

Анализ спектров поглощения газовых проб при помощи фазорного подхода*

Д.А. Лопес Гуардадо¹, В.В. Николаев¹, А. Зеар¹, Ю.В. Кистенев¹

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Анализ спектров поглощения газовых проб проводится путем его представления в виде суперпозиции спектров поглощения отдельных компонент пробы. Определение концентрации молекулярных компонент сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Такой подход затруднен, когда состав пробы неизвестен, а также при наличии шума в экспериментальных спектрах. В настоящее время активно развиваются методы из области искусственного интеллекта и компьютерного зрения, основанные на представлении спектральных данных в виде 2D-образов. В работе анализируется подход к преобразованию спектров поглощения газовых проб в графический образ на плоскости с использованием фазорного подхода. В качестве тестовых объектов рассмотрены спектры отдельной линии поглощения, имеющей профиль Лоренца, дублета таких линий и комбинации двух молекулярных компонент с различным соотношением между их концентрациями. Результаты анализа показали, что вид графических образов зависит от ширины и центральной частоты линии поглощения. По результатам анализа смеси двух молекулярных компонент установлено, что положение графического образа суммарного спектра зависит от соотношения концентраций компонент.

Ключевые слова: спектры поглощения газов, определение концентрации газов, фазорный подход, преобразование Фурье.

Введение

Экспериментальные методы оптической спектроскопии, в частности абсорбционной спектроскопии [1–6], широко применяются для содержательного анализа газовых проб в рамках задач мониторинга окружающей среды, промышленной безопасности и медицинской диагностики [7, 8]. При оценке концентрации компонент газовой смеси используют различные аппроксимации формы линии поглощения [9], такие как профили Лоренца, Гаусса и Фойгта [10, 11]. Такой подход эффективен, если удастся найти спектральную область, в которой линии поглощения исследуемых компонент изолированы от других или, по крайней мере, состав газовой пробы известен [12]. Основная проблема содержательного анализа газовых смесей природного происхождения методами абсорбционной спектроскопии заключается в том, что их состав лишь частично известен (случай так называемых «серых» систем [13]). Для «серых» систем были разработаны методы декомпозиции смесей лишь с относительно небольшим количеством компонент, ориентировочно не более десяти. Применение методов искусственного интеллекта, к примеру искусственных нейросетей (ИНС), в рамках данной задачи ограничено тем, что большая часть архитектур ИНС ориентирована на анализ графических образов, в частности, двумерных (2D) изображений. В связи с этим актуальны методы представления профилей спектров поглощения в виде графических образов.

Одним из вариантов преобразования спектральных кривых в 2D-данные является фазорный подход. Данный подход применяется, в частности, для графического анализа кривых затухания флуоресценции [14, 15]. При возбуждении флуоресценции последовательностью коротких импульсов с частотой повторения ω кривая затухания флуоресценции $I(t)$ может быть представлена точкой на плоскости с координатами g и s , определяемыми фазорным преобразованием:

$$G = g(\omega) = \frac{\int_0^{\infty} I(t) \cos(\omega t) dt}{\int_0^{\infty} I(t) dt},$$

$$S = s(\omega) = \frac{\int_0^{\infty} I(t) \sin(\omega t) dt}{\int_0^{\infty} I(t) dt}.$$

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-557 от 25.04.2024 г.).