

一种单光谱吸收积分吸光度快速计算方法及应用

鲁一冰^{1,2}, 刘文清¹, 张玉钧^{1*}, 张恺^{1,2}, 余冬琪^{1,2}

¹中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光学与技术重点实验室, 安徽 合肥 230031;

²中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026

摘要 可调谐半导体激光吸收光谱技术(TDLAS)作为一种痕量气体精确检测的方法,已广泛应用于生活生产之中,该方法可通过积分吸光度与气体浓度的线性关系准确反演待测气体的浓度。环境变化和系统噪声等易造成吸光度曲线发生变形,故需对吸光度曲线进行非线性拟合,将其回归至 Voigt 模型。设计并搭建了基于 TDLAS 的 CO 实时在线监测系统,在此平台基础上,提出了一种三角替代 Voigt 线型单光谱积分吸光度的快速计算方法,并与高斯-埃尔米特方法进行对比。结果表明:三角替代方法浓度反演精度仅下降 0.11%,平均计算耗时缩短 84.19%;三角替代 Voigt 线型拟合方法以极小的精度损失,大幅提高了线型拟合的运算速度。

关键词 光谱学; 可调谐半导体激光吸收光谱技术; Voigt 线型拟合; 三角替代方法; 高斯-埃尔米特方法

中图分类号 TH744.12

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201838.1214001

A Fast Calculation Method of Single Spectral Absorption Integral Absorbance and Its Application

Lu Yibing^{1,2}, Liu Wenqing¹, Zhang Yujun^{1*}, Zhang Kai^{1,2}, Yu Dongqi^{1,2}

¹Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China;

²University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230031, China

Abstract Tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS), as an accurate detection method for the trace gases, has been widely used in the life and production. It can accurately inverse the gas concentration through the linear relation between the integral absorbance and the gas concentration. The changes in the environment and the system noise tend to cause the deformation of the absorbance curve. Therefore, it is necessary to do the nonlinear curve fitting on the absorbance curve to make it return to the Voigt model. A real-time online monitoring system for carbon monoxide based on TDLAS has been designed and built. With the platform, a fast calculation method with the triangular Voigt linetype fitting for the single spectral integral absorbance has been put forward and compared with the Gauss-Hermite method. The accuracy of the proposed method is only 0.11% lower, but the average computation time is shortened by 84.19%. The experimental results show that the triangular Voigt linetype fitting method can greatly improve the fitting speed only with the minimal accuracy loss.

Key words spectroscopy; tunable diode laser absorption spectroscopy; Voigt linetype fitting; triangular fitting method; Gauss-Hermite method

OCIS codes 140.5960; 300.6260; 000.3860

1 引 言

可调谐半导体激光吸收光谱技术(TDLAS)具有灵敏度高、响应速度快、选择性强等特点,已成为痕量气体浓度检测的常用方法之一。TDLAS 的工

作原理是应用可调谐二极管激光器的波长连续调谐特性,通过改变驱动激光器的电流来改变激光器的输出波长,从而扫描待测气体的特征吸收线,其中的直接吸收方法是通过标定气体吸收光谱的积分吸光度与气体浓度的线性关系来精确反演气体浓度

收稿日期: 2018-05-24; 修回日期: 2018-06-25; 录用日期: 2018-07-03

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFC0201000)、安徽省科技重大专项(15czz04124)、安徽省自然科学基金面上项目(1808085MD107)

* E-mail: yjzhang@aiofm.ac.cn

的^[1-5]。气体分子的标准吸收线型为 Voigt 线型,它会受到光强波动、激光器噪声、干涉现象噪声等的影响,从而导致吸光度曲线与标准吸收谱线有很大差别^[6]。在 TDLAS 直接吸收方法中,需要对吸光度曲线进行非线性拟合,将其回归至 Voigt 线型,从而更加准确地计算积分吸光度。由于 Voigt 函数较为复杂,为简化运算过程,通常在保证精度的前提下使用较为简单的模型替代 Voigt 线型模型^[7-8]。Flores-Llamas 等^[9]使用洛伦兹函数和其倒数的和来替代 Voigt 线型,Puerta 等^[10]使用 2~4 个洛伦兹函数的和重构 Voigt 函数,高彦伟等^[11]将 Puerta 等重构的 Voigt 函数用于吸光度曲线拟合。在光谱吸收线型分析中,常使用高斯-埃尔米特方法对 Voigt 线型进行拟合,其优点在于拟合精度高,但是因其计算过程中的迭代次数过多,耗时过长,在高危气体泄漏检测等应用中难以满足对系统响应时间的要求,故本文考虑将三角替代法应用于光谱吸收线型的拟合中。

本文首先介绍了 TDLAS 直接吸收方法的原理,并基于 TDLAS 直接吸收原理设计、搭建了一氧化碳(CO)实时在线检测系统。以此系统作为实验平台,使用 Levenberg-Marquardt (L-M) 法搭配 Voigt 线型替代模型对实测的吸光度曲线进行非线性拟合及浓度反演,在吸光度曲线拟合线型、归一化拟合残差、算法运算时间、浓度反演精度等方面对高斯-埃尔米特方法和三角替代方法进行比较。

2 基本原理

2.1 TDLAS 直接吸收原理

根据 Lambert-Beer 定律,当红外光通过一段气体介质时,由于气体的吸收作用,光强会发生衰减,即

$$I_t(v) = I_0(v) \exp(-k_v L), \quad (1)$$

式中: $I_0(v)$ 为入射光强; $I_t(v)$ 为透射光强; v 为入射光的频率; L 为有效吸收光程; k_v 为光谱吸收系数。对于单一气体的单一跃迁而言,有

$$k_v = S(T) \phi(v) p m, \quad (2)$$

式中: $S(T)$ 为温度 T 时的吸收线强; p 为气体压力; m 为吸收气体的摩尔分数; $\phi(v)$ 为吸收线的归一化线型函数。

实际中常利用吸光度来描述目标气体的吸收特性,定义吸光度 α_v 为

$$\alpha_v = \ln \left[\frac{I_0(v)}{I_t(v)} \right] = k_v L = S(T) \phi(v) p m L. \quad (3)$$

对吸光度 α_v 进行积分就可得到吸收谱线的积分面积,即积分吸光度 A 为

$$A = \int a_v dv = S(T) p m L. \quad (4)$$

在温度、压力、光程已知的情况下,利用积分吸光度或吸光度峰值,可以进行气体浓度的反演。根据(4)式可得

$$m = \frac{A}{S(T) p L}. \quad (5)$$

由此,可利用实验中标气定标的方式反演待测气体的体积分数 c ,其表达式为

$$c = \frac{A_m}{A_{std}} \frac{L_{std}}{L_m} c_{std}, \quad (6)$$

式中: c_{std} 为标气的体积分数; L_{std} 为标注气体样品品池的光程; A_{std} 为标气的积分吸光度; L_m 为待测气体光程; A_m 为待测气体吸收线型的积分吸光度。基于半导体激光吸收光谱技术的气体浓度反演算法流程如图 1 所示。

2.2 吸光度曲线拟合方法

Voigt 线型为高斯线型 ϕ_{Gauss} 和洛伦兹线型 ϕ_{Lorentz} 的卷积,其中

$$\phi_{\text{Lorentz}}(v) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{(v - v_0)^2 + \gamma_L^2}, \quad (7)$$

$$\phi_{\text{Gauss}}(v) = \frac{1}{\gamma_G} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp \left[\ln 2 \frac{(v - v_0)^2}{\gamma_G^2} \right], \quad (8)$$

式中: γ_L 为洛伦兹线型的半峰全宽(FWHM); γ_G 为高斯线型的半峰全宽; $v - v_0$ 为到中心频率的距离。

定义 x 为频率刻度, y 为洛伦兹线型和高斯线型的宽度比,则

$$y \equiv \frac{\gamma_L}{\gamma_G} \sqrt{\ln 2}, \quad (9)$$

$$x \equiv \frac{v - v_0}{\gamma_G} \sqrt{\ln 2}. \quad (10)$$

Voigt 线型表达式 $\phi_v(v)$ 为:

$$\begin{aligned} \phi_v(v) &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\text{Lorentz}}(v - t) \phi_{\text{Gauss}}(t) dt = \\ &= \frac{\gamma_L}{\gamma_G^2} \frac{\ln 2}{\pi^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{\left(\frac{v - v_0}{\gamma_G} \sqrt{\ln 2} - t \right)^2 + \left(\frac{\gamma_L}{\gamma_G} \sqrt{\ln 2} \right)^2} dt = \\ &= \frac{1}{\gamma_G} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{(x - t)^2 + y^2} dt = \\ &= \frac{1}{\gamma_G} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} K(x, y), \end{aligned} \quad (11)$$

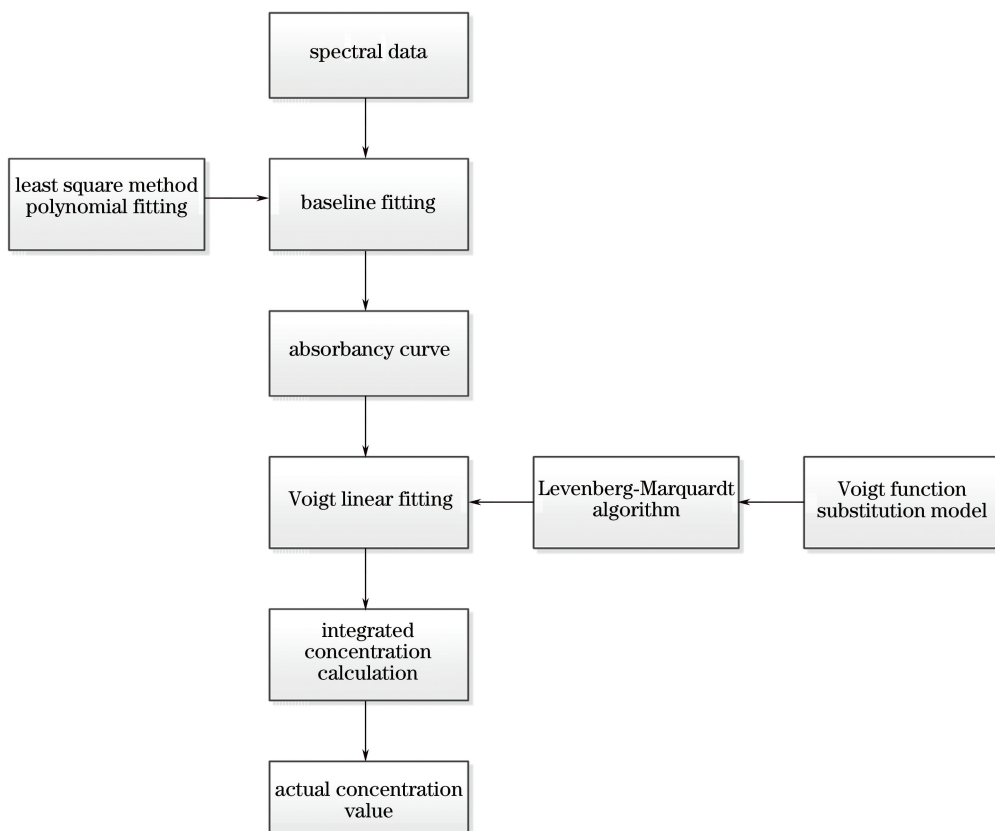


图 1 TDLAS 浓度反演算法流程图

Fig. 1 Flow chart of TDLAS concentration inversion algorithm

式中: t 为卷积的条件; $K(x, y)$ 为归一化 Voigt 函数, 其表达式为

$$K(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{y^2 + (x-t)^2} dt. \quad (12)$$

2.2.1 高斯-埃尔米特方法

由于 Voigt 函数计算过于复杂, 在对光谱进行拟合时, 通常使用较为简单的公式替代 Voigt 函数。在光谱处理领域, 通常使用高斯-埃尔米特方法^[12-13]对 Voigt 函数进行替换, 其原理为

$$K_{GH}(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-t^2) f(t) dt \approx \frac{y}{\pi} \sum_{i=1}^n \omega_i f(t_i), \quad (13)$$

式中: n 为采样点数; t_i 为 n 点埃尔米特的解; ω_i 为高斯积分法的权值, 其表达式为

$$\omega_i = \frac{2^{n-1} n! \sqrt{\pi}}{n^2 [H_{n-1}(t_i)]^2}. \quad (14)$$

参数 H_{n-1} 满足递推公式:

$$\begin{cases} H_{-1} = 0 \\ H_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} \\ \vdots \\ H_n = \sqrt{2n} H_{n-1} \\ H_{n+1} = x \sqrt{\frac{2}{n+1}} H_n - \sqrt{\frac{n}{n+1}} H_{n-1} \end{cases}. \quad (15)$$

2.2.2 三角替代方法(TRI)

使用闭合三角型函数替代 Voigt 函数中的高斯函数部分, 三角替代方法示意图如图 2 所示, 将与高斯线型等面积和等半宽作为约束条件, 可得到以下近似式^[14]:

$$f(t) = \exp(-t^2) \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\ln 2}} \left[1 - \frac{|t|}{2\sqrt{\ln 2}} \right], \quad |t| \leq 2\sqrt{\ln 2}. \quad (16)$$

将(16)式代入(12)式, 可得

$$K_{TRI}(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{y^2 + (x-t)^2} dt = \frac{y}{\pi} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\ln 2}} \int_{-2\sqrt{\ln 2}}^{2\sqrt{\ln 2}} \frac{1 - |t|/2\sqrt{\ln 2}}{y^2 + (x-t)^2} dt = \frac{y}{2\sqrt{\pi \ln 2}} D_{TRI}(x, y, 2\sqrt{\ln 2}), \quad (17)$$

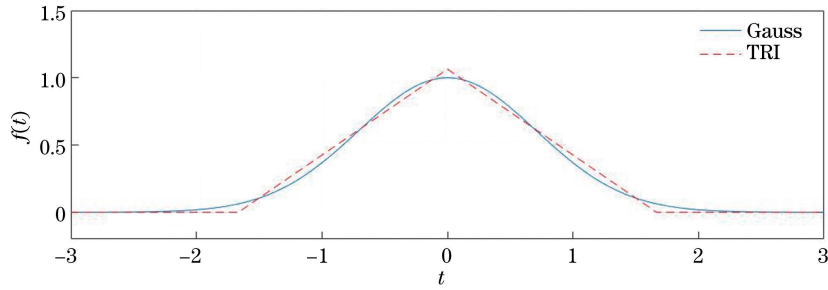


图 2 三角替代方法示意图

Fig. 2 Schematic of triangular function

其中

$$D_{\text{TRI}}(x, y, \tau) = \int_{-\tau}^{\tau} \frac{1 - |t|/\tau}{y^2 + (x-t)^2} dt = \frac{\tau-x}{\tau y} \arctan \frac{\tau-x}{y} + \frac{\tau+x}{\tau y} \arctan \frac{\tau+x}{y} - \frac{2x}{\tau y} \arctan \frac{x}{y} + \frac{1}{\tau} \ln(x^2 + y^2) - \frac{1}{2\tau} \{ \ln[(x+\tau)^2 + y^2] + \ln[(x-\tau)^2 + y^2] \}, \quad (18)$$

式中: $\tau = 2\sqrt{\ln 2}$ 。

综上, Voigt 函数可用高斯-埃尔米特和三角替代法重构, 分别将 K_{GH} 和 K_{TRI} 代入(11)式, 并考虑到吸收光谱中的直流分量和线型幅值, 两种 Voigt 重构模型最终形式为

$$y_{\text{GH}}(n) = y_0 + V \frac{2\ln 2}{\pi^{3/2}} \frac{\gamma_L}{\gamma_G} \sum_{i=1}^n \omega_i f(t_i), \quad (19)$$

$$y_{\text{TRI}}(x, y) = y_0 + V \frac{\sqrt{\ln 2}}{2\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_G^2} D_{\text{TRI}}(x, y, 2\sqrt{\ln 2}), \quad (20)$$

式中: y_0 为可能存在的直流分量; V 为幅度权重。

现从公式复杂度上分析两种 Voigt 重构模型。高斯-埃尔米特模型包含 n 组累加, n 取决于所选的采样点数, 一般较大, 同时每项累加式中包含迭代求解过程, 因此, 相比于三角替代模型, 高斯-埃尔米特模型的计算量较大。由于两种模型均较为复杂, 难以通过理论分析评估其复杂度, 故设计实验如下: 在同样的硬件环境下, 使用 LabVIEW 语言编写两种模型, 并运行 10000 次, 比较其平均运行速度。实验结果表明, 高斯-埃尔米特模型平均单次运行耗时 1130 μs , 三角替代模型平均单次运行耗时 254 μs 。

2.3 L-M 算法

2.2 节中列举了高斯-埃尔米特方法、三角替换方法重构的 Voigt 模型, 由(19)式和(20)式可知, 两个模型均有 4 个参数变量: y_0 、 V 、 γ_L 、 γ_G 。常用的非线性拟合算法有逆黑塞矩阵算法、最速下降法和 L-M 算法^[15]。L-M 算法作为另两种算法的结合, 不管参数现值与最佳参数距离的远近, 均表现优异, 是

解决非线性最小二乘法问题最有效的方法之一。L-M 算法流程图如图 3 所示, 其中, $a = \{y_0, V, \gamma_L, \gamma_G\}$, $\chi^2(a)$ 为优值函数, λ 为每次迭代的参数增量, δ_a 为 a 的优化增值。

3 实验及分析

搭建了基于 TDLAS 的 CO 实时在线检测系统, 激光器由温控、电流控制模块驱动输出激光, 出射的激光由光纤连接至 White 型多次反射池, 激光经多次反射池内气体吸收后, 由信号放大与滤波模块进行处理, 最后被数据采集卡采集, 送入上位机软件进行光谱处理及浓度反演。系统中激光器选用中心波长为 2.3 μm 的分布反馈(DFB)激光器, 该激光器在 25 $^{\circ}\text{C}$ 时的测量波长为 2331.8 nm, 输出波长范围为 2330.5 ~ 2333.5 nm, 覆盖了 CO 气体分子于 2331.9 nm 处的吸收线, 可以实现单根吸收线的扫描测量。探测器部分选用截止波长为 2.6 μm 的 InGaAs 光电探测器, 其频率响应带宽为 16 MHz, 结电容为 270 pF。考虑到系统探测精度、灵敏度和数据采集模块的兼容性问题, 选用 NI 公司的 USB-6212 数据采集卡, 其最大采样率为 400 kSa/s, 模拟输入精度为 16 位。系统中采用波长扫描的方式, 重复扫描气体的吸收线, 当激光器工作在恒定的温度下时, 由锯齿波电路对控制激光器的电流进行调谐, 激光器出射的波长即可扫描待测气体的单根吸收线, 从而产生输出光幅度的线性变化, 这称为“基线背景”。实验中本课题组采用幅值为 0.4 V、频率为 100 Hz 的锯齿波信号作为电流扫描波形, 设置采样

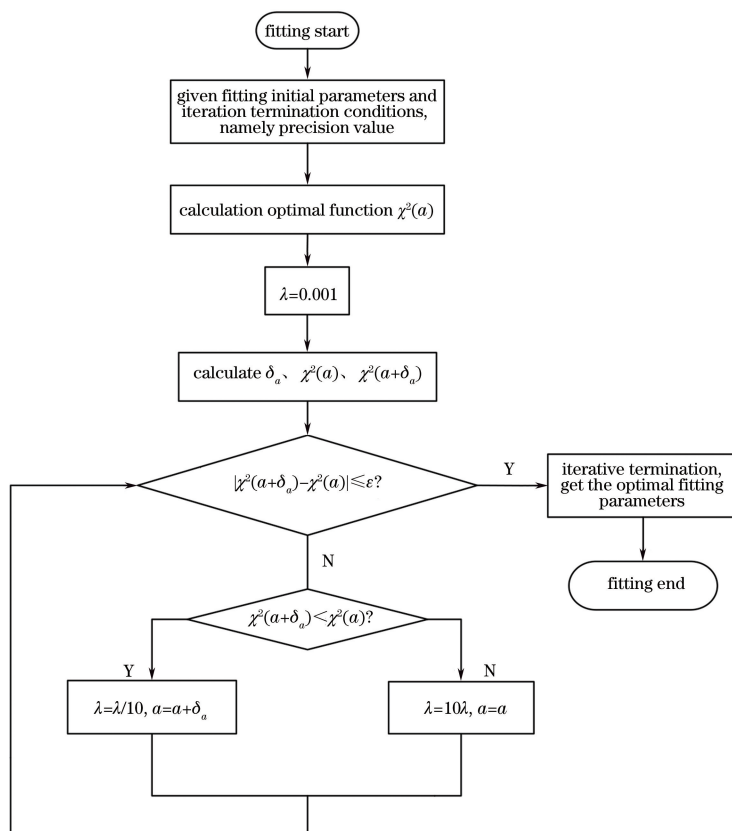


图 3 L-M 算法流程图

Fig. 3 Flow chart of L-M algorithm

速率为 200 kSa/s。在 4 核 8 线程且基本频率为 2.6 GHz 的 CPU、内存为 16 GB 的工控机上运行后得到实验数据,系统软件使用 LabVIEW 语言开发完成。使用开发的上位机软件对系统采集到的光谱数据进行 16 次数字平均处理,以增加所获得的光谱信号的信噪比。分别使用高斯-埃尔米特方法和三角替代方法对 8 个浓度梯度(体积分数为 $2 \times 10^{-6} \sim 96 \times 10^{-6}$)的 CO 吸光度曲线进行 Voigt 线型拟合。其中, 8×10^{-6} 、 16×10^{-6} 、 24×10^{-6} 、 48×10^{-6} 线型拟合结果及残差如图 4 所示,从拟合残差角度分析两种拟合方法。内插图分别显示了两种不同拟合方法在线型峰处、右翼处的拟合效果。由图 4 可知:两种拟合方法所得结果在吸收曲线线型、吸收峰值幅度和位置、残差分布上均无显著差异;在线型首末、吸收峰、两翼处的拟合残差稍大。由两种拟合方法在这些位置残差的一致性可以判断出:残差是由光谱本身噪声引起的。图中标明的 y_0 、 V 、 γ_L 、 γ_G 为使用三角替代法拟合时的参数。

由于吸光度曲线的幅值与体积分数呈线性关系,定义残差与气体体积分数的比值为归一化残差,以比对拟合结果与原始光谱的拟合误差。三角替代

方法和高斯-埃尔米特方法在不同浓度梯度 CO 气体测试集合上的归一化拟合残差如图 5 所示。可见,归一化拟合残差随系统信噪比的上升而下降,三角替代方法的归一化残差在 CO 体积分数为 2×10^{-6} 时最高,为 8.4452×10^{-8} ;在 96×10^{-6} 时最低,为 4.7289×10^{-8} 。高斯-埃尔米特方法的归一化残差在 CO 体积分数为 2×10^{-6} 时最高,为 7.8421×10^{-8} ;在 96×10^{-6} 时最低,为 4.4730×10^{-8} 。随着 CO 体积浓度从 96×10^{-6} 降为 2×10^{-6} (即信噪比从高至低),三角替代方法与高斯-埃尔米特方法的归一化残差比从 1.0572 增至 1.0769,表明高斯-埃尔米特方法比三角替代方法的抗噪声能力稍强。三角替代方法的归一化拟合残差的均值比高斯-埃尔米特方法的高 6.45%。

选用体积分数为 8×10^{-6} 时的光谱数据分别进行 50 次拟合运算,统计得到的拟合结果的归一化残差如图 6 所示。三角替代法归一化拟合残差的方差为 2.0443×10^{-22} ,高斯-埃尔米特方法的归一化残差的方差为 1.5712×10^{-22} 。故认为,高斯-埃尔米特方法在对同一条曲线拟合时,得到的结果稳定度稍高。

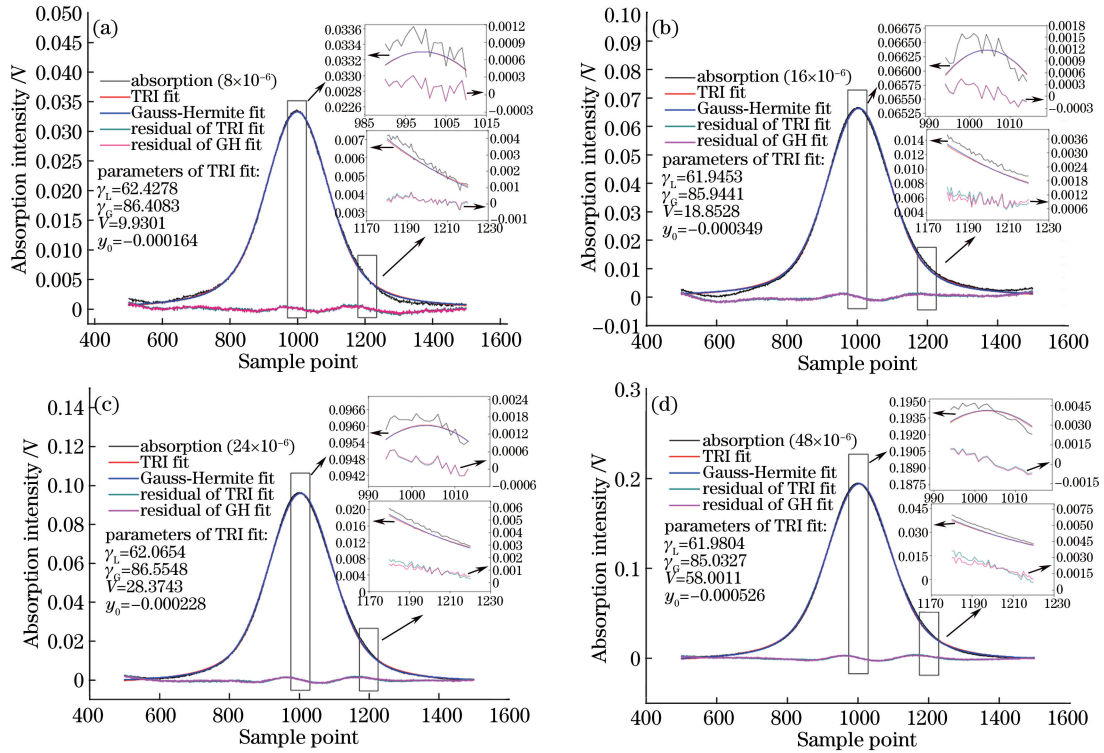


图 4 不同体积分数 CO 吸光度曲线的拟合结果。(a) 8×10^{-6} ; (b) 16×10^{-6} ; (c) 24×10^{-6} ; (d) 48×10^{-6}

Fig. 4 Fitted absorbance curves of CO with different volume fractions. (a) 8×10^{-6} ; (b) 16×10^{-6} ; (c) 24×10^{-6} ; (d) 48×10^{-6}

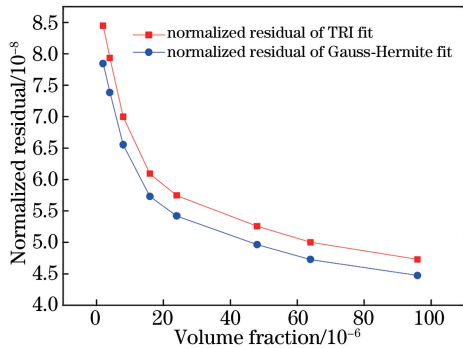


图 5 两种拟合方法的归一化残差

Fig. 5 Normalized residual comparison using two fitting methods

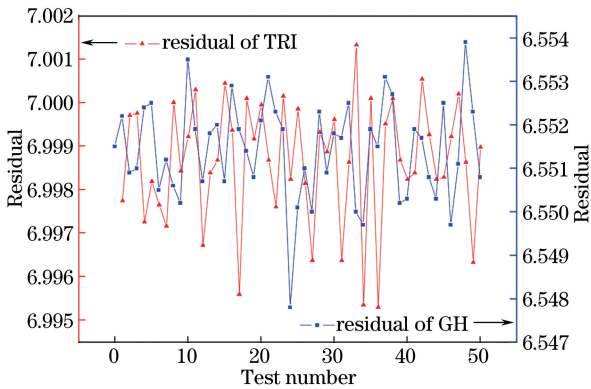


图 6 体积分数为 8×10^{-6} 的 CO 的吸收光谱使用两种拟合方法拟合 50 次的归一化残差

Fig. 6 Normalized residual of absorption spectrum of CO with volume fraction of 8×10^{-6} using two different methods

对吸光度曲线进行拟合过程中统计两种方法的计算耗时,结果如图 7 所示,三角替代法的运算速度明显优于高斯-埃尔米特方法,平均耗时仅为后者的 15.81%,与 2.2.2 节不同方法数学模型的理论分析及前期实验结果相符。图 7 中结果同样可以表明:待测气体的浓度越低,计算耗时越高;三角替代方法在待测气体浓度较低时(光谱信号信噪比较低)的耗时增幅明显低于高斯-埃尔米特方法。

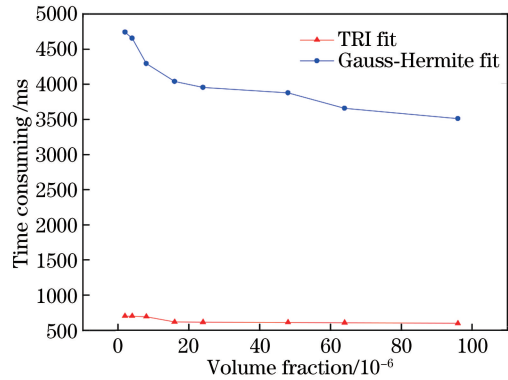


图 7 两种拟合方法的计算耗时

Fig. 7 Time consuming of two fitting methods

对上述不同浓度梯度的 CO 气体的吸收光谱分别使用不同方法拟合后得到的吸光度曲线求积分面积,并通过(6)式所示的 TDLAS 直接吸收方法原理对气体浓度进行反演,观察高斯-埃尔米特方法和三

角替代方法在浓度反演中的表现。实验中,使用体积分数为 96×10^{-6} 的 CO 气体光谱进行定标。表 1

给出了高斯-埃尔米特方法和三角替代法得到的测量值和真实值之间的对比。

表 1 不同拟合方法的浓度反演结果

Table 1 Concentration inversion results using two different fitting methods

Actual volume fraction/ 10^{-6}	Inversion volume fraction/ 10^{-6}		Absolute error/ 10^{-6}		Relative error /%	
	Gauss-Hermite	TRI	Gauss-Hermite	TRI	Gauss-Hermite	TRI
2	1.9478	1.9434	-0.0522	-0.0566	-2.61	-2.83
4	3.9186	3.9116	-0.0814	-0.0884	-2.04	-2.21
8	8.1376	8.1488	0.1376	0.1488	1.72	1.86
16	16.1808	16.1936	0.1808	0.1936	1.13	1.21
24	24.2328	24.2496	0.2328	0.2496	0.97	1.04
48	47.5728	47.544	-0.4272	-0.456	-0.89	-0.95
64	64.5376	64.5632	0.5376	0.5632	0.84	0.88

实验结果表明,系统浓度反演误差随待测气体浓度的升高而降低。其中,高斯-埃尔米特方法的平均偏差为 1.45%,线性相关度为 0.9999244,三角替代拟合方法的平均偏差为 1.56%,线性相关度为 0.9999148。使用三角替代拟合方法进行浓度反演的精度略低于高斯-埃尔米特方法。

4 结 论

针对吸光度曲线的快速拟合问题,本课题组提出了一种三角替代 Voigt 线型单光谱积分吸光度的快速计算方法——三角替代方法,并与高斯-埃尔米特方法进行比较。通过对实验所得的吸光度曲线进行光谱拟合处理及浓度反演,得到以下结论:三角替代方法在拟合精度上略有损失,主要体现为归一化拟合残差的均值上升约 6.45%,系统浓度反演误差提高 0.11%,但大幅提升了光谱拟合处理的运算速度,平均耗时缩短约 84.19%,而且系统信噪比对三角替代方法运算耗时的影响低于对高斯-埃尔米特方法的影响。在对吸光度曲线拟合过程中,三角替代方法以精度损失很小的代价大幅提高了运算速度,可应用在对 TDLAS 系统响应速度有严格要求的场合。

参 考 文 献

- [1] Cai T D, Wang G S, Zhang W J, *et al.* Simultaneous measurement of CO and CO₂ at elevated temperatures by diode laser wavelength modulated spectroscopy [J]. *Measurement*, 2012, 45(8): 2089-2095.
- [2] Lu R J, Shen D M, Du Q Q, *et al.* Tuning characteristics of DFB diode laser and its application

to TDLAS gas sensor design[J]. *Applied Mechanics and Materials*, 2014, 511/512: 173-177.

- [3] Yao L, Liu W Q, Liu J G, *et al.* Research on open-path detection for atmospheric trace gas CO based on TDLAS[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2015, 42(2): 0215003.
姚路, 刘文清, 刘建国, 等. 基于 TDLAS 的长光程环境大气痕量 CO 监测方法研究 [J]. *中国激光*, 2015, 42(2): 0215003.
- [4] Nelson D D, Zahniser M S, McManus J B, *et al.* A tunable diode laser system for the remote sensing of on-road vehicle emissions [J]. *Applied Physics B*, 1998, 67(4): 433-441.
- [5] Wang Y X, Chen D, Jia Z L, *et al.* Experimental study on the characteristics of near-infrared high resolution absorption spectroscopy of CO [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(11): 113004.
王尹秀, 陈东, 贾兆丽, 等. CO 近红外高分辨吸收光谱特性的实验研究 [J]. *激光与光电子学进展*, 2015, 52(11): 113004.
- [6] Liu M H, Dong Z R, Xin G F, *et al.* Discrimination method of Raman spectral peaks based on Voigt function fitting[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(5): 0511003.
刘铭晖, 董作人, 辛国锋, 等. 基于 Voigt 函数拟合的拉曼光谱谱峰判别方法 [J]. *中国激光*, 2017, 44(5): 0511003.
- [7] Ida T, Ando M, Toraya H. Extended pseudo-Voigt function for approximating the Voigt profile[J]. *Journal of Applied Crystallography*, 2000, 33(6): 1311-1316.
- [8] Liu Y Y, Lin J L, Huang G M, *et al.* Simple empirical analytical approximation to the Voigt profile [J]. *Journal of the Optical Society of America B*,

- 2001, 18(5): 666-672.
- [9] Flores-Llamas H, Cabral-Prieto A, Jiménez-Domínguez H, *et al.* An expression for an approximation of the Voigt profile I [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 1991, 300(1): 159-163.
- [10] Puerta J, Martin P. Three and four generalized Lorentzian approximations for the Voigt line shape [J]. Applied Optics, 1981, 20(22): 3923-3928.
- [11] Gao Y W, Zhang Y J, Chen D, *et al.* Measurement of oxygen concentration using tunable diode laser absorption spectroscopy [J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(3): 0330001.
高彦伟, 张玉钧, 陈东, 等. 基于可调谐半导体激光吸收光谱的氧气浓度测量研究 [J]. 光学学报, 2016, 36(3): 0330001.
- [12] Farias T M, Cardozo N S M, Secchi A R. The use of Gauss-Hermite quadrature in the determination of the molecular weight distribution of linear polymers by rheometry [J]. Brazilian Journal of Chemical Engineering, 2013, 30(4): 909-921.
- [13] William H. C++数值算法 [M]. 胡健伟, 赵志勇, 薛运华, 等, 译. 北京: 电子工业出版社, 2005.
William H. Numerical recipes in C++ [M]. Hu J W, Zhao Z Y, Xue Y H, *et al.*, transl. Beijing: Electronic Industry Press, 2005.
- [14] Jiménez-Mier J. An approximation to the plasma dispersion function [J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2001, 70(3): 273-284.
- [15] Xu X M, Zhang Y J, He Y, *et al.* Algorithm implementation of Lorentz linetype nonlinear fitting based on MATLAB [J]. Journal of Atmospheric and Environmental Optics, 2015, 10(3): 246-251.
徐秀敏, 张玉钧, 何莹, 等. 基于 MATLAB 洛伦兹线型非线性拟合算法实现 [J]. 大气与环境光学学报, 2015, 10(3): 246-251.