

## GENERALIZACIJA ANALIZE PRAHOVA OD INTERESA U BIOMEDICINI I EKOLOGIJI

Stanko Ostojić<sup>1</sup>, Željka Tomić<sup>2</sup>, Predrag Jovanić<sup>3</sup>, Andjelka Milosavljević<sup>4</sup>, Slavica Ristić, Jelena Ilić<sup>4</sup>,  
Radovan Radovanović<sup>4</sup>, Marko Živković<sup>6</sup>

1. Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd, Karnegijeva 4, stankos@afrodita.rcub.bg.ac.yu, 2. IRITEL A.D., Beograd,  
Batajnički put 23, [zeljka@iritel.com](mailto:zeljka@iritel.com), 3. ITNMS, Beograd, Franše d' Eperea, 4. Mašinski fakultet, Beograd, 27. marta 80,  
5. Tehnički fakultet Čačak, 6. Elektrotehnički fakultet, Beograd, Bulevar kralja Aleksandra 73

**Apstrakt** - Mikročestice, u prvom redu prahovi, koji su od interesa u mnogo oblasti, predstavljaju složeno područje istraživanja sa teorijske i metrološke tačke gledišta. Tačnost razmatranja i kontrole je od izuzetnog interesa za područja ekoloških i medicinskih normi i primena. U radu je razmatran matematički aparat, problematike korišćenja i distribucije prahova uz praktična rešenja, koja nudi savremena tehnika merenja.

### 1. UVOD

Tumačenje rezultata dobijenih iz podataka merenja putem rasejanja koherentne svetlosti (statički i dinamički) pripada kompleksnoj oblasti, jer su slučajevi u prirodi vrlo raznovrsni.

U teoriji obrade rezultata merenja, odnosno signala, postoji mnogo prilaza, koji su, za slučaj mikroobjekata od značaja za bionauku, uglavnom svedeni na mali broj raspodela. Da bi se obuhvatio veći broj mogućih raspodela, urađen je pokušaj da se:

a) generalizuje značaj pojedinih zaključaka;

b) da se dâ sofisticiraniji prilaz za specifične slučajeve (mali broj uzoraka, uticaj neregularnih oblika: nesfernih oblika, necilindričnih, perturbacija (raznih fizičkih polja), uticaj aparature, koja nosi sa sobom određenu generaciju tehničkih rešenja, uticaj odabiranja uzoraka, tehnologije...).

Identifikacija hemijskih procesa sa razmenom toplote i mase i termičkih heterogenih procesa postiže se korišćenjem čvrstih materijala u praškastom stanju. Svake godine, u hemijskim i drugim granama privrede, mehaničkim preradama se podvrgavaju stotine miliona tona sipućih materijala dobijenih u vidu krupnih "čestica". Mlevenje predstavlja osnovni stadijum takve prerade gde se troši 57 % u privredi elektroenergetskih razvijenih zemalja. Inače i posle mlevenja u gotove praškove postoje čestice, koje daleko da odgovaraju potrebama efektivnog protoka u raznim procesima. Mlevenje čestica dovodi do porasta gubitka energije. Zato se praktično u svim linijama dobijanja praškastih materijala, ustanovljavaju specijalni aparati - klasifikatori, čija je namena razdvajanje početnog praška u najprostijem slučaju na dva dela sa sadržajem finih i krupnih čestica. Pojam finih i krupnih čestica u procesu klasifikacije se gleda u odnosu na dimenzije frakcije raspodele čestica.

Važnost generatora čestica, uređaja za dobijanje sprejova, izduvnih gasova, raste na generalnim zadacima optimizacije nekog mernog procesa, kontrolisanog procesa. To su zadaci i aerodinamike, dinamike fluida, pa nedestruktivne tehnike analize tokova, gde su čestice obeleživači, dolaze u prvi plan.

Sve to ulazi u zadatak klasifikatora, koji je definisan pravilom da je (ili) važno povišenje efikasnosti prerade ili tačnosti merenja. Klasifikatori se koriste u raznim procesima i u kvalitetnim samostalnim konačnim produktima (u svojstvu polufabrikata). Konstrukcije aerodinamičkih klasifikatora su patentirane u više pravaca: razdvajanje na osnovu aerodinamičkih sila, sila gravitacije i radijalnih inercionih sila, hemijskim i drugim metodama [1].

Krupne industrije su se najviše interesovale za produktivnost i efikasnost procesa, ali do finalnih uspešnih operacija moralo je da se uloži dosta rada u oblasti optimizacije, tehnika merenja, prilagodjenja metode rada, aerodinamike. Tehnike optičke kontrole tu su dobijale sve više značaja. Za neke primene se traži definisanje bar dva do tri atributa čestice praha. U poredjenju sa detaljnim proučavanjima, koji česticu definišu sa 80 parametara [2], ovo pripada grupi manjih zahteva, ali zato rastu potrebe za što većom pouzdanošću finalnih produkata definisanih sa traženih 2-3 parametra. (Standardni materijali u čestičnom vidu dobijaju sve veću ulogu, međutim, tačnosti njihovih dimenzija moraju da preuzmu tehnike rasejanja svetlosti (dinamičke i statičke)). Trendovi globalizacije, traže nove stroge standardne administracije i definicije proizvoda. Pri svemu tome u određenom delu rada metode simulacije igraju veliku ulogu. Raspodela čestica

Za razmatranje raspodele čestica, micela itd. po nekom od parametara čestica često se koristi logaritamska (log normalna) raspodela. Analitički oblik raspodele je neophodan jer je raspodela često medjurezultat u analizi prahova, micela, koloida, aerosola i sl. Ako je od interesa da eksperimentalnim rezultatima (tabelarno, u histogramima) pridružimo neki analitički oblik raspodele tako da srednja vrednost nekog parametra ostane konstantna (srednja površina, zapremina, efektivno površinsko naelektrisanje) koriste se generalizovane logaritamske raspodele sa tri parametra. Jedan od parametara je srednja vrednost nekog parametra ansambla. U zavisnosti od vrste parametra, čija srednja vrednost treba da bude invarijantna, izračunava se red generalisane logaritamske raspodele. Treći parametar menja se tako da fitovanje bude najbolje. Promena tog parametra ne utiče na izabranu pračenu srednju vrednost, čime je fitovanje olakšano i kvalitetno.

Logaritamske raspodele nultog i prvog reda kod kojih su parametri medijana, odnosno modalna vrednost, su specijalni slučajevi generalne familije asimetričnih raspodela predstavljenih kao

$$p_n(r) = C_n r^n \exp \left[ -\frac{(\ln r - \ln r_n)^2}{2\sigma_n^2} \right] \quad (1)$$

gde je  $C_n$  faktor normiranja. Veličina  $r_n$  u specijalnim slučajevima predstavlja jednu od glavnih osobina raspodele (medijana, modalna vrednost, srednja vrednost) bilo kog parametra.  $C_n$  se određuje iz uslova normiranja

$$\int_0^{\infty} p_n(r) dr = 1 \quad (2).$$

Koristeći osobine  $\Gamma$ - funkcije dobija se da je

$$P_n(r) = \frac{r_n \exp \left[ -\frac{(\ln r - \ln r_n)^2}{2\sigma_n^2} \right]}{\sqrt{2\pi} \sigma_n r_n^{n+1} e^{-\frac{(n+1)^2 \sigma_n^2}{2}}} \quad (3)$$

što predstavlja generalisanu logaritamsku raspodelu, koja se za  $n=-1$  svodi na logaritamsku normalnu raspodelu, a za  $n=0$ , na logaritamsku raspodelu nultog reda. Srednja vrednost parametra (dužinske prirode) karakteristika (dijametra, dijagonale) se definiše

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r p(r) dr \quad (4).$$

Rešavanjem integrala dobija se

$$\langle r \rangle = r_n \exp \left[ \frac{(2n+3)\sigma_n^2}{2} \right] \quad (5).$$

Ako je  $n=-3/2$ , tada je

$$r = r_n,$$

koje se unapred može zadati i ne zavisi od izbora  $\sigma_n$ , koje se menja sasvim slobodno samo po kriterijumu da fitovanje bude najbolje. Pomoću analognih analiza da bi se održala  $\langle S \rangle$  (ili veličina sa prirodnom površine) za na pr. sferne čestice

$$\langle S \rangle = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 p_n(r) dr \quad (6)$$

invarijantnom, potrebno je da je  $n = -2$ .

Za invarijantnu srednju zapreminu,

$$\langle V \rangle = \frac{4}{3} \pi \int_0^{\infty} r^3 p_n(r) dr \quad (7)$$

neophodno je uzeti  $n = -5/2$ .

Vršena su fitovanja raspodele finih prahova i dobijena su dobra slaganja [2].

### Rosin-Rammlerova raspodela

Mnogobrojni industrijski procesi kao što su proizvodnja cementa, medicinskih aerosola, insekticidnih sprejeva, sagorevanje kerozina u gasnim turbinama, metalurškim halama, topionicama, valjaonicama, pri proizvodnji metalnih prahova, uz industrije sa produktima sagorevanja moraju uključiti merenje i kontrolisanje dimenzije čestica.

U mnoštvu invazivnih i neinvazivnih tehnika najelegantniju i najmanje perturbacionu širu primenu su doživele optičke tehnike, koje se zasnivaju na efektima rasejanja i difrakcionim efektima laserske svetlosti pod malim uglovima.

Glavni problem u primeni ove tehnologije proizilazi iz inverzne operacije, koja omogućava raspodele veličine na osnovu difrakcionih figura. Jedan od načina rešavanja je usvajanje određenog oblika raspodele unapred, na pr. Rosin Rammlerove raspodele i određivanje dva parametra, koji je definišu potpuno.

### Metode simulacije

Metode simulacije, bazirane na numeričkoj simulaciji problema se razvijaju u dva pravca, gde se koriste : integralna (kumulativna) i diferencijalna funkcija raspodele.

Integralna funkcija raspodele  $R(\delta)$  daje deo čestica, čiji je parametar veći od  $\delta$ . Ova integralna funkcija distribucije (kriva ostataka) je definisana neophodnim uslovima:

$$R(0) = 1 \quad (8),$$

$$R(\delta \rightarrow \infty) = 0 \quad (9).$$

Matematički, to znači da čestica ne može imati parametar koji, je jednak nuli i da ne postoje čestice sa beskonačnim parametrom. (Vrlo je važno od 80 parametara izabrati one, koji su ovde relevantni). Diskutabilno je shvatanje pojma dimenzije, kojoj treba pridodati topološko značenje.

Za postavljanje odgovarajućih teorija, matematički modeli su glavni. Teškoće se pojavljuju samo u povezivanju realnih situacija i graničnih uslova, povezivanja matematičkih strogih definicija i fizičke nemogućnosti sa ostrim, strmim prelazima.

Granulometrijski sastav je a priori nepoznat. Na njega utiče i proces razdvajanja, koji određuje masu i sastav fluksa, koji recirkuliše. Način praktičnog dobijanja mikročestica, uključujući i generatore čestica pruža veliki dijapazon dimenzija i osobina ansambala, pa sve to, treba uključiti u odgovarajuće statističko tumačenje. Modelovanje može dovesti do ušteda u proizvodnom procesu i zbog toga su simulacije dobijanja od velikog značaja. Matematičko modelovanje počiva na stohastičkom prilazu. Bitnu ulogu igra frakcionisanje praškova.

U izvodenju teoretskih zakona granulometrijskih sastava praškova, veliku ulogu igraju funkcije raspodele. Najrasprostranjenija aproksimacija je Rosin Rammlerom raspodelom

$$R(\delta) = \exp(-b\delta^{n_r}) \quad (10),$$

gde su  $b$  i  $n_r$  parametri identifikacije krive eksperimentalnim podacima.

Ona je prvobitno bila uvedena kao čista aproksimacija eksperimentalnih podataka, a posle je dobijena i teoretski za pojedine procese transformacija granulometrijskih sastava praškastih materijala. Rosin Rammlerova distribucija uvek zadovoljava uslove (8) i (9).

Negativan izvod integralnog oblika Rosin Rammlerove raspodele je diferencijalni oblik:

$$f(\delta) = -\frac{dR}{d\delta} = \exp(-b\delta^{n_R}) b n_R \delta^{n_R-1} = R b n_R \delta^{n_R-1} \quad (11)$$

Ova funkcija raspodele pokazuje gustinu verovatnoće da se dijametar (karakteristična dimenzija) neke čestice nadje u intervalu  $(\delta, \delta+d\delta)$ .

Na osnovu definicije diferencijalnog oblika raspodele, broj čestica, čiji je dijametar u intervalu  $(\delta_1, \delta_2)$  je integral:

$$\int_{\delta_1}^{\delta_2} f(\delta) d\delta \quad (12).$$

Uslov kojim se izražava normiranje:

$$\int_0^{\infty} f(\delta) d\delta = 1 \quad (13).$$

Dakle, veza između integralne i diferencijalne raspodele je sledeća:

$$R(\delta) = \int_{\delta}^{\infty} f(\delta) d\delta \quad (14).$$

Intenzitet svetlosti difraktovane na sfernoj čestici, pod uglom  $\theta$  dat je teorijskim izrazom

$$I(\theta) = I_0 \left[ \frac{2J_1\left(\frac{2\pi\delta \sin \theta}{\lambda}\right)}{2\pi\delta \sin \theta} \right]^2 \quad (15).$$

gde je  $J_1$  prvi red Besselove funkcije i  $\lambda$  talasna dužina.

Metoda određivanja nepoznatih parametara Rosin Rammlerove raspodele se bazira na numeričkoj simulaciji problema. Naime, ukupni intenzitet svetlosti difraktovan sa oblaka čestica je suma izmerenih intenziteta koji odgovaraju svakoj čestici iz skupa. Taj intenzitet se može izraziti na sledeći način

$$I(s) = k \int_0^{\infty} \left[ \frac{J_1\left(\frac{2\pi\delta s}{\lambda f}\right)}{\frac{2\pi\delta s}{\lambda f}} \right]^2 f(\delta) d\delta \quad (16),$$

pošto je  $\sin \theta = s/f$ , gde je  $s$  rastojanje od optičke ose a  $f$  žižna daljina upotrebljenog sočiva.

Ako integral izračunamo kao sumu n integrala, gustinu verovatnoće raspodele čestica  $f(\delta)$  je moguće linearizovati na malim intervalima. Za  $\delta \in [\delta_j, \delta_{j+1}]$ :

$$f(\delta) \approx f(\delta_j) + f'(\delta_j)(\delta - \delta_j), \text{ odnosno}$$

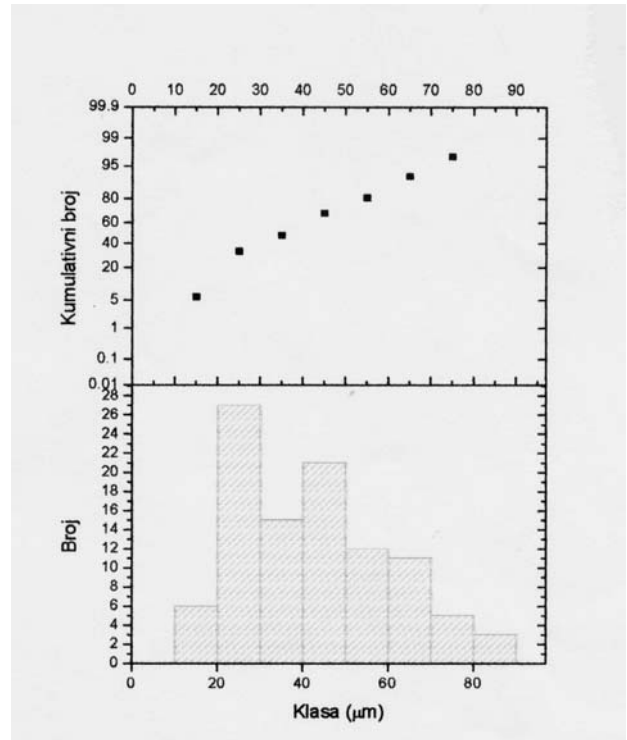
$$f(\delta) \approx f(\delta_j) + \frac{f(\delta_{j+1}) - f(\delta_j)}{\delta_{j+1} - \delta_j} (\delta - \delta_j) = M_j \delta + N_j \quad (17)$$

gde je

$$M_j = \frac{f(\delta_{j+1}) - f(\delta_j)}{\delta_{j+1} - \delta_j}, \quad N_j = \frac{\delta_{j+1} f(\delta_j) - \delta_j f(\delta_{j+1})}{\delta_{j+1} - \delta_j}$$

$$I(s) = \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\delta_j}^{\delta_{j+1}} k \left( \delta \frac{f(\delta_{j+1}) - f(\delta_j)}{\delta_{j+1} - \delta_j} + \frac{\delta_{j+1} f(\delta_j) - \delta_j f(\delta_{j+1})}{\delta_{j+1} - \delta_j} \right) \right.$$

$$\left. \left[ \frac{J_1\left(\frac{2\pi\delta s}{\lambda f}\right)}{\frac{2\pi\delta s}{\lambda f}} \right]^2 d\delta \right\} \quad (18)$$



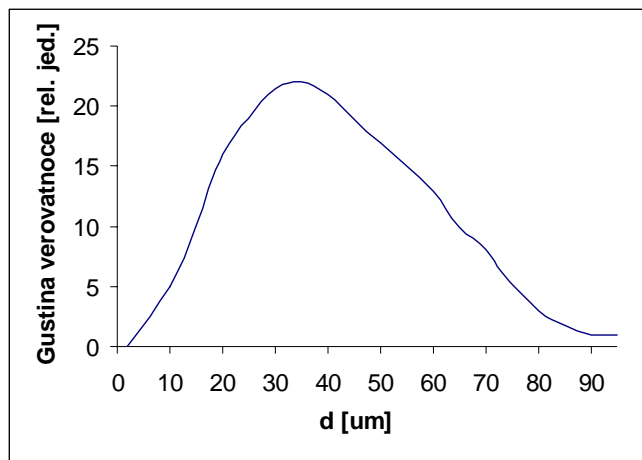
Sl.1.

Na osnovu dalje obrade i analize histograma u cilju nalaženja analitičkih zavisnosti i zakonitosti kojima pripadaju dati prahovi vršeno je fitovanje podataka histograma sa različitim aproksimacijama (sl.2, sl.3)

## Eksperimentalni rezultati

B. Modelovanje eksperimentalnih rezultata na drugi, analitički način

Za prahove od interesa za postizanje dobrog kontrasta pri snimanjima tehnikama magnetne rezonance pravljenе u laboratoriji [ 3] tehnikama elektronske mikroskopije izvršene su analize dobijenih prahova. Samostalno razvijenim i prilagođenim tehnikama kvantifikacije slike dobijeni su histogrami, koji prikazuju raspodele veličine čestica praha (sl.1).



Sl.2. Kubna aproksimacija glatkom krivom.

U radu je dat numerički postupak za nalaženje nepoznatih parametara predpostavljene Rosin Rammlerove raspodele na osnovu eksperimentalnih podataka. Za potpuno definisanje Rosin-Rammlerove raspodele je potrebno odrediti njena dva Izvršena je generalizacija log normalne raspodele tako da ona i raspodela nultog reda postaju specijalni slučaj generalne formule asimetričnih raspodela sa tri nepoznata parametra kod kojih izabrane vrednosti parametra ansambla čestica su invarijante.

Za eksperimentalne podatke dobijenih prahova

[3] izvršena je analiza tehnikama elektronske Dobijeni eksperimentalni podaci su analitički modelovani krivama, koje pokazuju izvesne frekventne zavisnosti. Sledeća aproksimacija, koja pokušava da • Gaussov karakter procesa je na sl. 2 i 3 .

Interesantna je interpretacija podataka, koji možda govore o izraženim magnetnim osobinama dobijenih prahova.

Frekventne zavisnosti kao da pokazuju suštinske osobine prahova, interakcione procesa uparivanja.

U radu je analiziran pristup funkcijama raspodele u tumačenju specifičnih oblika koji se manje sreću u praksu od Gaussove. Pored tipičnih izraza koji se koriste u analizi, izvedeni su ili su na drugi način izraženi uslovi, koji takodje mogu da dovedu do primena....

## LITERATURA

1. 2. Mizonov V.E., Ušakov S.G., *Aerodinamičeskaya klasifikacija poroškova*, Kimija, Moskva, 1989

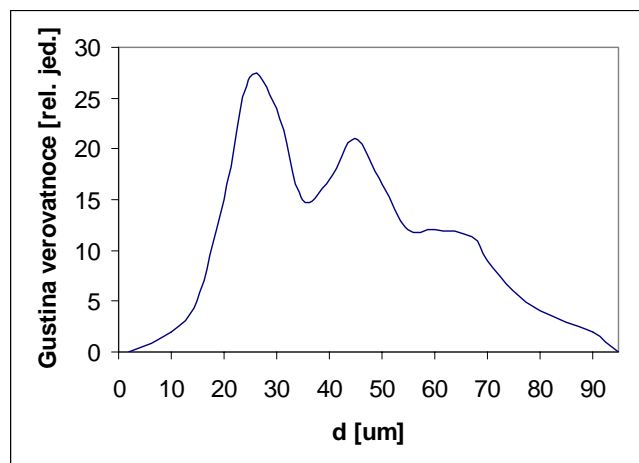
parametra. To se postiže numeričkom simulacijom radi inverzije, tj. određivanjem funkcije raspodele, ako znamo angularnu zavisnost intenziteta difraktovane ili rasejane laserske svetlosti.

## Zaključak (1)

.Prahovi su od interesa za snimanja magnetne rezonance ,tj. postizanja kontrasta.

.Prahovi su od interesa za snimanja magnetne rezonance tj postizanja kontrasta slike.

Na osnovu mikrografa elektronske mikroskopije,izvršena je kvantifikaciona analiza slike. Dobijeni su histogrami kojui predstavljaju raspodelu čestica..



Sl.3. Aproksimacija Bessel-ovim krivama.

2. S.Ostojić , *Doktorska teza* , ETF Beograd, 2000

3.Ž.Tomić i dr. Analiza mogućnosti dobijanja superparamagnetnih prahova na bazi oksida gvoždja kao prekursora pri sintezi MR kontrastnih medijuma, ETRAN,Čačak,2004

**Abstract** - *Microparticles, firstly, powders of interest in many area, represent complex research field from the theoretical and metrologic point of view. The exact consideration as well as control is of extremely importance for ecological and biomedical normative and application. The numerical and analytical point of view for powder distribution as well as practical modern solution are considered in this paper.*

## GENERALIZATION OF POWDER ANALYSES OF INTEREST IN BIOMEDICINE AND ECOLOGY

S.Ostojić, Ž.Tomić , P.Jovanić, A.Milosavljević, S.Ristić, J.Ilić, R.Radovanović, M. Živković