基于谱线频率特征的调谐二极管激光吸收光谱参数分析

尚侯飞1, 杜振辉2, 3, 高 楠1, 3*, 李金义4, 肖艳军1, 孟召宗1, 张宗华1

1. 河北工业大学机械工程学院, 天津 300130

2. 天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室, 天津 300072

3. 天津大学微光机电系统技术教育部重点实验室, 天津 300072

4. 天津工业大学天津市电工电能新技术重点实验室, 天津 300387

摘 要 调谐激光二极管吸收光谱(TDLAS)技术因其高分辨率、高灵敏度和快速测量等优点在工业生产、 环境污染监测等方面受到广泛应用。波长调制光谱(wavelength modulation spectrum, WMS)的二次谐波信 号经常用作气体浓度反演的检测信号。TDLAS 检测性能与系统参数,如锁相放大器的时间常数、扫描幅度、 扫描频率、调制幅度、调制频率等的选取紧密相关,实际测量中各参数的选择多以谱线形态特征为依据,参 数之间的关联性未能得到较好体现。由于信号的采样与处理均在频域对谱线产生作用,各参数之间的作用 相互关联。然而很少有研究参数对谱线频域的影响,针对此问题,在一定的理论基础上通过实验分别观察各 调制参数对二次谐波信号的影响。通讨保持其他参数不变,只改变一个参数的方法,得出各个参数对信号线 型、频率特征及噪声引入的影响规律,继而分析并验证了多参数联合变化对谱线频带的决定作用。与基于时 域特征的传统方法相比,基于谱线频率特征分析一方面具有与谱线信号采集检测处理机理相近的优点,另 一方面可以直观得到各参数对主频带的影响和不同频率信号的衰减趋势。总结出基于频率特征的各参数的 基本选取方法,以谱线频带和截止频率相互关系为判定标准,截止频率的大小由锁相放大器时间常数决定。 通过设置合适的时间常数和扫描参数使信号频带与截止频率相近但不相交,使谱线频带内频率分量不产生 衰减,频带外噪声得到最大抑制;再根据锁相放大器的性能和信号信噪比来确定调制参数,使谱线主频幅度 最大:最后根据系统需求确定采样率。单周期采样点不变时,低扫描频率时检测精度相对提高但耗时较长; 反之,扫描频率提高,速度变快但检测精度下降。通过联合影响规律调整关联参数,减小硬件限制对参数最 优值选取造成的影响。可在考虑系统检测需求与硬件条件限制的前提下,通过参数选择得到最优二次谐波 信号,为此技术的实际应用提供了参数优化的实验依据与参考方法。

关键词 调制参数;频域分析;调谐二极管激光吸收光谱;参数选择 中图分类号: O433.4 文献标识码: A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)11-3359-06

引 言

调谐激光二极管吸收光谱技术具有高灵敏度、实时、响应速度快、多组分同时测量等优点,在痕量气体分析^[1]、环境监测^[2]及燃烧诊断^[3]等方面受到广泛关注和研究。调谐激光二极管吸收光谱(tunable diode laser absorption spectroscopy, TDLAS)参数的选择直接影响谱线质量与检测精度,这些参数在检测过程中很难同时调整到最优状态,并存在多参

数共同影响检测结果的现象。因此在实际工作中,需要根据 不同的测量目的来调整调制参数,这使得调制参数的优化成 为提升系统性能的重要问题。

调制参数的研究一直受到广泛关注。Stewart^[4]等通过选 择适当的调制指数和调制频率反演获得了信号线型。陈玖 英^[5]等给出了直接吸收法中扫描频率的选择依据。张志荣^[6] 等通过改变扫描频率及幅度变化和调制频率及幅度变化,对 谱线信号峰的峰值、对称性、信号展宽和完整性等方面进行 了分析。李晗等比较了不同调制系数下的二次谐波信号的峰

收稿日期: 2018-09-28, 修订日期: 2019-01-10

基金项目:河北省自然科学基金项目(F2014202065),国家自然科学基金项目(61505142),微光机电系统技术教育部重点实验室(天津大学) 开放基金项目资助

作者简介:尚侯飞,女,1994年生,河北工业大学机械工程学院硕士研究生 e-mail: houfei1102@163.com * 通讯联系人 e-mail: ngao@hebut.edu.cn

值和峰宽的变化情况。张锐^[7]等除了研究调制参数对谐波线 型的影响,还给出了调制幅度对线型及 RAM 噪声^[8]水平的 影响规律。这些只是对部分参数从理论方面进行分析,在实 际中并没有给出选择依据,且大部分是基于谱线时域形态特 征的优化。

以谱线形态为依据优化系统参数,虽然直观简便但各参 数之间对谱线形态的影响没有明显的关联性。在检测机理上 系统采样率决定信号的频域分辨率,调制参数决定谱线的频 带范围,时间常数决定锁相放大器低通滤波器的带宽进而影 响二次谐波信号。上述参数都作用于吸收谱线的频域信号且 互相关联,在频域内可以很直观的分析不同参数对主频带的 影响以及不同时间常数下谐波信号的衰减情况。频域分析的 前提是波长调谐速率保持恒定,即横坐标采样点与波长呈线 性关系。

本文对 TDLAS 的二次谐波信号进行频域分析,分别研 究了调制参数、扫描参数、锁相放大器时间常数以及多参数 联合调整对信号主频带、主频幅度和信号衰减的影响。总结 影响规律进而给出了参数选择的依据。选择最佳的参数可获 得高质量的二次谐波信号,精确检测出痕量气体包含的信息。

1 基本原理

TDLAS 技术的理论基础是 Lambert-Beer 吸收定律。在 用来表示气体浓度等特性时一般选用二次谐波^[9]。

在检测系统中,信号发生器产生扫描信号和调制信号。 扫描信号被送入激光驱动器来控制激光器发射反复扫描的调制光,在光程池内被样品吸收后由光电探测器转换成电信 号,经前置放大器送至锁相放大器^[10]与倍频信号进行二次 谐波检测,经数据采集卡送入计算机进行分析处理。

扫描幅度影响激光器的波长范围,扫描频率决定信号频率。由于解调得到的高次谐波信号的幅值仅与相应的波长和 调制幅度有关,所以调制幅度决定着谐波信号的幅度和线型。当谐波次数恒定时,调制频率越高噪声抑制能力越强。 但过高的调制频率需要高性能的锁相放大器。时间常数 (time constant, T_c)是影响解调结果的重要参数,它决定了 低通滤波器的带宽,其与待测信号带宽的重叠情况影响着信 号频域分量的抑制程度。因此,时间常数决定着信号的衰减 程度,即影响信号的幅频特征。综上所述,影响信号质量的 重要参数有调制幅度、调制频率、扫描幅度、扫描频率和锁 相放大器的时间常数,本文将对上述参数进行频域分析。

2 实验部分

在上述系统中,用LD1582 激光器检测 CO₂ 气体,实验 初始条件为扫描频率 10 Hz、扫描幅度 2.8 V、调制频率 10 kHz、调制幅度 1.2 V、采样率 2.4 kHz、采样时间 10 s,每 周期 240 个点,共 100 周期 24 000 点,以 100 周期平均后的 信号作为研究对象。

2.1 锁相放大器时间常数对信号频域特征的影响

其他参数均为初始值,图1为不同时间常数下的信号时 域图。



由图 1 可知,信号在 30 和 100 ms 时不具有典型二次谐 波的特征。对信号时域图进行频谱转换得到信号频域图,各 谱线频谱包络线如图 2 所示。不同时间常数下谐波信号的主 频带都为 30~60 Hz;主频带幅值随时间常数的增大而减小。 这是由于输出信号要通过低通滤波器,锁相放大器的通带宽 度取决于低通滤波器的时间常数,截止频率 $f=1/2\pi T_c$,时 间常数增大截止频率变小,滤除信号中相对高频成分。当时 间常数变大时,低通滤波器的截止频率降低,输出信号主频 带被抑制导致线型的失真。不同时间常数的截止频率如表 1 所示。





表1 不同时间常数的截止频率

Table 1 Cutoff frequency for different time constants

时间常数/ms	截止频率/Hz
0.3	530.516 5
1	159.154 9
3	53.051 6
10	15.915 5
30	5.305 2
100	1.591 5

信号频谱和频率响应曲线图如图 3 所示。由表 1 和图 3 可知,时间常数为 0.3 和 1 ms 时截止频率远远大于二次谐 波信号主频频带;50 Hz 之前的信号没有衰减,此时的信号 等同于原始信号。时间常数为 3 和 10 ms 时的截止频率距离 主频带最近,此时的信号既没有失真也抑制了噪声,说明当 前时间常数比较合适。时间常数为 30 和 100 ms 时,截止频 率远小于主频频带,信号大幅度衰减失真。





……:频率响应曲线;-*-:频谱线

Fig. 3 Spectrogram and frequency response curve at different time constants with modulation amplitude of 1.2 V

.....: The frequency response curve; -*-: The spectral line

2.2 调制幅度对信号频率特征的影响

当锁相放大器的时间常数为 0.3 ms 时,二次谐波信号 的衰减最小,因此选择该时间常数下的信号进行比较。不同 调制幅度下的信号频谱如图 4 所示。







调制幅度不会影响信号频率,理论上信号主频带应相同。而图4中,主频带宽随调制幅度的增加而减小,与理论 不符。这可能是低调制幅度引入了较多的高频噪声信号。所 以从频域上来看要选择较大的调制幅度。

2.3 调制频率对信号频率特征的影响

时间常数为1 ms 时,其他三个参数保持不变,不同调制 频率的信号频域图如图 5 所示。

由图 5 可知,调制频率对信号的主频带没有影响。主频

最大幅值随调制频率的增加先变大后变小。由于大部分背景 噪声的特点是低频段强度大高频段强度低,所以应增加调制 频率以抑制背景噪声。然而,调制频率的增大会增加成本和 系统硬件的要求。所以调制频率要在考虑系统硬件性能和信 号幅值的前提下在一定范围内选取。



图 5 时间常数为 1 ms 时不同调制频率的信号频谱图

Fig. 5 Spectrogram of the signal with different modulation frequencies when the time constant is 1 ms

2.4 扫描幅度对信号频率特征的影响

选择不同的扫描幅度,观察信号频域特征值。时间常数 为10 ms的不同扫描幅度的频谱图如图 6 所示。



Fig. 6 Spectrum of different scanning amplitudes when the time constant is 10 ms

由图 6 可知,扫描幅度增大,主频带向高频移动,幅值 减小。选取扫描幅度时,在保证能得到完整吸收线的前提下 选择较小的扫描幅度。

2.5 扫描频率对频率特征的影响

时间常数为1 ms 时,不同扫描频率的信号频谱图如图7 所示。

由图 7 可知,随着扫描频率增加,信号主频带范围越大 主频幅度越小。随着扫描频率增加,信号主频带向高频方向 移动,当信号慢慢接近并超过锁相放大器的低通截止频率 时,信号的幅值发生衰减。研究扫描频率为4 Hz时不同时 间常数的信号频域图和频率响应曲线。如图 8 所示。

由图 8 可知,信号频谱图的主频带为 6~12 Hz。3 ms 之前由于截止频率远大于信号主频带信号基本没有衰减;10 ms 时截止频率与主频带最接近信号没有失真且噪声受到抑

制; 30 ms之后信号已经失真。在时间常数一定时,扫描频 率越大被抑制的程度越大。虽然扫描频率变小时信号幅值高 噪声小,但要在满足系统的响应时间的基础上减小。当扫描 频率较大时,需要减小锁相放大器时间常数以提高截止频 率,避免信号幅度的衰减。所以不同的扫描频率需要适当的 时间常数以确保获得更好的二次谐波信号。



0.3 ms 0.3 ms 1 ms3 m 30 ms10 ms 140 1 ms 3 ms 120 3 ms Amplitude/a.u. 100 10 ms 10 ms 80 30 ms 60 30 ms 100 ms 40 100 ms 20 10^{4} Ω Frequency/Hz 10² 10^{2} 10^{-2} 10⁰ Time constant/ms 10^{0}

图 8 扫描频率为 4 Hz 不同时间常数信号频谱图和 频率响应曲线

……:频率响应曲线; -*-:频谱线

Fig. 8 The frequency spectrum and frequency response curve of different time constant signals when the scanning frequency is 4 Hz

.....: The frequency response curve; -*-: The spectrum line

2.6 扫描频率和采样率同时调整对频率特征的影响

由公式采样点×扫描频率=采样率可知,采样点一定时 扫描频率与采样率相互影响。联合调整采样率和扫描频率使 采样点不变。本次实验设定每个周期采样点为 240,时间常 数为 0.3 ms。选取三组不同的扫描频率和采样率,如图 9 所 示。

图 9 为时间常数 0.3 ms 时扫描频率采样率联合调整的 时域图和频域图。由图 9(a)可以看出,三组谱线的峰宽相 同;扫描频率与采样率最小时,峰值最高。由图 9(b)可知, 三组信号的主频带一致;扫描频率与采样率最小时,信号幅 度最高且噪声最小,由此可知此时信噪比大。所以当采样点 不变时,信号主频带基本不受影响;扫描频率与采样率越



- 图 9 时间常数为 0.3 ms 时扫描频率和采样率 联合调整的(a)时域图,(b)频谱图
- Fig. 9 Combined adjustment of scanning frequency and sampling rate when the time constant is 0.3 ms (a) Time domain diagram, (b) Spectrogram



图 10 时间常数 0.3 ms (a)乘积为 21.504 的频域图, (b)乘积为 56 的频域图

Fig. 10 Time constant 0. 3 ms (a) Frequency domain plot with product of 21. 504, (b) Frequency domain plot with product of 56

2.7 扫描频率和扫描幅度的乘积对频率特征的影响

扫描频率和扫描幅度都会影响信号幅频特性,由以往的 研究可知理论上信号的主频频带范围=扫描幅度×扫描频 率/比例系数,当时间常数恒定时,主频带范围影响输出信 号。实验选取了两组不同乘积进行分析,分别为 21.504 和 56,每组乘积下选取三组不同的扫描幅度和扫描频率,具体 数值见图 10。时间常数为 0.3 ms 时两组乘积下的信号频谱 图如图 10 所示。

由图 10 可知,当扫描幅度与扫描频率乘积相同时,信号的频率特征基本一致,随着乘积的增加,信号主频带向高频 方向移动且幅值减小。

3 结果与讨论

锁相放大器的通频带宽取决于低通滤波器的时间常数, 信号主频带与截止频率的距离影响信号的衰减程度。根据二 者的距离选取合适的时间常数,使两者相近但不重叠,既保 证主频信号不失真又抑制了噪声,有足够大的信噪比。本文 研究的系统中选取了时间常数为10 ms。表 2 总结了时间常 数10 ms 时各参数对谐波信号的影响。其中"+"表示单调递 增,"-"表示单调递减,"max"表示存在最大值,"~"表示 不变。

在进行参数选择时,首先选择时间常数。时间常数决定 低通滤波器的截止频率,使得信号频带与截止频率相近但不 相交;谱线频带位置和宽度由扫描幅度与扫描频率的乘积决 定。在保证完整谐波信号的基础下,尽可能的选取低扫描幅 度,选择合适的扫描频率使频带外噪声受到抑制;结合信号

References

- [1] ZHANG Zhi-rong, SUN Peng-shuai, PANG Tao, et al. Optical Engineering, 2016, 55(7): 076107.
- [2] Li J, Yu B, Zhao W, et al. Applied Spectroscopy Reviews, 2014, 49(8): 666.
- [3] Bolshov M A, Kuritsyn Y A, Romanovskii Y V. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2015, 106: 45.
- [4] Stewart G, Bain J R P, Ruxton K, et al. Journal of Lightwave Technology, 2011, 29(6): 811.
- [5] CHEN Jiu-ying, LIU Jian-guo, HE Ya-bo, et al(陈玖英, 刘建国, 何亚柏, 等). Acta Photonica Sinica(光学学报), 2013, 33(2): 0230003.
- [6] ZHANG Zhi-rong, SUN Peng-shuai, XIA Hua, et al(张志荣,孙鹏帅,夏 滑,等). Acta Photonica Sinica(光子学报), 2015, 44(1): 0114002.
- [7] HU Ya-jun, ZHAO Xue-hong, ZHANG Rui, et al(胡雅君, 赵学玒, 张 锐, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2013, 33(11): 1130002.
- [8] WANG Yan, ZHANG Rui(王 燕,张 锐). Acta Optica Sinica(光学学报), 2016, 36(2): 0230002.
- [9] Neethu S, Verma R, Kamble S S, et al. Sensors and Actuators B: Chemical, 2014, 192: 70.
- [10] Ortegarobles E, Cruzorea A, ElíasViñas D. Review of Scientific Instruments, 2018, 89(3): 034904.

时域峰值信噪比和频域信号主频幅度与噪声,选择合适的调制幅度;考虑到信号幅值和锁相放大器的性能,调制频率应 在一定范围内取值。在采样点不变时,低扫描频率的采样率 小,采样时间长,检测精度相对提高但耗时较长;反之,扫 描频率增加,速度增加但检测精度下降。根据测量系统的硬 件情况和目的进行选择,提高测量精度速度得到最佳的谐波 信号。

表 2 实验结果总结

Table 2	Summary of	of	experiment	al	resul	ts
---------	------------	----	------------	----	-------	----

各参数	主频带	主频幅度
调制幅度	_	+
调制频率	\sim	max
扫描幅度	+	—
扫描频率	+	—
扫描频率和采样率	\sim	—
扫描幅度与扫描频率的乘积	+	—

4 结 论

分析了 TDLAS 的系统参数对信号频域特征的影响。得 到了锁相放大器时间常数的选取方法;总结了扫描幅度、扫 描频率、调制幅度、调制频率以及多参数联合调整对谐波信 号的主频带宽和主频幅值的影响。此外,给出了各参数的选 取依据,对实际测量具有较强的指导意义。

Parameter Analysis of Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy Based on Spectral Frequency Characteristics

SHANG Hou-fei¹, DU Zhen-hui^{2, 3}, GAO Nan^{1, 3*}, LI Jin-yi⁴, XIAO Yan-jun¹, MENG Zhao-zong¹, ZHANG Zong-hua¹

- 1. School of Mechanical Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China
- 2. State Key Laboratory of Precision Measuring Technology and Instruments, Tianjin University, Tianjin 300072, China
- Key Laboratory of Micro Opto-electro Mechanical System Technology, Ministry of Education, Tianjin University, Tianjin 300072, China
- 4. Key Laboratory of Advanced Electrical Engineering and Energy Technology, Tianjin Polytechnic University, Tianjin 300387, China

Abstract Tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) technology is widely used in the industrial production and environmental pollution monitor due to its high resolution, high sensitivity and fast measuring speed. The second-harmonic signal of wavelength modulation spectroscopy (WMS) is often used as the detection signal for gas concentration inversion. The detection performance of TDLAS is closely related to the system parameters, such as the time constant of lock-in amplifier, scanning amplitude, scanning frequency, modulation amplitude and modulation frequency. The selection of each parameter in practical measurement is mostly according to the spectral line shape characteristics, in which method the relevance between each parameter is not considered completely. Since the signal sampling and processing affect the spectral line in the frequency domain, the mechanism of influence between parameters is interrelated. However, the influence of each parameter on the frequency domain of the signal was rarely researched. Aiming at this problem, the influence of modulation parameters on second harmonic signals was observed by experiment based on a certain theory in the present paper. The influence of each parameter on signal line shape, frequency characteristics and introduced noise was obtained when only one parameter was changed with all other parameters unchanged. Then the determinant of multi-parameter joint changes on spectral frequency band was analyzed and verified. Compared with traditional methods based on time-domain features, spectrum analysis from frequency characteristics has the advantages not only similar to the principle of spectrum signal acquisition, detection and processing, but also intuitive to get the influence of various parameters on the main frequency band and the attenuation trend of different frequencies signals. The basic selection method of each parameter was summarized based on spectral frequency characteristics. Firstly, the time constant and the scanning parameters should be reasonably set with the judgment criteria of the relationship between the spectral frequency band and the cutoff frequency, which is determined by the time constant of the lock-in amplifier. The appropriate time constants and scanning parameters should be set so that the signal frequency band is close to but not intersected with the cut-off frequency, the in-band components are not attenuated, and the out-band noise is maximally suppressed. Then, the modulation parameter should be determined to maximize the main frequency component amplitude of the spectrum on the basis of the function of lock-in amplifier and the spectrum signal noise ratio. Finally, the sampling rate should be determined according to the system requirements. When the sampling points of one period remain unchanged, the detection accuracy is relatively improved at low scanning frequency but the sampling time increases, on the contrary, the sampling speed increases and the detection accuracy decreases at a higher scanning frequency. The interrelated parameters should be adjusted simultaneously to reduce the influence of the hardware limit on the parameter optimal selection. In this paper, the optimal second harmonic signal can be obtained by parameter selection in the premise of sufficiently considering the system detection requirements and hardware condition limitations, which provided experimental basis and reference method of parameter optimization for the practical application of such technology.

Keywords Modulation parameters; Frequency domain analysis; Tuned diode laser absorption spectroscopy; Parameter selection

(Received Sep. 28, 2018; accepted Jan. 10, 2019)

* Corresponding author