

立方腔平均反射光程的研究

刘高佑^{1,2}, 安 宁¹, 韩兴伟¹, 董 雪¹, 马 磊¹, 范存波¹, 刘承志¹

(1. 中国科学院国家天文台 长春人造卫星观测站, 吉林 长春 130117;
2. 中国科学院大学, 北京 100049)

摘 要: 利用有限元光腔表面分割法对立方腔的平均反射光程 (Average Reflex Optical Path Length, L_{ave}) 进行了数值模拟, 给出了 L_{ave} 与腔长的线性关系式, 并通过 TDLAS 实验得到了具有不同腔长的立方腔 L_{ave} 的实验值。研究表明, 立方腔的 L_{ave} 随着腔长的增加而线性增大。与之前报道的理论结果相比, 采用有限元光腔表面分割法得到的 L_{ave} 模拟值与实验值更为接近, 误差率仅在 2.5% 以内。立方腔平均反射光程模拟值与腔长的关系可以作为确定腔长的依据, 提高了基于立方腔的 TDLAS 气体测量系统的反演精度。

关键词: L_{ave} ; 有限元光腔表面分割法; TDLAS; 数值模拟

中图分类号: O433 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201645.1118003

Study on average reflex optical path length of cubic cavity

Liu Gaoyou^{1,2}, An Ning¹, Han Xingwei¹, Dong Xue¹, Ma Lei¹, Fan Cunbo¹, Liu Chengzhi¹

(1. Changchun Observatory, National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130117, China;
2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: A new method of the finite element cavity surface segmentation was presented to simulate the propagation of light in the cubic cavity, and the linear formula between the average reflex optical path length (L_{ave}) and cavity length of closed cubic cavity was calculated with MATLAB. At the same time, the L_{ave} of cubic cavities with different cavity lengths were obtained by Tunable Diode L_{ave} Absorption Spectroscopy (TDLAS) technique. Results show that the L_{ave} will increase linearly with the increase of cavity length. Compared with the previous theoretical values, the experimental values have a better agreement with the simulated values of the finite element cavity surface segmentation and the relative errors between simulated values are no more than 2.5%. The linear formula between the L_{ave} and cavity length can be used to decide the cavity length and enhances the inversion accuracy of TDLAS gas measurement system based on cubic cavity.

Key words: L_{ave} ; finite element cavity surface segmentation; TDLAS; numerical simulation

收稿日期: 2016-03-05; 修订日期: 2016-04-08

基金项目: 国家自然科学基金天文联合基金(U1431121); 国家自然科学基金青年基金(61605220, 11303063)

作者简介: 刘高佑(1991-), 男, 硕士生, 主要从事光学及应用方面的研究。Email: liugaoyou@126.com

导师简介: 安宁(1988-), 女, 助理研究员, 博士, 主要从事光电子技术及应用方面的研究。Email: anning4252@126.com

0 引言

随着现代化社会的迅猛发展,大气中的 CO、H₂S、SO₂、NO 等有害气体日益增多,如何对这些痕量气体成分做出准确的定量分析对保护环境和人类生产生活安全具有十分重要的意义^[1-3]。可调谐二极管激光吸收光谱 (Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy, TDLAS) 技术作为痕量气体检测技术的发展方向和技术主流,具有选择性好、灵敏度高、抗干扰性强、快速响应、无需采样、可实现多组分同时测量等一系列优点,已广泛地应用于大气环境、工业生产、医疗卫生等诸多领域^[4-7]。

TDLAS 技术气体检测灵敏度与光腔的平均反射光程 (Average Reflex Optical Path Length, L_{ave}) 有着密切的关系^[8]。平均反射光程,即光线在内壁涂有高反射率 ($R \approx 100\%$) 涂料的封闭光腔内任意两个反射点之间传播距离的平均值。相比于积分球腔,有关立方腔 L_{ave} 的研究鲜有报道,且现有的理论研究数学推导繁复、计算耗时,与实验值的误差率较大^[9-10],不利于高灵敏度的立方腔腔长的确定。

文中从光线在立方腔中的传播特性角度出发,利用有限元光腔表面分割法对立方腔的 L_{ave} 进行了数值模拟,讨论了 L_{ave} 与腔长之间的关系,并给出了立方腔的 L_{ave} 与腔长的计算公式。同时,为了验证上述计算关系,开展了 TDLAS 实验,得到了具有不同腔长立方腔的 L_{ave} 实验值。这为高灵敏度的立方腔腔长的确定提供了一种新的思路和方法。

1 平均反射光程的数值模拟

由 Beer-Lambert 吸收定律可知, TDLAS 系统检测气体浓度变化的灵敏度 η 为^[8,11]:

$$\eta = \frac{\Delta I}{\Delta C} = \left\{ g S P I_0 \left[\frac{\rho}{1 - \rho(1 - f_0)} L_{ave} \right] \right\} \cdot \exp \left\{ -g S P C \left[\frac{\rho}{1 - \rho(1 - f_0)} L_{ave} \right] \right\} \quad (1)$$

式中: I_0 为入射光强; g 为吸收谱线线型函数; S 为吸收谱线的谱线强度; P 为总体压强; C 为气体浓度; ρ 为涂层漫反射率; f_0 为固定开口比(进、出光孔和六个面板之间的缝隙)。

由公式(1)可知,系统的灵敏度与 L_{ave} 成正比关系,研究光腔的 L_{ave} 对提高基于立方腔的 TDLAS 气

体测量系统的反演精度具有重要意义。为了得到较为精准的立方腔 L_{ave} 与边长的计算关系,提出了有限元光腔表面分割法,即将涂有高反射率 ($R \approx 100\%$) 涂料的立方腔内表面分割成很多个小面元,当分割数足够大时每个小面元可视为单个反射点,两个反射点之间的光程大小可以用对应的空间坐标中的线段长度来等价代替 ($n_{\text{空气折射率}}=1$),所有反射点对应的长度总和 $L_{\text{总}}$ 除以线段总个数 $N_{\text{总}}$ 即为平均反射光程 L_{ave} , 即:

$$L_{ave} = L_{\text{总}} / N_{\text{总}} \quad (2)$$

具体步骤如下: 首先将立方腔(结构如图 1 所示)的每个面分割成 $N \times N$ 个小面元, 假定光线从 $ABGH$ 面射出, 与其有光线传播的面包括 $ADEH$ 、 $ABCD$ 、 $BCFG$ 、 $EFGH$ 和 $CDEF$ 。设 $ABGH$ 面上一点 $P(p, 0, q)$, $ADEH$ 面上一点 $Q_1(0, m, n)$, $CDEF$ 面上一点 $Q_2(r, a, s)$, 其中, a 为立方腔的腔长, p, q, m, n, r, s 都是变量。光子由 $ABGH$ 面反射至对立面 $CDEF$ 面的概率为 α , 则反射至其他四个面的概率为 $1 - \alpha$ 。则对 $ABGH$ 面来说 α 满足:

$$\alpha = \bar{\Omega} / 2\pi \quad (3)$$

式中: 2π 为整个立方腔对 $ABGH$ 面的立体角; $\bar{\Omega}$ 为 $ABGH$ 面上所有点到 $CDEF$ 面的立体角的平均值。

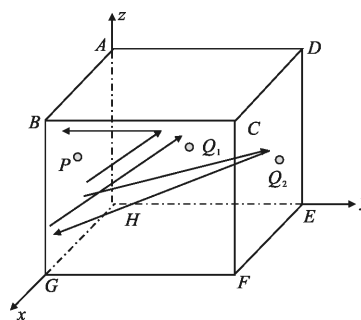


图 1 立方腔结构图

Fig.1 Structure of cubic cavity

设 O 为 $ABGH$ 面的中心点,如图 2(a)所示。以 O 为球心、 OC 为半径的球被 $CDEF$ 面横切形成表面积 $S = 12Aa^2$ 的曲面。其中, A 为常数且 $A = \pi/4 - \arcsin(\sqrt{3}/3)$ 。由几何知识可知, $ABGH$ 面上任意一点 $P(p, 0, q)$ 到 $CDEF$ 面的立体角与 P 点到该曲面的立体角的大小相等,如图 2(b)所示。

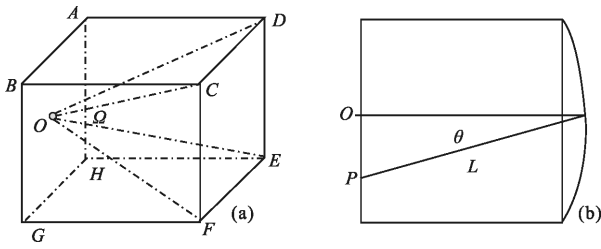


图 2 对立面立体角(a)和曲面立体角(b)

Fig.2 Solid angle between opposite sides (a) and solid angle of surface(b)

那么, $ABGH$ 面上任意一点 P 到该曲面的立体角 Ω 为:

$$\Omega = \frac{S}{L^2} \cos\theta = \frac{S}{L^2} \frac{\frac{\sqrt{6}}{2} a}{L} = \frac{6\sqrt{6} A a^3}{\left[\left(p - \frac{a}{2}\right)^2 + \left(q - \frac{a}{2}\right)^2 + \frac{3}{2} a^2 \right]^{3/2}} \quad (4)$$

式中: p, q 的取值为 $\frac{a}{N}, 2\frac{a}{N}, 3\frac{a}{N}, \dots, (N-1)\frac{a}{N}$ (不考虑边界上的点,下同),代入公式(4)得到

$$\Omega = \frac{6\sqrt{6} A}{\left[\left(p^* - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(q^* - \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{3}{2} \right]^{3/2}} \quad (5)$$

式中: p^*, q^* 的取值为 $\frac{1}{N}, 2\frac{1}{N}, 3\frac{1}{N}, \dots, (N-1)\frac{1}{N}$ 。由公式(5)可知, Ω 与腔长 a 无关, 只与 N 有关, 并且满足:

$$\bar{\Omega} = \left[\sum_{p^*=1/N}^{(N-1)/N} \sum_{q^*=1/N}^{(N-1)/N} \Omega \right] / (N-1)^2 \quad (6)$$

为了讨论 $\bar{\Omega}$ 与 N 的关系, 利用 MATLAB 对公式(6)进行了数值计算。结果表明, 随着 N 逐渐增大, $\bar{\Omega}$ 趋于一个定值, 当 $N \geq 6000$ 后, 计算得到 $ABGH$ 面上所有点到 $CDEF$ 面的立体角的平均值 $\bar{\Omega} = 1.1693 \text{ rad}$ 保持不变, $\alpha = \bar{\Omega} / 2\pi = 0.1861$ 。由于 $ADEH, ABCD, BCFG, EFGH$ 四个面对 $ABGH$ 面是等价的, 可将这四个面作为一个整体来计算, 因此立方腔的 L_{ave} 表达式为:

$$L_{\text{ave}} = L_{\text{总}} / N_{\text{总}} = \frac{4 \times (1 - 0.1861)x + 0.1861y}{5(N-1)^4} \quad (7)$$

式中: $L_{\text{总}} = 4 \times (1 - 0.1861)x + 0.1861y$, x 为线段 PQ_1 的总和, y 为线段 PQ_2 的总和, 每两个面之间(不考虑边

界上的点)的线段个数为 $(N-1)^4$, 对于 $ABGH$ 面来说 $N_{\text{总}} = 5(N-1)^4$ 。

下面确定分割数 N 的最优值。以 $a = 12 \text{ cm}$ 为例, 讨论了 N 与模拟值 L_{ave} 之间的关系, 结果如图 3 所示。从图中可知, 当 N 逐渐增大时, L_{ave} 逐渐减小; 当 $N \geq 700$ 后, L_{ave} 保持不变。为了提高模拟计算的效率, 将 N 设为 700 进行了后续的模拟计算。

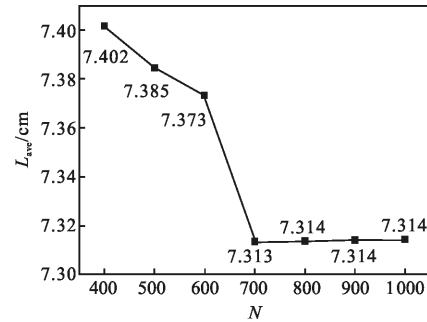


图 3 12 cm 立方腔在不同 N 下的 L_{ave} 模拟值

Fig.3 Simulation results of L_{ave} with different N when cubic cavity length is 12 cm

当 $N = 700$ 时, 通过 MATLAB 计算得到了具有不同腔长 a 的立方腔的 L_{ave} 模拟值, 对模拟值进行线性拟合后得到立方腔的 L_{ave} 与腔长的计算关系为:

$$L_{\text{ave}} = 0.614a - 0.044 \quad (8)$$

结果如图 4 所示。

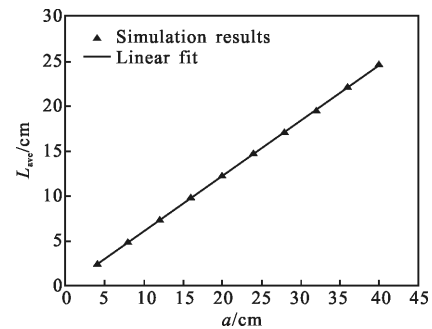


图 4 $N = 700$ 情况下不同腔长立方腔的 L_{ave} 的模拟结果和拟合直线

Fig.4 Simulation results and linear fit of L_{ave} under the condition of $N = 700$ with different cubic cavity lengths

从图 4 可知, 数据点和拟合直线吻合的很好, 并且随着腔长的增大, L_{ave} 线性增大。

2 平均反射光程的 TDLAS 实验

2.1 实验原理

为了验证立方腔平均反射光程的模拟结果, 并

得到 L_{ave} 与腔长的计算关系,开展了 TDLAS 实验研究。对于内表面涂有高反射率的立方腔, L_{ave} 满足:

$$L_{ave} = \left[\frac{1 - \rho(1 - f_0)}{\rho} \right] EOPL \quad (9)$$

式中: $EOPL$ 为立方腔的有效光程^[11]。

研究表明, L_{ave} 的实验值无法从实验中直接测得^[11]。因此可首先通过 TDLAS 实验得到 $EOPL$ 与光学参量 OP 之间的关系,再确定不同腔长的 $EOPL$ 实验值,进而间接地得到相应的 L_{ave} 实验值。其中,光学参量 OP 为氧气对 760 nm 激光的吸收值。

2.2 实验内容

为了确定 $EOPL$ 与 OP 之间的关系,利用空气中氧气的吸收定标实验测量了不同距离 L 下对应氧气的直接吸收信号,实验装置如图 5 所示。空气中激光的 $EOPL$ 为光源到探测器之间的距离 L ,改变距离 L 就可以得到不同 $EOPL$ 对应的 OP 值。由于空气中的氧气对光线的吸收峰在 760 nm 处,实验选用了发射波长为 760 nm 的可调谐二极管激光源。在电流控制器上加载一个频率为 10 Hz、振幅为 120 mV 的锯齿波后,再将其加载到激光器上,使得激光波长扫描过氧气的吸收峰位置,温度控制器保持温度在 25 °C 左右。

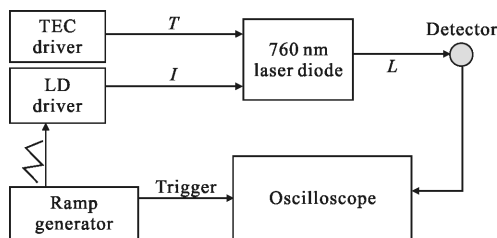


图 5 空气中氧气的吸收定标实验装置图

Fig.5 Experimental device of absorption spectrum of O₂ in air

图 6 为实验测得的氧气直接吸收信号。透射光强为 I ,对吸收信号中直线部分进行线性拟合得到拟合光强 I_0 。根据 Beer-Lambert 定律,用 I 除以 I_0 再取负对数,就得到内插图所示的氧气直接吸收面积图像,对其积分处理就可以得到图中氧气的吸收面积大小,即氧气吸收值,将其定义为光学参量 OP 。在 $EOPL$ 为 70~120 cm 范围内每隔 5 cm 测量一个数据点得到 OP 值,多次实验取平均值后对数据进行拟合得到 $EOPL$ 与光学参量 OP 的关系式为:

$$EOPL = (OP + 2.470) / 0.044 \quad (10)$$

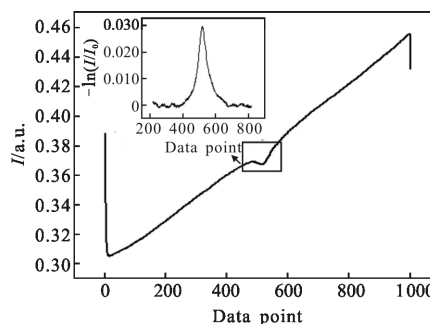


图 6 氧气对 760 nm 激光的吸收曲线和对数曲线

Fig.6 Curve of absorption spectrum of O₂ with 760 nm laser and logarithm curve

接着,在图 5 中加入待测的腔长为 12 cm 的立方腔,实验装置如图 7 所示。多次测量取平均得到了腔长为 12 cm 的立方腔的 OP 值。其中, $a=12$ cm, $\rho=0.95$, $f_0=0.005$,代入公式(9)和(10)得到 L_{ave} 的实验值为 7.491 cm。

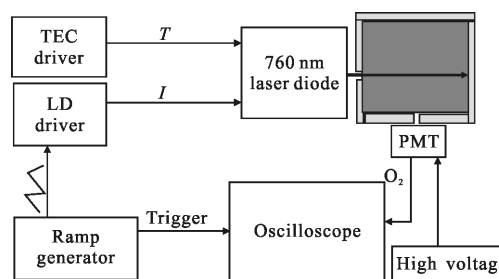


图 7 测量立方腔的有效光程实验装置图

Fig.7 Experimental device of measuring EOPL of cubic cavity

由之前报道的理论结果可知,12 cm 立方腔的 L_{ave} 理论值为 8 cm。与之相比,由有限元光腔表面分割法得到的模拟值为 7.313 cm。 L_{ave} 的实验值与理论值的误差率为 6.363%,与模拟值的误差率仅为 2.434%。

基于以上方法,得到了其他不同腔长立方腔的 L_{ave} 的大小,结果如表 1 所示。其中, T 为理论值, S 为模拟值, E 为实验值, $W_1(W_1=100 \cdot |E-T|/T)$ 和 $W_2(W_2=100 \cdot |E-S|/S)$ 为误差率。

表 1 不同腔长立方腔的 L_{ave} 的结果

Tab.1 Results of L_{ave} with different a

a/cm	T^{10}/cm	S/cm	E/cm	W_1	W_2
5	3.333	3.071	3.128	6.151%	1.856%
8	5.333	4.876	4.989	6.450%	2.317%
12	8.000	7.313	7.491	6.363%	2.434%
20	13.333	12.275	12.523	6.075%	2.020%

由表 1 可知,对于不同腔长的立方腔,其 L_{ave} 模拟值的误差率 W_2 在 2.5% 以内,远小于理论值的误差率 W_1 ,更符合实验值。表明了有限元光腔表面分割法优于现有的理论分析方法,可更合理地解释 TDLAS 的实验结果。

3 结论

文中从光线在立方腔中的传播特性角度出发,利用有限元光腔表面分割法模拟了光线在立方腔内的传播过程,并通过 MATLAB 对立方腔的 L_{ave} 进行了数值模拟,给出了立方腔的 L_{ave} 与腔长的计算关系,得到了具有不同腔长立方腔的 L_{ave} 模拟值。同时,通过 TDLAS 实验测得了 L_{ave} 的实验值。结果表明,对于腔长为 12 cm 的立方腔来说,模拟值为 7.313 cm ($N=700$),理论值为 8 cm,实验值为 7.491 cm。模拟值的误差率仅为 2.434%,远小于理论值的误差率 6.363%。对于其他腔长的立方腔,模拟值的误差率在 2.5% 以内,更符合实验值。研究结果表明有限元光腔表面分割法优于现有的理论计算方法,其模拟结果可更合理地解释 TDLAS 的实验结果,这为立方腔 L_{ave} 的研究及立方腔腔长的确定提供了新的研究方法思路,对提高基于立方腔的 TDLAS 气体测量系统的反演精度具有重要意义。

参考文献:

- [1] Sun Yuantao, Zhang Hongtian. Real-time monitoring for the concentrations of SO_2 and H_2S mixed gas by ultraviolet absorption spectroscopy detection technique [J]. *Chin J Lumin*, 2015, 36(3): 366–369. (in Chinese)
孙远涛,张洪田.基于紫外吸收光谱技术的混合气体 SO_2 和 H_2S 浓度的实时监测[J].*发光学报*, 2015, 36(3): 366–369.
- [2] An Ning, Liu Guojun, Li Zhanguo, et al. $2\ \mu m$ InGaAsSb–AlGaAsSb multi-quantum well laser diode with electron stopper layer [J]. *Chin J Lumin*, 2014, 35(10): 1205–1209. (in Chinese)
安宁,刘国军,李占国,等.具有电子阻挡层的 $2\ \mu m$ InGaAsSb–AlGaAsSb 量子阱激光器 [J].*发光学报*, 2014, 35(10): 1205–1209.
- [3] Zhang Zhirong, Xia Hua, Dong Fengzhong, et al. Simultaneous and on-line detection of multiple gas concentration with tunable diode laser absorption spectroscopy [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2013, 21(11): 2771–2777. (in Chinese)
张志荣,夏滑,董凤忠,等.利用可调谐半导体激光吸收光谱法同时在线监测多组分气体浓度 [J].*光学精密工程*, 2013, 21(11): 2771–2777.
- [4] Song Junling, Hong Yanji, Wang Guangyu, et al. Measurement of supersonic flow parameters using laser absorption spectroscopy [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, 43(11): 3510–3515. (in Chinese)
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.
- [5] Wang Hongtao, Huang Yunbiao, Huang Hong. Design of digital filter in laser gas analyzer [J]. *Chinese Optics*, 2013, 6(5): 729–735. (in Chinese)
王洪涛,黄云彪,黄鸿.激光气体分析仪中数字滤波器的设计 [J].*中国光学*, 2013, 6(5): 729–735.
- [6] Ding Zhiquan, Bao Jilong, Zhao Hongxia, et al. Acetylene gas concentration online monitoring using TDLAS [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(4): 1015–1019. (in Chinese)
丁志群,鲍吉龙,赵洪霞,等.乙炔气体浓度的 TDLAS 在线监测 [J].*红外与激光工程*, 2013, 42(4): 1015–1019.
- [7] Ren Libing, Yang Honglei, Wei Haoyun, et al. Design for multi-gases analyzer based on FTIR principle [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(12): 3175–3179. (in Chinese)
任利兵,杨宏雷,尉昊赞,等.采用 FTIR 原理的多组分气体分析仪研制 [J].*红外与激光工程*, 2013, 42(12): 3175–3179.
- [8] Xiao Bing, Liang Yinglin, Ye Yiru, et al. Improving measurement system's sensitivity of gas dynamic concentrations based on TDLAS [J]. *Instrument Technique and Sensor*, 2009(5): 99–102. (in Chinese)
肖兵,梁瑛琳,叶一如,等.提高基于 TDLAS 的废气动态浓度测量系统分辨率与灵敏度的方法 [J].*仪表技术与传感器*, 2009(5): 99–102.
- [9] Tranchart S, Bachir I H, Destombes J L. Sensitive trace gas detection with near infrared laser diodes and an integrating sphere [J]. *Appl Opt*, 1996, 35(36): 7070–7074.
- [10] Fry E S, Musser J, Kattawar G, et al. Integrating cavities: temporal response [J]. *Appl Opt*, 2006, 45(36): 9053–9065.
- [11] Yu Jia, Zheng Fu, Gao Qiang, et al. Effective optical path length investigation for cubic diffuse cavity as gas absorption cell [J]. *Appl Phys B*, 2014, 116: 135–140.