基于宽波段吸收光谱的 CO/CO_2混合气体分压测量

王亚民[1)2)] 沈涛[1)†] 吴昊龙[1)2)] 吴振杰[2)] 陶蒙蒙[2)††] 陶波[2)] 叶景峰[2)] †††王晟[2)] 刘洋阳[2)]

1)（火箭军工程大学，西安 710025）

2)（西北核技术研究所，激光与物质相互作用全国重点实验室，西安 710024）

摘 要

CO 与 CO_2 是燃烧过程中最主要的含碳产物，其分压（体积分数）的准确测量对燃烧机理研究与燃烧过程诊断具有重要意义。针对复杂环境下基线畸变导致吸收光谱定量反演困难的问题，本文基于宽波段吸收光谱（broadband absorption spectroscopy，BDAS）技术，提出一种基于局部极值的基线分段拟合方法（piecewise baseline fitting based on local extrema，PBF-LE），并结合宽波段特征匹配模型实现了 CO/CO_2混合气体分压的高动态范围反演。结果表明：在基线剧烈波动及局部谱峰畸变条件下，该方法仍可稳定地反演气体分压；低阶随机基线畸变下分压反演平均误差小于 1%，高阶随机基线畸变下理论反演平均误差小于 10%，实测平台上的分压反演误差小于 5%。本文方法为复杂环境下 CO/CO_2的在线监测提供了一种有效途径。

关键词：吸收光谱，宽波段吸收光谱，不同气体组分，基线畸变

PACS： 42.62.Fi, 33.20.Ea

基金: 国家自然科学基金(批准号：62274182，62475288)、激光与物质相互作用全国重点实验室基金(批准号：SKLLIM2305)资助的课题.

† 通信作者.E-mail: luckyshentao@163.com

†† 通信作者.E-mail: taomengmeng@nint.ac.cn

††† 通信作者.E-mail: yejingfeng@nint.ac.cn

第一作者.E-mail: 3274275104@qq.com

1 引 言

燃烧是能源转化与动力输出的核心环节，CO 与 CO_2 作为燃烧过程最主要的含碳产物，其浓度及相对比例直接表征燃烧效率、反应进程与排放特性，是燃烧机理研究与燃烧过程诊断的关键参量[1-5]。电化学法、催化燃烧式气体测量法及气相色谱法等传统检测手段虽已应用于 CO/CO_2测量，但普遍存在响应滞后、环境耐受性不足、难以原位实时实施等局限[6-10]。基于分子吸收的激光光谱技术具有在线、原位、非接触、抗电磁干扰等突出优势[11-15]，其中基于分布反馈（DFB）激光器的可调谐二极管激光吸收光谱（tunable diode laser absorption spectroscopy，TDLAS）技术已发展成为燃烧流场气体多参数测量的代表性手段。[16-18]

近年来，TDLAS 在 CO/CO_2混合气体测量方面取得了一系列进展：通过时分复用双 DFB 激光器实现了常压下低浓度 CO（2.3 μm、2 ppm）与 CO_2（2.0 μm、6 ppm）的同步测量[19]；面向转炉煤气与高炉煤气燃烧过程研究了多组分气体对 CO/CO_2浓度测量的影响[20]；采用单 DFB 激光器结合 db3 小波二级滤波实现了大浓度差 CO/CO_2的同步测量，将检测限由 0.004%降至 0.0025%，CO 与 CO_2测量相对误差均方值分别由 7.11%、1.28%降至 5.18%、1.21%[21]。然而，受单激光器窄带可调谐范围的限制，TDLAS 在单一连续波段内可覆盖的组分与谱线数量有限，测量能力难以满足宽工况、多组分环境的检测需求 [22-24]；多组分同步测量虽可借助时分复用（time division multiplexing，TDM）等多光源协同方案实现[25, 26]，但系统复杂度与标定负担随之增加，且基线畸变、谱线展宽与混合谱线重叠等问题仍显著制约测量精度[27-30]。

宽波段吸收光谱（broadband absorption spectroscopy，BDAS）借助超辐射发光二极管（SLED）、超连续谱光源及宽波段可调谐光纤激光器等宽谱光源，可在单次测量中获取多组分、多谱线的吸收信息，为突破上述瓶颈提供了新途径。目前，基于 SLED 已实现常压下 CO_2与 CH_4的同步检测[31]；基于超连续谱光源的宽波段测量已应用于 473–1173 K 范围的温度反演，最大相对反演误差为-1.98%[32]；宽波段可调谐掺铥光纤激光器在宽光谱吸收测量中的技术优势与可行性亦得到系统论证[33, 34]。本团队前期已实现室温下 CO 在近红外波段的宽光谱吸收测量[35]。然而，上述工作多聚焦于温度测量或单组分监测，面向宽工况条件下 CO/CO_2混合气体分压精确测量的宽波段吸收光谱研究仍鲜有报道。吸收光谱定量反演基于比尔-朗伯定律，其精度高度依赖光谱基线质量。早期多项式拟合虽实现简单，但难以抑制湍流、干涉等与吸收特征相近的噪声；此后发展的吸收峰屏蔽法[36, 37]、结合自动峰识别的 B 样条拟合[38]、基线-吸收线整体同步拟合[1]及以局部最小值

为基线锚点的 IECM 法[39]等，分别改善了特定工况下的基线处理效果。然而，宽工况、多组分场景下基线畸变、谱线展宽与吸收峰交叠及湍流、干涉等干扰相互耦合，现有方法在精度与鲁棒性上仍难以兼顾。

针对上述问题，本文提出基于局部极值的基线分段拟合算法（piecewise baseline fitting based on local extrema，PBF-LE），并将其应用于宽波段吸收光谱 CO/CO_2混合气体分压测量。研究结果表明，该算法对基线漂移与突变噪声不敏感，反演过程无需参数标定，测量结果具有较高的可信度与精度，在工程应用场景中展现出显著优势。

2 理论分析

比尔—朗伯定律是气体吸收光谱定量分析的基本模型，它描述了光强穿过气体介质前后的衰减关系，建立了宏观光学现象与微观分子吸收之间的联系。透射光强 $I(\nu)$与入射光强 $I_0(\nu)$满足：

$$I(\nu)=I_0(\nu)e^{-\alpha(\nu)L} \tag{1}$$

式中，L 为吸收路径长度，ν 为波数，$\alpha(\nu)$为吸收系数，$I_0(\nu)$为无吸收时的入射光强（即基线）。吸收系数 $\alpha(\nu)$可表示为各组分吸收贡献的线性叠加：

$$\alpha(\nu)=\rho_i\bullet\sum_{j=\nu_{o\min}}^{\nu_{o\max}}S_{ij}\bullet\int_{\nu_{\min}}^{\nu_{\max}}\phi_{ij}d\nu \tag{2}$$

式中，ρ_i 为气体组分 i 的分子数密度；S 为组分 i 第 j 条谱线的线强度，仅与温度有关；φ 为相应的吸收线型函数，其形状由温度与压力共同决定。

在航空发动机燃烧流场、激波管等复杂环境中，高速湍流、颗粒散射与光学干涉等会使实测基线呈现不可预测的非线性畸变。将基线扰动表示为如式(3)所示的多项式模型。式中，k=0与k=1,2项分别描述基线的整体偏移及线性倾斜特征，高次项（$k\geq3$）则用于刻画基线的局部弯曲。

$$P(\nu)=\sum_{k=0}^{n_p}a_k\nu^k \tag{3}$$

计入上述基线扰动后，式(1)修正为：

$$I(\nu)=\sum_{k=0}^{n_p}a_k\nu^k\bullet I_0(\nu)e^{-\alpha(\nu)L} \tag{4}$$

参数反演的前提是准确提取吸收系数 $\alpha(\nu)$。本文提出的 PBF-LE 算法首先选取无吸收或吸收最弱的数据点作为初始基线特征点（初代特征点），特征点的选取间隔依据相邻吸收峰的分布预先设定，原则上在相邻吸收峰组之间选取一个特

征点。高压下吸收峰发生展宽与重叠时，取较小的选取间隔虽会滤除峰展宽—重叠形成的大尺度包络，但不会破坏吸收峰组特征参数的唯一性。对初代特征点作多项式拟合得到初代基线，计算各特征点相对初代基线的偏差，以偏差的均值、标准差等统计量作为筛选判据，剔除偏离过大的点后得到二代特征点。BDAS 依靠吸收峰组的整体特征参数实现反演，当峰组包含 10 条以上谱线时，个别特征点的局部提取偏差不会对反演结果产生显著影响。在此基础上引入物理约束校验：若特征点的拟合幅值低于或显著高于实测信号，则判定其违背“入射光强大于等于透射光强”的物理关系，据此修正两类典型偏差——高压下初代基线与原始光谱大范围偏离或相互重合，以及基线拟合误差造成的初代基线整体低于实测信号；最后结合实测光谱的整体趋势对基线施加二次平滑约束，进一步改善基线的物理合理性。

以分压比 R=1/1（定义见式(5)）为例，图 1 给出了总压分别为 1 atm 和 10 atm 时，CO 和 CO_2 混合气体在 6270–6410 cm^{-1}范围内基于 HITRAN2024 数据库的模拟吸收谱线及 PBF-LE 拟合结果。图中蓝色点为叠加了随机基线的模拟吸收光谱，红色点为 PBF-LE 选取的初代特征点，绿色曲线为依据修正后的二代特征点拟合得到的基线。

$$R=\frac{P_{CO_2}}{P_{CO}}=\frac{X_{CO_2}}{X_{CO}} \tag{5}$$

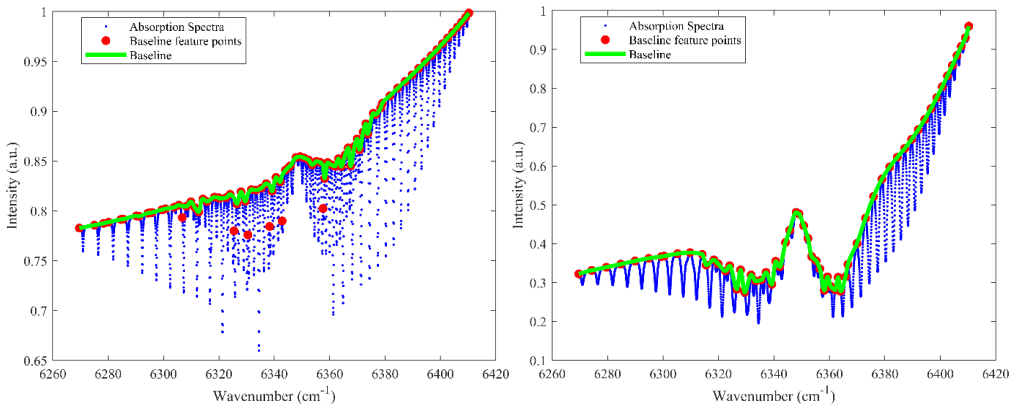


图 1 不同总压下 PBF-LE 基线拟合结果： (a) P=1atm；(b) P=10atm

Fig. 1. Baseline fitting results under different total pressures: (a) P=1atm; (b) P=10atm.

在相同温度、压力与组分浓度下，去基线后的吸收谱线应具有唯一性。图2(a)为同一吸收谱线叠加不同基线后的结果；由图2(b)可见，尽管局部区域存在偏差，不同基线条件下去基线后的吸收谱线整体高度一致。这表明PBF-LE通过

自适应特征点追踪与动态拟合，可有效抑制基线漂移对吸收信号的干扰。

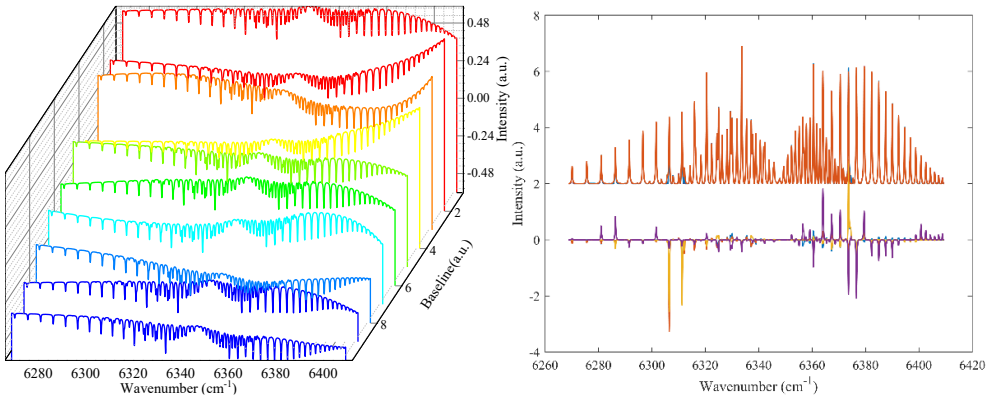


图 2 *P*=1atm，*R*=1/1 时基线反演效果 (a) 叠加不同基线的吸收谱线；(b)去基线后的吸收谱线及标准残差

Fig. 2. Baseline fitting resultsat different baselines underP=1atm and *R*=1/1 (a) Absorption spectra at different baselines; (b) spectra after baseline removal and standard residuals.

在高压（如10 atm）条件下，分子碰撞频率显著增大，谱线碰撞展宽加剧，相邻谱线相互重叠而趋于连续，如图3(a)所示。对于基于窄线宽光源的TDLAS，单根谱线难以分辨严重重叠的吸收结构，比尔—朗伯定律赖以成立的单谱线线性条件失效，易导致参数反演失败。BDAS因覆盖完整谱带，可通过宽范围的谱形特征分析规避单谱线分辨率的限制。由图3(b)可见，不同基线条件下去基线后的吸收谱线仍高度一致，说明其谱线唯一性未受压力展宽的破坏。

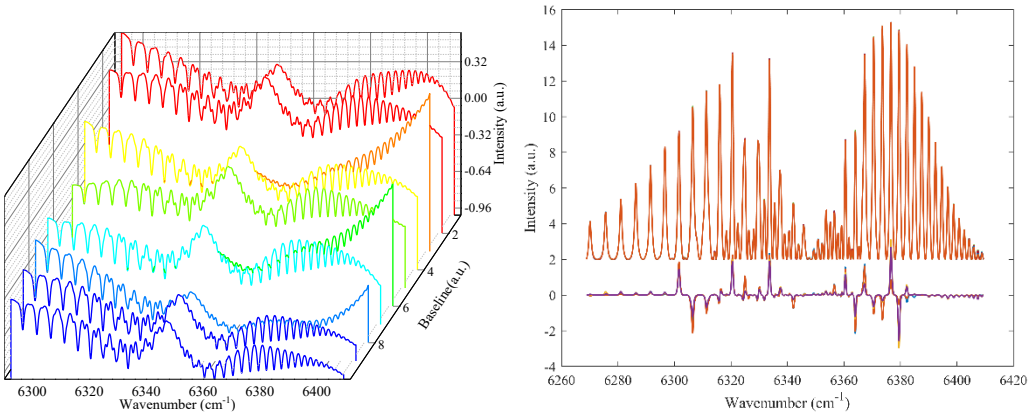


图 3 *P*=10atm，*R*=1/1 时基线反演效果 (a) 不同基线时的吸收谱线；(b)去基线后的吸收谱线及标准残差

Fig. 3. Baseline recovery results under different baselines at P=10 atm and R=1/1: (a) absorption spectra with different baselines; (b) spectra after baseline removal and standard residuals.

分压比 *R* 保持恒定、总压 *P* 不同的条件下，随机生成 100 条包含高阶畸变的光谱基线，采用 PBF-LE 算法进行基线校正后，在 1atm、5atm 和 10atm 条件下，平均相对误差分别为 0.55%、0.43% 和 0.33%，最大相对误差依次为

1.5%、2.4% 和 2.4%，如图 4 (a) 所示。PBF-LE 以一定窗口内的局部极值作为基线特征点，在谱线强度差异较大的重叠区，非线性基线可能引起个别特征点的识别偏差，如图 4(b)所示；但对于以全波段特征匹配为判据的 BDAS 反演方法，算法本身对单峰位置偏差具有较强的容差，此类局部区域的吸收峰还原误差对整体反演结果的影响可以接受。

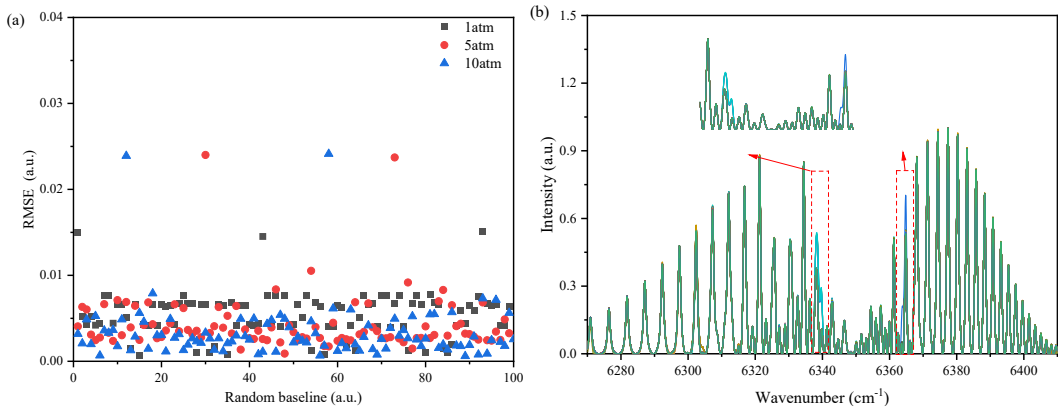


图 4　PBF-LE 去基线误差分析 (a) 不同基线下去基线后的均方根误差；(b) PBF-LE 法的误差来源

Fig. 4.　Error analysis of PBF-LE baseline removal: (a) RMSE after baseline removal for different baselines; (b) error source of PBF-LE.

与传统吸收光谱参数反演所依赖的曲线拟合方法不同，BDAS 采用基于统计特征的全局模式匹配策略，如图 5 所示。该方法将实测光谱与标准光谱数据库进行全波段多维模式比对，以整体特征的统计相似性度量代替对单一谱线的精确拟合。

相较于传统曲线拟合，该方法不再依赖个别特征峰的完整性：即使局部谱线受到噪声干扰、重叠或展宽，仍可通过全局特征向量的统计显著性分析实现可靠反演。这种特性使其在复杂噪声环境下具有更强的鲁棒性，并可通过多特征维度的联合约束提高反演结果的置信度。

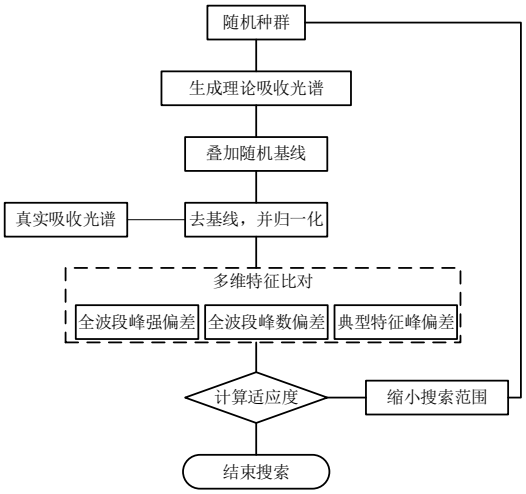


图 5 BDAS 特征匹配算法框图

Fig. 5. Block diagram of the BDAS feature matching algorithm.

图6为典型的BDAS特征匹配算法的搜索过程曲线。传统曲线拟合方法在搜索初期普遍收敛缓慢，而该方法在搜索初期即可达到工程允许的误差范围，因而更适用于对实时性要求较高的场合。随着迭代代数的增加，搜索误差按指数规律下降并逐步逼近最优解；当误差满足预设精度阈值或达到最大迭代代数时，搜索自动终止。这种分阶段收敛特性既保证了快速响应能力，又通过自适应迭代提高了最终解的精度。

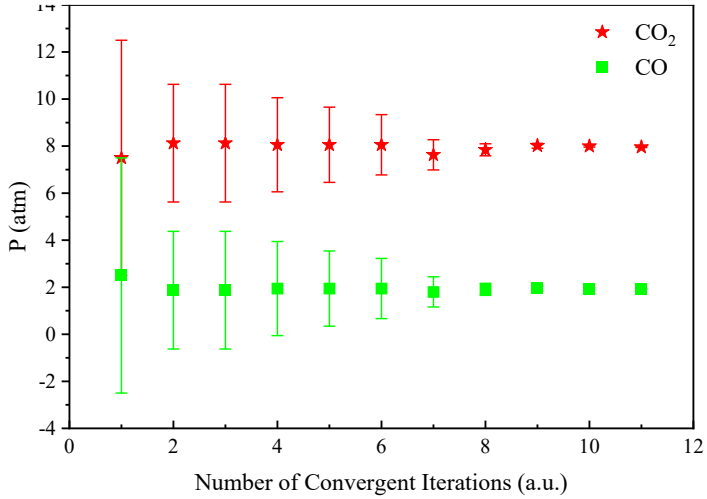


图 6 *P*=10atm，*R*=8/2 时搜索代数与搜索范围的变化趋势

Fig. 6. Search error versus iteration number at P=10 atm and R=8/2.

BDAS特征匹配算法虽具有较快的收敛速度，但当不同组分的吸收强度差异较大时，强组分信号会掩盖弱组分的吸收谱线。针对这一问题，本文采用分阶段优化策略：在算法收敛至预设代数后，先锁定强吸收组分的分压，再通过反比函数、强峰归零等方式放大弱吸收区域在适应度函数中的权重，转而搜索弱吸收组分的浓度。该策略通过降低强吸收组分在适应度函数中的权重因子、动

态收缩弱吸收组分的浓度搜索空间，有效克服了强吸收信号对弱吸收信号的非线性掩蔽。图7给出了R=0.1/9.9时搜索范围、搜索结果与迭代代数的关系。搜索初期，低浓度组分CO_2的反演结果几乎丢失有效信号，而高浓度组分CO的分压快速收敛至真值的2.5%误差范围内；实施高浓度组分分压固定策略后，低浓度组分的反演性能显著改善并重新进入有效搜索区间，至第11代时，CO_2与CO的分压绝对误差分别收敛至8.78%和1.54%。这是因为高浓度组分的强吸收信号主导了适应度函数的梯度方向，易使算法陷入局部最优；固定高浓度组分分压后，搜索空间被约束在弱吸收特征对应的子域内，搜索重心转移至低浓度组分的弱吸收区域，从而提高了低浓度组分的可检测性。

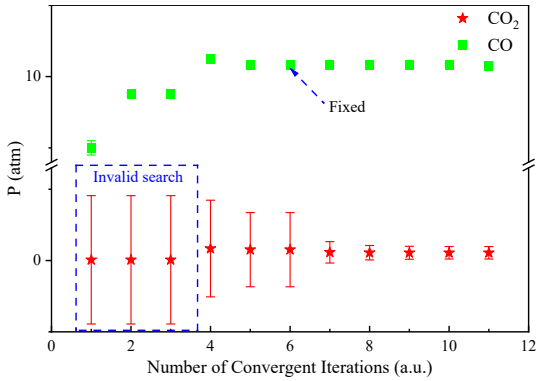


图7 *P*=10atm，*R*=0.1/9.9时，搜索范围和搜索代数之间的变化趋势

Fig. 7. Evolution of search range and search result with iteration number at P=10 atm and R=0.1/9.9

在总压 P=12 atm 条件下，配置不同分压比 *R* 开展反演精度验证。当畸变基线不含高阶分量（图 8）时，BDAS 特征匹配算法经 12 代搜索后的反演结果列于表 1。分压反演的最大绝对误差为 0.9%，平均绝对误差为 0.26%，表明该算法在低阶基线畸变下具有很高的反演精度与参数辨识能力。

表 1 低阶基线畸变反演结果

Table 1 Inversion Results of Low-Order Baseline Distortion

P (atm)	*R*	P(CO_2)		P(CO)		分压比误差 (%)
		实测值(atm)	绝对误差(%)	实测值(atm)	绝对误差(%)	
12	0/10	0.00	0.00	10.01	0.08	\
12	0.1/10	0.10	0.45	10.04	0.38	0.07
12	1/9	0.99	0.90	8.95	0.61	0.29
12	2/8	2.00	0.17	7.99	0.16	0.01
12	3/7	3.00	0.13	7.01	0.13	0.00
12	4/6	3.99	0.13	5.99	0.19	0.05
12	5/5	5.01	0.26	5.02	0.31	0.05
12	6/4	5.99	0.23	3.99	0.28	0.05

12	7/3	7.00	0.04	3.00	0.00	0.03
12	8/2	7.99	0.18	2.00	0.17	0.01
12	9/1	8.96	0.44	1.00	0.39	0.04
12	10/0	9.98	0.22	0.00	0.00	\

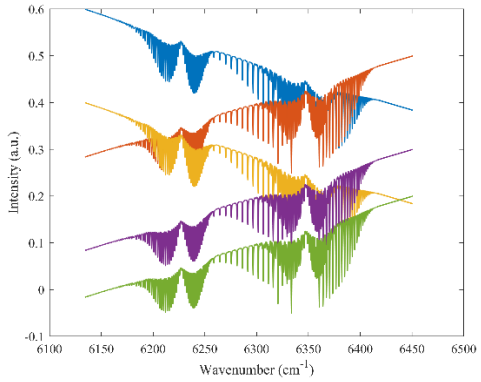


图 8 基线低阶畸变示意图

Fig. 8. Schematic Diagram of Baseline Low-Order Distortion

当畸变基线包含高阶分量 (图 9) 时，反演结果如表 2 所示。分压反演最大绝对误差为 9.33%，平均绝对误差为 3.83%。这表明该算法在复杂基线条件下仍具有良好的鲁棒性，可有效抑制基线非线性畸变与压力展宽引起的谱线重叠干扰，实现多组分分压的协同反演。

表 2 高阶基线畸变反演

Table 2 Inversion of High-order Baseline Distortion

P (atm)	*R*	$P(CO_2)$		P(CO)		分压比误差 (%)
		实测值(atm)	绝对误差(%)	实测值(atm)	绝对误差(%)	
12	0/10	0.02	1.98	10.02	0.22	\
12	0.1/10	0.10	4.34	10.02	0.15	4.48
12	1/9	0.97	3.24	8.95	0.61	2.65
12	2/8	1.85	7.32	8.14	1.77	8.93
12	3/7	3.06	1.93	6.96	0.61	2.55
12	4/6	4.03	0.85	6.07	1.12	0.27
12	5/5	4.97	0.67	4.99	0.15	0.51
12	6/4	5.95	0.86	4.03	0.86	1.71
12	7/3	6.63	5.29	2.83	5.62	0.35
12	8/2	7.48	6.50	1.85	7.31	0.88
12	9/1	8.68	3.61	0.93	6.65	3.26
12	10/0	10.93	9.33	0.00	0.00	\

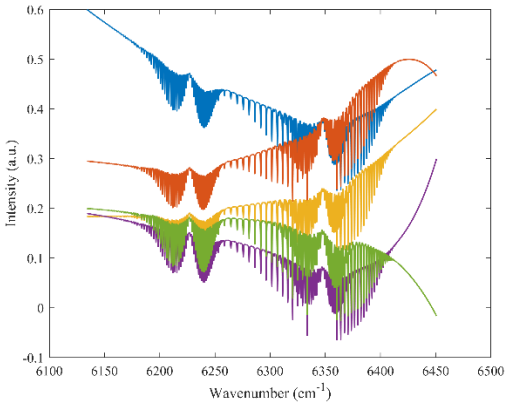


图 9 基线高阶畸变示意图

Fig. 9. Schematic Diagram of Baseline High-Order Distortion

3 实验结果

为验证上述方法的实际效果，搭建了BDAS测试平台。光源采用Santec TSL-570-C-480640-P-F-AP-00-1可调谐激光器，波长调谐范围1460-1640 nm，波长分辨率0.1 pm，信噪比90 dB；气体吸收池为GSL-1200X-HP，最高耐压4 MPa；光电探测器为PDA20CS2；数据采集系统采用NI-9224。

图10(a)中黑色曲线为296 K、1.1 atm条件下的实测吸收光谱，采用PBF-LE算法去基线后的结果如图中红色曲线所示。图10(b)为特征匹配算法反演光谱与实测光谱的对比，二者在全波段吻合良好，CO_2与CO的分压反演误差分别为4.67%和1.67%。

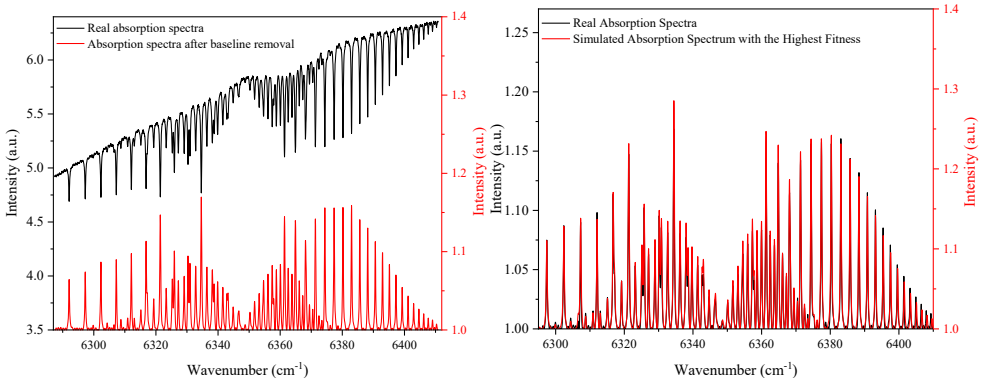


图 10 PBF-LE 在实测吸收光谱中的去基线效果：(a) 去基线前后对比；(b) 反演光谱与实测光谱对比

Fig. 10. Baseline removal effect of PBF-LE on measured absorption spectra: (a) comparison before and after baseline removal; (b) comparison between retrieved and measured spectra.

结合前述误差来源分析与实测结果，局部误差主要来自双峰混叠区域的相互干扰：谱峰重叠使基线特征点的提取存在偏差，去基线时难以将吸收信号与基线成分完全分离，如图 11(a)中 A—E 点所示。全局误差则源于基线畸变中的

高阶非线性分量会在吸收峰附近产生与真实吸收高度相似的偏移，如图 11(b)中 F、G 区域所示；此类偏移在基于信号整体趋势的去基线处理中难以完全识别，从而形成系统性的全局误差。总体而言，对于以全波段特征匹配为判据的 BDAS 方法，上述误差水平是可以接受的。

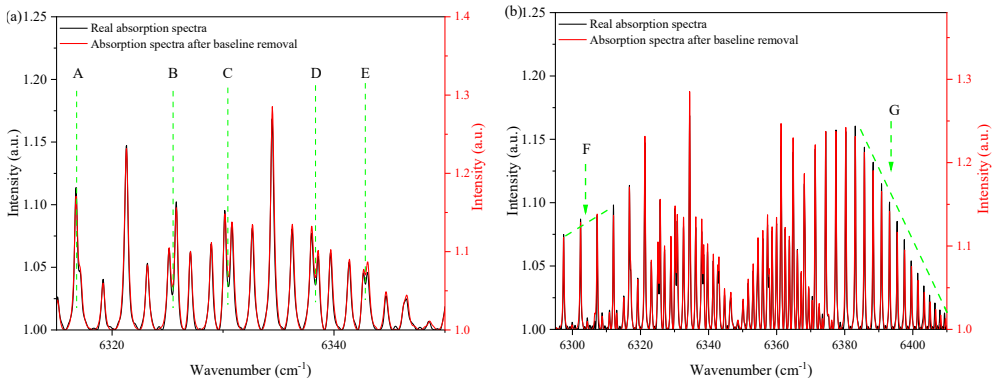


图 11 误差分析 (a) 局部误差 (b) 全局误差

Fig. 11. Error analysis(a) Local error (b) Global error

4 结　论

针对复杂环境下 CO/CO_2 混合气体分压的高精度测量需求，本文开展了基于宽波段吸收光谱（BDAS）的分压反演方法研究：提出基于局部极值的基线分段拟合算法（PBF-LE），在相邻吸收峰组间自适应选取局部极值作为基线特征点，经偏差统计筛选、入射—透射光强物理约束校验与二次平滑修正，在 1、5、10 atm 条件下对随机高阶畸变基线的去基线平均相对误差分别为 0.55%、0.43% 和 0.33%，最大误差不超过 2.4%，有效克服了湍流、干涉引起的非线性基线漂移；建立基于统计特征的全波段模式匹配反演模型，以全波段谱形的统计相似性度量替代传统单谱线曲线拟合，摆脱了对个别特征峰完整性的依赖，低阶随机基线畸变下分压反演最大绝对误差 0.9%、平均 0.26%，高阶随机畸变下最大 9.33%、平均 3.83%，在压力展宽与谱线重叠条件下仍可稳定反演；进一步提出分阶段优化策略，收敛后锁定强吸收组分分压并放大弱吸收区权重，使低浓度 CO_2反演由信号丢失收敛至 8.78%、高浓度 CO 收敛至 1.54%，在 296 K、1.1 atm 实测平台上 CO_2与 CO 的分压反演误差分别为 4.67% 和 1.67%。需指出本文尚未覆盖高温、强振动与颗粒消光的实际燃烧工况验证，且两组分浓度差异较大时低浓度组分检测限与灵敏度不足，分阶段优化后其绝对误差仍达 8.78%；强非线性高阶畸变下平均误差 3.83%、最大达 9.33%。后续研究将把方法拓展至高温变压流场，引入机器学习代理模型辅助基线提取与谱线解叠，优化搜索策略以压低弱组分检测限、缩短反演时间；并在航空发动机、激波管等真实平台上验证。

参考文献

[1] Wu H L, Wang Y M, Tao M M, Wang S, Li G H, Ye J F, Wu Z J, Wang L J 2024*Acta Photon. Sin.***53**0730001 (in Chinese) [吴昊龙, 王亚民, 陶蒙蒙, 王晟, 李国华, 叶景峰, 吴振杰, 王立君 2024 光子学报 **53**0730001]

[2] Silva S J, Arellano A F, Worden H M 2013*Geophys. Res. Lett.***40**4971

[3] Ma Z K, Cheng L M, Wang Q H, Li L Y, Luo G W, Zhang W G 2022*Energy***252**123919

[4] Xin H, Tian W, Zhou B, Wu J, Xu Z, Lu L, Wang D 2023*Fuel***332**126175

[5] Wang Z, Du Y J, Ding Y J, Peng Z M 2020*Acta Phys. Sin.***69**064204 (in Chinese) [王振, 杜艳君, 丁艳军, 彭志敏 2020 物理学报 **69**064204]

[6] Huang W, Zhang Z, Xia H, Wang Q, Sun P, Pang T, Wu B 2024*Sens. Actuators B: Chem.***417**136119

[7] Hu W, Marek E, Donat F, Dennis J S, Scott S A 2019*Proc. Combust. Inst.***37**2987

[8] Scarpelli T R, Palmer P I, Lunt M, Super I, Droste A 2024*Atmos. Chem. Phys.***24**10773

[9] Shan C, Wang W, Xie Y, Wu P, Xu J, Zeng X, Zha L, Zhu Q, Sun Y, Hu Q, Liu C, Jones N 2022*Sci. Total Environ.***851**158188

[10] Zou R, Luo G, Cao L, Jiang L, Li X, Yao H 2018*Fuel***233**480

[11] Wang S J, Gu M M, Yin S M, Zhou Z Y, Ma L H, Qi F 2024*Chin. J. Chem. Phys.***37**745

[12] Gao H, Wang Q, Lu Y, Zhang Z 2025*IEEE Sens. J.***25**443

[13] Huang W, Xia H, Zhang Z, Wang Q, Sun P, Pang T, Wu B, Yu R, Yang X, Liu X, Cai Y 2025*Anal. Chem.***97**5217

[14] Wang M R, Cai T D 2015*Acta Phys. Sin.***64**213301 (in Chinese) [王敏锐, 蔡廷栋 2015 物理学报 **64**213301]

[15] Xia H H, Kan R F, Liu J G, Xu Z Y, He Y B 2016*Chin. Phys. B***25**064205

[16] Tao B 2019*Ph. D. Dissertation*(Xi'an: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [陶波 2019 博士学位论文 (西安: 西北工业大学)]

[17] Tao B, Wang H, Zhu F, et al. 2021 (in Chinese) [陶波, 王淏, 朱峰 等 2021 基于激光吸收光谱的惰性气体 Xe 在线探测技术]

[18] Tao B, Hu Z Y, Zhang L R, et al. 2010*J. Atmos. Environ. Opt.***5**438 (in Chinese) [陶波, 胡志云, 张立荣 等 2010 大气与环境光学学报 **5**438]

[19] Cui H B 2021*Ph. D. Dissertation*(in Chinese) [崔海滨 2021 博士学位论文]

[20] Liu Y 2021*M. S. Thesis*(in Chinese) [刘宇 2021 硕士学位论文]

[21] Deng Y 2021*Ph. D. Dissertation*(in Chinese) [邓瑶 2021 博士学位论文]

[22] Ai S M, Deng H, Huang A, Xia H H, Chen C G, Kan R F, He Y B, Xu Z Y 2022*Acta Opt. Sin.***42**1830003 (in Chinese) [艾苏曼, 邓昊, 黄安, 夏晖晖, 陈楚戈, 阚瑞峰, 何亚柏, 许振宇 2022 光学学报 **42**1830003]

[23] Gao H, Yang Q, Wang Q, Zhang Z, Lu Y, Wang L 2025*Sens. Actuators B: Chem.***427**137159

[24] Zhang L W, Wang Q J, Sun P S, Pang T, Wu B, Xia H, Zhang Z R 2023*Spectrosc. Spectral Anal.***43**767 (in Chinese) [张乐文, 王前进, 孙鹏帅, 庞涛, 吴边, 夏滑, 张志荣 2023 光谱学与光谱分析 **43**767]

[25] Zhang Z R, Xia H, Dong F Z, Pang T, Wu B 2013*Opt. Precision Eng.***21**2771 (in Chinese) [张志荣, 夏滑, 董凤忠, 庞涛, 吴边 2013 光学精密工程 **21**2771]

[26] Wang Y, Nie W, Yao L, et al.*J. Atmos. Environ. Opt.*(in press) (in Chinese) [王颖, 聂伟, 姚路 等 大气与环境光学学报 (in press)]

[27] Wang Q, Sun P, Zhang Z, Cai Y, Huang W, Pang T, Wu B, Xia H, Guo Q 2023*Opt. Express***31**16770

[28] Wang Q, Sun P, Zhang Z, Pang T, Wu B, Xia H, Chen P, Cai Y, Guo Q 2025*Saf. Sci.***187**106869

[29] Wang Q, Sun P, Zhang Z, Zhang L, Pang T, Wu B, Xia H, Guo Q, Sigrist M W, Culshaw B 2022*Sens.*

*Actuators B: Chem.***369**132292

[30] Wang Q J, Sun P S, Zhang Z R, Zhang L W, Yang X, Wu B, Pang T, Xia H, Li Q Y 2021*Acta Phys. Sin.***70**144203 (in Chinese) [王前进, 孙鹏帅, 张志荣, 张乐文, 杨曦, 吴边, 庞涛, 夏滑, 李启勇 2021 物理学报 **70**144203]

[31] Selvaraj R, An K T, Vasa N J, Shiva Nagendra S M 2017*Sens. Actuators B: Chem.***249**378

[32] Qian B J, Zhang H, Yang X Y, Chang H T, Cai J 2025*J. Astronaut. Metrol. Meas.***45**95 (in Chinese) [钱宝健, 张浩, 杨鑫宇, 常海涛, 蔡静 2025 宇航计测技术 **45**95]

[33] Wang Y M, Wu H L, Tao M M, Liu Y Y, Li G H, Wang S, Ye J F 2024*Mod. Appl. Phys.***15**87 (in Chinese) [王亚民, 吴昊龙, 陶蒙蒙, 刘洋阳, 李国华, 王晟, 叶景峰 2024 现代应用物理 **15**87]

[34] Tao M M, Wu H L, Wang Y M, Wang S, Wang K, Cao H L, Ye J F 2024*Spectrosc. Spectral Anal.***44**3043 (in Chinese) [陶蒙蒙, 吴昊龙, 王亚民, 王晟, 王科, 曹慧琳, 叶景峰 2024 光谱学与光谱分析 **44**3043]

[35] Wang Y M, Wu H L, Tao M M, Li G H, Wang S, Ye J F 2023*Acta Phys. Sin.***72**224207 (in Chinese) [王亚民, 吴昊龙, 陶蒙蒙, 李国华, 王晟, 叶景峰 2023 物理学报 **72**224207]

[36] Murzyn C M, Allen D J, Baca A N, Egeln A A, Houim R W, Guildenbecher D R, Marinis R T, Welliver M C 2024*J. Appl. Phys.***135**013101

[37] Murzyn C, Allen D, Baca A, Ching M, Marinis R 2022*J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.***279**108029

[38] Blume N G, Ebert V, Dreizler A, Wagner S 2016*Meas. Sci. Technol.***27**015501

[39] Huang T, Wang R, Wang G, Mei J, Gao X, Liu K 2025*Opt. Lett.***50**411

Measurement of Partial Pressure of CO/CO_2 Mixed Gas Based on Broadband Absorption Spectroscopy

WANG Yamin[1) 2)],SHEN Tao[1)†],WU Haolong[1) 2)],WU Zhenjie[2)],TAO Mengmeng[2)††],TAO Bo[2)],YE Jingfeng[2)†††],WANG Sheng[2)],LIU Yangyang[2)]

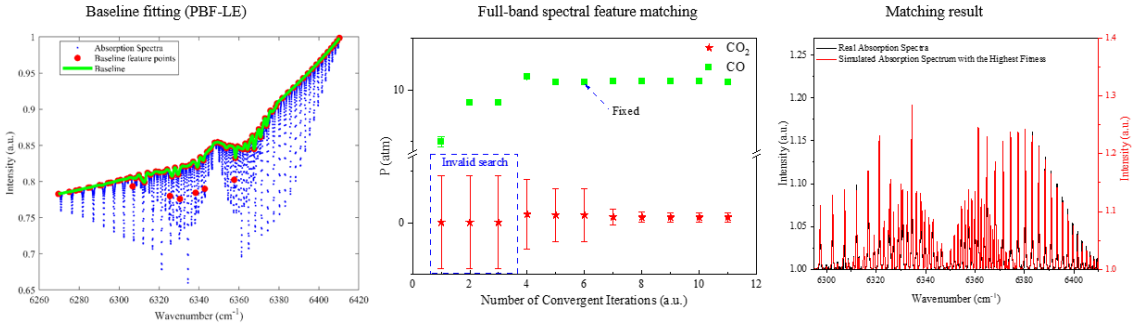
1) (PLA Rocket Force University of Engineering, Xi'an 710025, China)

2) (State Key Laboratory of Laser Interaction with Matter, Northwest Institute ofNuclear Technology, Xi'an 710024, China

CO and CO_2 are the main carbon-containing products of combustion, and accurate determination of their partial pressures (volume fractions) is of fundamental importance for combustion mechanism research and combustion process diagnostics. Conventional techniques such as electrochemical sensors, catalytic combustion analyzers and gas chromatography suffer from slow response, poor environmental tolerance and difficulty in in-situ real-time implementation, while narrow-band tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) is limited by its restricted spectral coverage and is susceptible to baseline distortion in

complex environments. In this paper, a measurement method for CO/CO_2 partial pressures based on broadband absorption spectroscopy (BDAS) is developed, featuring a piecewise baseline fitting algorithm based on local extrema (PBF-LE) combined with a full-band statistical feature matching retrieval model. PBF-LE adaptively selects local extrema between adjacent absorption peak groups as initial baseline feature points, and refines the baseline through three stages: (i) polynomial fitting followed by statistical deviation screening based on the mean and standard deviation of the residuals; (ii) physical-constraint verification ensuring that the incident light intensity is always no less than the transmitted light intensity; and (iii) secondary smoothing constrained by the overall spectral trend. For 100 randomly generated baselines containing high-order distortion, the mean relative baseline-removal errors at total pressures of 1, 5 and 10 atm are 0.55%, 0.43% and 0.33%, respectively, with maximum errors below 2.4%, effectively overcoming the nonlinear baseline drift caused by turbulence and interference. The retrieved baseline-removed spectra remain highly consistent under different baseline conditions, confirming the uniqueness of the absorption profiles. For parameter retrieval, instead of fitting individual spectral lines, a full-band pattern matching model based on statistical features is established, which compares the measured spectrum with a standard spectral database over the whole band and is therefore robust to local peak distortion, spectral line overlap and pressure broadening. Under low-order random baseline distortion at a total pressure of 12 atm, the maximum and mean absolute errors of partial-pressure inversion over a wide range of mixing ratios R (defined as the partial-pressure ratio of CO_2 to CO) from 0/10 to 10/0 are 0.9% and 0.26%, respectively; under high-order distortion they are 9.33% and 3.83%, and stable inversion is still achievable. Furthermore, a staged optimization strategy is introduced to overcome the masking of weak-absorption species by strong-absorption components: after initial convergence, the partial pressure of the strong component is locked and the weight of the weak-absorption region is amplified in the fitness function, recovering the low-concentration CO_2 retrieval from signal loss to an absolute error of 8.78% while reducing that of high-concentration CO to 1.54% (at R = 0.1/9.9, P = 10 atm). Experimental validation was carried out on a BDAS platform using a 1460–1640 nm tunable laser with 0.1 pm resolution and a gas cell rated

up to 4 MPa. At 296 K and 1.1 atm, the measured spectra processed by PBF-LE agreed well with the retrieval over the whole band, with partial-pressure retrieval errors of 4.67% for CO_2 and 1.67% for CO. The results demonstrate that the proposed method can stably retrieve CO/CO_2 partial pressures under severe baseline fluctuation and local peak distortion without calibration, providing an effective approach for the online monitoring of CO/CO_2 in complex combustion environments.



Graphical Abstract

Keywords: absorption spectrum, broadband absorption spectroscopy, different gas components, baseline distortion

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62274182，62475288), and the Key Laboratory of Laser Interaction with Matter (Grant No. SKLLIM2305) .

† Corresponding author. luckyshentao@163.com

†† Corresponding author. taomengmeng@nint.ac.cn

††† Corresponding author. yejingfeng@nint.ac.cn

The first author. 3274275104@qq.com