

Tomasz GUSZKOWSKI, Janusz MROCZKA

KATEDRA METROLOGII ELEKTRONICZNEJ I FOTONICZNEJ, POLITECHNIKA WROCŁAWSKA

Ocena wpływu niedokładności określenia współczynnika załamania na symulowane wyniki pomiarów turbidymetrycznych

Mgr inż. Tomasz GUSZKOWSKI

Absolwent Wydziału Elektroniki Politechniki Wrocławskiej, obecnie pracownik Katedry Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej Politechniki Wrocławskiej w zespole prof. Mroczonego. Jego zainteresowania naukowe obejmują metody sztucznej inteligencji, sposoby rozwiązania problemu odwrotnego oraz konstrukcję inteligentnej aparatury pomiarowej.



e-mail: tomasz.guszkowski@pwr.wroc.pl

Prof. dr hab. inż. Janusz MROCZKA

Kierownik Katedry Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej Politechniki Wrocławskiej. Zajmuje się metodologią obserwacji i eksperymentu, algorytmizacją problemu odwrotnego, modelowaniem matematycznym pól fizycznych, analizą spektralną i polaryzacyjną promieniowania rozproszonego, reprezentacjami czasowo-częstotliwościowymi w przetwarzaniu danych.



e-mail: janusz.mroczonego@pwr.wroc.pl

Streszczenie

Symulowane pomiary turbidymetryczne można wykorzystać do określania różnych parametrów układów dyspersyjnych, np. wielkości cząstek fazy rozproszonej. Przeważnie jest to problem źle uwarunkowany, gdzie małe błędy w pomiarze mętności ulegają wielokrotnemu wzmocnieniu. W takich zastosowaniach otwarty pozostaje problem wpływu dokładności określenia przyjętego w badaniach symulacyjnych zespolonego współczynnika załamania w funkcji długości fali na wyniki pomiarów turbidymetrycznych. Praca próbuje wypełnić tę lukę i oszacować wrażliwość symulowanego pomiaru turbidymetrycznego na zmiany współczynnika załamania m dla wybranego układu dyspersyjnego – wodnego aerozolu.

Słowa kluczowe: turbidymetria, współczynnik załamania, problem źle uwarunkowany

Evaluation of influence of errors of refractive index determination on simulated turbidity measurements

Abstract

Simulated turbidimetric measurements can be utilised to evaluate various parameters of disperse systems, eg. size of particles of disperse phase. Mostly the problem is ill-conditioned, where small errors in turbidity measurements are heavily magnified after inversion. In the above-mentioned kind of applications the problem of influence of errors in determination of complex refractive index m to the simulated turbidity is still open. The paper attempts to fulfill this gap and evaluate sensitivity of simulated turbidity measurements for a given dispersion system – water aerosol.

Keywords: turbidimetry, refraction index, ill-conditioned problem

1. Wprowadzenie

Rozwiązanie problemu odwrotnego w turbidymetrii, tj. wnioskowanie o właściwościach układu dyspersyjnego na podstawie pomiaru mętności dla różnych długości fali, wymaga wielokrotnej symulacji rozwiązania wprost, czyli obliczenia mętności dla zadanych parametrów układu dyspersyjnego. Inne problemy spotykane podczas szukania rozwiązania to: źle postawienie problemu, gdzie liczba niewiadomych jest większa od liczby równań pozwalających wyznaczyć te niewiadome, oraz źle uwarunkowanie numeryczne, prowadzące najczęściej do silnego wzmocnienia błędów pomiarowych, przy czym z reguły pomijany jest problem wrażliwości symulowanych pomiarów turbidymetrycznych na błędy określenia współczynnika załamania m fazy rozproszonej i fazy rozpraszającej.

Z drugiej strony wartości m w funkcji długości fali λ podawane przez różnych badaczy różnią się, niekiedy dość znacznie, nawet dla tak dobrze poznanych związków, jak woda.

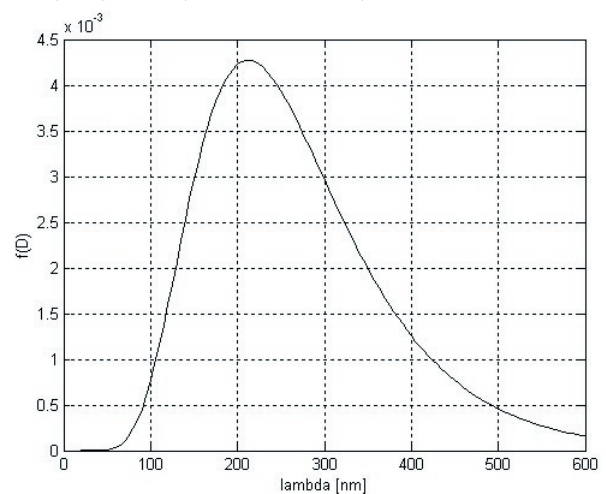
Niniejsza praca próbuje oszacować wpływ błędu określenia współczynnika załamania fazy rozproszonej na wynik symulowanego pomiaru mętności dla wybranego układu dyspersyjnego.

2. Metoda badań

Założono, że przedmiotem badań jest próbka wodnego aerozolu, prześwietlana światłem o zmiennej długości fali λ od 350 do 650 nm z krokiem 50 nm, co odpowiada możliwościom pomiarowym typowych spektrofotometrów. Dodatkowo przyjęto, że próbka charakteryzuje się rozkładem logarytmiczno-normalnym (1)

$$f(D) = \frac{1}{\ln(\sigma)\sqrt{2\pi}D} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln D - \ln D_m}{\sigma}\right)^2\right) \quad (1)$$

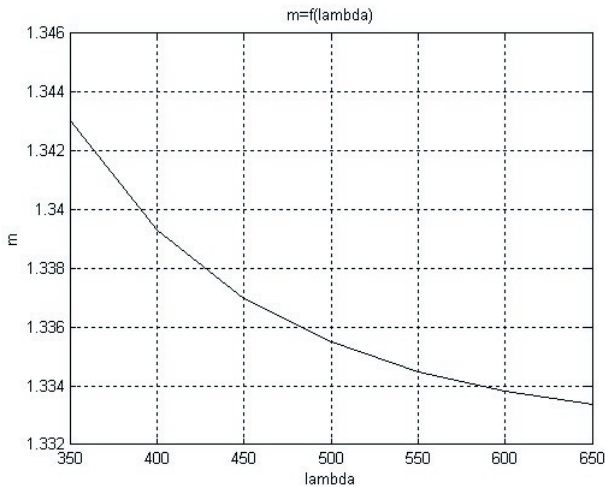
cząstek o średniej geometrycznej średnicy $D_m = 250$ nm oraz geometrycznym odchyleniu standardowym $\sigma = 1,5$.



Rys. 1. Rozkład logarytmiczno-normalny o $D_m = 250$ nm i $\sigma = 1,5$
Fig. 1. Logarithmic-normal distribution $D_m = 250$ nm and $\sigma = 1,5$

Założono, że woda w podanym przedziale λ jest nieabsorbująca, a co za tym idzie urojona część zespolonego współczynnika załamania jest pomijalnie mała. Wykorzystany

współczynnik załamania wody w funkcji długości fali zaczerpnięto z [1], a jego przebieg przedstawia rys. 2.



Rys. 2. Współczynnik załamania m wody w funkcji długości fali λ
Fig. 2. Refractive index m of water as a function of wavelength λ

Założono również, że cząstki aerozolu są jednorodne, kuliste i na tyle od siebie oddalone, że nie zachodzi wielokrotne rozproszenie. Mętność względną $R(\lambda, \lambda_0)$ (stosunek mętności dla danej długości fali pomiarowej do mętności dla fali odniesienia) wyznaczono korzystając z zależności (2),

$$R(\lambda, \lambda_0) = \frac{\int_0^{\infty} D^2 Q_{ext}(D, \lambda, m) f(D) dD}{\int_0^{\infty} D^2 Q_{ext}(D, \lambda_0, m_0) f(D) dD} \quad (2)$$

gdzie λ jest długością pomiarowej fali świetlnej, Q_{ext} efektywnością ekstynkcji, λ_0 długością fali odniesienia, m_0 współczynnikiem refrakcji dla fali odniesienia, $f(D)$ funkcją rozkładu wielkości cząstek (1). Do obliczeń efektywności ekstynkcji Q_{ext} użyto teorii Mie. Analizę przeprowadzono określając z zależności (3) współczynnik k wzmocnienia błędu,

$$k = \frac{\delta_T}{\delta} \quad (3)$$

gdzie δ_T jest względnym błędem symulowanej mętności, a δ jest względnym błędem określenia m .

3. Wyniki

Badanie przeprowadzono dla względnego błędu δ określenia m o wartościach 0,1 %, 0,2 %, 0,5 %, 1 %, 2 %, 5 %, 10 %.

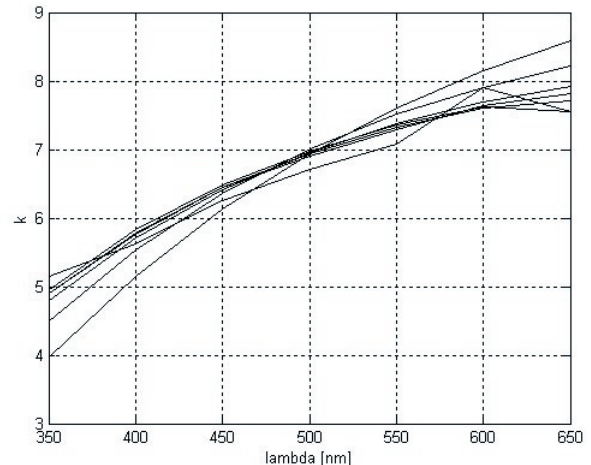
Tab. 1. Wzmocnienie błędu określenia m w turbidymetrii
Tab. 1. Amplification of m error in turbidimetry

δ	k_{350}	k_{400}	k_{450}	k_{500}	k_{550}	k_{600}	k_{650}
0,001	5,156	5,625	6,248	6,717	7,073	7,904	7,545
0,002	4,964	5,837	6,488	6,979	7,352	7,631	7,556
0,005	4,903	5,783	6,441	6,938	7,317	7,602	7,705
0,01	4,897	5,762	6,441	6,904	7,294	7,646	7,817
0,02	4,791	5,716	6,410	6,959	7,380	7,701	7,921
0,05	4,501	5,541	6,354	7,008	7,510	7,910	8,214
0,1	3,981	5,152	6,136	6,945	7,606	8,150	8,579

Jako długość fali odniesienia λ_0 wybrano 500 nm. Do obliczenia Q_{ext} wykorzystano przetłumaczony na język MATLAB kod zamieszczony w [2]. Współczynnik k wzmocnienia błędu dla długości fali λ od 350 do 650 nm przedstawia tab. 1.

4. Wnioski

Wyraźnie widoczne jest, że w analizowanym przypadku dla rozkładu logarytmiczno-normalnego o $D_m = 250$ nm i $\sigma = 1,5$ błąd w określeniu współczynnika załamania powoduje kilkukrotnie większy (od około 5 do ponad 8 razy) błąd obliczonej mętności.



Rys. 3. Wzmocnienie błędu określenia m w turbidymetrii
Fig. 3. Amplification of m error in turbidimetry

W badanym przypadku rozkładu logarytmiczno-normalnego współczynnik k wzmocnienia błędu rośnie wraz ze wzrostem długości fali i jest słabo zależny od błędów względnego δ wyznaczenia m , co przedstawia rys. 3.

Przy tak dużym wzmocnieniu błędu próby wykorzystywania symulacji pomiarów turbidymetrycznych do rozwiązania problemu odwrotnego mogą okazać się bezowocne, a duża wrażliwość na zmiany współczynnika załamania może być przyczyną braku sukcesów podczas prób opartego na pomiarach, a więc obarczonego niepewnością, rozwiązania problemu odwrotnego w turbidymetrii.

Choć nie można wyciągnąć ogólnych wniosków na podstawie pojedynczej symulacji wykonanych pomiarów, to jednak otrzymane wyniki w opinii autorów są znaczące i wskazują na celowość dalszych prac nad problemem wrażliwości mierzonej, bądź symulowanej mętności na zmiany współczynnika załamania.

W tym świetle wskazane wydaje się przeprowadzenie symulacji lub pomiarów wrażliwości turbidymetrii dla wielu różnych wartości parametrów D_m i σ rozkładu logarytmiczno-normalnego, jak również dla substancji o innych, niż przebadana, wartościach współczynnika załamania m .

Zasadnym wydaje się również przeanalizowanie wpływu błędów pomiaru turbidymetrycznego na wyniki odwracania (określenia parametrów rozkładu), ponieważ błędy te prawdopodobnie też są wzmocniane.

5. Literatura

- [1] The International Association for the Properties of Water and Steam: Release on the Refractive Index of Ordinary Water Substance as a Function of Wavelength, Temperature and Pressure; IAPWS, Erlangen, 1997.
[2] Bohren C.F., Huffman D.R.: Absorption and Scattering of Light by Small Particles; Wiley, New York, 1983.