

DOI: 10.13382/j.jemi.2017.12.010

多谱线 TDLAS 测温中谱线选择的实验研究*

陈亚婧 邱爽 徐立军

(北京航空航天大学 仪器科学与光电工程学院 北京 100191)

摘要:采用可调谐半导体激光吸收光谱技术,利用两条谱线可以测量激光路径上的平均温度。在利用多条谱线测量激光路径的平均温度时,测量的精确度主要受制于测量信号的离散程度以及谱线低能级能量的分散程度。利用中心波长为 1 392.5 nm ($7\,181.32\text{ cm}^{-1}$)的激光器快速扫描 4 条 H_2O 的波数为 7 182.950、7 182.209、7 181.156、7 179.752 cm^{-1} 的吸收谱线,研究了不同的谱线组合方式对激光路径平均温度测量精密度的影响。实验结果表明,进行谱线选取时,通过依次去掉一条谱线并计算其余谱线测量标准偏差的结果,能够快速反映出被去掉谱线对温度测量精确度的权重。通过谱线选择,测量得到的路径上平均温度的标准偏差小于 20 K。

关键词:激光吸收光谱;多谱线测温;谱线选择

中图分类号: TN249 文献标识码: A 国家标准学科分类代码: 510.20

Experimental investigation on absorption line selection in temperature measurement from tunable diode laser absorption spectroscopy

Chen Yajing Qiu Shuang Xu Lijun

(School of Instrument Science and Opto-Electronic Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: Using the tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) technique, the average temperature along the laser path can be measured using two absorption lines. When the average temperature along the laser path is measured by using multiple absorption lines, the measurement accuracy is mainly determined by the deviation of the measured signals and the lower energy of the absorption lines. The laser with a central wavelength of 1 392.5 nm ($7\,181.32\text{ cm}^{-1}$) can rapidly scan four absorption lines of H_2O , in which the wave number is 7 182.950, 7 182.209, 7 181.156, and 7 179.752 cm^{-1} respectively, and investigate the influence of different combinations of spectral lines on precision of average temperature along laser path. The experimental results show that the weight of the accuracy to the measured temperature of every absorption line can be quickly reflected from calculating the standard deviation of the measured temperature. The standard deviation of the average temperature along the laser path is less than 20 K by absorption line selection.

Keywords: laser absorption spectroscopy; multi-spectral temperature measurement; line selection

0 引 言

可调谐激光吸收光谱(TDLAS)技术通过获取特征物质的光谱信息,实现相应的温度、浓度、压力等参数的在线测量。由于其具有快速、非侵入、灵敏度高等优点^[1-7],

在温度测量领域是一种有效的方法,被广泛应用在燃烧诊断、燃烧控制等方面。

国内外学者利用 TDLAS 技术对温度测量进行了大量的研究工作。温度测量主要有温度分布及平均温度的测量。当利用 TDLAS 方法测量平均温度时,一般是通过同一路径上两条吸收谱线测量结果的比值获得该路径上

的平均温度^[8]。例如,通过测量燃烧流场的待测气体的吸收率信息,实现了路径上平均温度的准确快速测量,温度测量的标准偏差约为 40 K^[9-10]。利用两条水的吸收线,对空气平面火焰温度进行测量,温度不确定度为 6.7%^[11]。通过对 1 391 和 1 468 nm 两个激光器采用时分复用的方式,实现了对平焰燃烧炉的温度测量,温度测量的不确定度为 4.2%^[12]。当引入多条吸收谱线时,能够获得激光路径上更多的测量信息。在实际测量中,获得多条谱线的测量值后,测量噪声以及测量谱线本身的低能级能量的分散程度直接影响测量精确度,因此需要进行谱线选择。

本文利用一个中心波长为 1 392.5 nm 的 DFB 激光器,扫描 4 条 H₂O 的吸收谱线,结合加权迭代最小二乘法获得路径平均温度及标准偏差,并给出了一种谱线选择的方法,能够快速反映出不同谱线对温度测量精确度的权重。并通过研究 7 种谱线组合对路径平均温度测量精确度的影响,验证了方法的有效性。

1 TDLAS 测温基本原理

当一束波长为 ν , 强度为 $I_0(t)$ 的激光通过了吸收气体后,带有气体吸收信息的激光光强可以用 $I_i(t)$ 表示,并遵循 Beer-Lambert 定律^[13]。

$$\alpha(\nu) = -\ln\left(\frac{I_i(\nu)}{I_0(\nu)}\right) = P \int_0^L X_{abs}(x) \cdot S(T(x)) \cdot \phi \cdot dx \quad (1)$$

式中: $\alpha(\nu)$ 是吸收系数, L 是吸收路径长度 (cm), $I_0(t)$ 是初始的激光强度, P 是总气压 (atm), T 是温度 (K), X_i 是被测气体对应的摩尔分数, $\phi(\nu)$ 是被测气体的线型函数 (cm)。 $S(T)$ 是被测气体的线强度,且线强度只与温度相关 (cm⁻² · atm⁻¹)。

$$S(T) = \frac{S(T_0)Q(T_0)}{Q(T)} \exp\left[-\frac{hcE'}{k}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \times \frac{1 - \exp(-hc\nu_0/kT)}{1 - \exp(-hc\nu_0/kT_0)} \quad (2)$$

式中: h 为普朗克常数 (J · s), c 为光速 (cm · s⁻¹), k 是玻尔兹曼常数 (J · K⁻¹), $Q(T)$ 是配分函数^[14], ν_0 为吸收谱线中心频率 (cm⁻¹), E' 为吸收跃迁的低能级能量 (cm⁻¹)。

由于线型函数 ϕ 满足归一化条件,因此有 $\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\nu) d\nu \equiv 1$,对于第 i 条吸收谱线,吸收率 $\alpha(\nu_i)$ 的积分面积为 A_i 。

$$A_i = \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(\nu_i) d\nu = P \int_0^L X_{abs}(x) \cdot S(T(x)) dx \quad (3)$$

采用直接吸收测温方法,两条不同吸收谱线的积分吸收率之比 R 仅仅是温度的函数:

$$R = \frac{A_1}{A_2} = \frac{S_1(T)}{S_2(T)} = \frac{S_1(T_0, \nu_1)}{S_2(T_0, \nu_2)} \exp\left[-\frac{hc(E''_1 - E''_2)}{k}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \quad (4)$$

因此,可以求得激光路径上的平均温度的表达式:

$$T = \frac{\frac{hc}{k}(E''_2 - E''_1)}{\ln \frac{A_1}{A_2} + \ln \frac{S_2(T_0)}{S_1(T_0)} + \frac{hc}{k} \frac{(E''_2 - E''_1)}{T_0}} \quad (5)$$

进一步推导,可以得到:

$$\ln \frac{A_2}{S_2(T_0)} - \ln \frac{A_1}{S_1(T_0)} = -\frac{hc}{k}(E''_2 - E''_1)\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right) \quad (6)$$

在计算得到吸收谱线的吸收率积分面积 A_i 后,取低能级能量 E'' 为横坐标,取 $\ln(A/S(T_0))$ 为纵坐标,则此时连接两个点绘出的直线斜率即反映出路径的平均温度值。当有多条谱线参与计算,则此时路径的平均温度不再是两点确定一条直线,而是多点确定一条直线,对路径平均温度的测量有了相应的约束,此时,利用加权迭代最小二乘法 (IRLS) 拟合出的直线的斜率设为 l_k ,则路径上平均温度的计算公式就转化为:

$$T = 1 / \left(-\frac{k}{hc} \cdot l_k + \frac{1}{T_0}\right) \quad (7)$$

2 实验装置与光谱数据获取

为了测量激光路径上的平均温度,搭建了如图 1 所示的测量光路。实验系统由一个可调谐半导体激光器、激光器温度电流控制器、信号发生模块、探测器、标准具、光纤分束器、准直镜、National Instruments 采集卡组成。在待测路径上放置一个长金属管,下方用燃烧炉进行加热。采用金属管有效抑制了燃烧导致的空气对流对测量信号的扰动。实验时,对激光器进行调谐,信号发生模块输出一个锯齿波电压信号,调制激光器驱动电流,实现输出激光波长扫描。



图 1 测量光路
Fig. 1 Optical set-up

实验在常温常压下进行,待测区域路径长度为 44 cm。利用实验室现有中心波长为 1 392.5 nm (7 181.32 cm⁻¹) 的激光器,测得的 4 条谱线的信息如表 1 所示。

表 1 测量的 4 条谱线的信息

Table 1 The measured four absorption lines information

编号	中心频率/ cm ⁻¹	低能态 能量/cm ⁻¹	线强度 $S(T_0)$ / (cm ⁻² · atm ⁻¹)
1	7 182.950	142.278 5	3.75×10^{-21}
2	7 182.209	42.371 7	1.54×10^{-21}
3	7 181.156	136.761 7	1.51×10^{-20}
4	7 179.752	1 216.195 0	1.80×10^{-22}

实测目标温度范围为 300 ~ 500 K,在该温度范围内具有较高温度灵敏度的谱线应该被选取,谱线的温度灵敏度可以由式(8)来描述。

$$\frac{dS/S}{dT/T} = \frac{hc}{k} \cdot \frac{[E'' - E(T)]}{T} \quad (8)$$

其中, $E(T)$ 指的是被吸收物质的特征能量。可由式(9)表示。

$$E(T) = \frac{k}{hc} \cdot \frac{T}{Q(T)} \cdot \frac{d[T \cdot Q(T)]}{dT} \quad (9)$$

本文所研究的水蒸气的 $E(T)$ 值与温度的关系如图 2 所示,随着温度的升高而升高。而吸收谱线的温度敏感性与 $|E'' - E(T)|$ 成正比,在目标温度范围 300 ~ 800 K,水蒸气 $E(T)$ 的范围在 569 ~ 891 cm⁻¹,因此选择的水蒸气的吸收谱线的第能级能量的范围就应大致为 $E'' \ll 569$ cm⁻¹ 或者 $E'' \gg 891$ cm⁻¹。实测得到的 4 条吸收谱线符合要求。

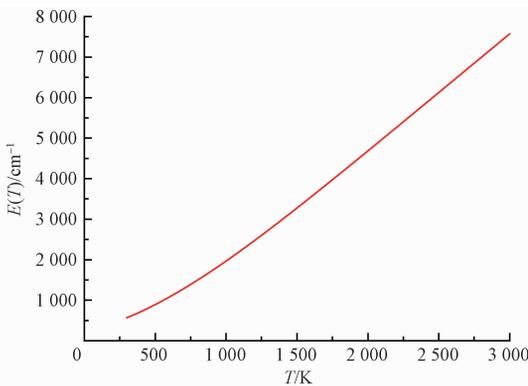


图 2 水的特征能量与温度的关系曲线

Fig. 2 $E(T)$ curve of H₂O

实际测量中需要采集两路激光信号,一路激光通过被测气体后被光电探测器所接收,为测量信号。通过对透射激光光强信号进行分析,可以利用在无吸收时的激光光强信号进行多项式拟合,获得基线;另外一路激光穿

过标准具,为标准具信号。利用标准具将激光强度随时间的变化关系转化为激光强度随波长(或波数)的变化关系。标准具信号的处理,需要计算出自由光谱区(free spectral range,FSR)的个数,以此来获得激光器扫描过的波数,并进行相应换算,最终将 FSR 个数转化为波数。图 3 所示为测量得到的吸收信号和标准具信号。

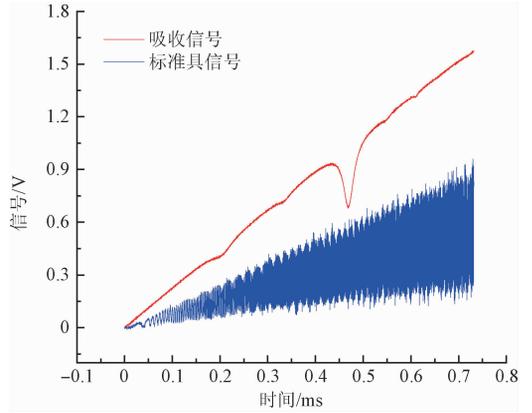


图 3 测量得到的吸收信号和标准具信号

Fig. 3 The measured absorption signal and the etalon signal

最后对吸收峰进行 Voigt 线型函数的拟合,获得吸收率的积分面积(测量值)A,如图 4 所示。

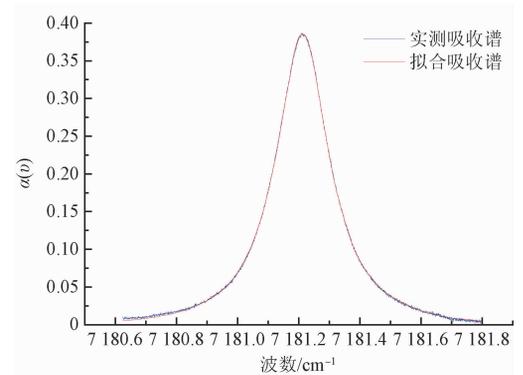


图 4 拟合波数为 7 181.156 cm⁻¹ 的吸收峰

Fig. 4 Fitting absorption peak of wave number 7 181.156 cm⁻¹

3 谱线选取与验证

对实验采集到的 296 组数据进行吸收峰拟合后,可得到 296 组 4 条谱线的测量值。将计算得到的测量值代入,取对应的低能级能量 E'' 为横坐标,取 $\ln(A/S(T_0))$ 为纵坐标,如图 5 所示。图中能够明显反映出谱线 2 的测量值 $\ln(A/S(T_0))$ 离散程度最大,而谱线 3 的 $\ln(A/S(T_0))$ 的离散程度最小。

在对测量得到的 4 条谱线进行选择时,依次去除一

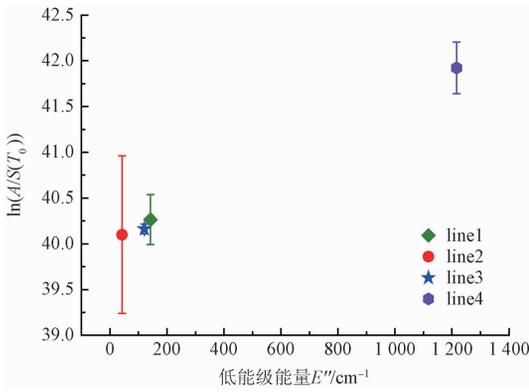


图 5 多次测量的 $\ln(A/S(T_0))$ 离散程度

Fig. 5 The $\ln(A/S(T_0))$ discrete scale in multiple measurements

条谱线的测量结果,用其余 3 条谱线的测量值,对 296 组测量数据,均利用 IRLS 拟合出斜率,求得激光路径的平均温度,并计算出标准偏差。图 6 所示为依次去除一条谱线时计算得到的平均温度的标准偏差。其中,去除谱线 4 时,由于剩余 3 条谱线的低能级能量很接近,因此计算得到的偏差最大,反映出谱线 4 对温度测量精确度的权重最大,此结果与谱线选择的基本原则相一致^[15]。故谱线 4 是必选谱线。而去除谱线 2 时,计算得到的标准偏差最小,反映出谱线 2 的对应的测量数据的离散程度最大,且对温度测量精确度的权重最小。

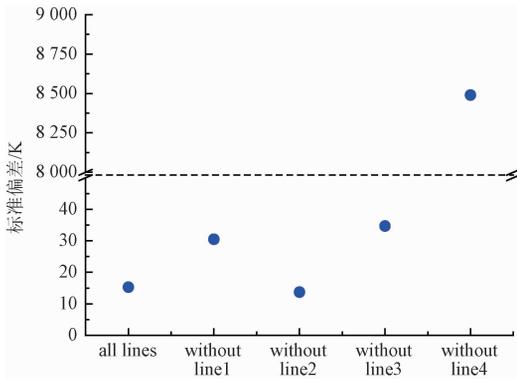


图 6 温度测量结果的标准偏差

Fig. 6 Standard deviation of temperature measurement results

为了验证上述谱线选择方法的有效性,通过比较不同谱线组合计算得到的激光路径平均温度的标准偏差,可以得出表 2 所列结果。由于谱线 2 的 $\ln(A/S(T_0))$ 离散程度最大,所以包含谱线 2 的谱线组合计算得到的路径平均温度的标准偏差都较大,激光路径平均温度的测量精度较低。且由于谱线 3 的 $\ln(A/S(T_0))$ 离散程度最小,所以包含谱线 3 的谱线组合计算得到的路径平均温度的标准偏差都相对小,激光路径平均温度的测量精度

高。与图 6 所示的结果一致。

表 2 不同谱线组合的路径平均温度测量结果

Table 2 Path average temperature measurement results by different combinations of absorption lines

组合编号	谱线组合	平均温度/K	标准偏差/K
1	1,4	434.204	16.704 7
2	2,4	436.821 6	37.470 9
3	3,4	445.065 4	12.667
4	1,2,4	433.764 7	34.685 9
5	1,3,4	439.648 2	13.732
6	2,3,4	437.679 2	30.482 1
7	1,2,3,4	438.815	15.317 3

由此表明,利用多条谱线测温时,通过依次去除一条谱线计算其余谱线测量标准偏差的方式,能够快速反映出被去除谱线对温度测量精密度的权重。当谱线数量增加为 n 时,只需计算 $(n+1)$ 次即可给出所有谱线对温度测量精确度的权重。

7 个不同的谱线组合测量得到的激光路径平均温度如图 7 所示,结果表明进行了谱线选择后,测得激光路径平均温度的标准偏差不超过 20 K。

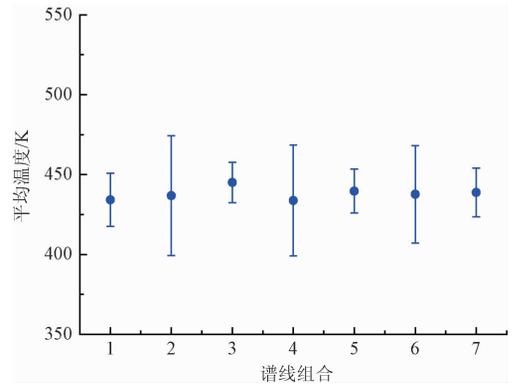


图 7 不同谱线组合测量得到的温度值

Fig. 7 The temperature measured by the different combinations of absorption lines

4 结 论

本文利用不同谱线计算得到的温度测量标准偏差,反映出每条谱线对温度测量精确度影响的权重,实现了谱线的快速选择。后续考虑利用黑体炉对激光路径的平均温度进行标定,分析不同谱线组合对激光路径平均温度测量准确度的影响。

参考文献

[1] CATOIRE V, BERNARD F, BARKI M Y, et al. A

- tunable diode laser absorption spectrometer for formaldehyde atmospheric measurements validated by simulation chamber instrumentation [J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2012, 24(1):22-33.
- [2] LI F, YU X, GU H, et al. Simultaneous measurements of multiple flow parameters for scramjet characterization using tunable diode-laser sensors[J]. *Applied Optics*, 2011, 50(36):6697-6707.
- [3] RIEKER G B, JEFFRIES J B, HANSON R K. Calibration-free wavelength-modulation spectroscopy for measurements of gas temperature and concentration in harsh environments [J]. *Applied Optics*, 2009, 48(29):5546-60.
- [4] CHAO X, JEFFRIES J B, HANSON R K. Absorption sensor for CO in combustion gases using 2.3 μm tunable diode lasers[J]. *Measurement Science & Technology*, 2009, 20(11):115201-115209.
- [5] LIU J T, RIEKER G B, JEFFRIES J B, et al. Near-infrared diode laser absorption diagnostic for temperature and water vapor in a scramjet combustor[J]. *Applied Optics*, 2005, 44(31):6701-6711.
- [6] 顾海涛, 陈人, 叶华俊, 等. 基于 DLAS 技术的现场在线气体浓度分析仪[J]. *仪器仪表学报*, 2005, 26(11):27-30.
- GU H T, CHEN R, YE H J, et al. An field gas concentration analyzer based on diode-laser absorption spectroscopy [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2005, 26(11):27-30.
- [7] LIU C, LIJUN X U, CAO Z. Measurement of nonuniform temperature distribution by combining line-of-sight TDLAS with regularization methods[J]. *Instrumentation*, 2014, 1(3):43-57.
- [8] LIU X, JEFFRIES J B, HANSON R K, et al. Development of a tunable diode laser sensor for measurements of gas turbine exhaust temperature [J]. *Applied Physics B*, 2006, 82(3):469-478.
- [9] ZHOU X, JEFFRIES J B, HANSON R K. Development of a fast temperature sensor for combustion gases using a single tunable diode laser[J]. *Applied Physics B*, 2005, 81(5):711-722.
- [10] BOLSHOV M A, KURITSYN Y A, LIGER V V, et al. Measurements of the temperature and water vapor concentration in a hot zone by tunable diode laser absorption spectrometry[J]. *Applied Physics B*, 2010, 100(2):397-407.
- [11] 李飞, 余西龙, 陈立红, 等. TDLAS 测量甲烷/空气预混平面火焰温度和 H_2O 浓度[J]. *实验流体力学*, 2009, 23(2):40-44.
- LI F, YU X L, CHEN L H, et al. Temperature and water vapour concentration measurements of CH_4 /air premixed flat flame based on TDLAS[J]. *Journal of Experiments in Fluid Mechanics*, 2009, 23(2):40-44.
- [12] 李金义, 杜振辉. 直接吸收光谱时分复用技术双线测温[J]. *激光杂志*, 2015, 36(8):58-62.
- LI J Y, DU ZH H. Temperature sensing using direct absorption spectroscopy combined with time division multiplexing[J]. *Laser Journal*, 2015, 36(8):58-62.
- [13] ALLEN M G. Diode laser absorption sensors for gas-dynamic and combustion flows[J]. *Measurement Science & Technology*, 1998, 9(4):545-545.
- [14] ROTHMAN L S, GORDON I E, BARBE A, et al. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2009, 110(9-10):533-572.
- [15] LIU C, XU L, CAO Z. Measurement of nonuniform temperature and concentration distributions by combining line-of-sight tunable diode laser absorption spectroscopy with regularization methods. [J]. *Applied Optics*, 2013, 52(20):4827-4842.

作者简介



陈亚婧, 2017 年于北京航空航天大学获得硕士学位, 现就职于西安飞行自动控制研究所, 主要从事光纤陀螺的设计和研发。
E-mail: yajingchen0305@163.com

Chen Yajing received M. Sc. from Beihang University in 2017. Now she works in Xi'an Flight Automatic Control Research Institute, and mainly engaged in the design and research of fiber optic gyro.



徐立军, 分别在 1990、1993 及 1996 年在天津大学获得学士学位、硕士学位和博士学位, 现为北京航空航天大学仪器科学与光电工程学院教授, 主要研究方向为燃烧过程监测、工业过程层析成像等。

E-mail: lijunxu@buaa.edu.cn
Xu Lijun received B. Sc., M. Sc., and Ph. D. all from Tianjin University in 1990, 1993 and 1996, respectively. Now he is a professor in School of Instrument Science and Optoelectronics Engineering, Beihang University. His main research interests include combustion process monitoring, and industrial process tomography, etc.