

利用可调谐激光吸收光谱技术对光路上气体温度分布的测量

李 宁, 严建华, 王 飞*, 池 涌, 岑可法

浙江大学能源清洁利用国家重点实验室, 浙江 杭州 310027

摘 要 利用可调谐激光吸收光谱技术(TDLAS), 扫描多条吸收谱线以实现气体温度分布的测量。文章给出了温度分布测量的原理和方程离散化的方法, 在气体浓度和压力均匀时, 利用带约束最小二乘法计算得到温度分布。根据 HITRAN 中 $6\,330\text{ cm}^{-1}$ 附近的 4 条 CO 谱线的参数, 建立了温度在 300 和 600 K 时, 路径长度均为 55 cm 的两段温度分布模型, 模拟了测量误差与温度区间长度约束条件的影响。结果表明随着测量误差的增大和约束条件的减弱, 计算结果误差相应增大。在 5% 的测量误差下, 计算结果的最大误差为 11%, 平均误差为 2.2%。以管式炉中的高温段和室温下的低温段作为两段温度分布模型进行试验。利用 $6\,330\text{ cm}^{-1}$ 处的垂直腔面发射激光二极管(VCSEL)扫描得到的 4 条 CO 谱线, 通过背景信号的三次多项式拟合得到基线, 求出温度分布计算所需的光谱吸收率积分值。在四种情况下, 计算温度分布结果与模型误差分别为 7.3%, 6.5%, 4.7% 和 2.7%。

关键词 可调谐激光吸收光谱技术; 气体温度分布测量; 最小二乘法; 离散化方法

中图分类号: O443.1 文献标识码: A 文章编号: 1000-0593(2008)08-1708-05

引 言

很多行业都需要对温度进行实时监控, 以实现优化控制, 提高燃烧经济性, 降低污染物排放。热电偶测量是常用的温度测量方法, 但是只能实现单点的测量, 无法得到测量区域内部温度信息, 并且由于采用接触式的测量原理, 对温度场存在一定影响, 具有局限性。光学测量方法采用非接触式的测量原理, 通过得到与内部温度场相关的光学信号进行计算, 从而得到测量区域内部温度分布, 如利用 CCD 来进行温度场重建等等^[1-3]。

利用调谐激光吸收光谱(TDLAS)技术不但可以实现对于气体浓度的在线测量^[4-8], 也可以进行气体的温度测量。利用同时扫描两条气体吸收谱线得到的吸收信号, 可以实时计算出气体温度值。目前国内外研究学者对此都进行了大量的研究^[9-11], 但是此方法不能用于具有明显温度梯度的测量对象。采用扫描多条吸收谱线, 结合离散化的处理方法则可以得到在测量温度范围内, 测量区域内部大致的温度分布情况, 从而为安全控制和优化提供帮助。近些年来, 随着激光技术的发展和通讯技术的进步, 在近红外波段的光学仪器设备成本大大降低, 因此在近红外波段利用 TDLAS 进行气体

浓度和温度测量成为研究的热点。采用 VCSEL 激光二极管, 可以在其较宽的波长扫描范围内得到多条气体吸收谱线, 大大方便了气体温度分布的测量。

1 测量原理

激光穿过气体介质后, 其强度变化遵循 Beer Lambert 定律^[9, 10, 12-17]:

$$\frac{I_t}{I_0} = \exp(-PS_i(T)\phi L) \quad (1)$$

$S_i(T)$ 为该谱线强度, 它表示该谱线的吸收强度; P 为气体的总压; L 为光学路径长度; X 为气体的体积浓度; $\phi(v)$ 为线型函数, 它表示了被测吸收谱线的形状。

随着气体温度的变化, 其谱线强度也将发生变化^[11, 15-18]:

$$S_i(T) = S_i(T_0) \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \exp\left[-\frac{hcE_i''}{k}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \times \left[\frac{1 - \exp(-hc\nu_{0,i}/kT)}{1 - \exp(-hc\nu_{0,i}/kT_0)}\right] \quad (2)$$

其中 Q 为总的分子内部分割函数; E_i'' 为低跃迁态的能量; $\nu_{0,i}$ 为跃迁频率; h 为普朗克常数, k 为波尔兹曼常数, c 为光速。在温度低于 2 500 K, 波长小于 $2.5\text{ }\mu\text{m}$ 的情况下,

收稿日期: 2007-04-08, 修订日期: 2007-07-18

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(60534030)和国家自然科学基金项目(50576082)资助

作者简介: 李 宁, 1981 年生, 浙江大学热能工程研究所博士研究生 e-mail: phoenixkyo@163.com

* 通讯联系人 e-mail: wangfei@cmee.edu.cn

最后一项对于谱线强度的影响可以被忽略。由于线型函数在频域上的积分值为 1, 故(1)式可以表示为,

$$a_i = \int_{-\infty}^{\infty} -\ln\left(\frac{I_i}{I_0}\right) dv = \int_0^L PX S_i(T) dx \tag{3}$$

不同位置的谱线, 具有不同的低态跃迁能量, 根据(2)式, 其谱线强度随温度的变化情况也不相同。因此, 对于气体温度非均匀的测量区域, 通过采用多条吸收谱线, 利用其在光路上得到的不同的光谱吸收率积分值, 并借助于离散化或拟合^[18]的方法, 从而计算出光路上的气体温度分布为,

$$\begin{cases} a_1 = \int_0^L PX S_1(T) dx \\ a_2 = \int_0^L PX S_2(T) dx \\ \vdots \\ a_m = \int_0^L PX S_m(T) dx \end{cases} \tag{4}$$

其中 m 为测量中采用的吸收谱线的数目。采用离散化方法, 首先估计出测量气体的温度范围, 即温度的上限与下限, 然后在这个范围内, 把温度分成 n 段, 假定在每一段的区间内具有均匀分布的温度 T_i , 压力 P_i , 浓度 X_i , 从而(4)式可表示为:

$$\begin{bmatrix} S_1(T_1) & S_1(T_2) & \cdots & S_1(T_n) \\ S_2(T_1) & S_2(T_2) & \cdots & S_2(T_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ S_m(T_1) & S_m(T_2) & \cdots & S_m(T_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1 X_1 L_1 \\ P_2 X_2 L_2 \\ \vdots \\ P_n X_n L_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} \tag{5}$$

或

$$Sx = A \tag{6}$$

如果温度区间分布为($T_1, T_2, \cdots, T_n$), 则矩阵 S 便可以求出, 从而 x 也可以求解。很多测量过程中, 压力 P 和浓度 X 是均匀不变的, 这时便可以作为常数从矢量 x 中分离开来, 留下 $[L_1, L_2, \cdots, L_n]^T$, 即光路在各自温度区间内的长度, 从而得到了测量场内的温度分布。缺点在于得到的结果只能了解测量场内在不同温度区间内的长度, 无法知道各个温度区间在测量场中的位置。

拟合方法通过假定待测气体的温度和浓度分布建立模型, 利用迭代计算得到结果。但是对于很多测量对象, 其温度和浓度分布情况是无法提前预知的, 这便限制了拟合方法的应用, 相比而言, 离散化方法只需了解测量场的温度范围, 便可以得到气体温度的分布情况, 具有一定的优势。本文的数值模拟和试验均采用离散化的方法来进行计算。

当(5)式中谱线的数目 m 大于等于温度区间数目 n 时, 利用带约束的线性最小二乘法来进行拟合计算:

$$\min \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n (S_i(T_j) \times (P_j X_j L_j) - a_i) \right)^2 \tag{7}$$

计算结果为光路在各个温度区间内的长度。为了防止由于测量误差的存在, 使得计算结果误差过大, 或不符合物理意义, 在计算过程中加入一定的物理约束条件, 如每个温度区间的长度不能为负值, 总的温度区间长度为光路长度等等, 从而约束得到的计算结果, 使其可以真实反映实际情况。

2 数值模拟

为了考察气体温度分布计算过程中测量误差及物理约束条件对于结果的影响, 首先进行了数值模拟。模拟和试验中采用的激光源为波长在 $6\,330\text{ cm}^{-1}$ 处的 VCSEL 激光二极管, 在其扫描范围内存在 4 条较强的 CO 谱线, 其光谱参数如表 1 所示。

Table 1 Parameters of absorption lines of CO near $6\,330\text{ cm}^{-1}$ in HITRAN database

$\nu_{0,i}/\text{cm}^{-1}$	$S_i(T_0)/[\text{cm}^{-1} \cdot (\text{molecule} \cdot \text{cm}^{-2})]$	E''_i/cm^{-1}
6 334 43	1.313E-23	38 448 1
6 330 167	1.476E-23	57 670 4
6 325 799	1.565E-23	80 735 4
6 321 327	1.582E-23	107 642 4

模拟中, 模型由两个温度段组成, 300 与 600 K, 其长度均为 55 cm。温度分布计算采用 4 个温度区间, 分别为 300, 600, 900 和 1 200 K, 并设定气体浓度和压力均匀不变。通过给吸收信号添加不同比例的误差, 模拟计算过程中测量误差对于计算结果的影响。

向 4 条谱线模拟得到的吸收信号中添加同方向的 2%, 5% 和 10% 的误差, 以表示在最不利的情况下, 不同大小的测量误差对温度区间长度计算结果的影响, 如图 1 所示。

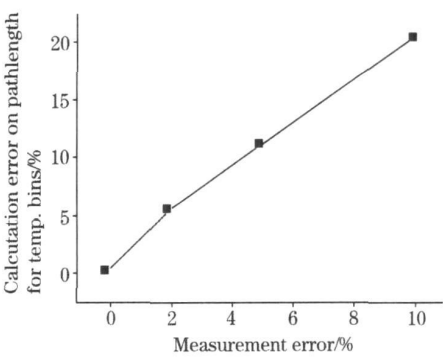


Fig 1 Effect of measurement error on calculation result of path length for temperature bins

在最不利的情况, 5% 的测量误差将导致最大为 11% 的温度区间长度计算误差, 但考虑到测量中误差的随机性, 故实际的温度区间长度计算误差将小于 11%。经计算, 5% 的测量误差所引起的温度区间长度计算误差的平均值为 2.2%。

利用最小二乘法进行的计算过程中, 不同的物理约束条件也会对温度分布的结果产生影响。图 2 给出了在 3% 的测量误差下进行两段温度分布计算时, 不同的温度区间长度约束条件对于计算结果的影响。

可见, 当约束温度区间长度小于 55 cm, 即与模型一致时, 计算出的温度分布与模型中吻合。但随着温度区间长度约束条件的减弱, 由于测量误差的存在, 利用最小二乘法计

算出的温度分布与模型之间的差异增大。因此,在实际测量中根据实际情况增加合适的物理约束条件,可以有效提高测量的准确性,减少测量误差对于结果的影响。

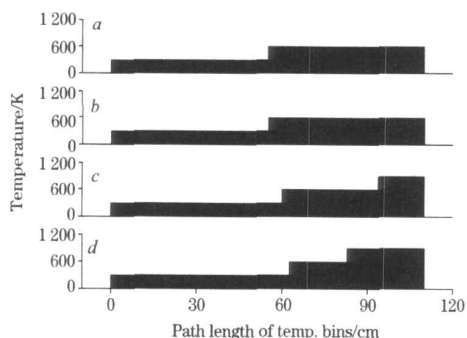


Fig 2 Calculation results of gas temperature distribution by different path length constraints of temperature bins

a is the setting temperature distribution; *b*, *c*, *d* are calculation results for constrained path length of less than 55 cm, 60 cm and 70 cm

3 两段温度测量试验

试验中利用信号发生器对 VCSEL 激光二极管驱动模块加载 10Hz 的周期性锯齿波电压信号,输出的激光束经过透镜准直后,入射至存入 CO 气体的 2 个 55 cm 的气体池内:一个作为高温段放置在管式炉内进行加热,为了保证在加热过程中的石英管内压力始终保持在大气压,石英管不封闭,一部分保留在管式炉外,与大气相通,并在开口处采用 CO 气体来进行密封;另一个吸收池放置在管式炉外,作为低温段以实现两段温度的测量。试验中设定了 4 个工况,分别将管式炉温度控制在 300, 573, 773 和 973 K,通过测量透射过高温段和低温段的气体吸收信号来计算光路上的温度分布(见图 3)。

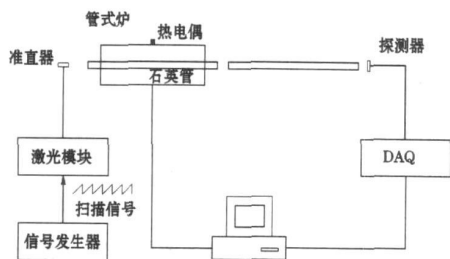


Fig 3 Experiment setup of two temperature distribution measurement

为了减少随机误差的影响,采集到的数据经过 10 次平均,得到在不同工况下谱线的吸收信号,并利用扫描过程中无气体吸收时激光强度信号拟合来得到基线的位置(见图 4)。

由于高温段有部分石英管没有被加热,而且管式炉的设定温度是由位于炉中央的热电偶反馈回的温度信号,代表管式炉内空间中心处的温度,其值高于炉内平均水平,因此,

管式炉设定温度与高温段的实际温度有一定差异,所以试验中首先测量了在不同工况下高温段内温度分布情况。利用离散化方法,设定 4 个温度区间, 300, 600, 900 和 1 200 K,利用带约束的最小二乘法进行计算,约束每个温度区间的长度均大于零,小于高温段长度 55 cm,从而计算得到高温段在 4 个温度区间中的长度分布。

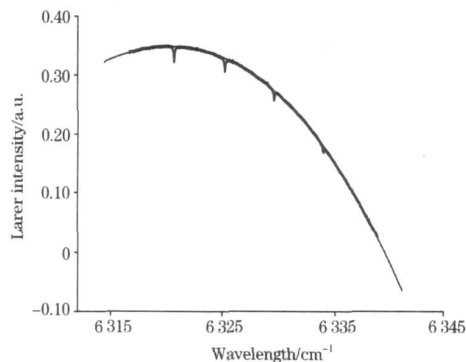


Fig 4 Baseline obtained by cubic polynomial fitting of background intensity

图 5 为管式炉温度分别设定为 573, 773 和 973 K 3 个工况时,高温段温度分布计算结果。为了与计算结果比较,将高温段气体温度假定为两段,炉内气体温度为管式炉设定值,炉外气体温度为室温,从而与高温段温度分布计算结果来进行对比。

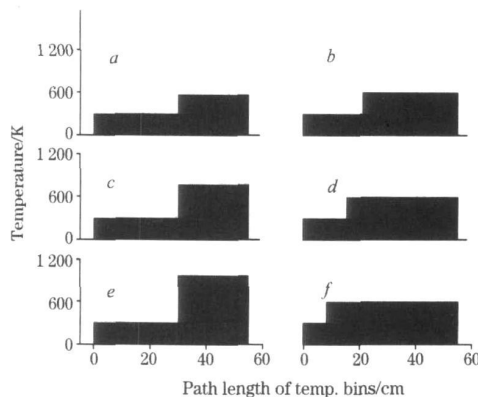


Fig 5 Comparison of supposed temperature distribution and calculated result at high temperature section

a, *c*, *e* are the supposed temperature distribution in three cases; *b*, *d*, *f* are the calculation results in three cases

计算出的气体温度集中于 300 与 600 K 两个区间内,低于管式炉的设定温度,与实际情况相符。并且随着管式炉设定温度的升高,计算得到的 600 K 区间内的光路长度不断增加,300 K 区间内的光路长度减小,与炉内温度变化趋势一致。以计算得到的高温段温度分布结果作为高温段的温度信号,结合室温下的低温段,作为两段温度分布计算模型。设定管式炉温度分别为 300, 573, 773 和 973 K,通过得到透射过两个吸收池的激光强度信号,计算出各个工况下的温度分布情况。分布计算采用了 4 个温度区间, 300, 600, 900 和 1 200 K,在计算中,约束每一个温度区间长度大于零,小于

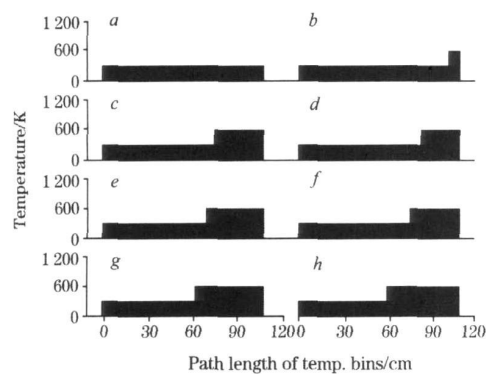


Fig 6 Comparison of two temperature distribution model and calculation result in four case

a, c, e, g are the two-temperature distribution model in four cases;
b, d, f, h are the calculation result of temperature distribution in four cases

高温段和低温段的长度总和 110 cm, 并且约束 4 个温度分布区间长度的总和为 110 cm。

通过图 6 可知, 计算出的温度分布情况与模型中的温度分布情况是比较吻合的, 并且随着高温段温度的变化, 其变化趋势一致, 在 4 个工况下的温度区间长度相对误差分别为 7.3%, 6.5%, 4.7% 和 2.7%。

4 结 论

利用可调谐激光吸收光谱技术, 通过扫描多条气体吸收谱线可以实现对于气体温度分布的测量。通过估计待测气体的温度范围, 划分出不同的温度区间, 利用带约束的最小二乘法进行计算从而得到光路在不同温度区间内的长度。在计算中结合实际环境, 添加符合物理意义的约束条件, 将提高测量的准确性。测量结果可以为研究人员对温度场内部的了解提供帮助。

参 考 文 献

- [1] WANG Fei, MA Zeng yi, WEI Cheng ye, et al(王 飞, 马增益, 卫成业, 等). Proceedings of the CSEE (中国电机工程学报), 2000, 20(7): 40.
- [2] HUANG Qun xing, MA Zeng yi, YAN Jiar hua, et al(黄群星, 马增益, 严建华, 等). Proceedings of the CSEE(中国电机工程学报), 2005, 25(6): 134.
- [3] HUANG Qun xing, MA Zeng yi, YAN Jiar hua, et al(黄群星, 马增益, 严建华, 等). Proceedings of the CSEE(中国电机工程学报), 2003, 23(3): 156.
- [4] TU Xing hua, LIU Wei qing, ZHANG Yu jun, et al(涂兴华, 刘文清, 张玉钧, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2006, 26(7): 1190.
- [5] DONG Lei, MA Wei guang, YIN Wang bao, et al(董 磊, 马维光, 尹王保, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2005, 25(3): 473.
- [6] Mihalcea R M, Baer D S, Hanson R K. Applied Optics, 1997, 36(33): 8745.
- [7] KAN Rui feng, LIU Wei qing, ZHANG Yu jun, et al(阚瑞峰, 刘文清, 张玉钧, 等). Acta Physica Sinica(物理学报), 2005, 54(4): 1927.
- [8] Wang J, Maierov M, Jeffries J B, et al. Measurement Science & Technology, 2000, 11: 1576.
- [9] WANG Jian, HUANG Wei, GU Hai tao, et al(王 健, 黄 伟, 顾海涛, 等). Journal of Optoelectronics • Laser(光电子•激光), 2006, 17(10): 1233.
- [10] Zhou Xin, Liu Xiang, Jeffries J B. Measurement Science & Technology, 2003, 14(8): 1459.
- [11] Liu J T C, Jeffries J B, Hanson R K. Applied Physics B, 2004, 78(34): 503.
- [12] Nikkari J J, Di Iorio J M, Thomson M J. Applied Optics, 2002, 41(3): 446.
- [13] LI Ning, WANG Fei, YAN Jiar hua, et al(李 宁, 王 飞, 严建华, 等). Proceedings of the CSEE(中国电机工程学报), 2005, 25: 121.
- [14] Webber M E, Claps R, Florian F V, et al. Applied Optics, 2001, 40(24): 4395.
- [15] Webber M E, Baer D S, Hanson R K. Applied Optics, 2001, 40(12): 2031.
- [16] Allen M G. Measurement Science & Technology, 1998, 9(4): 545.
- [17] Webber M E, Kim S, Sanders S T, et al. Applied Optics, 2001, 40(6): 821.
- [18] Sanders S T, Wang Jian, Jeffries J B, et al. Applied Optics, 2001, 40(24): 4404.

Measurement on Gas Temperature Distribution by Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy

LI Ning, YAN Jianhua, WANG Fei*, CHI Yong, CEN Kefa

State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China

Abstract The technique of tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) can be used for gas temperature distribution measurement by scanning multiple gas absorption lines with a tunable diode laser. The fundamental of gas temperature distribution measurement by TDLAS is introduced in the present paper, and the discretization strategy of equation for gas absorption is also given here. Using constrained linear least square fitting method, the gas temperature distribution can be calculated with the help of physical constraints under the condition of uniform gas concentration and pressure. Based on the spectral parameters of four CO absorption lines near 6330 cm^{-1} from HITRAN database, the model of two-temperature distribution at 300 and 600 K with each path length of 55 cm was set up. The effects of relative measurement error and different path length constraints of temperature bins on the gas temperature distribution measurement results were simulated by constrained linear least square fitting. The results show that the temperature distribution calculation error increases as the relative measurement error rises. A measurement error of 5% could lead to a maximum relative error of 11%, and an average relative error of 2.2% for calculation result. And the weak physical constraints of path length for temperature bins could increase the calculation result error during the process of constrained linear least square fitting. By setting up the model of two-temperature distribution with gas cells at room temperature as the cold section and in tube furnace as the hot section, the experiment of gas temperature distribution measurement in lab was carried out. Using four absorption lines of CO near 6330 cm^{-1} scanned by VCSEL diode laser, and fitting the background laser intensity without absorption by the cubic polynomial to get the baseline signal, the integrals of spectral absorbance for gas temperature distribution measurement can be calculated. The relative calculation errors of path length for temperature bins are about 7.3%, 6.5%, 4.7% and 2.7% in the four cases.

Keywords Tunable diode laser absorption spectroscopy; Gas temperature distribution measurement; Least square fitting; Discretization method

(Received Apr. 8, 2007; accepted Jul. 18, 2007)

* Corresponding author