矿用红外甲烷传感器温度补偿算法模型研究

杨　震　梁永直

太原理工大学机械工程学院，山西 太原 030024

摘要　运用统计学理论，通过高斯回归过程建立了一种用于矿用红外甲烷传感器温度补偿的算法模型，研究了模型中各参数对数据拟合度和拟合误差的控制效果，在 Matlab 软件平台上验证了模型的合理性，并利用基于贝叶斯定理的训练算法对模型进行训练，构建了该温度补偿模型的数值仿真效果图。仿真结果表明，该模型误差小、精度高，能对不同温度下传感器的非线性波动进行良好的补偿。

关键词　物理光学；甲烷检测；高斯回归过程；温度补偿；算法模型

中图分类号　TP212　　**文献标识码**　A

doi：10.3788/LOP53.102602

Algorithmic Model of Temperature Compensation for Infrared Methane Sensors

Yang Zhen　Liang Yongzhi

College of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan, Shanxi 030024, *China*

Abstract　With the statistical theory used, an algorithmic model of temperature compensation based on the Gaussian process regression is established for infrared methane sensors. The model parameters are studied to fit the data and to minimize the fitting error. In the Matlab software platform, the model is trained with the Bayesian algorithm and the numerical simulation of temperature compensation is performed. The simulation results show that the model has small error and high accuracy, and it can compensate the nonlinear fluctuation of sensor signal at different temperatures.

Key words　physical optics; methane detection; Gaussian process regression; temperature compensation; algorithmic model

OCIS codes　260.3060; 230.4320; 040.3060; 200.4560

1　引　　言

目前，矿用甲烷传感器不仅要考虑其精度、分辨率和稳定性，还要考虑其抗干扰能力、成本、便携性和使用寿命等因素，而传统的热催化甲烷传感器易受矿井中的腐蚀气体影响发生中毒现象，寿命短、稳定性差，因此，国内外越来越多的甲烷浓度测定仪开始利用红外光谱技术。但是矿用红外甲烷传感器的浓度输出往往受到温度、压力、湿度、粉尘等的影响，对于便携式的传感器来说，矿井中显著的温度变化，对其所测浓度的影响最大，所以对传感器进行温度补偿尤为重要。

温度补偿的方法有很多，一般来说，可以分为两大类：一类是通过恒温补偿电路去除温度带来的影响[1]，但是存在可靠性低、精度低、功耗大等缺陷，所以该方法对工程实际应用的帮助很小；另一类是借助软件编程实现，将温度补偿算法编译为程序并写入单片机，随着单片机的内存和运算速度的不断提高，数值温度补偿逐渐成为研究的焦点[2]。本文利用高斯回归过程建立了一个适用于矿用红外甲烷传感器的温度补偿算法模型。

收稿日期：2016-06-13；**收到修改稿日期**：2016-06-17；**网络出版日期**：2016-09-21

基金项目：山西省社会发展科技攻关计划(20120313029-1)

作者简介：杨　震(1992—)，男，硕士研究生，主要从事光机电一体化方面的研究。E-mail：642428629@qq.com

导师简介：梁永直(1964—)，男，博士，讲师，硕士生导师，主要从事光机电一体化方面的研究。

E-mail：Liangyongzhi@tyut.edu.cn(通信联系人)

2 红外光谱检测技术及温度影响

矿用红外甲烷传感器是利用甲烷的特征红外吸收光谱来鉴别甲烷并分析其浓度的仪器，其理论依据是：不同气体的特征红外吸收光谱不同，在一定浓度范围内，每种气体的红外吸光度值与气体浓度存在关联[3]，当红外光通过待测气体时，气体分子会吸收特定频率的辐射，使透射光强度减小，其吸收关系可以用朗伯-比尔(Lambert-Beer)吸收定律来表示[4]：

$$I = I_0 \exp(-kCL), \tag{1}$$

式中 I_0 是红外辐射的初始能量；I 是红外辐射被气体吸收后的能量；L 是光线的光程；C 是被测气体的浓度；k 是气体光吸收系数，

$$k(v,x) = \frac{s}{\pi} \times \frac{\alpha_1}{(v - v_0)^2 + \alpha_1^2}, \tag{2}$$

$$s = s_0 \left[\frac{T_0}{T(x)}\right]^n \exp\left[-\frac{E''}{k} \times \frac{T_0 - T(x)}{T_0 T(x)}\right], \tag{3}$$

$$\alpha_1 = \alpha_{10} \frac{P_e(x)}{P_0} \left[\frac{T_0}{T(x)}\right]^n, \tag{4}$$

式中 v_0 是谱线中心频率；T_0 是标定温度；$T(x)$是传输路径上的温度；s_0 为某参考标准温度下的平均线强度；E''是分子振动-转动基态能量；α_1 为谱线的半峰全宽；α_{10}为标准状况下谱线的半峰全宽；$P_e(x)$为路径上位置 x 的有效压强，$P_e = P + (B-1)P_0$，P 是总压强，P_0 是吸收气体分压强，B 是自加宽系数[5]。

由(2)～(4)式可得，吸收截面对温度和压强都有依赖关系，但是在实际应用中，气压日变化幅度较小，一般为 0.1～0.4 kPa，并随纬度增高而减小。实践证明气压变化缓慢或者气压变化较小，对仪器的测量结果影响不大，可以忽略不计[6]。因此理论上讲，温度是影响气体吸收系数的主要因素，矿井中显著的温度变化大大增加了吸收系数的波动性，而且在传感器使用过程中，受环境温度的影响，光源性能、半导体电子元件和光电探测器等参数同样发生了漂移且呈复杂的非线性变化[7-8]。只利用朗伯-比尔吸收定律无法精确算出甲烷浓度，为了提高矿用红外甲烷传感器的检测精度，保障矿井的安全生产，有必要在已有的防尘、防湿基础上，建立有效的温度补偿算法模型。

3 基于高斯回归过程的温度补偿模型

用于矿用红外甲烷传感器的温度补偿算法模型有很多，如最小二乘法[9]、误差反向传播神经网络[10]和径向基函数神经网络[11]等。其中最小二乘法作为一种经典数值算法，在样本容量大的情况下难以获得较高的精度。神经网络算法则被许多学者认为是“暗箱操作”，由于缺少完整的数学定理框架，无法从根本原则上解释如何选择最佳的网络结构、激活函数和学习速率等，这也是令许多统计学者不甚满意的一个原因。

基于此，本文提出了一种基于高斯过程的回归模型进行温度补偿，以提高传感器的检测精度。在核学习机中，高斯过程是一种基于概率论的实用型机器学习算法[12]，对于模型的选择和数据的回归拟合、分类都能提供完善的数学原理框架。首先通过实验得到 n 个观测值，即模型中的训练样本，记作 $D = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i) \mid i = 1,2,\cdots,n\}$，其中 $\boldsymbol{x}_i$ 代表每一个实验观测值的二维输入向量，即矿用红外甲烷传感器上显示的温度和信号比；y_i 则代表实验中每一个标定的甲烷浓度值。随后用贝叶斯分析方法解决带有高斯噪声的回归模型即

$$y = f(\boldsymbol{x}) + \varepsilon, \tag{5}$$

式中 y 是假定被干扰后的浓度标量，$f(\boldsymbol{x})$是理想环境下的函数值，ε 是假定服从高斯分布的噪声干扰值，其数学期望为 0，方差为 σ_n，即 $\varepsilon \sim N(0, \sigma_n^2)$。

实验室中标定的甲烷浓度值 y 的先验分布为

$$y \sim N(0, \boldsymbol{K}(X,X) + \sigma_n^2 I), \tag{6}$$

该分布中 $\boldsymbol{K}(X,X)$代表每一个二维输入量 $\boldsymbol{x}_i$ 的协方差所构成的 $n \times n$ 阶矩阵。可得观测值和预测值组成的联合分布为

$$\begin{bmatrix} y \\ f_* \end{bmatrix} \sim N\left(0, \begin{bmatrix} \boldsymbol{K}(X,X)+\sigma_n^2 I & \boldsymbol{K}(X,X_*) \\ \boldsymbol{K}(X_*,X) & \boldsymbol{K}(X_*,X_*) \end{bmatrix}\right), \tag{7}$$

式中 $\boldsymbol{K}(X,X_*)$ 是每个训练样本输入向量与预测值输入向量的协方差构成的 $n\times 1$ 阶矩阵，同理 $\boldsymbol{K}(X_*,X)$ 是 $1\times n$ 阶矩阵，$\boldsymbol{K}(X_*,X_*)$ 是预测值输入向量自身的协方差。

而条件分布 $p(f_*|X,y,X_*)$ 满足高斯分布即

$$f_* \mid X,y,X_* \sim N(\bar{f}_*, \mathrm{cov}(f_*)), \tag{8}$$

$$\bar{f}_* \triangleq E[f_*|X,y,X_*] = \boldsymbol{K}(X_*,X)[\boldsymbol{K}(X,X)+\sigma_n^2\boldsymbol{I}]^{-1}y, \tag{9}$$

$$\mathrm{cov}(f_*) = \boldsymbol{K}(X_*,X_*) - \boldsymbol{K}(X_*,X)[\boldsymbol{K}(X,X)+\sigma_n^2\boldsymbol{I}]^{-1}\boldsymbol{K}(X,X_*)。 \tag{10}$$

因此，最佳预测值即是该分布的均值 $\bar{f}_*$，即传感器在利用该温度补偿算法模型后得出的甲烷浓度输出值，估计的不确定性可以用该分布的均方差 $\mathrm{cov}(f_*)$ 来表示。图 1 所示为高斯模型示意图，其中方形代表已知的输入向量，圆形代表未知的 f_i 预测值，水平黑线连接一系列有联系的节点。

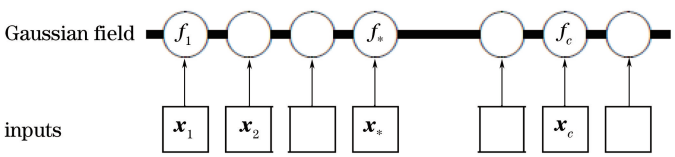

图 1　高斯回归模型

Fig. 1　Gaussian regression model

4　高斯回归训练算法

4.1　协方差函数的确定

最佳预测值与各个协方差组成的矩阵密切相关，因此协方差函数（核函数）的选择和高维参数的设定至关重要。协方差函数的种类繁多，包括 Matern 函数、周期协方差函数和线性协方差函数等[13]。在实际应用中根据输入向量的相似度选择特定的核函数，不同的核函数具有不同的特点，三阶 Matern 函数拟合的曲线比较平滑且能显示局部变化，周期函数则显示一个重复的周期过程，线性协方差函数表示拟合对象之间的线性关系[14]。

以具体的一维实验数据为例，在 20 ℃的测量环境下，利用矿用红外甲烷传感器实测数据为训练样本，如表 1 所示，选择上述三种函数为核函数，分别比较各自构建的算法模型，如图 2 所示。图中＋代表各个实验数据点，阴影部分是预测回归函数 $f(x)$ 时获得的 95%置信区间，置信区间越小，误差越小。

表 1　标定甲烷浓度下的传感器信号

Table 1　Sensor signals at calibrated methane concentrations

Calibrated concentration C/%	Reference voltage U/mV	Measured voltage U/mV	Voltage ratio
0.50	1.1278	1.2580	0.8965
1.00	1.1203	1.2367	0.9059
1.50	1.1275	1.2399	0.9138
2.00	1.1110	1.2066	0.9208
2.50	1.1140	1.2025	0.9264
3.00	1.1228	1.2083	0.9292
3.50	1.1142	1.1926	0.9343
4.00	1.1129	1.1830	0.9407

如图 2 所示，Matern 模型与周期模型比较理想，但是实际应用中，温度对红外甲烷传感器的影响机理十分复杂，传感器探测信号与标定甲烷浓度之间存在非线性关系，所以选择三阶 Matern 函数作为协方差函数，即

$$k(\boldsymbol{x}_p,\boldsymbol{x}_q) = \sigma_f^2\left(1+\sqrt{3r}\right)\exp(-\sqrt{3r}) + \sigma_n^2\delta_{pq}, \tag{11}$$

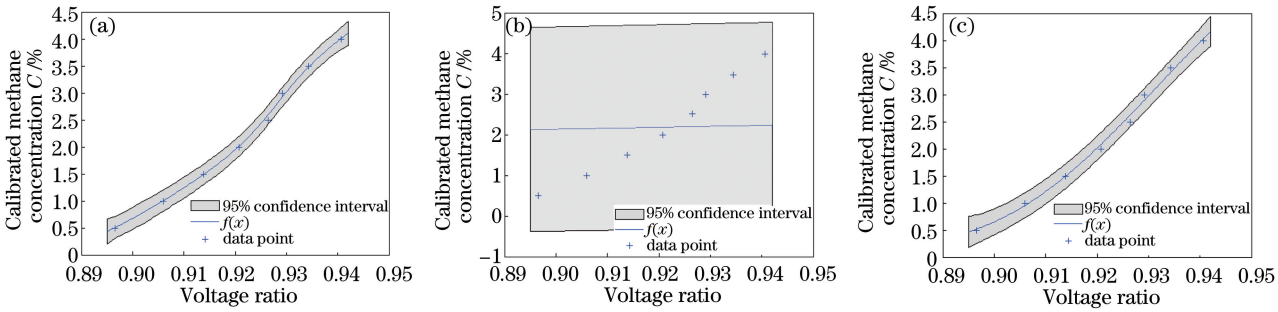

图 2　甲烷浓度预测模型。(a) Matern 模型；(b)线性模型；(c)周期模型

Fig. 2　Methane concentration forecasting models. (a) Matern model; (b) linear model; (c) periodic model

$$r=(\boldsymbol{x}_p-\boldsymbol{x}_q)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}_p-\boldsymbol{x}_q),\tag{12}$$

$$\boldsymbol{M}=l^{-1}\boldsymbol{I},\tag{13}$$

式中 $\boldsymbol{x}_p$ 和 $\boldsymbol{x}_q$ 代表不同的温度和信号比所组成的二维向量；上标 T 代表矩阵的转置；l 代表空间尺度；$\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵；δ_{pq}是克罗内克函数，$\delta_{pq}=\begin{cases}0 & \text{if} \quad p\neq q\\ 1 & \text{if} \quad p=q\end{cases}$。判断一个模式的好坏，以贝叶斯观点，就是基于边缘分布，使用训练样本后能否获得最大的概率，因为边缘分布的特质是能自动地权衡模式对样本点的匹配度和模式的复杂度。边缘分布的公式为

$$\ln p(\boldsymbol{y}\mid X,\theta)=\frac{1}{2}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_y^{-1}\boldsymbol{y}+\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{K}_y|+\frac{n}{2}\ln 2\pi,\tag{14}$$

式中 $\boldsymbol{K}_y=\boldsymbol{K}+\sigma_n^2\boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{K}$ 为没有噪声干扰的协方差矩阵，$\theta=\{l,\sigma_f,\sigma_n\}$。

4.2　参数的确定

即使选择同一个协方差函数，不同的参数也会给模型带来截然不同的结果，可以先对比不同的空间尺度 l 带来的影响，如图 3 所示[13]。图 3(a)中随着空间尺度 l 的增加(其他两个参数 σ_f 和 σ_n 保持不变)，数据拟合度呈单调递减，因为模型变得越来越平缓，缺乏灵活性，这也导致模型的复杂程度不断下降，而边缘分布则是在 l 接近 1 的位置达到最大值，值得注意的是，l 超过 1 后，数据拟合度和边缘分布急剧下降。图 3(b)显示了样本点的数量对边缘分布的影响，样本点越多，边缘分布的极大值越大，模型越可靠。

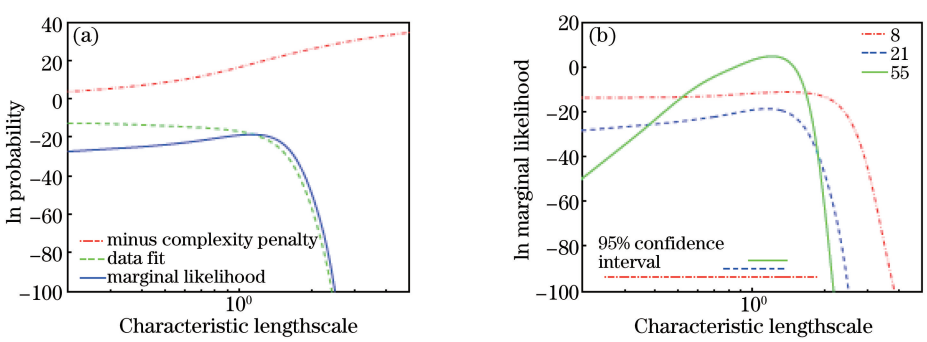

图 3　空间尺度 l 的影响[13]

Fig. 3　Effect of characteristic lengthscale l[13]

l 取在 1 附近比较合适，参数 σ_f 和 σ_n 可以对边缘分布[(14)式]取极大值获得，从而确定协方差函数[(11)式]，求出多个二维输入向量 $\boldsymbol{x}_i$ 之间的协方差矩阵。

5　高斯温度补偿模型的数值仿真及验证

5.1　数值仿真

作为一种矿用红外甲烷传感器的温度补偿算法模型，需要首先在计算机上模拟构造该模型，以便于下一步实际编程应用。Matlab 具有高效的数值计算能力和完备的图形处理能力，能使编程效果具有良好的可视

化效果，因此使用 Matlab 平台进行模拟仿真。具体操作步骤如下：

1）依据不同温度下实验获得的数据，构建整个模型的训练样本 $D=(\boldsymbol{X},y)$，其中 $\boldsymbol{X}$ 为传感器上温度和电压信号读数组成的二维向量，y 为实验过程中的甲烷浓度的标定值；

2）选择适应于学习样本的 Matern 协方差函数，利用共轭梯度法，对边缘分布函数取极大值点，获得最佳的参数；

3）根据训练样本的二维输入向量，在 x-y 平面上编译需要显示的点；

4）利用 for 循环语句构造协方差矩阵；

5）导入浓度值 y，构建温度补偿三维模型并显示，即可知晓是否满足预期目标。

模型效果如图 4 所示，其中 x 轴坐标是信号比；y 轴坐标是温度值；z 轴坐标是浓度。与图 2 对比，可以发现图 2(a)中的曲线即为图 4 中 20 ℃条件下对应的电压信号比-浓度曲线的一部分，若不对温度进行补偿，则图 4 为同一条曲线构成的平滑曲面。但是根据实际情况，在同一标定甲烷浓度下，不同温度条件会对传感器的信号比值产生非线性影响，而整个高斯回归温度补偿模型就是学习图中三者之间的非线性函数关系，从而依据此关系推断出不同矿井温度下的实际甲烷浓度值。因此，该温度补偿模型能够对温度造成的非线性误差进行良好的补偿。

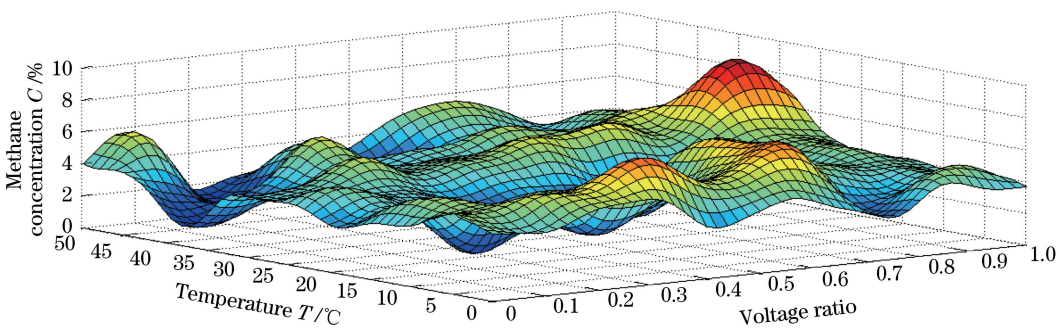

图 4　三维回归模型

Fig. 4　Three-dimensional regression model

5.2　实验验证

将优化后的核函数 $k(\boldsymbol{x}_p,\boldsymbol{x}_q)$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{K}(X,X)_{16\times16}+\sigma_n^2\boldsymbol{I}$ 的逆矩阵写入单片机，在实际应用中，当红外传感器的探测电压和温度发生变化时，单片机就会利用核函数，将这两个变量组成的向量 $\boldsymbol{x}_*$ 与其他训练样本 x 进行运算得到矩阵 $\boldsymbol{K}(X_*,X)_{1\times16}$，根据(9)式即可得到甲烷浓度的预测输出值。为了更直观地验证该模型的真实性和有效性，利用同款传感器在 25 ℃条件下测量了不同浓度的 8 组甲烷，如表 2 所示，其中未经温度补偿的测量值是写入高斯温度补偿模型之前所测。误差分析结果如表 3 所示，从表中可以看出，经过高斯模型补偿后的预测值误差明显小于未经过补偿的测量值，而且均方差更小，说明精确性提高。

表 2　标定甲烷浓度下的传感器信号

Table 2　Sensor signals at calibrated methane concentrations

Calibrated concentration C/%	Reference voltage U/mV	Measured voltage U/mV	Voltage ratio	Measured concentration /%	
				Before compensation	After compensation
0.5	8834	10025	0.8812	0.35	0.54
1.0	8844	9944	0.8894	0.85	0.92
1.5	8854	9757	0.9075	1.73	1.54
2.0	9008	9847	0.9148	2.27	2.09
2.5	8804	9573	0.9197	2.56	2.58
3.0	9014	9779	0.9218	2.88	2.78
3.5	9115	9747	0.9352	3.81	3.57
4.0	9160	9710	0.9434	4.60	3.96

表 3 预测误差分析

Table 3 Forecasting error analysis

Method	Mean absolute error	Mean squared error
Before compensation	0.2363	0.0806
After compensation	0.0841	0.0102

6 结 论

分析了基于红外光谱技术的矿用甲烷传感器的原理及温度引起的漂移误差，利用高斯回归过程，初步建立了温度校正理论模型，与目前流行的智能算法（神经网络、基因遗传算法和模糊理论等）所构建的温度补偿模型相比，高斯回归温度补偿模型从数学原理上解释了相关参数的选择优化，用一维实验数据为样本，通过选择不同的核函数构建回归预测模型。当选择 Matern 函数为核函数时，预测模型的数据拟合度达到最佳，95%置信区间也达到极小，并且通过实验验证了该模型在不同温度条件下的准确性和有效性。该温度补偿模型具有通用性，适用于其他红外传感器的补偿，具有重要的应用价值。

参 考 文 献

1 Li Bin, He Qixin, Fu Yang, *et al*. Development of near infrared distributed feedback laser temperature control system for CO detection[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(s2): s214002.
李 彬，何启欣，付 洋，等. 用于 CO 气体检测的近红外分布式反馈激光器温控系统[J]. 光学学报，2014，34(s2): s214002.

2 Xu D, Liu Y. A temperature compensation algorithm of piezoresistive pressure sensor and software implementation[C]. IEEE International Conference on Mechatronics and Automation, 2013: 1738-1742.

3 Pan Xiaoqing, Liu Qingcheng. Gas sensor and its development[J]. Journal of East China Institute of Technology, 2004, 27(1): 89-93.
潘小青，刘庆成. 气体传感器及其发展[J]. 东华理工学院学报，2004，27(1): 89-93.

4 Wang Shutao, Zeng Qiuju, Song Haobing, *et al*. Signal denoising method based on the SVM filter absorption methane detection[J]. Chinese J Lasers, 2014, 41(9): 0915001.
王书涛，曾秋菊，宋浩兵，等. 基于 SVM 滤波器的吸收式甲烷检测的信号去噪方法[J]. 中国激光，2014，14(9): 0915001.

5 王汝琳，王咏涛. 红外检测技术[M]. 北京：化学工业出版社，2006.

6 王一蒙. 甲烷传感器工作特性分析与故障模式研究[J]. 淮南职业技术学院学报，2015，15(2): 11-13.

7 Wang Yan, Zhang Rui. Photo detector characteristics effect on TDLAS gas detection[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(2): 0230002.
王 燕，张 锐. 光电探测器特性在 TDLAS 气体检测中的影响[J]. 光学学报，2016，36(2): 0230002.

8 Ye Weilin, Zheng Chuantao, Wang Yiding. Stability measurement and temperature compensation of mid-infrared methane detection device [J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(3): 0323003.
叶玮琳，郑传涛，王一丁. 中红外甲烷检测仪稳定性实验及温度补偿研究[J]. 光学学报，2014，34(3): 0323003.

9 Zhang Liping, Zhang Fan. The mathematical modeling of infrared methane detector with real-time rectification of temperature influence[J]. Safety in Coal Mines, 2005, 36(7): 1-3.
张立萍，张 帆. 红外甲烷传感器的实时温度校正模型的建立[J]. 煤矿安全，2005，36(7): 1-3.

10 Chen Yingchun, Zhao Jianhua. Study on temperature compensation of infrared combustible gas detector based on BP neural network[J]. Fire Safety Science, 2014, 23(1): 34-40.
陈迎春，赵建华. 基于 BP 神经网络的红外可燃气体探测器温度补偿研究[J]. 火灾科学，2014，23(1): 34-40.

11 Zhang Li, Wang Rulin, Wang Ying, *et al*. Research of detection model of mine-used infrared gas sensor based on neural network[J]. Industry and Mine Automation, 2009(8): 18-21.
张 丽，王汝琳，王 瑛，等. 基于 RBF 神经网络的矿用红外瓦斯传感器检测模型的研究[J]. 工矿自动化，2009(8): 18-21.

12 Wen X, Qian Y. Gaussian process applied in temperature compensation for FBG strain sensing [C]. International Conference on Remote Sensing, Environment and Transportation Engineering, 2011: 4075-4078.

13 Rasmussen C E, Williams C K I. Gaussian process for machine learning[M]. Cambridge: MIT Press, 2005.

14 Qu Yisong. Research on data processing based on Gaussian process[D]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2014: 29-32.
曲轶松. 基于高斯过程的数据处理的研究[D]. 北京：北京交通大学，2014: 29-32.