

МОДИФИКАЦИЯ ТУРБИДИМЕТРИЧЕСКОГО ВЫСОКОСЕЛЕКТИВНОГО МЕТОДА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ

А. А. Жирнов^а, младший научный сотрудник

С. С. Титов^а, канд. техн. наук

О. Б. Кудряшова^а, доктор физ.-мат. наук

^аИнститут проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук, Бийск, РФ

Введение: оптические методы, такие как турбидиметрический высокоселективный метод (модификация метода спектральной прозрачности), успешно применяются для измерения дисперсных характеристик аэрозолей. Турбидиметрический высокоселективный метод позволяет определять характеристики дисперсных сред (функцию распределения, концентрацию) в диапазоне от 20 нм до 6 мкм. Однако в реализации метода используется аналитическая функция распределения частиц по размерам (гамма-распределение), имеющая только два параметра, что не всегда адекватно отражает эволюцию нанодисперсных аэрозолей, созданных в результате быстропотекающих процессов (ударно-волновым, импульсным способом), не позволяя адекватно описывать распределение частиц аэрозоля по размерам.

Цель: модификация метода в целях устранения недостатка его реализации на основе замены двухпараметрической функции распределения многопараметрической. **Результаты:** турбидиметрический высокоселективный метод в многопараметрической модификации проверен экспериментально. Обработаны экспериментальные данные для суспензии в кювете (установившийся процесс) и для твердофазного аэрозоля, созданного импульсным способом (быстропотекающий процесс). Сравнивались результаты, полученные с помощью оригинального метода, основанного на применении функции гамма-распределения, и модифицированного метода. В качестве модельных веществ были выбраны суспензия нанодисперсного порошка алюминия марки Alex в ацетоне и аэрозоль мелкодисперсного порошка оксида алюминия (Al_2O_3). Описаны алгоритмы, позволяющие ускорить вычисление функции распределения частиц по размерам. Реализован поиск решения в виде многопараметрической функции распределения частиц по размерам. Дальнейшее развитие метода связано с расширением диапазона измеряемых параметров по диаметру частиц дисперсной среды. Для этого планируется объединить результаты измерений с помощью турбидиметрического высокоселективного метода и метода малоуглового рассеяния, позволяющего измерять дисперсные характеристики в диапазоне от 1 до 100 мкм. Это позволит расширить область применения методов и более адекватно описывать дисперсные параметры в быстропотекающих процессах их генезиса в широком диапазоне размеров частиц — от 20 нм до 100 мкм. **Практическая значимость:** полученная модификация турбидиметрического высокоселективного метода позволяет измерять дисперсности аэрозоля в неустановившихся потоках. В перспективе работа послужит математической основой создания прибора, объединяющего два оптических метода измерений, базирующихся на различных принципах взаимодействия зондирующего излучения с дисперсной средой.

Ключевые слова — аэрозоль, суспензия, гамма-распределение, многопараметрическое распределение, оптимизация, оптический метод, параметры аэрозольных сред, алгоритм.

Введение

Функция распределения частиц по размерам — важнейшая характеристика дисперсных сред. Существует множество методов определения дисперсных характеристик среды, один из эффективных — турбидиметрический высокоселективный метод, не вносящий возмущение в исследуемую среду. Он относится к категории оптических методов измерений и основан на регистрации ослабления излучения дисперсной средой в широком спектре длин волн. Оптическая толщина τ_λ в данном случае — ослабление зондирующего излучения на разных длинах волн дисперсной средой. Принципиальная схема установки, реализующей данный метод, приведена на рис. 1.

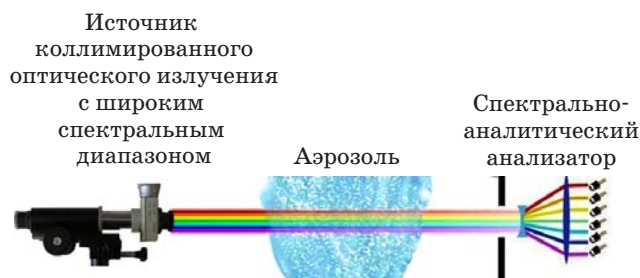
Одна из реализаций метода [1] заключается в нахождении функции распределения частиц по размерам в виде гамма-распределения и решении

обратной задачи оптики аэрозолей путем решения серии прямых задач:

$$f(D) = aD^\alpha \exp^{-\beta D}, \quad (1)$$

где a — нормирующий множитель; D — диаметр частиц; α и β — параметры распределения.

В прямой задаче заданы характеристики падающего потока излучения и свойства вещества



■ Рис. 1. Принципиальная схема установки

частиц; необходимо исследовать особенности рассеяния. В обратной задаче зондирования известными считают характеристики пучка излучения до и после рассеяния; необходимо определить свойства элемента объема вещества, на котором происходило рассеяние. Задачи представляют два разных подхода к одному и тому же явлению, методы решения их существенно различны. Для прямой задачи всегда есть решение, для обратной задачи вопрос существования решения остается открытым. Это общая особенность обратных задач [2].

В предлагаемом подходе [1] при поиске решения происходит перебор параметров α и β до тех пор, пока расчетные значения коэффициента спектральной прозрачности наиболее точно не опишут экспериментальные значения, полученные с помощью спектрометра, т. е. минимизируется функционал:

$$\Omega = \min_{\alpha, \beta} \left\{ \sum_{i=1}^N |k_i^{\text{эксп}} - k_i^{\text{теор}}| \right\},$$

где $k_i^{\text{эксп}} = \frac{\tau_{\lambda_i}^{\text{эксп}}}{\tau_{\lambda_j}^{\text{эксп}}}$ — экспериментально измеренные коэффициенты спектральной прозрачности на разных длинах волн; j — номер нормировочной длины волны;

$$k_i^{\text{теор}} = \frac{\tau_{\lambda_i}^{\text{теор}}}{\tau_{\lambda_j}^{\text{теор}}} = \frac{\int_{D_{\min}}^{D_{\max}} Q\left(\frac{\pi D}{\lambda_i}, m(\lambda_i)\right) D^2 f(D) dD}{\int_{D_{\min}}^{D_{\max}} Q\left(\frac{\pi D}{\lambda_j}, m(\lambda_j)\right) D^2 f(D) dD} \quad (2)$$

— теоретически рассчитанные коэффициенты спектральной прозрачности на разных длинах волн, в которых $Q\left(\frac{\pi D}{\lambda_i}, m(\lambda_i)\right)$ — фактор эффективности ослабления зондирующего излучения, $m(\lambda_i)$ — комплексный показатель преломления измеряемой среды на разных длинах волн.

Постановка задачи

Несмотря на то что гамма-распределение частиц по размерам (1) адекватно описывает реальное распределение в большинстве случаев, существуют ситуации, когда это не так. Например, если аэрозоль образуется в результате разных механизмов и источников или процесс его образования и эволюции отличается высокой скоростью в неустановившихся потоках и т. п. В этих случаях может возникнуть многомодальное распределение частиц аэрозоля по размерам, которое сложно описать аналитической функцией. В настоящей работе предлагается искать

функцию распределения частиц по размерам в виде массива значений. Цель работы — разработка алгоритма поиска многопараметрической функции распределения частиц по размерам и реализация этого алгоритма в виде программы расчета.

Сложность задачи заключается в том, что с увеличением числа параметров [по сравнению с функцией (1), имеющей только два параметра] будет существенно расти время вычислений. Для уменьшения времени расчетов необходимо оптимизировать вычислительный алгоритм.

Для проверки адекватности разработанного алгоритма решения задачи в работе проводятся модельные эксперименты с использованием аэрозоля оксида алюминия, полученного импульсным способом (быстропротекающий процесс), суспензии порошка алюминия в ацетоне (установившийся процесс) и сравнение результатов расчетов, полученных в соответствии с новым (в виде многопараметрической функции) и прежним (в виде аналитической функции) алгоритмом поиска решения.

Алгоритм решения

Для того чтобы функция описывала дисперсные характеристики неустановившихся аэрозольных сред, предлагается искать решение как многопараметрическую функцию распределения частиц по размерам [3] в виде

$$f(D) = \begin{cases} A_1 & \text{при } D \leq D_1 \\ A_2 & \text{при } D_1 < D \leq D_2 \\ A_3 & \text{при } D_2 < D \leq D_3 \\ \dots & \dots \\ A_i & \text{при } D_{i-1} < D \leq D_i \\ \dots & \dots \\ 1 - \sum_i^N A_i & \text{при } D > D_N \end{cases},$$

где A_1, \dots, A_i — параметры функции распределения; N — число элементов массива (параметров) распределения. Часто для описания дисперсных систем используют усредненную характеристику D_{32} — средний объемно-поверхностный диаметр. Для N -параметрической функции распределения D_{32} находят по формуле

$$D_{32} = \frac{A_1 D_1^3 + A_2 D_2^3 + \dots + A_i D_i^3 + \left(1 - \sum_i^N A_i\right) D_{i+1}^3}{A_1 D_1^2 + A_2 D_2^2 + \dots + A_i D_i^2 + \left(1 - \sum_i^N A_i\right) D_{i+1}^2},$$

при этом чем больше число параметров, тем точнее результат определения функции распределения частиц. Это приводит к значительному увеличению требований по вычислительным мощностям, поэтому целесообразно оптимизировать алгоритм. В реализации данного метода и для

расчета интеграла (2) мы применяли следующие меры оптимизации (используя работы [4, 5]):

- расчет и сохранение всех теоретически определенных функций распределения в массив вместо расчета для каждого файла эксперимента отдельно;
- сокращение количества используемых длин волн;
- оптимизацию интегрирования;
- изменение количества и типов переменных;
- оптимизацию компилятора и компоновщика IDE;
- группировку данных по одинаковым типам в памяти;
- удаление операций приведения типов;
- предварительный расчет факторов эффективности ослабления.

В результате проведенной оптимизации удалось добиться ускорения вычислений в 5–6 раз (для пятипараметрической функции распределения — до, приблизительно, 40 с).

Следует отметить, что увеличение числа параметров в искомой функции распределения частиц по размерам, с одной стороны, позволяет описать распределение частиц более точно, но, с другой стороны, резко увеличивает объем необходимых вычислений. Следовательно, потребуются дальнейшая оптимизация вычислительных алгоритмов, что планируется в будущих исследованиях.

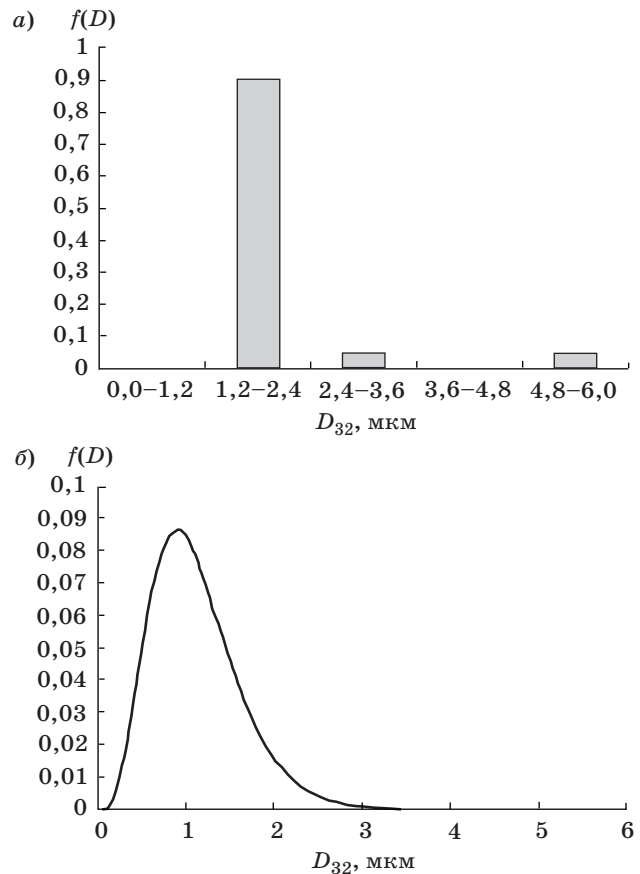
Проверка и тестирование

Для проверки работоспособности предложенного алгоритма в быстропротекающем процессе проведен модельный эксперимент, для которого был выбран мелкодисперсный аэрозоль порошка оксида алюминия (Al_2O_3). Его создавали между источником и приемником зондирующего излучения с помощью пескоструйного пистолета Кратон SBG-01. После обработки результатов эксперимента были получены следующие функции распределения и их параметры (рис. 2, а, б; табл. 1).

Как видно из табл. 1, полученные при разном подходе значения D_{32} близки между собой. Таким образом, обработка результатов эксперимента в случаях использования многопараметрической функции и функции гамма-распределения частиц по размерам дает хорошее согласие

■ **Таблица 1.** Параметры многопараметрической функции и гамма-распределения для аэрозоля Al_2O_3

Массив значений, 5 параметров					D_{32} , мкм	Функция гамма-распределения		D_{32} , мкм
A_1	A_2	A_3	A_4	A_5		α	β	
0	0,9	0,05	0	0,05	1,504	3,9	4,4	1,568



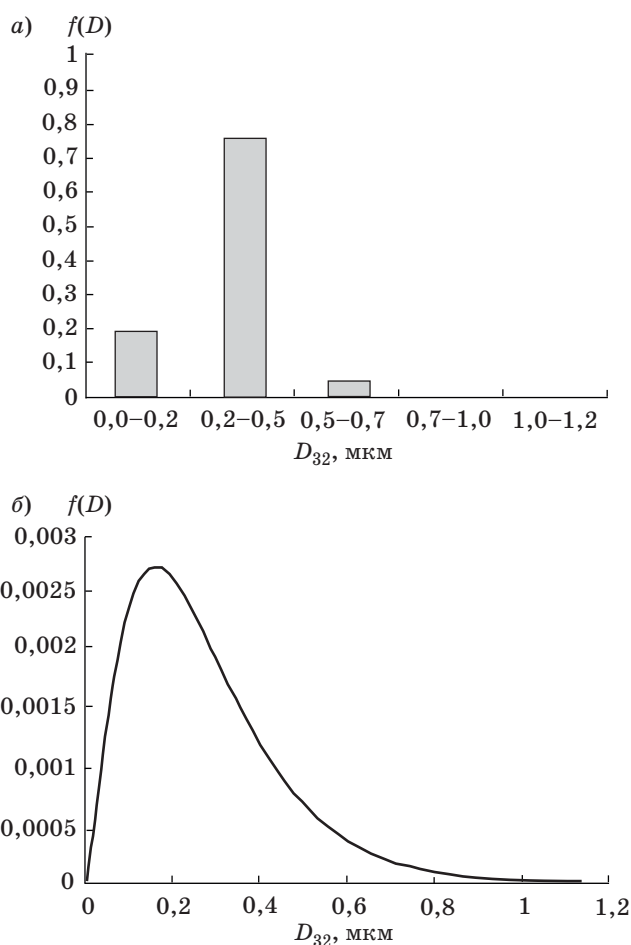
■ **Рис. 2.** Результаты, полученные с использованием многопараметрической функции (а) и гамма-распределения (б) для аэрозоля Al_2O_3

по среднему значению. В то же время на рис. 2, а видно, что многопараметрическая функция распределения частиц по размерам имеет бимодальный характер (в диапазоне от 3,6 до 4,8 мкм частиц не обнаружено, а в следующем диапазоне 4,8–6 мкм они вновь находятся).

Второй эксперимент был проведен для установившегося процесса — зондирующее излучение проходило через кювету с дисперсной системой. В качестве дисперсионной среды был взят ацетон (слабо окисляет алюминий), а в качестве дисперсной фазы — порошок алюминия марки Alex. После обработки результатов эксперимента были получены следующие функции распределения и их параметры (рис. 3, а, б; табл. 2).

■ **Таблица 2.** Параметры многопараметрической функции и гамма-распределения для суспензии порошка алюминия

Массив значений, 5 параметров					D_{32} , мкм	Функция гамма-распределения		D_{32} , мкм
A_1	A_2	A_3	A_4	A_5		α	β	
0,2	0,75	0,05	0	0	0,505	1,4	8,6	0,511



■ **Рис. 3.** Результаты, полученные с использованием многопараметрической функции (а) и гамма-распределения (б) для суспензии порошка алюминия

Из рисунков видно, что решение, полученное с использованием многопараметрической функции и аналитической функции, имеет строгое одномодальное распределение частиц по размерам. Полученные значения D_{32} близки между собой.

Заключение

В ходе выполнения работы был разработан алгоритм определения многопараметрической функции распределения частиц дисперсной среды по размерам. Алгоритм был реализован в виде программы. Проведены эксперименты по измерению дисперсных характеристик аэрозольной среды и суспензии. Как показали расчеты, разработанный алгоритм дает более адекватные

результаты (по сравнению с поиском решения в виде аналитической функции) при обработке данных измерений дисперсности быстротекающего процесса со сложным видом функции распределения частиц по размерам. Реализация алгоритма в виде программы с ее оптимизацией позволила сократить время расчетов примерно в 5–6 раз. В дальнейшем планируется объединить математическую обработку результатов измерений, полученных с помощью метода малоуглового рассеяния [6], с полученными с помощью турбидиметрического высокоселективного метода (реализация в виде поиска многопараметрической функции распределения частиц по размерам). Математическое обобщение рассматриваемых методов позволит получать экспериментальную информацию об оптических свойствах дисперсных сред в широком диапазоне размеров частиц и существенно расширит возможности интерпретации получаемых данных. Разработанный программный комплекс по обработке экспериментальных данных, полученных с помощью двух оптических методов, в дальнейшем послужит основой для создания прибора.

Литература

1. **Титов С. С.** Турбидиметрический высокоселективный метод и быстродействующий измерительный комплекс определения параметров нестационарных многофазных сред: дис. ... канд. техн. наук. — Бийск, 2011. — 153 с.
2. Теоретические и прикладные проблемы рассеяния света / под ред. Б. И. Степанова и А. П. Иванова. — Минск: Наука и техника, 1971. — 487 с.
3. **Жирнов А. А., Ахмадеев И. Р., Кудряшова О. Б.** Параллельные вычисления в методе малоуглового рассеяния // Вестник компьютерных и информационных технологий. 2015. № 8. С. 46–50. doi:10.14489/issn.1810-7206
4. **Steve McConnell.** Code Complete. 2nd ed. — Redmond, Wa.: Microsoft Press, 2004. — 960 p.
5. **Касперски К.** Техника оптимизации программ. Эффективное использование памяти. — СПб.: БХВ-Петербург, 2003. — 464 с.
6. **Ахмадеев И. Р.** Метод и быстродействующая лазерная установка для исследования генезиса техногенного аэрозоля по рассеянию луча в контролируемом объеме: дис. ... канд. техн. наук. — Бийск, 2008. — 86 с.

UDC 519.688, 537.872

doi:10.15217/issn1684-8853.2016.3.95

Modification of the Turbidimetric High-Selective Method for Measurement of Fast ProcessesZhirnov A. A.^a, Junior Researcher, toluol_88@mail.ruTitov S. S.^a, PhD, Tech., titov@ipcet.ruKudrjashova O. B.^a, Dr. Sc., Phys.-Math., olgakudr@inbox.ru^aInstitute for Problems of Chemical and Energetic Technologies, Siberian Branch of the RAS, 1, Sotsialisticheskaja St., 659322, Biysk, Russian Federation

Introduction: Optical methods like the turbidimetric high-selective method (modification of the spectral transparency method) are successfully applied to measuring disperse characteristics of aerosols. The turbidimetric high-selective method allows you to define the characteristics of disperse media (distribution function, concentration) in the range from 20 nm to 6 μm . However, this method uses an analytical function of distribution of particles by the sizes (gamma-distribution) which has only two parameters and does not always adequately define the evolution of the nanodisperse aerosols created as a result of a fast process (a shock wave or impulse). **Purpose:** This method should be modified to eliminate the shortcoming of its realization, via replacing the two-parametric distribution function by a multi-parametric one. **Results:** We carried out an experimental check of the turbidimetric high-selective method in its multi-parametric modification. We processed experimental data for suspension in a cuvette (an established process) and for a solid-phase aerosol created by an impulse (a fast process). We compared the results obtained by the original method based on gamma-distribution function with the results obtained by the modified method. As model substances, we chose suspension of nanodisperse powder of aluminum (Alex) in acetone, and aerosol of aluminum oxide fine powder (Al_2O_3). We described algorithms which speed up calculating the function of distribution of particles by their sizes, and searched for a solution in the form of a multi-parametric function of distribution of particles by their sizes. The further development of the method is associated with the expansion of the range of the measured parameters in terms of disperse media particle diameter. For this purpose, we are going to combine the results of the measurements by means of the turbidimetric high-selective method and by means of the method of small-angle scattering which allows you to measure disperse characteristics in the range from 1 to 100 μm . This will make it possible to expand the field of application of these methods and to describe the disperse parameters in more adequately in the fast processes of their genesis over a wide range of particle sizes: from 20 nm to 100 μm . **Practical relevance:** The obtained modification of the turbidimetric high-selective method allows you to measure aerosol dispersion in unsteady streams. In the long term, this work will generate a mathematical basis for the creation of a device combining two optical methods of the measurements based on different principles of interaction between the probing radiation and the disperse media.

Keywords — Aerosol, Suspension, Gamma-Distribution, Multi-Parametric Distribution, Optimization, Optical Method, Parameters of Aerosol Media, Algorithm.

References

1. Titov S. S. *Turbidimetricheskii vysokoselektivnyi metod i bystrodeistvuiushchii izmeritel'nyi kompleks opredeleniia parametrov nestatsionarnykh mnogofaznykh sred.* Dis. kand. tehn. nauk [Turbidimetric Method is Highly Selective and Fast Measurement System of Determining the Parameters of Nonstationary Multiphase Media. PhD tech. sci. diss]. Biysk, 2011. 61 p. (In Russian).
2. *Teoreticheskie i prikladnye problemy rasseianiia sveta* [Theoretical and Applied Problems of Light Scattering]. Minsk, Nauka i tekhnika Publ., 1971. 487 p. (In Russian).
3. Zhirnov A. A., Ahmadeev I. R., Kudrjashova O. B. Parallel Computations in the Small-Angle Scattering Method. *Vestnik komp'iuternykh i informatsionnykh tekhnologii*, 2015, no. 8, pp. 46–50 (In Russian). doi:10.14489/issn.1810-7206
4. Steve McConnel. Code Complete. 2nd ed. Redmond, Wa, Microsoft Press, 2004. 960 p.
5. Kasperski K. *Tekhnika optimizatsii programm. Effektivnoe ispol'zovanie pamiaty* [Technique Optimization Programs. Efficient Use of Memory]. Saint-Petersburg, BHV-Peterburg Publ., 2003. 464 p. (In Russian).
6. Ahmadeev I. R. *Metod i bystrodeistvuiushchaia lazernaia ustanovka dlia issledovaniia genezisa tekhnogennogo aerologia po rasseianiiu lucha v kontroliruemom ob'eme.* Dis. kand. tehn. nauk [Method and High-Speed Laser System for the Study of the Genesis of Man-Made Aerosol Scattering of the Beam in a Controlled Amount. PhD tech. sci. diss]. Biysk, 2008. 86 p. (In Russian).