

激光与光电子学进展

基于多任务学习的有源内腔混合气体
反演算法研究(特邀)刘琨^{1,2,3*}, 尹慧^{1,2,3}, 江俊峰^{1,2,3}, 刘铁根^{1,2,3}, 赵成伟^{1,2,3}¹天津大学精密仪器与光电子工程学院, 天津 300072;²天津大学光电信息技术教育部重点实验室, 天津 300072;³天津大学光纤传感研究所, 天津 300072

摘要 针对目前深度学习在气体检测领域多聚焦于学习单个任务即气体定性分类或气体体积分数定量回归,忽略了相关任务间的信息关联性,降低了模型学习精度与效率等问题,提出了一种基于一维卷积神经网络和长短期记忆网络的多任务学习模型,即 MTL-1DCNN-LSTM,并行实现了混合气体种类定性识别与体积分数定量回归。利用掺铥光纤,搭建了二级放大掺铥环腔光纤激光器,基于有源内腔吸收光谱法探测了 CO₂和 NH₃混合气体的吸收光谱数据。将实验数据放入多任务学习模型中训练,并进行超参数优化后,对测试集数据进行测试得到气体识别准确率为 100%,NH₃体积分数预测决定系数为 99.84%,CO₂体积分数预测决定系数为 99.62%,优于单任务模型与传统的气体反演算法如反向传播神经网络和支持向量机。所提出的深度学习算法与有源内腔法相结合的方法,为吸收光谱型混合气体反演技术的进一步研究提供了新思路。

关键词 掺铥光纤激光器; 有源内腔法; 多任务学习; 一维卷积神经网络; 长短期记忆网络

中图分类号 TN29

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP231913

Active Intracavity Mixed Gas Inversion Algorithm Based on
Multi-Task Learning (Invited)Liu Kun^{1,2,3*}, Yin Hui^{1,2,3}, Jiang Junfeng^{1,2,3}, Liu Tiegeng^{1,2,3}, Zhao Chengwei^{1,2,3}¹School of Precision Instruments and Opto-Electronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China;²Key Laboratory of Opto-Electronics Information Technology, Ministry of Education, Tianjin University, Tianjin 300072, China;³Institute of Optical Fiber Sensing of Tianjin University, Tianjin 300072, China

Abstract Deep learning methods used in the field of gas detection mostly focus on learning a single task, such as the qualitative classification of gas or the quantitative regression of gas concentration. However, training a model in this way ignores the correlation of information between related tasks, reducing the accuracy and efficiency of training. This paper proposes a multi-task learning (MTL) model that combines a one-dimensional convolutional neural network (1DCNN) and a long short-term memory (LSTM) network to realize qualitative identification of mixed gas species in parallel with a quantitative regression prediction of gas concentrations. Using a thulium-doped fiber, a two-stage amplified thulium-doped ring-cavity fiber laser was constructed, and the absorption spectral data of mixed gases, comprising CO₂ and NH₃, were detected based on the active intracavity absorption spectroscopy method. The experimental data were put into the MTL model to train until the model performance was optimized. The trained model achieves a gas classification accuracy rate of 100%, while the coefficient of determination of NH₃ and CO₂ are 99.86% and 99.62%, respectively. These values are superior to the equivalent values obtained using conventional single-task models and gas inversion algorithms such as the backpropagation neural network and support vector machine. By combining the deep learning algorithm with the active intracavity spectroscopy method, a superior absorption spectroscopy-based gas inversion technology is developed.

Key words thulium-doped fiber laser; active intra-cavity; multi-task learning; one-dimensional convolutional neural network; long short-term memory network

收稿日期: 2023-08-14; 修回日期: 2023-08-28; 录用日期: 2023-09-06; 网络首发日期: 2023-09-20

基金项目: 国家自然科学基金(61922061,61735011,61775161)、国家重大科学仪器设备开发专项(2013YQ030915)、天津市自然科学基金杰出青年科学基金(19JCJQJC61400)

通信作者: beiyangkl@tju.edu.cn

1 引言

随着社会发展,人们对生产安全与身体健康要求在不断加强,石油化工、煤炭电力等行业生产过程中会产生各种有毒有害、易燃易爆的气体,因此实时准确监测污染气体十分必要^[1]。目前气体测量的方法大致可分为非光学法与光学法。非光学法大多为传统的气体检测技术,如定电位电解法、比色还原法和气相色谱法等,具有直接接触、价格低、测量原理简单等优点。但这些方法采样过程复杂,不具有实时性和智能性^[2-3]。基于近红外吸收光谱的光学气体检测方法具有高灵敏度和高精度的优势。特别是与光纤传感技术相结合,能实现极端环境下的气体测量并且具有抗电磁干扰、抗腐蚀、本质安全等优点,因此红外吸收光谱方法被认为是气体检测技术中最有前景的方法之一^[4-5]。内腔吸收光谱法是一种将气室置于激光器谐振腔内部增加气体有效吸收光程从而显著提高气体传感灵敏度的气体传感技术,具有很大应用潜力^[6]。

针对气体传感器存在交叉灵敏度与低选择性的问题,各种智能气体反演算法如逻辑回归、K最近邻(KNN)、支持向量机(SVM)和神经网络等在气体检测领域的应用越来越广泛^[7]。史屹君等^[8]结合主成分分析(PCA)和反向传播神经网络(BPNN)算法搭建气体反演网络模型并运用于其设计的电子鼻系统中,实现白醋、醋和苹果醋混合气体 100% 的高准确率识别。闪霁芳等^[9]基于 SVM 分别建立 NH₃ 和 CO₂ 气体体积分数反演模型,利用 PCA 法进行特征提取和数据降维并采用自适应变异粒子群算法优化反演模型参数,实现两种气体体积分数回归决定系数均为 0.9998 的高精度预测。然而这些气体识别与体积分数预测方法的共同缺点是需要复杂的数据预处理过程,并且其性能在很大程度上依赖于人工提取特征的质量。深度学习算法直接从原始数据中提取特征,大大节省了整体处理时间,是近些年气体反演方法新的研究方向^[10-11]。李聪聪等^[12]建立了萤火虫算法优化的宽度学习网络模型,对利用可调谐半导体激光吸收光谱技术测量的 CO₂ 气体二次谐波信号峰值差值进行补偿,实现植物净光合速率实时有效测定。Song 等^[11]研究了基于深度学习的红外光谱气体反演技术,实现了单质气体识别准确率为 100% 和混合气体识别准确率为 98% 的气体快速精准定性分析。传统气体反演方法通常将气体识别与体积分数预测分开,这样串行处理分别优化模型的确能够使气体识别或体积分数预测各自达到最好效果。但是,目前研究已经证实多任务学习能够利用多个任务之间的相关性提高模型的泛化能力,相比多个单任务学习,其能提升小样本训练效果和提高模型效率^[13]。

本文通过搭建二级放大掺铥环腔激光器气体传感系统,测量 NH₃、CO₂ 纯气体与混合气体的吸收谱线。

对吸收光谱数据进行预处理后制作成数据集输入到基于一维卷积神经网络和长短期记忆网络的多任务学习模型(MLT-1DCNN-LSTM)中进行训练,其中,卷积神经网络(CNN)层进行特征自动提取,LSTM层捕获数据点的时间依赖性。最后,并行输出气体识别结果和气体体积分数预测结果,在对模型进行超参数优化后,测试数据得到气体识别准确率为 100%,NH₃ 预测决定系数为 99.84%,CO₂ 预测决定系数为 99.62%,与单任务分类和单任务回归以及传统的 BPNN、SVM 等浅层网络反演算法相比,多任务学习在气体检测领域中表现更好。

2 气体传感实验

2.1 有源内腔吸收光谱气体传感技术

有源内腔吸收光谱法是将气室置于激光器内部,光子反复在谐振腔振荡与气体发生多次相互作用,增加了有效吸收光程。根据朗伯-比尔定律可知,当一束激光通过待测气体介质后,得到的透射光强^[14]表达式为

$$I(\nu) = I_0(\nu) \exp[-\alpha(\nu)CL], \quad (1)$$

式中: ν 为激光的频率; $I_0(\nu)$ 为入射光强; α 为气体吸收截面; C 为气体体积分数; L 为有效吸收光程。对式(1)进行变形得到吸光度 K 表达式为

$$K(\nu) = \ln \frac{I_0(\nu)}{I(\nu)} = \alpha(\nu)CL. \quad (2)$$

实际上,内腔吸收光谱法是通过增加 L 值来提高吸收强度的。基于掺铥光纤的内腔气体传感系统结构如图 1 所示。由于气体的吸收作用,激光器输出激光功率会随气体体积分数变化而出现不同程度的减弱,在此环腔系统中,激光会在谐振腔内反复振荡,多次通过待测气体,因此能够增加有效吸收光程、提高气体传感灵敏度。

理论上,掺铥光纤具有激光波长 1.7~2.1 μm 的增益范围,但是其增益在波长 2 μm 后较小,单次放大

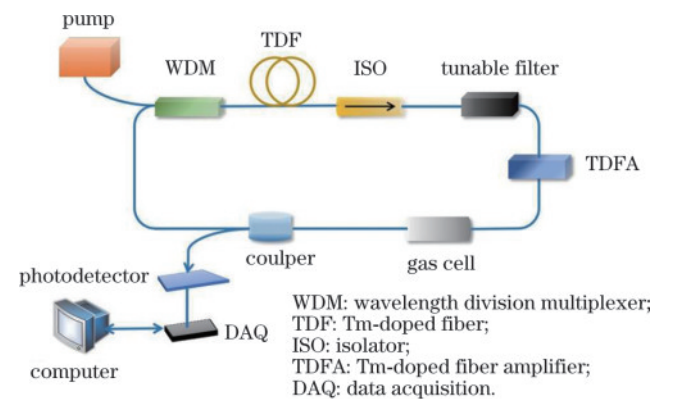


图 1 基于二级放大掺铥光纤环腔激光器气体传感系统原理图
Fig. 1 Schematic diagram of gas sensing system based on two-stage amplified thulium-doped fiber ring cavity laser

不足以产生 $2\ \mu\text{m}$ 后的激光输出。然而 CO_2 气体在 $2\ \mu\text{m}$ 波段附近具有较高的吸收线强,为了提高吸光度提升 CO_2 气体测量精度,需要选择具有较高吸收截面的吸收谱线,因此本文搭建二级放大系统,拓展激光波长调谐范围。在实际测量过程中,可能存在着混合气体吸收谱线发生混叠和谱线展宽问题,这会影响到波长定位与体积分数反演,因此本文使用深度学习算法来实现气体识别与体积分数预测,一定程度上降低了固有因素产生的误差,避免了繁杂的数据处理过程。

2.2 二级放大掺铥环腔激光器气体传感系统

图 2 为本文搭建的基于二级放大掺铥环腔光纤激光器的气体传感系统实物图。该系统由 $1570\ \text{nm}$ 泵浦光源 (pump)、 $1570/2000\ \text{nm}$ 波分复用器 (WDM)、 $5\ \text{m}$ 掺铥光纤 (TDF)、隔离器 (isolator)、可调谐光纤滤波器 (TF)、掺铥光纤放大器 (TDFA)、气室 (gas cell)、 $10/90$ 耦合器 (coupler)、光电探测器 (PD)、数据采集卡 (DAQ) 和上位机软件等组成。在实验中, $1570\ \text{nm}$ 的单模泵浦激光通过 WDM 耦合进环腔中,掺铥光纤在泵浦光的激励下产生放大自发辐射光 (ASE),隔离器使光在光纤环路中单向运行,同时避免空间烧孔效应,ASE 光经滤波器选频压窄线宽后通过 TDFA 模块进一步信号放大,依次通过气室和耦合器后信号光作为输入光再次进入环腔。其中,气室为两端装有准直镜、长度为 $20\ \text{cm}$ 的空心钢管,信号光 90% 的光继续在环腔中放大, 10% 光经耦合器输出。持续以上过程,光在环腔内不断被激励放大,最后当系统稳定后输出激光。由于光会反复通过待测气体,因此大大增加了有效吸收光程,进而提高了气体传感灵敏度。最后,光电探测器将部分通过耦合器输出的激光转化为电信号,提供给数据采集卡、计算机等终端设备进行处理,由此获得经气体作用后的激光吸收光谱数据,从而反演出气体信息。

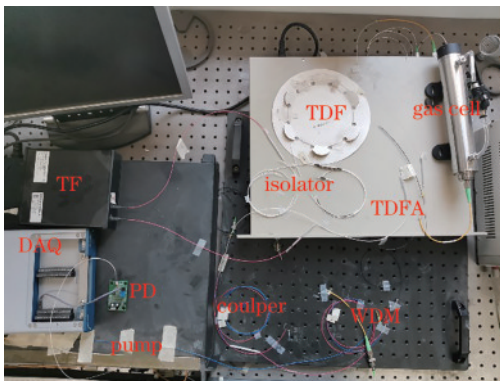


图 2 基于二级放大掺铥光纤环腔激光器气体传感系统实物图
Fig. 2 Physical diagram of gas sensing system based on two-stage amplified thulium-doped fiber ring cavity laser

当耦合器直接连接光谱仪时,保持激光器泵浦功率为 $1.2\ \text{W}$,改变光纤滤波器滤波波长,得到 $1928.5\sim 2022\ \text{nm}$ 波长范围的激光输出,如图 3 所示。与不加掺

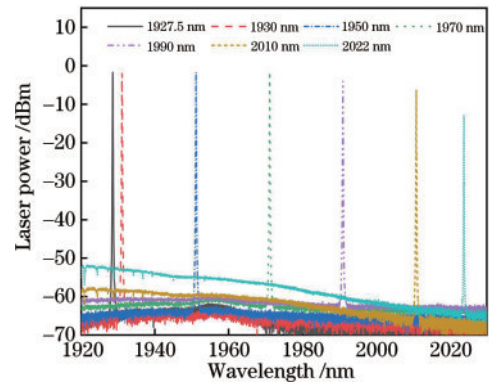


图 3 基于二级放大掺铥光纤环腔激光器输出光谱图
Fig. 3 Output spectra of two-stage amplified thulium-doped fiber ring cavity laser

铥放大器、只进行一级放大的系统(激光波长输出范围只有 $1928.5\sim 1980\ \text{nm}$)相比,二级放大系统波长调谐范围增加了 $42\ \text{nm}$ 。这极大拓展了可检测气体吸收光谱范围,增加了可检测气体种类。其中,短波长只能输出 $1928.5\ \text{nm}$ 的激光,这是受到滤波器本身的波长扫描范围限制,如果使用可扫描范围更大的滤波器,则激光器输出波长在短波长范围能进一步扩宽。激光器在 $1928.5\sim 2000\ \text{nm}$ 范围内输出激光具有较好的平坦性,有利于降低滤波器波长扫描时输出激光不平坦导致的气体检测误差。通过查询 HITRAN 数据库发现, NH_3 和 CO_2 在 $1957.5\sim 1959.2\ \text{nm}$ 附近有着丰富的吸收谱线,但是,此波段相同体积分数下 NH_3 的最高吸光度约为 CO_2 的 20 倍,差异巨大的吸收能力使得在进行混合气体实验时 CO_2 的吸收谱线一定程度上会被 NH_3 的吸收谱线所掩盖,导致气体检测产生较大误差。为此,本文选择 CO_2 吸收比较明显的 $2000\ \text{nm}$ 波段同样采集一段吸收谱线,提高混合气体测量精度,这也是本文将激光器传感系统输出激光调谐范围拓展到 $2\ \mu\text{m}$ 的原因之一。

将光谱仪替换为光电探测器并连接 NI 采集卡及上位机,在上位机上利用 LabVIEW 软件编写数据采集和低通滤波程序即可进行数据采集,得到初步处理后的吸收光谱数据。以体积分数为 1% 的 NH_3 和 2.5% 的 CO_2 混合气体为例,控制滤波器分别在该两个范围 range1 ($1957.5\sim 1959.2\ \text{nm}$) 和 range2 ($2002.2\sim 2004.2\ \text{nm}$) 内扫描,同时采集两个波长范围的吸收光谱数据,如图 4 所示。由于波长扫描时存在输出激光波动的问题,获得数据后要要进行基线移除操作,首先对吸收谱线求二阶导,二阶导最大值处确定为吸收峰中心位置,计算吸收峰两端相邻数据点差值,差值基本不变区域即为非吸收区,对应的数据点为光谱基线,再利用线性插值法拟合吸收区基线,最后得到基线移除后的吸收光谱如图 4(a)、(b) 所示。理想情况下,气体的吸收谱线为一条几何线,但是实际情况下由于自然展宽、碰撞展宽、多普勒展宽等因素的影响,气体吸收谱

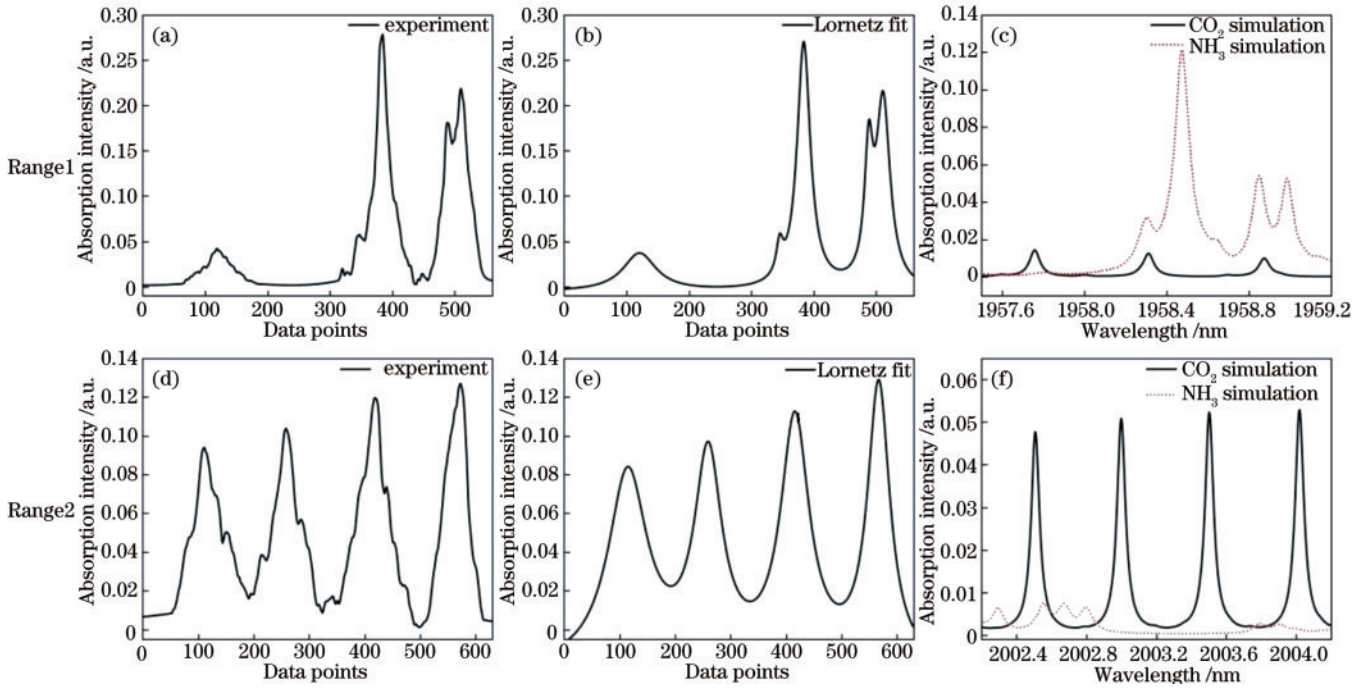


图 4 混合气体吸收光谱图。(a)range1 波长范围基线移除后吸收光谱图;(b)range1 波长范围洛伦兹拟合后吸收光谱图;(c)range1 波长范围利用 HITRAN 数据仿真后吸收光谱图;(d)range2 波长范围基线移除后吸收光谱图;(e)range2 波长范围洛伦兹拟合后吸收光谱图;(f)range2 波长范围利用 HITRAN 数据仿真后

Fig. 4 Absorption spectra of mixed gas. (a) Absorption spectrum after baseline removal in wavelength range1; (b) absorption spectrum after Lorentz fit in wavelength range1; (c) absorption spectrum after simulation using HITRAN data in wavelength range1; (d) absorption spectrum after baseline removal in wavelength range2; (e) absorption spectrum after Lorentz fit in wavelength range2; (f) absorption spectrum after simulation using HITRAN data in wavelength range2

线有一定的展宽,在常温常压下,碰撞展宽占主要因素,而碰撞展宽对应的是洛伦兹线型,图 4(b)、(e)为洛伦兹拟合后的实验吸收光谱数据。图 4(c)、(f)为利用 HITRAN 数据库中的参数,设置温度为 296 K,压强为 1 atm (1 atm=101325 Pa),吸收光程为 20 cm, NH₃ 体积分数为 1%, CO₂ 体积分数为 2.5%, 仿真模拟得到的 NH₃ 和 CO₂ 的气体吸收光谱图像。可以观察到,实验获得的气体吸收谱线分布和利用 HITRAN 数据库的数据仿真模拟的吸收谱线分布基本一致,这证明了利用该系统进行气体检测的可行性。但是可以发现,在 range1 波段内的 CO₂ 和 range2 波段内的 NH₃ 由于吸收强度比较弱,吸收谱线不明显,重叠部分被高吸收强度的其他气体吸收谱线所掩盖,因此,为了提高气体测量的准确率与精度,综合分析两个波段的吸收光谱数据。

为了构建吸收光谱数据集,利用上述搭建的气体传感系统采集纯氮气 (N₂)、纯 CO₂、纯 NH₃ 和混合 NH₃+CO₂ 四种情况下不同体积分数气体组成的吸收光谱数据。由于深度学习训练需要大量的数据来构建可靠的网络参数,因此通常需要用数据扩增的办法,本文中给原数据分别加上 20 dB 和 30 dB 的高斯白噪声使实验数据倍增,最后得到的数据集分布为 180 个纯 N₂ 光谱数据,体积分数分别从 0.2% 到 1.8%、以梯

度 0.2% 递增的每组 60 个样本共计 540 个纯 NH₃ 光谱数据,以及体积分数分别从 0.5% 到 4.5%、以梯度 0.5% 递增的每组 60 个样本共计 540 个纯 CO₂ 光谱数据,混合气体数据分布如表 1 所示。

表 1 混合气体数据分布
Table 1 Data distribution of mixed gas

Gas	NH ₃ volume fraction / %	CO ₂ volume fraction / %	Number
NH ₃ +CO ₂	0.2	4.5	60
	0.4	4.0	60
	0.6	3.5	60
	0.8	3.0	60
	1.0	2.5	60
	1.2	2.0	60
	1.4	1.5	60
	1.6	1.0	60
	1.8	0.5	60

3 多任务学习模型构建

3.1 卷积神经网络

作为一种深度学习算法,在 1989 年,卷积神经网络便由 LeCun 等^[15]得到初步实现及应用。卷积神经网络作为深度前馈神经网络的一种,主要由卷积层、池

化层和全连接层等组成。卷积神经网络利用卷积操作来代替一般的矩阵运算,利用卷积层进行特征提取,避免了繁琐的人工提取特征过程^[16-17]。与其他深度神经网络相比,卷积神经网络具有局部连接、权值共享和子采样三个特征,这使其具有一定的平移、旋转和缩放不变性,并且减少了网络参数、降低了网络复杂度。因此,卷积神经网络在图像识别与自然语言处理和一维信号序列处理等方面具有独特优势。

卷积神经网络已经在二维图像领域得到广泛应用,同时也可衍生到一维信号序列。一维卷积神经网络避免了一维数据二维化后丢失一些不可逆转的数据,能最大程度保持原始信号的特征信息,并且一维数据维度小,模型相对简单,计算速度更快。与二维卷积神经网络运算不同的是,一维卷积神经网络需要进行一维卷积和一维池化处理,如图 5 所示。

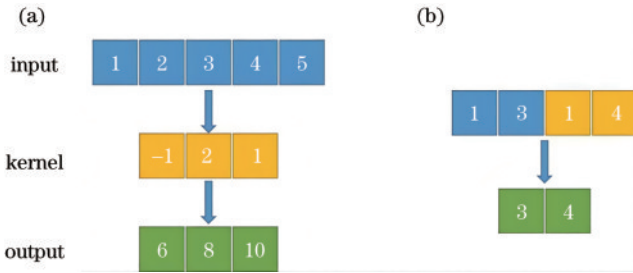


图 5 一维卷积和一维最大池化运算。(a)卷积;(b)最大池化
Fig. 5 One-dimensional convolution and one-dimensional pooling operations. (a) Convolution; (b) maximum pooling

卷积后需要加入激活函数使模型能够学习非线性函数,以应用于更复杂的气体分类与回归情形。激活函数通常选用线性整流函数(ReLU),与其他激活函数相比,它能使模型训练速度更快,且一定程度上避免梯度爆炸和过拟合问题。池化层对卷积层的输出进行降维操作,能有效减小参数矩阵尺寸,减少参数数量,提取深度特征,具有提高运算速度与防止过拟合作用^[18]。本文使用的是最大池化,如图 5(b)所示。

3.2 长短期记忆神经网络

LSTM 在传统的循环神经网络(RNN)上加上门控机制和记忆单元,解决了 RNN 在面对长期时间依赖的数据时存在的梯度爆炸和梯度消失问题,在语音识别、天气预测、股票市场预测、机器翻译等时间序列任务中表现良好。LSTM 实际上是通过引入“门(gate)”来有选择性地加入新信息和遗忘以前的信息,具有防止单元状态改变的特性,因此,保留了长期依赖性关系。一个 LSTM 单元有三个这样的门,分别为遗忘门(forget gate)、输入门(input gate)和输出门(output gate)^[19],LSTM 单元基本架构如图 6 所示。

图中, C_{t-1} 为上一个时刻 LSTM 单元记忆状态, h_{t-1} 为上一时刻的隐藏状态, x_t 为当前时刻的输入, W_f, W_i, W_c, W_o 为权重项, b_f, b_i, b_c, b_o 为偏置项, σ 表

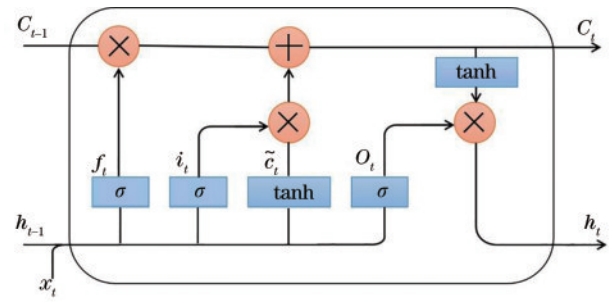


图 6 LSTM 单元结构图
Fig. 6 LSTM cell structure diagram

示 sigmoid 函数, f_t 代表遗忘门操作,选择性遗忘某些信息。 i_t 为输入门的控制信号, \tilde{C}_t 为信息候选状态,输入门操作中,通过 sigmoid 函数决定哪些新信息需要保留,然后利用 tanh 函数产生新的候选值。 o_t 为输出门的控制信号,输出门操作得到该 LSTM 单元的输出状态 C_t 和隐藏状态 h_t ,同时也作为下一时刻的单元状态和隐藏状态被更新,然后重复着以上过程。具体的门操作可描述为

$$f_t = \sigma(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f), \quad (3)$$

$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i), \quad (4)$$

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c), \quad (5)$$

$$C_t = f_t \cdot C_{t-1} + i_t \cdot \tilde{C}_t, \quad (6)$$

$$o_t = \sigma(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o), \quad (7)$$

$$h_t = o_t \cdot \tanh(C_t). \quad (8)$$

3.3 多任务学习

多任务学习是一种基于参数共享、同时学习多个任务的机器学习方法,一般来说,包含多个目标损失(loss)函数的模型就算多任务学习模型。目前,大多数机器学习仍然是单任务学习,通过调整模型参数,loss 值降低趋近于 0,从而达到最优目标指标,对于复杂任务的处理方法,通常是将其分为多个单任务分别训练,再将结果进行统一综合考虑,但是这样忽略了任务之间的相关性。例如,本文进行的气体传感研究,传统方法是将其分为气体识别与体积分数预测分开进行,但是这样容易造成识别错误,导致气体体积分数预测误差增加,因此同时进行两种任务的学习更为合理。在多任务学习的发展历程中,Caruana^[20-21]的工作起着继往开来的作用,1994 年 Caruana 证实了一种网络模型能够同时实现多个相关任务的学习,并且能提高模型的泛化能力,后续其也指出多任务学习在共享底层特征信息、扩大训练数据规模、增强模型鲁棒性等方面也发挥着有效作用。目前,多任务学习在目标跟踪、无人驾驶、文本分析等领域得到广泛应用。

由于气体传感器采集的数据为一维时间序列,为避免二维化后原始数据丢失重要信息和提高运算速度,本文使用一维卷积神经网络提取空间特征,并且考虑到传感器响应序列的时间相关性,引入在长期时间

依赖性上学习能力强大的长短期记忆网络,最终搭建了多任务学习模型即 MTL-1DCNN-LSTM 模型,模型的基本架构如图 7 所示。将混合传感器直接采集到的光谱数据经过去噪、基线移除、洛伦兹拟合等预处理后作为网络的输入,在这里分类任务和回归任务的输入是相同的,一共包括 1800 个样本,每个样本维度为 (1190, Y),本文中 1190 维度由 range1 波长范围 560 个光谱数据与 range2 波长范围 630 个光谱数据拼接而成。Y=(y_{cla}, y_{NH₃}, y_{CO₂}),其中, y_{cla} 为气体分类的标签,将纯 N₂、纯 NH₃、纯 CO₂、NH₃+CO₂ 混合气体四种气体事件分别打标签为 0、1、2、3, y_{NH₃} 和 y_{CO₂} 分别为 NH₃ 和 CO₂ 的体积分数值。该算法的卷积神经网络特征提取部分由 VGG16 模型简化而来,卷积层的卷积核尺寸均为 1×3,首先进行浅层共享特征提取,共享参数层中卷积核的数目按顺序分别为 16、16、64、64, 然后进行分支任务的特有特征深度提取,其中,分类任务中卷积核的数目分别为 64、64,回归任务中分别为 128、128、64、64,激活函数都设置为 ReLU 函数。深层卷积后得到的特征输入 LSTM 层进一步提取序列的时序

特征,LSTM 层输出维度参数设置为 32。分类任务中由于需要对 4 种气体事件进行分类,所以全连接 (dense) 层的输出维度参数 units 设置为 4,并且激活函数需要选择 Softmax 函数,回归任务中仅输出气体体积分数值,因此 dense 的 units 参数设置为 1,激活函数选择 linear 函数。

3.4 损失函数

损失函数是度量模型真实值与预测值之间差异性的函数,训练过程中损失函数不断减小并趋近于 0,说明预测值不断接近真实值,该模型才具有可行性。损失函数不同,模型性能也会有所差异,因此执行不同的任务往往需要使用不一样的损失函数。对于本文中的多任务学习模型,分类任务和回归任务学习机制不同,需要用不同的损失函数。分类任务使用交叉熵损失作为损失函数,误差大的时候,权重更新快,误差小的时候,权重更新慢的良好性质,其表达式为

$$L_{cla} = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{c=1}^M y_{ic} \lg(p_{ic}), \quad (9)$$

式中:n 是样本的数目;M 是气体类别的数目;p_{ic} 是第 i 个样本属于类别 c 的概率,p_{ic} 取值范围为 (0, 1);y_{ic} 为符号函数,当样本 i 的真实类别为 c 时取 1,反之取 0。模型总的损失值为单次计算的交叉熵损失全部加起来再取平均值。

回归任务使用均方误差(MSE)作为损失函数,其是回归问题中最常见的损失函数,计算简单,收敛效果好,表达式为

$$L_{reg} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (10)$$

式中:y_i 为体积分数值真实值;ŷ_i 为体积分数值预测值。本文涉及到两种气体体积分数的回归预测,产生两个回归损失函数,由于两种气体的体积分数值在一个数量级,吸收强度相当,所以将它们损失函数直接相加作为回归任务的损失函数。

整个多任务学习模型的损失函数为两个任务损失函数的线性加和,即 L = ω₁L_{cla} + ω₂L_{reg},ω₁、ω₂ 分别为分类任务和回归任务损失函数的权重,调整权重以平衡网络对两个任务的关注。

3.5 评价指标

不同任务使用的评价指标也不同,本文采用准确率 A_{cc} 作为分类任务的评价指标,采用 R² 和均方根误差 R_{MSE} 作为回归预测任务的评价指标。

准确率表示预测正确的样本在总样本中所占的比例。R² 也称为决定系数,是衡量实际值与拟合回归线之间接近程度的评价指标,其值越接近于 1 说明拟合程度越好。均方根误差是量化回归模型误差的评价方法,数值越低说明算法性能越好。其具体的定义为

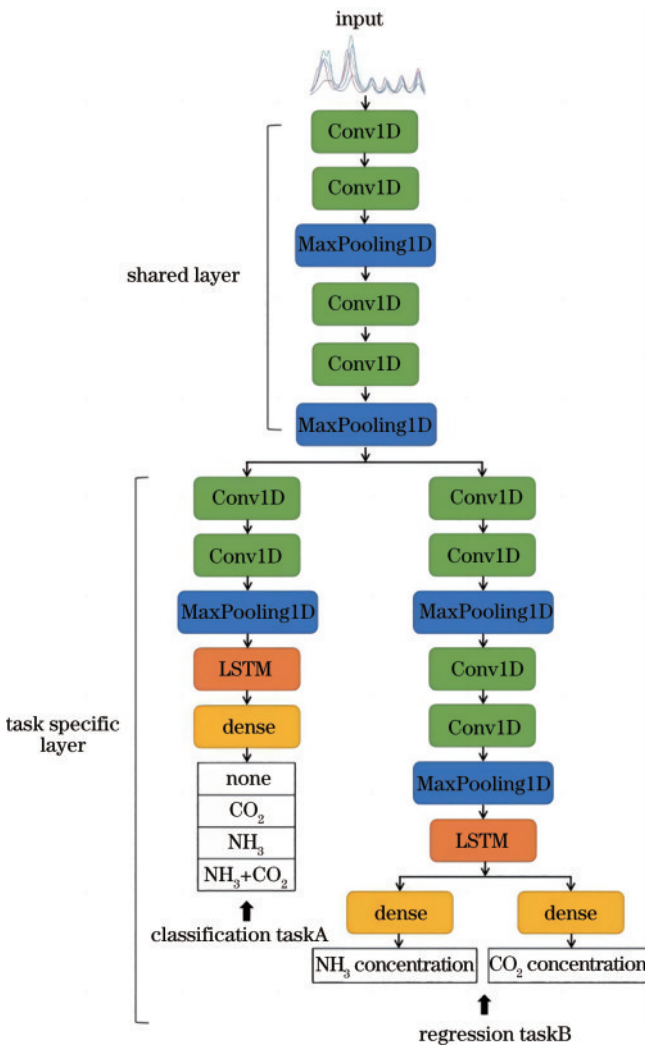


图 7 MTL-1DCNN-LSTM 模型结构图

Fig. 7 Structure of the MTL-1DCNN-LSTM model

$$A_{cc} = \frac{T_P + T_N}{T_P + T_N + F_N + F_P}, \quad (11)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2}, \quad (12)$$

$$R_{MSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (13)$$

式中： T_P 表示预测为正例，实际为正例的数目； T_N 表示预测为负例，实际为负例的数目； F_N 表示预测为负例，实际为正例的数目； F_P 表示预测为正例，实际为负例的数目； \bar{y}_i 为真实值的平均值。

表 2 多任务学习平台硬件配置

Table 2 Multi-task learning

Hardware name	Detailed information
Computer operating system	Windows 10 64
CPU	Intel(R) Core(TM) i5-7200U CPU @ 2.50GHz
GPU	NVIDIA GeForce 940MX
Random access memory (RAM)	4 GB

表 3 模型超参数设置

Table 3 Model hyperparameter settings

Hyperparameter name	Value
Learning rate	0.001
Batch-size	8
Epochs	150
Optimizers	Adam
ω_1	1
ω_2	10

在学习过程中，得到训练和验证时损失函数随轮次 (epoch) 的变化曲线，如图 8(a) 所示。由损失函数图可知，训练与验证过程中模型都基本在 10 次迭代后达到稳定收敛状态。在训练 150 epochs 后保存模型最佳训练结果权重文件 model.h5，测试时加载该文件并输入测试集数据，分别得到气体种类和体积分数回归预测的结果，如图 8(b)~(d) 所示。评估模型分类性能时引入混淆矩阵来可视化测试结果，如图 8(b) 所示，当预测标签和真实标签一致时说明预测结果正确，由图可知，气体识别准确率为 100%，证明了 MTL-1DCNN-LSTM 算法在识别气体种类上的高准确性，并且可以推断当气体种类增加时，该算法仍然可以工作，不过可能由于事件复杂化识别准确率有一定降低。图 8(c)、(d) 分别为 NH_3 和 CO_2 气体真实体积分数与预测体积分数对比图，可以看出，体积分数预测值与真实值拟合程度良好，其中， NH_3 和 CO_2 的回归预测决定系数 R^2 分别为 99.84% 和 99.62%，均方根误差分别为 0.025% 和 0.089%，结果说明了该算法对于回归任务

4 实验结果与分析

4.1 多任务学习结果

为了验证本文所提多任务学习算法 MTL-1DCNN-LSTM 的有效性和可行性，将实验获得以及扩增后得到的共 1800 个气体吸收光谱数据按照 8:1:1 的比例随机分为训练集、验证集和测试集，每个输入数据维度为 (1190, 1)，整个训练过程在 python 3.7 和 keras 环境中进行，多任务学习平台硬件配置如表 2 所示。在训练过程中发现分类任务的损失值比回归任务大，且经过实验发现，回归任务的损失值增加 10 倍后训练效果比较好，所以损失函数权重取值以及其他模型超参数设置可见表 3。

具有高拟合精度和低预测误差。该算法在 NH_3 回归预测上表现更优秀，与气体检测实验时其吸收强度比 CO_2 更高、测量误差小有一定关系。综上，证明了该多任务学习模型能同时实现混合气体分类与体积分数预测，且具有高识别准确率与高体积分数预测精度。

4.2 对比分析

为了进一步评估多任务学习算法的性能，将其与单任务学习 (STL) 算法以及传统的气体反演算法 (如 BPNN、SVM) 进行对比分析。单任务模型设置与多任务学习模型相同，不同在于分别进行分类识别 (STLC) 与回归预测 (STLR) 任务，得到的训练损失函数曲线如图 9 所示，并从识别准确率、 NH_3 回归预测决定系数、 CO_2 回归预测决定系数、 NH_3 预测均方根误差、 CO_2 预测均方根误差、推理时间等指标进行分析对比，结果可见表 4。

观察损失曲线可以发现，相比于多任务学习，单任务学习无论是分类还是回归任务，大概都需要迭代 20 次后能达到稳定收敛状态，这说明多任务学习能够加快模型收敛速度。由表 4 可知：针对气体分类任务，多任务学习与单任务学习面对 4 种气体事件时都能实现 100% 识别准确率，而由于 STLC 模型网络简单所以推理时间更短；针对气体体积分数回归任务，可以得到相比于单任务回归，多任务学习中 NH_3 体积分数预测误差降低了 37.5%， CO_2 体积分数预测误差降低了 24.6%，多任务学习比单任务学习在回归拟合精度与预测误差方面表现都更优秀，同样由于模型相较更简单所以单任务回归推理时间要短一些。但是串行执行多分类与回归预测的总时间 (1.453 s) 远大于多任务

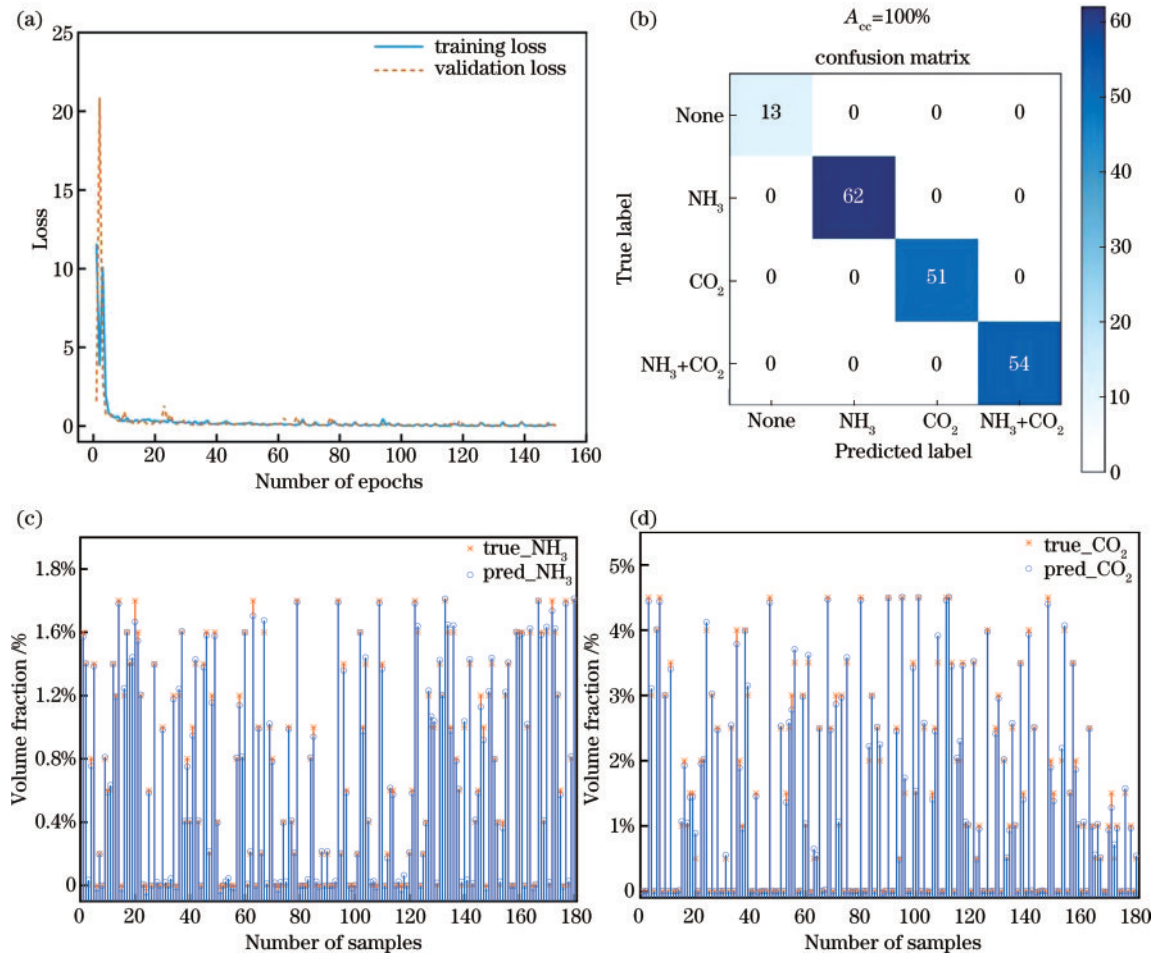


图 8 MTL-1DCNN-LSTM 模型学习结果。(a) 训练和验证过程损失函数曲线图；(b) 气体分类混淆矩阵图；(c) 测试时 NH_3 预测值与真实值对比图；(d) 测试时 CO_2 预测值与真实值对比图

Fig. 8 MTL-1DCNN-LSTM model learning results. (a) Loss function plots for training and validation processes; (b) confusion matrix for gas classification; (c) comparison of NH_3 predicted values with true values during the testing process; (d) comparison of CO_2 predicted values with true values during the testing process

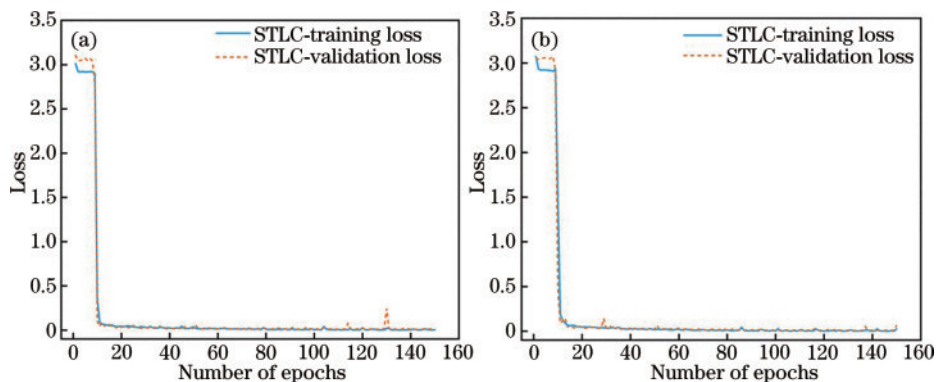


图 9 单任务学习训练和验证过程损失函数曲线。(a) 分类任务；(b) 回归任务

Fig. 9 Single-task learning training and validation process loss function curves. (a) Classification task; (b) regression task

学习时间,因此多任务学习有利于节省算法计算时间。从表 4 中可以看出,与传统的 BPNN 和 SVM 浅层网络气体反演算法相比,深度学习算法无论在分类任务或回归任务上表现都更为出色,这是由于深度学习网络能够提取深度吸收光谱特征,因此适合广泛的混合气体识别与体积分数预测应用。

为了研究长短期记忆网络在多任务学习过程中发挥的作用,将本文提出的 MTL-1DCNN-LSTM 算法与只基于卷积神经网络的 MTL-1DCNN 算法、基于卷积神经网络与双层长短期记忆网络 (Double LSTM, DLSTM) 的 MTL-1DCNN-DLSTM 算法进行分析对比,对比结果见表 5。由表 5 可知,相比于只使用 1DCNN,

表 4 多任务学习、单任务学习、BPNN 和 SVM 气体反演性能对比

Table 4 Comparison of multi-task learning, single-task learning, BPNN, and SVM gas inversion performance

Algorithm	$A_{cc} / \%$	$R^2(\text{NH}_3) / \%$	$R^2(\text{CO}_2) / \%$	$R_{\text{MSE}}(\text{NH}_3) / \%$	$R_{\text{MSE}}(\text{CO}_2) / \%$	Inference time / s
MTL-1DCNN-LSTM	100	99.84	99.62	0.025	0.089	0.922
STLC-1DCNN-LSTM	100	-	-	-	-	0.578
STLR-1DCNN-LSTM	-	99.53	98.62	0.040	0.118	0.875
SVM	95.00	-	-	-	-	-
SVR	-	98.37	98.13	0.111	0.297	-
BPNN	98.89	-	-	-	-	-
BPNNR	-	93.57	85.92	0.148	0.594	-

表 5 LSTM 使用方案对比

Table 5 Comparison of LSTM usage methods

Algorithm	$A_{cc} / \%$	$R^2(\text{NH}_3) / \%$	$R^2(\text{CO}_2) / \%$	$R_{\text{MSE}}(\text{NH}_3) / \%$	$R_{\text{MSE}}(\text{CO}_2) / \%$	Inference time / s
MTL-1DCNN-LSTM	100	99.84	99.62	0.025	0.089	0.922
MTL-1DCNN	98.89	99.36	97.88	0.380	0.179	0.838
MTL-1DCNN-DLSTM	100	99.87	99.33	0.023	0.132	1.109

将 1DCNN 与 LSTM 相结合能有效提升多任务分类和回归性能,证明了 LSTM 能提升时间序列数据训练效果。但是,使用双层 LSTM 性能提高不明显且会增加计算的时间,所以本文将 1DCNN 与一层 LSTM 相结合就能满足精准识别气体与预测体积分数的要求。

5 结 论

本文提出了一种基于一维卷积神经网络和长短期记忆网络的并行实现气体定性分类与体积分数定量回归任务的气体反演算法,构建了 MTL-1DCNN-LSTM 多任务学习模型。通过二级放大环腔掺铒光纤激光器测量吸收光谱数据获得数据集,输入到多任务学习模型中,利用卷积神经网络自动提取特征信息和长短期记忆网络获得数据间的长期依赖性信息,同时实现了纯 N_2 、纯 NH_3 、纯 CO_2 、 $\text{NH}_3 + \text{CO}_2$ 混合气体四种气体事件的分类和 NH_3 、 CO_2 体积分数回归预测,气体分类准确率达到 100%, NH_3 、 CO_2 预测拟合精度分别为 99.84% 和 99.62%, 均方根误差分别为 0.025% 和 0.089%, 证明了该模型在气体分析上的有效性。与单任务学习相比,多任务学习模型通过参数共享机制,降低了训练和开发成本,提高了模型泛化能力和学习性能。该 MTL-1DCNN-LSTM 算法在更多种类混合气体反演中同样具有应用潜力,这也是我们后续研究的方向。

参 考 文 献

- [1] Kang M G, Cho I, Park J, et al. High accuracy real-time multi-gas identification by a batch-uniform gas sensor array and deep learning algorithm[J]. ACS Sensors, 2022, 7(2): 430-440.
- [2] 王书涛, 王昌冰, 潘钊, 等. 光学技术在气体浓度检测中的应用[J]. 光电工程, 2017, 44(9): 862-871, 939.
Wang S T, Wang C B, Pan Z, et al. Applications of optical technology in gas concentration detection[J]. Opto-Electronic Engineering, 2017, 44(9): 862-871, 939.
- [3] 李晋, 闫浩, 孟杰. 光子晶体光纤气体吸收光谱探测技术研究进展[J]. 光学精密工程, 2021, 29(10): 2316-2329.
Li J, Yan H, Meng J. Research progress of gas absorption spectrum detection technology based on photonic crystal fiber[J]. Optics and Precision Engineering, 2021, 29(10): 2316-2329.
- [4] Bremer K, Pal A, Yao S, et al. Sensitive detection of CO_2 implementing tunable thulium-doped all-fiber laser [J]. Applied Optics, 2013, 52(17): 3957-3963.
- [5] 焦晓峰, 孙鹏, 管今哥, 等. 基于 TDLAS 的二氧化碳检测技术综述[J]. 测控技术, 2022, 41(9): 1-8.
Jiao X F, Sun P, Guan J G, et al. Summary of carbon dioxide detection technology based on TDLAS[J]. Measurement & Control Technology, 2022, 41(9): 1-8.
- [6] Liu K, Liu T G, Jiang J, et al. Investigation of wavelength modulation and wavelength sweep techniques in intracavity fiber laser for gas detection[J]. Journal of Lightwave Technology, 2011, 29(1): 15-21.
- [7] Feng S B, Farha F, Li Q J, et al. Review on smart gas sensing technology[J]. Sensors, 2019, 19(17): 3760.
- [8] 史屹君, 武鸿涛, 刘文皓, 等. 近红外光谱吸收技术的无线电子鼻设计[J]. 红外与激光工程, 2022, 51(5): 20210374.
Shi Y J, Wu H T, Liu W H, et al. Design of wireless electronic nose based on near infrared spectral absorption technology[J]. Infrared and Laser Engineering, 2022, 51(5): 20210374.
- [9] 闪霁芳, 刘琨, 江俊峰, 等. 支持向量机在混合气体定量分析中的应用[J]. 光学学报, 2023, 43(12): 1206001.
Shan J F, Liu K, Jiang J F, et al. Application of support vector machine in quantitative analysis of mixed gas[J]. Acta Optica Sinica, 2023, 43(12): 1206001.
- [10] Zhao X J, Wen Z H, Pan X F, et al. Mixture gases classification based on multi-label one-dimensional deep convolutional neural network[J]. IEEE Access, 2019, 7:

- 12630-12637.
- [11] Song L M, Wu H, Yang Y G, et al. Application of deep learning in quantitative analysis of the infrared spectrum of logging gas[J]. *Applied Optics*, 2020, 59(17): E9-E16.
- [12] 李聪聪, 罗旗舞, 张莹莹. 基于环境补偿模型的植物净光合速率测定[J]. *光谱学与光谱分析*, 2022, 42(5): 1561-1566.
Li C C, Luo Q W, Zhang Y Y. Determination of net photosynthetic rate of plants based on environmental compensation model[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2022, 42(5): 1561-1566.
- [13] 王军, 陈百艳, 程勇. 基于多任务长短时卷积计算网络的降雨预测[J]. *计算机工程与设计*, 2022, 43(9): 2686-2693.
Wang J, Chen B Y, Cheng Y. Rainfall forecast based on multi-task long-short convolution computing network[J]. *Computer Engineering and Design*, 2022, 43(9): 2686-2693.
- [14] Baev V M, Latz T, Toschek P E. Laser intracavity absorption spectroscopy[J]. *Applied Physics B*, 1999, 69(3): 171-202.
- [15] LeCun Y, Boser B, Denker J S, et al. Backpropagation applied to handwritten zip code recognition[J]. *Neural Computation*, 1989, 1(4): 541-551.
- [16] Yi J Z, Chen J S, Zhou M N, et al. Analysis of stock market public opinion based on web crawler and deep learning technologies including 1DCNN and LSTM[J]. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 2023, 48(8): 9941-9962.
- [17] Peng D D, Liu Z L, Wang H, et al. A novel deeper one-dimensional CNN with residual learning for fault diagnosis of wheelset bearings in high-speed trains[J]. *IEEE Access*, 2018, 7: 10278-10293.
- [18] Wang H C, Liu C, Du W L, et al. Intelligent diagnosis of rotating machinery based on optimized adaptive learning dictionary and 1DCNN[J]. *Applied Sciences*, 2021, 11(23): 11325.
- [19] 王磊, 张晓东, 戴欢. 基于 1D-CNN-LSTM 注意力网络的抽油机井故障诊断[J]. *计算机与现代化*, 2023(4): 1-6, 14.
Wang L, Zhang X D, Dai H. Fault diagnosis of pumping unit based on 1D-CNN-LSTM attention network[J]. *Computer and Modernization*, 2023(4): 1-6, 14.
- [20] Caruana R. Learning many related tasks at the same time with backpropagation[EB/OL]. [2023-03-05]. <https://www.semanticscholar.org/paper/Learning-Many-Related-Tasks-at-the-Same-Time-with-Caruana/210da45e57f86a50c04bdd7b37d498c8ecc288da>.
- [21] Caruana R. Multitask learning[J]. *Machine Learning*, 1997, 28: 41-75.