

# РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА МНОГОФАЙЛОВОЙ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ В ТУРБИДИМЕТРИЧЕСКОМ ВЫСОКОСЕЛЕКТИВНОМ МЕТОДЕ

А.А. Жирнов, С.С. Титов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук, г. Бийск

Быстрая обработка экспериментальной информации в оптических методах диагностики дисперсных сред является актуальной задачей. Решение такой задачи позволит использовать данные методы и приборы на производстве для контроля, в науке и других сферах деятельности человека.

В настоящее время разработан турбидиметрический высокоселективный метод для определения дисперсных характеристик полидисперсных сред. Этот метод и установка на его основе позволяет определять дисперсные характеристики в аэрозоле и суспензии, однако обработка файлов эксперимента осуществляется оператором по одному. Для того чтобы ускорить обработку экспериментальных данных необходимо разработать и реализовать алгоритм в виде программы, позволяющий осуществлять многофайловую обработку экспериментальной информации.

Проверка реализованного алгоритма осуществляется оптическим анализатором частиц Spraytec компании Malvern Instruments на модельной среде электрокорунда ( $Al_2O_3$ ) A25 марки M1.

Работа позволит осуществлять автоматизированную обработку экспериментальной информации установкой на основе турбидиметрического высокоселективного метода для других веществ. Таким образом, работа оператора будет ускорена в  $N$  раз, где  $N$  – число экспериментальных файлов (спектров).

*Ключевые слова:* средний объемно-поверхностный диаметр частиц ( $D_{32}$ ), оптическая плотность, алгоритм, спектрометр, опорный спектр, спектр затухания.

## ВВЕДЕНИЕ

Автоматизация и ускорение обработки экспериментальной информации, получаемых с приборов является важной задачей в современной технике, медицине, науке. Например, в медицине позволяет пациенту получать результаты анализов в кратчайшее время, что крайне важно в ряде заболеваний [1].

В оптических методах диагностики дисперсных характеристик сред также необходима автоматизация. Она позволит осуществлять контроль на производстве, проводить эксперименты в науке и других областях жизнедеятельности человека.

Сейчас разработан турбидиметрический высокоселективный метод (ТВСМ) и установка на его основе (ТИПАС-1), которая позволяет определять дисперсные характеристики [2] аэрозолей и суспензий в диапазоне от 30 нм до 6 мкм [3]. Реализация данного метода требует от оператора обрабатывать экспериментальные файлы, получаемые со спектрометра по очереди [4]. Таким образом, время затрачиваемое оператором на обработку файлов эксперимента пропорционально числу файлов.

В качестве входной информации для данного метода используется опорный спектр, снятый при прохождении зондирующего излучения без дисперсной фазы. При измерении аэрозоля это спектр, снятый на

воздухе, а при измерении в кювете – в воде или другой жидкости. Этот спектр снимается один раз в начале эксперимента. После снятия опорного спектра снимаются спектры сигнала – при прохождении зондирующего излучения через дисперсионную среду с дисперсной фазой. Таких спектров в каждом эксперименте своё количество –  $N$  штук. Регистрация спектров осуществляется спектрометром S125-2048/14 производства фирмы «Solar ТП» в диапазоне от 352,7 нм до 1105,5 нм.

## ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Для метода используются определённые длины волн из диапазона спектрометра [5], поэтому из исходных файлов необходимо предварительно сделать отбор.

Подготовка экспериментальных данных (экспериментальные расчёты) для метода осуществляется по формуле 1.

$$k_i^{\text{эксн}} = \frac{\tau_{\lambda_i}^{\text{эксн}}}{\tau_{\lambda_j}^{\text{эксн}}}, \quad i, j = 1 \dots n, \quad (1)$$

где  $i$  – номер длины волны;  $j$  – номер нормировочной длины волны;  $k_i^{\text{эксн}}$  – отношения оптических плотностей на определённых длинах волн;

$$\tau_{\lambda_i}^{\text{эксн}} = \ln \frac{I_0(\lambda_i)}{I(\lambda_i)}$$

– оптическая плотность;  $I_0(\lambda_i)$  –

интенсивность на  $i$  длине волны спектра излучения прошедшего через дисперсионную среду при отсутствии в ней дисперсионной фазы;  $I(\lambda_i)$  – интенсивность на  $i$  длине волны спектра излучения прошедшего через дисперсионную среду при наличии в ней дисперсионной фазы.

На рисунке 1 представлен спектр  $I_0(\lambda_i)$  и  $I(\lambda_i)$ .

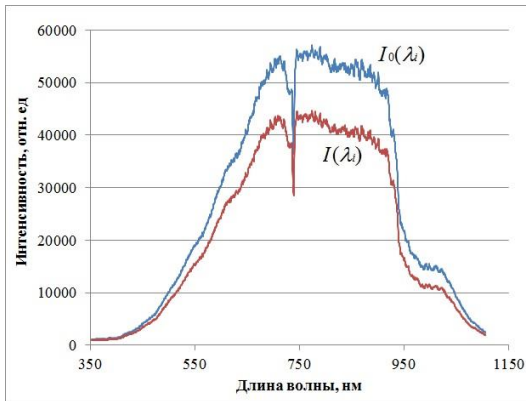


Рис. 1. Спектр  $I_0(\lambda_i)$  и один из спектров  $I(\lambda_i)$ , полученных на спектрометре

На рисунке 2 представлена зависимость  $\tau_{\lambda_i}^{\text{эксн}}$  (графиком чёрного цвета показана аппроксимация полиномом 4-ой степени).

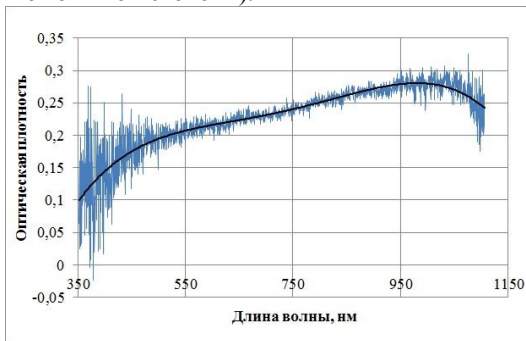


Рис. 2. Оптическая плотность  $\tau_{\lambda_i}^{\text{эксн}}$

Для реализации метода требуется:

- 1) получить значения  $I_0(\lambda_i)$  со спектрометра;
- 2) получить значения  $I(\lambda_i)$  со спектрометра;
- 3) выбрать требуемые длины волн для  $I_0(\lambda_i)$ ,  $I(\lambda_i)$ ;
- 4) определить оптическую плотность  $\tau_{\lambda_i}^{\text{эксн}}$  для выбранных длин волн;
- 5) найти отношения оптических плотностей по формуле 1;

б) определить  $\tau_{\lambda_i}^{\text{эксн}}$  и  $k_i^{\text{эксн}}$  для всех файлов  $I(\lambda_i)$ .

Данный алгоритм подготовки экспериментальных данных представлен в виде блок-схемы, рис. 3.



Рис. 3. Блок-схема программы многофайловой обработки и подготовки экспериментальных данных

Для проверки разработанного алгоритма и программы многофайловой обработки был проведён эксперимент. Установкой ТИПАС-1 измерялась водная

суспензия  $Al_2O_3$  марки A25-M1, после чего эта же суспензия измерялась оптическим анализатором Spraytec компании Malvern.

На рисунке 4 показаны результаты измерения оптическим анализатором.

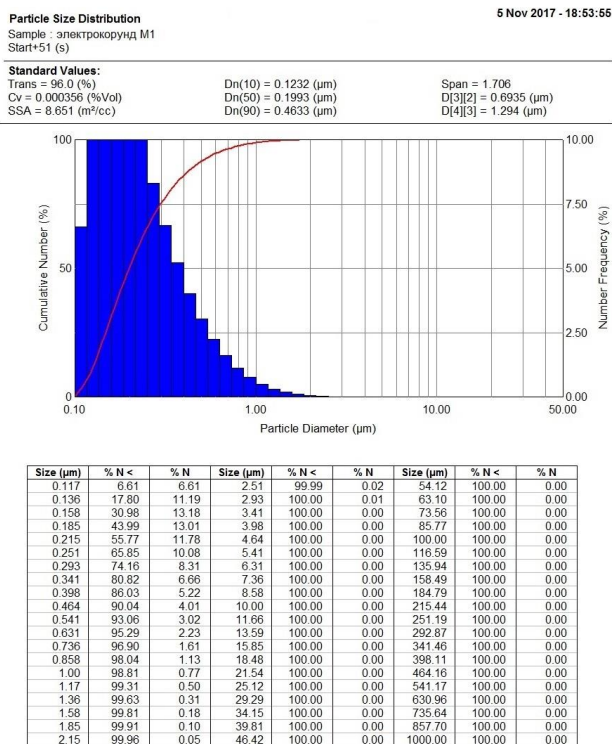


Рис. 4. Результат измерения суспензии  $Al_2O_3$  на оптическом анализаторе Spraytec компании Malvern Instruments

В таблице 1 сведены результаты измерения, полученные установкой ТИПАС-1 и Spraytec компании Malvern Instruments.

Табл. 1. Сравнение результатов, полученных установкой на основе ТВСМ и оптическим анализатором

Относительное время, с	ТВСМ $D_{32}$ , нм	Spraytec компании Malvern Instruments $D_{32}$ , нм
0,33	704,0	693,5
0,66	702,9	
1	696,9	
1,33	690,0	
1,66	683,6	

Исходя из данных таблицы, можно сделать вывод, что разработанный и реализованный алгоритм многофайловой обработки экспериментальных данных показывает адекватные результаты. В таблице значения  $D_{32}$  отличаются не более чем на 10,5 нм.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

В результате проведённой работы была разработана программа для автоматизированной обработки файлов спектрометра в ТВСМ, которые представляют собой файлы \*.txt, записанные в формате длина волны – относительная интенсивность. Данная программа была проверена экспериментально. Результаты обра-

ботки хорошо согласуются с другим измерителем дисперсных характеристик и отличаются не более чем на 2% для 5-ти точек по времени. Для данного эксперимента оператор затратил в 5 раз меньше времени на обработку экспериментальных данных, используя установку ТИПАС-1.

Работа выполнена при использовании оборудования Бийского регионального центра коллективного пользования СО РАН (ИПХЭТ СО РАН, г. Бийск).

**СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ**

1. Сандерс, Дж. Технология CUDA в примерах: введение в программирование графических процессоров: Пер. с англ. Слинкина А.А., научный редактор Боресков А.В. [Текст] / Дж. Сандерс, Э. Кэндрот. – М.: ДМК Пресс, 2011. – 232 с.
2. Архипов, В.А. Движение частиц дисперсной фазы в несущей среде: учеб. пособие [Текст] / В.В. Архипов, А.С. Усанина. – Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2014. – 252 с.
3. Титов С.С. Турбидиметрический высокоселективный метод и быстродействующий измерительный комплекс определения параметров нестационарных многофазных сред [Текст]: дис...канд. техн. наук: 01.04.01 : защищена 08.12.2011 / Титов Сергей Сергеевич. – Бийск, 2011. – 153 с.
4. О конференции [Электронный ресурс] // Веб-узел VI Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Перспективы создания и применения конденсированных высокоэнергетических материалов». 2016. – Режим доступа: <http://www.ipcet.ru/index.php/konferentsii/26-molodjzohnaya-konferentsiya>.
5. Границы применимости высокоселективного турбидиметрического метода / А.А. Жирнов [и др.] // Ползуновский вестник. – 2016. – № 4. – С. 55-58.

*Жирнов Анатолий Алексеевич – младший научный сотрудник лаборатории физики преобразования энергии высокоэнергетических материалов, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук, тел. (3854)305847, e-mail: toluol\_88@mail.ru.*

*Титов Сергей Сергеевич – кандидат технических наук, ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИПХЭТ СО РАН), тел. (3854)305847, e-mail:titov@ipcet.ru.*

# ALGORITHM FOR MULTIFILE PROCESSING OF EXPERIMENTAL DATA IN HIGH-SELECTIVE TURBIDIMETRIC METHOD

**A.A. Zhirnov, S.S. Titov**

*Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Biysk*

The fast processing of experimental information in the optical methods for diagnostics of disperse media is a relevant challenge. Once the challenge is solved, those methods and instruments can be used in industries for inspection, in science, and in other scope of human's activities. To date, a high-selective turbidimetric method has been devised for measuring disperse characteristics of polydisperse media. This method and an instrument system based thereon enable the measurement of disperse characteristics of aerosols and suspensions, though the files of experiments are manipulated by an operator one by one. In order to make the experimental-file processing faster, it is necessary to have developed and implemented an algorithm as a program, which can process multiple files of experimental data. The implemented algorithm is checked on by a Spraytec optical particle analyzer (Malvern Instruments) on a model medium of M1-brand electrocorundum ( $Al_2O_3$ )A25. This will allow the computer-aided processing of experimental data for other substances by an instrument system using the high-selective turbidimetric method. Thus, the operator's work will be done  $N$  times faster, where  $N$  is the number of experimental files (spectra). Index terms: средний объемно-поверхностный диаметр частиц ( $D_{32}$ ), оптическая плотность, алгоритм, спектрометр, опорный спектр, спектр затухания.

Index terms: Sauter mean diameter ( $D_{32}$ ), optical density, algorithm, spectrometer, reference spectrum, attenuation spectrum.

## REFERENCES

1. Sanders, J. and E. Kandrot, CUDA by Example An introduction to general-purpose GPU programming, MA: NVIDIA Corporation, 2011.
2. Arhipov, V.A. and A.S. Usanina, The movement of particles of a disperse phase in the bearing medium, MA: Tomsk State University, 2014.
3. Titov, S.S. "Turbidimetric high-selective method and high-speed measuring complex of determination of parameters of non-stationary multi-phase medium", PhD, Tech. dissertation, Biysk, 2011.
4. The prospects of creation and use of the condensed high-energy materials, accessed October 30, 2017, <http://www.ipcet.ru/index.php/konferentsii/26-molodjiozhnaya-konferentsiya>.
5. Zhirnov, A.A., et al, "Limits of applicability of the high-selectivity turbidimetric method", Polzunovsky vestnik, vol 4, pp 55–58. December, 2016.

*Zhirnov Anatolij Alekseevich – Junior Researcher of the laboratory of physics of transformation of energy of explosives, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, тел. (3854)305847, e-mail: [toluol\\_88@mail.ru](mailto:toluol_88@mail.ru).*

*Titov Sergey Sergeevich – PhD, Tech, Scientific Secretary, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, тел. (3854)305847, e-mail: [titov@ipcet.ru](mailto:titov@ipcet.ru).*