

**ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ДЛЯ ИНФОРМАЦИОННО-
ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ИЗМЕ-
РЕНИЯ СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ
ВОДНОЙ СРЕДЫ И РАСЧЕТА НА ЕГО
ОСНОВЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВЕЩЕСТВ
В ВОДНОЙ СРЕДЕ**

А.И. Чепыженко^{}, Ю.Т. Щетинин^{**},
С.Р. Суворов^{***}*

** Морской гидрофизический институт
НАН Украины*

г. Севастополь, ул. Капитанская, 2

E-mail: shelf@alpha.mhi.iuf.net

alex_chep@hotmail.com

*** Севастопольский национальный тех-
нический университет*

г. Севастополь, 53

E-mail: root@sevgtu.sebastopol.ua

**** Институт биологии южных морей
НАН Украины*

г. Севастополь, пр. Нахимова, 2

E-mail: biophys@ibss.iuf.net

sserge@lik-info.com

В этой работе описано разработанное и протестированное программное обеспечение для лабораторного варианта спектрофотометра с двойной оптической базой (двухбазовой кюветой), позволяющее оперативно принимать и накапливать данные от прибора в персональном компьютере, в любом поддиапазоне диапазона длин волн 380–800 нм с произвольно выбираемым шагом (приращением длины волны), видом сигнала – двухуровневым (опорный и информационный) или одноуровневым (только информационный), а также производить расчет концентраций растворенных и взвешенных органических и неорганических веществ по описанному алгоритму.

Введение. В настоящее время крайне актуальной является проблема сохранения и рационального использования шельфовой зоны Черного моря, возникшая из-за антропогенного влияния крупных портов, судоходства, берегового строительства, сельскохозяйственных работ, зон рекреации, выброса сточных вод, загрязняющих веществ промышленными, энергетическими, транспортными объектами. Особое значение эта проблема приобретает для акваторий портов, бухт, эстуариев рек, наиболее подверженных антропогенной нагрузке. Данные районы характеризуются большим

количеством взвешенных и загрязняющих веществ и биогенов.

Для экологического мониторинга, выявления зон интенсивной антропогенной нагрузки и решения проблем, связанных с экологической безопасностью прибрежных вод, выявления зон накопления загрязняющих веществ применяются спектральные оптические измерительные приборы, разработанные в Морском гидрофизическом институте НАН Украины [1], позволяющие оперативно определять как концентрацию природных веществ (взвешенное вещество, растворенное органическое вещество, концентрация фитопланктона), так и загрязняющих веществ (биогенное загрязнение, интегральное содержание загрязняющего вещества, концентрация растворенных нефтепродуктов) [2].

Их регистрация (растворенного органического вещества (РОВ), хлорофилла, взвешенного вещества, биогенного загрязнения, растворенных нефтепродуктов) основана на использовании явлений спектрального поглощения и ослабления световой энергии содержащимся в воде веществом. Вид спектра прозрачности и поглощения водой зависит от количественного и качественного состава, содержащегося в воде вещества. Главными компонентами, обуславливающими поглощение света водой, являются: чистая вода, растворенные органические вещества, пигменты фитопланктона, взвешенное вещество, загрязняющие вещества. Соотношение между составляющими компонентами и определяет форму спектра поглощения света водой.

С помощью измерителя спектральной прозрачности можно производить:

– расчет концентрации взвешенного и растворенного вещества;

– расчет концентрации бытовых и промышленных загрязняющих веществ.

Что позволяет:

– производить анализ пространственного и временного распределения природных и загрязняющих веществ;

– оперативно определять источники их поступления, направление переноса, места накопления.

Алгоритм расчета концентраций веществ, реализованный программно. Алгоритм расчета концентраций веществ основан на пошаговом последовательном вычитании из измеренного спектра масштабиро-

ванных эталонных (образцовых) спектров или аналитических функций и расчета на каждом шаге концентрации того или иного составляющего вещества из масштабного коэффициента, вычисляемого в результате масштабирования («подтягивания снизу» к измеренному (остаточному) спектру до касания в какой-либо точке) образцового спектра поглощения того или иного вещества. Этот алгоритм выгодно отличается от широко используемых в настоящее время стандартных методик расчета концентраций веществ, так как в данном алгоритме анализируется весь спектр видимого диапазона длин волн (380 – 750 нм), а не величины поглощения, ослабления световой энергии на одной (нескольких) характерных длинах волн. После каждого шага алгоритма (вычитания поглощения того или иного вещества, его вклада в суммарный спектр поглощения) получается остаточный спектр, обусловленный суммарным поглощением всех оставшихся веществ. Таким образом, после всех шагов алгоритма остается спектр всех оставшихся веществ и алгоритм может быть легко расширен для определения концентраций каких-либо других веществ. Подобный подход был применен в системах дистанционного (с ИСЗ) зондирования, в которых также анализируется весь спектр видимого диапазона [3, 4, 5].

Масштабирование производится до «касания» спектров в одной из точек характерных максимумов поглощения образцового спектра, но последующее вычитание спектра производится во всем диапазоне длин волн. При уходе остаточного спектра в какой-либо точке в отрицательные значения производится возврат алгоритма на один или несколько шагов назад и корректировка одной из вычисленных ранее составляющих. Итак, пошаговый алгоритм состоит из следующих шагов.

На первом этапе из суммарного спектра $E_{\lambda i}$ вычитается спектральное ослабление, обусловленное собственно водой.

Данные спектрального ослабления водой либо принимаются по каналу опорного светового потока или же берутся табличные эталонные данные (из файла) и масштабируются. Получаем результирующий спектр ослабления $E_{1\lambda i}$, обусловленный суммарным поглощением веществ.

Расчет концентрации растворенных органических веществ (РОВ). В соответствии с

зависимостью (1)

$$a_x(\lambda) = a_x(400) * \exp^{-S_x(\lambda-400)} \quad (1)$$

формируется экспоненциальная функция, огибающая результирующий спектр $E_{1\lambda i}$ снизу, при этом должно выполняться $a_x(\lambda) \leq E_{1\lambda i}$, рассчитываются коэффициенты $a_x(400)$ и S_x .

Концентрация РОВ:

$$C_{\text{ров}} = C_0 + C_1 * S_x * a_x(400) \quad (2)$$

Коэффициенты C_0 и C_1 в (2, 4, 8, 10, 11) устанавливаются по результатам градуировки (вводятся в диалоговом режиме в программу). По формуле (3) рассчитывается результирующий спектр ослабления:

$$E_{2\lambda i} = E_{1\lambda i} - a_x(\lambda) \quad (3)$$

Расчет общего взвешенного вещества: учитывая спектральную неселективность взвешенного вещества, по (4) рассчитывается его концентрация $C_{\text{взвесь}}$ как постоянная составляющая, ограниченная нижним (наименьшим) значением $E_{2\lambda i}$ в спектральном диапазоне от 380 и 750 нм – $E_{\text{взвесь}}$.

$$C_{\text{взвесь}} = C_0 + C_1 * E_{\text{взвесь}} \quad (4)$$

Рассчитывается результирующий спектр ослабления (5)

$$E_{3\lambda i} = E_{2\lambda i} - E_{\text{взвесь}} \quad (5)$$

Расчет концентрации фитопланктона (хлорофилл-а, б), бактериопланктона и интегрального загрязняющего вещества (7)

$$E_{3\lambda i} = E_{\text{хл-а}} \lambda i + E_{\text{хл-в}} + E_{\text{бакт}} + E_{\text{загр}} \quad (6)$$

Откуда:

$$E_{\text{загр}} = E_{3\lambda i} - E_{\text{хл-а}} \lambda i - E_{\text{хл-в}} - E_{\text{бакт}} \quad (7)$$

где $E_{\text{хл-а}}$, $E_{\text{хл-в}}$, $E_{\text{бакт}}$ спектры берутся из табличных (эталонных) данных и масштабируются до касания со спектром $E_{3\lambda i}$. Показатель ослабления, обусловленный фитопланктоном (хлорофилл-а,б) и бактериопланктоном оценивается по их спектральному распределению с шагом 1 нм. Собственно их концентрации определяются по (8)

$$C_{\text{хл}} = C_0 + C_1 * E_{\text{хл}} \quad (8)$$

Для определения концентрации хлорофилла-а, определяется концентрация отдельно по синему максимуму (9) (диапазон спектра 380 – 500 нм)

$$C_{\text{хл (син)}} = C_0 + C_1 * E_{\text{хл380-500}} \quad (9)$$

и красному максимуму (10) (диапазон 500 – 750 нм)

$$C_{\text{хл (красн)}} = C_0 + C_1 * E_{\text{хл500-750}} \quad (10)$$

Показатель ослабления, обусловленный загрязняющими веществами, определяется как остаток вычисления. Соответственно, концентрация ЗВ рассчитывается по (11)

$$C_{\text{загр}} = C_0 + C_1 * C_{\text{загр}} \quad (11)$$

где $C_{\text{загр}}$ – среднее значение спектра $E_{\text{загр}}$ в диапазоне 380 – 750 нм.

Описание системы и программного обеспечения. Программно-аппаратный комплекс состоит из лабораторного спектрофотометра, платы 12-разрядного АЦП/ЦАП L-154 производства фирмы I-card, ПЭВМ с установленной операционной системой Windows 9x/XP и разработанным ПО. Программа полностью использует возможности ввода данных на высоких частотах в многозадачной среде Windows, предоставляемые платой L-154 и позволяет визуализировать принятые данные и сохранять их на носителях информации в ASCII-файлах или в формате Excel-листа. Разработка ПО производилась в среде Delphi, как полностью поддерживаемой фирмой-

производителем платы L-154 и возможности которой полностью удовлетворяют требованиям поставленной задачи.

Информационная модель программы изображена на рисунке 1. Программа состоит из ряда взаимосвязанных модулей:

- модуль интерфейса с пользователем осуществляет общее управление работой и настройку параметров модуля обработки данных с прибора и модуля вычислений;

- модуль интерфейса с прибором осуществляет низкоуровневое взаимодействие с платой АЦЦ, получает оцифрованные сигналы и передает этот массив данных в модуль обработки данных с прибора;

- модуль обработки данных с прибора анализирует полученный массив данных в соответствии с алгоритмом работы прибора и установками пользователя и формирует массив данных – измеренный спектр;

- модуль вычислений обрабатывает полученный массив данных спектра и вычисляет значения концентраций веществ;

- модуль текстовой и графической визуализации позволяет отобразить в графической форме полученный спектр или в текстовой форме рассчитанные значения концентраций веществ;

- модуль записи в файл и чтения из файла позволяет считать и записать массив данных спектра в файл и записать значения концентраций веществ в файл.

На рисунке 2 показан интерфейс программы с пользователем; на рисунках 3, 4, 5 – графические представления спектров, полученных в результате тестовой обработки спектра поглощения пробы воды из Севастопольской бухты.



Рис. 1 – Информационная модель системы

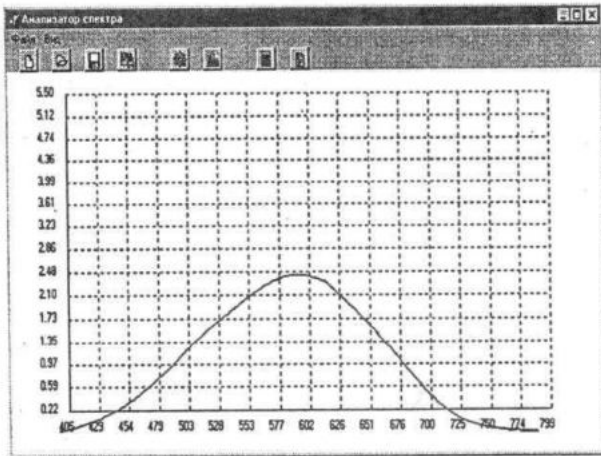


Рис. 2 – Основное окно программы

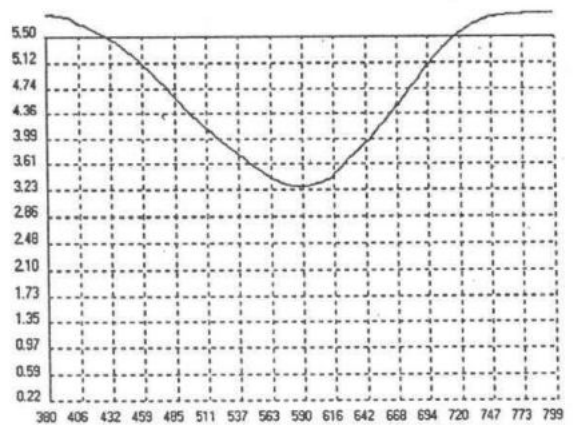


Рис. 3 – Измеренный суммарный спектр морской воды E_{λ}

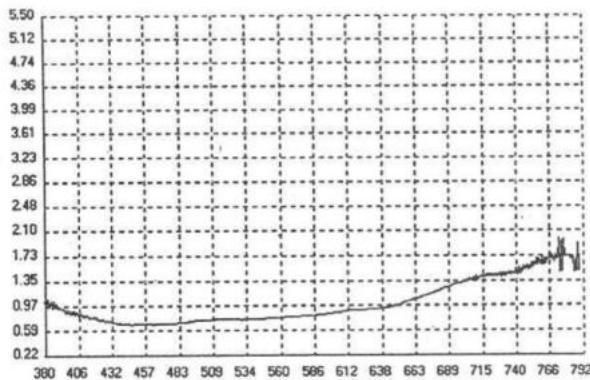


Рис. 4 – Спектр E_{λ} , обусловленный суммарным поглощением веществ (спектр морской воды после вычитания спектра дистиллированной воды)

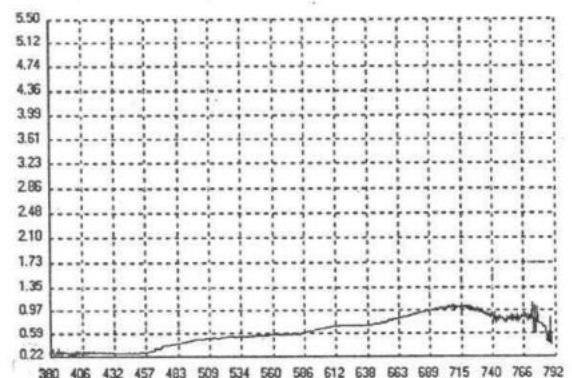


Рис. 5 – Остаточный спектр после расчета концентраций веществ

ЛИТЕРАТУРА

1. Chepyzhenko A.I., Haltrin V.I. Laboratory and flow-through optical spectral probes to measure water quality and content. // *Ocean Remote Sensing and Applications*. Robert J. Frouin, YellYuan, Hiroshi Kawamura, Editors. Proceedings of SPIE. - Vol. 4892 (2003) (24-26 October 2002, Hangzhou, China). - 2003 SPIE * 0277-786X/03. - P. 482-488 pp.

2. Кондратьев С.И., Лисиченок А.Д., Лемешко С.В., Чепыженко А.И., Гидролого-гидрохимические и гидрооптические характеристики вод Голубого залива (пос.Кацивели, сентябрь 2002г.), сб. Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон. Вып.8, Севастополь, МГИ, НВЦ «Экоси-гидрофизика». - 2003. - С. 119-132.

3. Kendall L. Carder, F. Robert Chen, Jennifer P. Cannizzaro, MODIS Ocean Science

Team, Algorithm Theoretical Basis Document, ATBD 19, Case 2 Chlorophyll a, Version 6, 30 June 2002, College of Marine Science, University of South Florida, 140 Seventh Avenue South, St. Petersburg, Florida

4. Clark Dennis K. , MODIS, Algorithm Theoretical Basis Document, Bio-Optical Algorithms|Case 1 Waters, National Oceanic and Atmospheric Administration, National Environmental Satellite Service, Washington, D.C. 20233, Version 1.2

5. Ocean Optics Protocols For Satellite Ocean Color Sensor Validation, Revision 2. Giulietta S. Fargion, James L. Mueller, San Diego, California, National Aeronautical and Space administration, Goddard Space Flight Space Center, Greenbelt, Maryland 20771, August 2000