



Precisão e exatidão na determinação da temperatura rotacional de espectros com radical C2* utilizando o simulador



Yasmin Matos Amado^{1*}; Angelo Passaro²; Dermeval Carinhana Jr.²

¹Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física "Gleb Wataghin"

²Instituto de Estudos Avançados, São José dos Campos, SP, Brasil

*yasmin_amado@hotmail.com

INTRODUÇÃO

A simulação de espectros é uma importante ferramenta na análise de chamas e plasmas. Grandezas físicas, tais como a temperatura, podem ser determinadas a partir da comparação entre espectro experimental e espectro teórico com a vantagem de fornecer informações adicionais sobre o sistema. O objetivo deste estudo é avaliar a precisão e exatidão na determinação da temperatura dos produtos da combustão ou plasma contendo radicais C2* usando a simulação do espectro de emissão de moléculas diatômicas.

METODOLOGIA

Um espectro teórico é simulado e neste é adicionado um ruído com distribuição uniforme gerada por um programa em que a amplitude máxima é definida pelo usuário. O espectro resultante é definido como um espectro-teste, o qual desempenha o papel de um espectro experimental. Para determinar a temperatura e a resolução FWHM o programa usa um método cujo princípio é baseado na determinação da melhor sobreposição entre os espectros teste e teórico usando o método do qui-quadrado, que é a soma dos quadrados das diferenças entre espectro-teste e espectro teórico simulado. A sobreposição entre ambos os espectros depende de uma entrada do usuário para corrigir a linha de base do espectro-teste.

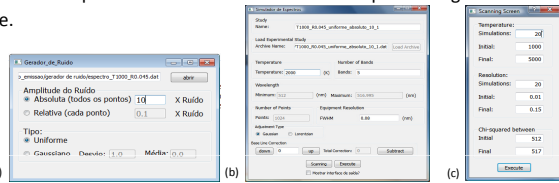


Figura 1 (a) interface do programa gerador de ruído, (b) a interface de programa que simula o espectro teórico e carrega o espectro-teste e (c) janela na qual os limites de temperatura e de resolução são definidos.

RESULTADOS E DISCUÇÃO

As avaliações revelaram que com diferentes estimativas iniciais de temperatura e de resolução introduzida pelo utilizador para ser comparado com o espectro-teste, o programa foi capaz de determinar os parâmetros esperados. O espectro da Figura 2 mostra a sobreposição entre o espectro-teste e teórico simulado antes de utilizar o método do qui-quadrado. A Figura 3 mostra os espectros após a verificação, que indica a capacidade de reproduzir o espectro-teste consequentemente determinando a melhor temperatura e resolução entre eles. A diferença entre os valores esperados de temperatura e espectral resolução e os valores obtidos depois de simulações sucessivas foi definido como o erro relativo.

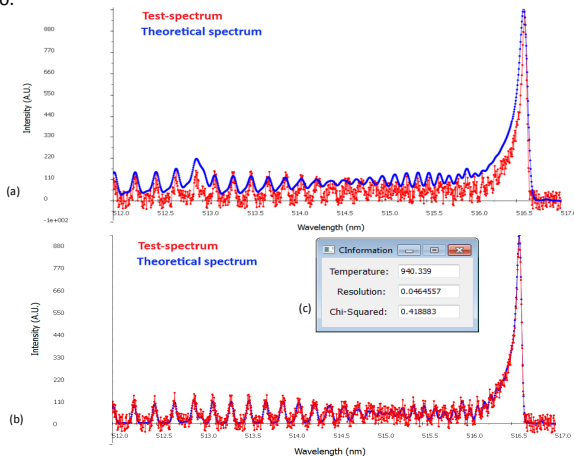


Figura 2: Espectro simulado (teórico) com os valores de temperatura de 2000 K e resolução 0,080 nm, sobrepostos no espectro de teste (com ruído uniforme e amplitude máximo de 10 unidades) a 1000 K e 0,045 nm. A linha de base foi ajustada em 45 unidades para baixo. (a) espectro antes e (b) após o sacnning. (c) Interface de Programa que mostra os valores de temperatura e resolução do espectro obtido para varrimento do espectro acima.

Os resultados são mostrados na Figura 4, na qual representa graficamente os erros máximos calculados para cada espectro-teste em função da sua respectiva temperatura e resolução.

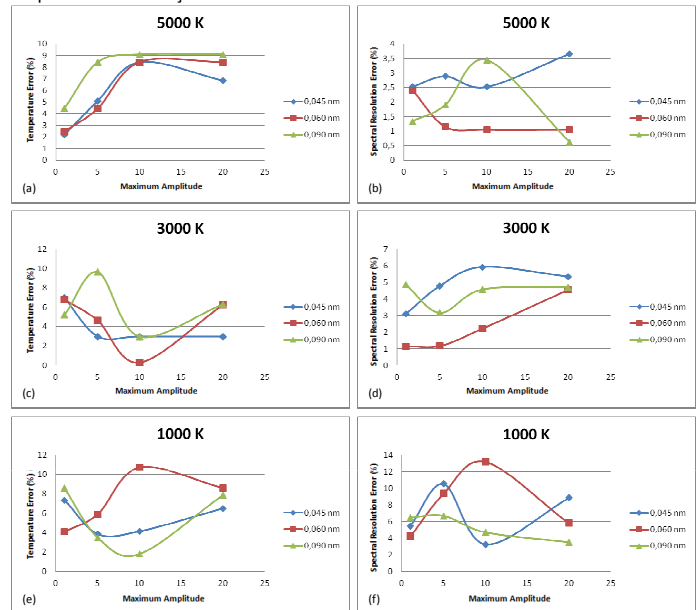


Figura 3: Comportamento dos erros de temperatura para (a) 5000 K, (c) 3000 K e (e) a 1000 K e erros de espectro de resolução para (b) 5000 K, (d) e 3000 K (f) 1000 K devido o aumento da amplitude máxima de ruído

Nas Figuras 3 (a) observa-se que o erro encontrado aumenta e tende a permanecer estável em aproximadamente 9%. Era esperado este mesmo comportamento para as outras temperaturas e resoluções, no entanto, os erros determinados nos outros parâmetros não seguem nenhum comportamento específico. Nas Figuras 3 (c) e 3 (d), pode-se observar que o erro de temperatura diminui com o aumento da amplitude, enquanto que o erro da resolução tende a estabilizar para espectros gerados com amplitude de 10 unidades. Finalmente, os resultados para os espectros a partir de 1000 K, Figuras 3 (e) e 3 (f) mostram que não existe uma gama de valor específico o qual pode ser associado a um erro máximo calculado.

CONCLUSÃO

A falta de um padrão para a determinação de erros associados à amplitude máxima de ruído nos espectros-teste sugere a influência de outros fatores como por exemplo na determinação da linha de base, pois esta é ajustada pelo usuário. Caso o ajuste não seja o mais preciso a sobreposição dos espectros não poderá determinar os melhores valores de temperatura e resolução. Em todo o caso, os resultados parecem confirmar o erro descrito na literatura, ou seja, a determinação da temperatura e resolução dos espectros de emissão de radical C2* tem uma precisão de 10% [1].

AGRADECIMENTO

Os autores agradecem ao CNPq pelo apoio financeiro e pelas bolsas de estudo.

REFERÊNCIAS

[1] Passaro, A.; Carinhana Jr, D.; Gonçalves, E. A.; Silva, M. M. da; Guimarães, A. P. L.; Abe, N. M.; Santos, A. M. dos. The use of molecular spectra simulation for diagnostics of reactive flows. *J. Aerosp. Technol. Manag.*, v.3, n.1, p. 13-20, jan/abr. 2011.