

基于遗传算法对氨气检测中温度补偿的研究

李阳 黄怿 施援 邓传鲁 胡程勇 董艳华 张小贝 王廷云

Temperature compensation in ammonia detection based on genetic algorithm

LI Yang, HUANG Yi, SHI Yuan, DENG Chuanlu, HU Chengyong, DONG Yanhua, ZHANG Xiaobei, WANG Tingyun

引用本文:

李阳, 黄怿, 施援, 等. 基于遗传算法对氨气检测中温度补偿的研究[J]. 应用光学, 2021, 42(6): 1067–1071. DOI: 10.5768/JAO202142.0603002

LI Yang, HUANG Yi, SHI Yuan, et al. Temperature compensation in ammonia detection based on genetic algorithm[J]. Journal of Applied Optics, 2021, 42(6): 1067–1071. DOI: 10.5768/JAO202142.0603002

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.5768/JAO202142.0603002>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

气体浓度激光光谱检测温度影响修正研究

Study on temperature influence correction of gas concentration laser spectrum detection

应用光学. 2020, 41(2): 348–353 <https://doi.org/10.5768/JAO202041.0203002>

结合环境参数修正的高温气体光谱检测系统设计

Design of high temperature gas spectrum detection system combined with environmental parameters modification

应用光学. 2018, 39(6): 809–814 <https://doi.org/10.5768/JAO201839.0608009>

基于中红外DFG光源的甲烷气体光谱检测方法研究

Research on methane gas spectroscopy detection method based on mid-infrared DFG laser source

应用光学. 2018, 39(5): 735–742 <https://doi.org/10.5768/JAO201839.0506001>

基于拉曼光谱的海水COD检测方法的研究

Seawater chemical oxygen demand optical detection method based on Raman spectroscopy

应用光学. 2019, 40(2): 278–283 <https://doi.org/10.5768/JAO201940.0203001>

基于改进梯度幅值的包装缺陷检测算法研究及应用

Research and application of package defects detection algorithm based on improved GM

应用光学. 2019, 40(4): 644–651 <https://doi.org/10.5768/JAO201940.0403003>

基于改进空间频率域采样的天文光干涉望远镜阵列优化

Astronomy optical interferometric telescope array optimization based on modified UV sampling method

应用光学. 2017, 38(4): 555–561 <https://doi.org/10.5768/JAO201738.0401007>



关注微信公众号，获得更多资讯信息

文章编号: 1002-2082 (2021) 06-1067-05

基于遗传算法对氨气检测中温度补偿的研究

李 阳, 黄 恽, 施 援, 邓传鲁, 胡程勇, 董艳华, 张小贝, 王廷云

(上海大学特种光纤与光接入网重点实验室, 上海 200444)

摘 要: 氨气是大气中常见的污染气体之一, 其浓度检测结果易受到环境温度的影响, 为准确检测氨气浓度, 必须对温度的影响进行修正。该文将遗传算法与差分吸收光谱技术相结合, 对氨气检测过程中温度的影响进行研究。基于紫外差分吸收光谱技术, 搭建了 296 K~328 K 温度下的氨气检测系统, 采用遗传算法对氨气检测结果进行温度补偿。结果表明, 通过实验获得的温度补偿模型可有效消除温度对氨气检测的非线性影响, 从而提高检测精度。在 328 K 温度下, 44×10^{-6} 氨气检测结果的误差降低了 26.97%, 随着温度变化, 线性相关系数均在 0.998 16 以上; 6×10^{-6} 氨气在温度补偿前后系统的检测限分别为 0.198×10^{-6} 和 0.278×10^{-6} 。

关键词: 遗传算法; 紫外差分吸收光谱技术; 氨气检测; 温度补偿; 检测限

中图分类号: TN206

文献标志码: A

DOI: [10.5768/JAO202142.0603002](https://doi.org/10.5768/JAO202142.0603002)

Temperature compensation in ammonia detection based on genetic algorithm

LI Yang, HUANG Yi, SHI Yuan, DENG Chuanlu, HU Chengyong,
DONG Yanhua, ZHANG Xiaobei, WANG Tingyun

(Key Laboratory of Specialty Fiber Optics and Optical Access Networks,
Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Abstract: Ammonia is one of the common pollutants in the atmosphere, and the temperature has a significant impact on ammonia concentration detection results. In order to obtain the accurate concentration of ammonia, the influence of the temperature must be eliminated. The genetic algorithm was combined with differential optical absorption spectroscopy to explore the influence of temperature on ammonia concentration detection. The ammonia detection system at 296 K~328 K was developed based on ultraviolet differential optical absorption spectroscopy, and the compensated detection results were obtained by using genetic algorithm. The experimental results show that the temperature compensation model can effectively eliminate the non-linear influence of temperature on ammonia detection and improve the detection accuracy. The error of 44×10^{-6} ammonia detection results at 328 K is reduced by 26.97%. With the change of temperature, the linear correlation coefficients are above 0.998 16. For 6×10^{-6} ammonia, the detection limit of the system is 0.198×10^{-6} and 0.278×10^{-6} , respectively, before and after temperature compensation.

Key words: genetic algorithm; ultraviolet differential optical absorption spectroscopy; ammonia detection; temperature compensation; detection limit

引言

氨气是大气污染物的主要成分之一, 对其进行

在线监测是控制大气污染的重要措施^[1]。温度变化会对气体检测的准确性产生很大影响。目前已

收稿日期: 2021-05-27; 修回日期: 2021-09-02

基金项目: 国家自然科学基金 (61735009, 62027818, 61875118, 62022053)

作者简介: 李阳 (1995—), 女, 硕士研究生, 主要从事气体传感技术研究。E-mail: liyong950620@163.com

通信作者: 黄恽 (1978—), 男, 博士, 讲师, 主要从事特种光纤设计与制备、光纤传感、光纤器件技术研究。

E-mail: huangyi1008@shu.edu.cn

经有许多关于温度对气体检测影响的研究^[2-6],其中,差分吸收光谱技术(DOAS)不易受到散射、暗噪声的干扰,利用气体分子的窄带吸收特性可实现低浓度气体的精确检测^[7]。

2008年,浙江大学的周洁等人测量了308 K~397 K下氨气在紫外波段的吸收截面,结果表明在212.5 nm处吸收截面峰值的最大相对减幅为46%,且减小趋势随波长红移减弱^[8]。2012年,南京工业大学的朱靳等人研究并利用分子数密度比和对应温度的关系,拟合出温度补偿函数,对氨气检测结果进行补偿,误差在2%以内^[9]。2016年,东南大学的许康等人根据氨气的差分吸收截面峰值同温度的对应关系,拟合得到温度补偿函数,从而有效消除了氨气对一氧化氮浓度检测的影响,误差在3%以内^[10]。然而,这些研究都是基于传统DOAS展开的,并没有通过算法优化而进一步提高气体浓度检测精度。

本文将遗传算法(GA)与紫外差分吸收光谱技术(UV-DOAS)相结合,建立了296 K~328 K下氨气浓度检测系统,通过对比不同温度下氨气标准浓度与检测结果之间的关系,拟合得到温度补偿函数,并对实验检测结果进行补偿,结果表明本文提出的补偿方法可实现不同温度下氨气的准确检测。

1 基本原理

DOAS是基于Lambert-Beer定律的一种有效的气体浓度检测技术^[11],其将光谱分为包含吸收信息的快速变化部分和由瑞利散射、米氏散射和气流震颤等干扰因素引起的缓慢变化部分^[12],气体浓度可由(1)式计算得到:

$$OD'(\lambda) = \sigma'(\lambda)cL \quad (1)$$

式中: $OD'(\lambda)$ 为差分吸收光谱; $\sigma'(\lambda)$ 为差分吸收截面; c 为气体浓度; L 为光路长度。

本文将GA与DOAS相结合,采用实验得到的 $OD'(\lambda)$ 与理论计算得到的 $\sigma'(\lambda)cL$ 之间的平均绝对误差作为该算法中的目标函数,通过多次迭代计算,当目标函数值最小时,即可得到最优解^[13],目标函数如(2)式所示。

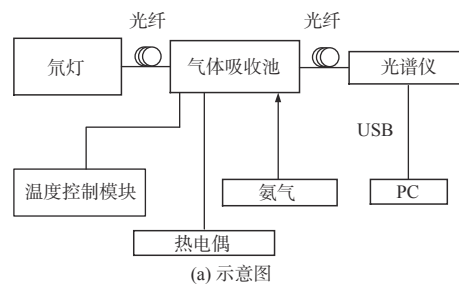
$$f(c) = \sum_{i=1}^n |OD'(\lambda_i) - \sigma'(\lambda_i)Lc|/n \quad (2)$$

式中: c 为变量,即气体浓度; $OD'(\lambda_i)$ 为某波长处实验得到的差分吸收光谱强度; $\sigma'(\lambda_i)Lc$ 为某波长处

计算得到的差分吸收光谱强度; n 为数据点数。

2 实验系统

实验系统如图1所示,功率为26 W的氙灯(DH-2000-S-DUV-TTL, Ocean Optics)输出190 nm~400 nm的紫外光,通过多模光纤(QP150-2-XSR, Ocean Optics)传输后,测得其光功率为10 μ W,经过透镜准直入射到气体吸收池(GW-1020UV-2.4M, GAINWAY)中,反射11次,实现240 cm的长光程,随后通过多模光纤(QP230-2-XSR, Ocean Optics)将信息传输到光谱仪(Maya2000 Pro, Ocean Optics),再由计算机进行解调计算。为研究温度对氨气检测的影响,在温度控制器(GW-5030P)上设定目标温度,将热电偶(80PK-1, FLUKE)放置在出气口处,温度表(53/54 II B, FLUKE)实时显示气体温度。



(a) 示意图



(b) 实物图

图1 基于UV-DOAS的氨气检测系统

Fig. 1 Experimental system for ammonia detection based on ultraviolet differential optical absorption spectroscopy

实验中的氨气由上海通辉特种气体公司提供,使用配气仪将高纯氮气与氨气混合,并采用气相色谱-质谱联用仪(GCMS-QP2020, 岛津)对氨气进行标定。由于氨气具有较强的吸附性,静置一段时间后会吸附在气体吸收池内壁上,从而影响其检测精度。因此,本文采用动态检测法,将氨气以500 mL/min的流量注入气体吸收池中进行检测。

3 结果及讨论

本文选择 195 nm~210 nm 作为浓度反演波段^[14], 采用 Sym8 小波对差分吸收光谱进行滤波, 几乎消除了高低频噪声的影响^[13]。图 2 所示为不同温度下 6×10^{-6} 氨气的差分吸收光谱, 可看到氨气吸收峰的位置相同, 但吸收峰值随温度升高而变小。

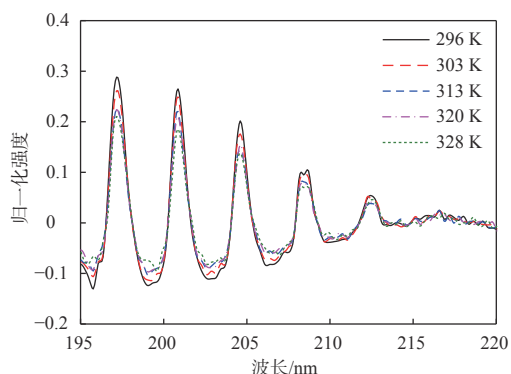


图 2 不同温度下 6×10^{-6} 氨气的差分吸收光谱

Fig. 2 Differential absorption spectrum of 6×10^{-6} ammonia under different temperatures

根据不同温度下氨气的检测结果与标准浓度之间的比值拟合得到温度补偿函数 $K(T)$, 如图 3 所示, 可发现 $K(T)$ 与温度之间近似为非线性关系, 通过指数函数拟合, 得到 $K(T)$ 关于温度的表达式 (4), 如图 3 中黑色实线所示。

$$K(T) = -1.37E_4 \times \exp(-T/29.85) + 1.62 \quad (3)$$

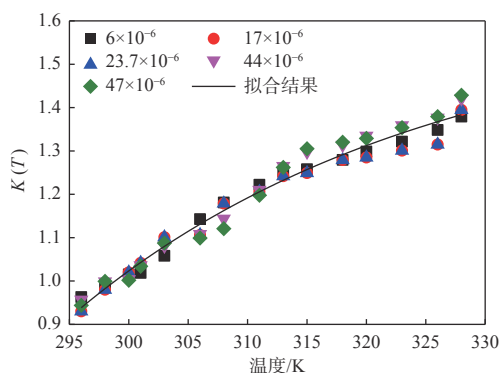
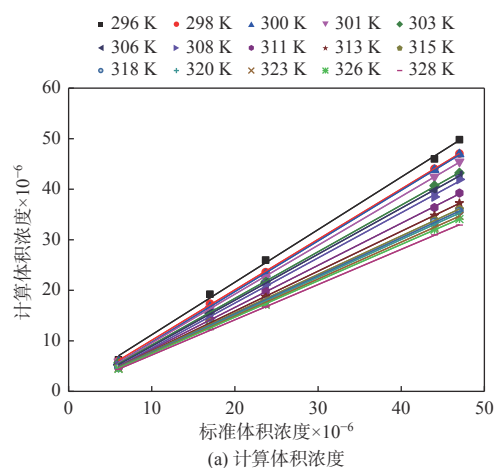


图 3 温度补偿函数与温度之间的关系

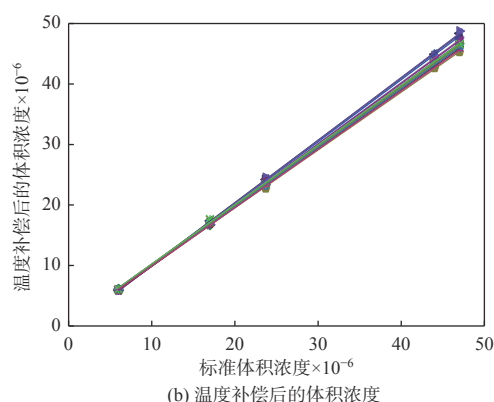
Fig. 3 Relationship between temperature compensation function and temperature

图 4(a) 显示了不同温度下采用 GA 计算得到的氨气浓度, 计算中设置群体大小为 50, 个体长度为 10, 交叉概率为 0.3, 变异概率为 0.02, 迭代次数为 2 000。图中观察得知, 误差随着温度升高而变

大, 说明温度对氨气检测精度有较大影响。使用 $K(T)$ 对氨气在 296 K~328 K 下的检测结果进行补偿, 结果如图 4(b) 所示, 所拟合直线的斜率接近于 1, 表明本文提出的补偿方法显著提高了不同温度下氨气检测的精度。



(a) 计算体积浓度



(b) 温度补偿后的体积浓度

图 4 296 K~328 K 下氨气检测结果与标准浓度之间的关系
Fig. 4 Relationship between detection results and standard concentration of ammonia at 296 K~328 K

表 1 具体给出了 296 K~328 K 下温度补偿前后的氨气浓度, 在温度 328 K 下标准浓度为 44×10^{-6} 氨气的计算结果为 30.97×10^{-6} , 检测误差达到 29.61%, 而使用 $K(T)$ 对检测结果进行补偿后, 氨气浓度计算结果为 42.84×10^{-6} , 检测误差降低为 2.64%, 有效消除了温度对氨气检测的非线性影响, 实现了不同温度下氨气的准确检测。

线性相关系数是研究变量之间线性相关程度的量^[15], 在温度 328 K 下, 温度补偿前线性相关系数为 0.999 92, 温度补偿后线性相关系数达到 0.999 97, 说明温度对线性相关系数基本没有影响, 本系统具有良好的稳定性, 可实现不同浓度氨气的准确检测。

表 1 296 K~328 K 下氨气的计算体积浓度及温度补偿后的浓度

Table 1 Calculated concentration and concentration after temperature compensation of ammonia at 296 K~328 K

温度/K	计算浓度 $\times 10^{-6}$					温度补偿后的浓度 $\times 10^{-6}$				
	6	17	23.7	44	47	6	17	23.7	44	47
296	6.23	18.28	25.98	45.98	49.79	5.88	17.16	24.39	43.16	46.73
308	5.08	14.42	21.11	38.48	41.94	5.91	16.76	24.54	44.73	48.75
318	4.69	13.29	17.95	33.49	35.60	6.06	17.16	23.18	43.25	45.97
328	4.35	12.19	16.66	30.97	32.90	6.02	16.86	23.04	42.84	45.52

本文选择 6×10^{-6} 的氨气在 328 K 下进行 10 次实验, 检测结果如图 5 所示, 发现检测结果存在一定波动, 考虑是由于气体吸收池内部温度不均造成的。图 6 给出了 20 min 内吸收池内部温度的测试情况, 温度在设定值 328 K 附近上下波动, 可知检测结果的波动性是吸收池内部温度不稳定造成的。计算得到温度补偿前系统的检测限为 198×10^{-9} , 温度补偿后系统的检测限为 278×10^{-9} , 检测限指标有一定程度增大。因此本系统可实现 10^{-9} 量级的氨气检测, 可用于大气中氨气浓度的在线监测。

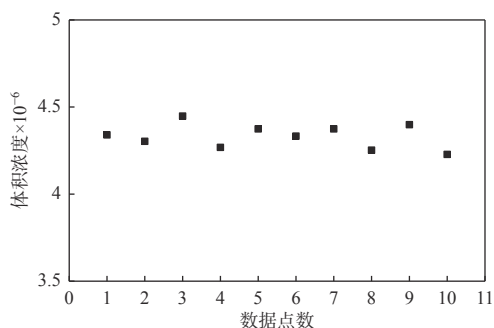
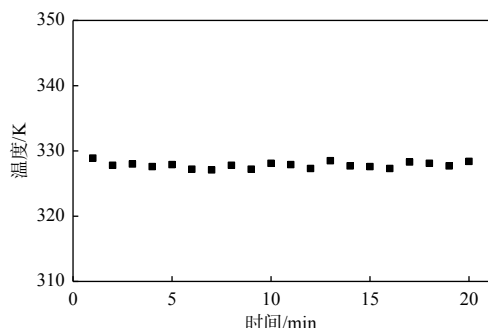
图 5 328 K 下 6×10^{-6} 氨气的多次检测结果Fig. 5 Multiple test results of 6×10^{-6} ammonia at 328 K

图 6 20 min 内气体吸收池内部温度稳定性测试结果

Fig. 6 Test results of internal temperature stability of gas-absorption cell in 20 minutes

4 结论

本文提出将 DOAS 和 GA 相结合, 搭建了氨气检测系统, 采用 GA 得到 296 K~328 K 温度范围内的温度补偿函数, 并对检测结果进行补偿, 补偿后 44×10^{-6} 氨气检测结果的最大误差降低了 26.97%, 有效消除了温度对氨气检测的非线性影响。温度对线性相关系数没有明显影响, 说明本系统可实现不同浓度氨气的准确检测。在温度 328 K 下, 6×10^{-6} 氨气在温度补偿前后系统的检测限分别为 0.198×10^{-6} 和 0.278×10^{-6} 。

参考文献:

- [1] NIU X F, ZHONG Y B, CHEN R, et al. Highly sensitive and selective liquid crystal optical sensor for detection of ammonia[J]. *Optics Express*, 2017, 25: 13549-13556.
- [2] 贾巍, 何莹. 结合环境参数修正的高温气体光谱检测系统设计[J]. *应用光学*, 2018, 39(6): 809-814.
JIA Wei, HE Ying. Design of high temperature gas spectrum detection system combined with environmental parameters modification[J]. *Journal of Applied Optics*, 2018, 39(6): 809-814.
- [3] 王迪, 李玉爽, 濮御, 等. 气体浓度激光光谱检测温度影响修正研究[J]. *应用光学*, 2020, 41(2): 348-353.
WANG Di, LI Yushuang, PU Yu, et al. Study on temperature influence correction of gas concentration laser spectrum detection[J]. *Journal of Applied Optics*, 2020, 41(2): 348-353.
- [4] 常敏, 刘奔, 张学典. 红外 CO_2 浓度检测中的温度补偿方法研究[J]. *仪表技术与传感器*, 2017, 2: 93-95.
CHANG Min, LIU Ben, ZHANG Xuedian. Research on temperature compensation for CO_2 concentration measurement[J]. *Instrument Technique and Sensor*, 2017, 2: 93-95.

- [5] 陆剑敏, 邵理堂, 汤光华, 等. 差分光学吸收光谱法在线监测烟气中 SO_2 浓度的非线性补偿研究[J]. 应用光学, 2008, 29(6): 859-862.
- LU Jianmin, SHAO Litang, TANG Guanghua, et al. Non-linear compensation of in-situ monitoring SO_2 concentration in flue gas by DOAS[J]. Journal of Applied Optics, 2008, 29(6): 859-862.
- [6] QIANG G, WENG W B, LI B, et al. Gas temperature measurement using differential optical absorption spectroscopy (DOAS)[J]. *Applied spectroscopy*, 2018, 72: 1014-1020.
- [7] 孙立群, 陈克新, 杨怀栋, 等. 基于差分吸收光谱法的大气痕量气体在线检测技术[J]. 应用光学, 2012, 33(1): 115-119.
- SUN Liquan, CHEN Kexin, YANG Huaidong, et al. On-line monitoring technique for trace gases in atmosphere based on differential optical absorption spectroscopy[J]. Journal of Applied Optics, 2012, 33(1): 115-119.
- [8] 周洁, 龙志云, 赵翠. 温度对 NH_3 气体紫外吸收截面影响研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, 29(4): 982-985.
- ZHOU Jie, LONG Zhiyun, ZHAO Cui. Influence of temperature on the ultraviolet absorption cross section of NH_3 gas[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2009, 29(4): 982-985.
- [9] 朱靳, 孙冬梅, 陈玲. 基于差分吸收光谱技术 NH_3 浓度在线反演方法研究[J]. *计算机与应用化学*, 2012, 10: 1263-1266.
- ZHU Jin, SUN Dongmei, CHEN Ling. On line retrieval of NH_3 concentration based on differential absorption spectroscopy[J]. *Computers and Applied Chemistry*, 2012, 10: 1263-1266.
- [10] 许康, 王一红, 周宾, 等. 基于DOAS方法烟气中 NH_3 对 NO 浓度测量的干扰补偿[J]. *仪表技术与传感器*, 2016, 12: 121-125.
- XU Kang, WANG Yihong, ZHOU Bin, et al. Compensation method of NH_3 interference in NO concentration measurement in flue gas based on DOAS[J]. *Instrument Technique and Sensor*, 2016, 12: 121-125.
- [11] ZHANG X, ZHOU H, CHUAN C, et al. Ultraviolet differential optical absorption spectrometry: quantitative analysis of the CS_2 produced by SF_6 decomposition[J]. *Measurement Science and Technology*, 2017, 28: 115102-115109.
- [12] 郁敏捷, 刘铭晖, 董作人, 等. 基于傅里叶变换的差分吸收光谱法测量 NH_3 和 SO_2 浓度的实验研究[J]. 中国激光, 2015, 42(9): 351-359.
- YU Minjie, LIU Minghui, DONG Zuoren, et al. Study on measuring concentration of ammonia and sulphur dioxide by differential optical absorption spectrometry based on fast fourier transform[J]. *Chinese J Lasers*, 2015, 42(9): 351-359.
- [13] TANG G H, XU C L, SHAO L T, et al. Improved algorithms of differential optical absorption spectroscopy for monitoring SO_2 , NO_2 from flue gas[J]. *Measurement Science and Technology*, 2008, 20(1): 015601.
- [14] CHEN F Z, JUDGE D L, WU R, et al. Low and room temperature photoabsorption cross sections of NH_3 in the UV region[J]. *Planetary and Space Science*, 1999, 47(1-2): 261-266.
- [15] CUI Z, ZHANG X, CHENG Z, et al. Quantitative analysis of SO_2 , H_2S and CS_2 mixed gases based on ultraviolet differential absorption spectrometry[J]. *Spectrochimica Acta Part A Molecular & Biomolecular Spectroscopy*, 2019, 215: 187-195.