

УДК 621.373

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВЕЩЕСТВ ЗА СЧЕТ КОНТРОЛЯ ДОЗИРОВАНИЯ ПРОБЫ И ВРЕМЕНИ ИСПАРЕНИЯ ПРОБЫ

К.П. КУРЕЙЧИК, В.В. ШЕВЧЕНКО, А.З. ИБРАГИМ

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровки, 6, Минск, 220013, Беларусь*

Поступила в редакцию 15 августа 2004

При исследовании химического состава вещества в спектрометрах дозатора, имеется некоторая погрешность дозирования (это сказывается на точности измерений), а также при исследовании химического состава вещества в спектрометрах, оснащенных спиральным атомизатором, испарение вещества со спирали происходит за некоторое время. При повторении заборов пробы может оказаться так, что спираль не полностью погрузится в пробу или на ней будет избыточное количество пробы. Это сказывается на точности измерений. Необходимо разработать метод, который бы позволял контролировать отклонение от нормы, оценивать его и вводить поправочные коэффициенты в результат, основываясь на измерении времени испарения.

Ключевые слова: проба, объем тела, масса вещества, спиральный атомизатор.

Введение

Эту задачу предлагается решить при помощи персонального компьютера, камеры, которая фотографирует дозу вещества в момент ее выхода из дозатора, и соответствующего программного обеспечения для обработки информации от камеры, определения объема и вычисления корректирующих коэффициентов.

Математический расчет (методы расчета)

Объем тела можно вычислить при помощи интеграла, если возможно определить площади поперечных сечений тел, перпендикулярных к какому-либо фиксированному направлению. Примем это направление за ось абсцисс и обозначим через V объем данного тела. Далее, допустим, что известна площадь любого сечения рассматриваемого тела плоскостью, перпендикулярной к оси Ox . Эта площадь будет зависеть от положения секущей плоскости, т. е. по формуле (1) будет функцией от x :

$$S = S(x). \quad (1)$$

Разобьем тело плоскостью $X=\text{const}$ на тонкие слои, начиная от сечения $x_1=a$ и кончая сечением $x_n=b$ (рис. 1).

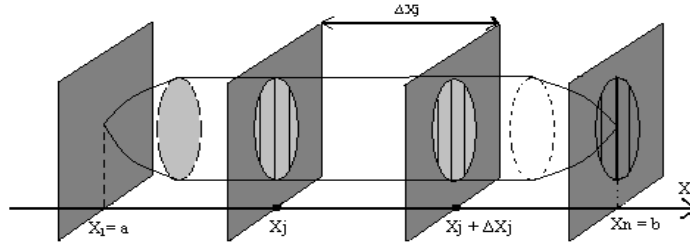


Рис. 1. Представление тела в виде отдельных слоев

Объем ΔV_j рассматриваемого j -го тонкого слоя приблизительно равен произведению площади сечения $S(x_j)$ на толщину данного слоя Δx_j :

$$\Delta V_j = S(x_j)\Delta x_j. \quad (2)$$

Следовательно, просуммировав все эти элементарные объемы ΔV_j , получим для объема V такое приближенное выражение:

$$V \approx \sum_{j=1}^n S(x_j)\Delta(x_j). \quad (3)$$

В пределе, когда число элементов n безгранично возрастает ($n \rightarrow \infty$) и наибольшее из Δx_j стремится к нулю ($\max \Delta x_j \rightarrow 0$), рассматриваемая по формуле (4) сумма переходит в определенный интеграл, который и дает точное значение искомого объема:

$$V = \int_a^b S(x)dx. \quad (4)$$

Для тела, образованного вращением вокруг оси абсцисс кривой $y=f(x)$ будет иметь вид

$$V = \pi \int_a^b y^2 dx, \quad (5)$$

где $y=f(x)$.

Действительно, в рассматриваемом случае произвольные сечения тела плоскостью, перпендикулярной к оси абсцисс, есть круг радиуса $r=y(x)$, площадь которого

$$S(x) = \pi r^2 = \pi y^2(x). \quad (6)$$

Подставив это значение в общую формулу и вынеся постоянную π из-под знака интеграла, получим формулу для вычисления объема тела вращения [1].

Корректирующий результат определяется по отношению эталонного объема к полученному объему. Нахождение поправочного коэффициента и умножение его на исследуемый объект.

Решение применимо для атомно-абсорбционного метода, когда одному и тому же объему могут соответствовать различные концентрации исследуемого вещества.

Приближение функций, заданных таблицей, по методу наименьших квадратов

Программно мы можем определить точки, которые являются границами пробы исследуемого вещества, но необходимо определить функцию, которая проходила бы через эти точки, и, зная эту функцию, мы можем определить объем методом, описанным выше. Функцию $y=f(x)$ определим по методу наименьших квадратов.

Интерполяционный способ нельзя считать наиболее удобным по двум причинам. Во-первых, если число узлов велико, то мы получаем громоздкие выражения для интерполяционных многочленов. Во-вторых, если табличные значения функции подвержены каким-то случайным ошибкам, например ошибкам измерения, то эти ошибки будут внесены в интерполяционный многочлен и тем самым исказят картину поведения функции.

Метод наименьших квадратов

Пусть снова $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ — какая-то система линейно независимых функций на $[a, b]$, $m \leq n$. Будем разыскивать обобщенный многочлен, составленный из этих функций, так, чтобы

$$\sum_{i=0}^n [f(x_i) - \Phi(x_i)]^2, \quad (7)$$

имело наименьшее возможное значение [2].

Программное обеспечение

Разработанная программа проводит распознавание проб (капель) вещества, определяет границы и по методу наименьших квадратов находит функцию, которой определены границы капли. Зная функцию, программа вычисляет объем по формуле (5).

На рис. 2 изображена исходная картина, а на рис. 3 исходные диаграммы для верхней и нижней части капли (исходный объем $V=35861$ точек).

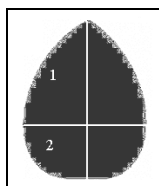
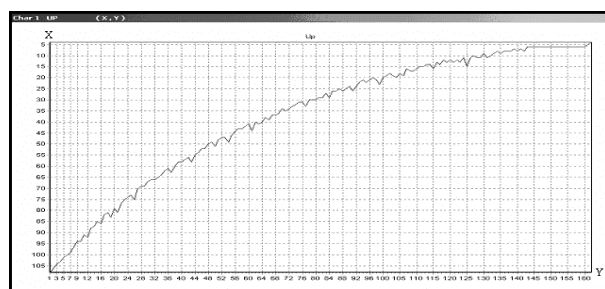
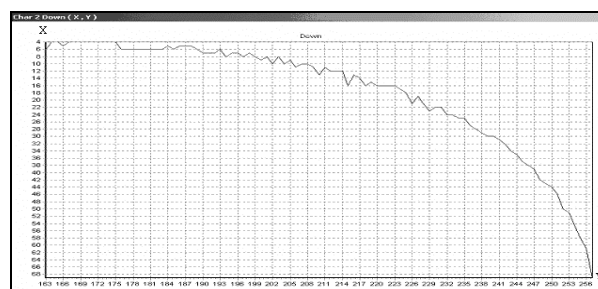


Рис. 2. Исходное изображение капли раствора пробы



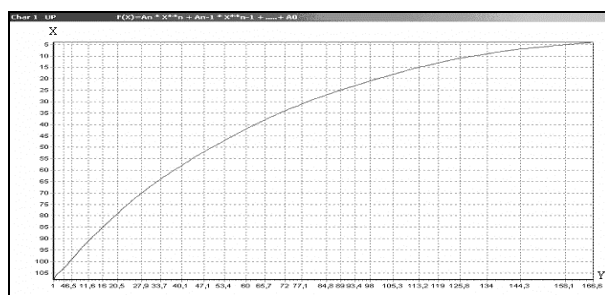
а



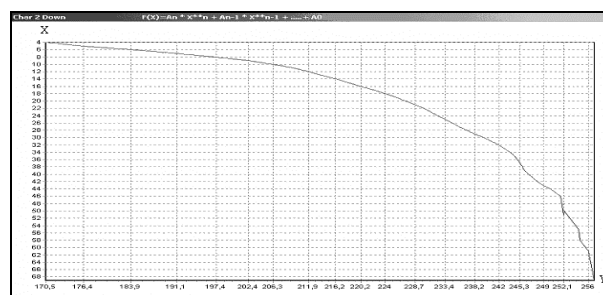
б

Рис. 3. Исходные диаграммы для верхней (а) и нижней (б) части капли раствора пробы вещества

Исходная картина разделяется на две части по оси Y . Для каждой части считается степень полинома, объем и отдельно рисуется диаграмма (рис. 4). После этого суммируются оба объема, где сумма составляет $V=36232$ точек.



а



б

Рис. 4. Вид диаграммы для верхней (а) и нижней части капли (б) после обработки

Кроме метода повышения точности измерения концентрации пробы с помощью измерения объема пробы, в данной статье рассмотрен метод повышения точности за счет контроля времени испарения пробы.

В спиральных атомизаторах отклонение концентрации можно определить косвенно, относительно некоторого исходного объема. Теплота, выделяемая спиральным атомизатором, идет на нагревание и испарение воды, в которой растворено исследуемое вещество. Зная момент начала нагрева и момент окончания испарения, можно определить отношение времени испарения данной пробы к некоторой эталонной пробе.

Выделение энергии атомизатором вычисляется по формуле (8) при постоянном токе или по формуле (9), если ток изменяется [3].

Если ток не изменяется:

$$Q = I^2 R \Delta t . \quad (8)$$

Для изменяющегося тока:

$$Q = R \int_t^{\Delta t} I^2(t) dt . \quad (9)$$

Вся данная теплота идет на нагрев и на испарение воды по формуле

$$Q = Q_{i\ddot{a}\ddot{a}\ddot{o}} + Q_{\ddot{e}\ddot{e}\ddot{i}} = \ddot{N}\ddot{o} \Delta\ddot{O} + r\ddot{o} = \ddot{o} (\ddot{N}\Delta\ddot{O} + r) , \quad (10)$$

где C — теплоемкость воды равна $4,2 \cdot 10^3$ Дж/кг·К; r — удельная теплота парообразования воды; m — масса воды.

Примем то, что раствор нагревается с 20 до 100 град, а затем происходит его кипение и испарение, т.е $\Delta T=80^\circ$, $r=2,3 \cdot 10^6$ Дж/кг·К, $Q=m(4,2 \cdot 10^3 \cdot 80 + 2,3 \cdot 10^6) = 2,644 \cdot 10^6 \cdot m$ Дж.

Так как вся энергия, приложенная к спирали атомизатора, идет на нагрев, то масса воды вычисляется по формуле

$$2,644 \cdot 10^6 \cdot m = R \int_t^{\Delta t} I^2(t) dt ,$$

$$m = 3,782 \cdot 10^{-7} R \int_t^{\Delta t+t} I^2(t) dt , \quad (11)$$

где R — сопротивление спирали атомизатора; Δt — время нагрева и испарения; $I(t)$ — функция, описывающая ток, проходящий через атомизатор.

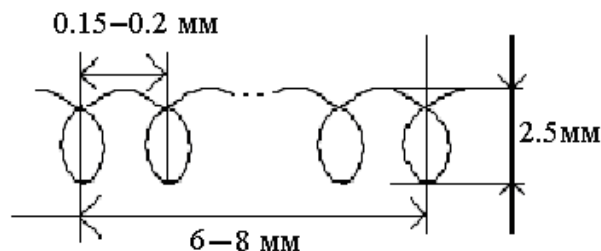


Рис. 5. Размеры спирального атомизатора

Толщина вольфрамовой проволоки, из которой сделан атомизатор, равна 0,15 мм. Рассчитаем длину проволоки спирали (рис. 5) по формуле

$$L = n L_0 + S_{\ddot{o}} , \quad (12)$$

где n — число витков; L_0 — длина одного витка; S_T — шаг спирали $0,15-0,2$; $L_0 = 2 \pi r = 7,854$ мм, где r — радиус витка спирали.

В спирали длиной 6 мм содержится 40 витков, $L=40 \cdot 7,854=314,159$ мм= $314,159 \cdot 10^{-3}$ м.

Рассчитаем сопротивление по формуле

$$R = \rho (L/S), \quad (13)$$

где ρ — удельное сопротивление; L — длина; S — площадь поперечного сечения, которая рассчитывается по формуле

$$S = \pi r_0^2, \quad (14)$$

где r_0 — радиус проволоки, из которой сделана спираль; $S=3,14 \cdot (0,15/2)^2=1,76 \cdot 10^{-8}$ м². Сопротивление спирали $R=(5,0 \cdot 10^{-8} (314,159 \cdot 10^{-3}/1,76 \cdot 10^{-8}))=2,686$ Ом. Эталонный объем пробы (2 мкл.). Рассчитаем количество энергии, необходимой на нагрев и испарение воды: $Q=2,644 \cdot 10^6 \cdot m=2,644 \cdot 10^6 \cdot 2 \cdot 10^{-6} \cdot 10^{-3}=5,288 \cdot 10^3$ Дж. Так как концентрация химических элементов, растворенных в воде, постоянна, то: $m_1 / m = m_{\text{э}} / m_{\text{п}}$, то: $t_1 / t = m_{\text{э}} / m_{\text{п}} = k$.

где t — время, необходимое на испарение эталонного образца; t_1 — время, необходимое на испарение опытного образца; K — поправочный коэффициент, используемый для повышения точности определения химических веществ в атомизаторе. Опытная концентрация рассчитывается по формуле: $C_1 = C \hat{E}$, где C — концентрация в эталонной пробе.

Заключение

С помощью программы показано, что методом наименьших квадратов при определении объема капли, погрешность составляет 1,0345 %. При разделении исходной последовательности на 4 части и вычислении объема для каждой в отдельности при 33292 точках погрешность составила 7 %.

RAISE OF A MEASUREMENT ACCURACY DENSITY OF SUBSTANCES BY CONTROLLING THE DOSING AND THE TRANSPIRATION TIME OF HALLMARKS

K.P. KUREJCHIK, V.V. SHEVCHENKO, A.Z. IBRAHIM

Abstract

At examination in chemical composition of substances in spectrometers the batcher, through which substance is gives, has some error of dosing one. It affects exactitude of measuring. In addition, at research of chemical substances compound in the spectrometers, equipped pulverize - spiral, transpiration of substance in spiral and we have to say that, the transpiration needs some times. By repeating the test, the spiral not completely immersed in hallmarks, or will be a surplus amount of hallmarks. It affects exactitude of measuring. It is necessary to develop a method which will allow to inspecting a diverting from norm, to evaluate it and to introduce correction factors in result of dimension. The method had based on measuring the transpiration time.

Литература

1. Фильчаков П.Ф. Справочник по высшей математике. Киев, 1972.
2. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычисления. М., 1959.
3. Буров Л.И., Стрельчяня В.М. Физика от А до Я. Мн, 1999. С. 146–192, 195–209.