

前向散射颗粒粒径分布分析中的向量相似度反演算法

王天恩 沈建琪 林承军

上海理工大学理学院, 上海 200093

摘要 目前,向量相似度测量(VSM)算法被应用于分析前向散射颗粒测试技术的颗粒粒径分布(PSD)。但其对多峰分布颗粒情况的反演结果并不理想,尤其是对 3 个峰值以上的颗粒分布。为了满足预测多峰分布颗粒的需要及提高普遍适用性,提出了一种基于向量相似度的优化迭代算法,并将其用于颗粒粒径分布函数的反演计算。模拟计算和实验研究均表明:该算法在较高的测量误差情况下仍可得到合理的颗粒粒径分布。

关键词 散射; 向量相似度测量; 欧氏距离; 颗粒粒径; 反演算法

中图分类号 O436 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201636.0629002

Vector Similarity Retrieval Algorithm in Particle Size Distribution Analysis of Forward Scattering

Wang Tian'en Shen Jianqi Lin Chengjun

College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China

Abstract Recently, the vector similarity measurement (VSM) algorithm has been introduced to analyze particle size distribution (PSD) of the forward scattering. However, the retrieval result is not ideal for multi-modal distribution particle systems, especially for the particle distributions of more than three peaks. To satisfy the need of predicting multi-peak distribution particle and enhancing common applicability, a modified iterative algorithm is proposed based on vector similarity measurement, and it is applied in retrieval calculation of PSD function. Simulated results and experimental researches show that the algorithm can also get the reasonable PSD with high measurement error.

Key words scattering; vector similarity measurement; Euclidean distance; particles size; inverse algorithm

OCIS codes 290.5850; 350.4990; 290.5825

1 引 言

基于前向散射光分布的激光粒度仪是颗粒测量领域应用最广泛的仪器之一,相关的研究至今仍在继续^[1-2]。颗粒粒径分布(PSD)的反演计算是光散射颗粒测试技术中的重要问题之一。基于前向散射光分布的激光粒度仪通过扩束器将激光扩展为平行光,并照射到位于测量区内的颗粒上,颗粒的前向散射光经接收透镜后,被位于透镜焦平面上的半圆形环状多元光电探测器接收,得到一组测量信号。从测量数据中得到颗粒粒径分布需要求解第一类 Fredholm 积分方程或者经过离散化处理后的矩阵方程^[3-6]: $\mathbf{A}\mathbf{Q} = \mathbf{E}$ 。其中,向量 $\mathbf{Q} = (q_1, q_2, \dots, q_n)^T$ 是离散化颗粒粒径分布函数, n 是颗粒粒径分档数; 向量 $\mathbf{E} = (E_1, E_2, \dots, E_m)^T$ 是测量量, m 是光电探测器单元数。 \mathbf{A} 是 $m \times n$ 矩阵,可由米氏散射理论计算得到。

通常情况下,矩阵 \mathbf{A} 是病态的,矩阵元的数值相差很大甚至几个数量级^[7-8],求解很困难。当存在实验误差时,所求得解存在明显振荡现象。此外,当选取的颗粒粒径分档数大于探测器单元数(即 $m > n$)时,上述矩阵方程欠定,这导致反演问题解的多值性。

为此,研究人员提出了多种反演计算方法。最常见的有以下几种方法:约束最小二乘法^[9-11]、奇异值分

收稿日期: 2016-01-21; **收到修改稿日期:** 2016-03-04

基金项目: 国家自然科学基金(NSFC 51476104)

作者简介: 王天恩(1989-),男,硕士研究生,主要从事光学测试方面的研究。E-mail: opticswong@163.com

导师简介: 沈建琪(1965-),男,博士,教授,主要从事光学测试方面的研究。E-mail: jqshenk@163.com(通信联系人)

解法(SVD)^[12-16]、正则化方法^[17-21]、迭代求解法^[22-26]等。虽然这些方法已经被证明对线性方程组求解有效,但还存在着一些相关的问题有待解决。在约束最小二乘法中,颗粒粒径分布 Q 通过求解方程 $Q = (A^T A + \gamma H)^{-1} A^T E$ 得到。其中, H 是光滑矩阵, γ 是光滑约束因子。当 γ 取很小的值时, Q 的求解结果会出现严重振荡;反之,当 γ 很大时又会造成光滑过度。因此,选取合适的 γ 值对得到合理的反演结果十分重要。奇异值分解法是将矩阵 A 分解成矩阵乘积的形式,即 $A = U \Sigma V^T$,其中 U 和 V 是正交矩阵, Σ 为对角矩阵(其对角元称作奇异值)。利用奇异值分解法,可以直接求得矩阵方程解,即颗粒粒径分布为 $Q = V[\text{diag}(1/\Sigma_i)](U^T E)$ 。其中, $[\text{diag}(1/\Sigma_i)]$ 表示对角矩阵,其对角元为奇异值的倒数 $1/\Sigma_i$ 。通常情况下,奇异值的数值范围变化很大,其中数值较小的奇异值会引起解的剧烈振荡。因此,奇异值分解法的直接求解存在缺陷,需要与其他方法(如约束最小二乘法、正则化方法等)相结合去除数值较小的奇异值对解的影响。正则化方法是用一个相对良态的方程组替代原病态方程组,从而求得与真解接近的一个近似解。正则化算法改善病态方程组的方法是通过在原矩阵对角元素上加一定量的值,从而达到改善矩阵性态的目的。正则化因子的选择是关键,其值太小起不到改善原方程病态性的作用,所得到的解振荡剧烈;反之,所得的解过于平滑,与实际情况不符。迭代求解法是一种常用的求解颗粒粒径分布算法,例如 Chahine 算法和投影算法等。迭代算法首先需要设定一个初值,然后按照一定的迭代规则循环计算。当迭代结果满足预先设定的收敛条件时,迭代立即停止。在投影算法中,将矩阵方程看成一系列多维空间中的超平面,方程的解看成这些超平面的交点。在设定一个初始点后,依次向各个超平面投影,其投影点在迭代过程中逐步逼近交点(即方程的解)。在解决实际问题时,测量量的误差会导致各个超平面在多维空间中平移,因此矩阵方程不再相交于某个特定的解。因此,投影算法随着循环次数的增加,其最后的解并不能得到保证。

本课题组提出了一种基于向量相似度测量(VSM)技术的反演方法来分析颗粒粒径分布^[27],这种方法是以前测量向量 E 和矩阵 A 的列向量之间的相似度为依据进行反演。数值模拟和实验表明,当实验误差高达 10% 时,这种算法对单峰和双峰颗粒系依旧具有较好的重构能力。然而,对于三峰分布或者更复杂的颗粒系来说,这种算法却不是很有成功。本文提出了一种迭代方法,旨在改良基于 VSM 的反演算法,使之能够适用于多峰分布颗粒系。

2 向量相似度测量的迭代算法

将矩阵 A 写成

$$A = (A_1, A_2, \dots, A_n), \quad (1)$$

式中 A_j 是矩阵 A 的第 j 列列向量,其转置形式为

$$A_j^T = (A_{1j}, A_{2j}, \dots, A_{mj}), \quad (2)$$

则离散化处理后的矩阵方程 $AQ = E$ 可以写成

$$\sum_{j=1}^n A_j q_j = E, \quad (3)$$

可以看出,测量量 E 是所有矩阵列向量的线性组合,因此测量量 E 与各个列向量 A_j 的相似度可以反映出颗粒粒径分布的相关信息。两向量之间的相似度可以有不同的定义方法,较为常见的是余弦相似度和欧氏距离相似度,本文采用欧氏距离相似度进行讨论。

定义欧氏距离如下^[28]:

$$d_j = \|A_j - E\| = \sqrt{\sum_{i=1}^m (A_{ij} - E_i)^2}, \quad (4)$$

对应的相似度定义为^[29-30]

$$s_j^{\text{Euc}} = \frac{1}{1 + d_j}. \quad (5)$$

假设矩阵 A 是近似对角矩阵,则当 $i \neq j$ 时, $A_i^T A_j \approx 0$ 。因此由(3)式可得:

$$q_j \sum_{i=1}^m A_{ij}^2 = A_j^T A_j q_j \approx A_j^T E, \quad (6)$$

由(4)式可得:

$$d_j^2 = \| \mathbf{A}_j - \mathbf{E} \|^2 = \mathbf{A}_j^T \mathbf{A}_j + \mathbf{E}^T \mathbf{E} - 2\mathbf{A}_j^T \mathbf{E}, \quad (7)$$

将(7)式代入(6)式可得:

$$q_j \approx \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mathbf{E}^T \mathbf{E} - d_j^2}{\mathbf{A}_j^T \mathbf{A}_j} \right), \quad (8)$$

从(4)、(5)、(8)式可知,欧氏距离 d_j 越小,则相似度 s_j^{Euc} 越大,对应的粒径分布 q_j 也就越高。基于以上分析,提出一种以最小的欧氏距离 $\min_{1 \leq j \leq n} (d_j)$ 为优先原则获得颗粒粒径分布的迭代方法。迭代过程如下:

1) 将迭代步数 k 的初始值设为 0,未知待求向量的初始值设为 $\mathbf{0}$ (即 $\mathbf{Q}_{k=0} = \mathbf{0}$),此时的测量量为 \mathbf{E} (即 $\mathbf{E}_{k=0} = \mathbf{E}$)。

2) 计算出所有列向量 \mathbf{A}_j 和测量量 \mathbf{E} 的欧氏距离,求得最小欧氏距离,即 $d_{J_k} = \min_{1 \leq j \leq n} (d_j)$,对向量 \mathbf{Q} 的第 J_k 项进行修正,同时从测量量中扣除相应的贡献。即:

$$\begin{aligned} q_{J_{k+1}} &= q_{J_k} + \delta \left(1 + \frac{\mathbf{E}_k^T \mathbf{E}_k - d_{J_k}^2}{\mathbf{A}_{J_k}^T \mathbf{A}_{J_k}} \right), \\ \mathbf{E}_{k+1} &= \mathbf{E}_k - \mathbf{A}_{J_k} \cdot \delta \left(1 + \frac{\mathbf{E}_k^T \mathbf{E}_k - d_{J_k}^2}{\mathbf{A}_{J_k}^T \mathbf{A}_{J_k}} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

式中 δ 为松弛因子。

3) 重复步骤 1)和 2),直到测量量 \mathbf{E}_{k+1} 的范数 $\| \mathbf{E}_{k+1} \|$ 接近预先设定的阈值 ϵ ($\epsilon \ll 1$)。

该迭代算法的思路是:每一次迭代提取的结果均是对残余测量量贡献最大的粒径分档处的分布。通过多次迭代,逐步构建颗粒的粒径分布,同时在测量量中扣除其相应的成份。随着迭代的持续,测量量的残余量不断降低。测量量的残余值小于某个阈值时,颗粒分布重构结束。(9)式中设置了松弛因子 δ 用来控制收敛速度,这是因为在之前的推导中假定了矩阵 \mathbf{A} 是近似对角的,但在实际情况下矩阵 \mathbf{A} 可能是奇异的。根据(7)式,可以确定松弛因子 δ 的取值范围为 $(0, 0.5]$ 。松弛因子 δ 越小,其适应性越强(即允许矩阵 \mathbf{A} 偏离对角矩阵的程度越远),但收敛速度越慢。

3 数值模拟与实验

3.1 无误差情况下的数值模拟

基于前向散射光分布的激光粒度仪的原理图如图 1 所示,其通过扩束器将激光扩展为平行光,并照射到位于测量区内的颗粒上,颗粒的前向散射光经接收透镜后,被位于透镜焦平面上的半圆形环状多元光电探测器接收,得到一组测量信号。

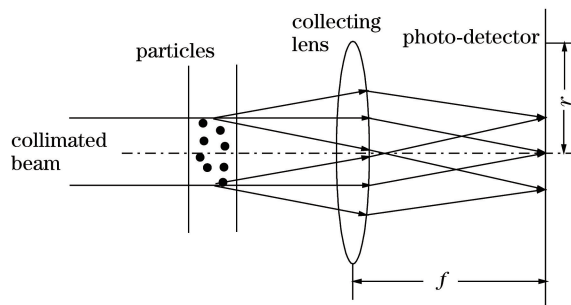


图 1 基于前向散射的激光粒度仪原理图

Fig. 1 Schematic of the laser particle analyzer based on forward light scattering

在数值模拟和实验验证中,采用天津大学生产的有 31 个探测单元的半圆环状光电探测器,其相关参数与参考文献[8]相同。探测器最小半径和最大半径分别为 0.149 mm 和 15.9 mm,接收透镜焦距为 100 mm,采用波长为 0.65 μm 的半导体激光为光源。相应的粒径区间为 1.50 μm 和 191.2 μm 。取 31 个颗粒粒径分档,颗粒粒径分档在对数坐标上均匀,即按照等比数列选取。以分散在水中的聚苯乙烯标准颗粒为模拟对象,相对折射率 $\hat{m} = 1.59/1.33$ 。对于单峰颗粒系,其粒径分布函数 $q(D)$ 采用对数正态分布;对于多峰分布

颗粒系, 粒径分布函数 $q(D)$ 采用多个对数正态分布按照一定比例混合, 单峰分布 (mono-modal)、双峰分布 (bi-modal)、三峰分布 (tri-modal) 和四峰分布 (quadri-modal) 颗粒系的相关参数如表 1 所示。

表 1 不同颗粒系的分布参数

Table 1 Distributed parameters of different particle systems

Mono-modal	Bi-modal	Tri-modal	Quadri-modal
$\bar{D} = 20 \mu\text{m}, \ln \sigma = 0.18$	$\bar{D}_1 = 20 \mu\text{m}, \ln \sigma_1 = 0.2$	$\bar{D}_1 = 10 \mu\text{m}, \ln \sigma_1 = 0.15$	$\bar{D}_1 = 3 \mu\text{m}, \ln \sigma_1 = 0.2$
	$\bar{D}_2 = 60 \mu\text{m}, \ln \sigma_2 = 0.2$	$\bar{D}_2 = 33 \mu\text{m}, \ln \sigma_2 = 0.15$	$\bar{D}_2 = 10 \mu\text{m}, \ln \sigma_2 = 0.15$
		$\bar{D}_3 = 90 \mu\text{m}, \ln \sigma_3 = 0.15$	$\bar{D}_3 = 33 \mu\text{m}, \ln \sigma_3 = 0.15$
			$\bar{D}_4 = 90 \mu\text{m}, \ln \sigma_4 = 0.15$

首先, 预设颗粒分布, 并由离散化处理后的矩阵方程 $\mathbf{A}\mathbf{Q} = \mathbf{E}$ 计算得到模拟测量量 \mathbf{E} 。然后用所提出的算法依据矩阵 \mathbf{A} 和测量量 \mathbf{E} 重构颗粒分布。数值模拟结果如图 2 所示, 图中黑线代表预设的颗粒粒径分布, 蓝线代表通过所提出的优化迭代算法重构的颗粒粒径分布。可以看出, 该算法能够重构出单颗粒系和多颗粒系 (双颗粒及以上颗粒系), 说明该算法较参考文献[27]所提算法有明显的优势。

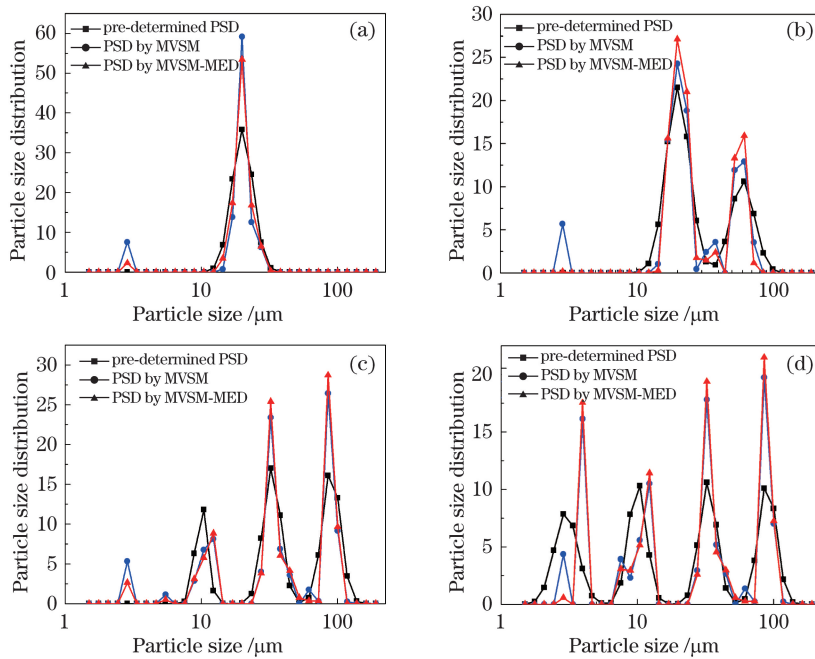


图 2 不同颗粒系的 VSM 迭代算法模拟结果。(a)单峰分布;(b)双峰分布;(c)三峰分布;(d)四峰分布

Fig. 2 Simulation results of different particle systems simulated by VSM iterations. (a) Mono-modal; (b) bi-modal; (c) tri-modal; (d) quadri-modal

然而, 由数值模拟重构出的颗粒粒径分布或多或少会存在一些振荡, 特别是在小粒径处会出现伪峰。导致这种情况的原因是: 本文采用的向量相似度是由欧氏距离定义的, 而欧氏距离依赖于两个向量的范数。因此, 引入修正的欧氏距离 (MED)^[29-30] 如下:

$$d'_j = \eta \sqrt{\sum_{i=1}^m (A_{ij} - E_i)^2}, \quad (10)$$

式中 η 是欧氏距离的修正因子, 用以减小向量范数对欧氏距离的影响。其定义如下:

$$\eta = 2 - \frac{\left| \sum_{i=1}^m (A_{ij} - E_i) \right|}{\sum_{i=1}^m |A_{ij} - E_i|}, \quad (11)$$

需要指出, 修正的欧氏距离只用于迭代算法的第二步来计算向量 \mathbf{A}_j 和 \mathbf{E} , 但不用于(9)式计算 \mathbf{E}_k 和 \mathbf{Q}_k 。为避免混淆, (9)式相应改写为

$$q_{J_{k+1}} = q_{J_k} + \delta \left(1 + \frac{\mathbf{E}_k^T \mathbf{E}_k - \|\mathbf{A}_{J_k} - \mathbf{E}_k\|^2}{\mathbf{A}_{J_k}^T \mathbf{A}_{J_k}} \right)$$

$$\mathbf{E}_{k+1} = \mathbf{E}_k - \mathbf{A}_{J_k} \cdot \delta \left(1 + \frac{\mathbf{E}_k^T \mathbf{E}_k - \|\mathbf{A}_{J_k} - \mathbf{E}_k\|^2}{\mathbf{A}_{J_k}^T \mathbf{A}_{J_k}} \right), \quad (12)$$

在以下实验和数值模拟中将采用 VSM 算法与修正的欧氏距离 (VSM-MED) 相结合来分析颗粒粒径分布。数值模拟结果如图 2 中红色曲线所示。可以看出,修正欧氏距离后所得粒径分布更加接近预定的粒径分布,且粒径分布更加平顺,在小粒径处出现的伪峰也明显减小。

迭代算法中 \mathbf{Q}_k 和 \mathbf{E}_k 的变化过程如图 3 和图 4 所示。当迭代开始 (即 $k=0$) 时, $\mathbf{Q}_k = \mathbf{0}$, \mathbf{E} 为测量的初始值;随着迭代的继续, \mathbf{Q}_k 逐渐增加,同时在向量 \mathbf{E}_k 中扣除 \mathbf{Q}_k 相应的贡献;在经过数次迭代后, \mathbf{E}_k 趋于零,而 \mathbf{Q}_k 也不再发生明显的变化,此时迭代停止。这个过程可以以向量的范数 (即 $\|\mathbf{Q}_k\|$ 和 $\|\mathbf{E}_k\|$) 作为评估标准。以图 2(d) 所示的四峰分布颗粒系为例,该颗粒系的向量范数 $\|\mathbf{Q}_k\|$ 和 $\|\mathbf{E}_k\|$ 随迭代次数增加的变化如图 3 所示,图 4 给出了迭代过程中不同迭代次数时颗粒粒径分布 \mathbf{Q}_k 和测量量 \mathbf{E}_k 的变化过程。从图 4 可以看出,当 $k \in [1, 10]$ 时,粒径分布的峰值已经定位在 $\bar{D}_1 = 3 \mu\text{m}$ 处,且其高度在逐步增加;当 $k \in [11, 50]$ 时,其余三个分布峰值也相继显现,并不断调整各自的高度;当迭代次数 $k \geq 200$ 时,向量 \mathbf{Q}_k 已经基本保持不变。随着迭代的持续,测量量 \mathbf{E}_k 也产生相应变化,直到最后趋近于零。因此,当测量量 \mathbf{E}_k 小于设定的阈值 ($\|\mathbf{E}_k\| \leq \epsilon$) 时,迭代结束。

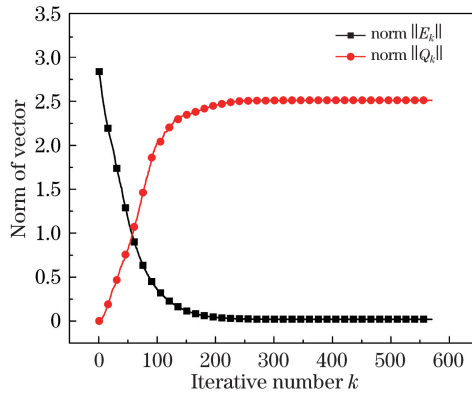


图 3 四峰分布颗粒系向量范数 $\|\mathbf{Q}_k\|$ 和 $\|\mathbf{E}_k\|$ 随迭代次数 k 的变化

Fig. 3 Variations of the norm $\|\mathbf{Q}_k\|$ and $\|\mathbf{E}_k\|$ with the increase of iterative number k for quadri-modal particle system

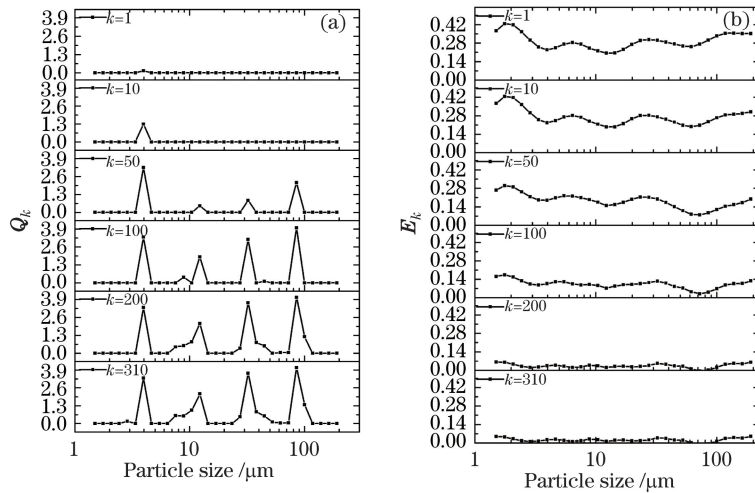


图 4 四峰分布颗粒系向量 (a) \mathbf{Q}_k 和 (b) \mathbf{E}_k 随迭代次数的变化

Fig. 4 Variations of the vectors (a) \mathbf{Q}_k and (b) \mathbf{E}_k with the iterative number for quadri-modal particle system

3.2 有误差的数值模拟

在上述数值模拟中,由离散化处理后的矩阵方程 $AQ = E$ 计算得到的模拟测量量 E 中未加入随机误差。为了检验该算法对实验误差的敏感度,在接下来的数值模拟中,向模拟测量量 E 中加入介于 $\pm 10\%$ 之间的随机误差。反演结果如图 5 所示。

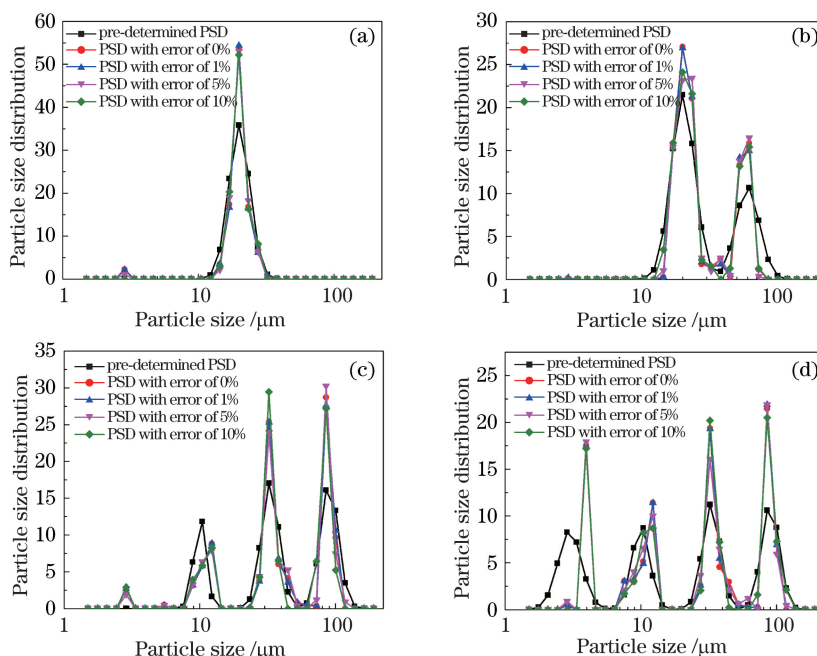


图 5 各颗粒系在不同误差下的模拟结果。(a)单峰分布;(b)双峰分布;(c)三峰分布;(d)四峰分布

Fig. 5 Simulation results of every particle systems with different errors. (a) Mono-modal; (b) bi-modal; (c) tri-modal; (d) quadri-modal

由图 5 可知,反演得到的颗粒粒径分布几乎不受实验误差的影响。这是因为在所提出的相似度算法中,采用了两个向量之间的相似度(或者修正欧氏距离)来进行反演计算,这使得测量量的随机误差在反演过程中对结果的影响甚小。迭代一定次数后,随机误差作为测量量 E_k 的残量保留。因此,只要随机误差控制在一定范围内,所求的结果对误差就不灵敏。

为了了解实验误差对反演算法的影响,图 6 给出了不同误差的向量范数 $\|E_k\|$ 随迭代次数的变化情况。可以看出,当迭代次数足够大时,向量范数 $\|E_k\|$ 将不再变化,其最终大小取决于随机测量误差的大小。显而易见,随机误差越大,最终的向量范数 $\|E_k\|$ 也越大。

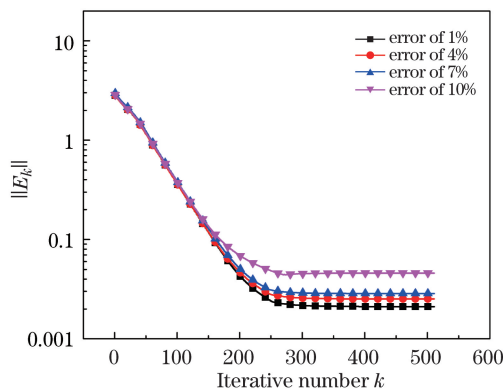


图 6 四峰分布颗粒系中测量量范数 $\|E_k\|$ 随迭代次数的变化

Fig. 6 Variation of the norm $\|E_k\|$ with the iterative number for quadri-modal particle system

值得注意的是,尽管范数 $\|E_k\|$ 的最终残量取决于随机误差的大小,但是由于实验误差的不确定性,依旧需要修正控制迭代结束的次数。其中一种简便的选择方法就是根据范数 $\|E_k\|$ 的变化,例如

$|1 - \| \mathbf{E}_{k+1} \| / \| \mathbf{E}_k \| | < \epsilon$ 。根据这个标准,大概 300 次迭代即可重构出所需的粒径分布,在处理器频率为 3 GHz 的计算机上运行只需不到 1 ms(0.74 ms)的时间。

3.3 实验验证

将聚苯乙烯标准颗粒分散在水中,标准颗粒的标称粒径分别为 15、39、51、76.9 μm 。试样的折射率为 $m_p = 1.59$,水的折射率为 $m_s = 1.33$,入射光波长为 0.65 μm ,接收透镜的焦距为 100 mm。颗粒浓度控制在一定范围内,使遮光率保持在 30%,以避免复散射。

实验所得各标准颗粒试样的测试结果如图 7 所示,测量得到的中位径分别为 14.4、38.0、52.5、72.5 μm ,与标称值的相对误差分别为 -4% 、 2.6% 、 2.9% 和 -5.7% 。

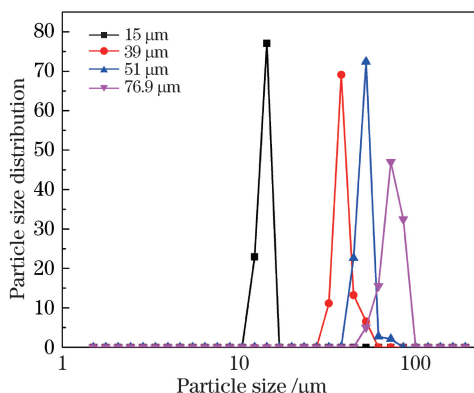


图 7 单峰分布颗粒系用 VSM-MED 算法反演的粒径分布

Fig. 7 PSD of the mono-modal particle system inverted by VSM-MED

图 8 给出了多种混合颗粒系的测试结果。图 8(a)中双峰分布颗粒系的颗粒粒径标称值分别为 15 μm 和 39 μm ,反演结果分别为 14.4 μm 和 38 μm ,相应峰值的相对误差分别为 -4% 和 -3.6% 。图 8(b)中三峰分布颗粒系的颗粒粒径标称值分别为 5、15、51 μm ,反演结果分别为 3.9、12.3、52.5 μm ,相应峰值的相对误差与双峰分布颗粒系相比明显增大。但是,依旧重构了所有的分布峰值。

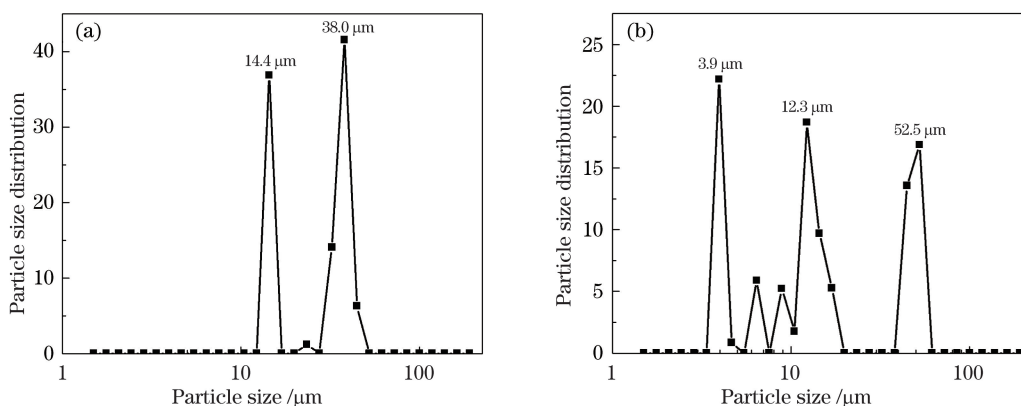


图 8 多峰分布颗粒系的反演粒径分布。(a)双峰颗粒粒径标称值为 15 μm 和 39 μm ;(b)三峰颗粒粒径标称值为 5、15、51 μm

Fig. 8 PSD of the multi-modal particle system. (a) Labeled mean diameters of bi-modal are 15 μm and 39 μm ;

(b) labeled mean diameters of tri-modal are 5, 15, 51 μm

从上述任意一个测试对象中抽取 20 组散射信号进行分析,其标准偏差范围均在 2%以内。相应的逆运算迭代结束后,测量量的残余量范数 $\| \mathbf{E}_k \|$ 与原始测量量范数 $\| \mathbf{E}_0 \|$ 之比大体与测量量的标准偏差相匹配。这说明本文提出的基于 VSM 的迭代算法对实验误差并不敏感。但是,重构得到的部分颗粒粒径分布(尤其是多峰分布)中,其峰值位置存在一定的偏差,同时伴随着较低的伪峰,如图 8(b)所示。这可能是由颗粒粒径分档有限导致的,在本文中颗粒粒径分档数和探测器环数都取 31。

4 总 结

颗粒粒径的反演计算是前向散射颗粒测试技术中的一个关键问题,本文提出了一种基于向量相似度测量的迭代算法,利用矩阵列向量和测量量之间的修正欧氏距离来描述向量相似度,通过迭代方式重构颗粒的粒径分布。在每次迭代中,计算出矩阵各个列向量与测量量之间的相似度(即欧氏距离)。以相似度极大值为优先原则,对颗粒的粒径分布进行修正,同时在测量量中扣除相应的成分。在迭代过程中,颗粒的粒径分布逐次得到修正,当测量量 E 的残余量趋近于零(或不再明显变化)时,迭代终止。文献[27]所提出的相似度算法采用了相似度基准扣除的方式,基准的选取带有有人为因素。与之相比,所给出的迭代公式更加缜密,同时采用了松弛因子以适应矩阵的非正交性,具有较好的性能。

数值模拟和实验结果表明该算法能够合理地重构出多峰分布颗粒系的粒径分布。当随机误差在合理的范围内时,该算法不受随机误差的影响。该迭代算法简单快速,一般来说,从测量数据中重构出粒径分布耗时低于 1 ms。

目前情况下,反演所得的部分粒径分布的峰值稍有偏移且存在伪峰。在后续的研究中,将考虑在反演计算中增设约束,或者采用与其他算法相结合的方式,从而获得更合理的峰值分布。

参 考 文 献

- Ge Baozhen, Pan Linchao, Zhang Fugen, *et al.*. Abnormal moving of scattered energy distribution and its effect on particle size analysis[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(6): 0629001.
葛宝臻, 潘林超, 张福根, 等. 颗粒散射光能分布的反常移动及其对粒度分析的影响[J]. *光学学报*, 2013, 33(6): 0629001.
- Guo Lufang, Shen Jianqi. Dependence of forward light scattering particle size measurement on the relative refractive index [J]. *Chinese J Lasers*, 2016, 43(3): 0308004.
郭露芳, 沈建琪. 相对折射率对前向散射粒度测试的影响[J]. *中国激光*, 2016, 43(3): 0308004.
- Jones A R. Light scattering for particle characterization[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1999, 25(1): 1-53.
- Xu R L. Particle characterization: light scattering methods[M]. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2002: 151-159.
- Jillavenkatesa A, Dapkunas S J, Lum L H. Particle size characterization[Z]. U. S. Government Printing Office, 2001: 93-124.
- Doicu A, Wriedt T, Eremin Y A. Light scattering by systems of particles[M]. Heidelberg: Springer, 2006: 1-66.
- Kandlikar M, Ramachandranst G. Inverse methods for analysing aerosol spectrometry measurements: a critical review [J]. *Journal of Aerosol Science*, 1999, 30(4): 413-437.
- Shen J Q, Yu B, Wang H R, *et al.*. Smoothness-constrained projection method for particle analysis based on forward light scattering[J]. *Applied Optics*, 2008, 47(11): 1718-1728.
- Phillips D L. A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind[J]. *Journal of the ACM*, 1962, 9(1): 84-97.
- Twomey S. On the numerical solution of Fredholm integral equations of the first kind by the inversion of the linear system produced by quadrature[J]. *Journal of the ACM*, 1963, 10(1): 97-101.
- Eldén L. A note on the computation of the generalized cross-validation function for ill-conditioned least square problems [J]. *BIT Numerical Mathematics*, 1984, 24(4): 467-472.
- Hansen P C. Truncated singular value decomposition solutions to discrete ill-posed problems with ill-determined numerical rank[J]. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 1990, 11(3): 503-518.
- Hansen P C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve[J]. *SIAM Review*, 1992, 34(4): 561-580.
- Hansen P C. The L-curve and its use in the numerical treatment of inverse problems[J]. *WIT*, 2001: 119-142.
- Zhu X, Shen J, Liu W, *et al.*. Nonnegative least-squares truncated singular value decomposition to particle size distribution inversion from dynamic light scattering data[J]. *Applied Optics*, 2010, 49(34): 6591-6596.
- Yanai H, Takeuchi K, Takane Y. Projection matrices, generalized inverse matrices, and singular value decomposition [M]. New York: Springer, 2011: 125-148.
- Tikhonov A N, Arsenin V Y. Solutions of ill-posed problems[M]. Washington DC: V. H. Winston, 1977.

- 18 Calvettia D, Morigi S, Reichel L, *et al.*. Tikhonov regularization and the L-curve for large discrete ill-posed problems [J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2000, 123(1-2): 423-446.
- 19 Lukas M A. Robust generalized cross-validation for choosing the regularization parameter[J]. *Inverse Problems*, 2006, 22(5): 1883-1902.
- 20 Su M, Xu F, Cai X, *et al.*. Optimization of regularization parameter of inversion in particle sizing using light extinction method[J]. *China Particuology*, 2007, 5(4): 295-299.
- 21 Fuhry M, Reichel L. A new Tikhonov regularization method[J]. *Numerical Algorithms*, 2012, 59(3): 433-445.
- 22 Chahine M T. Determination of the temperature profile in an atmosphere from its outgoing radiance[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1968, 58(12): 1634-1637.
- 23 Santer R, Herman M. Particle size distributions from forward scattered light using the Chahine inversion scheme[J]. *Applied Optics*, 1983, 22(15): 2294-2301.
- 24 Ferri F, Bassini A, Paganini E. Modified version of the Chahine algorithm to invert spectral extinction data for particle sizing[J]. *Applied Optics*, 1995, 34(25): 5829-5839.
- 25 Wang J, Xie S, Zhang Y, *et al.*. Improved projection algorithm to invert forward scattered light for particle sizing[J]. *Applied Optics*, 2001, 40(23): 3937-3945.
- 26 Pedocchi F, Garcia M H. Noise-resolution trade-off in projection algorithms for laser diffraction particle sizing [J]. *Applied Optics*, 2006, 45(15): 3620-3628.
- 27 Hu B, Shen J Q, Duan T X. Vector similarity measure for particle size analysis based on forward light scattering [J]. *Applied Optics*, 2015, 54(13): 3855-3862.
- 28 Deza M M, Deza E. *Encyclopedia of distances*[M], Heidelberg: Springer, 2009: 94.
- 29 Zhang Yu, Liu Yudong, Ji Zhao. Vector similarity measurement method [J]. *Technical Acoustics*, 2009, 28(4): 532-536.
张 宇, 刘雨东, 计 钊. 向量相似度测度方法 [J]. *声学技术*, 2009, 28(4): 532-536.
- 30 Ge Baozhen, Ma Yunfeng, Wei Yaolin. Improved projection algorithm for measuring distribution of particle sizes [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2012, 20(1): 197-203.
葛宝臻, 马云峰, 魏耀林. 求解粒子群粒度分布的改进 Projection 算法 [J]. *光学 精密工程*, 2012, 20(1): 197-203.