

文章编号: 0258-7025(2010)05-1310-06

# 基于吸收光谱技术的气体分布重建

李 宁 翁春生

(南京理工大学瞬态物理国家重点实验室, 江苏 南京 210094)

**摘要** 结合计算机断层成像算法与吸收光谱气体测量技术, 实现了对于均匀温度压力下气体分布二维图像重建。设计搭建了基于 4 个小型旋转平台摆动扫描的断层重建系统, 在 0.1 s 内完成对于 16 cm×16 cm 测量区域的空间扫描, 获得由激光器高速扫描气体吸收谱线所采集得到的 400 组投影数据。采用数值模拟方法, 利用代数迭代重建算法 (ART) 与最小二乘 QR 分解算法进行重建与对比, 并考察了气体浓度边界条件对重建结果的影响。实验室内利用体积分数为 4 % 的 NH<sub>3</sub> 混合气体作为测量介质, 重建了测量区域内圆形烟道出口不同位置处的气体断层分布图像, 并对结果进行了分析。

**关键词** 激光技术; 气体分布断层重建; 代数迭代重建算法; 最小二乘 QR 分解算法; 吸收光谱

中图分类号 O 433.5 文献标识码 A doi: 10.3788/CJL20103705.1310

## Gas Reconstruction Distribution Based on Absorption Spectroscopy Technology

Li Ning Weng Chunsheng

(National Key Laboratory of Transient Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210094, China)

**Abstract** The absorption spectroscopy combined with computerized tomography technique is used to reconstruct the two-dimensional (2D) image of gas distribution at uniform temperature and pressure. A new optical scanning system is set up based on four rotation platforms. The 16 cm×16 cm region of interest is scanned within 0.1 s, and 400 projections are calculated according to the laser attenuation caused by gas absorption. With numerical simulation, the assumed model of gas distribution is reconstructed by algebraic reconstruction technique (ART) and least square QR-factorization method. The effect of the concentration boundary constants on reconstruction results is also discussed. The experiments are performed on the reconstruction of 4% NH<sub>3</sub> distribution at different heights away from the round flue located in the scanning range, and the images are analyzed further.

**Key words** laser technique; gas distribution tomography; algebraic reconstruction technique; least square QR-factorization; absorption spectroscopy

### 1 引 言

吸收光谱气体测量技术具有高光谱分辨率、高灵敏度、快速响应的优点, 避免了采样方法对测量带来的不利影响, 且测量结果为整个光路内气体浓度平均值, 更具有代表性。目前基于吸收光谱技术的气体组分在线测量研究已经非常广泛<sup>[1~6]</sup>, 但商业化半导体激光器输出能量较低 (毫瓦量级), 通常在

使用时将其输出光束准直成线状以减少能量在空间中的衰减, 从而完成在单一光路内的气体组分在线测量。对于气体空间分布测量研究, 这种测量方法无法覆盖整个测量区域, 因此限制了其在气体空间分布测量中的应用。

研究学者通过设计各种不同类型的光学系统, 对吸收光谱技术在空间气体分布测量中的应用进行

收稿日期: 2009-06-09; 收到修改稿日期: 2009-08-25

基金项目: 国家自然科学基金(10672080)、高等学校博士学科点专项科研基金(20093219110037)和江苏省博士后科研资助计划项目(0902094C)资助课题。

作者简介: 李 宁(1981—), 男, 讲师, 主要从事气体在线测量方面的研究。E-mail: stokim@gmail.com

研究。部分学者借鉴于医学计算机断层扫描(CT)的重建方式,利用机械设备带动测量光源和探测器围绕被测对象进行旋转,或转动被测对象,从而得到完备的投影数据进行重建<sup>[7~9]</sup>。但由于旋转过程的存在,测量系统响应时间将不能满足动态变化气体分布测量的要求。为了提高测量系统的响应时间,可采用固定光路的测量方式,通过从不同角度和方向布置多条测量光路来覆盖测量区域,从而进行气体分布重建。由于系统中没有了机械运动部件,因此测量时间极短,可以用于对火焰中气体组分的测量。如 S. J. Carey 等<sup>[10]</sup>通过在燃烧发动机周围布置 28 对位置固定的激光器与探测器,从而重建出燃烧产物的分布情况;P. Wright 等<sup>[11]</sup>利用固定的 4 组测量单元,共 32 组光路来完成对发动机内 HC 分布的测量;E. J. Beiting<sup>[12]</sup>通过均匀布置 96 个激光源与 576 个探测器,对 10 cm 的方形区域进行了快速重建。但在实际应用中,增加一条测量光路需要添加对应的激光源与探测器,由于受到测量对象空间的限制,因此测量光路数量较少,从而影响了重建图像的质量。L. Ma 等<sup>[13]</sup>则通过利用波分复用技术,在同一光路中同时扫描多条吸收谱线,从而增加了气体投影信息,大大减少了重建所需的光路数量,并通过数值计算对重建结果进行了分析。

本文将激光源与探测器固定于小型旋转台上,并在旋转台对面放置反射镜,作为一组测量单元,从而完成在一个投影角度内对测量区域的断层扫描。通过在测量区域四周不同位置处布置 4 组测量单元,实现气体分布的断层重建。与旋转扫描的方式相比,该测量系统测量时间大大缩短,而得到的投影数据远多于固定光路的扫描方式,大大改善了重建图像的质量。

## 2 理论分析

### 2.1 气体测量基本原理

基于可调谐半导体激光器的吸收光谱气体测量技术,通过输出窄带宽且波长可调的激光束,对目标气体的单一谱线进行扫描,具有测量精度高、可以有效避免其他背景气体谱线的干扰、无需预处理、实时响应等优点。当可调谐半导体激光器输出的激光信号穿越待测气体介质时,其激光强度的变化遵循比尔-朗伯(Beer-Lambert)定律

$$A = -\ln\left(\frac{I_t}{I_0}\right) = PS(T)\phi(\nu)XL, \quad (1)$$

式中  $A$  为吸收系数,代表激光强度衰减大小; $I_0$  为

初始激光强度, $I_t$  为透射激光强度, $P$  为气体的总压强; $L$  为激光在气体中传播的距离, $X$  为气体的浓度, $\phi(\nu)$  为线型函数,其中  $\nu$  为激光波长,线型函数与温度、气体压力和各成分含量有关,通常可以采用沃伊特(Voigt)函数来描述吸收谱线的形状,且线型函数在频域上的积分值为 1; $S(T)$  为该谱线的线强度,表示该谱线的吸收强度,只与气体温度  $T$  相关,可以通过光谱数据库进行查询<sup>[14]</sup>,或者通过公式

$$S(T) = S(T_0) \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \exp\left[-\frac{hcE}{k}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \times \left\{ \frac{1 - \exp[-hcE/(kT)]}{1 - \exp[-hcE/(kT_0)]} \right\} \quad (2)$$

进行求解。式中  $Q$  为总的分子内部分割函数,可以通过光谱数据库查询得到, $E$  为低跃迁态的能量, $h$  为普朗克常数, $k$  为玻尔兹曼常数, $c$  为光速。

半导体激光器在外部三角波电信号的驱动下,输出的激光波长发生变化,从而扫描对应的气体吸收谱线。在已知压力、光程长度和谱线强度的情况下,根据激光强度衰减所得到的气体吸收谱线信号,通过在频域内积分去除线型函数影响后,可以直接反算得到光路中气体浓度的平均值为

$$X = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} -\ln(I_t/I_0) d\nu}{PS(T)L}. \quad (3)$$

### 2.2 气体分布重建原理与算法

传统的半导体激光吸收光谱测量方法,只能得到单一路径中的气体组分浓度平均值。对于气体组分的二维分布,需要测量在不同角度不同路径中得到的气体吸收系数,结合图像重建算法来进行求解。气体分布重建的本质问题就是利用投影数据得到图像。投影重建图像问题主要有两类反演算法<sup>[15]</sup>:一类是对横截剖面的直接数学反计算,是以雷登(Radon)变换为基础的变换法,此类方法需要得到均匀分布在  $360^\circ$  范围的完备的投影数据来保证重建的精度。但由于受到实际测量环境条件的限制,往往很难提供如此完备的投影数据。另一类是一系列的区域迭代,称为迭代法。迭代重建法(ART)中假设断层截面是一个未知的数字矩阵组成,然后由测量到的投影数据建立未知矩阵元素的一个代数方程组,对于投影数据不完全的测量情况,是一种比较有效的算法。本文中采用 ART 来进行气体分布重建的计算。

对于气体分布重建的研究,首先需要对待测区域进行离散化,即将欲重建的分布图像  $f(x, y)$  离散成一个  $n \times n = N$  重建图像网格,如图 1 所示。

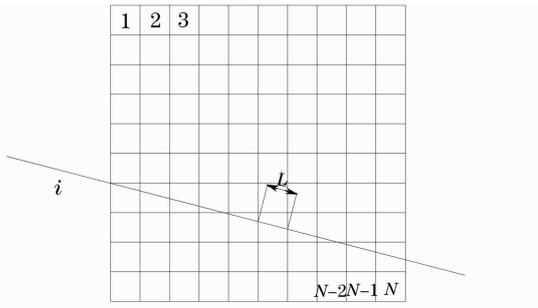


图 1 激光射线穿越离散化的测量区域

Fig. 1 Plotted region of interest and corresponding absorption length of the laser beam

当测量激光束  $i$  穿越测量区域时,被待测目标气体所吸收,从而强度发生衰减。当激光束从不同位置与方向穿越网格时,由于其穿越网格的长度和网格内的气体浓度等参数的不同,导致探测到的激光强度衰减不同。根据(3)式,对于激光束  $i$ ,在测量区域内其气体吸收方程为

$$A_i = [PS(T)X]_1 L_{i,1} + [PS(T)X]_2 L_{i,2} + \dots + [PS(T)X]_N L_{i,N}, \quad (4)$$

式中  $N$  为划分的网格数,  $A_i$  为激光束  $i$  穿越所有网格后所得到的气体吸收系数。可见,最终探测到的气体吸收衰减信号分别由穿越离散化图像中的各个网格内的气体吸收贡献值叠加而成。其中激光束穿越网格的距离  $L$  不随着测量场中气体的浓度、温度等参数的变换而改变,只与激光射线的入射角度和位置相关。当有  $M$  条激光束从不同方向穿越测量区域时,则可以建立

$$A_{v_1,i} = \sum_{j=1}^N [PS(T)X]_{v_1,j} L_{ij} = \sum_{j=1}^N f_{v_1,j} L_{ij}, \quad (i = 1, 2, \dots, M) \quad (5)$$

对于(5)式,可以通过采用 ART 进行求解。先假设一初始图像分布  $f^{(0)}$ , 然后根据初始值求一次近似图像  $f^{(1)}$ , 再根据  $f^{(1)}$  求二次近似图像  $f^{(2)}$ , 以此类推。每次求解时,需添加一修正值  $\Delta f^{(i)}$ , 代表只考虑一条射线的投影影响,修正此射线所经过的像素,然后在下一次迭代时考虑下一条射线所带来的影响。ART 代数迭代的基本公式为<sup>[15]</sup>

$$f_{v_1,j}^{(k+1)} = f_{v_1,j}^{(k)} + \lambda \frac{A_{v_1,i} - \sum_{n=1}^N f_{v_1,n}^{(k)} L_{in}}{\sum_{n=1}^N L_{in}^2}, \quad (j = 1, 2, \dots, N) \quad (6)$$

式中  $\lambda$  为迭代方程中的松弛系数。当给出了初始的气体分布数值后,利用每条射线所得到的投影值,根据(6)式来进行迭代计算,从而得到最终收敛后的重

建图像。

为了进行对比分析,还采用了最小二乘 QR 分解(LSQR)算法<sup>[16,17]</sup>来对(5)式进行求解。LSQR 方法广泛应用于地球物理和地震层析成像反演及病态问题的求解中,其计算速度快,占用内存小,解的数值稳定,适合于大型稀疏病态矩阵方程的求解。

### 3 实验系统

在实验室内设计搭建的气体组分分布重建测量系统如图 2 所示。

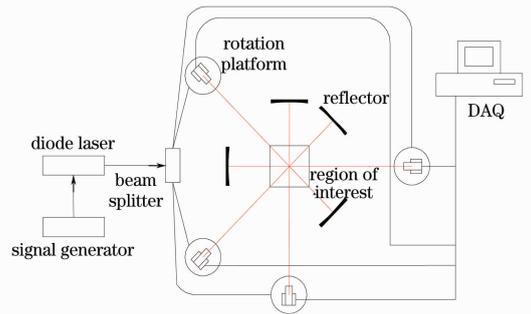


图 2 气体组分分布重建测量系统

Fig. 2 Measurement system of gas distribution reconstruction

测量系统主要由半导体激光器,4 路测量单元以及数据采集系统(DAQ)构成。半导体激光器通过温度控制电路的调节,使得输出激光波长位于目标谱线中心位置。在外部信号发生器锯齿波电流信号作用下,驱动窄线宽激光波长在频域范围内对目标气体谱线进行扫描。激光束通过尾纤输出,直接连接至光纤分路器后均分为 4 路,然后分别通过单模光纤连接于 4 路测量单元中的光纤准直器上。每一路测量单元包括一个小型旋转台、一个光纤准直器、一个大面积光电探测器以及一块定制的曲率半径为 750 mm 的镀膜柱面反射镜。4 个旋转台安装在以矩形测量区域中心的圆心半径为 50 cm 的圆周上,并采用非对称的安装布置方式以获得不同角度的投影数据。光纤准直器与光电探测器同轴安装在旋转台架上,光纤准直器与光电探测器感光面的垂直高度距离约为 2 cm。柱面反射镜放置在距离旋转台轴心 75 cm 的位置处,旋转台的轴心正好与柱面反射镜的曲率中心重合。这样的布置方式保证了旋转台在摆动的同时,由光纤准直器输出的准直光束经过柱面反射镜反射后,可以准确地返回到旋转台轴心位置的探测器感光面上。

测量开始时,采用并联控制实现 4 台小型旋转

平台的同步运动。旋转平台启动后,经过短暂加速过程后,以  $120(^{\circ})/s$  的均匀速度带动激光束扫描测量区域,对应扫描时间为  $0.1 s$  左右。旋转台运动的同时激光器开始工作,为了可以在旋转台摆动过程中能够采集足够多的吸收信号,实验中将扫描频率设定为  $5 kHz$ 。对于旋转台  $0.1 s$  的摆动时间,单个旋转台将采集得到  $500$  组吸收信号,对于目前系统中的旋转台转速以及划分网格未知数的求解是足够的。值得注意的是,提高旋转台的转速和激光器波长扫描频率对于动态气体测量是有利的,但对电机性能以及旋转台运动的稳定性等提出了更高的要求。同时激光器随着扫描频率的增加,其波长扫描范围在相同电流驱动下也将发生缩小,因此必须根据实际情况来合理选择。扫描后的吸收信号经过频域积分后,得到激光衰减信号与气体浓度之间的关系。测量过程中采用多通道数据采集卡采集投影数据,数据采集频率为  $500 kHz$ 。为了减少测量误差,采集得到的相邻  $5$  条射线投影数据进行平均,最终  $4$  个测量单元共得到方程数量  $M=400$ 。

气体分布重建计算前还需要进行测量区域网格

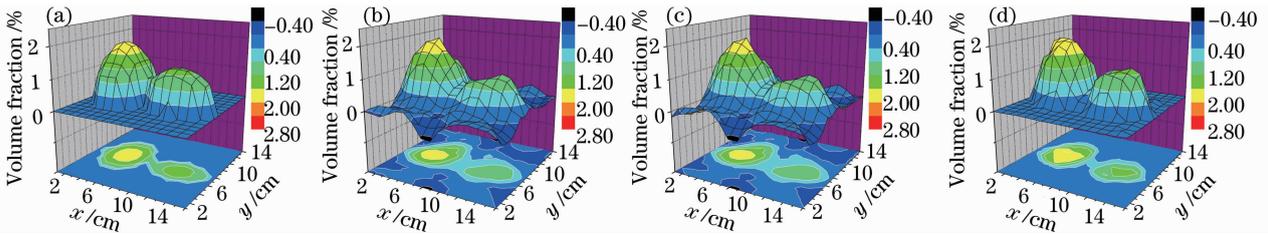


图 3 气体浓度分布模型(a)及其不同重建结果:(b)ART 算法;(c)LSQR 算法;(d)带有浓度边界条件的 ART 算法

Fig. 3 Gas distribution model (a) and the reconstruction results: (b) ART; (c) LSQR; (d) ART with concentration boundary

对计算投影数据添加不同比例的随机误差,来模拟实际测量过程中存在的各种误差之和。为了比较重建效果,定义重建结果的最大相对误差  $e$  与平均相对误差  $e_a$  为

$$e = \max_{i=1}^N \frac{|X_i - O_i|}{O_{\max} - O_{\min}}, \quad (7)$$

$$e_a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|X_i - O_i|}{O_{\max} - O_{\min}}, \quad (8)$$

式中  $X_i$  为重建图像中气体浓度,  $O_i$  为假定图像中的气体浓度。将重建结果分别代入(7),(8)式中,得到两种不同方法重建结果的对比。

从图 4 可见,对于假定的模型,两种方法的重建结果基本相同,ART 方法精度略好于 LSQR 方法,但 ART 方法方程计算时间较长。

在 ART 重建计算过程中,对气体浓度添加一

的划分。网格划分较少会导致重建出的图像过于粗糙,而增加网格数目将会增加计算时间,且必须保证有足够数目的吸收方程来对未知数进行求解。考虑到实验中采集到的吸收谱线和方程数量,以及划分网格的便利,将测量区域划分为  $16 \times 16$  的网格,共计未知数  $N=256$ 。根据旋转台摆动过程中得到每组气体吸收信号时激光束所在测量区域内的位置,计算得到激光束穿越每个网格的长度与网格系数矩阵,然后根据气体分布重建算法得到气体分布图像。

## 4 数值计算

假定测量区域内常温常压下的浓度分布模型如图 3(a)所示,根据 4 个旋转台的分布位置、投影射线数量以及网格划分数量等,计算得到(3)式中的网格系数矩阵以及投影矩阵。数值计算中分别采用了 ART,LSQR 方法对气体分布图像进行重建,结果如图 3(b),(c)所示。可见,重建结果与模型结果基本吻合。

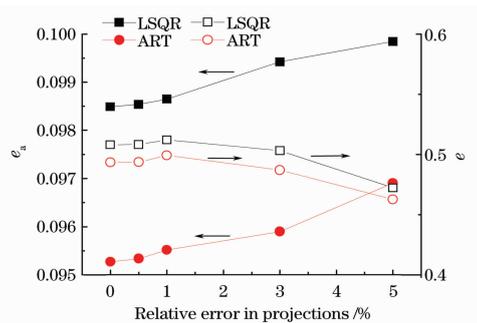


图 4 不同投影数据误差条件下 ART 算法与 LSQR 算法重建结果对比

Fig. 4 Comparison of reconstruction results by ART and LSQR at different errors in projection

定的边界条件:  $0 \leq X \leq X_{\max}$ , 可以有效地限定重建结果的变化范围,改善重建图像质量,如图 3(d)所示。事实上,对于很多实际应用场合,添加一定的

边界条件是符合实际情况的,如气体浓度应该为非负,且低于理论最大值。图 5 给出了图 3(a)中  $y=7$  的一系列网格中,在利用 ART 方法重建过程中添加气体浓度边界条件前后重建结果的对比。可见,添加气体浓度边界条件后,ART 重建结果的最大相对误差与平均误差由原先 0.494 与 0.09527,分别降为 0.373 与 0.041,大大提高了重建结果的准确性。

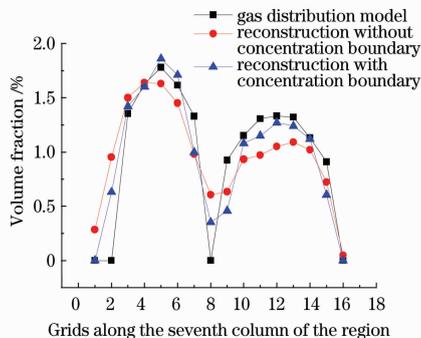


图 5 气体浓度边界条件对于重建结果的影响

Fig. 5 Effect of concentration boundary on reconstruction results

## 5 重建实验研究

在矩形测量区域内放置一直径为 5 cm,高为 14 cm 的小型圆形烟道,用于喷射出预先配置的体积分数为 4% 的  $\text{NH}_3$  气体,从而在测量区域内形成

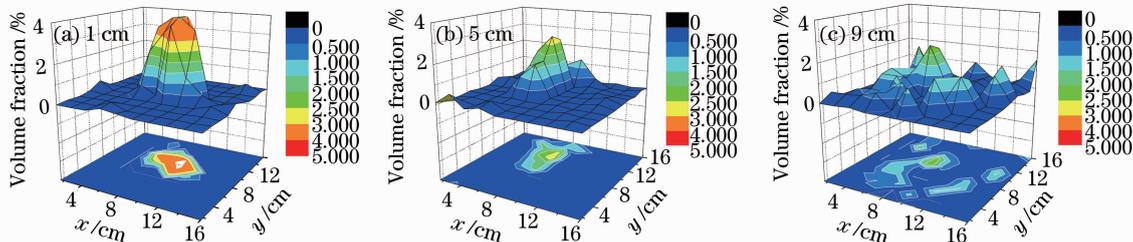


图 7 不同高度的气体浓度分布重建结果

Fig. 7 Reconstruction results of concentration at different distances

可见,随着重建断层距离烟道出口高度的增加,重建得到的气体浓度分布情况变化明显。对于距离  $H=1$  cm 的断层重建结果,其重建出的  $\text{NH}_3$  分布位置形状与实际烟道一致,且气体浓度与真实值较为接近。对于  $H=5$  cm 的断层重建结果, $\text{NH}_3$  分布形状与位置均发生了一定的改变,其浓度在扩散作用的影响下已经有了较大的衰减。对于  $H=9$  cm 的断层重建结果,气体分布已经非常杂乱,分布范围充满了整个重建的测量区域,已经无法判断出烟道的位置,且重建的浓度也更小。这与实际情况非常相符, $\text{NH}_3$  气体从烟道射向自由空间后,其

气体分布图像。通过在烟道下方放置一电动升降台,分别对距离烟道出口 1.5 与 9 cm 断层内的气体组分分布进行重建。测量采用波长中心为 1531.7 nm 的  $\text{NH}_3$  气体吸收谱线,由于光谱数据库中对  $\text{NH}_3$  气体的光谱参数数据并不完全,因此测量过程中的谱线位置参数、谱线强度等参数参照文献[18]中实验得到的数据。旋转台摆动过程中激光器扫描得到的  $\text{NH}_3$  谱线如图 6 所示。

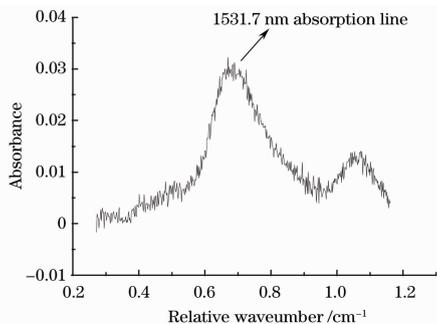


图 6 1531.7 nm 处的  $\text{NH}_3$  气体吸收谱线

Fig. 6 Absorption line of  $\text{NH}_3$  at 1531.7 nm

激光穿越网格长度根据得到激光信号时旋转台的旋转角度以及激光源与测量区域之间的距离来确定。利用采集到一系列如图 6 所示的气体吸收信号,通过(3)式频域内积分后,最终得到(5)式。利用带有浓度边界条件约束的 ART 算法重建得到的不同高度处的气体分布图像如图 7 所示。

速度开始减小,随着重建断层与烟道出口处距离的增加,在空间中的扩散情况越来越严重,从而导致了气体分布范围增大,气体浓度降低。

## 6 结 论

通过设计基于 4 个旋转平台摆动扫描的气体分布重建系统,将吸收光谱技术应用到气体分布测量研究中。利用单一激光源和少量的探测器,可以获得大量的气体吸收投影数据。分别利用 ART 方法以及 LSQR 方法对气体分布模型进行了重建比较,并对气体浓度边界条件对于重建结果的影响进行了

计算。结果表明了测量方法的可行性,通过添加符合实际情况的物理边界条件有助于提高测量结果准确性。重建实验结果表明,随着重建断层距离烟道出口距离的增加,重建出的烟气分布逐步扩散到整个测量区域,与实际情况相符。

### 参 考 文 献

- 1 R. M. Mihalcea, D. S. Baer, R. K. Hanson. Diode laser sensor for measurements of CO, CO<sub>2</sub>, and CH<sub>4</sub> in combustion flows[J]. *Appl. Opt.*, 1997, **36**(33): 8745~8752
- 2 Xia Hui, Liu Wenqing, Zhang Yujun *et al.*. On-line monitoring and analysis of long open-path methane based on laser absorption spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(6): 1454~1458  
夏 慧,刘文清,张玉钧 等. 基于激光吸收光谱开放式长光程的空气中甲烷在线监测及分析[J]. *光学学报*, 2009, **29**(6): 1454~1458
- 3 Li Ning, Yan Jianhua, Wang Fei *et al.*. Effect of linewidth on measurement of CO<sub>2</sub> by wavelength modulation absorption spectrometry using tunable diode laser[J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(10): 1567~1572  
李 宁,严建华,王 飞 等. 光谱线宽对可调谐激光调制吸收光谱技术测量 CO<sub>2</sub> 浓度的影响[J]. *中国激光*, 2008, **35**(10): 1567~1572
- 4 Cui Houxin, Qi Rubin, Chen Wenliang *et al.*. Measurement of oxygen concentration using tunable diode laser absorption spectroscopy and wavelength modulation spectroscopy [J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(10): 1558~1562  
崔厚欣,齐汝宾,陈文亮 等. 可调谐激光波长调制技术检测氧气浓度[J]. *中国激光*, 2008, **35**(10): 1558~1562
- 5 X. Zhou, X. Liu, J. B. Jeffries *et al.*. Development of a sensor for temperature and water concentration in combustion gases using a single tunable diode laser [J]. *Meas. Sci. Technol.*, 2003, **14**(8): 1459~1468
- 6 J. Wang, M. Maiorov, J. B. Jeffries *et al.*. A potential remote sensor of CO in vehicle exhausts using 2.3  $\mu\text{m}$  diode lasers[J]. *Meas. Sci. Technol.*, 2000, **11**(11): 1576~1584
- 7 K. B. Chung, F. C. Gouldin, G. J. Wolga. Experimental reconstruction of the spatial density distribution of a nonreacting flow with a small number of absorption measurements[J]. *Appl. Opt.*, 1995, **34**(24): 5492~5500
- 8 B. Gillet, Y. Hardalupas, C. Kavounides *et al.*. Infrared absorption for measurement of hydrocarbon concentration in fuel/air mixtures (MAST-B-LIQUID) [J]. *Appl. Thermal Eng.*, 2004, **24**(11-12): 1633~1653
- 9 N. Krstajić, S. J. Doran. Fast laser scanning optical-CT apparatus for 3D radiation dosimetry [J]. *Phys. Med. Biol.*, 2007, **52**(11): 257~263
- 10 S. J. Carey, H. McCann, F. P. Hindle *et al.*. Chemical species tomography by near infra-red absorption [J]. *Chem. Eng. J.*, 2000, **77**(1-2): 111-118
- 11 P. Wright, C. A. Garcia-Stewart, S. J. Carey *et al.*. Toward in-cylinder absorption tomography in a production engine [J]. *Appl. Opt.*, 2005, **44**(31): 6578~6592
- 12 E. J. Beiting. Fast optical absorption tomography [J]. *Opt. Lett.*, 1991, **16**(16): 1280~1282
- 13 L. Ma, W. Cai. Numerical investigation of hyperspectral tomography for simultaneous temperature and concentration imaging [J]. *Appl. Opt.*, 2008, **47**(21): 3751~3759
- 14 L. S. Rothman, C. P. Rinsland, A. Goldman *et al.*. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN atmospheric workstation): 1996 edition [J]. *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 1998, **60**(5): 665~710
- 15 Zhuang Tiange. Computed Tomography Theory and Algorithm [M]. Shanghai: Shanghai Jiaotong University Press, 1992  
庄天戈. 1992 CT 原理与算法 [M]. 上海: 上海交通大学出版社, 1992
- 16 C. C. Paige, M. A. Saunders. LSQR: An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares [J]. *AMC T. Math. Software*, 1982, **8**(1): 43~71
- 17 C. C. Paige, M. A. Saunders. LSQR: Sparse linear equations and least squares problems [J]. *AMC T. Math. Software*, 1982, **8**(2): 195~209
- 18 M. E. Webber, D. S. Baer, R. K. Hanson. Ammonia monitoring near 1.5  $\mu\text{m}$  with diode-laser absorption sensors [J]. *Appl. Opt.*, 2001, **40**(12): 2031~2042