

文章编号 1004-924X(2012)05-0963-09

Tikhonov 正则化与多重网格技术相结合的 动态光散射反演

王雅静^{1*}, 申晋¹, 郑刚², 刘伟¹, 孙贤明¹

(1. 山东理工大学 电气与电子工程学院, 山东 淄博 255091;

2. 上海理工大学 光学与电子信息工程学院, 上海 200093)

摘要:针对单尺度反演方法中存在的精度偏低问题,结合 Tikhonov 正则化与瀑布型多重网格技术,提出了一种多尺度 Tikhonov 正则化(ML-TIK)动态光散射反演方法。该方法利用多重网格技术将原反演问题分解到多尺度的网格空间,按着网格从粗到细的顺序,采用单尺度 Tikhonov 正则化(TIK)对每个子反演问题进行求解,获取颗粒的粒度分布。分别采用 TIK 和 ML-TIK 法对噪声水平为 0、0.005、0.01 的 200~650 nm 模拟双峰分布颗粒数据进行了反演,结果表明:ML-TIK 法的反演结果与理论分布吻合,平滑性更好;相对于 TIK 法,ML-TIK 法最多可减少粒径峰值误差 8.19%,粒径反演误差 0.448 2;而 TIK 法在噪声水平为 0.005、0.01 时,反演结果双峰特征不明显。因此,ML-TIK 方法的反演精度更高、抗干扰能力更强。最后,用 60 nm 与 200 nm 实测数据的反演结果验证了该结论。

关键词:动态光散射;多重网格;Tikhonov 正则化;反演;粒度分布

中图分类号:O436.2;TP301 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/OPE.20122005.0963

Inversion of dynamic light scattering combining Tikhonov regularization with multi-grid technique

Wang Ya-jing^{1*}, Shen Jin¹, Zheng Gang², Liu Wei¹, Sun Xian-ming¹

(1. College of Electrical and Electronic Engineering, Shandong University of
Technology, Zibo 255049, China

2. College of Optics and Electronic Information Engineering, Shanghai University of
Science and Technology, Shanghai 200093, China;)

* Corresponding author, E-mail: wangyjing0725@126.com

Abstract: For the low accuracy of single-level inversion methods to dynamic light scattering, a novel Multi-level Tikhonov regularization inversion (ML-TIK) method combining the Tikhonov regularization method with cascading multi-grid technique was developed. Firstly, this method divided the original problem into several sub-inversion problems with different grid spaces by a multi-grid technique. Then, from the coarsest scale to the finest scale, each sub-inversion problem was inverted by single-level Tikhonov regularization (TIK) method. Finally, the Particle Size Distribution (PSD) was suc-

收稿日期:2011-11-14;修订日期:2012-01-06.

基金项目:山东省自然科学基金资助项目(No. ZR2010FM005, No. ZR2009AQ013);上海市重点学科建设资助项目(No. S0502);山东理工大学博士点学科建设资助项目(No. 103123)

cessively obtained by solving several sub-inversion problems. This method effectively reduces the ill-condition of the original equations. At noise levels 0, 0.005 and 0.01, the simulation data of 200~650 nm bimodal distribution particles were respectively inverted by the TIK and ML-TIK. The results indicate that the inversion PSD of ML-TIK is more consistent with that of the theoretical one and it has better smoothness. Comparing to TIK, the ML-TIK can reduce the peak value error by 8.19% and relative error by 0.448 2. However, when the noise level is 0.005 and 0.01, the PSD of TIK has not obvious bimodal features. Therefore, the ML-TIK has improved the inversion accuracy and noise immunity. Inversion results of 60 and 200 nm experimental data verify above conclusions.

Key words: dynamic light scattering; multi-grid; Tikhonov regularization; inversion; particle size distribution

1 引言

动态光散射 (Dynamic Light Scattering, DLS) 技术是一种快速、可靠、非入侵性的测量布朗运动颗粒粒径的光学技术^[1], 被广泛用于化学、生物、高分子材料等领域^[2-3]。该技术通过测量悬浮液中布朗运动颗粒的散射光强自相关函数, 并对其反演来获取颗粒的粒度分布信息。但反演粒度分布问题属于数学领域不适定病态 (ill-posed) 方程的求解问题, 仅当测量相关函数中没有噪声且数据运算中没有舍入误差时, 理论上方程才有唯一解。而实际测量中, 由于噪声及舍入误差的存在, 会使解的存在性、唯一性、稳定性都难以保证。因此, 寻求接近真实粒度分布的反演方法一直是动态光散射技术中的难点。

针对该问题的研究, 目前已提出了多种反演算法, 如累积法^[4]、指数采样法^[5]、CONTIN^[6]、双指数法^[7]、NNLS 法^[8]、极大似然法^[9]、非负约束 TSVD 方法^[10]、Tikhonov 正则化^[11]等。但这些算法都是在单网格单尺度空间下进行的。由于单网格空间只有一个固定的网格尺寸, 该空间下的反演算法只能有效地削减那些与网格尺寸同一量级的误差频率分量, 不能有效地削减其它频率的误差分量。因此, 单网格的反演方法难以得到全局最优解, 存在反演误差偏大的缺点。而多重网格技术 (Multi-grid method) 是一种多尺度的求解方法, 它通过在一套粗细不同的网格间迭代达到逐步消除高频与低频误差的目的, 从而提高求解精度^[12]。该技术中的瀑布型多重网格是一种简单、经济的求解技术^[13], 广泛应用于抛物线、椭

圆等多种有限元问题的求解。因此, 为了提高动态光散射粒度反演精度, 本文在传统的 Tikhonov 正则化粒度反演方法基础上结合多重网格技术, 提出了一种 Tikhonov 正则化的多尺度动态光散射反演方法。

2 瀑布型多重网格技术的求解原理

设求解问题的离散方程为

$$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}, \quad (1)$$

其中, \mathbf{A} 是离散的算子矩阵, \mathbf{b} 是列向量, \mathbf{x} 是解向量。

对于方程 (1), 传统方法是在确定的一种网格 h 上采用某种迭代法求解。而多重网格法将式 (1) 问题分解到不同等级的网格空间 $\{\Omega_i\} (i=1, 2, \dots, l)$, 不同网格空间对应的子方程为

$$\mathbf{A}^i \mathbf{x}^i = \mathbf{b}^i, \quad (2)$$

式中, i 称为网格尺度, Ω_i 对应的不同网格步长为 h_i , 随着 i 的增加, 网格越来越粗, 这些网格都逼近同一区域 Ω 。这样问题 (1) 形成一系列嵌套网格空间下的问题 (2), 瀑布型多重网格技术通过对

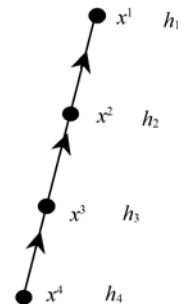


图 1 瀑布型多重网格示意图
Fig. 1 Cascadic multi-grid diagram

这些嵌套子问题的求解来获得原问题的解,它的计算原理如下^[13-15]

图1所示为4尺度瀑布型多重网格示意图,图中“ h_i ”表示不同的网格空间步长,“ \cdot ”表示不同网格空间的子问题,“ x^i ”表示每个子问题的解。瀑布型多重网格技术的求解思路为:首先,将问题(1)分解为4个不同网格空间下的子问题。然后,从最粗的尺度4开始对该尺度的子问题求解,因为尺度4网格比较粗,求解过程容易收敛,极易获得一个大致近似解 x^4 ,再将近似解 x^4 插值延拓到尺度3,将其作为尺度3子问题求解的初值,在尺度3求解时,因网格变细,并且从最优值附近开始寻优,故比较容易平滑掉高频误差分量,从而获得更接近真值的近似解 x^3 ,过程如此重复,直到最细尺度1,最终获得全局最优解 x^1 。

从上述求解过程可以看出,多重网格技术中的粗网格用于消除易收敛的低频误差,细网格用于消除易光滑的高频误差,该方法结合了粗、细网格各自的优点对问题进行求解,因此,这种求解方法计算精度高。

3 基于瀑布型多重网格技术的多尺度 Tikhonov 正则化动态光散射反演方法

3.1 动态光散射反演原理

由激光器发出的光经透镜聚焦后,照射到样品池内的颗粒样品上,光电探测器接收到的散射光强为 $I(t)$,其对应的归一化自相关函数为

$$g(\tau) = \int_0^{\infty} G(\Gamma) \exp(-2\Gamma\tau) d\Gamma \int_0^{\infty} G(\Gamma) d\Gamma = 1, \quad (3)$$

式中, τ 是延迟时间, Γ 为衰减线宽, $G(\Gamma)$ 为衰减线宽分布函数。该方程为第一类 Fredholm 积分方程。在式(3)中,衰减线宽与粒径关系为,

$$\Gamma = Dq^2, q = \frac{4\pi n}{\lambda_0} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), D = \frac{k_B T}{3\pi\eta d}, \quad (4)$$

式中, D 为颗粒的平移扩散系数, q 为散射波矢量, n 为溶液的折射率, λ_0 为激光在真空中的波长, θ 为散射角, k_B 为 Boltzman 常数, T 代表绝对温度, η 为溶液黏性系数, d 为当量球型颗粒的直径。

方程(3)可离散化为

$$g(\tau) = \sum_{i=1}^N G(\Gamma_i) \exp(2\Gamma_i\tau), \quad (5)$$

式(5)可写为

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (6)$$

式中, $b_j = g(\tau_j)$, $x_i = G(\Gamma_i)$, \mathbf{A} 的元素 $a_{i,j} = \exp(-2\Gamma_i\tau_j)$ 。

对方程(6)进行求解得 $G(\Gamma_i)$,即为相应的粒度分布。

3.2 单尺度 Tikhonov 正则化反演方法(TIK)

由于方程(6)是不适定的病态方程,难以直接对其求解,Tikhonov 正则化处理是解决这类问题的有效方法之一^[16]。它的具体原理为:采用一个适定方程来近似不适定方程,通过适定方程的解来逼近原方程的真实解。适定方程的解为

$$\min\{\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \lambda^2 \|\mathbf{L}(\mathbf{x})\|_2^2\}. \quad (7)$$

式(7)中, λ 为正则化参数,它控制着附加约束条件 $\|\mathbf{L}(\mathbf{x})\|_2^2$ 与残差的范数 $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2$ 之间的权重,矩阵 \mathbf{L} 一般取单位阵 \mathbf{I}_n 。式(7)的解可表述为如下的最小二乘问题。

$$\min\left\{\left\|\begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \lambda\mathbf{I} \end{bmatrix}x - \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ 0 \end{bmatrix}\right\|_2^2\right\}, \quad (8)$$

其中,正参数 λ 可采用如下的广义交叉检验准则(GCV)确定^[17]。

$$\frac{\|\mathbf{Ax}_{\text{reg}} - \mathbf{b}\|_2^2}{[\text{trace}(\mathbf{I} - \mathbf{AA}^t)]^2} = \min. \quad (9)$$

式(9)中, \mathbf{A}^t 是将方程 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 右端项 \mathbf{b} 映射成正则解 \mathbf{x}_{reg} 的矩阵,即 $\mathbf{A}^t\mathbf{b} = \mathbf{x}_{\text{reg}}$,符号 trace 表示矩阵的迹,即 $\text{trace}(\mathbf{A})$ 等于矩阵 \mathbf{A} 的对角元素的代数和。

3.3 多尺度 Tikhonov 正则化反演算法(ML-TIK)

为了方便介绍 ML-TIK 反演算法,设定义在不同尺度下的 DLS 反演问题为式(2),记网格 Ω_i 上的长度为 h_i ,本研究中相邻两层网格距的关系为 $h_i = h_{i+1}/2$ 。多尺度反演算法由三个部分组成:第一部分,将原始问题分解到不同尺度的网格空间上,构造出不同网格空间的子问题,称之为网格粗化,即需要完成 $\mathbf{A}^i \rightarrow \mathbf{A}^{i+1}$ 的网格粗化;第二部分,在每个分解后的尺度上进行反演运算,本算法中的反演运算均采用 TIK 正则化方法;第三部分,将粗尺度上得到的解映射到较细尺度上,通过插值操作实现。通过网格粗化和插值操作实现粗网格空间和细网格空间之间的转换。

3.3.1 网格粗化

网格粗化方法有 2 种方式,即全粗化和半粗化。全粗化对算子 \mathbf{A} 在 x, y 方向同时粗化,半粗化只在 x 或 y 方向进行粗化,半粗化的计算量是全粗化的一半。本文采用半粗化,则矩阵 \mathbf{A} 由细尺度到粗尺度可通过下式转换,

$$\mathbf{A}^{i+1} = \mathbf{A}^i \mathbf{I}_{i+1}^i, \quad (10)$$

其中

$$\mathbf{I}_{i+1}^i = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

\mathbf{I}_{i+1}^i 与 \mathbf{I}_i^{i+1} 的关系为 $\mathbf{I}_{i+1}^i = (\mathbf{I}_i^{i+1})'$ 。

由于 \mathbf{A} 采用半粗化方法,则在各网格空间下, \mathbf{b} 均不变。

3.3.2 插值操作

为了使粗网格空间求得的解 \mathbf{x}^{i+1} 适合于下一细尺度空间的求解,即需要完成 $\mathbf{x}^{i+1} \rightarrow \mathbf{x}^i$ 的插值操作。若定义从粗网格空间到细网格空间的算子为 \mathbf{p}_{i+1}^i ,则向量 \mathbf{x} 由粗尺度到细尺度可通过如下的插值方法实现,

$$\mathbf{x}^i = \mathbf{p}_{i+1}^i \mathbf{x}^{i+1}, \quad (11)$$

其中,

$$\mathbf{p}_{i+1}^i = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}.$$

3.3.3 算法流程

多尺度反演算法的具体流程如图 2 所示。

在 ML-TIK 中反演精度与最大尺度有关系,在一定范围内,一般尺度越大精度越高,但如果超出这个范围,选择过大的尺度,会造成粗尺度方程网格距太粗,从而丢失太多的方程信息,引起反演结果不准确。根据大量的模拟经验,最大尺度的选择应满足最大尺度反演方程的粒径维数不小于 16。

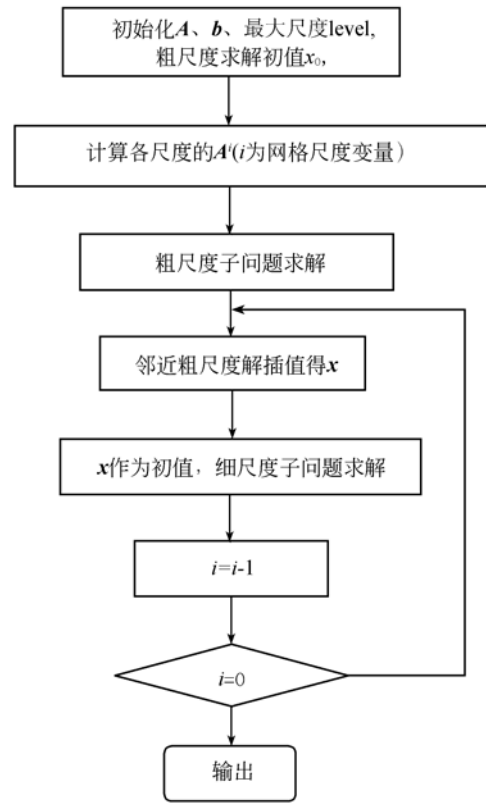


图 2 ML-TIK 方法流程图
Fig. 2 Flow diagram of ML-TIK

4 模拟实验研究及结果分析

为了验证 ML-TIK 算法的有效性,以双峰分布颗粒为例,分别采用 TIK 方法、ML-TIK 方法,对噪声水平为 0, 0.005, 0.01 的数据进行了反演研究。其中,模拟相关函数由 Johnson's SB^[18] 分布函数获得,相应参数分别为 $u_1 = 3.4, \sigma_1 = 2.1, u_2 = -2.4, \sigma_2 = 2.0; \alpha_{\max} = 650 \text{ nm}; \alpha_{\min} = 100 \text{ nm}$;模拟实验参数为:入射光波长 632.8 nm,分散介质(水)折射率为 1.331,散射角为 90°,测量温度为 25°C,波尔兹曼常数为 $1.3807 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$,水的黏度系数为 $0.89 \times 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$ 。在反演研究中,非负约束通过信赖域内点反射牛顿法(TR-IRN)方法实现^[19],反演初值均为 0,最细尺度 level=3。当矩阵 \mathbf{A} 的细网格分别为 $128 \times 128, 256 \times 256$,反演范围为 $[30, 890], [1, 900]$ 时,上述各种情况下的反演结果及其理论分布如图 3~6 所示,其对应的数据如表 1~2 所示。

表 1 初始网格为 128×128 时的反演结果

Tab.1 Inversion results with original grid 128×128

noise levels	TIK			ML-TIK		
	peak value/nm	peak value error/ %	relative error	peak value/nm	peak value error/ %	relative error
0	152.17,525.48	8.19, 1.27	0.397 6	165.75, 532.27	0,0	0.288 3
0.005	—	—	0.675 0	165.75, 518.69	0, 2.55	0.282 5
0.01	—	—	0.691 9	165.75, 539.05	0,1.27	0.243 7

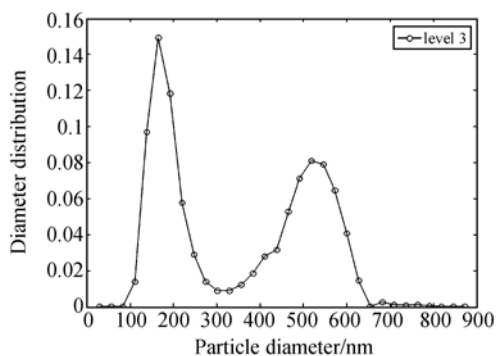
表 2 初始网格为 256×256 时的反演结果

Tab.2 Inversion results with original grid 256×256

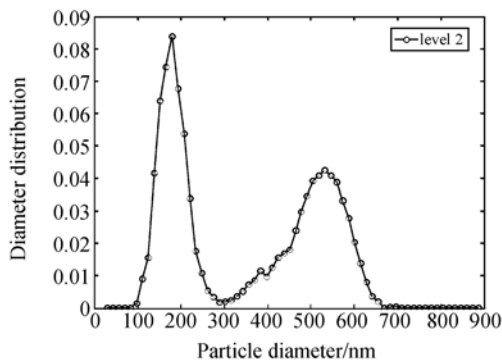
noise levels	TIK			ML-TIK		
	peak value/nm	peak value error/ %	relative error	peak value/nm	peak value error/ %	relative error
0	156.12,512.19	4.32,3.96	0.308 7	166.69,519.25	2.15,2.64	0.261 4
0.005	—	—	0.672 3	166.69,529.82	2.15,0.07	0.266 8
0.01	—	—	0.590 8	166.69,529.82	2.15,0.07	0.198 7

从图 3~6 及表 1~2 可以看出:

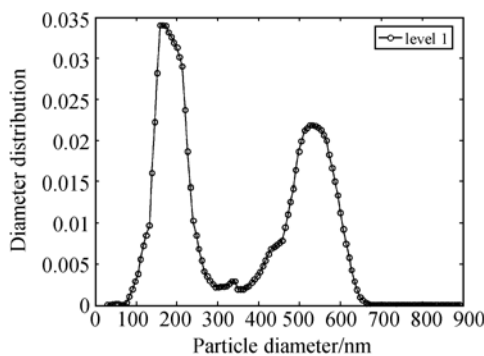
(1)在噪声水平为 0,0.005,0.01 情况下, ML-TIK 法的反演结果与理论分布吻合,相对于单尺度的反演方法,多尺度反演方法的峰值误差、



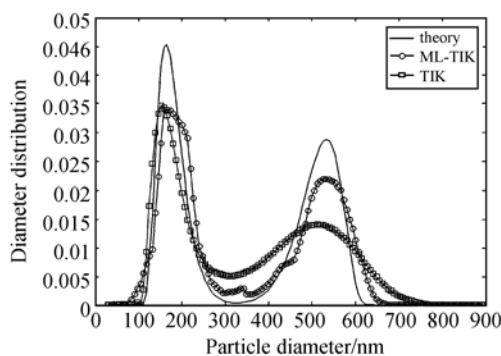
(a)尺度 3
(a) level 3



(b)尺度 2
(b) level 2



(c)尺度 1
(c) level 1



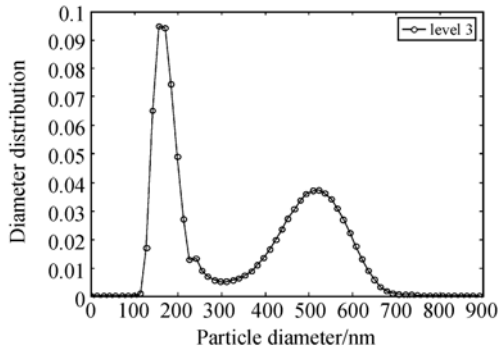
(d)TIK 及 ML-TIK 反演结果
(d) TIK and ML-TIK

图 3 初始网格为 128×128 时,无噪声相关函数的反演结果

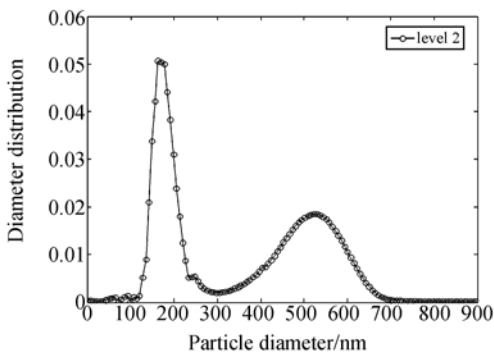
Fig.3 Inversion results of noises-free ACF with original grid 128×128

粒径反演误差都有明显的改善,ML-TIK 法相对于 TIK 法最多可减少粒径峰值误差 8.19%,粒径反演误差 0.448 2。因此,相对于单尺度法,多尺度法明显地提高了粒径反演精度。

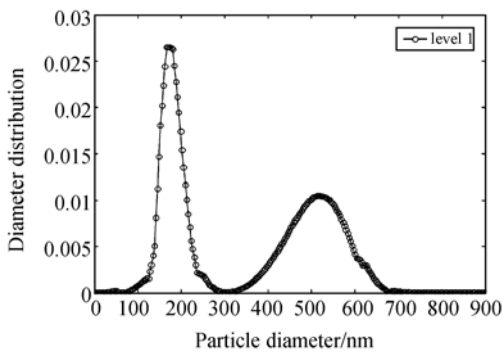
(2)采用 TIK 法反演时,在噪声水平为 0.005 及 0.01 时,得到的反演结果双峰特征不明显,而采用 ML-TIK 法能够得到明显的双峰特征。因此,相对于单尺度反演方法,多尺度反演法明显地



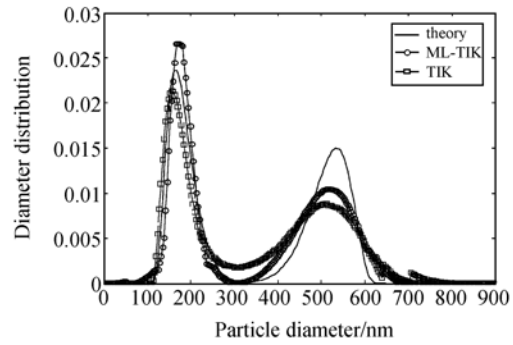
(a)尺度 3
(a) level 3



(b)尺度 2
(b) level 2



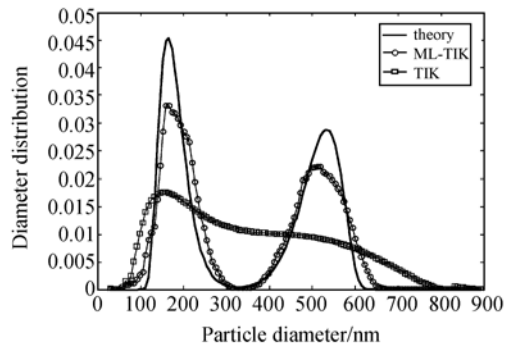
(c)尺度 1
(c) level 1



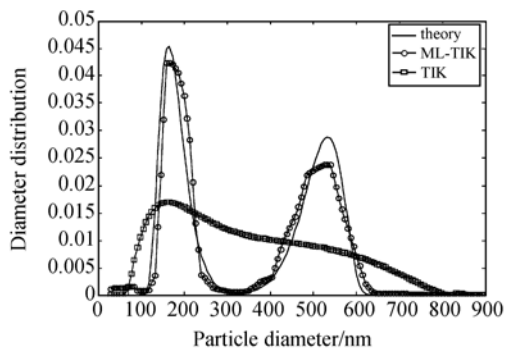
(d)TIK 及 ML-TIK 反演结果
(d) TIK and ML-TIK

图 4 初始网格为 256×256 时,无噪声相关函数的反演结果

Fig. 4 Inversion results of noises-free ACF with original grid 256×256



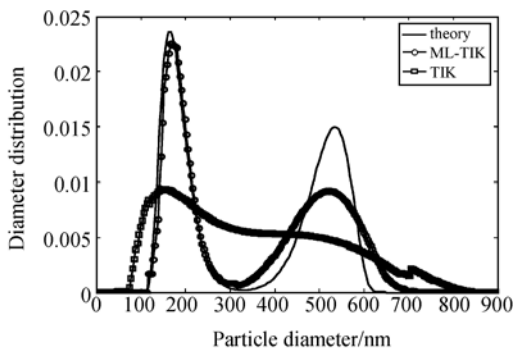
(a)噪声水平为 0.005
(a) With noise level of 0.005



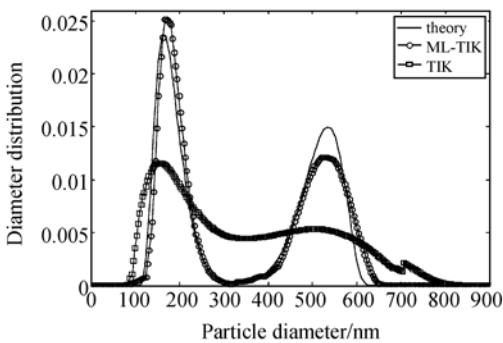
(b)噪声水平为 0.01
(b) With noise level of 0.01

图 5 初始网格为 128×128 时,噪声相关函数的反演结果

Fig. 5 Inversion results of noise ACF with original grid 128×128



(a) 噪声水平为 0.005
(a) With noise level of 0.005



(b) 噪声水平为 0.01
(b) With noise level of 0.01

图 6 初始网格为 256×256 时,噪声相关函数的反演结果

Fig. 6 Inversion results of noise ACF with original grid 256×256

提高了反演算法的抗干扰能力。

(3)当矩阵 A 维数较小时,即反演参数较少时,单尺度反演结果的平滑性较好,而当维数大、反演参数较多时,反演结果的平滑性差。但在反演参数增多时,多尺度法能够改善反演粒度分布的平滑性。

造成以上 3 种情况的原因为:矩阵 A 的条件数是衡量方程病态程度的一个参数^[20]。当矩阵 A 为 128×128 、 256×256 时,其对应方程的条件数分别为 1.742×10^{23} 、 8.539×10^{23} ,条件数都很大,2 个方程都是严重的病态方程, A 为 256×256 时的病态性更严重。虽然采用单尺度反演方法可以得到方程的近似解,但解的近似性较差,算法的抗噪声能力也不强。当采用多尺度反演算法时,它将原始病态问题分解为多个不同病态情况的子问题,每个子问题 A 对应方程的条件数按从

细到粗尺度分别为: $1.742 \times 10^{23} \rightarrow 3.318 \times 10^{22} \rightarrow 5.608 \times 10^{21}$ (128×128) 和 $8.539 \times 10^{23} \rightarrow 7.918 \times 10^{22} \rightarrow 3.104 \times 10^{22}$ (256×256)。可以看出,分解后从细到粗尺度方程的病态性都有同程度的下降。当采用多尺度算法反演时,反演从粗尺度开始,粗尺度方程的病态性最小,比较容易寻找该尺度的最优值,然后,对此最优值进行插值,插值的结果作为临近细尺度反演问题的初值,此时,尽管该尺度方程的病态性有所增加,但由于是在粗尺度最优值附近寻找该尺度的最优值,相对容易,等效于降低了方程的病态性,过程如此反复,最终达到最细尺度。从图 3、4 所示的各尺度反演结果也能够看出,每次细尺度反演都是在其临近粗尺度反演结果附近寻优,最终逐步接近真值。

由上述分析看出,ML-TIK 反演方法将原反演问题分解为多个不同网格空间的子反演问题进行求解,这种方法等效于降低了病态方程的病态性,改善了反演分布的光滑性、提高了反演算法的抗干扰能力和粒度反演精度。

5 实验数据的反演

由动态光散射颗粒测量系统获得实测颗粒相关函数,样品颗粒系为 60 nm 与 200 nm 的标准聚苯乙烯乳胶颗粒系,实验温度为 23°C ,散射角为 90° ,实验介质为水。分别采用 TIK、ML-TIK 2 种方法对颗粒进行反演,反演结果如图 7 所示,反演峰值如表 3 所示。在反演中,反演初值均为 0,最大尺度 level 为 3,初始网格矩阵 A 为 128×128 。

表 3 60 nm 与 200 nm 颗粒的反演数据

Tab. 3 Inversion data of 60 nm and 200 nm particles

方法	TIK	ML-TIK
粒径/nm	55.12, 208.62	59.05, 204.79

由图 7 及表 3 可以看出,对于 60 nm 与 200 nm 标准聚苯乙烯乳胶颗粒系的反演,TIK 法的峰值误差为 8.13%,ML-TIK 法的峰值误差为 2.39%。相对于 TIK 方法,ML-TIK 法可减少峰值误差为 5.74%,并且其反演结果具有更强的双峰分布特征。因此,ML-TIK 法的反演结果更符合实际的颗粒分布。

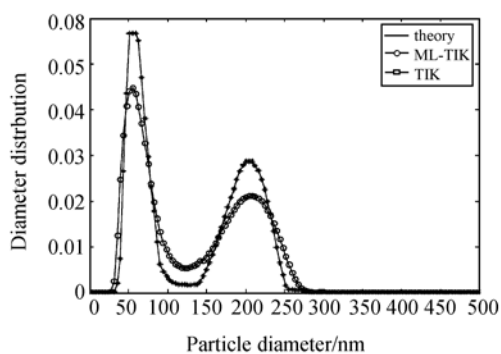


图 7 60 nm 与 200 nm 颗粒的反演结果

Fig. 7 Inversion results of 60 nm and 200 nm particles

6 结 论

针对单网格单尺度反演方法中存在的反演精

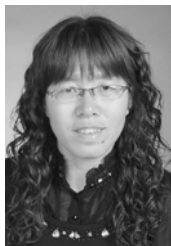
度偏低的问题,将瀑布型多重网格技术与 Tikhonov 正则化反演方法相结合,提出了一种多尺度 Tikhonov 正则化的动态光散射反演方法。该方法采用多重网格技术将原反演问题分解为多个不同网格空间的子反演问题进行求解,该求解方法等效于降低了病态方程的病态程度。100 nm ~ 650 nm 模拟双峰分布颗粒系的反演结果表明:相对于 TIK 法,ML-TIK 法最多可减少粒径峰值误差 8.19%,粒径反演误差 0.448 2,而 TIK 法在噪声水平为 0.005,0.01 时,反演结果双峰特征不明显。因此,ML-TIK 法具有更高的反演精度及更强抗干扰能力。最后,60 nm 与 200 nm 实测数据的反演结果验证了该结论。另外,ML-TIK 的反演思路也可以推广到多重网格技术与其他传统动态光散射反演方法的结合。

参考文献:

- [1] CHU B, LIU T. Characterization of nanoparticles by scattering techniques[J]. *J. Nanoparticle Res.* 2000, 2, (1): 29-41.
- [2] 杨晖,郑刚,王雅静.用动态光散射现代谱估计法测量纳米颗粒[J]. *光学 精密工程*, 2010, 18(9): 1996-2001.
YANG H, ZHENG G, WANG Y J. Measurement of nano-particles by dynamic light scattering based on spectral estimation[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2010, 18(9): 1996-2001. (in Chinese).
- [3] 杨晖,郑刚,张仁杰.用动态光散射时间相干度法测量纳米颗粒粒径[J]. *光学 精密工程*, 2011, 19(7): 1546-1551.
YANG H, ZHENG G, ZHANG R J. Measurement of nano-particle sizes by variance of temporal coherence of dynamic light scattering[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2011, 19(7): 1546-1551. (in Chinese)
- [4] KOPPEL D E. Analysis of macromolecular polydispersity in intensity correlation spectroscopy: The method of Cumulants [J]. *Chem Phys*, 1972, 57 (11): 4814-4820.
- [5] MCWHIRTER J G, PIKE E R. On the numerical inversion of the Laplace transform and similar Fredholm integral equations of the first kind[J]. *Phys A; Math Gen*, 1978, 11 (9): 1729-1745.
- [6] PROVENCHER S W, CONTIN. A general purpose constrained regularization program for inverting noisy linear algebraic and integral equations [J]. *Comput Phy Commun*, 1982, 27(3): 229-242.
- [7] DAHNEKE B E. *Measurement of Suspended particles by Quasi-Elastic Light Scattering*[M]. New York: Wiley Interscience, 1983.
- [8] MORRISON I D, GRABOWSKI E F. Improved techniques for particle size determination by quasi-elastic light scattering[J]. *Langmuir*, 1985, 1: 496-501.
- [9] SUN Y F, WALKER J G. Maximum likelihood data inversion for photon correlation spectroscopy[J]. *Meas Sci Technol*, 2008, 19(11): 115-302.
- [10] ZHU X J, SHEN J, LIU W, et al.. Nonnegative least-squares truncated singular value decomposition to particle size distribution inversion from dynamic light scattering data [J]. *Applie Optics*, 2010, 49(36): 6591-6596.
- [11] 韩秋燕,申晋,孙贤明,等.基于 Tikhonov 正则参数后验选择策略的 PCS 颗粒粒度反演方法[J]. *光子学报*, 2009, 38(11): 917-2926.
HAN Q Y, SHEN J, SUN X M, et al.. A posterior choice strategies of the tikhonov regularization parameter in the inverse algorithm of the photon correlation spectroscopy particle sizing techniques [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2009, 38(11): 2917-2926 (in Chinese).
- [12] STUBEN K. A review of algebraic multigrid[J].

- Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2001, 128: 281-309.
- [13] BORNEMANN F, DEUFLHARD P. The cascadic multi-grid method for elliptic problems[J]. *Numer Math*, 1996, 42(9):917-924.
- [14] BORNEMANN F, KRAUSE R. Classical and cascadic multigrid methodological comparison [C]. *Proceedings of the 9th International Conference on Domain Decomposition*. New York: John Wiley and Sons, 1998
- [15] BORNEMANN F, DEUFLHARD P. The cascadic multi-grid method[C]. *The Eighth International Conference on Domain Decomposition Method for Partial Differential Equations*. New York: Wiley and Sons, 1997.
- [16] HANSEN P C. Regularization tools: A matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems [J]. *Numer. Algo*, 2007, 46 :189-194.
- [17] GOLUB G H, HEATH M T, WAHBA G. Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter [J]. *Technometrics*, 1979, 21:215-223.
- [18] YU A B, STANDISH N. A study of particle size distribution [J]. *Power Technol*, 1990, 62(2):101-118.
- [19] COLEMAN T F, LI Y. An interior trust region approach for nonlinear minimization subject to bounds [J]. *SIAM Journal on Optimization*, 1996, 6(2):418-445.
- [20] 吴杰, 李明峰, 余腾. 测量数据处理中病态矩阵和正则化方法[J]. *大地测量与地球动力学*, 2010, 30 (4):102-105.
WU J, LI M, YU T. Ill matrix and regularization method in surveying data processing[J]. *Journal of Geodesy and Geodynamics*, 2010, 30 (4):102-105. (in Chinese)

作者简介:



王雅静(1971—),女,河北承德人,博士,副教授,1993年、2003年分别于山东建材学院、山东科技大学获学士、硕士学位,2011年于上海理工大学获博士学位,主要从事光电精密测试技术方面的研究。E-mail: wangyajing0725@126.com



刘伟(1971—),男,山东聊城人,博士,副教授,1995年、2003年分别于沈阳黄金学院、石油大学获得学士、硕士学位,2006年于中科院电工所获得博士学位,主要从事光电精密测试技术方面的研究。E-mail: weikey@sdut.edu.cn



申晋(1962—),男,山西高平人,博士,教授,1985年、1996年分别于东北重型机械学院、中国农业大学获学士、硕士学位,2004年于上海理工大学获工学博士学位,主要从事光电精密测试技术方面的研究。E-mail: shenjin@sdut.edu.cn



孙贤明(1979—),男,山东海阳人,博士,副教授,1998年毕业于烟台师范学院、2007年于西安电子科技大学获博士学位。主要从事离散随机介质的波传播和散射方面的研究。E-mail: xianming_sun@yahoo.com.cn



郑刚(1962—),男,浙江余姚人,博士,教授,1982年于南京理工大学获得学士学位,1985年于天津大学获得硕士学位,1993年于上海理工大学获得博士学位,主要从事光电精密测试技术方面的研究。E-mail: gangzheng@usst.edu.cn