

В.Ф. Рапута, К.П. Куценогий, Г.Т. Яковенко

ОПТИМАЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ИЗМЕРЕНИЙ СПЕКТРА СУБМИКРОННЫХ АЭРОЗОЛЕЙ МЕТОДОМ СЕТЧАТОЙ ДИФФУЗИОННОЙ БАТАРЕИ

Применительно к сетчатой диффузионной батарее разработана математическая модель планирования измерений спектра субмикронных аэрозолей для случая одномодальной функции распределения. Предложен метод численного нахождения оптимального количества сеток. Для допустимых значений параметров атмосферного аэрозоля проведено численное моделирование локально-оптимальных планов. По результатам моделирования построены аналитические аппроксимации планов наблюдений.

Введение

Широкий спектр размеров (от 10^{-3} до 10^2 мкм) атмосферных аэрозолей невозможно охватить единым методом измерения [1, 2]. Поэтому обычно используется совокупность различных методов, каждый из которых оптимален при измерениях в более узком интервале размеров.

Для измерения спектра размеров субмикронных ($d < 1$ мкм) частиц в последние годы часто используется методика сетчатых диффузионных батарей, впервые предложенная в середине 70-х гг. [3–5]. Простота конструкции измерительного устройства – одно из главных преимуществ данного прибора.

Активное использование этой методики в различных областях стимулировало серию теоретических и экспериментальных исследований, направленных на выяснение предельных возможностей метода и оценки точности восстановления интересующих исследователя параметров распределения [3–13]. В ряде работ были оценены возможности восстановления многомодальных распределений и указаны ограничения на решающую способность методики [14, 15].

Отмечая, что метод позволяет надежно восстановить только бимодальные распределения, в работе [15] на основе численных экспериментов показано, что не имеет смысла измерять более шести коэффициентов проскока. Однако ни в данной работе, ни в предшествующих публикациях не был решен вопрос о том, как влияют на точность измерения конкретные параметры диффузионной батареи. Для диффузионных батарей канального типа вопрос о выборе режимов измерения спектра размеров субмикронных аэрозолей с одномодальным логарифмически-нормальным распределением подробно рассмотрен в [16].

Выбор той или иной схемы проведения измерений может существенно повлиять на точность восстановления параметров распределений. Однако попытки анализа соответствующих измерительных схем вызывают значительные затруднения, связанные как с многоэтапностью проведения подобного исследования, так и с конкретным выбором критери-

ев точности решения обратных задач восстановления и планирования наблюдений. В данной работе для одномодального логнормального распределения рассмотрена задача планирования эксперимента применительно к сетчатой диффузионной батарее (СДБ), численно построены локально-оптимальные планы измерений.

Постановка обратной задачи

Проскок монодисперсного аэрозоля через y сеток СДБ удовлетворительно описывается полуэмпирической зависимостью [14]

$$p(y) = \exp(-c y D^{2/3}(r)), \quad (1)$$

где c – константа, зависящая от скорости потока и параметров сеток (шаг и диаметр волокон); r – радиус частиц, нм; $D(r)$ – коэффициент диффузии, для которого обычно используется аппроксимационная зависимость [14]

$$D(r) = \frac{B_1}{r} + \frac{B_2}{r^2}, \quad (2)$$

где $B_1 = 8,53 \cdot 10^{-9}$; $B_2 = 1,27 \cdot 10^{-6}$.

Полидисперсные аэрозоли можно описывать функцией распределения $f(x, \Theta)$ по размерам частиц. В этом случае проскок полидисперсного аэрозоля через y сеток определяется следующим образом:

$$p(y, \Theta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y t(x)} f(x, \Theta) dx, \quad (3)$$

где

$$x = \log r; \quad t(x) = c D^{2/3}(r), \quad r = 10^x;$$

Θ – вектор неизвестных параметров.

В данной работе мы будем рассматривать одномодальные по размерам частиц распределения. Функция распределения по размерам частиц в большинстве аэрозолей конденсационного и коагуляционного

происхождения описывается логарифмически-нормальным законом [17], т.е. выражением вида

$$f(x, \Theta) = (2\pi \log^2 \sigma_g)^{-1/2} \exp\{-(x - \log r_{50})^2 / 2 \log^2 \sigma_g\}, \quad (4)$$

где r_{50} – среднегеометрический радиус частиц; σ_g – стандартное геометрическое отклонение; $\Theta = (r_{50}, \sigma_g)$.

Пусть измеренные значения проскока аэрозоля имеют следующий вид:

$$\lambda_k = p(y_k, \Theta) + \xi_k, \quad E[\xi_k] = 0, \quad E[\xi_k \xi_j] = \delta_{kj} \sigma_k^2, \quad (5)$$

$$k, j = \overline{1, N}.$$

Здесь E – операция математического ожидания; δ_{kj} – символ Кронекера.

Оценки вектора Θ могут быть получены с помощью метода наименьших квадратов [18]:

$$\sum_{k=1}^n \sigma_k^{-2} [\lambda_k - p(y_k, \Theta)]^2 \rightarrow \min_{\Theta} \quad (6)$$

Здесь n – число наблюдений; λ_k – измеренные значения проскока аэрозоля; σ_k – дисперсия ошибок измерений. Для повышения точности оценивания вектора параметров целесообразно предварительно провести процедуру оптимизации условий наблюдений, состоящую в задании соответствующих наборов сеток.

Для численного нахождения искомого вектора Θ можно применить процедуру градиентного спуска [18]:

$$\Theta_{m+1} = \Theta_m + M^{-1}(\Theta_m) Y(\Theta_m).$$

Здесь

$$M(\Theta) = \sum_{k=1}^n \sigma_k^{-2} f(y_k, \Theta) f^T(y_k, \Theta); \quad (7)$$

$$Y(\Theta_m) = \sum_{k=1}^n \sigma_k^{-2} f(y_k, \Theta) \lambda_k; \quad f(y, \Theta) = \nabla_{\Theta} p.$$

Планирование измерений

Рассмотрим задачу определения оптимальных наборов сеток для установления размеров аэрозольных частиц.

Под планом наблюдений будем понимать совокупность величин

$$\varepsilon_n = \left\{ \begin{array}{cccc} y_1, & y_2, & \dots, & y_n \\ q_1, & q_2, & \dots, & q_n \end{array} \right\},$$

где $q_i = S_i/N$, S_i – число наблюдений с набором сеток

$$y_i; \quad i = \overline{1, n}; \quad N = \sum_{i=1}^n S_i \text{ – общее число наблюдений.}$$

Для определенности ограничимся рассмотрением D -оптимальных планов, максимизирующих определитель информационной матрицы $M(\varepsilon, \Theta)$, определяемой выражением (7).

В силу нелинейной зависимости $p(y, \Theta)$ от Θ априорное построение оптимального плана, вообще говоря, невозможно. Поэтому ограничимся нахождением локально-оптимальных планов с помощью следующей процедуры последовательного анализа и планирования наблюдений [18].

1. Пусть проведен эксперимент из $K-1$ наблюдений по невырожденному плану ε_{K-1} (т.е. $|M(\varepsilon_{K-1}, \Theta)| \neq 0$). Отыскиваем точку y_K такую, что

$$d(y_K, \varepsilon_{K-1}, \Theta_{K-1}) = \max_{y \in \Omega} d(y, \varepsilon_{K-1}, \Theta_{K-1}),$$

где

$$d(y, \varepsilon_{K-1}, \Theta_{K-1}) = f^T(y, \Theta) M^{-1}(\varepsilon_{K-1}, \Theta) f(y, \Theta) |_{\Theta = \Theta_{K-1}}.$$

2. В точке y_K проводим дополнительное наблюдение $\lambda_K = p(y_K) + \xi_K$.

3. Отыскиваем МНК-оценки Θ_K по K наблюдениям согласно плану

$$\varepsilon_K(y_K) = \frac{K-1}{K} \varepsilon_{K-1} + \frac{1}{K} \varepsilon(y_K),$$

где $\varepsilon(y_K)$ – одноточечный план.

После выполнения пункта 3 снова переходим к пункту 1 и т.д. Выполнение операций 1–3 повторяется до тех пор, пока выражение

$$|M^{-1}(\varepsilon_N, \Theta_N)|/N$$

не станет меньше некоторой заданной величины.

Замечание 1. При наличии приближенных оценок r_{50} и σ_g процедуру 1–3 можно заменить следующими двумя этапами [19]:

– по имеющимся предварительным оценкам построить оптимальный план ε и согласно ему провести наблюдения;

– используя полученные в соответствии с планом ε измерения, оценить r_{50} , σ_g .

Замечание 2. Для регрессионной зависимости (1), соответствующей случаю монодисперсного аэрозоля, локально-оптимальный одноточечный план может быть представлен в явном виде как функция радиуса частиц.

Действительно, в этом случае оптимальное число сеток определяется из условия максимума выражения

$$M(\varepsilon, r) \equiv \left(\frac{\partial p}{\partial r} \right)_{\varepsilon}^2 \rightarrow \max_{\varepsilon} \quad (8)$$

С учетом необходимого условия экстремума функции (8) по y несложно получить искомое представление точки оптимального плана:

$$y = 1/[cD^{2/3}(r)]. \quad (9)$$

Численные эксперименты

В силу нелинейной зависимости функции регрессии (3) от неизвестных параметров r_{50} и σ_g априорное построение оптимального плана становится невозможным. Поэтому в этом разделе, используя процедуру 1)–3), ограничимся численным моделированием локально-оптимальных планов наблюдений для заданных значений вектора Θ .

Выражение (3) и его производные по параметрам можно заметно упростить, если воспользоваться следующей заменой:

$$\omega_1 = \frac{1}{\log \sigma_g}, \quad \omega_2 = \frac{\log r_{50}}{\log \sigma_g}. \quad (10)$$

Тогда, с учетом (3), (4) и (10), получаем

$$p(y, \omega) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \omega_1 e^{A(x,y,\omega)} dx;$$

$$\frac{\partial p(y)}{\partial \omega_1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} (1 - \omega_1^2 x^2 + x\omega_1 \omega_2) e^{A(x,y,\omega)} dx;$$

$$\frac{\partial p(y)}{\partial \omega_2} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \omega_1 (x \omega_1 - \omega_2) e^{A(x,y,\omega)} dx,$$

где

$$A(x, y, \omega) = -y \ln(x) - \frac{1}{2} (x \omega_1 - \omega_2)^2.$$

Характерной областью изменения r_{50} примем интервал размеров аэрозольных частиц от 5 до 200 нм, и пусть стандартное геометрическое отклонение σ_g принадлежит интервалу (1,2; 2,5).

На рисунке представлены результаты моделирования локальных D -оптимальных планов для фиксированных $\sigma_g = 1,2; 1,5; 1,8$ и текущих значений r_{50} из допустимой области с шагом 5 нм. Построенные планы состоят из двух наборов $y_1(\omega)$ и $y_2(\omega)$, включающих различное число сеток. Как видно из рисунка, количество сеток в полученных планах в основном определяется среднегеометрическим радиусом частиц и представляет собой монотонно возрастающие функции от r_{50} .

При $r_{50} \approx 85$ нм функции $y_2(\omega)$ терпят излом и вырождаются в прямую линию, параллельную r_{50} , что в данном случае связано с действием ограничения на допустимое количество используемых сеток.

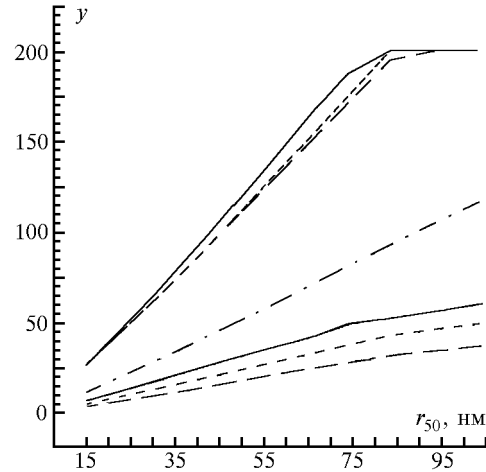
Представленный на рисунке достаточно простой характер связей между точками оптимальных планов и значениями r_{50} и σ_g позволяет подобрать соответствующие им аналитические аппроксимации. Положение точек планов измерений вполне удовлетвори-

тельно описывается следующими аппроксимационными зависимостями:

$$y_1(\Theta) = \text{ctg}(c_1 \sigma_g) r_{50} + a_1,$$

$$y_2(\Theta) = \begin{cases} \text{ctg}(c_2 \sigma_g) r_{50} + a_2, & \text{при } r_{50} < 85 \text{ нм,} \\ 200 \text{ сеток,} & \text{при } r_{50} \geq 85 \text{ нм,} \end{cases}$$

где $c_1 = 0,3; c_2 = 0,7; a_1 = -10; a_2 = -2$.



Нижнее и верхнее число сеток в локально-оптимальных планах: — — — — — ($\sigma_g = 1,2$); - - - - ($\sigma_g = 1,5$); — · — · — ($\sigma_g = 1,8$); · · · · — — — — — — зависимость положения точки оптимального плана от радиуса частицы в монодисперсном случае

Заключение

В данной статье рассмотрена задача оптимизации условий измерений для случая одномодальной функции распределения спектра размеров атмосферного аэрозоля. Предложенные в работе математические методы планирования эксперимента могут быть применены и для многомодальных функций распределения с учетом возникающих при этом дополнительных связей.

Выполнение достаточно обширного комплекса условий определяет эффективность планирования наблюдений. В первую очередь необходимы адекватность математической модели и уровень ее определенности. Значительную роль играют также возможности системы наблюдений. С другой стороны, построенные оптимальные планы измерений позволяют сформулировать в определенном смысле предельные условия устойчивости обратной задачи.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (95-05-15575).

1. Koutzenogij K.P. // J. Electrostatics. 1989. V. 23. P. 371–379.
2. Куценогий К.П. // Аэрозоль и климат / Под ред. К.Я. Кондратьева. Л.: Гидрометеиздат, 1991. С. 17–51.
3. Sinclair D. // Am. ind. Hyg. Assoc. J. 1972. V. 33. P. 729–751.
4. Sinclair D., Hoopes G.S. // Am. ind. Hyg. Assoc. J. 1975. V. 35. P. 39–42.
5. Sinclair D. et al. // J. Air. Pollut. Control Assoc. 1976. V. 26. P. 661–663.

6. *Cheng Y.S., Yen H.C.* // *J. Aerosol Sci.* 1980. V. 11. P. 313–320.
7. *Yen H.C., Cheng Y.S., Otman M.M.* // *J. Coll. Inter. Sci.* 1982. V. 86. P. 12–16.
8. *Scheibel H.G., Porstendorfer J.* // *J. Aerosol Sci.* 1984. V. 15. P. 673–682.
9. *Brown K.E., Beyer J., Gentry J.W.* // *J. Aerosol Sci.* 1984. V. 15. P. 133–145.
10. *Cheng Y.S., Yen H.C.* // *Am. ind. Hyg. Assoc. J.* 1984. V. 45. P. 556–561.
11. *Cooper D.W., Wu J.J.* // *J. Aerosol Sci.* 1990. V. 21. P. 217–226.
12. *Grump J.G., Sceinfeld J.H.* // *Aerosol Sci. Technol.* 1992. V. 1. P. 15–34.
13. *Пусен А.Ю., Шохирев Н.В.* // *Коллоидный журнал.* 1986. Т. 48. С. 108–113.
14. *Bashurova V.S. et al.* // *J. Aerosol Sci.* 1991. V. 22. P. 373–388.
15. *Koutzenogii P.K.* // *Dissertation.* Mainz, 1992. P. 106.
16. *Фукс Н.А., Сутугин А.Г.* // *Высокодисперсные аэрозоли. Итоги науки и техники.* М.: ВИНТИ, 1969. С. 83.
17. *Фукс Н.А.* *Механика аэрозолей.* М.: Изд. АН СССР, 1955. 352 с.
18. *Федоров В.В.* *Теория оптимального эксперимента.* М.: Наука, 1971. 312 с.
19. *Успенский А.Б., Федоров В.В.* // *Кибернетика.* 1974. № 4. С. 123–128.

ИВМ и МГ СО РАН, Новосибирск
ИХКГ СО РАН, Новосибирск

Поступила в редакцию
4 февраля 1998 г.

V.F. Raputa, K.P. Koutzenogii and G.T. Yakovenko. **Optimal Planning of Range Measurements.**

A mathematical model for planning the measurements of submicron aerosol range has been developed to fit a screen-type diffusion battery in the case of one-modal distribution function. A method has been proposed for numerical determination of the optimal number of nets. Numerical modeling of the locally optimal plans has been performed for the accessible values of atmospheric aerosol parameters. Modeling results have been used to construct the analytical approximation observation plans.