

求解双峰颗粒尺寸分布的一种新算法*

郑 刚 刘铁英 陈善忠

(上海理工大学仪表学院 上海 200093)

提要 提出了一种确定激光粒度仪中颗粒尺寸分布的新算法, 该算法采用函数限制解法, 能对具有单峰及双峰分布形式的颗粒尺寸进行精确求解。同时给出了计算机数值模拟结果及实测结果。

关键词 颗粒尺寸, 双峰分布, 算法

1 引 言

光散射测粒技术是近二十年来得到迅速发展的一门新兴技术, 目前仍在继续发展与进一步完善之中。光散射测粒技术的基本原理是根据颗粒对光的散射信息(例如散射光的角度特性、偏振特性、光强涨落等)来重现散射颗粒的浓度、大小及尺寸分布。很显然, 测粒工作成败的一个很关键的问题是: 从数学角度怎样由接收到的光散射信号求得颗粒尺寸分布。由于散射光信号与粒度分布之间的基本方程往往是第一类 Fredholm 方程, 而且对这个方程理论上目前尚无一个通解, 所以, 求解颗粒尺寸分布这一反命题, 仍然是当今国际上许多从事粒度测量工作的学者所关心的热门课题之一, 并针对各种不同的光散射测粒原理, 发展了多种算法^[1], 有些厂商则作为商业机密将其置于保密之中。激光衍射粒度分析仪是光散射测粒仪中的一种, 是目前应用最为广泛的测粒仪。然而, 激光粒度仪虽能精确地测出单峰分布形式的颗粒尺寸, 但对具有双峰及多峰分布的颗粒尺寸的测量还不尽人意。为此, 本文提出一种能测量单峰及双峰分布颗粒尺寸的新算法, 大量的计算机数值模拟及实测均表明了这种算法的有效性。

2 计算颗粒尺寸分布的算法

为叙述简单, 本文以激光衍射测粒仪为例, 关于测粒原理及仪器组成详见文献[2, 3]。根据 Fraunhofer 衍射理论, 被测颗粒群在激光粒度仪光电探测器各环上的光能分布为

$$E_n = \sum_i \frac{W_i}{D_i} [J_0^2(X_{i,n}) + J_1^2(X_{i,n}) - J_0^2(X_{i,n+1}) - J_1^2(X_{i,n+1})] \quad n = 1, 2, \dots, 15$$

上式实为一线性方程组, 可写成矩阵形式

$$E = TW \quad (1)$$

其中 $E = (E_1, E_2, \dots, E_{15})^T$ 为各环上的光能分布; $W = (W_1, W_2, \dots, W_{15})^T$ 为各尺寸档中的

* 上海市自然科学基金资助项目, 编号: 96ZF14004。

颗粒重量百分比,称为尺寸分布列向量;而

$$T = \begin{pmatrix} t_{1,1} & t_{1,2} & \cdots & t_{1,15} \\ t_{2,1} & t_{2,2} & \cdots & t_{2,15} \\ \cdots & & & \\ \cdots & & & \\ t_{15,1} & t_{15,2} & \cdots & t_{15,15} \end{pmatrix}$$

为系数矩阵,矩阵中的各元素为

$$t_{n,i} = \frac{1}{D_i} [J_0^2(X_{i,n}) + J_1^2(X_{i,n}) - J_0^2(X_{i,n+1}) - J_1^2(X_{i,n+1})] \quad (2)$$

当激光测粒仪各部件的尺寸(如焦距、光电探测器各环的几何尺寸)确定后, T 中的各元素为常量,也就是说方程(1)为常系数线性方程组。理论上只要光电探测器测出被测颗粒群的光能分布列向量 E , 通过解上述方程组,即可确定尺寸分布列向量 W 。遗憾的是,在光散射测量中,系数矩阵 T 的条件数往往很大,因此方程组是个严重的病态方程,对它的直接求解常常得到一组非物理解,因此不能采用一般的线性方程组的解法。目前,许多激光测粒仪在求尺寸分布的数据处理方法上都配备了两类解法,即分布函数限制解法(Model dependent)和独立模式解法(Model independent)^[3]。所谓独立模式解法,就是对被测颗粒系的尺寸分布形式不作任何假定,理论上能对任意分布的颗粒尺寸进行求解,一般采用 Twomey 的非负最小二乘约束算法,但对具有双峰及多峰分布的实际颗粒系的求解往往得出错误的结果。所谓函数限制解法就是预先假定被测颗粒系的尺寸分布符合某个特定的函数,通常采用的是双参数函数,例如正态分布、对数正态分布和 Rosin-Rammler 分布等等,但这些函数都是单峰分布的函数。很显然,它只能模拟单峰分布而不能模拟多峰分布的实际颗粒系,这是计算方法本身的限制,尽管它对单峰分布的颗粒系能给出很好的测量结果。

为求得单峰及双峰分布颗粒系的尺寸,根据上述函数限制解法的思路,我们假定被测颗粒系具有双 Rosin-Rammler 分布函数的形式,即取分布函数为

$$F(D) = AN_1 \left[\frac{D^{N_1} - 1}{D_1^{N_1}} \right] \exp \left[- \left[\frac{D}{D_1} \right]^{N_1} \right] + (1 - A)N_2 \left[\frac{D^{N_2} - 1}{D_2^{N_2}} \right] \exp \left[- \left[\frac{D}{D_2} \right]^{N_2} \right] \quad (3)$$

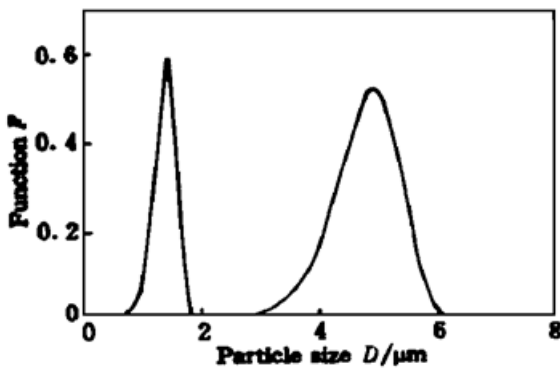


图 1 双峰分布的函数曲线

Fig. 1 Function curve of bimodel distribution

式中的 2 项分别为单峰形式的 $R-R$ 分布, A 为常系数,而 $(D_1, N_1), (D_2, N_2)$ 即为待定的两组双参数,函数 $F(D)$ 的曲线如图 1 所示。反过来,若参数 $(D_1, N_1), (D_2, N_2)$ 已知,那么每个尺寸区间上颗粒的重量百分率即可算出,为

$$W_i = \int_{D_{il}}^{D_{iu}} F(D) dD \quad i = 1, 2, \dots, 15 \quad (4)$$

式中 D_{iu}, D_{il} 分别代表第 i 个小区间的上下限。尺寸分布 W_i 求出后,将其代入方程(1)即可算出在该尺寸分布下光电探测器各环上的散射光能,即光能分布向量 E_c 。因此函数限制解法的根本任务是确定两组

待定的参数,解法的基本思想是:采用逐步逼近的反演算步骤,即不断调整双参数 $(D_i, N_i), i = 1, 2$,从而计算出一系列的光能分布 E_c ,并将其与实测的光能分布 E_m 比较,显然使下列目标函数

$$F_{obj} = |E_c - E_m|^2 \quad (5)$$

的拟合误差为最小所对应的 $(D_i, N_i)^*$, $i = 1, 2$ 就是所求的两组最佳参数。拟合误差的定义是对目标函数取对数

$$\text{拟合误差} = \ln(F_{obj}) = \ln(|E_c - E_m|^2) \quad (6)$$

当然, 为提高计算效率, 在调整 (D_i, N_i) 的过程中可采用优化方法。关于优化理论及算法可参阅有关资料。

式(3) 中的常数 A 实际上是个权重比例系数, 它起到了平衡两个峰值大小的作用, 如果取 $A = 1$ (或 0), 则双峰分布就退化成了单峰分布, 因此式(3) 实际上同时包含了单、双峰分布这两种情况。 A 的选取可由计算机自动搜索进行。

3 计算机数值模拟及实测结果

用上述双峰分布函数及 Powell 优化算法, 进行了大量的单双峰数值模拟计算。模拟计算的步骤如下: (1) 先任意设定各尺寸档中的颗粒重量百分比(即为设定值); (2) 按方程(1) 算出光能分布列向量 E_c , 并将此 E_c 作为光能的测量值 E_m (模拟测量值); (3) 根据目标函数式(5) 及拟合误差式(6), 用优化算法确定两组待定参数 $(D_i, N_i)^*$, $i = 1, 2$ 及权系数 A ; (4) 最后, 按式(4) 得到各尺寸档中颗粒的相对百分比, 即所求的尺寸分布。

计算时取激光衍射测粒仪的透镜焦距为 $f = 63 \text{ mm}$ 。限于篇幅, 仅给出大量模拟计算结果中的两个, 如表 1 所示。

表 1 单峰及双峰分布的模拟计算结果

Table 1 Simulation results of single model and bimodel distributions

No	size band	assumed value	calculated value	assumed value	calculated value
1	0.5~ 0.8	0	0	0	0
2	0.8~ 1.1	0	0.02	0	0
3	1.1~ 1.4	0.15	0.13	0	0
4	1.4~ 1.8	0.40	0.40	0	0
5	1.8~ 2.2	0.15	0.15	0	0
6	2.2~ 2.7	0	0	0	0
7	2.7~ 3.2	0	0	0	0
8	3.2~ 3.9	0	0	0	0
9	3.9~ 4.6	0	0	0	0.01
10	4.6~ 5.5	0.05	0.05	0.20	0.20
11	5.5~ 6.6	0.20	0.20	0.50	0.50
12	6.6~ 8.0	0.05	0.05	0.30	0.29
13	8.0~ 9.9	0	0	0	0
14	9.9~ 12.7	0	0	0	0
15	12.7~ 17.0	0	0	0	0

从表 1 明显可见, 无论是单峰分布颗粒系还是双峰分布颗粒系, 反演算计算结果与设定值均相当吻合。图 2 则给出了对标准颗粒的实测结果, 纵坐标表示某一尺寸档内的颗粒体积占颗粒总体积的百分数, 其中图 2 (a) 为单分散颗粒系, 其直径的名义值为 $2.02 \mu\text{m}$, 图 2 (b), (c)

为两种单分散颗粒系(其直径的名义值分别为 $2.02 \mu\text{m}$ 及 $10.14 \mu\text{m}$) 的混合颗粒, 其中图 2(c) 中, $10.14 \mu\text{m}$ 的颗粒的浓度比图 2(b) 中的浓度要大, 这在图中能明显反映。实验中所用的标准颗粒是聚苯乙烯乳胶球, 由我国核工业部第五研究院生产, 编号为 GBW120001 及 GBW120004。实验发现, 本算法对标准颗粒的测量误差小于 10%, 对工业生产中的实际粉末如 Al_2O_3 , MnO 等的测量也表明本算法有很好的测量精度(与显微测量比较)。

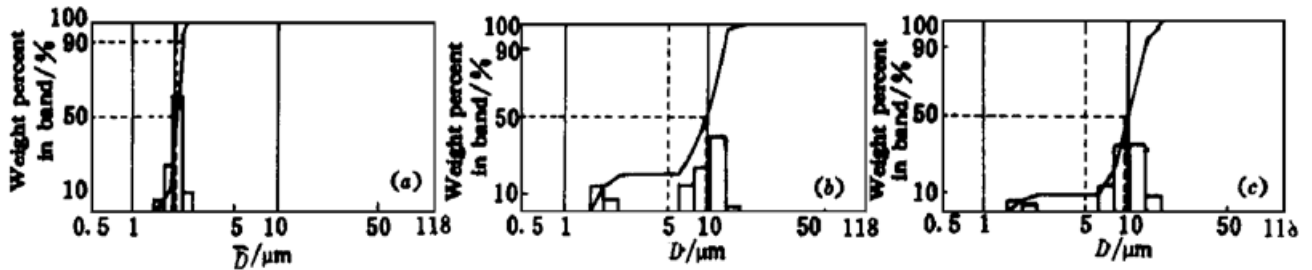


图 2 标准颗粒的实测结果

Fig. 2 Measurement results of standard particles

综上所述, 本文提出的求解单、双峰颗粒尺寸分布的函数限制解法是一种十分有效的新算法, 可以预计, 采用与本文类似的思路, 这一算法也能用于三峰及多峰分布的颗粒系的求解, 从而更好地满足工业生产上的实际测量要求。

参 考 文 献

- 1 D. Lesnic, L. Elliott. A numerical analysis of the data inversion of particle sizing instruments. *J. Aerosol Sci.*, 1996, **27**(7): 1063~ 1082
- 2 Zheng Gang, Zhang Zhiwei, Yu Xianhuang *et al.*. A method for reducing the number of coefficient matrix in laser particle sizer. *Chinese J. Lasers* (中国激光), 1994, **A21**(11): 889~ 892 (in Chinese)
- 3 H. G. Barth. Modern methods of particle size analysis. New York: John Wiley & Sons, 1984, 135~ 170

A New Algorithm for Determining the Bimodel Particle Size Distribution

Zheng Gang Liu Tieying Chen Shanzhong

(Department of Instruments, University of Shanghai for Science & Technology, Shanghai 200093)

Abstract A new algorithm for determining the bimodel particle size distribution is presented in this paper. A number of computer numerical simulations and experimental results demonstrate that the new algorithm is suitable for the determination of the single model and bimodel particle size distributions.

Key words particle size, bimodel distribution, algorithm