

文章编号: 1007-6735(2015)05-0445-05

DOI: 10.13255/j.cnki.jusst.2015.05.006

波长扫描直接吸收光谱法燃烧诊断 技术适用情况讨论

杨 斌^{1,3}, 潘科玮², 杨荟楠¹, 黄 斌³, 刘佩进³

(1. 上海理工大学 上海市动力工程多相流动与传热重点实验室, 上海 200093; 2. 上海航天动力技术研究所, 上海 201109; 3. 西北工业大学 燃烧、热结构与内流场重点实验室, 西安 710072)

摘要: 针对波长扫描直接吸收光谱法(SDAS)在燃烧诊断应用中受温度与压强等参数影响的问题, 采用光谱仿真计算讨论该方法的适用情况, 以常用的 H_2O 分子 $7\,185.597\text{ cm}^{-1}$ 谱线为例, 基于 HITRAN 光谱数据库, 对不同温度和压强下分子吸收光谱影响因素进行分析. 根据目前二极管激光器调制范围一般在 2 cm^{-1} 以内, 得到了燃烧诊断应用中 SDAS 技术适用的一般原则, 并对适用范围的拓展提出了建议.

关键词: 可调谐二极管激光器吸收光谱技术; 波长扫描法; 波长扫描直接吸收光谱法; 燃烧诊断
中图分类号: TK 31 **文献标志码:** A

Application Conditions of Scanned-Wavelength Direct Absorption Spectroscopy for Combustion Diagnostics

YANG Bin^{1,3}, PAN Kewei², YANG Huinan¹, HUANG Bin³, LIU Peijin³

(1. Shanghai Key Laboratory of Multiphase Flow and Heat Transfer in Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China; 2. Shanghai Space Propulsion Technology Research Institute, Shanghai 201109, China; 3. Science and Technology on Combustion, Internal Flow and Thermal-Structure Laboratory, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: For understanding the influences of temperature and pressure on combustion diagnostics by the scanned-wavelength direct absorption spectroscopy (SDAS), the molecular absorption spectrum simulation method was used to discuss the application conditions. Based on HITRAN database, taking $7\,185.597\text{ cm}^{-1}$ water-vapor line as an example, the influence factors were analyzed at different temperature and pressure. Considering the modulation range of diode laser is about 2 cm^{-1} at present, the application criterions of SDAS for combustion diagnostics were discussed and summarized, and the suggestions which broaden the application range were presented.

收稿日期: 2014-07-21

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51306123); 教育部博士点基金联合资助项目(20133120120008); 上海市科委科研计划项目(13DZ2260900)

第一作者: 杨 斌(1985-), 男, 讲师. 研究方向: 燃烧与多相流在线测量方法. E-mail: yangbin@usst.edu.cn

通信作者: 杨荟楠(1983-), 女, 讲师. 研究方向: 激光光谱测量方法. E-mail: yanghuinan@usst.edu.cn

Key words: *tunable diode laser absorption spectroscopy; scanned-wavelength method; scanned-wavelength direct absorption spectroscopy; combustion diagnostic*

燃烧诊断技术是揭示燃烧机理和认识燃烧过程的重要工具之一^[1-3]. 可调谐二极管激光器吸收光谱技术 (tunable diode laser absorption spectroscopy, TDLAS) 对于碳氢燃料燃烧环境下的气体参数测量极具优势, 可实现诸如温度、组分浓度、速度及流量等多参数在线测量, 并且具有高灵敏度、高光谱分辨率、快时间响应、高可靠性及非接触等特点^[4-5]. 由于系统实现和处理方法简单, 波长扫描直接吸收光谱法 (scanned-wavelength direct absorption spectroscopy, SDAS) 是 TDLAS 技术应用最为广泛的技术之一^[6-9]. 但是, 在燃烧诊断应用中, 由于分子吸收光谱峰值、线宽等参数受到温度、压强等参数影响, 要获得准确、完整的吸收光谱, 对波长扫描范围有一定要求, 然而目前 TDLAS 技术广泛采用的通信用二极管激光器调制范围一般在 2 cm^{-1} 以内, 因此, SDAS 方法具有一定的局限性. 但其具体适用范围并未见有文献讨论, 因此, 本文以常用的 H_2O 分子 $7\,185.597\text{ cm}^{-1}$ 谱线为例, 基于 HITRAN 光谱数据库, 编写分子吸收光谱仿真程序, 开展不同温度、压强下分子吸收光谱影响因素分析. 根据目前二极管激光器调制范围一般在 2 cm^{-1} 以内, 讨论燃烧诊断应用中 SDAS 技术适用情况, 以此为 TDLAS 技术燃烧诊断应用提供参考.

1 基本原理

TDLAS 技术是将激光波长调制到特定组分吸收频域, 通过测量激光束经待测区域内某一特定波长范围内的衰减程度, 实现气态流场参数测量的一种燃烧诊断技术, 其基本原理为 Beer-Lambert 定律. 如图 1 所示, 半导体激光器产生激光, 光强为

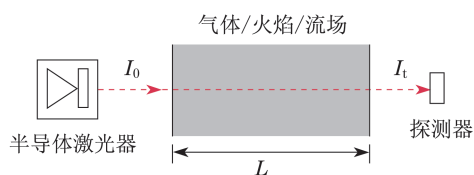


图 1 TDLAS 技术原理示意图
Fig.1 Schematic of TDLAS

I_0 , 激光通过待测气体后由光电探测器接收, 透射光强为 I_t , 激光频率为 ν , 单位为 cm^{-1} . 当激光频率 ν 与气体吸收组分跃迁频率相同时, 激光能量被吸收.

定义传播分数 T_ν , 入射光强与透射光强满足 Beer-Lambert 定律.

$$T_\nu = \left(\frac{I_t}{I_0} \right)_\nu = \exp(-k_\nu L) = \exp(-PX_{\text{abs}}S(T)\Phi L) \quad (1)$$

式中, k_ν 为光谱吸收系数; L 为激光光程; $(k_\nu L)$ 为光谱吸收率 α_ν ; p 为压强; X_{abs} 为吸收组分摩尔浓度; Φ 为线型函数 (在燃烧场条件下通常采用 Voigt 线型函数描述); $S(T)$ 为谱线强度, 是温度 T 的函数.

$$S(T) = S(T_0) \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \left(\frac{T_0}{T} \right) \cdot \exp \left[-\frac{hcE''}{k} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \cdot \left[1 - \exp \left(-\frac{h\nu_0}{kT} \right) \right] \left[1 - \exp \left(-\frac{h\nu_0}{kT_0} \right) \right]^{-1} \quad (2)$$

式中, h 为 Planck 常数; c 为真空中光速; k 为 Boltzmann 常数; E'' 为低能级能量; T_0 为参考温度; ν_0 为谱线中心频率; $Q(T)$ 为吸收组分配分函数.

2 分子吸收光谱仿真计算

为了深入理解分子吸收光谱与温度、压强等参数的关系, 有必要对分子吸收光谱开展系统的理论分析, 分子吸收光谱仿真计算必不可少. 本文基于 HITRAN 数据库, 编写分子吸收光谱仿真程序, 开展分子吸收光谱影响参数分析.

HITRAN 光谱数据库是由空军剑桥研究实验室 (Air Force Cambridge Research Laboratories, AFCRL) 在 20 世纪 60 年代针对大气分子跃迁而创建, 历经 50 余年的发展, 目前已成为可见光和红外区域大气分子光谱定量的重要工具. 数据库汇编了众多小分子光谱参数的实验测量、理论计算和预估结果, 包括谱线中心、谱线强度、低能级能量、空气加宽系数、自

加宽系数及温度指数等重要光谱参数^[10]. 由于 HITRAN 光谱数据库压强单位统一采用标准大气压 (atm) ($1 \text{ atm} = 101\,325 \text{ Pa}$), 为了同国际惯例一致, 本文压强单位统一采用标准大气压 (atm).

本文基于 Matlab 软件编写了分子吸收光谱仿真计算程序, 包括线型函数计算、谱线强度计算和分子吸收光谱仿真计算模块, 该程序是本文开展 SDAS 技术适用情况讨论的理论工具.

3 分子吸收光谱影响参数分析

由 Beer-Lambert 定律(式(1))可知, 吸收光谱与光程、组分浓度成正比, 而受温度 T 和压强 p 影响较为复杂, 本文以常用于燃烧诊断应用的 H_2O 分子 $7\,185.597 \text{ cm}^{-1}$ 谱线为例, 开展详细的分子吸收光谱参数影响分析, 其中, H_2O 组分浓度取 10%.

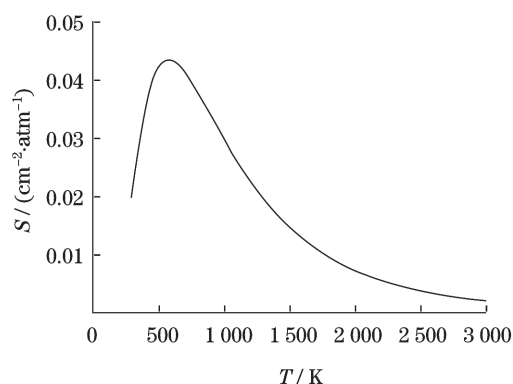
3.1 温度参数

由于吸收光谱是谱线强度与线型函数等的乘积, 温度对分子吸收光谱的影响可分解为对谱线强度与线型函数的影响. 压强 $p = 1 \text{ atm}$ 情况下, 计算不同温度 (296, 600, 1 000, 1 500, 2 000 K) 下 H_2O 分子谱线强度随温度 T 的变化情况、线型函数与吸收光谱随波长 λ 的变化情况, 如图 2 所示. 随着温度的升高, 谱线强度先增大, 在 580 K 左右达到最大值后降低. 而对于线型函数来说, 温度的变化对其影响不大. 因此, 压强等其它参数相同, 吸收光谱吸收率峰值随温度的变化趋势与谱线强度一致, 吸收率峰值随温度的升高先增大, 在 580 K 左右达到最大值后降低. 此外, 由图 2(c) 可以看出, 吸收光谱的线宽随温度变化不大, 这便是实现 SDAS 技术的基础.

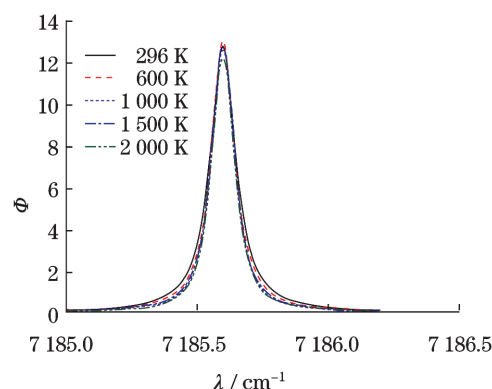
3.2 压强参数

压强对分子吸收光谱的影响主要是对线型函数的影响, 在温度 $T = 1\,000 \text{ K}$ 情况下, 开展不同压强 (0.5, 1, 2, 5, 10 atm) 下 H_2O 分子线型函数与吸收光谱计算, 如图 3 所示(见下页). 随着压强的升高, 线型函数的峰值减小, 线宽增大, 这是因为压强增大造成碰撞加宽增大, 线型函数宽度增大, 而面积积分不变, 因此, 峰值随之降低. 对于吸收光谱来说, 压强升高导致线宽增大的同时, 还会造成碰撞漂移, 并且

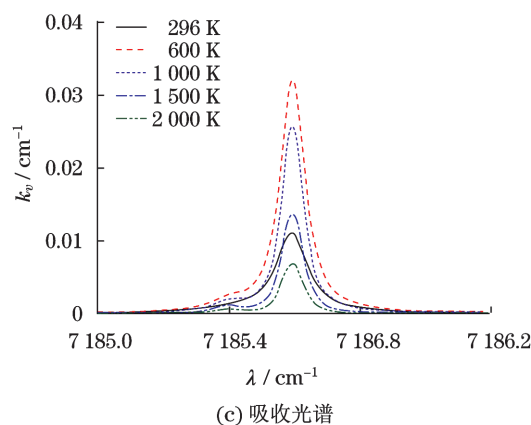
漂移量与压强成正比. 从图 2(b) 可以看出, 吸收光谱随压强的升高变化十分剧烈, 当 $p = 1 \text{ atm}$ 时, 吸收光谱频率跨度 1 cm^{-1} 左右, 当 $p = 5 \text{ atm}$ 时, 吸收光谱两翼已无法达到零值, 即无零吸收翼, 因此, 无法再通过 SDAS 技术获得该谱线完整的吸收光谱.



(a) 谱线强度



(b) 线型函数



(c) 吸收光谱

图 2 谱线强度、线型函数与吸收光谱随温度的变化情况

Fig. 2 Line strength, lineshape function and molecular absorption spectrum at different temperature

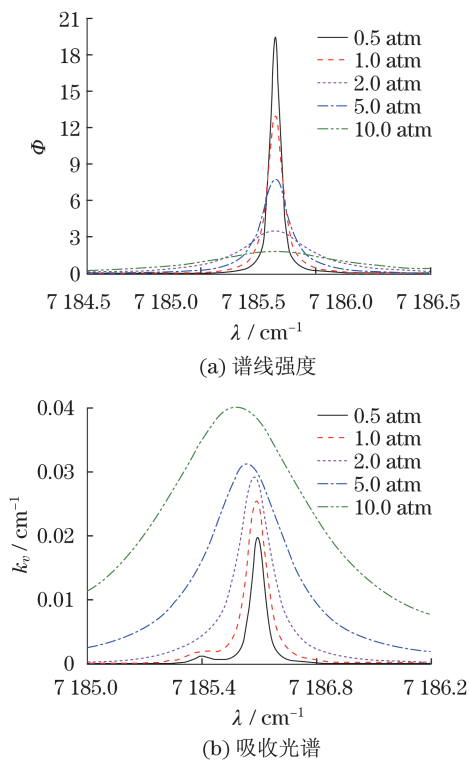


图3 线型函数与吸收光谱随压强的变化情况

Fig.3 Lineshape function and molecular absorption spectrum at different pressure

4 SDAS 技术适用情况讨论

能否有效获得吸收光谱是 SDAS 技术的关键. 温度对吸收光谱影响主要体现在峰值的变化, 而压强对吸收光谱的影响非常大. 由于目前半导体激光器调制范围在 2 cm^{-1} 以内, 因此, SDAS 技术就有一定的适用范围, 现将压强分为几个范围进行讨论.

4.1 低压 ($p \leq 1 \text{ atm}$)

如图 4 所示, 在压强 $p \leq 1 \text{ atm}$ 情况下, 零吸收翼间距小于 1.1 cm^{-1} , 而二极管激光器通常都能通过电流调制进行该范围吸收光谱的扫描, 此时 SDAS 技术完全适用, 即使有邻近谱线的干扰, 只要谱线强度大小差别较大, SDAS 技术仍然能够通过多峰函数拟合实现有效分辨, 从而准确获得确定谱线的吸收光谱.

4.2 较高压强 ($1 \text{ atm} < p \leq 3 \text{ atm}$)

如图 5 所示, 在压强 $p > 1 \text{ atm}$ 情况下, 谱线由于压强的增大使得碰撞加宽增大, 光谱整体上移, 零吸收翼逐渐消失. 以 $p = 3 \text{ atm}$ 为例, 零吸收翼间隔为 2 cm^{-1} , 正好为二极管激光器调制范围, 因此, 认

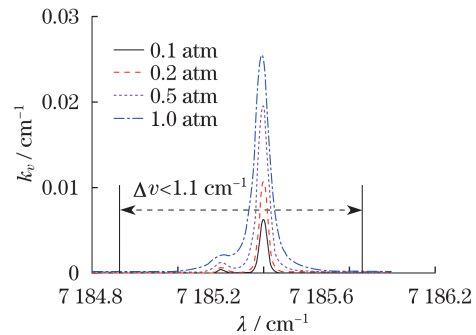


图4 较低压强下吸收光谱

Fig.4 Molecular absorption spectrum at lower pressure

为当 $1 \text{ atm} < p \leq 3 \text{ atm}$ 时, SDAS 技术仍然适用. 但压强越大, 对激光器调制范围的要求越高, 并且由于邻近谱线光谱叠加, 零吸收翼的范围越来越小, 此时, 利用 SDAS 技术获取吸收光谱的准确度会降低, 此时, 应对吸收光谱进行一定的修正.

4.3 高压 ($p > 3 \text{ atm}$)

如图 5 所示, 当压强 $p > 3 \text{ atm}$ 时, 吸收光谱线宽继续增大, 零吸收翼间距大于 2 cm^{-1} , 超出二极管激光器通常的调制范围, 并且由于邻近谱线的叠加, 吸收光谱甚至不存在有效的零吸收翼, 此时, SDAS 技术不再适用.

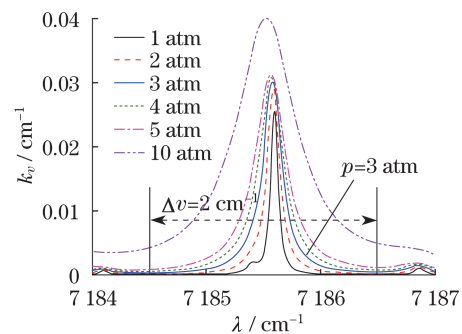


图5 较高压强下吸收光谱

Fig.5 Molecular absorption spectrum at higher pressure

5 进一步拓宽压强适用范围的建议

本文是基于常用作燃烧诊断的 H_2O 分子 7185.597 cm^{-1} 谱线进行分析, 以通常激光器调制范围 2 cm^{-1} 作为 SDAS 技术适用条件, 讨论得到 SDAS 技术适用原则. 目前来说, 该讨论是具有代表性的. 但进一步来说, 若能选取更为孤立的谱线, 随着压强增大, 邻近谱线的干扰将进一步减弱, 这对拓宽 SDAS 技术压强适用范围具有积极意义. 此外, 随

着激光器的进一步发展,调制范围也能进一步加宽,这也能扩宽 SDAS 技术压强适用范围。

与其它技术相比,SDAS 技术具有系统实现与处理方法简单等优点,是 TDLAS 技术优先考虑的技术,但是,由于燃烧环境下分子吸收光谱受压强影响较大,因此,存在一定的压强适用范围,这是本文研究的出发点。但对于 SDAS 技术无法实现的更高压强范围,可利用固定波长直接吸收光谱技术(fix-wavelength direct absorption spectroscopy, FDAS)和二次谐波调制光谱技术(wavelength modulation spectroscopy with the second harmonic detection, WMS-2f)^[11]。由于 FDAS 技术将激光固定调制在谱线中心处,仅需测量该波长下激光的衰减程度实现参数测量,无需获得整个光谱形状,不受压强影响;而 WMS-2f 技术利用谱线中心处 2f 信号高度开展参数测量,同样不需要获得整个光谱 2f 信号,不受压强增大造成光谱线宽加宽影响,因此,这两种方法为 TDLAS 技术对高压流场参数的测量提供可能。

6 结 论

基于 HITRAN 光谱数据库,通过开展不同温度和压强下分子吸收光谱的仿真计算,讨论 SDAS 燃烧诊断技术适用情况,得到如下结论:

a. 开展温度和压强参数对吸收光谱的影响分析发现,温度对谱线强度影响较大,且谱线强度决定吸收光谱吸收率峰值的大小;压强对线型函数影响较大,谱线线宽增大,邻近谱线叠加严重。

b. 根据压强对吸收光谱影响的特点,结合 SDAS 技术适用条件(通常激光器调制范围 2 cm^{-1}),确定在低压情况($p \leq 1\text{ atm}$)下,SDAS 技术完全适用;在较高压强($1 < p \leq 3\text{ atm}$)下,利用 SDAS 技术需通过理论分析进行测量结果修正;而对于高压($p > 3\text{ atm}$)情况,SDAS 技术不再适用。

c. 谱线的优化与激光器调制范围的进一步加宽都能拓宽 SDAS 技术的压强适用范围,而对于

SDAS 技术无法实现的更高压强范围,可利用 FDAS 技术和 WMS-2f 技术。

参考文献:

- [1] Soid S N, Zainal Z A. Spray and combustion characterization for internal combustion engines using optical measuring technique—A review[J]. Energy, 2011, 36(2): 724–741.
- [2] Candel S, Durox D, Schuller T, et al. Advances in combustion and propulsion applications[J]. European Journal of Mechanics-B/Fluids, 2013, 40 (7/8): 87–106.
- [3] 王美清, 郁鸿凌, 陈梦洁, 等. 城市污水污泥热解和燃烧的实验研究[J]. 上海理工大学学报, 2014, 36(2): 185–188.
- [4] Hanson R K. Applications of quantitative laser sensors to kinetics, propulsion and practical energy systems [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2011, 33 (1): 1–40.
- [5] 洪延姬. 燃烧场吸收光谱诊断技术研究进展[J]. 实验流体力学, 2014, 28(3): 12–25.
- [6] Baer D S, Nagali V, Furlong E R, et al. Scanned-and fixed-wavelength absorption diagnostics for combustion measurements using multiplexed diode lasers[J]. AIAA Journal, 1996, 34(3): 489–493.
- [7] 许振宇, 刘文清, 刘建国, 等. 基于可调谐半导体激光器吸收光谱的温度测量方法研究[J]. 物理学报, 2012, 61(23): 232–239.
- [8] 李飞, 余西龙, 陈立红, 等. TDLAS 测量甲烷/空气预混平面火焰温度和 H_2O 浓度[J]. 实验流体力学, 2009, 23(2): 40–44.
- [9] 陶波, 胡志云, 张立荣, 等. 基于激光吸收光谱技术在燃烧场温度研究[J]. 大气与环境光学学报, 2010, 5(6): 438–444.
- [10] Rothman L S, Gordon I E, Barbe A, et al. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2009, 110(9/10): 533–572.
- [11] Zhou X. Diode laser absorption sensors for combustion control[D]. California: Stanford University, 2005.

(编辑:石 瑛)