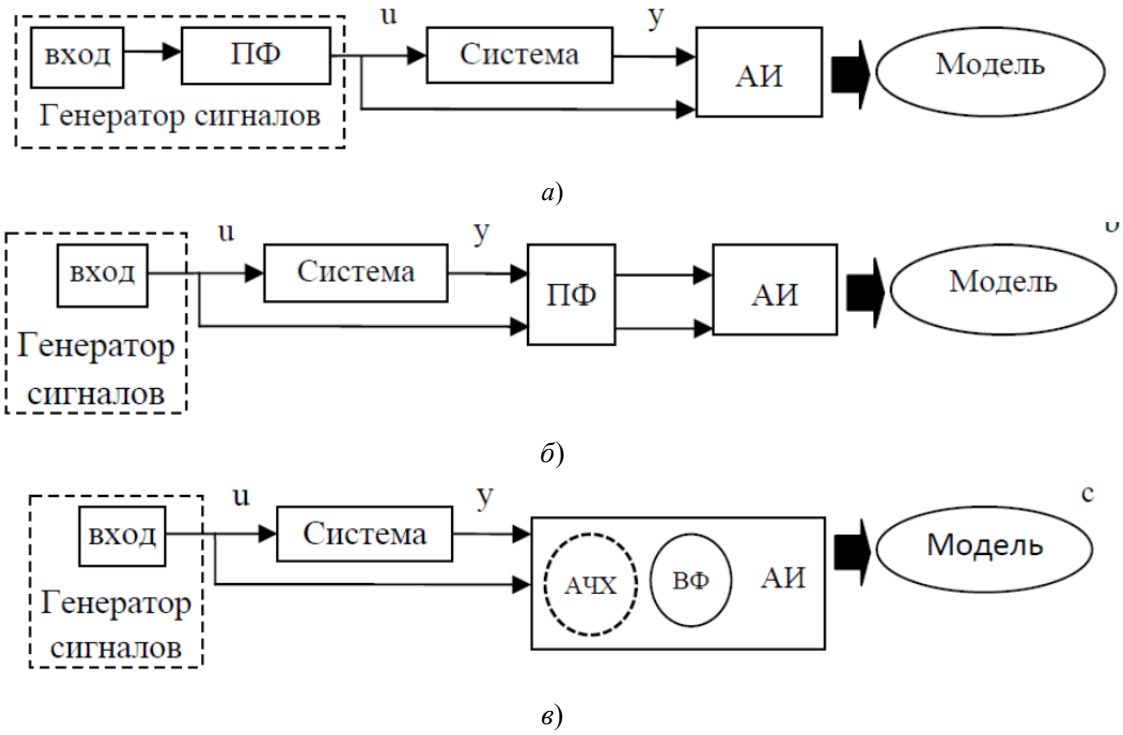


Рис. 3. Основные принципы алгоритмов:
а, *б* – классические методы идентификации в частотной области;
в – модификация идентификации; ПФ – преобразование Фурье;
АИ – алгоритм идентификации; АЧХ – анализ частотных характеристик; ВФ – вейвлет-фильтр

Напряжение измеряется каждый момент времени и может быть сглажено с увеличением интервала измерений. Представим измеряемое напряжение в виде

$$U(t) = U_i, \text{ где } t \in [i, i+1], i \in Z. \tag{1}$$

Сглаживание $U(t)$ непрерывно и соответствует дискретным наборам U_i, измеренным с интервалом $1/\omega c$, в этом случае вейвлет-образ $U(t)$ имеет вид

$$W_U(a,b) = U(t)\left|\frac{1}{\sqrt{|a|}}\psi\left(\frac{t-b}{a}\right)\right. \tag{2}$$

или, переходя к интегрируемым в пространстве $\mathbb{R}$ функциям:

$$W_U(a,b) = \frac{1}{\sqrt{|a|}}\int_0^t U(t)\psi\left(\frac{t-b}{a}\right)dt. \tag{3}$$

Коэффициенты a и b в (2) и (3) определяют масштабирование по времени и деформацию вейвлет-производящей функции ψ. Учитывая (1), уравнение (3) примет вид

$$W_U(a,b) = \frac{1}{\sqrt{|a|}}\sum_{i=0}^{N-1} U_i \int_0^t \psi\left(\frac{t-b}{a}\right)dt. \tag{4}$$

При этом a изменяется от 1 до N, b от 0 до $N-1$. Таким образом, сигналу U_i с количеством отсчетов N ставится в соответствие матрица размерностью $N \times N$ [6].

Массив вейвлет-преобразования $W_U(a, b)$ вычисляется при вариации коэффициентов a и b по измеренным значениям $U(t)$ при условии $a \neq 0$. Для сигналов конечной длины выражение (4) представляет собой конечную сумму, вычисляемую в масштабе реального времени процесса измерения.

Наиболее подходящими базовыми вейвлет-функциями являются начальные производные функции Гаусса. Применение гауссовой функции для спектрального преобразования позволяет построить вейвлет-базис следующего аналитического вида:

$$\psi_n(t) = (-1)^{n+1} \partial_t^n e^{-\frac{t^2}{2}}. \quad (5)$$

Первые четыре функции, образующие базис, определяются операцией дифференцирования уравнения (5):

– исходная функция: $\psi_0(t) = e^{-t^2}$;

– первая производная: $\psi_1(t) = -te^{-t^2}$;

– вторая производная: $\psi_2(t) = (1-t^2)e^{-t^2}$;

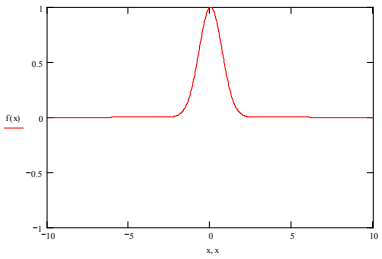
– третья производная: $\psi_3(t) = (t-t^3)e^{-t^2}$;

– четвертая производная: $\psi_4(t) = (1+t^2-t^4)e^{-t^2}$.

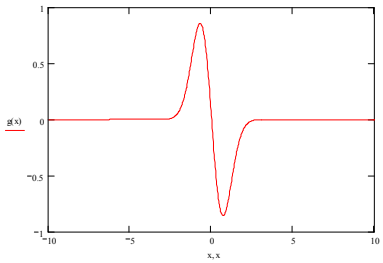
То есть производные вейвлет-образующей функции гауссовой формы можно представить как произведение полиномов Лежандра и экспоненты квадрата зависимой переменной в квадрате, взятой со знаком минус:

$$\psi_n(t) = (-1)^n L_n(t) e^{-t^2}. \quad (6)$$

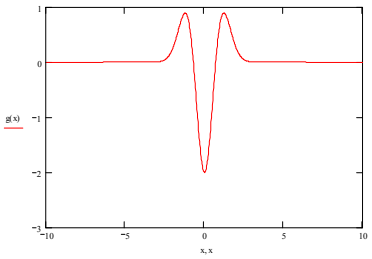
На рис. 4 приведены графики вейвлет-образующей функции и первых ее производных, образующих вейвлет-базис.



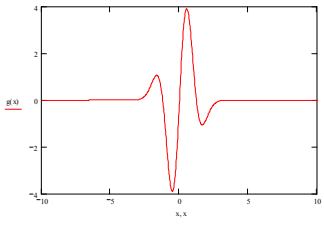
Вейвлет-образующая функция



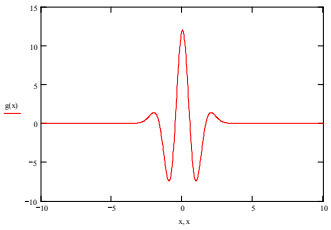
Вейвлет-образующая функция первого порядка



Вейвлет-образующая функция второго порядка



Вейвлет-образующая функция третьего порядка



Вейвлет-образующая функция четвертого порядка

Рис. 4. Функции, образующие базис и соответствующие основным свойствам вейвлетов

Для данных вейвлетов характерно свойство, имеющее практическое значение: при построении вейвлет-преобразования, проведенного по результатам эксперимента, можно использовать один и тот же коэффициент сжатия/растяжения для всех вейвлетов порядка n.

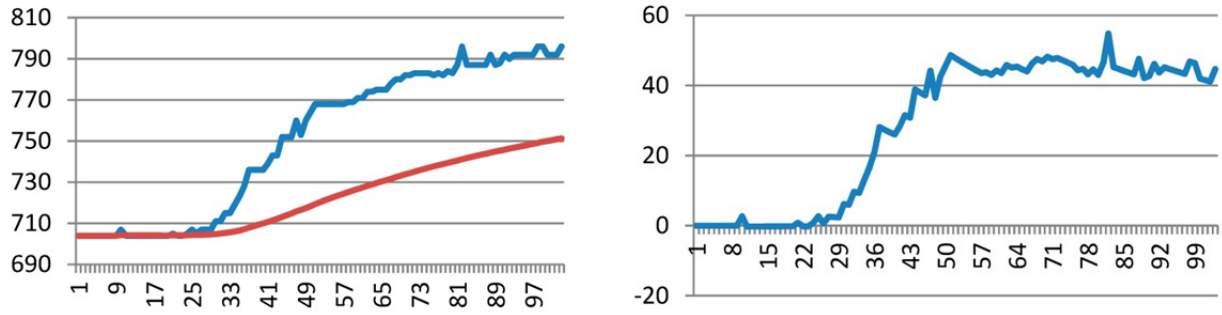
Следует отметить, что дифференцирование вейвлета часто оказывается более простой операцией, чем дифференцирование самой анализируемой функции, которая может иметь разрывы и искажаться случайными внешними воздействиями. В этом случае вейвлет-преобразование от производной исходной функции можно представить как

$$W_{\psi n}\varphi = W_{\psi n} D_k f = W_{n+k} f. \quad (7)$$

На примере обнаружения паров несимметричного диметилгидразина, являющегося активным восстановителем, рассмотрим алгоритм проведения вейвлет-преобразования для повышения достоверности идентификации вещества [5].

Перед преобразованием проведены предварительные операция сглаживания и нормировки исходного сигнала.

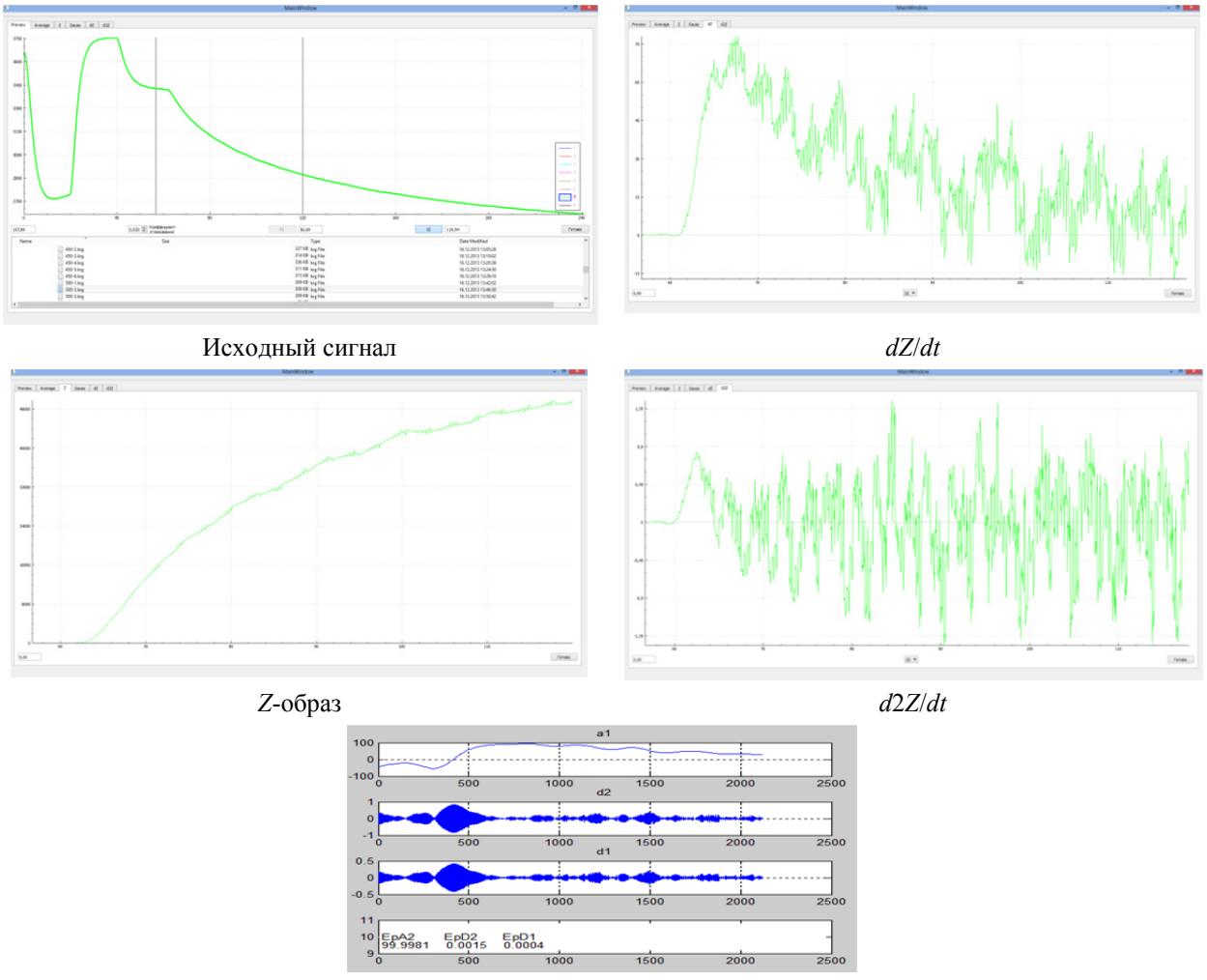
На рис. 5 показаны исходный, сглаженный и нормированный сигналы.



Исходный и сглаженный сигнал $U(t)$ Сглаженный и нормированный сигнал $U(t)$

Рис. 5. Первичная обработка сигнала: сглаживание и нормировка

Приведем пример вычисления WWT-преобразования паров НДМГ. Исходный сигнал сглаживается по экспоненте (рис. 6).



Исходный сигнал dZ/dt

Z-образ $d2Z/dt$

WWT-преобразование

Рис. 6. Этапы проведения WWT для паров НДМГ

Затем рассчитывается *Z*-образ как мгновенная дисперсия. Следующий шаг – расчет производной первого и второго порядка. После проведения самоподобных преобразований, проводится операция WWT. Отметим, что все операции осуществляются в режиме реального времени [4, 6].

Вейвлет-базисы локализованы как по частоте, так и по времени. При выделении в исходных сигналах локализованных разномасштабных процессов можно выделить только те масштабные уровни разложения, которые соответствуют веществу-аналиту. Сечение WWT-образа, определенного временем процесса, частотой и амплитудой, приведено на рис. 7.

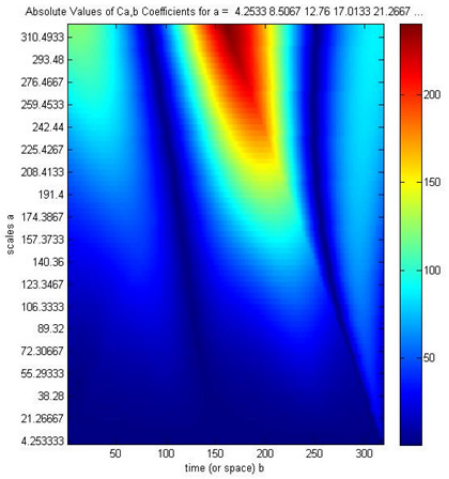


Рис. 7. Пространственно-частотная локализация в вейвлет-базисе для НДМГ

Выбор конкретного вида и типа вейвлетов во многом зависит от анализируемых сигналов и задач анализа. Для получения оптимальных алгоритмов преобразования разработаны определенные критерии, но их еще нельзя считать окончательными, так как они являются внутренними по отношению к самим алгоритмам преобразования и, как правило, не учитывают внешних критериев, связанных с сигналами и целями их преобразований.

Отсюда следует, что при практическом использовании вейвлет-функций необходимо уделять достаточное внимание проверке их работоспособности и эффективности для поставленных целей по сравнению с известными методами обработки и анализа [6].

С помощью вейвлет-базиса получены вейвлет-разложения для паров НДМГ и АТ, измеренных газочувствительными сенсорами в сложной паровоздушной смеси. На рис. 8 показан WWT-образ для НДМГ, на рис. 9 – для АТ. Концентрации примеси гептила и амила составляют 0,5 и 2,5 мг/м^3 соответственно [6].

На рисунках видно, WWT-образ, полученный в режиме реального времени, позволяет однозначно идентифицировать вещества-аналиты – НДМГ и АТ. Следует отметить, что с учетом реакции топлива и окислителя, компоненты идентифицируются с высокой достоверностью. Видно, что для повышения селективности при обнаружении пары НДМГ-АТ достаточно применения базиса, состоящего из первой и второй производной *Z*-функции (дисперсии), рассчитанной по измеренному потенциалу – напряжению в каждом канале аналитической системы, состоящей из четырех сенсоров.

Модель обработки результатов измерений, построенная на основе вейвлет-преобразований, позволяет, не повышая времени принятия решения, идентифицировать многокомпонентные парогазовые смеси, рассчитывать концентрации компонент как интегральные суммы WWT-разложения по первой и второй производной [7]. Так как модель является эмпирической в силу формирования базиса по измерениям «чистых» веществ, то массив проб, необходимых для градуировки, снижается, что значительно повышает ценность применения эмпирического моделирования.

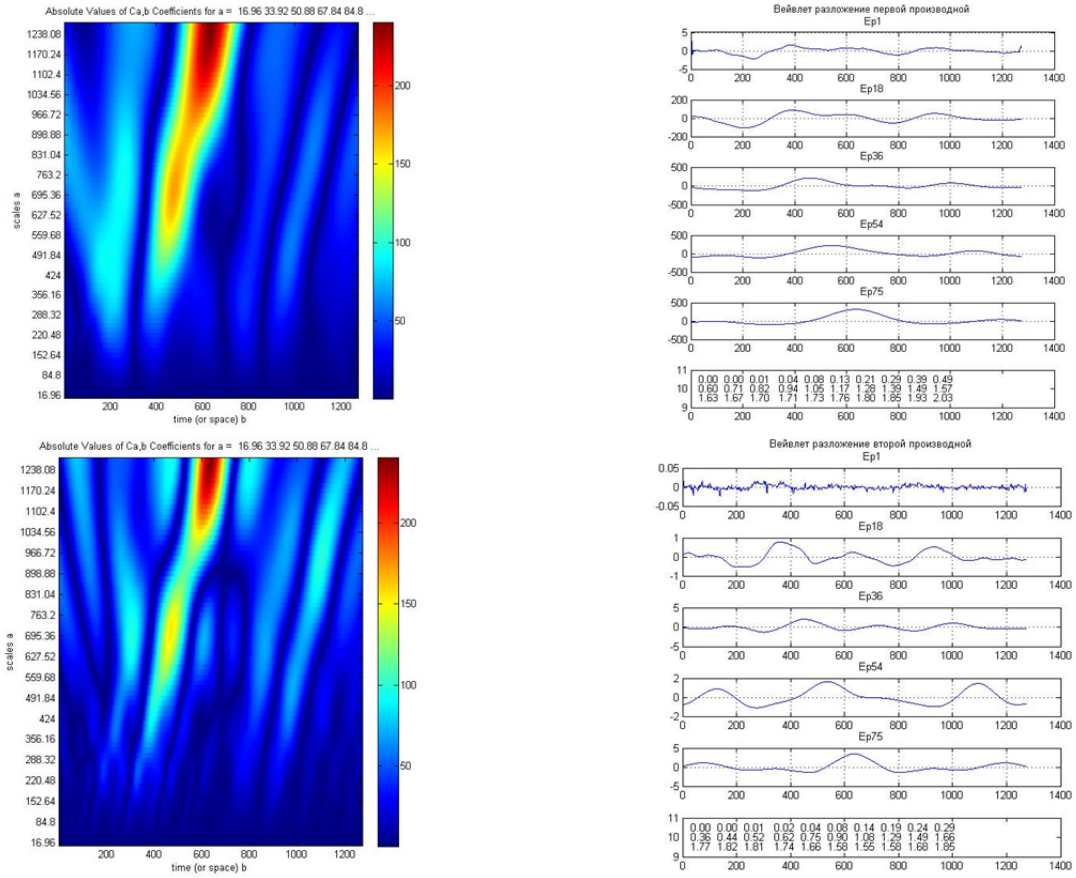


Рис. 8. WWT-преобразование по первой и второй производной паров НДМГ

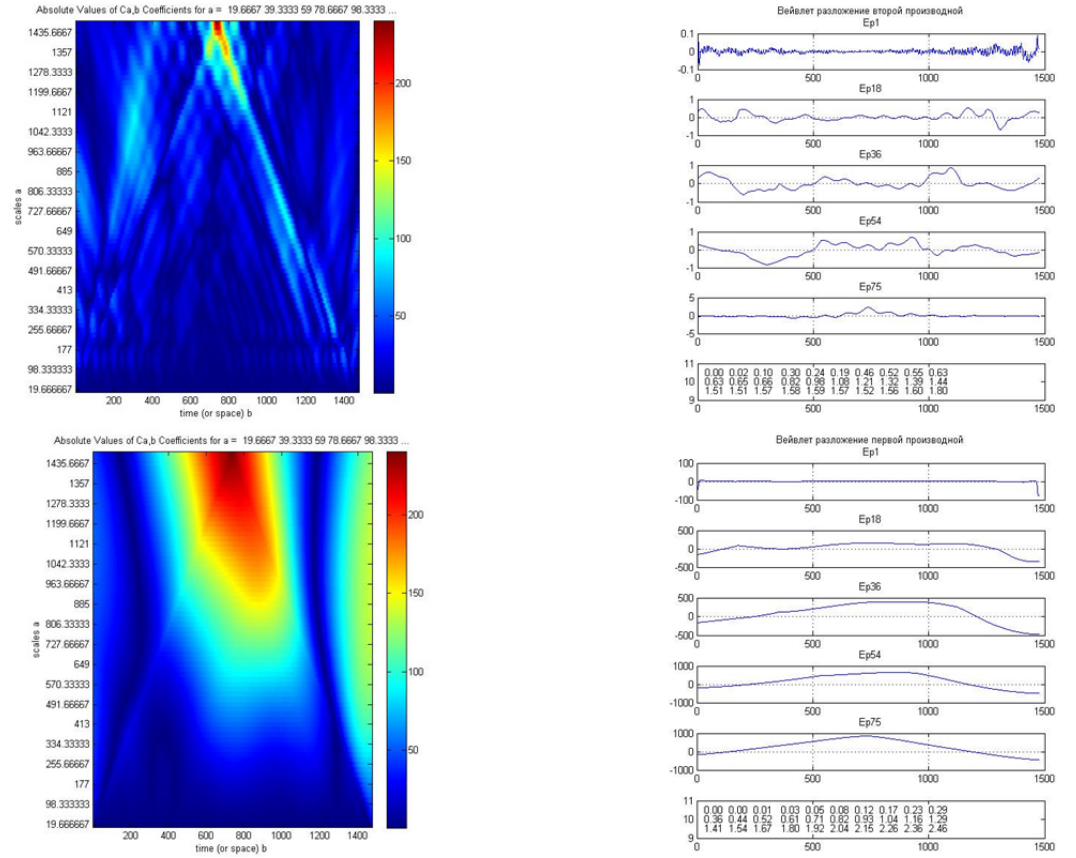


Рис. 9.WWT-преобразование по первой и второй производной паров АТ

Библиографический список

1. Налимова, С. В. Анализ газочувствительных наноструктур с варьируемым типом и концентрацией адсорбционных центров : автореф. дис. … канд. физ.-мат. наук / Налимова С. В. ; Санкт-Петербургский государственный электротехнический ун-т. – СПб., 2013. – 22 с.
2. Odor identification using SnCVbased sensor array / T. Maekawa, K. Suzuki, T. Takada, T. Kabayushi, M. Egashira // Sensors and Actuators. – 2001. – Vol. 80. – P. 51–58.
3. Мясников, И. А. Полупроводниковые сенсоры в физико-химических исследованиях / И. А. Мясников, В. Я. Сухарев, Л. Ю. Куприянов. – М. : Наука, 1991. – 327 с.
4. Методы определения компонентов ракетных топлив и их производных в объектах производственной и окружающей среды : метод. пособие / под ред. Л. М. Разбитной. – М. : Ин-т Биофизики, 1988. – С. 68–70.
5. Тулупов, П. Е. Кинетика превращения несимметричного диметилгидразина в гелево-кислородной газовой фазе / П. Е. Тулупов, С. В. Колесников // Труды IV Всесоюз. совещания Загрязнение атмосферы и почвы : сб. – Л. : Гидрометеоиздат, 1991. – С. 102–108.
6. Мисийчук Ю. И., Терещенко Г. Ф., Лебедев Г. П. и др. // Экологические аспекты применения диметилгидразина // Экологическая химия. – 1998. – № 7 (1). – С. 42–47.
7. Вейвлет-преобразования в пакете Матлаб. – URL: https/ www.exponenta.ru

Белозерцев Александр Иванович
первый заместитель генерального директора,
Научно-исследовательский институт
физических измерений
(440026, Россия, г. Пенза, ул. Володарского, 8/10)
E-mail: info@niifi.ru

Эль-Салим Суад Зухер
доктор физико-математических наук, профессор,
генеральный директор
ООО «Омега»
(199048, Россия, г. Санкт-Петербург,
наб. реки Смоленки, 19-21, лит. В)
E-mail: suad-olka@yandex.ru

Belozertsev Aleksandr Ivanovich
first deputy general director,
Scientific-research Institute
of physical measurements
(440026, 8/10 Volodarskogo street, Penza, Russia)

Al-Salim Suad Zuher
doctor of physical and mathematical sciences, professor,
director general,
Ltd "Omega"
(199048, lit. In, 19-21 embankment
of the Smolenka river, Saint-Petersburg, Russia)

Аннотация. Рассматривается эмпирическая модель идентификации вещества при анализе многокомпонентных парогазовых смесей. Приводится анализ измеримых множеств и самоподобные преобразования первичных массивов данных. Показана возможность проведения вейвлет-преобразований в базисе, построенном на основе первичных и преобразованных функций, полученных при измерениях «чистых» веществ.

Ключевые слова: вейвлет, дисперсия, газочувствительный слой, мультисенсорная система, вейвлет-преобразования, селективность.

Abstract. In work the empirical model of identification of substances is considered in the analysis of multicomponent steam-gas mixes. The analysis of measurable sets and self-similar transformations of the processed data arrays is provided. The possibility of carrying out wavelet-transformations in basis, constructed on the basis of primary and transformed functions received at measurements of «pure» substances is shown.

Key words: wavelet, dispersion, a gas-sensitive layer, multitouch system, wavelet-transformations, selectivity.

УДК 543.5;543.26
Белозерцев, А. И.
Эмпирическая модель идентификации вещества многокомпонентных парогазовых смесей / А. И. Белозерцев, С. З. Эль-Салим // Надежность и качество сложных систем. – 2017. – № 3 (19). – С. 10–17. DOI 10.21685/2307-4205-2017-3-2.