

В.А. Капитанов, М.Ю. Катаев, А.А. Мицель, Б.А. Тихомиров, К.М. Фирсов

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИКО-АКУСТИЧЕСКОГО ГАЗОАНАЛИЗАТОРА
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ С ТЕПЛОВЫМ ИСТОЧНИКОМ**

Выполнено численное моделирование потенциальных возможностей ОА газоанализатора с тепловым возбуждением для измерения содержания CO , NO_2 , NO в осушенной смеси $\text{N}_2 + \text{CO}_2 + \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$. Рассмотрены вопросы оптимизации параметров осветительной системы, моделирования коэффициентов поглощения газов в ячейке ОАП и минимально-обнаруживаемых концентраций газов, приведены результаты решения обратной задачи. Показана возможность обнаружения NO_2 на уровне $\sim 2 \text{ мг/м}^3$ при мощности излучателя 1 мВт, NO и CO на уровне 2 мг/м^3 при мощности излучателя 10 мВт.

1. Введение

Оптико-акустический (ОА) газоанализатор имеет ряд преимуществ по сравнению с другими оптическими устройствами для измерения состава газовых смесей — это, прежде всего, высокая чувствительность по поглощению ($10^{-7} \div 10^{-9} \text{ см}^{-1}$), малые габариты и малое потребление энергии.

В данной статье рассматривается моделирование потенциальных возможностей ОА газоанализатора с тепловым возбуждением для измерения содержания газов CO , NO_2 и NO в осушенной смеси N_2 (0,888) CO_2 (0,1), CH_4 (0,01) и H_2O ($0,156 \cdot 10^{-3}$ атм). Обсуждаются следующие вопросы: формирование потока излучения, падающего на светофильтр от излучателя шаровой формы, находящегося в фокусе эллипсоидального отражателя, исследование формы полосы пропускания интерференционного светофильтра при такой схеме освещения, моделирование коэффициентов поглощения газов в ячейке ОАП и минимально-обнаружимых концентраций газов, решение обратной задачи.

В приближении оптически тонкого слоя в ОА ячейке выражение для ОА сигнала имеет вид [1]:

$$U = \eta \int W(\nu) \left[\sum_{j=1}^m \kappa_j(\nu) \rho_j + \beta_f \right] d\nu, \quad (1)$$

где η — константа ячейки ОАП; $W(\nu)$ — мощность излучения на входе в ОА ячейку; ρ_j — концентрация j -го газа в смеси; $\kappa_j(\nu)$ — коэффициент поглощения j -го газа на частоте ν ; β_f — коэффициент фонового поглощения; m — число поглощающих газов в смеси.

Коэффициент молекулярного поглощения можно описать следующим выражением:

$$\kappa_j(\nu) = \sum_i S_{ij} F(\nu, \nu_{ij}), \quad (2)$$

где S_{ij} , ν_{ij} — интенсивность и центр i -й спектральной линии j -го газа; $F(\nu, \nu_{ij})$ — нормированный на единицу формфактор i -й линии. В связи с тем, что ширина линии поглощения много меньше ширины спектра излучения теплового источника, выражение (1) с учетом (2) легко преобразовать к виду

$$U = \eta W_0 \left[\sum_{j=1}^m K_j \rho_j + \beta_f \right], \quad (3)$$

где $K_j = \sum_i g(\nu_{ij}) S_{ij}$, $g(\nu)$ — нормированная на единицу аппаратная функция ОА газоанализатора, которая связана с $W(\nu)$ соотношением: $g(\nu) = W(\nu)/W_0$; W_0 — интегральная интенсивность на входе в ОА ячейку.

2. Аппаратная функция ОА газоанализатора

Величина сигнала ОА ячейки пропорциональна мощности падающего на нее излучения. При использовании теплового источника возникает необходимость разработки осветительной системы, которая позволит увеличить мощность излучения, попадающего в ОА кювету. Одним из путей решения этой проблемы является использование эллиптического отражателя [2], в фокусе которого находится тепловой источник, а в другом фокусе — приемное окно ОА ячейки с интерференционным свето-

фильтром, позволяющим выделять достаточно узкий спектральный интервал (см. рис. 1). Однако спектральные характеристики многослойных интерференционных систем зависят от угла падения излучения на поверхность покрытия [3]. С увеличением угла падения излучения положение максимума пропускания смещается в коротковолновую область спектра, уменьшается крутизна, растет фон.

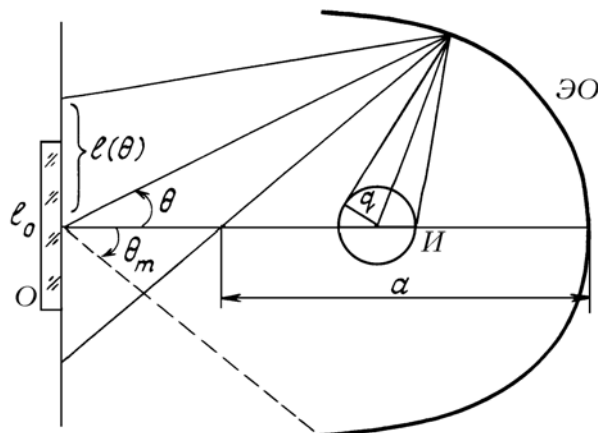


Рис. 1 Схема осветительной системы: *И* – источник ИК-излучения, *ЭО* – эллиптический отражатель, *О* – окно *ОА* ячейки, l_0 – радиус *ОА* ячейки, q – радиус шарового источника ИК-излучения, a – большая полуось, $l(\theta)$ – радиус светового пятна

При больших углах падения может проявиться дублетная структура вследствие изменения оптических свойств покрытия для *S*- и *P*-составляющих падающего излучения. Поэтому при расчете спектральной формы полосы пропускания интерференционного светофильтра для вышеописанной схемы освещения необходимо принимать во внимание зависимость характеристик фильтра и мощности излучения от угла падения света.

$$W(\nu) = \int \frac{dW^0}{d\theta} \tau(\nu, \theta) d\theta, \quad (4)$$

где $dW^0/d\theta$ – угловое распределение мощности излучения, падающего на поверхность фильтра; $\tau(\nu, \theta)$ – пропускание светофильтра на частоте ν для излучения, падающего под углом θ .

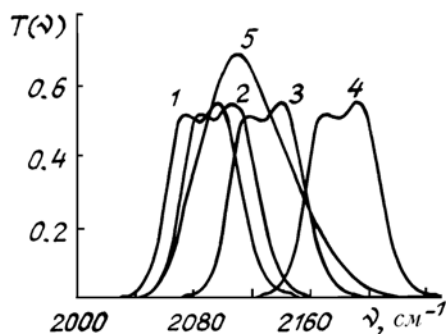


Рис. 2. Полосы пропускания интерференционного светофильтра для различных типов освещения

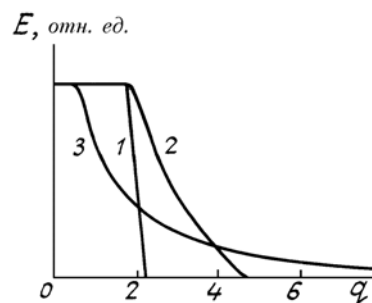


Рис. 3. Освещенность приемного окна *ОА* ячейки в относительных единицах в зависимости от q . Эксцентриситет отражателя: 1 – $\varepsilon = 0,4$; 2 – $\varepsilon = 0,62$; 3 – $\varepsilon = 0,85$. Максимальный угол падения света на окно $\theta = 33^\circ$

В настоящее время имеется возможность проводить расчеты контура пропускания для узкополосной системы. Однако для этого необходимо иметь информацию о структуре и материалах, изготовления фильтра, которая, как правило, неизвестна. В паспорте на фильтр обычно указывают следующие параметры; ν_0 – центр полосы пропускания; $\delta\nu_0$ – полуширина на полувысоте; τ_0 – пропускание в центре на частоте ν_0 . Кроме этого, иногда указывают величину смещения максимума при некотором угле θ_0 . Поэтому для описания контура полосы пропускания использовались приближенные формулы.

Достаточно хорошей аппроксимацией асимметричной полосы пропускания узкополосного фильтра является лоренцевский контур, а в случае симметричной – гауссовская кривая [2]. В расчетах также использовалась реальная форма спектра пропускания $T(\nu)$ фильтра, изготовленного НПО «Аналитприбор». В паспортных данных была приведена полоса пропускания светофильтра при перпендикулярном падении света (кривая 1 на рис. 2).

Смещение максимума полосы пропускания в коротковолновую область спектра можно аппрокси-

мировать выражением [3]

$$v_0(\theta) = v_0(0) \sqrt{1 - \sin^2 \theta / n^2}, \quad (5)$$

где n — показатель преломления разделительного слоя, при замене реальной полосовой системы на фильтр, состоящий из двух зеркал и разделительного слоя между ними. Зная смещение максимума при некотором угле, нетрудно рассчитать показатель преломления. Величины τ_0 и δv_0 полагаются независящими от угла θ .

Для описания углового распределения мощности излучения, падающего на поверхность фильтра от осветительной системы (см. рис. 1), необходимо было получить достаточно простую аппроксимацию, так как расчет коэффициентов поглощения требует учета большого количества спектральных линий, которое может достигать десятков тысяч. Задача расчета световых потоков, падающих с одной поверхности на другую, достаточно сложная [3], тогда как для точечного источника легко получить угловое распределение мощности излучения в фокальной плоскости, в которой находится светофильтр:

$$\frac{dW}{d\theta} = 2\pi\alpha_v B_v \frac{(1 - \varepsilon^2)^2 \sin \theta}{(1 + \varepsilon^2 - 2\varepsilon \cos \theta)^2}, \quad (6)$$

где ε — эксцентриситет отражателя; α_v — спектральный коэффициент поглощения материала, из которого изготовлен источник излучения; B_v — светимость точечного источника. Для источника шаровой формы B_v равно $S_q L_v$, где S_q — площадь поперечного сечения источника, а L_v — функция Планка. Выражение (6) справедливо и для шарового источника, если радиус излучателя много меньше большой полуоси эллиптического отражателя, а поперечные размеры фильтра больше размеров изображения источника. На рис. 3 приведено распределение освещенности в плоскости расположения фильтра для различных значений эксцентриситета отражателя, которое позволяет соотнести размеры источника и фильтра.

Из этого рисунка следует, что выражение (6) необходимо скорректировать с учетом того, что светофильтр не будет перехватывать весь поток. Световой поток, падающий на светофильтр в интервале углов от θ до $\theta + d\theta$, приводит к практически равномерной освещенности площадки радиусом:

$$l(\theta) = q \frac{1 - \varepsilon^2}{(1 - 2\varepsilon \cos \theta + \varepsilon^2) \cos \theta}. \quad (7)$$

Поскольку освещенность пропорциональна потоку излучения, падающему на единичную площадку, то через фильтр в этом интервале углов проходит поток, пропорциональный $(l_0/l(\theta))^2$, где l_0 — радиус светофильтра, а $l(\theta)$ определяется формулой (7). Поэтому для того чтобы учесть конечность размеров интерференционного фильтра в (4), можно ввести в виде множителя поправочную функцию χ , которая равна единице, если $l(\theta) < l_0$ и $\chi = (l_0/l(\theta))^2$ при $l(\theta) > l_0$.

Формулы (4)–(7) позволяют рассчитать аппаратную функцию $g(v)$:

$$g(v) = \frac{\int_0^{\theta_m} \frac{dW(v)}{d\theta} \tau(v, \theta) d\theta}{\int_{\Delta v} dv \int_0^{\theta_m} \frac{dW(v)}{d\theta} \tau(v, \theta) dv}, \quad (8)$$

необходимую для определения эффективного коэффициента поглощения $K(v)$ в (3). В формуле (8) θ_m — максимальный угол падения светового пучка на светофильтр.

На рис. 2 приведены рассчитанные полосы пропускания светофильтра для четырех углов падения параллельного пучка света на фильтр $\theta = 0, 10, 20, 30^\circ$ (кривые 1, 2, 3, 4 соответственно). Кривая 5 описывает аппаратную функцию, нормированную на единицу, в случае падения на светофильтр сфокусированного излучения с максимальным углом падения $\theta_m = 33^\circ$ от эллиптического отражателя с эксцентриситетом $\varepsilon = 0,62$, в фокусе которого расположен ламбертовский источник излучения шаровой формы. Кривые на рис. 2 получены для светофильтра с типичными характеристиками: $v_0 = 2100 \text{ см}^{-1}$, $\delta v_0 = 32 \text{ см}^{-1}$, относительная величина смещения максимума при $\theta = 20^\circ$ составляет 0,02.

Для того чтобы получить максимальный сигнал, необходимо сделать оптимальный выбор размеров излучателя и приемного окна ОА ячейки, эксцентриситета и большой полуоси эллиптического отражателя, а также предельного угла падения θ_m , показанного на рис. 1. Величина сигнала ОА ячейки пропорциональна мощности излучения, попадающего внутрь ее, которая, в свою очередь, пропорциональна средней освещенности окна. Освещенность в центре светофильтра пропорциональна величине $\sin^2 \theta_m$ (θ_m — максимальный угол падения света на фильтр). Максимальное значение угла θ_m следует взять $\sim 30^\circ$, так как при больших значениях угла наблюдается сильное смещение полосы про-

пускания светофильтра, как это показано на рис. 2, и, кроме того, при больших θ_m происходит значительное уширение полосы пропускания светофильтра, увеличение фона [3]. Детальный анализ условий прохождения светового потока через светофильтр и формирования ОА сигнала позволил выявить следующие закономерности: 1) с увеличением ϵ КПД преобразования световой энергии осветительной системы $\eta = \Phi_{\text{пр}}/\Phi_{\text{пад}}$ (где $\Phi_{\text{пр}}$, $\Phi_{\text{пад}}$ — прошедший через светофильтр и падающий на него поток излучения) уменьшается с увеличением v и уменьшением относительного радиуса окна l_0/q ; 2) при фиксированной длине ОА ячейки формируемый ОА сигнал уменьшается с ростом l_0/q и имеет экстремум (максимум) по ϵ для фиксированного значения l_0/q ; 3) с увеличением ϵ сдвиг максимума полосы пропускания уменьшается, а ее ширина меняется незначительно. Исходя из вышеприведенного анализа, максимальный ОА сигнал можно получить при следующих параметрах осветительной системы: $\epsilon = 0,64 \div 0,65$ и $l_0/q \approx 2,3 \div 2,7$, где q — радиус излучателя.

3. Расчет коэффициентов поглощения газовых смесей в ОА ячейке

Проведенный нами анализ спектров поглощения на основе базы данных [5] показал, что максимальное поглощение газами CO , NO , NO_2 наблюдается в следующих диапазонах: CO —2050÷2200, NO —1780÷1930, NO_2 —1530÷1650 см^{-1} . В указанных диапазонах спектра расположены также полосы поглощения других газов, таких как H_2O , CO_2 , CH_4 , которые перекрываются с полосами поглощения исследуемых газов. Поэтому расчеты коэффициентов поглощения проводились для всех шести газов в трех спектральных интервалах: 1500÷1800, 1700÷2500 и 2900÷3200 см^{-1} . Выбор канала для зондирования CO проводился в диапазоне 2055÷2200 см^{-1} . Основным мешающим газом являлся углекислый газ, который имеет сильную полосу поглощения с центром 4,3 мкм. Известно [2], что у реальных светофильтров коротковолновое крыло простирается достаточно далеко, тогда как модель полосы пропускания светофильтра, описанная выше, получена без его учета. Для того чтобы учесть поглощение в центре 4,3-мкм полосы CO_2 , мы смоделировали коротковолновое крыло, в предположении комбинированного светофильтра, на основе каталога [7]. Это привело к тому, что вблизи от центра 4,3-мкм полосы CO_2 нарушается приближение оптически тонкого газа и, соответственно, коэффициент поглощения CO_2 нелинейно зависит от его концентрации. Для учета этого эффекта использовалась приближенная методика, описанная в [6]. Для уменьшения влияния центральной части 4,3-мкм полосы CO_2 моделировался газовый фильтр с CO_2 , установленный в канале на CO . Для остальных газов влияние коротковолнового крыла аппаратной функции оказалось незначительным. На рис. 4 а, б приведены коэффициенты поглощения, рассчитанные без учета коротковолнового крыла.

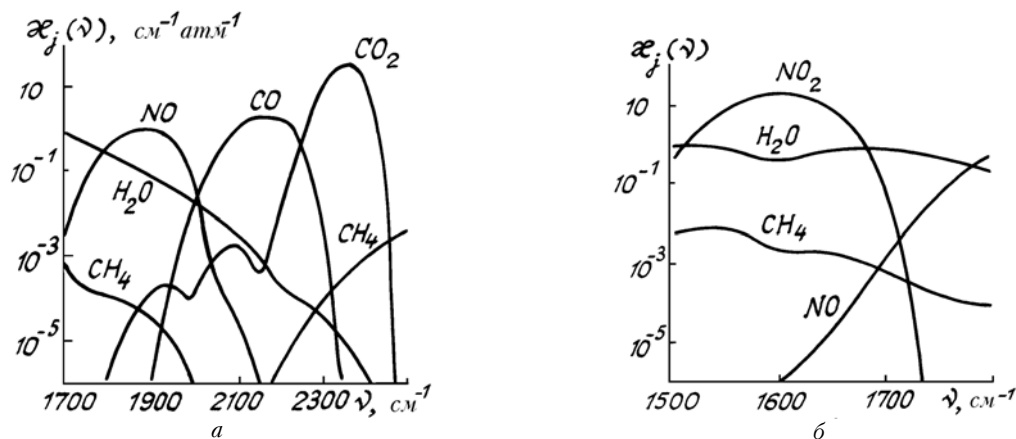


Рис. 4. Коэффициенты поглощения без учета коротковолнового крыла аппаратной функции. Модель поглощения — линейная

4. Минимально обнаруживаемые концентрации газов

Для моделирования минимально обнаруживаемых концентраций газов воспользуемся результатами работы [8], в которой рассмотрен алгоритм обнаружения на основе математического аппарата проверки статистических гипотез [9]. В качестве критерия обнаружения воспользуемся правилом Неймана-Пирсона. Приведем здесь конечные формулы для расчета минимально обнаруживаемых концентраций газов.

Вероятность правильного обнаружения (надежность обнаружения) вычисляется по формулам:

$$P = \frac{1}{2} [1 + \Phi(g)], \quad (9)$$

$$g = \frac{E - \Lambda}{2\sqrt{E}}; \quad (10)$$

где

$$E = \frac{1}{2\sigma^2} (M_2 - M_1)^2; \quad (11)$$

$$\Lambda = 2\sqrt{E} \Phi^{-1}(1 - 2\varepsilon_0) - E; \quad (12)$$

$$\Phi(g) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^g \exp(-t^2) dt.$$

В формуле (10) параметры M_1 , M_2 , σ имеют вид

$$M_1 = \eta W_0 (\kappa_1 \rho_1 + \beta); \quad M_2 = \eta W_0 (\kappa_2 \rho_2 + \beta); \quad (13)$$

$$\sigma^2 = \sigma_u^2 + \delta_\beta^2 (\eta W_0 \beta)^2, \quad (14)$$

где κ — коэффициент поглощения анализируемого газа; β — суммарный коэффициент поглощения мешающих газов смеси и фона; ρ_1 , ρ_2 — концентрация исследуемого газа в гипотезах H_1 и H_2 . В данной задаче $\rho_1 = 0$; $\rho_2 = \rho$; W_0 — мощность излучения теплового источника; σ_u — абсолютная погрешность ОА сигнала; δ_β — относительная погрешность определения β ; ε_0 — фиксированная вероятность ошибки второго рода [9]. В данной статье она принималась равной 0,05.

Критерий определения минимально обнаруживаемой концентрации состоит в следующем. По заданным параметрам ОА газоанализатора (η , W_0 , σ_u , δ_β , β_f), концентрациям мешающих газов ρ_i и значениям коэффициентов поглощения вычисляется вероятность правильного обнаружения P как функции длины волны и концентрации исследуемого газа ρ . То значение ρ , для которого $P \geq 0,95$, принимаем за минимально обнаруживаемую концентрацию ρ_{\min} . Ясно, что для разных длин волн величина P будет различной и, следовательно, обнаруживаемая концентрация будет также различна для разных длин волн.

При нахождении ρ_{\min} концентрации мешающих газов задавались следующими: CO_2 — 0,1 атм; CH_4 — 0,01 атм; H_2O — $0,156 \cdot 10^{-3}$ атм; CO — $1,89 \cdot 10^{-6}$ атм; NO_2 — $2,31 \cdot 10^{-6}$ атм; NO — $3,53 \cdot 10^{-6}$ атм. Параметры ОА системы: $\eta = 50$ мВ/(мВт · см⁻¹); $\sigma_u = 2 \cdot 10^{-4}$ мВ; $\beta_f = 5 \cdot 10^{-8}$ см⁻¹; $W_0 = 1 \div 10$ мВт; $\delta_\beta = 4\%$ при $W_0 = 1$ мВт и $\delta_\beta = 0,4\%$ при $W_0 = 10$ мВт. Величина определялась из решения обратной задачи (см. п. 5), при этом в качестве δ_β бралось максимальное значение относительной погрешности определения концентрации мешающих газов.

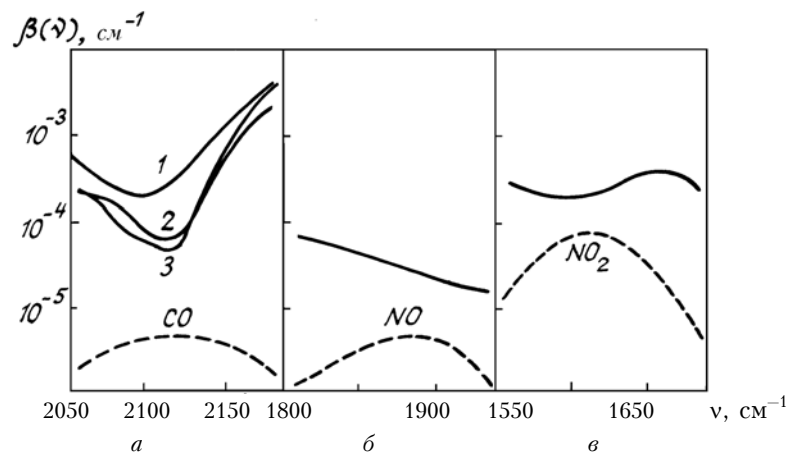


Рис. 5. Коэффициенты поглощения анализируемых (штриховые) и мешающих (сплошные линии) газов: а) $\rho_{\text{CO}} = 2$ мг/м³, 1 — с учетом коротковолнового крыла пропускания интерференционного фильтра, 2 — без учета крыла; 3 — с учетом крыла и газового фильтра на CO_2 ; б) $\rho_{\text{NO}} = 4$ мг/м³, в) $\rho_{\text{NO}_2} = 4$ мг/м³

На рис. 5 приведены коэффициенты поглощения мешающих и исследуемых газов в участках спектра, благоприятных для их измерения. На рис. 5, а представлены величины β как с учетом коротковолнового крыла пропускания интерференционного фильтра, так и без него. Вследствие большого содержания в смеси CO_2 и наличия в данном интервале сильной полосы CO_2 с центром 2370 см⁻¹ (см. рис. 4, а) происходит изменение условия оптически тонкого слоя в ячейке ОАП, что

приводит к нарушению линейности модели (3). Поэтому при расчете коэффициента β_{CO_2} в области частот 2050–2200 см^{-1} вместо (3) использовалась нелинейная модель.

Из рис. 5 видно, что наибольшее влияние мешающих газов присуще СО. Так, для фильтра с крылом минимальное значение отношения $\beta_1/\alpha_{\text{CO}}$ при $\rho_{\text{CO}} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ г/м}^3$ составляет ~ 60 на частоте 2100 см^{-1} , для фильтра без крыла минимальная величина $\beta_2/\alpha_{\text{CO}} = 9,6$ на частоте $\nu = 2120 \text{ см}^{-1}$. На рис. 5 приведены, коэффициенты поглощения мешающих газов β_3 при установке в канал СО газового, фильтра с CO_2 при $P_{\text{CO}_2} = 1 \text{ атм}$ и длине 1 см. В этом случае удается уменьшить влияние мешающих газов более чем в два раза в диапазоне частот 2100–2130 см^{-1} .

В табл. 1 приведены минимально обнаруживаемые концентрации анализируемых газов в мг/м^3 , рассчитанные для двух значений мощности излучения $W_0 = 1$ и 10 мВт и надежности обнаружения $P = 0,95$. Из табл. 1 видно, что для аппаратной функции светофильтра, не учитывающей далекие крылья, использование газового фильтра не дает никакого выигрыша в обнаружительной способности СО. Уменьшение концентрации мешающего газа CO_2 на порядок приводит к уменьшению нелинейности модели поглощения, к увеличению обнаружительной способности и смещению оптимального канала определения СО от частоты 2100 до 2140 см^{-1} . При этом влияние высокочастотного крыла аппаратной функции светофильтра становится пренебрежимым. Сдвиг частоты наилучшей обнаружительной способности по СО обусловлен тем, что на частоте 2140 см^{-1} коэффициент поглощения α_{CO} достигает своего максимума (см. рис. 4, а).

При измерениях окислов азота в данной смеси наибольшее влияние оказывает водяной пар. Так, например, увеличение концентрации H_2O на порядок приводит к ухудшению обнаружительной способности газоанализатора по NO в 1,5 и по NO_2 в 5 раз.

Таблица 1

| Минимально обнаруживаемые концентрации газов (мг/м^3) | | | | | |
|------------------------------------------------------------------|-----------------|-----------------------|----------|------------------------|----------|
| Частота, см^{-1} | Газ | $W_0 = 1 \text{ мВт}$ | | $W_0 = 10 \text{ мВт}$ | |
| | | без крыла | с крылом | без крыла | с крылом |
| 2110 | СО* | 9,0 | 18 | 0,9 | 1,8 |
| | | 9,0 | 9,5 | 0,9 | 0,95 |
| 1870 | NO | 16 | | 1,6 | |
| 1600 | NO ₂ | 2,2 | | 0,22 | |

* В знаменателе даны значения $\rho_{\text{CO}}^{\text{min}}$ полученные при включении газового фильтра с CO_2 в канал СО.

Вышеописанный критерий позволяет на основе информации о характеристиках ОА газоанализатора, коэффициентах поглощения мешающих газов и их концентрациях определить длины волн, на которых с вероятностью P , большей некоторой пороговой P_0 , можно определить минимально обнаруживаемую концентрацию исследуемого газа, Пороговое значение надежности обнаружения P_0 принималось равным 0,95.

5. Решение обратной задачи

Из предыдущего анализа было установлено сильное влияние мешающих газов CO_2 , H_2O и CH_4 вследствие перекрывания их полос поглощения с полосами анализируемых газов СО, NO, NO₂. Поэтому для количественного анализа СО, NO, NO₂ необходимо измерять также и мешающие газы, используя следующие каналы: $\text{H}_2\text{O} - 1710 \text{ см}^{-1}$, $\text{CH}_4 - 2990 \text{ см}^{-1}$, $\text{CO}_2 - 2430 \text{ см}^{-1}$. В табл. 2 приведены коэффициенты поглощения всех шести газов на шести длинах волн.

Таблица 2

Матрица коэффициентов поглощения ($\text{атм}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$) с учетом крыла аппаратной функции

| $\nu, \text{см}^{-1}$ | СО | NO | NO ₂ | H ₂ O | CO ₂ | CH ₄ |
|-----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|----------------------|
| 2110 | 1.69 | $1.22 \cdot 10^{-6}$ | 0.0 | $6.95 \cdot 10^{-4}$ | $1.90 \cdot 10^{-3}$ | $4.10 \cdot 10^{-7}$ |
| 1870 | $2.75 \cdot 10^{-4}$ | $9.46 \cdot 10^{-1}$ | 0.0 | $6.97 \cdot 10^{-2}$ | $1.22 \cdot 10^{-4}$ | $3.49 \cdot 10^{-5}$ |
| 1600 | 0.0 | $8.37 \cdot 10^{-5}$ | $1.74 \cdot 10^1$ | $4.39 \cdot 10^{-1}$ | $6.98 \cdot 10^{-11}$ | $2.30 \cdot 10^{-3}$ |
| 1710 | $2.36 \cdot 10^{-9}$ | $9.36 \cdot 10^{-3}$ | $4.06 \cdot 10^{-3}$ | $6.43 \cdot 10^{-1}$ | $9.42 \cdot 10^{-8}$ | $3.62 \cdot 10^{-4}$ |
| 2430 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | $1.06 \cdot 10^{-6}$ | $2.31 \cdot 10^{-2}$ | $1.82 \cdot 10^{-3}$ |
| 2990 | 0.0 | 0.0 | $5.36 \cdot 10^{-4}$ | $3.57 \cdot 10^{-3}$ | 0.0 | 1.39 |

Если не учитывать коротковолновое крыло аппаратной функции в канале измерения СО, то из выражения (3) получается линейная система уравнений для определения концентраций газов. Сигналы рассчитывались по формуле (3) с параметрами: $\eta = 50 \text{ мВ}/(\text{мВт} \cdot \text{см}^{-1})$, $W_0 = 1$ и 10 мВт. Значения концен-

траций газов, для которых рассчитывались коэффициенты поглощения, приведены в табл. 3, 4 в первом столбце. Для имитации шума измерения рассчитанные ОА сигналы искажались датчиком случайных чисел с параметрами $(0, \sigma_n)$, где σ_n — абсолютная погрешность измерения ОА сигналов ($\sigma_n = 2 \cdot 10^{-4}$ мВ).

Таблица 3

Результаты решения обратной задачи при мощности $W_0 = 1$ мВт

| Газы | ρ_t , ppm | $\rho_{\text{реш}}$, ppm | $\Delta_{\text{абс}}$, ppm | $\Delta_{\text{отн}}$, % | N1 | N2 |
|------------------|-------------------|---------------------------|-----------------------------|---------------------------|----|----|
| CO | 1,89 | 1,85 | 2,31 | $5,95 \cdot 10^1$ | 21 | 42 |
| NO | 3,53 | 3,89 | 4,45 | $4,12 \cdot 10^1$ | 21 | 45 |
| NO ₂ | 2,31 | 2,28 | $2,98 \cdot 10^{-1}$ | 9,64 | 0 | 0 |
| H ₂ O | $1,56 \cdot 10^2$ | $1,57 \cdot 10^2$ | 6,49 | 3,88 | 0 | 0 |
| CO ₂ | $1,00 \cdot 10^5$ | $1,00 \cdot 10^5$ | $1,80 \cdot 10^2$ | $1,34 \cdot 10^{-1}$ | 0 | 0 |
| CH ₄ | $1,00 \cdot 10^4$ | $1,00 \cdot 10^4$ | 2,86 | $1,94 \cdot 10^{-2}$ | 0 | 0 |

Таблица 4

Результаты решения обратной задачи при мощности $W_0 = 10$ мВт

| Газы | ρ_t , ppm | $\rho_{\text{реш}}$, ppm | $\Delta_{\text{абс}}$, ppm | $\Delta_{\text{отн}}$, % | N1 | N2 |
|------------------|-------------------|---------------------------|-----------------------------|---------------------------|----|----|
| CO | 1,89 | 1,89 | $2,31 \cdot 10^{-1}$ | 5,95 | 0 | 0 |
| NO | 3,53 | 3,57 | $4,45 \cdot 10^{-1}$ | 4,12 | 0 | 0 |
| NO ₂ | 2,31 | 2,31 | $2,98 \cdot 10^{-2}$ | $9,64 \cdot 10^{-1}$ | 0 | 0 |
| H ₂ O | $1,56 \cdot 10^2$ | $1,56 \cdot 10^2$ | $6,49 \cdot 10^{-1}$ | $3,88 \cdot 10^{-1}$ | 0 | 0 |
| CO ₂ | $1,00 \cdot 10^5$ | $1,00 \cdot 10^5$ | $1,80 \cdot 10^1$ | $1,34 \cdot 10^{-2}$ | 0 | 0 |
| CH ₄ | $1,00 \cdot 10^4$ | $1,00 \cdot 10^4$ | $2,86 \cdot 10^{-1}$ | $1,94 \cdot 10^{-3}$ | 0 | 0 |

Результаты решения представлены в табл. 3, 4. В первом, столбце таблиц приводятся точные значения концентраций газов в ppm, во втором — полученные из решения обратной задачи, усредненные по ста реализациям, в третьем — среднеквадратическое отклонение, в четвертом — относительная погрешность. В пятом столбце дана информация о количестве полученных отрицательных решений, а в шестом — с ошибкой более ста процентов.

Из таблиц видно, что при решении обратной задачи для CO и NO получается наибольшая погрешность восстановления концентраций. Причем при малых значениях концентраций этих газов (2 мг/м^3 для CO и 4 мг/м^3 для NO) и $W_0 = 1$ мВт могут появиться отрицательные значения. Это хорошо согласуется с результатами моделирования минимально обнаруживаемых концентраций, приведенными в табл. 1.

Повысить точность решения можно двумя путями, Первый — использование регуляризирующих алгоритмов для решения обратной задачи с привлечением априорной информации об искомым концентрациях (например, их положительность). Второй путь — повышение отношения сигнал/шум. В табл. 4 приведены результаты решения обратной задачи для $W_0 = 10$ мВт, из которой следует вполне приемлемая точность определения концентраций CO и NO.

1. Christensen J. // Technical Review. Bruel & Kjaer. Denmark. 1990. № 1. P. 1–39.
2. Борисевич Н.А., Верещагин В.Г., Валидов М.А. Инфракрасные фильтры. Минск: Наука и техника, 1971. 226 с.
3. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М.: Наука, 1972. 332 с.
4. Гурвич М.М. Фотометрия (теория, методы и приборы). Л.: Энергоатомиздат, 1983. 272 с.
5. Rothman L.S., Gamache R.R., Goldman A. // Appl. Opt. 1987. V. 26. № 19. P. 4058–4097.
6. Мицель А.А., Фирсов К.М. // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1987. Т. 23. № 11. С. 1221–1227.
7. Каталог инфракрасных дисперсионных фильтров для области спектра 4–30 мкм. Минск, 1973.
8. Катаев М.Ю., Мицель А.А. // Оптика атмосферы. 1988. Т. 4. № 7. С. 705–712.
9. Левин Б.Р. Теоретические основы статистической радиотехники. Т. 2. М.: Сов. радио, 1985.

Институт оптики атмосферы СО РАН,
Томск

Поступила в редакцию
28 декабря 1991 г.

V.A. Kapitanov, M.Yu. Kataev, A.A. Mitsel, B.A. Tikhomirov, K.M. Firsov.
Modelling of the Opto-Acoustic Gas Analyzer with a Thermal Light Source.

A numerical simulation of the potentialities of an optoacoustic gas analyzer with a thermal light source to detect CO, NO₂ and NO in a dried mixture of N₂, CO₂, CH₄ and H₂O has been carried out. Some problems of optimizing the parameters of a light source system are considered. Also modelling of the absorption coefficients of gases in the opto-acoustic cell is discussed and minimum detectable concentrations are analyzed. It is shown that NO₂ quantity of 2 мг/м^3 can be detected with the power of light about 1 mW, while the detection of the same quantities of NO and CO will require 10 mW light power.