

基于机器学习对火焰温度场和 CO₂ 浓度场的同步重建

张倚成¹, 韩永康¹, 周亚¹, 任涛^{1*}, 刘训臣²

¹上海交通大学中英国际低碳学院, 上海 201306;

²上海交通大学机械与动力工程学院, 上海 200240

摘要 基于可调谐二极管激光吸收光谱法(TDLAS)和传统的反演重建算法对轴对称火焰的二维温度场和 CO₂ 浓度场的同步重建通常需要进行空间轴向和径向的多视线扫描式测量,测量系统相对复杂,反演重建效率不佳。本文基于 4.2 μm 中红外 TDLAS 激光测量系统,针对轴对称层流扩散火焰,建立了能够同步反演火焰温度场和 CO₂ 浓度场的机器学习模型。与传统的反演重建方法相比,采用机器学习的反演模型只需要对火焰中心轴向进行扫描式测量就能同步、高效地重建轴对称层流扩散火焰的二维温度场和 CO₂ 浓度场,在相同的硬件条件下需要更少的实验测量数据,能够简化实验测量的复杂度并提高反演重建的效果。

关键词 光谱学; 层流火焰; 机器学习; 温度; 浓度

中图分类号 TP181

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.2312003

Machine-Learning-Based Reconstruction of Flame Temperature and CO₂ Concentration Fields

Zhang Yicheng¹, Han Yongkang¹, Zhou Ya¹, Ren Tao^{1*}, Liu Xunchen²

¹China-UK Low Carbon College, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 201306, China;

²School of Mechanical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

Abstract Reconstruction of two-dimensional temperature and CO₂ concentration fields based on the tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) and traditional reconstruction algorithm requires multiple line-of-sight measurements in both axial and radial directions for axisymmetric flames. The experimental system is usually complicated, and the reconstruction efficiency is relatively low. Herein, a machine-learning-based reconstruction model is developed and used to simultaneously retrieve the two-dimensional temperature and CO₂ concentration fields from 4.2-μm mid-infrared TDLAS laser absorption measurements for axisymmetric laminar diffusion flames. Compared with the traditional inversion reconstruction method, the machine-learning-based inversion model only needs to scan the central axis of the flame to simultaneously and efficiently reconstruct the two-dimensional temperature and CO₂ concentration field of an axisymmetric laminar diffusion flame, and the model requires less experimental measurements only in the axial direction, which considerably simplifies the measurement system and improves the reconstruction performance.

Key words spectroscopy; laminar flame; machine learning; temperature; concentration

OCIS codes 120.1740; 100.4996; 300.6260; 280.2470

1 引 言

对火焰温度和燃烧产物浓度进行测量是燃烧诊断的重要内容之一^[1-3]。可调谐二极管激光吸收光谱法(TDLAS)具有定量测量和灵敏度高等优点,已

成为原位测量火焰温度和燃烧产物浓度的重要手段。然而,TDLAS 测量获得的只是沿着测量视线路径上信号的一种积分效应,并不能直接获得火焰的局部温度和燃烧产物的浓度分布,一般还需要依靠反演算法来获取火焰的标量场信息。为了获取火

收稿日期: 2020-07-06; 修回日期: 2020-08-09; 录用日期: 2020-08-14

基金项目: 国家自然科学基金(91941301)、上海交通大学引进人才科研启动项目(WF20428005)

* E-mail: tao.ren@sjtu.edu.cn

焰温度和燃烧产物浓度的分布,通常需要进行多视线、多角度的同步测量,或在单一视角上进行多频率测量,然后再通过反演算法来获取火焰的一维或者二维温度以及燃烧产物的浓度场等信息^[4]。然而,由于发射器和接收器数量的限制,采样信号的空间分辨率有限,重建的温度场和浓度场的空间分辨率受到一定限制。Liu 等^[5]采用 TDLAS 沿单一视线方向进行测量,获取了水蒸气在 1300~1350 nm 波段上的 12 条吸收谱线,然后分别采用材料线性和非线性正则化方法,实现了水蒸气在视线方向上一维温度和浓度的反演。Wang 等^[6]采用双色激光器和 4 台可旋转的探测平台对流场从不同的角度进行扫描测量,然后采用代数重建算法(ART)对 NH₃ 的二维温度和浓度分布进行了反演重建。以上研究表明,对这类逆问题的求解多是不适定(ill-posed)的,即求解结果依赖于初值的选取,而且对测量中的微小误差非常敏感。

中红外波段的分子基频吸收较强,适合采用直接吸收法测量该波段的光谱。Zhang 等^[7]基于 4.2 μm 中红外 TDLAS 激光测量系统,对火焰的轴向和径向进行了二维扫描式测量,讨论了采用不同 Abel 反演算法重建轴对称层流火焰温度场和 CO₂ 浓度场的可行性。Liu 等^[8]基于同样的测量系统,采用 Abel 反演算法和 Tikhonov 正则化对乙烯空气层流扩散火焰的温度场和 CO₂ 浓度场进行了反演重建;结果表明,CO₂ 分子在 4.2 μm 波段的吸收谱线具有背景干扰小、对高温敏感的优点,而且光谱信息丰富。然而,采用传统的反演算法并不能有效地挖掘高光谱分辨率测量中蕴藏的丰富信息。如果有更好的反演重建算法,就不需要通过对火焰进行轴向和径向的二维扫描式测量来获取火焰二维温度场和燃烧产物二维浓度场的分布,而只要采用轴向的高光谱分辨率测量就能够同步重建二维温度场和浓度场的分布。

本文基于 4.2 μm 带间级联中红外激光器高光谱分辨率测量的特点,建立了从火焰轴向进行 TDLAS 扫描测量,从而直接反演重建轴对称层流扩散火焰温度场和 CO₂ 浓度场的机器学习方法。甲烷空气层流扩散火焰的模拟实验证明了机器学习反演重建算法的有效性和可行性。

2 理论与方法

2.1 火焰温度场和 CO₂ 浓度场同步反演重建的原理

图 1 所示为轴对称火焰在任一高度截面的温度场和 CO₂ 浓度场测量原理图。

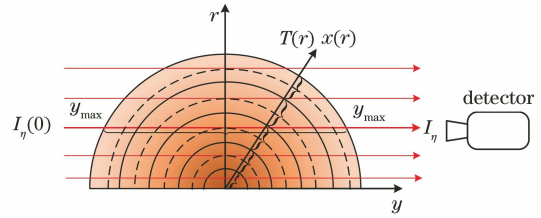


图 1 轴对称火焰温度场和 CO₂ 浓度场的测量原理
Fig. 1 Schematic of temperature and CO₂ concentration fields measurements for axisymmetric flames

一束激光穿过燃烧火焰气体介质时被介质吸收,能量衰减。探测器探测到的沿任一视线(line-of-sight)方向的光谱辐射强度为

$$I_\gamma = I_\gamma(0) \exp \left[- \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \kappa_\gamma(T, x) dy \right], \quad (1)$$

式中: $I_\gamma(0)$ 是入射的激光光谱强度; κ_γ 是气体介质的光谱吸收系数,它是与气体温度 T 、浓度 x 相关的函数。气体介质沿着视线方向的光学厚度 τ_γ 可以由经过介质吸收衰减后的辐射强度与入射激光辐射强度的比值求得,即

$$\tau_\gamma = - \ln \left(\frac{I_\gamma}{I_\gamma(0)} \right) = - \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \kappa_\gamma(T, x) dy. \quad (2)$$

由(2)式可见,气体介质沿视线方向的光学厚度与其温度、浓度分布直接相关。据此可以实现对气体介质温度和浓度的反演求解。基于 TDLAS 对轴对称火焰温度和燃烧产物浓度的反演多采用正则化 Abel Onion-Peeling 方法,该方法的核心思想是假设温度和气体介质浓度的分布分别为 $T(r)$ 和 $x(r)$,并将火焰中的气体介质沿着径向均匀离散为 N 段,每段温度和浓度均匀分布。然后进行如图 1 所示的径向扫描式测量,进而建立方程系统,实现对温度和浓度分布的求解。如果再进行火焰轴向的扫描式测量,则整个轴对称火焰的温度和气体浓度的二维分布就可以重建出来。

如果对测量的空间分辨率有一定要求,就需要径向扫描测量的次数足够多,否则建立的离散方程组将是典型的秩亏方程组,无法直接求解出温度和浓度的分布。Zhang 等^[7]和 Liu 等^[8]采用的针对 CO₂ 分子的 4.2 μm 带间级联中红外激光器能够对 CO₂ 在中红外波段的吸收谱线进行高分辨率测量,也就是说,所测得的光谱光学厚度具有一定的光谱分辨率。如果同步测量并反演温度和 CO₂ 浓度的分布,那么需要反演的未知数的个数为 $2N$ 。如果测量的有效光谱数据的数量 M 足够多 ($M \geq 2N$),就可以形成新的非线性方程组

$$\tau_i = \tau_i[T_j, x_j], 1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq N, M \geq 2N, \quad (3)$$

那么温度和浓度分布 $[T_j, x_j]$ 就有可能从光谱光学厚度 $[\tau_i]$ 的测量中被反演重建出来(i 为光谱节点, j 为空间节点)。这样就不需要再进行径向的扫描式测量,只需要沿着火焰中心测量其光谱光学厚度,温度和 CO_2 浓度的分布就可以被反演求解出来。

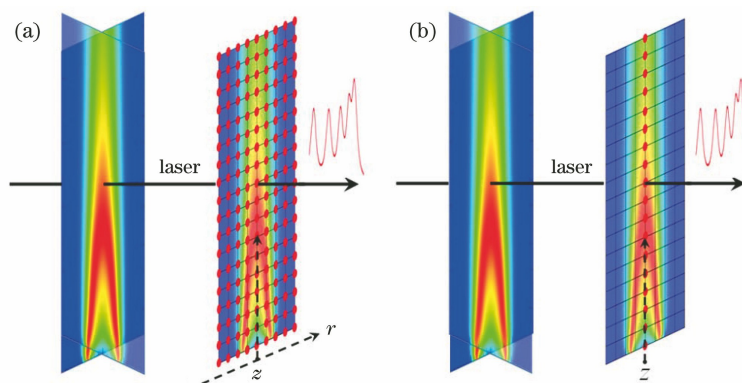


图2 传统测量方法示意图。(a)基于轴向和径向空间扫描式激光吸收光谱测量反演重建火焰温度场和 CO_2 浓度场;
(b)基于轴向扫描式激光吸收光谱测量反演重建火焰温度场和 CO_2 浓度场

Fig. 2 Schematics of traditional measurement method. (a) Reconstruction of temperature and CO_2 concentration fields based on axial and radial laser spectral absorption measurements; (b) reconstruction of temperature and CO_2 concentration fields based on axial laser spectral absorption measurement

尽管(3)式从光谱维度上为温度和浓度的反演重建提供了额外信息,但是直接求解(3)式进而从火焰的光谱光学厚度中反演温度和浓度分布的问题是非线性的,而且是不适定的。基于传统的优化算法难以准确、同步地求解温度和浓度的分布,通常还需要提供其他额外的约束条件来得到物理上合理的解^[9]。此外,在求解过程中,传统反演算法的每一步迭代求解都需要引入辐射正计算,这会影响到反演计算的效率。所以,为了实现温度和气体浓度场的快速同步反演,必须探索全新的反演算法。而对于这样的反演计算问题,一种全新的解决方案就是利用机器学习的方法。

2.2 机器学习反演重建模型

机器学习通过优化和统计学原理,自动地从数据中提取信息,使计算机能够从经验中学习,无需知晓支配变量和自变量关系的物理和化学规律。即使变量与自变量之间的关系并不明确,机器学习也可以为非线性反问题提供全局模型解决方案^[10]。机器学习已在众多领域表现出色^[11-14]。与传统的迭代重建方法相比,机器学习方法在多参数同步重建速度和性能方面具有显著优势。传统的反演算法通过构建关于未知量的矩阵方程组,进而求解大型矩阵

图2(a)给出了基于轴对称火焰径向(r)和轴向(z)空间扫描式激光吸收光谱测量反演重建火焰温度场和 CO_2 浓度场的传统测量方法示意图。如果测量的光谱光学厚度 $[\tau_i]$ 信号有足够多的光谱信息,就没有必要再进行径向扫描,仅基于沿着火焰中心的单一轴向扫描测量的数据,便可以将温度场和浓度场反演重建出来,这样测量系统就可以简化为图2(b)。

或采用迭代算法实现对温度场和浓度场的反演重建。其特点是反演速度慢、空间分辨率低,而且很难实现对火焰温度场和多种气体浓度场的多参数高维耦合同步重建。然而,基于机器学习的反演重建算法,通过线下“训练和学习”,能够获得全局反演模型,避免了非常耗时的辐射光谱的在线计算,从而极大地提高了反演计算的效率。由于机器学习模型能够有效地并行处理不同空间位置上的光谱信息,而且统一的全局模型也能够将温度和浓度在空间上分布的连续性信息通过隐含在光谱中的信息很好地保留下来,不再需要将类似的约束条件引入反演计算的方程当中,从而可以自动引入约束条件,实现温度场和浓度场的准确反演。

多层感知机(MLP)神经网络是比较流行的应用在机器学习领域的模型之一^[15]。本文针对 CO_2 $4.2 \mu\text{m}$ 带间级联中红外激光器测量系统,建立了用于温度和浓度同步反演重建的多层感知机神经网络结构,如图3所示。多层感知机神经网络一般由输入层、中间隐藏层和输出层组成。中间隐藏层可以为一层,也可以为多层,层与层之间通过人工神经元相连接。在图3中,输入层是火焰中心沿径向测量的光谱光学厚度,输出层是对应高度处温

度和浓度的径向分布。每层的节点称为神经元,每一层的神经元通过权重连接到下一层神经元之上。如图3所示,最左边的一层称为输入层,由一组代表输入特征的神经元构成(光谱光学厚度)。隐藏层中的每个神经元通过权重形成前一层神经元的值的线性求和,然后通过非线性激活函数输出^[16]。输出层的值(温度和CO₂体积分数分布)

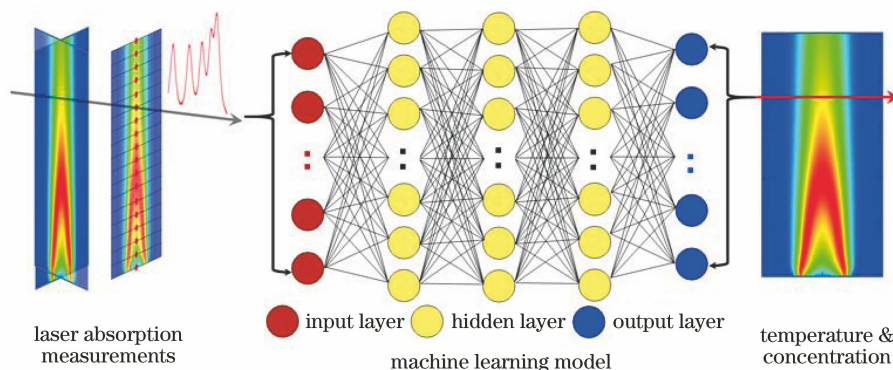


图3 基于机器学习的温度场和浓度场的同步反演重建模型

Fig. 3 Machine-learning-based reconstruction model for temperature and concentration fields retrieval

建立机器学习反演模型的一个重要步骤就是对所建立的神经网络模型进行有效训练。机器学习模型训练过程就是通过优化神经网络,调整神经元之间的权重对损失函数进行最小化。多层感知机使用的是平方误差损失函数,该函数定义为

$$F(X_p, X, W) = \|X_p - X\|^2 + \alpha \|W\|^2, \quad (4)$$

式中: X_p 是神经网络预测值; X 是对应的真实值; W 为权重系数; α 为正则化系数。多层感知机使用参数 α 进行正则化(L2-regularization),通过调整 α 的大小来避免过拟合现象的发生。机器学习模型的训练是一个反复进行的过程,一般从一个初始随机权重开始,通过不断的更新这些权重来最小化损失函数。损失被计算出来以后,再通过反向传递将它从输出层传播到前一层,为每一个权重参数提供一个更新值,使得损失下降。为了达到较好的训练效果,通常需要使用大量的数据对模型进行训练^[16-18]。

2.3 机器学习训练数据的生成

建立基于机器学习的火焰温度和CO₂浓度同步反演重建模型的目的是实现对火焰温度和CO₂浓度场的测量,显然,通过实验测量为机器学习模型提供训练数据的方式是不现实的。近年来,对辐射换热正问题求解算法的研究以及高温介质光谱参数数据库的持续更新,使得通过计算机模拟为机器学习提供大量有效的训练数据成为可能。如此大量的有效数据为机器学习模型的训练提供了前所未有的

通过最后一个隐藏层的值转换获得。然而,对于特定的问题,现在并没有统一的方法来确定输入层的神经元节点数、输出层的神经元节点数以及隐藏层的层数和神经元节点数等神经网络结构参数,这些参数通常需要在机器学习模型训练过程中通过反复实验来做出最佳选择,最终才能得到最优化的神经网络结构^[17]。

机会,而且使得不用直接求解反问题而是通过计算机算法就可以有效地探索这些大量数据集所隐含的关联信息。此外,利用这些有效数据可以对辐射反问题进行高效的非线性回归分析。

本文首先采用简单的火焰燃烧数值模拟来生成火焰温度场和CO₂浓度场,在火焰的数值模拟过程中不需要采用复杂的燃烧、化学反应和换热模型,只需要采用最基本、最简单的模型生成火焰温度和CO₂浓度分布的典型特征即可。然后再通过正向求解(2)式来生成火焰中心不同高度处的光学厚度。本文对数值模拟所得的火焰温度场和CO₂浓度场的大小进行一定幅度的调整,便可源源不断地产生不同的火焰温度场和CO₂浓度场分布。然后再针对4.2 μm带间级联中红外激光器的光谱测量范围,对每组温度和浓度分布所对应的光学厚度进行计算,就可以获得大量的CO₂光学厚度数据。在数值计算中,CO₂的光谱参数可以通过HITEMP2010数据库^[19]获得。

3 模型验证与分析

本文针对轴对称层流扩散火焰,基于4.2 μm带间级联中红外激光器测量系统,建立了火焰温度场和CO₂浓度场同步反演的机器学习模型。本文采用模拟实验的方法对所建立的机器学习模型的有效性和鲁棒性进行验证。首先采用LaminarSmoke

对甲烷和空气混合气体的同轴扩散火焰进行模拟,得到了火焰温度和 CO_2 浓度分布;然后基于 HITEMP2010 光谱数据库生成了对应火焰不同位置的光谱光学厚度。这些数据之后被用来训练和测试基于机器学习的温度场和 CO_2 浓度场同步反演重建模型。

3.1 甲烷和空气混合气体层流同轴扩散火焰的模拟

本文采用 LaminarSmoke 对文献[7,20]中的甲烷和空气混合气体层流同轴扩散火焰进行了模拟。LaminarSmoke 是基于 OpenFOAM 框架建立的适用于层流火焰模拟的开源 CFD 求解器^[21-23]。如图 4 所示,甲烷和空气分别由燃气管道和空气管道进入火焰生成区。燃气管道半径为 6 mm,厚度为 0.8 mm;空气管道半径为 51 mm,厚度为 1 mm。

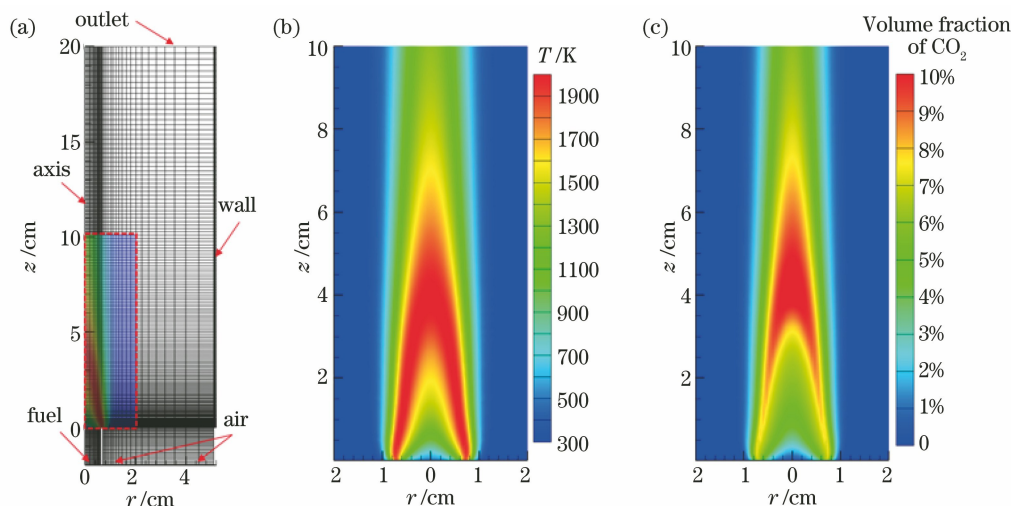


图 4 甲烷和空气混合气体层流同轴扩散火焰的模拟。(a)火焰模拟的计算网格和边界条件;(b)温度分布;(c) CO_2 浓度分布
Fig. 4 Numerical simulation of CH_4 -air laminar coaxial diffusion flame. (a) Computation grid and boundary conditions for simulating flame; (b) temperature field; (c) CO_2 concentration field

3.2 训练数据和测试数据的生成

机器学习训练数据应该包括火焰不同位置处的温度和 CO_2 浓度分布,以及火焰对应的光谱光学厚度。火焰温度和 CO_2 浓度的分布分别从图 4 (b)和图 4 (c)所示的火焰模拟数据中提取。本文首先均匀提取了火焰中心从根部($z = 0$)到高度为 10 cm 之间的 100 组径向的温度和 CO_2 浓度数据,径向数据分布由火焰中心($r = 0$)到半径为 2 cm 之间的 30 组均匀分布的温度和 CO_2 浓度来表示。在提取温度和浓度的分布之后,再对其添加 $-10\% \sim 10\%$ 之间的随机浮动,共产生了 10000 组温度和 CO_2 浓度的分布。文献[7-8]中采用 $4.2 \mu\text{m}$ 带间级联中红外激光器测量了 CO_2 在 $2396.9 \sim 2397.4 \text{ cm}^{-1}$ 光谱范围内的高分辨率光谱光学厚度(均匀分布的有效光谱数

甲烷入口流速为 3.57 cm/s ,空气入口流速为 8.32 cm/s ,流速的设置与文献[7]保持一致。由于对称性,在数值模拟过程中,采用 wedge 结构代表完整的轴对称圆柱结构。计算域内的大环境为常温状态下的空气氛围,压强为一个标准大气压,温度为 300 K。数值计算的网格和边界条件如图 4(a)所示。考虑到燃烧区域的温度和组分梯度较大,采用非均匀网格,对燃烧区域的网格进行了加密。燃烧反应采用 LaminarSmoke 自带的甲烷骨干反应机理,包含 24 种产物的 155 步反应。辐射模型采用 LaminarSmoke 自带的 P1 模型。经过模拟计算,稳态的火焰温度场和 CO_2 浓度场分别如图 4(b)和图 4(c)所示。图中展示了由轴对称二维分布镜像得到的火焰的完整形状。

据点为 2100 个)。本文基于 HITEMP2010 光谱数据库,也计算了这 10000 组温度和 CO_2 浓度分布所对应的在 $2396.9 \sim 2397.4 \text{ cm}^{-1}$ 光谱范围内 2100 个光谱位置上的光学厚度。光谱光学厚度有 2100 个数据点($M=2100$),温度和 CO_2 浓度分布作为需要反演计算的值,共有 $2N=60$ 个数据点,满足(3)式中的 $M \geq 2N$ 的条件。由于 2100 远远大于 60,而且本研究团队在模型训练和测试过程中发现没有必要采用所有的光谱数据,因此本文每间隔 10 个数据取 1 个,这样有效的光谱数据点即为 210 个,依然远大于需要反演重建的未知数的个数。

当机器学习模型训练结束之后,输入“测量”的火焰的光谱光学厚度,其对应的温度和 CO_2 浓度分布即可被反演出来。本文采用模拟实验数据对所建

立的机器学习模型进行验证。火焰的光谱光学厚度是根据图 4 (b)和图 4 (c)所示的火焰温度和 CO_2 浓度分布计算得到的,然后再添加一定的随机噪声,以模拟实验测量值。经过反演得出的温度和浓度分布也可以与图 4 (b)和图 4 (c)所示的火焰真实温度场和 CO_2 浓度场进行比较。

3.3 机器学习模型训练以及温度和浓度的反演

本文通过 scikit-learn 的 Python 库^[24]来建立机器学习反演模型,模型训练中使用的是 Kingma 等^[25]提出的基于随机梯度的优化器(Adam)。对多层感知机的神经网络结构和参数进行多次训练和调整之后,最终得到的优化的神经网络结构一共有 4 个中间层,每层节点数分别为 200、400、400 和 200,正则化参数 $\alpha = 0.01$ 。

为了验证机器学习模型反演温度和 CO_2 浓度分布的可行性和鲁棒性,本文在模拟生成的火焰光谱光学厚度中分别加入 2%、5% 和 10% 三组不同的

高斯随机噪声,然后将其输入到训练好的机器学习模型中,测试模型反演火焰温度和 CO_2 浓度分布的效果。图 5 给出了机器学习模型反演得到的火焰温度场和 CO_2 浓度场以及真实的火焰温度场和 CO_2 浓度场。从图中可以看出,如果光谱数据中添加 2% 的随机噪声,反演得到的温度场和浓度场与真实的温度场和浓度场几乎没有差别。文献^[7]认为,对于这样的逆辐射反演问题,由于问题本身是不适定的,因此反演结果对噪声非常敏感。如果采用传统的 Abel 反演算法,即使添加 1% 的随机噪声也会带来非常大的反演误差。从图 5 可以看出,机器学习模型对噪声并不敏感,在随机噪声为 5%,甚至是 10% 的情况下,火焰的温度场和浓度场也能够完整并且相对准确地被反演重建出来,尤其是在火焰下游,反演的结果与真实值几乎无异。在噪声较大时,重建的火焰温度场和 CO_2 浓度场只是在火焰上游出现了一定程度的波动。

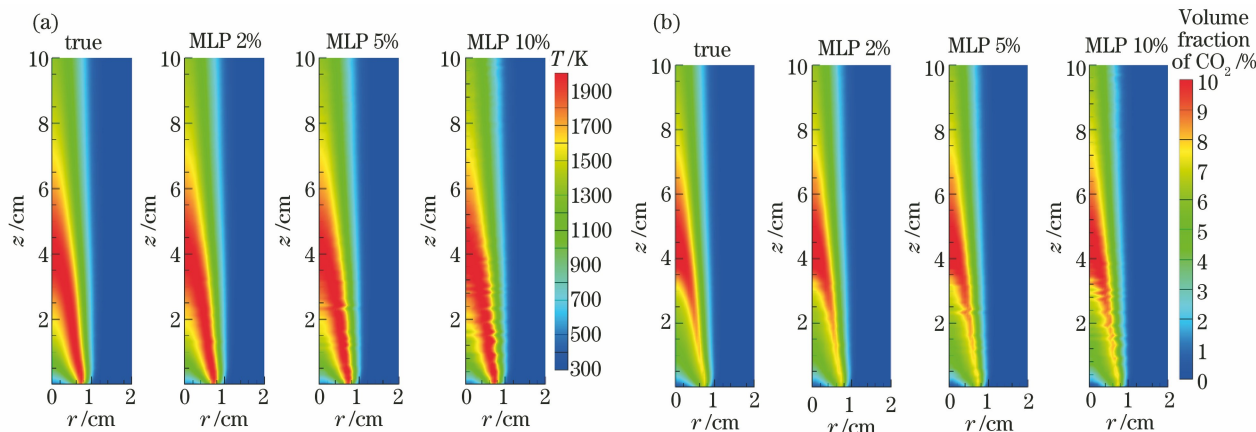


图 5 火焰温度场和 CO_2 浓度场的真实分布以及加入 2%、5% 和 10% 高斯随机噪声后机器学习模型的预测结果。

(a) 温度场; (b) CO_2 浓度场

Fig. 5 True flame temperature and CO_2 concentration fields, as well as machine-learning-based model predicted fields with 2%, 5% and 10% Gaussian random noises. (a) Temperature fields; (b) CO_2 concentration fields

图 6 定量地展示了机器学习模型反演重建的火焰温度场和 CO_2 浓度场的性能。图 6(a)~(c)分别给出了加入 2%、5% 和 10% 高斯随机噪声情况下机器学习模型反演重建得到的温度、 CO_2 浓度与真实温度、浓度的比较,其中阴影部分分别表示 $\pm 2\%$ 、 $\pm 5\%$ 、 $\pm 10\%$ 的温度和浓度区间。可以看出,机器学习反演模型的鲁棒性非常好,光谱测量中所引入的随机误差并没有因为问题本身的不适定性被放大,即使噪声高达 10%,反演重建的温度和浓度的误差几乎都在 10% 以内。

图 7 也给出了火焰中心位置高度为 40 mm 处的真实温度和 CO_2 分布,以及添加 2%、5% 和 10% 高斯随机噪声情况下反演重建的火焰温度和 CO_2 浓度分布。可以看出,机器学习反演重建的效果非常好,反演重建的温度和浓度分布的相对误差都没有超出光谱数据原始噪声的相对大小。而且,尽管光谱噪声是随机分布的,但由于机器学习损失函数引入了正则化,有效地避免了过拟合,因此即使在光谱数据噪声很大时(10%),反演得到的温度和浓度的空间分布依然是相对光滑的。

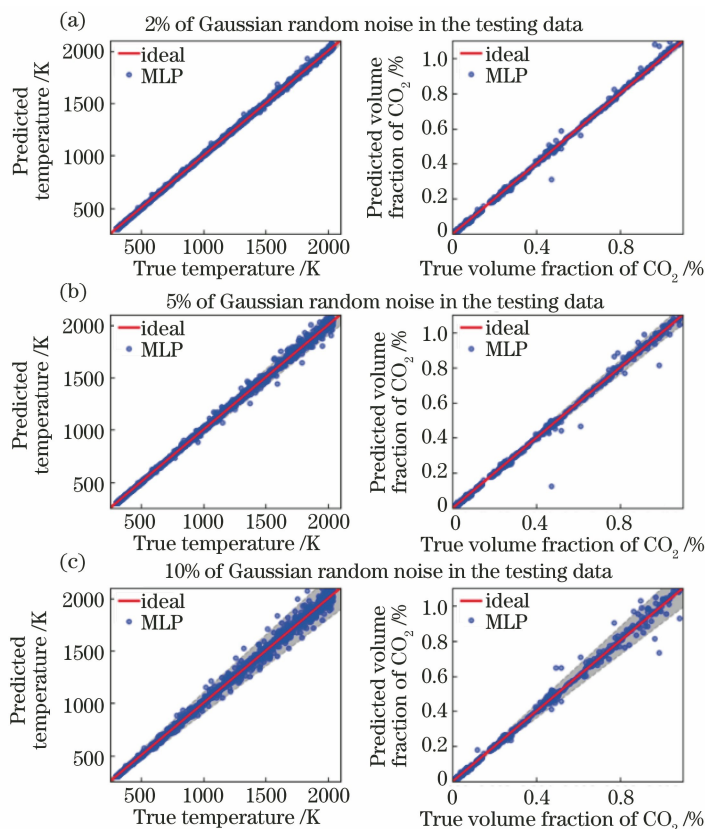


图 6 真实的火焰温度场和 CO_2 浓度场以及不同随机噪声下机器学习模型得到的预测结果的对比。

(a) 2% 随机噪声; (b) 5% 随机噪声; (c) 10% 随机噪声

Fig. 6 Comparisons of true temperature and CO_2 concentration fields (ideal) with machine-learning-based model predicted ones (MLP) with different random noises. (a) 2% random noise; (b) 5% random noise; (c) 10% random noise

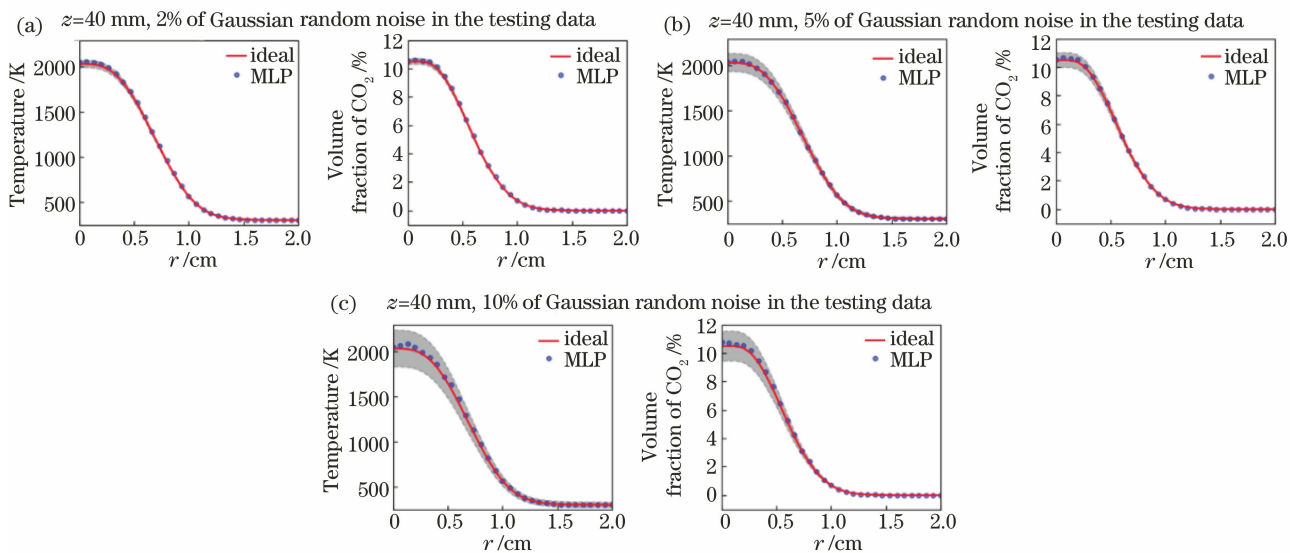


图 7 火焰高度为 40 mm 处真实温度和 CO_2 浓度的径向分布与机器学习模型得到的预测值之间的对比。

(a) 2% 随机噪声; (b) 5% 随机噪声; (c) 10% 随机噪声

Fig. 7 Comparisons of true temperature and CO_2 concentration distributions (ideal) at the height above burner of 40 mm with machine-learning-based model predicted ones (MLP). (a) 2% random noise; (b) 5% random noise; (c) 10% random noise

4 结 论

本文基于 $4.2\ \mu\text{m}$ 带间级联中红外激光器 TDLAS 测量系统,建立了用于轴对称层流火焰温度场和 CO_2 浓度场同步反演重建的机器学习模型。首先从理论上阐述了基于火焰中心沿轴向的扫描式测量重建火焰温度场和 CO_2 浓度场的可行性,之后介绍了采用多层感知机神经网络重建火焰温度和 CO_2 浓度的机器学习模型的结构和原理,然后介绍了采用数值模拟和辐射计算的方式为机器学习模型提供训练数据的可行性,最后采用模拟数据添加不同噪声的方式对机器学习模型反演重建温度场和浓度场的有效性和鲁棒性进行了验证。结果表明,机器学习模型能够很好地解决这类非线性逆问题,可以高效地实现温度场和浓度场的耦合反演重建。机器学习模型需要更少的实验测量数据,且对噪声不敏感,比传统反演重建算法具有更显著的优势。

参 考 文 献

- [1] Chen X, Kan R F, Yang C G, et al. Concentration measurements of NO_2 and NH_3 based on wavelength-modulation frequency-division-multiplexing spectroscopic technique [J]. *Acta Optica Sinica*, 2018, 38 (5): 0512004.
陈祥, 阚瑞峰, 杨晨光, 等. 基于频分复用波长调制光谱的 NO_2 及 NH_3 浓度测量[J]. *光学学报*, 2018, 38(5): 0512004.
- [2] Qu D S, Fan H J, Liu L W, et al. Measurement of gas parameters in supersonic combustion field based on near-infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(3): 0330001.
屈东胜, 樊宏杰, 刘连伟, 等. 基于近红外光谱的超声速燃烧场气体参数测量研究[J]. *光学学报*, 2020, 40(3): 0330001.
- [3] Zhang F C, Sun B J, Sun X G. Multispectral true temperature inversion based on multi-objective minimization optimization method [J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(2): 0212008.
张福才, 孙博君, 孙晓刚. 基于多目标极值优化法的多光谱真温反演 [J]. *光学学报*, 2019, 39 (2): 0212008.
- [4] Huang Y, Zhang G Y, Liu X C, et al. Temperature distribution of axisymmetric diffusion flame measured by mid-infrared laser [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2017, 38(7): 1447-1453.
黄燕, 张国勇, 刘训臣, 等. 中红外激光测量扩散火焰温度场 [J]. *工程热物理学报*, 2017, 38(7): 1447-1453.
- [5] Liu C, Xu L J, Cao Z. Measurement of nonuniform temperature and concentration distributions by combining line-of-sight tunable diode laser absorption spectroscopy with regularization methods[J]. *Applied Optics*, 2013, 52(20): 4827-4842.
- [6] Wang F, Cen K, Li N, et al. Two-dimensional tomography for gas concentration and temperature distributions based on tunable diode laser absorption spectroscopy [J]. *Measurement Science and Technology*, 2010, 21(4): 045301.
- [7] Zhang G Y, Wang G Q, Huang Y, et al. Reconstruction and simulation of temperature and CO_2 concentration in an axisymmetric flame based on TDLAS[J]. *Optik*, 2018, 170: 166-177.
- [8] Liu X C, Zhang G Y, Huang Y, et al. Two-dimensional temperature and carbon dioxide concentration profiles in atmospheric laminar diffusion flames measured by mid-infrared direct absorption spectroscopy at $4.2\ \mu\text{m}$ [J]. *Applied Physics B*, 2018, 124(4): 1-10.
- [9] Zhang H D. Reconstruction of flame temperature field and soot concentration field based on hyperspectral imaging system [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2016.
张海丹. 基于高光谱成像系统的火焰三维温度场和烟黑浓度场重建研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2016.
- [10] Michalski R S, Carbonell J G, Mitchell T M. Machine learning [M]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1983.
- [11] Chen N F Y, Kasim M F, Ceurvorst L, et al. Machine learning applied to proton radiography of high-energy-density plasmas[J]. *Physical Review E*, 2017, 95: 043305.
- [12] Rodrigues É O, Pinheiro V H A, Liatsis P, et al. Machine learning in the prediction of cardiac epicardial and mediastinal fat volumes [J]. *Computers in Biology and Medicine*, 2017, 89: 520-529.
- [13] Huang J Q, Liu H C, Cai W W. Online *in situ* prediction of 3-D flame evolution from its history 2-D projections via deep learning [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2019, 875: R2.
- [14] Jin Y, Zhang W Q, Song Y, et al. Three-dimensional rapid flame chemiluminescence tomography via deep learning [J]. *Optics Express*, 2019, 27(19): 27308-27334.
- [15] Johns J M, Burkes D. Development of multilayer perceptron networks for isothermal time temperature transformation prediction of U-Mo-X alloys [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2017, 490: 155-166.
- [16] Ren T, Modest M F, Fateev A, et al. Machine learning applied to retrieval of temperature and

- concentration distributions from infrared emission measurements [J]. *Applied Energy*, 2019, 252: 113448.
- [17] Tagliatela Scafati F, Lavorgna M, Mancaruso E, et al. Artificial intelligence for modeling and control of nonlinear phenomena in internal combustion engines [M] // *SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology*. Cham: Springer International Publishing, 2017: 1-19.
- [18] Nutkiewicz A, Yang Z, Jain R K. Data-driven Urban Energy Simulation (DUE-S): a framework for integrating engineering simulation and machine learning methods in a multi-scale urban energy modeling workflow[J]. *Applied Energy*, 2018, 225: 1176-1189.
- [19] Rothman L S, Gordon I E, Barber R J, et al. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2010, 111 (15): 2139-2150.
- [20] Smooke M D, McEnally C S, Pfefferle L D, et al. Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar diffusion flame [J]. *Combustion and Flame*, 1999, 117(1/2): 117-139.
- [21] Cuoci A, Frassoldati A, Faravelli T, et al. Numerical modeling of laminar flames with detailed kinetics based on the operator-splitting method [J]. *Energy & Fuels*, 2013, 27(12): 7730-7753.
- [22] Cuoci A, Frassoldati A, Faravelli T, et al. A computational tool for the detailed kinetic modeling of laminar flames: application to C_2H_4/CH_4 coflow flames [J]. *Combustion and Flame*, 2013, 160(5): 870-886.
- [23] Cuoci A, Frassoldati A, Faravelli T, et al. OpenSMOKE++: an object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms [J]. *Computer Physics Communications*, 2015, 192: 237-264.
- [24] Kramer O. Machine learning for evolution strategies [M]. Cham: Springer International Publishing, 2016.
- [25] Kingma D P, Ba J. Adam: a method for stochastic optimization [EB/OL]. 2014: arXiv: 1412. 6980 [2020-07-16]. <https://arxiv.org/abs/1412.6980>.