

# 激光衍射法测量粒子群窄分布反演优化算法

顾芳<sup>1</sup> 张加宏<sup>2</sup> 刘清倦<sup>2</sup> 李敏<sup>2</sup>

## 摘要

针对激光衍射法中粒子群窄分布反演普遍存在峰位粒径定位不准及峰值偏差较大的问题,提出了一种适合粒子群窄分布的二次分环反演遗传优化算法.大量数值模拟计算结果表明:应用优化算法反演的粒度分布曲线与实际粒度分布曲线的一致性得到显著提高,在1~140  $\mu\text{m}$  量程内,粒子群窄分布的峰值粒径定位准确,与实际值相比差值小于1  $\mu\text{m}$ ,且峰值的精度得到大幅提高,相对误差减小到10%左右.

## 关键词

激光衍射;粒子群窄分布;遗传算法;二次分环

中图分类号 O439

文献标志码 A

收稿日期 2011-09-21

资助项目 国家自然科学基金(41075026);东南大学 MEMS 教育部重点实验室开放研究基金(2009-03;2010-02);公益性行业(气象)科研专项(GYHY200906037);江苏高等优势学科建设工程(传感网与现代气象装备)资助项目

## 作者简介

顾芳,女,博士,讲师,主要从事大气颗粒激光探测及第一性原理电子功能材料设计方面的研究. gfnuist@yahoo.cn

## 0 引言

在医药、电子、建筑、化工及气象环保等领域,存在诸多与颗粒粒度相关的技术问题,尤其是在医药和化工行业,大约有60%的产品呈颗粒状,而这些产品性能与颗粒的尺寸密切相关,因而关于颗粒粒度及其空间分布的测试研究一直受到人们的普遍重视<sup>[1-3]</sup>.目前,粒度分布测量的方法很多,按其工作原理可分为筛分法、显微镜法、沉降法、电感应法、激光衍射法和光子相关光谱法等,其中,激光衍射法因具有测量速度快、精度高、重复性好、测粒范围宽(0.1~3 000  $\mu\text{m}$ )及适于在线测量等优点而得到了广泛应用.

在激光衍射法中,用来表征衍射光强分布与颗粒粒度分布之间关系的是一线性方程组,由于其病态严重,条件数大,很难用常规的算法进行求解.因此,如何选用适当的反演算法对粒度分布进行求解,是激光衍射粒度仪能否准确测量颗粒群粒度分布的关键技术.常用的反演算法分为2大类:第1类是有模式算法,该方法需要知道粒子群的分布形式(如R-R分布、正态分布等)而后反演计算<sup>[4-5]</sup>,但实际很多情况下,预先并不知道被测颗粒群的分布规律,因此这种求解方法受到了很大的限制;第2类是无模式反演算法,其无需对粒子群的分布做任何假定,直接根据颗粒群的衍射光强分布反演粒度分布,主要有积分变换法<sup>[6]</sup>、迭代法<sup>[7]</sup>和正则法<sup>[8]</sup>等,这些方法各有优缺点.最近,文献<sup>[9]</sup>提出了一种无需任何先验信息,基于颗粒粒度极值分布函数的无模式遗传反演算法.该方法具有较好的稳定性、收敛性及抗噪能力,然而,当粒子群是窄分布时,反演的粒度分布普遍存在峰位定位不准、峰值偏差较大的问题(峰位偏差可达十几微米、峰值偏差可达60%以上).针对这一问题,本文通过详细分析光电探测器的分环理论,对粒子群窄分布的反演算法作了相应优化,并利用自编的遗传反演优化算法程序进行数值计算,结果表明反演的峰位和峰值与实际粒子群粒度分布的一致性得到了显著提高.

## 1 激光衍射粒度仪的原理

### 1.1 激光衍射模型方程<sup>[10]</sup>

激光衍射粒度仪的种类很多,但一般来说,它们具有相同的理论基础,即颗粒群产生的散射光符合夫琅和费衍射理论.如果假设测量区中只有一个直径为 $D$ 的球形颗粒,颗粒的衍射光强分布为

1 南京信息工程大学 物理与光电工程学院, 南京,210044

2 南京信息工程大学 电子与信息工程学院, 南京,210044

$$I(\theta) = I_0 \frac{\pi^2 D^4}{16f^2 \lambda^2} \left[ \frac{2J_1(X)}{X} \right]^2, \quad (1)$$

式(1)中,  $I_0$  为平行入射光强度,  $f$  为接收透镜的焦距,  $\lambda$  为激光波长,  $J_1$  为一阶 Bessel 函数,  $X = \frac{\pi D \sin \theta}{\lambda}$ , 其中  $\theta$  为衍射角。

对于激光衍射粒度仪中多元光电探测器的第  $i$  环(设环半径从  $S_i$  到  $S_{i+1}$  对应的衍射角为  $\theta_i$  到  $\theta_{i+1}$ ), 其光能量为

$$E_i = \int_{S_i}^{S_{i+1}} I(\theta) 2\pi S dS, \quad i = 1, 2, \dots, 30. \quad (2)$$

将式(1)代入式(2), 并利用 Bessel 函数的递推公式可得:

$$E_i = I_0 (\pi D^2 / 4) [J_0^2(X_i) + J_1^2(X_i) - J_0^2(X_{i+1}) - J_1^2(X_{i+1})]. \quad (3)$$

其中  $J_0$  为零阶 Bessel 函数。

但事实上, 测量区中的颗粒数往往很多, 并且由许多大小不同的颗粒组成。因此, 若考虑这种情况, 假定直径为  $D_j$  的粒子有  $N_j$  个, 其质量分数为  $W_j$ , 则颗粒群在光电探测器第  $i$  环上的总衍射能量为

$$E_i = \frac{3I_0}{2\rho} \sum_{j=1}^{30} \frac{W_j}{D_j} [J_0^2(X_{i,j}) + J_1^2(X_{i,j}) - J_0^2(X_{i+1,j}) - J_1^2(X_{i+1,j})] = \frac{3I_0}{2\rho} \sum_{j=1}^{30} W_j T_{ij}. \quad (4)$$

式(4)中,  $\rho$  为颗粒密度,  $T_{ij} = (1/D_j) [J_0^2(X_{i,j}) + J_1^2(X_{i,j}) - J_0^2(X_{i+1,j}) - J_1^2(X_{i+1,j})]$ ,  $X_{i,j} = \frac{\pi D_j S_i}{\lambda f}$ 。略去

常数  $\frac{3I_0}{2\rho}$ , 式(4)可写成矩阵形式:

$$\mathbf{E} = \mathbf{T}\mathbf{W}. \quad (5)$$

式(5)中,  $\mathbf{E} = (E_1, E_2, \dots, E_i)^T$ ,  $\mathbf{W} = (W_1, W_2, \dots, W_j)^T$ 。若测量到能量分布  $\mathbf{E}$ , 由式(5)便可计算出对应的颗粒群粒度质量分布  $\mathbf{W}$ 。

## 1.2 光电探测器分环的分析讨论

直径为  $D$  的颗粒在波长为  $\lambda$  的单色平面平行光照射下产生衍射光, 经焦距为  $f$  的傅里叶变换透镜成像在焦平面上, 其强度分布是轴心对称的, 在以透镜焦点为中心, 半径为  $r$  的圆内, 衍射光能量可由(6)式得出:

$$E(r) = \frac{I_0 \pi D^2}{4} [1 - J_0^2(X) - J_1^2(X)]. \quad (6)$$

其中  $X = \frac{\pi D r}{\lambda f}$ 。

令  $d^2 E / dX^2 = 0$ , 则得到微粒衍射极大能量处对

应的值为<sup>[7]</sup>

$$X = \frac{\pi D r}{\lambda f} = 1.357 \approx \frac{\pi D \theta}{\lambda}. \quad (7)$$

式(7)中  $\theta \approx \text{tg } \theta = r/f$  为探测器张角。式(7)表明: 直径为  $D$  的颗粒只对特定的探测器张角  $\theta$  贡献其衍射光能最大值, 且其最大值在焦平面上的位置与颗粒直径  $D$  有关, 因此  $D$  就是张角为  $\theta$  的探测器环的特征直径。颗粒群的衍射光主要来自粒径分布范围内偏大的那部分颗粒, 且大颗粒的衍射光能分布在小衍射角范围内。理论研究表明<sup>[11]</sup>: 不均匀对数分环方法与均匀线性分环方法相比,  $\mathbf{T}$  矩阵具有更好的条件数, 所以绝大多数激光粒度测量仪都是采用不均匀的粒径分档, 如英国 Malvern 公司的激光粒度仪 2200 和 330 等<sup>[12-13]</sup>。因此, 本文采用不均匀对数分环方式对探测器进行分环, 对应粒径通道的特征粒径排布参见表 1。

由表 1 可以看出: 粒径越大, 各粒径通道的上下限粒径间相差越大, 在 50  $\mu\text{m}$  附近, 粒径间隔可达 9.37  $\mu\text{m}$ 。也就是说, 粒径越大, 粒径划分就越粗, 特别当平均粒径大于 20  $\mu\text{m}$  时, 这对大粒径颗粒的测量精度是很不利的。一般来说, 在确定的粒径范围内, 增加探测器分环的数目有利于提高测量精度, 但方程(5)中系数矩阵  $\mathbf{T}$  的条件数和方程解的计算量将急剧增大<sup>[14]</sup>, 这在实际测量中是不可取的。尤其是当分环数超过 30 后, 计算分析表明反演计算结果的精度几乎没有提高<sup>[15]</sup>。因此, 通过增加分环数提高大颗粒的测量精度是不可能的, 必须通过改进反演算法来提高。下面本文将利用基于颗粒粒度极值分布函数的遗传反演优化算法解决该问题。

## 2 粒子群窄分布的二次分环遗传优化算法及数值计算结果

根据上述对探测器分环的分析讨论, 本文提出了一种适合粒子群窄分布的反演遗传优化算法, 并用 Matlab 语言编制了相应的计算程序。

### 2.1 粒子群窄分布的反演遗传算法

遗传算法(GA)是模拟自然界生物进化的过程, 将实际问题的参数进行编码形成染色体, 经选择、交叉和变异等遗传操作, 产生一代比一代更优秀的个体。本文遗传反演算法中, 利用颗粒粒度极值分布函数<sup>[9]</sup>生成解向量  $\mathbf{W}$  的初始群体, 剔除了大量无效解向量, 且在进化过程中采用了保持最优个体策略, 因此可以保证算法收敛于全局最优解。算法的步骤如下。

表1  $f=20\text{ mm}$  时的各个粒径区间Table 1 Size ranges with  $f=20\text{ mm}$ 

环数	下限/ $\mu\text{m}$	上限/ $\mu\text{m}$	$\Delta D/\mu\text{m}$	环数	下限/ $\mu\text{m}$	上限/ $\mu\text{m}$	$\Delta D/\mu\text{m}$
1	117.81	140.17	22.36	16	8.69	10.34	1.65
2	99.02	117.81	18.79	17	7.30	8.69	1.39
3	83.22	99.02	15.80	18	6.14	7.30	1.16
4	69.94	83.22	13.28	19	5.16	6.14	0.98
5	58.78	69.94	11.16	20	4.34	5.16	0.82
6	49.41	58.78	9.37	21	3.64	4.34	0.70
7	41.52	49.41	7.89	22	3.06	3.64	0.58
8	34.90	41.52	6.62	23	2.57	3.06	0.49
9	29.33	34.90	5.57	24	2.16	2.57	0.41
10	24.65	29.33	4.68	25	1.82	2.16	0.34
11	20.72	24.65	3.93	26	1.53	1.82	0.29
12	17.42	20.72	3.30	27	1.28	1.53	0.25
13	14.64	17.42	2.78	28	1.08	1.28	0.20
14	12.30	14.64	2.34	29	0.91	1.08	0.17
15	10.34	12.30	1.96	30	0.76	0.91	0.15

1) 编码和初始群体. 采用实数编码的方式对方程的解向量  $\mathbf{W}$  进行编码, 此编码方式无需进行实数和二进制间的转换, 大大缩短了编码串长度, 有利于提高算法精度.

2) 群体规模. 群体规模直接影响着 GA 的计算效率和进化过程所获得解的质量. 该算法中群体规模采用自适应调节策略<sup>[16]</sup>, 将进化过程分为 3 个阶段, 在进化初期采用较大群体规模, 而在进化中期、后期采用较小群体规模.

3) 适应度函数. 适应度是群体中个体生存机会选择的唯一确定性指标, 直接影响 GA 的收敛速度及能否找到最优解. 本文的适应度函数为

$$F_{\text{fitness}} = \sum_{i=1}^{30} \left( \frac{|E_{mi} - E_{ci}|}{E_{mi}} \right) + \sum_{i=1}^k \left( \frac{|E_{mi} - E_{ci}|}{E_{mi}} \right), \quad (8)$$

其中  $E_{mi}$  为  $i$  环的光能量测量值,  $E_{ci}$  为  $i$  环的光能量计算值,  $k$  为光能量分布的极大值个数.

4) 选择. 根据适应度函数, 采用截断选择算法选择子代, 即选择当前群体中适应度较大的一半个体进入交配池, 截断选择暗含了保持最优个体策略, 因此可以保证算法收敛于全局最优解.

5) 交叉变异. 对交配池中的群体, 随机选择 2 个个体作为父代, 进行交叉、变异操作, 生成子代, 再和选择出的群体组成下一代子群体.

6) 终止条件. 在最大进化代数 500 范围内连续 50 代解向量不变则输出最优解.

## 2.2 粒子群窄分布的二次分环反演计算步骤

1) 利用上述遗传算法对粒子群质量分布  $\mathbf{W}$  进行反演, 当反演结果表明粒子群分布为窄分布时(若遗传反演算法计算出的粒度分布在 5 个粒径档之内且峰值粒径大于  $20\ \mu\text{m}$  时, 即定义为窄分布), 则转入下一步.

2) 将有颗粒分布的粒径通道重新细分, 没有颗粒分布的粒径通道进行合并, 从而保持原有的粒径通道数即探测器环数不变.

3) 重新产生初始群体, 经选择、交叉和变异等遗传操作, 输出最优个体.

按照上述算法, 本文做了大量数值模拟计算, 以 R-R 分布为基础, 则直径为  $D_j$  的粒子所占的质量分数为

$$\mathbf{W}(D_j) = e^{-(D_{ju}/X)^N} - e^{-(D_{jl}/X)^N}. \quad (9)$$

式(9)中  $D_{ju}$  和  $D_{jl}$  分别表示第  $j$  个粒径区间的上下限,  $X$ 、 $N$  分别为颗粒尺寸参数和分布参数.

对给定的  $X$  和  $N$ , 利用式(9)可求出实际的粒度质量分布  $\mathbf{W}$ , 再代入式(4), 即可求出实际的能量分布. 将此能量分布作为能量分布的测量值, 利用遗传算法进行逆向求解粒度质量分布  $\mathbf{W}$ .

## 2.3 数值模拟计算结果分析

算例 1. 尺寸参数  $X=85$ , 分布参数  $N=20$ , 结果如图 1 所示.

算例 2. 尺寸参数  $X_1=50$ ,  $X_2=98$ , 分布参数  $N_1=25$ ,  $N_2=8$ , 结果如图 2 所示.

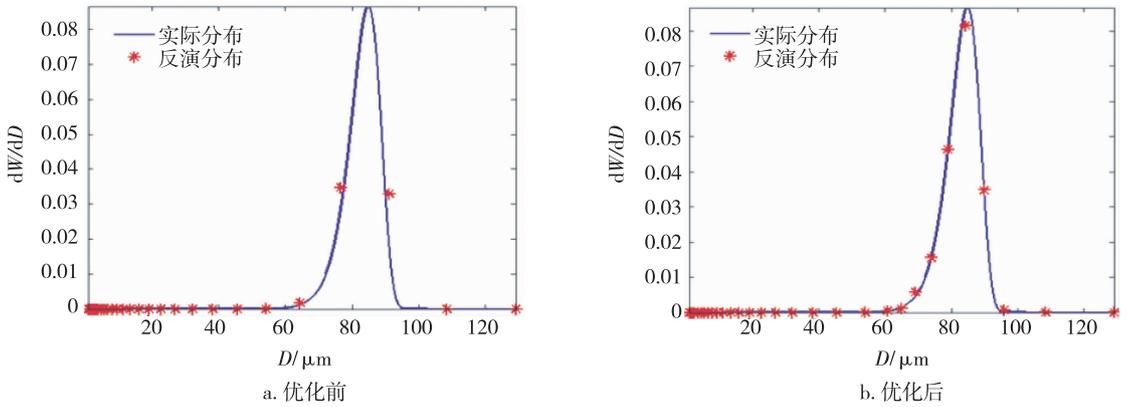


图 1 实际分布与反演分布的比较 ( $X = 85, N = 20$ )

Fig. 1 Comparison between exact distribution and inversion distribution ( $X = 85, N = 20$ )

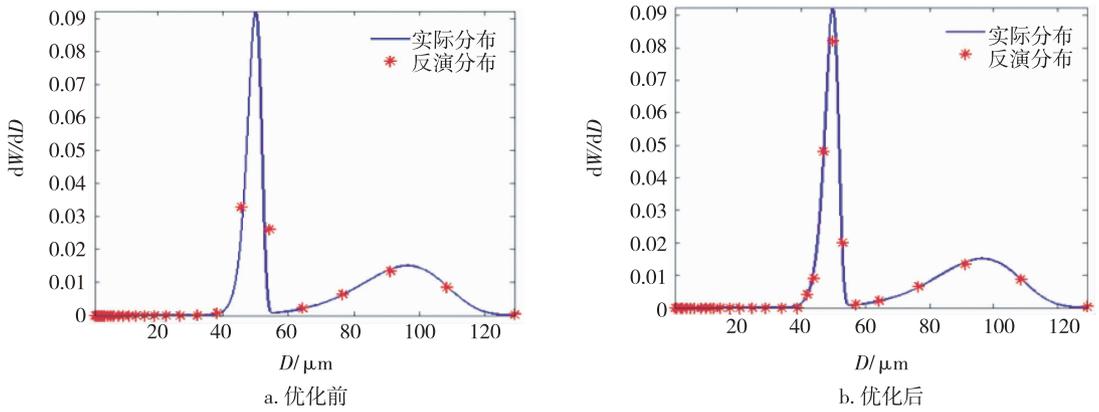


图 2 实际分布与反演分布的比较 ( $X_1 = 50, X_2 = 98; N_1 = 25, N_2 = 8$ )

Fig. 2 Comparison between exact distribution and inversion distribution ( $X_1 = 50, X_2 = 98; N_1 = 25, N_2 = 8$ )

由上面的 2 个算例可以看出:对于较大粒径的窄分布粒子群,由于优化前反演粒度分布在峰位附近的数值点太少,导致反演分布的峰位和峰值与实际值相差都较大.算例 1 中二次分环优化反演前的峰位值与实际值相差约  $20 \mu\text{m}$ ,算例 2 中两者峰位相差  $11 \mu\text{m}$ ,2 个算例的峰位相对误差达 24% 左右,且 2 个算例中优化反演前的峰值和实际峰值相对误差达 60% 左右.经二次分环遗传反演优化后,窄分布

粒子群的粒度分布峰位差值不超过  $1 \mu\text{m}$ ,峰值误差由原来的 60% 减小到 10% 左右.具体结果见表 2.

为总体评价二次分环反演遗传算法的粒度分布与实际粒度分布的吻合程度,引入了粒度相对误差计算公式,计算得到算例 1 和算例 2 的粒度相对误差分别为 1.3% 和 6.2%,表明反演的粒度分布与实际粒度分布之间的吻合程度较好.

表 2 峰值及峰位的反演值与实际值比较

Table 2 Comparison between exact value and inversion value of two samples

算例	实际值		反演值				相对误差/%			
	峰位/ $\mu\text{m}$	峰值	优化前		优化后		优化前		优化后	
			峰位/ $\mu\text{m}$	峰值	峰位/ $\mu\text{m}$	峰值	峰位	峰值	峰位	峰值
算例 1	84.8	0.087	64.4	0.035	84.2	0.082	24.1	59.8	0.7	5.7
算例 2*	49.9	0.092	38.2	0.033	50.0	0.078	23.4	64.1	0.2	15.2

注:算例 2 中峰位指第 1 个峰位,峰值指第 1 个峰值.

$$\text{粒度相对误差} = \frac{\left( \sum_{i=1}^{30} (W_{\text{real},i} - W_{ci})^2 \right)^{1/2}}{\left( \sum_{i=1}^{30} W_{\text{real},i}^2 \right)^{1/2}}. \quad (11)$$

其中  $W_{\text{real},i}$  为  $i$  通道实际的粒度质量分数,  $W_{ci}$  为  $i$  通道反演计算的粒度质量分数.

### 3 结论

激光衍射法粒度分布反演理论模型指出, 不均匀的粒径分档有利于降低系数矩阵  $T$  的条件数, 因此, 实际应用中大多采用不均匀分环的光电探测器. 但是, 当粒子群为窄分布时, 反演的粒度分布普遍存在峰形描述粗糙、峰值粒径及峰值较大误差的问题, 且激光衍射法测量粒度分布不能简单地通过增加探测器环的数目来提高测量精度, 必须通过反演算法的改进来提高. 本文提出了二次分环的遗传反演优化算法并进行了大量的数值计算, 结果表明反演粒度分布与原分布吻合较好. 在  $1 \sim 140 \mu\text{m}$  量程内, 粒子群窄分布的峰值粒径定位准确, 与实际值相比较差值不超过  $1 \mu\text{m}$ , 峰值的大小也十分接近. 本方法可结合 CCD 探测器实现在粒度测量中的应用, 从而进一步提高测量精度.

### 参考文献

#### References

- [ 1 ] 杨依枫, 杨晖, 郑刚, 等. 衍射散射式颗粒粒度测量法的研究新进展[J]. 光学技术, 2011, 37(1): 19-24  
YANG Yifeng, YANG Hui, ZHENG Gang, et al. Progress of particle size measurement by laser diffraction and scattering[J]. Optical Technique, 2011, 37(1): 19-24
- [ 2 ] Gu F, Yang J, Wang C Y, et al. Mass concentration calculation with the pulse height distribution of aerosols and system calibration[J]. International Journal for Light and Electron Optics, 2010, 121(1), 1-10
- [ 3 ] 殷杰, 邓永锋, 徐飞. 激光衍射粒度仪在连云港软土颗粒分析中的应用[J]. 河海大学学报: 自然科学版, 2008, 36(3): 379-383  
YIN Jie, DENG Yongfeng, XU Fei. Application of a laser grain size analyzer in grain analysis of the soft clay in Li-anyungang[J]. Journal of Hohai University: Natural Sciences, 2008, 36(3): 379-383
- [ 4 ] Sun F, Lewis J W L. Simplex deconvolutions of particle-size distribution functions from optical measurements [J]. Applied Optics, 1995, 34(36): 8437-8446
- [ 5 ] 郑刚, 刘铁英, 陈善忠. 求解双峰颗粒尺寸分布的一种新算法[J]. 中国激光, 1998, 25(4): 377-380  
ZHENG Gang, LIU Tiejing, CHEN Shanzhong. A new al-

gorithm for determining the bimodel particle size distribution [J]. Chinese Journal of Lasers, 1998, 25(4): 377-380

- [ 6 ] Koo J H, Hirtleman E D. Synthesis of integral transform solutions for the reconstruction of particle-size distributions from forward-scattered light [J]. Applied Optics, 1992, 31(12): 2130-2140
- [ 7 ] Santer R, Herman M. Particle size distributions from forward scattered light using the Chahine inversion scheme [J]. Applied Optics, 1983, 22(15): 2294-2310
- [ 8 ] Vogel C R. Non-convergence of the  $L$ -curve regularization parameter selection method [J]. Inverse Problems, 1996, 12(4): 535-547
- [ 9 ] 尹吉婷. 基于颗粒粒度极值分布函数的遗传反演算法的研究[D]. 南京: 南京理工大学电子工程与光电技术学院, 2005  
YIN Jiting. The study of inverse genetic algorithm based on the max distribution of the particle size [D]. Nanjing: School of Electronic and Optical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, 2005
- [ 10 ] Barth H G. Modern methods of particle size analysis [M]. Hoboken: John Wiley & Sons, 1984: 137-144
- [ 11 ] Ma Z H. Measurement of particle size and shape by laser light scattering [C] // Netherlands Delft University of Technology, 2001(2): 39-41
- [ 12 ] Hirtleman E D, Oechsle V, Chigier N A. Response characteristics of laser diffraction particle size analysis: Opticle sample volume extent and lens effects [J]. Optical Engineering, 1984, 23(5): 610-619
- [ 13 ] Dodge L G. Calibration of the Malvern particle sizer [J]. Applied Optics, 1984, 23(14): 2415-2419
- [ 14 ] 张传武, 蔺森夫, 王清华, 等. 散射法粒度分布测试中无约束反演的误差分析 [J], 南京工业大学学报: 自然科学版, 2003, 25(4): 73-75  
ZHANG Chuanwu, JIAN Miaofu, WANG Qinghua, et al. Systematic error of inversion analysis under nonrestraint condition with light scattering measurement of particle size distribution [J]. Journal of Nanjing University of Technology: Natural Science Edition, 2003, 25(4): 73-75
- [ 15 ] 沈建琪. 光散射法测粒技术延伸测量下限的研究 [D]. 上海: 上海理工大学理学院, 1999  
SHEN Jianqi. The study of extending the lower limit of particle size by the light scattering method [D]. Shanghai: College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, 1999
- [ 16 ] 李敏强, 寇纪松, 林丹, 等. 遗传算法的基本理论与应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2002: 212-215  
LI Minqiang, KOU Jisong, LIN Dan, et al. The basic theory and application of genetic algorithm [M]. Beijing: Science Press, 2002: 212-215

# Study on inverse optimization algorithm for narrow particle distribution measurement by laser diffraction method

GU Fang<sup>1</sup> ZHANG Jiahong<sup>2</sup> LIU Qingquan<sup>2</sup> LI Min<sup>2</sup>

1 School of Physics and Optoelectronic Engineering, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044

2 School of Electronic and Information Engineering, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044

**Abstract** A second sub-loop genetic optimization algorithm was proposed in order to improve the narrow particle distribution inversion by laser diffraction method, which suffers from inaccurate peak positioning and relatively big deviation in peak value measurement. Numerical simulation results show that the consistency between particle size distribution inversion curve by the second sub-loop genetic optimization algorithm and the actual particle size distribution curve has been significantly improved. In the range from 1  $\mu\text{m}$  to 140  $\mu\text{m}$ , peak positioning of the narrow particle distribution is accurate and the difference with the actual value is decreased to less than 1  $\mu\text{m}$ . Moreover, the precision of peak value is obviously increased and the relative error is reduced to about 10%.

**Key words** laser diffraction; narrow particle distribution; genetic algorithm; second sub-loop