

DOI: 10.19650/j.cnki.cjsi.J2209463

非色散红外气体传感器稳态扩散高斯分布浓度校正方法*

强振峰, 王雪, 张效天

(清华大学精密仪器系 北京 100084)

摘要: 流程工业中气体浓度测量至关重要。非色散红外传感器是一种基于不同气体对红外光吸收强度差异性测量气体浓度的传感器, 气体浓度测量精度高, 广泛用于流程工业中 CO_2 和 N_2O 气体浓度测量。非色散红外传感器内气体不均匀扩散使气体浓度测量会产生原理性误差, 需要得到气体在传感器气室内达到稳态扩散时间降低浓度测量误差, 提高测量精度。本文提出一种非色散红外传感器高斯分布扩散模型预测气体稳态扩散时间计算方法, 14组不同条件下 CO_2 和 N_2O 的仿真实验得到本文提出高斯扩散模型的拟合度分别为 0.82 和 0.80, 验证所提出高斯模型预测气体稳态扩散时间的鲁棒性。本文所提方法非色散红外传感器浓度测量不均匀扩散产生误差补偿提供保障。

关键词: 非色散红外传感器; 气体浓度校准; 高斯扩散模型; 稳态扩散时间

中图分类号: TH741 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 460.4620

Gaussian distribution of stable diffusion for gas concentration correction on infrared dispersive gas sensor

Qiang Zhenfeng, Wang Xue, Zhang Xiaotian

(Department of Precision Instrument, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Gas concentration measurement is crucial in the process industry. The measurement principle of non-dispersive infrared (NDIR) sensors is based on the difference in the absorption intensity of infrared light for different gases. It is widely used to measure CO_2 and N_2O concentrations for reducing the influence of environmental factors. But, the inhomogeneous gas diffusion in NDIR sensor chamber generates principle errors. It is necessary to determine the accurate time when CO_2 and N_2O reach stable diffusion within the gas chamber to reduce errors and improve the measurement accuracy. In this article, a Gaussian diffusion model is proposed to predict the gas stable diffusion time in the gas chamber of the NDIR sensor to correct gas concentration. The effectiveness of the proposed Gaussian diffusion model is evaluated by the simulation experiment. Fourteen sets of simulations for CO_2 and N_2O under different conditions show that the fitness of the proposed Gaussian diffusion model is 0.82 and 0.80, respectively, which verifies the robustness of the proposed model. The Gaussian diffusion model between gas stable diffusion time and inlet flow velocity provides theoretical support for error correction generated by inhomogeneous gas diffusion which finally improves the measurement accuracy.

Keywords: NDIR sensor; gas concentration correction; Gaussian diffusion model; stable diffusion time

0 引言

石化冶金等流程工业领域现场通常会产生大量二氧化碳 (CO_2) 和一氧化二氮 (N_2O) 等造成环境污染和影响人体健康的气体^[1-3]。因此, 准确测量工业产生的气体浓度至关重要^[4]。光学传感器因具有测量快捷、灵敏度高

等特点广泛应用于气体浓度测量^[5]。基于不同测量方式, 光学传感器分为: 可调谐半导体激光吸收谱传感器^[6]、光腔衰荡传感器^[7-8]、分光光度传感器^[9]、非色散红外 (non-dispersive infrared, NDIR) 传感器^[10]。NDIR 传感器是一种基于不同气体对红外光吸收强度存在差异性测量气体浓度的传感器^[11]。该传感器由光源、气室、滤光片、探测器、目标通道和参考通道组成^[12]。NDIR 传感器

收稿日期: 2022-03-18 Received Date: 2022-03-18

* 基金项目: 国家重点研发计划(2018YFB2003200, 2019YFB2005700)项目资助

两端分别布置红外光源和允许特定波长红外光通过的窄带/宽带滤光片。当测量目标气体浓度时,红外光源发出的红外光穿过气体的气室到达滤光片。目标通道中窄带滤光片允许检测气体敏感度最高波长的红外光可通过,参考通道中的宽带滤光片允许较宽区间红外光可通过。位于滤光片后的光电探测器将穿过滤光片红外光光强转换为电压值,测量系统基于电压值,采用 Beer-Lambert 定理^[13]实现气体浓度值计算。该传感器的目标通道与参考通道可降低环境因素影响,提高浓度测量准确性与精度,因此 NDIR 传感器在工业领域广泛应用。

NDIR 传感器测量 CO_2 和 N_2O 气体浓度时存在气体在气室内的不均匀扩散产生的原理性误差。该原理性误差使得目标通道和参考通道输出电压值包含之前时刻的气体浓度信息,产生气体浓度测量误差。因此开展 CO_2 和 N_2O 气体在气室内的扩散状态研究至关重要。目前研究主要通过设计新型气室结构提升 NDIR 传感器精度,气室结以圆柱和棱柱状为主^[14-15],但上述气室结构的低适应性限制了其在 NDIR 传感器领域的应用。因此提出研究气体在气室内的扩散状态并构建通用性的稳态扩散时间计算方法,对提升 NDIR 传感器气体浓度测量精度具有重要意义。

目前气体扩散研究方法包括:现场测量法^[16]、室内风洞实验法^[17]和数值模拟法^[18-19]。现场测量法受制于实验周期长,测量技术复杂和费用高而影响使用。室内风洞实验法虽然条件可控,但研究对象为大尺寸空间的气体流动特性,无法模拟小尺寸半封闭空间。随着计算机计算效率的提高,数值模拟法得到广泛应用。研究气体扩散的数值模拟技术主要是计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD),CFD 采用离散化方法处理连续流体。网格化方法将仿真区域划分为若干网格,通过纳维-斯托克斯方程或欧拉方程来求解网格运动方程。目前基于 CFD 的气体扩散研究主要围绕在室内房间^[20-21]、大气环境^[22]等大尺寸空间,针对尺寸在毫米级别的小尺寸半封闭空间内的气体扩散研究较少。与大尺寸空间气体扩散状态相比,小尺寸半封闭空间的边界条件会对气体扩散状态产生影响,而该影响可通过仿真模型求解过程的计算迭代而降低或消除。因此,本文采用 CFD 开展 NDIR 传感器气室的扩散状态研究。

基于 CFD 技术开展不同入口处气体流速、浓度、压强和温度下, CO_2 和 N_2O 气体在 NDIR 传感器气室内不同时刻的扩散状态研究。气体质量分数和速率分布云图表明入口流速是影响 CO_2 和 N_2O 气体达到稳态扩散时间的重要因素。因此本文构建稳态扩散时间与入口流速的高斯模型,14 组仿真实验验证所提出方法的鲁棒性,为降低气体在气室内不均匀扩散产生的原理性误差提供理论指导。

1 气体扩散仿真建模

采用 CFD 技术仿真建模实现方式以获得不同条件下气体扩散状态数据,为气体稳态扩散高斯模型构建和验证提供数据支撑,选择 ANSYS 软件中的 Fluent 15.0 模块作为 CFD 技术实现方式^[23]。建模步骤包括:结构模型建立、网格划分、求解模型选择、边界条件设置和模型求解。通过改变目标气体种类和变换目标材料,构建不同工况下 CO_2 和 N_2O 气体扩散仿真模型。通过改变入口流速、入口浓度、温度、压强等条件,获得不同湍流强度与流速,实现边界条件调整。通过求解模型,获得不同工况下气体质量分数和速率分布云图。

1.1 非色散红外传感器模型气体扩散模型建立

非色散红外传感器气体扩散建模首先需构建 NDIR 传感器气室结构物理模型。图 1 为 NDIR 传感器结构及气室结构示意图。图 1(a) 是 NDIR 传感器三维结构图,图中左侧圆柱状结构为气体入口,右侧圆柱状结构为气体出口。气室为位于圆柱状气体出入口下方的腔体,气室右侧为滤光片和光电探测器。滤光片和光电探测器位于气室外沿,不影响气体扩散,因此在构建非色散红外传感器气室结构模型时可忽略滤光片和探测器的分布对气体扩散状态的影响。

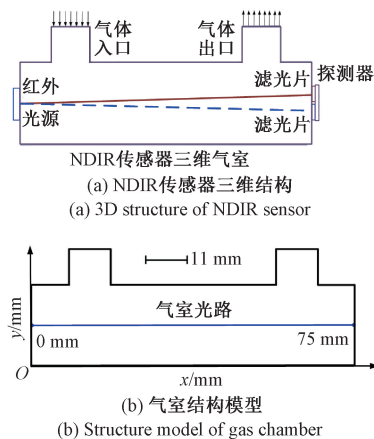


图 1 NDIR 传感器结构及气室结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of NDIR sensor structure and gas chamber structure

气体从 NDIR 传感器入口进入气室至从出口流出气室的过程中,其扩散状态在气室内呈对称状分布,因此将三维 NDIR 传感器气室简化为二维气室结构降低所构建模型求解计算量。二维气室长度为 75 mm,高度为 16 mm,气体入口和出口直径分别为 11 mm,高度分别为 8 mm,气体入口和出口中心距离气室两侧的距离分别为 8 mm。图 1(b) 为 NDIR 传感器气室光路位置示意图及

气室网格划分示意图,光路位于气室中轴线,其长度为75 mm,划分网格后气室内相邻网格间距为0.25 μm 。

1.2 非色散红外传感器模型气体扩散网格划分

NDIR 传感器气室结构模型网格划分对气体扩散状态的计算精度和计算效率至关重要。采用前处理软件 Gambit 实现二维 NDIR 传感器气室结构模型的网格划分。气室结构网格从结构上可分为结构化网格和非结构化网格。对相同的网格精度,采用非结构化网格自动划分虽然容易实现,其网格数量约为结构化网格的数倍,计算量增加。结构化网格质量可精准控制,边界层网格质量较高,所需计算量较小,模拟计算气体扩散状态过程中更容易收敛。因此本文采用结构化网格中六面体网格。网格采用非均匀方式划分,首层网格间距为0.5,相邻两层网格的间隔比例为1.12,网格总数为19 132。

1.3 非色散红外传感器模型气体扩散边界条件

边界条件设置对于求解气体在不同条件下的扩散状态至关重要。本文基于美国国家标准与技术研究所(national institute of standards and technology, NIST)获得 CO_2 和 N_2O 气体在不同温度、压强下的动力粘度^[24],基于动力粘度计算湍流强度,实现 CO_2 和 N_2O 气体在气室内的边界条件设置。仿真中气室入口处气体浓度分别为 50×10^{-6} 、 100×10^{-6} 、 150×10^{-6} 、 200×10^{-6} 和 250×10^{-6} ;气室入口处气体流速分别为0.3、0.6、0.9、1.2、1.5 和 3 m/s;气室入口压强分别为0.1 MPa、4 MPa 和 8 MPa;气室入口温度分别为10 $^\circ\text{C}$ 、20 $^\circ\text{C}$ 、30 $^\circ\text{C}$ 、40 $^\circ\text{C}$ 、50 $^\circ\text{C}$ 和 60 $^\circ\text{C}$ 。湍流强度计算公式如式(1)所示。

$$\begin{aligned} \rho &= MC/22.4 \\ Re &= \rho vd/\eta \\ I &= 0.16 \times Re^{-0.125} \end{aligned} \quad (1)$$

式中:雷诺数 Re ,湍流强度 I , M 为相对分子质量, C 为气体浓度($\times 10^{-6}$), ρ 为气体浓度(kg/m^3), v 为气体流速(m/s), d 为水力直径(m), η 为动力粘度。

基于不同气体、温度和压强下的动力粘度、入口浓度、入口流速和气室的水力直径(与气室直径相同,均为16 mm)实现湍流强度的计算。

1.4 非色散红外传感器模型气体扩散模型选择

气体扩散模型的选择对于求解气体在气室内的扩散状态至关重要。仿真模型入口处的目标气体是由不同浓度的 CO_2 和 N_2O 分别和空气形成的混合气体组成,目标气体中的 CO_2 和 N_2O 在气室流动的过程中与空气中成分相互融合,但是不发生反应。因此本文选择无反应组分运输模型描述上述互溶气体运动。针对气体在气室扩散的流动特性与气体在气室边缘产生的湍流现象,本文选择非直接数值模拟法中应用多、计算量适中、有较多数据累计和相当精度的标准 $\text{K}-\varepsilon$ 湍流模型作为气体扩散模型。

1.5 非色散红外传感器模型气体扩散模型求解

本文采用 ANSYS 求解器计算气体扩散状态(质量分数和速率分布云图)的数值结果。按照气体的质量守恒方程、动量守恒方程和能量守恒方程求解 CO_2 和 N_2O 气体在不同时刻的扩散状态,如下分别说明3大方程。质量守恒方程也称为连续性方程,其表达式如式(2)所示。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} + \frac{\partial(\rho)}{\partial t} &= 0 \\ \nabla(\vec{v}) &= 0 (\text{div}(\vec{v}) = 0) \end{aligned} \quad (2)$$

式中: ρ 代表流体的密度,在连续不可压缩的流体中,流体的密度被当为常数; v_x 、 v_y 和 v_z 分别代表流体在 x 、 y 、 z 方向上的速度矢量分量; t 代表时间。

动量守恒方程也被称为运动方程或者 Navier-Stokes (N-S) 方程,其表达式如式(3)所示。

$$\begin{aligned} \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial t} \right) &= \\ f_x \rho \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) &= \\ \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial v_y}{\partial t} \right) &= \\ f_y \rho \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) &= \\ \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial t} \right) &= \\ f_z \rho \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) &= \end{aligned} \quad (3)$$

式中: τ_{xx} 、 τ_{xy} 和 τ_{xz} 分别代表流体在 xx 、 xy 和 xz 方向上的分子粘性应力分量。

能量守恒指的是微元体积内单位时间能量的增加即进入到微元体中净热流量和体积力、面积力对它本身所做的功,其表达式如式(4)所示。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v T)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w T)}{\partial z} &= \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_T &= \end{aligned} \quad (4)$$

式中: T 代表热力学温度,单位为 K; k 代表流体的传热系数; c_p 代表比热容,单位为 $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ 。ANSYS 求解器基于质量守恒方程、动量守恒方程和能量守恒方程求解 CO_2 和 N_2O 气体在不同时刻扩散状态求解。

2 气体稳态扩散时间分析

基于 ANSYS 求解器得到的不同时刻 CO_2 和 N_2O 气体扩散状态,开展气体质量分数随时间变化研究,揭示气体种类对气体扩散状态影响机理。图2是入口浓度

为 100 ppm、流速为 0.3 m/s、压强为 0.1 MPa、温度为 27℃ 时,CO₂ 和 N₂O 在气室内扩散时间为 0.01、0.1、0.3 和 0.5 s 时,气体质量分数在气室光路扩散情况。如图 2 所示,CO₂ 或 N₂O 的质量分数在气室内的扩散随着时间变化呈现明显的差异性。同时在气体进入气室扩散相同时间后,CO₂ 和 N₂O 在气室内不同位置的质量分数趋近于入口处气体浓度,且质量分数分布类似。但气体流动导致光路上的气体浓度未完全达到入口处气体浓度。不同气体在气室内的稳态扩散时间不同。在对气体扩散状态定性研究基础上,本文量化研究 CO₂ 和 N₂O 气体稳态扩散时间差异性。

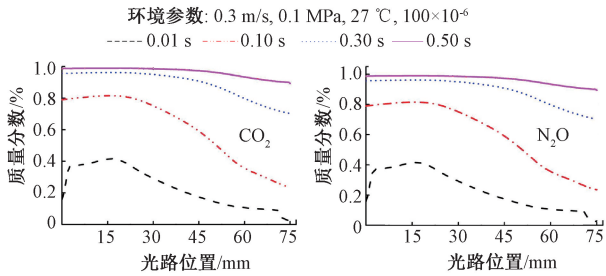


图 2 NDIR 传感器气室光路上质量分数随时间变化曲线图
Fig. 2 The curve diagram of the mass fraction on the optical path of the NDIR sensor gas chamber with time

本文以 NDIR 传感器气室光路上的气体质量分数达到入口浓度 99% 的时刻作为气体稳态扩散时间。图 3 是入口浓度为 100×10⁻⁶, 入口流速为 0.3 m/s, 温度为 300 K, 压强为 0.1 MPa 时,CO₂ 和 N₂O 气体在气室内的质量分数随时间变化云图。CO₂ 和 N₂O 气体扩散的后 3 张质量分数云图分别对应气体稳态扩散前、中、后 3 个时刻。如图 3 所示,CO₂ 和 N₂O 气体进入气室扩散 0.60 s 和 0.85 s 时达到稳态扩散。图 3 表明,CO₂ 和 N₂O

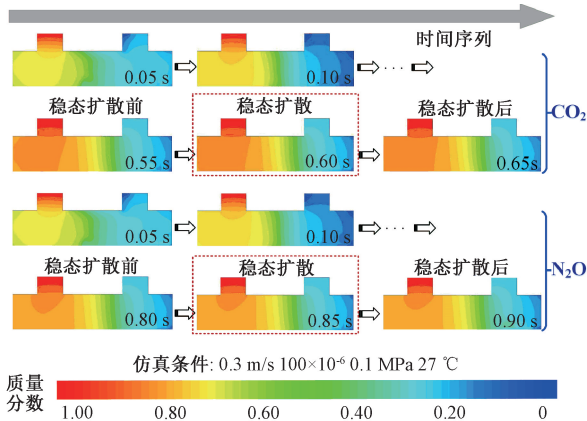


图 3 CO₂ 和 N₂O 在气室的扩散状态变化云图

Fig. 3 Cloud diagrams of the diffusion states of CO₂ and N₂O

在气室内达到稳态扩散的时间呈现明显差异性,表明气体种类对于气体在气室内部达到稳态扩散具有明显影响,需构建不同气体的稳态扩散模型。

3 稳态扩散时间建模

本文开展入口流速对不同气体在气室内的稳态扩散时间影响研究。CO₂ 稳态扩散时间随着入口流速的变化呈现先减小后增大,再减小的变化趋势。当气体种类变化为 N₂O 时,其稳态扩散时间呈现与 CO₂ 稳态扩散时间类似的变化趋势。在入口流速达到 1.4 m/s 前,CO₂ 在气室的稳态扩散时间随入口流速增加而增加。入口流速为 1.4 m/s 时的稳态扩散时间最长 (10.02 s)。当流速 > 1.4 m/s 时,气体稳态扩散时间逐渐减小并趋于 0。在入口处气体流速达到 1.3 m/s 前,N₂O 在气室内的稳态扩散时间随入口流速变化呈增加趋势,流速在 1.3 m/s 处的稳态扩散时间最长 (8.14 s)。当流速大于 1.3 m/s 时,气体稳态扩散时间逐渐减小。基于上述气体稳态扩散时间变化趋势,本文提出气体流速与稳态扩散时间之间高斯分布函数,高斯分布函数表达式如式 (5) 所示。

$$f_i = t_0 + A \sqrt{\pi/2} e^{-\frac{(v_i - v_c)^2}{w^2}} / w$$

$$\bar{t} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n t_i$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (t_i - f_i)^2}{\sum_i (t_i - \bar{y})^2} = \frac{\sum_i (f_i - \bar{y})^2}{\sum_i (t_i - \bar{y})^2}$$

式中: f_i 为第 i 个样本的高斯函数拟合得到的稳态扩散时间, t_0 为偏移量, v_i 为第 i 个样本的流速, v_c 为输入样本流速均值, w 为 2 倍的标准差, A 为高斯拟合函数与横轴所形成区间面积, t_i 为第 i 个样本实际稳态扩散时间, \bar{t} 为输入样本稳态扩散时间的平均值。

如图 4 所示,入口处气体浓度为 100×10⁻⁶,压强为 0.1 MPa,温度为 27℃ 时,CO₂ 气体流速与稳态扩散时间满足上述高斯函数关系,其中参数 $t_0 = 0.417$, $v_c = 1.333$, $w = 0.356$, $A = 3.429$,高斯拟合函数与稳态扩散时间的整体拟合度为 0.823。如图 4(b) 所示,相同条件下,N₂O 气体流速与稳态扩散时间满足高函数分布,其中参数 $t_0 = 0.588$, $v_c = 1.284$, $w = 0.367$, $A = 2.650$,高斯拟合函数与稳态扩散时间的整体拟合度为 0.804。上述拟合度表明本文所提出的稳态扩散时间高斯拟合函数具有较高有效性。

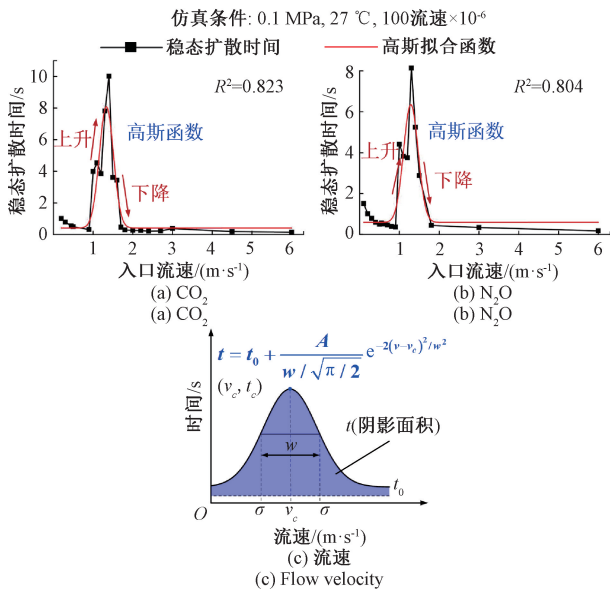


图4 气体稳态扩散时间与入口流速高斯函数拟合曲线
Fig. 4 The fitted curve of Gaussian function between gas inlet flow velocity and stable diffusion time

4 稳态扩散时间高斯模型验证

针对不同压强、温度和入口浓度值,分别开展 14 组 CO₂ 和 N₂O 仿真实验验证提出稳态扩散时间高斯模型的鲁棒性,仿真参数参见气体稳态扩散时间建模部分。14 组仿真实验环境因素和拟合高斯函数得到不确定度如表 1 和 2 所示。14 组 CO₂ 和 N₂O 测试样本高 (R^2) 均为 0.80,拟合精度较高。CO₂ 和 N₂O 稳态扩散时,高斯拟合曲线整体拟合度间高斯函数的不确定度分别为 0.14 和 0.23,表明本文提出的高斯拟合函数具有较高可靠性。基于稳态扩散时间-入口流速的高斯函数可实现任意流速下,气体在气室内的稳定扩散时间修正,降低气体在 NDIR 传感器气室内不均匀扩散产生浓度测量误差。

表 1 7 组 CO₂ 试验组的模拟参数

Table 1 Simulation parameters of seven CO₂ test groups

序列	环境因素			R^2	不确定度
1	30℃	0.1 MPa	100×10 ⁻⁶	0.823	
2	30℃	0.1 MPa	150×10 ⁻⁶	0.823	
3	30℃	0.1 MPa	200×10 ⁻⁶	0.822	
4	40℃	0.1 MPa	100×10 ⁻⁶	0.823	0.14
5	50℃	0.1 MPa	100×10 ⁻⁶	0.824	
6	40℃	4.0 MPa	100×10 ⁻⁶	0.824	
7	40℃	8.0 MPa	100×10 ⁻⁶	0.824	

表 2 7 组 N₂O 试验组的模拟参数

Table 2 Simulation parameters of seven N₂O test groups

序列	环境因素			R^2	不确定度
1	30℃	0.1 MPa	50×10 ⁻⁶	0.805	
2	30℃	0.1 MPa	100×10 ⁻⁶	0.804	
3	30℃	0.1 MPa	150×10 ⁻⁶	0.804	
4	30℃	0.1 MPa	200×10 ⁻⁶	0.806	0.23
5	30℃	0.1 MPa	250×10 ⁻⁶	0.803	
6	30℃	0.1 MPa	400×10 ⁻⁶	0.804	
7	30℃	0.1 MPa	600×10 ⁻⁶	0.803	8

本文通过分析 14 组 CO₂ 和 N₂O 气体稳态扩散时间与入口流速高斯函数,研究入口浓度、温度和压强对于气体稳态扩散高斯函数模型影响。CO₂ 和 N₂O 在气室中的稳态扩散时间与入口流速的高斯拟合函数各参数和拟合度分布情况。如图 5 所示,在不同环境因素作用下,CO₂ 和 N₂O 气体的稳态扩散时间的高斯函数拟合参数的 t_0 , v_c , w , A 没有明显偏差,表明入口浓度、压强和温度对 CO₂ 和 N₂O 气体在气室中的稳态扩散时间高斯函数未产生明显影响。因此,在构建稳态扩散时间高斯函数模型的过程中,可忽略入口浓度、压强和温度的影响。

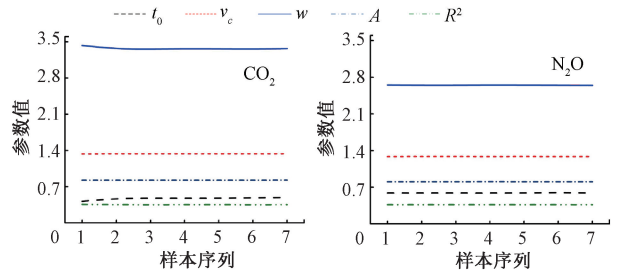


图 5 不同工况下 CO₂ 和 N₂O 稳态扩散时间的
高斯拟合函数各参数统计

Fig. 5 Statistical plots of parameters of Gaussian function for stable diffusion time of CO₂ and N₂O under different conditions

5 讨论与分析

气体运动动力学分析研究表明:非色散红外传感器气室内气体稳态扩散时间呈高斯分布。力学参数和气室结构是影响气体稳态扩散的核心因素,动力学参数主要包括:惯性力和粘性力。雷诺数为流体惯性力与粘性力比值的量度,粘性力的大小与粘性及相对速度成正比,CO₂ 和 N₂O 气体流速较小趋势时,气体的粘性较小,雷诺数较小。当气体流速较小趋势时,所产生的粘性力相比惯性力可忽略不计,惯性力为气体主要受力,气体粘度对气体在气室内扩散状态影响较小,表现为 CO₂ 和 N₂O 气

体在气室内部扩散速率较快。当气体流速增大时,气体的粘性增大,产生的粘性力大于惯性力,阻碍气体在气室内扩散。 CO_2 和 N_2O 雷诺数随着流速增加逐渐小,表明惯性力和粘性力不是影响气体稳态扩散时间呈现高斯分布主要原因,则气室的物理结构影响是气体扩散的核心因素。

本文以 CO_2 为例,开展气室结构对气体稳态扩散时间影响研究。图 6 是入口流速分别为 1.4、0.9 m/s 时, CO_2 和 N_2O 气体在气室内扩散 0.01、0.20 和 2.0 s 的流速分布云图。图 6(I)、(II) 分别为 0.01 s 时,入口流速为 0.9 和 1.4 m/s 时的 CO_2 流速分布云图。图 6(I)、(II) 中入口区域气体流速较小,且数值接近 0。其中图 6(I) 的 A 区域的气体流速受到气室上边缘的影响, B 区域受到气室下边缘的影响,而图 6(II) 中 A 区域的气体流速受到气室上边缘的影响, B 区域受到气室下边缘的影响。相比于图 6(I),图 6(II) 中的 A、B 区域流速呈现数值大且分布区域明显增加的特点,图 6(II) 中流速还分布在区域 C,该区域流速的分布主要受到气室右边缘的影响。0.01 s 时的流速分布表明气室边缘对气体流速分布产生较大影响。

图 6(III)、(IV) 为 0.20 s 时,入口流速分别为 0.9 和 1.4 m/s 时的 CO_2 流速分布云图。图 6(III) 中气体流速变化较为平缓,流速分布具有明显的过渡区域。图 6(IV) 中气体流速区域边缘变化较为陡峭,图中区域 A、B、C、D、E 处的流速值小于周围区域流速,且上述 5 个区域的流速均呈环状分布,表明入口流速为 1.4 m/s 时,气室边缘对气体的流动产生影响,产生大量回环状流速分布,气体流速回环的存在限制气体在气室中扩散速率。

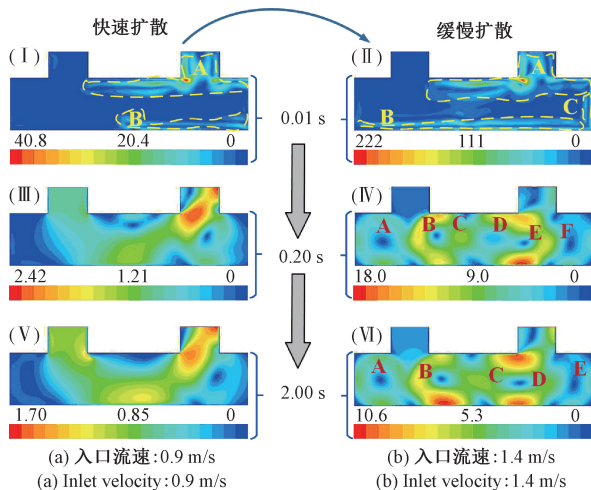


图 6 入口流速在 1.4、0.9 m/s 时, CO_2 气体在气室内扩散 0.01、0.20 和 2.0 s 时的流速分布云图

Fig.6 Distribution map of flow velocity of CO_2 at 0.01, 0.20 and 2.0 s with the inlet velocity of 1.4 and 0.9 m/s

图 6(V)、(VI) 为 2.0 s 时,入口流速分别为 0.9 和 1.4 m/s 时 CO_2 流速分布云图。此时气体流速分布云图与 2.0 s 时气体流速分布云图呈现较高相似性,且 2.0 s 后气体流速分布云图与该时刻流速分布无明显差别。表明该状态在气体扩散过程中持续存在,而该状态持续存在使得气体在 1.4 m/s 时稳态扩散时间 > 0.9 m/s 时稳态扩散时间。

上述分析表明,气体在气室内部扩散具有临界速度,当入口流速较低时,气体在气室内部扩散速率与入口流速之间具有一致性,即扩散速率随入口流速增加而增加,导致稳态扩散时间降低;当入口流速超过临界速度时,气体在气室内流速出现大量环状分布区域,该区域持续存在限制气体在气室扩散速率,延长气体稳态扩散时间。气体在 NDIR 传感器气室内稳态扩散时间与入口流速分布满足高斯分布,但局部流速下稳态扩散时间与高斯函数拟合值存在误差。

本文所提方法产生误差的原因包括如下两方面: 1) NIST 参数并非完全准确,本文在 ANSYS 建模过程中,采用 NIST 中不同温度、压强下的动力粘度,该动力粘度为特定环境下测量值,虽然该值具有一定程度的准确性,但是测量值与真实动力粘度之间存在误差。该误差导致计算湍流强度存在误差,增加求解仿真模型得到稳态扩散时间与真实稳态扩散时间误差,降低高斯函数的拟合精度; 2) 气室结构是影响气体在气室内稳态扩散时间重要指标,本文构建气体稳态扩散时间高斯模型中变量中未考虑气室结构的定量影响,从而产生拟合误差。因此,后续研究可通过开展气室结构及尺寸研究实现气体稳态扩散时间高斯模型拟合精度提升。

上述研究表明, CO_2 和 N_2O 气体在气室内稳态扩散时间与入口流速满足高斯函数关系,且高斯函数参数具有较高一致性。因此探究该一致性存在机理至关重要。麦克斯韦速率分布函数表明:气室内气体分子速率分布决定了气体分子速率分布^[25],式(3)为麦克斯韦速率分布函数,该函数描述分子运动速率分布与分子质量、热力学温度等变量关系。式(6)表明分子质量对气体流速分布具有重要影响。

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k T N_A} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT N_A} v^2 \quad (6)$$

式中: m 为气体分子质量; k 为玻尔兹曼常量; T 为系统热力学温度; e 为自然对数的底。 CO_2 和 N_2O 具有相同分子质量(44),导致 CO_2 和 N_2O 分子流速分布相同。

本文引入相对熵衡量 CO_2 和 N_2O 速率分布差异性对其稳态扩散时间影响,相对熵如式(7)所示。 $p(v)$ 和 $q(v)$ 分别为 CO_2 和 N_2O 麦克斯韦速率分布函数。将 CO_2 和 N_2O 的麦克斯韦速率分布函数代入式(7),即可得到 CO_2 和 N_2O 相对熵。

$$D_R L(p \parallel q) = \sum_{i=1}^N p(v) \log(p(v)/q(v)) \quad (7)$$

基于式(6)和(7)得到 CO₂ 和 N₂O 麦克斯韦速率分布函数相对熵为 0, 表明 CO₂ 和 N₂O 速率分布几乎不存在差异性。表明相同分子质量和气室结构, 使得 CO₂ 和 N₂O 在气室内气体稳态扩散呈现相似分布。

6 结 论

针对非色散红外传感器气室内气体浓度不均匀扩散与浓度测量问题, 本文提出一种气体稳态扩散时间高斯扩散模型方法。针对 CO₂ 和 N₂O 在不同流速下影响浓度准确测量稳态扩散时间开展定性和定量分析, 建立了 CO₂ 和 N₂O 气体在不同气体入口流速、入口浓度、压强和温度下的 14 组扩散模型, 模型参数的相似性分布表明入口浓度、压强和温度对气体稳态扩散时间影响较小, 高拟合度验证了气体稳态扩散时间高斯模型的有效性。最后通过引入相对熵和麦克斯韦速率分布方程表征气体种类流速分布差异性对气体稳态扩散时间影响。本文所提气体稳态扩散时间高斯扩散模型方法为降低非色散红外气体传感器气室内气体不均匀扩散产生的原理性误差, 提高气体浓度测量精度提供有效支撑。

参考文献

- [1] VINCENT T A, GARDNER J W. A low cost MEMS based NDIR system for the monitoring of carbon dioxide in breath analysis at ppm levels [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2016, 236: 621-623.
- [2] DINH T V, CHOI I Y, SON Y S, et al. A review on non-dispersive infrared gas sensors: Improvement of sensor detection limit and interference correction [J]. *Sensor and Actuators B: Chemical*, 2016, 231: 529-538.
- [3] KIM S J, HWANG I S, KANG Y C, et al. Design of selective gas sensors using additive-loaded In₂O₃ hollow spheres prepared by combinatorial hydrothermal reactions [J]. *Sensors*, 2011, 11(11): 10603-10614.
- [4] 李明, 于冀平. 几何量工业测量的现状与发展 [J]. *仪器仪表学报*, 2017, 38(12): 2959-2971.
LI M, YU J P. Status and development of geometric measurement in industry [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2017, 38(12): 2959-2971.
- [5] LIU X, CHENG S, LIU H, et al. A survey on gas sensing technology [J]. *Sensors*, 2012, 12 (7): 9635-9665.
- [6] MASIYAN D, HODGKINSON J, SCHILT S. Self-mixing interference effects in tunable diode laser absorption spectroscopy [J]. *Applied Physics B*, 2009, 96: 863-874.
- [7] IMO A, NAKANO H, WIMMER C, et al. Cavity ring-down spectroscopy system for the evaluation of negative hydrogen ion density at the ELISE test facility [J]. *Review of Scientific Instrument*, 2020, 91(1): 013510.
- [8] WAECHTER H, LITMAN J, CHEUNG A H, et al. Chemical sensing using fiber cavity ring-down spectroscopy [J]. *Sensors*, 2010, 10(3): 1716-1742.
- [9] KHAN S, NEWPORT D, CALVE S L. Gas detection using portable deep-UV absorption spectrophotometry: A review [J]. *Sensors*, 2019, 19(23): 5210.
- [10] FONSECA L, CABRUJA E, CALAZA C, et al. Feasibility of a flip-chip approach to integrate an IR filter and an IR detector in a future gas detection cell [J]. *Microsystem Technologies*, 2004, 10(5): 382-386.
- [11] 戴峰, 常建华, 房久龙, 等. 差频产生中红外光源及甲烷气体光谱检测 [J]. *电子测量与仪器学报*, 2017, 31(9): 1447-1452.
DAI F, CHANG J H, FANG J L, et al. Mid infrared light source based on difference frequency generation and detection of methane gas spectrum [J]. *Journal of Electronic Measurement and Instrumentation*, 2017, 31(9): 1447-1452.
- [12] JHA R K. Non-dispersive infrared gas sensing technology: A review [J]. *IEEE Sensors Journal*, 2022, 22(1): 6-15.
- [13] KWAK D, LEI Y, MARIC R. Ammonia gas sensors: A comprehensive review [J]. *Talanta*, 2019, 204: 713-730.
- [14] LIU H H, SHI Y B, WANG T. Design of a six-gas NDIR gas sensor using an integrated optical gas chamber [J]. *Optics Express*, 2020, 28(8): 11451-11462.
- [15] SKLORZ A, JANSSEN S, LANG W. Detection limit improvement for NDIR ethylene gas detectors using passive approaches [J]. *Sensor and Actuators B: Chemical*, 2012, 175: 246-254.
- [16] CHING W H, LEUNG M K, LEUNG D Y, et al. Reducing risk of airborne transmitted infection in hospitals by use of hospital curtains [J]. *Indoor and Built Environment*, 2008, 17(3): 252-259.

- [17] KLEMP D, MANNSCHRECK K, PATZ H W, et al. Determination of anthropogenic emissions in the augsburg area from concentration ratios; results from long-term measurements [J]. Atmospheric Environment, 2002, 36: S61-S80.
- [18] CALOGINE D, BOYER H, NDOUMBE S, et al. Identification of parameters in building concentration dispersion model [J]. Indoor and Built Environment, 2010, 19(2): 250-266.
- [19] LI Y, DUAN S, YU I T, et al. Multi-zone modeling of probable SARS virus transmission by airflow between flats in Block E, Amoy Gardens [J]. Indoor Air, 2005, 15(2): 96-111.
- [20] YANG L, YE M, HE B J. CFD simulation research on residential indoor air quality [J]. Science of the Total Environment, 2014, 472: 1137-1144.
- [21] AGARWAL T K, SAHOO B K, JOSHI M, et al. CFD simulations to study the effect of ventilation rate on 220Rn concentration distribution in a test house [J]. Radiation Physics and Chemistry, 2019, 162: 82-89.
- [22] HUH C, CHOI S, LEE J M. Concentration model for gas releases in buildings and the mitigation effect [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2020, 65: 104135.
- [23] 陈佳, 袁朝辉, 郭强, 等. 射流管伺服阀前置级的动态流场分析 [J]. 仪器仪表学报, 2017, 38(7): 1731-1737.
- CHEN J, YUAN CH H, GUO Q, et al. Dynamic flow field analysis of the prestage of jet jet pipe servo valve [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2017, 38(7): 1731-1737.
- [24] HONG H. A multigrid navier-stokes CFD code for rotor computations [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1998, 167(2): 127-137.
- [25] JUTTNER F. Maxwell's law of speed distribution in the theory of relativity [J]. Annalen Der Physik, 1911, 34(5): 856-882.

作者简介



强振峰, 2017 年于陕西科技大学获得学士学位, 2020 年于吉林大学获得硕士学位, 现为清华大学精密仪器系博士研究生, 主要研究方向为非色散红外传感器系统算法与边缘计算。

E-mail: qzf20@mails.tsinghua.edu.cn

Qiang Zhenfeng received his B.Sc. degree from Shaanxi University of Science and Technology in 2017, and received his M.Sc. degree from Jilin University in 2020. He is currently a Ph.D. candidate at Tsinghua University. His main research interests include system algorithm of non-dispersive infrared sensor and edge computing.



王雪 (通信作者), 1994 年于华中科技大学获博士学位, 现为清华大学精密仪器系长聘教授, 博士生导师。主要研究方向为智能感知与精密测量。

E-mail: wangxue@mail.tsinghua.edu.com

Wang Xue (Corresponding author) received his Ph.D. degree from Huazhong University of Science and Technology in 1994. He is currently a professor and a Ph.D. advisor in the Department of Precision Instrument at Tsinghua University. His main research interests include smart sensing and precision measurement.