

doi:10.3788/gzxb20164511.1112004

含噪动态光散射测量数据反演中正则化算法与 Chahine 算法的比较

修文正¹, 申晋^{1,2}, 肖莹莹¹, 徐敏¹, 王雅静^{1,2}, 尹丽菊^{1,2}

(1 山东理工大学 电气与电子工程学院, 山东 淄博 255049)

(2 山东理工大学 光电技术研究所, 山东 淄博 255049)

摘要:采用两种常用的粒度反演方法——正则化和 Chahine 算法,对 90 nm 与 250 nm 单峰分布、50 nm 与 200 nm 双峰分布、100 nm 与 300 nm 双峰分布的模拟动态光散射数据,以及 105 nm、300 nm 标准颗粒的实测动态光散射数据进行了反演分析.结果表明:噪声水平的高低是影响粒度分布反演准确性的关键因素之一,反演结果的准确性随噪声水平的增加而降低,噪声水平超过某一阈值后,将无法得到有意义的反演结果;不同反演方法具有不同的抗噪能力,在低噪声水平下反演结果无显著差别,随着噪声水平的增加,反演结果表现出很大差异;正则化方法通过正则参数的选择可以有效抑制噪声影响,表现出强于 Chahine 算法的抗噪能力;与 Chahine 算法相比,正则化方法不需要假定初始分布,因此,在噪声较大的实验或生产过程中进行颗粒分布测量时,宜采用正则化方法.

关键词:散射测量;粒度分布;颗粒测量;反问题;正则化算法;Chahine 算法

中图分类号:O436;O439

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2016)11-1112004-7

Comparison between the Regularization Algorithm and the Chahine Algorithm in Inversions of Scattering Measurement Data of the Noisy Dynamic Light

XIU Wen-zheng¹, SHEN Jin^{1,2}, XIAO Ying-ying¹, XU Min¹, WANG Ya-jing^{1,2}, YIN Li-ju^{1,2}

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

(2 Institute of Optoelectronic Technology, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255049, China)

Abstract: In this paper, two kinds of commonly used particle size inversion methods, regularization algorithm and Chahine algorithm, were used to inverse the simulated dynamic light scattering data of the unimodal distribution of 90nm and 250nm, the bimodal distribution of 50nm and 200 nm, and the bimodal distribution of 100 nm and 300 nm of the particles in submicron region, and measured the dynamic light scattering data of 105nm and 300nm particles, for comparing the noise effects of the two algorithms. The inversion results show that, the noise level is one of the key factor can restrict the accurate inversion for particle size measurement. The accuracy of inversion results decreases with the increase of the noise level, and when the noise level increase to a certain threshold value, the meaningful inversion results will not be obtained. Different inversion methods have different anti-noise ability, but there is no significant difference of the inversion results when noise level is very low. With the increase of the noise level, the retrieval results show a substantial difference: regularization method can effectively restrain the noise influence by the appropriate choice of the regularization parameter, which shows a better anti noise capability than Chahine algorithm. Compared with the Chahine algorithm, the regularization method, despite the need for regularization parameter setting, it does not need to assume the initial distribution. Therefore, it is recommended to use in noisy environment.

Key words: Scattering measurements; Particle size distribution; Particle sizing; Inverse problems;

基金项目:国家自然科学基金(No. 61205191)和山东省自然科学基金(Nos. ZR2014FL027, ZR2015FL034)资助

第一作者:修文正(1991-),男,硕士研究生,主要研究方向为动态光散射测量技术. Email: mrxiuwenzheng@163.com

导师(通讯作者):申晋(1962-),男,教授,博士,博导,主要研究方向为光电精密测试技术. Email: shenjin@sdut.edu.cn

收稿日期:2016-07-06;录用日期:2016-09-05

Regularization algorithm; Chahine algorithm

OCIS Codes: 120.5820;290.0290;290.5820;290.5850

0 引言

动态光散射(Dynamic Light Scattering, DLS)技术是测量亚微米及纳米颗粒的有效方法之一,它是通过散射光强信号随时间的起伏来获取颗粒粒径信息的技术^[1-3].在动态光散射数据处理过程中,病态方程的存在使得噪声对颗粒粒度分布(Particle Size Distribution, PSD)反演的准确性产生严重影响.通常情况下,为减少测量噪声,保证测量结果的准确性,对动态光散射测量条件有着严格的要求^[4].随着动态光散射应用领域的拓展,一些生产过程的应用环境不能满足传统的测量条件要求^[5-7],使得动态光散射测量面临很多噪声问题^[8-10].动态光散射信号是极微弱的散射光信号,信号噪声对测量结果有至关重要的影响,研究噪声对测量的影响对于提高动态光散射信号测量的准确性,以及后期选用合适的反演算法对含噪动态光散射数据进行处理,特别是实现在较强噪声环境进行准确的动态光散射测量具有重要意义.

1990年,Zbigniew Kojro采用正则化方法反演模拟单峰分布颗粒时发现,信号中低频噪声分量的存在会使原始分布的再现性丢失^[11].2009年,Hui Yang分析了动态光散射测量中的噪声主要来源,包括被测样品、激光光源、光探测器和相关器^[12].2012年,Xinjun Zhu和Jin Shen等分析了噪声对正则化反演的影响,指出信号噪声会导致反演的粒度分布变窄,而且随着噪声水平增加,变窄会更加严重^[9].不同的反演方法具有不同的抗噪能力,因而在实际应用中,选择合适的反演方法对测量结果有着重要的影响.通常情况下,按照标准实验室条件,对于单峰窄分布颗粒体系的测量,反演方法的影响并不明显.而在颗粒生成和变化等实验过程的测量中^[5],由于噪声的影响,特别是存在双峰分布的颗粒体系,反演方法的选取则至关重要.本文采用两种常用的粒度反演方法—正则化和Chahine算法,针对90 nm与250 nm单峰分布、50 nm与200 nm双峰分布以及100 nm与300 nm双峰分布的模拟散射光数据,添加不同水平的噪声进行了反演,并对105 nm、300 nm标准颗粒进行了实测.通过比较不同反演方法的抗噪能力得到算法的适用范围.

1 正则化算法和Chahine算法

1.1 正则化算法

DLS技术数据处理的过程中,当溶液颗粒为多分散体系时,归一化的散射光电场自相关函数为

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

式中, $G(\Gamma)$ 是衰减线宽分布函数,在求得 $G(\Gamma)$ 后,由平移扩散系数公式和Stokes-Einstein公式可得颗粒粒径分布, τ 为延迟时间.将式(1)写成离散化的形式,即

$$g^{(1)}(\tau_j) = \sum_{i=1}^N G(\Gamma_i) \exp(-\Gamma_i\tau_j) \quad (2)$$

将式(2)简化为

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (3)$$

式(2)、(3)为病态方程,用Tikhonov正则化算法求解该类病态问题,即求如下优化问题

$$\min: \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \alpha\Omega(\mathbf{x}) \quad (4)$$

式中,系数矩阵 $\mathbf{A} \in R_{m \times n}$ ($m \geq n$), α 为正则化参数, $\Omega(\mathbf{x})$ 为稳定泛函,根据所求解的实际意义,对式(4)做非负约束,则优化式(4)变为

$$\min: \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \alpha \|\mathbf{x}\|^2; \text{ s. t. } x_i \geq 0 \quad (5)$$

等价于

$$\min: \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\alpha}\mathbf{L} \end{bmatrix} \mathbf{x} - \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ 0 \end{bmatrix} \right\|^2; \text{ s. t. } x_i \geq 0 \quad (6)$$

式中, \mathbf{L} 是单位矩阵.

1.2 Chahine算法

Chahine算法也是解决反演问题的有效算法之一,该算法最初是在测量大气温度分布时被提出,后在颗粒测量中得到应用^[13-14].Chahine算法的最大优点就是收敛和计算速度快,经过多次迭代后便能得到一个相对稳定的解.

Chahine算法中首先要确定粒度分布的初始值 $\mathbf{x}^{(1)}$,其次确定迭代格式,即

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{c}^{(k)} \cdot * \mathbf{x}^{(k)} \quad (7)$$

式中

$$\begin{cases} \mathbf{c}^{(k)} = [\mathbf{A}^T \cdot * \mathbf{r}^{(k)}] / \text{sum}(\mathbf{A}) \\ \mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} / \mathbf{b}^{(k)} \\ \mathbf{b}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} \end{cases} \quad (8)$$

式中, \mathbf{A} 是系数矩阵, \mathbf{A}^T 表示矩阵转置, k 为迭代次数, \mathbf{b} 为测量光强值, \mathbf{x} 为粒度分布, $\cdot *$ 和 $/$ 分别表示将两向量的对应元素相乘和相除, $\text{sum}()$ 表示将矩阵每列的元素相加得到的行向量.由Chahine算法的步骤可以看出,利用Chahine算法得到的粒度分布 \mathbf{x} 是非负的.Chahine算法计算所得粒度结果与初始值的选择没有密切的联系,但是,如果初始值的选择偏离实际情况,则迭代的次数会相应地增加.

定义计算结果和测量结果之间差值的均方差

$$\text{RME}^{(k)} = \left| \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M [\mathbf{b} - \mathbf{b}^{(k)}]^2 \right|^{1/2} \quad (9)$$

式中, M 为测量值的数目, \mathbf{b} 为测量值, k 为迭代次数.

当满足 $\left| 1 - \frac{\text{RME}^{(k)}}{\text{RME}^{(k-1)}} \right| \leq 1 \times 10^{-5}$ 时,迭代结束,

输出 $\mathbf{x}^{(k)}$ 为颗粒粒度分布。

2 数值模拟及结果分析

在数值模拟中,我们通过模拟得到的粒度分布计算电场自相关函数,在场强自相关函数值中分别加入不同水平的噪声,然后分别用正则化算法和 Chahine 算法进行反演,探究噪声对两种算法反演的粒度分布的影响。

$$f(D) = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} [t(1-t)]^{-1} \exp \left\{ -0.5 \left[u + \sigma \ln \left(\frac{t}{1-t} \right) \right]^2 \right\} \quad (10)$$

$$f(D) = 0.25 \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} [t(1-t)]^{-1} \exp \left\{ -0.5 \left[u + \sigma \ln \left(\frac{t}{1-t} \right) \right]^2 \right\} + 0.75 \frac{\sigma_1}{\sqrt{2\pi}} [t_1(1-t_1)]^{-1} \cdot \exp \left\{ -0.5 \left[u_1 + \sigma_1 \ln \left(\frac{t_1}{1-t_1} \right) \right]^2 \right\} \quad (11)$$

用式(10)来模拟单峰颗粒粒度分布,用式(11)来模拟双峰颗粒粒度分布。其中, $t = (D - D_{\min}) / (D_{\max} - D_{\min})$, $t_1 = (D_1 - D_{\min}) / (D_{\max} - D_{\min})$ 为归一化尺寸且 $1 \geq t \geq 0$, D 与 D_1 为离散的颗粒粒径, D_{\min} 和 D_{\max} 分别为最小颗粒粒径和最大颗粒粒径, u, u_1, σ 和 σ_1 是分布参数。在 90 nm 单峰颗粒体系中, $D_{\max} = 400$ nm, $D_{\min} = 10$ nm, $u = 3.8, \sigma = 3$; 在 250 nm 单峰颗粒体系中, $D_{\max} = 500$ nm, $D_{\min} = 100$ nm, $u = 1, \sigma = 2.3$; 在 50 nm 与 200 nm 双峰颗粒体系模拟中, $D_{\min} = 1$ nm, $D_{\max} = 300$ nm, $u = 2.9, \sigma = 2, u_1 = -2.7, \sigma_1 = 4$; 在 100 nm 与 300 nm 双峰颗粒体系模拟中, $D_{\min} = 1$ nm, $D_{\max} = 500$ nm, $u = 4, \sigma = 3, u_1 = -1.5, \sigma_1 = 4$ 。为了比较两种算法的抗噪能力,引入两个性能参数^[15]: 峰值误差 Error 1 和分布误差 Error 2

$$\text{Error 1} = \frac{|p_{\text{true}} - p_{\text{meas}}|}{p_{\text{true}}} \quad (12)$$

$$\text{Error 2} = \| f(D_i) - f_1(D_i) \|_2 \quad (13)$$

式中, p_{true} 为模拟的颗粒粒度分布的峰值, p_{meas} 为反演得到的颗粒粒度分布的峰值, $f(D_i)$ 为模拟的颗粒粒度分布, $f_1(D_i)$ 为反演的颗粒粒度分布。误差越小,模拟分布和反演分布匹配程度越好。

图 1 和图 2 分别为 90 nm 单峰颗粒体系在不同噪声水平下用正则化算法和 Chahine 算法反演得到的粒度分布,表 1 为 90 nm 颗粒粒度反演的性能参数。从图 1 和表 1 可以看出,用正则化算法反演颗粒粒度分布时,当噪声水平为 0 时,正则化算法可以很好地反演出 90 nm 颗粒粒度分布,随着噪声水平的增加,反演得到的粒度分布误差和峰值误差都随之增加,当噪声水平达到 0.1 时,峰值误差为 0.297,粒度分布误差为 0.158。从图 2 和表 1 可以看出,与正则化算法相比,Chahine 算法更易受噪声影响,当噪声水平为 0 时,Chahine 算法可以准确地反演出粒度分布,当噪声水平

模拟数据选取 90 nm 与 250 nm 单峰颗粒体系,50 nm 与 200 nm、100 nm 与 300 nm 双峰颗粒体系 4 组数据来进行数值模拟,模拟的实验条件为:激光在真空中的波长 $\lambda = 632.8$ nm,溶液折射率 $m = 1.33$,绝对温度 $T = 273$ K,波尔兹曼常数 $k_B = 1.3807 \times 10^{-23}$ J/K,粘性系数 $\eta = 0.89 \times 10^{-3}$ Pa/s,散射角 $\theta = 90^\circ$ 。粒度分布选用 Johnson-SB 函数来模拟,即

为 0.000 1 时,反演得到的峰值和粒度分布存在较大误差,当噪声水平为 0.001 时,反演得到的粒度分布的峰值误差为 0.209,分布误差达到 0.074,远大于正则化方法的峰值误差 0.044,分布误差 0.033。综合分析图 1 和图 2 可以得出,正则化算法反演 90 nm 颗粒粒度分布时,抗噪能力优于 Chahine 算法。

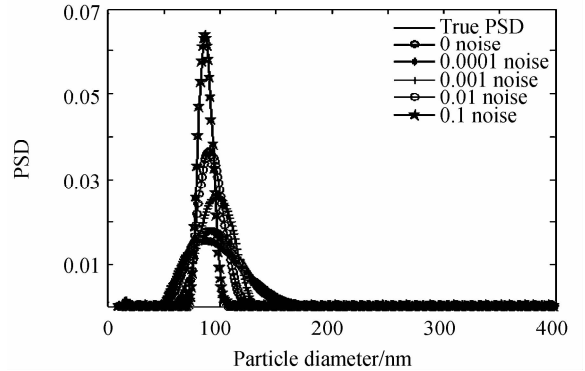


图 1 90 nm 颗粒在不同噪声水平下的正则化算法反演结果

Fig. 1 PSDs of 90 nm particles recovered from regularization algorithm

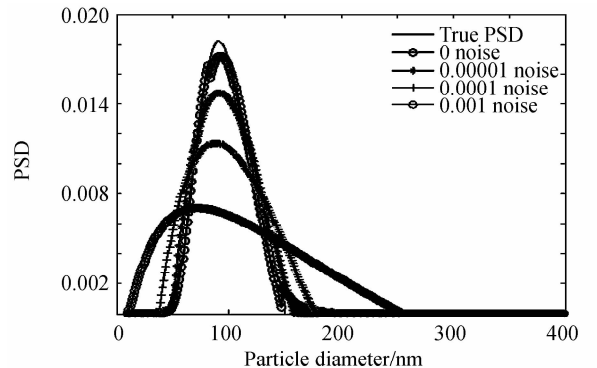


图 2 90 nm 颗粒在不同噪声水平下的 Chahine 算法反演结果

Fig. 2 PSDs of 90 nm particles recovered from Chahine algorithm

表 1 不同噪声水平下 90 nm 颗粒粒度反演的性能参数

Table 1 The performance parameters of 90 nm PSDs under different noise levels

Size /nm	Noise level	Regularization		Chahine	
		Error 1	Error 2	Error 1	Error 2
90	0	0.01	0.003	0.022	0.005
	0.000 01	0.011	0.009	0.015	0.020
	0.000 1	0.011	0.017	0.033	0.043
	0.001	0.044	0.033	0.209	0.074
	0.01	0.044	0.082		
	0.1	0.297	0.158		

图 3 和图 4 分别为 250 nm 颗粒在不同噪声水平下的正则化算法和 Chahine 算法反演结果,表 2 为 250 nm 颗粒粒度反演的性能参数.从图 3、图 4 和表 2 可以看出,当噪声水平为 0 时,两种算法都可以很好地反演出 250 nm 颗粒粒度分布,随着噪声水平的增加,两种算法反演得到的粒度分布误差和峰值误差都随之增加,但当噪声水平达到 0.001 时,Chahine 算法反演得到的粒度分布开始完全失真,正则化算法明显优于 Chahine 算法.

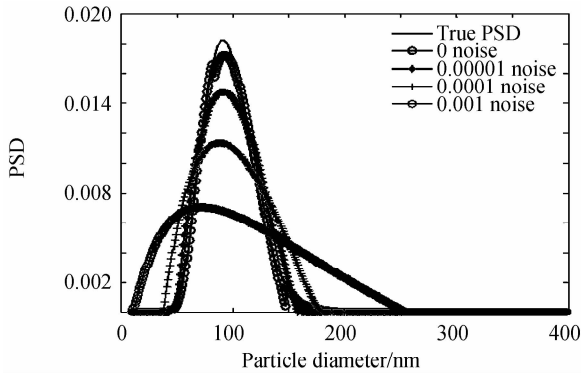


图 3 250 nm 颗粒在不同噪声水平下的正则化算法反演结果

Fig. 3 PSDs of 250 nm particles recovered from regularization algorithm

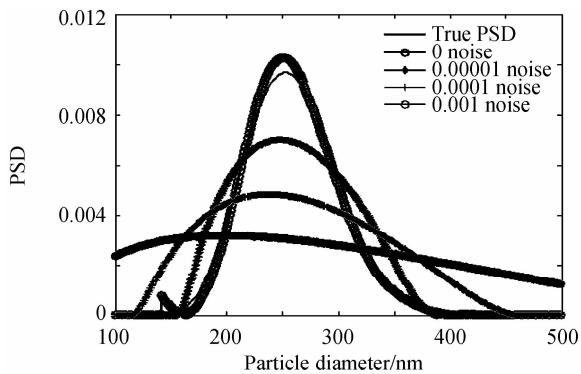


图 4 250 nm 颗粒在不同噪声水平下的 Chahine 算法反演结果

Fig. 4 PSDs of 250 nm particles recovered from Chahine algorithm

表 2 不同噪声水平下 250 nm 颗粒粒度反演的性能参数

Table 2 The performance parameters of 250 nm PSDs under different noise levels

Size /nm	Noise level	Regularization		Chahine	
		Error 1	Error 2	Error 1	Error 2
250	0	0.008	0.014	0.012	0.018
	0.000 01	0.008	0.016	0.008	0.019
	0.000 1	0.034	0.019	0.044	0.044
	0.001	0.012	0.043	0.202	0.060
	0.01	0.032	0.114		
	0.1	0.337	0.209		

从图 5、图 6 和表 3 可以看出,当噪声水平为 0.000 1 时,正则化算法反演的 50 nm 与 200 nm 双峰颗粒粒度分布,能够给出较为准确的峰值信息和比较小的分布误差,而 Chahine 算法反演出的粒度分布只有一个峰值,且存在较大误差.噪声水平提高到 0.01 时,正则化算法仍能反演出双峰,而 Chahine 算法在噪声水平大于 0.000 01 已经不能给出双峰分布.不难看出,对于 50 nm 与 200 nm 双峰颗粒粒度分布的反演,正则化算法表现出强于 Chahine 算法的抗噪能力.

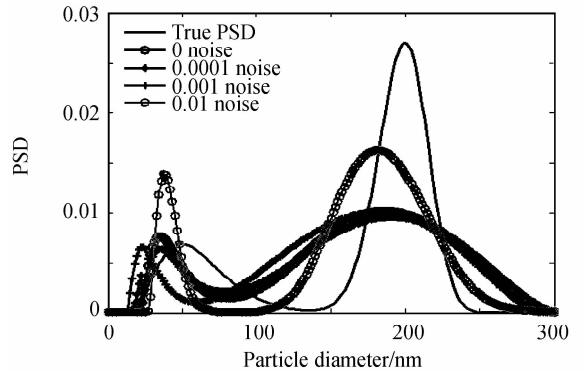


图 5 50 nm 与 200 nm 双峰颗粒在不同噪声水平下的正则化算法反演结果

Fig. 5 PSDs of 50 nm and 200 nm bimodal particles recovered from regularization algorithm

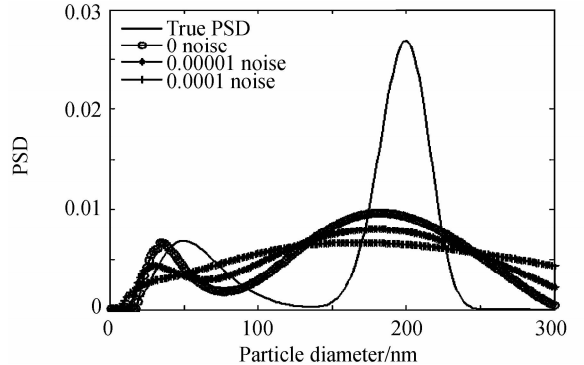


图 6 50 nm 与 200 nm 双峰颗粒在不同噪声水平下的 Chahine 算法反演结果

Fig. 6 PSDs of 50 nm and 200 nm bimodal particles recovered from Chahine algorithm

表 3 不同噪声水平下 50 nm 与 200 nm 双峰颗粒粒度反演的性能参数

Table 3 The performance parameters of 50 nm and 200 nm bimodal PSDs under different noise levels

Size /nm	Noise level	Regularization		Chahine	
		Peak value/nm	Error 2	Peak value/nm	Error 2
	0	33/184	0.071	36/190	0.058
50/	0.000 01			31/181	0.073
200	0.000 1	32/179	0.072	-/170	0.079
	0.001	32/181	0.062		
	0.01	24/169	0.101		

图 7 和图 8 分别为 100 nm 与 300 nm 双峰颗粒正则化和 Chahine 算法的反演结果,表 4 为相应的反演性能参数表,可以看出,Chahine 算法在噪声水平为 0.000 1 时反演出的粒度分布只有一个峰值,此时的分布误差为 0.043,大于正则化算法反演得到的粒度分布误差 0.033,而正则化算法在噪声水平为 0.001 时,反演出的粒度分布仍能明显看出存在两个峰,分布误差为 0.05.

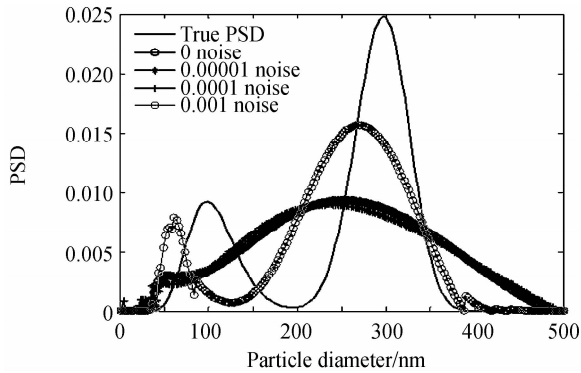


图 7 100 nm 与 300 nm 双峰颗粒在不同噪声水平下的正则化算法反演结果

Fig. 7 PSDs of 100 nm and 300 nm bimodal particles recovered from regularization algorithm

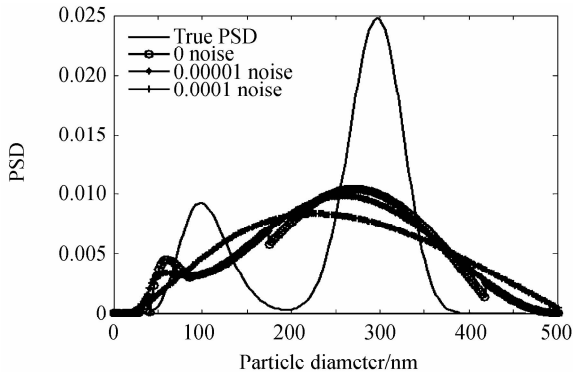


图 8 100 nm 与 300 nm 双峰颗粒在不同噪声水平下的 Chahine 算法反演结果

Fig. 8 PSDs of 100 nm and 300 nm bimodal particles recovered from Chahine algorithm

表 4 不同噪声水平下 100 nm 与 300 nm 双峰颗粒粒度反演的性能参数

Table 4 The performance parameters of 100 nm and 300 nm bimodal PSDs under different noise levels

Size /nm	Noise level	Regularization		Chahine	
		Peak value/nm	Error 2	Peak value/nm	Error 2
	0	78/275	0.043	70/270	0.047
100/	0.000 01	73/241	0.055	70/265	0.050
300	0.000 1	80/260	0.033	-/220	0.043
	0.001	100/240	0.050		

3 实验分析

DLS 实验装置由波长为 632.8 nm 的垂直偏振 He-Ne 激光器、100 通道的数字相关器等组成,测量温度 298K. 由于动态光散射信号的信噪比与信号采样数量有关,采样数越少,信噪比越低. 动态光散射信号中包含的噪声包括散粒噪声和信号噪声,信号噪声可以通过改善光路和信号处理电路的设计,以及提高操作者的测量操作技能和优化测量环境等因素加以抑制,而散粒噪声来源于光电探测器(一般为光电倍增管),可以通过采用高性能光电探测器件和增加采样数据量进行抑制. 因此采样数越多,信号中的散粒噪声水平越低. 为比较两种算法反演实测数据时的抗噪性能,分别用采样数 3×10^6 代表低噪声数据,采样数 5×10^5 代表高噪声数据. 图 9 和图 10 分别为 105 nm 颗粒在不同采样点数下的正则化算法、Chahine 算法反演结果,表 5 为 105 nm 颗粒粒度反演的性能参数表. 从图 9、图 10 和表 5 可以看出,在采样数量为 3×10^6 时,两种算法都能很好地反演出 105 nm 颗粒粒度分布,在采样数量为 5×10^5 时,Chahine 算法反演的峰值误差增大.

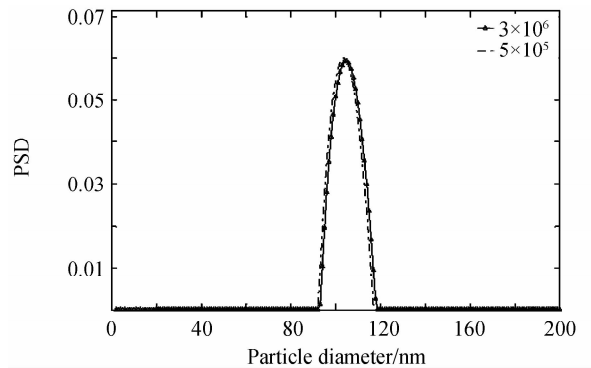


图 9 105 nm 颗粒在不同采样数量下的正则化算法反演结果

Fig. 9 PSDs of 105 nm particles recovered from regularization algorithm

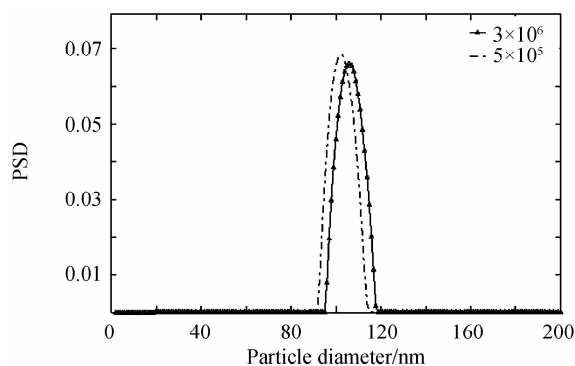


图 10 105 nm 颗粒在不同采样数量下的 Chahine 算法反演结果

Fig. 10 PSDs of 105 nm particles recovered from Chahine algorithm

表 5 不同采样数量下 105 nm 颗粒粒度反演的性能参数
Table 5 The performance parameters of 105 nm PSDs under different sample numbers

Size /nm	Sample number	Regularization		Chahine	
		Peak value/nm	Error 1	Peak value/nm	Error 1
105	3×10^6	104	0.009	106	0.009
	5×10^5	103	0.019	101	0.038

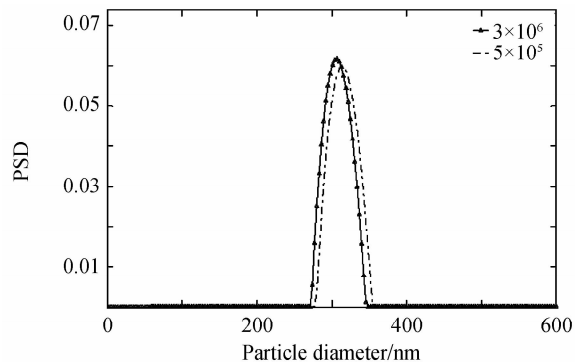


图 11 300 nm 颗粒在不同采样数量下的正则化算法反演结果

Fig. 11 PSDs of 300 nm particles recovered from regularization algorithm

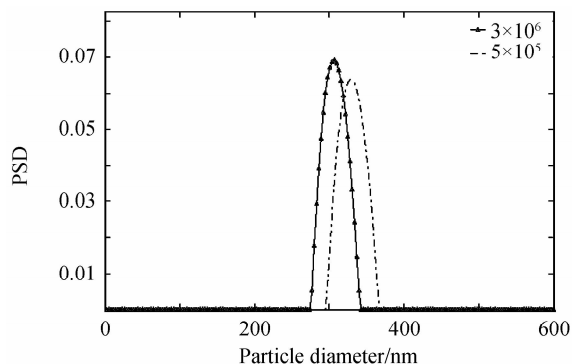


图 12 300 nm 颗粒在不同采样数量下的 Chahine 算法反演结果

Fig. 12 PSDs of 300 nm particles recovered from Chahine algorithm

表 6 不同采样数量下 300 nm 颗粒粒度反演的性能参数
Table 6 The performance parameters of 300 nm PSDs under different sample numbers

Size /nm	Sample number	Regularization		Chahine	
		Peak value/nm	Error 1	Peak value/nm	Error 1
300	3×10^6	306	0.020	307	0.023
	5×10^5	312	0.040	322	0.073

图 11 和图 12 分别为 300 nm 颗粒在不同采样数量下的正则化算法与 Chahine 算法的反演结果,表 6 为 300 nm 颗粒粒度反演的性能参数.从图 11、图 12 和表 6 可以看出,在采样数量为 3×10^6 时,正则化算法可以很好地反演出 300 nm 颗粒粒度分布,采样数量的减少导致反演得到的峰值误差增大.与正则化算法相比,Chahine 算法反演颗粒粒度分布时,采样数减少导致的峰值误差增大更加明显.

4 结论

正则化方法不需要假定初始分布,但需要设定正则参数,正则参数与反演分布存在一定的映射关系,求出最优正则参数即可求出最优分布,最优正则参数在 L -curve 的拐点处. Chahine 循环算法初始分布可以任意选取,但是必须是正值,且对系数矩阵要求较严格,若初始分布偏离真实值太大则迭代次数将会增加,收敛速度相应变慢.

本文采用两种常用的粒度反演方法—正则化算法和 Chahine 算法,对 90 nm 与 250 nm 单峰分布,50 nm 与 200 nm、100 nm 与 300 nm 双峰分布的模拟动态光散射数据进行了反演,并用 105 nm、300 nm 标准颗粒的实测数据反演进行验证,结果表明:噪声是影响粒度分布反演准确性的关键因素,无论是正则化算法还是 Chahine 算法,反演的粒度分布结果误差都随着噪声水平的提高而增大,噪声超过某一阈值后,将无法得到有意义的反演结果;不同的反演方法具有不同的抗噪能力,在低噪声水平下反演结果无显著差别,随着噪声水平的提高,反演结果会表现出很大差异,在单峰颗粒粒度分布反演中,噪声水平为 0.1 时,采用正则化算法仍能给出较好的粒度分布,而 Chahine 算法反演颗粒粒度分布时,噪声水平不能超过 0.001. 在双峰颗粒粒度分布反演中,正则化算法能承受的噪声水平可达 0.01,而 Chahine 算法要求噪声水平不能超过 0.00001. 在良好的实验室测量条件下(信号噪声得到有效抑制),采样数据量大于通常要求的 10^6 时,对于单峰颗粒体系,两种反演方法都可使用,对于多峰分布颗粒体系,或采样数据少于 10^6 的单峰颗粒体系,则不宜采用 Chahine 算法. 由于正则化方法通过正则参数的选择可以有效抑制噪声影响,表现出强于 Chahine 算法的抗噪能力,因此,在较强噪声环境下进行动态光散射测量时,宜采

用正则化算法进行反演.

参考文献

- [1] HASSAN P A, RANA S, VERMA G. Making sense of brownian motion: colloid characterization by dynamic light scattering[J]. *Langmuir the Acs Journal of Surfaces & Colloids*, 2015, **31**(1): 3-12.
- [2] THOMAS J C. Photon correlation spectroscopy: technique and instrumentation[J]. *Proc Spie*, 1991, **1430**: 2-18
- [3] KATZEL U, BEDRICH R, STINTZ M, *et al.* Dynamic light scattering for the characterization of polydisperse fractal systems; I. simulation of the diffusional behavior[J]. *Particle & Particle Systems Characterization*, 2008, **25**(1): 9-18.
- [4] ISO 22412: 2008 (E), Particle size analysis-dynamic light scattering (DLS) [S]. Switzerland, 2008.
- [5] DIERKS K, MEYER A, EINSPAHR H, *et al.* Dynamic light scattering in protein crystallization droplets; adaptations for analysis and optimization of crystallization processes [J]. *Crystal Growth & Design*, 2008, **8**(5): 1314-6.
- [6] LAUKKANEN A, VALTOLA L, WINNIK F M, *et al.* Formation of colloiddally stable phase separated poly (N-vinylcaprolactam) in water; a study by dynamic light scattering, microcalorimetry, and pressure perturbation calorimetry[J]. *Macromolecules*, 2015, **108**(2): 98a.
- [7] MEYER A, DIERKS K, HUSSEIN R, *et al.* Systematic analysis of protein - detergent complexes applying dynamic light scattering to optimize solutions for crystallization trial [J]. *Acta Crystallographica*, 2015, **71**(1): 75-81.
- [8] SHEN J, THOMAS J C, ZHU X J, *et al.* Wavelet denoising experiments in dynamic light scattering[J]. *Optics Express*, 2011, **19**(13): 12284-90.
- [9] GAO S S, SHEN J, THOMAS J C, *et al.* Analysis of noisy multi-angle dynamic light scattering data[J]. *Applied Optics*, 2014, **53**(26): 6001-6007.
- [10] MENTA M, FRAYRET J, GRASSL B, *et al.* Development of an alternative analytical methodology to monitor industrial degreasing baths by dynamic light scattering[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2015, **113**: 981-988.
- [11] ZBIGNIEW K. Influence of statistical errors on size distributions obtained from dynamic light scattering data: Simulation of experimental noise in the intensity autocorrelation function [J]. *Journal of Modern Optics*, 1991, **38**(9): 1867-1878.
- [12] YANG H, ZHENG G, Li M C. A discussion of noise in dynamic light scattering for particle sizing [J]. *Particle & Particle Systems Characterization*, 2009, **25**(5-6): 406-413.
- [13] GRASSL H. Determination of aerosol size distributions from spectral attenuation measurements [J]. *Applied Optics*, 1971, **10**(11): 2534-8.
- [14] CAO Li-xia, ZHAO Jun, KONG Ming, *et al.* Inversion of particle size distribution based on improved chahine algorithm [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, **44**(9): 2837-2843.
曹丽霞,赵军,孔明,等.基于改进的 Chahine 迭代算法的粒径分布反演[J]. *红外与激光工程*, 2015, **44**(9): 2837-2843.
- [15] LIU Xiao-yan. Angular dependence of dynamic light scattering[J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, **32**(6) :0629002.
刘晓艳.动态光散射技术的角度依赖性[J]. *光学学报*, 2012, **32**(6) :0629002.