

**КОНФЕРЕНЦИЯ С**  
**ИССЛЕДОВАНИЕ АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА**  
**ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И КОНЦЕНТРАЦИИ ГАЗОВ  
МЕТОДОМ АППРОКСИМАЦИОННЫХ ПОЛИНОМОВ НА ПРИМЕРЕ  
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО CO<sub>2</sub>

О.К. Войцеховская, О.В. Егоров, Д.Е. Каширский, Н.М. Емельянов

Кафедра квантовой электроники и фотоники, Радиофизический факультет, Национальный  
исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

vok44@mail.tsu.ru, egorovolegv@mail.ru, kde@mail.tsu.ru, nikita.emelyanov.92@mail.ru

**Ключевые слова:** углекислый газ, высокая температура, парциальное давление, спектр поглощения

**Аннотация.** В статье рассматривается метод аппроксимационных полиномов для одновременного определения температуры и концентрации нагретого газа из его спектральных характеристик. Точность нахождения экспериментальных значений термодинамических параметров повышена за счёт использования произвольного количества ( $\geq 2$ ) спектральных центров и учёта погрешности измерения функции пропускания. Апробация усовершенствованной методики осуществлена с применением наиболее точных измерений функции пропускания углекислого газа в интервале температуры 500 – 1770 К и парциального давления  $p_{\text{CO}_2} = 0,17 - 1$  атм.

Для регистрации спектров поглощения (излучения) газов и аэрозолей, образующихся при сгорании топлив в двигателях наземных и воздушных транспортных средств, заводов и фабрик применяются дистанционные оптические методы, например, [1–4]. На основе этого возможен дистанционный анализ процесса работы двигателей, так как спектры выхлопных газов зависят от типа топлива, условий его сгорания и технического состояния двигателя.

Ранее авторами настоящей работы предложен метод одновременного определения  $\theta$  и  $\rho$  путём решения системы нелинейных алгебраических уравнений, представленных аппроксимационными полиномами теоретических значений измеряемой спектральной характеристики [5–7]. При апробации методики система уравнений содержала два уравнения, так как этого достаточно для нахождения двух неизвестных величин. Однако двух уравнений оказывается не всегда достаточно для однозначного решения системы, так как близкие по величине значения спектральной характеристики могут достигаться при различных комбинациях температуры  $\theta$  и парциального давления  $\rho$ .

Результаты данной работы во многом стимулированы появлением кюветных измерений функции пропускания высокотемпературного углекислого газа (CO<sub>2</sub>) с погрешностью до 5 % при  $\theta = 500 - 1770$  К и  $\rho = 0,17 - 1$  атм [8]. Это позволяет оценить максимально достижимую точность методики на примере газа CO<sub>2</sub>.

При выборе спектральных центров CO<sub>2</sub>, на которых в дальнейшем проводился расчёт функции пропускания учитывалось согласие между теоретическими и экспериментальными

значениями пропускания в пределах погрешности измерения. Из рисунка 1 видно, что имеются расхождения, превышающие 5 %.

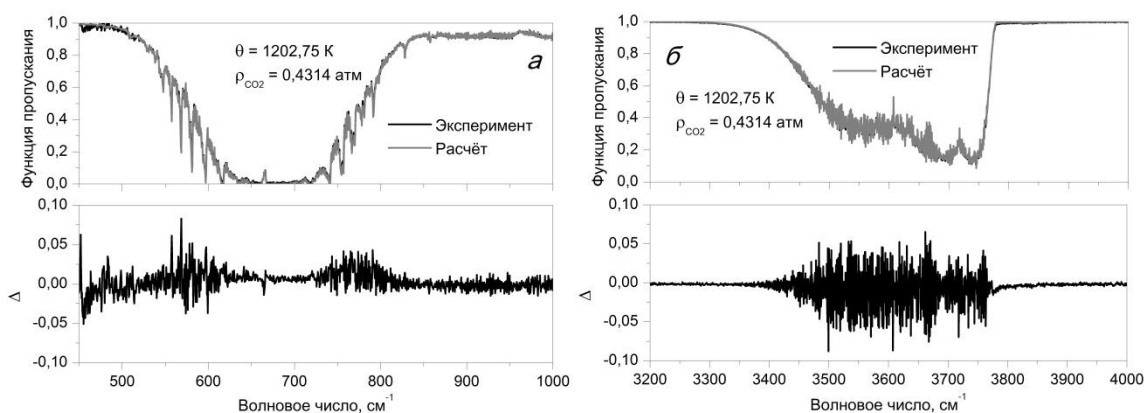


Рисунок 1 – Функция пропускания газа CO<sub>2</sub> в сравнении с измеренными значениями [8] в спектральных интервалах 450 – 1000 см<sup>-1</sup> (а) и 3200 – 4000 см<sup>-1</sup> (б): Δ – отклонение расчётных значений от экспериментальных

При расчёте теоретических зависимостей функции пропускания для спектрального интервала 450 – 1000 см<sup>-1</sup> температура и концентрация CO<sub>2</sub> изменялись от 500 К до 1800 К с шагом 100 К и от 0,1 атм до 1 атм с шагом 0,1 атм (140 комбинаций θ и ρ). Во втором выбранном спектральном интервале – 3200 – 4000 см<sup>-1</sup> минимальная температура была равна 800 К, так как в этом случае не рассматриваются условия измерения при θ = 500,15 К (110 комбинаций θ и ρ). Максимальная ошибка аппроксимации теоретических значений функции пропускания CO<sub>2</sub> не превысила 2 %, а средняя ошибка оказалась менее 0,2 % при максимальной степени полинома равной четырём.

Особенность настоящей работы заключается в использовании произвольного числа спектральных центров в системе уравнений при нахождении θ и ρ. Из результатов расчётов следует, что увеличение спектральных центров существенно (более чем в два раза) повышает точность решения обратной задачи (рисунок 2). Для случая спектрального интервала 3200 – 4000 см<sup>-1</sup> среднее относительное отклонение удалось снизить до 0,17 % по концентрации и 0,10 % по температуре. Как показали расчёты, дальнейшее увеличение числа спектральных центров из доступных в интервале 450 – 1000 см<sup>-1</sup> изменяет точность определения θ и ρ не более чем на 0,1 % как в положительную, так и в отрицательную сторону, что связано с однотипностью температурной зависимости функции пропускания для них.

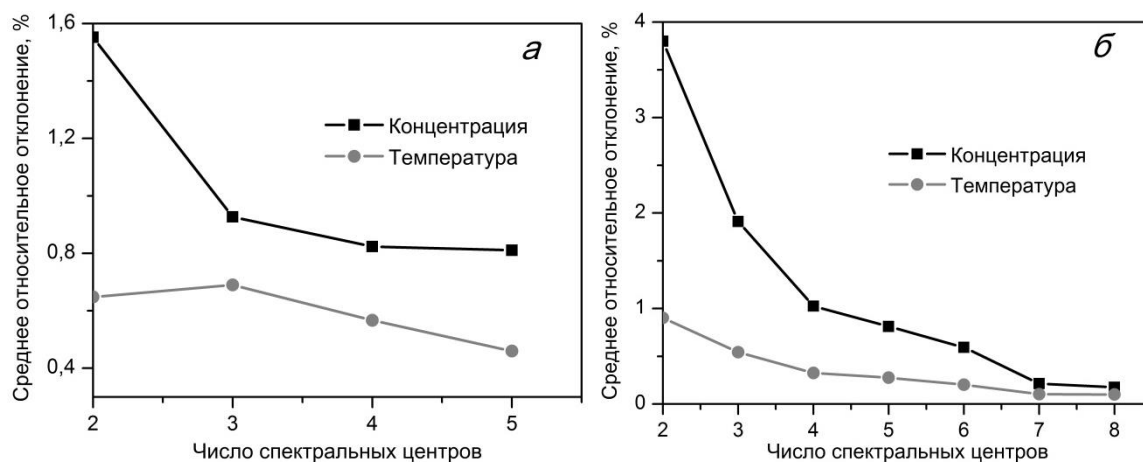


Рисунок 2 – Зависимость ошибки определения температуры и концентрации газа CO<sub>2</sub> от числа спектральных центров в интервалах 450–1000 см<sup>-1</sup> (а) и 3200–4000 см<sup>-1</sup> (б)

В случае спектрального интервала 3200 – 4000 см<sup>-1</sup> относительное отклонение расчётных  $\theta$  и  $\rho$  от экспериментальных не превышает 1,2 % и 2,4 %, когда экспериментальные значения функции пропускания берутся как в [8] (таблица 1). При аналогичных условиях максимальные относительные отклонения в случае спектрального интервала 450 – 1000 см<sup>-1</sup> приходятся на первое условие измерения функции пропускания CO<sub>2</sub> авторами работы [8] ( $\theta_{\text{эксп.}} = 500,15$  К и  $\rho_{\text{эксп.}} = 1$  атм), что связано с наибольшими отклонениями теоретической функции пропускания CO<sub>2</sub>, рассчитанной на основе HITRAN2010 [9], от экспериментальной.

Таблица 1 – Результаты определения экспериментальных значений температуры и концентрации CO<sub>2</sub>

$\theta_{\text{эксп.}}, \text{ К}$	$\rho_{\text{эксп.}}, \text{ атм}$	450–1000 см <sup>-1</sup>				3200–4000 см <sup>-1</sup>			
		1		2		1		2	
		$\delta_{\theta}, \%$	$\delta_{\rho}, \%$	$\delta_{\theta}, \%$	$\delta_{\rho}, \%$	$\delta_{\theta}, \%$	$\delta_{\rho}, \%$	$\delta_{\theta}, \%$	$\delta_{\rho}, \%$
500,15	1,000	19,59	22,54	0,48	0,44	-	-	-	-
1202,75	0,4314	3,76	1,19	0,59	0,46	1,19	1,60	0,02	0,12
1770,75	0,1729	13,66	8,11	0,22	1,53	0,03	1,16	0,43	0,15
1770,75	0,4314	5,22	1,08	0,01	0,20	0,04	2,36	0,13	0,34
1770,75	0,6903	3,54	0,51	0,54	0,07	0,37	1,99	0,08	0,08
1770,75	1,000	1,22	1,01	0,17	0,05	0,22	1,60	0,10	0,02

Результат под номером 2 в таблице 1 получен варьированием экспериментальной функции пропускания CO<sub>2</sub> в пределах погрешности её измерения 5 % и соответствует

идеальному случаю, когда отклонение экспериментальных значений от теоретических не более 1 %. Для этого варианта максимальная ошибка усовершенствованного метода аппроксимационных полиномов не превышает 0,43 % по температуре и 0,34 % по концентрации в спектральном интервале 3200 – 4000 см<sup>-1</sup> и принимает значения 0,59 % и 1,53 % соответственно в спектральном интервале 450 – 1000 см<sup>-1</sup>.

Работа поддержана РФФИ (рег. № 15-01-03176) и стипендиями Президента Российской Федерации (СП-1766.2015.5 и СП-2547.2016.1).

1. Ludwig C.B., Malkmus W., Reardon J.E., et al. Handbook of infrared radiation from combustion gases. Technical Report SP-3080. – Washington: NASA, 1973. – 497 p.
2. Heland J., Schäfer K. Analysis of aircraft exhausts with Fourier-transform infrared emission spectroscopy// Applied Optics. 1997. Vol. 36. No. 21. P. 4922–4931.
3. Evseev V., Fateev A., Clausen S. High-resolution transmission measurements of CO<sub>2</sub> at high temperatures for industrial applications // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2012. Vol. 113. P. 2222–2233.
4. Masiol M., Harrison R.M. Aircraft engine exhaust emissions and other airport-related contributions to ambient air pollution: A review // Atmospheric Environment. 2014. P. 95. P. 409–455.
5. Voitsekhovskii A.V., Voitsekhovskaya O.K., Kashirskii D.E., Suslova I.S. Modelling the determination of the thermodynamic parameters of a high-temperature gaseous volume by a passive remote method // Journal of Optical Technology. 2010. Vol. 77. Is. 9. P. 554–559.
6. Voitsekhovskaya O.K., Volkov D.V., Kashirskii D.E. Methodology of laser detection of engine exhaust gases // Russian Physics Journal. 2013. Vol. 56. No. 6. P. 657–666.
7. Egorov O.V., Voitsekhovskaya O.K., Kashirskii D.E., Tsvyk R.Sh., Sazanovich V.M., Sherstobitov M.V. The optical method for determining the thermodynamic parameters of hot gases // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer. 2014. V. 147. P. 38-46.
8. Alberti M., Weber R., Mancini M., Fateev A., Clausen S. Validation of HITEMP-2010 for carbon dioxide and water vapour at high temperatures and atmospheric pressures in 450-7600 cm<sup>-1</sup> spectral range // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer. 2015. V. 157. P. 14-33.
9. Rothman L.S., Gordon I.E., Barber R.J., Dothe H., Gamache R.R., Goldman A., Perevalov V., Tashkun S.A., Tennyson J. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer. 2010. V. 111. P. 2139-2150.