

DOI:10.16136/j.joel.2023.03.0205

基于时域频域分析结合的调谐激光吸收光谱检测参数优化

于永波¹, 杜振辉^{2,3}, 高楠^{1,3*}, 李金义⁴, 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:随着调谐激光吸收光谱(tunable laser absorption spectroscopy, TLAS)技术在气体检测中的应用越来越广泛,二次谐波信号的质量与检测参数紧密相关,因而分析检测参数的优化方法很有意义。本文根据谱线预处理中的滤波参数、系统采样时间、锁相放大器的时间常数对信号的影响以及参数间的联系,总结检测参数的选取规律。根据滤波原理和不同浓度下信号的均方根误差(root mean squared error, RMSE)值选择合适的滤波阶数和窗宽。选择信噪比(signal-to-noise ratio, SNR)、RMSE、信号与噪声频域幅度之比(ratio of amplitude in frequency domain of signal to noise, f_{SNR})3种评价指标的曲线变化趋势进行时频分析,得到最佳采样周期数为30,结合实验系统具体参数可计算最佳采样时间。通过信号主频带与截止频率的关系和滤波效果选择合适的时间常数。综合分析3个检测参数并总结选取方法,可提高二次谐波信号的质量。本文提出的参数选取方法对提高二次谐波在实际应用中的准确度有重要意义。

关键词:调谐激光吸收光谱(TLAS); 参数优化; 时频分析; 信号滤波

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-0086(2023)03-0278-06

Detection parameters optimization of tunable laser absorption spectroscopy based on the combination of time domain and frequency domain analysis

YU Yongbo¹, DU Zhenhui^{2,3}, GAO Nan^{1,3*}, LI Jinyi⁴, MENG Zhaozong¹, ZHANG Zonghua¹

(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; 3. Key Laboratory of Micro Optical Electro Mechanical System Technology, Ministry of Education, Tianjin University, Tianjin 300072, China; 4. Key Laboratory of Advanced Electrical Engineering and Energy Technology, Tiangong University, Tianjin 300387, China)

Abstract: Tunable laser absorption spectroscopy (TLAS) technology has been widely used in gas detection. The quality of the second harmonic signal is closely related to the detection parameters. Therefore, it is very meaningful to analyze the optimization methods of detection parameters. This paper summarizes the selection rules of detection parameters according to the influence of the filter parameters in spectral line preprocessing, the sampling time of the system, and the time constant of the lock-in amplifier on the signal and the relationship between the parameters. The appropriate filter order and window width are selected according to the filtering principle and the root mean squared error (RMSE) value of the signal

* E-mail: ngao@hebut.edu.cn

收稿日期: 2022-03-29 修订日期: 2022-06-08

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

under different concentrations. The three evaluation indicators of signal-to-noise ratio (SNR), RMSE , and the ratio of amplitude in frequency domain of signal to noise (f_{SNR}) are selected for time-frequency analysis to obtain the optimal sampling period value of 30 according to the trend of curves. The optimal sampling time can be calculated according to the specific parameters of the experimental system. The appropriate time constant is selected according to the relationship between the main frequency band of the signal and the cut-off frequency and the filtering effect. The quality of the second harmonic signal can be improved by comprehensive analyzing the three detection parameters and summarizing the selection method. The parameter selection method proposed in this paper is of great significance to improve the accuracy of the second harmonic in practical applications.

Key words: tunable laser absorption spectroscopy (TLAS); parameter optimization; time-frequency analysis; signal filtering

0 引言

调谐激光吸收光谱(tunable laser absorption spectroscopy, TLAS)技术可以得到调谐范围内的吸收光谱,含有更加丰富的谱线信息^[1]。该技术具有光谱分辨率高、非接触、抗干扰能力强等优点,已经成为痕量气体检测中的重要方法^[2],被广泛地应用于痕量气体检测的多个领域^[3-5]。

TLAS技术的应用非常广泛,其检测参数的优化问题也得到更多人的研究。宫学程等^[6]通过仿真分析,计算了调制度、调谐频率和调制频率对谐波测量精度和抗噪性能的影响,对其变化规律进行了总结。吕文静等^[7]基于硬件实验系统与仿真分析,总结了CO₂检测系统的最佳调制参数。JAHROMI等^[8]研究了锁相放大器的时间常数对吸收光谱分辨率和信噪比(signal-to-noise ratio, SNR)的影响。赵鹏^[9]等研究了调制频率对二次谐波的影响,对调制参数进行优化,实现了更低的检测下限。尚侯飞等^[10]分析了TLAS技术的部分系统参数对谱线的影响,通过控制变量法得出系统参数对吸收谱线的影响规律,总结了系统参数的基本选取方法。以上研究只是分别分析了部分检测参数对谱线的影响,对于检测参数例如锁相放大器的时间常数、采样时间、谱线预处理问题等对谱线的影响以及它们之间的联系没有提及。

在TLAS技术中,检测参数如时间常数、采样时间、谱线预处理中的滤波参数等因素均会对谱线产生影响。本文通过TLAS的实验系统获得气体的二次谐波信号,从谱线的频域特征出发,分析3个影响因素之间的相关性以及对谱线的共同影响。通过频域分析,获得检测参数的选取方法,使系统在采集和预处理过程中得到更准确的吸收谱线,从而提高气体检测的精度。

1 基本原理

由Lambert-Beer定律可知,激光器发出的激光束被气体吸收后,激光束的能量发生衰减,光强衰减量与气体浓度和气体经过的光程有关^[11,12]。

平滑滤波是谱线分析中比较常用的预处理方法,本文采用Savitzky-Golay滤波器对光谱曲线进行滤波处理从而减小噪声对光谱曲线的影响。Savitzky-Golay滤波器采用最小二乘拟合的滤波方法,可对信号进行平滑滤波,滤除噪声并保证信号的形状基本不受影响。由于其具有更高的分辨能力,加上其窗宽的选取比较灵活,应用的场合也比较多^[13]。

锁相放大器是谐波检测的关键,它可以从较大噪声中得到频率已知的微弱信号,提高测量精度^[14]。其主要由相敏检测器、低通滤波器、参考通道等组成,核心部分相敏检测器负责从噪声中提取信号^[15]。锁相放大器的截止频率 f 与时间常数 τ_c 的关系为 $f=1/(2\pi\tau_c)$,时间常数增大,截止频率降低,可以去除信号的高频噪声。

2 实验部分

实验系统的原理图如图1所示。

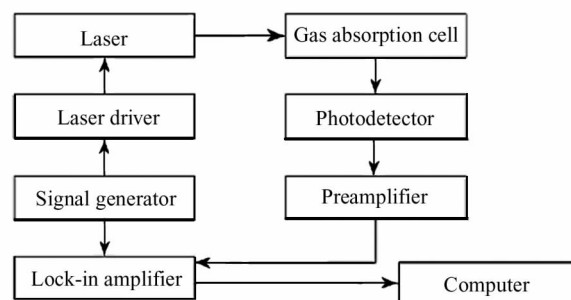


图1 原理图

Fig.1 Schematic diagram

由于实验系统包含的器件较多,所以只对系统主要器件及功能进行介绍。信号发生器为 FLUKE284 任意波形发生器。选择分布式反馈激光器,此激光器适合近红外波长范围内的气体检测。选择的激光驱动器稳定性好,可对激光器进行精确控制。气体吸收池基于 White 原理可增加光程长度。对实验初始条件设定后,采集气体的二次谐波信号。

由图 1 可知,信号发生器产生扫描信号进入激光驱动器、调制信号进入锁相放大器,激光驱动器驱动激光器产生一定波长范围的调制激光,激光在光程池内多次反射被样品充分吸收后经过光电探测器

和前置放大器进入锁相放大器,锁相放大器产生的二次谐波信号进入计算机进行分析处理。

使用图 1 所示实验系统分析 CO₂ 气体,获得不同浓度不同周期的二次谐波信号。对不同浓度不同周期的信号进行时频分析,总结检测参数的选取方法。

2.1 滤波参数选择

在谱线预处理过程中,Savitzky-Golay 滤波器的滤波作用可以降低噪声对光谱曲线的干扰。对相同浓度不同周期数的谱线进行频域分析,得到各个周期的频谱图,各个周期的频谱曲线如图 2 所示。

为了清晰显示各个周期的频谱曲线的特征,谱

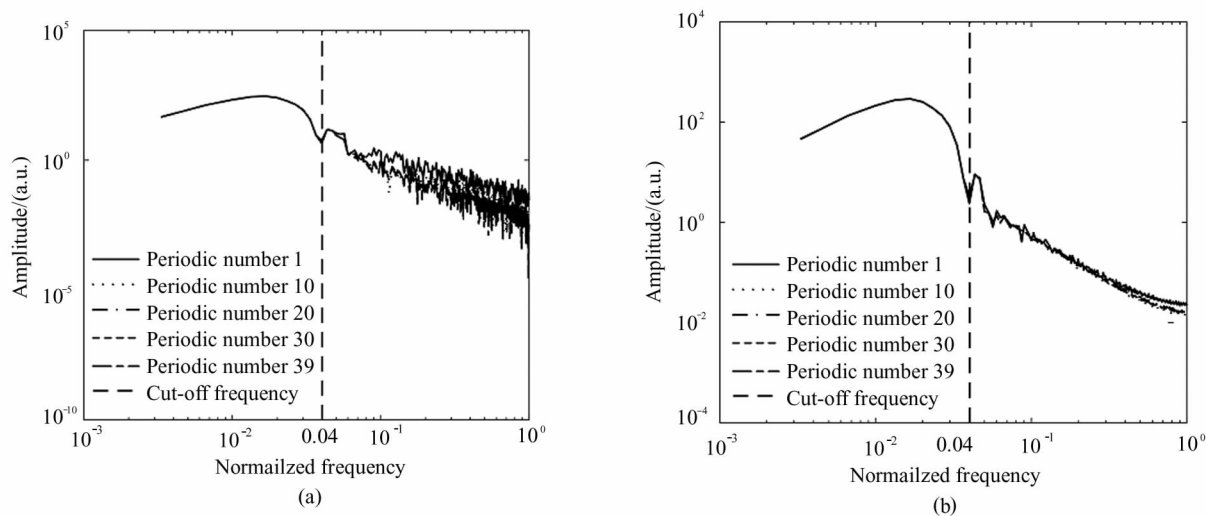


图 2 频率曲线:(a) 滤波前;(b) 滤波后

Fig. 2 Frequency curve:(a) Before filtering; (b) After filtering

线频率和谱线幅度用对数坐标表示。由于分析的周期个数较多,为了使图中线条更清晰,图 2 中仅列出部分周期个数对应的曲线,不同颜色代表了不同周期个数下的频谱曲线。

图 2 为滤波前后光谱的频谱曲线,归一化后的截止频率为 0.04。由图 2 可知,噪声主要集中在较高频率,滤波后高频噪声得到明显抑制,说明选择好参数的滤波器有较好的滤波效果。

在保证滤波效果的同时,应使谱线被处理的采样点数尽可能多。均方根误差(root mean squared error, RMSE)值反应了去噪光谱与原始光谱的幅值差异。信号周期增加, RMSE 值趋于稳定,选择其稳定值作为滤波参数的评价指标。不同浓度不同滤波参数对应的截止频率、谱线的 RMSE 值和未被处理的采样点数如表 1 所示。

由表 1 可知,当滤波阶数达到 6 阶后, RMSE 值

表 1 截止频率及不同参数下的评价指标

Tab. 1 Cut-off frequency and evaluation index under different parameters

Cut-off frequency of normalization	Cut-off frequency /Hz	Order	Window width	The number of unprocessed sampling points at the left and right ends	RMSE value		
					Concentration is 6.3%	Concentration is 54%	Concentration is 100%
0.04	12.04	2	53	26	0.015	0.054	0.047
		4	85	42	0.014	0.045	0.031
		6	115	57	0.014	0.042	0.023
		8	147	73	0.015	0.045	0.023
		10	179	89	0.016	0.048	0.024

都不再下降,说明此时的滤波效果最好,随着阶数的增加,未被处理的采样点数增多。结合采样点被处理的个数和 RMSE 值两个因素,选择滤波器的阶数为 6 阶,此时的窗宽为 115 个采样点。

2.2 采样时间选择

系统参数已知后,可以通过分析信号周期来间接说明采样时间对谱线的影响。分析采样时间对信号质量的影响时,从时间和频率两个方面进行研究。

2.2.1 时域分析

时域分析时,选择 SNR 和 RMSE 作为评价指标,SNR 是信号峰高与噪声的比值。采用已确定参数的滤波器对不同浓度不同周期的信号滤波,根据 SNR 值和 RMSE 值选出最佳谱线周期。不同浓度的 CO₂ 气体对应的 SNR 曲线、RMSE 曲线如图 3 所示。

由图 3 可知,周期达到 30 后 SNR 趋于稳定,周

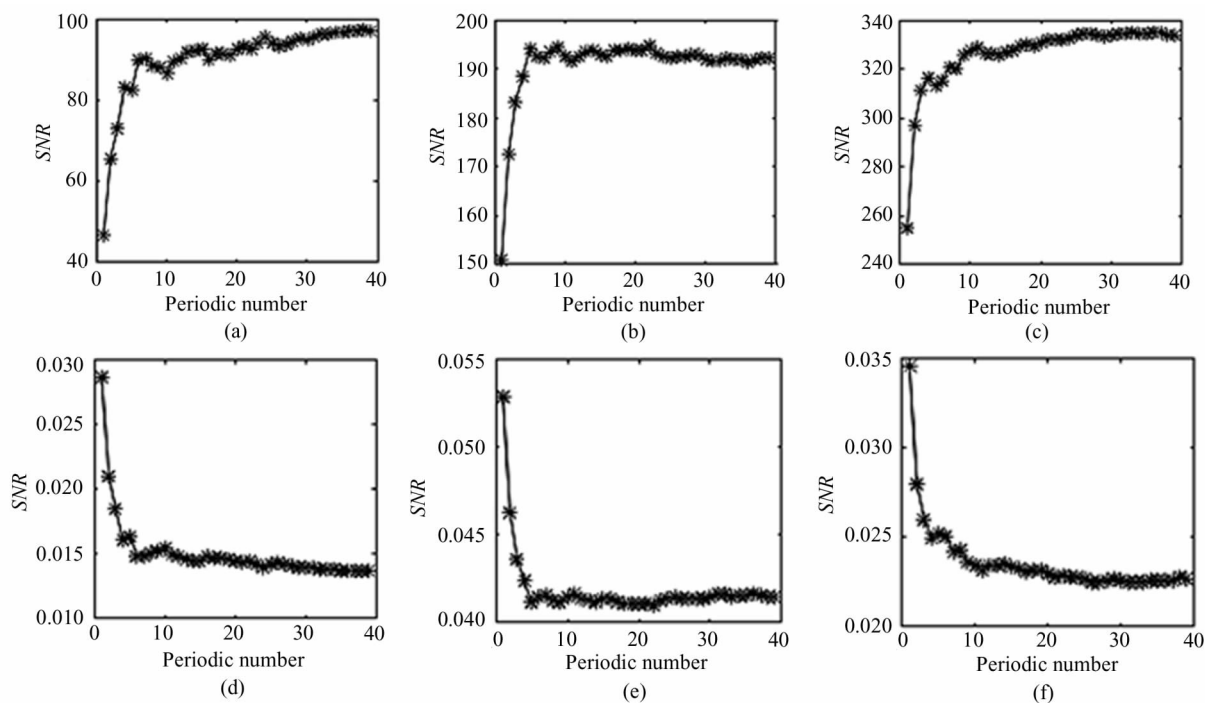


图 3 不同浓度的 SNR 曲线:(a) 6.3%; (b) 54%; (c) 100%

不同浓度的 RMSE 曲线:(d) 6.3%; (e) 54%; (f) 100%

Fig. 3 The SNR curves of different concentrations:(a) 6.3%; (b) 54%; (c) 100%

RMSE curves of different concentrations:(d) 6.3%; (e) 54%; (f) 100%

期达到 26 后 RMSE 趋于稳定。

2.2.2 频域分析

频域分析时,选择频谱图中信号与噪声频域幅度之比(ratio of amplitude in frequency domain of

signal to noise, f_{SNR})作为评价指标,根据 f_{SNR} 曲线选出最佳信号周期。不同浓度的信号对应的 f_{SNR} 曲线如图 4 所示。

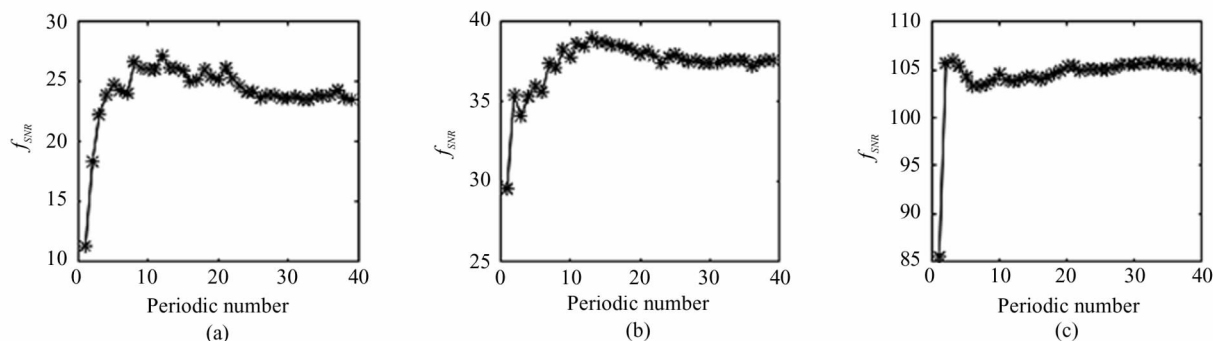


图 4 不同浓度的 f_{SNR} 曲线:(a) 6.3%; (b) 54%; (c) 100%

Fig. 4 The f_{SNR} curves of different concentrations:(a) 6.3%; (b) 54%; (c) 100%

由图 4 可知,信号周期达到 27 后, f_{SNR} 曲线均趋于稳定。

通过对 SNR 曲线、RMSE 曲线、 f_{SNR} 曲线的综合分析,时域分析与频域分析中得到的最佳周期基本一致。当信号周期达到 30 后,曲线均趋于稳定,结合实验系统参数,可计算出最佳采样时间范围。

2.3 时间常数选择

时间常数决定锁相放大器低通截止频率进而影响二次谐波信号。时间常数增大截止频率降低,输出信号的主频带被抑制,信号失真;时间常数减小截止频率升高,对信号中的高频噪声的滤除效果不明显。

归一化后截止频率为 0.04,实际的截止频率为 12.04 Hz,可以计算出对应的时间常数为 13.22 ms。选择 CO₂ 气体来研究时间常数对信号的影响,设置扫描频率为 4 Hz,采样率为 2 400 Hz,锁相放大器的时间常数取值为 1 ms,3 ms,10 ms,30 ms,不同时间常数对应的截止频率为 159.15 Hz,53.05 Hz,15.92 Hz,5.31 Hz。时间常数为 1—30ms 范围内信号时域图和频谱图如图 5 所示。

由图 5 可知,时间常数为 30 ms 时,信号的主频带大于截止频率,信号失真。时间常数为 1 ms 和 3 ms 时,信号没有失真但滤波效果不明显。

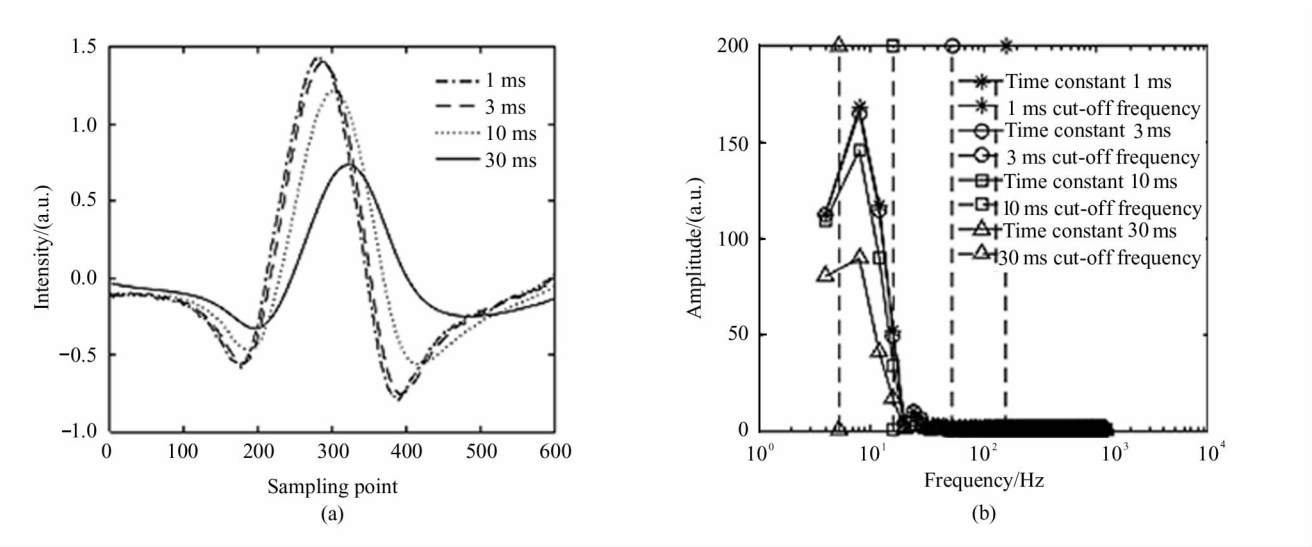


图 5 不同时间常数:(a) 时域图;(b) 频域图

Fig. 5 Different time constants: (a) Time domain diagram; (b) Frequency domain diagram

用功率谱选择 10 ms 时主频带范围,实验结果表明,频率为 16 Hz 时,累计功率占总功率 99% 以上,结合图 5 可以认为主频带范围为 4—16 Hz,此时信号几乎没有失真。当截止频率过高时,高频噪声的滤除效果不明显,根据 2.2 节中的方法计算出 1 ms、3 ms、10 ms、30 ms 时对应的 SNR 值、RMSE 值和 f_{SNR} 值如表 2 所示。

表 2 不同时间常数对应的 SNR 值、RMSE 值和 f_{SNR} 值
Tab. 2 SNR, RMSE and f_{SNR} corresponding to different time constants

Time constant /ms	SNR value	RMSE value	f_{SNR} value
1	293.26	0.115	277.062
3	560.34	0.059	439.658
10	1 446.22	0.021	1 191.714
30	2 120.60	0.009	1 168.949

由表 2 可知,与 1 ms 和 3 ms 相比,10 ms 时的 SNR 值和 f_{SNR} 值最大, RMSE 的值最小,此时的信号抑制噪声效果明显,信号几乎没有失真。因为 30 ms 时信号已经失真,因此,时间常数选择 10 ms 比较合适。

2.4 实验结果及分析

本小节根据 Savitzky-Golay 滤波原理及信号的 RMSE 值,选择阶数为 6、窗宽为 115 个采样点的滤波参数。通过谱线滤波,时域上获得信号的 SNR 值和 RMSE 值,频域上获得 f_{SNR} 值,随着信号周期增加,SNR 曲线、RMSE 曲线、 f_{SNR} 曲线均趋于稳定,得到信号最佳周期为 30,当系统参数已知时,可以通过分析信号周期间接分析采样时间对信号的影响。根据实验得到不同时间常数下信号的时频图,以信号是否失真和不同时间常数下的谱线滤波效果为依据,选择 10 ms 的时间常数。

3 结 论

本文分析了3个检测参数对谱线的影响。分析采样时间时,以 SNR 、 $RMSE$ 、 f_{SNR} 做为评价指标,随着信号周期的增加,3种评价指标对应的曲线均趋于稳定;分析滤波参数和时间常数时,3种评价指标的取值都是在对应曲线稳后选取的。综合分析3个检测参数发现,滤波参数的选择最为重要,参数选择时首先考虑滤波参数的选择。采样时间、时间常数、谱线预处理3个因素相互联系、相互影响,在参数选取过程中应综合分析,以获得最好的吸收光谱信号。本文总结出的当前检测参数的选取规律,同样适用于其他实验系统参数的优化问题,对红外吸收光谱在实际应用中提高准确性方面具有重要的借鉴意义。

参考文献:

- [1] WANG Q J, SUN P S, ZHANG Z R, et al. Separation and analysis method of overlapping absorption spectra with cross interference in gas mixture measurement[J]. *Acta Physica Sinica*, 2021, 70(14): 233-242.
王前进, 孙鹏帅, 张志荣, 等. 混合气体测量中重叠吸收谱线交叉干扰的分离解析方法[J]. *物理学报*, 2021, 70(14): 233-242.
- [2] LIANG W K, WEI G F, HE A X, et al. A novel wavelength modulation spectroscopy in TDLAS[J]. *Infrared Physics & Technology*, 2021, 114: 103661.
- [3] LI C L, SHAO L G, MENG H Y, et al. High-speed multi-pass tunable diode laser absorption spectrometer based on frequency-modulation spectroscopy[J]. *Optics Express*, 2018, 26(22): 29330-29339.
- [4] QI H Y, ZHENG C T. A methane detection device using near-infrared long-path laser absorption spectroscopy[J]. *Journal of Optoelectronics • Laser*, 2020, 31(1): 21-26.
齐海英, 郑传涛. 近红外长光程激光调制吸收光谱甲烷检测仪[J]. *光电子 • 激光*, 2020, 31(1): 21-26.
- [5] GAO G Z, CAI T D, ZHANG T, et al. Sensitive detection of CH_4 based on tunable multi-mode diode laser correlation spectroscopy[J]. *Journal of Optoelectronics • Laser*, 2019, 30(2): 140-145.
高光珍, 蔡廷栋, 张婷, 等. 基于多模激光关联光谱的甲烷气体检测技术[J]. *光电子 • 激光*, 2019, 30(2): 140-145.
- [6] GONG X C, GAO Y F, YANG J, et al. Parameter optimization of TDLAS wavelength modulation pressure measurement method[J]. *Optical Technique*, 2020, 46(2): 134-139.
宫学程, 高一凡, 杨军, 等. TDLAS 波长调制压力测量法参数优化[J]. *光学技术*, 2020, 46(2): 134-139.
- [7] LV W J, LI H L, LI W D, et al. Optimization and experimental research on modulation parameters of TDLAS technology[J]. *Laser Technology*, 2021, 45(3): 336-343.
吕文静, 李红莲, 李文铎, 等. TDLAS 技术调制参数的优化及实验研究[J]. *激光技术*, 2021, 45(3): 336-343.
- [8] JAHROMI K E, NEMATOLLAHI M, PAN Q, et al. Sensitive multi-species trace gas sensor based on a high repetition rate mid-infrared supercontinuum source[J]. *Optics Express*, 2020, 28(18): 26091-26101.
- [9] ZHAO P, SUN W, FU M Y, et al. Measurement of concentration of carbon dioxide gas with TDLAS and modulation parameters optimization[J]. *Journal of Changchun University of Science and Technology*, 2017, 40(6): 57-59+64.
赵鹏, 孙伟, 付明艳, 等. 基于激光吸收光谱技术的 CO_2 痕量检测及调制参数的优化[J]. *长春理工大学学报*, 2017, 40(6): 57-59+64.
- [10] SHANG H F, DU Z H, GAO N, et al. Parameter analysis of tunable diode laser absorption spectroscopy based on spectral frequency characteristics[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2019, 39(11): 3359-3364.
尚侯飞, 杜振辉, 高楠, 等. 基于谱线频率特征的调谐二极管激光吸收光谱参数分析[J]. *光谱学与光谱分析*, 2019, 39(11): 3359-3364.
- [11] CAI S X, SUN B, FENG W W, et al. Research on measurement method of ammonia nitrogen concentration in water based on ultraviolet absorption spectrum[J]. *Journal of Optoelectronics • Laser*, 2021, 32(8): 888-893.
蔡树向, 孙冰, 冯巍巍, 等. 基于紫外吸收光谱法的水中氨氮浓度测量方法研究[J]. *光电子 • 激光*, 2021, 32(8): 888-893.
- [12] ZHANG K, HUANG S Y, LU H B, et al. Experimental study of the light source characteristics for the NH_3 concentration detection[J]. *Optik*, 2020, 209, 164608.
- [13] LIU Y P, DANG B, LI Y, et al. Applications of Savitzky-Golay filter for seismic random noise reduction[J]. *Acta Geophysica*, 2016, 64(1): 101-124.
- [14] LI G L, JIANG Q Z, MA K, et al. Experimental study on methane detection based on cascaded integrator comb of digital orthogonal phase-locked in amplifier[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2021, 50(2): 0212001.
李国林, 蒋庆志, 马坤, 等. 基于 CIC 的数字正交锁相放大器的甲烷检测实验研究[J]. *光子学报*, 2021, 50(2): 0212001.
- [15] SUI Y, DONG M, ZHENG C T, et al. Development of a differential mid-infrared carbon monoxide detection device[J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2016, 37(10): 2282-2289.
隋越, 董明, 郑传涛, 等. 差分式中红外一氧化碳检测仪的研制[J]. *仪器仪表学报*, 2016, 37(10): 2282-2289.

作者简介:

高楠 (1982—), 男, 博士, 副教授, 硕士生导师, 主要从事光学测量与光谱检测等方面的研究。