## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И СТРУКТУРА МОДУЛЯЦИОННОГО ОПТИКО-АБСОРБЦИОННОГО ГАЗОАНАЛИЗАТОРА ВЫХЛОПНЫХ ГАЗОВ

# Кузнецов А.А.<sup>1</sup>, Морозов О.Г.<sup>1</sup>, Нуреев И.И.<sup>1</sup>, Сахабутдинов А.Ж.<sup>1</sup>, Фасхутдинов Л.М.<sup>1</sup>, Кучев С.М.<sup>2</sup>, Петров А.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГОБУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева – КАИ», Казань, Россия(420111, Казань, ул. Карла Маркса, 10), e-mail:serius\_91@mail.ru <sup>2</sup>НТЦ ОАО «КАМАЗ», Набережные Челны, Россия (423827, Набережные Челны, пр-т. Автозаводский, 2), email:Sergey.Kuchev@kamaz.org

В работе представлены результаты разработки математической модели и структуры модуляционного оптико-абсорбционного газоанализатора выхлопных газов, в котором используется модулированное по длине волны излучение квантово-каскадного лазера. Одной из основных целей математического моделирования является определение минимальной требуемой длины оптического пути L измерительной газовой кюветы при заданной чувствительности газоанализатора. Представлены исходные данные для построения математической модели, а именно параметры спектров поглощения исследуемых газов, спектр излучения лазера и закон его модуляции, параметры фотоприемника; алгоритм работы модели. В ходе моделирования было установлено, что для определения концентраций  $O_2=0,1\%$  иNO = 1 ppm, необходимо обеспечить  $L \ge 10$  см. Описана структура газоанализатора, предназначенного для контроля выхлопных газов двигателя внутреннего сгорания на газовом топливе, удовлетворяющего экологическим нормам Евро-5 и Евро-6.

Ключевые слова: абсорбционная спектроскопия, модуляционный оптико-абсорбционный газоанализатор, математическая модель, структура, квантово-каскадный лазер

#### MATHEMATICAL MODEL AND STRUCTURE OF MODULATION OPTICO-ABSORPTIVEEXHAUST GASESANALYZER

Kuznetsov A.A.<sup>1</sup>, Morozov O.G.<sup>1</sup>, Nureev I.I.<sup>1</sup>, Sahabutdinov A.J.<sup>1</sup>, Fashutdinov L.M.<sup>1</sup>, Kuchev S.M.<sup>2</sup>, Petrov A.V.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kazan National Research Technical University n.a. A.N. Tupolev-KAI, Kazan, Russia (10, Karl Marks street, Kazan, 420111, Russia), e-mail: serius\_91@mail.ru

<sup>2</sup>S&T Centre KAMAZ Inc., Naberezhnye Chelny, Russia(2, Ave. Avtozavodskii, Naberezhnye Chelny, 423827, Russia), e-mail:Sergey.Kuchev@kamaz.org

This article deals with the results of a mathematical modeling and structure designing of the modulation opticoabsorptive exhaust gases sensor, which uses a wavelength modulated radiation of quantum cascade laser. One of the main purposes of mathematical modeling is to determine the minimum required length of the optical path length L of the measuring gas cell at a given sensitivity of the analyzer. Initial data of a mathematical model, namely, the absorption spectra of the studied parameters of gas, the emission spectrum of the laser and the law of its modulation, parameters of the photo-detector; the algorithm of the model are shown. During the simulation, it was found that for the determination of the concentrations of O2=0,1% and NO = 1 ppm it was necessary to ensure L $\geq 10$  cm. The structure of gas analyzer is described. Analyzer is designed to control exhaust gases of internal combustion engine on gas that meets the environmental standards Euro-5 and Euro-6.

Keywords: absorption spectroscopy, modulation optico-absorptive gas analyzer, mathematical model, structure, quantum-cascade laser

В связи с ужесточением экологических требований на содержание вредных и загрязняющих веществ в выхлопных газах двигателя внутреннего сгорания (ДВС) задача высокоточного определения их концентрация в режиме реального времени крайне актуальна. Требования к аналитическому оборудованию (в частности к чувствительности), отвечающего стандартам Евро-5 и Евро-6, приведены в ГОСТ Р 54942-2012 [2] и составляют для анализаторов оксидов азота±1 ppm, анализаторов кислорода±0,1%. Существующие

газоанализаторы выхлопных газов ДВС [1] используют электрохимические сенсоры для анализа концентраций оксидов азота и кислорода. Существенным недостатком датчиков данного типа является низкий срок службы (1 год), вызванный «отравлением» Использование оптико-абсорбционного метода позволяет чувствительного элемента. увеличить срок службы на порядок и достичь более высоких характеристик чувствительности.

В работах [7-10] представлен широкий спектр газоанализаторов, построенных на различных принципах оптико-абсорбционной спектроскопии (TDLAS, CEAS, DOAS). Общим недостатком данных работ является отсутствие рекомендаций по выбору оптической длины пути, которая позволит обеспечить необходимую чувствительность, также не учтены эффекты температурного ослабления поглощения, которые имеют место R высокотемпературных выхлопных газах. Лишь в некоторых работах приведены данные по чувствительности при использовании одноходовой оптической кюветы. Так, в работе [10] при L=21 см получена чувствительность 2,7–5ррт для NO. Кроме того, не рассматриваются принципы построения модуляционных газоанализаторов.

Таким образом, основным направлением данной работы является разработка структуры и математической модели оптико-абсорбционного газоанализатора NO  $uO_2$  в выхлопных газах ДВС, построенного по принципу модуляционного зондирования, с целью определения минимальной длины оптического пути, при которой будут достигнуты требуемые характеристики по чувствительности $O_2$  и NO.

# Общие положения. Исходные данные для построения математической модели и задача моделирования.

Принцип работы модуляционного оптико-абсорбционного газоанализатора заключается в следующем (рис.1). Квантово-каскадный лазер генерирует узкополосное излучение (рис. 2), которое в блоке накачки лазера модулируется по длине волны по синусоидальному закону. В газовой кювете происходит поглощение излучения в те моменты времени, когда длина волны излучения лазера соответствует длине волны линии поглощения газа. Фотоприемник преобразует оптический сигнал в электрический, который поступает в блок обработки и визуализации для определения требуемых параметров.

2



Рис. 1. Структурная схема газоанализатора



Рис. 2. Спектр излучения лазера

Исходными данными для построения модели служат спектры поглощения исследуемого газа, характер его изменения при различных температурах и давлении, спектр излучения и тип модуляции лазера и чувствительность фотоприемника. Характеристики газовой кюветы подлежат определению.

*Спектры поглощения исследуемых газов.* Характеристики поглощения кислорода в УФ области и вид спектра используемой линии поглощения представлен на рис. 3.



Рис. 3. Контур поглощения кислорода (линия λ=760.887 нм)

Ширина линии поглощения NOтакже составляет<sup>▲</sup> *г*~0,01 пм по полной ширине на полувысоте [3].

Характер изменения спектра исследуемых газов при различных температурах и давлении. При изменении температуры и давления газа изменяется его спектр поглощения. Увеличение температуры приводит к уменьшению коэффициента поглощения, а рост давления – к уширению линий. Параметры исследуемой среды (выхлопной газ ДВС): температура T~600°C, давление P~2атм. Для таких условий явления уширения линий будут незначительны и ими можно пренебречь. Однако температурное снижение коэффициента поглощения будет существенно, и его необходимо учитывать. Для этого необходимо ввести датчик температуры, исходя из показаний которого будут вводиться поправочные коэффициенты. В общем случае зависимость интенсивности линии от температуры выглядит следующим образом:

$$I_{T=X K} = I_{T=296 K} \cdot \frac{W_{T=296 K}}{W_{T=X K}}$$
(1)

где *I*<sub>*T*=296 *к* – интенсивность линии при *T*=296 °К;</sub>

## W<sub>T=296 K</sub>

 $W_{T=XK}$  – параметр, определяемый на основе статистических данных для температуры  $T=X^{\circ}K[4]$ .

#### Спектр излучения, тип модуляции лазера и параметры фотоприемника

В качестве источника используется квантово-каскадный лазер с центральной длиной волны излучения 760нм, шириной линии излучения *∆L* = 0,008пм и мощностью 15 мВт [6].

Модуляция длины волны излучения лазера осуществляется с помощью тока накачки вблизи линии поглощения по синусоидальному закону (2), частоту и амплитуду которого можно задавать.

$$\lambda_L = A_L \cdot \sin(\omega_L \cdot t), \tag{2}$$

где*A*<sub>*L*</sub>– амплитуда модуляции длины волны;

*w*<sub>L</sub> – частота модуляции длины волны.

Используется фотоприемник с чувствительностью 0,4 А/Вт и темновым током 20 нА. Данные параметры являются типовыми для фотоприемников диапазона 700-800 нм [5].

#### Задача моделирования. Длина газовой кюветы

В ходе моделирования должны быть определены следующие параметры измерительной газовой кюветы: оптическая длина пути L и коэффициент передачи  $T_R$ . Для упрощения задачи примем коэффициент  $T_R=1$  (используется оптическая схема без потерь).

Подразумевается использование одноходовой оптической кюветы, однако это не ограничивает возможность использования других оптических схем.

#### Алгоритм работы модели газоанализатора

Для упрощения примем, что в начальный момент времени  $t_0$ длина волны излучения лазера  $\lambda_L$  и центральная длина волны линии поглощения газа  $\lambda_G$  равны. Промодулируем длину волны излучения лазера по закону (2).

Построение диаграммы интенсивности в программе происходит следующим образом.

1. Описывается кривая спектра излучения лазера и линии поглощения газа.

В обоих случаях эта кривая имеет форму гауссиана (3):

$$I(\lambda) = \frac{1}{2 \cdot \pi} \exp^{-\frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{2 \cdot \Delta \lambda^2}} \Box, \qquad (3)$$

где<sup>*λ*</sup>о – центральная длина волны излучения лазера/линии поглощения газа;

∆д — ширина линии излучения лазера/поглощения газа.

2. Находится площадь подинтегральной кривой для лазераз<sub>L</sub> и линии поглощения s<sub>G</sub>.

3. Для дискретных отчетов λ<sub>i</sub> производится вычисление по следующей формуле (4) и построение сигналограммы.

$$I = 1 - \frac{s_G}{s_L} \tag{4}$$

Минимумы этой кривой соответствуют максимуму поглощения (*I*). Интенсивность лазерного излучения ( $I_0$ ) известна и постоянна. Фиксируя значение коэффициента поглощения *k* (для концентрации O<sub>2</sub>=0,1% k=5,6·10<sup>-7</sup> см<sup>-1</sup>) и задавая различные значения параметра *L*, по закону Бугера-Ламберта-Бера, с учетом температурного коэффициента  $K_T$ , определяется значение *I*:

$$I = I_1 \mathbf{0} \cdot K_1 T \cdot \exp^{\dagger}(-k \cdot L) \tag{5}$$

4. Выбирается минимальное значение *L*, при котором разница  $I_0$ –*I* является различимой. Под понятием «различимой» подразумевается та оптическая мощность, которая способствует возникновению фототока, величина которого на порядок выше темнового и для данного фотодиода составляет 8·10<sup>-8</sup> Вт.

#### Моделирование оптико-абсорбционного газоанализатора

Для моделирования характеристик датчика по приведенному выше алгоритму была создана программа «Газоанализатор».

Окно программы представлено на рис. 4, результаты моделирования – на рис. 5.



Рис. 4. Окно программы «Газоанализатор»



Рис. 5. Зависимость *I*<sub>0</sub>–*I* длины оптического пути *L* 

В ходе моделирования был сделан вывод, что необходимая точность измерения концентрации (для O<sub>2</sub>=0,1 %, для NO = 1 ppm) может быть достигнута при оптической длине кюветы не менее 10 см.

#### Заключение

В ходе исследования была разработана математическая модель оптико-абсорбционного газоанализатора NO и O<sub>2</sub> в выхлопных газах ДВС, построенная по принципу модуляционного зондирования. По результатам моделирования было определено, что для обеспечения требуемой чувствительности (для O<sub>2</sub>=0,1 %, для NO = 1 ppm) необходимо использовать газовую кювету с оптической длиной путине менее 10 см.

Работа выполнена в рамках договора с Министерством образования и науки РФ от 12 февраля 2013 г. № 02.G25.31.0004.

1. ГИАМ-29М-3, ГИАМ-29М-4 газоанализатор контроля отработавших газов двигателей внутреннего сгорания переносной // Аналитприбор.URL:http://www.analitpribors.ru/GIAM-29M-3--GIAM-29M-4.html(дата обращения 05.09.2014).

 ГОСТ Р 54942-2012. Газобаллонные автомобили с искровыми двигателями. Выбросы вредных (загрязняющих) веществ с отработавшими газами. Нормы и методы контроля при оценке технического состояния. – М., Изд-во стандартов, 2012. – 20 с.

3. Инфракрасная спектроскопия // Физическая энциклопедия.URL: http://dic.academic.ru/ dic.nsf/enc\_physics/1134/ИНФРАКРАСНАЯ(дата обращения 05.09.2014).

4. Справочная информация по ИВС SPECTRA // Спектроскопия атмосферных газов. URL:http://specinfo.iao.ru/ru/theory/pt\_dep/(дата обращения 05.09.2014).

5. Фотодиоды для диапазона 280-1100 нм. Каталог продукции// Инновационная компания ФТИ им. А.Ф. Иоффе. ЗАО Техноэскан. URL:http://www.technoexan.ru/products/ diodes/cat1.php(дата обращения 05.09.2014)

6. Eblana Photonics. Gas Sensing & Metrology Laser Diodes// Eblana Photonics. URL: http://www.eblanaphotonics.com/specialty-laser-diodes.php (дата обращения 05.06.2014).

7. FitzpatrickC.,DoolyG.andLewisE.HazardousexhaustgasmonitoringusingadeepUVbaseddifferentialopticalabsorptionspectroscopy(DOAS) system // Journal of Physics: Conference Series, 2007. - №76. - P.15-21.

8. Kasyutich V.L., Holdsworth R.J., Martin P.A. Mid-infrared laser absorption spectrometers based upon all-diode laser difference frequency generation and a room temperature quantum cascade laser for the detection of CO, N<sub>2</sub>O and NO // Appl. Phys., 2008, No B92. – C. 271–279.

9. Mędrzycki R., Wojtas J., Rutecka B., Bielecki Z. Detection of nitric oxide in exhaled air using cavity enhanced absorption spectroscopy // Proc. of SPIE, 2013. Vol. 8902. – C. 92-113.

 Oxygen Concentration Sensors and Methods of Rapidly Measuring the Concentration of Oxygen in Fluids: пат.US20120019829 A1 США. №US8248612; заявл.26.07.2010; опубл. 26.01.2012. 4 с.

#### Рецензенты:

Морозов Г.А., д.т.н., профессор, директор Казанского филиала Поволжского государственного университета телекоммуникаций и информатики, г. Казань. Анфиногентов В.И., д.т.н., профессор, профессор Казанского филиала Поволжского государственного университета телекоммуникаций и информатики, г. Казань.

7