

УДК 681.5.017:519.87

В. А. Іщенко, асп.;

В. Г. Петрук, д. т. н., проф.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ОПТИЧНОГО СФЕРИЧНОГО ПЕРЕТВОРЮВАЧА ІНТЕРАКТИВНОЇ СИСТЕМИ КОНТРОЛЮ МІКРОКОНЦЕНТРАЦІЇ ЗАБРЮДНЮВАЛЬНИХ ГАЗІВ

Розроблено математичну модель оптичного сферичного вимірювального перетворювача, який є головним елементом розроблюваної інтерактивної системи контролю мікроконцентрації забруднювальних газів. Розглянуто основні фактори, які визначають точність вимірювань системи, а також в аналітичному вигляді описано їх вплив на інформативний параметр. На основі відомого рівняння переносу випромінювання і з урахуванням вищезгаданих факторів розроблено узагальнену математичну модель сферичного перетворювача.

Питанню умов проживання людей в сучасних будинках і квартирах, у тому числі стану мікроклімату в газифікованих житлових приміщеннях, на даний час в Україні приділяється надто мало уваги. Хоча забезпечення нормальних умов життя і здоров'я людей є пріоритетним завданням соціальної політики будь-якої держави. Тому дослідження цього питання є особливо актуальним.

Відомо, що при використанні у побутових умовах газових плит (а останнім часом і газових котлів) виділяється чимало шкідливих і небезпечних для людини речовин — продуктів горіння природного газу (бензен, бензпірен, формальдегід, чадний газ, оксиди азоту і сірки та ін.). Ці речовини за певних умов здатні викликати негативні зміни в організмі людини.

Слід зазначити, що відповідні служби в Україні не мають у своєму розпорядженні приладів, які могли б забезпечити належну якість і повноту вимірювань і були б відносно недорогими. Тому авторами розробляється інтерактивна система контролю мікроконцентрації забруднювальних газів, яка працюватиме в інфрачервоному діапазоні довжин хвиль. В роботі розглянуто розроблену математичну модель сферичного оптичного перетворювача, який є основним елементом вищезгаданої системи.

В основі розробленої математичної моделі лежить теорія переносу випромінювання з відповідним рівнянням [1]

$$\frac{dI_l}{d\tau} = -I_0 + \frac{\Lambda}{4\pi} \int_{4\pi} f(\theta') I_r d\omega', \quad (1)$$

де I_0 , I_l та I_r — відповідно інтенсивності падаючого світла, світла, яке пройшло шлях l , та інтенсивність розсіяного світла; $f(\theta')$ — індикатриса розсіяння, тобто відносний розподіл за кутами θ' світла, розсіяного елементарним об'ємом з довжиною dl ; $d\omega'$ — тілесний кут стороннього джерела освітлення; Λ — ймовірність виживання фотона; $d\tau = \varepsilon dl$ — оптична довжина середовища, де ε — показник послаблення.

Враховуючи те, що розглядається сферичний вимірювальний перетворювач, то хоч ефект розсіювання і буде присутнім, однак він не буде інформативним. Розсіяне світло знову буде відбиватись від стінок сфери і знову частково поглинатись, а частково розсіюватись і т. д. Тому другий член в правій частині рівняння (1), який називають функцією джерела, буде дорівнювати нулю, а саме рівняння перетвориться у закон Бугера у диференціальній формі

$$\frac{dI_l}{d\tau} = -I_0. \quad (2)$$

Із закону Бугера, при введенні концентрації (у нашому випадку газу) C , отримується закон Бугера—Ламберта—Бера

$$I_l = I_0 e^{-\varepsilon Cl}. \quad (3)$$

Показник послаблення ε являє собою суму двох складових

$$\varepsilon = m_\alpha + m_\sigma, \tag{4}$$

де m_α та m_σ — показники поглинання і розсіювання відповідно.

Через неінформативність розсіювання другий доданок у формулі (4) зникає. Отже формулу (3) можна переписати у вигляді

$$I_l = I_0 e^{-m_\alpha C l}. \tag{5}$$

Тепер, якщо розмірністю C є моль/л, то показник поглинання m_α замінюється на молярний питомий показник поглинання χ (одиниці вимірювання — [л/(моль·см)])

$$I_l = I_0 e^{-\chi c l}. \tag{6}$$

Розглянемо тепер основні фактори, які впливають на процес перенесення випромінювання і, відповідно, на вигляд математичної моделі.

1. Ефективний коефіцієнт відбивання внутрішніх стінок сфери буде мати вигляд [1]

$$\rho = \rho' \frac{S_{\text{роб}}}{S}, \tag{7}$$

де ρ' — коефіцієнт відбиття шару нанесеного матеріалу; $S_{\text{роб}}$ і S — робоча і повна поверхні сфери відповідно. Площа робочої поверхні визначається як

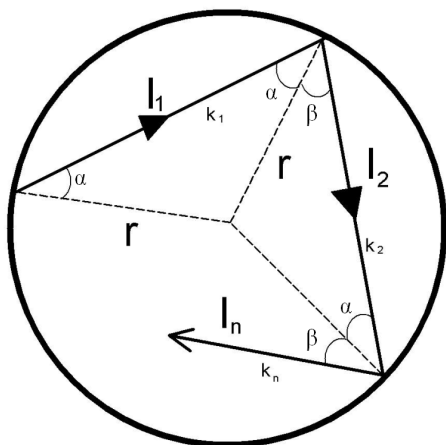
$$S_{\text{роб}} = S - S_{\text{отв}}, \tag{8}$$

де $S_{\text{отв}}$ — площа отворів.

Зрозуміло, що чим більше відношення $S_{\text{роб}}/S$, тим більше ρ і тим менші втрати світла при перенесенні випромінювання і, відповідно, тим менша похибка вимірювань. Тому необхідно або зменшувати площу отворів до мінімуму, або збільшувати розмір сфери. І задача зводиться до вибору оптимального співвідношення $S_{\text{роб}}/S$.

Виразивши концентрацію із закону Бугера—Ламберта—Бера і врахувавши поправку на втрати світла через неповне відбивання від внутрішніх стінок сфери, отримаємо такий вираз:

$$C = -\rho' \frac{S - S_{\text{отв}}}{S} \cdot \frac{\ln \frac{I_l}{I_0}}{\chi l}. \tag{9}$$



До визначення довжини шляху пучка світла у сферичному вимірювальному перетворювачі

2. Значення довжини шляху пучка світла l , яке проходить через досліджуване середовище, визначається через кількість відбивань n пучка світла від внутрішніх стінок сфери. n — це число відбивань, після яких інтенсивність пучка світла буде рівною порогу чутливості приймача, або такою межею буде значення допустимої похибки вимірювань (див. рис.). Якщо цю похибку прийняти за 1% (тобто мінімальна інтенсивність, на яку ще реагує приймач, буде складати 1% від початкової інтенсивності), то $I_n = 0,01 I_1$, а також $I_n = I_1 \rho^n$. Останній вираз легко отримується, враховуючи, що $I_2 = I_1 \rho$, $I_3 = I_2 \rho^2$ і т. д. Отже, можна записати

$$0,01 = \rho^n, \tag{10}$$

$$n = -\frac{2}{\lg \rho}. \tag{11}$$

звідки

Шукана довжина шляху l буде сумою шляхів пучка світла від відбивання до відбивання, тобто сумою відрізків $k_1, k_2 \dots k_n$. Беручи до уваги, що кут падіння α пучка світла на стінки сфери дорівнює куту відбивання β , неважко зрозуміти, що $k_1 = k_2 = \dots = k_n$.

Звідси отримуємо вираз:

$$l = k_n (n + 1). \quad (12)$$

Із рисунка визначаємо, що

$$k_n = 2r \cos \alpha. \quad (13)$$

Підставляючи в (12) формули (11) та (13), отримуємо

$$l = 2r \cos \alpha \left(1 - \frac{2}{\lg \rho} \right). \quad (14)$$

Отже, довжина пучка світла, яке проходить через досліджуване середовище, буде змінюватись в залежності від значення ефективного коефіцієнта відбивання внутрішніх стінок сфери. При цьому математична модель переносу випромінювання набуде вигляду:

$$C = -\rho' \frac{S - S_{\text{отв}}}{S} \cdot \frac{\ln \frac{I_l}{I_0}}{\chi D \cos \alpha \left(1 - \frac{2}{\lg \rho} \right)}, \quad (15)$$

де D — діаметр сфери ($D = 2r$).

3. Тиск P і температура T досліджуваного середовища впливають на процес поширення випромінювання за рахунок того, що при їх зміні змінюється і значення показника поглинання χ . Справа в тому, що в інфрачервоній спектрометрії вплив тиску і температури враховується таким чином: від тиску і, в меншій мірі, від зміни температури сильно залежить напівширина спектральної лінії поглинання, огинаюча спектра смуги теж прямо пропорційна зміні тиску і обернено пропорційна квадратному кореню зміни температури. В свою чергу форма контуру спектральних ліній (а з нею і їх напівширина) визначається головним чином дією таких трьох ефектів:

- 1) радіаційним затуханням (природна ширина лінії);
- 2) ефектом Доплера;
- 3) зіткненням молекул.

Природна ширина ліній спектру настільки мала у порівнянні із доплерівською, що нею можна знехтувати. Ефект Доплера полягає в тому, що частота випромінювання чи поглинання атома, який рухається в напрямку променя зору, зміщена відносно частоти випромінювання чи поглинання нерухомого атома на величину, яку називають доплерівським розширенням. Для контуру спектральної лінії, розширення в якій викликане тільки ефектом Доплера, отримуємо такий вираз [2]:

$$k_n(\nu) = \frac{s}{\sqrt{\pi} \gamma_D} e^{\left[-\left(\frac{\nu - \nu_0}{\gamma_D} \right)^2 \right]}, \quad (16)$$

де $k_n(\nu)$ — спектральний коефіцієнт поглинання на довжин хвилі із частотою ν ; s — інтенсивність лінії (стала для даної молекули газу на певній довжині хвилі); ν_0 — центр лінії поглинання;

$$\gamma_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{m}} \quad (17)$$

— доплерівська напівширина лінії; T — температура газу, К; m — маса молекули газу, розширення спектральної лінії якого визначається (молекулярна маса); c — швидкість світла, км/с; k — стала Больцмана ($1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К).

Як видно із формули (17), γ_D не залежить від тиску і слабо залежить від температури.

Підставляючи значення констант у (17), отримуємо

$$\gamma_D = 7,16 \cdot 10^{-7} \nu_0 \sqrt{\frac{T}{m}}. \quad (18)$$

Розширення ліній, обумовлене зіткненням молекул, описується рядом теорій. У даному випадку також мають місце впливи сил Ван-дер-Ваальса, міжатомних електричних полів. Найпростіший і найпоширеніший вираз для спектрального коефіцієнта поглинання, який дає теорія Лоренца, описано у [2]

$$k_n(\nu) = \frac{s}{\pi} \cdot \frac{\gamma_L}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_L^2}, \quad (19)$$

де γ_L — лоренцівська напівширина лінії. Цей параметр напряму обумовлений тиском: із зростанням тиску зростає інтенсивність зіткнень і, відповідно, тим більшим буде розширення лінії.

Напівширина лінії складає [2]

$$\gamma_L = \frac{1}{2\pi\tau}, \quad (20)$$

де τ — час життя у збудженому стані поглинаючої молекули. Із кінетичної теорії газів отримується вираз [2]:

$$\gamma_L = \sum_i n_i \sigma_i^2 \left[\frac{2kT}{\pi} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m_i} \right) \right]^{1/2}, \quad (21)$$

де n_i — концентрація молекул i -го типу; σ_i — ефективна відстань між збудженою молекулою і молекулою i -го типу; m і m_i — маси вказаних молекул.

Як видно, лоренцівська ширина лінії пропорційна тиску і перерізу співудару молекул.

У більш простій формі напівширина лінії записується так [2]:

$$\gamma_L = \gamma_L^0 \frac{P}{P_0} \sqrt{\frac{T_0}{T}}, \quad (22)$$

де γ_L^0 — напівширина лінії при нормальних умовах ($P_0 = 1$ атм, $T_0 = 273$ К). Найбільш ймовірне для атмосферних газів значення $\gamma_L^0 = 0,08$ см⁻¹.

В багатьох практично важливих випадках необхідно враховувати розширення ліній за рахунок обох ефектів одночасно. В цьому випадку вираз для спектрального коефіцієнта поглинання має вигляд [2]

$$k_n(\nu) = \frac{k_0 y^{+\infty}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x - t)^2} dt, \quad (23)$$

де k_0 , y , x — параметри, які визначаються за формулами

$$k_0 = \frac{s}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}; \quad y = \frac{\gamma_L}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}; \quad x = \frac{\nu - \nu_0}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}. \quad (24)$$

Тепер врахуємо вираз для значення $k_n(\nu)$ у нашій моделі (15). Для цього слід перейти до молярного показника поглинання.

Молярний і спектральний показники поглинання зв'язані залежністю

$$\chi = k_n(\nu) \frac{V}{n}, \quad (25)$$

де V — об'єм газу, л; n — кількість моль газу

$$n = \frac{V_0}{V_m}, \quad (26)$$

де $V_m = 22,4$ л/моль — об'єм 1 моля газу за нормальних умов, V_0 — об'єм, який займає газ за нормальних умов, л.

Використовуючи відомий закон Менделєєва—Клапейрона

$$PV = nRT, \quad (27)$$

(R — універсальна газова стала) і, розв'язуючи систему рівнянь

$$\begin{cases} PV = nRT; \\ P_0 V_0 = nRT_0, \end{cases} \quad (28)$$

отримаємо:

$$V_0 = \frac{PV T_0}{TR_0}. \quad (29)$$

Підставляючи (29) у (26) і, беручи до уваги, що $P_0 = 1 \text{ атм} = 760 \text{ мм рт.ст.}$, а $T_0 = 273 \text{ К}$, визначаємо

$$n = 1,6 \cdot 10^{-2} \frac{PV}{T}. \quad (30)$$

Підставивши отриманий вираз у (25), отримаємо

$$\chi = k_n(\nu) \frac{62,36 T}{P}. \quad (31)$$

Тоді загальний вигляд математичної моделі

$$C = -\rho' \frac{S - S_{\text{отв}}}{S} \cdot \frac{\ln \frac{I_l}{I_0}}{k_n(\nu) \frac{62,36 T}{P} d \cos \alpha \left(1 - \frac{2}{\lg \rho} \right)}. \quad (32)$$

Висновки

Розглянуто основні фактори, які впливають на процес перенесення випромінювання у оптичному сферичному перетворювачі, а також в аналітичному вигляді описано їх вплив на ступінь поглинання випромінювання визначуваними газами. На основі відомого рівняння переносу випромінювання і з урахуванням вищезгаданих факторів розроблено узагальнену математичну модель сферичного перетворювача інтерактивної системи контролю мікроконцентрації забруднювальних газів.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Петрук В. Г. Спектрофотометрія світлорозсіювальних середовищ (теорія і практика оптичного вимірювального контролю) Монографія (ч. II). — Вінниця: Універсум-Вінниця, 2000. — 207 с.
2. Зуев В. Е., Кабанов М. В. Перенос оптических сигналов в земной атмосфере (в условиях помех). — М.: Советское радио, 1977. — 368 с.

Иценко Віталій Анатолійович — аспірант, **Петрук Василь Григорович** — завідувач кафедри. Кафедра хімії та екологічної безпеки, Вінницький національний технічний університет