

非独立模式算法下粒径分布反演及分类的研究

孙晓刚, 唐红, 原桂彬

哈尔滨工业大学自动检测与过程控制系统研究所, 黑龙江 哈尔滨 150001

摘要 在光全散射法颗粒粒径测量中, 提出一种非独立模式算法下粒径分布反演及分类的方法。对被测颗粒系分别按照不同的粒径分布函数同时进行反演, 并依据反演误差大小判断被测颗粒系符合哪种分布函数。仿真实验结果表明, 在非独立模式下, 完全可以利用已知的不同分布函数的反演误差作为分类依据, 从而更准确地确定被测颗粒系的粒径分布。采用的遗传反演算法能够在3个可见光波长下得到较准确的粒径分布, 反演结果稳定可靠, 最大限度地减少了多个波长的使用, 从而对光源有更大的选择余地。对透射消光测量结果加入5%随机噪声时, 单峰分布颗粒系的反演误差小于5%, 多峰分布颗粒系的反演误差小于10%。整个算法运行时间小于2s。该方法具有原理简单, 计算速度快等优点, 能够满足颗粒粒径在线测量的要求。

关键词 粒径测量; 光全散射法; 非独立模式; 粒径分布函数分类

中图分类号: TH744, O436 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-0593(2008)05-1111-04

引言

光全散射法是一种不需标定的绝对测量方法, 无论在测量原理还是测量装置上都比其他光散射法简单。其测量范围从亚微米至上百微米, 并可同时测得颗粒系的浓度。由于在线粒度监测的需求十分迫切, 光全散射法已逐渐显示出较大的发展空间和应用潜力。该方法的最大难点在于如何通过衰减光谱的反演获得准确的粒径分布, 在理论上归结于第一类Fredholm积分方程的求解。这是一个典型的不适定问题, 直接求解具有很大的困难。因此粒径分布反演算法的研究受到了众多研究者的重视。光全散射粒径测量方法分为独立模式算法和非独立模式算法。独立模式算法事先无须假定粒径分布, 通过求解离散线性方程组得到粒径分布。非独立模式算法事先假定被测颗粒系符合某一分布函数, 如R-R分布, 正态分布等, 计算在给定多个波长下的消光值, 并将计算值和消光测量值比较, 最后用优化算法寻得最佳的粒径分布函数。这种方法计算过程简单, 速度快, 只需测量少数几个波长下的消光系数, 即可反演粒径分布函数。实际上大部分被测颗粒系符合某一函数分布规律, 但往往事先并不清楚该被测颗粒系的实际分布近似符合哪种分布函数。本文提出一种非独立模式下的粒径分布反演及分类方法, 利用遗传算法, 对常用的单峰及多峰R-R分布, 对数正态分布, 正态分布三

种函数进行反演及分类, 从而获得更接近于实际分布的粒径分布函数。

1 测量原理

光全散射法粒径测量的基本原理是Lambert-Beer定律, 在颗粒浓度满足不相关单散射的前提下, 对于具有一定尺寸范围的多分散颗粒系则有^[1,2]

$$\ln \left(\frac{I}{I_0} \right)_j = - \frac{3}{2} \times L \times N \times \int_{D_{\min}}^{D_{\max}} Q(j, m, D) \times f_D(D) / D dD \quad (1)$$

式中, L 为被测颗粒系的厚度, N 为颗粒系的粒子总数, j 为第 j 个波长数, $Q(j, m, D)$ 为消光系数, 它表征每个颗粒对入射光的散射量, 是颗粒粒径 D 、波长 j , 以及相对介质折射率 m 的函数, 其值可由经典的米氏理论求得^[3,4], $f_D(D)$ 是颗粒体积频度分布函数, 表示单位体积内直径在 D 和 $D + dD$ 范围内的粒子体积频度百分比, 它是粒度测量中待求的未知量。

用数值积分的方法将(1)式离散, 可得如下矩阵表示的线性方程组

$$E = CTN \quad (2)$$

式中, $T_{j,i} = D_i^3 Q(j, m, D)$, D_i 为各分档的等效粒径, E_j

收稿日期: 2006-12-16, 修订日期: 2007-03-30

基金项目: 国家自然科学基金项目(50336010)资助

作者简介: 孙晓刚, 1967年生, 哈尔滨工业大学教授 e-mail: tangbenben@126.com

$= \ln \left(\frac{I}{I_0} \right)_j, f_D = [f_1, f_2, \dots, f_M]^T, M$ 表示粒径的分档数, $C = -\frac{3}{2}LN$ 。

这样, 粒径反演问题归结为方程组 (2) 的求解, 但是方程组 (2) 是一严重病态的方程组, 采用一般的求解线性方程组的算法无法求解。目前常用的是采用最优化算法求解颗粒系粒径分布。

在实际测量中, 许多被测颗粒的尺寸常常符合某种双参数分布函数, 这时采用非独立模式算法求解粒径分布函数则更为简便。较为常用的颗粒粒径分布函数有 R-R 分布函数, 对数正态分布函数 (L-N), 正态分布函数 (N)。它们的体积频度分布函数如下

$$f_{R-R}(D) = \frac{k}{D} \left(\frac{D}{\bar{D}} \right)^{k-1} \times \exp \left[-\frac{D}{\bar{D}} \right]^k \quad (3)$$

$$f_{L-N}(D) = \frac{1}{\sqrt{2} \ln(k) D} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln D - \ln \bar{D}}{\ln k} \right)^2 \right] \quad (4)$$

$$f_N(D) = \frac{1}{\sqrt{2} k} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{D - \bar{D}}{k} \right)^2 \right] \quad (5)$$

在非独立模式下, 方程组 (2) 的求解简化为 (3), (4), (5) 3 式中两个待定的双参数 (\bar{D}, k) 的优化求解问题。由于消光系数 Q 是一个随粒径 D 变化的振荡函数, 为避免解的多值问题, 需要测量 3 个波长下消光值, 即可确定颗粒系的分布规律。其优化目标函数有两种形式

$$\min = \sum_{k=1}^3 \left[\ln \left(\frac{I_{i1}}{I_i} \right) - C \sum_{j=1}^M \frac{f_j(D_j)}{D_j} Q_{\text{mad}}(i, m, D) \right]^2 \quad (6)$$

$$\min = \sum_{k=1}^3 \left[\ln \left(\frac{I_{i1}}{I_i} \right) - C \sum_{j=1}^M \frac{f_j(D_j)}{D_j} Q_{\text{mad}}(i, m, D) \right]^2 \quad (7)$$

若使用 (7) 式, 虽然无须考虑被测颗粒系的浓度, 但是目标函数对参数 (\bar{D}, k) 的变化非常敏感, 这里使用 (6) 式作为粒径优化问题的目标函数。本文选择被测颗粒系粒径范围 0.1 ~ 10 μm , 此范围是光全散射法最佳粒径测量范围。因此可以推算出以上三种分布参数 (\bar{D}, k) 的大致范围

$$R-R: 1 < k < 9 \quad 1 < \bar{D} < 9 \quad (8)$$

$$L-N: 1.1 < k < 2.5 \quad 0.4 < \bar{D} < 9 \quad (9)$$

$$N: 0.1 < k < 2 \quad 0.4 < \bar{D} < 9 \quad (10)$$

对于被测颗粒系, 虽然符合某一分布函数, 但往往事先并不知道具体符合哪一种分布函数, 因此给非独立模式下粒径分布反演带来一定困难。本文采用遗传算法, 对符合 R-R 分布, 对数正态分布, 正态分布其中一种分布的被测颗粒系分别采用这三种分布函数进行反演, 并将目标函数值的大小作为区分三种分布函数的依据, 取目标函数值最小的一个所对应的分布函数作为最终测量结果。采用遗传算法克服了一般的优化算法如最小二乘法, Powell 法等容易陷入局部极小值的缺陷, 因而具有较强的搜索能力以及较好的稳定性^[5]。粒径分布反演及分类方法如图 1 所示。

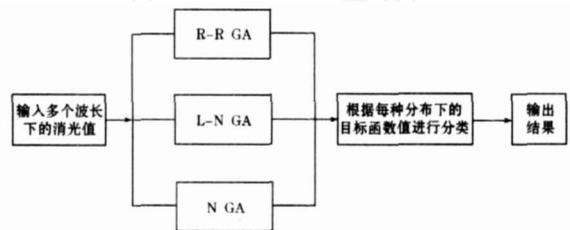


Fig 1 Diagram of inversion and classification method

2 仿真实验及数值模拟结果

为了验证算法的可行性以及可靠性, 分别对单峰以及双峰分布的颗粒系进行大量的仿真实验。

表 1 为单峰分布函数反演结果。被测颗粒系符合 R-R 分布、对数正态分布、正态分布中其中一种分布, 并分别按照以上三种分布函数同时进行反演。颗粒的复折射率 $m = 1.33$, 波长选择可见光波段的 0.45, 0.55, 0.73 μm 三个波长。遗传算法采用浮点数编码, 随机遍历抽样选择, 两点算术交叉算子, 均匀变异, 自适应交叉变异概率^[6], 初始种群数为 50, 最大进化代数 200 代。适应度函数为目标函数的倒数。从表中可以看出, 若被测颗粒符合 R-R 分布, 按照 R-R 分布进行反演所得的目标函数值最小, 即反演误差最小, 而

Table 1 Inversion results of single peak particle size distribution

真实分布	设定值 (\bar{D}, k)	假定分布	反演值 (\bar{D}, k)	进化代数	目标函数值
R-R	(3.2, 3.5)	R-R	(3.2012, 3.5016)	200	1.12E-10
R-R	(3.2, 3.5)	L-N	(3.1868, 1.8837)	200	3.95E-5
R-R	(3.2, 3.5)	N	(2.7491, 0.7780)	200	2.88E-5
L-N	(2.2, 1.8)	L-N	(2.2000, 1.8008)	200	2.53E-9
L-N	(2.2, 1.8)	R-R	(2.4977, 2.5740)	200	2.25E-4
L-N	(2.2, 1.8)	N	(2.0919, 0.8916)	200	4.52E-4
N	(5.4, 0.7)	N	(5.3992, 0.6985)	200	3.04E-9
N	(5.4, 0.7)	R-R	(6.1538, 5.3990)	200	4.52E-5
N	(5.4, 0.7)	L-N	(5.3833, 1.1706)	200	2.30E-6
R-R	(3.2, 3.5)*	R-R	(3.1007, 3.5292)	200	0.0015
R-R	(3.2, 3.5)*	L-N	(3.0188, 1.7974)	200	0.0020
R-R	(3.2, 3.5)*	N	(2.1587, 0.58672)	200	0.0066

*表示在第一、第三个波长处对加入 5% 的测量误差

相同条件下按照对数正态分布或正态分布所得的反演误差则相差很大。同样，若被测颗粒符合对数正态分布或正态分布，也能得到相同的结论。因此，可以将目标函数值的大小作为划分依据，判断该被测颗粒系最符合哪种分布函数，从而更准确地确定被测颗粒系的粒径分布。

图 2 为被测颗粒系符合 (3.2, 3.5) 的单峰 R-R 分布，分别采用 R-R 分布，对数正态分布，以及正态分布三种分布函数作为已知函数进行反演后得到的粒径分布曲线。可以看出，采用 R-R 分布函数反演的结果与实际情况最接近。为了验证该方法的可靠性，对第一、第三个波长下测得的消光值加入了 5% 的随机噪声进行反演，实际上 5% 的随机噪声已经很大。从测量结果可以看出，在加入 5% 的随机噪声之后，反演结果仍然与实际值吻合得相当好。在遗传算法参数初始化时，反演参数 (\bar{D}, k) 的边界值应满足 (8), (9), (10) 3 个不等式，这样可以大大提高算法的搜索效率。可以看出，进行 200 次迭代后，对不同分布的 (\bar{D}, k) ，都可以用这种方法区分所属的分布函数并得到满意的结果，总体测量误差小于 5%。相对于独立模式而言，非独立模式下粒径分布的计算需要反演的变量少，计算效率高。仅用三个波长的消光值即可反演粒度分布，从而对光源有更大的选择余地。

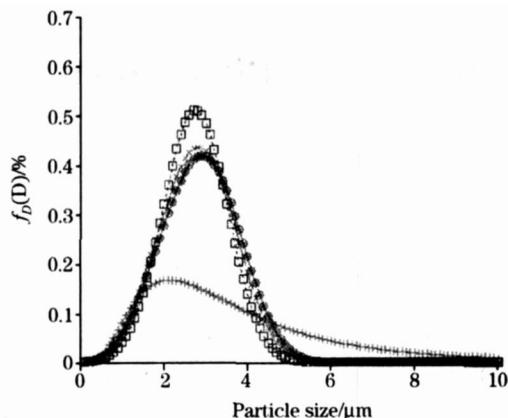


Fig 2 Inversion results of a single peak particle size distribution

* : Real distribution; : R-R distributions;
 × : R-R distribution (5% error);
 + : L-N distribution; : N distribution

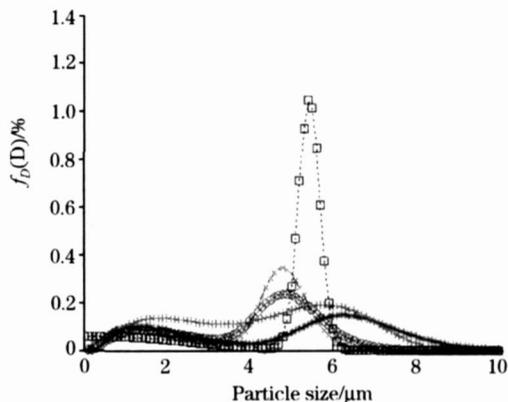


Fig 3 Inversion results of a bimodel particle size distribution

* : Real distribution; : L-N distributions; × : L-N distribution (5% error); + : N distribution; : R-R distribution

本文同时对双峰分布的颗粒系进行了验证。双峰的 R-R 分布、对数正态分布、正态分布函数形式如下^[7]

$$f_{RR}(D) = n \cdot \frac{k_1}{D_1} \left(\frac{D}{D_1}\right)^{k_1-1} \exp\left[-\frac{D}{D_1} k_1\right] + (1-n) \cdot \frac{k_2}{D_2} \left(\frac{D}{D_2}\right)^{k_2-1} \exp\left[-\frac{D}{D_2} k_2\right] \quad (11)$$

$$f_{L-N}(D) = n \cdot \frac{1}{\sqrt{2} \ln(k_1) D} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln D - \ln \bar{D}_1}{\ln k_1}\right)^2\right] + (1-n) \cdot \frac{1}{\sqrt{2} \ln(k_2) D} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln D - \ln \bar{D}_2}{\ln k_2}\right)^2\right] \quad (12)$$

$$f_N(D) = n \cdot \frac{1}{\sqrt{2} k_1} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{D - \bar{D}_1}{k_1}\right)^2\right] + (1-n) \cdot \frac{1}{\sqrt{2} k_2} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{D - \bar{D}_2}{k_2}\right)^2\right] \quad (13)$$

其中， n 为两峰之间的平衡系数， $0 < n < 1$ 。

表 2 为双峰分布的反演结果，并对加入 5% 测量误差进行验证。在非独立模式下，双峰分布函数需要反演 5 个参数： $(\bar{D}_2, k_1, \bar{D}_2, k_2, n)$ 。可以看出，对于双峰分布函数，仍然可以通过遗传算法下的目标函数值的大小确定具体的分布函数，并且反演结果能够反映真实的粒径分布。图 3 为对表 2

Table 2 Inversion results of bimodel particle size distribution

真实分布	设定值 $(\bar{D}_1, k_1, \bar{D}_2, k_2, n)$	假定分布	反演值 $(\bar{D}_1, k_1, \bar{D}_2, k_2, n)$	进化代数	目标函数值
R-R	(2.5, 3.0, 6.5, 5.0, 0.3)	R-R	(2.348 8, 2.960 2, 7.248 1, 4.061 0, 0.283 4)	300	4.23E-9
R-R	(2.5, 3.0, 6.5, 5.0, 0.3)	L-N	(3.722 3, 1.035 6, 5.499 1, 1.240 9, 0.728 6)	300	1.39E-5
R-R	(2.5, 3.0, 6.5, 5.0, 0.3)	N	(4.562 0, 2.105 4, 7.761 0, 1.997 2, 0.351 6)	300	7.40E-6
L-N	(2.0, 1.9, 6.5, 1.2, 0.4)	L-N	(2.392 8, 2.079 6, 4.972 5, 1.161 8, 0.427 3)	300	5.37E-10
L-N	(2.0, 1.9, 6.5, 1.2, 0.4)	R-R	(2.424 7, 2.031 5, 6.093 0, 4.823 3, 0.367 9)	300	4.10E-5
L-N	(2.0, 1.9, 6.5, 1.2, 0.4)	N	(0.432 5, 2.109 3, 5.429 6, 0.257 8, 0.323 4)	300	0.0578
L-N	(2.0, 1.9, 6.5, 1.2, 0.4) *	L-N	(1.709 1, 2.127 9, 4.848 7, 1.118 8, 0.245 8)	300	2.15E-9
L-N	(2.0, 1.9, 6.5, 1.2, 0.4) *	R-R	(3.460 6, 2.183 7, 6.183 5, 3.735 7, 0.353 6)	300	7.39E-4
L-N	(2.0, 1.9, 6.5, 1.2, 0.4) *	N	(3.480 2, 1.793 7, 4.803 3, 0.264 4, 0.480 9)	300	6.20E-4

*表示在第一、第三个波长处对加入 5% 的测量误差

中实际颗粒系满足 L-N 分布情况下的反演结果绘制的曲线。对于多个参数反演,遗传算法仍能搜索到全局最优解,总体测量误差小于 10%。

3 结 论

光全散射法是各种光散射粒径测量中较为简便的一种。在非独立模式算法下,提出一种粒径反演及分类方法,阐述了算法的实现步骤,并分别对单峰及双峰分布的颗粒系进行

了仿真实验验证。结果表明,该方法是一种十分有效的粒径测量的方法。本文仅对常用的三种分布函数进行了验证,三种分布函数的遗传反演算法同时并行执行,以上计算都是 Athlon3000+ 计算机上完成的,遗传算法的反演时间在 2 s 以内。采用的遗传算法具有快速收敛性以及全局搜索能力,进而较准确反演出粒径分布,对随机噪声也有很强的抑制能力,在测量误差达 5% 时仍有较高的精度,较好地解决了非独立模式算法通常存在的无法直接分辨粒径分布的问题,因而具有很好的应用前景。

参 考 文 献

- [1] WANG Nai-ning(王乃宁). Optic Measurement Technology of Particle Size and Its Application(颗粒粒径的光学测量技术及应用). Beijing: Atomic Energy Press(北京:原子能出版社), 2000.
- [2] SU Ming-xu, REN Kuan-fang, Grehan G, et al(苏明旭, 任宽芳, Grehan G, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2004, 24(5): 696.
- [3] XU Feng, CAI Xiao-shu, SHEN Jiar-qi(徐峰, 蔡小舒, 沈嘉祺). Acta Optica Sinica(光学学报), 2003, 23(12): 1464.
- [4] Bohrend C F, Huffman R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. John Wiley & Sons INC., 1998: 481.
- [5] LIU Fang, WANG Jun-de(刘芳, 王俊德). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2001, 21(5): 213.
- [6] SUN Xiao-gang, YUAN Gui-bin, DAI Jing-min(孙晓刚, 原桂彬, 戴景民). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2007, 27(2): 213.
- [7] ZHENG Gang, LIU Tie-ying, CHEN Shan-zhong(郑刚, 刘铁英, 陈善忠). Chinese Journal of Laser(中国激光), 1998, 25(4): 377.

Study of Inversion and Classification of Particle Size Distribution under Dependent Model Algorithm

SUN Xiao-gang, TANG Hong, YUAN Gui-bin

Department of Automation Measurement and Control, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China

Abstract For the total light scattering particle sizing technique, an inversion and classification method was proposed with the dependent model algorithm. The measured particle system was inverted simultaneously by different particle distribution functions whose mathematic model was known in advance, and then classified according to the inversion errors. The simulation experiments illustrated that it is feasible to use the inversion errors to determine the particle size distribution. The particle size distribution function was obtained accurately at only three wavelengths in the visible light range with the genetic algorithm, and the inversion results were steady and reliable, which decreased the number of multi wavelengths to the greatest extent and increased the selectivity of light source. The single peak distribution inversion error was less than 5% and the bimodal distribution inversion error was less than 10% when 5% stochastic noise was put in the transmission extinction measurement values at two wavelengths. The running time of this method was less than 2 s. The method has advantages of simplicity, rapidity, and suitability for on-line particle size measurement.

Keywords Particle sizing; Total light scattering; Dependent model algorithm; Classification of particle size distribution

(Received Dec. 16, 2006; accepted Mar. 30, 2007)