

可调谐二极管激光吸收光谱二次谐波信号的模拟与分析

李 晗, 刘建国, 何亚柏, 何俊峰, 姚 路, 许振宇, 陈玖英, 袁 松, 阚瑞峰*

中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光学与技术重点实验室, 安徽 合肥 230031

摘 要 可调谐二极管激光吸收光谱技术(TDLAS)作为近年来发展起来的一种气体检测技术,具有高分辨率、高灵敏度和快速测量等特点。波长调制光谱信号的二次谐波分量常作为检测信号,用于气体浓度信息的反演。利用 MATLAB 中的可视化建模仿真平台 Simulink,模拟了基于 TDLAS 的波长调制光谱信号,利用锁相放大原理提取二次谐波分量。采用数字锁相,正交双通道结构实现锁相算法。通过比较不同调制系数下二次谐波信号的变化情况,分析了二次谐波信号与调制系数的关系,以便确定最佳参数,用于二次谐波的提取。

关键词 可调谐二极管激光吸收光谱(TDLAS);二次谐波;Simulink;锁相

中图分类号: O433 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2013)04-0881-05

引 言

可调谐二极管激光吸收光谱技术(TDLAS),是利用半导体激光器波长调谐特性,通过电流控制波长扫描获得被测气体特征吸收光谱,从而对痕量气体进行测量的一种技术。这种技术具有高分辨率、高灵敏度和快速测量等特点,已经广泛应用于工业过程监测控制、痕量气体检测、分子光谱研究等领域^[1,2]。

TDLAS 可以分为直接吸收光谱技术和调制吸收光谱技术。在波长调制光谱(WMS)技术中,激光器的注入电流受到慢变的扫描锯齿信号和快变的高频正弦信号共同作用,使激光器的输出波长在气体的吸收峰附近调谐。光束通过气体吸收池后产生吸收信号,该信号可以利用锁相放大器进行谐波检测,解调出二次谐波信号,获得气体吸收的信息。与直接吸收光谱技术相比,波长调制光谱技术提高了检测精度和灵敏度,减少了系统的不稳定性。利用数字锁相进行二次谐波解调,数字锁相灵活应用各种数字信号处理技术,与模拟锁相相比,可以避免模拟锁相存在的温度漂移、相位漂移等缺点,减少信号质量的损失。本工作提出了波长调制吸收光谱二次谐波信号的模拟方法,利用数字锁相算法提取二次谐波信号,分析了相关参数对二次谐波信号的影响。

1 谐波检测原理^[3-6]

根据 Beer-Lambert 定律,当一束频率为 ν 强度为 I_0 的激光通过一气体样品,输出光强 I 可以表示为

$$I(\omega) = I_0(\omega) \exp(-\sigma(\omega)LN) \quad (1)$$

其中, $\sigma(\omega)$ 是吸收系数, L 是吸收光程长, N 是吸收气体的浓度。

当激光的中心频率 ω_L 受到频率为 ω_m 的正弦波调制时,其瞬时频率可表示为

$$\omega = \omega_L + \delta\omega \cos(\omega_m t) \quad (2)$$

式中, $\delta\omega$ 是调制幅度,其典型值与吸收线宽一个量级。光通过样品吸收池后的强度可以用 $I(\omega_L)$ 的余弦傅里叶级数来表示

$$I(\omega_L, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(\omega_L) \cos(n\omega_m t) \quad (3)$$

每个谐波分量 $A_n (n > 0)$ 可以用锁相放大器测得

$$A_n(\omega_L) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} I_0(\omega_L + \delta\omega \cos\theta) \exp\{-\sigma(\omega_L + \delta\omega \cos\theta)LN\} \cos(n\theta) d\theta \quad (4)$$

式中, $\theta = \omega_m t$ 。

当 $I_0(\omega)$ 和 $\sigma(\omega)$ 已知时,上式可以计算得出。在 I_0 不变的理想情况下可以扫描得到吸收线。对于 ppm 量级的痕量气体弱吸收而言, $\sigma LN \ll 1$, 可得到

收稿日期: 2012-07-18, 修订日期: 2012-09-25

基金项目: 国家自然科学基金项目(61108034), (973)前期先导专项(2010CB234607), 中国科学院先导专项(XDA05040102)资助

作者简介: 李 晗, 1987 年生, 中国科学院安徽光学精密机械研究所硕士研究生 e-mail: hanli@aiofm.ac.cn

* 通讯联系人 e-mail: kanruifeng@aiofm.ac.cn

$$A_n(\omega_L) = \frac{2I_0NL}{\pi} \int_0^\pi -\sigma(\omega_L + \delta\omega \cos\theta) \cos(n\theta) d\theta \quad (5)$$

因此，每个谐波分量是直接和痕量气体的浓度 N 成正比的。

对上式的 $\sigma(\omega)$ 进行泰勒级数展开，得到

$$A_n(\omega_L) = \frac{2^{1-n}I_0NL}{n!} \delta\omega^n \left. \frac{d^n\sigma}{d\omega^n} \right|_{\omega=\omega_L} \quad (6)$$

可以看出， n 次谐波的幅值正比于 $\sigma(\omega)$ 的 n 次导数、原始光强 I_0 、光程长 L 以及吸收气体的浓度 N 。

在实际应用中，选择二次谐波分量作为检测信号，取 $n = 2$ 。

$$A_2(\omega_L) = \frac{I_0NL}{4} \delta\omega^2 \left. \frac{d^2\sigma}{d\omega^2} \right|_{\omega=\omega_L} \quad (7)$$

锁相放大器得到的二次谐波信号峰值直接与浓度信号成正比。通过谐波检测可以获得气体的吸收信息。

2 波长调制信号模型

在模拟 WMS 技术的实际吸收信号时，同时考虑了频率调制和幅度调制两方面因素。半导体激光器受慢变锯齿波和快变正弦波信号共同作用，瞬时输出频率 $\nu(t)$ 和输出光强 $I_0(t)$ 可以分别表示为^[7,8]

$$\nu(t) = \bar{\nu}(t) + \delta\nu \cos(\omega_m t) \quad (8)$$

$$I_0(t) = \bar{I}_0(t) + i_0 \cos(\omega_m t + \Psi) \quad (9)$$

其中， $\bar{\nu}(t)$ 和 $\bar{I}_0(t)$ 代表慢变锯齿波引起的输出频率和输出光强的平均变化， $\delta\nu$ 和 i_0 代表正弦波引起的相应的调制幅度。 $\delta\nu$ 也称作调制深度。调制频率用 ω_m 表示，频率调制和幅度调制的相位差用 Ψ 表示。

根据 Lambert-Beer 定律，有

$$I(t) = I_0(t) \exp[-S(T)NLP\phi(\nu)] \quad (10)$$

其中， $S(T)$ 为吸收线线强； N 是吸收气体占总气体的摩尔数之比，即体积比； L 是吸收光程长； P 为气体样品的总压强； $\phi(\nu)$ 是归一化的吸收线线型函数。

将式(8)和式(9)代入式(10)，可得到

$$I(t) = [\bar{I}_0(t) + i_0 \cos(\omega_m t + \Psi)] \exp\{-S(T)NLP[\bar{\nu}(t) + \delta\nu \cos(\omega_m t)]\} \quad (11)$$

用 Lorentz 线型函数描述气体吸收谱线

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta\nu}{(\nu - \nu_0)^2 + \Delta\nu^2} \quad (12)$$

其中， $\Delta\nu$ 是谱线的半高半宽 (HWHM)， ν_0 是中心频率。

3 谐波检测的 Simulink 建模

Simulink^[9,10] 是一种图形化仿真工具包，能够进行动态系统建模、仿真和综合分析，可以处理线性和非线性系统，离散、连续和混合系统，以及单任务和多任务系统，并在同一系统中支持不同的变化速率。Simulink 建模与一般程序建模相比更为直观，操作也更为简单，它包括非常全面的模块库及工具箱，提供了非常方便的图形建模方式 (GUI)，通过单击和拖动鼠标搭建框图来完成仿真模型的建立。在建立好

数学模型并进行参数设置后，就可以运行仿真了。

3.1 调制吸收光谱信号的模拟

模拟系统采用 30 kHz 正弦波调制，100 Hz 锯齿波扫描，采样率为 30 MHz。

Simulink 的仿真参数设置如下：仿真起始时间为 0.0 s，终止时间为 0.01 s，仿真步长为可变步长，步长模式解法器选用 ode45。

选取 Lorentz 线型函数模拟气体的吸收函数。输入参数包括瞬时输出频率 ν ，依据式(8)可得；中心频率 ν_0 ；谱线的半高半宽 (HWHM)。输出参数为吸收线的线型函数 ϕ 。利用 Simulink 数学运算模块组 (Math Operations) 中的有关模块，完成相加、增益、叉乘等操作，实现线型函数的模拟。

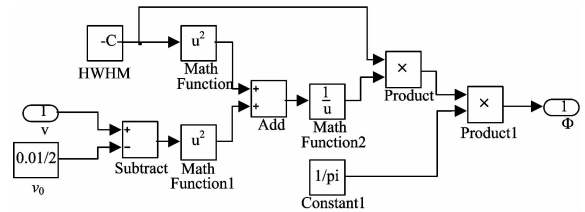


Fig. 1 Simulation of lineshape function

根据式(11)，模拟了在一个锯齿扫描周期 0.01 s 内，受调制后的激光器输出光通过气体吸收池后探测到的电压信号，模型如图 2 所示。

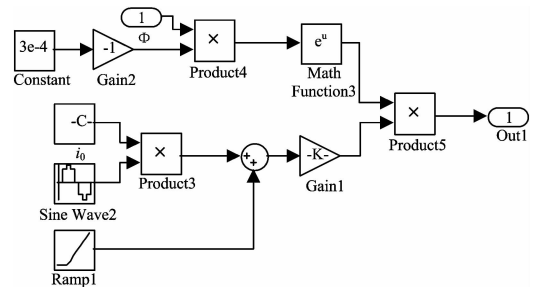


Fig. 2 Simulation of wavelength-modulated signal with absorption

3.2 二次谐波的提取

二次谐波的提取由锁相来实现。锁相部分采用正交双通道结构，可以消除被测信号和参考信号之间相位差的影响，直接获得目标信号的幅度。提供正弦、余弦两路正交参考信号输入，参考信号的频率为调制正弦波频率的 2 倍，60 kHz。两路参考信号分别与吸收信号相乘，经低通滤波提取直流成分，然后通过求平方和、开方运算，得到二次谐波信号。

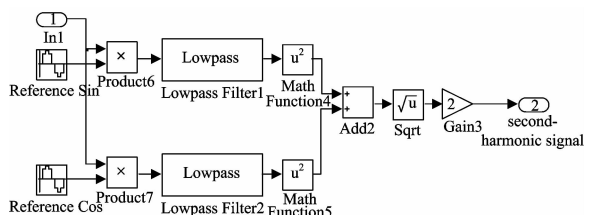


Fig. 3 Demodulation of second harmonic component

低通滤波模块采用 IIR Butterworth 滤波器。滤波器的通带截止频率设为 100 Hz，阻带截止频率设为 30 kHz，转换成归一化频率后设置模块参数。通带最大衰减设置为 1 dB，阻带最小衰减为 50 dB。

4 仿真分析

4.1 系统仿真结果

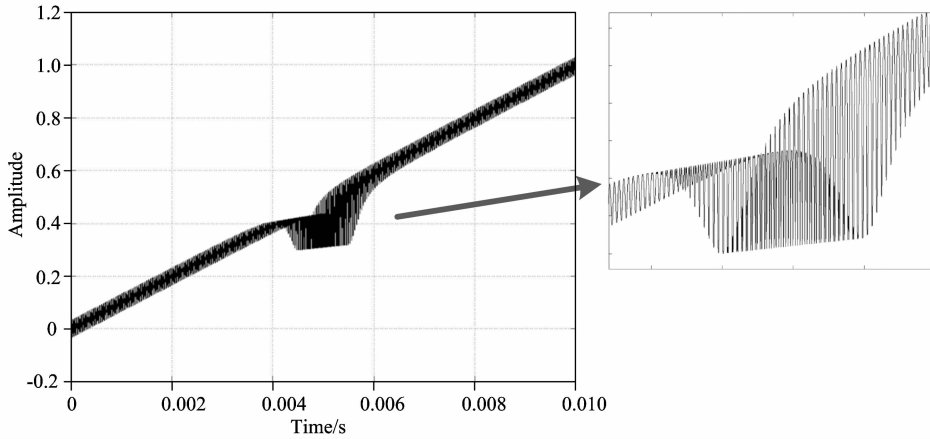


Fig. 4 Example of wavelength-modulated signal with absorption

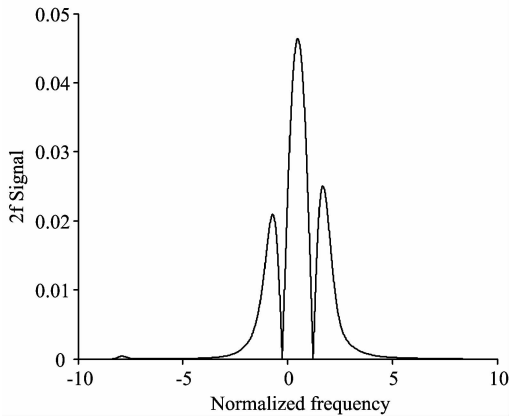


Fig. 5 Example of second harmonic signal

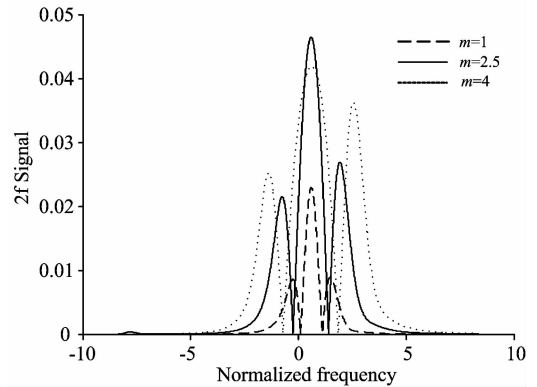


Fig. 6 Second-harmonic signals of different modulation indexes

4.2 调制系数对二次谐波幅度的影响

调制深度 $\delta\nu$ 的选择对二次谐波的影响是实际应用时需要考虑的因素之一。定义一个无量纲的参数 m ，称为调制系数

$$m = \frac{\delta\nu}{\Delta\nu} \tag{13}$$

式中， $\delta\nu$ 为调制深度， $\Delta\nu$ 为谱线的半高半宽。

$m=1, 2.5$ 和 4 时，提取出的二次谐波信号，如图 6 所示。可以看到，不同调制系数下，二次谐波信号的变化明显。

随调制系数的增加，二次谐波的峰值呈先增大后减小的趋势。当信号峰值达到最大值时的调制系数称为最优调制系数。二次谐波峰值随调制系数变化的情况如图 7 所示。可以看出，最优调制系数约为 2.2 。当 $m=2.2$ 时，二次谐波信号的峰值随调制系数变化的灵敏度最低，峰值达到最大。

波长调制吸收信号和二次谐波波形的仿真结果分别如图 4 和图 5 所示。

正交结构的锁相放大器中，经过了开方运算，所以得到的结果是非负的。由图 5 可以看出，二次谐波信号负半轴的波形被翻转到了正半轴。图 5 中横坐标轴是归一化的频率， $(\nu - \nu_0) / \Delta\nu_{FWHM}$ ，其中 $\Delta\nu_{FWHM}$ 为谱线的半高全宽。得到的二次谐波信号不对称是由于幅度调制的影响。

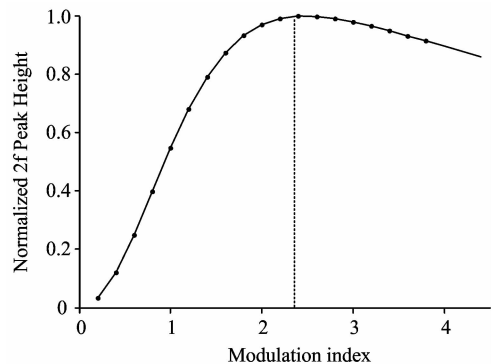


Fig. 7 Relationship between peak values of second harmonic signals and modulation indexes

4.3 调制系数对二次谐波宽度的影响

调制系数的变化不仅会影响二次谐波的高度，还会影响二次谐波的宽度。二次谐波信号的宽度定义为信号两个谷值之间的距离。在本模拟中，由于二次谐波信号负半轴的波形被翻转到了正半轴，所以宽度为左右两个较低峰之间的距离。如图 8 所示。

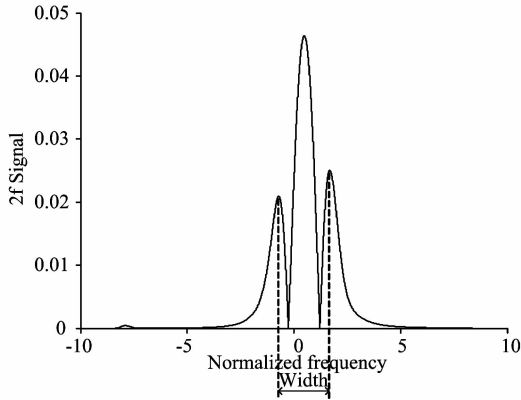


Fig. 8 Width of second harmonic signal

不同调制系数下，模拟得到的二次谐波信号的宽度如图 9 所示。可以看到，随着调制系数的增加，二次谐波的宽度也增大。最优调制系数虽然对应着最大强度的检测信号，但带来的谱线展宽会干扰相邻谱线的测量。所以在选择调制系数时，需要同时考虑信号强度和宽度这两方面的因素，选择最合适的工作参数。

References

- [1] Curl R F, Tittel F K. Annu. Rdp. Prog. Chem., Sect. C, 2002, 98: 219.
- [2] XU Zhen-yu, LIU Wen-qing, KAN Rui-feng, et al(许振宇, 刘文清, 阚瑞峰, 等). Journal of Atmospheric and Environmental Optics(大气与环境光学学报), 2011, 6(2): 95.
- [3] Werle P. Spectrochimica Acta Part A, 1998, 54: 197.
- [4] TU Xing-hua, ZHOU Jie(涂兴华, 周洁). Journal of Nanjing University of Posts and Telecommunications • Natural Science(南京邮电大学学报 • 自然科学版), 2009, 29(5): 46.
- [5] Philippe L C, Hanson R K. Applied Optics, 1993, 32(30): 6090.
- [6] Liu J T C, Jeffries J B, Hanson R K. Applied Physics B, 2004, 78: 503.
- [7] Chang L S. Development of a Diode Laser Sensor for Measurement of Mass Flux in Supersonic Flow. TSD-184, Stanford University, 2011.
- [8] Pawel Kluczynski, Ove Axner. Applied Optics, 1999, 38(27): 5803.
- [9] HUANG Yong-an, MA Lu, LIU Hui-min(黄永安, 马路, 刘慧敏). MATLAB 7.0/Simulink 6.0 Modeling Simulation Development and Senior Engineering Application(MATLAB 7.0/Simulink 6.0 建模仿真开发与高级工程应用). Beijing: Tsinghua University Press(北京: 清华大学出版社), 2005.
- [10] HAN Li-zhu, WANG Hua(韩利竹, 王华). MATLAB Electronic Simulation and Application(MATLAB 电子仿真与应用). Beijing: National Defence Industry Press(北京: 国防工业出版社), 2003.

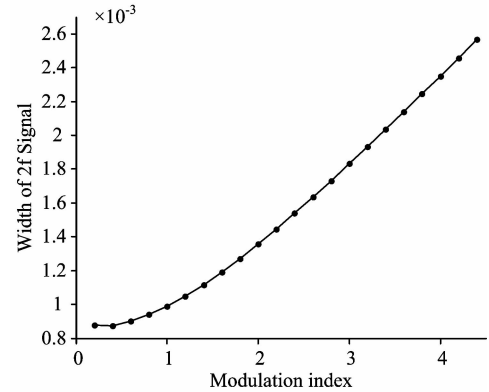


Fig. 9 Relationship between widths of second harmonic signals and modulation indexes

5 结论

二次谐波信号的检测对痕量气体测量有着重要意义。利用 MATLAB 中的 Simulink 仿真平台，建立系统模型，模拟了波长调制吸收信号以及二次谐波的提取过程。通过更改系统参数，比较了不同调制系数下二次谐波信号的特征，分析了谐波信号与调制系数的关系，为实际测量中相关参数的选取提供了理论依据。在 MATLAB 中对谐波信号检测的算法流程进行研究，对今后运用 DSP 或 FPGA 进行硬件开发和软件设计有一定的参考价值。

Simulation and Analysis of Second-Harmonic Signal Based on Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy

LI Han, LIU Jian-guo, HE Ya-bai, HE Jun-feng, YAO Lu, XU Zhen-yu, CHEN Jiu-ying, YUAN Song, KAN Rui-feng*
Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China

Abstract Tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) is a new gas detection technique developed recently with high spectral resolution, high sensitivity and fast time response. The second-harmonic signal of wavelength modulation spectroscopy (WMS) is often used as the detection signal for gas concentration inversion. Using Simulink, a visual modeling and simulation platform, the authors simulated the WMS signal based on TDLAS, and got the second-harmonic signal by using lock-in amplifier algorithm. Digital orthogonal algorithm was studied in this paper. The relationship between second-harmonic signals and the modulation indexes was analyzed by comparing changes of second-harmonic under different modulation indexes, in order to find out the optimized parameters for second-harmonic detection.

Keywords TDLAS; Second-harmonic; Simulink; Lock-in amplifier

(Received Jul. 18, 2012; accepted Sep. 25, 2012)

* Corresponding author

《光谱学与光谱分析》期刊社决定采用 ScholarOne Manuscripts 在线投稿审稿系统

《光谱学与光谱分析》期刊社与汤森路透集团签约,自2010年12月1日起《光谱学与光谱分析》决定采用 Thomson Reuters旗下的 ScholarOne Manuscripts 在线投稿审稿系统。

- ScholarOne Manuscripts, 该系统不仅能轻松处理稿件,而且能提速科技交流。
- 全球已有360多家学会和出版社的3800多种期刊选用了 ScholarOne Manuscripts 系统作为在线投稿、审稿平台,全球拥有超过1350万的注册用户,代表着全球学术期刊在线投审稿的一流水平。
- ScholarOne Manuscripts 与 EndNote, Web of Science 无缝链接和整合;使科研探索、论文评阅和信息传播效率大为提高。
- ScholarOne Manuscripts 是汤森路透科技集团的一个业务部门,拥有丰富的学术期刊业务经验,为学术期刊提供综合管理工作流程系统,使期刊更有效管理投稿、同行评审、加工和发表过程,提高作者心中的专业形象,缩短论文发表时间,削减管理成本,帮助期刊提高科研绩效和实现学术创新。

《光谱学与光谱分析》采用“全球学术期刊首选的在线投稿审稿系统—ScholarOne Manuscripts”,势必对2010年11月30日以前向本刊投稿的作者在查阅稿件信息时,会带来某些不便,在此深表歉意!为了推进本刊的网络化、数字化、国际化进程,以实现与国际先进出版系统对接;为了不断提高期刊质量,加快网络化、数字化建设,加快与国际接轨的进程,希望能得到广大作者、读者们的支持与理解,对您的理解和配合深表感激。这是一件新事物,肯定有不周全、不完善的地方,让我们共同努力,不断改进和完善起来。

《光谱学与光谱分析》期刊社
2010年12月1日