

В.А. Архипов, С.С. Бондарчук, Н.Г. Квеско, А.Т. Росляк, В.Ф. Трофимов

Идентификация унимодальных распределений частиц по размерам

Томский государственный университет
НИИ прикладной математики и механики

Поступила в редакцию 4.02.2004 г.

Дается обобщение практически всех известных унимодальных функций распределения аэрозольных частиц по размерам в виде двух компактных зависимостей. Получены аппроксимационные и аналитические (где это возможно) формулы связи параметров этих распределений со средними размерами частиц и геометрическими характеристиками функций плотности вероятности. Приведена уточненная методика и представлены результаты обработки гистограмм при определении спектра размеров частиц применительно к седиментационному анализу.

Аэродисперсные системы широко распространены в природе и технике. В связи с бурным развитием порошковой технологии, механики многофазных потоков, лазерных методов диагностики параметров аэрозольных частиц задачи адекватного описания полидисперсных систем, идентификации экспериментально полученных распределений частиц по размерам (опытных гистограмм) и аппроксимации их подходящей функцией плотности вероятности достаточно часто стоят перед специалистами в различных областях физики. Решение этих задач вызывает определенные затруднения в связи с многообразием встречающихся в литературе зависимостей для функции распределения частиц по размерам (традиционно «своих» для отдельных разделов механики и оптики аэрозолей); отсутствует полный набор формул связи этих характеристик с параметрами распределений.

Содержание частиц различных размеров в полидисперсной системе полностью определяется заданием ее дифференциальной функции счетного распределения $f(x)$, где x — параметр, характеризующий размер индивидуальной частицы (радиус, диаметр, объем, масса, поперечное сечение, некоторый эквивалентный размер для несферических частиц и т.д.). При этом $df = f(x)dx$ — доля частиц, размеры которых лежат в пределах $(x, x + dx)$ [1]. Функция $f(x)$ имеет смысл плотности распределения вероятностей, т.е. нормирована на единицу

$$\int_0^{\infty} f(x)dx = 1. \quad (1)$$

Анализ многочисленных литературных данных по гранулометрическому составу различных полидисперсных систем показал, что практически все природные и искусственно получаемые аэрозоли с унимодальной (одновершинной) функцией распределения могут быть описаны с помощью либо обобщенного гамма-распределения (ОГР), либо

логарифмически нормального распределения (ЛНР) [1–6]. Формулу для ОГР, предложенную в 1951 г. К.С. Шифриным [2], запишем в виде

$$f(x) = ax^{\alpha} \exp(-bx^{\beta}), \quad (2)$$

где $a > 0$ — нормирующий множитель; α, β, b — параметры распределения ($\alpha > -1, b > 0, \operatorname{sgn}(\alpha) = \operatorname{sgn}(\beta)$).

Нормирующий множитель для ОГР, определяемый из условия (1), имеет вид

$$a = \beta b^{\frac{\alpha+1}{\beta}} \Gamma^{-1}\left(\frac{\alpha+1}{\beta}\right),$$

где Γ — гамма-функция.

При $\beta = 1$ ОГР переходит в широко распространенное гамма-распределение (ГР)

$$f(x) = ax^{\alpha} \exp(-bx), \quad (3)$$

нормирующий множитель для которого $a = b^{\alpha+1} \times \Gamma^{-1}(\alpha + 1)$.

Отметим, что при α целом $\Gamma(\alpha + 1) = \alpha!$.

Из обобщенного гамма-распределения (2) можно получить большинство встречающихся в литературе распределений, варьируя параметры α, β, b . Наиболее распространенные из них приведены в табл. 1.

Этим формулам в большинстве случаев нельзя приписать какого-либо теоретического значения. Они являются более или менее удачными чисто эмпирическими приближениями к реальным распределениям. Тем не менее их практическая ценность несомненна, так как они позволяют описать гранулометрический состав полидисперсной среды посредством ограниченного набора параметров (не более трех). Многопараметрические формулы не получили практического применения в связи с трудоемкостью подбора параметров при аппроксимации гистограмм.

Эмпирические законы распределения полидисперсных частиц

α	b	β	$f(x)$	Распределение	Область использования
2	b	3	$ax^2 \exp(-bx^3)$	Смолуховского – Шумана	Физика атмосферы (облака, осадки), коллоидные системы
0	b	1	$a \exp(-bx)$	Мартина (Маршалла – Пальмера)	Физика атмосферы (облака, осадки), продукты измельчения
2	b	2	$ax^2 \exp(-bx^2)$	Максвелла – Больцмана	Дисперсность сажи в пламенах
1	b	2	$ax \exp(-bx^2)$	Ромашова	Промышленные пыли
-4	0	-	ax^{-4}	Юнге	Физика атмосферы (дымки, приземные аэрозоли)
2	b	β	$ax^2 \exp(-bx^\beta)$	Наукиямы – Танасавы	Распыливание жидкости форсунками
$\beta-4$	b	1	$ax^{\beta-4} \exp(-bx)$	Розина – Раммлера	Распыливание жидкости форсунками, продукты измельчения
α	b	2	$ax^\alpha \exp(-bx^2)$	Вейнинга	Продукты измельчения

Логарифмически нормальное распределение относится к классу распределений Кэптейна [3], выведенному на основе распределения Гаусса. В этом случае логарифмы размеров частиц распределены по нормальному закону и выражение для функции распределения имеет вид [1]:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi x} \text{Ln}(\sigma_p)} \exp\left[-\frac{(\text{Ln}(x) - \text{Ln}(x_p))^2}{2 \text{Ln}^2(\sigma_p)}\right], \quad (4)$$

где $\text{Ln}(x_p)$ – математическое ожидание логарифма размеров частиц (x_p – среднее геометрическое размеров); $\text{Ln}^2(\sigma_p)$ – среднеквадратическое отклонение логарифма размеров (в иностранной литературе σ_p обычно называется «стандартным геометрическим отклонением»). В отличие от ОГР, полученного эмпирическим путем, ЛНР имеет физическое обоснование. В 1941 г. А.Н. Колмогоров теоретически показал, что при довольно общей схеме случайного процесса дробления частиц в пределе получается ЛНР [4]. Естественно предположить, что ЛНР может сформироваться и при случайном процессе коагуляции капель в двухфазном потоке в предельном случае большого числа взаимодействий частиц. Логарифмически нормальный закон широко распространен в природе. Так, ему подчиняются распределения взвешенных частиц в воде и воздухе, частиц пород при дроблении, при химическом осаждении, при ситовом анализе, распределение содержания золотин в россыпях и т.д. [5]. Интересно отметить, что функция ЛНР дает, например, удовлетворительное описание распределения прироста веса школьников после каникул [3].

Проведенный Л.М. Левиным [6] графический анализ показал хорошую взаимную аппроксимацию ЛНР и ГР (рис. 1). Причем аппроксимация тем лучше, чем выше параметр α гамма-распределения; более высоким α соответствуют меньшие значения дисперсии логарифма размеров частиц.

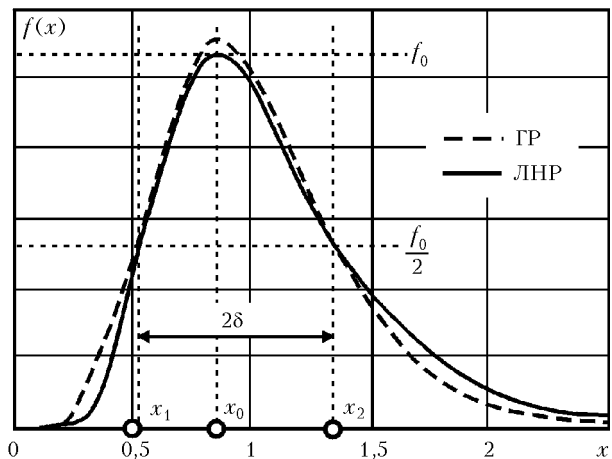
Выражение для ЛНР (4) удобно записать в компактной форме:

$$f(x) = \frac{a}{x} \exp[-b \text{Ln}^2(\beta x)], \quad (5)$$

где параметры a , β , b связаны с x_p , σ_p соотношениями

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \text{Ln}(\sigma_p)}; \quad b = \frac{1}{2 \text{Ln}^2(\sigma_p)}; \quad \beta = \frac{1}{x_p}.$$

Параметры a , β , b распределений (2), (3), (5) не имеют наглядного геометрического смысла.

Рис. 1. Геометрические характеристики распределения $f(x)$

При практической работе, связанной с анализом дисперсных систем, удобно оценивать форму распределения с помощью геометрических характеристик функции плотности вероятности, в качестве которых целесообразно использовать модальный размер x_0 (точка максимума плотности распределения вероятностей), $f_0 = f(x_0) = f_{\max}(x)$, полушироту распределения δ и его асимметрию ε (см. рис. 1):

$$\delta = \frac{x_2 - x_1}{2}; \quad \varepsilon = \frac{x_0 - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{x_0 - x_1}{2\delta}, \quad (6)$$

где

$$f(x_1) = f(x_2) = f_0/2.$$

Для гамма-распределения формулы связи его параметров с геометрическими характеристиками $f(x)$ (кроме асимметрии) приведены в [2]. В настоящей статье эти формулы получены для ОГР, ГР и ЛНР (табл. 2). Наряду с функцией распределения для описания дисперсных сред широко исполь-

зуются осредненные характеристики, большинство из которых определяется следующим выражением:

$$x_{mm} = \left[\frac{\int_0^{\infty} x^m f(x) dx}{\int_0^{\infty} x^n f(x) dx} \right]^{\frac{1}{m-n}}, \quad (7)$$

где m, n – целые числа, означающие порядок момента функции распределения.

Наиболее распространенными из них являются следующие средние размеры:

- x_{10} – среднеарифметический;
- x_{20} – среднеквадратический;
- x_{32} – средний объемно-поверхностный;
- x_{43} – среднемассовый (математическое ожидание x для дифференциальной функции массового распределения частиц по размерам $g(x)$).

Подставляя в (7) выражения (2), (3), (5), можно получить формулу расчета x_{mm} для ОГР, ГР и ЛНР соответственно:

$$\text{ОГР: } x_{mm} = b^{\frac{n-m}{\beta}} \Gamma\left(\frac{m+1+\alpha}{\beta}\right) \Gamma^{-1}\left(\frac{n+1+\alpha}{\beta}\right);$$

$$\text{ГР: } x_{mm} = b^{n-m} \frac{m+\alpha}{n+\alpha} \frac{\Gamma(m+\alpha)}{\Gamma(n+\alpha)};$$

$$\text{ЛНР: } x_{mm} = \left[\beta^{n-m} \exp\left(\frac{m^2-n^2}{4b}\right) \right]^{\frac{1}{m-n}}.$$

Конкретные зависимости для x_{10}, x_{32}, x_{43} через параметры распределений приведены в табл. 2.

В табл. 3 приведены формулы для оценки параметров ГР и ЛНР по геометрическим характеристикам функций распределения $f(x)$.

Практическое применение изложенного подхода можно проиллюстрировать на примере восстановления функции распределения по данным, полученным гравитационным седиментационным анализом

Таблица 2

Выражение геометрических характеристик плотности вероятности и некоторых средних размеров частиц через параметры распределений

Параметры	ОГР	ГР	ЛНР
x_0	$\left(\frac{\alpha}{b\beta}\right)^{1/\beta}$	$\frac{\alpha}{b}$	$\frac{1}{\beta} \exp\left(-\frac{1}{2b}\right)$
f_0	$a \left(\frac{\alpha}{b\beta}\right)^{\alpha/\beta} \exp\left(-\frac{\alpha}{\beta}\right)$	$a \left(\frac{\alpha}{b}\right)^{\alpha} \exp(-\alpha)$	$a\beta \exp\left(\frac{1}{4b}\right)$
2δ	$\frac{2,34}{\sqrt{\alpha\beta}} x_0$	$\frac{2,34}{\sqrt{\alpha}} x_0$	$2\text{sh}\left(\sqrt{\frac{\text{Ln}2}{b}}\right) x_0$
ϵ	$0,304\alpha^{(3/b-1)/16} \beta^{0,358}$	$0,304\alpha^{0,125}$	$\left[1 + \exp\left(\sqrt{\frac{\text{Ln}2}{b}}\right)\right]^{-1}$
x_{10}	$\Gamma\left(\frac{2+\alpha}{\beta}\right) \left[b^{1/\beta} \Gamma\left(\frac{1+\alpha}{\beta}\right) \right]^{-1}$	$\frac{1+\alpha}{b}$	$\frac{1}{\beta} \exp\left(\frac{1}{4b}\right)$
x_{32}	$\Gamma\left(\frac{4+\alpha}{\beta}\right) \left[b^{1/\beta} \Gamma\left(\frac{3+\alpha}{\beta}\right) \right]^{-1}$	$\frac{3+\alpha}{b}$	$\frac{1}{\beta} \exp\left(\frac{5}{4b}\right)$
x_{43}	$\Gamma\left(\frac{5+\alpha}{\beta}\right) \left[b^{1/\beta} \Gamma\left(\frac{4+\alpha}{\beta}\right) \right]^{-1}$	$\frac{4+\alpha}{b}$	$\frac{1}{\beta} \exp\left(\frac{7}{4b}\right)$

Таблица 3

Выражение параметров распределений через геометрические характеристики функции плотности вероятности

Параметр	ГР	ЛНР
α	$\left(\frac{1,17}{\delta} x_0\right)^2$	–
b	$x_0 \left(\frac{1,17}{\delta}\right)^2$	$\text{Ln}2 \left[\text{Ar sh}\left(\frac{\delta}{x_0}\right) \right]^{-2}$
β	–	$\frac{1}{x_0} \exp\left\{ -\frac{\left[\text{Ar sh}\left(\frac{\delta}{x_0}\right) \right]^2}{2\text{Ln}2} \right\}$

частиц ферросилициума. Предварительно необходимо отметить, что поскольку ряд экспериментальных значений, как правило, существенно ограничен, то для значительного уточнения получаемых зависимостей необходимо использовать какие-либо средние размеры частиц полученных массовых долей фракций. В частности, для гравитационной седиментации соотношение для выбора эффективного размера фракций можно получить из следующих представлений. Предположим, что осаждение N фракций частиц в диапазоне размеров ($D_j \div D_{j+1}$) осуществляется в стоковском режиме, т.е. $v_i = \phi D_i^2$, где v – скорость частицы; D – диаметр; ϕ – константа, зависящая от характеристик среды и плотности материала частиц. Тогда из закона сохранения массы имеем

$$c_m \bar{D}^2 = \sum_{i=1}^N c_{mi} D_i^2, \quad (8)$$

где c_m , \bar{D} – массовая концентрация и среднеэффективный диаметр частиц рассматриваемого диапазона размеров; c_{mi} – массовая концентрация частиц i -й фракции.

Из уравнения (8) следует

$$\bar{D} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N c_{mi} D_i^2}{c_m}} = \sqrt{\sum_{i=1}^N z_i D_i^2}.$$

Предполагая равномерность распределения частиц по размерам в диапазоне (D_j, D_{j+1}) , т.е. $z_i = \text{const}$,

и учитывая условие $\sum_{i=1}^N z_i = 1$, получим

$$\bar{D} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N D_i^2 \Delta D}{D_{j+1} - D_j}}. \quad (9)$$

Переходя в (9) от суммирования к интегрированию, получим выражение для среднеэффективного диаметра в виде

$$\bar{D} = \sqrt{\frac{\int_{D_j}^{D_{j+1}} D^2 dD}{D_{j+1} - D_j}} = \sqrt{\frac{(D_{j+1}^3 - D_j^3)}{3(D_{j+1} - D_j)}}. \quad (10)$$

Сравнение уравнений (7) и (10) показывает, что при гравитационной седиментации в качестве характерных точек на столбцах гистограмм необходимо использовать среднеквадратический размер D_{20} .

На рис. 2 представлены обработанные по соотношению (10) исходные данные (черные кружки) и соответствующая гистограмма массовых долей фракций ферросилициума, а также результаты восстановления функции распределения частиц по размерам в классах ГР (кривая 1) и ОГР (кривая 2), отмасштабированные из нормированных зависимостей на значения исходных параметров. Для получения данных зависимостей из графической аппроксимации определялись $x_0 \approx 35$, $x_1 \approx 17,5$, $x_2 \approx 62$ мкм. По соотношениям (6) определялись полуширота распределения δ и его асимметрия ϵ , по значениям которых из соотношений табл. 2 рассчитывались параметры распределений α , b и β для ГР и ОГР.

V.A. Arkhipov, S.S. Bondarchuk, N.G. Kvesko, A.T. Roslyak, V.F. Trofimov. **Identification of unimodal size distributions of aerosol particles.**

Generalization of practically all known unimodal functions of aerosol particle size distribution as two compact dependences is given. Formulas relating these distribution parameters with the average size of particles and geometrical characteristics of probability density functions are obtained (approximate and analytical whenever possible). The specified technique and results of histogram processing are presented for determination of the particle size spectrum with reference to sedimentation analysis.

Далее через показатели распределения по приведенным выше зависимостям определяется нормирующий множитель a .

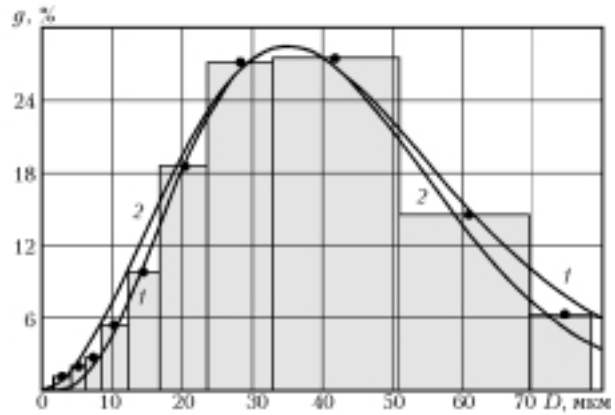


Рис. 2. Исходные данные и результаты восстановления функций распределения частиц по размерам

Для данных, представленных на рис. 2, получены следующие законы распределений:

для ГР: $\alpha = 3,387$, $b = 0,097$;

для ОГР: $\alpha = 1,739$, $\beta = 1,947$, $b = 0,001$.

Таким образом, представленный подход позволяет выбирать адекватную функцию распределения частиц по размерам для аппроксимации опытных данных гранулометрического анализа и получать оценку параметров выбранного класса распределений, а также осредненных параметров выбранной полидисперсной системы.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (проект 02-01-01246) и Минобразования РФ (проект E02-12.3-108).

1. Фукс Н.А. Механика аэрозолей. М.: Изд-во АН СССР, 1955. 352 с.
2. Шифрин К.С. О расчете микроструктуры // Тр. ГГО. 1961. Вып. 109. С. 168–178.
3. Арлей Н., Бух К. Введение в теорию вероятностей и математическую статистику. М.: Изд-во иностр. лит., 1951. 248 с.
4. Колмогоров А.Н. О логарифмически-нормальном законе распределения размеров частиц при дроблении // Докл. АН СССР. 1941. Т. 31. № 2. С. 99–101.
5. Разумовский Н.К. Характер распределения содержания металлов в рудных месторождениях // Докл. АН СССР. 1940. Т. 28. № 9. С. 815–817.
6. Левин Л.М. О функциях распределения облачных капель по размерам // Изв. АН СССР. 1958. № 10. С. 1211–1221.