

ВЫБОР СПЕКТРАЛЬНЫХ УЧАСТКОВ ДЛЯ ДИСТАНЦИОННОГО ГАЗОАНАЛИЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ШИРОКОПОЛОСНОГО ИСТОЧНИКА

В.А. Калашникова

kalashv1999@yandex.ru

SPIN-код: 3290-7935

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Важной задачей экологического мониторинга является определение концентраций загрязнителей атмосферы. Основная возникающая проблема при использовании широкополосного источника излучения — невозможность аналитического определения концентраций газов по результатам измерений ослабления на трассе зондирования. В данной статье проведено математическое моделирование. Показано, что для многих загрязнителей атмосферы существуют спектральные участки, для которых с приемлемой погрешностью возможен переход от точного уравнения (системы уравнений в случае многокомпонентной газовой смеси) к приближенному аналитическому выражению. Оценена зависимость максимальной погрешности, возникающей при переходе от точной формулы к приближенной, от концентрации исследуемого газа.

Ключевые слова

Экологический мониторинг, дистанционный газовый анализ, загрязнители, пропускание газа, концентрация, спектр, широкополосный источник излучения, математическое моделирование

Поступила в редакцию 17.09.2021

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2021

Введение. В настоящее время в результате деятельности человека изменяются состав и содержание атмосферных газовых примесей, что влияет на состояние окружающей среды и здоровье людей [1]. Ежедневно в атмосферу выбрасывается огромное количество загрязнителей, содержание которых не должно превышать предельно допустимых концентраций (ПДК), поскольку в противном случае наличие примесей может оказать негативное воздействие на здоровье людей. Поэтому в рамках экологического мониторинга важной задачей является определение концентраций газовых загрязнителей атмосферы [2, 3]. Применение лазерных дистанционных методов позволяет оперативно осуществлять мониторинг больших объемов атмосферы [4]. Для определения состава многокомпонентной газовой смеси, какой является загрязненная атмосфера, необходимо осуществлять мультиспектральные измерения с использованием перестраиваемых лазеров.

Многие загрязнители атмосферы имеют поглощение в средней инфракрасной (ИК) области спектра (вблизи длины волны $\lambda = 3$ мкм). Однако в этом спектральном регионе отсутствуют мощные узкополосные источники лазерного излучения. В качестве источника лазерного излучения в среднем ИК-диапазоне широкое распространение получили параметрические генераторы света (ПГС),

однако данные источники имеют большую (порядка нескольких сантиметров в минус первой степени) спектральную ширину выходного излучения.

Для определения концентраций газов по результатам дистанционных измерений оптического ослабления с использованием широкополосных источников излучения необходимо решить систему нелинейных интегральных уравнений [5]. Выполнить это аналитически в общем виде не представляется возможным, однако в ряде случаев удобно воспользоваться приближенной линейной системой уравнений [5].

Целью данной работы является выбор спектральных участков, для которых с приемлемой погрешностью можно перейти от точных нелинейных выражений к приближенным линейным.

Количественный газовый анализ с помощью широкополосного источника излучения. При использовании широкополосных источников излучения закон Бугера — Ламберта — Бера не соблюдается [1]. В этом случае пропускание слоя газа описывается выражением следующего вида [6]:

$$T_{gm}(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{las}(\lambda_1 - \lambda) \exp[-2HK(\lambda_1)] d\lambda_1, \quad (1)$$

где $G_{las}(\lambda_1 - \lambda)$ — нормированная на единицу спектральная форма зондирующего излучения; H — толщина слоя поглощающего газа; $K(\lambda_1)$ — показатель поглощения газа в слое H . Показатель поглощения определяется по формуле

$$K(\lambda) = N\sigma(\lambda),$$

где N — концентрация газа в слое H ; $\sigma(\lambda)$ — сечение поглощения газа.

Для определения концентрации газа необходимо решить уравнение вида (1) (систему уравнений вида (1) в случае многокомпонентной газовой смеси), что не может быть сделано аналитически.

Для упрощения поиска решений можно от точной формулы (1) перейти к приближенной:

$$T_{gn}(\lambda) = \exp \left[-2HN \int_{-\infty}^{\infty} G_{las}(\lambda_1 - \lambda) \sigma(\lambda_1) d\lambda_1 \right]. \quad (2)$$

Однако в этом случае значение пропускания (а соответственно, и искомое значение концентрации), рассчитанное по точной и приближенной формулам, не совпадают. Однако могут быть найдены спектральные участки, для которых возможен переход от точной к приближенной формуле в пределах заданной погрешности.

Математическое моделирование. Для определения спектральных участков, в которых возможен переход от точной формулы к приближенной, было проведено математическое моделирование. Для разных газов, находящихся в поглощающем слое с разной концентрацией, выполнили расчет пропускания с использованием формул (1) и (2). Результаты расчетов сравнивали и оценивали погрешность определения пропускания при переходе от выражения (1) к выражению (2):

$$\Delta T(\lambda) = \frac{|T_{gm}(\lambda) - T_{gn}(\lambda)|}{T_{gm}(\lambda)}, \quad (3)$$

где $T_{gm}(\lambda)$ — пропускание газа, вычисленное по точной формуле; $T_{gn}(\lambda)$ — пропускание газа, вычисленное по приближенной формуле.

Концентрации исследуемых газов подбирали так, чтобы в максимуме поглощения пропускание на трассе зондирования составляло примерно 10 % (случай сильного поглощения и расхождения результатов). Длину трассы зондирования принимали равной 200 м.

Предполагали, что в качестве источника излучения выбран лазер Ekspla NT277, работающий в диапазоне 2500...4475 нм и имеющий спектральную ширину линии не более 10 см^{-1} [7]. Спектральная форма линии лазера моделировалась кривой Лоренца:

$$G(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{\lambda^2 + \gamma^2},$$

где γ — полуширина на полувысоте; при расчетах принимали $\gamma = 5 \text{ см}^{-1}$

Результаты математического моделирования. В качестве примера приведем результаты математического моделирования для двух газов: диметилового эфира и дифторэтана. Для расчетов использовали значения сечения (коэффициента) поглощения газов из банка данных HITRAN [8].

Диметиловый эфир $O(CH_3)_2$. Спектральные зависимости коэффициента поглощения диметилового эфира без учета и с учетом ширины линии источника показаны на рис. 1 (А и Б соответственно). Спектральная зависимость коэффициента поглощения с учетом ширины линии источника рассчитывали по следующей формуле:

$$\sigma^*(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{las}(\lambda_1 - \lambda) \sigma(\lambda_1) d\lambda_1.$$

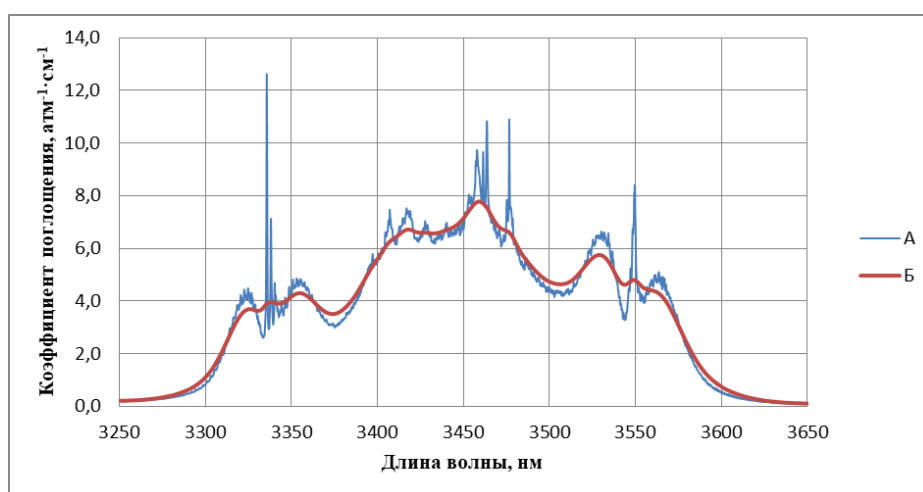


Рис. 1. Спектральные зависимости коэффициента поглощения диметилового эфира

Спектральные зависимости коэффициента пропускания диметилового эфира, рассчитанные по точной и приближенной формулам (кривые А и Б соответственно), для концентрации газа, равной 15 мг/кг, приведены на рис. 2.

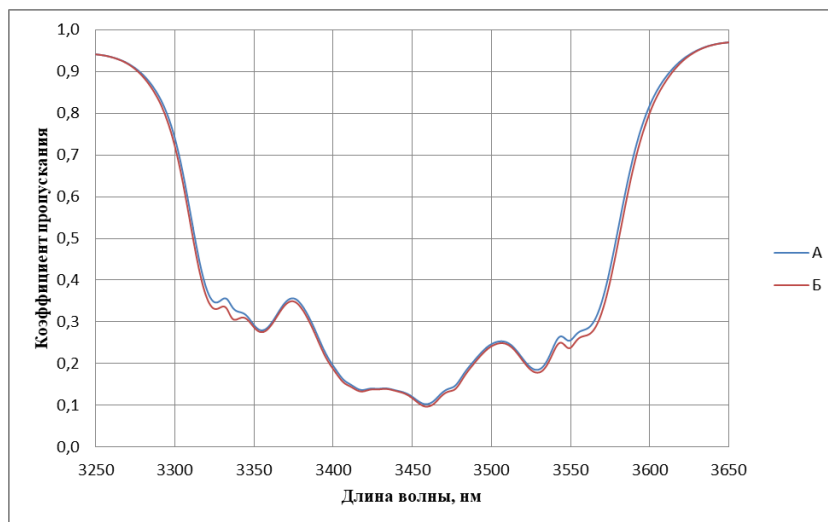


Рис. 2. Спектральные зависимости коэффициента пропускания диметилового эфира

Погрешность, возникающая при переходе от точной формулы к приближенной, была рассчитана по формуле (3). Зависимость погрешности от длины волны, выраженная в процентах, показана на рис. 3.

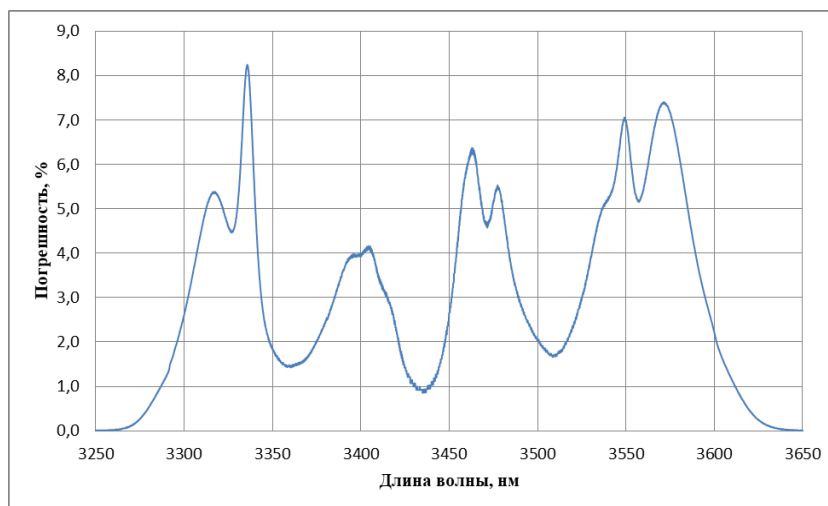


Рис. 3. Погрешность перехода от точной формулы к приближенной для диметилового эфира

На рис. 3 видно, что в рассматриваемом диапазоне существуют спектральные участки, в которых погрешность перехода от точной формулы к приближенной имеет значение 1...2 %.

Дифторэтан CH_3CHF_2 . Спектральные зависимости коэффициента поглощения дифторэтана без учета и с учетом ширины линии источника (А и Б соответственно) представлены на рис. 4.

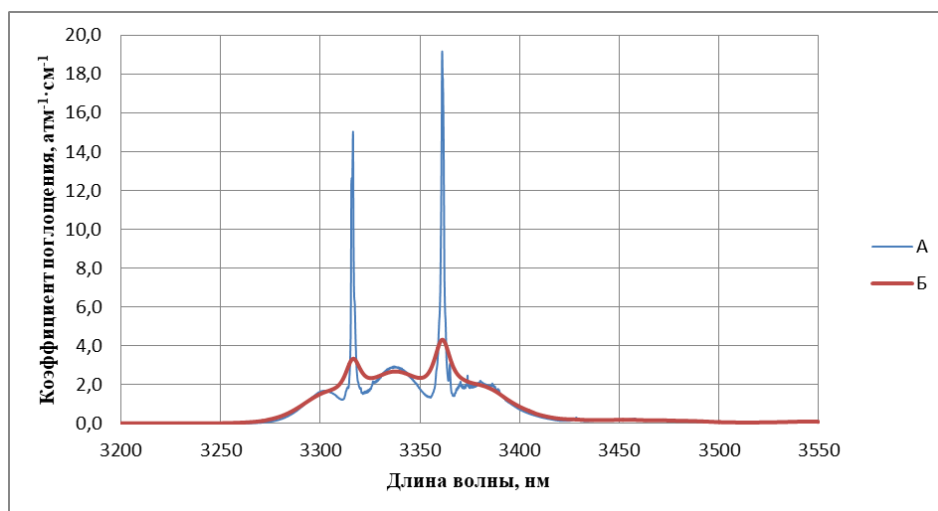


Рис. 4. Спектральные зависимости коэффициента поглощения дифторэтана

Спектральные зависимости коэффициента пропускания дифторэтана, рассчитанные по точной и приближенной формулам (кривые А и Б соответственно), для концентрации газа 50 мг/кг показаны на рис. 5.

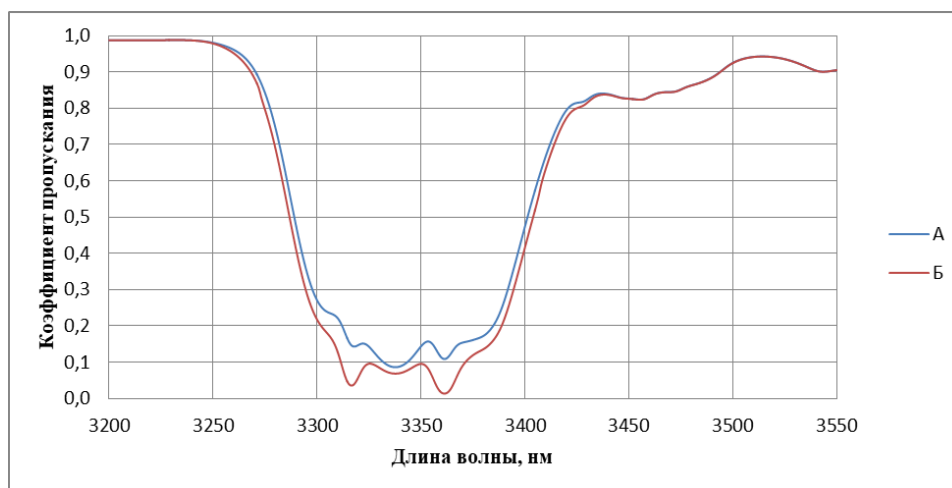


Рис. 5. Спектральные зависимости коэффициента пропускания дифторэтана

Погрешность, возникающая при переходе от точной формулы к приближенной, показана на рис. 6.

На рис. 6 видно, что в рассматриваемом диапазоне существуют спектральные участки, для которых с незначительной погрешностью можно перейти от точной формулы к приближенной.

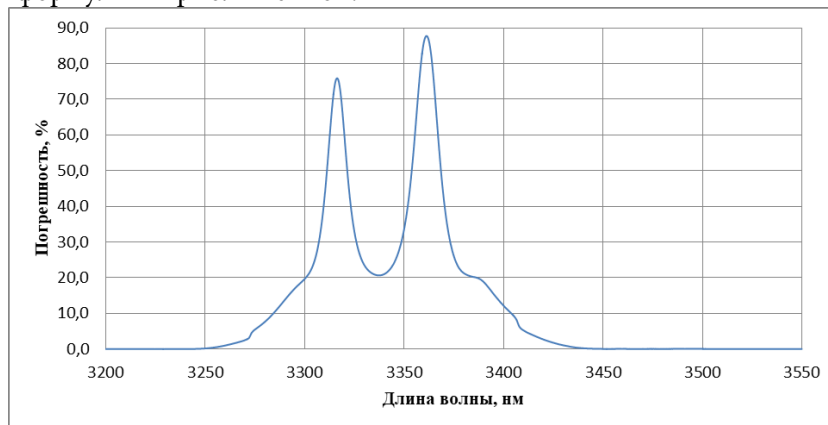


Рис. 6. Погрешность перехода от точной формулы к приближенной для дифторэтана

Результаты математического моделирования показывают, что для многих газов загрязнителей, взятых из банка данных HITRAN [9], в среднем ИК-диапазоне существуют спектральные участки, в которых погрешность перехода выражения (1) к выражению (2) имеет значение, не превышающее нескольких процентов, что позволяет с приемлемой точностью использовать приближенное уравнение (2) для определения концентрации газа-загрязнителя.

Оценка зависимости максимальной погрешности от концентрации. Для диметилового эфира была определена зависимость максимальной погрешности, возникающей при переходе от точной формулы к приближенной, от концентрации исследуемого газа (рис. 7).

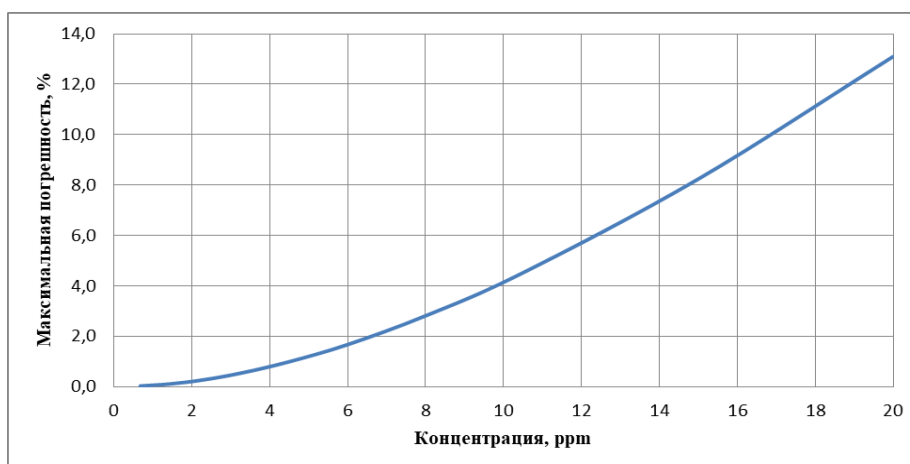


Рис. 7. Зависимость максимальной погрешности от концентрации

На рис. 7 видно, что при уменьшении величины концентрации снижается максимальная погрешность перехода от точной формулы к приближенной. Отметим, что с практической точки зрения обнаружение и измерение малых концентраций газов-загрязнителей является наиболее важной задачей.

Заключение. Проведенное в работе математическое моделирование показывает, что для дистанционного газового анализа в среднем ИК-диапазоне могут быть использованы широкополосные источники излучения, такие как ПГС. Показано, что для многих газов могут быть выбраны спектральные участки, в которых с приемлемой точностью может быть использовано приближенное выражение, позволяющее определить концентрацию аналитически. Для наиболее значимого случая малых концентраций наблюдаются наименьшие погрешности.

Литература

- [1] Manisalidis I., Stavropoulou E., Stavropoulos A. et al. Environmental and health impacts of air pollution: a review. *Front. Public Health*, 2020, vol. 8, art. 14. DOI: <https://doi.org/10.3389/fpubh.2020.00014>
- [2] Козинцев В.И., Белов М.Л., Городничев В.А. и др. Лазерный оптико-акустический анализ многокомпонентных газовых смесей. М., Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003.
- [3] Liu X., Cheng S., Liu H. et al. A survey on gas sensing technology. *Sensors*, 2012, vol. 12, no. 7, pp. 9635–9665. URL: <https://doi.org/10.3390/s120709635>
- [4] Killinger D.K., Menyuk N. Laser remote sensing of the atmosphere. *Science*, 1987, vol. 235, no. 4784, pp. 37–45. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.235.4784.37>
- [5] Федотов Ю.В., Городничев В.А. Особенности количественного абсорбционного газоанализа с использованием широкополосного источника излучения. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение*, 2008, № 3, с. 16–27.
- [6] Zuev V.E. Signals and noise in laser ranging. *J. Russ. Laser Res.*, 1987, vol. 8, no. 4, pp. 283–426. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01120343>
- [7] NT270 series. Tunable wavelength NIR-IR range DPSS lasers. *ekspla.com: веб-сайт*. URL: <https://ekspla.com/product/nt270-tunable-wavelength-nir-ir-range-dpss-lasers/#tab3> (дата обращения: 26.04.2021).
- [8] Sharpe S.W., Johnson, T.J., Sams R.L. et al. Gas-phase databases for quantitative infrared spectroscopy. *Appl. Spectrosc.*, 2004, vol. 58, no. 12, pp. 1452–1461. DOI: <https://doi.org/10.1366%2F0003702042641281>
- [9] Gordon I.E., Rothman L.S., Hill C. et al. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 2017, vol. 203, pp. 3–69. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2017.06.038>

Калашникова Валерия Александровна — студентка магистратуры кафедры «Лазерная техника и лазерные технологии», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Научный руководитель — Федотов Юрий Викторович, кандидат технических наук, доцент кафедры «Лазерная техника и лазерные технологии», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Калашникова В.А. Выбор спектральных участков для дистанционного газоанализа с использованием широкополосного источника. *Политехнический молодежный журнал*, 2021, № 10(63). <http://dx.doi.org/10.18698/2541-8009-2021-10-739>

**SELECTION OF SPECTRAL REGIONS FOR REMOTE GAS ANALYSIS
USING A BROADBAND SOURCE**

V.A. Kalashnikova

kalashv1999@yandex.ru

SPIN-code: 3290-7935

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation**Abstract**

An important task of environmental monitoring is to determine the concentration of atmospheric pollutants. The main problem that arises when using a broadband radiation source is the impossibility of analytical determination of gas concentrations from the results of attenuation measurements along the sounding path. In this article, mathematical modeling has been carried out. It is shown that for many atmospheric pollutants there are spectral regions for which, with an acceptable error, a transition from the exact equation (a system of equations in the case of a multi-component gas mixture) to an approximate analytical expression is possible. The dependence of the maximum error arising in the transition from the exact formula to the approximate one on the concentration of the gas under study is estimated.

Keywords

Environmental monitoring, remote gas analysis, pollutants, gas transmission, concentration, spectrum, broadband radiation source, mathematical modeling

Received 17.09.2021

© Bauman Moscow State Technical

University, 2021

References

- [1] Manisalidis I., Stavropoulou E., Stavropoulos A. et al. Environmental and health impacts of air pollution: a review. *Front. Public Health*, 2020, vol. 8, art. 14. DOI: <https://doi.org/10.3389/fpubh.2020.00014>
- [2] Kozintsev V.I., Belov M.L., Gorodnichev V.A. et al. Lazernyy optiko-akusticheskiy analiz mnogokomponentnykh gazovykh smesey [Laser optics-acoustic analysis of multicomponent gas mixtures]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2003 (in Russ.).
- [3] Liu X., Cheng S., Liu H. et al. A survey on gas sensing technology. *Sensors*, 2012, vol. 12, no. 7, pp. 9635–9665. URL: <https://doi.org/10.3390/s120709635>
- [4] Killinger D.K., Menyuk N. Laser remote sensing of the atmosphere. *Science*, 1987, vol. 235, no. 4784, pp. 37–45. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.235.4784.37>
- [5] Fedotov Yu.V., Gorodnichev V.A. Peculiarities of quantitative absorption gas analysis using wide-band radiation source. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Priborostr.* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Instrum. Eng.], 2008, no. 3, p. 16–27 (in Russ.).
- [6] Zuev V.E. Signals and noise in laser ranging. *J. Russ. Laser Res.*, 1987, vol. 8, no. 4, pp. 283–426. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01120343>
- [7] NT270 series. Tunable wavelength NIR-IR range DPSS lasers. *ekspla.com: website*. URL: <https://ekspla.com/product/nt270-tunable-wavelength-nir-ir-range-dpss-lasers/#tab3> (accessed: 26.04.2021).

- [8] Sharpe S.W., Johnson, T.J., Sams R.L. et al. Gas-phase databases for quantitative infrared spectroscopy. *Appl. Spectrosc.*, 2004, vol. 58, no. 12, pp. 1452–1461. DOI: <https://doi.org/10.1366%2F0003702042641281>
- [9] Gordon I.E., Rothman L.S., Hill C. et al. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 2017, vol. 203, pp. 3–69. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2017.06.038>

Kalashnikova V.A. — Master’s Degree Student, Department of Laser Technologies in Mechanical Engineering, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Scientific advisor — Fedotov Yu.V., Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Laser Technologies in Mechanical Engineering, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Please cite this article in English as:

Kalashnikova V.A. Selection of spectral regions for remote gas analysis using a broadband source. *Politekhicheskiy molodezhnyy zhurnal* [Politechnical student journal], 2021, no. 10(63). <http://dx.doi.org/10.18698/2541-8009-2021-10-739.html> (in Russ.).