

ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ МЕТОД ОПТИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ РОЗМІРІВ МІКРОЧАСТИНОК

© Гетьман Василь, 2001

Описано нові принципи побудови оптоелектронного приладу для визначення розмірного розподілу мікрочастинок у дисперсних середовищах. Зменшення похибки досягається математичною обробкою результатів вимірювань для сукупності частинок. Розмірний розподіл визначається розв'язуванням системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Запропоновано новий спосіб розв'язання погано обумовлених систем. На модельному прикладі показано переваги способу порівняно з методом регуляризації Тіхонова.

The new principles of build-up of an optoelectronic device for definition of dimensional allocation of microparticles in dispersion mediums are circumscribed. The diminution of an error is reached by mathematical handling of observed datas for many particles. The dimensional allocation is defined by a solution of a system of the linear algebraic equations. The new mode of a solution of the badly stipulated systems is offered.. On a model example is rotined advantages of a mode in matching with a method of a Tikhonov regularization.

В електронній, фармацевтичній промисловостях, у системах моніторингу застосовують оптоелектронні прилади й давачі контролю вмісту мікрочастинок у рідинах та газах [1, 2]. Серед них найбільш поширені прилади, у яких розміри мікрочастинок визначаються за інтенсивністю світла, розсіяного частинками, що перетинають у потоці досліджуваного середовища освітлену зону реєстрації. Прилади попередньо калібрують стандартними сферичними монодисперсними частинками. Розмір мікрочастинки визначається за амплітудою електричного імпульсу, що виробляється фотоприймачем. Для правильної роботи приладу повинна бути однозначна відповідність між розміром частинки та амплітудою імпульсів на виході фотоприймача. Нерівномірність освітлення зони реєстрації, вплив шумів на амплітуду сигналу та інші фактори порушують цю умову, що призводить до похибок вимірювання. Існують методи зменшення цієї похибки, які, як правило, значно ускладнюють прилад.

Одним із способів часткового усунення цього та інших недоліків є обробка результатів вимірювань для сукупності частинок. Характеристикою, за якою визначають розмірний розподіл, приймаємо залежність кількості зареєстрованих частинок від амплітуди електричних імпульсів на виході фотоприймача, яка будується за таким алгоритмом. Діапазон амплітуд електричних імпульсів $[U_{\min}, U_{\max}]$ розбивається на m частин $[U_{\min}, U_1], \dots, [U_{l-1}, U_l], \dots, [U_{m-1}, U_{\max}]$. Протягом часу замірювання підраховуються частинки, яким відповідают електричні імпульси з амплітудами, що потрапляють у відповідний піддіапазон. Отримуємо набір чисел $N_i, i = 1, m$. Знаходимо нормовані значення y_i за формулами

$$y_i = \frac{N_i}{\sum_{i=1}^m N_i}, \quad i = 1, m. \quad (1)$$

Отриманий m – вимірний вектор Y , компонентами якого є числа y_i , є характеристикою сукупності частинок, які знаходяться в середовищі. Це означає, що при проведенні замірювань з однією пробой, отримані розподіли амплітуд електричних імпульсів збігаються у межах статистичних похибок.

Розглянемо визначення розподілу частинок за розмірами, використовуючи Y . Розбиваємо заданий діапазон розмірів частинок $[d_{\min}, d_{\max}]$ на задані n піддіапазонів $[d_{\min}, d_1[, \dots, [d_{l-1}, d_l[, \dots, [d_{n-1}, d_{\max}[$. Послідовно вимірюємо вектори Y для суспензій, які складаються з однакових частинок із розмірами $d_1, d_2, \dots, d_{\max}$. Позначимо i – ту компоненту вектора Y для j – го розміру a_{ij} . Отримані результати можна записати у вигляді $m \times n$ матриці з компонентами a_{ij} , $i = 1, m$, $j = 1, n$.

Визначення розподілу будемо проводити згідно з гіпотезою, що в контрольованому середовищі знаходиться суміш частинок із розмірами $d_1, d_2, \dots, d_{\max}$. Позначимо $K_1, K_2, \dots, K_n$ кількість таких частинок, які зареєстровані приладом. Розглянемо детальніше частинки з розміром d_j . Їх загальна кількість дорівнює K_j . Визначимо, скільком із них відповідає амплітуда електричних імпульсів, із підінтервалу $[U_{i-1}, U_i[$. Для них справедливі вищевикладені міркування. Кількість таких частинок, яку позначимо K_{ij} , визначається зі співвідношення

$$K_{ij} = a_{ij} K_j. \quad (2)$$

Позначимо N_i – кількість частинок середовища, амплітуда імпульсів від яких потрапляє в підінтервал $[U_{i-1}, U_i]$. Її визначимо зі співвідношення

$$N_i = \sum_{j=1}^n K_{ij}. \quad (3)$$

Враховуючи (2), запишемо (3) у вигляді

$$N_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} K_j. \quad (4)$$

Поділимо обидві частини рівняння (4) на сумарну кількість частинок, які пройшли через зону реєстрації $N = \sum_{s=1}^m N_s$. Отримуємо

$$\frac{N_i}{\sum_{s=1}^m N_s} = \sum_{j=1}^n a_{ij} \frac{K_j}{\sum_{s=1}^m N_s}. \quad (5)$$

Враховуючи (1), та, позначивши $x_j = \frac{K_j}{\sum_{s=1}^m N_s}$ – відносна частка частинок, розміри яких

потрапляють у вибраний підінтервал, запишемо (5) у вигляді

$$y_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j. \quad (6)$$

Такі самі співвідношення можна записати і для всіх m підінтервалів напруг. При $m = n$ отримуємо квадратну систему рівнянь.

Отже, у межах прийнятої моделі, задача визначення розмірного розподілу зводиться до розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Для розв'язування таких задач необхідно застосовувати спеціальні методи. Пропонується метод, який дає кращі наближення до правильного результату, ніж відомі дотепер.

Розглянемо систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$Ax = y, \quad (7)$$

де A – матриця з елементами a_{ij} , $A = \{a_{ij}\}$, x – шуканий вектор із координатами x_j , $x = \{x_j\}$. y – відомий вектор із координатами y_j , $y = \{y_j\}$, $i, j = 1, \dots, n$. У випадку матриці з відмінним від нуля визначником, така задача є математично коректною, тобто існує її єдиний розв'язок, який неперервно залежить від вхідних даних. Його можна записати у вигляді

$$x = A^{-1}y. \quad (8)$$

Коректність математичної задачі ще не означає, що отриманий результат відповідає тим вимогам, які ставляться до шуканої величини. Справді, у практичних задачах права частина y та елементи матриці A відомі наближено. У такому разі ми маємо справу з іншою системою

$$\bar{A}x = \bar{y}, \quad (9)$$

такою, що $\|\bar{A} - A\| \leq \varepsilon$, $\|\bar{y} - y\| \leq \lambda$, де ε і λ характеризують точність матриці та правої частини відповідно, вигляд норми визначається характером задачі. Далі будемо розглядати системи, в яких матриця задана точно: $\varepsilon = 0$, приблизно задана лише права частина, а норма

вектора $z = \{z_j\}$, $j = 1, \dots, n$ визначається співвідношенням $\|z\| = \left(\sum_{j=1}^n z_j^2 \right)^{\frac{1}{2}}$. Нехай $\bar{x} = A^{-1}\bar{y}$,

$\delta x = \bar{x} - x$, $\delta y = \bar{y} - y$. Тоді справедливе співвідношення

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq M(A) \frac{\|\delta y\|}{\|y\|},$$

де $M(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ – число обумовленості матриці [3]. При великому числі обумовленості, похибки розв'язку, зумовлені похибками даних, настільки спотворюють результат, що його не можна трактувати в межах фізичної інтерпретації величини, яка вимірюється.

Для часткового усунення цього недоліку розроблено методи наближеного пошуку розв'язків системи (7), які більш точно відповідають нашим апріорним уявленням. Простим у застосуванні та обґрунтованим із математичного погляду є метод регуляризації Тіхонова [4].

Метод регуляризації стосовно (7) полягає у відшуванні вектора $\bar{x}^{-\alpha}$, що мінімізує функціонал

$$L^{\alpha} = \|Ax - y\|^2 + \alpha\Omega(x) \quad (10)$$

де $\Omega(x)$ – регуляризуючий функціонал, вигляд якого визначається умовами, за якими вибирається розв’язок, $\alpha > 0$ – параметр регуляризації. За умови мінімуму норми розв’язку функціонал має вигляд $\Omega(x) = \|x\|^2$. Пошук вектора, який мінімізує (10), еквівалентний розв’язуванню системи лінійних рівнянь [2]

$$(A' A + \alpha I)x = A' y, \quad (11)$$

де I – одинична матриця, A' – транспонована матриця A .

Цей метод поряд із перевагами має істотний недолік. При α , вибраному за методом нев’язки [4], розв’язок виходить дуже згладженим, маскуються тонкі його особливості. У багатьох задачах апіорно задана невід’ємність результату, що ускладнює розв’язування. Для збереження переваг методу регуляризації і суттєвого зменшення його недоліків пропонується така процедура пошуку наближеного розв’язку задач вигляду (7).

Виберемо регуляризуючий функціонал у вигляді

$$\Omega(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (x_i - x_j)^2. \quad (12)$$

Задача (10) при регуляризуючому функціоналі (12) зводиться до розв’язування системи рівнянь

$$(A' A + \alpha U)x = A' b, \quad (13)$$

де $U = n\alpha I - \alpha O$, де O – матриця, елементами якої є одиниці, $o_{ij} = 1$, $i, j = 1, \dots, n$. Тоді (13) можна переписати у вигляді

$$x = (A' A + \alpha U)^{-1} A' b \quad (14)$$

Пропонується метод побудови наближеного розв’язку (7). Позначимо $x^{1\alpha}$ – результат (14) для такого значення параметра регуляризації α , при якому розв’язок знаходиться в межах заданих апіорних обмежень (наприклад, задовольняє умову невід’ємності).

Позначимо

$$D^1 = \text{diag}(x^{1\alpha}).$$

Пропонується обчислювати таке наближення у вигляді

$$x^{2\alpha} = D^1 (A' A D^1 + \alpha U)^{-1} A' b. \quad (15)$$

Зауважимо, що при $\alpha = 0$ (15) зводиться до (8).

Аналогічно проводяться наступні ітерації. На $k+1$ -му кроці отримуємо

$$x^{k+1\alpha} = D^k (A' A D^k + \alpha U)^{-1} A' b, \quad (16)$$

де $D^k = \text{diag}(x^{k\alpha})$, $x^{k\alpha}$ – вектор, отриманий на k -му кроці.

Пропонований метод продемонструємо модельним прикладом для системи рівнянь 30-го порядку. Задамо точне значення вектора x такими виразами для його компонент: $x_i = e^{-0.5(i-10)^2} + e^{-0.5(i-20)^2}$, $i = 1, 30$, а компоненти матриці A задамо формулами

$$a_{ij} = \frac{\ln(j+1)}{4n^2} \left(1 - \left(\frac{\text{abs}(i-j)}{29} \right)^{1,95} \right), \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Число обумовленості цієї матриці $M(A) = 1,4 \cdot 10^6$. Точні значення компонент вектора y отримуємо, підставивши x та A в (7). Компоненти вектора $\bar{y}$, який приймемо за наближення до точного значення y , задамо виразами $\bar{y}_i = y_i(1 + \theta_i)$, $i = 1, \dots, n$, де компоненти вектора похибки θ – випадкові числа, рівномірно розподілені в інтервалі $[-5 \cdot 10^{-6}; 5 \cdot 10^{-6}]$. Відповідний вектор $\bar{x}$ знаходимо розв’язуванням (9). Графіки x та $\bar{x}$ показані на рис. 1. Отримані вектори суттєво відрізняються між собою, що є проявом великого числа обумовленості матриці A .

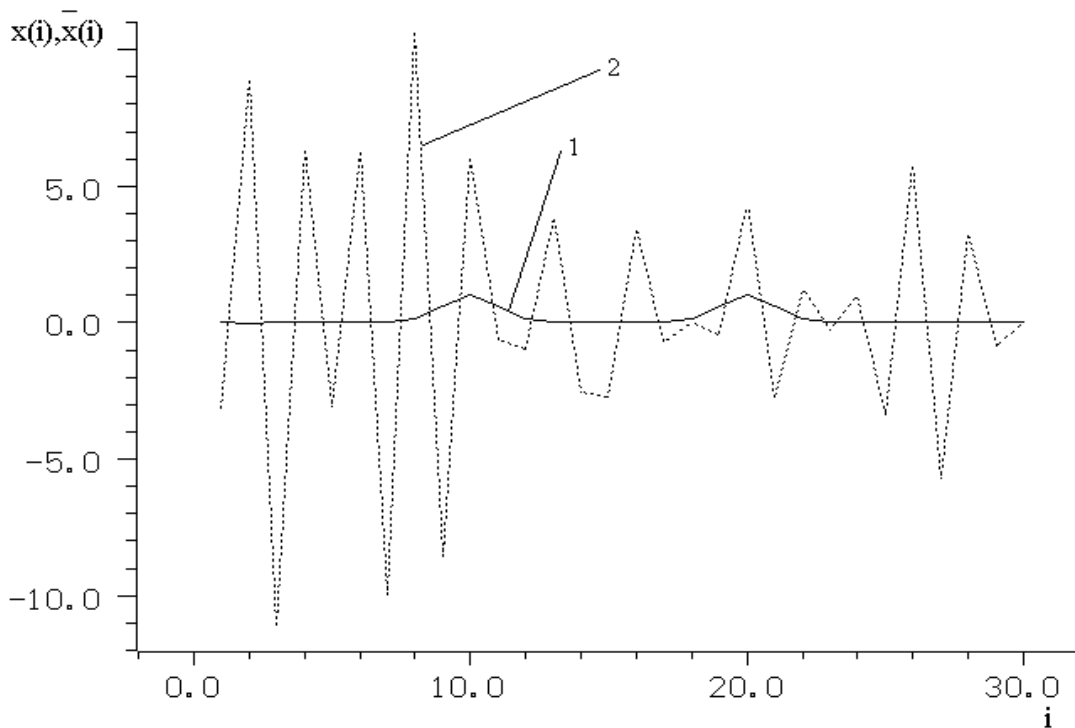


Рис 1. 1 – заданий вектор; 2 – розв'язок рівняння (9).

Порівняємо наближення до відомого вектора, отримані методом регуляризації та пропонуваним методом. Найкращими наближеннями вважатимемо такі, для яких норма відстані від отриманого розв'язку до заданого вектора найменша. Пошук найкращого наближення для методу регуляризації проводимо, розв'язуючи систему (12) для різних значень параметра α . З отриманих результатів вибираємо той, який забезпечує мінімум норми різниці між заданим вектором і отриманим розв'язком.

Для початкового наближення y пропонуваному методі вибираємо параметр регуляризації, при якому розв'язок, отриманий після першої ітерації, задовольняє умову невід'ємності. Кількість ітерацій вибираємо згідно з вищеописаним критерієм. На рис. 2 зображена залежність норми різниці між розв'язком, отриманим методом регуляризації, та модельним розподілом, від параметра регуляризації. На рис. 3 представлена аналогічна залежність від

кількості ітерацій для пропонованого методу. Норма відхилення для пропонованого методу становить 0,28, тоді як для методу регуляризації – 0,88.

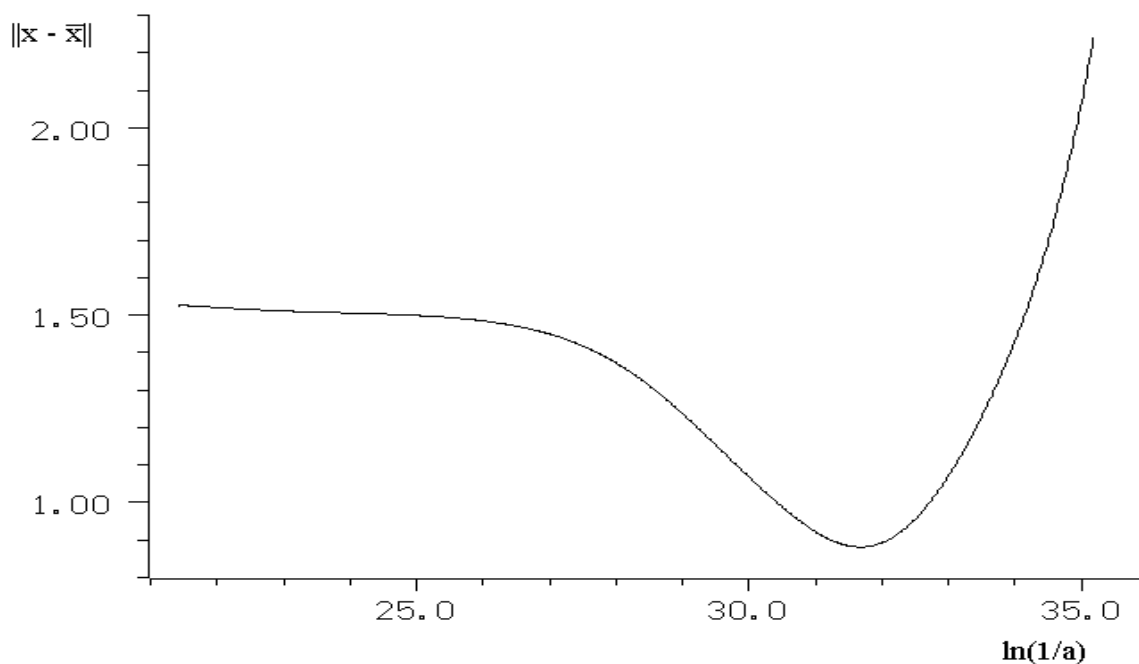


Рис. 2. Залежність норми відхилення розв'язку, отриманого методом регуляризації, від параметра регуляризації

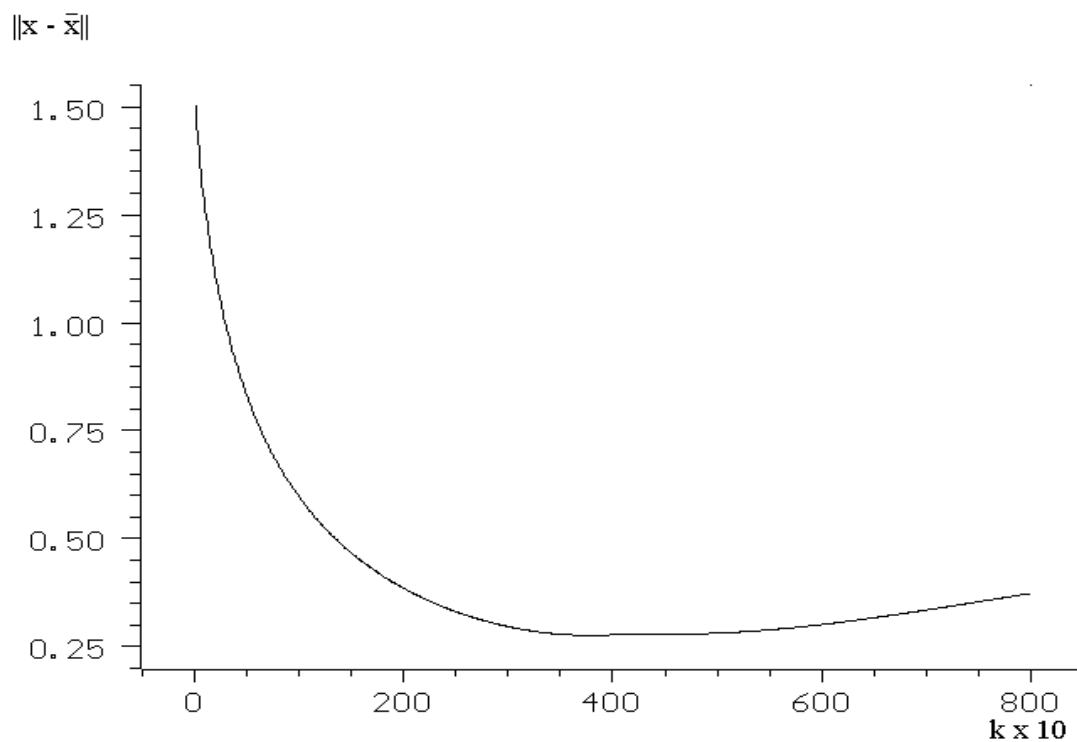


Рис. 3. Залежність норми відхилення розв'язку, отриманого пропонованим методом від кількості ітерацій

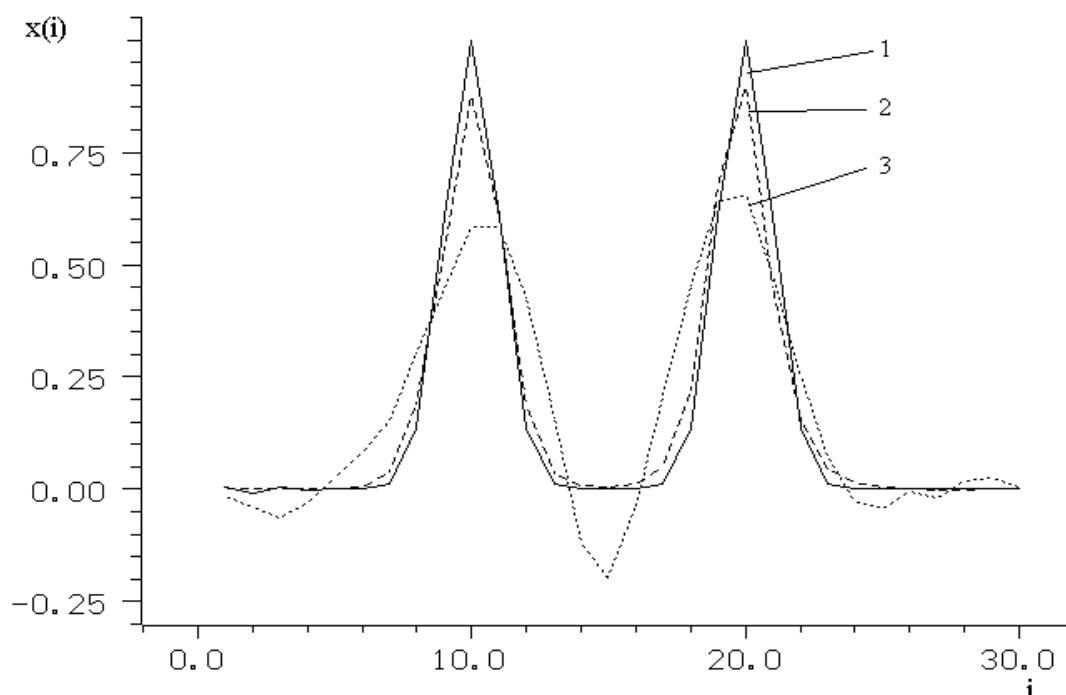


Рис. 4. Найкращі наближення до правильного розв'язку

На рис. 4 показані найкращі наближення до правильного розв'язку, отримані запропонованим методом, та методом регуляризації.

Запропонований метод можна застосовувати для пошуку наближеного розв'язку зворотних задач. Отримані результати значно краще відображають характер шуканого розв'язку, ніж метод регуляризації Тіхонова. Автоматично забезпечується умова невід'ємності отриманих значень, яка є апіорним обмеженням для багатьох типів практичних задач.

1. Беляев С.П. и др. *Опτικο-електронные методы изучения аэрозолей*. М.: Энергоиздат, 1981. 2 Barth H., Shao-Tang Sun, Nickol R. Particle Syce Analysis // *Anal. Chem.* – 1987. – Vol.59, № 12. P. 142-162. 3. Самарский А.А. , Гулин А.В. *Численные методы*. М.: Наука, 1989. 4. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. *Методы решения некорректных задач*. М.: Наука, 1986.