

文章编号:1001-9014(2018)01-0106-06

DOI:10.11972/j. issn. 1001-9014. 2018. 01. 019

# 近红外混叠吸收线光谱解析及线强测量方法研究

贾巍<sup>1</sup>, 何莹<sup>2</sup>, 张玉钧<sup>2\*</sup>, 刘建国<sup>2</sup>, 刘文清<sup>2</sup>, 王敏<sup>1</sup>, 张润梅<sup>1</sup>

(1. 安徽建筑大学 机械与电气工程学院,安徽 合肥 230601;  
2. 中国科学院安徽光学精密机械研究所 中国科学院环境光学与技术重点实验室,安徽 合肥 230031)

**摘要:**近年来近红外激光吸收光谱检测技术得以飞速发展,其中对吸收线的光谱解析是光谱检测的重要研究内容之一。文章建立了气体激光吸收光谱测量实验平台,重点研究了混叠吸收线光谱检测算法,以  $6528.8\text{ cm}^{-1}$  附近氨气吸收线为例,开展了特征光谱解析实验与算法研究。结果表明,结合小波降噪方法后,信号均方根误差降低 4.45 倍,利用多线 Voigt 线型拟合算法实现混叠吸收线特征光谱解析,线型拟合残差优于  $\pm 2\%$ 。实验获得了氨气在室温不同压力下的特征吸收光谱,并计算得到各条吸收线的线强参数结果。测量线强与 Hitran 数据库的相对偏差在 5.67~8.2% 之间,线强计算的不确定度约为 4.6%。有效的混叠吸收线光谱解析算法可实现气体线强参数的准确测量,有益于提高氨气浓度反演的准确性。

**关 键 词:**激光吸收光谱;光谱解析;小波降噪;线型拟合;线强

中图分类号:O433.1 文献标识码: A

## Spectral analysis and line strength measurement method of near-infrared overlapped absorption lines

JIA Wei<sup>1</sup>, HE Ying<sup>2</sup>, ZHANG Yu-Jun<sup>2\*</sup>, LIU Jian-Guo<sup>2</sup>,  
LIU Wen-Qing<sup>2</sup>, WANG Min<sup>1</sup>, ZHANG Run-Mei<sup>1</sup>

(1 Mechanical and electrical engineering college, Anhui Jianzhu University, Hefei 230601, China;  
2 Key Laboratory of Environmental Optics & Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics,  
the Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

**Abstract:** In recent years, near-infrared laser absorption spectroscopy detection technique has developed rapidly, and spectral analysis of absorption lines is one of the important research contents of spectrum detection. The experimental platform for gas laser absorption spectroscopy measurement was established in this study, moreover the experiment of ammonia characteristic spectroscopy analysis at  $6528.8\text{ cm}^{-1}$  and algorithm research were carried out. Experimental results show that the root mean square error of the measured signal reduced 4.45 times after combined with wavelet denoising method, and the fitting residual error of overlapped absorption lines was lower than 2% by using multi-line Voigt line profile fitting algorithm. In the experiment, the ammonia characteristic absorption spectrum of different pressures at room temperature was obtained, and the line strength parameters of each absorption line were also calculated. The relative deviation between the measured results and Hitran database was between 5.67~8.2%, and the uncertainty of calculated line strength was about 4.6%. The accurate measurement of line strength by the effective spectrum analysis algorithm of overlapped absorption lines is in favor for improving the accuracy of ammonia concentration inversion.

**Key words:** laser absorption spectroscopy, spectrum analysis, wavelet denoising, line profile fitting,

收稿日期:2017-09-04,修回日期:2017-09-25

Received date: 2017-09-04, revised date: 2017-09-25

基金项目:国家重点研发计划课题(2016YFC0201003),安徽省科技重大专项(15CZZ04124),国家环境光学监测仪器工程技术研究中心开放基金(2005DP173065-2016-02),安徽建筑大学引进人才及博士启动基金(2016QD111)

**Foundation items:** Supported by National Program on Key Research Project of China (2016YFC0201003), Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of Anhui Province (15CZZ04124), Open fund of National environmental optical monitoring instrument engineering technology research center of China (2005DP173065-2016-02), Introduction of talent and doctoral start-up fund of Anhui Jianzhu University (2016QD111)

**作者简介(Biography):**贾巍(1983-),男,安徽芜湖人,讲师,博士。主要研究领域为大气痕量气体监测。E-mail: jwaiofm@163.com

\* 通讯作者(Corresponding author): E-mail: yjzhang@aiofm.ac.cn

line strength

PACS: 42.62. Fi, 42.68. Ca, 42.55. Px

## 引言

近年来,可调谐半导体激光吸收光谱(TDLAS)技术<sup>[1-2]</sup>以其高选择性、高灵敏度等特点,结合稳定的光学设计实现了工业过程监测控制、大气痕量气体检测、医疗诊断等不同现场气体浓度的在线测量<sup>[3-4]</sup>。然而在近红外波段,气体的吸收光谱存在多根吸收线重叠现象,为混叠光谱解析带来了困难,同时由于测定浓度与光谱参量特别是线强直接相关,因此线强的不确定性将导致气体浓度反演准确性的降低。

目前,TDLAS技术通常使用 Hitran 数据库的配分函数获取参数线强,其数据主要来自理论计算,未包括振动配分函数的贡献,通过理论计算的室温线强不确定度约为 5~10%,高温线强的不确定度甚至达到 20%<sup>[5-6]</sup>,因此线强误差将直接造成气体浓度计算的偏差。近年来,众多国内外文献相继报道了近红外波段的气体光谱检测和光谱参数分析工作<sup>[7-8]</sup>,Lundsberg-Nielsen 等人<sup>[9]</sup>讨论了氨气吸收线的位置和强度,但是测量工作在光学厚度区中进行,因此线强测量的偏差较大;Webber<sup>[10]</sup>开展了高温模拟实验得到 NH<sub>3</sub> 和 CO<sub>2</sub> 近红外吸收线的光谱参数,指出交叠严重的光谱线强不确定度大于单根吸收线线强;Mihalcea 等人<sup>[11]</sup>利用外腔激光器(EDL)研究了 296~1425 K 温度范围内 4915~5085 cm<sup>-1</sup> 的 CO<sub>2</sub> 吸收光谱,获得 R(56) 吸收线强、温度系数和自加宽系数,测量线强与 HITEMP96 的相对偏差为 3.9~11.3%,自加宽系数比 HITEMP96 高 20%;但是文献中对如何解析混叠吸收光谱,以及对近红外光谱线强参数的实测和分析较少。因此,研究有效的光谱解析和线强计算方法,对精确反演气体浓度具有重要意义。

本文搭建了近红外激光吸收光谱检测实验系统,重点研究了结合小波降噪方法和多线 Voigt 线型拟合算法实现混叠吸收线的光谱解析方法,以 6528.8 cm<sup>-1</sup> 氨气近红外混叠吸收线检测实验为例,通过有效的光谱检测和光谱解析获得 6528.8 cm<sup>-1</sup> 处各条吸收线的线强参数,并与 Hitran 数据库的结果进行对比分析,验证了本方法的可行性。

## 1 测量原理

根据 Lambert-Beer 定律,采用透过率  $T(v)$  和吸

光度  $A(v)$  来表示气体吸收,  $I_o(v)$  表示入射光强,  $I_t(v)$  表示出射光强,  $\alpha(v)$  表示吸收系数,  $L$  表示光程,由此可得到:

$$T(v) = \frac{I_t(v)}{I_o(v)}, \quad (1)$$

$$A(v) = \ln \frac{I_o(v)}{I_t(v)} = -\ln T(v) = \alpha(v)L \quad , \quad (2)$$

对于单一气体的单一跃迁,  $\alpha(v)$  可以表示为下式:

$$\alpha(v) = S(T)\varphi(v)Px \quad , \quad (3)$$

其中  $S(T)$  表示气体分子线强,  $P$  表示压力,  $x$  表示气体浓度,  $\varphi(v)$  表示归一化的线型函数, 则线强可以表示为:

$$S(T) = \frac{A}{PLx} \quad , \quad (4)$$

由上式可以看出,单个分子跃迁的积分吸光度面积将随压力呈线性变化。因此,通过对不同压力下的测量结果(积分吸光度与光程和浓度乘积的商)进行线性拟合,拟合的斜率即为当前温度下的线强。理论上,由于零压力对应零吸光度,故线性拟合受限通过原点。通常选择五组不同压力进行光谱检测并由此计算线强。

在进行计算函数不确定度的过程中,因为函数  $x=f(u,v,\dots)$  整体的不确定度与每个变量的不确定度有关,因此当变量之间相互独立时,函数的总体不确定度可使用标准偏差表示,其传递公式为:

$$\sigma_x \approx \sqrt{\sigma_u^2 \left(\frac{\partial x}{\partial u}\right)^2 + \sigma_v^2 \left(\frac{\partial x}{\partial v}\right)^2 + \dots} \quad , \quad (5)$$

式中,  $\sigma_x, \sigma_u, \sigma_v$  分别表示变量  $x, u, v$  的标准偏差。由公式(4)可知线强不确定度与吸光度、压力、浓度、光程和温度等因素的不确定度有关,再根据公式(5)计算线强的总不确定度。

## 2 实验装置

基于 TDLAS 技术搭建气体激光吸收光谱测量实验平台,如图 1 所示。具体实验过程为:激光器控制器 LDC-3724C 驱动并确保激光器稳定工作,信号发生器产生锯齿信号作为波长扫描信号,激光器发出的激光通过分束器后,分为两路输出,其中一路 98% 的激光经准直后通过石英吸收池进行气体探测,其中石英吸收池气室长度为 20 cm,吸收池端面

3°的倾角上安装有楔形窗片,以减少干涉对光谱测量的影响;另一路2%的激光经准直后通过标准具( $\text{FSR} = 3 \text{ GHz}$ )探测;通过检测气体吸收光谱信号,并进行时域到频域的转换,完成波长标定,由信号检测与处理器进行吸光度信号的提取和线强计算。由于某些目标气体具有吸附性,导致气体通入吸收池后压力略有降低,因此使用薄膜规真空计CDG800全程监测整个气路链接中的压力。

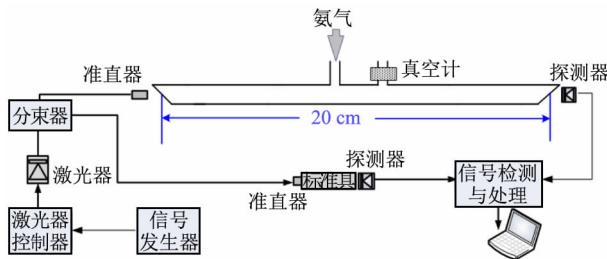


图1 光谱测量实验平台

Fig. 1 Experimental setup for spectrum detection

### 3 混叠吸收线光谱检测算法

#### 3.1 小波降噪

在使用TDLAS技术进行气体检测时,来自电子元器件、测量环境变化等因素所产生的噪声将严重影响测量的准确性。基于此,采用在时域和频域均具有多尺度分辨率的小波阈值降噪方法对探测信号进行预处理,以达到降低噪声的目的。

小波阈值降噪方法的基本原理是<sup>[12]</sup>:信号中的噪声部分 $n(t)$ 的能量主要集中在数目众多但幅值较小的小波系数上,而原始无噪声信号 $f(t)$ 的能量分布在数目较少但幅值较大的小波系数上,利用原始信号小波系数值比噪声信号大的特点可实现信号与噪声的分离,最后通过信号重构得到无噪声信号。

具体的信号降噪处理分以下几步骤进行:

(1) 首先对待处理的信号进行离散采样,并通过选择的母小波对信号采取层分解;

(2) 经小波分解后,得到一组小波变换系数 $w_{j,k}$ :

$$\begin{cases} S_f(j,k) = S_f(j-1,k) * h(j,k) \\ W_f(j,k) = W_f(j-1,k) * g(j,k) \end{cases}, \quad (6)$$

式中 $W_f(j,k)$ 表示小波变换系数( $j$ 表示尺度因子, $k$ 表示平移因子), $S_f(j,k)$ 表示 $j$ 尺度上的逼近系数, $S_f(0,k)$ 表示原始信号 $f(k)$ , $h(j,k)$ 表示对应于尺度函数的低通滤波器, $g(i,k)$ 表示对应于小波函数的

高通滤波器。因此,通过小波分解得到的小波系数为 $w_{j,k} = f_{j,k} + n_{j,k}$ ( $f_{j,k}$ 是原始信号的小波系数, $n_{j,k}$ 是噪声的小波系数)。

(3) 通过对小波变换系数的阈值量化处理,将噪声的小波系数置零,即使 $\|\tilde{w}_{j,k} - f_{j,k}\|$ 的值最小,来确定小波系数的估计值 $\tilde{w}_{j,k}$ ;

(4) 利用估计的小波系数进行信号重构:

$$S_f(j-1,k) = S_f(j,k) * \tilde{h}(j,k) + W_f(j,k) * \tilde{g}(j,k) \quad (7)$$

得到估计信号 $\tilde{f}(k)$ ,实现小波降噪。

通过实验研究,采用db6母小波对探测信号进行5层分解,能最大程度地压缩叠加的噪声信号。通常情况下由信噪比或者均方根误差来评价信号的去噪效果<sup>[13]</sup>,这里选择后者来验证小波降噪方法的有效性。如公式(8)所示,其中表示均方根误差,表示原始无噪声的信号,表示含有噪声的信号。以氨气样气检测为例,将20 torr压力情况下得到的原始检测光谱和小波降噪后的光谱信号进行对比分析,信号整体的均方根误差降低了4.45倍,说明噪声压缩效果良好,具体结果如图2所示。

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f_i - s_i)^2} \quad , \quad (8)$$

#### 3.2 背景基线拟合

光谱检测的重点是准确获取吸光度信号。在采用锯齿信号进行激光波长扫描时,通过对无吸收部分进行基线拟合来获得原始光强,通常采用三次多项式拟合背景基线 $I_{0x}$ ,如式(9)所示:

$$I_{0x} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 \quad . \quad (9)$$

当测量信号 $I_{tx}$ 与背景基线 $I_{0x}$ 的残差平方和 $Q(a_0, a_1, a_2, a_3)$ 取最小值时,拟合效果最佳,如公式(10)所示:

$$Q(a_0, a_1, a_2, a_3) = \sum_{x=1}^n (I_{0x} - I_{tx})^2 \quad . \quad (10)$$

通过对各系数求导并计算最优值,代入式(9)还原背景基线。最后对去噪后的信号进行背景扣除并进行光强归一化,以消除光强起伏对测量的影响。

#### 3.3 线型拟合

为进一步减小系统噪声和环境改变导致的吸光度信号畸变,对吸光度信号进行线型拟合。通常当非均质展宽和均质展宽的线宽接近时(压强约为10~50 torr),吸收线型表示为高斯线型和洛伦兹线型的卷积,即Voigt线型,表示为式(11):

$$\Phi_V(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_N(u) \Phi_C(v-u) du \quad . \quad (11)$$

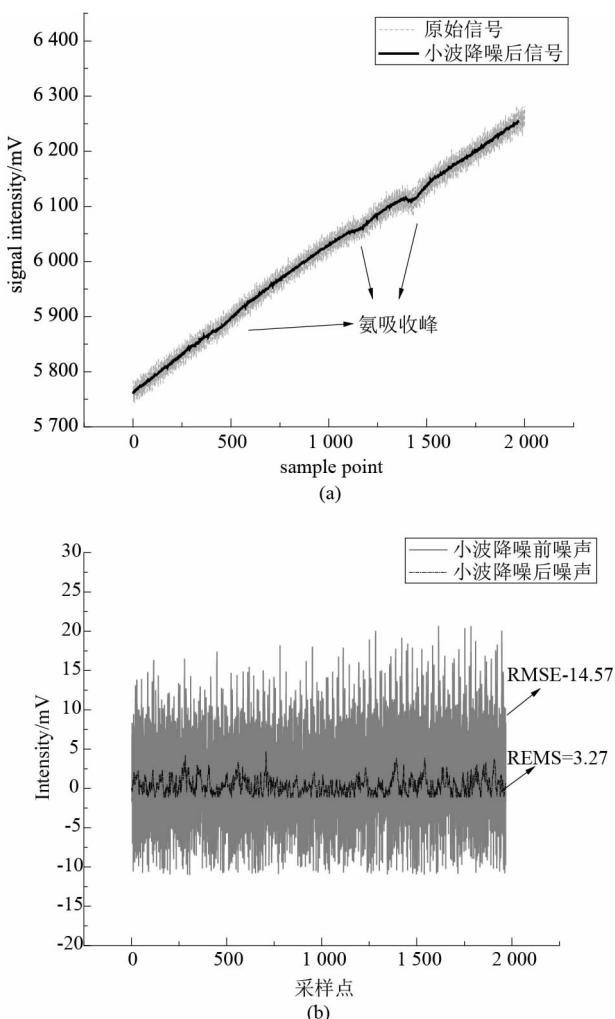


图2 (a) 小波降噪前后的信号,(b) 小波降噪前后的均方根误差分析

Fig. 2 (a) Signals before and after wavelet denoising, (b) RMSE analysis before and after wavelet denoising

在前期实验室的研究基础上<sup>[14]</sup>,采用L-M算法<sup>[15]</sup>实现混叠吸收线的线型拟合,设Voigt线型表示为谱线中心 $v_0$ ,洛伦兹幅度 $\alpha_c$ ,洛伦兹半宽 $\Delta v_c$ ,高斯半宽 $\Delta v_D$ 以及直流背景 $y_0$ 的函数模型,此函数非线性依赖于各个参数:

$$y = y(x_i, \alpha) \quad (i = 0, 1 \dots n - 1), \quad (12)$$

其中 $\alpha = (y_0, v_0, \alpha_c, \Delta v_c, \Delta v_D)$ ,定义优值函数为 $\chi^2$ , $\sigma_i$ 表示各数据的标准差:

$$\chi^2(\alpha) = \sum_{i=0}^{n-1} \left[ \frac{y_i - y(x_i; \alpha)}{\sigma_i} \right]^2. \quad (13)$$

循环优化 $\alpha$ ,求解 $\chi^2$ 的最小值,通过迭代运算确定各拟合参数.对于多条混叠的吸收线,需要同时考虑到拟合范围内的吸收峰的个数、吸收谱线的中心频率、吸收半宽,由此分离出各条吸收线的吸光度信号,完成多线Voigt线型拟合,主要步骤如下:

(1)根据测量的吸光度信号确定拟合函数中吸收线数量;

(2)选取吸光度信号的最小值(或零),作为直流偏量的初值;

(3)选取每根吸收线的拟合范围,对各吸收线叠加积分,作为积分吸光度的初值;

(4)对每根吸收线的中心频率赋初值,选取为信号峰值对应点;

(5)根据已知温度计算每根吸收线的洛伦兹半宽和高斯半宽,作为初值带入;

(6)为Voigt拟合函数中的各个参数赋上下限;

(7)循环求解优值函数的最小值,以确定拟合参数.

在室温情况下向石英吸收池通入29.8 torr纯氨样气,进行光谱信号检测,由多线Voigt线型拟合算法得到拟合后的信号残差低于 $\pm 2\%$ ,实验结果如图3所示.

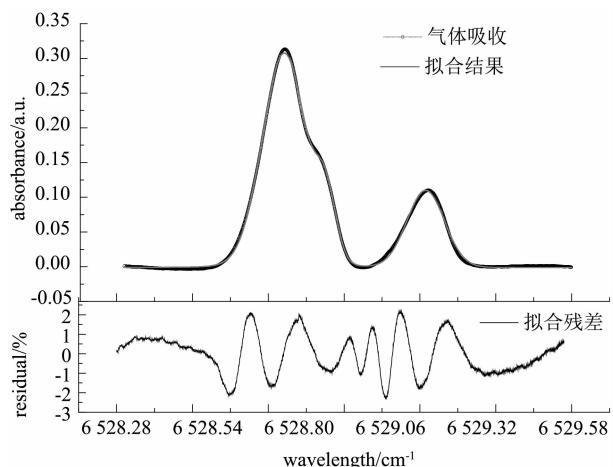


图3 Voigt线型拟合结果分析

Fig. 3 Analysis of multi-line Voigt line profile fitting

#### 4 线强测量及分析

以 $6528.8\text{ cm}^{-1}$ 处的氨气吸收光谱检测为例,此处氨气吸收线为四条距离很近的吸收线混叠( $6528.7685\text{ cm}^{-1}, 6528.7732\text{ cm}^{-1}, 6528.8998\text{ cm}^{-1}, 6529.1901\text{ cm}^{-1}$ ).系统中选择了FITE公司激光器作为系统光源,其线宽为1 MHz,输出中心波长为 $6528.69\text{ cm}^{-1}$ ,实验中的波长扫描信号幅值为2.8 V,频率为100 Hz,根据上述光谱解析算法结合线强测定方法计算室温下的氨气吸收线强.

##### 4.1 实验步骤

实验中整体气体测量链路应具有良好的气密性,因此通气实验之前使用机械真空泵对气路进行

抽气,真空度可以达到 0.1 mtorr;再通入氮气,除去吸附在石英吸收池内部的任何残留气体,反复清洗三次;随后打开氨气高压气瓶的减压阀和针阀,将一定量的纯氨标气通入石英吸收池,并控制压力在 100 torr 以下,保证在氨气的光学薄区进行光谱数据测量;接着关闭针阀,待气体稳定 30 min 后采样,对原始数据采取 400 次平均并保存光谱数据,同时记录当前温度和压强;之后利用真空泵和球阀对吸收池抽气以降低压强,关闭真空泵和球阀,稳定 30 min 后采样,方法同上;再次对吸收池缓慢抽气以降低压强,共采集五组不同压强下的吸收光谱数据进行分析。由于氨气的强吸附性,导致标气通入吸收池后压力略微降低,因此使用纯氨而非混合气体,以避免氨吸附引起测量的不确定性。氨气在充入石英吸收池后,会慢慢产生吸附现象,约 30 min 后开始进行测量以正确估计吸收光程中的氨气分子数密度。实验中使用南京特种气体有限公司生产的标气,浓度不确定度 <2.0%。

#### 4.2 测量结果

TDLAS 系统正常工作,室温 295 K 时向吸收池充入 99.99% 氨气,通过抽气过程测量不同压力下的氨气混叠吸收光谱,结果如图 4 所示。从图中可以看出,吸收谱线的加宽效应随压强增加更为明显,相邻的四条吸收谱线随着压力的增大逐渐交叠而不易分辨,因此在常压情况下(756 torr)气体吸收线基本连成一片,此时如果仅测量单条吸收线的线强,准确性明显降低。因此,室温测量都在光学薄区(低压 < 100 torr)进行,以降低实验的不确定性。

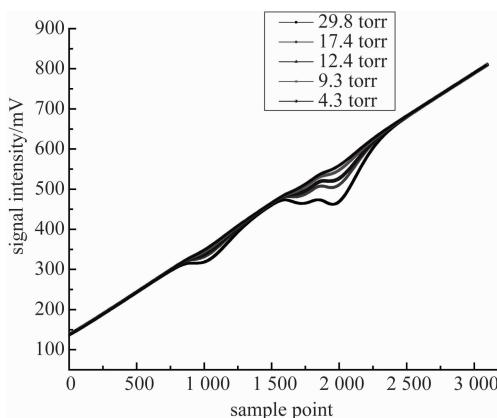


图 4 室温下不同压强下的探测信号

Fig. 4 Detection signals under different pressures at room temperature

通过前文所述的混叠吸收线光谱检测算法提取吸光度信号,并进行时一频转换,有效地分离各条氨

气吸收线,得到拟合后的吸光度信号结果,如图 5 所示,图中可见降低压强后吸光度信号更加明晰。以  $6528.76\text{ cm}^{-1}$  处的吸收线强计算为例,计算  $A/xL$  与  $P$  的线性拟合斜率,得到吸收线强结果如图 6(a) 所示。

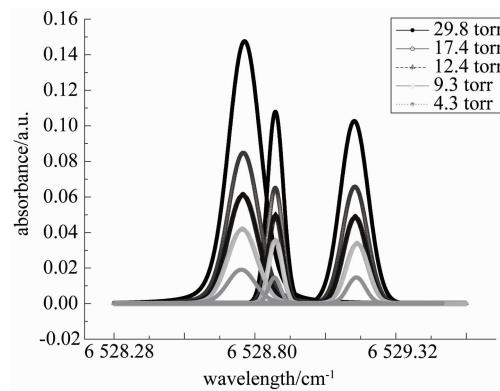


图 5 混叠吸收谱线分离

Fig. 5 Multi-line separation

同理计算得到  $6528.8998\text{ cm}^{-1}$  和  $6529.1901\text{ cm}^{-1}$  的线强。Hitran 数据库中列出  $6528.7685\text{ cm}^{-1}$  和  $6528.7732\text{ cm}^{-1}$  两条吸收线,但实际测量中两者距离太近,呈现为一条吸收线的状态,实际线强计算结果为两条吸收线强之和。而  $6528.8998\text{ cm}^{-1}$  和  $6528.7732\text{ cm}^{-1}$  两条吸收线在常温测量时即使降低压强,交叠仍然比较严重,造成了谱线分离和线强计算的偏差。

室温下测量的线强和 Hitran 数据库对比结果如表 1 所示,表中  $v_0$  表示无压力频移时的中心频率(源自 Hitran); $S_M$  表示测量得到的线强, $S_H$  表示 Hitran 数据库线强结果; $E_{S,M,H}$  表示测量线强和 Hitran 中线强的相对偏差,即  $(S_M - S_H)/S_H$ 。

表 1 测量线强和 Hitran 数据库对比

Table 1 Comparison between measured line strength and Hitran database

跃迁	吸收线 1	吸收线 2	吸收线 3	吸收线 4
$v_0/\text{cm}^{-1}$	6528.7685	6528.7732	6528.8998	6529.1901
$S_H$ 数据库/ $\text{cm}^{-2}\text{atm}^{-1}$	0.029	0.029	0.0335	0.0305
$S_M/\text{cm}^{-2}\text{atm}^{-1}$	0.0617		0.0316	0.033
$E_{S,M,H}$ 偏差/%	6.21		5.67	8.2

由上述实验结果可知,在室温条件下利用实验室平台获得的线强与 Hitran 数据库中结果的相对偏差在 5.67% ~ 8.2% 之间。在该实验中,光程不确定度为 0.2%,压强不确定度为 1%,气体浓度不确定度 <2%,对于混叠吸收线积分吸光度的不确定度约为

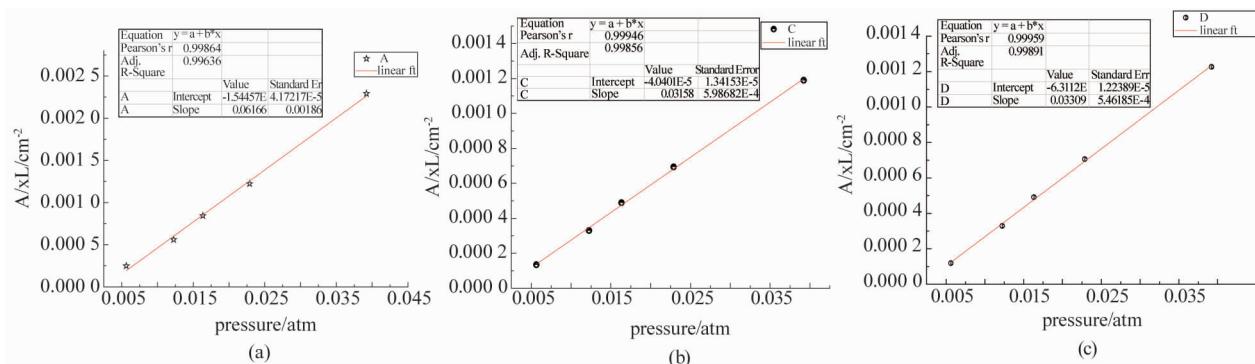


图6 (a) 6528.76 cm<sup>-1</sup>处的吸收线强计算结果,(b) 6528.8998 cm<sup>-1</sup>处的吸收线强计算结果,(c) 6529.1901 cm<sup>-1</sup>处的吸收线强计算结果

Fig. 6 (a) Line strength calculated results at 6528.76 cm<sup>-1</sup>, (b) Line strength calculated results at 6528.8998 cm<sup>-1</sup>, (c) Line strength calculated results at 6529.1901 cm<sup>-1</sup>

4%,因此氨气线强测量的不确定度约为4.6%,实验验证了混叠吸收线解析算法及线强测量的有效性。

## 5 结论

搭建近红外激光吸收光谱测量实验平台,结合小波降噪方法和多线Voigt线型拟合算法实现了各混叠吸收线的分离和光谱有效检测,开展了6528.8 cm<sup>-1</sup>氨气吸收光谱检测实验,算法处理后的整体拟合残差低于2%,由实验获得了室温下不同压力氨气的吸收光谱,随着压力的降低各吸光度信号更明晰。根据五组室温低压情况下测量的光谱解析并计算氨气线强参数,结果与Hitran数据库的偏差约在5.67~8.2%之间,整体线强计算的不确定度约为4.6%。混叠吸收线的分离和线强数据的精确获取为浓度反演过程中的线强修正提供了重要依据,在下一步工作中,可以将本光谱解析方法应用于高温气体光谱检测中,以提高高温监测环境下目标气体浓度测量的准确性。

## References

- [1] Pantani M, Castagnoli F, D'Amato F, et al. Two infrared laser spectrometers for the in situ measurement of stratospheric gas concentration[J]. *Infrared physics & technology*, 2004, **46**(1): 109–113.
- [2] Barrass S, Gérard Y, Holdsworth R J, et al. Near-infrared tunable diode laser spectrometer for the remote sensing of vehicle emissions[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2004, **60**(14): 3353–3360.
- [3] Michopoulos P, Baloutsos G, Economou A, et al. Effects of nitrogen deposition on nitrogen cycling in an Aleppo pine stand in Athens, Greece[J]. *Science of the Total Environment*, 2004, **323**: 211–218.
- [4] Fenn M E, Baron J S, Allen E B, et al. Ecological effects of nitrogen deposition in the western United States[J]. *Bio-Science*, 2003, **53**(4): 404–420.
- [5] Šimečková M, Jacquemart D, Rothman L S, et al. Einstein A-coefficients and statistical weights for molecular absorption transitions in the HITRAN database[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2006, **98**(1): 130–155.
- [6] Fischer J, Gamache R R, Goldman A, et al. Total internal partition sums for molecular species in the 2000 edition of the HITRAN database[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2003, **82**(1): 401–412.
- [7] Pogány A, Werhahn O, Ebert V. High-Accuracy Ammonia Line Intensity Measurements at 1.5 μm[C]. *Laser Applications To Chemical, Security and Environmental Analysis*, 2016.
- [8] Bozóki Z, Árpád Mohácsí, Szabó G, et al. Near-Infrared Diode Laser Based Spectroscopic Detection of Ammonia: A Comparative Study of Photoacoustic and Direct Optical Absorption Methods[J]. *Applied Spectroscopy*, 2002, **56**(6): 715.
- [9] Lundsberg-Nielsen L, Hegelund F, Nicolaisen F M. Analysis of the High-Resolution Spectrum of Ammonia (14NH<sub>3</sub>) in the Near-Infrared Region, 6400 ~ 6900 cm<sup>-1</sup>. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 1993, **162**: 230–245.
- [10] Webber M E. Diode laser measurements of NH<sub>3</sub> and CO<sub>2</sub> for combustion and bioreactor applications[D]. *Degree of Doctor of Philosophy*, 2001, 18–27.
- [11] Mihalcea R M, Baer D S, Hanson R K. Diode-Laser Absorption Measurements of CO<sub>2</sub> Near 2.0 μm at Elevated Temperatures[J]. *Applied Optics*, 1998, **37**(36): 8341–8347.
- [12] Fan Qi-Bin. Wavelet Analysis[M]. Wuhan: Wuhan University Press (樊启斌. 小波分析[M]. 武汉大学出版社), 2008, 301–302.
- [13] Li Jing-Song, Yu Ben-Li, Horst Fischer. Wavelet Transform Based on the Optimal Wavelet Pairs for Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy Signal Processing[J]. *Applied Spectroscopy*, 2015, **69**(4): 496–506.
- [14] Gao Yan-Wei, Zhang Yu-Jun, Chen Dong, et al. Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy for Detection of Hydrogen Fluoride[J]. *Acta Photonica Sinica* (高彦伟, 张玉钧, 陈东等. 可调谐二极管激光吸收光谱氟化氢检测[J]. 光子学报), 2015, **44**(6): 630003.
- [15] McLean A B, Mitchell C E J. Implementation of an efficient analytical approximation to the Voigt function for photoemission lineshape analysis[J]. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 1994, **69**(2): 125–132.