

差分吸收光谱系统监测污染物浓度实时预测模型

李素文^{1,2}, 刘文清², 谢品华², 王凤随¹, 杨一军¹

1. 淮北煤炭师范学院物理与电子信息学院, 安徽 淮北 235000
2. 中国科学院环境光学与技术重点实验室, 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031

摘要 差分吸收光谱(DOAS)法是一种有效的监测大气污染气体浓度的光学遥感方法, 不仅有好的时间分辨率, 而且测量灵敏度也很高。但是由于遥测系统处于复杂的大气环境中, 各种干扰因素以及恶劣的气候条件, 都会对系统产生影响。针对现有实时、在线监测差分吸收光谱系统中存在的不足, 作者提出了一种基于改进 Elman 网络的实时预测模型。利用逐步回归筛选预测因子, 不仅降低了预测网络的复杂程度, 而且增强了系统的预测实时性。利用带自适应学习率的动态 BP 算法对改进的 Elman 网络进行训练, 使预测系统能更好地辨识要预测的差分吸收光谱系统, 该模型能较准确地对 DOAS 系统监测污染物数据进行实时跟踪监控, 一定程度上弥补了遥测系统的不足。

关键词 差分吸收光谱系统; Elman 网络; 实时预测; 动态 BP 算法

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)11-3057-04

引言

差分吸收光谱法(DOAS)由 Platt^[1]等在 20 世纪 70 年代末提出, 用于遥测大气中污染气体浓度。该方法不仅有很高的时间分辨率, 而且测量精度较高^[2-4]。但是由于遥测系统处于复杂大气环境中, 各种干扰因素以及恶劣气候条件都会对系统产生影响, 导致奇异值, 甚至无法获取监测数据。本文针对 DOAS 系统的技术特点, 建立了基于改进 Elman 网络的实时预测模型, 对 DOAS 系统监测的污染物浓度进行实时跟踪控制, 以弥补遥测系统不足。

1 DOAS 简介

DOAS 系统是一个光机电一体化装置, 可以连续、自动监测、自动反演痕量气体的浓度。其结构框图如图 1 所示。主要包括光源, 发射和接收一体的望远镜系统, 角反射镜, 石英光纤, 光谱仪, PDA 探测器和 DSP 采集电路, 进行数据存储和实时、在线处理的计算机系统^[2]。

光源发出光 I_0 和反射光 I 之间的关系遵从 Lambert-Beer 定律

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp\left\{\sum_{i=1}^n [(-\sigma_i(\lambda) - \sigma'_i(\lambda)) N_i - \epsilon_R(\lambda) - \epsilon_M(\lambda)] L\right\} + B(\lambda) \quad (1)$$

式中: λ 表示波长, $\sigma_i(\lambda)$ 是所测第 i 种气体的分子窄带吸收截面, $\sigma'_i(\lambda)$ 则是宽带吸收截面, N_i 是第 i 种气体的浓度, L 表示光程(3 km), n 是所测气体的种类数, $\epsilon_R(\lambda)$ 和 $\epsilon_M(\lambda)$ 则分别是瑞利散射系数和米散射系数, $B(\lambda)$ 是各种噪声之和。由于 $\sigma'_i(\lambda)$, $\epsilon_R(\lambda)$ 和 $\epsilon_M(\lambda)$ 是随波长作慢变化的, 将测得光谱进行高通滤波, 以除去这种慢变化。(1)式则变为(2)式

$$\ln[I_0(\lambda)/I(\lambda)] = \sum_{i=1}^n \sigma_i(\lambda) N_i L + B'(\lambda) \quad (2)$$

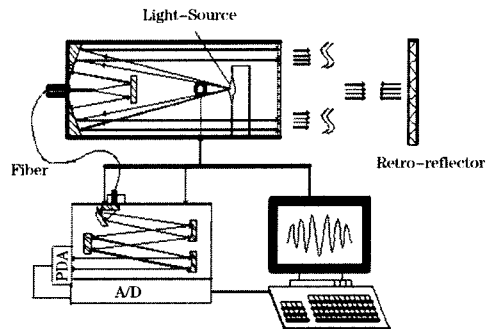


Fig. 1 Schematic view of DOAS system

收稿日期: 2008-10-26, 修订日期: 2009-01-28

基金项目: 国家自然科学基金项目(40805015), 教育部科学技术研究重点项目(209057), 安徽高校省级自然科学基金计划重点项目(KJ2008A114)和安徽省自然科学基金项目(090412028)资助

作者简介: 李素文, 女, 1968年生, 淮北煤炭师范学院物理与电子信息学院教授 e-mail: lswluyue12@yahoo.com.cn

然后把(2)式和待测量气体的标准吸收截面进行最小二乘拟合, 得出待测量气体的浓度^[4-6]。

由(1)和(2)式可知, 返回的光强 I 大小和干扰是 DOAS 系统两个至关重要的参数。光强大小不仅与光源 I_0 和痕量气体的吸收有关, 很大程度受气候条件的制约, 由于光程一般为几 km, 在大雨或者大雾天气时, 返回的光强会变得很弱, 以至于无法满足计算的需要, 不能正确分析出气体的浓度, 而且在复杂的大气环境下, 各种突发干扰时有发生。因此监测数据需要实时跟踪监控。

2 预测模型

神经网络技术的自组织、自适应、自学习功能, 使得神经网络在复杂非线性系统的分析和预测中得到了广泛应用^[7,8]。

本文根据差分吸收光谱系统的技术特点, 提出利用改进 Elman 网络对 DOAS 系统监测数据进行实时预测。改进 Elman 神经网络可以看作一个具有局部记忆单元和局部反馈连接的前馈 BP 神经网络, 其基本结构如图 2 所示^[9-13]。改进 Elman 通过结构单元上增加一个固定增益为 α 的自反馈连接, 能够有效地辨识动态系统。网络主要由输入层、隐层、上下文层(亦称状态层)、输出层组成。在状态层神经元中, 由于增加了一个固定增益的自反馈连接, 使结构单元在 k 时刻的输出等于隐层在 $k-1$ 时刻的输出加上下文单元在 $k-1$ 时刻输出值的 α 倍。

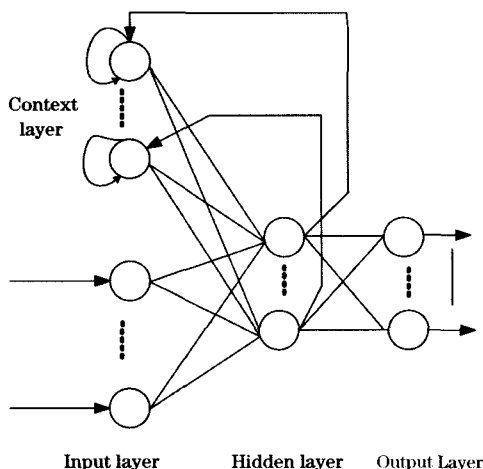


Fig. 2 Structure of the improved Elman network

假设 Elman 网络的输入为 $x_i^{(k)}$, 网络输出为 $y_{net}^{(k)}$, 网络隐层节点 j 的输入记作 $in_{-}h_j$, 隐层节点 j 的输出 $o_{-}h_j$, 状态层节点 p 的输入记作 $in_{-}c_p$, 状态层节点 p 的输出记作 $o_{-}c_p$, M, N, L 分别为输入层、输出层和隐层的节点数, 状态层节点数与隐层节点数相等。连接输入层节点 i 到隐层节点 j 的权值记作 W_{ij}^x , 连接隐层节点 j 到输出层节点 q 的权值记作 W_{jq}^y , 连接状态层节点 p 到隐层节点 j 的权值记作 W_{jp}^h , 网络隐层的节点激发函数为 $f(\cdot)$, 通常取 Sigmoid 函数 $f(x) = 1/(1 + e^{-x})$ 。从图 2 可得

$$\begin{aligned} o_{-}c_j^{(k)} &= \alpha o_{-}c_j^{(k-1)} + in_{-}c_j^{(k)} & j = 1, 2, \dots, L \\ in_{-}h_j^{(k)} &= \sum_{i=1}^M W_{ij}^x x_i^{(k)} + \sum_{i=1}^L W_{ij}^h x_i^{(k)} o_{-}c_i^{(k)} & j = 1, 2, \dots, L \\ o_{-}h_j^{(k)} &= f(in_{-}h_j^{(k)}) & j = 1, 2, \dots, L \\ y_{net}^{(k)} &= \sum_{i=1}^L W_{ij}^y o_{-}h_i^{(k)} & j = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (3)$$

其中在 k 时刻状态层的输入为 $in_{-}c_j^{(k)}$, 时刻 $k-1$ 所对应的隐层节点的输出为 $o_{-}h_j^{(k-1)}$ 。

采用带自适应学习率的动态 BP 算法对改进的 Elman 网络进行训练, 具体算法如下

$$\begin{aligned} \Delta W_{ij}^x &= \eta f'_i(\cdot) x_i^{(k)} \sum_{p=1}^N (y_d^{(k)} - y_{net}^{(k)}) W_{jp}^y \\ l &= 1, 2, \dots, M; i = 1, 2, \dots, L \\ \Delta W_{ij}^y &= \eta (y_d^{(k)} - y_{net}^{(k)}) o_{-}h_i^{(k)} \\ i &= 1, 2, \dots, L; j = 1, 2, \dots, N \\ \Delta W_{jp}^h &= \eta \sum_{p=1}^N (y_d^{(k)} - y_{net}^{(k)}) W_{jp}^y \frac{\partial o_{-}h_i^{(k)}}{\partial W_{jp}^h} \\ q &= 1, 2, \dots, L; i = 1, 2, \dots, L \\ \frac{\partial o_{-}h_i^{(k)}}{\partial W_{jp}^h} &= f'_i(\cdot) o_{-}h_i^{(k-1)} + \alpha \frac{\partial o_{-}h_i^{(k-1)}}{\partial W_{jp}^h} \end{aligned} \quad (4)$$

式中 y_d 为网络训练的目标值, k 为当前时刻, $k-1$ 为前一时刻, η 为学习速率, α 为冲量系数, $f'_i(\cdot)$ 为第 i 个节点的激发函数的导数。改进 Elman 神经网络算法中的(4)式构成了梯度 $\partial o_{-}h_i^{(k)} / \partial W_{jp}^h$ 的动态递推关系, 可以更好地辨识要预测的动态系统。

3 预测因子选取

通过长期的实践发现, 大气中微量气体浓度的变化是有规律的, 图 3 是痕量气体 O_3 在 2005 年 8 月 18 到 9 月 1 日这一时间段的浓度变化趋势图。从图中可见在监测时间内, 每天痕量气体的浓度的变化趋势有一定的相似性, 且浓度变化是连续的(因为 DOAS 系统几分钟就可给出一个数据, 而且对于一个地区来说, 污染源相对固定), 这就使得对其进行实时预报成为可能。

痕量气体浓度变化还受到气象 5 参数影响, 即温度、湿度、气压、风速、风向。在实际监测中, 发现微量气体的浓度每天都有一定的趋势, 同时对于一个地区来说, 每天的温度变化也是有一定规律的, 所以可以认为它们之间存在着一定的关系, 故温度可以作为一个影响因素; 而湿度的大小在一定程度上反映了当天的气候, 如雨天湿度大, 晴天湿度小, 而空气的痕量气体在湿度大的情况下, 可能会发生沉降, 或者吸附在气溶胶上, 所以痕量气体的浓度显然是和晴天、雨天有关系的, 故湿度也作为一个影响因素; 气压是海拔的函数, 而对应一个区域来说, 气压基本上是不变的, 所以微量气体的浓度可能与气压关系不大, 这个常量要不要考虑, 需要做出判断。在实践中发现, 当刮某个方向的风时, 下风处痕量气体浓度大于上风处, 风速大时, 痕量气体很快散去,

浓度变低,反之痕量气体的浓度变得较高,这说明风速和风向也是影响污染物浓度的因素。

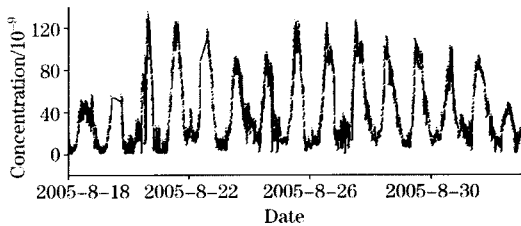


Fig. 3 Time series of O_3 concentration

为了较好地选取预测因子,我们利用逐步回归方法对上述因子进行了精选,最后选取 6 个影响较显著预测因子,即要预测时刻的前一时刻值,即前一天该时刻浓度值及温度、湿度、风速、风向。这些因子将作为 Elman 网络输入矢量,训练改进 Elman 网络,用训练后的网络对 DOAS 系统监测数据进行实时监测。

4 网络训练与测试

网络训练输入矢量分别为预测时刻前一时刻测量值,即前一天该时刻的浓度值、温度、湿度、风速和风向共 6 个因子。选取 2005 年 8 月 25 日到 8 月 28 日的 1 000 组测量数据,对网络进行训练。为了加快网络的收敛速度,将其进行归一化处理。网络隐层节点数取 21,一个浓度输出值。从而形成 6-21-1 的网络结构,网络学习速率为 0.15,冲量系数为 0.35。另外,网络训练结束的条件是网络的训练次数超过 10 000,误差小于 0.001。图 4 是 DOAS 系统用来训练的实测 O_3 浓度值和训练的估计值对照图。

网络的测试是利用该模型对 2005 年 8 月 29 日到 9 月 1 日这 4 天的 O_3 的浓度进行预测,结果如图 5 所示。图 5 是利用设计的改进 Elman 网络作为模型进行预测的结果和实测结果对照图,可以看出,网络预测的 O_3 浓度值和 DOAS 系统测量值前两天吻合非常好,相对误差不超过 2%,到了第三天、第四天有些偏差,但相对误差不超过 5%。这已足以

满足对 DOAS 系统监测数据进行实时预测的要求。

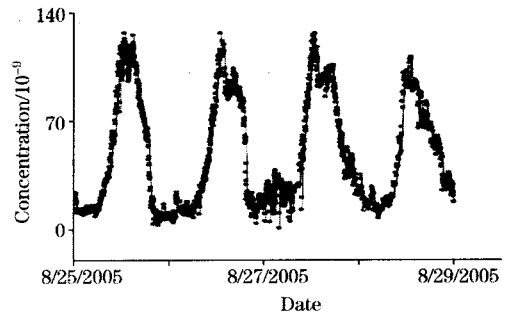


Fig. 4 Evaluating value and testing value

■: Testing; ●: Evaluating

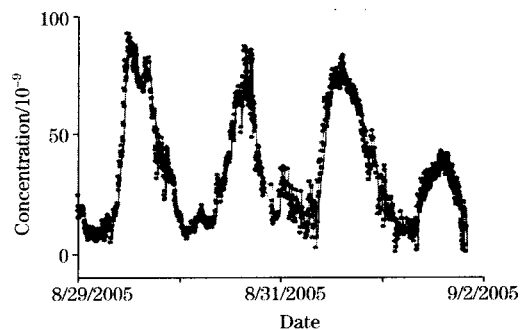


Fig. 4 Forecasting value and measuring value

■: Measuring value; ●: Forecasting value

5 结论

针对 DOAS 系统的技术特点,建立了基于改进 Elman 网络的污染物浓度实时预测模型,用带自适应学习率的动态 BP 算法进行网络的训练,并且利用逐步回归筛选预测因子,降低了网络的复杂度,提高了训练速度。对 DOAS 系统的监测数据的实验结果表明,该模型能很好地满足差分吸收系统的监测要求。

参 考 文 献

- [1] Stutz J, Platt U. *Applied Optics*, 1996, 35(30): 6041.
- [2] LI Su-wen, XIE Pin-hua, LIU Wen-qing, et al(李素文, 谢品华, 刘文清, 等). *Acta Phys. Sin.* (物理学报), 2008, 57(3): 646.
- [3] SI Fu-qi, LIU Jian-guo, XIE Pin-hua, et al(司福祺, 刘建国, 谢品华, 等). *Acta Phys. Sin.* (物理学报), 2006, 55: 3165.
- [4] Si F Q, Liu J Q, et al. *Chinese Physics*, 2005, 14: 2360.
- [5] ZHOU Bin, HAO Nan, CHEN Li-min(周斌, 郝楠, 陈立民). *Acta Phys. Sin.* (物理学报), 2005, 54: 4445.
- [6] Wang L X. *IEEE Int. Conference on Fuzzy Systems*, San Diego, 1992. 1163.
- [7] Takagi T, Sugeno M. *IEEE Trans on System Man and Cybernetics*, 1985, 15(1): 16.
- [8] Benjathapanun N, Boyle W J O, Grattan K T V. *IEE Proceedings-Science Measurement and Technology*, 1997, 144(2): 73.
- [9] Cathy Clerbaux, Juliette Hadji-Lazaro, Sébastien Payan, et al. *Applied Optics*, 2002, 41(33): 7068.
- [10] LI Su-wen, XIE Pin-hua, et al(李素文, 谢品华, 等). *Acta Phys. Sin.* (物理学报), 2008, 57(3): 646.
- [11] Cathy C, Juliette H L, Sébastien P, et al. *Applied Optics*, 2002, 41(33): 7068.
- [12] Chen S, Cowan C F, Grant P M. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1991, 2(2): 302.
- [13] Musaoim T. *Neural Networks*, 1992, 5: 595.

Real-Time Forecasting Model for Monitoring Pollutant with Differential Optical Absorption Spectroscopy

LI Su-wen^{1,2}, LIU Wen-qing², XIE Pin-hua², WANG Feng-sui¹, YANG Yi-jun¹

1. The College of Physics and Electronic Information, Huaibei Coal Industry Teachers College, Huaibei 235000, China
2. Key Laboratory of Environmental Optical & Technology, Anhui Institute of Optics & Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China

Abstract For real-time and on-line monitoring DOAS (differential optical absorption spectroscopy) system, a model based on an improved Elman network for monitoring pollutant concentrations was proposed. In order to reduce the systematical complexity, the forecasting factors have been obtained based on the step-wise regression method. The forecasting factors were current concentrations, temperature and relative humidity, and wind speed and wind direction. The dynamic back propagation (BP) algorithm was used for creating training set. The experiment results show that the predicted value follows the real well. So the modified Elman network can meet the demand of DOAS system's real time forecasting.

Keywords Differential optical absorption spectroscopy; Elman network; Real-time forecasting; Dynamic back propagation algorithm

(Received Oct. 26, 2008; accepted Jan. 28, 2009)