

可调谐二极管激光吸收光谱氧气测量中的导数光谱处理与浓度反演算法研究

何俊峰¹ 阚瑞峰² 许振宇² 段连飞¹ 王小中¹

(¹ 陆军军官学院无人机研究所, 安徽 合肥 230031
² 中国科学院环境光学与技术重点实验室, 安徽 合肥 230031)

摘要 氧气是发动机燃烧过程的必需成分,在飞行器进气道进行氧气监测需求迫切。针对飞行器上的工程要求和应用特点,设计了一种波长线性扫描可调谐半导体激光吸收光谱(TDLAS)短光程系统结合有限冲击响应(FIR)滤波二阶导数谱算法的方案完成了氧气吸收微弱信号的提取和浓度反演。根据 TDLAS 工作原理和吸收信号特征,对二阶导数谱用于气体浓度反演的理论依据进行了推导,在此基础上提出一种基于 FIR 的数字滤波方案来完成吸收信号的噪声滤除和二阶导数谱的提取。实验结果证明,该方案简单易行,提高了检测信噪比,降低了检测限,浓度反演结果准确、线性良好。

关键词 光谱学;激光吸收光谱;浓度反演;二阶导数谱;有限冲击响应

中图分类号 O433 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201434.0430003

Derivative Spectrum and Concentration Inversion Algorithm of Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy Oxygen Measurement

He Junfeng¹ Kan Ruifeng² Xu Zhenyu² Duan Lianfei¹ Wang Xiaozhong¹

(¹ *Unmanned Aerial Vehicle Institute, Army Officer Academy, Hefei, Anhui 230031, China*
² *Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China*)

Abstract Oxygen is an essential component of the engine combustion process. It is an urgent demand for aircraft inlet oxygen monitoring. Aiming at aircraft engineering requirements and application characteristics, a short-path wavelength linear scanning tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) system is designed, which complete the weak oxygen absorption signal extraction and concentration inversion combined with the second derivative spectrum algorithm based on finite impulse response (FIR) filter. Theoretical basis for the second derivative spectrum method of gas concentration inversion is deduced according to the absorption signal characteristics and the TDLAS principle. A solution based on the FIR digital filter to complete absorption signal noise filtering and second derivative spectrum extracting is proposed on this basis. Experimental results show that this scheme is simple, the detected signal to noise ratio is improved, and the detection limit is reduced. Inversion results of gas concentration are accurate and linearity is good.

Key words spectroscopy; laser absorption spectroscopy; concentration inversion; second derivative spectra; finite impulse response

OCIS codes 300.1030; 280.1740; 140.2020

1 引言

氧气是大气中含量丰富且又非常重要的气体,

不仅用于维持生命,也为大部分飞机和临近空间飞行器燃烧过程所必需,与飞行器相关的氧气监测有

收稿日期: 2013-10-31; 收到修改稿日期: 2013-12-06

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金(61205151)、国家自然科学基金(611108034)

作者简介: 何俊峰(1980—),男,博士,讲师,主要从事基于激光光谱和激光散射的系统方案、光电信号处理方法等方面的研究。E-mail: ruwhat@163.com

本文电子版彩色效果请详见中国光学期刊网 www.opticsjournal.net

着迫切的需求^[1]。喷气式飞机进气道是捕获空气中的氧气用来供给发动机燃烧的通道。对进气道氧气浓度等参数进行监测、获取氧气的质量流量,可以用来控制发动机燃料供给,优化发动机燃烧,增加发动机动力输出、节省燃料、增加续航时间^[2]。

传统的氧气探测有原电池式、热磁式、氧化锆式等,这些方法稳定性差、响应速度慢、功耗大、工作温度高、抗干扰性差,难以满足飞行器氧气检测的应用需求^[3]。而可调谐半导体激光吸收光谱(TDLAS)被称为最理想的氧气探测技术,有很高的精度、稳定性、抗干扰和环境适应性^[4]。国内外将 TDLAS 方法应用于发动机参数监测和控制方面的研究越来越多^[1-3],在飞行器发动机进气道氧气质量流量监测方面的研究也已经出现^[1]。

由于氧气的吸收光谱线强较弱,为了提高测量精度,通常采用多次反射吸收池加大光程、正弦波调谐加锁相放大,并配合其他复杂信号处理方法来提取微弱的吸收线。这样不仅加大了 TDLAS 系统光学机械和电路结构的复杂程度,也降低了系统工作稳定性,使 TDLAS 氧气测量方案在很多要求系统小型化的应用场合难以适用。本文在考虑飞行器上的工程应用特点的基础上,采用波长线性扫描结合有限脉冲响应(FIR)滤波方案来完成短光程微弱吸收信号的提取和浓度反演。实验证明,本方案在氧气浓度检测方面的应用效果显著。

2 TDLAS 气体浓度测量原理

可调谐半导体激光吸收光谱技术是利用半导体激光器(LD)的波长扫描和电流调谐特性对气体进行测量的一种技术。由于激光辐射波长的单模性,选择被测气体的特定波长的吸收光谱谱线,使得所在波长附近无背景气体其他组分的吸收谱线,从而避免其他气体组分的交叉干扰。

扫描激光输出波长,当波长经过被测气体吸收谱线时,激光能量被吸收。强度为 I_0 , 频率为 ν 的单色激光通过长度为 L 的均匀吸收介质后,在接收端测得的强度为 I , 设 $T(i)$ 为透射率, 满足 Beer-Lambert 定律^[5]:

$$T(\nu) = \left(\frac{I}{I_0} \right)_{\nu} = \exp[-k(\nu) \cdot L], \quad (1)$$

式中光谱吸收系数 $k(\nu)$ 的表达式为

$$k(\nu) = SPc \cdot \Phi(\nu), \quad (2)$$

其中, P 为压力, c 为气体的浓度, S [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{atm}^{-1}$] ($1 \text{ atm} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$) 和 Φ [cm] 分别为气体的吸收线线强和线形。线强是温度的函数, 线型与压力有关。线强大小可以通过分子光谱数据库 HITRAN 进行计算查询, 其单位为 $\text{cm}^{-1}/(\text{molecule} \cdot \text{cm}^{-2})$, 这个单位是吸收的一个基本描述, 但应用在气体浓度测量中不是很方便, 经常用压力和摩尔质量代替分子数, 因此, 线强经常用 $\text{cm}^{-2} \cdot \text{atm}^{-1}$ 作单位, 它们之间的转化关系为

$$S(T)[\text{cm}^{-2} \cdot \text{atm}^{-1}] = S(T)[\text{cm}/\text{molecule}] \cdot \frac{N[\text{molecule}]}{PV[\text{cm}^3 \cdot \text{atm}]} = S(T)[\text{cm}/\text{molecule}] \cdot \frac{7.34 \times 10^{21}}{T[\text{K}]} \left[\frac{\text{molecule} \cdot \text{K}}{\text{cm}^3 \cdot \text{atm}} \right], \quad (3)$$

式中 N 为气体分子数, V 为体积, T 为绝对温度。

O_2 的光谱吸收集集中在 760 nm 附近, 强度为 10^{-24} 量级。常见的测量环境下, 该波长附近还有 H_2O 、 CO_2 、 CO 等气体可能对 O_2 测量造成干扰。经过 HITRAN 数据库计算, H_2O 在 $700 \sim 790 \text{ nm}$ 附近的范围内有多条吸收谱线, 但是在 760 nm 附近并没有发现存在明显的谱线干扰, 而 CO_2 、 CO 气体在 $700 \sim 800 \text{ nm}$ 范围内没有计算到任何吸收谱线, 可以保证在利用 TDLAS 技术现场测量 O_2 过程中各种测量结果不受通常环境中其他气体组分的干扰。综上考虑, 采用 764 nm 分布反馈(DFB)半导体激光器, 在 764.2808 nm 处吸收线强为 $7.435 \times 10^{-24} \text{ cm}/\text{molecule}$ 。

2.1 直接吸收光谱原理

TDLAS 在技术实现上通常根据信号检测方法主要有直接吸收和波长调谐两种方式^[5-8]。无论是系统结构还是反演算法都以直接吸收方式的系统最为简单易行。波长调谐与直接吸收方法相比, 检测灵敏度能够得到提高, 能够满足一些痕量气体测量的需要, 但其局限性也同样明显: 系统复杂、受调谐谐波频率限制^[9]、波长扫描周期较长。

测量 TDLAS 系统的直接吸收光谱, 常用的实现过程如下:

1) 在吸收线所在的一定波长范围内线性改变激光的波长、周期地扫描该段波长, 通常采用锯齿波形进行波长扫描;

2) 激光直接通过测量的气体介质,被光电探测器检测,由于气体的吸收,其强度会发生变化,再对线性扫描结果进行累加平均,可以得到信噪比较高的波长扫描谱线;

3) 直接吸收法的浓度反演过程比较复杂,要利用先进的波长标定和信号处理方法去克服波长扫描非线性 and 光电噪声等影响,再通过对谱线上没有气体吸收的区域进行多项式拟合(一般用到的是二次多项式),从而得到近似的未被吸收的激光强度,由此得到近似的参考光强,利用(1)式,可以计算得到吸光度和待测气体浓度。

直接吸收法的技术实质就是激光波长的线性扫描和吸收线的直接提取。目前常用的直接吸收法的浓度反演过程比较复杂^[5],需要完成未吸收光强信号拟合、完成除法对数和积分运算,而且由于在光强拟合基础上提取的吸收信号信噪比很低,这种实现方法灵敏度低,难以满足低浓度的痕量气体检测的要求。本文旨在研究一种基于波长线性扫描的吸收信号检测和浓度反演方法,使其可以在短光程 TDLAS 系统结构中得到应用。

2.2 基于波长线性扫描的二阶导数谱方法

根据 Lambert-Beer 定律,探测器接收到的光强信号为^[10]

$$I = T(\nu)I_0(\nu), \quad (4)$$

其二阶导数为

$$I'' = T''(\nu)I_0(\nu) + 2T'(\nu)I_0'(\nu) + T(\nu)I_0''(\nu). \quad (5)$$

由于波长扫描过程中采用锯齿扫描,较理想情况下,激光器出光随电流呈线性变换, $I_0''(\nu) = 0$, (5)式中第三项可以直接略去(实际测试过程中由于出光和电流并非线性,该项非零,但远小于第一项),第二项在吸收峰中心位置为 0,其影响为使二阶导数波形不对称(具体形式见实验结果,使两侧极小值高度不同)。

对于压力展宽占优的情形,线形描述为洛伦兹函数,表达式为^[6]

$$\Phi(\nu) = \frac{1}{\pi\Delta_c} \frac{1}{1 + [(\nu - \nu_0)/\Delta_c]^2}, \quad (6)$$

式中 Δ_c 为线形的压力展宽, ν_0 为中心频率。因此光强信号二阶导数第一项中的 $T''(\nu)$ 在中心频率处值为

$$T''(\nu_0) = -SPcL\Phi''(\nu_0) \cdot T(\nu_0). \quad (7)$$

根据(6)、(7)式得

$$\Phi(\nu_0) = \frac{1}{\pi\Delta_c}, \quad (8)$$

$$T(\nu_0) = \exp[-SPcL/(\pi\Delta_c)], \quad (9)$$

$$\Phi''(\nu_0) = \frac{1}{\pi\Delta_c^3}, \quad (10)$$

因此

$$I''(\nu_0) = I_0(\nu_0)T''(\nu_0) = -SPcL \frac{1}{\pi\Delta_c^3} \exp[-SPcL/(\pi\Delta_c)] I_0(\nu_0). \quad (11)$$

由于氧气吸收线强非常弱,这时透射率 $\exp[-SPcL/(\pi\Delta_c)]$ 近似为 1, $I''(\nu_0)$ 与氧气浓度近似呈线性关系,这种近似关系可以大大简化 O_2 浓度的反演算法。经过 HITRAN 数据库计算,在常温常压、光程为 40 cm 的空气中,氧气在吸收峰值位置的吸光度,也就是(1)式中自然指数函数中的指数部分的绝对值约为 0.01。由此可知以上线性近似造成的浓度计算误差小于 1%。(11)式表明特征吸收气体均匀分布且温度压力和光程一定时,该气体浓度与探测器接收光强的二阶导数近似呈线性关系,可以通过(4)~(11)式来计算气体浓度。

为了验证提出的基于 TDLAS 的二阶导数谱气体测量方法,研究过程中搭建了实验平台,整个系统及电路部分原理分别如图 1 所示。

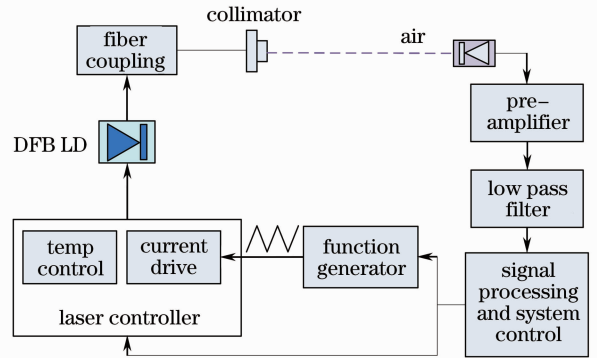


图 1 TDLAS 氧气浓度测量系统框图

Fig. 1 TDLAS oxygen measuring system chart

光源为中心波长在 764 nm 附近的 Nanoplus DFB 半导体激光器,激光器的电流驱动、温度控制和调谐信号生成电路完成激光器的精密电流调谐、温度控制和工作保护,探测器采用硅光电二极管,光源和探测器主要参数如表 1 所示。进行 O_2 测量时,信号发生电路产生锯齿扫描信号使输出激光波长在 764 nm 附近线性扫描,输出的光束通过准直器准直后,射入 40 cm 长的目标探测气体吸收池内,透射出的带有待测气体吸收线的光信号由光电探测器配合低噪声前置放大和低通滤波电路转化为电压信号,该电压信号经模拟数字转换器(A/D)采集和累积平均之后用于浓度、温度等反演。考虑到直接吸

收信号信噪比较低的实际情况及其二阶导数谱与待测气体浓度的线性关系,为了进一步提高用于浓度反演信号的信噪比,简化反演算法,此处考虑采用数

字滤波技术来完成吸收信号的噪声滤除和二阶导数谱的提取。

表 1 光源和探测器相关参数
Table 1 Laser and detector parameters

Laser type	Center wavelength /nm	Output power /mW	Detector type	Responsive wavelength /nm	Noise equivalent power / (W/\sqrt{Hz})
DFB LD	764.3	2	Si PIN	350~1100	1.2×10^{-14}

3 用 FIR 滤波实现二阶导数谱

数字滤波器的种类很多,根据冲击响应特性可分为有限区间冲击响应滤波器 FIR 和无限区间冲击响应滤波器无限脉冲响应(IIR)两大类。IIR 型滤波器是一种递归型滤波器,有反馈、与模拟滤波器有对应关系、滤波器的阶次可以很低,但其缺点是要考虑系统稳定性、易溢出、实现难度较大。FIR 类滤波器通常是非递归型滤波器,没有反馈,但需要较高的滤波器阶次,其主要优点是线性相位、稳定性好、硬件易实现。

此处考虑采用 FIR 结构的滤波器来实现吸收信号的二阶导数谱提取,二阶导数可以由两级 FIR 微分器级联得到,两级微分器之间辅以滑动平均滤

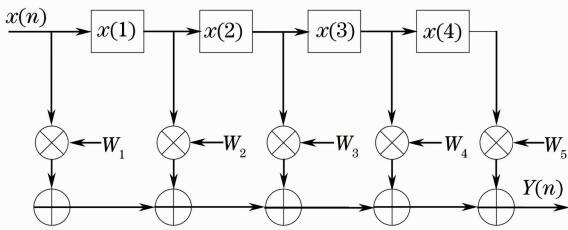


图 2 5 抽头 FIR 滤波结构
Fig. 2 5-tap FIR filtering structure

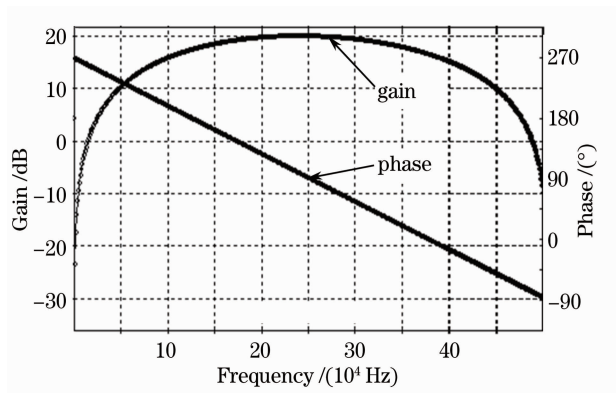


图 3 FIR 微分器频率响应特性
Fig. 3 Frequency response of FIR differentiator

波去噪。FIR 微分器的阶次对微分效果影响明显,阶次越低实现越容易、性能越差,对高频噪声非常敏感,阶次越高时延越大、实现越复杂,但是能够大大提高处理后导数谱的信噪比。经过实验验证,此处考虑采用 5 抽头 FIR 微分器结构,如图 2 所示,抽头权重 $W_i (i=1,2,3,4,5)$ 依次为 $-0.2, -5, 0, 5, 0.2$ 。该结构具有典型的带通和线性相位特性,微分器幅频和相位特性如图 3 所示。根据以上二阶导数谱推导过程,浓度反演算法流程如图 4 所示。首先对浓度反演过程中参与运算的参数(主要包括两级微分运算 FIR 滤波器的抽头系数、滑动平均滤波参

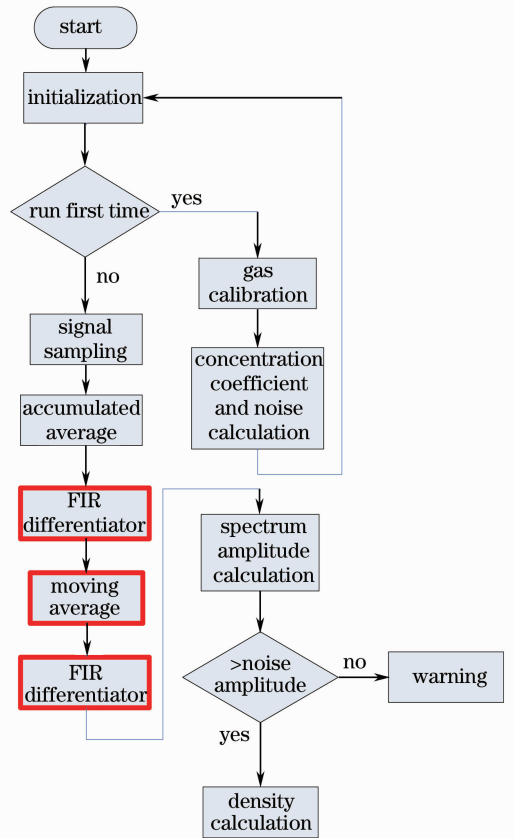


图 4 二阶导数谱浓度反演算法流程
Fig. 4 Second derivative spectrum concentration inversion algorithm flow

数、导数谱幅度-气体浓度拟合直线斜率等)进行初始化,其中导数谱幅度-气体浓度拟合直线斜率可以考虑在系统首次工作前用标准浓度气体(常温常压下空气中氧气体积分数约为 21%)来标定。探测器接信号 A/D 采集后先进行累积平均去噪,再进行两级微分运算(经验证,两级微分运算可以采用相同滤波器结构来简化算法),其间利用滑动平均去噪。最后,在波长扫描范围内(此处采用第二条谱线)计算最大值以确定二阶导数谱幅度,再将此幅度除以导数谱-气体浓度拟合直线斜率,得到的就是待测气体浓度。

4 算法的实验验证

为验证二阶导数谱浓度反演算法的可行性,利用该算法对以上 TDLAS 实验系统获取的 O_2 吸收信号进行了处理。实验装置主要参数包括:激光调制信号 1 kHz 锯齿;吸收光程 40 cm; A/D 采集精度 14 bit, 采样率 $1 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$; O_2 标准气体体积分数 1%、5%、10% 和 21%。为了保证吸收池内 O_2 气体浓度的准确无误,每次测量不同浓度 O_2 之前,先用纯 N_2 充满吸收池再持续充入待测气体。

图 5(a)~(c)分别为波长扫描吸收信号(经过了低通滤波和 64 次平均)、直接吸收法反演的吸光度和二阶导数谱。由于 O_2 在 764 nm 附近的吸收线比较弱,而且各种光电背景噪声比较强,检测到的波长扫描信号中 O_2 吸收较弱、特征不明显,再加上扫描锯齿的非线性,该信号不能直接用于浓度反演。经过对扫描锯齿的二次多项式拟合,可以有效消除锯齿扫描的非线性因素,利用拟合结果去除扫描信号再取对数可以得到吸光度,结果如图 5 所示,由此可见,直接吸收法获得的吸光度信噪比较低(经统计计算约 20 dB),这样加大了浓度反演算法的难度、增加了反演结果的误差、提高了氧气浓度检测限。

综上,二阶导数谱和浓度是线性关系,二阶导数谱通过微分算法不但消除了锯齿扫描非线性对浓度反演的影响而且大大抑制了背景噪声,从而使微弱的氧气吸收信号特征更加突出。经实验中 A/D 采集数据统计计算,二阶导数谱信噪比接近 40 dB,与直接吸收法相比,信噪比改善约 20 dB。结合实验数据和浓度反演结果,可得该实验条件下直接吸收法的氧气浓度最低检测限约为 2%,而二阶导数谱法的最低检测限可达 0.2%。

利用该实验装置和算法对不同体积分数的 O_2 (常温 25 $^{\circ}\text{C}$, 1 atm, 1%、5%、10% 和 21%)进行了

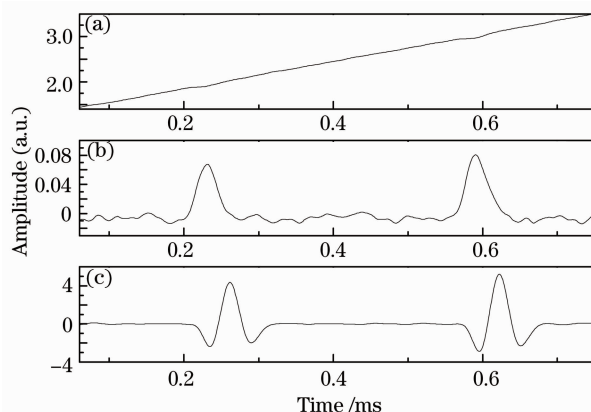


图 5 (a)波长扫描吸收信号;(b)直接吸收法反演的吸光度;(c)二阶导数谱

Fig. 5 (a) Wavelength scanning absorbed signal; (b) absorbance of direct absorbing inversion; (c) second derivative spectrum

测量,直接吸收法反演得到的吸光度和本研究中算法得到的二阶导数谱结果分别如图 6、7 所示,并对不同浓度反演结果进行了线性拟合,如图 8 所示。

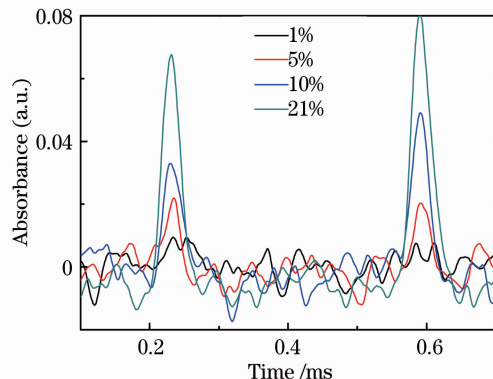


图 6 不同浓度的直接吸收法反演吸光度
Fig. 6 Absorbances of direct absorbing inversion of different concentrations

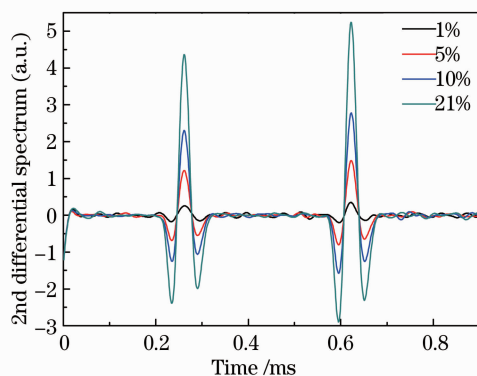


图 7 不同浓度的二阶导数谱
Fig. 7 Second derivative spectra of different concentrations

可见平均和滤波处理后的二次多项式拟合残差中吸收线的信噪比仍然比较低,高浓度情况下吸收线相对明显,但是用于浓度反演时误差较大,低浓度时吸收线基本被背景噪声淹没;二阶导数谱中的吸收信号信噪比得到明显改善,吸收信号特征非常突出,低浓度气体时优势更为明显。利用该算法得到的导数谱幅度和已知标准气体浓度进行比较,线性拟合校正决定系数为 0.99571,拟合线性度良好,可见该算法适用于光程较短、吸收较弱的氧气浓度反演。

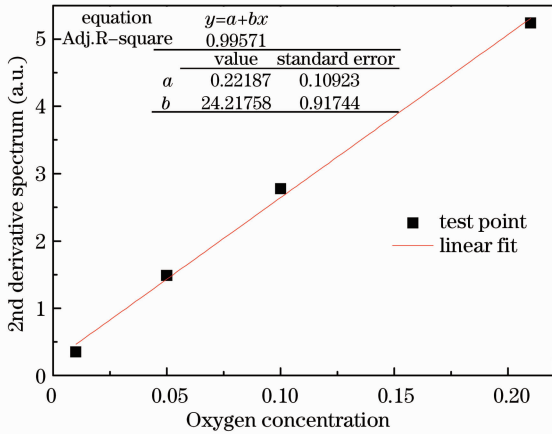


图 8 二阶导数谱法浓度反演结果线性拟合

Fig. 8 Linear fit of second derivative spectroscopy inversion results

5 结 论

考虑到氧气吸收信号特点和直接吸收法的局限性,设计了一种波长线性扫描 TDLAS 短光程实验装置来进行氧气浓度测量。在证明氧气光谱吸收信号的二阶导数与其浓度近似呈线性关系的基础上,提出了一种用两级 5 抽头 FIR 微分器结合平滑滤波的数字滤波方案来完成吸收信号的噪声滤除和二阶导数谱的提取。标准气体测量实验证明,与直接吸收法结合二次多项式拟合的氧气浓度反演算法相比,该方案将吸收信号信噪比提高了 20 dB,将浓度检测限降低到直接吸收法的 1/10,结构简单、测量准确,为飞行器发动机的燃烧过程监测提供了技术支持。

参 考 文 献

- Xin Zhou. Diode-Laser Absorption Sensors for Combustion Control [M]. Stanford: Stanford University, 2005.
- A D Sappey, L Sutherland, D Dwenby, *et al.* Flight-Ready TDLAS Combustion Sensor for the HIFiRE 2 Hypersonic Research Program [R]. Zolo Technologies Final Report for Period 1, 2006.
- E Schlosser, J Wolfrum, V Ebert, *et al.* In-situ determination of molecular oxygen concentrations in full-scale fire suppression tests using TDLAS [J]. Proc Combust Inst, 2002, 29(1): 353-360.
- Zhang Shuai, Dong Fengzhong, Zhang Zhirong, *et al.* Monitoring of oxygen concentration based on tunable diode laser absorption spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(10): 2593-2596.
张 帅,董凤忠,张志荣,等. 基于可调谐半导体激光吸收光谱的氧气测量方法的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(10): 2593-2596.
- Xu Zhenyu, Liu Wenqing, Kan Ruifeng, *et al.* Study on the arithmetic of absorbance inversion based on tunable diode-laser absorption spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(8): 2201-2204.
许振宇,刘文清,闾瑞峰,等. 可调谐半导体激光吸收光谱中的吸光度反演算法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(8): 2201-2204.
- Fan Fengying, Song Zengyun. Measurement of CO₂ concentration with tunable diode laser absorption spectroscopy near 2 μm [J]. Chinese J Lasers, 2012, 39(2): 0215002.
范凤英,宋增云. 2 μm 附近二极管激光吸收光谱 CO₂ 浓度测量研究[J]. 中国激光, 2012, 39(2): 0215002.
- Li Suning, Zhu Rihong, Li Jianxin, *et al.* Discussion about the spectral resolution of the Sagnac interference imaging spectrometer caused by offset of the Sagnac prism [J]. Journal of Atmospheric and Environmental Optics, 2009, 4(3): 223-228.
李苏宁,朱日宏,李建欣,等. TDLAS 氧气检测中谐波信号特性研究[J]. 大气与环境光学学报, 2009, 4(3): 223-228.
- 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.
- Chen Jiuying, Liu Jianguo, He Yabai, *et al.* Scanning frequency optimization of laser absorption spectroscopy [J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(2): 0230003.
陈玖英,刘建国,何亚柏,等. 激光吸收光谱技术中扫描频率的选择[J]. 光学学报, 2013, 33(2): 0230003.
- Chen Jiuying, Liu Jianguo, He Yabai, *et al.* Temperature measurement of CO₂ by use of a distributed-feedback diode laser sensor near 2.0 μm [J]. Chinese J Lasers, 2012, 39(11): 1108004.
陈玖英,刘建国,何亚柏,等. 基于分布反馈激光器在 2.0 μm 波段对 CO₂ 气体温度的测量[J]. 中国激光, 2012, 39(11): 1108004.

栏目编辑: 史 敏