

УДК 517.518.8

## Моделирование оптико-акустического анализатора SF<sub>6</sub> в атмосферном воздухе с частотной модуляцией излучения теплового источника

К.Ю. Осипов, В.А. Капитанов\*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН  
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 3.04.2012 г.

Предложена простая схема оптико-акустического (ОА) газоанализатора с тепловым источником и интерференционным фильтром. В программной среде LabView проведено моделирование работы оптико-акустического анализатора при измерении содержания гексафторида серы (SF<sub>6</sub>) в атмосферном воздухе. Определены оптимальные параметры его элементов: оптико-акустической ячейки, интерференционного фильтра, источника инфракрасного излучения и микрофонов. Рассмотрено влияние основных поглощающих компонентов атмосферного воздуха на величину ОА-сигнала. Показано, что с использованием недорогих коммерческих элементов анализатора пороговый детектируемый уровень SF<sub>6</sub> в атмосферном воздухе достигает ~0,06 млн<sup>-1</sup>.

*Ключевые слова:* газоанализ, гексафторид серы, оптоакустика, LabView, тепловой источник; gas analysis, hexafluoride, optoacoustic, LabView programming, IR heat source.

### Введение

Несмотря на обилие полупроводниковых и других сенсоров для определения концентраций загрязняющих атмосферу газов, весьма перспективным является разработка новых приборов, основанных на спектроскопических методах. И одним из таких методов является метод лазерной оптико-акустической спектроскопии [1]. Лазерные оптико-акустические газоанализаторы (ЛОАГ) имеют ряд преимуществ по сравнению с другими оптическими устройствами для измерения содержания газовых примесей в составе атмосферного воздуха. Прежде всего, это высокая чувствительность по поглощению ( $10^{-7} - 10^{-9}$  см<sup>-1</sup>) и простота конструкции. Однако наличие в конструкции ЛОАГ лазерных источников обуславливает их достаточно высокую стоимость, а при использовании мощных лазеров и большое энергопотребление.

Использование в качестве излучателя теплового источника позволяет избавиться от этой проблемы, одновременно с этим сохранив высокий уровень чувствительности. Одной из наиболее успешных зарубежных разработок в этом направлении являются газоанализаторы фирмы LumaScence [2] с тепловым источником излучения. Недостатками используемой в [2] схемы являются применение метода модуляции интенсивности излучения и вытекающие отсюда проблемы измерения фонового сигнала и его зависимости от длины волны.

В настоящей статье предложена простая схема оптико-акустического газоанализатора с тепловым источником и качающимся интерференционным фильтром, позволяющим реализовать метод регистрации производных спектра поглощения.

Известно, что гексафторид серы SF<sub>6</sub> (элегаз) широко используется в высоковольтной электротехнике, в качестве основной изоляции для комплексных распределительных устройств, высоковольтных измерительных трансформаторов тока и напряжения. Особенности использования определяются его физическими свойствами: элегаз обладает высокой электрической прочностью и чрезвычайно химически инертен. По степени воздействия на организм элегаз относится к 4-му классу опасности, к которому принадлежат вещества малоопасные. Предельно допустимая концентрация (ПДК) в воздухе рабочей зоны производственных помещений 5000 мг/м<sup>3</sup> (767 млн<sup>-1</sup>).

Согласно Киотскому протоколу гексафторид серы входит в список парниковых газов. Это объясняется тем обстоятельством, что элегаз является в 22 200 раз более эффективным парниковым газом, чем CO<sub>2</sub>, в расчете на 1 кг. Он высвобождается из антропогенных источников, чрезвычайно долго сохраняется в атмосфере (средняя продолжительность жизни его молекулы 1000 лет) и является активным поглотителем инфракрасного излучения. Понятно, что концентрация SF<sub>6</sub> в атмосфере по отношению к CO<sub>2</sub> ничтожно мала (1/100 000 000) и, соответственно, парниковый эффект по сравнению с CO<sub>2</sub> меньше в 5000 раз. Однако ситуация осложняется тем, что, по данным 60 метеостанций Национального

\* Константин Юрьевич Осипов (Osipov@iao.ru); Венидикт Андреевич Капитанов (venedikt@iao.ru).

управление по океану и атмосфере США (NOAA), в последнее время отчетливо наблюдается рост мировых объемов эмиссии SF<sub>6</sub> в атмосферу. Связано это, прежде всего, с широчайшим использованием элегаза в промышленности, где неизбежны его разного рода утечки. Разработка недорогого и компактного анализатора SF<sub>6</sub> представляет собой самостоятельную актуальную задачу. В связи с вышесказанным анализ возможностей предлагаемого газоанализатора с тепловым источником был проведен на примере измерений концентрации SF<sub>6</sub>.

## ОА-газоанализатор с тепловым источником излучения

Газоанализатор с тепловым источником излучения приведен на рис. 1.

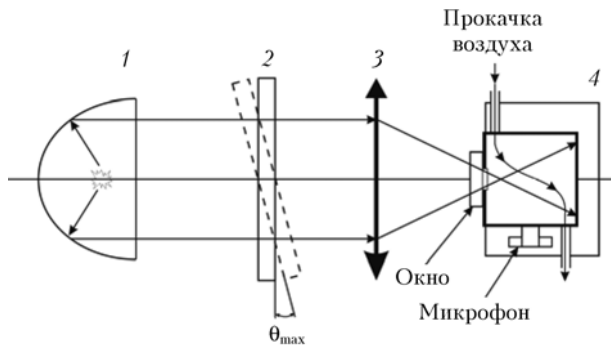


Рис. 1. Блок-схема опико-акустического газоанализатора с тепловым источником излучения: 1 – тепловой источник с параболическим отражателем; 2 – интерференционный фильтр; 3 – фокусирующая линза; 4 – опико-акустический детектор с микрофоном и с золотым покрытием внутренней поверхности

Интерференционный фильтр (ИФ) 2 выделяет узкий спектральный интервал  $\delta\nu$  излучения теплового источника 1, совпадающий с полосой спектра поглощения детектируемого газа. Излучение фокусируется линзой 3 в ячейку ОА-детектора 4, выполненную в виде цилиндра с отверстием, внутренняя поверхность которого покрыта отражающим покрытием. В боковой стенке цилиндра расположен конденсаторный или электретный микрофон. Положение ИФ изменяется с частотой  $f$  таким образом, что угол падения меняется от 0 до  $\theta_{\max}$  согласно закону

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } -\pi < 2\pi ft < 0 \\ \theta_{\max} & \text{при } 0 < 2\pi ft < \pi \end{cases} \quad (1)$$

С увеличением угла падения излучения положение максимума пропускания ИФ смещается в коротковолновую область, что приводит к частотной модуляции излучения и возможности регистрировать сигналы, пропорциональные первой, второй и т.д. производным спектра поглощения анализируемого газа.

Расчет ОА-сигналов, обусловленных поглощением модулированного по частоте или амплитуде излучения в ОА-детекторах, наиболее удобно и просто проводить с помощью метода электроакустиче-

ской аналогии [3], основанного на сходстве дифференциальных уравнений, описывающих состояния акустических систем и электрических колебательных контуров [4, 5].

В приближении оптически тонкого поглощающего слоя ( $n\sigma(\nu)L \ll 1$ ) в ячейке ОА-детектора выражение для ОА-сигнала, регистрируемого микрофоном, имеет вид [6]:

$$U(\nu_0, t) = \alpha \int_{\Delta\nu} W(\nu_0, t) [n\sigma(\nu) + \beta] d\nu, \quad (2)$$

где  $\nu = 1/\lambda$  – волновое число, м<sup>-1</sup>;  $n$  – концентрация поглощающих молекул, мол·м<sup>-3</sup>;  $\sigma(\nu)$  – сечение поглощения, м<sup>2</sup>·мол<sup>-1</sup>;  $L$  – длина ОА-ячейки, м;  $\alpha$  – чувствительность ОА-детектора, В·Вт<sup>-1</sup>·м;  $W(\nu_0, t)$  – мощность излучения, падающего на поглощающий слой, Вт;  $\beta$  – коэффициент фонового поглощения, м<sup>-1</sup>.

В случае, если ячейка покрыта отражающим покрытием с коэффициентом отражения  $R$ , излучение многократно проходит через ячейку и ОА-сигнал возрастает в  $A = \frac{1-R^m}{1-R}$  раз, где  $m$  – число отражений [4].

Согласно [4] чувствительность ОА-детектора определяется как

$$\alpha = \frac{U(\nu_0, t)}{\int_{\Delta\nu} W(\nu_0, t) \sigma(\nu) n d\nu} = R_M Z I_0, \quad (3)$$

где  $Z = \frac{\rho v_s}{2\pi f V}$  – акустический импеданс ячейки;  $I_0 = \frac{(\gamma-1)L}{2,22\rho U^2}$ ;  $\rho$  – плотность газа в ячейке, кг/м<sup>3</sup>;  $v_s$  – скорость звука, м/с;  $V$  – объем ячейки, м<sup>3</sup>;  $\gamma$  – показатель адиабаты;  $R_M$  – чувствительность микрофона, В·Па<sup>-1</sup>.

При использовании теплового источника мощность излучения, падающего на ОА-детектор, можно оценить из соотношения

$$W(\nu) = \varepsilon W_b(\nu, T) T_f(\nu, \theta) T_w, \quad (4)$$

где  $\varepsilon$  – коэффициент эффективности осветительной системы – параболического зеркала, в фокусе которого находится тепловой источник;

$$W_b(\nu, T) = \frac{2\pi h c^2 \nu^3 S}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

– функция Планка (мощность излучения черного тела площадью поперечного сечения  $S$  (м<sup>2</sup>) при температуре  $T$  в диапазоне волновых чисел  $(\nu + \Delta\nu)$ ;  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с;  $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К;  $T_w$  – пропускание окна ОА-детектора;  $T_f(\nu, \theta)$  – спектральное пропускание интерференционного фильтра;  $\theta$  – угол падения излучения на поверхность фильтра, рад;  $c$  – скорость света.

Расчет контура пропускания узкополосного ИФ возможен при наличии информации о структуре

и материалах ИФ, которая, как правило, неизвестна. Известны параметры фильтра:  $\nu_0$  – центр полосы пропускания при нормальном падении излучения на ИФ;  $\delta\nu$  – полуширина на полуввысоте;  $\tau_0$  – пропускание в центре. Достаточно хорошей аппроксимацией полосы пропускания ИФ  $T_f(\nu, \theta)$  является контур Лоренца

$$T_f(\nu, t) = \tau_0 \frac{(\delta\nu)^2}{([\nu_0 - \nu_0(\theta)] - \nu)^2 + (\delta\nu)^2}. \quad (5)$$

Смещение максимума центра полосы пропускания в зависимости от угла падения излучения на ИФ можно аппроксимировать выражением [7]:

$$\nu_0(\theta) = \nu_0 \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta}{n^*}}}, \quad (6)$$

где  $n^* = 1,7 \div 2,5$  – эффективный показатель преломления ИФ.

Учитывая (1) и (6), изменение волнового числа от частоты модуляции  $f$  и времени  $t$  можно записать:  $\nu(t) = \frac{\nu_0 + \nu_0(\theta_{\max})}{2} + \frac{2(\nu_0(\theta_{\max}) - \nu_0)}{\pi} \sin 2\pi ft + \dots$ , и сигнал ОА-детектора (2) примет вид

$$U(\nu_0, t) = \alpha \varepsilon T_w \int_{\Delta\nu} W_b(\nu, t) T_f(\nu, \theta) [n\sigma(\nu) + \beta] d\nu. \quad (7)$$

Для регистрации ОА-сигнала применен высокочувствительный метод синхронного детектирования [8], при котором в качестве аналитического сигнала регистрируется сигнал, пропорциональный  $n$ -й производной спектра. Данный метод позволяет исключить влияние фонового сигнала ( $\beta = a + b\nu(t)$ ), а также избавиться от зависимости мощности излучения теплового источника от длины волны. Сигнал, пропорциональный 2-й производной, имеет вид

$$\frac{d^2 U(\nu_0, t)}{dt^2} = \sqrt{\left( \int U(\nu_0, t) \sin(2 \cdot 2\pi ft) dt \right)^2 + \left( \int U(\nu_0, t) \cos(2 \cdot 2\pi ft) dt \right)^2}. \quad (8)$$

Кроме того, синхронное детектирование достаточно просто реализуется в электронных схемах при построении реальных приборов и устройств.

Моделирование работы ОА-газоанализатора (согласно выражениям (1)–(8)) выполнено в среде программирования LabView [9]. Рабочая панель программы представлена на рис. 2.

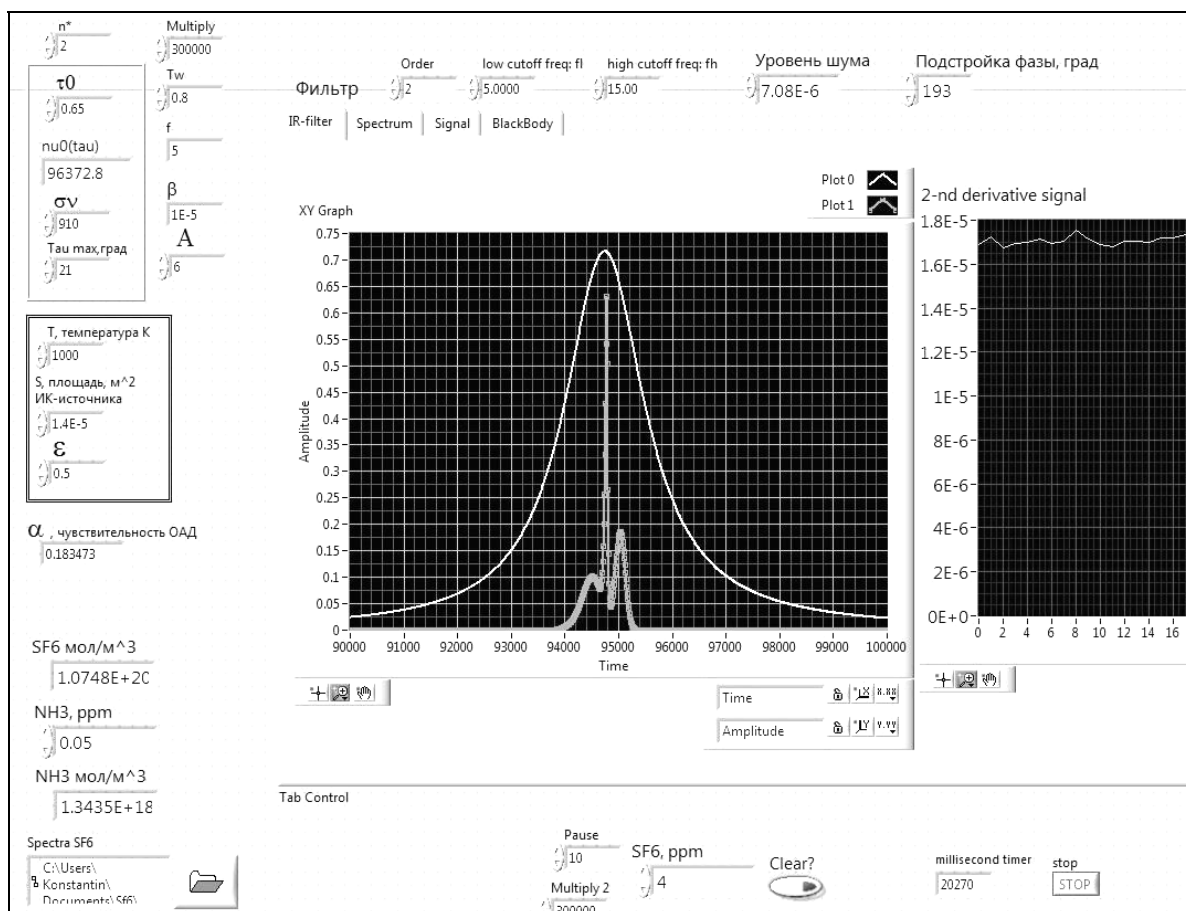


Рис. 2. Рабочая панель программы, моделирующей газоанализатор SF<sub>6</sub>. На графике в программе представлены: спектр поглощения SF<sub>6</sub> (серая кривая с точками); контур пропускания ИФ (белая сплошная линия) и сигнал, пропорциональный 2-й производной спектра (белая тонкая линия на правой панели)

В программу загружаются: спектр детектируемого газа и его концентрация, а также спектры поглощения атмосферы и interfering газов [10]. Пользователем устанавливаются параметры компонентов газоанализатора: ОА-ячейки, инфракрасного источника, интерференционного фильтра и микрофона. Также задается уровень шумов, номер регистрируемой производной и постоянная времени интегрирования. Программа рассчитывает сигнал, пропорциональный заданной производной [например, второй производной, выражение (8)], и отношение сигнал-шум, записывает его в память и отображает на графике. В программе предусмотрен режим определения оптимальных значений параметров ИФ  $\nu_0$ ,  $\delta\nu$  и  $\theta_{\max}$ .

### Моделирование работы, оптимизация и оценка пороговой чувствительности ОА-газоанализатора SF<sub>6</sub>

Конструкция ОА-ячейки газоанализатора SF<sub>6</sub> представляет собой полый цилиндр диаметром 0,01 м и длиной 0,1 м, внутренняя поверхность которого покрыта отражающим покрытием с коэффициентом отражения  $R = 0,9$ . В боковую поверхность вмонтированы микрофон фирмы Knowles [11] ( $R_M = 0,02 \text{ В} \cdot \text{Па}^{-1}$ , эквивалентный уровень шума  $\sim -103 \text{ дБ} \cdot \text{В}$ ) и патрубки для напуска и откачки анализируемой смеси. Рассчитанная чувствительность ОА-детектора составила  $\alpha = 0,1834 \text{ В} \cdot \text{Вт}^{-1} \cdot \text{м}$ . Выбранный инфракрасный источник имеет излучающую поверхность  $S = 1,4 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2$ , температуру  $T \sim 1000 \text{ К}$  и коэффициент эффективности  $\epsilon = 0,5$ .

Для определения оптимальных параметров ИФ ( $\nu_0$ ,  $\theta_{\max}$  и  $\delta\nu$ ) в программе моделирования рассчитывались семейства кривых – зависимостей сигнала, пропорционального второй производной  $\frac{d^2U(\nu_0, \theta_{\max}, \delta\nu)}{dt^2}$ , и отношения сигнал-шум для различных значений этих параметров. На рис. 3 приведены зависимости сигнала от  $\theta_{\max}$  и  $\delta\nu$ .

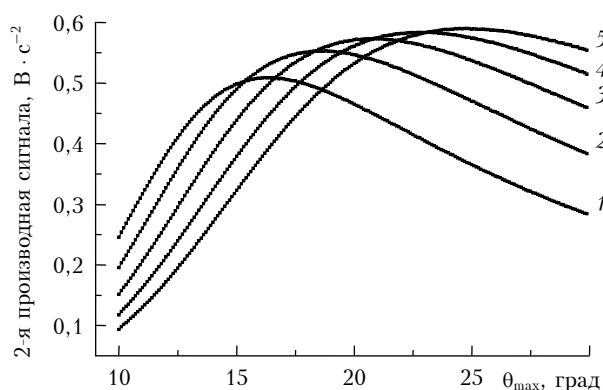


Рис. 3. Зависимости уровня сигнала от параметров ИФ:  $\delta\nu$ ,  $\text{м}^{-1}$ : 1 – 400, 2 – 600, 3 – 800, 4 – 1000, 5 – 1200

Из анализа этих зависимостей были определены оптимальные значения параметров ИФ:  $\nu_0 = 94500 \text{ м}^{-1}$ ,  $\theta_{\max} = 21^\circ$  и  $\delta\nu = 910 \text{ м}^{-1}$ .

На рис. 4 показаны концентрационная характеристика ОА-газоанализатора SF<sub>6</sub>, значение сигнала, обусловленное поглощением атмосферного воздуха, и уровень шума, обусловленный, в основном, собственными шумами микрофона.

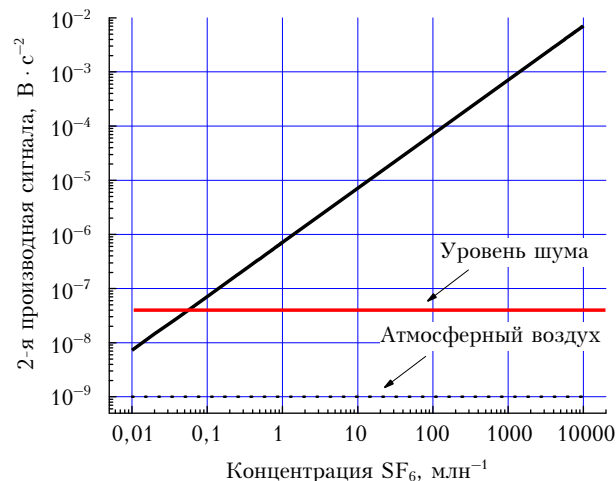


Рис. 4. Концентрационная характеристика ОА-анализатора SF<sub>6</sub>

Минимально обнаружимый предел концентрации SF<sub>6</sub>, при которой выходной сигнал газоанализатора начинает превышать уровень шумов системы ( $3 \cdot 10^{-8} \text{ В} \cdot \text{с}^{-2}$ ), составил  $\sim 0,06 \text{ млн}^{-1}$ .

Важной характеристикой газоанализаторов является его избирательность – влияние других поглощающих газов на показания газоанализатора. Нами были проведены исследования влияния атмосферного воздуха и загрязняющих примесей на показания газоанализатора. Для этого в программу наряду со спектром SF<sub>6</sub> загружаются спектры атмосферного воздуха и загрязняющих газов. Спектры синтезированы из БД HITRAN [10] с помощью информационной системы «Спектроскопия атмосферных газов» (<http://spectra.iao.ru>). Из рис. 4 видно, что уровень сигнала, обусловленный воздухом, на 1,5 порядка ниже уровня шумов системы и газовые составляющие атмосферы не оказывают влияния на регистрируемый

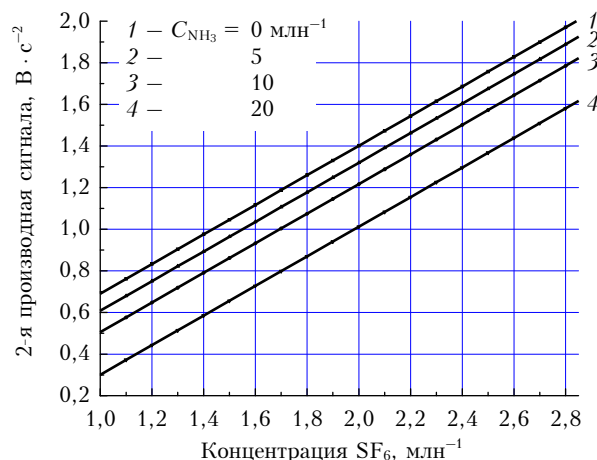


Рис. 5. Влияние аммиака на концентрационную характеристику ОА-анализатора SF<sub>6</sub>

сигнал. Из перечня основных загрязняющих газов только присутствие в составе анализируемых проб аммиака, начиная с концентрации  $1 \text{ млн}^{-1}$ , приводит к уменьшению выходного ОА-сигнала и смещению концентрационной характеристики (рис. 5).

### Заклучение

Предложенная программа моделирования оптико-акустического газоанализатора с тепловым источником позволяет определять оптимальные параметры элементов подобных устройств, ориентированных также и на другие газы, если спектр поглощения их известен. На конкретном примере показано, что регистрация сигнала, пропорционального второй производной спектра поглощения детектируемого газа, позволяет избавиться от фонового сигнала и от зависимости мощности излучения от длины волны. Определены оптимальные параметры компонентов газоанализатора  $\text{SF}_6$ , которые позволяют обеспечить минимальный порог обнаружения  $0,06 \text{ млн}^{-1}$ .

Авторы выражают благодарность А.И. Карапузикову за инициацию работы.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 10-05-00764а.

1. Пономарев Ю.Н., Азеев Б.Г., Зигрист М.В., Капитанов В.А., Куртуа Д., Никуфорова О.Ю. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия межмолекулярных взаимодействий в газах / Под ред. Л.Н. Синицы. Томск: МГП «РАСКО», 2000. 200 с.
2. LumaScence Technologies. Web site /  $\text{SF}_6$  Leak Detector 3434i. Режим доступа: <http://www.lumasenseinc.com/EN/products/gas-monitoring/gas-monitoring-instruments/sf6-leak-detector.html> свободный.
3. Сапожков М.А. Электроакустика. М.: Связь, 1978. 272 с.
4. Song K., Cha H.K., Kapitanov V.A., Ponomarev Yu.N., Rostov A.P., Courtois D., Parvitte B., Zeninari V. Differential Helmholtz resonant photoacoustic cell for spectro-

scopy and gas analysis with room-temperature diode lasers // Appl. Phys B. 2002. V. 75. P. 215–227.

5. Зенинари В., Капитанов В.А., Пономарев Ю.Н., Куртуа Д. Резонансная фотоакустическая ячейка Гельмгольца для спектроскопии слабо поглощающих газов и газоанализа // Оптика атмосф. и океана. 1999. Т. 12, № 10. С. 968–980.
6. Капитанов В.А., Катаев М.Ю., Мицель А.А., Тихомиров Б.А., Фирсов К.М. Моделирование оптико-акустического газоанализатора многокомпонентных газовых смесей с тепловым источником / Оптика атмосф. и океана. 1992. Т. 5, № 4. С. 378–387.
7. Electro optical components, inc. Web site / Infrared Optical Filters. IR Interference Filters: 1.5–20  $\mu\text{m}$ . Режим доступа: [http://www.eoc-inc.com/noc/angular\\_shift.htm](http://www.eoc-inc.com/noc/angular_shift.htm)
8. Макс Ж. Методы и техника обработки сигналов при физических измерениях: в 2 т. / Пер. с фр. М.: Мир, 1983. Т. 2. 256 с.
9. Осипов К.Ю., Капитанов В.А. Программа для моделирования и расчета оптико-акустических анализаторов газов в атмосферном воздухе с тепловым источником: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011616820, сентябрь 2011.
10. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Browen L.R., Campargue A., Champion J.-P., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Fally S., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Jacquemart D., Kleiner I., Lacome N., Lafferty W.J., Mandin J.-Y., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Miller C.E., Moazzen-Ahmadi N., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V.I., Perrin A., Predoi-Cross A., Rinsland C.P., Rotger M., Simeckova M., Smith M.A.H., Sung K., Tashkun S.A., Tennyson J., Toth R.A., Vandaele A.C., Auwera J.V. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2009. V. 110, N 9. P. 533–572.
11. Knowles Hearing Instrument Microphones. Web site [электронный ресурс] / Hearing Instrument Microphones. Режим доступа: [http://www.knowles.com/search/product.htm?x\\_sub\\_cat\\_id=1](http://www.knowles.com/search/product.htm?x_sub_cat_id=1)
12. IR sources. Web site / IR Sources. Режим доступа: <http://www.scitec.uk.com/irsources/index>

#### **K.Yu. Osipov, V.A. Kapitanov. Numerical modeling of $\text{SF}_6$ optoacoustic gas analyzer in atmosphere with frequency modulation of IR heat source.**

A simple design of optoacoustic gas analyzer with heat source and interference filter is suggested. An optoacoustic analyzer modeling was performed by LabView graphical programming interface. As an example, the measurements of hexafluoride ( $\text{SF}_6$ ) contents in atmosphere was considered. Optimal parameters of gas analyzer elements were determined: optoacoustic cell, interference filter, infrared heat source, and microphones. Effect of general air pollutants on OA signal amplitude was tested. It is shown that using low-cost commercial elements of the analyzer, the threshold hexafluoride level in atmosphere achieve, 0.006 ppm.