

非负迭代截断奇异值纳米颗粒粒度分布反演算法

谭成勋 刘伟* 陈琛 王雅静 陈文钢 申晋

山东理工大学电气与电子工程学院, 山东 淄博 255049

摘要 截断奇异值分解法能够反演纳米颗粒的粒度分布,但通常难以确定其最优截断参数。在分析截断奇异值算法的基础上,提出非负迭代截断奇异值算法来获取纳米颗粒的粒度分布,并对选取截断参数的 L-曲线准则进行了修正。实验结果表明,利用二次截断 L-曲线准则选取最优截断参数,使用非负迭代截断奇异值反演算法,能准确地表征单峰分布的颗粒粒径大小及粒径分布,所求平均粒径相对误差小于 3%。

关键词 散射; 非负迭代截断奇异值分解; 二次截断 L-曲线; 反演算法; 最优截断参数

中图分类号 O433.4 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201535.s129003

Nonnegative Iterative TSVD Inversion Algorithm for Nanoscale Particle Sizing

Tan Chengxun Liu Wei Chen Chen Wang Yajing Chen Wengang Shen Jin

School of Electrical and Electronic Engineering, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255049, China

Abstract Nanoscale particle size distribution can be inverted by truncated singular value decomposition (TSVD) method. However, it is difficult to select the optimal truncated parameter. Based on the analyzation of TSVD method, we present a nonnegative iterative truncated singular value decomposition (NNI-TSVD) method for obtaining the particle size distribution of nanoscale particle suspensions from dynamic light scattering data. Furthermore, we modify the L-curve criterion for choosing the optimal truncated parameter. Experimental data show that with the NNI-TSVD method, its optimal truncated parameter selected by the second truncated L-curve criterion, can be employed to accurately get the average size and size distribution of unimodal suspensions. The relative error of the inverted average diameter is less than 3%.

Key words scattering truncated singular value decomposition(TSVD); nonnegative iterative TSVD (NNI-TSVD); second truncated L-curve; inversion algorithm; optimal truncated parameter

OCIS codes 290.5850; 290.5870; 300.6330

1 引 言

动态光散射(DLS)技术是一种有效的测量纳米颗粒粒径的光散射技术^[1-2],其原理是:由于布朗运动,纳米颗粒的散射光强随时间起伏波动,采用光电探测器测得散射光强,通过对散射光强数据的处理获取颗粒粒度分布信息。从测量数据中获取纳米颗粒粒径分布信息,实际上是对第一类 Fredholm 积分方程的求解,属于反演问题,此类方程是不适定方程,即病态方程。因此,如何准确求出纳米颗粒粒径分布是 DLS 技术的难点。目前,常用的反演算法有:CONTIN 算法^[3-4]、非负约束最小二乘法(NNLS)^[5-6]、截断奇异值分解法(TSVD)^[7-8]、指数采样法^[9]、最大似然法^[10]、神经网络法^[11]、Tikhonov 正则化法^[12]等。然而这些算法都有一定的局限性。CONTIN 算法稳定性好,但由于非负和正则化两种约束同时作用使得程序较为复杂。神经网络

收稿日期: 2015-01-25; 收到修改稿日期: 2015-02-20

基金项目: 山东省自然科学基金(ZR2012FL22, ZR2012EEM028, ZR2014FL027)

作者简介: 谭成勋(1986-),男,硕士研究生,主要从事动态光散射数据反演算法方面的研究。

E-mail: tanchengxun@126.com

* 通信联系人。E-mail: weikey@sdut.edu.cn

络法收敛速度慢,且所要优化的目标函数十分复杂,计算起来非常耗时。TSVD 抗噪能力较强,运算程序较为简单,但得到的分布展宽较大。在求解粒度分布反演过程中,如何寻求最优正则解是解决问题的关键。为了快速简便地获取较准确的颗粒粒度分布,本文采用非负迭代截断奇异值反演算法,并且结合二次截断 L-曲线准则选取最优截断参数,通过求解真实解与反演结果间的偏差来求得最优近似解,获取颗粒粒度分布。

2 动态光散射颗粒测量基本原理

在动态光散射颗粒测量实验中,求得的归一化散射光电场自相关函数为

$$g^{(1)}(\tau) = \int_0^{\infty} G(\Gamma) \exp(-\Gamma\tau) d\Gamma, \quad (1)$$

其中 τ 为相关延迟时间, $G(\Gamma)$ 是归一化的衰减线宽分布,并且满足 $\int_0^{\infty} G(\Gamma) d\Gamma = 1$ 。(1) 式的解为衰减线宽分布 $G(\Gamma)$, 依据 Stokes-Einstein 关系式,可将(1)式转换成对颗粒粒度分布的直接求解,函数表达式变为

$$g^{(1)}(\tau) = \int_0^{\infty} f(D) \exp(-k\tau/D) dD, \quad (2)$$

其中 $f(D) = (k/D^2) \cdot G(\Gamma)$ 为颗粒粒度分布, k 为常数量, D 为球形颗粒粒径。

将(2)式离散化,然后再进行求解,离散化后的方程为

$$\begin{cases} g^{(1)}(\tau_i) = \sum_{j=1}^M f(D_j) \exp(-k\tau_i/D_j), & i = 1, 2, \dots, N \\ \sum_{j=1}^M f(D_j) = 1, & j = 1, 2, 3, \dots, M \end{cases}, \quad (3)$$

其中 M 为粒径, N 为相关通道数。将(3)式写成矩阵的形式:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (4)$$

其中 $A_{ij} = \exp(-k\tau_i/D_j)$, $x_j = f(D_j)$, $\mathbf{b} = g^{(1)}(\tau_i)$ 。

(4) 式是不适定方程,此方程的最优正则解就是纳米颗粒粒度分布。

3 非负迭代奇异值分解法

3.1 截断奇异值分解

假设(4)式的系数矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$), $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$, 则所求的解为 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ 。对系数矩阵进行奇异值分解:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T = \sum_{i=1}^n \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T, \quad (5)$$

其中左奇异向量 \mathbf{u}_i 和右奇异向量 \mathbf{v}_i 分别为左奇异矩阵 $\mathbf{U} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ 和右奇异矩阵 $\mathbf{V} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 的正交列向量, $\mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ 为 n 个奇异值组成的对角矩阵,并且奇异值 σ_i 是按从大到小的顺序排列,即 $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_n > 0^{[7]}$, 如图 1 所示。(4) 式的最小二乘解为:

$$\mathbf{x}_{\text{LS}} = \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i, \quad (6)$$

由(6)式可以看出,当 σ_i 很小,即 $\sigma_i \rightarrow 0$ 时,小的奇异值会对误差进行放大,对最小二乘解的影响较大。

以标称直径为 150 nm 颗粒样品的动态光散射数据为例,对其系数矩阵进行奇异值分解后得:

$$\sigma_1 = 86.6936, \sigma_{100} = 2.8863 \times 10^{-15}, \quad R = \frac{\sigma_1}{\sigma_{100}} = \frac{86.6936}{2.8863 \times 10^{-15}} = 3.003 \times 10^{16}.$$

由此可以看出,第一个奇异值与最后一个奇异值之间的数量级相差 10^{16} ,最小奇异值接近于 0,因此必须对奇异值进行截断,截去小的奇异值。截断后(4)式的最优正则解可以表示为

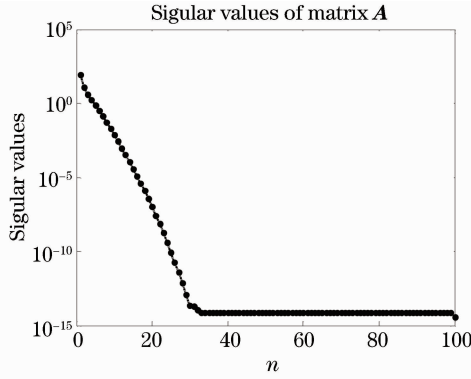


图 1 奇异值分布图

Fig. 1 Distribution of singular value

$$x_{LS} = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T \cdot b}{\sigma_i} v_i, \quad (7)$$

其中 k 为截断长度,称为截断参数,起正则化参数的作用。

3.2 非负迭代奇异值分解法

理论上,(4)式的解是最小二乘解,即 $\|Ax - b\|_2 = \min$,其值可正可负。但实际上,颗粒粒度分布其值不能为负值,故求解必须满足的条件为 $x \geq 0$,因此要对求出的数值进行非负约束,即在非负约束条件下的解才是需要的正则解。即

$$x_{LS} = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T \cdot b}{\sigma_i} v_i, \quad (8)$$

$$x \geq 0.$$

由于对(4)式的求解是求病态方程的正则解,测量值 b 的微小扰动会极大地影响解的稳定性。对真实解与反演结果之间的偏差进行计算,通过求解两者之间的偏差 Δx 来获取最小二乘解。假设已知初始解为 x_0 ,并令 $b_0 = Ax_0$,则(4)式可变形为

$$Ax - Ax_0 = b - b_0 \Rightarrow A \cdot \Delta x_i = \Delta b_i \quad (9)$$

$$Ax_{i+1} - Ax_i = b - b_i \Rightarrow A \cdot \Delta x_i = \Delta b_i$$

根据(9)式,对 x 求解转化成对 Δx 求解,方程(9)的最优解 Δx 使得 $\|A \cdot \Delta x - \Delta b\|_2 = \min$ 。(9)式第一次迭代结果为 $x_1 = x_0 + \Delta x_0$,并进行非负约束,将小于零的值变为零,并通过 $A \cdot \Delta x_1 = b - Ax_1$ 求出 Δx_1 ,比较 $\|\Delta x_1 - \Delta x_0\|_2$ 与 10^{-6} 之间的大小,若差值范数大于 10^{-6} ,则以 $x_2 = x_1 + \Delta x_1 (x_2 \geq 0)$ 进行第二次迭代。以此类推求出 $\Delta x_2, \Delta x_3, \dots$,继而求出 x_2, x_3, \dots ,直到满足条件 $\varepsilon = \|\Delta x_l - \Delta x_{l-1}\|_2 \leq 10^{-6}$ 为止。则 $x_l = x_{l-1} + \Delta x_{l-1}$ 为 $\|Ax - b\|_2 = \min$ 时第 l 次迭代的最优解,即

$$\begin{cases} \|A \cdot \Delta x - \Delta b\|_2 = \min \\ x_l = x_{l-1} + \Delta x_{l-1}, \quad l = 1, 2, 3, \dots \\ x \geq 0 \end{cases} \quad (10)$$

则非负迭代截断奇异值反演算法的步骤为:

- 1) 对系数矩阵 A 进行奇异值分解;
- 2) 假设初始值 $x_0 = 0$,并计算 Δb_0 的值;
- 3) 计算 $\Delta b_l = b - A \cdot x_l, l$ 为迭代的次数;
- 4) 计算 $\|A \cdot \Delta x_l - \Delta b_l\|_2 = \min$,求出最优二乘解 Δx_l ,截断参数由 L-曲线准则确定;
- 5) 计算 $x_l = x_{l-1} + \Delta x_{l-1}$;
- 6) 对 x_l 进行非负约束;

7) 判断是否满足条件 $\varepsilon = \|\Delta x_l - \Delta x_{l-1}\|_2 \leq 10^{-6}$ 。若满足条件, x_l 即为 $\|Ax - b\|_2 = \min$ 的最优二乘解,否则返回 3) 重新计算,直到满足条件为止。

4 截断参数的选取

不同的截断参数对应于不同的解,截断参数过大所取得的奇异值过小,影响解的稳定性。截断参数过小得到的奇异值过大,反演得到的曲线分布过于平坦,与真实分布偏离也很大。不同的截断参数对解的稳定性有不同的影响,截断参数过大或过小都会导致解与真实解之间的偏离,因此选取合适的截断参数是得到最优解的关键。截断参数 k 可以通过 L-曲线准则^[13-15] 或者广义交叉验证 (GCV) 准则^[16] 选取。

GCV 准则源于统计估计理论中选择最佳模型的 PRESS 准则,属于后验选择策略,不需要数据的误差水平。正则化参数的选取就是选取一个参数值,使得函数 $G_{CV}(\lambda)$ 最小,本质是最小化问题。

$$G_{CV}(\lambda) = n \frac{\|\mathbf{I} - \mathbf{A}(\lambda)\mathbf{b}\|^2}{\{\text{trace}[\mathbf{I} - \mathbf{A}(\lambda)]\}^2}, \quad (11)$$

其中 $\mathbf{A}(\lambda) = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A} + n\lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}^T$, n 为矩阵的阶数, \mathbf{A} 为系数矩阵, \mathbf{I} 为单位矩阵, trace 为矩阵的迹, λ 为奇异值。若使函数 $G_{CV}(\lambda)$ 最小的 λ 值为第 k 个奇异值,则 k 即为截断参数。

采用同样的 150 nm 颗粒样品实验数据进行分析,通过图 2 可以看出,采用 GCV 准则选取的截断参数 $k=28$ 。当 $k=28$ 时,使用 NNI-TSVD 与 TSVD 反演算法均无法准确地表征单峰颗粒粒度的分布,所求解与真实解存在巨大偏差,如图 3 所示。由此表明采用截断奇异值反演算法时,GCV 准则选取的截断参数过大,截断处的奇异值过小导致解的不稳定。因此,对于截断奇异值分解法,GCV 准则无法准确有效地选出截断参数。

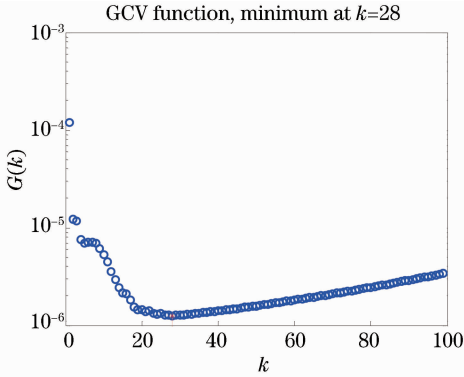


图 2 GCV 准则选取的截断参数

Fig. 2 Truncation parameter selected using GCV criteria

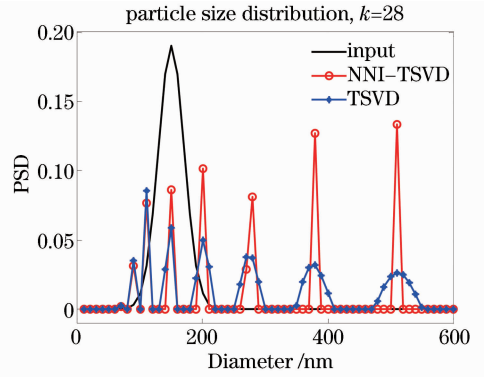


图 3 GCV 准则选取的截断参数得到的反演结果

Fig. 3 Inversion results of truncation parameter selected using GCV criteria

L-曲线准则是以双对数尺度描述残差范数 $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$ 与解的范数 $\|\mathbf{x}\|_2$ 的曲线,图形呈现“L”型,曲率最大处的解即为最优解,拐角处所对应的 k 值为第 k 个奇异值,即为最优截断参数。

采用 L-曲线准则寻求截断参数,并在双对数坐标下画出残差范数 $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$ 与解范数 $\|\mathbf{x}\|_2$ 曲线,如图 4 所示。图 4(a)中, k 的变化范围为 $1 \sim n$,由图可以看出,当奇异值较大时画出的曲线比较平滑,呈“L”

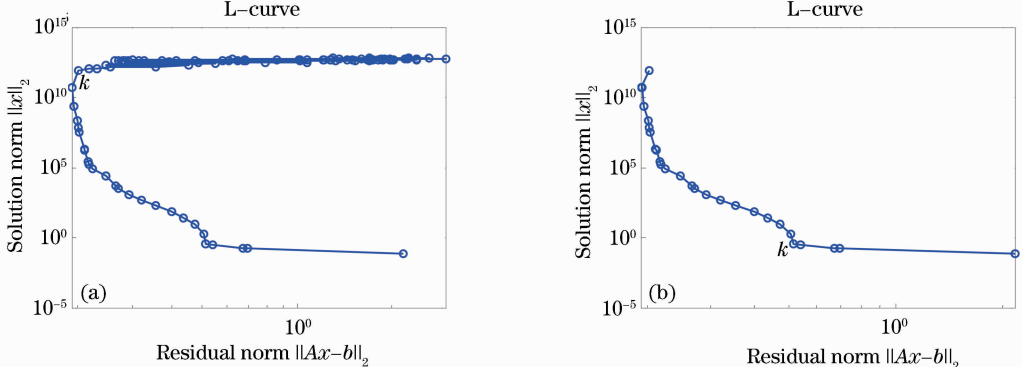


图 4 L-曲线。(a) 所有奇异值作为参数得到的 L 曲线; (b) 二次截断后的 L-曲线

Fig. 4 L-curve. (a) L-curve obtained with all singular values as parameters; (b) L-curve after secondary truncation

型,并且有一个较明显的拐点。但在曲线的上端出现杂乱无章的分布。此时 L-曲线准则选取的曲率最大的点为图 4(a)中 k 所处的位置,截断参数 k 较大,对应的奇异值接近于 0,并不是需要的奇异值,在此处截断无法得到准确的粒度分布。因此,需对 L-曲线准则做相应的修正以便选出最优的截断参数。首先令 $1 < k < n$,采用 L-曲线准则得到截断参数 k , k 将奇异值分成较大奇异值和较小奇异值两部分,定义为初次截断。然后以初次截断获取的 k 个较大的奇异值作为参数,即 $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_k$,将参数的个数限定在较小的范围内,再次采用 L-曲线准则选取最优截断参数,定义为二次截断。二次截断选取的最优截断参数即图 4(b)中 k 所处的位置。

5 模拟数据分析

模拟数据产生的条件如下:实验室温度为 21 °C,入射光波长为 632.8 nm,水的折射率为 $n=1.331$,粘滞系数 $\eta=9.78 \times 10^{-7}$ Pa·s,散射角为 90°,相关延迟时间间隔为 1 μ s,相关通道数为 512。采用正态分布函数模拟单峰颗粒粒度分布:

$$f(d) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left[-\frac{(d-D)^2}{2\sigma^2}\right], \tag{12}$$

其中 $f(d)$ 为模拟的颗粒粒度分布, d 为离散的颗粒粒径, D 为设定的颗粒粒径, σ 为标准偏差。则归一化的模拟光强自相关函数表达式为

$$g^{(2)} = B + \beta [A \cdot f(d)]^2 + \alpha \cdot \epsilon, \tag{13}$$

其中 B 为基线, β 为截距,系数矩阵 $A = \exp(-k\tau/d)$, ϵ 为高斯随机噪声, α 为噪声因子,改变 α 值可改变噪声幅值的大小,噪声因子的选取范围一般为 0 ~ 0.05。

假设待测颗粒粒径 $D=200$ nm,标准偏差 $\sigma=21$ nm,并且在噪声水平为 0,0.01,0.02,0.05 的情况下得到相关函数,图 5 为噪声水平为 0.01 下的光强自相关函数。分别采用 TSVD 和 NNI-TSVD 反演算法进行数据分析。当噪声水平为 0 时,TSVD 和 NNI-TSVD 均可得到比较理想的颗粒粒度分布,其中 NNI-TSVD 更接近于真实分布,如图 6 所示。在不同的噪声水平下,TSVD 反演算法得到的反演分布明显变宽,如图 7 所示。然而 NNI-TSVD 反演算法得到的颗粒粒度分布与真实分布基本保持一致,如图 8 所示。

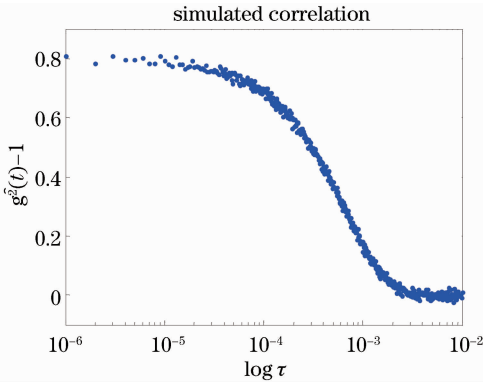


图 5 噪声水平为 0.01 下的光强相关函数
Fig. 5 Intensity autocorrelation function with noise level 0.01

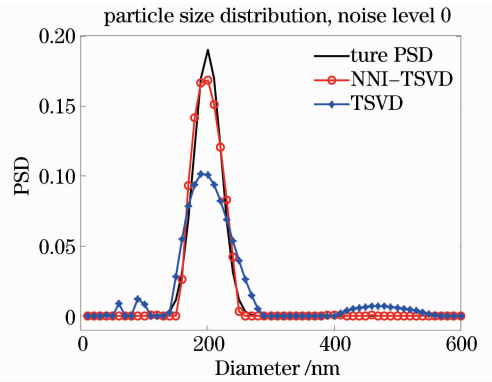


图 6 噪声为 0 时,TSVD 与 NNI-TSVD 反演分布
Fig. 6 Distribution of TSVD and NNI-TSVD methods with noise level 0

分别采用(14)式拟合 TSVD 法和 NNI-TSVD 法得到的颗粒粒度分布曲线,获得平均粒径和相对多分散系数 $P_1 = (\sigma/\bar{D}) \times 100\%$ 。

$$F(D) = k \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{D-\bar{D}}{\sigma_D}\right)^2\right]. \tag{14}$$

在噪声水平为 0.02 时,NNI-TSVD 反演算法得到的曲线,经高斯拟合后获得平均粒径 $\bar{D}=195.2$ nm,标准偏差 $\sigma_D = 30.5$ nm,相对多分散系数为 $P_1 = (30.5/195.2) \times 100\% = 15.8\%$,相对误差 $\epsilon = (|195.2 - 200|/200) \times 100\% = 2.40\%$ 。所有计算结果如表 1 所示。

表 1 不同噪声水平下的反演结果

Table 1 Inversion results with different noise levels

Size /nm	$P_1/\%$	Noise level	TSVD method			NNI-TSVD method		
			\bar{D}/nm	Relative error /%	$P_1/\%$	\bar{D}/nm	Relative error /%	$P_1/\%$
200 $\sigma=21$	10.5	0	190.6	4.70	23.2	197.3	1.35	16.4
		0.01	210.7	5.35	42.7	194.6	2.70	14.9
		0.02	211.0	5.50	44.0	195.2	2.40	15.6
		0.05	190.1	4.95	44.3	198.5	0.75	16.5

通过对模拟数据的分析,在不同噪声水平下,验证了 NNI-TSVD 反演算法的有效性。从图 7 和表 1 可以看出,采用 TSVD 反演算法得到的相对误差约为 5%,多分散系数偏大,展宽比较严重。从图 8 和表 1 看出,NNI-TSVD 反演算法得到的颗粒粒度分布更接近真实分布,粒径相对误差与多分散系数都比较小,得到的平均粒径更加接近于真实值。

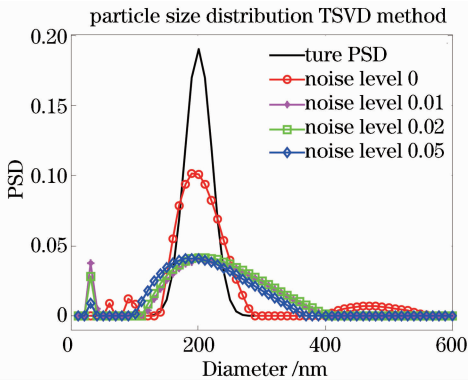


图 7 不同噪声水平下 TSVD 反演结果
Fig. 7 Results of TSVD method in different noise levels

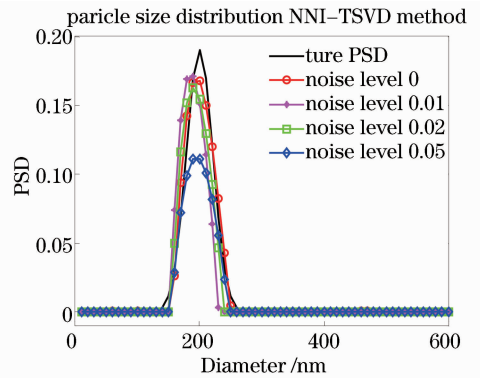


图 8 不同噪声水平下 NNI-TSVD 反演结果
Fig. 8 Results of NNI-TSVD method in different noise levels

6 实验数据分析

实验装置为三维光散射仪 3D DLS,激光波长 632.8 nm,使用 Optek OP-90S 型光子相关器。实验温度为 21 °C,溶剂为水,当波长为 632.8 nm 时,其折射率为 $n=1.331$,粘滞系数 $\eta=9.78 \times 10^{-7} \text{ Pa}\cdot\text{s}$,散射角为 90°。

本文对 60,100,150,200 nm 的四种标准样品颗粒,采用 NNI-TSVD 反演算法求得颗粒粒径分布,然后采用(14)式拟合,得到的高斯拟合曲线如图 9~12 所示。以标准样品颗粒 3060 A 为例,得到的平均颗粒粒径 $\bar{D}=60.8 \text{ nm}$,标准偏差 $\sigma=15.1 \text{ nm}$ 。与标准颗粒粒径的相对误差 $\varepsilon=(|\bar{D}-D|/D) \times 100\%=1.33\%$,相对多分散系数 $P_1=(\sigma/\bar{D}) \times 100\%=24.9\%$,如表 2 所示。

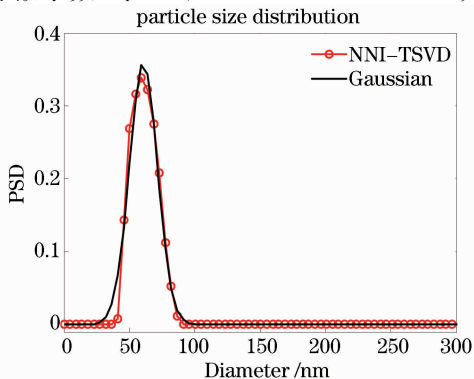


图 9 60 nm 颗粒粒度分布
Fig. 9 Particle size distribution of 60 nm

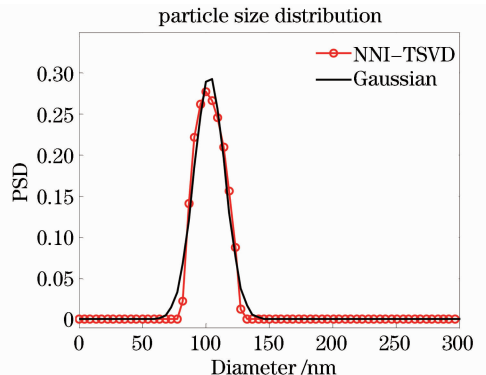


图 10 100 nm 颗粒粒度分布
Fig. 10 Particle size distribution of 100 nm

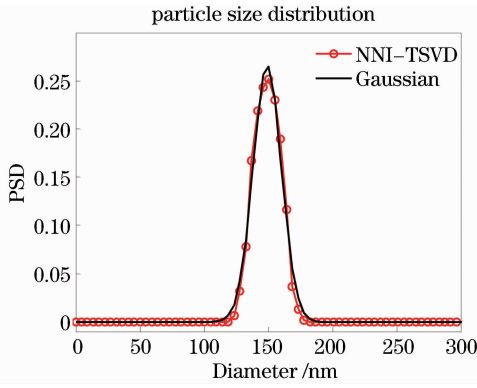


图 11 150 nm 颗粒粒度分布

Fig. 11 Particle size distribution of 150 nm

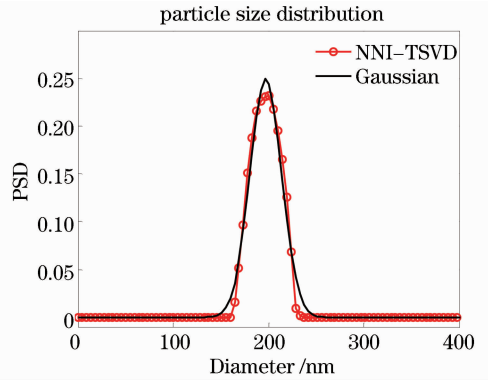


图 12 200 nm 颗粒粒度分布

Fig. 12 Particle size distribution of 200 nm

表 2 标准颗粒样品的实验结果

Table 2 Experimental results of standard materials

No.	Diameter /nm	σ /nm	P_1 /%	\bar{D} /nm	Relative error /%	P_1 /%
3060 A	60±4	10.2	17	60.8	1.33	24.9
3100 A	102±3	5.2	5.1	103.1	1.07	16.7
3150 A	147±3	4.3	2.9	149.2	1.49	10.5
3200 A	203±5	4.7	2.3	197.1	2.90	11.9

通过对 60, 100, 150, 200 nm 四种标准样品颗粒进行实验测量, 得到的粒径相对偏差均小于 3%。在实际测量过程中, 由于受到噪声、杂质等的影响, 反演得到的结果与真实解存在一定的偏差, 实际测得的多分散系数比真实值偏大。

7 结 论

详细阐述了用于纳米颗粒粒径测量的非负迭代截断奇异值反演算法的基本原理, 并对以奇异值作为参数, 采用 L-曲线准则选取截断参数的方法进行修正, 通过模拟数据和实测数据, 对非负迭代截断奇异值反演算法的稳定性, 及二次截断方法选取最优截断参数的有效性进行了验证。实验结果表明, 使用二次截断 L-曲线准则选取最优截断参数, 采用非负迭代截断奇异值反演算法能准确地表征单峰分布的颗粒粒径大小及粒径分布, 平均粒径相对误差小于 3%, 因此该方法能有效地应用于纳米颗粒粒径的测量。

参 考 文 献

- 1 U Kätzel, R Bedrich, M Stintz. Dynamic light scattering for the characterization of polydisperse fractal systems: I. simulation of the diffusional behavior[J]. Part Part Syst Charact, 2008, 25(1): 9–18.
- 2 C Batz-Sohn. Particle sizes of fumed oxides: A new approach using PCS signals[J]. Part Part Syst Charact, 2003, 20(6): 370–378.
- 3 Thomas Antony, Anita Saxena. Laser light scattering immunoassay: An improved data analysis by CONTIN method[J]. J Biochem Biophys Methods, 1998, 36(2–3): 75–85.
- 4 Yu Leishou, Yang Guanling, He Zhenjiang, et al.. Iterative CONTIN algorithm for particle sizing in dynamic light scattering[J]. Opto-Electronic Engineering, 2006, 33(8): 64–69.
俞雷寿, 杨冠玲, 何振江, 等. 用于动态光散射颗粒测量的迭代 CONTIN 算法[J]. 光电工程, 2006, 33(8): 64–69.
- 5 Zhou Shucang, Yang Yanting, Zhou Yuchang. Analysis and improvement on non-negative least square algorithm in size measurement for nano-particle[J]. China Powder Science and Technology, 2009, 15(5): 72–75.
周述苍, 杨艳婷, 周誉昌. 纳米颗粒粒径测量的非负最小二乘法分析及改进[J]. 中国粉体技术, 2009, 15(5): 72–75.
- 6 Zhou Shucang, Zhou Ying, Guo Tiankui. Non-negative least square algorithm for measurement of particle size with photon correlation spectroscopy[J]. Journal of Guangdong University of Technology, 2012, 29(1): 5–8.
周述苍, 周莹, 郭天葵. 光子相关光谱法粒径测量的非负最小二乘法[J]. 广东工业大学学报, 2012, 29(1): 5–8.
- 7 P C Hansen. The truncated SVD as a method for regularization[J]. BIT Numerical Mathematics, 1987, 27(4): 534–553.
- 8 Xinjun Zhu, Jin Shen, Wei Liu, et al.. Nonnegative least square truncated singular value decomposition data[J]. Appl Opt, 2010, 49(34): 6591–6596.
- 9 N Ostrowsky, D Sornette, P Parker, et al.. Exponential sampling method for light scattering polydispersity analysis[J]. J Mod Opt, 1981,

- 28(8): 1059–1070.
- 10 Yunfei Sun, John G Walker. Maximum likelihood data inversion for photon correlation spectroscopy[J]. *Meas Sci Technol*, 2008, 19(11): 115302.
- 11 L M Gugliotta, G S Stegmayer, L A Clementi, *et al.*. A neural network model for estimating the particle size distribution of dilute latex from multiangle dynamic light scattering measurements[J]. *Part Part Syst Charact*, 2009, 26(1–2): 41–52.
- 12 A N Tikhonov, V Arsenin. *Solutions of Ill Posed Problems*[M]. Michigan: V H Winston, Michigan, 1977.
- 13 P C Hansen. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve[J]. *SIAM Review*, 1992, 34(4): 561–580.
- 14 P C Hansen, D P O'Leary. The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems[J]. *SIAM J Sci Comput*, 1993, 14(6): 1487–1503.
- 15 P C Hansen, T K Jensen, G Rodriguez. An adaptive pruning algorithm for the discrete L-curve criterion[J]. *J Comput Appl Math*, 2007, 198(2): 483–492.
- 16 N Riefler, T Wriedt. Intercomparison of inversion algorithms for particle-sizing using Mie scattering[J]. *Part Part Syst Charact*, 2008, 25(3): 216–230.

栏目编辑: 殷建芳