

QEPAS 系统中石英音叉模态仿真计算与研究

程刚^{1,2,3}, 曹渊², 刘锐^{1*}, 曹亚南^{1,2}, 田兴^{1,2}, 陈家金^{1,2}, 杨刚², 高晓明^{1,2}

1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031
2. 中国科学技术大学, 安徽 合肥 230031
3. 安徽理工大学矿山智能装备与技术安徽省重点实验室, 安徽 淮南 232001

摘要 对石英音叉增强型光声光谱(QEPAS)系统中常用的石英音叉进行了有限元模态计算, 获得石英音叉前6阶振型与模态频率, 认知了第4阶对称摆动振型为有效振动, 利用单因素法分析了石英音叉的音臂长度 l_1 、音臂宽度 ω_1 、音臂厚度 t 、音臂切角 θ 、音臂圆孔直径 d 及音臂圆孔高度 h 对低阶有效共振频率(Fre)的影响, 敏感度依次为: $l_1 > \omega_1 > d > \theta > t > h$, 考虑实际设计情形, 筛选出了 l_1, ω_1, d 与 h 四个石英音叉设计变量, 采用 Box-Behnken 实验设计方案与 RSM(response surface methodology)方法, 以 Fre 为函数目标, 建立 l_1, ω_1, d 与 h 的二次回归响应面模型, 得到了参数之间的交互作用, 利用 Design-Expert 软件对响应面模型进行设计参数反求, 结果表明, 在 $15\ 000\ \text{Hz} \leq Fre \leq 25\ 000\ \text{Hz}$ 计算区域内误差较小, 基本满足 QEPAS 系统的计算需求, 所提出的研究与设计方法具有一定通用性, 可为 QEPAS 系统中石英音叉结构参数设计提供参考。

关键词 光声光谱; 石英音叉; 模态; 实验设计; 响应面法

中图分类号: Q433.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)01-0031-08

引言

痕量气体的探测在工业生产、环境监测、生物医学等领域有着广泛的应用。痕量气体检测时必须具有高灵敏度、高选择性、快速响应和实时非破坏的测量特点。随着激光技术与弱信号检测技术的发展与创新应用, 光声光谱现已成为一种有效的、有潜力的痕量气体检测方法, 与传统的吸收光谱技术, 如 TDLAS(tunable diode laser absorption spectroscopy)相比, 光声光谱技术具有背景信号低、探测器与波长无关、线性度好、响应范围宽、系统体积小等优点。光声光谱通常采用麦克风或石英音叉来探测光声信号的, 但麦克风式易受到外界声波的干扰, 石英音叉式由于利用共振原理产生信号, 因而可以避免上述问题, 相比而言, 石英音叉式并具有体积更小、有效性好等优点, 该技术被称为石英音叉增强型光声光谱技术(quartz enhanced photoacoustic spectroscopy, QEPAS)。当前, 国内外学者已对 QEPAS 系统做出了一定的研究, 文献[1], 美国 Rice 大学 Frank. Tittel 小组最先提出 QEPAS, 并进行了系统性的研究; 文献[2-3]基于

QEPAS 技术对 H_2O , HCl 等进行过探测并构建了多音叉增强光声光谱系统(Multi-QEPAS); 文献[4-5]针对双声波谐振器(AMRS)QEPAS 系统进行了研究, 以不同光波长对多组分气体进行快速探测; 文献[6-7]基于石英音叉基频与泛频特性提出了新型的 QEPAS 气体探测方法, 实现了痕量气体的实时连续探测; 文献[8]提出并研究了离轴式 QEPAS 技术, 并获得了装置系统的最优化参数; 文献[9]将 QEPAS 结合数字频率锁定技术建立了一套气体实时探测系数, 利用 3f 信号作为误差反馈信号, 保证了长时间检测准确度且提高了工作效率; 文献[10]对 QEPAS 装置中不同功率激光器和空气阻尼对音叉共振特性的影响进行了研究分析。上述文献主要以 QEPAS 理论为基础, 围绕对系统探测方法、提高探测的准确度与效率进行了研究, 相关成果为 QEPAS 提供了重要的设计依据, 然而, QEPAS 是以石英音叉共振机理为设计基础的, 石英音叉作为关键性部件, 其共振特性对系统起着至关重要的作用, QEPAS 系统目前普遍采用 32.768 kHz 的石英音叉来研发设计, 石英音叉的结构单一化和共振特性的单一性, 在一定程度上局限了 QEPAS 探测系统的设计宽度, 目前针对 QEPAS 石英音叉共振特性与结构参数设计的

收稿日期: 2017-12-12, 修订日期: 2018-04-06

基金项目: 国家重点研发计划项目(2017YFC0209700), 国家自然科学基金项目(41730103, 41575030, 41475023)资助

作者简介: 程刚, 1986年生, 中国科学院安徽光学精密机械研究所博士研究生 e-mail: chgmec@mail.ustc.edu.cn

* 通讯联系人 e-mail: liukun@aiofm.ac.cn

研究资料较少, 本文将针对 QEPAS 石英音叉结构振动特性进行系统性研究, 为设计新型石英音叉以及 QEPAS 创新设计提供依据与借鉴。

1 QEPAS 系统与石英音叉模型

QEPAS 由激光器、函数发生器、激光控制器、石英音叉、跨阻抗放大、锁相放大器、采集系统等组成, 其探测过程是一个光热效应的过程, 系统原理如图 1 所示。QEPAS 通常采用波长调制的二次谐波探测技术, 利用石英音叉共振频率的 1/2 的正弦波调制激光, 待测气体分子吸收光能引起受热膨胀, 激发石英音叉的共振产生压电效应, 通过解调换算进而反演待测气体浓度等敏感信息。QEPAS 系统通常采用的石英音叉实物及模型如图 2 所示, 照片实物石英音叉系日本 KDS 公司生产, 出厂标定共振频率为 32.768 kHz, 如图 2(a) 所示, 由于模型尺寸较小, 为保证测量准确性, 本文采用数字显微镜进行定标测量, 如图 2(b) 所示。

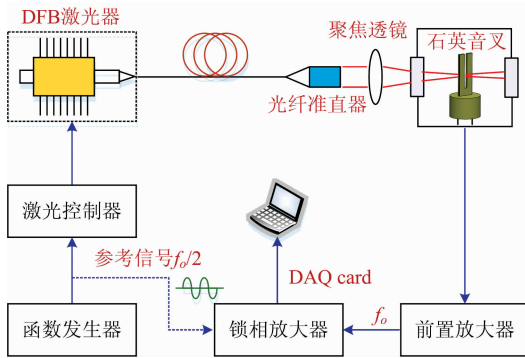


图 1 QEPAS 系统探测原理示意图
Fig. 1 Schematic diagram of QEPAS

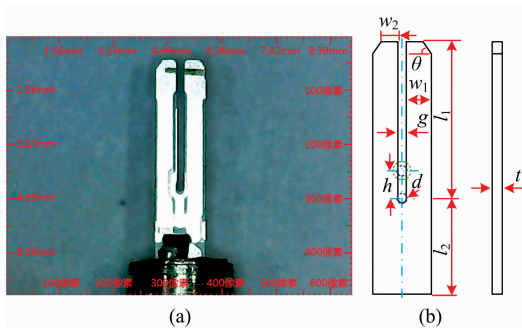


图 2 QEPAS 石英音叉实物及模型图

(a): 数字显微镜下石英音叉实物图; (b): 三维模型

Fig. 2 Quartz tuning fork and the model of QEPAS

(a): Real map of quartz tuning fork observed under digital microscope; (b): Three-dimensional model

2 模态计算与分析

2.1 模态分析基本原理

在结构模态分析中, 计算自由振动位移时, 需要考虑阻尼的影响, 而本文仅考察石英音叉结构的固有模态频率, 因

而只求解适用于无阻尼模态求解, 无阻尼模态求解是经典的特征值问题, 由振动学理论可知, 无阻尼的 n 自由振动微分方程一般形式为^[11]

$$\begin{cases} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nn} \end{cases} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{Bmatrix} + \begin{cases} k_{11} & k_{12} & \cdots & k_{1n} \\ k_{21} & k_{22} & \cdots & k_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{n1} & k_{n2} & \cdots & k_{nn} \end{cases} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{Bmatrix} = \{0\} \quad (1)$$

式(1)中, $m_{ij} = m_{ji}$, $k_{ij} = k_{ji}$, 可写成

$$[M]\{\ddot{x}\} + [K]\{x\} = \{0\} \quad (2)$$

设式(2)的解为

$$x_i = A_i(\sin\omega_n t + \varphi) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3)$$

假设石英音叉发生振动时偏离平衡位置作自由振动时, 各 x_i 在同一频率 ω_n , 同一相位角 φ 作自由振动, 式中 A_i 表示 x_i 的振幅, 式可用矩阵表示为

$$[K]\{A\} - \omega_n^2[M]\{A\} = \{0\} \quad (4)$$

式(4)中是一组 A_i 的 n 元线性齐次方程组, 其非零解的条件为系数行列式等于零, 展开后可得 ω_n^2 的 n 次代数方程

$$\omega_n^{2n} + a_1\omega_n^{2(n-1)} + a_2\omega_n^{2(n-2)} + \cdots + a_{n-1}\omega_n^2 + a_n = 0 \quad (5)$$

对于石英音叉振动系统仅在平衡位置附近作微小振动来说, 从式(5)中可解出 ω_n^2 的 n 个大于零的正实根, 也就是多自由度系统各阶固有频率的平方值, 一般情况下, 这 n 个频率值互不相等, 将各个固有频率按照从小到大的顺序排列为

$$0 < \omega_{n1} < \omega_{n2} < \cdots < \omega_{nm-1} < \omega_{nm} \quad (6)$$

其中最低固有频率 ω_{n1} 称为第一阶模态固有频率或称基频, 后面依次为第二阶、第三阶模态固有频率等。

2.2 有限元仿真网格无关性验证

基于所建立的石英音叉三维模型, 本文采用有限元方法对石英音叉进行模态仿真计算。在有限元仿真中, 网格划分至关重要, 它在一定程度上影响着仿真结果的准确性。石英音叉三维模型较为简单, 拟采用相同网格尺寸进行划分, 在网格划分中, 保证模型的最小几何体尺寸上不少于两层的划分, 保证高效的仿真同时尽可能地将网格划细, 为验证所划网格密度对计算结果的影响性, 以几何体最小尺寸与网格单元大小的无量纲比值 C 为参照, 以石英音叉能产生压电效应的对称振型模态频率值进行分析对比, 模型材料属性与约束条件为: 石英音叉材料主要成份为 SiO_2 , 弹性模量为 70 GPa, 泊松比为 0.17, 密度为 $2\,300 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, 对石英音叉实加底座底面约束。

$$C = x_{\min}/x_{\text{u\min}} \quad (7)$$

式(7)中, C 为无量纲比值; x_{\min} 为几何体最小尺寸, mm; $x_{\text{u\min}}$ 为网格单元大小, mm。

网格划分无关性验证如图 3 所示, 正方形标记点上方数据为其网格单元数目, 图中 C 步长取 0.5, 为体现差异性, 仿真中依然给出了无量纲比值等于 1 情况下的网格划分及其结果。从图中可知, 除 $C=1$ 时情况与其他结果略有差异外, 其余网格划分情况下所仿真的结果差异非常微小, 仅为

0.02%，并且在无量纲比值为 3.5 后计算结果趋于稳定状态，由此考虑，在石英音叉的模态仿真计算中，网格划分可按 $C=2$ 进行计算即能保证可靠的精度与计算效率， $C=2$ 时的网格划分情况如表 1 所示。

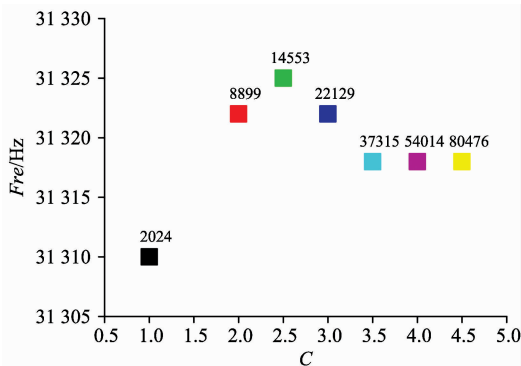


图 3 网格划分无关性验证

Fig. 3 Unrelated validation of grid partition

表 1 $C=2$ 的网格划分情况
Table 1 Grid partition of $C=2$

网格类型	雅可比点	单元大小 /mm	公差 /mm	单元总数	最大高宽比例
实体网格	4	0.12	0.006	8 899	4.5

2.3 仿真结果与分析

模态计算结果中，低阶振型对模型振动影响较大，由文献[12]可知，石英音叉的振动形式分为对称振动与非对称振动，石英音叉为对称振型式的振动视为有效振动，即能激发有效压电效应。本文选取石英音叉的前 6 阶振型与模态频率值，依据上节分析方法进行仿真模拟，石英音叉前 6 阶模态分析结果如图 4 所示，本文所研究的石英音叉有效振动在前 6 阶振型中为第 4 阶振型，从仿真结果中可知，石英音叉的前 4 阶模态均为摆动振型，第 1 和 3 阶摆动振型为沿整体沿同一方向摆动，第 2 和 4 阶摆动振型为双臂交错式对向摆动，第 5 和 6 阶模态均为扭动振型，第 5 阶扭动振型为整体扭动，第 6 阶双臂交错式扭动；从第 4 阶模态计算频率为 31 322 Hz，石英音叉仿真结果如表 2 所示，与出厂标定值误差仅为 4.6%，原因可能在于测量误差、制造误差和仿真误差，但总体说明仿真结果与实际比较吻合，证明了所建模型准确性与仿真方法的有效性，因而通过仿真实验可以为石英

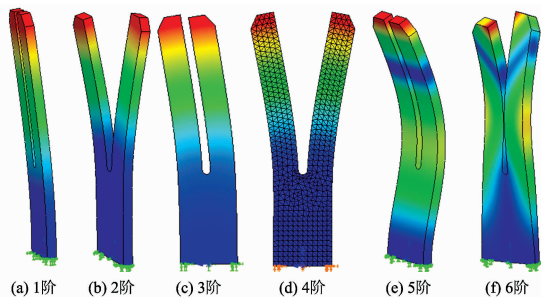


图 4 石英音叉前 6 阶模态振型图

Fig. 4 The first 6 modals' shapes of the quartz tuning fork

音叉后续大规模的设计实验提供帮助。

表 2 石英音叉前 6 阶模态仿真结果与分析
Table 2 Simulation results of the first 6 modes of quartz tuning fork

阶数	模态频率/Hz	振型	标定值/Hz	误差/%
1	6 443	单向摆动	—	—
2	12 435	交错摆动	—	—
3	26 334	单向摆动	—	—
4	31 322	对称摆动	32 768	4.6
5	37 978	弯曲扭动	—	—
6	64 433	交错扭动	—	—

3 模态频率影响因素分析

石英音叉由压电材料石英晶体制作而成，通常采用蚀刻技术对石英音叉的结构进行切型加工，石英音叉作为 QEPAS 系统中的敏感性元件，探讨石英音叉的低阶有效共振频率与其结构形状和几何因素之间的关系甚为重要，几何尺寸的改变会引起其低阶有效共振频率阶数的变化，因而在仿真中要注意筛选。

3.1 形位尺寸变化对模态特性的影响

石英音叉形状尺寸主要包括音臂长度 l_1 、宽度 w_1 、厚度 t ，臂底高度 l_2 ，音臂间隙 g ，圆孔直径 d ，音臂缝宽 g ，默认情形 $g=d$ ，音臂顶端宽度 w_2 和音臂切角 θ ，位置尺寸主要为圆孔高度 h ，默认值为 0，参见图 2(b)，研究各因素对石英音叉低阶有效共振频率的影响及其对灵敏度。

3.1.1 音臂长度 l_1 的变化

保持石英音叉其余几何尺寸不变，仅改变音臂长度 l_1 ，以步长增量为 0.5 mm 仿真计算石英音叉的低阶有效共振频率的变化情况，仿真结果如图 5 所示，结果表明， l_1 不断增加时，其低阶有效共振振型均为第 4 阶振型，频率值呈现下降趋势，且下降幅度越来越弱，参数敏感度非常高，通过曲线拟合表明，石英音叉音臂长度与低阶有效共振频率呈非线性幂函数关系，拟合度非常显著，拟合公式如式(8)。

$$Fre = 35\ 785l_1^{-1.8}, R^2 = 0.999\ 9 \quad (8)$$

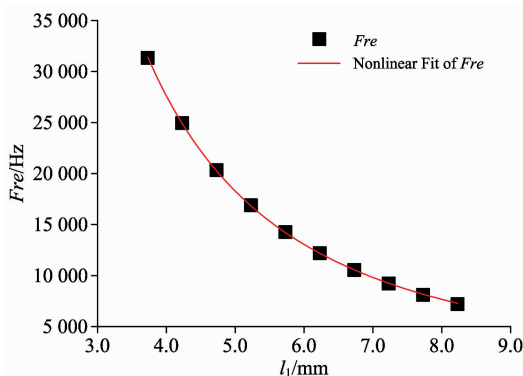


图 5 音臂长度与低阶有效振动频率的关系

Fig. 5 The relationship between the length of the fork's arm and the low order effective vibration frequency

3.1.2 音臂宽度 ω_1 的变化

保持石英音叉其余几何尺寸不变, 仅改变音臂宽度 ω_1 , 以步长增量为 0.1 mm 模拟仿真石英音叉的低阶有效共振频率的变化情况, 仿真结果如图 6 所示, 结果表明, 低阶有效共振阶数随 ω_1 值变化发生改变, ω_1 为 0.6 与 0.7 mm 时, 其低阶有效共振振型为第 4 阶振型, l_1 为 0.8, 0.9 与 1.0 mm 时为第 5 阶振型, l_1 为 1.1, 1.2, 1.3 与 1.4 mm 时为第 6 阶振型, l_1 为 1.5 mm 时为第 7 阶振型; ω_1 不断增加时, 低阶有效共振频率值呈现上升趋势, 因素敏感度非常高, 通过曲线拟合表明, 石英音叉音臂宽度与低阶有效共振频率呈线性函数关系, 拟合度非常显著, 拟合式如式(9)。

$$Fre = 45\,135\omega_1 + 4\,569, R^2 = 0.999\,7 \quad (9)$$

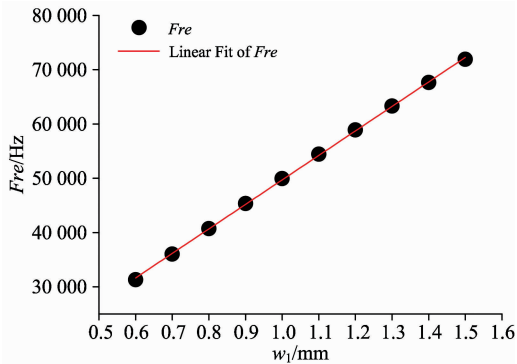


图 6 音臂宽度与低阶有效振动频率的关系

Fig. 6 The relationship between the width of the fork's arm and the low order effective vibration frequency

3.1.3 音臂厚度 t 的变化

保持石英音叉其余几何尺寸不变, 仅改变音臂厚度 t , 以步长增量为 0.2 mm 模拟仿真石英音叉的低阶有效共振频率的变化情况, 仿真结果如图 7 所示, 结果表明, 低阶有效共振阶数随参数值变化发生改变, t 为 0.24 与 0.44 mm 时, 其低阶有效共振振型为第 4 阶振型, t 为 0.64, 0.84 与 1.04 mm 时为第 3 阶振型, 剩下为第 2 阶振型; t 不断增加时, 低阶有效共振频率值呈现微弱的上升趋势, 因素敏感度非常低, 通过曲线拟合表明, 石英音叉音臂厚度与低阶有效共振频率呈非线性函数关系, 拟合度显著, 拟合式如式(10)。

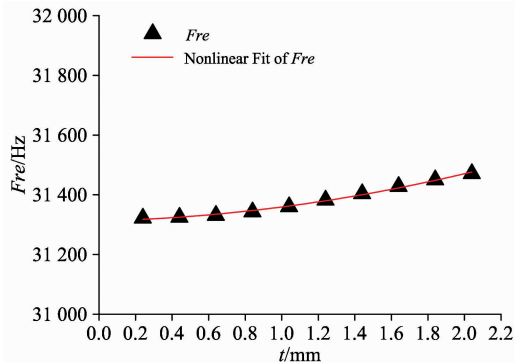


图 7 音臂厚度与低阶有效振动频率的关系

Fig. 7 The relationship between the thickness of the fork's arm and the low order effective vibration frequency

$$Fre = 31\,312 + 14t + 23t^2, R^2 = 0.993\,6 \quad (10)$$

3.1.4 音臂切角 θ 的变化

保持石英音叉其余几何尺寸不变, 仅改变音臂切角 θ , 以步长增量为 3° , 模拟仿真石英音叉的低阶有效共振频率的变化情况, 仿真结果如图 8 所示, 结果表明, θ 不断增加时, 其低阶有效共振振型均为第 4 阶振型, 低阶有效共振频率值呈现微弱的上升趋势, 因素敏感度较低, 通过曲线拟合表明, 石英音叉音臂切角与低阶有效共振频率呈非线性函数关系, 拟合度较为显著, 拟合式如式(11)。

$$Fre = 42\,096 - 374\theta + 3\theta^2, R^2 = 0.984\,9 \quad (11)$$

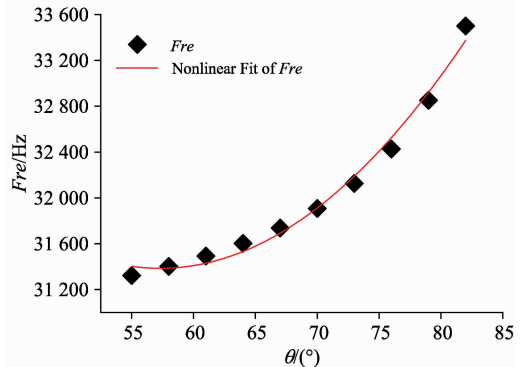


图 8 音臂切角与低阶有效振动频率的关系

Fig. 8 The relationship between the tangent angle of the fork's arm and the low order effective vibration frequency

3.1.5 音臂圆孔直径 d 的变化

保持石英音叉其余几何尺寸不变, 仅改变音臂圆孔直径 d , 以步长增量为 0.1 mm 模拟仿真石英音叉的低阶有效共振频率的变化情况, 仿真结果如图 9 所示, 结果表明, d 不断增加时, 其低阶有效共振振型均为第 4 阶振型, 低阶有效共振频率值下降趋势强烈, 通过曲线拟合表明, 石英音叉音臂圆孔直径与低阶有效共振频率呈线性函数关系, 拟合度显著, 拟合式如(12)式。

$$Fre = -28\,610d + 38\,170, R^2 = 0.995\,8 \quad (12)$$

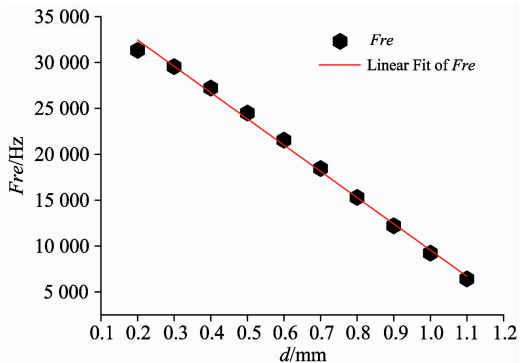


图 9 音臂圆孔直径与低阶有效振动频率的关系

Fig. 9 The relationship between the diameter of the fork's arm and the low order effective vibration frequency

3.1.6 音臂圆孔高度 h 的变化

保持石英音叉其余几何尺寸不变, 改变音臂圆孔高度 h ,

以步长增量为 0.3 mm 模拟仿真石英音叉的低阶有效共振频率的变化规律, 仿真结果如图 10 所示, 结果表明, h 不断增加时, 其低阶有效共振频率均为第 4 阶振型, 低阶有效共振频率值呈现上升趋势, 通过曲线拟合表明, 石英音叉圆孔高度与低阶有效共振频率呈非线性函数关系, 拟合度显著, 拟合式如(13)式。

$$Fre = 29\,601 + 1\,884h - 275h^2, R^2 = 0.999\,6 \quad (13)$$

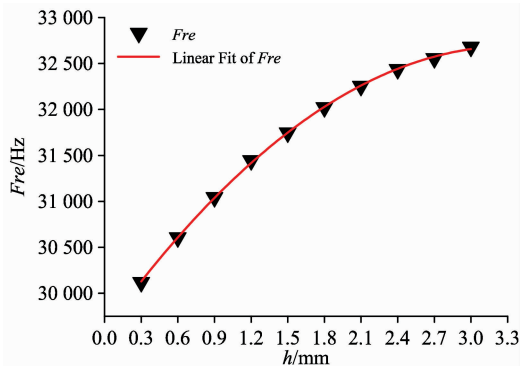


图 10 音臂圆孔高度与低阶有效振动频率的关系

Fig. 10 The relationship between the height of the hole of the fork's arm and the low order effective vibration frequency

3.2 各类因素影响敏感度讨论

从上节结果可知, 石英音叉形位尺寸对低阶有效共振频率均有一定影响, 其规律特性可为设计新型石英音叉提供重要的依据, 为进一步优化石英音叉的结构设计工作, 根据影响敏感性程度对上述仿真结果做进一步分析。从图 5—图 10 曲线可知, 石英音叉的音臂长度 l_1 、宽度 w_1 、厚度 t 、音臂切角 θ 、圆孔直径 d 、圆孔高度 h 在设定范围内, 对低阶有效共振频率的影响均为单调函数, 为避免步长值对仿真结果的影响, 统一用无量纲表示变量参数的影响敏感度^[12], 如式(10), 计算对比结果如图 11 所示。

$$S = \Delta y_{\max} / \Delta x_{\max} \quad (14)$$

式(14)中: Δy_{\max} 为仿真结果中最大与最小频率之间比值; Δx_{\max} 为仿真求解中最大与最小因子之间比值。

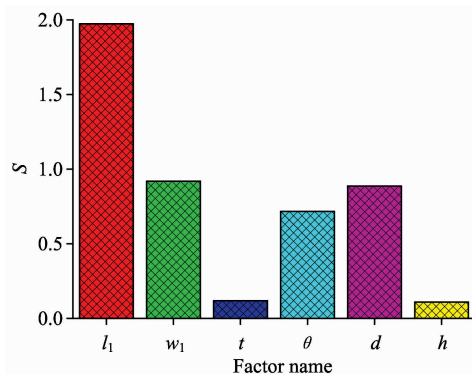


图 11 变量参数的影响敏感度

Fig. 11 Impact of variable parameters on sensitivity

从图 11 中可知, 石英音叉结构变量在设定取值范围内,

敏感度依次为: $l_1 > w_1 > d > \theta > t > h$, 参数敏感度特性可为后续的石英音叉结构反求工作奠定基础。

4 石英音叉结构反求研究

4.1 响应面实验设计

4.1.1 响应面法基础

响应面法(response surface methodology, RSM)是一种基于数学与统计理论下构建代理模型的方法, 该方法通过对指定设计空间实验、建模和数据分析对所感兴趣的多个变量进行研究, 进而拟合输出变量的全局逼近来代替真实响应面, 并且可以根据代理模型来优化相关设计参量^[13], 通常响应面模型采用二次响应面模型, 结合前文对单因素影响设计的拟合情况来看, 本文将采用二次响应面模型来分析研究, 二次响应面模型系统响应 y 与设计变量 x 之间表示为

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i + \sum_{i=1}^n \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon \quad (15)$$

式中, $x = (x_1, x_1, \dots, x_n)$ 为设计变量; β_i 表示 x_i 的一阶效应系数, β_{ii} 表示编码 x_i 的二阶效应系数, β_{ij} 表示编码 x_i 与 x_j 的交互作用效应系数; ϵ 表示响应误差或噪声, 通常假定 ϵ 在不同的实验中是相互独立的, 均值为 0; n 为设计变量个数。

当实验得到 m 个对应设计样本的响应量 y 后, 通过最小二乘法可计算上述效应系数值为

$$\beta = (W^T W)^{-1} (W^T y) \quad (16)$$

式中, W 为响应面样本点矩阵

$$W = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,2} & \dots & x_{1,n} \\ 1 & x_{2,1} & x_{2,2} & \dots & x_{2,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{m,1} & x_{m,2} & \dots & x_{m,n} \end{bmatrix} \quad (17)$$

结合式(15)一式(17)可计算出响应面模型表达式。

响应面模型精度主要基于样本点的选取, 合理选择实验样本是求解模型的关键, 本文采用 Box-Behnken 方法设计实验, Box-Behnken 是一种具有高效率的响应曲面设计方法, 它符合旋转性或几乎可旋转性的球面设计, 实验区域内的任何点与设计中心点的距离相等, 而变异数是此点至设计中心点的距离函数, 所有实验点均位于等距端点上, 可以很好地估计一阶、二阶与一阶具有交互作用项之多项模式。

4.1.2 设计变量选取与水平设定

上述研究表明, 音叉臂长 l_1 、音臂圆孔直径 d 为单调减函数, 其余变量为单调增函数, 设计新型石英音叉时应综合考虑加工工艺、安装操作与性能要求等, 传统石英音叉几何尺寸已相当微小, 若进一步减小, 加工工艺难度增大, 安装系统与光学调节难度也相应加大, 因而在拓宽石英音叉的使用空间上, 选取石英音叉结构参数上应挑选单调减函数的变量; 性能要求上石英音叉的低阶有效共振频率需降低, 由于激光器光束质量, QEPAS 系统激光束准直聚焦是关键, 因而尽可能增加石英音叉狭缝大小可解决上述问题, 采用 QEPAS 系统探测时, 信号强弱也与激光光束通过石英音叉狭缝位置有关。综上表明, 开孔大小以及开孔位置将对

QEPAS 系统产生重要影响, 因而本文选取音叉臂长 l_1 、音叉臂圆孔直径 d 、音叉臂圆孔高度 h 作为设计变量, 设计变量与参数水平如表 3 所示, 以石英音叉低阶有效共振频率值为评价目标, 采用 Design-Expert 软件进行实验设计与统计分析, 因仿真为确定性结果, 所以在本实验中, 中心重复点次数选为 1, 共生成 25 组设计实验, 如表 4 所示。

表 3 设计变量与水平
Table 3 Design variables and levels

设计变量	水平		
	-1	0	1
l_1/mm	3.5	6.0	8.5
d/mm	0.4	0.7	1.0
h/mm	0.3	1.8	3.3
w_1/mm	0.6	0.9	1.2

表 4 Box-Behnken 实验设计方案与结果

Table 4 Box-Behnken experimental design scheme and results

序号	l_1/mm	d/mm	h/mm	w_1/mm	Fre/Hz
1	8.5	0.7	0.3	0.9	8 545
2	8.5	0.7	1.8	0.6	5 733
3	6	0.7	3.3	1.2	25 783
4	6	0.4	3.3	0.9	19 605
5	3.5	0.7	0.3	0.9	40 975
6	6	0.4	0.3	0.9	18 967
7	3.5	0.7	1.8	1.2	67 806
8	8.5	0.7	3.3	0.9	9 758
9	6	0.4	1.8	0.6	13 039
10	6	0.7	1.8	0.9	18 119
11	6	0.7	3.3	0.6	12 919
12	3.5	0.7	3.3	0.9	55 802
13	6	0.4	1.8	1.2	25 620
14	6	1	1.8	0.6	7 064
15	6	1	0.3	0.9	11 803
16	6	0.7	0.3	1.2	22 300
17	3.5	0.7	1.8	0.6	34 045
18	6	1	1.8	1.2	22 606
19	6	1	3.3	0.9	18 788
20	6	0.7	0.3	0.6	9 309
21	8.5	0.7	1.8	1.2	12 661
22	8.5	1	1.8	0.9	9 265
23	8.5	0.4	1.8	0.9	10 005
24	3.5	0.4	1.8	0.9	52 332
25	3.5	1	1.8	0.9	48 523

4.1.3 二次回归响应面模型与评估

以表 4 中的 25 组实验统计数据为基础, 建立石英音叉低阶有效共振频率与石英音叉 l_1 , d , h 和 w_1 的二次回归响应面模型, 如式(18)所示, 响应面模型评估如表 5 所示。

$$Fre = 64\ 223 - 22\ 003l_1 - 20\ 790d + 5\ 884h + 77\ 687w_1 + 1\ 023l_1d - 908l_1h - 8\ 944l_1w_1 + 3\ 526dh + 8\ 225dw_1 - 70hw_1 + 1\ 904l_1^2 - 3\ 625d^2 - 315h^2 - 1\ 864w_1^2 \quad (18)$$

由表 5 可知, 二次回归响应面模型是极为显著的, 模型

表 5 响应面模型评估

Table 5 Evaluation of the response surface model

Source	Fre			
	SS	df	F	p
Model	6.984×10^9	14	92.38	$<0.0001^{**}$
l_1	4.942×10^9	1	915.12	$<0.0001^{**}$
d	3.859×10^7	1	7.15	0.0234^{**}
h	7.883×10^7	1	14.60	0.0034^{**}
w_1	7.468×10^8	1	138.30	$<0.0001^{**}$
l_1d	2.355×10^6	1	0.44	0.5240
l_1w_1	4.634×10^7	1	8.58	0.0151^{**}
dh	1.800×10^8	1	33.33	0.0002^{**}
dw_1	1.007×10^7	1	1.87	0.2020
hw_1	2.192×10^6	1	0.41	0.5384
l_1^2	4 032.25	1	7.467×10^{-4}	0.9787
d^2	4.000×10^8	1	74.08	$<0.0001^{**}$
h^2	3.005×10^5	1	0.056	0.8183
w_1^2	1.420×10^6	1	0.26	0.6192

注: SS 为变差平方和, df 为自由度, ** 为极为显著 ($p < 0.05$), * 为显著 ($0.05 < p < 0.1$), 不显著 ($p > 0.1$)。

可以为设计提供指导, 对石英音叉的低阶共振频率影响而言, 最为显著因素为 l_1 , d , l_1h 与 l_1^2 , 影响不显著因素为 dh , d^2 与 h^2 。

4.2 反求工程设计与验证

4.2.1 响应面模型交互作用讨论

利用 Design-Expert 软件可以直观地将所求响应面模型利用三维响应曲面图表达出来, 分别考察 d , h 和 w_1 在中心值情况下, l_1 与 w_1 , l_1 与 h , l_1 与 d 之间交互作用对石英音叉的低阶共振频率的影响情况, 如图 12(a), (b) 与 (c) 所示。

图 12(a) 中, $d=0.7\text{ mm}$, $h=1.8\text{ mm}$ 固定时, 石英音叉低阶有效共振频率 Fre 随音叉臂长度 l_1 的增加而降低, 减幅程度较为明显, 随音叉臂宽度 w_1 的增加而升高, 增幅程度较弱, 同时随着 w_1 的增加, Fre 随 l_1 的变化程度有所增加, 随着 l_1 的增加, Fre 随 h 的变化程度减缓, 在 $6.5\text{ mm} \leq l_1 \leq 8.5\text{ mm}$ 且 $0.6\text{ mm} \leq w_1 \leq 0.9\text{ mm}$ 变化区域内 Fre 变化极为平缓; 图 12(b) 中, $d=0.7\text{ mm}$, $w_1=0.9\text{ mm}$ 固定时, Fre 随 l_1 的增加而降低, 随 h 的增加而略微升高, 同时 h 的增加对 Fre 随 l_1 有较弱的变化影响, 随着 l_1 的增加, Fre 随 h 的变化程度减缓幅度明显, 在 $5.5\text{ mm} \leq l_1 \leq 7.5\text{ mm}$ 变化区域内 Fre 变化极为平缓; 图 12(c) 中, $h=0.8\text{ mm}$, $w_1=0.9\text{ mm}$ 固定时, Fre 随 l_1 的增加而降低, 随 d 的增加而略微降低, 同时随着 d 的增加, Fre 随 l_1 的变化程度有所降低, 随着 l_1 的增加, Fre 随 d 的变化程度减缓, 在 $0.6\text{ mm} \leq d \leq 1\text{ mm}$ 且 $7.5\text{ mm} \leq l_1 \leq 8.5\text{ mm}$ 变化区域内 Fre 变化极为平缓。

4.2.2 响应面模型与验证

在给定的约束条件下, 利用 Design-Expert 软件中 Optimization 设计功能, 根据响应面回归模型(18), 可以反向求给定石英音叉共振频率情况下结构参数, 设定参数、约束条件及求解目标如(19)式所示, 表 6 给出了设计参数值、响应面计算与有限元仿真结果及其对比误差, 在参数值约束范围

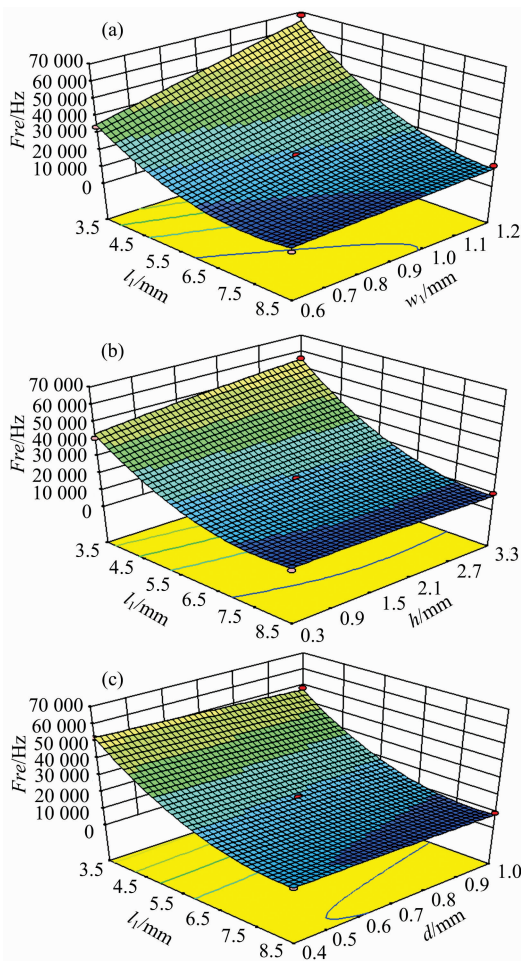


图 12 因素交互作用三维响应面图

- (a): $d=0.7\text{ mm}$, $h=1.8\text{ mm}$, l_1 与 w_1 交互作用响应面图
- (b): $d=0.7\text{ mm}$, $w_1=0.9\text{ mm}$, l_1 与 h 交互作用响应面图
- (c): $h=0.8\text{ mm}$, $w_1=0.9\text{ mm}$, l_1 与 d 交互作用响应面图

Fig. 12 3D response surface diagram with interaction of the factors

(a): Response surface diagram of interaction between l_1 and w_1 ($d=0.7\text{ mm}$, $h=1.8\text{ mm}$); (b): Response surface diagram of interaction between l_1 and h ($d=0.7\text{ mm}$, $w_1=0.9\text{ mm}$); (c): Response surface diagram of interaction between l_1 and d ($h=0.8\text{ mm}$, $w_1=0.9\text{ mm}$)

内, 允许 l_1 , h , w_1 与 d 值同时可变, 由 Design-Expert 软件从众多预测参数组合中筛选出最佳组合。

$$\begin{aligned}
 &Fre(\min) = 15\ 000\ \text{Hz}, \\
 &Fre(\max) = 25\ 000\ \text{Hz}, \text{ step} = 2\ 500\ \text{Hz} \\
 \text{s. t. } &\begin{cases} 4\ \text{mm} \leq l_1 \leq 8\ \text{mm} \\ 0.4\ \text{mm} \leq d \leq 0.6\ \text{mm} \\ 0.3\ \text{mm} \leq h \leq 3.3\ \text{mm} \\ 0.6\ \text{mm} \leq w_1 \leq 1.2\ \text{mm} \end{cases} \quad (19)
 \end{aligned}$$

表 6 响应面模型预测与有限元仿真对比

Table 6 Comparison diagram of the response surface model prediction and the finite element simulation

Fre /Hz	l_1 /mm	d /mm	h /mm	w_1 /mm	响应面 /Hz	有限元 /Hz	相对误差/%
15 000	6.39	0.42	0.72	0.86	15 000	16 148	7.6
17 500	6.81	0.42	1.92	1.12	17 500	18 885	7.9
20 000	6.0	0.41	3.12	0.9	20 000	19 579	2.1
22 500	4.84	0.41	1.19	0.67	22 500	21 451	4.7
25 000	4.69	0.42	0.93	0.71	25 000	23 666	5.3

结果表明, 在 $15\ 000\ \text{Hz} \leq Fre \leq 25\ 000\ \text{Hz}$ 内, 响应面模型预测值与有限元仿真结果误差均小于 8%, 基本可以满足 QEPAS 系统对石英音叉计算需求, 误差存在的原因在于石英音叉共振频率与其结构参数之间呈现较为复杂的非线性关系, 因而表现出了预测值与仿真值之间的偏移, 但响应面计算方法仍然可以作为 QEPAS 系统中对石英音叉结构反求设计时的参考, 通过有限元仿真方法进行参数修正或加大实验样本, 可以在一定程度上提高预测模型的准确性。

5 结论

针对 QEPAS 系统中重要部件石英音叉的低阶有效共振频率进行了分析计算, 利用单因素法了解了石英音叉形位尺寸对低阶有效共振频率的影响情况, 利用响应面法获得了二次回归响应面模型与各设计变量间的交互作用, 并进行了响应面模型的评估, 结论如下:

(1)对常用 32.768 kHz 的石英音叉进行有限元模态仿真, 获得了石英音叉前 6 阶振型与模态频率, 理解了石英音叉第 4 阶对称摆动振型为有效振动, 仿真结果与出厂标定值误差仅为 4.6%, 验证了所建模型与仿真方法的有效性;

(2)利用单因素法仿真分析了石英音叉的音臂长度 l_1 、音臂宽度 w_1 、音臂厚度 t 、音臂切角 θ 、音臂圆孔直径 d 、音臂圆孔高度 h 参数对低阶有效共振频率 Fre 的影响, 通过灵敏度模型表征参数影响程度依次为: $l_1 > w_1 > d > \theta > t > h$, 考虑设计需求, 筛选出了 4 个石英音叉设计变量为: l_1 , w_1 , d 与 h ;

(3)采用 Box-Behnken 实验设计策略, 基于 RSM 方法, 以 Fre 为函数目标, 建立 l_1 , w_1 , d 与 h 的二次回归响应面模型, 得到了参数之间的交互作用, 利用 Design-Expert 软件对响应面模型进行设计参数反演, 结果表明, 在 $15\ 000\ \text{Hz} \leq Fre \leq 25\ 000\ \text{Hz}$ 计算区域内误差较小, 基本满足 QEPAS 系统的计算需求, 所提出的研究与设计方法具有一定通用性, 可为 QEPAS 系统中石英音叉结构设计提供参考依据。

References

- [1] Kosterev A A, Tittel F K, Curl R F, et al. *Optics Letters*, 2002, 27(21): 1902.
- [2] Ma Y, Yu X, Yu G, et al. *Applied Physics Letters*, 2015, 107(2): 1993.
- [3] MA Yu-fei, YU Guang, ZHANG Jing-bo, et al(马欲飞, 于光, 张静波, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2015, 35(11): 3003.
- [4] Dong L, Wu H, Zheng H, et al. *Optics Letters*, 2014, 39(8): 2479.
- [5] Zheng H, Dong L, Sampaolo A, et al. *Applied Physics Letters*, 2016, 109(11): 1902.
- [6] Wu H, Yin X, Dong L, et al. *Applied Physics Letters*, 2017, 110(12): 121104.
- [7] Liu K, Guo X, Yi H, et al. *Optics Letters*, 2009, 34(10): 1594.
- [8] Yi H, Liu K, Chen W, et al. *Optics Letters*, 2011, 36(4): 481.
- [9] WANG Gui-shi, YI Hong-ming, CAI Ting-dong, et al(王贵师, 易红明, 蔡廷栋, 等). *Acta Physica Sinica(物理学报)*, 2012, 61(12): 120701.
- [10] ZHANG Zhou-qiang, JIA Shu-hai, MA Bin-shan(张周强, 贾书海, 马斌山). *Journal of Xi'an Jiaotong University(西安交通大学学报)*, 2014, 48(7): 96.
- [11] GU Hai-ming, ZHOU Yong-jun(顾海明, 周勇军). *Theory and Application of Mechanical Vibration(机械振动理论与应用)*. Nanjing: Southeast University Press(南京: 东南大学出版社), 2007.
- [12] Usher M B. *Catena*, 2001, 42(2-4): 375.
- [13] HE-Wei, XUE Wei-dong, TANG Bin(何 为, 薛卫东, 唐 斌). *Optimizing Experimental Design Method and Data Analysis(优化实验设计方法及数据分析)*. Beijing: Chemical Industry Press(北京: 化学工业出版社), 2012. 218.

Modal Simulation Calculation and Research of Tuning Fork Based on QEPAS System

CHENG Gang^{1,2,3}, CAO Yuan², LIU Kun^{1*}, CAO Ya-nan^{1,2}, TIAN Xing^{1,2}, CHEN Jia-jin^{1,2}, YANG Gang², GAO Xiao-ming^{1,2}

1. Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China

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

3. Anhui University of Science and Technology, Key Laboratory of Mine Intelligent Equipment and Technology, Huainan 232001, China

Abstract The finite element modes of the quartz tuning fork in the Quartz Enhanced Photoacoustic Spectroscopy (QEPAS) system were calculated and the first 6 modes and modal frequencies of the quartz tuning fork were obtained. The 4th order symmetrically oscillating vibration mode was recognized as an effective vibration. Single factor method was used to analyze the effects of fork's arm length l_1 , fork's arm width w_1 , fork's arm thickness t , fork's arm cutting angle θ , fork's arm diameter d and fork's arm round hole height h on low effective resonance frequency (Fre). The results of the sensitivity sensitivity were as follows: $l_1 > w_1 > d > \theta > t > h$. Considering the actual design situation, four design parameters of quartz tuning fork l_1 , w_1 , d and h were screened. Using Box-Behnken experimental design and RSM (Response Surface Methodology) method, Fre was set as a function target to establish l_1 , w_1 , d and h quadratic regression response surface model, and get the interaction between the parameters. The Design-Expert software was used to inverse the design parameters of the response surface model. The results showed that the error in the calculation area of $15\ 000\ \text{Hz} \leq Fre \leq 25\ 000\ \text{Hz}$ is small, and basically meets the calculation requirements of QEPAS system. The proposed research and design methods have some generality, which can provide references for the design of quartz tuning fork structure in QEPAS system.

Keywords Photoacoustic spectroscopy; Quartz tuning fork; Modal; Experimental design; Response surface method

(Received Dec. 12, 2017; accepted Apr. 6, 2018)

* Corresponding author