

基于自适应红外多波段联合光谱分析的高精度气体浓度反演研究

王冠程 赵百轩 郑凯丰 陈宇鹏 赵莹泽 秦余欣 王惟彪 刘国豪 盛开洋 吕金光 梁静秋

Research on high-precision gas concentration inversion based on adaptive infrared multi-band joint spectral analysis

WANG Guan-cheng, ZHAO Bai-xuan, ZHENG Kai-feng, CHEN Yu-peng, ZHAO Ying-ze, QIN Yu-xin, WANG Wei-biao, LIU Guo-hao, SHENG Kai-yang, LV Jin-guang, LIANG Jing-qiu

引用本文:

王冠程, 赵百轩, 郑凯丰, 陈宇鹏, 赵莹泽, 秦余欣, 王惟彪, 刘国豪, 盛开洋, 吕金光, 梁静秋. 基于自适应红外多波段联合光谱分析的高精度气体浓度反演研究[J]. *中国光学*, 优先发表. doi: 10.37188/CO.2024-0071

WANG Guan-cheng, ZHAO Bai-xuan, ZHENG Kai-feng, CHEN Yu-peng, ZHAO Ying-ze, QIN Yu-xin, WANG Wei-biao, LIU Guo-hao, SHENG Kai-yang, LV Jin-guang, LIANG Jing-qiu. Research on high-precision gas concentration inversion based on adaptive infrared multi-band joint spectral analysis[J]. *Chinese Optics*, In press. doi: 10.37188/CO.2024-0071

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.37188/CO.2024-0071>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

氨气高精度激光光谱检测装置的设计及实现

Design and achievement of a device for high-precision ammonia gas detection based on laser spectroscopy

中国光学 (中英文). 2023, 16(5): 1129 <https://doi.org/10.37188/CO.2023-0023>

全景双谱段红外成像干涉光谱测量反演仪器

Panoramic bispectral infrared imaging interference spectrum measurement inversion instrument

中国光学 (中英文). 2022, 15(5): 1092 <https://doi.org/10.37188/CO.2022-0114>

分孔径紫外多波段成像光学系统设计

Aperture-divided ultraviolet multiband imaging optical system

中国光学 (中英文). 2021, 14(6): 1476 <https://doi.org/10.37188/CO.2021-0052>

基于残差网络的结肠内窥镜图像超分辨率重建方法

Super-resolution reconstruction for colorectal endoscopic images based on a residual network

中国光学 (中英文). 2023, 16(5): 1022 <https://doi.org/10.37188/CO.2022-0247>

光致热弹光谱气体检测技术研究进展

Research progress of gas detection based on laser-induced thermoelastic spectroscopy

中国光学 (中英文). 2023, 16(2): 229 <https://doi.org/10.37188/CO.2022-0137>

高精度辐射热流计的不确定度分析与评价

Uncertainty analysis and evaluation of a high-precision radiative heat-flux meter

中国光学 (中英文). 2022, 15(4): 780 <https://doi.org/10.37188/CO.2022-0023>

文章编号 2097-1842(xxxx)x-0001-13

基于自适应红外多波段联合光谱分析的高精度气体浓度反演研究

王冠程^{1,2,3,4}, 赵百轩^{1,3,4}, 郑凯丰^{1,3,4}, 陈宇鹏^{1,3,4}, 赵莹泽^{1,3,4}, 秦余欣^{1,3,4},

王惟彪^{1,3,4}, 刘国豪^{1,2,3,4}, 盛开洋^{1,2,3,4}, 吕金光^{1,3,4}, 梁静秋^{1,3,4}

(1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林长春 130033;

2. 中国科学院大学, 北京 100049;

3. 应用光学国家重点实验室, 吉林长春 130033;

4. 光学系统先进制造重点实验室 (中国科学院), 吉林长春, 130033)

摘要:目的: 傅里叶变换光谱技术(FTS)是气体成分分析及浓度的精准测量的有效手段,但在分析过程中待测气体的饱和吸收与弱吸收使某些波段的透过率偏离稳定区间,导致光谱信噪比降低以及仪器的非线性响应,降低浓度反演精度。方法: 本文提出一种自适应多波段联合浓度反演算法,结合透过率稳定区间与谱宽阈值自适应选择待测气体的有效波段;采用非线性最小二乘拟合方法对各有效波段进行浓度反演并进行残差分析,获得各有效波段的浓度反演结果及其权重,通过加权平均实现待测气体浓度的精确定量分析。结果: 设计并进行了算法验证实验,结果表明,自适应多波段联合浓度反演算法的稳定系数达到了 0.9976,相较于传统的单波段及多波段浓度反演算法,反演结果的均方根误差分别降低了 64.44%、41.52%,平均相对误差分别降低了 65.97%、46.72%,平均绝对误差分别降低了 66.32%、47.74%。结论: 反演精度与稳定性得到了明显提升。

关键词: 有效波段选择; 残差分析; 加权平均; 自适应多波段联合浓度反演

中图分类号: TP394.1; TH691.9

文献标志码: A

doi: 10.37188/CO.2024-0071

收稿日期: 2024-04-15; 修订日期: xxxx-xx-xx

基金项目: 吉林省科技发展计划(No. 20230201049GX, No. 20230508137RC, No. 20230508141RC, No. 20240602066RC); 国家自然科学基金(No. 61627819, No. 62305339, No. 61727818, No. 61805239); 中国科学院青年创新促进会人才基金(No. 2018254); 国家重点研发计划(No. 2022YFB3604702)

Supported by Jilin Provincial Scientific and Technological Development Program (No. 20230201049GX, No. 20230508137RC, No. 20230508141RC, No. 20240602066RC); National Natural Science Foundation of China (No. 61627819, No. 62305339, No. 61727818, No. 61805239); Youth Innovation Promotion Association Foundation of the Chinese Academy of Sciences (No. 2018254); National Key R&D Program of China (No. 2022YFB3604702)

Research on high-precision gas concentration inversion based on adaptive infrared multi-band joint spectral analysis

WANG Guan-cheng^{1,2,3,4}, ZHAO Bai-xuan^{1,3,4}, ZHENG Kai-feng^{1,3,4}, CHEN Yu-peng^{1,3,4}, ZHAO Ying-ze^{1,3,4},
QIN Yu-xin^{1,3,4}, WANG Wei-biao^{1,3,4}, LIU Guo-hao^{1,2,3,4}, SHENG Kai-yang^{1,2,3,4},
LV Jin-guang^{1,3,4}, LIANG Jing-qiu^{1,3,4}

(1. *Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of*

Sciences, Changchun Jilin 130033, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun, Jilin 130033, China;

4. Key Laboratory of Advanced Manufacturing for Optical Systems, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China)

Abstract: Objective: Fourier transform spectroscopy (FTS) is an effective method for gas composition analysis and accurate measurement of concentration. However, in the process of analysis, the saturated absorption and weak absorption of the measured gas make the transmittance of some bands deviate from the stable range, which leads to the decrease of spectral signal-to-noise ratio and the nonlinear response of the instrument, and reduces the accuracy of concentration inversion. **Method:** In this paper, an adaptive multi-band joint concentration inversion algorithm is proposed, which combines the transmittance stable range and the spectral width threshold to adaptively select the effective band of the measured gas. The nonlinear least squares fitting method is used to invert the concentration of each effective band and the residual analysis is carried out to obtain the concentration inversion results and their weights of each effective band. The accurate quantitative analysis of the measured gas is realized by weighted average. **Result:** The algorithm verification experiment is designed and carried out; the results show that the stability coefficient of the adaptive multi-band joint concentration inversion algorithm is 0.9976. Compared with the traditional single-band and multi-band concentration inversion algorithms, the root mean square error of the inversion results is reduced by 64.44% and 41.52%, the mean relative error is reduced by 65.97% and 46.72%, and the mean absolute error is reduced by 66.32% and 47.74% respectively, **Conclusion:** the inversion accuracy and stability are significantly improved.

Key words: effective band selection; residual analysis; weight average; adaptive multi-band joint concentration inversion

1 引言

近年来,温室气体的过度排放引起了全球气候异常等一系列严重的环境问题,因此对温室气体及其浓度变化趋势的精确探测提出了十分迫切的需求。傅里叶变换光谱技术(FTS)可以获得气体的光谱信息^[1-4],具有灵敏、稳定的非接触式的

探测能力、高光谱分辨率及高通量等优点^[5-9],在气体浓度测量与环境气体监测等领域发挥了重要作用^[10-11]。

浓度反演是 FTS 气体分析的重要一环,传统的单波段反演算法通常仅选取单一吸收波段数据进行浓度反演,在对浓度过高或者过低的气体进行分析时,待测气体的饱和吸收与弱吸收会使某些波段的透过率偏离稳定区间,导致光谱信噪比

降低以及仪器的非线性响应,降低浓度反演精度。

为解决以上问题,研究人员在在多波段联合浓度反演方面开展了大量的研究。Li 等人提出了一种利用光谱吸收峰积分面积计算 CO_2 浓度的算法,根据待测气体 CO_2 红外吸收峰的位置对 1425~1445 nm、1565~1585 nm、1595~1615 nm 波段内 CO_2 的吸收光谱进行了测量,将各波段的浓度测量结果进行加权融合实现多波段浓度反演^[12]。Cieszczyk 等人提出了一种利用开放光路傅里叶变换红外光谱的多波段浓度反演方法,根据各波段的谱线积分计算平均波段吸收,采用基于神经网络的逆模型,实现气体浓度的测量^[13]。吴时超等人通过研究在不同高度上 CO_2 辐亮度光谱值的变化差异,得到 CO_2 在垂直方向的近红外与中红外波段的权重函数,使用 SCIATRAN 辐射传输模型的权重计算模式实现波段联合。实验结果表明,波段联合可以增加信息量并有效减弱气溶胶散射对浓度反演的影响,提高 CO_2 的反演精度^[14]。王文正等人提出了一种用于有限地下环境甲烷排放监测的多波段红外诊断(MBID)方法,基于气溶胶的空间分布和粉尘粒子的复折射率,获得了矿井的大气透过率。选择了 4 个红外波段,结合随机粒子群优化 (SPSO) 算法计算了甲烷浓度^[15]。吴靖等人提出了一种利用双通道光谱图像对气体浓度进行定量监测的方法,通过 405 和 470 nm 双通道光谱图像的光强比之间的关系反演 N_2O 浓度,减小了气溶胶、颗粒物及其他气体成分分子的干扰^[16]。

可以看出,目前多波段浓度反演方法大多是在预设的多个固定吸收波段对气体进行分析,可以实现一定浓度范围内气体的高精度浓度测量,在对浓度过高或过低的气体进行分析时,某些波段透过率偏离稳定区间问题仍然没有得到很好的解决。还有部分多波段浓度反演算法从各吸收波段中选取最优波段,利用其他波段消除气溶胶、颗粒物以及其他气体成分分子对浓度反演的干扰,虽然可以有效降低反演误差,但多波段信息未得到充分利用,反演精度仍具有提升空间。

针对当前多波段浓度反演方法所存在的问题,本文提出一种自适应多波段联合浓度反演算法以解决透过率偏离稳定区间的问题,提高反演精度与稳定性。

2 自适应多波段联合浓度反演算法

该算法将透过率稳定区间以及谱宽阈值作为判定依据,对待测气体的实测透过率光谱进行有效波段的自适应选择^[17];当具有多个有效波段时,对各波段进行浓度反演与残差分析,获得其浓度反演结果及对应权重^[18-21],通过加权平均实现待测气体浓度的精确定量分析,算法流程如图 1 所示。

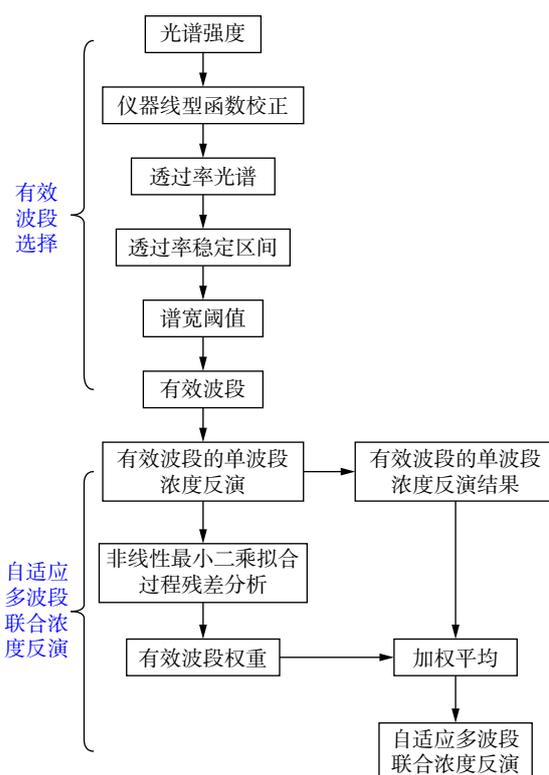


图 1 自适应多波段联合浓度反演算法流程图

Fig. 1 Flow chart of adaptive multi-band joint concentration inversion algorithm

2.1 有效波段选择

通过光谱仪可以获得待测气体的实测透过率光谱 τ_{gas} , 当待测气体在某些波段出现饱和吸收时透过率接近 0, 此时光谱信号较弱, 受到噪声的干扰较大, 进而导致光谱信噪比降低, 使测量结果的精度受限; 当待测气体在某些波段出现弱吸收时透过率接近 1, 此时光谱信号过强, 进而引发仪器的非线性响应, 增加测量结果的不确定性, 因此需要对待测气体的透过率光谱 τ_{gas} 进行有效波段的自适应选择^[22]。

为了保证透过率光谱具有较高的光谱信噪比并且避免仪器非线性响应, 通常选取透过率范围

为 0.1~0.9 作为透过率稳定区间^[23]。将透过率稳定区间以及谱宽阈值作为判定依据,对待测气体的实测透过率光谱进行有效波段的自适应选择,其结果如式 (1) 所示。

$$\begin{cases} A_1(\tau_{gas}, 0.1, 0.9) < t_1 < B_1(\tau_{gas}, 0.1, 0.9) \\ A_2(\tau_{gas}, 0.1, 0.9) < t_2 < B_2(\tau_{gas}, 0.1, 0.9) \\ \vdots \\ A_m(\tau_{gas}, 0.1, 0.9) < t_m < B_m(\tau_{gas}, 0.1, 0.9) \end{cases}, \quad (1)$$

其中 A_m 与 B_m 为透过率等于 0.1 或者 0.9 的波数位置, t_m 为透过率处于稳定区间的连续波段范围。

以稳定区间为判据选择的波段范围 t_m 并不是可以全部用来进行高精度浓度反演,需要对其进行进一步选择以获得有效波段。波段范围内的光谱数据点个数是影响浓度反演结果的重要因素,根据相关研究可知,当光谱数据点个数大于等于 8 时,可以进行准确的浓度反演^[24, 25]。基于光谱数据点个数可以计算出浓度反演的谱宽阈值(光谱数据点个数与光谱分辨率的乘积),根据谱宽阈值对式 (1) 中的波段范围 t_m 进行选择,大于谱宽阈值的波段范围为有效波段,具体计算公式如式 (2) 所示。

$$E(N) = \{t_m | (B_m - A_m) \geq S, m = 1, 2, \dots, N\}, \quad (2)$$

其中 $E(N)$ 为有效波段的集合, S 为谱宽阈值, N 为有效波段的个数。

当待测气体具有多个有效波段时,采用自适应多波段联合浓度反演提高各有效波段信息的利用率,实现高精度气体浓度反演。

2.2 自适应多波段联合浓度反演

自适应多波段联合浓度反演是根据各有效波段的传统单波段浓度反演结果实现的,传统单波段浓度反演算法基于数字光谱合成校准思想,采用非线性最小二乘拟合分析方法,将测量透过率光谱与标准透过率光谱进行拟合,如果均方差没有达到最小,则通过修改浓度值并重复上一步的操作,直到当二者之间的均方差最小时,此时标准透过率光谱的浓度即为该有效波段的气体反演浓度,即通过使目标函数 $\chi^2(C)$ 最小化寻求最优浓度 C ^[26]:

$$\chi^2(C) = \arg \min \left\{ \sum_{w=1}^N [\tau_{gas} - \tau_{cal}(v_w, C)]^2 \right\}, \quad (3)$$

其中 $\tau_{cal}(v_w, C)$ 为标准透过率光谱, τ_{gas} 为实测透过率光谱, w 表示了光谱数据点的个数, v_w 为光谱中第 w 个光谱数据点所对应的波数。

标准透过率光谱的计算是基于吸收线参数的集合,这些参数包括分子吸收线的线频 ν_0 、谱线强度 S_T 、基态能级 E_0 以及与压力和温度有关的洛伦兹半宽 α_L 。

分子对波数 ν 处的单色光学深度 $h(\nu)$ 的贡献由下式给出:

$$h(\nu) = \sigma(\nu)CL, \quad (4)$$

其中, $\sigma(\nu)$ 为 ν 处的吸收系数, L 为气体的光程, C 为气体的浓度。

通过与真实线型的卷积,可以由积分谱线强度计算出吸收系数。线型的展宽机制主要有两种,多普勒展宽是由于随机分子运动,并导致高斯线型如式 (5) 所示。

$$f_G(\nu) = \frac{1}{\alpha_G \sqrt{\pi}} e^{-\frac{(\nu-\nu_0)^2}{\alpha_G^2}}, \quad (5)$$

其中, α_G 是半高的高斯半宽。

$$\alpha_G = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}, \quad (6)$$

其中, m 是分子量, T 为温度, c 为光速, k_B 表示 Boltzmann 常数。

压力展宽是由于碰撞扰动分子能级,并导致洛伦兹线型如式 (7) 所示。

$$f_L(\nu) = \frac{\frac{\alpha_L}{\pi}}{(\nu-\nu_0)^2 + \alpha_L^2}, \quad (7)$$

其中, α_L 是半高的洛伦兹半宽,与压强成正比。

在 HITRAN 中给出了每条吸收线在 1 atm 压强处的洛伦兹半宽及其与温度的关系,而高斯半宽则由温度和分子量计算。在室温下, α_L 的典型值约为 0.07 cm^{-1} , α_G 的典型值约为 0.003 cm^{-1} 。因此,除了在低压下,洛伦兹线型的贡献占据主导地位,此时卷积的线形状被称为 voigt 线型。

吸收系数 $\sigma(\nu)$ 是谱线强度与两种线型的卷积如式 (8) 所示。当实验温度为室温时,线强 S_T 近似等于温度为 296 K 时 HITRAN 数据库给出的线强^[27]。

$$\sigma(\nu) = S_T \otimes f_L(\nu) \otimes f_G(\nu), \quad (8)$$

在没有仪器线型函数的影响下, 气体的透过率可以由式 (9) 表示。

$$T(\nu) = \frac{B_0(\nu)'}{B_0(\nu)} = e^{-h(\nu)} = e^{-\sigma(\nu)C \cdot L}, \quad (9)$$

然而在实际测量中, 光谱仪会将真实光谱强度 $B_0(\nu)$ 与仪器线型函数 $f_i(\nu)$ 做卷积, 以产生实测光谱强度 $B(\nu)$, 如式 (10) 所示。

$$B(\nu) = B_0(\nu) \otimes f_i(\nu), \quad (10)$$

因此, 在进行非线性最小二乘拟合时, 需要对实测光谱强度进行逆卷积处理, 进而通过式 (9) 获得校正后的实测透过率光谱 τ 与标准透过率光谱 $\tau_{cal}(w, C)$ ^[28], 当存在最优浓度 C 满足式 (3) 时, 此时校正后的实测透过率光谱与标准透过率光谱的残差平方和为:

$$R^2 = \sum_{w=1}^Y [\tau - \tau_{cal}(w, C)]^2 = \sum_{w=1}^Y R_w^2, \quad (11)$$

其中 w 与 Y 分别为光谱数据点及其个数, R_w 为各光谱数据点光谱拟合的残差值, R^2 为所有光谱数据点的残差平方和。

传统多波段联合浓度反演算法通常直接将各有效波段的浓度反演结果进行平均求和来估算待测气体的浓度, 虽然相较于传统单波段浓度反演算法可以实现信息的充分利用, 但会忽略各有效波段的敏感性差异、信号强度以及波段之间的相关性。

为解决以上问题, 本文提出自适应多波段联合浓度反演算法, 其核心思想是通过对各有效波段非线性最小二乘回归过程中的残差进行分析, 并分配给各有效波段浓度反演结果不同的权重, 实现对各有效波段浓度反演结果的充分利用。如式 (12) 示为各有效波段的残差计算结果:

$$\left\{ \begin{array}{l} R_1^2 = \sum_{w_1=1}^{Y_1} [\tau_1 - \tau_{cal}(w_1, C_1)]^2 \\ R_2^2 = \sum_{w_2=1}^{Y_2} [\tau_2 - \tau_{cal}(w_2, C_2)]^2 \\ \vdots \\ R_n^2 = \sum_{w_n=1}^{Y_n} [\tau_n - \tau_{cal}(w_n, C_n)]^2 \end{array} \right., \quad (12)$$

其中 C_n 为各有效波段的浓度反演结果, τ_n 为各有

效波段的实测透过率, $\tau_{cal}(w_n, C_n)$ 为各有效波段的标准透过率, w_n 与 Y_n 分别为各有效波段的光谱数据点及其个数, R_n^2 为各有效波段非线性最小二乘拟合过程的残差平方和。

将各有效波段的浓度反演结果进行加权平均, 可获得自适应多波段联合浓度反演结果如式 (13) 所示:

$$\hat{C} = \sum_{n=1}^N H_n C_n, \quad (13)$$

其中 N 为有效波段的总数, \hat{C} 为自适应多波段联合浓度反演结果, H_n 为有效波段的权重。

为了精确表达各有效波段非线性最小二乘拟合过程中测量值与真实值之间差异的总体大小, 对各有效波段非线性最小二乘拟合过程的残差平方和 R_n^2 的倒数进行归一化处理如式 (14) 所示。

$$H_n = \frac{\frac{1}{R_n^2}}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{R_n^2}}, \quad (14)$$

H_n 的物理意义为不同有效波段浓度反演过程中非线性最小二乘的拟合精度, 数值分布在 0 到 1 区间。当 H_n 为 0.5 时, 说明该有效波段的拟合精度处于中等水平。当 H_n 趋近于 0 时, 说明该有效波段的拟合精度较差。同理可得, 当 H_n 趋近于 1 时, 该有效波段的拟合精度与光谱特征较好。

将有效波段权重 H_n 代入到式 (13) 中可以获得自适应多波段联合浓度反演结果:

$$\hat{C} = \sum_{n=1}^N \frac{\frac{1}{R_n^2}}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{R_n^2}} C_n, \quad (15)$$

为了对自适应多波段联合浓度反演算法的反演精度、有效性以及稳定性进行评价, 本文选取决定系数(稳定系数) $R^2 = 1 - \frac{\sum (y_{real} - \hat{y})^2}{\sum (y_{real} - \bar{y})^2}$ 、均方根误差 $RMSE = \sqrt{\frac{\sum (y_{real} - \hat{y})^2}{S}}$ 、平均绝对误差 $MAE = \frac{\sum |y_{real} - \hat{y}|}{S}$ 以及平均相对误差 $MRE = \frac{\sum |y_{real} - \hat{y}|/y_{real}}{S}$, 其中 S 为样本数作为评价指标, 分别对传统单波段与多波段浓度反演算法以及自适应多波段联合浓度反演算法进行对比评价分析。

3 实验设计

随着城市化进程的加速和工业化的发展,火力发电厂、钢铁冶炼、化工、建材等行业的烟囱排放已成为温室气体的主要来源之一。特别是一氧化二氮气体(N_2O),其排放量的持续增加,对大气和人类健康造成严重威胁,因此对 N_2O 进行准确的浓度测量具有重要意义,因此本文选取 N_2O 作为自适应多波段联合浓度反演的实验气体。

根据火电厂所排放氮氧化物测量的相关研究可知, N_2O 气体的柱浓度范围为 $250 \text{ mg/m}^3(5.68 \times 10^3 \text{ PPM}) \sim 400 \text{ mg/m}^3(9.09 \times 10^3 \text{ PPM})$ ^[29-30],为模拟污染物中 N_2O 气体的浓度分布,选取此浓度范围的 N_2O 气体进行实验研究,如图 2 所示为实验原理图。

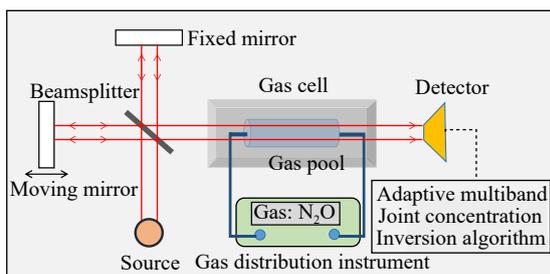


图 2 实验原理图

Fig. 2 Experimental schematic diagram

搭建实验平台,选取光谱仪的型号为 Bruker VERTEX 80v,探测器响应谱段为 $2100 \text{ cm}^{-1} \sim 2600 \text{ cm}^{-1}$,分辨率为 4 cm^{-1} ,根据分辨率可以计算出有效波段选择的谱宽阈值为 32 cm^{-1} 。气体池 (Bruker, A132-2) 的长度为 0.2 m ,根据待测气体柱浓度可以解算出实验气体 N_2O 的浓度范围为 $2.8\% \sim 4.6\%$,通过配气仪可获得 10 组不同浓度 (浓度间隔为 0.2%) 的实验气体,如图 3 所示为实验装置图。

对 10 种浓度的 N_2O 实验气体进行有效波段选择获得其实测有效波段,根据待测气体的浓度以及光程 (0.2 m) 获得标准透过率光谱及其理论有效波段,对比分析实测有效波段与理论有效波段的误差,完成有效波段选择验证实验。

对 10 种浓度 N_2O 气体各有效波段非线性最小二乘拟合过程中的残差进行计算分析,获得有

效波段的权重 H_n ,通过自适应多波段联合浓度反演算法获得浓度反演结果。对传统单波段与多波段浓度反演算法以及自适应多波段联合浓度反演算法的稳定系数 R^2 、均方根误差 RMSE、平均绝对误差 MAE 以及平均相对误差 MRE 进行对比分析,完成对各算法的评价。

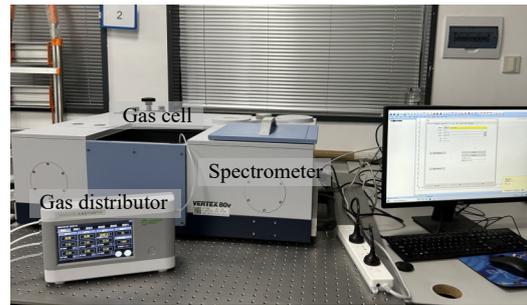


图 3 实验装置图

Fig. 3 Experimental device diagram

选取 $2.0\% \sim 2.6\%$ 以及 $4.8\% \sim 5.8\%$ 浓度的 N_2O 气体作为验证气体,通过计算其自适应多波段联合浓度反演结果与 $2.8\% \sim 4.6\%$ 浓度 N_2O 反演结果的相关系数,进行算法普适性的初步验证。为了进一步验证算法对不同种类气体的适用性,根据火力发电厂排放污染物种类,选取 SO_2 与 CO 作为实验气体,分别对其自适应多波段联合浓度反演结果进行评价,完成算法普适性的验证。

4 实验结果与讨论

4.1 有效波段选择实验结果

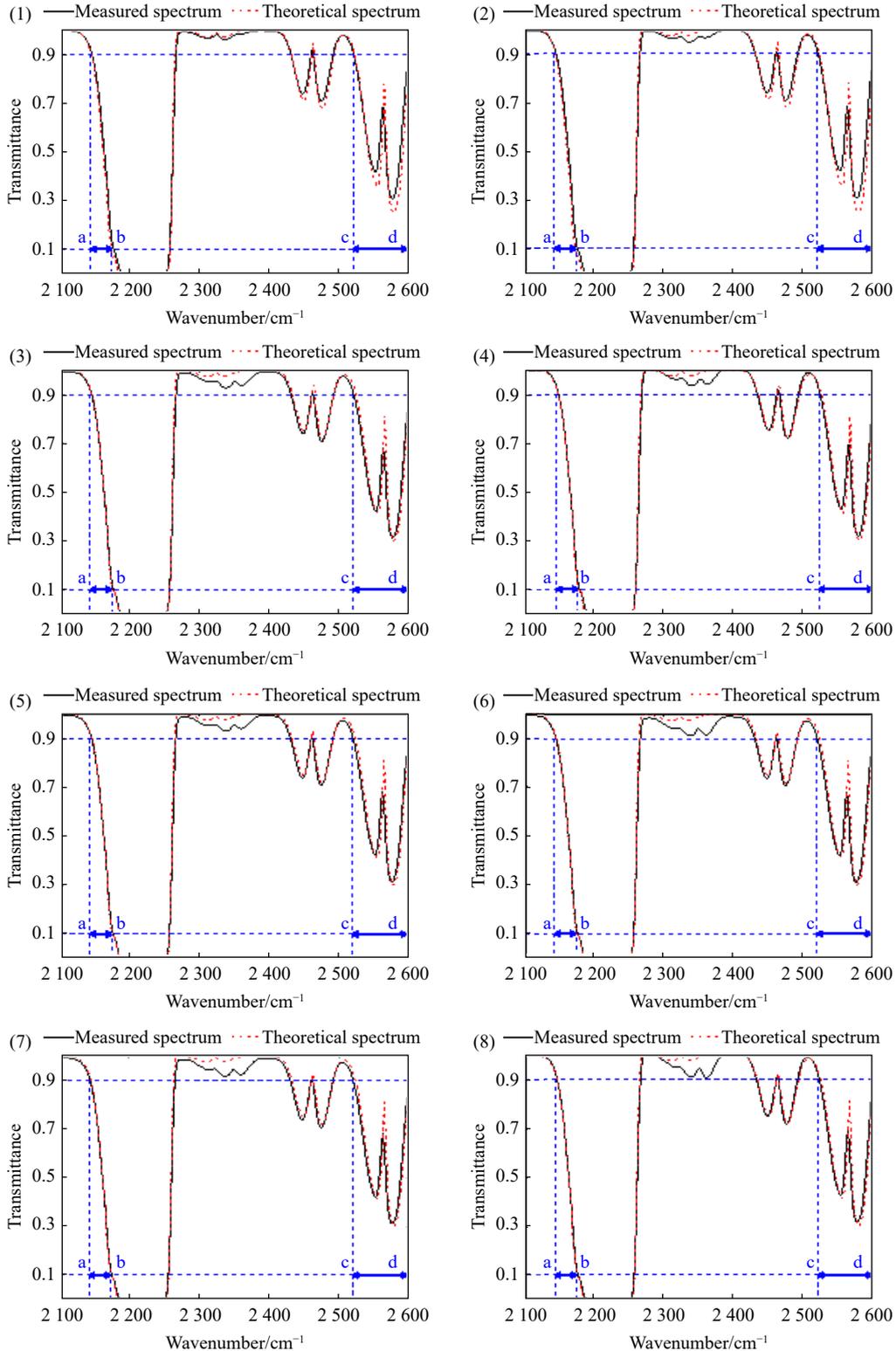
在实验室环境下,压强 P 为 1 atm ,温度为 296 K , N_2O 气体的分子量为 44 g/mol ,气体的迁跃中心频率为 $6.6 \times 10^7 \text{ MHz}$,高斯半宽 α_G 与洛伦兹半宽 α_L 分别为 0.002 cm^{-1} 与 0.07 cm^{-1} 。利用公式 (4)~(9),根据光程以及 10 种 N_2O 气体的浓度可以计算出其理论透过率光谱。

利用公式 (10),对光谱仪接收到的光强进行逆卷积处理可以消除仪器线型函数的影响,再通过光强的比值获得校正后的实测透过率。将透过率稳定区间 $0.1 \sim 0.9$ 以及谱宽阈值 32 cm^{-1} 作为判定依据,对实测透过率进行有效波段的自适应选择。

图 4 为 10 种浓度 N_2O 气体的理论透过率光谱与实测透过率光谱及其实测有效波段范围。

对 10 种浓度 N_2O 气体的理论透过率光谱进行有效波段选择, 将其与实测有效波段进行误差分析如表 1 所示。

根据表 1 可知, 10 种浓度 N_2O 实验气体的实测有效波段与理论有效波段的误差范围均小于 $4cm^{-1}$ (1 个分辨率), 有效解决了透过率偏离稳定区间导致的浓度反演精度降低问题。



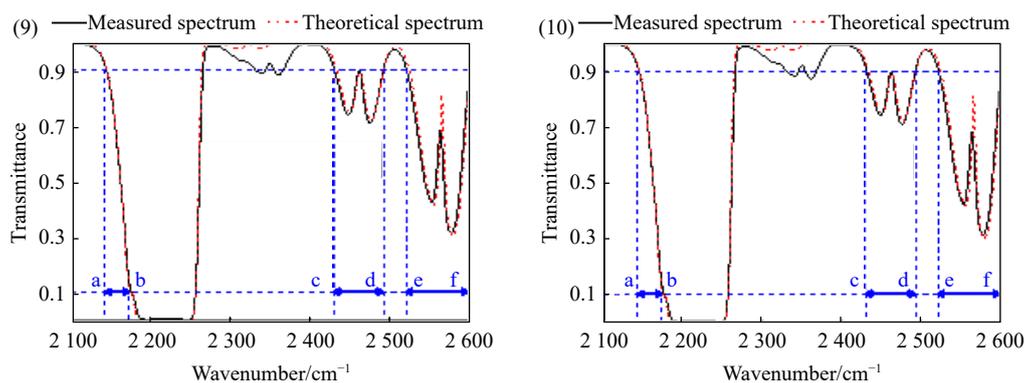


图 4 (1)~(10) 分别为 10 种浓度 N_2O 气体的实测透过率光谱与理论透过率光谱, 其中 a~b、c~d 以及 e~f 为实测有效波段范围

Fig. 4 (1) to (10) are the measured and theoretical transmittance spectra of 10 concentrations of N_2O gas, where a to b, c to d and e to f are the measured effective band ranges

表 1 10 种浓度 N_2O 气体的实测有效波段与理论有效波段及其误差分析

Tab. 1 The measured effective band and theoretical effective band of 10 concentrations of N_2O gas and their error analysis

| 浓度 | 实测有效波段(cm^{-1}) | 理论有效波段(cm^{-1}) | 误差 |
|------|---------------------------------|---------------------------------|------------------|
| 2.8% | 2144~2176, 2519~2600 | 2141~2173, 2520~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 3.0% | 2144~2176, 2518~2600 | 2141~2173, 2520~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 3.2% | 2143~2176, 2518~2600 | 2141~2173, 2520~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 3.4% | 2144~2176, 2518~2600 | 2142~2174, 2520~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 3.6% | 2143~2176, 2519~2600 | 2142~2175, 2519~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 3.8% | 2144~2176, 2519~2600 | 2142~2174, 2519~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 4.0% | 2144~2176, 2519~2600 | 2144~2176, 2519~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 4.2% | 2144~2176, 2519~2600 | 2144~2176, 2519~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 4.4% | 2144~2176, 2430~2491, 2519~2600 | 2144~2176, 2430~2492, 2519~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |
| 4.6% | 2144~2176, 2430~2491, 2519~2600 | 2144~2176, 2430~2492, 2519~2600 | $\leq 4 cm^{-1}$ |

4.2 自适应多波段联合浓度反演实验结果

根据表 1 中有效波段选择的结果, 4.4% 与 4.6% 浓度 N_2O 气体的实测有效波段个数为 3, 其它 8 种浓度 (2.8%~4.2%, 浓度间隔为 0.2%) N_2O 气体的有效波段个数为 2。因此选取 2.8% 以及 4.4% 浓度的 N_2O 气体作为代表性气体, 分别在其有效波段进行非线性最小二乘拟合以及残差分析。

图 5 为 2.8% 浓度的 N_2O 气体在其有效波段的光谱拟合结果及其残差分布。

由图 6 可知, 在有效波段 2144~2176 cm^{-1} 与 2519~2600 cm^{-1} 的传统单波段浓度反演结果分别

为 2.83% 与 2.72%, 残差平方和分别为 0.062 与 0.126, 进而可以计算出权重系数分别为 0.67 与 0.33, 将其代入到自适应多波段联合浓度反演算法中可以获得浓度反演结果为 2.794%。

图 6 所示为 4.4% 浓度的 N_2O 气体在其有效波段的光谱拟合过程及其残差分布。

由图 6 可知, 在有效波段 2144~2176 cm^{-1} 、2430~2491 cm^{-1} 以及 2519~2600 cm^{-1} 的传统单波段浓度反演结果分别为 4.43%、4.37% 以及 4.48%, 权重系数分别为 0.41、0.39 以及 0.20, 将其代入到自适应多波段联合浓度反演算法中可以获得浓度反演结果为 4.416%。

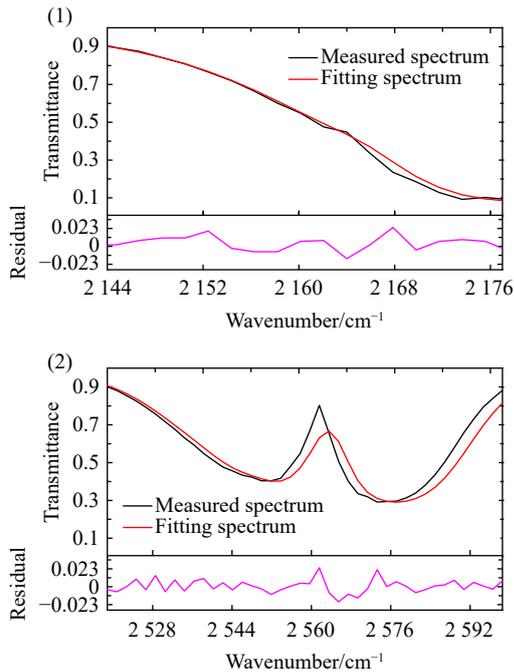


图 5 (1)2.8% 浓度 N_2O 气体在有效波段 $2144\sim 2176\text{ cm}^{-1}$ 的光谱拟合结果及其残差分布 (2)2.8% 浓度 N_2O 气体在有效波段 $2519\sim 2600\text{ cm}^{-1}$ 的光谱拟合结果及其残差分布

Fig. 5 (1) The spectral fitting results and residual distribution of N_2O gas with concentration of 2.8% in the effective band of 2144 to 2176 cm^{-1} . (2) The spectral fitting results and residual distribution of N_2O gas with concentration of 2.8% in the effective band of 2519 to 2600 cm^{-1}

重复上述操作获得全部 10 种浓度 (2.8%~4.6%, 浓度间隔为 0.2%) N_2O 气体的单波段浓度反演结果 C_n 及其残差分析结果, 分别计算不同浓度 N_2O 气体的有效波段的权重 H_n , 最终获得自适应多波段联合浓度反演结果 \hat{C} , 再对 10 种浓度 N_2O 气体各有效波段的单波段浓度反演结果进行平均求和获得传统多波段浓度反演结果 \bar{C} , 如表 2 所示。

由表 2 可知, 对于大多数实验气体, 自适应多波段联合浓度反演结果相较于传统浓度反演结果更接近真实值, 但对于个别实验气体, 传统浓度反演算法的结果更优, 为了直观展示各浓度反演结果与真实浓度值的误差, 绘制了如图 7 所示的误差分布图。

通过图 7 可知, 自适应多波段联合浓度反演结果在总体趋势上更接近于真实值, 但是在部分浓度位置的反演结果误差较大。为了实现算法稳定性以及反演精度的总体评价, 选取稳定系数

R^2 、均方根误差 RMSE、平均绝对误差 MRE 以及平均相对误差 MRE 对各浓度反演算法进行评价。由于在 10 种浓度 N_2O 的各有效波段均进行了传统单波段浓度反演, 因此其样本量 S 为 22, 自适应多波段联合浓度反演算法与传统多波段浓度反演算法的样本量 S 为 10。

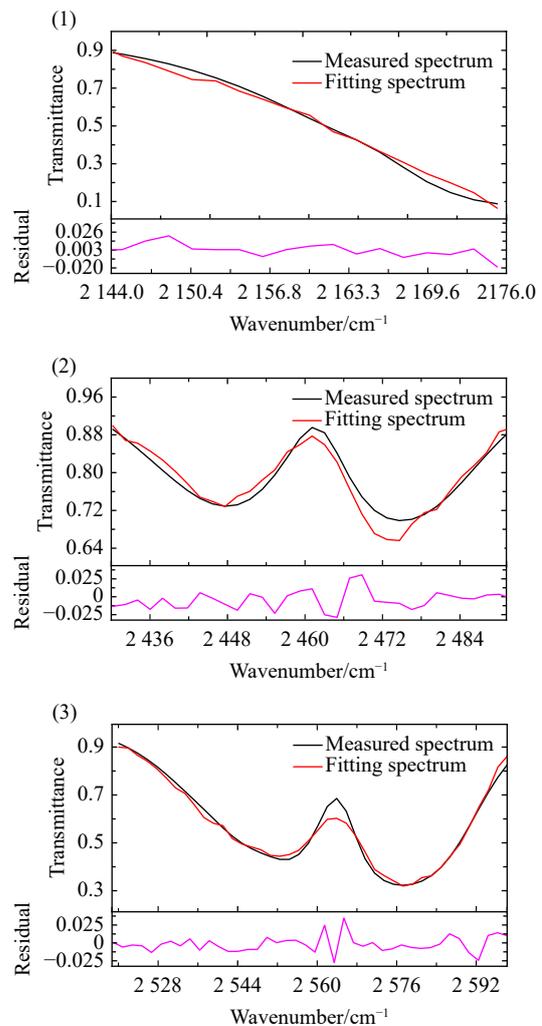


图 6 (1)4.4% 浓度 N_2O 气体在有效波段 $2144\sim 2176\text{ cm}^{-1}$ 的光谱拟合结果及其残差分布 (2)4.4% 浓度 N_2O 气体在有效波段 $2430\sim 2491\text{ cm}^{-1}$ 的光谱拟合结果及其残差分布 (3)4.4% 浓度 N_2O 气体在有效波段 $2519\sim 2600\text{ cm}^{-1}$ 的光谱拟合结果及其残差分布

Fig. 6 (1) The spectral fitting results and residual distribution of N_2O gas with concentration of 4.4% in the effective band of 2144 to 2176 cm^{-1} . (2) The spectral fitting results and residual distribution of N_2O gas with concentration of 4.4% in the effective band of 2430 to 2491 cm^{-1} . (3) The spectral fitting results and residual distribution of N_2O gas with concentration of 4.4% in the effective band of 2519 to 2600 cm^{-1}

表 2 传统单波段与多波段以及自适应多波段联合浓度反演结果

Tab. 2 Traditional single-band, multi-band, and adaptive multi-band joint concentration inversion results

| 真实值 | 传统单波段浓度反演结果 C_n | 传统多波段浓度反演结果 C | 自适应多波段联合浓度反演结果 | |
|------|-------------------|-----------------|----------------|-----------|
| | | | H_n | \hat{C} |
| 2.8% | $C_1=2.83\%$ | 2.775% | $H_1=0.67$ | 2.794% |
| | $C_2=2.72\%$ | | $H_2=0.33$ | |
| 3.0% | $C_1=2.93\%$ | 3.030% | $H_1=0.78$ | 2.968% |
| | $C_2=3.13\%$ | | $H_2=0.22$ | |
| 3.2% | $C_1=3.15\%$ | 3.250% | $H_1=0.85$ | 3.180% |
| | $C_2=3.35\%$ | | $H_2=0.15$ | |
| 3.4% | $C_1=3.35\%$ | 3.305% | $H_1=0.88$ | 3.339% |
| | $C_2=3.26\%$ | | $H_2=0.12$ | |
| 3.6% | $C_1=3.63\%$ | 3.570% | $H_1=0.89$ | 3.616% |
| | $C_2=3.51\%$ | | $H_2=0.11$ | |
| 3.8% | $C_1=3.83\%$ | 3.860% | $H_1=0.78$ | 3.843% |
| | $C_2=3.89\%$ | | $H_2=0.22$ | |
| 4.0% | $C_1=4.03\%$ | 3.955% | $H_1=0.91$ | 4.016% |
| | $C_2=3.88\%$ | | $H_2=0.09$ | |
| 4.2% | $C_1=4.17\%$ | 4.240% | $H_1=0.87$ | 4.188% |
| | $C_2=4.31\%$ | | $H_2=0.13$ | |
| 4.4% | $C_1=4.43\%$ | 4.427% | $H_1=0.41$ | 4.416% |
| | $C_2=4.37\%$ | | $H_2=0.39$ | |
| | $C_3=4.48\%$ | | $H_3=0.20$ | |
| 4.6% | $C_1=4.61\%$ | 4.560% | $H_1=0.73$ | 4.591% |
| | $C_2=4.55\%$ | | $H_2=0.18$ | |
| | $C_3=4.52\%$ | | $H_3=0.09$ | |

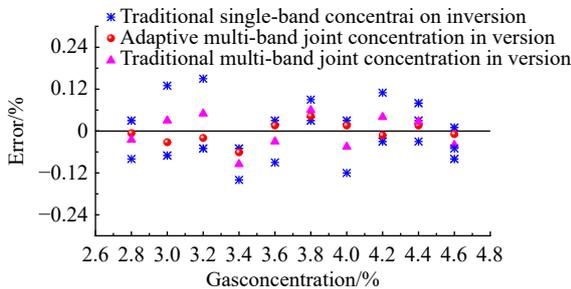


图 7 传统单波段与多波段以及自适应多波段联合的浓度反演结果相较于真实值的误差分布

Fig. 7 The error distribution of the traditional single-band, multi-band, and adaptive multi-band joint concentration inversion results compared with the real values

由表 3 可知, 自适应多波段联合浓度反演算法的稳定系数 R^2 达到了 0.9976, 说明本文提出的算法具有较好的稳定性。相较于传统单波段与多波段浓度反演算法, 自适应多波段联合浓度反演算法的 RMSE 分别降低了 64.44%、41.52%, MAE 分别降低了 66.32%、47.74%, MRE 分别降低了 65.97%、46.72%, 说明本文提出的算法具有较好的反演精度。

为了进一步验证自适应多波段联合浓度反演算法的普适性, 对 2.0%~2.6% 以及 4.8%~5.8% 浓

度的 N_2O 气体进行自适应多波段联合浓度反演, 将其结果与表 2 中 2.8%~4.6% 浓度 N_2O 气体的自适应多波段联合浓度反演结果进行对比分析, 如图 8 所示

表 3 传统单波段与多波段浓度反演以及自适应多波段联合浓度反演算法评价结果

Tab. 3 The evaluation results of traditional single-band, multi-band, and adaptive multi-band joint concentration inversion algorithm

| 算法 | S | R^2 | RMSE | MAE | MRE |
|--------------|----|--------|--------|--------|--------|
| 传统单波段浓度反演 | 22 | 0.9820 | 0.0796 | 0.0686 | 0.0191 |
| 传统多波段联合浓度反演 | 10 | 0.9928 | 0.0484 | 0.0442 | 0.0122 |
| 自适应多波段联合浓度反演 | 10 | 0.9976 | 0.0283 | 0.0231 | 0.0065 |

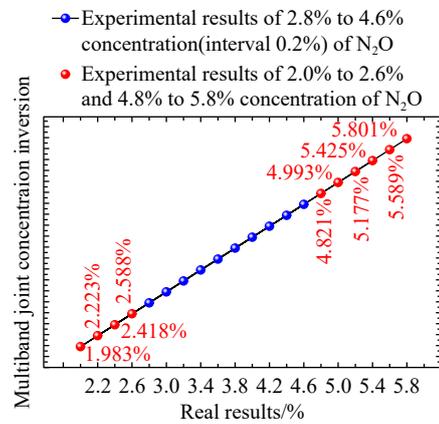


图 8 自适应多波段联合浓度反演结果的分布曲线

Fig. 8 Distribution curve of adaptive multi-band joint concentration inversion results

通过相关系数对 2.0%~2.6% 和 4.8%~5.8% 浓度 N_2O 的自适应多波段联合浓度反演结果与 10 种浓度 (2.8%~4.6%) N_2O 气体反演结果的相关强度进行评价, 如表 4 所示:

表 4 不同浓度 N_2O 的相关系数

Tab. 4 The correlation coefficients of different concentrations of N_2O

| 浓度 | 相关系数 |
|------|----------|
| 2.0% | 0.999177 |
| 2.2% | 0.999622 |
| 2.4% | 0.999286 |
| 2.6% | 0.999139 |
| 4.8% | 0.999201 |
| 5.0% | 0.999148 |
| 5.2% | 0.999172 |
| 5.4% | 0.999379 |
| 5.6% | 0.999485 |
| 5.8% | 0.999521 |

由表 4 可知, 2.0%~2.6% 和 4.8%~5.8% 浓度 N_2O 的相关系数均优于 0.999, 充分表明了超出 N_2O 气体的实验浓度区间 2.8%~4.6%, 自适应多波段联合浓度反演算法仍然适用。

表 5 为不同浓度 SO_2 与 CO 的自适应多波段联合浓度反演算法评价结果。其中反斜杠前的数值为待测气体的浓度区间, 反斜杠后的数值为待测气体的浓度间隔。

表 5 SO_2 与 CO 的自适应多波段联合浓度反演算法评价结果

Tab. 5 The evaluation results of adaptive multi-band joint concentration inversion algorithm of CO and SO_2

| 气体 | 浓度\间隔 | R^2 | RMSE | MAE | MRE |
|--------|--------------|--------|--------|--------|--------|
| SO_2 | 1%~10%\1% | 0.9652 | 0.0393 | 0.0237 | 0.0172 |
| CO | 0.1%~1%\0.1% | 0.9943 | 0.0205 | 0.0147 | 0.0065 |

由表 5 可知, 在对 CO 进行自适应多波段联合浓度反演时, 算法的稳定系数 R^2 为 0.9943, 优于 SO_2 的 0.9652; RMSE、MAE 以及 MRE 分别为 0.0205、0.0147 以及 0.0065, 小于 SO_2 气体的 0.0393、0.0237 以及 0.0172。

在进行自适应多波段联合浓度反演时, 由于 SO_2 与环境中 CO_2 的红外吸收峰有重合, 会产生光谱混叠, 导致对 SO_2 气体进行反演时算法精度与稳定性降低。而对 CO 进行反演时, 其红外吸收峰与环境中 CO_2 的红外吸收峰仅有部分重合, 此时算法具有较好的精度与稳定性。

参考文献:

- [1] CUISSET A, VENABLES D S, GAO X M, et al.. Applications of spectroscopy in environmental monitoring of gases and aerosols[J]. *Journal of Spectroscopy*, 2016, 2016: 2575782.
- [2] YANG CH, ZHOU ZH Y, LI Y, et al.. Measuring the tuning curve of spontaneous parameter downconversion using a comet-tail-like pattern[J]. *Optics Letters*, 2022, 47(4): 898-901.
- [3] TALGHADER J J, GAWARIKAR A S, SHEA R P. Spectral selectivity in infrared thermal detection[J]. *Light: Science & Applications*, 2012, 1(8): e24.
- [4] ZHAO B X, LIANG J Q, LV J G, et al.. Reducing the influence of systematic errors in interference core of stepped micro-mirror imaging fourier transform spectrometer: a novel calibration method[J]. *Remote Sensing*, 2023, 15(4): 985.
- [5] 张璐, 李博, 李寒霜, 等. 超光谱分辨率紫外双通道共光路成像光谱仪设计[J]. *中国光学(中英文)*, 2022, 15(5): 1029-1037.
- [6] ZHANG L, LI B, LI H SH, et al.. Hyperspectral resolution ultraviolet dual channel common optical path imaging spectrometer[J]. *Chinese Optics*, 2022, 15(5): 1029-1037. (in Chinese).
- [6] LI A, YAO CH H, XIA J F, et al.. Advances in cost-effective integrated spectrometers[J]. *Light: Science &*

5 结 论

本文提出了一种自适应多波段联合浓度反演算法, 该算法结合透过率稳定区间 0.1~0.9 以及谱宽阈值 32 cm^{-1} 实现对待测气体有效波段的自适应选择, 采用非线性最小二乘拟合方法对待测气体各有效波段进行浓度反演以及残差分析, 获得各有效波段的浓度反演结果及其权重, 通过加权平均实现待测气体浓度的精确定量分析。该算法解决了定量分析过程中透过率偏离稳定区间导致的反演精度低、稳定性差以及信息利用率低等问题。设计并进行了相关实验, 并根据热电厂排放污染物中 N_2O 的浓度分布进行了自适应多波段联合浓度反演。

实验结果表明, 自适应多波段联合浓度反演算法可以实现待测气体有效波段的准确获取, 实测与理论有效波段的误差在 4 cm^{-1} 之内。该算法的稳定系数达到了 0.9976, 相较于传统的单波段及多波段浓度反演算法, 反演结果的均方根误差分别降低了 64.44%、41.52%, 平均相对误差分别降低了 65.97%、46.72%, 平均绝对误差分别降低了 66.32%、47.74%。该算法对于提高反演精度及稳定性具有重要意义。

任何算法都存在一定局限性, 当待测气体与环境干扰气体的红外吸收峰重合时会产生光谱混叠, 导致自适应多波段联合浓度反演算法的精度与稳定性受到影响, 需要根据环境干扰气体的光谱特性进行干扰气体的光谱解调。

- Applications*, 2022, 11(1): 174.
- [7] ARRIGONE G M, HILTON M. Theory and practice in using Fourier transform infrared spectroscopy to detect hydrocarbons in emissions from gas turbine engines[J]. *Fuel*, 2005, 84(9): 1052-1058.
- [8] 刘成贵, 于江玉, 李奉翠, 等. 拉曼光谱测试技术在可充电锂离子电池储能机理的研究进展[J]. *应用化学*, 2023, 40(10): 1347-1358.
LIU CH Y, YU J Y, LI F C, *et al.*. Research progress of Raman spectroscopy technique in energy storage mechanism of rechargeable aluminum-ion batteries[J]. *Chinese Journal of Applied Chemistry*, 2023, 40(10): 1347-1358. (in Chinese).
- [9] 仝大伟, 孔明, 向育斌. 含甲氧基四苯乙炔咪唑化合物的合成、光物理性质、理论计算及细胞成像[J]. *应用化学*, 2023, 40(9): 1322-1333.
TONG D W, KONG M, XIANG Y B. Synthesis, photophysical properties, theoretical calculation and cell imaging of a tetraphenylethene imidazole compound with methoxy group[J]. *Chinese Journal of Applied Chemistry*, 2023, 40(9): 1322-1333. (in Chinese).
- [10] 舒开强, 陈友元, 彭郑英, 等. 铀矿中多目标元素的激光诱导击穿光谱定量分析方法研究[J]. *分析化学*, 2023, 51(7): 1195-1203.
SHU K Q, CHEN Y Y, PENG ZH Y, *et al.*. Laser-induced breakdown spectroscopy for quantitative analysis of multi-target elements in uranium ore[J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2023, 51(7): 1195-1203. (in Chinese).
- [11] 陈玥瑶, 夏静静, 韦芸, 等. 近红外光谱法无损检测平谷产大桃品质方法研究[J]. *分析化学*, 2023, 51(3): 454-462.
CHEN Y Y, XIA J J, WEI Y, *et al.*. Research on nondestructive quality test of Pinggu peach by near-infrared spectroscopy[J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2023, 51(3): 454-462. (in Chinese).
- [12] LI H L, DI S, LV W J, *et al.*. Research on the measurement of CO₂ concentration based on multi-band fusion model[J]. *Applied Physics B*, 2021, 127(1): 5.
- [13] CIĘSZCZYK S. A multi-band integrated virtual calibration-inversion method for open path fir spectrometry[J]. *Metrology and Measurement Systems*, 2013, 20(2): 287-298.
- [14] 吴时超. 基于中波红外光谱信息的大气 CO₂ 反演方法[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2021.
WU SH CH. *Atmospheric CO₂ inversion method based on mid-wave infrared spectral information*[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2021. (in Chinese).
- [15] WANG W ZH, WANG Y M, SONG W J, *et al.*. Multiband infrared inversion for low-concentration methane monitoring in a confined dust-polluted atmosphere[J]. *Applied Optics*, 2017, 56(9): 2548-2555.
- [16] 吴靖, 张朋朋, 黄峰, 等. NO₂ 双通道光谱成像定量监测技术研究[J]. *仪器仪表学报*, 2022, 43(4): 155-162.
WU J, ZHANG P P, HUANG F, *et al.*. Research on quantitative monitoring technology of NO₂ dual-channel spectral imaging[J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2022, 43(4): 155-162. (in Chinese).
- [17] 周佳巧, 崔文楠, 张涛, 等. 基于光谱测量数据的自适应波段选择技术[J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(23): 232501.
ZHOU J Q, CUI W N, ZHANG T, *et al.*. Adaptive band selection technique based on spectral measurement data[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(23): 232501. (in Chinese).
- [18] HAALAND D M, HAN L, NIEMCZYK T M. Use of CLS to understand PLS IR calibration for trace detection of organic molecules in water[J]. *Applied Spectroscopy*, 1999, 53(4): 390-395.
- [19] CHUKWU R, MUGISA J, BROGIOLI D, *et al.*. Statistical analysis of the measurement noise in dynamic impedance spectra[J]. *Chemelectrochem*, 2022, 9(14): e202200109.
- [20] 刘海涛, 魏汝祥, 蒋国萍. 基于加权偏最小二乘回归的软件成本估算方法[J]. *计算机工程*, 2012, 38(21): 36-39.
LIU H T, WEI R X, JIANG G P. Software cost estimation method based on weighted partial least squares regression[J]. *Computer Engineering*, 2012, 38(21): 36-39. (in Chinese).
- [21] 齐亚欣, 陈嵩. 一种基于多元回归的射线数字图像影响因子的权重分配方法[J]. *无损检测*, 2018, 40(8): 6-9,14.
QI Y X, CHEN S. A weight assignment method for influencing factors of radiographic digital images based on multiple regression[J]. *Nondestructive Testing*, 2018, 40(8): 6-9,14. (in Chinese).
- [22] CONDE O M, DE LA CRUZ J, RODRIGUEZ-COBO L, *et al.*. Optimized image calibration for spectroscopic systems[C]. *Proceedings of 2011 IEEE SENSORS*, IEEE, 2011.
- [23] DRYJAŃSKI P. Error analysis of infrared transmission measurements: determination of baseline, choice of peak maximum and range truncation in band profile and integrated intensity determination[J]. *Spectrochimica Acta Part A*:

- Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 1998, 54(2): 265-276.
- [24] LIU H, ZHU J, YIN H, *et al.*. Extreme learning machine and genetic algorithm in quantitative analysis of sulfur hexafluoride by infrared spectroscopy: erratum[J]. *Applied Optics*, 2023, 62(23): 6169-6170.
- [25] 张豹, 高潮, 郭永彩, 等. 基于 DOAS 及统计量的低浓度 SO₂ 测量方法 (英文)[J]. 光子学报, 2018, 47(2): 0230001. ZHANG B, GAO CH, GUO Y C, *et al.*. Measurement method for low-concentration SO₂ based on statistics and DOAS[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2018, 47(2): 0230001. (查阅网上资料, 本条文献为英文文献, 请确认).
- [26] 程巴阳, 张天舒, 高闯光, 等. FTIR 光谱高温气体浓度反演方法及残差结构分析[J]. *光谱学与光谱分析*, 2011, 31(1): 82-85. CHENG S Y, ZHANG T SH, GAO M G, *et al.*. Concentration inversion of high temperature air from FTIR spectra and analyzing residual error structure[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2011, 31(1): 82-85. (in Chinese).
- [27] NIE W, XU ZH Y, RAO G F, *et al.*. Methods of tunable diode laser absorption saturation spectroscopy to gas sensing under optically thick conditions[J]. *Microwave and Optical Technology Letters*, 2021, 63(8): 2063-2067.
- [28] CAI Y F, XU ZH, JI K F. Measurement and correction of instrumental profiles for the spectral data of the new vacuum solar telescope[J]. *Solar Physics*, 2020, 295(2): 31.
- [29] WANG F, MA S X, YAN G W. A PLS-based random forest for NO_x emission measurement of power plant[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2023, 240: 104926.
- [30] PEI X K, GIDON D, YANG Y J, *et al.*. Reducing energy cost of NO_x production in air plasmas[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2019, 362: 217-228.

作者简介:



王冠程(1999—), 男, 吉林长春人, 硕士研究生, 2021 年于长春理工大学获得学士学位, 主要从事红外光谱分析方面的研究。E-mail: wanguancheng21@mails.ucas.ac.cn



吕金光(1984—), 男, 吉林蛟河人, 博士, 副研究员, 博士生导师, 中国科学院青年创新促进会会员, 2008 年于吉林大学获得学士学位, 2013 年于中国科学院长春光学精密机械与物理研究所获得博士学位, 主要从事相干光谱成像与光学信息处理方面的研究。E-mail: jinguanglv@163.com



梁静秋(1962—), 女, 吉林长春人, 博士, 研究员, 博士生导师, 2003 年于中国科学院长春光学精密机械与物理研究所获得博士学位, 主要从事微光机电系统及光通信、红外光谱技术及仪器、Micro LED 芯片及应用等方面的研究。E-mail: liangjq@ciomp.ac.cn