

Verfahren zur Berechnung der Partikelgrößenverteilungen aus Beugungsspektren

Michael Heuer**

Für die Messung von Partikelgrößenverteilungen werden seit einigen Jahren vermehrt Geräte verwendet, die auf der Analyse Fraunhoferscher Beugungsbilder, sogenannter Beugungsspektren beruhen. Der Grund für den immer häufigeren Einsatz dieser Geräte ist auf deren, verglichen mit klassischen Methoden der Partikelmeßtechnik, sehr einfache Bedienung zurückzuführen. Auch der nötige, bei diesem Verfahren aber auf ein Minimum reduzierte, Aufwand für die Probenvorbereitung sowie die Möglichkeit der schnellen Messung, geben Grund zu der Vermutung, daß diesen Geräten in Zukunft immer größere Bedeutung zukommen wird.

Zur Zeit sind drei Geräte auf dem Markt die nach diesem Prinzip arbeiten. Dies sind das Granulometer der Firma CILAS, der ST 1800 der Firma MALVERN und der Microtrac der Firma Leeds and Northrup der in drei Versionen angeboten wird.

Für die Zielsetzung die am Institut für Mechanische Verfahrenstechnik in Clausthal verfolgt wurde, nämlich die Messung in Mehrphasenströmungen, speziell in umgelenkten Strömungen, war keines der drei Geräte einsetzbar. Da in unserem Fall damit zu rechnen war, sehr enge Verteilungen anzutreffen, wurde die Auflösung der Geräte als ungenügend betrachtet. Hinzu kam, daß keiner der Hersteller mitteilt, wie die gemessenen Lichtintensitäten zu Partikelgrößenverteilungen umgerechnet werden.

Ziel war daher die Entwicklung eines verbesserten Gerätes das Partikelgrößenverteilungen schnell und mit möglichst hoher Auflösung mißt und von dem bekannt ist wie die Auswertung vorgenommen wird.

* Vortrag bei der 3. Fachtagung "Granulometrie" 15.12.1983 in Dresden

** Dipl.-Ing. Michael Heuer, Institut für Mechanische Verfahrenstechnik der Technischen Universität Clausthal

1 Prinzip der Beugungsspektrengeräte

Das physikalische Prinzip mit dem diese Geräte arbeiten ist seit langem bekannt. Werden gleichgroße kreisförmige Körper in einer in Abb. 1 dargestellten optischen Anordnung von monochromatischem Licht beleuchtet, so erzeugen sie in der Brennebene der nachgeschalteten Linse ein radialsymmetrisches Fraunhofersches Beugungsspektrum. Dies besteht aus einem hellen Kreis im Zentrum umgeben von konzentrischen hellen und dunklen Ringen, wie es Abb. 2 zeigt.

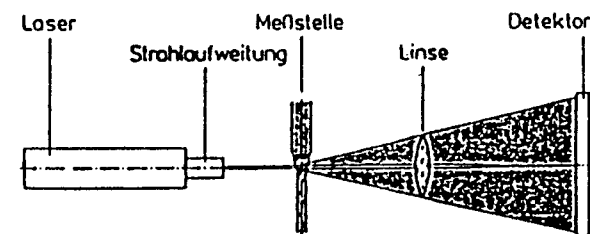


Abb. 1: Optische Anordnung zur Erzeugung von Beugungsspektren

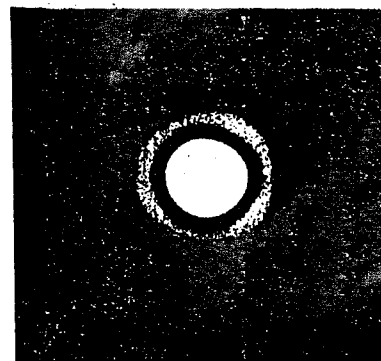


Abb. 2: Beugungsbild monodisperser Partikel.

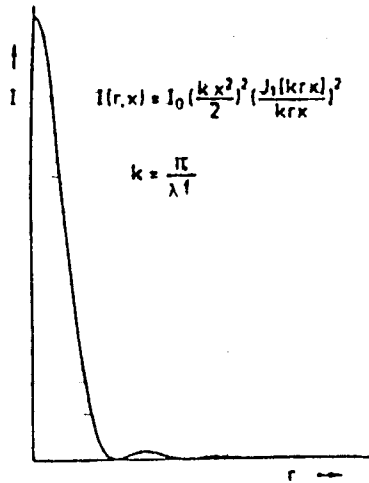


Abb. 3 Intensitätsverteilung monodisperser Partikel

Die in Abb. 3 dargestellte Intensitätsverteilung wird beschrieben durch die Gleichung (1):

$$I(r, x) = I_0 \left(\frac{kx^2}{2} \right)^2 \left(\frac{J_1(krx)}{krx} \right)^2 \quad (1)$$

mit $k = (\pi/\lambda f)$

r Radius in der Brennebene (Abstand vom Brennpunkt)

f Brennweite der Linse

I_0 Intensität des einfallenden Lichtes

λ Wellenlänge des Lichtes

J_1 Besselfunktion erster Art erster Ordnung

Der Durchmesser der Ringe ist umso größer, je kleiner die kreisförmigen Körper sind. Bringt man N gleichgroße Körper in den Lichtstrahl, so wird die Intensität des Beugungsbildes N mal so groß sein. Die Form des Beugungsbildes, d.h. die Lage der Ringe, wird sich jedoch nicht ändern.

Befinden sich N_{ges} kugelförmige Körper verschiedener Größe im Lichtstrahl, so muß man zur Beschreibung ihres Beugungsspektrums d.h. ihrer Intensitätsverteilung jedes Partikel berücksichtigt werden. Die Intensitätsverteilung ergibt sich aus der Summation aller Einzelintensitäten.

$$I_{\text{ges}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{ges}}} I(r, x_i) \quad (2)$$

Läßt sich die Anzahlgrößenverteilung der Partikel durch eine stetige Funktion $q_0(x)$ beschreiben, so kann man die Intensitätsverteilung berechnen aus

$$I(r) = \int_{x_{\text{min}}}^{x_{\text{max}}} N_{\text{ges}} q_0(x) I(r, x) dx \quad (3)$$

In diesem Fall sind keine Ringe mehr erkennbar, sondern nur noch eine diffuse, radialsymmetrische Intensitätsverteilung wie sie in Abb. 4 schematisch wiedergegeben ist. Derartige Intensitätsverteilungen sind in jedem Beugungsspektrengerät zu beobachten.

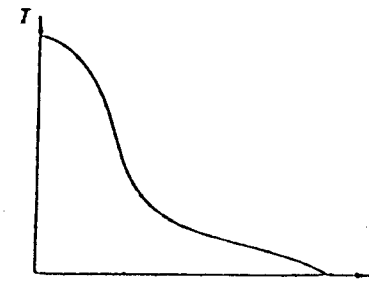


Abb. 4: Schematische Darstellung einer von verschiedenen großen kreisförmigen Körpern erzeugten Intensitätsverteilung

2 Aufstellung des Gleichungssystems und Berechnung der Koeffizientenmatrix

Um aus einer Intensitätsverteilung, wie sie in Abb. 4 dargestellt ist, auf die Größenverteilung der erzeugenden Körper schließen zu können muß man in j verschiedenen Kreisringen der Brennebene mit den Radien r_j, r_{j+1} die Intensität bzw die auftretende Lichtleistung messen. Die in einem Kreisring einfallende Lichtleistung ergibt sich nach Integration der örtlichen Intensitäten d.h. von Gleichung (3) über die Fläche des Kreisrings:

$$L(\Delta r_j) = \int_0^{2\pi} \int_{r_j}^{r_{j+1}} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} N_{\text{ges}} q_0(x) I(r,x) dx r dr d\theta \quad (4)$$

Die Integration über die Fläche ist für den allgemeinen Fall lösbar; es ergibt sich:

$$L(\Delta r_j) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} N_{\text{ges}} q_0(x) L(\Delta r_j, x) dx \quad (5)$$

$L(\Delta r_j, x)$ repräsentiert die von einem Objekt verursachte Leistung im Kreisring:

$$L(\Delta r_j, x) = (\pi/2) I_0 x^2 (J_0^2(kxr_j) + J_1^2(kxr_j) - J_0^2(kxr_{j+1}) - J_1^2(kxr_{j+1})) \quad (6)$$

Die Gleichung (5) ist für den allgemeinen Fall von $q_0(x)$ nicht geschlossen lösbar. Um dennoch die Verteilung berechnen zu können wird das Integral der Gleichung (5) zunächst aufgespalten in M Teilintervalle:

$$L(\Delta r_j) = \sum_{i=1}^M \int_{x_i}^{x_{i+1}} N_{\text{ges}} q_0(x) L(\Delta r_j, x) dx \quad (7)$$

Setzt man nun die Verteilung in den Intervallen konstant, was der Einführung eines Histogramms anstatt einer stetigen Kurve entspricht, so kann man die $q_0(x_i)$ vor die Integrale ziehen:

$$L(\Delta r_j) = \sum_{i=1}^M N_{\text{ges}} q_0(x_i) \int_{x_i}^{x_{i+1}} L(\Delta r_j, x) dx \quad (8)$$

Als x_i wird dabei das arithmetische Mittel des Intervalls x_i, x_{i+1} benutzt. Nimmt man weiterhin an, daß auch die noch im Integral (8) verbliebene, von einem Objekt verursachte Einzelleistung der Gleichung (6), in diesem Intervall ebenfalls konstant ist, oder löst das Integral numerisch, so erhält man die bekannte /1/2/3/ Gleichung für die in einem Kreisring auftretende Lichtleistung. Dazu wird die Einzelleistung berechnet für die für Gleichung (8) benutzten x_i .

$$L(\Delta r_j) = \sum_{i=1}^M N_{\text{ges}} q_0(x_i) L(\Delta r_j, x_i) \Delta x \quad (9)$$

Mißt man in M unterschiedlichen Kreisringen, so läßt sich die Gleichung (9) für jeden der M Kreisringe angeben. Da vorher der Bereich der Durchmesser x ebenfalls in M Teilintervalle zerlegt wurde hat man auf diese Weise ein lineares Gleichungssystem erzeugt. Die Unbekannten sind die Werte der Verteilung $q_0(x_i)$, die Koeffizienten dieses Systems sind die berechenbaren Einzelleistungen $L(\Delta r_j, x_i)$.

Bringt man statt der erwähnten kreisförmigen Körper unregelmäßig geformte Partikel in den Lichtstrahl, so kann auch deren Beugungsspektrum auf die gleiche Art ausgewertet werden. Man erhält dann eine Verteilung von Kugeldurchmessern gleicher optischer Eigenschaften. Vergleichsmessungen mit dem Microtrac der Fa. Leeds & Northrup ergaben gute Übereinstimmungen mit der Siebanalyse.

3 Spezielle Vorgehensweise zur Lösung des Gleichungssystems

Versucht man das aufgestellte Gleichungssystem zu lösen, so zeigt sich, daß schon kleinste Schwankungen des Meßsignals große Probleme aufwerfen, insbesondere wenn man eine hohe Auflösung anstrebt. Verursacht werden die Schwankungen durch:

1. Schwankungen der Laserleistung
2. Austausch der nicht kugelförmigen Partikel im Laserstrahl (Suspensionsinhomogenitäten)
3. Verstärkerrauschen

Um zu verwertbaren Ergebnissen zu kommen, müssen Maßnahmen zur Unterdrückung dieser Schwankungen vorgenommen werden.

3.1 Maßnahmen zur Verminderung der Schwankungseinflusses

Die permanenten Schwankungen sind durch konstruktive Eingriffe allein nicht vollständig zu unterbinden. Kombinierte Maßnahmen sowohl bei der Signalentstehung als auch bei der Signalverarbeitung können jedoch zur Verminderung der Schwankungen führen.

3.1.1 Bei der Signalentstehung

Bei der Signalentstehung sind nur wenige konstruktive Möglichkeiten der Schwankungsverminderung gegeben. Die Stabilisierung der Laserleistung ist nur mit hohem Kostenaufwand möglich. Der Einfluß des Austausches der Partikel im Laserstrahl ist durch die möglichst konstante Zuführung der Suspension oder des Aerosols minimierbar, aber nicht ganz auszuschalten.

3.1.2 Bei der Signalaufnahme

Folgende Maßnahmen können bei der Signalaufnahme zur Verminderung der Schwankungen beitragen:

1. Die Messung ist möglichst gleichzeitig an allen Orten durchzuführen, um Schwankungen der Laserleistung auszugleichen.
2. Die Messungen sollten möglichst schnell nacheinander erfolgen, um über möglichst viele Einzelmessungen mitteln zu können.
3. Die Messung sollte über möglichst großen Winkel (ideal wäre vollständiger Kreisring) erfolgen, um örtliche Schwankungen auszugleichen.

3.2 Mathematische Behandlung von Schwankungen

Die Anwendung aller genannten Methoden zur Verminderung von Schwankungen des Meßsignals reichen jedoch nicht aus um zu akzeptablen Ergebnissen zu kommen. Das zu benutzende Gleichungssystem ist instabil. Das hat zur Folge, daß selbst Meßsignale, die mit nur kleinen Fehlern behaftet sind Lösungen des Gleichungssystems ergeben, die nicht mehr Punkte einer stetigen Kurve sind, sondern oszillierende Werte, die die richtigen nicht mehr erkennen lassen. Die Oszillationen werden um so stärker, je größer die Anzahl der Gleichungen, d.h. je höher die Auflösung und je größer der Meßfehler ist.

3.2.1 Einordnung des Problems

Die Gleichung (3), die die Intensitätsverteilung einer Partikelgrößenverteilung beschreibt, hat die Form einer Fredholm'schen Integralgleichung erster Art. Als Fredholm'sche Integralgleichung erster Art bezeichnet man Gleichungen der Form:

$$\int_a^b K(x, z) f(z) dz = g(x) \quad (10)$$

$f(z)$ ist die gesuchte Funktion, $K(x, z)$ der bekannte Kern der Gleichung und $g(x)$ eine bekannte meist gemessene Funktion.

Die aus der Mathematik bekannten Formalismen für Fredholm'sche Integralgleichungen erster Art können angewendet werden. Auch die in Kap. 2 gezeigte Überführung der Integralgleichung (4) zum linearen Gleichungssystem (8) ist ein bekanntes /4/5/ Approximationsverfahren zur Lösung Fredholm'scher Integralgleichungen, das ähnlich auch bei der Berechnung der spektralen Extinktion und der Streulichtverteilung über den Winkel angewendet wird.

Zur Vereinfachung der folgenden Darstellungen soll nun die Gleichung (8) in die Matrixschreibweise übergeführt werden. Nennt man den Vektor der in den Ringen gemessenen Strahlungsleistungen L mit den Elementen L_j , die Matrix der berechneten Einzelleistungen A mit den Elementen A_{ij} und den Vektor der gesuchten Funktionswerte der Anzahlverteilung q mit den Elementen q_i , so läßt sich Gleichung (8) vereinfacht als Matrixgleichung schreiben:

$$A q = L \quad (11)$$

3.2.2 Probleme bei der Lösung linearer Gleichungssysteme

Gleichungssysteme die durch Approximation aus Integralgleichungen entstanden sind neigen dazu instabil zu werden. Dies liegt zum einen daran, daß diese Gleichungen meist von ihrem Kern beherrscht werden, was bewirkt, daß große Änderungen von $f(z)$ bei gleichem Kern nur geringen Einfluß auf $g(x)$ haben, oder umgekehrt: kleine Änderungen von $g(x)$ haben große Änderungen von $f(z)$ zur Folge. Zum anderen werden die Koeffizienten A_{ij} des Gleichungssystems aus derselben Kerngleichung gebildet, was dazu führt, daß $\det A$ sehr klein werden kann. Beide Effekte äußern sich darin, daß die exakten Lösungen q_e der Gleichung (11)

$$q_e = A^{-1} L_f \quad (12)$$

oszillierende Funktionen q_e ergeben, wenn die L_j mit nur kleinem Fehler behaftet sind. Versucht man nun genauer zu approximieren und wählt kleinere Intervalle, so werden durch die erhöhte Anzahl von Gleichungen die Oszillationen nur noch ausgeprägter.

3.2.3 Mathematische Behandlung instabiler Gleichungssysteme

Die einfachste Möglichkeit die Oszillationen zu unterdrücken ist die, für die Lösung q eine Funktion vorzugeben deren Parameter ermittelt werden. Sollen Partikelgrößenverteilungen ermittelt werden, könnte man einige der bekannten Verteilungsfunktionen wie z.B. Potenzverteilung, RRSB- Verteilung oder logarithmische Normalverteilung benutzen. Auf diese Weise wird das Feld der möglichen Lösungen jedoch unzulässig stark eingeschränkt, denn es wird keine allgemeine Lösung mehr zugelassen. Insbesondere wenn es sich um bi- oder mehrmodale Verteilungen handelt, kann man zu völlig verkehrten Ergebnissen kommen.

Ziel war daher ein Verfahren zu finden, das sowohl allgemeine Lösungen zulässt als auch die Oszillationen unterdrückt. Die aus Gleichung (12) erhaltene exakte, aber oszillierende Lösung q_e die sich aus der fehlerbehafteten Messung L_f ergibt

$$q_e = A^{-1} L_f \quad (13)$$

liefert nach Umstellung

$$A q_e - L_f = 0 \quad (14)$$

Da L_f fehlerbehaftet ist, lässt man diesen Fehler nun auch formell zu und erhält statt Gleichung (14)

$$A q_g - L_f = \epsilon \quad (15)$$

Durch diesen Ansatz wird eine unendliche Menge von Lösungen q_g eröffnet, aus der eine geeignete auszuwählen ist. Die Summe aller Fehlerquadrate von L ergibt sich aus

$$(A q_g - L_f)^T (A q_g - L_f) = \epsilon_i^2 = e^2 \quad (16)$$

Die Minimierung dieser Bedingung allein führt auf $e^2 = 0$ d.h. auf die exakte oszillierende Lösung q_e . Es ist also nötig eine weitere Bedingung einzuführen, die auf eine geglättete Lösung führt. Dazu wird als Maß für die Glattheit der Funktion die Abweichung a_i eingeführt.

Die Abweichung a_i ergibt sich aus

$$a_i = q_i - \frac{1}{2} q_{i-1} - \frac{1}{2} q_{i+1} \quad (17)$$

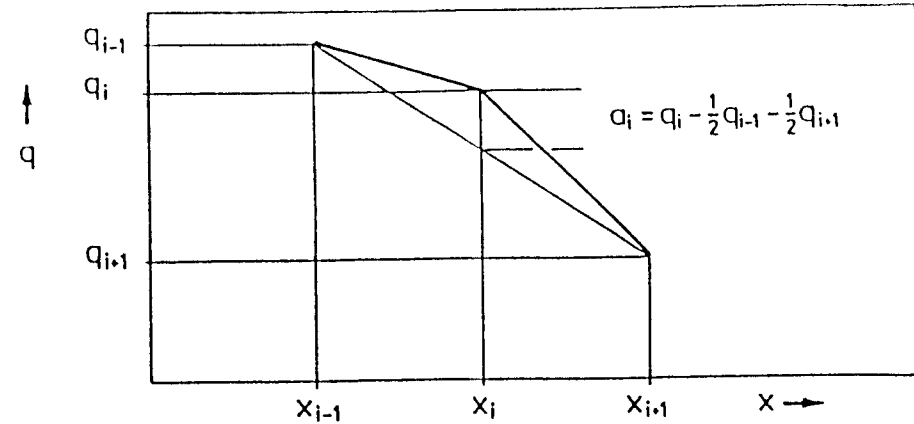


Abb. 8: Definition der Abweichung

Die Summe aller Abweichungsquadrate a^2 ergibt sich aus

$$a^2 = \sum a_i^2 = \sum \frac{1}{4} (2 q_i - q_{i-1} - q_{i+1})^2 \quad (18)$$

in vektorieller Schreibweise ergibt sich

$$a = K q \quad (19)$$

mit

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (20)$$

a^2 erhält man aus

$$a^2 = q^T K^T K q = q^T H q \quad (21)$$

mit

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ -2 & 5 & -4 & 1 & 0 & 0 & \cdot \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & \cdot \\ 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (22)$$

Minimiert wird jetzt die Summe von Fehlerquadratsumme und Abweichungsquadratsumme, wobei ein Teil mit einem Wichtungsfaktor versehen werden muß. Der zu minimierende Ausdruck lautet also

$$\sum \epsilon_i^2 + \gamma \sum a_i^2 = e^2 + \gamma a^2 \quad (23)$$

oder eingesetzt

$$(A q_g - L_f)^T (A q_g - L_f) + \gamma q_g^T H q_g \quad (24)$$

Minimiert wird bezüglich aller q_i . Die Bedingung lautet also:

$$\frac{\partial}{\partial q} ((A q_g - L_f)^T (A q_g - L_f) + \gamma q_g^T H q_g) \stackrel{!}{=} 0 \quad (25)$$

Nach Ableiten, Transponieren und umfangreichem Umformen ergibt sich die auch von Twomey /6/ angegebene Form für geglättete Lösungen.

$$q_g = (A^T A + \gamma H)^{-1} A^T L_f \quad (26)$$

Dieses Verfahren ist formal analog zum Vorgehen bei der linearen Optimierung und der eingeführte Wichtungsfaktor γ wird daher auch hier Lagrange'scher Multiplikator genannt. Er ist ein Maß für die erfolgte Glättung.

4 Ergebnisse der mathematischen Simulation

4.1 Ziele der mathematischen Simulationen

Die durchgeführten mathematischen Simulationen sollten der Klärung folgender Fragen dienen:

1. Wie leistungsfähig ist das beschriebene Verfahren.
2. Wie groß muß der Lagrange'sche Multiplikator γ gewählt werden um eine Partikelgrößenverteilung optimal wiederzugeben?
3. Können mit einem γ unterschiedliche Verteilungen gemessen werden?
4. Welche Genauigkeit der Messung ist erforderlich um zu akzeptablen Ergebnissen zu kommen?
5. Welche Genauigkeit der Ergebnisse ist zu erwarten?

4.2 Vorgehensweise bei der Simulation

Zur Simulation eines Meß- und Berechnungsvorgangs wurde folgende Vorgehensweise gewählt:

1. Festlegung der optischen und geometrischen Konstanten wie Wellenlänge des verwendeten Lichtes (meist $\lambda = 632,8$ nm) Brennweite der verwendeten Linse und Geometrie des Detektors.
2. Annahme einer Partikelgrößenverteilung.
3. Berechnung der von dieser Partikelgrößenverteilung erzeugten Intensitätsverteilung durch numerische Integration von Gleichung (3).
4. Berechnung der in 3) vorgegebenen Kreisringen eines Detektors auftretenden Lichtleistungen durch numerische Integration von Gleichung (4).

5. Zur Simulation eines Meßfehlers Rundung der berechneten Lichtleistungen auf wenige Stellen.
6. Rückrechnung der Verteilung mit der exakten Inversion nach Gleichung (12) und der geglätteten nach Gleichung (26) unter Variation des Lagrange'schen Multiplikators γ .

Als Modellverteilung wurde eine logarithmische Normalverteilung gewählt, da diese durch nur zwei Parameter beschrieben wird und als analytische Funktion leicht zu programmieren ist. Abb. 9 zeigt die Dichteverteilung der gewählten logarithmischen Normalverteilung mit einem Mittelwert $x_{50} = 200 \mu\text{m}$ und einer Standardabweichung $s = 0,5$.

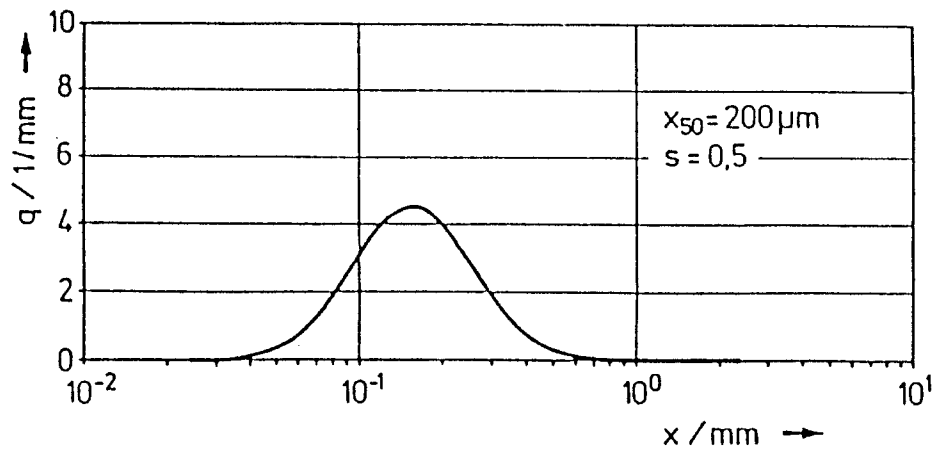


Abb. 9: Logarithmische Normalverteilung mit $x_{50} = 200 \mu\text{m}$ und $s = 0,5$.

4.3 Ergebnisse der mathematischen Simulation

Die Numerische Integration von Gleichung (3) ergab für die Verteilung der Abb. 9 die in Abb. 10 dargestellte Intensitätsverteilung in der Brennebene einer Linse mit einer Brennweite von $f = 1000 \text{ mm}$.

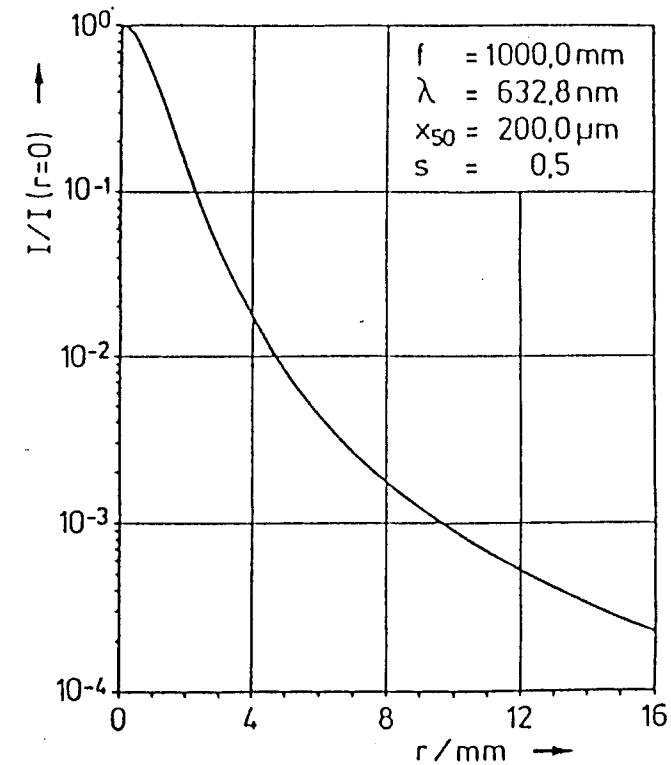


Abb. 10: Errechnete Intensitätsverteilung einer logarithmischen Normalverteilung mit $x_{50} = 200 \mu\text{m}$ und $s = 0,5$.

Durch numerische Integration der Gleichung (4) wurden aus der in Abb. 10 dargestellten Intensitätsverteilung die in 31 vorgegebenen Kreisringen eines Detektors ($r = 0,1 \div 16 \text{ mm}$) auftretenden

Leistungen berechnet. Die exakte Rückrechnung dieser Leistungen mit Gleichung (12) ergab die in Abb. 11 dargestellten, über 10 Zehnerpotenzen oszillierenden Werte.

$$q_e = A^{-1} L_f \quad (12)$$

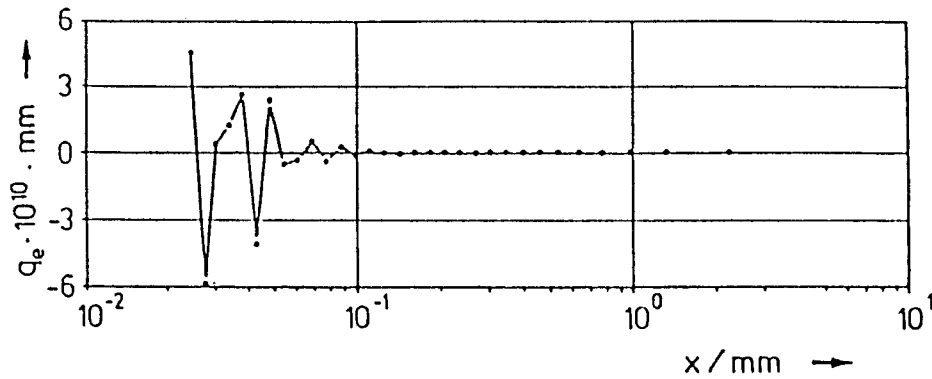


Abb. 11: Ergebnis der exakten Rückrechnung nach Gleichung 12

Erst die Benutzung von Gleichung (26)

$$q_g = (A^T A + \gamma H)^{-1} A^T L_f \quad (26)$$

ergab akzeptable Ergebnisse. Zum quantitativen Vergleich von rückgerechneter und vorgegebener Verteilung wurden die gewichteten Fehlerquadratsummen f_q berechnet:

$$f_q = \sqrt{\sum (\Delta q_i \Delta x_i)^2} \quad (27)$$

Verteilungsdichtekurven deren Fehler f_q unter $2 \cdot 10^{-2}$ liegt sind als akzeptabel zu bezeichnen; liegt f_q unter 10^{-2} so sind die Unterschiede der Werte im Größenbereich der Strichstärke.

Zur Simulation eines Meßfehlers wurden die berechneten Leistungen dann gerundet und mit Gleichung (26) zu Partikelgrößenverteilungen rückgerechnet. Dabei wurde γ von 10^{-16} bis 10^{-5}

variiert. Die Abb. 12 zeigt die rückgerechnete Verteilung der Abb. 9 für unterschiedliche γ -Werte mit den zugehörigen, errechneten Fehlern f_q .

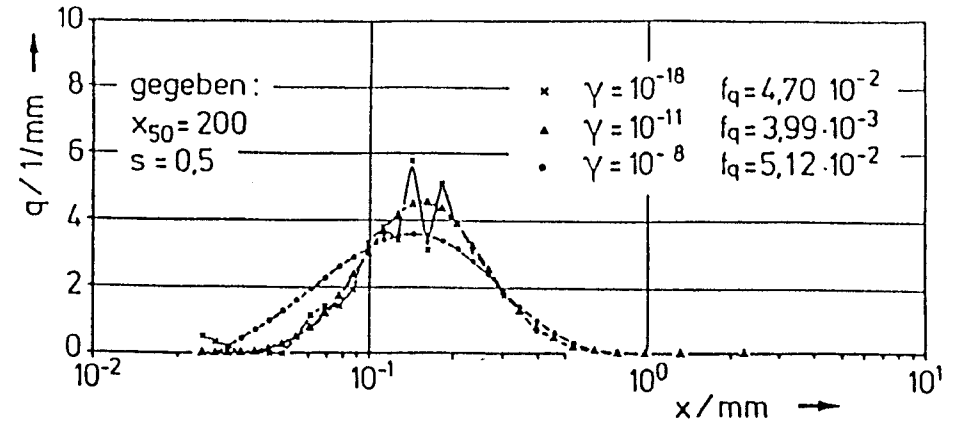


Abb. 12: Mit unterschiedlichen γ -Werten zurückgerechnete monomodale Verteilung mit den zugehörigen Fehlern f_q .

In Abb. 13 ist das Ergebnis einer Simulation unter Vorgabe einer bimodalen Verteilung dargestellt.

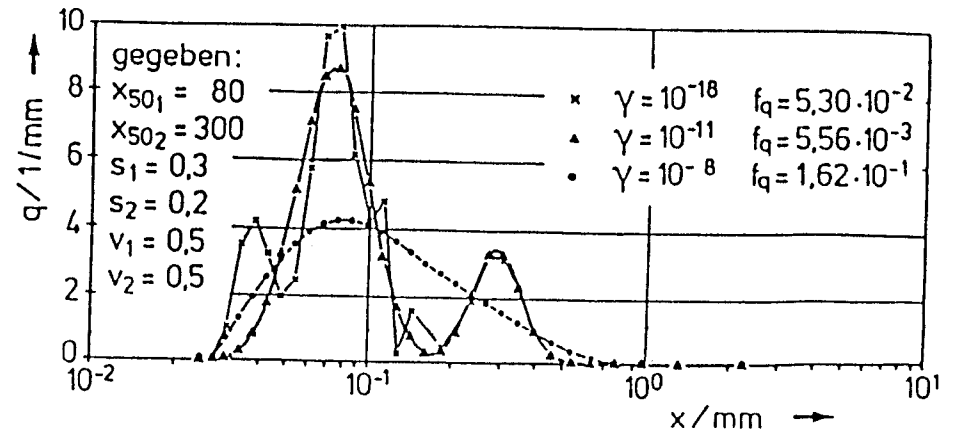


Abb. 13: Mit unterschiedlichen γ -Werten zurückgerechnete bimodale Verteilung mit den zugehörigen Fehlern f_q .

Sowohl bei der mono- als auch bei der bimodalen Verteilung ergab sich die beste Wiedergabe der vorgegebenen Verteilungen für $\gamma = 10^{-11}$.

Für größere Werte von γ , in den Abbildungen 12 und 13 werden die Ergebnisse für $\gamma = 10^{-8}$ gezeigt, ist eine zu starke Glättung der Verteilungskurven deutlich erkennbar. Die mit $\gamma = 10^{-18}$ errechneten Werte zeigen durch ihre Oszillationen die zu geringe Glättung.

Zur Erprobung der Leistungsfähigkeit des Verfahrens wurden sowohl Lage- als auch Streuungsparameter über weite Bereiche variiert. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind in den Abbildungen 14 bis 18 dargestellt. In diesen Abbildungen wurde der errechnete Fehler gegen die jeweils benutzten γ -Werte aufgetragen.

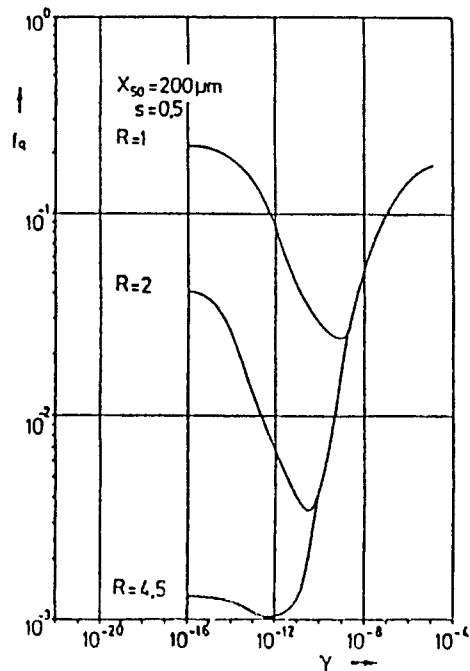


Abb. 14: Einfluß der Rundung auf die errechneten Fehler f_q bei der Rückrechnung einer logarithmischen Normalverteilung mit $x_{50} = 200 \mu\text{m}$ und $s = 0,5$.

Die Kurvenverläufe der Abb. 14 lassen für alle gerechneten Rundungen ausgeprägte Minima erkennen, deren Lage sich mit zunehmender Genauigkeit der benutzten Leistungen zu kleineren Werten von γ verschiebt. Die Glättung muß umso dominierender werden, je ungenauer gemessen wird.

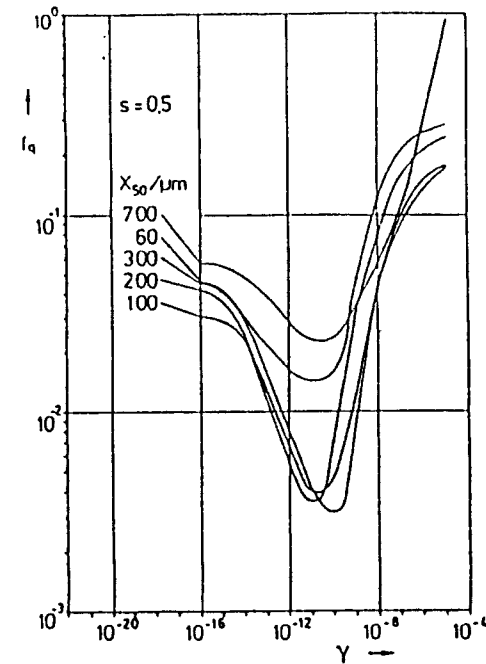


Abb. 15: Einfluß der mittleren Partikelgröße x_{50} auf die errechneten Fehler f_q bei der Rückrechnung einer logarithmischen Normalverteilung mit $s = 0,5$ bei Rundung auf zwei Stellen.

Wird die mittlere Partikelgröße verändert, so ergeben sich die in Abb. 15 gezeigten Verläufe der errechneten Fehler. Die Minima der Fehlerverläufe ändern ihre Lage nur geringfügig, so daß bei Festlegung von z. B. $\gamma = 10^{-11}$ auch sehr unterschiedlich liegende Verteilungen optimal wiedergegeben werden. Die erreichbaren Genauigkeiten der Verteilungen nehmen ab, je weiter sich die mittlere

Partikelgröße dem Rand des erfaßten Bereiches (hier $23 \pm 3000 \mu\text{m}$) nähert. Sollen derartige Verteilungen gemessen werden und ist keine Anpassung des Meßbereiches durch Änderung der benutzten Brennweite möglich, so müssen modifizierte Berechnungsverfahren benutzt werden. Der Bereich der γ -Werte, in dem noch akzeptable Ergebnisse erzielt werden, beträgt, läßt man einmal die am Rande liegenden Verteilungen außer Acht, vier Zehnerpotenzen zwischen bei der Rundung auf nur eine Stelle erheblich schmaler und wird von einigen Verteilungen gar nicht erreicht.

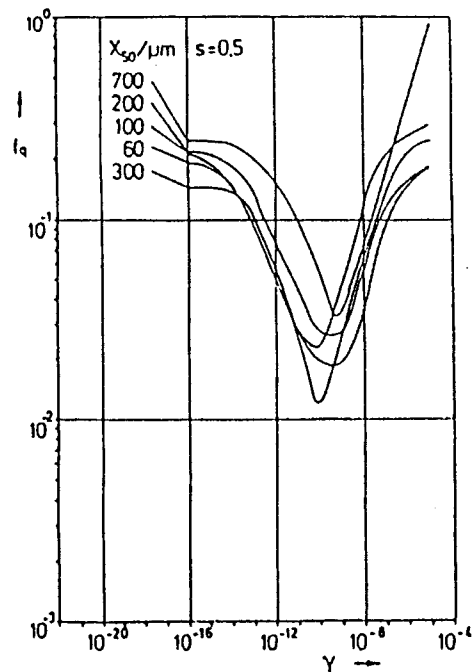


Abb. 16: Einfluß der mittleren Partikelgröße x_{50} auf die errechneten Fehler f_q bei der Rückrechnung einer logarithmischen Normalverteilung mit $s = 0.5$ bei Rundung auf eine Stelle.

Der Einfluß der Veränderung der Standardabweichung s ist in den Abbildungen 17 und 18 dargestellt. Der Fehler überschreitet die Grenzen des akzeptierbaren, wenn die Verteilungen entweder sehr schmal oder sehr breit werden. Im ersten Fall ist die Glättung zu stark, so daß die Maximalwerte der engen Verteilung nicht richtig wiedergegeben werden können. Hier kann ein von Twomey [7] vorgeschlagenes modifiziertes Berechnungsverfahren Abhilfe schaffen. Im zweiten Fall liegen, wie bei zu großen oder zu kleinen x_{50} , zu große Anteile der Verteilung außerhalb des erfaßten Bereiches. Die Abb. 18 läßt jedoch erkennen, daß nicht extrem geformte Verteilungen auch bei einer Rundung der Leistungen auf nur eine Stelle bei $\gamma = 10^{-10}$ noch in akzeptabler Form wiedergegeben werden.

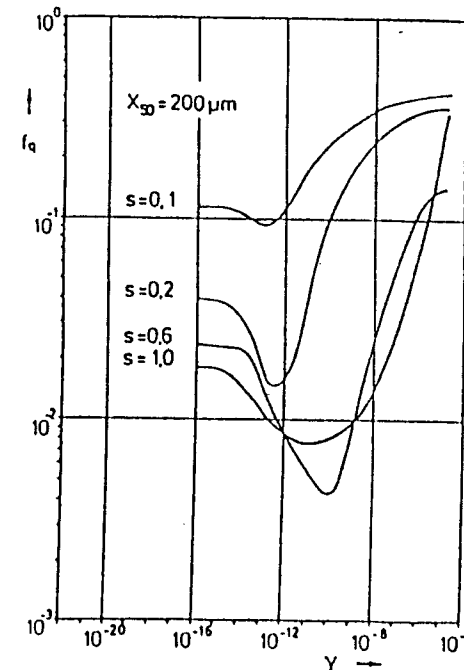


Abb. 17: Einfluß der Standardabweichung s auf die errechneten Fehler f_q bei der Rückrechnung einer logarithmischen Normalverteilung mit $x_{50} = 200 \mu\text{m}$ bei Rundung auf zwei Stellen.

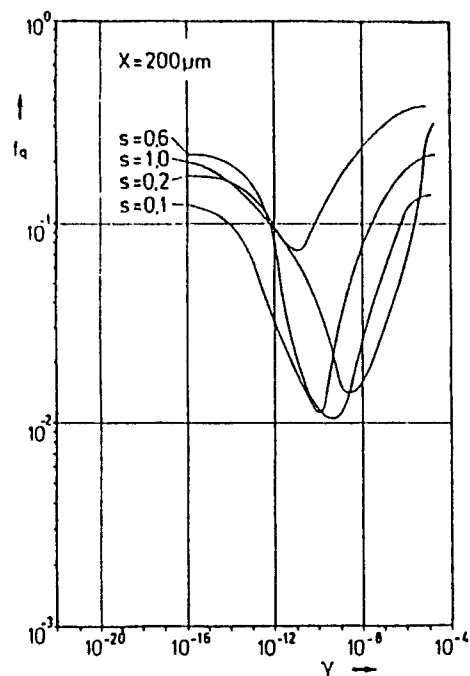


Abb. 18: Einfluß der Standardabweichung s auf die errechneten Fehler f_q bei der Rückrechnung einer logarithmischen Normalverteilung mit $x_{50} = 200 \mu\text{m}$ bei Rundung auf eine Stelle.

5. Zusammenfassung

Soll bei der Messung einer Partikelgrößenverteilung mittels Analyse von Beugungsspektrenanalyse eine größere Anzahl von Stützstellen verwendet werden, so ist die Anwendung eines speziellen Verfahrens zur Berechnung der Partikelgrößenverteilung unumgänglich. Die hier gezeigte Methode beinhaltet keine Vorgaben, die die Menge der möglichen Lösungen unzulässig stark einschränken. Das Maß der einzufügenden Glättung kann unso geringer sein, je genauer gemessen wird. Ganz unterbleiben kann die Glättung auch bei noch so genauen Messungen jedoch nicht. Die Benutzung dieses Verfahrens bedeutet für das Meßgerät keine Notwendigkeit der Vergrößerung der Rechnerkapazität, da nach Ermittlung der erreichbaren Meßgenauigkeit ein Wert von γ für den allgemeinen Betrieb festgelegt werden kann. Die dann noch durchzuführende Matrizenmultiplikation kann jeder Mikrocomputer innerhalb kürzester Zeit leisten. Das beschriebene Verfahren eignet sich daher zum Einsatz in einem auch on-line zu betreibenden Meßgerät.

Die Versuche, die mit einem solchen System am Institut für Mechanische Verfahrenstechnik der TU Clausthal durchgeführt wurden, haben gezeigt, daß das Verfahren die aus der Theorie zu erwartenden Leistungen auch im Experiment erfüllt.

Da das beschriebene Verfahren über die nötige Genauigkeit, Flexibilität und Leistungsfähigkeit verfügt, ist es naheliegend, darauf aufbauend ein neues Gerät zu entwickeln und zur Verfügung zu stellen, das in der Lage ist on-line Partikelgrößenverteilungen genauer als bisher möglich zu messen.

6 Literatur

- /1/ J. Cornillault, Applied Optics, 11(1972), 2. 265-60
- /2/ J. Swithenbank et al. A.I.A.A. Experimental Diagnostics in gas phase combustion systems edites by B. T. Zinn; Progress in aeronautics and astronautics, Vol.,53.
- /3/ J. Meric. Bulletin de la Societe francaise de ceramique 95(1972) 67-76.
- /4/ S. Twomey, "Introduction to the Mathematics of Inversion in remote Sensing and indirect Measurements", Elsevier, Amsterdam, 1977.
- /5/ A. L. Fymat, Appl. Math. Comput. 1(1975) 131-180.
- /6/ S. Twomey, J. ACM, 10(1963) 97-101.
- /7/ S. Twomey, Journal of Computational Physics, 18(1975) 188-200.