

用于激光吸收光谱二维重建的光谱 优化选择方法研究^{*}

辛明原, 宋俊玲, 饶 伟, 洪延姬, 姜雅晶

(航天工程大学 激光推进及其应用国家重点实验室, 北京 101416)

摘 要: 光谱组合对多光谱重建技术的重建结果有很大影响, 不合理的光谱组合会降低光谱测量的有效性, 加大重建误差。为了从海量的光谱数据库中选出适用于被测流场参数范围的最优光谱组合, 提出了一种基于向量组线性相关性的光谱选择方法, 采用数值仿真的方法开展研究, 仿真结果验证了方法的可行性与可靠性。分析了测量信号无噪声和存在噪声时, 光谱数量与重建结果的关系。研究发现最优光谱组合的线性相关指数小于0.01时, 该组合存在光谱的冗余。保证测量有效性的同时光谱数量最少的光谱组合为线性相关指数不小于0.01的最优光谱组合。测量存在噪声时, 光谱数量越多, 噪声的抑制效果越好, 重建结果精度更高。通过重复测量法可以有效降低噪声影响, 用最少数量的光谱实现更多光谱的测量效果。

关键词: 激光吸收光谱; 多光谱重建; 线性相关指数; 光谱选择; 光谱数量

中图分类号: V231.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2020) 10-2332-09

DOI: 10.13675/j.cnki. tjjs. 200295

Method of Optimal Spectral Lines Selection for Two-Dimensional Reconstruction of Laser Absorption Spectroscopy

XIN Ming-yuan, SONG Jun-ling, RAO Wei, HONG Yan-ji, JIANG Ya-jing

(State Key Laboratory of Laser Propulsion and Application, Space Engineering University, Beijing 101416, China)

Abstract: Spectral line combination has a great influence on the reconstruction result of multi-spectral laser absorption tomography. Poor spectral combination reduces the effectiveness of spectrum measurement and increases reconstruction error. In order to select the optimal spectrum combination suitable for the target flow field parameter range from the massive spectrum database, this paper proposes a spectrum selection method based on the linear correlation of the vector group. Numerical simulations verify the feasibility and reliability of the method. The relationship between the number of spectra and the reconstruction results is analyzed when the measured signal is noise-free and noisy. It is found that when the linear correlation index (LCI) of the optimal spectral combination is less than 0.01, the combination has spectral redundancy. The line combination with the least number of

^{*} 收稿日期: 2020-05-08; 修订日期: 2020-07-21。

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金 (61505263); 北京市自然科学基金 (1194028)。

作者简介: 辛明原, 博士生, 研究领域为可调谐半导体激光吸收光谱技术的测量及燃烧流场的二维重建。

E-mail: ybgaxmy@163.com

通讯作者: 宋俊玲, 博士, 助理研究员, 研究领域为研究领域为可调谐半导体激光吸收光谱技术的测量及燃烧流场的二维重建。E-mail: songjl_2008@163.com

引用格式: 辛明原, 宋俊玲, 饶 伟, 等. 用于激光吸收光谱二维重建的光谱优化选择方法研究[J]. 推进技术, 2020, 41 (10): 2332-2340. (XIN Ming-yuan, SONG Jun-ling, RAO Wei, et al. Method of Optimal Spectral Lines Selection for Two-Dimensional Reconstruction of Laser Absorption Spectroscopy[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2020, 41 (10): 2332-2340.)

spectra while ensuring the validity of the measurement is the optimal spectrum combination with an LCI not less than 0.01. When there is noise in the measurement, the more the number of spectra lines, the better the noise suppression effect, and the higher the accuracy of the reconstruction result. The repeated measurement method can effectively reduce the effect of noise and use the least number of spectra to achieve more spectral measurement effects.

Key words: Laser absorption spectroscopy; Multi-spectral absorption tomography; Linear correlation index; Spectral line selection; Spectral line number

1 引言

激光吸收光谱层析技术^[1](Tomographic absorption spectroscopy, 简记为TAS)是基于激光吸收光谱技术^[2-4]和计算成像技术的气体二维诊断技术,能够重建温度和组分浓度二维分布,具有响应快、分子辨识度高等优势,在航空发动机的燃烧诊断领域已经有了初步应用^[5-6]。为了进一步提高TAS的测量精度,研究人员从算法^[7-9]、光线布局^[10-11]、光谱选择^[12-13]等多个角度对TAS技术开展了研究,TAS技术从传统的利用两个光谱发展到利用多个光谱。利用两个光谱的TAS重建技术^[14]是最早发展的传统TAS技术,重建过程分为两步:首先,分别重建每个光谱的吸收系数;然后,根据两个光谱的吸收系数计算每个网格的气体参数。对于传统的TAS重建方法,光线数量对重建精度有重要影响,但受制于探头尺寸,光线数量不能满足需求^[5,15],这使传统TAS方法的发展陷入了瓶颈。随着宽谱激光器的发展,Ma等^[7,16-17]提出了一种多光谱重建方法,该方法与传统的TAS技术不同,能够综合利用多个光谱的测量信息做重建,通过增加光谱数量的方式增加了测量信息,但带来的问题是需要解算复杂的非线性方程组。尽管如此,多光谱重建技术减少了TAS对光线数量的需求,在仅有2个投影角度的平行光分布下依然能够实现高精度重建,相比于传统的TAS方法需要4个投影角度的需求^[18],减少了约50%的光线需求。

多光谱重建中光谱组合对重建非常重要,不合适的组合会降低重建精度^[10],需要解决选多少光谱,选哪些光谱的问题。Zhou等^[19-20]给出了一系列光谱的选择准则,这些准则是针对双光谱视线测量设计的,虽然不能用于多光谱重建中光谱组合的选取,但对于一般性实验的光谱选取准则具有参考价值,如实验中光谱吸光度峰值应在0.001~0.8等。Ma等^[12]提出用双温区分布选择最优光谱组合的方法,该方法假设对于双温区分布重建最好的光谱组合适用于非均匀温度分布(多于两个温度分布区),将非均匀

温度分布改写为两温度分布,通过计算在谱线集中找到最优的组合。但在实际计算中,两温度分布为人为设定的,同时需要大量计算遍历得到最优的光谱组合。Qu等^[13]提出采用格拉姆行列式(Gram determinant,简记为GD)方法判断不同谱线组合线性相关性的方法。指出线性相关性弱的光谱组合有更高的重建精度和重建稳定性,但是不能从格拉姆行列式结果中得到选取光谱数量的信息。

尽管Qu的方法量化了光谱组合的有效性,但是不能从中确定光谱组合是否存在冗余,光谱数量无法得到确定。为此,本文提出了一种新的光谱组合有效性评估指标,通过该指标可以确定光谱组合的最少光谱数量。

2 理论与方法

2.1 激光吸收光谱层析技术

已有很多文献介绍了基于多光谱的TAS理论,但为了方便说明方法和讨论问题,在此对涉及的理论 and 公式做简要介绍。

当一束单色激光穿过气体,透射光强 I_t 与入射光强 I_0 两者满足Beer-Lambert定律,表达式为

$$\ln\left(\frac{I_t}{I_0}\right) = -S(T) \cdot \chi \cdot L \cdot \phi \quad (1)$$

式中 T 和 χ 分别是气体的温度和分压, $S(T)$ 是吸收谱线强度, ϕ 是伏赫线型函数, L 是吸收光程。 $S(T)$ 的表达式为

$$S(T) = S(T_0) \cdot \frac{T_0}{T} \cdot \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \exp\left[-\frac{hc}{k} \cdot E'' \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \cdot \left[1 - \exp\left(\frac{-hcv}{kT}\right)\right] \left[1 - \exp\left(\frac{-hcv}{kT_0}\right)\right]^{-1} \quad (2)$$

式中 T_0 为参考温度296K, $Q(T)$ 是配分函数, h 为普朗克常数, c 为光速, k 为玻尔兹曼常数, ν 是中心波数, E'' 为下态能级。 ϕ 在频域中积分值为1,将式(1)在频域中做积分可以消除 ϕ ,此积分结果称为吸收面积 A 。

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} S(T) \cdot \chi \cdot \phi(\nu) \cdot d\nu \quad (3)$$

图1给出了多光谱重建的原理示意图,其中 λ 表示光谱的波长,红色箭头线表示光线,一条光线中包含了 I 个波长的光谱,共有 J 条光线。 $A_{i,j}$ 是光线 j 的光谱 i 测量的吸收面积。网格中的数字表示网格的行数和列数, (m,n) 表示 m 行 n 列的网格,绿色网格是黄色网格的相邻网格。

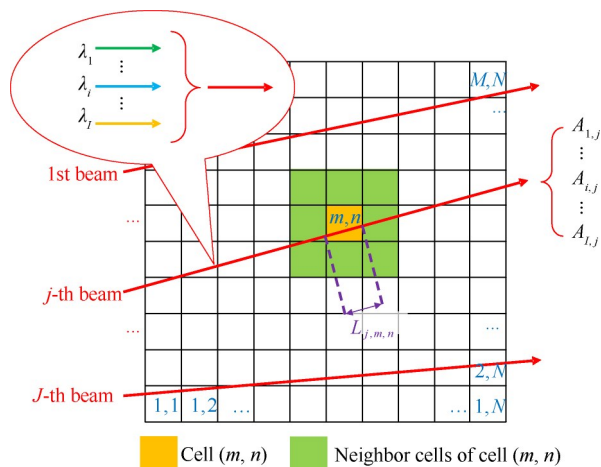


Fig. 1 Concept of multi-spectral laser absorption tomography

设被测区域离散成 $M \times N$ 个网格,每个网格内的温度和分压视为均匀分布。根据式(2)吸收面积的测量方程为

$$A_{i,j} = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N L_{j,m,n} \cdot \chi_{m,n} \cdot S_i(T_{m,n}) \quad (4)$$

式中 $L_{j,m,n}$ 表示光线 j 穿过第 m 行 n 列网格的长度, $T_{m,n}$ 和 $\chi_{m,n}$ 分别表示第 m 行 n 列网格的温度和分压, $A_{i,j}$ 表示光线 j 中谱线 i 测得的吸收面积。可看出式(4)是以 T 和 χ 为未知量的非线性方程组,设共有 J 条光线, I 个光谱,则重建方程的总数量为 $I \times J$ 个,方程组可用下式表示

$$\begin{cases} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N L_{1,m,n} \cdot \chi_{m,n} \cdot S_1(T_{m,n}) = A_{1,1} \\ \vdots \\ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N L_{j,m,n} \cdot \chi_{m,n} \cdot S_i(T_{m,n}) = A_{i,j} \\ \vdots \\ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N L_{J,m,n} \cdot \chi_{m,n} \cdot S_I(T_{m,n}) = A_{I,J} \end{cases} \quad (5)$$

式(5)为多光谱重建的重建方程组,关于多光谱重建方法的详细内容可参考文献[7,16-17]。用模拟退火算法求解方程(5):首先,给出一个气体分布的猜想 $^c T$ 和 $^c \chi$,根据式(5)计算吸收面积 $^c A_{i,j}$ ($i=1,2,$

$\dots, I; j=1, 2, \dots, J$);然后,对比实际测量的吸收面积 $^m A_{i,j}$,通过模拟退火算法寻找使 $^c A_{i,j}$ 和 $^m A_{i,j}$ 偏差最小的 $^c T$ 和 $^c \chi$ 即为重建结果。左上标“ c ”和“ m ”分别表示计算量和测量量。 $^c A_{i,j}$ 和 $^m A_{i,j}$ 的偏差 D 定义为

$$D = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\frac{^c A_{i,j} - ^m A_{i,j}}{^m A_{i,j}} \right)^2 \quad (6)$$

为了使模拟退火算法快速收敛并提高算法的稳定性,在式(6)中增加了温度和分压的平滑正则化函数,其表达式为

$$R_T = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[T_{m,n} - \frac{1}{8} (T_{m-1,n-1} + T_{m-1,n} + T_{m-1,n+1} + T_{m,n-1} + T_{m,n+1} + T_{m+1,n-1} + T_{m+1,n} + T_{m+1,n+1}) \right] \quad (7a)$$

$$R_\chi = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[\chi_{m,n} - \frac{1}{8} (\chi_{m-1,n-1} + \chi_{m-1,n} + \chi_{m-1,n+1} + \chi_{m,n-1} + \chi_{m,n+1} + \chi_{m+1,n-1} + \chi_{m+1,n} + \chi_{m+1,n+1}) \right] \quad (7b)$$

R_T 和 R_χ 分别描述了网格 (m,n) 与其相邻网格的平均温度和平均分压的偏差。增加正则化函数后的目标函数 F 为

$$F = D + \gamma_T \cdot R_T + \gamma_\chi \cdot R_\chi \quad (8)$$

式中 γ_T 和 γ_χ 分别为温度和分压的正则化参数,用于调整正则化函数在目标函数中的权重。

2.2 基于线性相关性指数的光谱组合优化方法

选取最优光谱组合前需要从海量的光谱中初选出适合实验测量的谱线,建立候选光谱集。近红外波段 H_2O 的吸收光谱主要在 $6600 \sim 7700 \text{ cm}^{-1}$ 的波数范围内,在HITRAN光谱数据库^[21]中包含了13722个谱线,然而这些谱线并非都适用于实验测量,需要去掉信号太弱或太强、干扰较大的谱线。基于文献[19-20]提出的谱线选择准则,设计如下的谱线选择策略:

(1)合并谱线。将中心波数小于 0.01 cm^{-1} ,下态能级差在10以内的谱线合并为一条谱线,合并后光谱的线强度是合并前所有谱线的线强度之和,其余光谱参数取合并前线强度最大光谱的参数。

(2)去掉线强度过小的谱线。对于线强度非常小的谱线,吸收带来的影响可基本忽略,设实验的温度是 $290 \sim 3000 \text{ K}$,去除在此温度范围内最大线强度小于 0.005 的谱线。

(3)去除重叠的谱线。去除谱线中心波数间隔小于 0.15 cm^{-1} 的两个谱线。

(4)选择吸光度适中的谱线。根据被测对象的

参数范围和光路设计,选出吸光度适中的谱线。

(5)去掉下态能级差小于 10 的谱线。

图 2 给出了按照上述策略逐步筛选后剩余谱线的数量,其中步骤(4)中采用的气体参数与光路设计在第 3 部分中给出,选取的吸光度范围是 0.03~1.5。

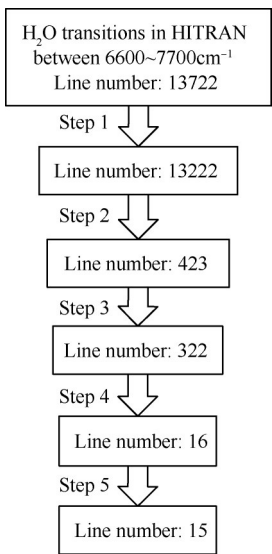


Fig. 2 Line selection result using the selection criteria in the near-infrared region based on HITRAN

表 1 给出了图 2 最终得出的 15 条谱线及其参数,这些谱线组成了候选光谱集。

Table 1 Candidate lines

No.	E''	ν/cm^{-1}	$S(T_0)$
1	447.25	7368.41	1.73×10^{-1}
2	586.24	7381.61	9.99×10^{-2}
3	742.07	7203.89	7.45×10^{-2}
4	920.19	7047.69	3.40×10^{-2}
5	1045.06	7185.60	1.96×10^{-2}
6	1079.08	7417.82	1.07×10^{-2}
7	1114.54	7416.05	1.42×10^{-2}
8	1216.19	7179.75	5.62×10^{-3}
9	1394.81	7164.90	3.58×10^{-3}
10	1524.85	6972.05	1.63×10^{-3}
11	1557.85	6972.75	1.56×10^{-3}
12	1774.75	6945.48	5.31×10^{-4}
13	1806.67	6946.58	5.05×10^{-4}
14	2042.31	6918.48	1.54×10^{-4}
15	2073.51	6919.95	2.00×10^{-4}

在介绍最优组合的选取方法之前,首先讨论测量的有效性。从重建方程组(5)中选出某一光线*j*的所有光谱的测量方程如下

$$\begin{cases} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N L_{j,m,n} \cdot \chi_{m,n} \cdot S_1(T_{m,n}) = A_{1,j} \\ \vdots \\ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N L_{j,m,n} \cdot \chi_{m,n} \cdot S_i(T_{m,n}) = A_{i,j} \\ \vdots \\ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N L_{j,m,n} \cdot \chi_{m,n} \cdot S_I(T_{m,n}) = A_{I,j} \end{cases} \quad (9)$$

公式(9)中给出了同一光路上,不同光谱*λ*的测量结果。由于在同一光路上,穿过的是相同的网格并且穿过网格的长度也相同,不同的光谱因为谱线强度不同而得到不同的吸收面积,若某条光谱*i*的谱线强度可以近似由其他光谱的谱线强度的线性组合表示,即

$$S_i(T, \lambda_i) \approx \sum_{p=1, p \neq i}^I k_p \cdot S_p(T) \quad (10)$$

式中*k_p*为常数,则将式(10)代入式(9)可得

$$A_{i,j} \approx \sum_{p=1, p \neq i}^I k_p \cdot A_{p,j} \quad (11)$$

这意味着光谱*i*的测量结果可由其他光谱的线性组合近似表示,那么光谱*i*的测量是冗余的。

综上,判断某一条光谱测量的有效性可以通过光谱的谱线强度与其他光谱的谱线强度的线性相关性强弱来判断。设一个光谱集合的谱线强度集为 $\text{Spectrum} = \{S_1(T), S_2(T), \dots, S_I(T)\}$, 对于其中的某一光谱*i* ($S_i(T) \in \{S_1(T), S_2(T), \dots, S_I(T)\}$), 定义线性相关性指数 (Linear correlation index, 简记为 LCI) 为

$$\text{LCI}_i = \left\| S_i - S'^{-i} \mathbf{k}_{\text{LS}} \right\|_2 / \left\| S_i \right\|_2 \quad (12)$$

$$\mathbf{k}_{\text{LS}} = \left[(S'^{-i})^T S'^{-i} \right]^{-1} (S'^{-i})^T S_i$$

式中 S_i 为 $S_i(T)$ 的列向量形式, $S'^{-i} = [S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, \dots, S_I]$, 上标“T”表示矩阵的转置, 上标“-1”表示矩阵求逆。下面对式(12)的推导进行说明。

根据公式(10),用光谱组合 spectrum 中的光谱*i* 以外的光谱 (即 $\{S_1(T), S_2(T), \dots, S_{i-1}(T), S_{i+1}(T), \dots, S_I(T)\}$) 线性表示光谱*i*, 方程如下

$$k_1 S_1 + k_2 S_2 + \dots + k_{i-1} S_{i-1} + k_i S_{i+1} + \dots + k_{I-1} S_I = S_i \quad (13)$$

式中 $k_i (i=1, 2, \dots, n-1)$ 是未知数。设 $\mathbf{k} = [k_1, k_2, \dots, k_{I-1}]^T$, 可以得出(13)的矩阵形式

$$S'^{-i} \mathbf{k} = S_i \quad (14)$$

定义偏差 ΔS_i 为

$$\Delta S_i = \left\| S_i - S'^{-i} \mathbf{k} \right\|_2 / \left\| S_i \right\|_2 \quad (15)$$

ΔS_i 反映了 S^{l-i} 基于 k 的线性相关式与 S_i 的归一化偏差;从定义中可看出, $\Delta S_i \geq 0$ 。 ΔS_i 越小,表明 $S^{l-i}k$ 与 S_i 的偏差越小,也说明 S_i 与 S^{l-i} 的线性相关性越强。用最小二乘法求解 k_{LS}

$$k_{LS} = \left[(S^{l-i})^T S^{l-i} \right]^{-1} (S^{l-i})^T S_i \quad (16)$$

LCI_i 的物理意义是用集合中其他光谱的测量结果近似表示光谱 i 的测量结果的偏差, LCI_i 越小,表明近似效果越好,光谱 i 测量的有效性越低,即冗余性越大;相反, LCI_i 越大,表明光谱 i 测量的有效性越高。

通过式(12)可以量化一个光谱与其余光谱的线性相关性,进一步定义光谱组合的线性相关性指数 LCI_{spectrum} 为组合中线性相关指数最小的光谱的线性相关性指数,即

$$LCI_{\text{spectrum}} = \min \{ LCI_i | S_i \in \text{spectrum} \} \quad (17)$$

基于LCI法对表2的候选光谱集做优化,采用枚举法选出不同数量下的最优光谱组合。LCI的方法的优势在于可以根据计算出的一个光谱组合的LCI值,判断该组合中有效性,即某一光谱被其他光谱线性表示的偏差,从而分析组合的光谱数量是否合适。这里需要指出,文中第一步选取光谱数据集是以HITRAN数据为基础,进行选择的。在实际测量中,需要根据实际流场的温度范围、实验条件(如实验室具备的激光器波段)等因素,在本文方法第一步初选时,将已有的激光器可以覆盖的光谱作为候选光谱,再利用线性相关性指标选出最优的光谱组合。

Table 2 Optimal line combinations based on LCI method		
Line number	Optimal line combination	LCI
2	{1, 15}	4.77×10^{-1}
3	{1, 8, 15}	3.08×10^{-2}
4	{1, 3, 12, 15}	1.84×10^{-3}
6	{1, 2, 4, 9, 10, 12}	3.87×10^{-6}
7	{1, 2, 6, 9, 10, 13, 15}	4.46×10^{-7}
8	{1, 3, 4, 5, 6, 9, 11, 13}	8.79×10^{-9}
9	{1, 2, 3, 6, 8, 9, 11, 14, 15}	1.36×10^{-9}
10	{1, 2, 3, 4, 5, 8, 10, 13, 14, 15}	2.47×10^{-11}
11	{1, 2, 3, 4, 5, 7, 9, 11, 13, 14, 15}	1.09×10^{-12}
12	{1, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15}	3.68×10^{-13}
13	{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 12, 13, 14, 15}	1.63×10^{-13}
14	{1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15}	6.13×10^{-14}
15	{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15}	5.80×10^{-16}

3 气体模型与光线布局

水分子为超燃冲压发动机重要的燃烧产物之一。本文以H₂O为研究对象,气体分布重建区域为24cm×11cm的矩形区域,温度分布和H₂O的组分浓度分布基于超燃冲压发动机的一次实际测量结果。模型中温度为700~1600K,组分浓度为0.05~0.2,温度和组分浓度分布如图3所示。

根据被测流场为24cm×11cm的矩形区域,测量探头的最小间隔为1.5cm,重建区域最大可离散为16×7,每个网格包括气体温度和组分浓度两个变量,共224个未知数。

实验采用正交分布的光线布局,如图4所示竖方向分布16条光线,水平方向分布7条光线,共23条光线。

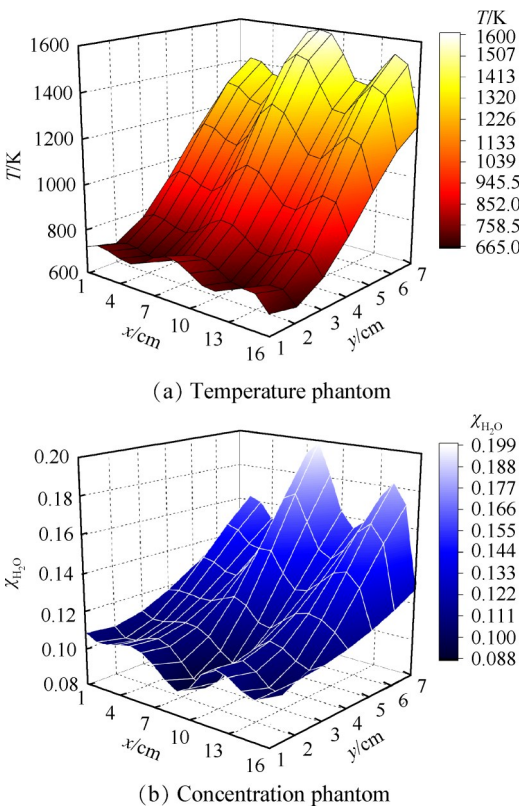


Fig. 3 Phantoms for numerical simulation

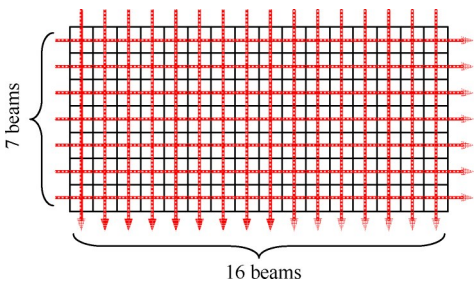


Fig. 4 Beam arrangement of the test

4 数值仿真分析

4.1 光谱数量的选择

从表2的选取结果可发现:当光谱数量为2时,选出了光谱1和光谱15,两者的下态能级差在候选光谱集中是最大的,这符合双线法光谱选择的经验性规律;当光谱数量大于2时,选出的光谱的下态能级分布较为均匀,与文献[12-13]的研究结论一致。

当光谱数量为4时,最优光谱组合的LCI值为 1.84×10^{-3} ,表明该组合中光谱之间最大的线性拟合偏差仅为0.184%,这已经是一个非常小的数值,说明4个光谱的组合已经存在冗余。图5给出了表2中选取3条光谱和4条光谱时的谱线强度分布图,其中图5(a)为3个光谱的线强度分布图,图5(b)为4个光谱时的线强度分布图。采用光谱1,12和15对光谱3做线性拟合,回归方程为如图5(b)中虚线所示。对比可见回归方程的计算结果与 $S_3(T)$ 的分布几乎重合。图5(b)下半部分为回归方程的计算结果与 $S_3(T)$ 的相对偏差,最大偏差不超过0.8%。从图5(a)中可看出光谱数量为3时,光谱8的拟合存在偏差大于5%以上的点,整体的偏差较光谱数量为4的情况相比增大了约10倍。从测量有效性、成本和时间分辨率要求分析,在700~1600K内,选择光谱编号1,12和15,3条光谱的测量是足够的。

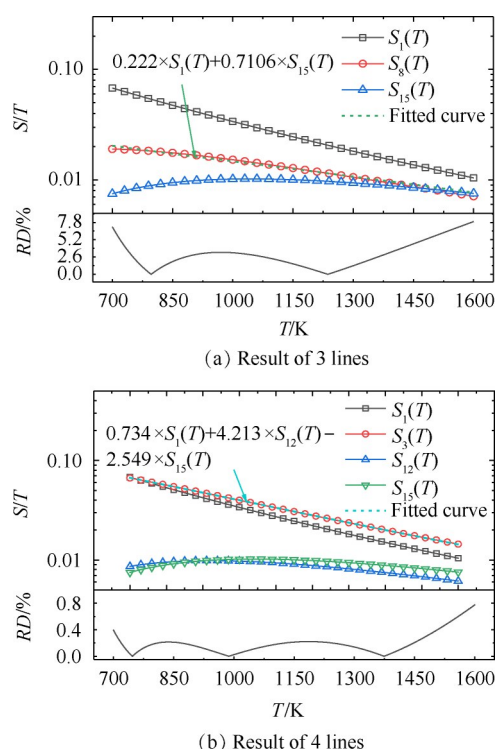


Fig. 5 Linear fitting results of linestrength (RD is relative deviation)

4.2 光谱数量对重建结果的影响

下面通过重建实验分析合适的光谱数量。用表1中光谱数量为2~10光谱组合对图3中的流场进行重建,重建算法采用模拟退火算法。重建误差用下面的公式计算

$$e_T = \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N |T_{m,n}^{rec} - T_{m,n}^{real}|}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N T_{m,n}^{real}} \quad (18)$$

式中上标“rec”表示重建结果,上标“real”表示真实的流场分布, m 和 n 分别表示网格的行数和列数,网格离散度为 $M \times N$ 。

图6为不同光谱数量下的重建结果,每个光谱组合重复10次实验,记录平均结果。从图中可看出光谱数量为2时重建误差较大,且结果不稳定;光谱增加到3个时重建误差减小,继续增加光谱数目对重建结果的影响不大。这一结果与图5得出的结论相一致,4条光谱的测量是存在冗余的信息,3个光谱能够实现重建。

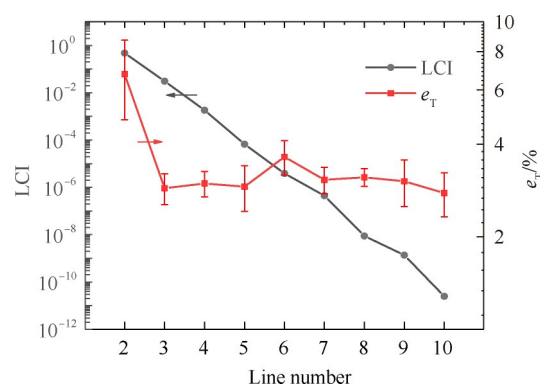


Fig. 6 Reconstruction results with different lines

这里对方程数量与未知数个数的关系及解的唯一性进行说明。采用3个光谱重建时方程数量是69个,而未知数有224个,方程数量少于未知数个数。而多光谱重建能够稳定输出结果原因有两点:(1)重建中增加了平滑正则化函数,相当于对未知数进行了约束。(2)模拟退火算法给出的是一个接近真实解的近似解,输出结果存在随机性。因此,多光谱重建的结果并不唯一,由于平滑正则化函数约束了解的取值,所以算法能够稳定输出一个靠近真实解的近似解。

下面通过调整公式(8)中正则化参数 γ_T ,改变正则化函数的影响,分析在不同的正则化参数下光谱数量与重建结果的关系。图7为实验结果,从中可看出随着 γ_T 的减小,平滑正则化函数的约束减小,重建

误差增大,光谱数量的变化对重建误差没有明显的影响,与图6的实验结论一致。

下面分析 LCI 与重建结果的关系。用表 1 给出的候选光谱集,任意 3 条光谱的组合,数量共有 455 个,利用这些光谱组合重建温度流场,并计算所有组合的 LCI,计算结果如图 8 所示。

图 8(a) 为 LCI 与重建误差的关系图,每个红点表示一个光谱组合的重建结果,图 8(b) 为图 8(a) 的统计结果。从图 8 中可看出,在选择相同光谱数量(图 8

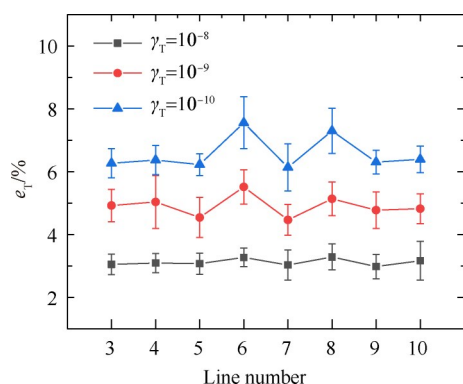
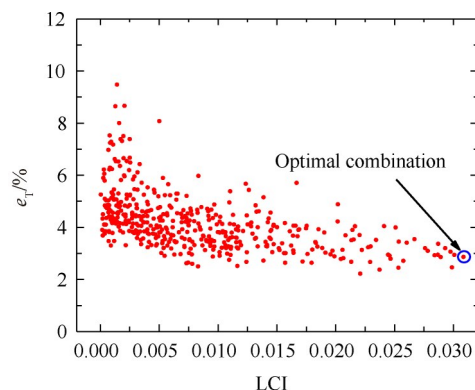
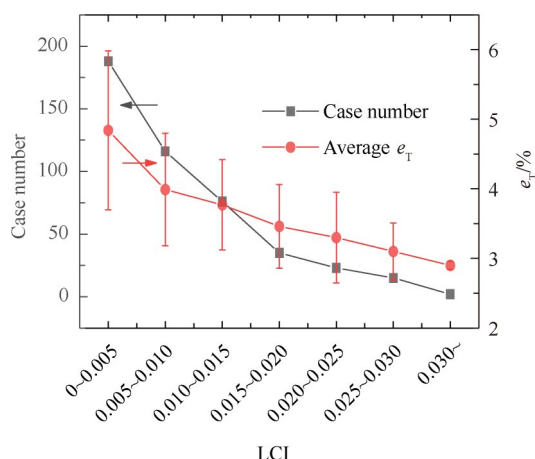


Fig. 7 Reconstruction results with different lines and regularization parameters



(a) Relationship between LCI and e_r

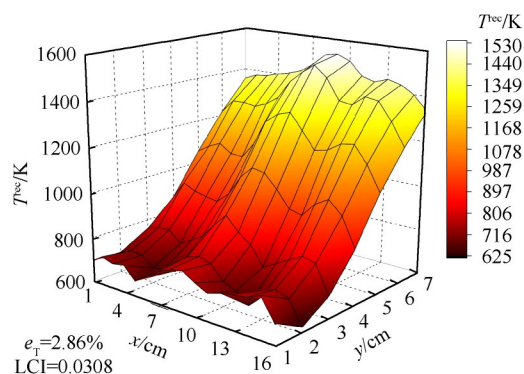


(b) Statistical results of (a)

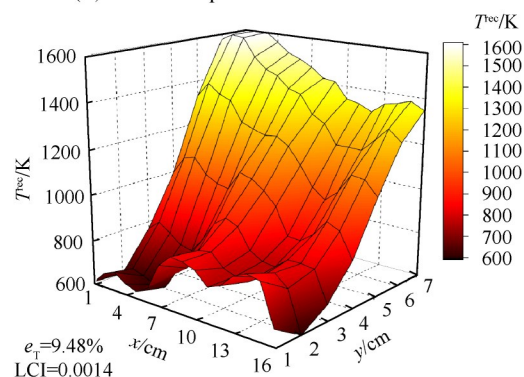
Fig. 8 LCI and e_r results for all 3-lines-combinations

为 3 条光谱)时,随着 LCI 增加,平均重建误差减小,标准差减小,因为 LCI 越大,光谱的相关性越小,选择这样的光谱组合重建误差越小、稳定性越高。

图 9 给出了基于 LCI 法选出的最优光谱组合与非最优光谱组合的重建结果,其中图 9(a) 为最优光谱组合的重建结果,LCI 值为 0.0308,重建误差为 2.86%;图 9(b) 为非最优光谱组合 {5, 14, 15} 的重建结果,LCI 值为 0.0014,重建误差为 9.48%。



(a) Result of optimal line combination



(b) Result of non-optimal lines

Fig. 9 Reconstructed temperature distribution by optimal line combination based on LCI method and non-optimal lines

4.3 噪声对光谱数量选择的影响

在吸收面积中加入 0.2%~25.6% 的高斯白噪声,光谱数量为 3, 6, 10, 15, 光谱组合为表 1 中对应的结果,每个组合重复 10 次实验,取平均结果。图 10 为实验结果,可看出在噪声水平较低时,光谱数量对重建结果的影响较低;在噪声水平大于 5% 时,光谱数量对重建结果的影响增大,随着光谱数目的增加,重建误差逐渐减小,即光谱数量越多,抗噪声能力越强。

从图 10 的实验中可知,在噪声环境下,光谱数量越多,对噪声的抑制作用越好,因此重建误差越小。但是这并不意味着更多光谱带来了更多的有效信息,而是因为多次测量抵消了噪声的影响。基于这

一点考虑,只要能够抑制噪声,就可以提高重建精度,因为多次测量一个光谱也能起到抑制噪声的作用。在一次实验中3条光谱多次测量,将所有的测量结果统一作为一次测量,模拟“光谱增加”。按照这一方案分别进行2次、3次、5次的重复测量,分别模拟“6个光谱”、“9个光谱”和“15个光谱的测量”,对比光谱数量为6,10,15的重建结果。图11为实验结果,每个实验重复10次,取平均结果。从图11中可看出,重复测量方案的效果非常明显,2次重复测量的结果甚至优于15个光谱的测量结果。因此,在实际测量时只需采用3个光谱,通过重复测量的方法即可得到较好的重建结果。需要指出的是,图11的实验中重复测量方案效果显著的原因是加入的噪声是高斯白噪声,重复测量是抑制这种噪声的最佳方式,实际的测量噪声更为复杂,抑制作用将没有图11中明显。

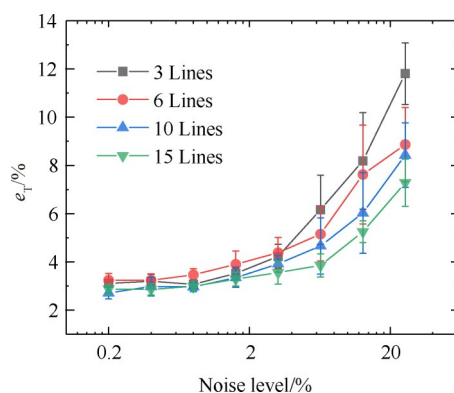


Fig. 10 Reconstruction results for different combination lines in different noise level

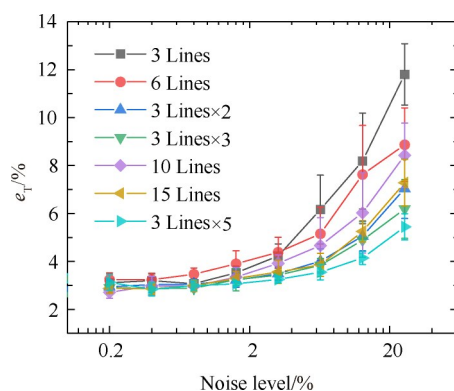


Fig. 11 Reconstruction comparisons between repeat-measurement strategy and normal strategy

5 结论

本文提出了一种基于光谱线性相关性指数的光谱组合选取方法,用于优化多光谱重建,通过数值仿真的方法验证了方法的可行性与可靠性,分析了光

谱数量对重建结果的影响,得出的主要结论如下:

(1)光谱线强度能够表征光谱测量的有效性,通过线强度向量的线性相关指数(LCI)可以评价光谱组合的有效性。在相同数量的光谱组合中LCI越大的光谱组合重建结果更稳定,重建误差更小。

(2)通过LCI可以判断光谱组合中光谱数量是否冗余。当光谱组合的LCI小于0.01时,该组合存在光谱冗余。保证测量有效性的同时光谱数量最少的光谱组合为LCI不小于0.01的最优光谱组合。

(3)测量存在噪声时,光谱数量越多重建结果越好。这是因为更多的光谱测量抑制了噪声影响,并非提供了更多有效信息。通过重复测量的方法抑制噪声影响,可以用最少光谱数量实现更多光谱的测量效果。

本文提出的光谱选择方法不仅可以找出不同光谱数量下的最优光谱组合,还可以确定最少光谱数量。通过减少测量光谱可提高测量系统的时间分辨率,加强可靠性并减少成本。

致谢:感谢国家自然科学基金和北京市自然科学基金的资助。

参考文献

- [1] Cai W, Kaminski C F. Tomographic Absorption Spectroscopy for the Study of Gas Dynamics and Reactive Flows [J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2017, 59: 1-31.
- [2] Wang Z, Fu P, Chao X. Laser Absorption Sensing Systems: Challenges, Modeling, and Design Optimization [J]. *Applied Sciences*, 2019, 9(13).
- [3] Goldenstein C S, Spearrin R M, Jeffries J B, et al. Infrared Laser-Absorption Sensing for Combustion Gases [J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2017, 60: 132-176.
- [4] Liu C, Xu L. Laser Absorption Spectroscopy for Combustion Diagnosis in Reactive Flows: A Review [J]. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2019, 54(1): 1-44.
- [5] Jackson K, Gruber M, Buccellato S. HIFiRE Flight 2 Project Overview and Status Update 2011 [C]. *San Francisco: 17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 2011.
- [6] Song J, Hong Y, Xin M, et al. Tomography System for Measurement of Gas Properties in Combustion Flow Field [J]. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2017, 30(5): 1697-1707.
- [7] Ma L, Cai W. Numerical Investigation of Hyperspectral Tomography for Simultaneous Temperature and Concentration Imaging [J]. *Applied Optics*, 2008, 47(21):

- 3751–3959.
- [8] Yu T, Cai W. Benchmark Evaluation of Inversion Algorithms for Tomographic Absorption Spectroscopy[J]. *Applied Optics*, 2017, 56(8): 2183–2194.
- [9] Yu T, Cai W, Liu Y. Rapid Tomographic Reconstruction Base on Machine Learning for Time-Resolved Combustion Diagnostics[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2018, 89(4).
- [10] Hong Y, Song J, Wang G, et al. Optimal Beam Arrangement Design for Two-Dimensional Temperature and Concentration Reconstruction Using ASA and SQP Algorithms [J]. *Optik*, 2015, 126(2): 292–296.
- [11] Yu T, Tian B, Cai W. Development of a Beam Optimization Method for Absorption-Based Tomography [J]. *Optics Express*, 2017, 25(6): 5982–5999.
- [12] Ma L, Li X, Cai W, et al. Selection of Multiple Optimal Absorption Transitions for Nonuniform Temperature Sensing[J]. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2010, 64(11): 1273–1282.
- [13] Qu Q, Cao Z, Xu L, et al. Optimal Selection of Spectral Lines for Multispectral Absorption Tomography [J]. *Applied Physics B*, 2018, 124(9).
- [14] Song J, Hong Y, Wang G, et al. Algebraic Tomographic Reconstruction of Two-Dimensional Gas Temperature Based on Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy [J]. *Applied Physics B*, 2013, 112(4): 529–537.
- [15] Liu C, Xu L, Chen J, et al. Development of a Fan-Beam TDLAS-Based Tomographic Sensor for Rapid Imaging of Temperature and Gas Concentration [J]. *Optics Express*, 2015, 23(17): 22494–22511.
- [16] Cai W, Ma L. Hyperspectral Tomography Based on Proper Orthogonal Decomposition as Motivated by Imaging Diagnostics of Unsteady Reactive Flows [J]. *Applied Optics*, 2010, 49(4): 601–610.
- [17] Cai W, Ewing D J, Ma L. Application of Simulated Annealing for Multispectral Tomography [J]. *Computer Physics Communications*, 2008, 179(4): 250–255.
- [18] 宋俊玲, 洪延姬, 王广宇, 等. 基于激光吸收光谱技术的超声速气流参数测量[J]. *红外与激光工程*, 2014, 43(11): 3510–3515.
- [19] Zhou X, Liu X, Jeffries J B, et al. Development of a Sensor for Temperature and Water Concentration in Combustion Gases Using a Single Tunable Diode Laser [J]. *Measurement Science and Technology*, 2003, 14(8).
- [20] Zhou X, Liu X, Jeffries J B, et al. Selection of NIR H₂O Absorption Transitions for in-Cylinder Measurement of Temperature in IC Engines [J]. *Measurement Science and Technology*, 2005, 16(12).
- [21] Gordon I E, Rothman L S, Hill C, et al. The HITRAN2016 Molecular Spectroscopic Database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2017, 203: 3–69.

(编辑:张 贺)