Точность многочастотной лазерной диагностики продуктов сгорания углеводородных топлив: учет ударного сдвига центров линий поглощения молекул CO_2

К. И. Аршинов[1], В. В. Бобровский[1], О. Н. Крапивная[1], В. В. Невдах[2]

[1]*Институт технической акустики НАН Беларуси, Витебск;*
e-mail: itaaki@yandex.ru
[2]*Белорусский Национальный технический университет, Минск*

Проанализировано влияние ударного сдвига центра контуров линий поглощения молекул CO_2 на точность определения парциального давления диоксида углерода и его температуры методом многочастотного лазерного зондирования продуктов сгорания углеводородных топлив с помощью перестраиваемого CO_2 лазера. Установлено, что с ростом температуры продуктов сгорания топлив снижается точность определения парциального давления CO_2 и температуры.

Ключевые слова: диоксид углерода, CO_2 лазер, ударный сдвиг центра контура, фойгтовский контур спектральной линии.

Введение

Эффективность сжигания углеводородных топлив может быть оценена по уровню концентрации какого-либо из продуктов сгорания (H_2O, CO, NO_x, CO_2 и др.) и температуре газа в атмосфере вблизи факела пламени, которые могут быть получены с помощью различных оптических методик диагностики [1]. Методика многочастотного лазерного зондирования продуктов сгорания с помощью перестраиваемого CO_2 лазера позволяет определить парциальное давление диоксида углерода и его температуру, используя в качестве входных данных спектральное распределение ненасыщенных коэффициентов поглощения (КП). В этой методике эти величины находятся одновременно методом наименьших квадратов из избыточной системы уравнений для КП на линиях генерации CO_2 лазера [2]. Точность решения такой обратной задачи (ОЗ) зависит от корректности записи выражений для КП. В рассматриваемом случае молекулы CO_2 входят в состав высокотемпературной газовой смеси, находящейся при атмосферном давлении. В таких условиях происходит уширение линий поглощения молекул CO_2 и сдвиг их центров. Основными механизмами уширения линий поглощения являются эффект Доплера и столкновения частиц газов, которые учитываются при использовании контура Фойгта в выражениях для КП.

Целью данной работы является выяснение влияния ударного сдвига центра контуров линий поглощения молекул CO_2 на точность определения парциального давления диоксида углерода и его температуры методом многочастотного лазерного зондирования продуктов сгорания углеводородных топлив с помощью перестраиваемого CO_2 лазера.

Ударный сдвиг центров линий поглощения CO_2

Источником зондирующего излучения служит перестраиваемый CO_2-лазер низкого давления, стабилизируемый по максимуму контура усиления. В этом случае можно считать, что генерация излучения осуществляется на центральных частотах спектральных линий лазерных переходов молекул CO_2. Тогда как контур линий поглощения диагностируемых молекул CO_2 испытывает уширение и сдвиг центра линий давлением. Уменьшение значения форм-фактора из-за сдвига вносит свой вклад в результирующую погрешность решения ОЗ.

Выражение для фойгтовского контура линий поглощения, полученного с помощью квадратуры Гаусса-Кристоффеля, имеет вид [3]:

$$F(\nu-\nu_0)=\frac{e}{\sqrt{\pi^3}}\sum_{k=-3}^{k=3} w_k \frac{(\Delta\nu_L+\Delta\nu_D/\sqrt{\ln 2})\cos(2\xi_k)-(\nu-\nu_0-\xi_k\,\Delta\nu_D/\sqrt{\ln 2})\sin(2\xi_k)}{(\nu-\nu_0-\xi_k\,\Delta\nu_D/\sqrt{\ln 2})^2+(\Delta\nu_L+\Delta\nu_D/\sqrt{\ln 2})^2}, \quad (1)$$

где $\xi_k=-\xi_k$ (k = 1: $\xi_1=0$; k = 2: $\xi_1=\xi_2=1/\sqrt{2}$; k = 3: $\xi_1=\xi_3=\sqrt{3/2}$, $\xi_2=0$) – узлы полиномов Эрмита; w_k (k = 1: $w_1=\sqrt{\pi}$; k=2: $w_1=w_2=\sqrt{\pi}/2$; k=3: $w_1=w_3=\sqrt{\pi}/6$, $w_2=2\sqrt{\pi}/3$) – весовые коэффициенты Кристоффеля [4]; $\Delta\nu_D=2\nu_0\sqrt{\frac{2\ln 2k_BT}{mc^2}}$, $\Delta\nu_L=\gamma_{CO_2-CO_2}(\frac{T_c}{T})^n(p_{CO_2}+\sum_i\beta_{M_i}\cdot p_{M_i})$ – доплеровская и лоренцевская составляющие ширины линии поглощения CO_2 на полувысоте, $\gamma_{CO_2-CO_2}$ – коэффициент ударного самоуширения, β_{M_i} – относительные коэффициенты ударного уширения линий CO_2 буферными газами M_i [2].

Лоренцевский контур описывается выражением:

$$F_L=\frac{\Delta\nu_L}{\pi[(\nu-\nu_0-\delta)^2+(\Delta\nu_L)^2]}, \quad (2)$$

где $\delta=\delta^0\cdot p$ – сдвиг центров линий поглощения, δ^0 – удельный сдвиг, p – давление смеси.

Результаты расчетов

Расчеты вариаций фойгтовского форм-фактора осуществлялись для линии R22 колебательного перехода 10^00-00^01 в газовой смеси CO_2:N_2 = 1:6.6 при атмосферном давлении в температурном диапазоне 300–2000 К. Рассчитанные лоренцевский и фойгтовский контура для газовой смеси CO_2:N_2 при температуре T = 1000 К и максимально возможным сдвигом $\delta=-2\cdot10^{-3}$ см$^{-1}$ [5] представлены на рис. 1. Предварительно были рассчитаны спектральные КП с наложением 5 % гауссова шума ($\Delta\alpha=0.05\alpha_{min}$).

На рис. 2 представлена температурная зависимость снижения форм-фактора ρ, вызванного сдвигом, относительно его максимального значения. Расчет параметра ρ осуществлялся, используя данные рис. 1. Из рис. 2 видно, что при повышении температуры газа от 300 К до 2000 К снижение значения форм-фактора увеличивается на порядок. Наличие ударного сдвига центра линий поглощения молекул CO_2 в газовой смеси при атмосферном давлении в температурном диапазоне 300–1500 К ведет к снижению значения форм-фактора, описываемого функцией Фойгта, не более чем на 0.7 % его максимума.

Результаты решения обратной диагностической задачи показали, что такой ударный сдвиг центра фойгтовского контура в газовой смеси CO_2:N_2 при T = 1000 К приводит к повышению относительной погрешности определения давления на 0.48 % и температуры на 0.31 %. При больших температурах эти величины возрастают. Например, при T = 2000 К они составляют уже 2.6 % и 1.25 %, соответственно.

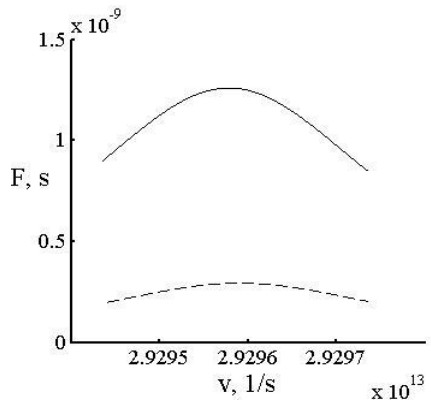

Рис. 1. – Контуры линии R22 колебательного перехода 10^00-00^01 молекулы CO_2: – – – лоренцевский, —— фойгтовский; T = 1000 К.

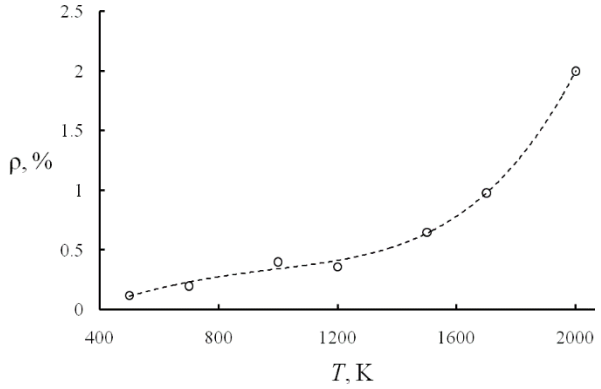

Рис. 2. – Температурная зависимость относительного снижения форм-фактора ρ, вызванного сдвигом центра линии R22 колебательного перехода 10^00-00^01 CO_2.

Заключение

Наличие ударного сдвига центра линий поглощения молекул CO_2 в газовой смеси при атмосферном давлении в температурном диапазоне 300–2000 К ведет к снижению значения форм-фактора, описываемого функцией Фойгта. Учет дополнительной погрешности методики многочастотной лазерной диагностики из-за сдвига центра линий поглощения CO_2 обязателен, если температура продуктов сгорания топлив превышает 1500 К.

Литература

1. Демтредер В. Лазерная спектроскопия: Основные принципы и техника эксперимента: Пер. с англ. / Под ред. И. И. Собельмана. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1985. 608 с.
2. Аршинов К. И., Крапивная О. Н., Невдах В. В. Лазерная диагностика равновесной газовой смеси CO_2:N_2. Оптика атмосферы и океана. 2014. Т. 27, № 05. С. 387–391.
3. Герцев М. Н. Восстановление сечений молекулярного поглощения излучения из базы данных HITRAN. Препринты Института прикладной математики им. М. В. Келдыша. 2016. № 19. 22 с.
4. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука. 1978. 512 с.
5. Агалаков Ю. Г., Буланин М. О., Берцев В. В., Бурцев А. П., Рубинов Ю. А. Обнаружение сдвига частот колебательно-вращательных переходов молекул CO_2 под действием буферного газа. Оптика и спектроскопия. 1985. Т. 58, вып. 3. С. 493–495.

Accuracy of multi-frequency laser diagnostics of combustion products of hydrocarbon fuels: accounting for the shock shift of the centers of the absorption lines of CO_2 molecules

K.I. Arshinov[1], V.V. Bobrovsky[1], O.N. Krapivnaya[1], V.V. Nevdakh[2]

[1]*Institute of Technical Acoustics of NAS of Belarus, Vitebsk; e-mail: itaaki@yandex.ru*
[2]*Belarusian National Technical University, Minsk*

The influence of the shock shift of the center of the contours of the absorption lines of CO_2 molecules on the accuracy of determining the partial pressure of carbon dioxide and its temperature by the method of multi-frequency laser probing of the combustion products of hydrocarbon fuels using a tunable CO_2 laser is analyzed. It is established that with an increase in the temperature of the fuel combustion products, the accuracy of determining the partial pressure of CO_2 and temperature decreases.

Keywords: carbon dioxide, laser, absorption coefficient, Voigt contour of the line.