

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.193:543.08

О.К. Войцеховская, М.Е. Антипин

Моделирование определения общего содержания газового компонента в термодинамически неоднородных средах

Томский государственный университет

Поступила в редакцию 11.06.2002 г.

Рассмотрен способ оценки общего содержания отдельного компонента газовой среды с неоднородным температурным и концентрационным распределениями, основанный на выборе спектрального диапазона с минимальной температурной зависимостью абсолютного коэффициента поглощения. Варьирование конкретных значений формы и ширины аппаратной функции регистрирующего устройства позволяет рекомендовать наиболее оптимальные параметры приемной системы, приводящие к наименьшей погрешности определения концентрации контролируемого газа из измерений прозрачности среды. Проведено численное моделирование измерений для угарного газа, и показано, что в практически важном случае (температурное распределение лесного пожара) погрешности восстановления концентрации CO не превышают 10%.

Введение

Разнообразие спектральных распределений коэффициентов поглощения (КП) газов позволяет предлагать их использование для анализа изучаемых газовых сред. В недавней работе авторов [1] было промоделировано определение усредненной по трассе температуры неоднородной среды с помощью пирометрических измерений в спектральных участках с минимальной и максимальной температурной зависимостью КП.

В данной статье рассматривается возможность нахождения полного содержания поглощающего газа по трассе с большими градиентами температур и концентраций с оценкой соответствующей погрешности. При этом спектральный диапазон с минимальным изменением коэффициента поглощения во всем интервале вариаций температуры представляется оптимальным в качестве рабочего диапазона для решения такой задачи. Эта довольно-таки очевидная идея применительно к реальной атмосфере изучалась в [2] и позднее обсуждалась в [3] для спектров непрерывного поглощения, однако рассматриваемый диапазон температур был невелик. Экспериментально такого рода участки зарегистрированы в работах Н.И. Москаленко и др. [4] и иллюстрируются расчетами авторов (рис. 1) для интервала температур 300 – 1200 К.

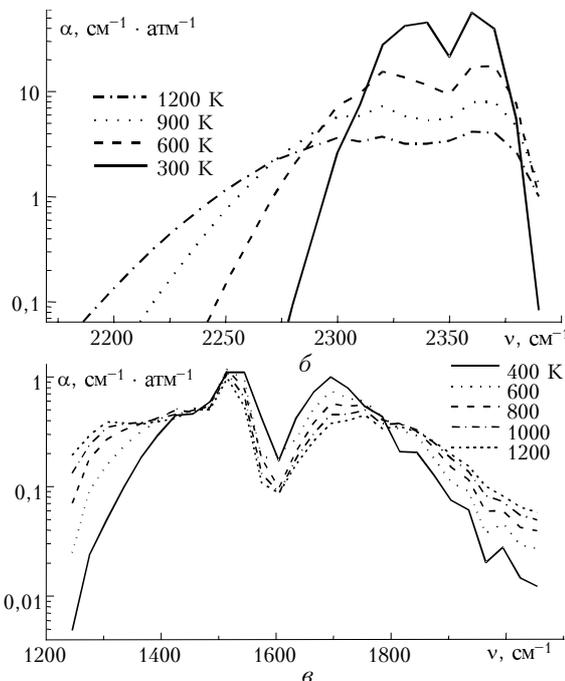
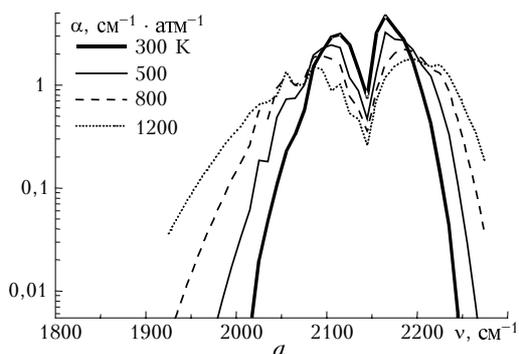


Рис. 1. Коэффициенты поглощения различных газов в диапазоне температур 300 – 1200 К: а – CO; б – CO₂; в – H₂O

В качестве исходных данных для расчетов КП использовались параметры спектральных линий оксида и диоксида углерода, водяного пара, генерируемые для широкого диапазона температур (300–3000 К) информационной системой «HOTGAS 2.0» [5].

Формальная основа определения общего содержания компонентов неоднородных газовых сред

На величину поглощения оптического излучения, регистрируемого приемным устройством, оказывает большое влияние аппаратная функция, определяемая

спектром излучателя и кривой спектральной чувствительности приемника как произведение соответствующих инструментальных функций.

Предположим, что можно выбрать такую аппаратную функцию $A(v, v')$, которая в некотором спектральном диапазоне $[v_1, v_2]$ приближенно сведет коэффициент поглощения во всем интервале температур, реализуемом вдоль оптической трассы, к константе

$$\int A(v, v') \alpha(v') dv' \cong \alpha_0(\theta, l) = \text{const}, \quad (1)$$

где $\alpha(v')$ – спектральный коэффициент поглощения; θ – кинетическая температура; l – пространственная координата вдоль оптической трассы; v – центральная частота аппаратной функции, расположенная в интервале $[v_1, v_2]$, который образован спектральными точками пересечения температурных зависимостей КП в выбранном диапазоне температур. Поскольку для реальных случаев величина интервала $[v_1, v_2]$, определенная точными расчетами функции пропускания, невелика, можно принять $v = [v_1, v_2]/2$. Пределы интегрирования определяются шириной аппаратной функции Δv , которая характеризуется стандартным определением Δv (ширина на половине пика чувствительности). Форма аппаратной функции и значение ширины могут варьироваться, что соответствует различным типам приемников или применению светофильтров в реальном эксперименте.

Предположим также, что ослабление излучения в температурно-неоднородной среде обусловлено наличием исследуемого газа и другими газами и аэрозолями, причем коэффициент поглощения последних $\tilde{\alpha}(l)$ известен и неселективен в пределах используемой аппаратной функции и слабо зависит от температуры. Это оправдано для континуального поглощения, ослабления аэрозолями и суммы далеких крыльев спектральных линий других газов. Тогда при измерении прозрачности среды прибором с аппаратной функцией $A(v, v')$ получим

$$\begin{aligned} T(v) &= \int A(v, v') \times \\ &\times \exp \left\{ - \int_L [\tilde{\alpha}(l) + \alpha(v', l) n(l)] dl \right\} dv' \neq \\ &\neq \exp(-\alpha_0 N) \tilde{T}, \end{aligned} \quad (2)$$

где L – длина оптической трассы; \tilde{T} – прозрачность рассматриваемой среды в отсутствие поглощающего газа;

$N = \int_L n(l) dl$ – общее содержание газа по трассе.

Рассмотрим случай, когда

$$\int_L \alpha(v, l) n(l) dl \ll 1 \quad (3)$$

для всех v , принадлежащих области ненулевых значений аппаратной функции, т.е. оптически тонкий слой исследуемого газа. В этом случае экспоненту в формуле (2) можно разложить в ряд и ограничиться первыми членами:

$$T(v) \cong \tilde{T} \left[1 - \int A(v, v') \int_L \alpha(v', l) n(l) dl dv' \right]. \quad (4)$$

Изменяя порядок интегрирования и учитывая (1), имеем

$$\begin{aligned} T(v) &\cong \tilde{T} \left[1 - \alpha_0 \int_L n(l) dl \right] = \\ &= \tilde{T} [1 - \alpha_0 N] \approx \tilde{T} \exp(-\alpha_0 N). \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, формально при оптически тонком слое исследуемого газа и наличии информации об ослаблении излучения другими факторами выбор аппаратной функции для диапазона температур, реализующихся на оптической трассе, дает возможность (с определенной погрешностью) оценить общее содержание исследуемого компонента непосредственно из закона Бугера.

Обсудим влияние возможных экспериментальных погрешностей на оценку общего содержания компонентов температурно-неоднородной газовой среды при выполнении условий (1) и (3) и погрешности измерений прозрачности среды с относительной ошибкой $\Delta = \Delta T/T$. Так как искомое общее содержание газа может быть найдено из соотношения

$$N = \frac{1}{\alpha_0} \left(1 - \frac{T}{\tilde{T}} \right) \quad (6)$$

при $\alpha_0 N \ll 1$, то точность результата зависит от величины \tilde{T} и определяется соотношением

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{T}{(\tilde{T} - T) - \Delta T} \Delta. \quad (7)$$

При неизвестном \tilde{T} ошибка труднопредсказуема для реального эксперимента. С наименьшей погрешностью результаты измерений можно получить в условиях максимальной прозрачности, обусловленной фоновыми факторами.

Вычислительный эксперимент по восстановлению общего содержания угарного газа в температурно-неоднородных средах

Ниже приводятся результаты численного моделирования определения концентрации угарного газа (СО) для условий среды, характерных для лесных пожаров [6] (большие градиенты температуры (300 – 1400 К) и концентраций (0,05 – 50 атм · см)). В такой

ситуации полное давление остается постоянным, что в первую очередь связано с открытостью пространства, в котором происходит процесс горения. Оценка роли вариаций давления требует иного прототипа моделируемого процесса, связанного с ограниченностью объема и, соответственно, дополнительных исследований, выходящих за рамки данной публикации.

Выбор оксида углерода в качестве определяемого газа объясняется наличием наиболее точно рассчитываемых значений параметров колебательно-вращательных линий (погрешность расчета интенсивностей линий менее 3% во всем диапазоне температур) и относительно небольшим объемом массива параметров линий. Кроме того, этот газ – один из основных продуктов сгорания и доступен для проведения реальных экспериментов.

Схема модельного эксперимента проста: источник, среда из плоскопараллельных слоев и ориентированный по нормали к плоскости слоев приемник излучения на выходе. Варьировались число слоев, температурное и концентрационное распределение. Примеры сред приведены в таблице.

Представленная на рис. 2 картина спектральной зависимости коэффициентов поглощения CO при различных температурах позволяет говорить о наличии характерных участков вблизи частот 2170 и 2210 см^{-1} с минимальной зависимостью коэффициента поглощения от температуры. Заметим, что для построения этого графика использован наиболее точный метод полинейного (line by line) счета [7].

Для этих условий простым подбором определена подходящая аппаратная функция с центром в 2189 см^{-1} ,

Результаты вычислительного эксперимента по восстановлению общего содержания CO в температурно-неоднородных средах

Исследуемая среда		Температура, K	Содержание CO, атм · см (STP)	Прозрачность среды	Исходное общее содержание CO, атм · см (STP)	Восстановленное общее содержание CO, атм · см (STP)	Отклонения, %
№ среды	№ слоя						
1	1	400	0,5	0,433	2,5	2,605	4,2
	2	800	2				
2	1	600	0,1	0,792	0,3	0,307	2,33
	2	800	0,1				
	3	1200	0,1				
3	1	600	0,1	0,647	0,8	0,876	9,5
	2	1400	0,5				
	3	800	0,2				
4	1	400	0,1	0,106	11,1	11,71	5,5
	2	1000	1				
	3	600	10				
5	1	400	0,1	0,535	1,5	1,601	6,73
	2	600	0,2				
	3	800	0,3				
	4	1000	0,4				
	5	1200	0,5				
6	1	1400	0,2	0,576	1,2	1,306	8,83
	2	1200	0,2				
	3	1000	0,2				
	4	800	0,2				
	5	600	0,2				
	6	400	0,2				

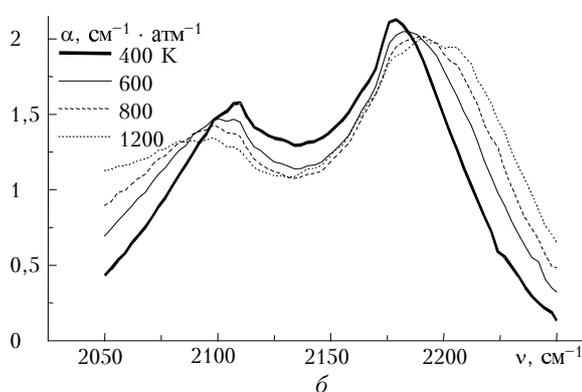
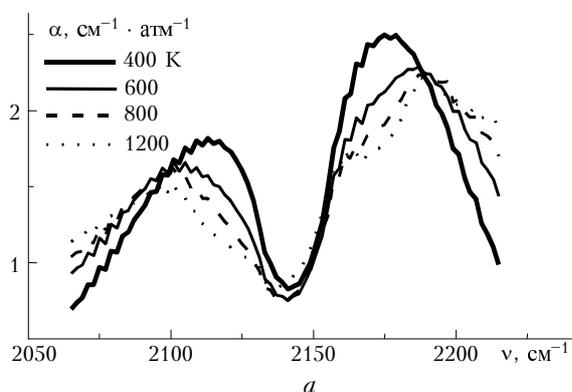


Рис. 2. Спектральные зависимости коэффициентов поглощения CO при различных температурах, рассчитанные line by line методом с дисперсионной аппаратной функцией с полуширинами: *a* – 12 см^{-1} ; *б* – 30 см^{-1}

дисперсионным профилем и полушириной 12 см^{-1} , при которой значение коэффициента поглощения CO практически не зависит от температуры.

При использовании прибора с такой аппаратной функцией измерение интегральной концентрации CO вдоль оптической трассы может быть произведено с точностью до процентов. В реальности точность будет определяться погрешностью измерения прозрачности.

К сожалению, возможности оптимизации аппаратной функции ограничены имеющимся набором фильтров и излучателей. В данном случае в качестве излучателя предлагается использовать тепловой излучатель с характеристикой близкой к абсолютно черному телу (АЧТ), т.е. штифт Нернста или глобар. Тогда аппаратная функция будет полностью определяться спектральной характеристикой фильтра. В [8] приведены данные о 700 узкополосных фильтрах с центрами в диапазоне от $1,36$ до $5,52 \text{ мкм}$ и шириной полосы на половине высоты максимума $0,05\text{--}0,1 \text{ мкм}$, что в рассматриваемом диапазоне соответствует $25\text{--}50 \text{ см}^{-1}$, т.е. значительно больше оптимальной. Проведенный расчет с полушириной 30 см^{-1} показал, что узкополосный фильтр с центром $2180\text{--}2184 \text{ см}^{-1}$ даст возможность определять по измерениям прозрачности концентрацию CO с точностью $15\text{--}30\%$, удовлетворительной для современного уровня исследований в данной области.

Отметим, что правильный выбор максимума пропускания фильтра для определения общего содержания играет более важную роль, чем выбор формы.

Проанализируем концентрационную зависимость величины $K_{\text{эф}} = \ln(T)/N$, которую назовем эффективным коэффициентом поглощения среды, определяя ее из общей функции пропускания, рассчитанной с выбранной дисперсионной аппаратной функцией с полушириной 12 см^{-1} . Основное внимание уделялось поиску границ динамического диапазона оптических толщ, в котором использование указанной аппаратной функции приводит к минимизации температурной зависимости эффективного коэффициента поглощения.

Приведенные на рис. 3 зависимости эффективного коэффициента поглощения от температуры позволяют утверждать, что измерение прозрачности среды

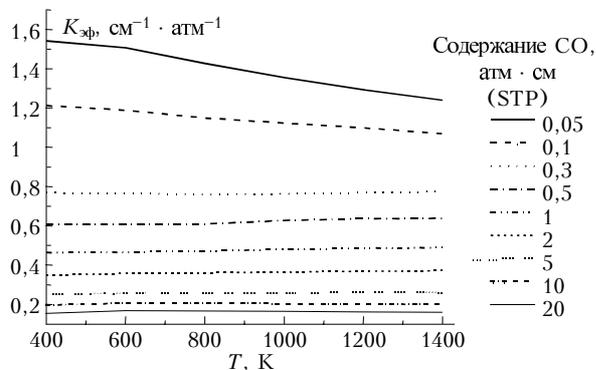


Рис. 3. Зависимость эффективного коэффициента поглощения, рассчитанного с дисперсионной аппаратной функцией с полушириной 12 см^{-1} , от температуры при различном общем содержании CO

с указанной аппаратной функцией дает возможность оценить значение общего содержания CO с точностью до 10% при температурных вариациях в среде в пределах $400\text{--}1400 \text{ К}$ и общем содержании поглощающего газа вдоль оптической трассы в пределах $0,05\text{--}20 \text{ атм} \cdot \text{см}$ (STP).

Зависимость логарифма прозрачности (рис. 4) от общего содержания является номограммой для определения последнего из измерений пропускания газовой средой оптического излучения с указанной аппаратной функцией. При ее построении использовались усредненные по температуре значения эффективного коэффициента поглощения.

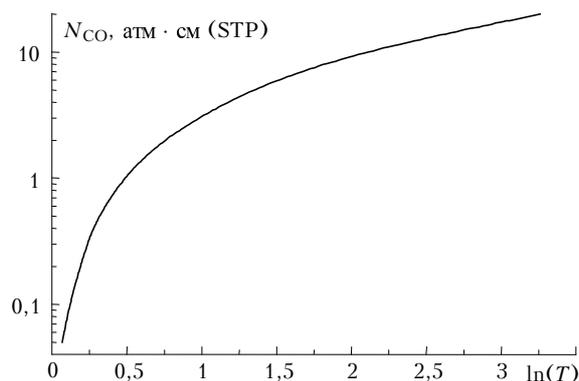


Рис. 4. Связь общего содержания CO с натуральным логарифмом прозрачности среды, измеренной прибором с дисперсионной аппаратной функцией с полушириной 12 см^{-1}

Для тестирования предложенного способа оценки общего содержания газов в температурно-неоднородных средах проведен вычислительный эксперимент на примере однокомпонентной среды угарного газа. Прозрачность стратифицированной неоднородной среды рассчитывалась line by line методом, и рассчитанные значения функции пропускания использовались в качестве исходных данных для определения общего содержания CO вдоль оптической трассы (рис. 4). Результаты моделирования и восстановления приведены в таблице. Как и ожидалось, рост градиента температур и увеличение содержания газов приводят к возрастанию ошибки определения полного содержания контролируемого вещества, но позволяют сделать заключение о возможности применения указанного подхода к анализу общего содержания газов при существенной термодинамической неоднородности сред.

Вместе с тем расчеты показывают, что условие (3) не является строгим и его выполнение лишь минимизирует погрешность определения концентрации. Так, например, для второго варианта среды из таблицы погрешность составляет менее 3% .

Заключение

Предлагаемая вниманию публикация посвящена поиску подходов к решению обратных задач оптики неоднородных газовых сред с большими градиентами

температур и концентраций газовых компонентов с целью построения их пространственного распределения. Несмотря на трудности, в последнее время эта тематика привлекает исследователей своей актуальностью, поскольку уровень обработки дистанционных измерений оптических характеристик пожаров, извержений вулканов, выбросов промышленных предприятий требует повышения точности определяемых характеристик среды и развития соответствующего математического аппарата.

Данная работа является еще одним шагом в этом направлении и поддержана грантами РФФИ (рег. № 01-01-00770 и 98-03-03003).

1. Антипин М.Е., Войцеховская О.К. Исследование спектральных характеристик теплового излучения нагретой газовой среды для дистанционного определения ее температуры // Изв. вузов. Физ. 2001. № 4. С. 3–8.
2. Войцеховская О.К., Макушкин Ю.С., Маричев В.Н., Мицель А.А., Самохвалов И.В., Соснин А.В. К вопросу

лазерного зондирования водяного пара атмосферы резонансным методом // Изв. вузов. Физ. 1977. № 1. С. 62–70.

3. Несмелова Л.И., Родимова О.Б., Творогов С.Д. Спектроскопическое определение концентрации атмосферных газов по измерениям в крыльях полос // Оптика атмосф. 1988. Т. 1. № 3. С. 16–19.
4. Кондратьев К.Я., Москаленко Н.И. Тепловое излучение планет. Л.: Гидрометеониздат, 1977. 263 с.
5. Войцеховская О.К., Пешков А.А., Тарасенко М.М., Шелудяков Т.Ю. Информационная система для расчетов спектральных характеристик нагретых газов CO₂ и H₂O (HOTGAS 2.0) // Изв. вузов. Физ. 2000. № 8. С. 43–51.
6. Гришин А.М. Математическое моделирование лесных пожаров и новые способы борьбы с ними. Новосибирск: Наука, 1992. 402 с.
7. Зуев В.Е. Распространение видимых и инфракрасных волн в атмосфере. М.: Сов. радио, 1970. 496 с.
8. Шоль Ж., Марфан И., Мюни М., Торель П., Комбет П. Приемники инфракрасного излучения. М.: Мир, 1969. 283 с.

О.К. Voitsekhovskaya, М.Е. Antipin. Modeling of determination of the gas component total content in thermodynamically inhomogeneous media.

The way of estimation of the separate component total content in a thermodynamically inhomogeneous gas mixture based on minimization of the spectral temperature dependence of the absolute absorption coefficient by choice of the form and width of instrumental function of a recording device is considered. Numerical modeling of measurements for charcoal gas is carried out, and it is shown that in a practically important case (temperature distribution of a forest fire) the error of concentration restoration does not exceed 10%.