

УДК 53.082.53:004.94

Н.В. Семидетнов

*Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Россия,
190008, Санкт-Петербург, ул. Лоцманская, д. 3, E-mail: n.semidetnov@ans.spb.ru*

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СПЕКТРАЛЬНОГО ОСЛАБЛЕНИЯ МЕТОДОМ ПРИВЕДЕНИЯ К ИНТЕГРАЛУ ФУРЬЕ: ОГРАНИЧЕНИЯ И ПОГРЕШНОСТИ

АННОТАЦИЯ

В работе представлены результаты исследования нового метода решения некорректной обратной задачи применительно к измерению дисперсности методом спектрального ослабления. Исследование выполнено с помощью компьютерного моделирования данных измерения с последующей их обработкой. Выявлены вычислительные проблемы и обсуждаются способы их решения, определены ограничения и погрешности метода.

**ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА, СПЕКТРАЛЬНОЕ ОСЛАБЛЕНИЕ, КОМПЬЮТЕРНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ, ДИСПЕРСНОСТЬ, ПОГРЕШНОСТЬ ИЗМЕРЕНИЯ**

ВВЕДЕНИЕ

Среди возможных методов измерения характеристик дисперсности капельной влаги в проточной части турбины, прежде всего, привлекают внимание оптические методы. Это связано с возможностью реализации мало-возмущающих измерений, трудностью организации доступа к проточной части, а также с высокой потенциальной точностью этих методов. Наибольшее распространение при измерении влажности пара в проточной части получил метод спектрального ослабления излучения. Применение этого метода на практике требует решения некорректной обратной задачи рассеяния. Такие задачи в измерительной технике, особенно в последние годы, встречаются все чаще, что, соответственно, требует разработки методов их решения. Применительно к задаче спектрального ослабления разработано большое число методик обработки данных, которые, однако, во многих случаях способны дать только интегральные характеристики распределения, а закон распределения по размерам или неизвестен или неизвестной остается его достоверность. Применяемые обратные методы базируются, как правило, на использовании метода регуляризации Тихонова [1]. При этом решение некорректной задачи сводится к компромиссу между уменьшением ошибки аппроксимации регуляризирующего оператора и усилением шумов в исходных данных, а полученное решение всегда является приближенным. Прямые методы решения задачи дают устойчивое решение, однако обладают рядом недостатков затрудняющих их использование в рассматриваемом случае. Основная проблема применения этих методов - необходимость задания априорной информации, например, формы распределения, числа мод закона распределения и т.п. и сильная зависимость результата от априорной информации [2].

Сотрудник ЦКТИ им. Ползунова Шустер А.Р., продолжая работу по разработке математического аппарата решения обратной задачи спектрального ослабления [3],

предложил новый способ решения, основанный на приведении исходного уравнения Фредгольма первого рода к интегралу Фурье [4]. Этот способ позволяет получить не только статистические оценки распределения, но и сам закон.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ

Согласно закону Бугера-Ламберта-Бера ослабление излучения интенсивностью I_0 и длиной волны λ , распространяющегося через рассеивающую среду, на расстоянии L , описывается соотношением:

$$I / I_0 = \exp\left\{-\pi L \int_0^{\infty} K(r, \lambda) N(r) r^2 dr\right\}, \quad (1)$$

где $I(r, \lambda)$ – интенсивность света на дистанции L , r – радиус частицы, $N(r)$ – закон распределения частиц по радиусам, а $K(r, \lambda)$ – фактор эффективности ослабления.

При исследовании дисперсности влажного пара ослабление излучения определяется рассеянием, а поглощением обычно пренебрегают в силу его малости. Размеры частиц удобнее выражать в безразмерных единицах относительно длины волны. Параметр $\rho = 2\pi r / \lambda$ носит название относительного размера или Ми-параметра частицы. Далее следуя работе [3] и вводя пространственную частоту $s = 2\pi / \lambda$, получим $\rho = rs$. Используя обозначения $G(s) = \ln(I_0/I) / \pi L$, после деления на s уравнения (1) получим в левой части $g(s) = G(s) / s^2$. Преобразуя правую часть и используя обозначение $k(\rho) = K(\rho) / \rho^2$ уравнение (1) запишем в виде

$$g(s) = \int_0^{\infty} k(\rho) N(r) r^4 dr. \quad (2)$$

После ряда преобразований [4] уравнения приводится к виду прямого преобразования Фурье и применяя обратное преобразование, получаем

$$N(e^p) e^{4p} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(t) / B(t) e^{itp} dt = f(p). \quad (3)$$

Окончательно получим распределение частиц по размерам как

$$N(r) = f(\ln(p)) / r^4. \quad (4)$$

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБРАБОТКА ДАННЫХ

Моделирование «идеального» эксперимента. Исследование нового метода решения любой задачи требует определения его реализуемости и оценки потенциальной и реально достижимой точности. В нашем случае требуется оценить погрешность закона распределения частиц по размерам и его статистических характеристик. Прямой путь решения такой задачи на первом этапе это компьютерное моделирование «идеального» эксперимента и обработка полученных таким образом данных. На следующем этапе компьютерного моделирования представляется возможным выполнить оценку влияния шумов измерений на погрешность оценки закона распределения и его характеристик. В любом случае требуется реализовать на ПК алгоритм вычисления прямой задачи ослабления и алгоритм решения обратной задачи.

Математический базис решения прямой задачи содержится в теории рассеяния. Приближение Релея в нашем случае использовать невозможно, так как диапазон размеров

частиц при конденсации пара в проточной части простирается до нескольких микрометров, а минимальное значение длины волны обычно составляет 0,2 мкм. Это дает относительный размер частицы, достигающий нескольких десятков, что далеко выходит за пределы допустимого для приближения Релея. Таким образом, следует воспользоваться теорией Ми, следствия из которой хорошо документированы в известных работах [5, 6]. Следуя [5] имеем

$$K(\rho) = \frac{2}{\rho^2} \sum_1^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n), \quad (5)$$

где a_n и b_n – амплитудные коэффициенты, n – порядковый номер ряда. Обычно суммирование ограничено конечным числом членов n_{max} . В нашем случае принято $n_{max} \leq \rho + 4\rho^{0.333} + 10$. Формулы для вычисления амплитудных коэффициентов приведены, например, в [7].

Для моделирования экспериментальных данных спектрального ослабления необходимо также выбрать один или несколько типов распределений, модельных законов распределения частиц по размерам, характеристические параметры и диапазон их изменения. Наиболее общеприняты при дисперсионном анализе тонкодисперсных газочапельных сред логнормальное и гамма распределения, которые и приняты в наших расчетах. В качестве исходных характеристических параметров законов выбраны мода и дисперсия распределения, а параметром масштаба – счетная концентрация частиц C_N . Что касается типов распределений, то в профилирующей литературе наиболее часто рассматриваются одно- и бимодальные распределения. С точки зрения пользователя конечный результат измерения дисперсности, кроме функции распределения по размерам принято характеризовать двумя интегральными параметрами – средним радиусом (диаметром) по Заутеру (R_{32}) и объемной концентрацией капельной влаги C_V . Первый является отношением третьего момента распределения ко второму, а объемная концентрация – производная от третьего момента:

$$R_{32} = \frac{\int_{R_{min}}^{R_{max}} N(r)r^3 dr}{\int_{R_{min}}^{R_{max}} N(r)r^2 dr} \quad \text{и} \quad C_V = \frac{4\pi}{3} \int_{R_{min}}^{R_{max}} N(r)r^3 dr.$$

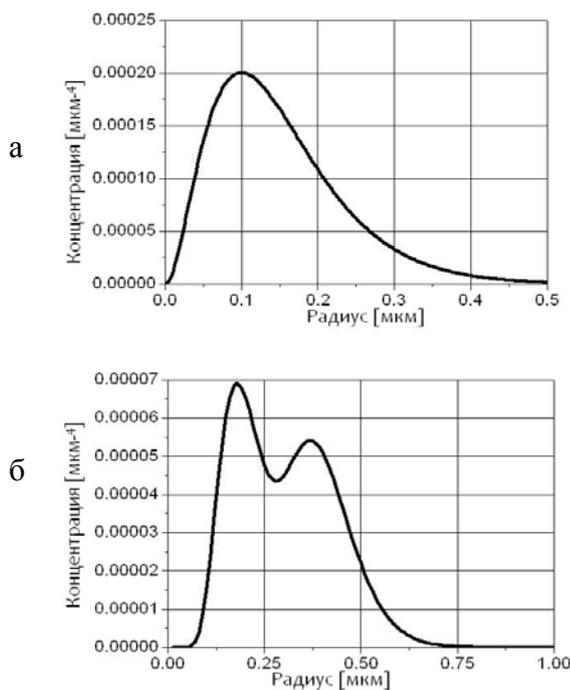


Рис. 1. Модельные распределения, а – Гаусса, б – логнормальное бимодальное

Интенсивное исследование предполагает варьирование типов и видов распределений и их параметров в широком диапазоне, решение прямой задачи, то есть вычисление спектрального ослабления, обработку данных в соответствии с представленной методикой и сравнение результирующих и исходных данных с определением погрешности расчета. Для исследования алгоритмов и их реализаций разработана исследовательская программа, включающая несколько программных модулей: модуль задания исходных распределений и вычисления зависимости ослабления от длины волны, модуль обработки, модуль представления и записи результатов. На Рис. 1 в качестве примеры представлены тестовые распределения, использованные для расчета прямой задачи.

На Рис. 2 приведена расчетная зависимость спектрального ослабления для распределения Рис. 1б, а на Рис. 3 – результат преобразования Фурье по формуле (3). Первые тестовые расчеты

позволили обнаружить ряд проблем, затрудняющих получение адекватного результирующего закона распределения частиц по размерам. Основная проблема получения достоверного решения связана с наличием колебаний небольшой величины значений характеристической кривой Nr^4 , которые далее приводят к очень большим по амплитуде осцилляциям закона распределения. Другая проблема связана с ограничением спектрального диапазона измерения ослабления на практике.

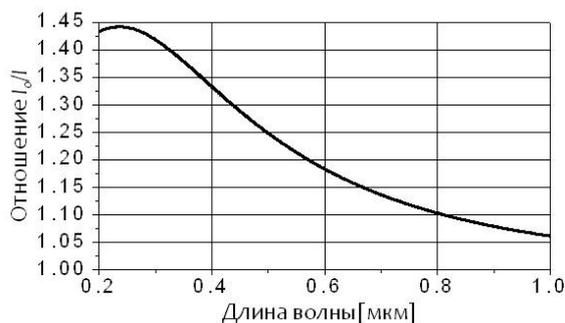


Рис. 2. Результаты «эксперимента»

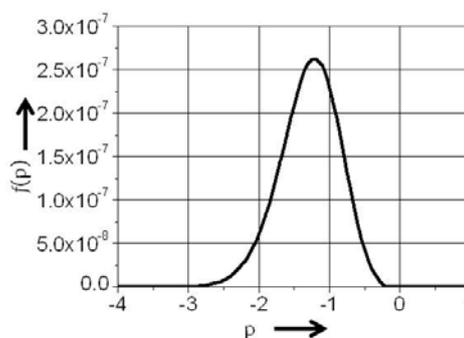


Рис. 3. Зависимость $f(p)$

Исследование путей устранения осцилляций. Анализ алгоритма вычислений показал, что возможными причинами появления осцилляций функции $f(p)$ может быть большое число факторов. Во-первых, при решении прямой задачи, которая дает исходные «экспериментальные» данные, выполняется численное интегрирование в соответствии с (1). Численным интегрирование всегда приводит к появлению некоторой погрешности. Во-вторых, интегральное преобразование Фурье, которое также реализуется численно, добавляет погрешности конечному результату. Можно перечислить еще ряд факторов, таких как: ограниченная точность вычислений в ЭВМ, дискретный характер решения прямой задачи по теории Ми (разложение на конечное число волн), дискретность описания ослабления с учетом ограниченного числа значений длин волн, конечный диапазон длин волн. Для решения проблемы было предпринято исследование влияния различных факторов на появление осцилляций. Так, например, применялись формулы интегрирования различной степени точности, варьировалась величина шага интегрирования, применялось представление числовых величин с различной точностью, вплоть до максимальной возможной, и другие меры направленные на выявление источника колебаний. Выполненные исследования возможного влияния перечисленных факторов не выявили одну или несколько конкретных причин, вызывающих указанные колебания и показали, что первопричину осцилляций устранить невозможно. В связи с этим в модуле обработки данных использована сглаживающая аппроксимация.

Выбор способа и этапа вычислений, на котором применяется аппроксимация, базируется на результатах выполненных исследований и тестовых расчетов. Эти работы позволили рекомендовать применение комбинированной аппроксимации, так что на одних участках зависимости используется сглаживание регрессионным сплайном, а на других – функцией Гаусса.

На Рис. 4 приведены результаты восстановления исходного распределения частиц по размерам с модальным радиусом 0,1 мкм и дисперсией при счетной концентрации частиц $C_N=3,7 \cdot 10^{-5}$ [мкм⁻³]. При этом расчетный радиус по Заутеру равен $R_{32}=0,25$ мкм, а объемная концентрация влаги - $C_V= 1,16 \cdot 10^{-6}$. Графики относительной погрешности заутеровского радиуса и объемной концентрации в зависимости от модального радиуса распределения приведены на Рис. 5. Приведенные на рисунках 4 и 5 результаты получены при моделировании спектрального ослабления в диапазоне длин волн 0,02 ÷ 2,0 мкм.

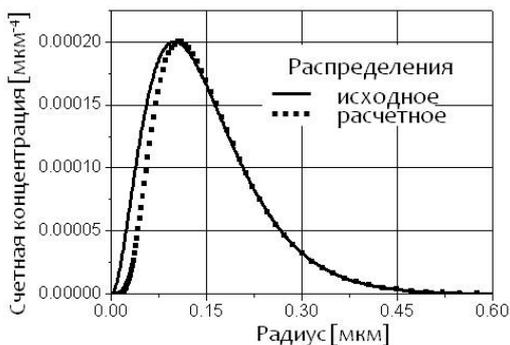


Рис. 4. Исходный и расчетный законы распределения 8по размерам

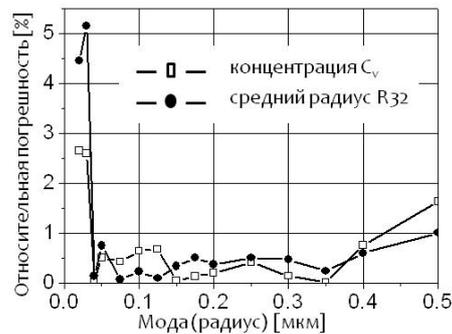


Рис. 5. Погрешности интегральных оценок распределений

Измерения в ограниченном диапазоне длин волн. Реальный эксперимент отличается от идеального (компьютерного) в первую очередь ограниченным спектральным диапазоном в котором осуществляется измерение коэффициента ослабления I/I_0 . В настоящее время, судя по работам ряда авторов [8], реальный диапазон длин волн ограничивается значениями $0,2 \div 1,0$ мкм. Ограничение диапазона длин волн в коротковолновой зоне приводит к искажениям закона распределения по размерам и значительным погрешностям, как закона распределения, так и его интегральных характеристик. В ряде случаев при уменьшении радиуса частицы распределение устремляется в бесконечность. Влияние ограничения с длинноволновой стороны спектра также приводит к увеличению погрешности, однако искажения закона не столь существенны. К сожалению, ограничение диапазона длин волн на практике это объективная реальность, поэтому следует попытаться найти способ коррекции ошибок результата. Коррекция может применяться к промежуточным или конечным результатам расчета и основываться на различных критериях. В результате выполненных исследований установлено, что наилучшие результаты на этапе промежуточных вычислений дает коррекция функции $f(p)$, а критерием может служить отклонение полученной зависимости от типовой. На заключительном этапе расчетов целесообразно использовать коррекцию величины счетной концентрации частиц, используя в качестве контрольного критерия невязку расчетной и экспериментальной зависимостей спектрального ослабления.

На основе этих положений разработана программа обработки данных спектрального ослабления в диапазоне длин волн $0,2 \div 1,0$ мкм с представлением результата расчета в виде закона распределения по радиусу и значений его статистических характеристик. Результаты тестирования программы при обработке одномодальных распределений в виде значений объемной концентрации частиц и относительных погрешностей среднего по Заутеру радиуса приведены на Рис. 6.

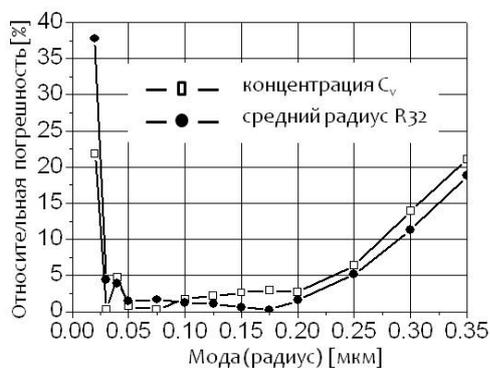


Рис. 6. Погрешность измерения интегральных характеристик (диапазон 0,2 – 1 мкм)

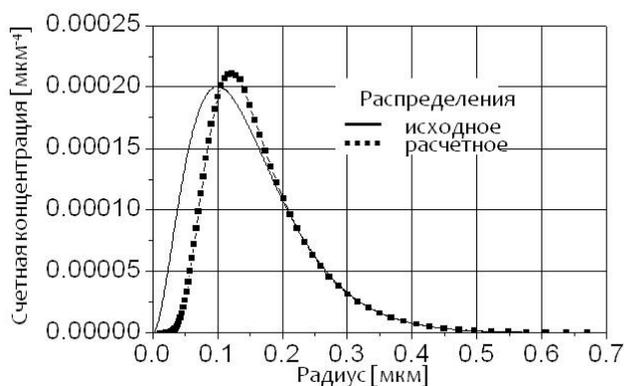


Рис. 7. Расчетное и исходное распределения (диапазон 0,2 – 1 мкм)

Видно, что погрешности измерения интегральных параметров в зоне модальных радиусов $0,03 \div 0,25$ мкм не превышает 5%. Увеличение погрешностей за пределами указанного диапазона со стороны коротких волн вызвано недостаточной коррекцией. В то же время большая коррекция опасна, так как может привести к нереальным значениям. В длинноволновой части спектра в настоящее время коррекция не применяется, и ее применение требует дополнительных исследований.

Погрешности измерений бимодальных законов зависят от типа распределения. При близких значениях объемных концентраций в модах погрешность практически не отличается от погрешности одномодальных распределений с близкими параметрами. Если вклад в объемную концентрацию вносится в основном грубодисперсной модой, то именно эта мода определяет погрешность измерения интегральных характеристик.

Расчетный закон распределения для одномодальных и бимодальных распределений с близкими модами в целом хорошо соответствует реальному закону, но наблюдается небольшая недооценка мелкодисперсной фазы распределения (Рис. 6). Если вклад в объемную концентрацию грубодисперсной моды на порядок превышает вклад мелкодисперсной, то максимум распределения, соответствующий мелкодисперсной моде при расчете не обнаруживается, так как ее вклад маскируется грубодисперсной модой.

Моделирование реального эксперимента со спектрометром высокого разрешения. В настоящее время при измерениях спектральной прозрачности широко применяются современные компактные спектрометры, работающие на линии связи с ЭВМ. Эти приборы могут использоваться для измерения отражения, поглощения, пропускания, освещенности и позволяют производить спектральный анализ с высоким разрешением. Например, прибор HR2000+ES фирмы Ocean optics [8] работает в диапазоне 200-1100 нм, обеспечивая оптическое разрешение до $\sim 1,33$ нм и регистрацию до 2048 линий. Спектрометр подключается к ПК через интерфейс USB 2.0.

Практическое применение подобного прибора требует проведения ряда дополнительных исследований, оптимизирующих практическое использование прибора и программного обеспечения обработки данных. Следует отметить, прежде всего, проблему наличия приборных погрешностей, вызванных как конечными характеристиками точности собственно прибора, так и влиянием внешних шумов и наводок. Погрешности оптической части измерительного аппарата, связанные с появлением водяных пленок на оптике, нестабильностью взаимного положения излучающей и приемной частей зонда, изменением потерь в волоконных световодах и подобные им здесь не рассматриваются.

К сожалению, технические характеристики спектрометров, даже в полной комплектации, очень редко содержат данные о нормируемой погрешности измерений. Поэтому представляется целесообразным выполнить общую оценку устойчивости программного обеспечения обработки данных к шумам измерения. Для решения этой задачи в программном модуле вычисления данных «эксперимента» обеспечена возможность задания интенсивности шумов измерения. Помехи и погрешности измерений учитываются случайным разбросом результатов измерения по нормальному закону.

Другая проблема связана с большим объемом информации на входе подсистемы обработки данных. Обеспечение работы системы в реальном времени требует оценки возможности и степени сжатия исходных данных допустимой с точки зрения погрешности измерения.

Для решения этих задач разработан дополнительный программный модуль предварительной обработки данных, которая имеет целью сокращение объема данных и ослабление влияния помех. Оператору предоставлена возможность ограничить спектральный диапазон данных, выполнить прореживание и сглаживание методом скользящего окна, уменьшить влияние случайного разброса сплайн-аппроксимацией. На Рис. 7а представлена «экспериментальная» зависимость спектрального ослабления с учетом помех и шумов, а на

Рис. 7б – графическая иллюстрация процедуры предварительной обработки данных. Сначала применено осреднение методом скользящего окна. При этом уменьшено количество точек и их разброс. На втором этапе использована сглаживающая аппроксимация регрессионным сплайном.

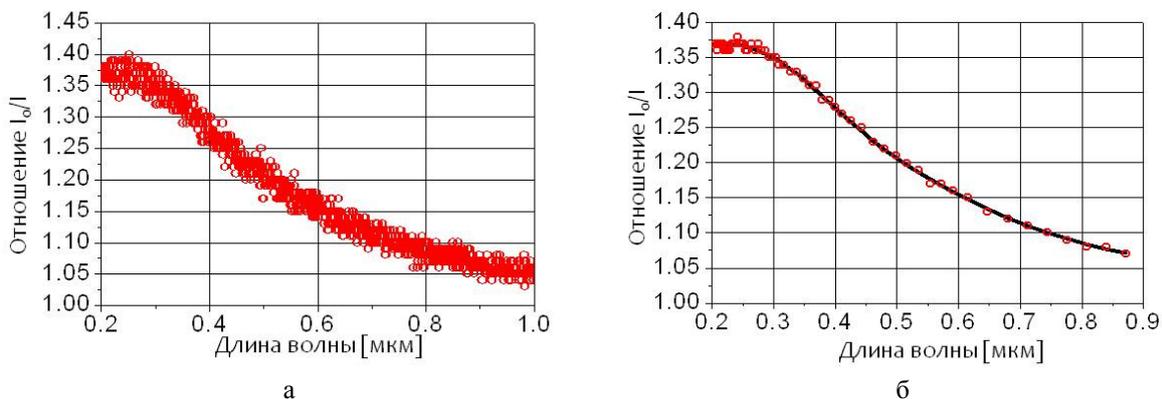


Рис. 8. Моделирование реального эксперимента: а – влияние наводок и шумов измерений, б – предварительная обработка данных

Исследование влияния погрешностей измерения показали, что в общем случае погрешности возрастают существенно, и результат в сильной степени зависит от параметров предварительной обработки: диапазона длин волн, числа узлов исходной функции и степени сглаживания. Расчетное распределение по размерам удовлетворительно описывает исходное. На Рис. 8а представлены результирующие погрешности оценки объемной концентрации и среднего заутеровского радиуса, а на Рис. 8б – действительное и измеренное распределение частиц по размерам.

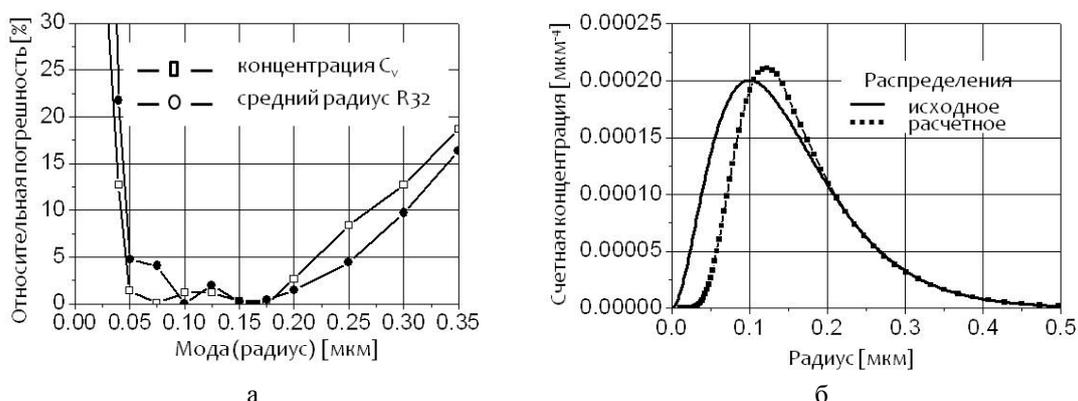


Рис. 9. Влияние погрешности измерения, а – погрешности интегральных оценок, б – исходный и расчетный законы распределения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненные исследования метода приведения к интегралу Фурье в приложении к обратной задаче спектрального ослабления показали возможность его применения и достаточно высокую эффективность разработанной методики и программного обеспечения. Метод принципиально является точным, однако при существующих на практике ограничениях спектрального диапазона измерений, имеется погрешность измерений. Тем не менее, можно заключить, что применение метода обеспечивает удовлетворительную точность восстановления закона распределения и его интегральных характеристик применительно к одномодальным и некоторым бимодальным распределениям. К недостаткам метода можно отнести недооценку в ряде случаев мелкодисперсной фракции, что, однако, мало сказывается на статистических характеристиках. Кроме того, в случае

бимодального распределения метод не способен обнаружить мелкодисперсную моду распределения на фоне грубодисперсной, если объемная концентрация определяется исключительно грубодисперсной модой.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает благодарность Фельдбергу Л.А., который инициировал эту работу и принимал активное участие в обсуждении ее хода, а также организации ООО «Альстом», которая выступила спонсором этих исследований. Кроме того, очевидно, что работа не могла состояться без поддержки А.Р. Шустера, который не только разработал сам метод, но и участвовал в обсуждении проблематики его программной реализации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.** Методы решения некорректных задач. –М: Наука, 1986.- С.287
2. **Riefler, N., T. Wriedt** Intercomparison of Inversion Algorithms for Particle-Sizing Using Mie Scattering. // Particle & Particle Systems Characterization. -25(3), 2008. - P. 216-230.
3. **Терентьев А.В., Фельдберг Л.А., Шустер А.Р.** Измерение объемной концентрации диспергированной фазы методом спектральной прозрачности. - В сб. «Оптические методы исследований потоков»: Труды VIII международной научно-технической конференции / под ред. Ю.Н. Дубнищева, Б.С. Ринкевичюса.- М.: Издательство МЭИ, 2005. С.37-40
4. **Л.А.Фельдберг, Н.В. Семидетнов, А.В. Терентьев, А.Р. Шустер** Измерение фракционного состава высокодисперсного газочапельного потока в экспериментальной турбине // Публикуется в настоящем сборнике
5. **Шифрин К.С.** Рассеяние света в мутной среде, - ГИТТЛ: Москва/Ленинград, 1951. С.288
6. **Хюлст Г. ван де** Рассеяние света малыми частицами. — Москва: Издательство иностранной литературы, 1961. С.537
7. **Kerker M.** The scattering of light and other electromagnetic radiation. -New York: Academic, 1969. -P.666.
8. **Kleitz A, Dorey J. M.** Instrumentation for wet steam. // Proceedings of the Institution of mechanical Engineering, Vol. 218 Part C: Journal Mechanical Engineering Science
9. <http://oceanoptics.ru/spectrometers/237-hr2000es.html>

N.V. Semidetnov

*Saint-Petersburg State Marine Technical University, Russia,
190008, Saint-Petersburg, ul. Lotsmanskaja 3, E-mail: n.semidetnov@ans.spb.ru*

SOLUTION FOR THE INVERSE PROBLEM OF THE SPECTRAL EXTINCTION MEASUREMENT TECHNIQUES BY THE REDUCTION TO FOURIER INTEGRAL: LIMITATIONS AND AMBIGUITIES

New method to solve the spectral extinction inverse problem is studied and results are presented. The work is carried out through the computer simulation of the extinction data for the predefined particle size distribution followed by the data processing. Computational problems are found and possible solutions are discussed. Limitations of the method and developed code as well as ambiguities are quantified.

INVERSE PROBLEM, SPECTRAL EXTINCTION, COMPUTER SIMULATION, DISPERSITY, MEASUREMENT AMBIGUITY