

散射法粒度分布测试中无约束反演的误差分析

张传武, 简森夫, 王清华, 张月

(南京工业大学 材料科学与工程学院, 江苏 南京 210009)

摘要: 激光散射法测量粒度分布技术近年来发展很快,其测量误差涉及散射理论及其反演计算,有关的理论研究还不充分。通过数值模拟,利用 Chahine 算法研究包含反演计算在内的系统误差。计算结果表明,光散射测量粒径不能通过简单的增加离散级数来提高测量精度,必须通过反演算法的改进来提高。

关键词: 误差分析; 无约束反演; 光散射粒度分布测试

中图分类号: TG806 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-7643(2003)04-0073-03

在科研和生产中,颗粒的粒径分布往往是一个十分关键的参数,颗粒粒度的测量是颗粒测试技术最重要也是最基本的测量,现已有多种基于不同工作原理的测量方法和测量仪器。在众多的粒度测试技术中,光散射法以其优异的性能得到了极大的重视与发展^[1,2],由于其测量误差涉及散射理论及其反演计算,有关的理论研究还不充分,本文通过计算机模拟研究包含反演计算在内的系统误差。研究结果表明,光散射测量粒径不能通过简单的增加离散级数来提高测量精度,必须通过反演算法的改进来提高。

1 误差来源

光散射法的基本原理如图1。它通过光环探测器采集颗粒在一定角度范围内的散射光来得到颗粒的粒径分布信息。夫朗和费衍射理论和经典的 Mie 散射理论都可用来解释散射光强中的粒度分布,而 Mie 散射理论是均质球形颗粒在电磁场中对平面波散射的精确解。它只需假定颗粒材料是光学均匀,且各向同性,就可以由 Maxwell 方程组及边界条件推导而出。它适用于描述任何尺寸球形颗粒的光散射^[3],因此本文采用 Mie 散射进行模拟研究。

对于多颗粒系统,某一粒级的颗粒散射光落在光电探测器上的光能量为:

$$E(\theta) = \int_{D_{\min}}^{D_{\max}} i(\theta, m, D)q(D)dD \quad (1)$$

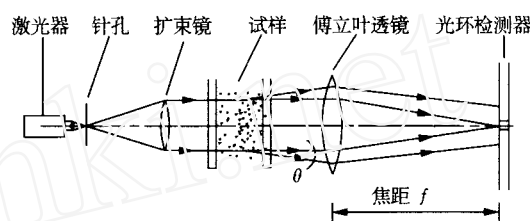


图1 前向光散射法原理示意图

Fig.1 Sketch of front light scattering

式中 $i(\theta, m, D)$ 为光电探测器上的光强分布, $q(D)$ 为粒径分布。这是第一类 Fredholm 积分方程,求其真实数值解为病态求解问题,实际采用离散化形式:

$$E = \frac{C\pi}{\rho} \sum_{i=1}^{15} \frac{W_i}{D_i^3} \int_{\theta_1}^{\theta_2} (i_1 + i_2) \sin\theta d\theta$$

W_i 为离散粒径分布。写成矩阵形式,即

$$E = T \times W \quad (2)$$

$$W = T^{-1} \times E \quad (3)$$

式中 $T_{i,j} = \frac{1}{D_j^3} \int_{\theta_1}^{\theta_2} (i_1 + i_2) \sin\theta d\theta$

实际测量中,由于误差的存在,由(3)式直接反演求解 W 通常不成功。因为从光强分布得到粒度分布是一个逆向的物理过程,通常求数字解是病态的。在数学上,把原因归结于 T 的条件数过大。因此,现普遍使用的求解方法是分布模型约束求解,实际使用中比较成功的为双参数粒度分布模型,如 RRB 分布,LOG 分布等,但这样大大降低了分辨率,以致人们有光散射法测量不准确的印象。实现无约束反

收稿日期:2002-10-08

作者简介:张传武(1977-),男,安徽金寨人,硕士生,主要研究方向为激光散射法测量颗粒大小与形状。

演是光散射法提高测量精度的基本方向。

在理想条件下的理论模拟过程中,(3)式的系统误差来源就是(1)式中 W 的离散化所产生的截断误差。通常,离散化的级数越多即测量环分得越细截断误差也就越小,但随之而来的问题是 T 的条件数也随之增大。由于反演过程是式(3)与反演算法的综合结果,为便于考察算法,本文就分环截断误差与 T 阵条件数两个主要误差因素的作用进行计算机模拟研究。

2 模拟结果

本文利用 Chahine 迭代反演算法进行理论模拟。Chahine^[4] 迭代算法是一个针对反求问题的有效算法,主要用于气象中测定云层的温度,Bassini^[5] 等人将这种算法成功地应用于光衍射测量中。这种算法的优点是收敛速度快,经过较少次数的迭代后,就能得到一个稳定解^[6]。模拟分两步进行:首先在 31 环的情况下,对各种粒度分布进行模拟,以求得各种粒度分布下 Chahine 算法的误差容限;第二步,取某一粒度分布,研究不同分环情况下 Chahine 算法的误差容限。

2.1 误差容限模拟分析

假设颗粒服从 RRB 分布,光电检测环取 31 环,各环参数的确定采用下式:

$$\begin{aligned} S_{in} &= c' S_{i(n-1)} \\ S_{on} &= c' S_{in} \end{aligned} \quad (4)$$

式中: S_{in} , S_{on} 为检测环内外径; c' 是无量纲常数,取值 1.154。透镜焦距 $f = 63 \text{ mm}$, 波长 $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$, 各环参数见表 1。

表 1 光检测环尺寸(1~31 为内环,2~32 为外环)

Table 1 Size of ring							
序号	环径 /cm	序号	环径 /cm	序号	环径 /cm	序号	环径 /cm
1	0.149	9	0.469	17	1.474	25	4.636
2	0.172	10	0.541	18	1.701	26	5.350
3	0.198	11	0.624	19	1.963	27	6.174
4	0.229	12	0.720	20	2.265	28	7.124
5	0.264	13	0.831	21	2.614	29	8.221
6	0.304	14	0.959	22	3.017	30	9.487
7	0.352	15	1.107	23	3.481	31	10.948
8	0.406	16	1.277	24	4.017	32	12.635

在反演计算中,加入随机误差 ΔE , 令

$$E' = E + \Delta E$$

$$E = T \times W, \Delta E = E \times E_{\text{rand}} \times \delta_{\text{max}}$$

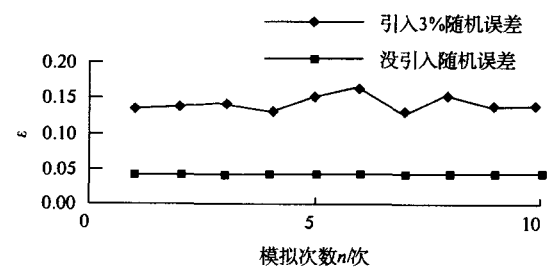
式中 E_{rand} 是一组满足正态分布的随机数, δ_{max} 是最大相对误差限。

为了评价反演结果,引入下式定义计算误差^[7]:

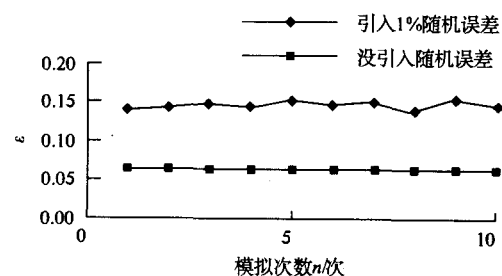
$$\epsilon = \frac{\left[\sum_{i=1}^M (W_{i,\text{real}} - W_{i,\text{resu}})^2 \right]^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^M W_{i,\text{real}}^2 \right)^{1/2}} \quad (5)$$

式中: $W_{i,\text{real}}$ 和 $W_{i,\text{resu}}$ 分别表示原始质量分布和反演得到的质量分布; M 是光环数。

在截断误差一定的情况下,引入随机误差 δ_{max} 。理论模拟的结果如图 2 所示。当服从 RRB 分布的颗粒群在 $D = 20 \mu\text{m}$, $N = 1$, $\delta_{\text{max}} = 3\%$ (图 2a) 和 $D = 20 \mu\text{m}$, $N = 3$, $\delta_{\text{max}} = 1\%$ (图 2b) 时的 ϵ 都在 15% 左右,因此我们可以认为 Chahine 算法能容忍的相对误差限相当小,另外还可以看到每次的 ϵ 相差很小,说明该算法的稳定性相当好。



(a) $D=20 \mu\text{m}$, $N=1$, $\delta_{\text{max}}=3\%$



(b) $D=20 \mu\text{m}$, $N=3$, $\delta_{\text{max}}=1\%$

图 2 引入随机误差后 W 的反演误差

Fig. 2 Error of the W with the random error

2.2 截断误差分布

光能 E 在实际模拟过程中采用离散化的(2)式计算。因此会产生离散误差,即截断误差。图 3 是一组服从 RRB 分布的颗粒由(2)式计算的光能 E 的

相对误差曲线。从图3中可以看出,光能 E 的误差分布在外环处较大,即小颗粒的影响比较大,而且误差分布的随机性比较差。从模拟中发现,当光能 E 的误差分布随机性越差,利用 Chihane 反演得到结果效果越差。因此,可以认为光能 E 的这种误差分布是导致反求过程中容差限比较小的原因。

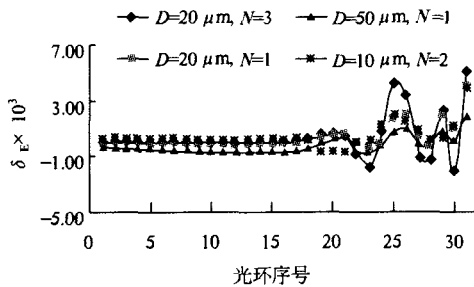


图3 光能 E 的误差

Fig.3 Error of the energy of light

2.3 截断误差即分环数的影响

在 $D = 20 \mu\text{m}$, $N = 1$ 的粒度分布下,将上面的31环按照公式(3)重新划分成15环和63环,然后进行模拟。3种情况下 T 的无穷条件数分别为:
 $\|T_{15}\|_{\infty} = 8.89 \times 10^{17}$, $\|T_{31}\|_{\infty} = 3.74 \times 10^{18}$,
 $\|T_{63}\|_{\infty} = 6.31 \times 10^{19}$ 。令 $\delta_{\text{max}} = 2\%$,则每次模拟的 W 误差平方和如图4所示。

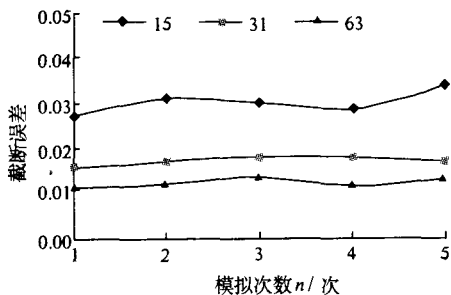


图4 不同分环数下的截断误差

Fig.4 Truncation error of different ring numbers

由图4可以看出,从15环到31环再到63环,虽然将环细分后,截断误差小了,但是由于条件数也同时增大,模拟效果改善不明显。因此,简单地将环细分并不能提高测量精度。

2.4 算法影响

在上述31环条件不变时,对 T 进行新的正则化^[8,9],正则化后条件数为 $\|T_{31}\|_{\infty} = 1.45 \times 10^{18}$,

Chanhine 算法的容差限明显增大。在 $D = 20 \mu\text{m}$, $N = 1$ 的粒度分布下, $\delta_{\text{max}} = 6\%$ 时的反演结果如图5所示,新的 T 阵正则化处理后的误差远小于初始情况。

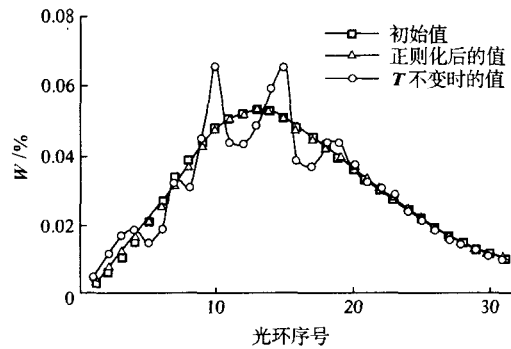


图5 $\delta_{\text{max}} = 6\%$ 时对正则化前后反演结果比较

Fig.5 Effect of regularization of T on W ($\delta_{\text{max}} = 6\%$)

3 结论

(1) 由于离散化所产生的系统误差分布的不随机性,在无约束条件下不能简单地通过增加离散级数提高测量精度。

(2) 改善反演算法和正则化矩阵 T 比增加离散级数能更加有效地提高测量精度。

参考文献:

- [1] 沈建琪,蔡小舒,王乃宁.小角前向光散射激光测粒仪中折射率对测量结果的影响[J].中国激光,1999,(26):312-316.
- [2] 艾伦 T. 颗粒大小测定[M].北京:中国建筑工业出版社,1984. 447-463.
- [3] 张夫根,荣跃龙,程路.用激光散射法测量大颗粒时使用衍射理论的误差[J].粉体技术,1996,(2):7-14.
- [4] Chahine M T. Inverse problems in radiative transfer: determination of atmospheric parameters[J]. Journal of the Atmospheric Sciences, 1970,27:960-967.
- [5] Alessandra Bassini. Optical particle sizer based on the chahine inversion scheme[J]. Optical Engineering, 1992, 31(5): 1123-1117.
- [6] 顾宇辉. CCD型激光粒度仪的模拟与实验研究[D].南京:南京化工大学,1999.
- [7] Ma Zhenhua. Particle-size analysis by laser diffraction with a complementary metal-oxide semiconductor pixel array[J]. Applied Optics, 2000,39(25):4547-4557.
- [8] Ma Zhenhua. Measurement of particle size and shape by laser light scattering[D]. Netherlands: Delft University of Technology, 2001.

(下转第101页)

Investigation on Eureka pitch-softened-point measuring by artificial intelligent method

SHU Chang-hao, HUANG Fei-xi, ZHANG Jian, LU Xin-jian, PENG Fei

(Oil Refinery of Yangzi Petrochemical Corporation, Nanjing 210048, China)

Abstract: Soft measuring by artificial neural network (ANN) is a focus of the petrochemical process successfully applied by artificial intelligent method. ANN can map the complicated non-linearity relations without systemized modeling and it especially appropriate for modeling and predicting of refining plant. This article presents the method of soft measuring Eureka pitch-softened-point by ANN, which is accurate and easy to learn, operate and remember compared with $k\theta$ method of KUREHA corporation, so it can optimize refining process control by combining with Distributed Control System (DCS).

Key words: artificial neural network; soft measuring; pitch-softened-point

(上接第75页)

- [9] Hirliman E D. Optimal scaling of inverse fraunhofer diffraction particle sizing problem: the linear system produced by quadrature [J]. Part C, *Optics*, 1987, 4: 128-133.

Systematic error of inversion analysis under nonrestraint condition with light scattering measurement of particle size distribution

ZHANG Chuan-wu, JIAN Miao-fu, WANG Qing-hua, ZHANG Yue

(College of Materials Science and Engineering, Nanjing University of Technology, Nanjing 210009, China)

Abstract: According to the numerical analysis of the error of inversion in light scattering measurement of particle size distribution (PSD), it was found that the main reasons that common algorithm of inversion can not get good result under nonrestrating condition are as follows: truncation error, condition number etc. In this paper, a resolution to decrease the error was proposed.

Key words: error analysis; nonrestraint inversion PSD; light scattering