

Лазерный КР-анализатор жидкостей с комплексным программным обеспечением



С.А.Буриков, Т.А.Доленко, С.В.Пацаева, В.И.Южаков

Физический факультет Московского государственного университета им.М.В.Ломоносова

<http://rswater.phys.msu.ru>

Введение

В ряде практических задач диагностики жидких сред требуются бесконтактные методы с возможной реализацией их в режиме реального времени. Именно такими свойствами обладают оптические методы, в частности, спектроскопия комбинационного рассеяния света (КР) и флуоресцентная спектроскопия. Предлагаемый лазерный КР-анализатор предназначен для бесконтактной диагностики жидкостей в режиме реального времени с целью определения в них вредных или опасных примесей, а также для качественного и количественного анализа жидких многокомпонентных смесей.

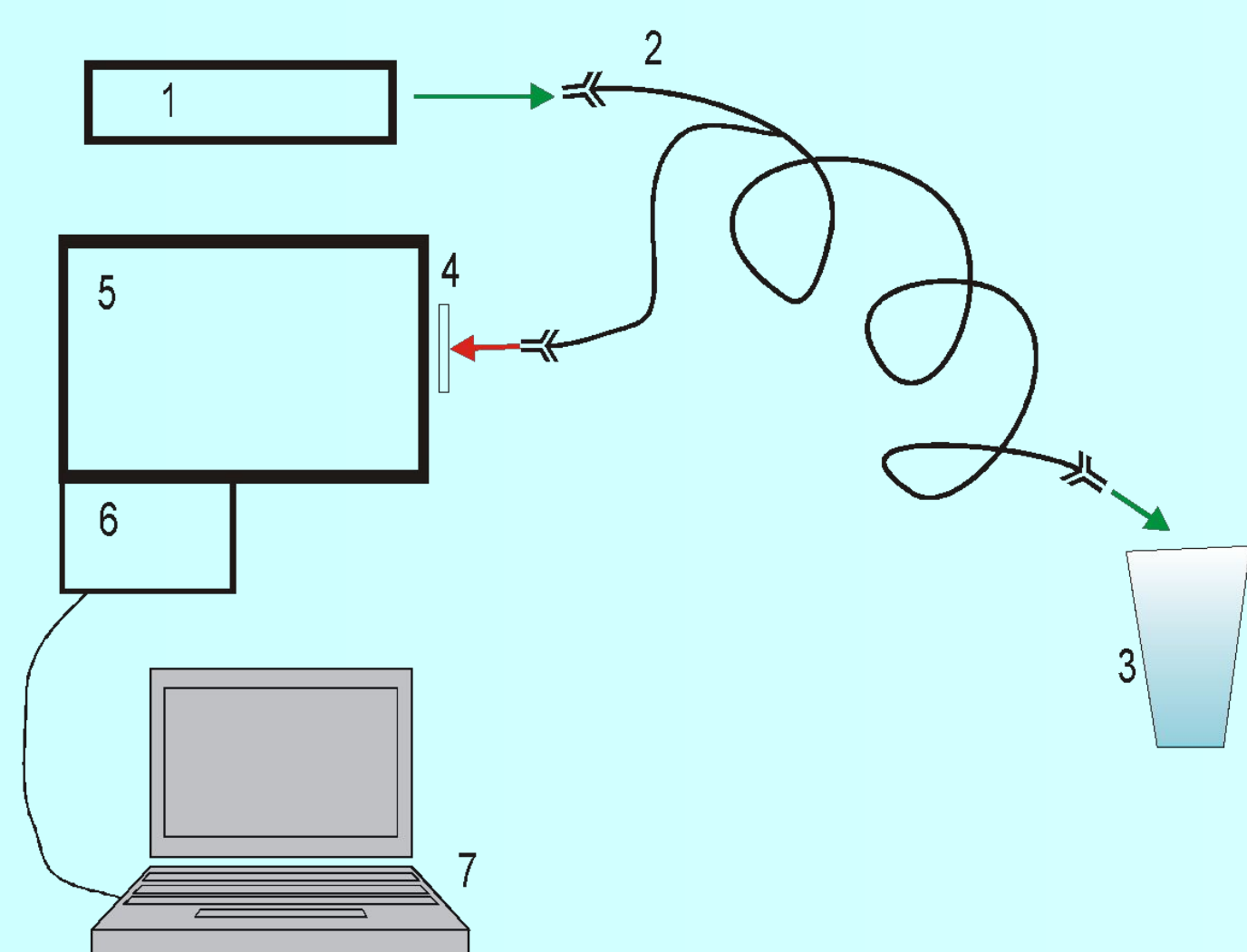
Задачи, решаемые прибором

- определение горючих и токсичных жидкостей, контроль вредных примесей в напитках (например, при досмотре на транспорте);
- определение типа и концентрации каждого из неорганических соединений в технологических, сточных, пластовых водах (до 5-6 компонент в растворах);
- определение концентрации органических веществ в многокомпонентных жидкостях (моторное топливо, водно-спиртовые растворы).

Принцип работы прибора основан на возбуждении спектрального отклика жидкой среды (КР света или флуоресценции) лазерным излучением, регистрации отклика оптическим детектором и анализе спектров с помощью современных математических методов.

Режимы работы:

- регистрация спектров проб жидкости, помещенной в кювету;
- бесконтактное зондирование жидкостей в прозрачных контейнерах (в случае напитков – в бутылках без их вскрытия);
- зондирование жидкостей с помощью погружаемого световодного зонда – для диагностики жидкостей в канистрах, цистернах и т.д.



Блок-схема КР-анализатора

КР-анализатор:

- 1 – ИАГ-лазер ($\lambda=532$ нм);
- 2 – приемо-передающий световодный кабель;
- 3 – емкость с жидкостью;
- 4 – отрезающий фильтр,
- 5 – монохроматор;
- 6 – CCD-камера;
- 7 – компьютер;

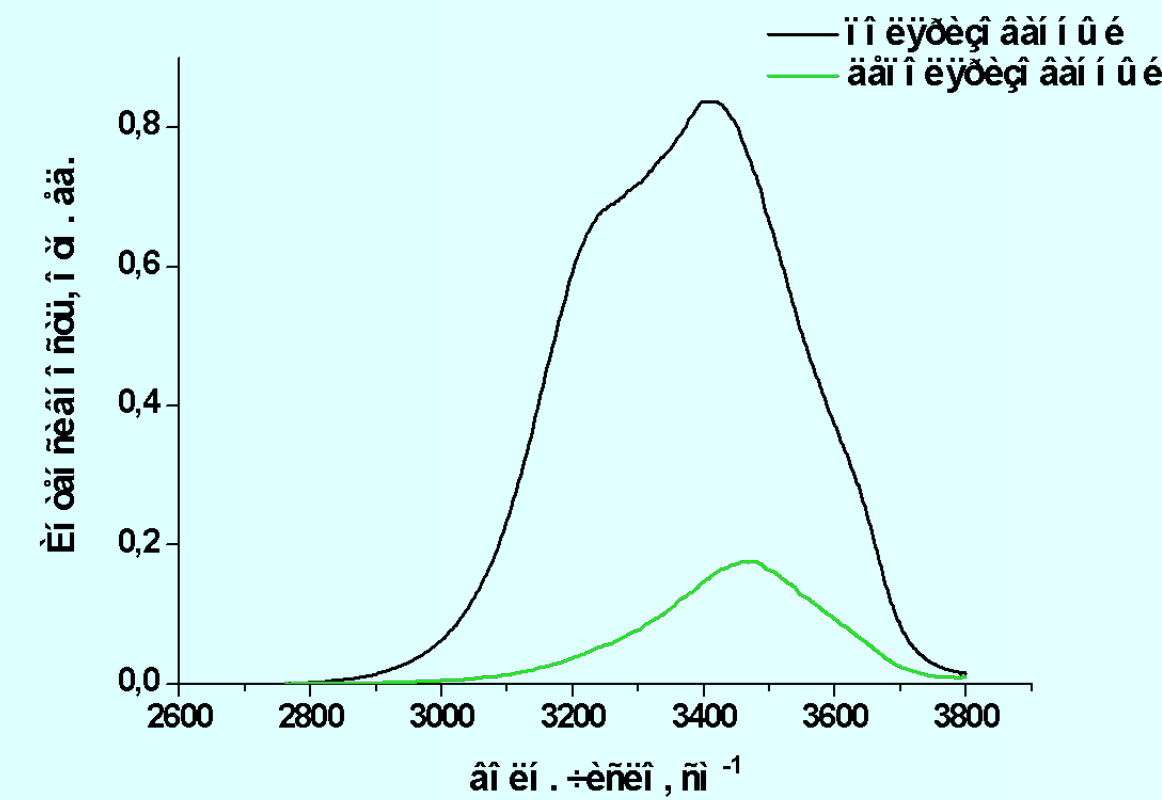
Программное обеспечение

Программное обеспечение комплекса включает в себя:

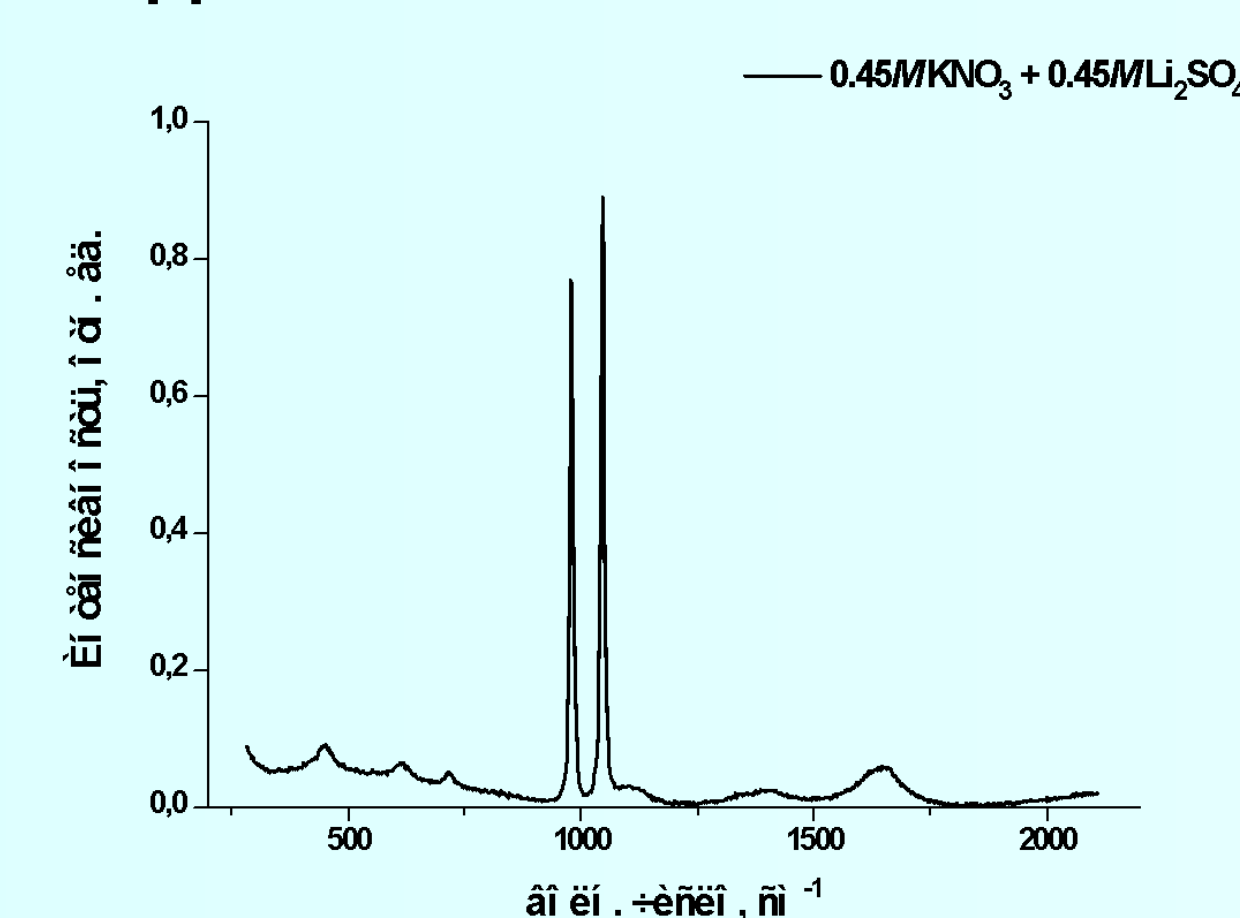
- программы расчета степени деполаризации спектров, отношения интенсивностей разных полос спектра КР, параметра χ_{21} (равного отношению интенсивностей высокочастотной и низкочастотной областей валентной полосы КР воды)
- пакет Neuroshell 2 (Ward System Group&Inc, USA), обеспечивающий использование искусственных нейронных сетей (ИНС) для решения задач распознавания образов и генетических алгоритмов (ГА)

Искусственные нейронные сети являются мощным методом, позволяющим эффективно решать разнообразные задачи распознавания образов, классификации и прогнозирования.

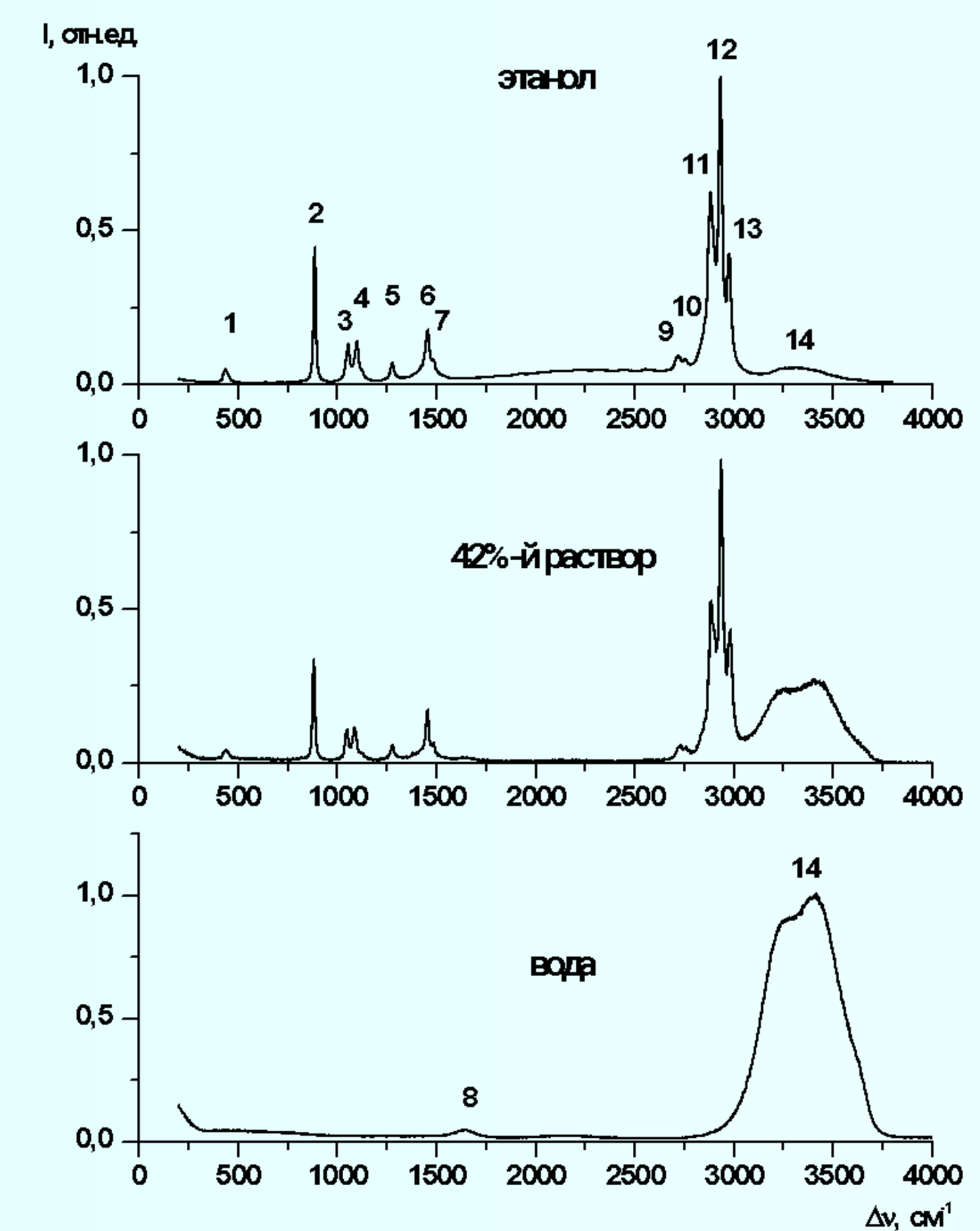
Генетические алгоритмы - обобщенное название целого класса современных алгоритмов оптимизации. Генетический алгоритм использует идеи отбора наиболее приспособленных и наследования полезных свойств (признаков) для решения задач оптимизации в математике.



Спектр валентной полосы КР воды



Спектр КР раствора солей KNO_3 и Li_2SO_4 в воде



Спектр КР раствора этанола в воде

Результаты решения обратных задач КР-спектроскопии водных сред

1. Идентификация типа растворенных неорганических солей и определение концентрации каждой соли в многокомпонентных растворах с помощью ИНС[1,2], см. Таблица 1
2. Определение концентрации этанола в водно-спиртовых растворах по линейной зависимости нормированной интенсивности валентной полосы КР этанола от его концентрации.[3]

Таблица 1

Методы решения обратной задачи	Средние абсолютные ошибки определения конц. солей, ΔC , М					
	Трехкомпонентные растворы					
	Диапазон 0 – 0.7 М			Диапазон 0 – 1 М		
	NaCl	KI	NH_4Br	NaCl	KI	NH_4Br
ИНС, «от эксперимента», трехслойный пересетрон	0.07	0.05	0.06	0.07	0.12	0.11
ИНС, «от эксперимента», пятислойный пересетрон	0.08	0.05	0.07	0.08	0.11	0.11
ИНС, «от эксперимента», сеть Ворда	0.08	0.06	0.08	0.08	0.12	0.12
ИНС, «МГУА*-квазимод.», трехслойный пересетрон	0.09	0.08	0.09	0.10	0.08	0.10

Преимущества реализуемого КР-анализатором метода – бесконтактность, возможность анализа жидкостей в режиме реального времени, без предварительной подготовки пробы и использования дорогостоящих реактивов. Предлагаемый лазерный КР-анализатор отличается от известных коммерческих установок более низкой стоимостью, портативностью, применением нескольких длин волн возбуждения, регистрацией поляризованной и деполаризованной компонент спектра, использованием комплексного программного обеспечения.

Литература

1. С.А.Буриков,Т.А.Доленко,В.В.Фадеев. Идентификация неорганических солей и определение их концентраций в многокомпонентных водных растворах по валентной полосе КР воды с помощью искусственных нейронных сетей. Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 2007, №5, с.62-72.
2. S.A. Burikov, T.A. Dolenko, V.V. Fadeev, and A.V. Sugonyaev. New opportunities in determination of inorganic compounds in water by method of laser Raman spectroscopy. Laser Physics, vol. 15, № 8, 2005, pp. 1-5.
3. С.А.Буриков, Т.А.Доленко, С.В.Пацаева, В.И.Южаков. Диагностика водно-этанольных растворов методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. Оптика атмосферы и океана, 2009, т.22, №11, в печати.