

DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-07-51-61

УДК 681.785.52

Исследование влияния повышенного давления в проточной кювете на мощность излучения в каналах многоканального спектрофотометра

Александра Сергеевна Бобе¹, Анна Олеговна Вознесенская²,
Вадим Михайлович Поляков³

^{1, 2}Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

^{1, 3}«Геофотоника», Санкт-Петербург, Россия

¹alexandrabobe@itmo.ru <https://orcid.org/0000-0001-7489-3567>

²voznensenskaya@itmo.ru <https://orcid.org/0000-0002-4074-4341>

³vadim.polyakov@r-aero.com <https://orcid.org/0009-0000-2949-257X>

Аннотация

Предмет исследования. Влияние повышенного давления в кювете многоканального проточного спектрофотометра на перераспределение мощности излучения в волоконно-оптических каналах. **Цель работы.** Разработка метода и алгоритма компенсации дополнительной погрешности измерения коэффициента пропускания вещества в системе многоканального спектрофотометра, возникающей при изменении давления в проточном канале. **Метод.** В среде Comsol Multiphysics на основе классической теории упругости разработана модель, описывающая возникающие механические напряжения и изменения профиля деформации оптических окон проточной кюветы при различных значениях повышенного давления в проточном канале. Полученные результаты использованы для расчета отклонения волнового фронта проходящего излучения и определения распределения облученности на торце волоконно-оптического жгута. С использованием пакета программ Zemax OpticStudio проведено моделирование и представлено обоснование целесообразности использования афокальной либо фокусирующей формирующей оптической системы спектрофотометра. **Основные результаты.** Показано, что повышенное давление в проточном канале влияет на результирующую мощность излучения в каналах проточного волоконно-оптического спектрофотометра. В случаях афокальной формирующей системы и семиканального волоконно-оптического жгута рассчитанная погрешность полученных измерений пропускания при давлении 100 МПа достигает 28%. Предложены матрица поправочных коэффициентов и алгоритм калибровки, учитывающий значения повышенного давления в системе проточной кюветы и показателя преломления анализируемого вещества. **Практическая значимость.** Полученные результаты демонстрируют необходимость учета влияния повышенного давления в проточных системах. Введено понятие калибровочных коэффициентов, предложен алгоритм калибровки многоканальных спектрофотометров.

Ключевые слова: проточный анализ, давление, эффект фокусировки, спектрометрия, волоконно-оптический жгут, моделирование оптических систем

Ссылка для цитирования: Бобе А.С., Вознесенская А.О., Поляков В.М. Исследование влияния повышенного давления в проточной кювете на мощность излучения в каналах многоканального спектрофотометра // Оптический журнал. 2024. Т. 91. № 7. С. 51–61. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-07-51-61>

Коды OCIS: 300.6340, 280.2490, 060.2390

Study of the effect of increased pressure in the flow cell on radiation power in the channels of a multichannel spectrophotometer

ALEXANDRA S. BOBE¹, ANNA O. VOZNESENSKAYA², VADIM M. POLYAKOV³

^{1, 2}ITMO University, St. Petersburg, Russia

^{1, 3}Geophotonica, LLC, St. Petersburg, Russia

¹alexandrabobe@itmo.ru

<https://orcid.org/0000-0001-7489-3567>

²voznensenskaya@itmo.ru

<https://orcid.org/0000-0002-4074-4341>

³vadim.polyakov@r-aero.com

<https://orcid.org/0009-0000-2949-257X>

Abstract

Subject of the study. The effect of increased pressure in the flow cell of a multichannel spectrophotometer on the redistribution of radiation power in fiber optic channels. **Aim of study.** Development of a method and algorithm for compensating for the additional error in measuring the transmittance of a substance in a multichannel spectrophotometer system, which occurs when the pressure in the flow cell changes. **Method.** In Comsol Multiphysics environment, based on the classical theory of elasticity, a model has been developed describing the arising mechanical stresses and changes in the deformation profile of optical windows of a flow cell for various values of increased pressure in the flow cell. Numerical modeling of the deformation profile of optical windows in the flow cell for various values of increased pressure in the flow channel was conducted. The obtained results were used to calculate the deviation of the wavefront of passing radiation and determine the distribution of irradiance on the end face of the fiber optic bundle. Using Zemax OpticStudio software package, a simulation was performed and a justification for the expediency of using an afocal or focusing forming optical system of a spectrophotometer was presented. **Main results.** It has been shown that increased pressure in the flow cell affects the resulting optical power in the channels of a fiber-optic multichannel spectrophotometer. The calculated error of the obtained transmittance measurements at a pressure of 100 MPa for an afocal forming system and a seven-channel fiber-optic bundle reaches 28%. A matrix of correction coefficients and a calibration algorithm have been proposed, considering the value of increased pressure in the flow cell system and the refractive index of the analyzed substance. **Practical significance.** The obtained results demonstrate the necessity of considering the influence of increased pressure in in-line systems, introducing the concept of calibration coefficients, and proposing a calibration algorithm for multichannel spectrophotometers.

Keywords: in-line analysis, pressure induced lensing, spectrometry, fiber optic bundle, optical systems modeling

For citation: Bobe A.S., Voznesenskaya A.O., Polyakov V.M. Study of the effect of increased pressure in the flow cell on radiation power in the channels of a multichannel spectrophotometer [in Russian] // Opticheskii Zhurnal. 2024. V. 91. № 7. P. 51–61. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-07-51-61>

OCIS codes: 300.6340, 280.2490, 060.2390

ВВЕДЕНИЕ

Динамические системы проточного мониторинга находят широкое применение в различных производственных и промышленных процессах [1–3]. Эти приборы используются, например, в нефтяной промышленности для определения состава флюида во время геологоразведки [4], в пищевой [5] и фармацевтической [6] промышленности для контроля качества продукции. Проточный анализ по-

зволяет получать информацию об анализируемом веществе в реальном времени и упрощает процесс отбора проб для дальнейших лабораторных исследований, что актуально для автоматизации и цифровизации производства [7]. Часто бесконтактные оптические методы, например спектрометрия, являются единственными возможными методами, когда контролируемое вещество находится в условиях высоких температур, давления, влажности

или в контакте с агрессивной химической средой [8].

Спектрометрические проточные инструменты включают кюветы для удержания жидкого или газообразного контролируемого вещества [9, 10]. В литературе широко представлены различные конструкции кювет высокого давления [8, 11–13] и способы их герметизации. Влияние механических напряжений в окнах кювет на результаты измерений лазерных и интерферометрических оптических систем рассматривается в работах [6, 14, 15], однако зависимости отклонений волнового фронта от давления и результирующее перераспределение облученности в плоскости приемника излучения не исследованы.

Целью работы является разработка метода и алгоритма компенсации дополнительной погрешности измерения коэффициента пропускания вещества в системе многоканального спектрофотометра, возникающей при изменении давления в проточном канале.

СХЕМА МНОГОКАНАЛЬНОГО СПЕКТРОМЕТРА

Многоканальные волоконно-оптические спектрофотометры используются для определения спектральных характеристик анализируемого вещества в проточной кювете [16–18]. В таких приборах одновременно регистрируются излучения в различных спектральных диапазонах, которые определяются пропусканием интерференционных фильтров в каждом из каналов прибора. Принципиальная схема устройства представлена на рис. 1.

Излучение галогенной лампы собирается оптической системой и направляется в волоконно-оптический жгут (ВОЖ) 3, затем оно поступает в проточную кювету и далее попадает в ее коллимационную систему, после которой параллельный пучок проходит через оптические окна и контролируемое вещество. В промышленных процессах анализируемое вещество может поступать в проточную кювету волоконно-оптического спектрофотометра под давлением, достигающим 100 МПа, что приводит к деформации оптических окон и появлению изменений в прохождении излучения в системе [14]. Формирующая оптическая система проточной кюветы создает распределение облученности на торце ВОЖ 9. Излучение каждого канала ВОЖ регистрируется фотодиодом после прохождения через интерференционные фильтры. Рабочие длины волн для регистрации выбираются исходя из характеристик поглощения анализируемого вещества.

Из-за простоты сборки, юстировки [19] и калибровки, а также использования фотодиодов вместо матричных приемников излучения такие приборы находят широкое применение в промышленном проточном мониторинге [20, 21]. Спектральное разрешение прибора определяется полосой пропускания светофильтров [22]. Одним из преимуществ многоканальных спектрофотометров является возможность проведения анализа вещества в широком спектральном диапазоне на выбранных длинах волн без потери разрешения в отличие от спектрофотометров на основе дисперсионных оптических элементов, где расширение

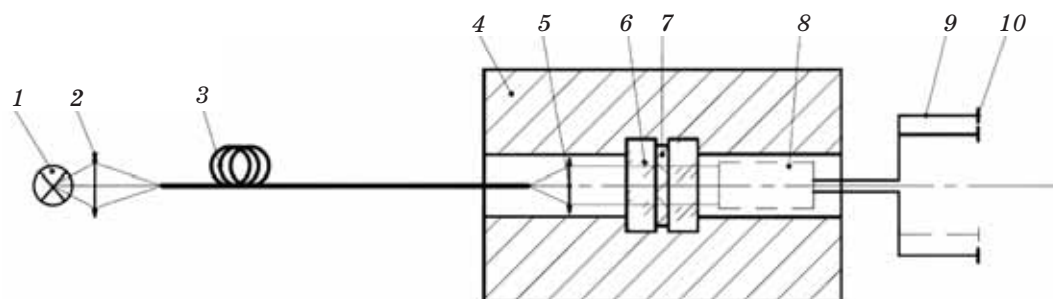


Рис. 1. Оптическая система многоканального спектрофотометра. 1 — галогенная лампа, 2 — собирающая оптическая система, 3 — ВОЖ, 4 — проточная кювета, 5 — коллимационная оптическая система, 6 — оптические окна кюветы, 7 — канал анализируемого вещества, 8 — формирующая оптическая система, 9 — ВОЖ, 10 — плоскость приемников излучения со спектральными фильтрами

Fig. 1. Multichannel spectrophotometer optical design. (1) Halogen lamp source, (2) collection optical system, (3) illumination fiber bundle, (4) flow cell, (5) collimation optical system, (6) flow cell windows, (7) sample channel, (8) forming optical system, (9) fiber bundle, (10) light detectors with spectral filters

спектрального диапазона достигается за счет ухудшения спектрального разрешения. Описанный прибор является перспективным инструментом для использования в нефтяной промышленности. Гибкий спектральный диапазон позволяет анализировать поглощение углеводородов (1650, 1750 нм), воды (1450 нм), CO₂ (2048 нм), что необходимо в задачах мониторинга состава нефти при ее добыче и состава нефтепродуктов при их производстве [7].

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ ОКОН ПРОТОЧНОЙ КЮВЕТЫ

В статье рассмотрена зондирующая часть спектрофотометра, которая состоит из коллимационной оптической системы, окон, проточного канала и формирующей оптической системы, создающей распределение облученности на поверхности ВОЖ (рис. 1).

Одним из первых этапов при проектировании кюветы является выбор материала оптических окон. Наряду с требованиями к спектру пропускания выбранные материалы должны выдерживать давление проточного канала. Схема нагружения одного окна проточной кюветы приведена на рис. 2а. Направление давления на боковую сторону окна обозначено стрелками. Неподвижные опоры AA'B'B и HH'G'G представляют собой металлическую конструкцию проточной кюветы. Для выбора оптических материалов окон были рассчитаны компоненты механических напряжений. Задача определения напряжений схемы

нагружения, представленной на рис. 2а, подробно изучена в классической теории упругости, например [28, 29]. Компоненты напряжений определяются как

$$\begin{aligned}\sigma_{zz} &= -\frac{P(h-z)^2(2h+z)}{4h^3}, \\ \tau_{rz} &= -\frac{3Pr(h^2-z^2)}{8h^3}, \\ \sigma_{rr} &= \frac{Pz}{h^3} \left(\frac{z^2(2+v)}{8} - \frac{(r_0^2-r^2)(3+v)}{32} - \frac{3h^2(2+v)}{40} \right), \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{Pz}{h^3} \left(\frac{z^2(2+v)}{8} - \frac{3r^2(-5+v)}{32} + \frac{r_0^2(3+v)}{32} - \frac{3h^2(2+v)}{40} \right),\end{aligned}\quad (1)$$

где σ_{zz} , σ_{rr} , $\sigma_{\theta\theta}$ и τ_{rz} — модули компонентов тензора напряжений Коши, направленных, как обозначено на рис. 2б, ν — коэффициент Пуассона материала окна, z , r — координаты окна, h , r_0 — ширина и механическая апертура окна, P — давление проточного анализируемого вещества в кювете.

В расчете используются следующие параметры: $P = 100$ МПа, $2h = 10$ мм, $r_0 = 16$ мм. Максимальные значения компонентов напряжений рассчитываются способом анализа

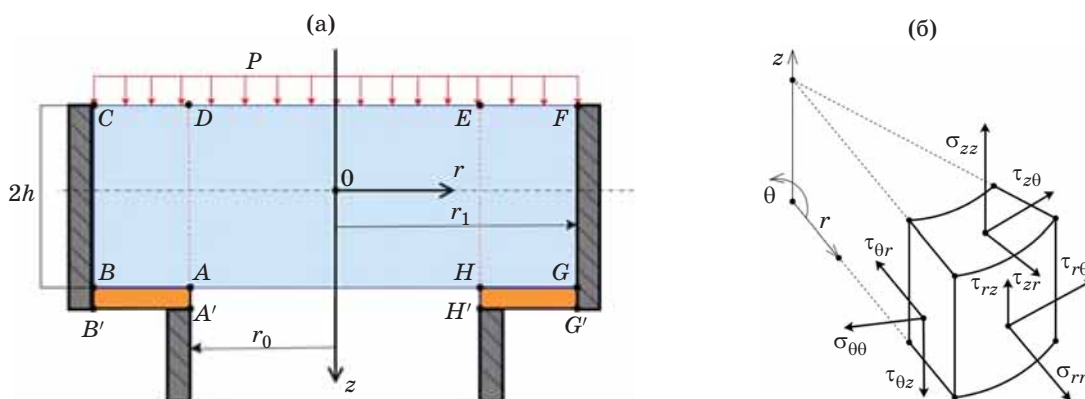


Рис. 2. Анализ напряжений в окне проточной кюветы. Схема нагружения окна проточной кюветы (а), направление векторов компонентов механических напряжений (б)

Fig. 2. Flow cell window stress analysis. (a) Loading scheme of the flow cell window, (b) stress tensor vector directions

Таблица 1. Значения максимальных напряжений оптического окна

Table 1. Maximum stress values for optical window

Компонент напряжения	Координаты, соответствующие максимальному напряжению, значения напряжений		
	Координата r	Координата z	Напряжение, МПа
σ_{zz}	–	$-h$	–100
σ_{rr}	0	$\pm h$	$\pm 37,3$
$\sigma_{\theta\theta}$	0	$\pm h$	$\pm 37,3$
τ_{rz}	r_0	0	–60

функции двух переменных в области $\{0 \leq r \leq r_0, -h \leq z \leq h\}$. Определяются внутренние экстремумы функции и проверяются значения в экстремумах и на краях области. Согласно выражениям (1) значения компонентов тензора напряжений различных оптических материалов остаются практически неизменными. Значения максимальных напряжений оптического окна представлены в табл. 1.

Параметры оптического стекла К8 не подходят для указанных характеристик системы в связи с тем, что предел прочности стекла на растяжение начинается с 25–30 МПа, а значение $\sigma_{\theta\theta}$ больше этого параметра. Параметр τ_{rz} кварцевого стекла превышает предел прочности на разрыв, равный 50 МПа. В случае сапфира с пределом прочности на разрыв около 400 МПа нагрузка не несет риска разрушения окна, поэтому для дальнейшего расчета был выбран именно сапфир в качестве материала оптических окон проточной кюветы.

РАСЧЕТ ПРОФИЛЯ ДЕФОРМАЦИЙ ОПТИЧЕСКИХ ОКОН

В каналах спектрофотометра требуется достижение равномерности распределения излучения между каналами для равного динамического диапазона, что особенно важно при работе с сильно поглощающими образцами. Формирующая оптическая система должна быть спроектирована таким образом, чтобы обеспечить наилучшую равномерность мощности излучения в каналах ВОЖ. Однако остаточная неравномерность в каналах компенсируется относительным характером измерений спектрофотометром пропускания τ

$$\tau = W_{1,i} / W_{0,i}$$

где $W_{1,i}$ — мощность излучения в канале i при наличии анализируемого вещества в кювете, $W_{0,i}$ — зарегистрированная мощность излучения в канале i при пустой кювете.

При повышенном давлении в системе спектрофотометра в проточном канале возникает деформация окон под нагрузкой, которая изменяет форму волнового фронта и может привести к перераспределению излучения на поверхности ВОЖ. Так как эта неравномерность зависит от давления в системе, которое может меняться во времени, она не может быть откалибрована в нормальных условиях, следовательно, для компенсации необходимы дополнительные коэффициенты k_i

$$\tau = k_i W_{1,i} / W_{0,i}$$

Результирующее влияние давления в системе спектрофотометра обусловлено двумя факторами [30]: геометрической деформацией формы окна и изменением показателя преломления материала окна из-за механических напряжений. В данном случае влияние на проходящее излучение оказывает градиент показателя преломления, который зависит от материала и координат луча на оптическом окне. Найденные в литературе значения тензоров фотоупругости сапфирового и кварцевого стекол определены на длинах волн 643,8 и 670 нм [31]. При моделировании полученной градиентной линзы и значениях коэффициентов фотоупругости сапфира полученное значение волновых aberrаций, вносимых градиентной линзой, меньше, чем $0,05\lambda$ на краю зрачка при максимальном давлении 100 МПа. Данный эффект не может быть точно рассчитан теоретически, однако необходимо учитывать его влияние на систему спектрофотометра и внести соответствующие изменения

в алгоритм калибровки прибора, который описан далее.

Геометрическая деформация окна аналитически описывается квадратикой [29], образованной вращением биквадратичной кривой вокруг оси z . Деформация линейно зависит от приложенного давления; примечательно, что это справедливо только в случае упругих деформаций [28]. При использовании таких материалов, как уплотнения из политетрафторэтилена, в процессе снятия давления и повторном его приложении контакт между нижним торцом оптического элемента и уплотнением проходит по разным контактным контурам двух кривых. Более того, политетрафторэтилен со временем частично просачивается через зазоры, поэтому деформация элемента

изменяется даже при постоянной нагрузке в течение любого промежутка времени. Таким образом, для точной компенсации влияния давления на результирующую мощность излучения в каналах спектрофотометра необходимо избегать применения уплотнений из материалов с пределом текучести ниже ожидаемого давления в системе. При нагрузке 100 МПа подходящими материалами являются, например, латунь или титан.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПРОТОЧНОЙ КЮВЕТЫ

Реальная проточная кювета имеет сложную конструкцию, поэтому для учета дополнительных механических элементов и уточнения

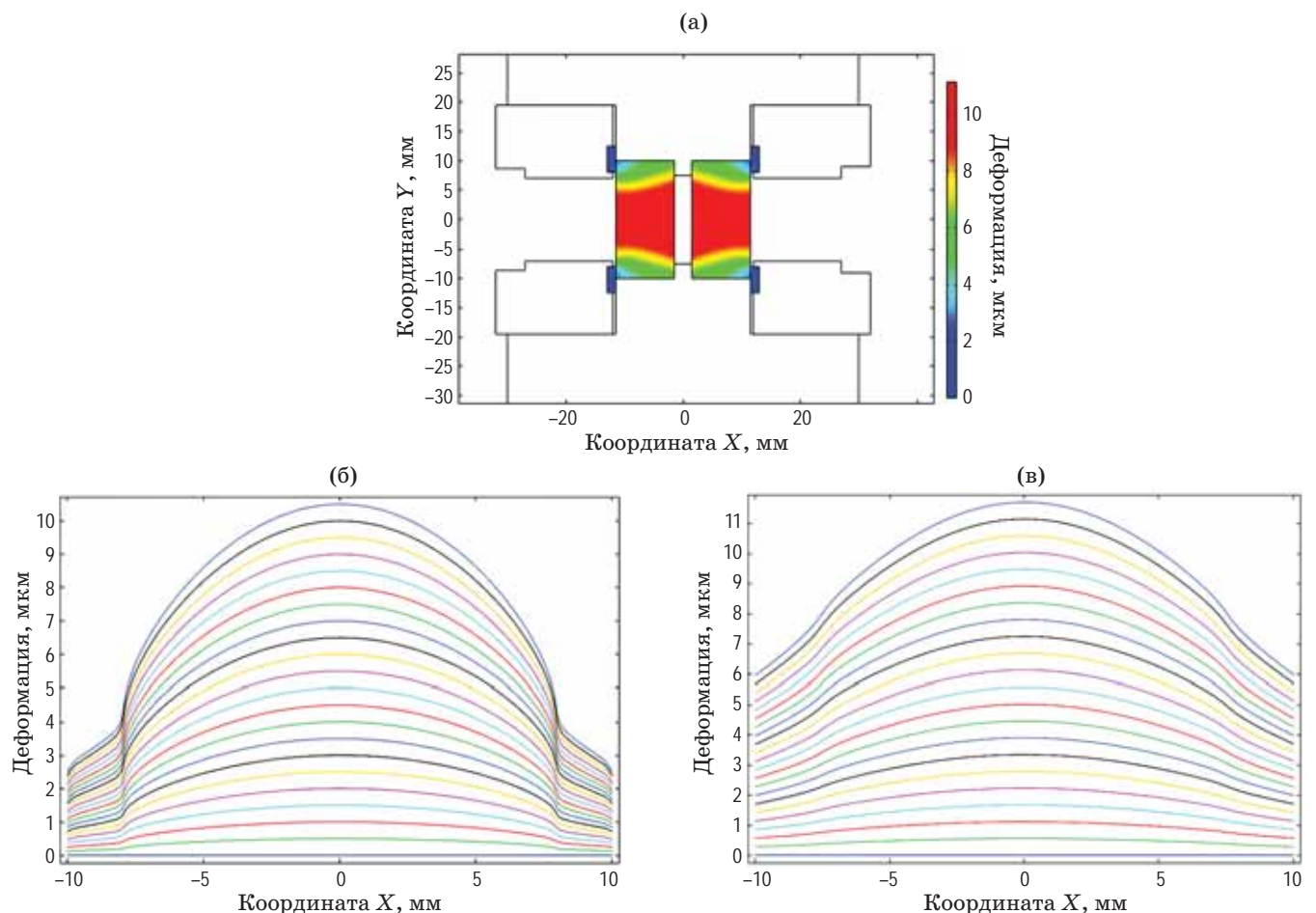


Рис. 3. Анализ деформаций окон проточной кюветы. Моделирование схемы нагружения кюветы при давлении 100 МПа в Comsol Multiphysics (а) и смоделированные профили деформации внешней (б) и внутренней (в) сторон окна кюветы при давлении от 0 до 100 МПа с шагом 5 МПа

Fig. 3. Flow cell window deformation analysis. (a) Modeling of deformation values in flow cell windows at a pressure of 100 MPa in Comsol Multiphysics and cross sections of the deformation of the (б) outer and (в) inner sides of the windows from 0 to 100 MPa with step of 5 MPa

граничных условий проводилось компьютерное моделирование деформации в Comsol Multiphysics. Для последующих расчетов в качестве материала окна был выбран сапфир. Система смоделирована для длины волны излучения $\lambda = 1600$ нм. Результаты моделирования схемы нагружения кюветы и профилей деформации внутренней и внешней сторон окна кюветы представлены на рис. 3.

Профили деформаций смоделированы в программе Zemax Optic Studio. Стороны окон и внутреннего протока были заданы полиномами высших порядков нечетных степеней Odd Asphere с коэффициентами, полученными при аппроксимации профиля деформации полиномом четвертой степени. При повышенном давлении в результате деформации окна кюветы представляют собой два мениска, оптическая сила которых зависит от показателя преломления анализируемого вещества в протоке кюветы.

После прохождения через кювету параллельный пучок излучения приобретает волновую aberrацию, которая зависит от давления в кювете и показателя преломления анализируемого образца. На рис. 4 представлены зависимости волновой aberrации от показателя

преломления анализируемого вещества в протоке при давлении 100 МПа и от давления при различных значениях показателей преломления на краю зрачка оптической системы.

Данный эффект также можно рассмотреть как возникновение фокусировки в системе оптических окон. В частности, в условиях максимального для системы давления 100 МПа при показателе преломления вещества между окнами $n = 1,0$ фокусное расстояние системы двух окон составит 71,7 м; в случае $n = 1,6$ фокусное расстояние будет 5,8 м. Эффект фокусировки усиливается формирующей оптической системой: при увеличении 10^{\times} в зависимости от показателя преломления вещества и значения давления в кювете фокусное расстояние системы варьируется в пределах от 0,6 м до ∞ .

ОБЛУЧЕННОСТЬ НА ВХОДНОМ ТОРЦЕ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОГО ЖГУТА

При работе с многоканальной системой необходимо определить изменение распределения облученности на торце ВОЖ, соответственно, изменение результирующей мощности в каждом канале. При этом возможно рассчитать

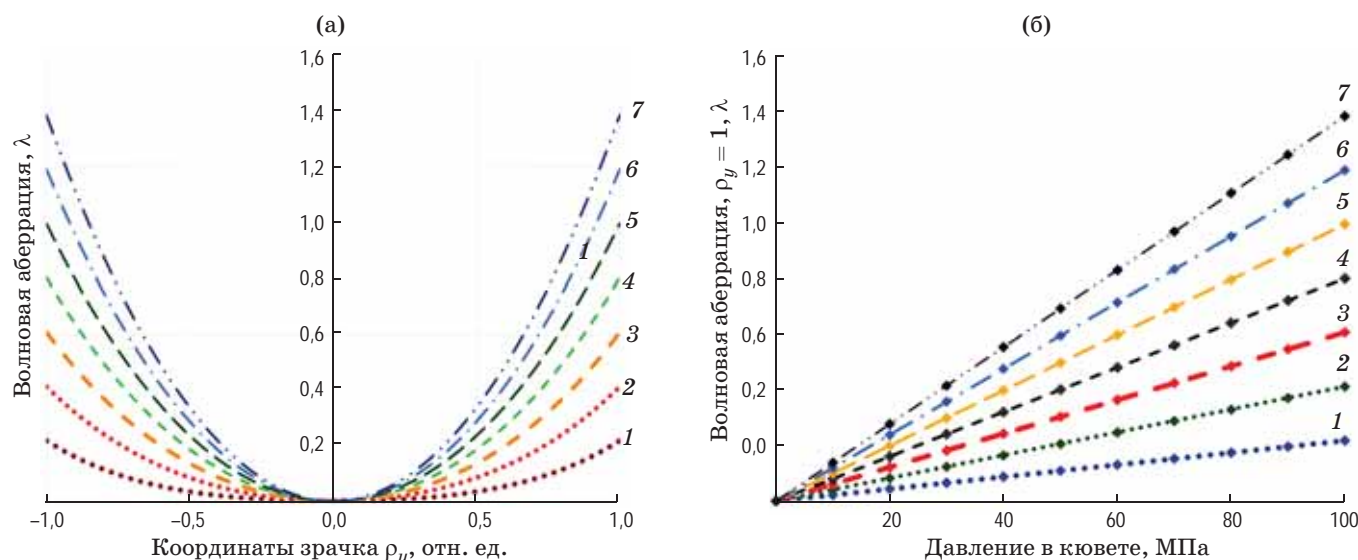


Рис. 4. Анализ волновой aberrации системы кюветы. Волновая aberrация при давлении 100 МПа (а) и зависимости волновой aberrации на краю зрачка от давления (б) при значениях показателя преломления вещества в протоке 1,0 (1), 1,1 (2), 1,2 (3), 1,3 (4), 1,4 (5), 1,5 (6) и 1,6 (7)

Fig. 4. Wave aberration analysis of the flow cell system. (a) Wavefront aberration dependences at a pressure of 100 MPa, and (б) the dependence of wavefront aberration on pressure in the flow cell, for edge of the pupil at values of the refractive index of the substance in the flow channel of (1) 1.0, (2) 1.1, (3) 1.2, (4) 1.3, (5) 1.4, (6) 1.5 and (7) 1.6

калибровочный коэффициент $k(P, n)$ для алгоритма обработки результатов спектрофотометра как

$$k(P, n) = W_{P,n} / W_{P=0, n=1},$$

где $W_{P,n}$ — мощность излучения при повышенном давлении и показателе преломления анализируемого образца в протоке n , $W_{P=0, n=1}$ — мощность излучения при отсутствии повышенного давления и пустой кювете.

На рис. 5 приведены результаты моделирования распределения облученности на торце семиканального ВОЖ с диаметром сердцевинны 200 мкм и полным диаметром 1 мм. В качестве формирующей оптической системы используется афокальная система типа Галилея с увеличением $10\times$.

На основе полученных значений облученности ВОЖ, геометрического расположения каналов и площади сердцевины волокон была рассчитана мощность излучения в каждом из

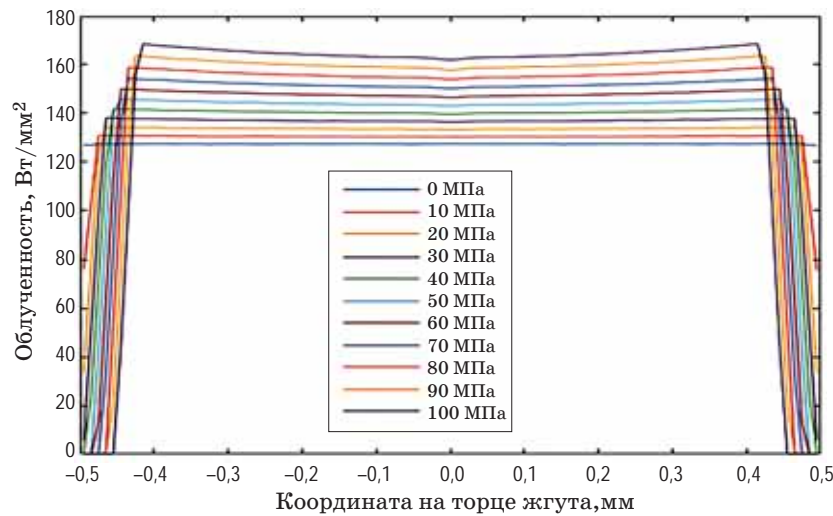


Рис. 5. Сечение облученности на торце приемного ВОЖ при различном давлении в проточной кювете

Fig. 5. Irradiance cross section on a fiber bundle face at different pressures in the flow cell

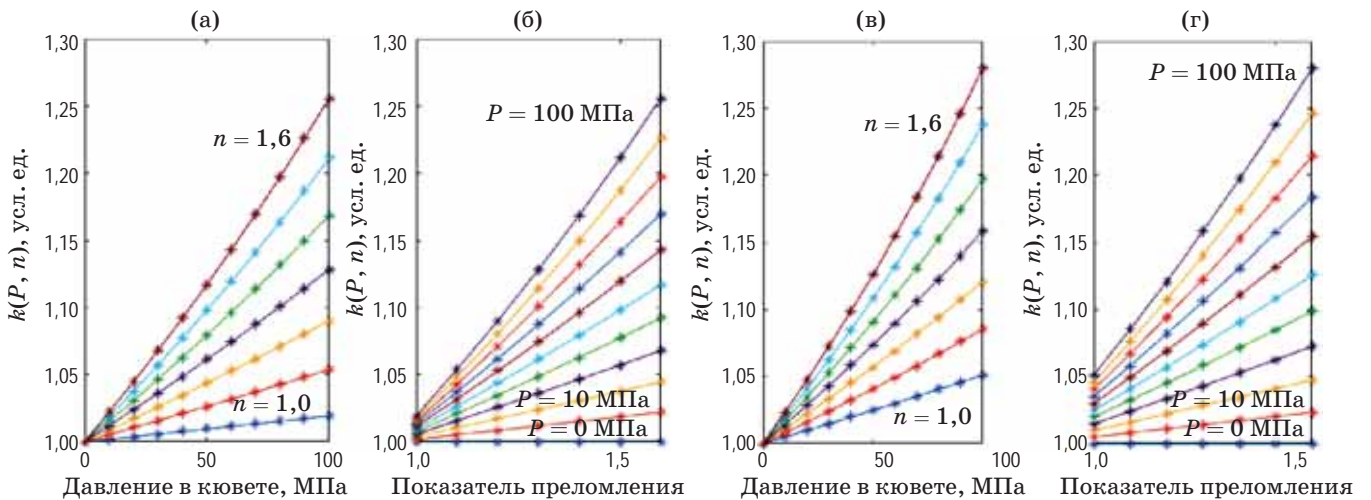


Рис. 6. Зависимости калибровочного коэффициента $k(P, n)$ алгоритма обработки результатов измерения спектрофотометра от давления протока в кювете (а, в) и показателя преломления анализируемого вещества (б, г) в центральном (а, б) и внеосевом (в, г) каналах афокальной системы (увеличение $10\times$)

Fig. 6. Dependences of the calibration coefficient $k(P, n)$ of the algorithm for processing spectrophotometer measurement resultson (а, в) the flow pressure in the flow cell and (б, г) the refractive index of the analyte in the (а, б) central and (в, г) off-axis channels of the afocal system (magnification $10\times$)

каналов ВОЖ в зависимости от значений повышенного давления системы и показателя преломления вещества (рис. 6). Для нормировки использована мощность излучения в канале при отсутствии повышенного давления в пустой кювете.

Разброс калибровочных коэффициентов $k(P, n)$ составляет 1,01–0,89 в центральном канале и 1,14–0,92 во внеосевом канале ВОЖ. Матрица калибровочных коэффициентов позволяет корректировать погрешность, возникающую при наличии повышенного давления в системе многоканального спектрофотометра. Такие коэффициенты являются уникальными для конкретной системы и зависят от материала окон, типа формирующей оптической системы, значения повышенного давления и показателей преломления вещества, протекающего через кювету.

ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ МНОГОКАНАЛЬНЫХ СПЕКТРОФОТОМЕТРОВ

Система спектрофотометра была проанализирована для двух типов формирующих оптических систем и ВОЖ. Входной зрачок систем — 10 мм. Результаты представлены в табл. 2. Волоконно-оптический жгут № 1 — стандартный семиканальный ВОЖ с одним центральным каналом и шестью внеосевыми. Волоконно-оптический жгут № 2 содержит шестнадцать каналов, расположенных по двум концентрическим окружностям вокруг одно-

го осевого канала. Выбранные типы формирующих систем являются наиболее используемыми в подобных системах: фокусирующая и афокальная формирующая оптические системы.

Из таблицы видно, что повышенное давление может вызывать в каналах спектрофотометра в зависимости от увеличения и типа формирующей оптической системы изменение мощности излучения до 28%. Диаметр сердцевин жгутов также оказывает влияние на значения калибровочных коэффициентов, поскольку одинаковые значения изменения облученности в случае жгута № 1 вносят большее относительное изменение мощности излучения, чем в случае жгута № 2 из-за меньшего диаметра сердцевины. В системах с малым увеличением и большим диаметром ВОЖ калибровочные коэффициенты близки к единице и в зависимости от необходимой точности прибора в различных условиях могут не учитываться при калибровке. Однако полученные результаты показывают, что при разработке систем многоканальных спектрофотометров необходимо оценивать возникновение дополнительной фокусировки при повышенном давлении и в случае необходимости использовать калибровочные коэффициенты. Также важным выводом является зависимость результирующей мощности излучения в канале ВОЖ от показателя преломления вещества в протоке, что свидетельствует о необходимости получения данных о показателе преломления в реальном времени. Калибровка

Таблица 2. Диапазоны калибровочных коэффициентов для различных систем спектрофотометров
Table 2. Correction coefficients range for different system designs

Параметры системы		Жгут № 1, $\varnothing = 1$ мм	Жгут № 2, $\varnothing = 5$ мм
Количество каналов		7	16
Диаметр сердцевины, мкм		200	800
Диаметр оболочки, мкм		320	1000
Числовая апертура		0,22	0,22
Афокальная формирующая система	Увеличение, крат	10	2
	Диапазон калибровочных коэффициентов $k(P, n)$	0,28 [1,00; 1,28]	0,02 [1,00; 1,02]
Фокусирующая формирующая система	Фокусное расстояние, мм	50	50
	Диапазон калибровочных коэффициентов $k(P, n)$	0,10 [1,00; 1,10]	0,02 [1,00; 1,02]

системы многоканального спектрофотометра также должна учитывать свойства градиентной линзы, которая возникает в системе при деформации окна. Поскольку этот эффект зависит только от значения повышенного давления, при калибровке изначально необходимо определить коэффициенты $k(P)$ в пустой кювете. Калибровочные коэффициенты учитывают как геометрические деформации окон, так и градиент показателя преломления оптических окон. Затем определяется коэффициент $k(n)$ для набора модельных веществ с известными показателями преломления при максимальном давлении. Остальные значения матрицы калибровочных коэффициентов могут быть получены методом линейной экстраполяции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Многоканальные спектрофотометры являются эффективными инструментами для анализа процессов в реальном времени в промышленных проточных каналах. В статье установлено влияние повышенного давления в проточном канале на результаты измерений прибора. На основе анализа уравнений классической теории упругости определены максимальные значения компонентов механических напряжений в окнах кюветы. Тип деформации обеих сторон окна аналитически определен с использованием классической теории упругости и смоделирован в программном обеспечении Comsol

Multiphysics. Полученные профили деформации аппроксимированы полиномом четвертой степени и использованы при моделировании в Zemax Optic Studio.

Проведена оценка волновой аберрации, вызванной эффектом фокусировки оптических окон, и проанализированы ее зависимости от давления и показателя преломления вещества в протоке. В результате анализа показано, что повышенное давление в проточном канале влияет на результирующую мощность излучения в каналах проточного волоконно-оптического спектрофотометра. Рассчитанная погрешность полученных измерений пропускания при давлении 100 МПа афокальной формирующей системы и семиканального ВОЖ достигает 28%.

Предложенный метод и алгоритм калибровки многоканального спектрофотометра позволяют почти полностью компенсировать дополнительную погрешность измерения коэффициента пропускания, возникающую из-за эффектов градиентной линзы и фокусировки излучения вследствие деформации оптических окон кюветы при изменении давления в проточной кювете системы многоканального спектрофотометра. Предложена матрица поправочных коэффициентов, учитывающая значения повышенного давления в системе проточной кюветы и показателя преломления анализируемого вещества в протоке. Выведены матрицы калибровочных коэффициентов для четырех различных вариантов системы.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Guo X., Sivagurunathan K., Garcia J., et al. Laser photothermal radiometric instrumentation for fast in-line industrial steel hardness inspection and case depth measurements // *Appl. Opt.* 2009. № 7(48). P. C11–C23. <https://doi.org/10.1364/AO.48.000C11>
2. Jamison D.E., Almond S.W. Systems and methods for real time monitoring of gas hydrate formation // United States Patent US9335438B2. Publ. May, 2016.
3. Zhang K., Lu H.-B., Shao L., et al. Experimental research on ammonia concentration detection with white light-emitting diodes (Контроль концентрации аммиака с использованием светодиода белого свечения) [на англ. яз.] // *Оптический журнал.* 2021. Т. 88. № 9. С. 93–100. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2021-88-09-93-100>
Zhang K., Lu H.-B., Shao L., et al. Experimental research on ammonia concentration detection with white light-emitting diodes // *J. Opt. Technol.* 2021. V. 88. № 9. P. 548–552. <https://doi.org/10.1364/JOT.88.000548>
4. Liu C., Wang D., Zheng H. In situ Raman spectroscopic study of barite as a pressure gauge using a hydrothermal diamond anvil cell // *Appl. Spectrosc.* 2016. № 2(70). P. 347–354. <http://doi.org/10.1177/0003702815620556>
5. Current R.W., Tilotta D.C. Determination of total petroleum hydrocarbons in soil by on-line supercritical fluid extraction-infrared spectroscopy using a fiber-optic transmission cell and a simple filter spectrometer // *J. Chromatography A.* 1997. № 1–2(785). P. 269–277. [http://doi.org/10.1016/S0021-9673\(97\)00466-4](http://doi.org/10.1016/S0021-9673(97)00466-4)
6. Whyman R., Hunt K., Page R., et al. A high-pressure spectroscopic cell for FTIR measurements // *J. Phys. E: Sci. Instruments.* 2000. № 17.7. P. 559. <http://doi.org/10.1088/0022-3735/17/7/005>
7. Mullins O.C., Pomerantz A.E., Zuo J.Y., et al. Downhole fluid analysis and asphaltene science for petroleum reservoir evaluation // *Annual Review of Chemical and Biomolecular Eng.* 2014. V. 5. P. 325–345. <http://doi.org/10.1146/annurev-chembioeng-060713-035923>
8. Yamate T., Mullins C. Permanent optical sensor for downhole fluid analysis systems // United States Patent US 6437326 B1. Publ. Aug., 2002.

9. Mark H.L. High pressure optical cell for spectrometry // United States Patent US5949536. Publ. Sep., 1999.
10. Bobe A., Pavlova A., Polyakov V. In situ downhole fluid analysis systems using LED, laser-induced fluorescence, and uranine-traced drilling water // Appl. Spectrosc. 2023. № 1(77). P. 116–122. <https://doi.org/10.1177/0003702822112884>
11. Gui J.Y., Silva J.M., Carnahan J.C., et al. Online monitor for polymer processes // United States Patent US6635224B1. Publ. Aug., 2001.
12. Wynn W.H. Micro volume inline optical sensor // United States Patent US9279746B2. Publ. Aug., 2004.
13. Wynn W.H. Inline optical sensor with modular flow-cell // United States Patent US9404849. Publ. Aug., 2013.
14. Shelton D.P. Lens induced by stress in optical windows for high-pressure cells // Review of Sci. Instruments. 1992. № 8(63). P. 3978–3982. <http://doi.org/10.1063/1.1143248>
15. Bartl G., Glaw P., Schmaljohann F., et al. Correction for stress-induced optical path length changes in a refractometer cell at variable external pressure // Metrologia. 2018. № 1(56). <http://doi.org/10.1088/1681-7575/aaef4c>
16. Алтухов А.А., Попов А.В., Фещенко В.С. Измеритель оптической плотности проточной жидкости // Патент РФ № RU157015U1. Бюл. 2015. № 32.
- Altuhov A.A., Popov A.V., Feshchenko V.S. Flow liquid optical density meter // RF Patent № RU157015U1. Bull. 2015. № 32.
17. Архипов И.Н., Ваганов М.А., Кулаков С.В. и др. Параллельный анализатор спектра сигналов оптического диапазона // Патент РФ № RU86734U1. Бюл. 2009. № 25.
- Arhipov I.N., Vaganov M.A., Kulakov S.V., et al. Parallel optical spectrum analyzer // RF Patent № RU86734U1. Bull. 2009. № 25.
18. Liston M.D., Dickinson D.G., Stark W.A. Multi-channel spectrophotometer // United States Patent US4477190A. Publ. Oct., 1984.
19. Fournel J., Lunati A., Gergaud T. Spectrometer for fluid analysis // United States Patent US7982189B2. Publ. Oct., 2011.
20. Электронный ресурс URL: <https://www.bakerhughes.com/evaluation/wireline-openhole-logging/fluid-characterization-and-testing/> Baker Hughes).
- Electronic resource URL: <https://www.bakerhughes.com/evaluation/wireline-openhole-logging/fluid-characterization-and-testing/> Baker Hughes).
21. Crombie A., Halford F., Hashem M., et al. Innovations in wireline fluid sampling // Oilfield Rev. 1998. № 10(3). P. 26–41.
22. DiFoggio R., Csutak S. Laser diode array downhole spectrometer // United States Patent US7,782,460. Publ. Aug., 2008.
23. Mullins O.C., Schroer J. Real-time determination of filtrate contamination during openhole wireline sampling by optical spectroscopy // SPE Annual Technical Conf. and Exhib. October 1, 2000. P. SPE-63071.
24. Mueller N. Quantification of carbon dioxide using downhole Wireline formation tester measurements // SPE Annual Technical Conf. and Exhib. October 1, 2006. P. SPE-100739.
25. Current R.W., Tilotta D.C. Determination of total petroleum hydrocarbons in soil by on-line supercritical fluid extraction-infrared spectroscopy using a fiber-optic transmission cell and a simple filter spectrometer // J. Chromatography A. 1997. № 1–2(785). P. 269–277. [http://doi.org/10.1016/S0021-9673\(97\)00466-4](http://doi.org/10.1016/S0021-9673(97)00466-4)
26. Mullins O.C. Hydrocarbon compositional analysis in-situ in openhole Wireline logging // SPWLA Annual Logging Symp. 2004. P. SPWLA-2004.
27. Mullins O.C., Hashem M., Elshahawi H., et al. Gas-oil ratio of live crude oils determined by near-infrared spectroscopy // Appl. Spectrosc. 2001. № 55(2). P. 197–201. <http://doi.org/10.1366/0003702011951506>
28. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1965. 27 с.
- Landau L.D., Lifshits E.M. Theory of elasticity [in Russian]. Moscow: "Nauka" Publ., 1969. 27 p.
29. Donnell L.H. Beams, plates and shells. McGraw-Hill, 1976. 482 p.
30. Egan P.F., Stone J.A., Scherschligt J.K., et al. Measured relationship between thermodynamic pressure and refractivity for six candidate gases in laser barometry // J. Vacuum Sci. & Technol. A, Vacuum, Surfaces, and Films: An Official J. American Vacuum Soc. 2019. № 37(3). <http://dx.doi.org/10.1116/1.5092185>
31. Waxler R.M., Farabaugh E.N. Photoelastic constants of ruby // J. Research of the National Bureau of Standards. Section A, Phys. and Chem. 1970. № 2 (74A). P. 215–220. <http://dx.doi.org/10.6028/jres.074A.016>

АВТОРЫ

Александра Сергеевна Бобе — аспирант Университета ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Россия; <https://orcid.org/0000-0001-7489-3567>; alexandrabobe@itmo.ru

Анна Олеговна Вознесенская — кандидат технических наук, доцент Университета ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-4074-4341>; voznensenskaya@itmo.ru

Вадим Михайлович Поляков — технический директор, ООО «Геофотоника», Санкт-Петербург, 197022, Россия; <https://orcid.org/0009-0000-2949-257X>; vadim.polyakov@r-aero.com

AUTHORS

Alexandra S. Bobe — PhD student at ITMO University, St. Petersburg, 197101, Russia; <https://orcid.org/0000-0001-7489-3567>; alexandrabobe@itmo.ru

Anna O. Voznesenskaya — PhD (Engineering), Associate Professor at ITMO University, St. Petersburg, 197101, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-4074-4341>; voznensenskaya@itmo.ru

Vadim M. Polyakov — Technical Director, LLC "Geophotonika", St. Petersburg, 197022, Russia; <https://orcid.org/0009-0000-2949-257X>; vadim.polyakov@r-aero.com