

**СОЗДАНИЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ПО СПЕКТРАЛЬНЫМ СВОЙСТВАМ
ГОРЯЧИХ ГАЗОВ, ЗАДЕЙСТВОВАННЫХ В ТЕХНОЛОГИЯХ,
ОСНОВАННЫХ НА ПРОЦЕССЕ ГОРЕНИЯ.
ПРОЕКТ № 187**

Координаторы: д-р физ.-мат. наук Первалов В. И., д-р физ.-мат. наук Толочко Н. К.
Исполнители: ИОА СО РАН, ИТА НАН РБ

Разработана первая версия Интернет-доступной информационно-вычислительной системы «Спектральные свойства горячих газов, задействованных в технологиях, основанных на процессе горения» (рис. 1). Система доступна внешним пользователям по адресу: <http://spechot.iao.ru>.

Проведено глобальное моделирование высокотемпературных спектров высокого разрешения молекул CO_2 , H_2O , N_2O , C_2H_2 , CO и NO . На основе этого моделирования сгенерированы и инкорпорированы в разрабатываемую информационную систему банки параметров спектральных линий высокотемпературных спектров для молекул CO_2 (CDSDB) и H_2O . В ближайшем будущем будут генерированы банки данных для молекул N_2O , C_2H_2 , CO и NO . Качество спектроскопической информации, содержащейся в нашем банке данных CDSDB, демонстрируется рис. 2, на котором дано сравнение функции пропускания углекислого газа, рассчитанной на основе нашего банка данных и на основе банка данных HITEMP, с экспериментальной функцией пропускания, полученной Модестом и Бхрадважом.

| Input selection | | Options | |
|--|----------|--|------|
| Gas mixture | | <input type="checkbox"/> Separate molecules | |
| Function type: Radiance | | Stick scale | |
| General parameters: | | | |
| $\text{WN}_{\text{min}}, \text{cm}^{-1}$ | 2200 | $\text{WN}_{\text{max}}, \text{cm}^{-1}$ | 2400 |
| T, K | 1500 | P, atm | 1 |
| Contour parameters: | | <input checked="" type="checkbox"/> Natural <input type="checkbox"/> Logarithmic | |
| Shape | Voigt | $\text{WN}_{\text{step}}, \text{cm}^{-1}$ | 0.01 |
| Function parameters: | | Wing, HW | 20 |
| App.func (AF) | Gaussian | Opt.path, m | 0.1 |
| App. Resolution (AR), cm^{-1} | 2 | AF wing, AR | 10 |
| Simulate spectrum | | | |

Рис. 1. Карта запроса информации.

Fig. 1. Request form.

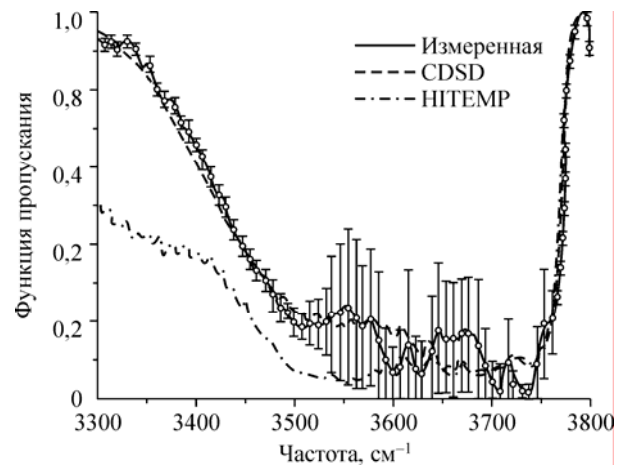


Рис. 2. Функция пропускания углекислого газа в районе $3300\text{--}3800 \text{ cm}^{-1}$ для температуры 1550 K , давления 1 атм . и трассы длиной 40 см .

Fig. 2. Transmissivity of the carbon dioxide in the $3300\text{--}3800 \text{ cm}^{-1}$ spectral region for the temperature 1550 K , pressure 1 atmosphere , and pathway 40 cm .

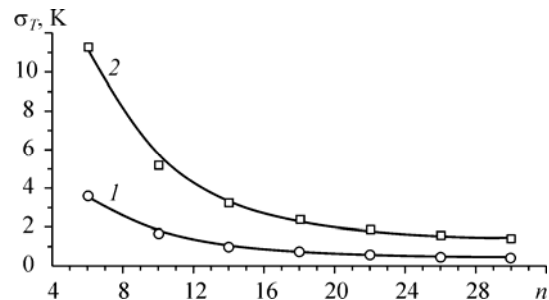


Рис. 3. Зависимость погрешности определения температуры σ_T от количества зондирующих линий для стабилизированного по частоте диагностического CO_2 -лазера (1) и для CO_2 -лазера без частотной стабилизации с $\Delta\nu = 30 \text{ МГц}$ (смесь $\text{CO}_2 : \text{N}_2$, $P_{\text{смеси}} = 750 \text{ Торр}$, $p_{\text{CO}_2} = 10 \text{ Торр}$, $T = 293 \text{ K}$) (2).

Fig. 3. Dependence of the uncertainty σ_T of the temperature determination on the number of analytic lines: (1) for the frequency stabilized diagnostic CO_2 laser and (2) for the nonstabilized CO_2 laser with the frequency uncertainty $\Delta\nu = 30 \text{ MHz}$ (mixture $\text{CO}_2 : \text{N}_2$, $P_{\text{mix}} = 750 \text{ Torr}$, $p_{\text{CO}_2} = 10 \text{ Torr}$, $T = 293 \text{ K}$).

На численных модельных экспериментах отработана методика решения обратной задачи оптического газоанализа. В ближайшем будущем эта методика будет включена в разрабатываемую информационную систему в качестве

одной из опций. На рис. 3 дана зависимость погрешности определения температуры σ_T в рамках разработанной методики от числа зондирующих линий диагностического CO₂-лазера.

Основные публикации

1. Wang L., Perevalov V. I., Tashkun S. A. et al. Absorption spectra of ¹²C¹⁶O₂ and ¹³C¹⁶O₂ near 1.05 μm// J. Mol. Spectrosc. 2005. V. 233, N 2. P. 297—300.
2. Wang L., Perevalov V. I., Tashkun S. A. et al. Absolute line intensities of ¹³C¹⁶O₂ in the 4200—8500 cm⁻¹ region// Ibid. 2005. V. 234, N 1. P. 84—92.
3. Vander Auwera J., Claveu C., Teffo J.-L. et al. Absolute line intensities of ¹³C¹⁶O₂ in the 3090—3920 cm⁻¹ region// Ibid. 2005. V. 235, N 1.
4. Лободенко Е. И., Быков А. Д. Изотопический эффект в спектрах линейных молекул типа XY₂ (D_{∞h})// Изв. РАН. Оптика атмосферы и океана. 2004. Т. 17, № 11. С. 944—947.