

光学学报

参数优化的 Kalman 滤波用于激光吸收光谱气体测量

李金义^{1*}, 杨雪¹, 张宸阁¹, 薛夫振², 杨晓涛³

¹天津工业大学控制科学与工程学院天津市电气装备智能控制重点实验室, 天津 300387;

²国家管网集团东部原油储运有限公司, 江苏 徐州 221008;

³哈尔滨工程大学动力与能源工程学院, 黑龙江 哈尔滨 150001

摘要 可调谐二极管激光吸收光谱(TDLAS)技术在测量过程中不可避免地会受到光学条纹、探测器噪声和电路噪声等干扰,导致输出结果波动较大。使用 Kalman 滤波器对测量结果进行后处理可有效提高 TDLAS 系统的测量精度和抗干扰能力。重点对 Kalman 滤波算法中的测量噪声协方差 σ_v^2 与过程激励噪声协方差 σ_w^2 的比值 g 进行了研究。从滤波器输出结果的波动和输出响应时间两个维度入手,通过赋予二者不同的权重得到滤波器的综合效果评价指标 R ,综合研究了 R - g 关系,得出了最佳 g 值为 27。同时,仿真验证了 Kalman 滤波比平滑滤波和扩张状态滤波在抗干扰和稳定性方面的优势。将参数优化后的 Kalman 滤波器用于 TDLAS 逃逸氨检测中,体积分数为 4.7×10^{-6} 的 NH_3 的浓度、体积分数为 108×10^{-6} 的 NH_3 的浓度、 H_2O 的浓度、温度的测量精度分别提高了 3.54、3.48、3.00、2.80 倍。

关键词 光谱学; 调谐激光吸收光谱; Kalman 滤波; 测量精度; 参数优化

中图分类号 TH744

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.1830001

Kalman Filtering with Optimized Parameters for Gas Measurement Using Laser Absorption Spectroscopy

Li Jinyi^{1*}, Yang Xue¹, Zhang Chengge¹, Xue Fuzhen², Yang Xiaotao³

¹Tianjin Key Laboratory of Intelligent Control of Electrical Equipment, School of Control Science and Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China;

²PipeChina Eastern Crude Oil Storage and Transportation Co., Ltd., Xuzhou 221008, Jiangsu, China;

³College of Power and Energy Engineering, Harbin Engineering University, Harbin 150001, Heilongjiang, China

Abstract Tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) technology is inevitably interfered by optical fringes, detector noise, and circuit noise during measurement, which results in large output fluctuations. The use of the Kalman filter to post-process the measurement results can effectively improve the measurement precision and anti-interference ability of the TDLAS system. This study focuses on the ratio g of the measured noise covariance σ_v^2 to the process excitation noise covariance σ_w^2 in the Kalman filtering algorithm. Starting with the fluctuation and the response time of the Kalman filter output, the comprehensive effect evaluation index R of the filter is obtained by assigning them different weights, and the comprehensive research on the relationship between R and g shows that the optimal g is 27. Moreover, the advantages of Kalman filtering in anti-interference and stability over smooth filtering and extended state filtering are verified by simulations. The Kalman filter with optimized parameters is applied in the TDLAS ammonia escape detection, and the measurement precision of concentration of NH_3 with a volume fraction of 4.7×10^{-6} , concentration of NH_3 with a volume fraction of 108×10^{-6} , H_2O concentration, and temperature is increased by 3.54, 3.48, 3.00, and 2.80 times, respectively.

Key words spectroscopy; tunable diode laser absorption spectroscopy; Kalman filtering; measurement precision; parameter optimization

收稿日期: 2021-12-20; 修回日期: 2022-01-05; 录用日期: 2022-01-13

基金项目: 国家自然科学基金(52176064)、天津市自然科学基金(20JCYBJC00160)

通信作者: *ljinyi@tiangong.edu.cn

1 引言

可调谐二极管激光吸收光谱(TDLAS)技术因其灵敏度高、选择性高、响应快和非接触等优势,已经成为气体组分浓度、温度、压力和流速等物理量测量的有力工具,其应用涉及环境保护、医学、工业过程控制、航空航天和科学研究等领域^[1-3]。提高信噪比和 TDLAS 的检测精度是相关领域研究者共同追求的目标之一。Li 等^[4]对 TDLAS 中的信号增强和噪声抑制技术进行了较为全面的综述。一方面,通过吸收谱线优选、气体压强的控制、长光程和腔增强技术等可以实现信号增强。另一方面,可通过信号多周期平均、滤波技术、调制技术、平衡检测和背景扣除技术来降低 TDLAS 测量过程中的噪声。近年来,一次谐波归一化的二次谐波检测(WMS-2f/1f, f 为谐波信号频率)技术被不断发展且广泛使用,用于消除 TDLAS 测量过程中因激光光强波动造成的输出结果波动^[5]。上述技术无疑大大提高了 TDLAS 的检测性能,但由于 WMS-2f/1f 信号主要受到光学干涉条纹噪声^[6]和探测器噪声等干扰^[7],相关噪声源可能是光学部件的热膨胀或收缩、激光频率漂移和标准具等,进而每次扫描得到的信号不完全相同,故使用以上技术并不能完全消除噪声^[8]。因此,通过对 TDLAS 测量结果的后处理进一步提升检测系统的精度和稳定性就变得十分必要。

目前已有许多滤波技术可以用于气体浓度测量结果的后处理中,但只有少数技术被确定能够有效地在线实时过滤浓度测量结果^[9],例如低通滤波、均值平滑滤波、小波变换、Kalman 滤波和扩张状态滤波(ESF)等。低通滤波可以很好地过滤高频噪声,但由于其局限性,故无法确定扰动发生的真实位置。对于均值平滑滤波,从理论上讲,可以忽略系统动态范围的限制,无限平均会提高检测质量。然而,实际上系统并不总是在无限时间内保持稳定的,因此用均值评价系统具有相当大的偏差^[9]。小波变换保留了信号的时频特征,具有很好的时频特性,但其基函数的多样性会造成最佳基函数的选取较为困难,且该方法的计算量较大,对处理器的性能要求较高^[10-11]。扩张状态滤波利用观测器原理对控制系统状态、未建模部分的扰动和系统的扰动进行观测,不依赖于系统的精确数学模型,而仅利用系统的阶次进行扩张状态观测器设计。当扩张状态观测器对系统扰动进行估计时,在估计的初始阶段估计误差相对较大,产生较大的超调量^[12]。Kalman 滤波是动态系统的最优状态估计过程,具有自适应性,其滤波效果可以在运行过程中根据信号统计和动态范围的变化进行调整^[13-14]。另外, Kalman 滤波不需要存储大量的测量数据来保持高精度,具有较少的滤波参数和较快的处理速度,能够在现场测量中有效地进行在线滤波,降低随机噪声^[15-16]。得益于上述优势, Kalman 滤波被广泛应用于实时痕量气体浓度测量^[17]。陈家金等^[18]将 Kalman 滤波应用于 WMS-2f/1f 免标定光谱测量算法中,设计了高温实时痕量气体检测系统。2021

年, Xia 等^[19]将 Kalman 滤波应用于湍流大气环境下开放光路的 WMS-2f/1f 甲烷测量中,提高了测量精度。在 Kalman 滤波算法中,测量噪声协方差 σ_v^2 和过程激励噪声协方差 σ_w^2 两个需要确定的参数分别代表传感器测量噪声的变化与被测气体真实浓度的变化。在实际应用中, σ_v^2 由先前多次测量值的方差计算得到,再在平稳过程的假设下,利用 σ_v^2/σ_w^2 为常数(本文以 g 表示该常数)这一关系得到 σ_w^2 。因此, g 值是与 Kalman 滤波器性能密切相关的一个重要参数,它的选取决定了 TDLAS 系统的测量精度和响应速度。然而,在目前应用中,通常根据经验或多次尝试的方法确定 g 值,缺乏选择依据。

本文对 Kalman 滤波算法中的参数 g 的选取进行了深入研究,从滤波器输出结果的波动和输出响应时间两个维度入手,通过赋予二者不同的权重得到滤波器的综合效果评价指标 R , 仿真研究了 R - g 关系,进而得出了最佳的 g 值。同时,通过仿真和实验验证了该 g 值的有效性。最后,将优化后的 g 值用于 TDLAS 气体测量中以提高测量精度等性能。

2 理论基础

2.1 WMS-2f/1f 免校准测量

电流调谐窄线宽半导体激光器使得激光频率 ν 在某一小范围内扫描,进而覆盖目标气体的吸收谱线,入射光经过光程为 L 的气体介质后,被目标气体分子选择性地吸收导致光强衰减。出射光的强度 I 与入射光 I_0 的定量关系可用 Beer-Lambert 定律描述,即

$$I = I_0 \tau(\nu) = I_0 \exp[-\alpha(\nu)] = I_0 \exp[-PS(T, \nu_0)\Phi_\nu xL], \quad (1)$$

式中: $\tau(\nu)$ 为待测气体的透过率; P 和 T 是探测气体环境的压强和温度; ν_0 为中心吸收频率; $S(T, \nu_0)$ 为气体谱线吸收强度; Φ_ν 为线性函数; x 为吸收气体的摩尔分数; $\alpha(\nu)$ 为吸光度。

在波长调制光谱技术中,激光器在波长调谐的同时叠加高频正弦调制,同时产生频率调制(FM)和强度调制(IM),调制后的激光频率和强度的表达式为

$$\begin{aligned} \nu(t) &= \nu_0 + a \cos(\omega t), \\ I_0(t) &= \bar{I}_0 [1 + i_0 \cos(\omega t + \phi_1) + i_2 \cos(2\omega t + \phi_2)], \end{aligned} \quad (2)$$

式中: t 是系统运行的时间; \bar{I}_0 是 ν_0 处的平均激光强度; a 是调频的幅度; ω 是调制频率,其值为 $2\pi f$; i_0 和 i_2 分别是具有相移 ϕ_1 和 ϕ_2 的线性(1f)和非线性(2f)强度调制幅度。

对于小吸收[吸光度为 $\alpha(\nu) < 0.05$]和小调制深度的常压应用,非线性强度调制可以被忽略($i_2 \approx 0$)。由于强度调制线性项系数 i_0 很小,通常将频率调制与强度调制的相位差近似为 $\phi_1 \approx \pi$, 并且不会引入太大的误差。将 WMS-2f/1f 的测量模型简化为通用形式

$$C_{2f/1f} = \frac{S_{2f}}{R_{1f}} = \left| \frac{1}{i_0} H_2 - \frac{1}{2} (H_1 + H_3) \right|, \quad (4)$$

式中: $C_{2f/1f}$ 是 WMS-2f/1f 信号幅度; S_{2f} 和 R_{1f} 分别为 2f 和 1f 信号在 ν_0 处的幅度; $H_k (k=1, 2, 3)$ 是透过率的傅里叶级数展开系数。式(4)是一种简化的免校准测量数学模型, 可以消除光束转向、散射、光学窗口污染和探测器增益等因素造成的激光强度起伏, 进而抑制来自激光器与探测器的共模噪声和非共振传输损耗。其中, $C_{2f/1f}$ 是激光器参数 (i_0, ϕ_1) 和气体参数 (包含在 H_k 项中) 的函数, 由于在对 $C_{2f/1f}$ 的测量过程中不可避免地包含了光学和电路噪声, 因此会影响气体浓度的测量精度。

2.2 气体浓度测量的 Kalman 滤波模型

Kalman 滤波算法可以估计某一给定时间的浓度, 并以具有噪声分量的测量值的形式获得反馈。因此, Kalman 方程可分为两组, 即时间更新方程和测量更新方程。时间更新方程的作用是向前推算误差协方差估计的值和当前状态变量, 以便构造出下一个时刻的先验估计。时间更新方程具体形式为

$$\hat{x}_k^- = \hat{x}_k, \quad (5)$$

$$p_k^- = p_k + \sigma_w^2, \quad (6)$$

式中: \hat{x}_k 为初始滤波值; p_k 为初始滤波协方差; \hat{x}_k^- 为前一时刻的滤波值; p_k^- 为前一时刻的滤波协方差。

测量更新方程的作用是反馈, 即它通过将先验浓度估计和新的测量变量相结合, 再构造出改进后的后验浓度估计, 具体形式为

$$K_k = p_k^- / (p_k^- + \sigma_v^2), \quad (7)$$

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k^- + K_k (z_k - \hat{x}_k^-), \quad (8)$$

$$p_{k+1} = (1 - K_k) p_k^-, \quad (9)$$

式中: K_k 为 Kalman 增益; z_k 为 k 时刻激光传感器得到的值, 即 k 时刻的观测值。

对 Kalman 滤波算法研究发现, 初始滤波值 \hat{x}_k 和初始滤波协方差 p_k [\hat{x}_k 一般取第一个测量值, p_k 一般取 0.1 (根据经验选取)] 在滤波收敛的情况下, Kalman 增

益 K_k 和滤波协方差 p_k 快速收敛, 对 Kalman 滤波的影响较小。重点分析测量噪声协方差 σ_v^2 (激光气体传感器引入的测量噪声, 表示传感器从一次测量到下一次测量的测量浓度中可能会引入的噪声值) 和过程激励噪声协方差 σ_w^2 (真实浓度的变化量, 表示从一次测量到下一次测量的真实浓度值的变化量)。

在恒定气体浓度下, 当传感器的测量值达到稳定时, 可以通过测量值来计算真实值, 但这种计算方法并不是对所有的动态范围都有效, 因为浓度测量方差与浓度范围成正比。在任何给定的实验条件下, 一旦测量系统达到平衡, 则有

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sigma_v^2}{\sigma_w^2} = g. \quad (10)$$

由于测量噪声的变化 (σ_v^2) 与真实浓度变化 (σ_w^2) 近似呈线性关系, 即 $\sigma_v^2 / \sigma_w^2 \approx g$ 。因此, 可以开发一种选择 σ_v^2 和 σ_w^2 的方法, 即应用先前的测量值 (如先前的 10 次原始测量) 来计算方差, 并将该值作为 σ_v^2 。当达到系统平衡时, g 值可以用作调谐参数, 以控制 Kalman 滤波器在计算输出时对测量变化的响应速度和输出波动的大小。

3 g 值优化的仿真分析

3.1 g 值对输出浓度标准差的影响

为了验证 Kalman 滤波参数的有效估计, 设置目标气体 NH_3 的恒定体积分数为 100×10^{-6} , 在其上叠加标准差为 1×10^{-6} (即恒定体积分数为 1%) 的高斯白噪声来构造出 200 个测量值。将得到的 200 个测量值作为输入, 来模拟体积分数为 100×10^{-6} 的 NH_3 的测量结果并进行 Kalman 滤波。此外, 将初始的滤波值设置为 100, 初始的滤波方差设为 0.1。任取 10 个测量值计算出 σ_v^2 为 0.450, 改变 g 值来观察该参数对 Kalman 滤波的影响, 效果如图 1 示, 随着 g 值的增大, Kalman 滤波后的曲线变得越来越平滑, 标准差越来越小, 滤波效果越来越好。

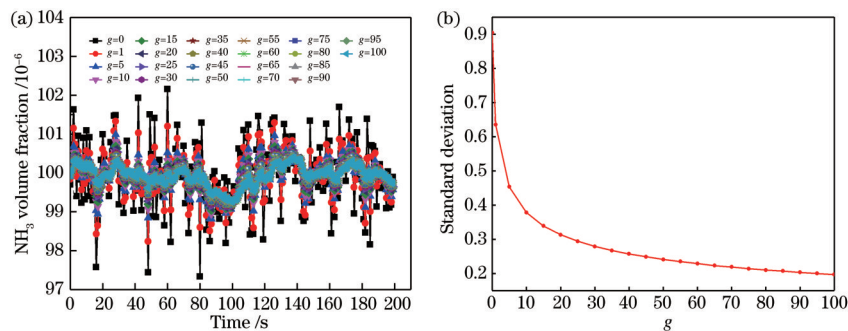


图 1 Kalman 滤波器在不同 g 值下的滤波效果评价。(a) 不同 g 值下滤波后的输出结果; (b) 滤波器输出结果的标准差随 g 值的变化曲线

Fig. 1 Filtering effect evaluation of Kalman filter under different g values. (a) Output results after filtering under different g values; (b) standard deviation of output result of filter varying with g value

3.2 g 值对输出响应时间的影响

对不同 g 值下 Kalman 滤波算法的实时性进行了仿真分析。仿真数据在 $0 \sim 100 \times 10^{-6}$ 气体体积分数范围内阶跃变化, 经过 Kalman 滤波后的仿真结果如 2

(a) 所示。观察 t_{90} (从 0 达到测量值的 90% 时所用的时间) 作为响应时间时, 其随 g 值的变化, 如 2(b) 所示。可以发现, 随着 g 值的增大, 响应时间越来越长, 这意味着测量的实时性变差。

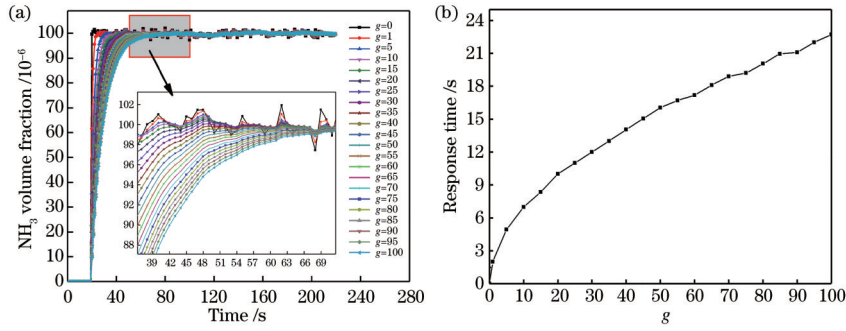


图 2 Kalman 滤波在不同 g 值下的时间响应评价。(a) 不同 g 值下滤波器对阶跃信号的响应;(b) t_{90} 响应时间随 g 值的变化关系
Fig. 2 Time response evaluation of Kalman filtering under different g values; (a) Response of filter to step signal under different g values; (b) t_{90} response time varying with g value

3.3 Kalman 滤波效果综合评价指标 R

综上,随着 g 值的增大,滤波后的波动越来越好,但实时性越来越差。定义一个综合评价指标 R 来分析 g 值对 Kalman 滤波效果的总体影响,由于标准差和 t_{90} 具有不同的量纲和量纲单位,故采用离差标准化方法对数据进行归一化处理。转换函数为

$$p^* = \frac{p - p_{\min}}{p_{\max} - p_{\min}}, \quad (11)$$

式中: p^* 表示归一化后的样本数据; p 为任意样本数据; p_{\max} 为样本数据的最大值; p_{\min} 为样本数据的最小值。根据式(11)对图 1(b)所示的滤波后的标准差和图 2(b)所示的 t_{90} 响应时间进行归一化,并进行两项指数关联方程拟合,得到二者随 g 值变化的规律函数 $y_1(g)$ 和 $y_2(g)$,如图 3 所示。综合评价指标 R 值可定义为 $y_1(g)$ 和 $y_2(g)$ 之和,即

$$R = y_1(g) + y_2(g). \quad (12)$$

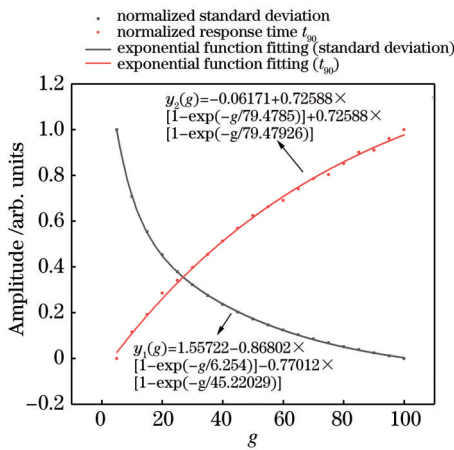


图 3 归一化的滤波后的标准差和 t_{90} 与 g 值的关系及指数函数拟合
Fig. 3 Normalized standard deviation and t_{90} varying with g value and corresponding exponential function fitting

显然, R 取最小值对应着综合考虑滤波后结果的标准差与响应时间的最佳 g 值。对叠加不同高斯白噪声幅度的气体浓度进行 Kalman 滤波,得到 R 与 g 的关系图,如图 4 所示。在恒定体积分数为 100×10^{-6} 的

NH_3 测量值上叠加不同标准差的高斯白噪声,当噪声的标准差分别为 $1 \times 10^{-6}, 3 \times 10^{-6}, 5 \times 10^{-6}$ 时, R 最小值对应的 g 值均为 23,说明噪声幅度对 R 值与 g 值间关系的影响可忽略不计。

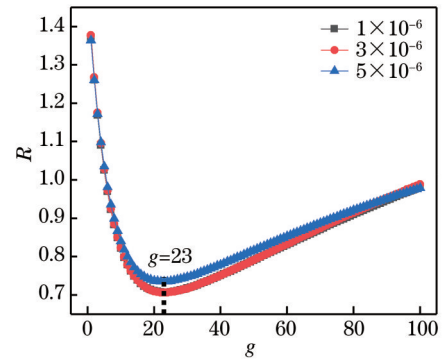


图 4 不同高斯白噪声幅度下的 R 值与 g 值关系
Fig. 4 Relationship between R value and g value under different Gaussian white noise amplitudes

需要注意的是,在实际应用中, R 的定义可根据需要给 $y_1(g)$ 和 $y_2(g)$ 添加不同的权重,以此得到所需的标准差和 t_{90} 响应时间,从而确定最佳 g 值,使 Kalman 滤波器的性能符合要求。以叠加标准差为 1×10^{-6} 的高斯白噪声为例,得到的不同权重下的 R 值与 g 值的关系如图 5 所示。

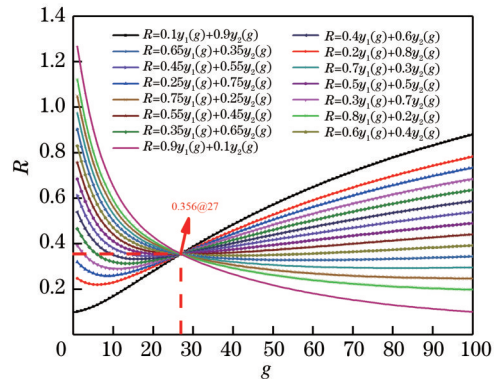


图 5 不同权重下 R 值与 g 值的关系
Fig. 5 Relationship between R value and g value under different weights

由图 5 可以看出,标准差所占比重越大,最佳 g 值的取值越大,滤波效果越好,但响应时间越长。值得注意的是,对于不同权重定义下的滤波器综合评价指标 R ,在 $g=27$ 处存在唯一共同的交点,如图 5 所示,该点可视为转折点。在 $g=27$ 之前,随着 g 值的增加,标准差的下降和 t_{90} 的上升都很快,但在 $g=27$ 之后标准差的下降和 t_{90} 的上升速度都越来越慢。此转折点与式 (12) 定义 R 时得到的最佳值 ($g=23$) 十分接近,因此在实际应用中,可使用 $g=27$ 作为最佳参数。

3.4 对异常测量值的处理效果

在 TDLAS 实际测量过程中,往往会因为现场恶劣环境的干扰导致测量结果产生异常值。通过在

100×10^{-6} 测量数据中添加一个异常测量值 (150×10^{-6}) 来验证 Kalman 滤波的效果和 g 值的合理性。不同 g 值下的滤波效果如图 6(a) 所示。可以发现,经过 Kalman 滤波后,异常值逐渐降低,但稳定在正常测量值的 2% 区域内的时间越来越长。当 $g=27$ 时, 150×10^{-6} 异常测量值滤波后为 107×10^{-6} ,幅值降低为滤波前的 71.3%,并在 6 s 后稳定在测量值的 2% 区域内。由图 6(b) 可得, Kalman 滤波和滑动平均滤波行为相似,但 Kalman 滤波的表现明显优于滑动平均滤波,这是因为 Kalman 滤波器是基于异常值之前的所有数据的,进而受异常值影响较小,而滑动平均滤波技术受异常值影响明显。

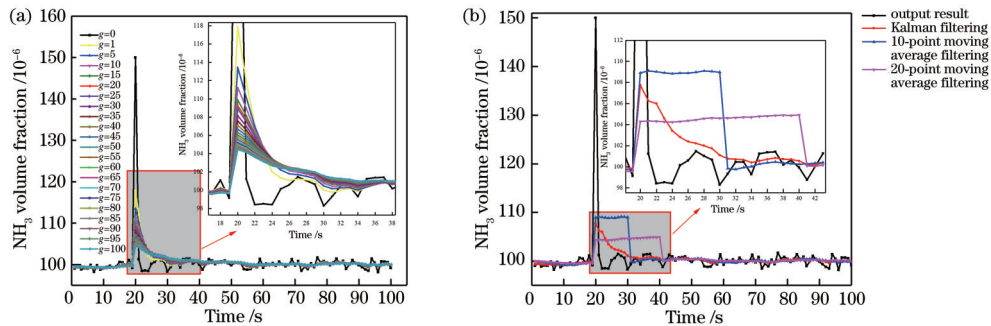


图 6 Kalman 滤波器对异常值的滤波效果评估。(a) 不同 g 值下 Kalman 滤波对异常值的响应; (b) 10 点和 20 点滑动平均滤波与 Kalman 滤波对比

Fig. 6 Filtering effect evaluation of Kalman filter on outliers. (a) Response of Kalman filtering to outliers under different g values; (b) comparison of 10-point and 20-point moving average filtering with Kalman filtering

3.5 与扩张状态滤波器的比较

为进一步说明 Kalman 滤波算法对 TDLAS 的测量结果的预测和估计性能,将其与线性扩张状态滤波器^[20]进行对比,结果如图 7 所示。当系统噪声为标准差为 1×10^{-6} 的高斯白噪声时, Kalman 滤波器滤波后的滤波值的标准差为 0.313×10^{-6} ,而扩张状态滤波器滤波后的滤波值的标准差为 0.477×10^{-6} 。虽然扩张状态滤波的响应时间短,但是对测量值的估计产生了较大的超调量,而 Kalman 滤波器的输出比较平稳,且无振荡、无超调。因此, Kalman 滤波器对 TDLAS 的

测量结果进行滤波的效果更好。

4 实验与讨论

4.1 实验系统

基于 WMS-2f/1f 技术设计了便携式激光氨逃逸检测系统,如图 8 所示。该系统可分为主机部分和采样探枪两部分。激光光源选择发射波长为 1512 nm 的分布反馈式 (DFB) 激光器 (Fitel, FBL 15DCWB-A82-W1512), 对其施加锯齿波电流扫描以同时覆盖中心频率位于 6612.73 cm^{-1} 的 NH_3 吸收谱线和中心频率位于 6612.02 (line 1), 6611.72 (line 2), 6611.50 (line 3), 6611.23 (line 4), 6609.85 cm^{-1} (line 5) 的 H_2O 的多条吸收谱线。选择 line 1 和 line 5 作为谱线对用于 H_2O 温度和浓度测量。出射的激光通过光纤跳线传输到光纤准直器 (Thorlabs, F220APC-1550) 中,经准直的激光进入到探枪内置的气室中多次反射,与气室中的烟气相互作用,激光信号被待测气体吸收后,出射光由光电探测器 (Thorlabs, PDA10CS-EC) 接收,并将光信号转换为电信号。将电信号通过屏蔽线传输至自制数字锁相放大器 (DLIA) 中,并进行解调和处理。关于该系统的详细信息可参考本课题组的前期工作^[21]。

对 DLIA 解调得到的 WMS-2f 和 1f 信号进行处理得到烟气中 H_2O 浓度、温度和 NH_3 浓度,反演算法流程如图 9 所示: 1) 利用经验模态分解 (EMD) 算法对实测的 WMS-2f 和 1f 信号进行分解与重建,去除标准具

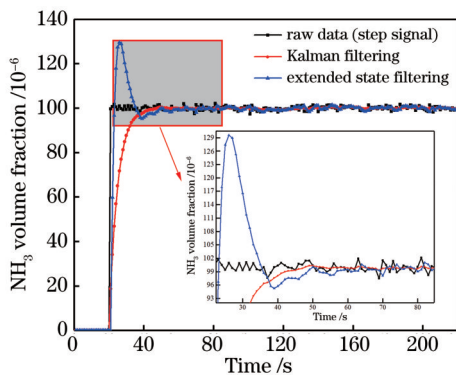


图 7 Kalman 滤波器和扩张状态滤波器对浓度阶跃信号的响应对比

Fig. 7 Comparison of response of Kalman filter and extended state filter to concentration step signal

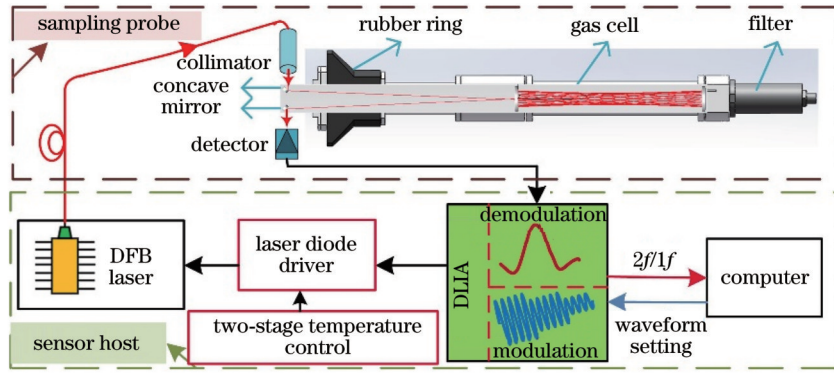


图 8 氨逃逸激光检测系统原理图

Fig. 8 Schematic diagram of ammonia slip laser detection system

条纹;2)通过寻峰获得 H_2O 的 line 1 和 line 5 的 WMS- $2f/1f$ 的峰高比,并利用双线测温原理计算出气体温度 T ;3)结合预先测得的激光特性、HITRAN 数据库中 H_2O 与 NH_3 的光谱参数、调制深度 a 和压力 P 等参数,利用 2.1 节的原理仿真得到 H_2O 和 NH_3 的 WMS- $2f/1f$ 仿真信号;4)以 x_{H_2O} 和 x_{NH_3} 作为回归参数,采用 L-M 算

法对仿真信号与测量信号进行迭代拟合,直到计算出的平方和误差(SSE)达到最小为止;5)对使迭代过程收敛的 x_{H_2O} 和 x_{NH_3} 的浓度值进行 Kalman 滤波,以减小输出波动;6)输出滤波后的 H_2O 的浓度值、 NH_3 的浓度值和气体温度 T 。

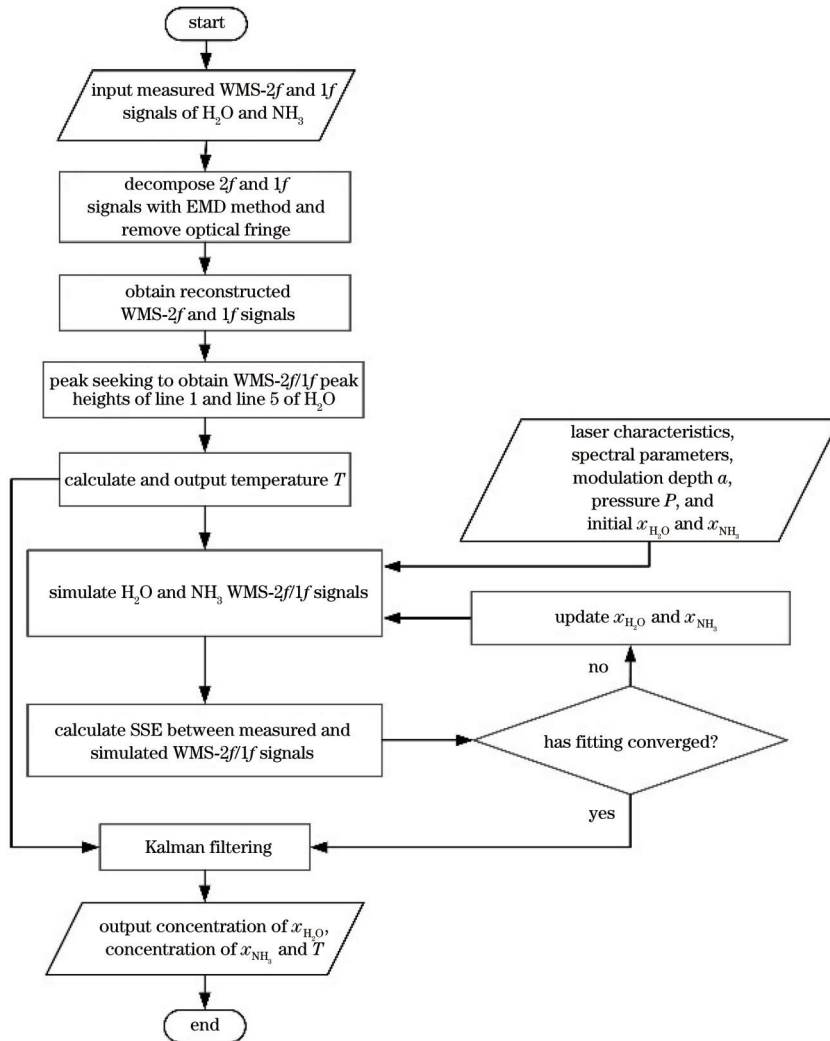


图 9 气体温度、 H_2O 气体浓度和 NH_3 气体浓度反演算法流程

Fig. 9 Flow chart for inversion of gas temperature, concentration of H_2O and concentration of NH_3

4.2 实验验证

在实验室的条件下,利用图 8 所示系统分别对 NH₃(体积分数为 4.7 × 10⁻⁶ 和 108 × 10⁻⁶) 标气和室内空气中的 H₂O (体积分数为 2.5%、温度为 297.95 K) 进行测量。将 TDLAS 输出结果有无 Kalman 滤波 ($g=27$) 的测量数据进行对比,结果如图 10 所示。滤波前后的测量结果变化趋势一致,这说明

了 Kalman 滤波并未影响系统的时间响应,并且滤波后的测量精度有了明显改善,具体评价结果如表 1 所示,对体积分数为 4.7 × 10⁻⁶ 的 NH₃、体积分数为 108 × 10⁻⁶ 的 NH₃、H₂O 的浓度的测量精度分别提高了 3.54、3.48、3.00 倍,对温度的测量精度提高了 2.8 倍。H₂O 的浓度和温度测量精度低于 NH₃ 的测量精度是室内环境不稳定性导致的。

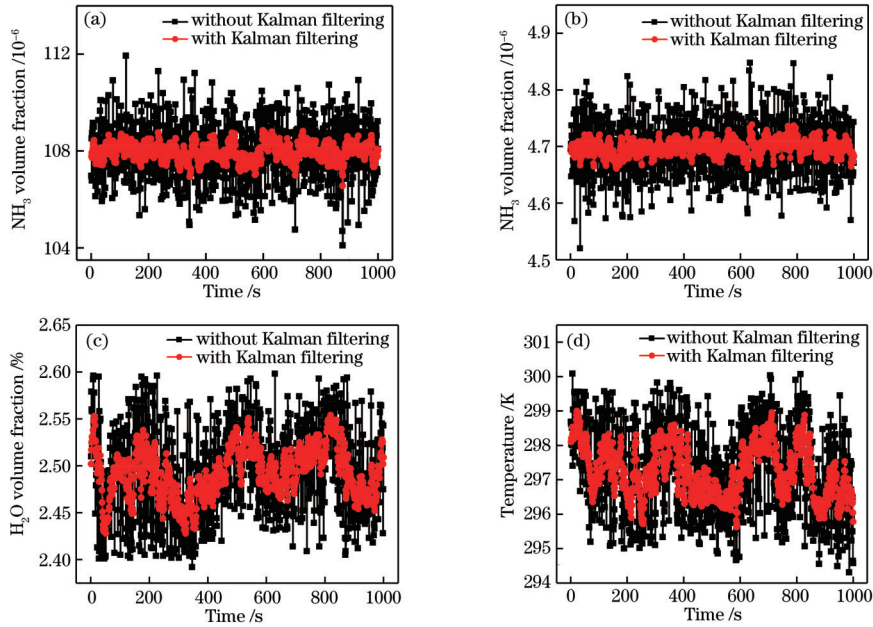


图 10 有无 Kalman 滤波时激光氨逃逸检测系统输出结果对比。(a) 108 × 10⁻⁶ NH₃; (b) 4.7 × 10⁻⁶ NH₃; (c) 室内条件下水汽浓度; (d) 室内气体温度

Fig. 10 Comparison of measured results of ammonia slip laser detection system with and without Kalman filtering. (a) 108 × 10⁻⁶ NH₃; (b) 4.7 × 10⁻⁶ NH₃; (c) concentration of indoor water vapor; (d) temperature of indoor gas

表 1 氨逃逸 TDLAS 系统有无 Kalman 滤波时的输出结果评价

Table 1 Evaluation of output results of ammonia slip TDLAS system with and without Kalman filtering

Evaluation indicator	Volume fraction of 4.7 × 10 ⁻⁶ NH ₃ / 10 ⁻⁶	Volume fraction of 108 × 10 ⁻⁶ NH ₃ / 10 ⁻⁶	Volume fraction of water vapor / %	Temperature / K
Standard deviation before filtering	0.046	1.095	0.048	1.268
Standard deviation after filtering	0.013	0.314	0.016	0.450
Accuracy improvement multiple	3.54	3.48	3.00	2.80

5 总 结

针对 Kalman 滤波用于 TDLAS 技术测量过程中的参数选取问题,重点对 Kalman 滤波算法中的测量噪声协方差 σ_v^2 与过程激励噪声协方差 σ_w^2 的比值 g 进行了优化研究。从滤波器输出结果的波动和输出响应时间两个维度入手,分析了该参数对滤波结果的影响,定义了综合评价指标 R ,并分析了不同权重条件下 R 与 g 的关系,研究分析得出最佳 g 值为 27。通过仿真验证了 Kalman 滤波比平滑滤波和扩张状态滤波的滤波具

有更强的抗干扰性和稳定性。将参数优化后的 Kalman 滤波器运用于便携式氨逃逸激光检测系统中,实验结果表明,体积分数为 4.7 × 10⁻⁶ 的 NH₃ 的浓度、体积分数为 108 × 10⁻⁶ 的 NH₃ 的浓度、H₂O 的浓度、温度的测量精度分别提高了 3.54、3.48、3.00、2.80 倍。因此,优化参数后的 Kalman 滤波器可以有效提高 TDLAS 气体测量精度。本研究为 Kalman 滤波在 TDLAS 测量中的应用提供了有力的参考,并可推广至其他 TDLAS 应用中以提高测量系统的性能。

参 考 文 献

- [1] Li J Y, Yu Z W, Du Z H, et al. Standoff chemical detection using laser absorption spectroscopy: a review [J]. *Remote Sensing*, 2020, 12(17): 2771.
- [2] Liu C, Xu L J. Laser absorption spectroscopy for combustion diagnosis in reactive flows: a review[J]. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2019, 54(1): 1-44.
- [3] Du Z H, Zhang S, Li J Y, et al. Mid-infrared tunable laser-based broadband fingerprint absorption spectroscopy for trace gas sensing: a review[J]. *Applied Sciences*, 2019, 9(2): 338.
- [4] Li J S, Yu B L, Zhao W X, et al. A review of signal enhancement and noise reduction techniques for tunable diode laser absorption spectroscopy[J]. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2014, 49(8): 666-691.
- [5] Li J Y, Luo G, Du Z H, et al. Hollow waveguide enhanced dimethyl sulfide sensor based on a 3.3 μm interband cascade laser[J]. *Sensors and Actuators B*, 2018, 255: 3550-3557.
- [6] Xiong B, Du Z H, Li J Y. Modulation index optimization for optical fringe suppression in wavelength modulation spectroscopy[J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2015, 86(11): 113104.
- [7] Werle P, Slemr F. Signal-to-noise ratio analysis in laser absorption spectrometers using optical multipass cells[J]. *Applied Optics*, 1991, 30(4): 430-434.
- [8] 梁宇, 刘铁根, 刘琨, 等. 基于变分模态分解算法的气体检测优化方法[J]. *中国激光*, 2021, 48(7): 0706003.
Liang Y, Liu T G, Liu K, et al. Optimized gas detection method based on variational mode-decomposition algorithm[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2021, 48(7): 0706003.
- [9] Zhang T Y, Kang J W, Meng D Z, et al. Mathematical methods and algorithms for improving near-infrared tunable diode-laser absorption spectroscopy[J]. *Sensors*, 2018, 18(12): 4295.
- [10] Zheng C T, Ye W L, Huang J Q, et al. Performance improvement of a near-infrared CH_4 detection device using wavelet-denoising-assisted wavelength modulation technique[J]. *Sensors and Actuators B*, 2014, 190: 249-258.
- [11] 姚丹, 郑凯元, 刘梓迪, 等. 用于近红外宽带腔增强吸收光谱的小波去噪[J]. *光学学报*, 2019, 39(9): 0930006.
Yao D, Zheng K Y, Liu Z D, et al. Wavelet denoising in near-infrared broadband cavity-enhanced absorption spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(9): 0930006.
- [12] Bai W Y, Xue W C, Huang Y, et al. The extended state filter for a class of multi-input multi-output nonlinear uncertain hybrid systems[C]//Proceedings of the 33rd Chinese Control Conference, July 28-30, 2014, Nanjing, China. New York: IEEE Press, 2014: 2608-2613.
- [13] Zhou S, Liu N W, Shen C Y, et al. An adaptive Kalman filtering algorithm based on back-propagation (BP) neural network applied for simultaneously detection of exhaled CO and N_2O [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2019, 223: 117332.
- [14] Leleux D P, Claps R, Chen W, et al. Applications of Kalman filtering to real-time trace gas concentration measurements[J]. *Applied Physics B*, 2002, 74(1): 85-93.
- [15] 孙明国, 马宏亮, 刘强, 等. 参数主动控制的痕量气体实时在线测量系统[J]. *光学学报*, 2018, 38(5): 0530003.
Sun M G, Ma H L, Liu Q, et al. Real-time and on-line measurement system for trace gas with active control parameters[J]. *Acta Optica Sinica*, 2018, 38(5): 0530003.
- [16] Zheng F, Qiu X B, Shao L G, et al. Measurement of nitric oxide from cigarette burning using TDLAS based on quantum cascade laser[J]. *Optics & Laser Technology*, 2020, 124: 105963.
- [17] Niu M S, Han P G, Song L K, et al. Comparison and application of wavelet transform and Kalman filtering for denoising in $\delta^{13}\text{CO}_2$ measurement by tunable diode laser absorption spectroscopy at 2.008 μm [J]. *Optics Express*, 2017, 25(20): A896-A905.
- [18] 陈家金. 基于长光程激光吸收光谱痕量气体及同位素探测技术研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2018.
Chen J J. Trace gases and isotopes measurements based on long-path length laser absorption spectroscopy[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2018.
- [19] Xia J B, Feng C, Zhu F, et al. Real-time measurement of methane in a turbulent atmosphere over kilometer long paths with denoising methods[J]. *Measurement*, 2021, 168: 108467.
- [20] Bai W Y, Xue W C, Huang Y, et al. Extended state filter design for general nonlinear uncertain systems[C]//54th Annual Conference of the Society of Instrument and Control Engineers of Japan (SICE), July 28-30, 2015, Hangzhou, China. New York: IEEE Press, 2015: 712-717.
- [21] Li J Y, Zhang C G, Wei Y Y, et al. *In situ*, portable and robust laser sensor for simultaneous measurement of ammonia, water vapor and temperature in denitrification processes of coal fired power plants[J]. *Sensors and Actuators B*, 2020, 305: 127533.