

DOI: 10.13382/j.jemi.B2508330

基于加权 Morozov 偏差的改进 GWO 气溶胶颗粒 正则化参数优化*

马龙飞 王雅静 申晋 刘伟明 虎杨光宇 张琪

(山东理工大学电气与电子工程学院 淄博 255049)

摘要:与普通非流动颗粒相比,气溶胶颗粒流速项的增加导致反演方程病态性加剧、对噪声的敏感度增加,难以获取准确的正则化参数。为提高流动气溶胶颗粒正则化参数选取的准确性,在传统 Morozov 偏差原理的基础上,提出基于加权 Morozov 偏差的改进灰狼算法(weighted morozov discrepancy-improve grey wolf optimizer, WMD-IGWO)优化正则化参数。该方法通过小波包分解得到电场自相关函数的噪声分量,根据噪声分量对 Morozov 偏差函数加权建立目标函数,降低噪声对数据的影响。对 GWO 的收敛因子进行非线性改进,将目标函数代入 IGWO 全局寻优,获得最优的正则化参数,进而提高了反演结果的准确性。4组模拟的气溶胶颗粒(292、483、167/575、208/733 nm)在不同流速下的反演结果表明,与 L-curve 方法相比,WMD-IGWO 反演所得粒度分布的分布误差及峰值位置误差更小,反演结果准确性更高。584 nm 单峰和 243/825 nm 双峰实测颗粒的结果表明,WMD-IGWO 分别最多能降低 0.041 和 0.116/0.087 的峰值位置误差,优于 L-curve 方法的反演结果,验证了模拟实验的结论。

关键词:动态光散射;颗粒测量;反演;正则化参数;气溶胶颗粒

中图分类号:TN247

文献标识码:A

国家标准学科分类代码:510.20

Optimization of improved GWO aerosol particles regularization parameters based on weighted Morozov discrepancy

Ma Longfei Wang Yajing Shen Jin Liu Wei Ming Hu Yang Guangyu Zhang Qi

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

Abstract: Compared with conventional non-flowing particles, an increase in flow velocity of aerosol particles can exacerbate the ill posedness of the inversion equation and increase sensitivity to noise, which makes it difficult to obtain accurate regularization parameters. To improve the accuracy of selecting regularization parameters for flowing aerosol particles, an improved grey wolf algorithm based on weighted Morozov discrepancy (WMD-IGWO) is proposed to optimize the regularization parameters on the basis of the traditional Morozov discrepancy principle. This method obtains the noise component of the electric field ACF through wavelet packet decomposition, and establishes an objective function by weighting the deviation function based on the noise component, which can reduce the impact of noise on the data. The convergence factor of GWO is nonlinearly improved, and the objective function is incorporated into the IGWO for global optimization to obtain the optimal regularization parameter, thereby enhancing the accuracy of the inversion results. The inversion results of four simulated aerosol particles (292, 483, 167/575, 208/733 nm) at different flow velocity show that compared with the L-curve method, the WMD-IGWO inversion results in smaller distribution errors and peak position errors of particle size distribution (PSD), and higher accuracy of inversion results. The inversion results of 584 nm unimodal and 243/825 nm bimodal measured particles show that WMD-IGWO can reduce peak position errors by up to 0.041 and 0.116/0.087, respectively, which is superior to the inversion results of the L-curve method and verifies the conclusions of the simulation experiment.

Keywords: dynamic light scattering; particle measurement; inversion; regularization parameters; aerosol particle

0 引言

在工业生产及生物医疗应用等诸多领域中,气溶胶颗粒粒度分布 (particle size distribution, PSD) 的准确测量具有重要意义。例如,在制药工业中,喷雾干燥工艺产生的气溶胶颗粒粒度直接影响药物的吸入效率和药效发挥;在疾病防控领域,病毒气溶胶的 PSD 及其传播能力和感染机制密切相关。由于实际应用中气溶胶颗粒处于流动状态,其 PSD 的精确测量面临挑战^[1-3]。由于动态光散射 (dynamic light scattering, DLS) 技术无需确定气溶胶中颗粒物的折射率,与其他方法相比具有一定优势^[4-5],许多学者从不同角度对气溶胶颗粒的准确测量进行了相关研究。2015 年, Liu 等^[6]用图像 DLS 技术测量了流动状态的聚苯乙烯乳胶颗粒。2021 年,牟彤彤等^[7-8]对气溶胶颗粒的粒度分布进行反演,分析了流速对气溶胶颗粒 PSD 测量的制约机制。2023 年, Li 等^[9]将累积法应用于气溶胶流速的在线测量,并进行气溶胶颗粒的 Tikhonov 正则化反演。2025 年, Sun 等^[10]采用贝叶斯算法,将反问题的求解转为正向问题的计算,对流动气溶胶进行了测量。

尽管 DLS 技术在颗粒测量方面具有一定优势,但其反演方程的求解属于病态问题,数据的微小扰动会导致解的显著变化^[11-12], Tikhonov 正则化可改善方程病态性,其正则化参数通过调节残差范数与约束项的权重控制解的准确性和稳定性^[13],对反演结果准确性的准确性有重要影响。正则化参数的选取通常用 L-curve 准则^[14-15]、Morozov 偏差原理^[16]及广义交叉验证准则 (generalized cross validation, GCV)^[17]等方法。与非流动颗粒相比,流动气溶胶粒度反演方程中加入了流速项,流速项加剧了粒度反演方程病态性,使方程求解对噪声的敏感度增强,通常在噪声水平较大时难以获得准确的正则化参数。2022 年, Liu 等^[18]在不同噪声水平和流速下,对流动颗粒的正则化参数选取方法进行了比较,发现在噪声较高时 L-curve 的反演效果优于 GCV,但与真实 PSD 相比仍存在较大误差。

针对流动气溶胶颗粒正则化参数难以选取的问题,本文提出基于加权 Morozov 偏差的改进灰狼算法 (weighted morozov discrepancy-improve grey wolf optimizer, WMD-IGWO) 优化正则化参数。通过小波包分解所得电场自相关函数 (autocorrelation function, ACF) 的噪声分量,根据噪声分量对 Morozov 偏差函数进行加权得到目标函数,对灰狼算法的收敛因子进行非线性改进得到 IGWO,采用 IGWO 优化目标函数得到正则化参数,该方法有效提高了流动气溶胶颗粒反演中正则化参数选取的准确性。

1 流动气溶胶颗粒 DLS 测量原理

在流动颗粒动态光散射测量中,光强 ACF^[19]为:

$$G^{(2)}(\tau) = B[1 + \beta \exp(-2\Gamma\tau)] \quad (1)$$

式中: B 为测量基线; β 为空间相干因子。对于单分散的流动颗粒, ACF 由扩散和平移两种运动共同影响。当颗粒数量满足高斯统计时,离散化的光强 ACF^[20]为:

$$G^{(2)}(\tau) = B \left[1 + \beta \exp(-2\Gamma\tau) \exp\left(-\frac{v^2\tau^2}{\omega^2}\right) \right] \quad (2)$$

式中: v 是颗粒流速。

衰减线宽 Γ 表示为:

$$\Gamma = Dq^2 \quad (3)$$

式中: $D = \frac{k_B T}{3\pi\eta d_i}$ 为平移扩散系数, T 为绝对温度, $q = \frac{4\pi n}{\lambda_0} \sin \frac{\theta}{2}$ 为散射波矢量, θ 为散射角度, λ_0 为入射光波长, η 为粘性系数, n 为折射率, k_B 为 Boltzmann 常数。

聚焦束腰 ω 表示为:

$$\omega = \frac{\lambda_0}{\pi\omega_0} f_m \quad (4)$$

式中: ω_0 是入射光的束腰半径; f_m 是透镜焦距。

高斯散射场中,归一化电场 ACF 与 $G^{(2)}(\tau)$ 满足 Siegert 公式^[21]:

$$G^{(2)}(\tau) = B(1 + \beta |g^{(1)}(\tau)|^2) \quad (5)$$

由式(5)可得归一化电场 ACF 为:

$$g^{(1)}(\tau) = \exp(-\Gamma\tau) \exp\left(-\frac{v^2\tau^2}{2\omega^2}\right) \quad (6)$$

多分散系流动颗粒的离散化电场 ACF 为:

$$g^{(1)}(\tau) = \sum_{i=1}^N \omega_i(\Gamma_i) \exp(-\Gamma_i\tau) \exp\left(-\frac{v^2\tau^2}{2\omega^2}\right) \quad (7)$$

式中: N 为颗粒数; $\omega_i(\Gamma_i)$ 为线宽分布。

将式(3)代入式(7)可得:

$$g^{(1)}(\tau) = \sum_{i=1}^N \exp\left[-\frac{16\pi k_B T n^2}{3\eta d_i \lambda^2} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cdot \tau\right] \times \exp\left(-\frac{v^2\tau^2}{2\omega^2}\right) \cdot f(d_i) \quad (8)$$

式中: $f(d_i)$ 为待求 PSD, 且 $\sum_{i=1}^N f(d_i) = 1$ 。

式(8)的向量形式为:

$$\mathbf{g} = \mathbf{A}\mathbf{f} \quad (9)$$

式中: \mathbf{A} 为电场 ACF 对应的核矩阵。式(9)通常用 Tikhonov 正则化方法求解,即:

$$J_\lambda(\mathbf{f}) = \|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{L}\mathbf{f}\|_2^2 \quad (10)$$

式中: $\|\cdot\|_2$ 为 L_2 范数; λ 为正则化参数; \mathbf{L} 为正则化矩阵。

2 WMD-IGWO 正则化参数优化

2.1 基于 WMD 的目标函数

由式(10)可知,正则化参数 λ 的选取对反演解的准确性有重要影响, λ 可以调节残差范数与约束项间的平衡,其值过小会使反演解欠正则化,PSD 出现虚假峰和振荡, λ 过大则导致 PSD 过于平滑^[18]。正则化参数的选取方法分为先验策略和后验策略,实际应用中通常难以获得先验条件,因而选用 Morozov 偏差原理等后验策略,该策略认为最优正则化参数 λ 应满足:

$$\| \mathbf{A}f_{\lambda} - \mathbf{g} \|^2 = \delta_g^2 \quad (11)$$

式中: $\| \mathbf{A}f_{\lambda} - \mathbf{g} \|^2$ 为偏差函数, \mathbf{A} 为核矩阵, \mathbf{g} 为电场自相关函数, δ_g 为 \mathbf{g} 的噪声水平。

对于流动颗粒系,流速项的增加导致粒度反演方程病态性加剧,对噪声敏感性增加^[8],ACF 相关数据受噪声的影响增大,进而使得参数选取准确性降低,因此,本文通过调整权重系数减小噪声对数据的影响,在传统 Morozov 偏差原理的基础上对偏差函数进行加权,根据加

权偏差函数建立目标函数 f ,表示为:

$$f = | \mathbf{W} \| \mathbf{A}f_{\lambda} - \mathbf{g} \|^2 - \delta_g^2 | \quad (12)$$

式中: δ_g 由小波包分解电场 ACF 得到的噪声分量确定; \mathbf{W} 是与噪声分量相对应的加权矩阵,且 $\mathbf{W} = \text{diag}[w_{\delta_i}]$,权重系数 w_{δ_i} 表示为式(13)。

$$w_{\delta_i} = (1 + |\delta_i| / \delta_m)^{-1} \quad (13)$$

式中: δ_i 为数据点 i 处噪声幅度的大小; δ_m 为噪声的最大幅值。式(13)表示各点的噪声 δ_i 的幅度大小与权重系数成反比,噪声分量较大时使用较小权重,噪声分量较小时使用较大权重,可以有效抑制噪声对数据的影响。以流速为 0.5 m/s 的 292 nm 流动气溶胶颗粒的粒度反演为例,对电场 ACF(图 1(a))进行小波包分解,得到噪声分量如图 1(b)所示,根据式(13)进行加权得到权重分布如图 1(c)所示。由图 1(b)、(c)可以看出,点 C 的噪声值高于点 D,对应权重系数 C' 的值小于 D',即噪声越大时,权重系数越小,数据受到噪声的影响越小。因此,通过权重系数降低气溶胶颗粒 ACF 数据在噪声水平较大时的占比,即权重系的值随着噪声的增大而降低,可以提高寻优结果的准确性。

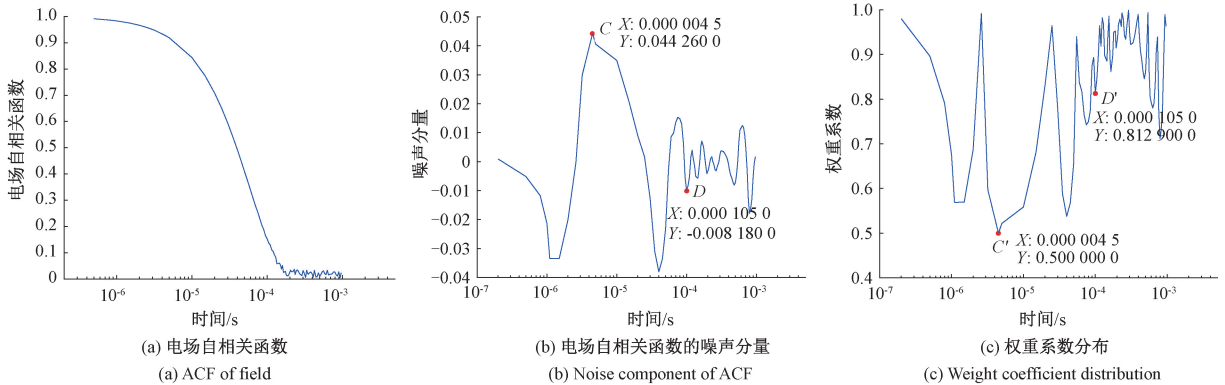


图 1 电场自相关函数, 电场自相关函数的噪声分量和权重系数分布

Fig. 1 The autocorrelation function of the electric field, noise component of electric field autocorrelation function and weight coefficient distribution

2.2 基于 IGWO 的正则化参数优化

为进一步提高正则化参数选取的准确性,可通过智能优化算法优化目标函数 f 。常用的优化算法有粒子群算法、遗传算法、蝙蝠算法等,但在实际气溶胶的测量中,由于测量条件经常变化,需要算法具有较强的鲁棒性。GWO 因其结构简单、参数少,仅需调节收敛因子一个主要参数,算法对参数设置的敏感性较低、稳定性更高^[22]。因此,本文采用 GWO 对气溶胶颗粒正则化参数进行优化。

1) 传统 GWO 算法

GWO 将狼群依次分为 α 、 β 、 γ 和 ε 4 个等级, α 、 β 、 γ 分别对应最优的 3 个解,引导灰狼向其移动^[23],以此精

准捕获猎物,优化步骤如下。

(1) 灰狼对猎物进行包围。该过程表示为:

$$\mathbf{D} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{X}_p(t) - \mathbf{X}(t) \quad (14)$$

$$\mathbf{X}(t+1) = \mathbf{X}_p(t) - \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} \quad (15)$$

式中: t 为迭代次数; \mathbf{X}_p 表示猎物的位置; \mathbf{X} 表示灰狼的位置; \mathbf{A} 和 \mathbf{C} 为系数向量。表达式为:

$$\mathbf{A} = 2a \cdot \mathbf{r}_1 - a \quad (16)$$

$$\mathbf{C} = 2 \cdot \mathbf{r}_2 \quad (17)$$

$$a = 2 - 2 \cdot \frac{t}{T} \quad (18)$$

式中: a 为收敛因子; \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 为 $[0,1]$ 的随机数。

(2) 进行捕猎。该过程由 α 、 β 、 γ 引导更新群体内灰

狼的位置,表示为:

$$\begin{cases} D_\alpha = |C_1 \cdot X_\alpha - X(t)| \\ D_\beta = |C_2 \cdot X_\beta - X(t)| \\ D_\gamma = |C_3 \cdot X_\gamma - X(t)| \end{cases} \quad (19)$$

$$\begin{cases} X_1 = X_\alpha - A_1 \cdot D_\alpha \\ X_2 = X_\beta - A_2 \cdot D_\beta \\ X_3 = X_\gamma - A_3 \cdot D_\gamma \end{cases} \quad (20)$$

$$X(t+1) = \frac{X_1 + X_2 + X_3}{3} \quad (21)$$

式中: D_α 、 D_β 和 D_γ 分别表示 ε 与 α 、 β 和 γ 间的距离向量; C_1 、 C_2 和 C_3 分别表示 α 、 β 和 γ 的搜索范围; X_1 、 X_2 和 X_3 分别表示 ε 在 α 、 β 和 γ 引导下生成的位置。

2) IGWO 算法

由式(16)可知,系数 A 决定了狼群包围猎物的速度, $|A| > 1$ 表示灰狼在整个搜索域搜寻猎物, $|A| < 1$ 表示狼群逐渐包围并捕获猎物,而其变化过程主要受收敛因子 a 的控制,选择合适的收敛因子 a 可以有效平衡算

法全局搜索与局部寻优能力。由式(18)可以看出,GWO 中收敛因子呈线性递减趋势, a 的更新策略会影响算法的性能,其线性变化的策略弱化了算法的全局搜索能力^[24]。因此,本文对收敛因子的更新方式进行非线性改进:

$$a = 2 \left(1 - \left(\frac{t}{T} \right)^3 \right) \quad (22)$$

式中: T 为最大迭代次数。由图 2(a)可知,改进后算法前期($a > 1$)的全局搜索时间变长,全局搜索能力增强,有效避免算法陷入局部极值的情况;算法后期($a < 1$)的搜索时间变短,收敛速度加快,有利于节约计算资源。

为验证算法的可靠性,本文以 1.5 m/s 流速的单峰 292 nm 气溶胶颗粒为例,反复进行 20 次模拟实验,所得 PSD 峰值位置相对误差 E_p 和分布误差 E_r 如图 2(b) 和 (c)所示,蓝色点代表的数值均大于红色点,即 IGWO 算法的峰值位置相对误差和分布误差均小于 GWO 算法。因此,改进后的非线性收敛因子可以提高算法的有效性,所得正则化参数准确性更高。

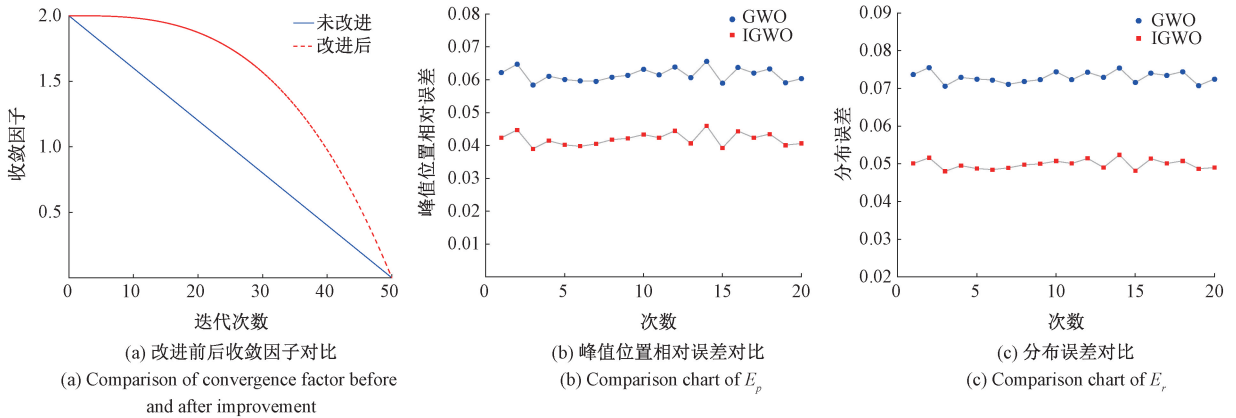


图 2 改进前后收敛因子,峰值位置相对误差对比及分布误差对比

Fig. 2 Comparison of convergence factor before and after improvement, relative error of peak position, and distribution error

2.3 WMD-IGWO 正则化参数优化算法

将 WMD-IGWO 应用到流动颗粒 DLS 正则化参数的选取中,对正则化参数进行全局寻优的流程如图 3 所示,具体步骤如下。

1) 种群初始化,即在正则化参数经验范围 (0, 20) 内生成初始种群,设定总迭代次数 T ,灰狼种群规模 N 。

2) 对目标函数 f 代入改进收敛因子的 GWO 算法 (IGWO) 进行迭代,并计算个体适应度。其中,目标函数 f 根据式(12)建立,即通过小波包分解得到噪声分量,根据噪声分量对 Morozov 偏差函数进行加权得到。

3) 根据式(22)对改进后的非线性收敛因子 a 进行位置更新,根据式(16)、(17)更新系数 A 和 C 。

4) 根据式(19)~(21)更新灰狼位置。

5) 若达到最大次数 T ,则输出最终结果,否则返回步骤 2)。

3 模拟数据反演及分析

3.1 模拟反演的实验参数及条件

采用 Tikhonov 正则化方法对流动气溶胶颗粒进行模拟,用 Johnson's SB 函数表示反演的粒径分布,表达式为:

$$f(d) = a_1 \frac{\sigma_1}{(d_{\max} - d_{\min}) \sqrt{2\pi}} [h(1-h)]^{-1} \times \exp \left\{ -0.5 \left[\mu_1 + \sigma_1 \ln \left(\frac{h}{1-h} \right) \right]^2 \right\} +$$

$$a_2 \frac{\sigma_2}{(d_{\max} - d_{\min}) \sqrt{2\pi}} [h(1-h)]^{-1} \times \exp\{-0.5[\mu_2 + \sigma_2 \ln(\frac{h}{1-h})]^2\} \quad (23)$$

式中: d_{\max} 和 d_{\min} 表示粒径最大、最小值; $h = \frac{d - d_{\min}}{d_{\max} - d_{\min}}$ 为归一化尺寸; a_1, a_2, μ, σ 为 PSD 参数, 且 $a_1 + a_2 = 1$, 单峰和双峰颗粒模拟分布的参数值如表 1 所示。

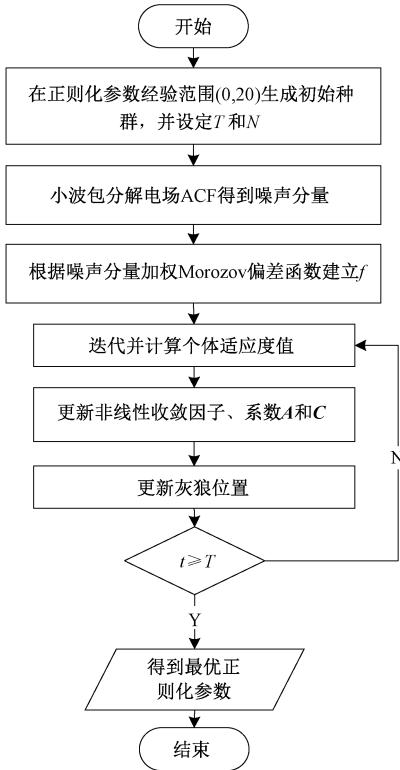


图3 WMD-IGWO 算法流程

Fig. 3 The basic flow of WMD-IGWO algorithm

表1 模拟反演 PSD 的参数

Table 1 Simulate the parameters of PSD inversion

P/nm	a_1	μ_1	σ_1	a_2	μ_2	σ_2
292	1	4.2	4.8	0	-	-
483	1	0.3	6.0	0	-	-
167/575	0.35	8.7	5.5	0.65	-2.2	7.0
208/733	0.35	6.0	4.6	0.65	-4.0	4.0

模拟实验条件为 $\lambda = 532 \text{ nm}$, $\theta = 90^\circ$, $f_m = 175 \text{ mm}$, $\beta = 0.7$, $B = 1$, $T = 298.15 \text{ K}$, $n = 1.000 \text{ 3}$, $\eta = 0.89 \text{ mPa}\cdot\text{s}$, $k_b = 1.380 \text{ 7} \times 10^{-23} \text{ J/K}$ 。气溶胶流速由雷诺数 (Reynolds number, Re) 决定, Re 表示为:

$$Re = \rho_0 D_0 v / \eta \quad (24)$$

式中: ρ_0 和 D_0 分别为流体介质的密度和圆管的等效直径^[8], 取 $\rho_0 = 1.293 \text{ kg/m}^3$, $D_0 = 12 \text{ mm}$ 。层流状态时, 气溶胶的 $Re \leq 2 \text{ 000}$, 可知其流速应为 $0 \sim 2.3 \text{ m/s}$ 。

为使模拟实验接近实测, 在数据中加入随机噪声:

$$G_{\text{noise}}(\tau) = G(\tau) + \delta n(\tau) \quad (25)$$

式中: $n(\tau)$ 代表高斯噪声; δ 为噪声水平。

采用峰值位置相对误差 E_p 和分布误差 E_r 两个性能指标对 PSD 反演结果进行评价, 表示为:

$$E_p = \frac{|P_{\text{true}} - P_{\text{inversion}}|}{P_{\text{true}}} \quad (26)$$

$$E_r = \left(\frac{\sum_1^N [f_{\text{true}}(d) - f_{\text{inversion}}(d)]^2}{N} \right)^{1/2} \quad (27)$$

式中: P 为峰值对应粒径的值; $f(d)$ 反演的 PSD; true 和 inversion 代表颗粒的真实值和反演值。

3.2 单峰气溶胶反演

在噪声水平为 10^{-2} 、流速为 $0, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2.0 \text{ m/s}$ 时, 分别采用 L-curve 和 WMD-IGWO 两种方法对 $292, 483 \text{ nm}$ 单峰颗粒进行反演, 所得 PSD 及性能指标如图 4、5 及表 2 所示, True 表示颗粒粒度分布的真实值。

由图 4、5 和表 2 可以看出, 对于同一粒径的气溶胶颗粒, 随着流速的增加, L-curve 和 WMD-IGWO 两种方法峰值位置误差和分布误差都逐渐增大, 表现为峰值位置左移和 PSD 展宽, 但 WMD-IGWO 比 L-curve 峰值位置左移和 PSD 展宽的幅度小。对于 292 nm 气溶胶颗粒, 在噪声系数为 10^{-2} 、流速为 0.8 m/s 时, L-curve 的峰值位置误差和分布误差分别为 $0.055, 0.058$, WMD-IGWO 的峰值位置误差和分布误差与 L-curve 相比分别降低 $0.028, 0.022$ 。当流速增加到 2.0 m/s 时, L-curve 峰值位置误差和分布误差分别增加到 $0.089, 0.087$, WMD-IGWO 分别降低 $0.034, 0.015$ 的峰值位置误差以及分布误差。当 483 nm 气溶胶颗粒在噪声系数为 10^{-2} 、 $0 \sim 2.0 \text{ m/s}$ 流速时, WMD-IGWO 比 L-curve 最多可降低 $0.021, 0.029$ 的峰值位置误差和分布误差。综上, 相比于 L-curve, WMD-IGWO 反演 PSD 的峰值位置误差和分布误差更小, 反演精度更高。

3.3 双峰气溶胶颗粒反演

在噪声水平为 10^{-3} 、流速为 $0, 0.3, 0.6, 0.9, 1.2, 1.5 \text{ m/s}$ 时, 分别采用 L-curve 方法和 WMD-IGWO 对 $167/575, 208/733 \text{ nm}$ 双峰颗粒进行反演, 不同粒径和流速的反演 PSD 及性能指标如图 6、7 和表 3 所示。

由图 6、7 和表 3 可知, 随着流速的不断增大, 两种方法反演得到双峰颗粒的 PSD 均表现为峰值位置左移、峰值降低, 从而导致峰值位置误差和分布误差均增大。相比于 L-curve 方法, 一般情况下, WMD-IGWO 峰值位置左移幅度和峰值位置误差更小、峰值降低更少。 $167/575$ 和 $208/733 \text{ nm}$ 气溶胶颗粒在所选 $0 \sim 1.5 \text{ m/s}$ 流速条件下, L-curve 反演结果峰值位置的左移幅度均大于 WMD-IGWO, WMD-IGWO 反演所得 PSD 更加接近真实情况。

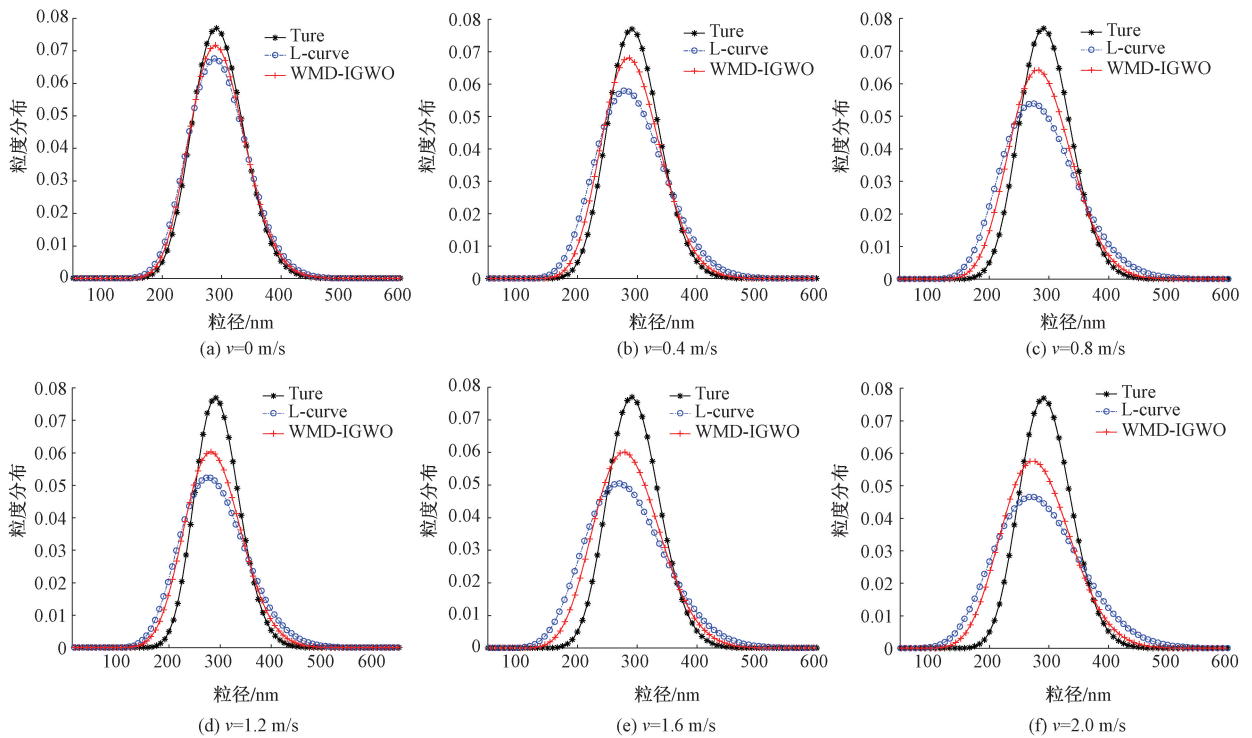


图 4 单峰 292 nm 颗粒不同流速下反演的结果

Fig. 4 Results of inversion for unimodal 292 nm particles at different flow rates

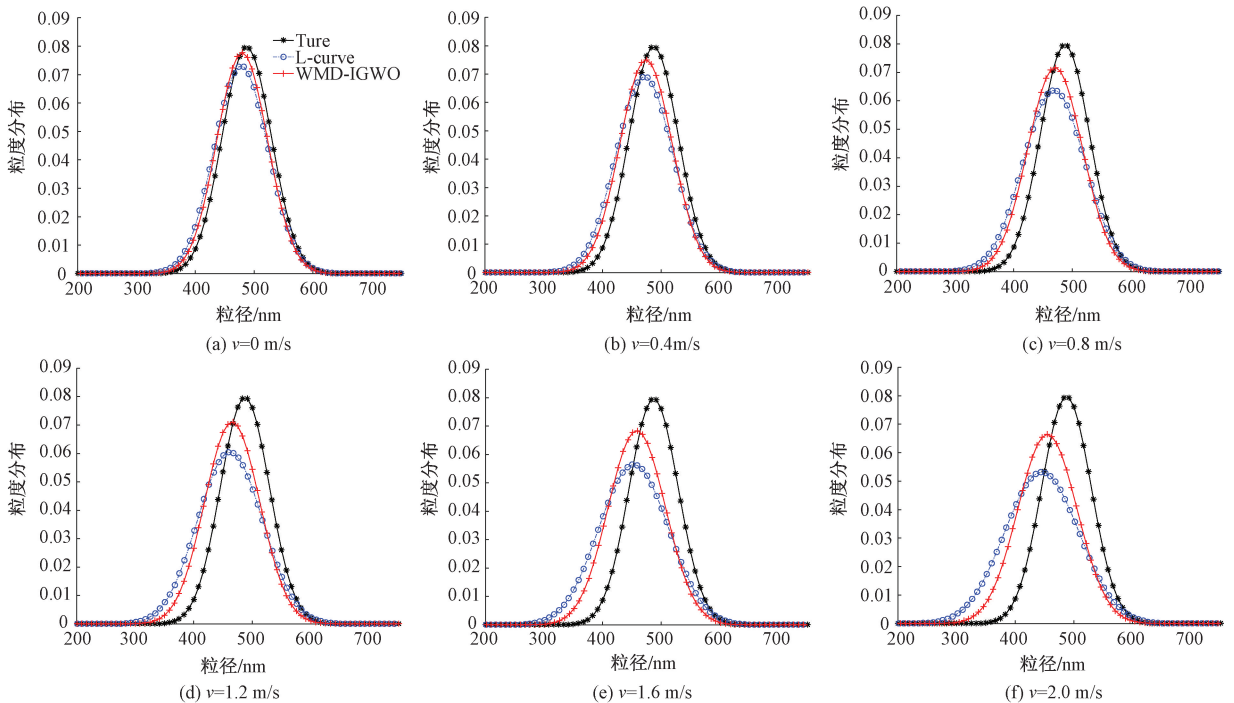


图 5 单峰 483 nm 颗粒在不同流速下反演的结果

Fig. 5 Results of inversion for unimodal 483 nm particles at different flow rates

表 2 单峰气溶胶颗粒的反演数据

Table 2 The inversion data of unimodal aerosol particles

单峰颗粒	流速/ ($m \cdot s^{-1}$)	L-curve 方法			WMD-IGWO 方法		
		P/nm	E_p	E_r	P/nm	E_p	E_r
292 nm	0	288	0.014	0.028	290	0.007	0.014
	0.4	278	0.048	0.045	286	0.021	0.020
	0.8	276	0.055	0.058	284	0.027	0.036
	1.2	272	0.068	0.070	282	0.034	0.053
	1.6	270	0.075	0.076	278	0.048	0.057
	2.0	266	0.089	0.087	276	0.055	0.072
483 nm	0	475	0.017	0.029	481	0.004	0.009
	0.4	467	0.033	0.036	475	0.017	0.017
	0.8	465	0.037	0.045	471	0.025	0.022
	1.2	459	0.050	0.056	467	0.033	0.030
	1.6	451	0.066	0.067	461	0.046	0.042
	2.0	443	0.083	0.089	453	0.062	0.060

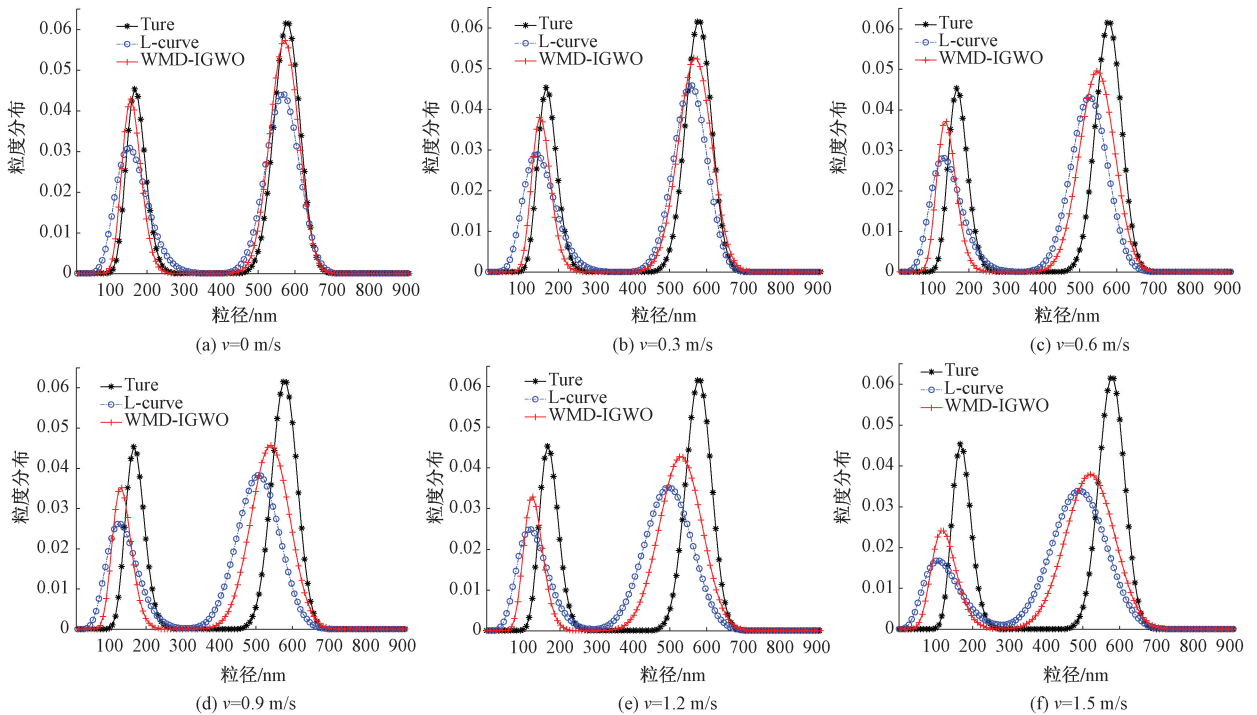


图 6 双峰 167/575 nm 颗粒在不同流速下反演的结果

Fig. 6 Results of inversion I for 167/575 nm bimodal particles at different flow rates

对于 167/575 nm 颗粒系,噪声为 10^{-3} 、流速由 0 增至 1.5 m/s 时,从峰值位置误差和分布误差角度分析,L-curve 的峰值误差和分布误差分别从 0.072/0.007、0.063 增大至 0.335/0.146、0.282,而 WMD-IGWO 的峰值误差和分布误差分别从 0.048/0.007、0.035 增大至 0.263/0.097、0.219。选取不同流速时,WMD-IGWO 的峰值误差和分布误差一般都低于 L-curve。对于 208/733 nm 颗粒系,当噪声水平为 10^{-3} 、流速由 0 增至 1.5 m/s 时,WMD-IGWO 的峰值位置误差及分布误差均

小于 L-curve。因此,与 L-curve 方法相比,WMD-IGWO 的峰值位置误差和分布误差更小,反演结果更准确。

4 实测数据反演

实验中光强 ACF 数据取自流动气溶胶颗粒 DLS 测量装置(图 8),3321PLUS 和 SX-Q5 气溶胶发生器、MGL-III-532 nm-15 mW 固体激光器、BI9000AT 数字相关器、光子计数探测器、热敏风速计、计算机(内置数字相关器)、

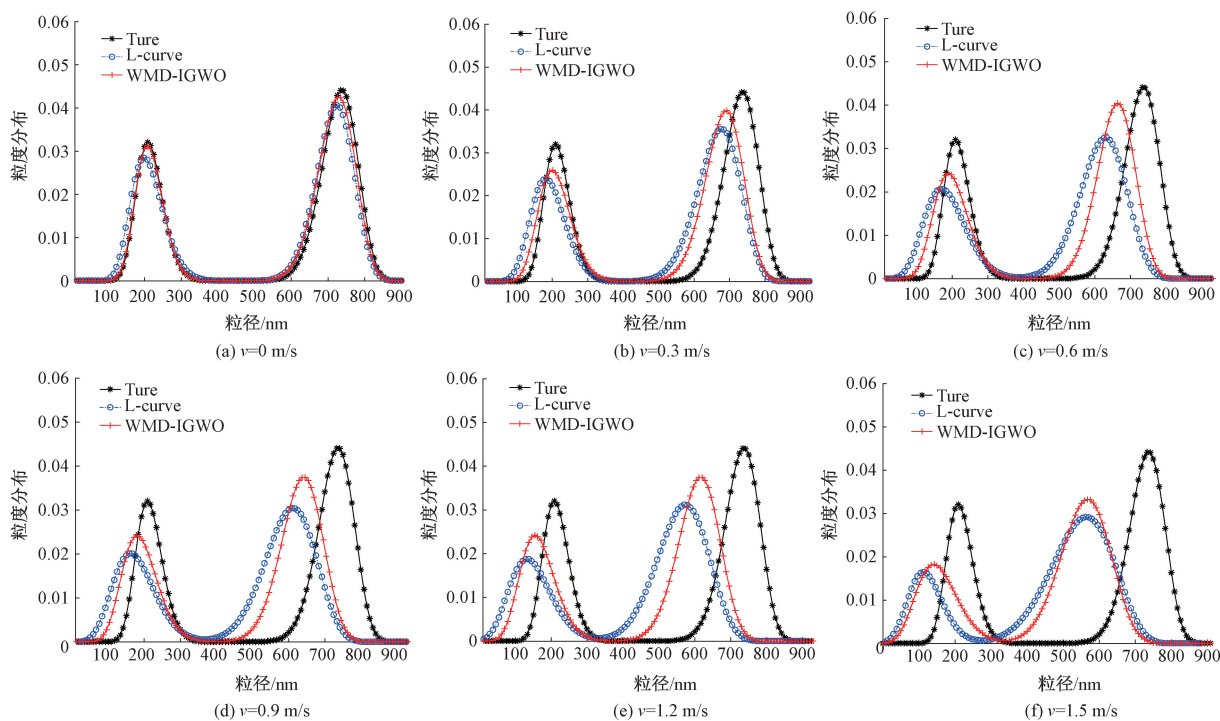


图 7 双峰 208/733 nm 颗粒在不同流速下反演的结果

Fig. 7 Results of inversion for 208/733 nm bimodal particles at different flow rates

表 3 双峰气溶胶颗粒的反演数据

Table 3 The inversion data of bimodal aerosol particles

双峰颗粒	流速/ ($m \cdot s^{-1}$)	L-curve 方法			WMD-IGWO 方法		
		P/nm	E_p	E_r	P/nm	E_p	E_r
167/575 nm	0	155/571	0.072/0.007	0.063	159/571	0.048/0.007	0.035
	0.3	143/559	0.144/0.028	0.107	147/563	0.120/0.021	0.070
	0.6	135/527	0.192/0.083	0.163	139/547	0.168/0.049	0.112
	0.9	131/507	0.216/0.118	0.221	131/539	0.216/0.063	0.167
	1.2	123/495	0.263/0.139	0.253	127/523	0.240/0.090	0.194
	1.5	111/491	0.335/0.146	0.282	123/519	0.263/0.097	0.219
208/733 nm	0	198/723	0.048/0.014	0.072	203/728	0.024/0.007	0.036
	0.3	183/673	0.120/0.082	0.107	198/693	0.048/0.055	0.081
	0.6	168/633	0.192/0.136	0.151	188/663	0.096/0.095	0.137
	0.9	158/608	0.240/0.171	0.182	178/643	0.144/0.123	0.163
	1.2	128/573	0.385/0.218	0.193	148/603	0.288/0.177	0.176
	1.5	113/563	0.457/0.232	0.212	143/568	0.313/0.225	0.191

聚焦透镜。单峰气溶胶由 3321PLUS 气溶胶发生器及内置 Collison 喷嘴雾化癸二酸二乙酯 (DEHS) 产生,双峰气溶胶由 SX-Q5 气溶胶发生器及内置 Laskin 喷嘴雾化 DEHS 产生,由雾化压力调节阀控制气溶胶流速,通过 SAR886A 热线风速计获取流速。

在流速为 0.90、1.15、1.67 m/s 时,用 L-curve 准则和 WMD-IGWO 两种方法反演得到 584 nm 单峰 PSD 及反演结果如图 9 和表 4 所示。流速为 0.58、1.31、

1.76 m/s 时反演得到 243/825 nm 双峰 PSD 及反演结果如图 10 和表 4 所示。

由图 9、10 和表 4 可知,对于 584 nm 的单峰气溶胶颗粒系,WMD-IGWO 反演结果的峰值位置误差分别比 L-curve 方法的低 0.027、0.014 和 0.041。对于 243/825 nm 的双峰颗粒系,WMD-IGWO 在 3 种流速下均能反演出双峰,其峰值位置误差分别比 L-curve 方法降低 0.074/0.022、0.116/0.087 和 -0.349,而 L-curve 方法在

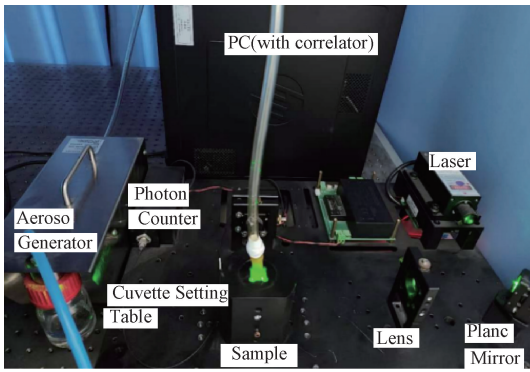


图8 气溶胶测量装置

Fig. 8 Diagram of aerosol measurement device

1.76 m/s 条件下的反演结果表现为单峰,与 WMD-IGWO 相比误差较大。造成该结果的原因在于 L-curve 方法在解范数和残差范数之间取一个平衡,当气溶胶处于高流速(1.76 m/s)状态时,颗粒反演受流速的影响变大,反演解对噪声的敏感性增加,L-curve 方法则在一定程度上以丧失解的精度来保持解的稳定性^[18],因此,L-curve 方法在气溶胶流速为 1.76 m/s 时的反演结果较差、误差较大。上述结果表明,对于流动气溶胶颗粒正则化参数的选择,与 L-curve 方法相比,WMD-IGWO 可以在相同噪声水平和流速下获得更准确的反演结果,实测数据的反演结果验证了模拟数据的结论。

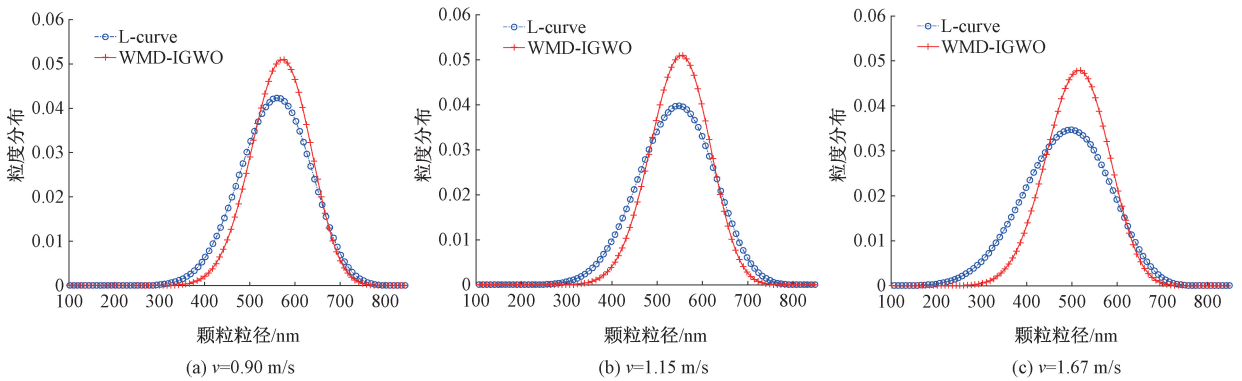


图9 实测单峰 584 nm 气溶胶颗粒的反演结果

Fig. 9 Results of inversion of measured unimodal 584 nm aerosol particles

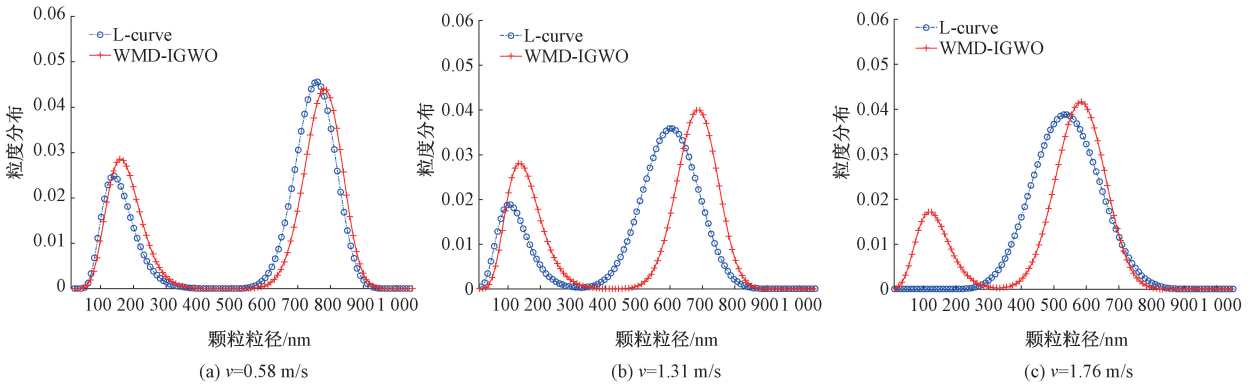


图10 实测双峰 243/825 nm 气溶胶颗粒的反演结果

Fig. 10 Inversion results of measured bimodal 243/825 nm aerosol particles

表4 实测气溶胶颗粒的反演数据

Table 4 Inversion data of measured aerosol particles

单/双峰颗粒	流速/ ($m \cdot s^{-1}$)	L-curve 方法		WMD-IGWO 方法	
		P/nm	E_p	P/nm	E_p
584 nm	0.90	560	0.041	576	0.014
	1.15	548	0.062	556	0.048
	1.67	496	0.151	520	0.110
243/825 nm	0.58	141/759	0.420/0.080	159/777	0.346/0.058
	1.31	107/609	0.560/0.262	135/681	0.444/0.175
	1.76	-/537	-/0.349	117/585	0.519/0.291

5 结 论

DLS 应用于流动气溶胶颗粒的测量时,相比于传统的非流动颗粒,气溶胶颗粒流速项的增加导致反演方程病态性加剧、对噪声的敏感度增加,从而使选取正则化参数选取的准确性降低。正则化参数的选取是影响 PSD 反演的重要因素,针对气溶胶颗粒正则化参数难以准确选取的问题,本文提出了 WMD-IGWO 算法,该算法通过对电场 ACF 进行小波包分解得到噪声分量,并根据噪声分量对 Morozov 偏差函数加权建立目标函数,通过调整权重系数来减弱噪声对 ACF 数据的影响,即在噪声水平较大时使用较小的权重系数。为提高 GWO 算法寻优结果的准确性,对 GWO 的收敛因子进行非线性改进,利用 IGWO 进行全局寻优得到正则化参数。模拟数据在不同流速及噪声水平下的气溶胶颗粒反演结果表明,WMD-IGWO 方法反演 PSD 的分布误差及峰值位置误差比 L-curve 准则更小,反演结果更为准确。584 nm 单峰和 243/825 nm 双峰实测颗粒的结果表明,WMD-IGWO 反演得到的 PSD 优于 L-curve,两种颗粒分别最多能降低 0.041 和 0.116/0.087 的峰值位置误差,验证了模拟实验的结论。因此,WMD-IGWO 是一种适用于流动气溶胶颗粒反演的正则化参数选取方法。

参考文献

- [1] SIPKENS T A, BOIES A, CORBIN J C, et al. Overview of methods to characterize the mass, size, and morphology of soot [J]. *Journal of Aerosol Science*, 2023, 173: 106211.
- [2] 张白,王鹤,高正,等.基于光学散射原理的气溶胶光度计开发 [J]. *电子测量技术*, 2022, 45 (7): 110-116.
ZHANG B, WANG H, GAO ZH, et al. Development of aerosol photometer based on optical scattering principle [J]. *Electronic Measurement Technology*, 2022, 45 (7): 110-116.
- [3] HU J H, XING X N, SHEN J, et al. A dynamic light scattering inversion method based on regularization matrix reconstruction for flowing aerosol measurement [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2024, 95(4): 045102.
- [4] 杨智翔,窦智,王雅静,等.流动气溶胶总体最小二乘混合正则化动态光散射反演 [J]. *中国激光*, 2025, 52(6): 0604001.
YANG ZH X, DOU ZH, WANG Y J, et al. Dynamic light scattering inversion of flow aerosols using mixed regularized based on total least squares [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2025, 52(6): 0604001.
- [5] STETEFELD J, MCKENNA S A, PATEL T R. Dynamic light scattering: A practical guide and applications in biomedical sciences [J]. *Biophysical Reviews*, 2016, 8(4): 409-427.
- [6] LIU L L, CAI X S, ZHANG J, et al. Particle-size measurements in a micro-channel with image dynamic light scattering method [J]. *Procedia Engineering*, 2015, 102: 904-910.
- [7] MU T T, SHEN J, WANG M J, et al. Particle size distribution measurement in a flowing aerosol using dynamic light scattering [J]. *Measurement Science and Technology*, 2021, 32(7): 075007.
- [8] 牟彤彤,申晋,李鑫强,等.流动气溶胶动态光散射测量中的流速限制 [J]. *光学学报*, 2021, 41(14): 1429001.
MU T T, SHEN J, LI X Q, et al. Velocity limitation in dynamic light scattering measurement for flowing aerosols [J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(14): 1429001.
- [9] LI X Q, SHEN J, WANG M J, et al. On-line measurement for velocity and particle size distribution of flowing aerosol by dynamic light scattering [J]. *Optics and Lasers in Engineering*, 2023, 160: 107271.
- [10] SUN Z H, SHEN J, WANG Y J, et al. Particle size inversion of flowing aerosol using Bayesian inference in dynamic light scattering [J]. *Applied Optics*, 2025, 64(3): 521-534.
- [11] GUO W, ZENG N, LIAO R, et al. Simultaneous retrieval of aerosol size and composition by multi-angle polarization scattering measurements [J]. *Optics and Lasers in Engineering*, 2022, 149: 106799.
- [12] WANG Q, SHEN J, WANG M J, et al. Measuring particle size in ultra-low concentration suspensions by removing the number fluctuation contribution in dynamic light scattering [J]. *Optics Express*, 2021, 29(23): 38567-38581.
- [13] 马敏,郭鑫,于洁.改进正则化半阈值算法的 ECT 图像重建 [J]. *仪器仪表学报*, 2022, 43(5): 110-119.
MA M, GUO X, YU J. ECT image reconstruction based on improved regularized half threshold algorithm [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2022, 43(5): 110-119.
- [14] DAY I J. On the inversion of diffusion NMR data: Tikhonov regularization and optimal choice of the regularization parameter [J]. *Journal of Magnetic Resonance*, 2011, 211(2): 178-185.
- [15] LIN C J, SHEN J Q, WANG T E. Multi-parameter regularization method for particle sizing of forward light scattering [J]. *Journal of Modern Optics*, 2017, 64: 787-798.
- [16] 王乐洋,陈涛,邹传义.病态乘性误差模型的加权最小

- 二乘正则化迭代解法及精度评定[J]. 测绘学报, 2021, 50(5): 589-599.
- WANG L Y, CHEN T, ZOU CH Y. Weighted least squares regularization iteration solution and precision estimation for ill-posed multiplicative error model [J]. Acta Geodaetica et Cartographica Sinica, 2021, 50(5): 589-599.
- [17] 代荣获,尹成,刘阳,等. 广义 Stein 无偏风险估计与地球物理反问题正则化参数求取[J]. 地球物理学报, 2019, 62(3): 982-992.
- DAI R H, YIN CH, LIU Y, et al. Estimation of generalized Stein's unbiased risk and selection of the regularization parameter in geophysical inversion problems [J]. Chinese Journal of Geophysics, 2019, 62(3): 982-992.
- [18] LIU Z M, ZHANG X K, WANG Y J, et al. Research on Tikhonov regularization parameter selection in dynamic light scattering measurement of flowing particles [J]. Journal of Optics, 2022, 51: 1038-1051.
- [19] 韩锦壮,李鑫强,申晋,等. 结合条件预优的流动气溶胶动态光散射正则化反演[J]. 光子学报, 2022, 51(11): 57-66.
- HAN J ZH, LI X Q, SHEN J, et al. Regularization inversion with preconditioner for flowing aerosols in dynamic light scattering [J]. Acta Photonica Sinica, 2022, 51(11): 57-66.
- [20] YUAN X, LIU Z M, WANG Y J, et al. The analysis of influencing factors on Tikhonov and truncated singular value decomposition inversion of flowing aerosol particle in dynamic light scattering [J]. Journal of Optics, 2022: 1-13.
- [21] 梁佳明,王晶,梅建生,等. 基于扩散相关光谱的血流检测方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(10): 2749-2752.
- LIANG J M, WANG J, MEI J SH, et al. A study on blood flow measurement by diffuse correlation spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2012, 32(10): 2749-2752.
- [22] 陈敏,陈晔,牛兴龙,等. 求解全局优化问题的多策略改进灰狼算法[J]. 国外电子测量技术, 2022, 41(11): 22-29.
- CHEN M, CHEN Y, NIU X L, et al. Multi-strategy improved grey wolf algorithm for solving the global optimization problem [J]. Foreign Electronic Measurement Technology, 2022, 41(11): 22-29.
- [23] 吴宸之,李炜,房琪,等. 基于小波包混合优化的欠定盲源分离方法[J]. 电子测量与仪器学报, 2023, 37(9): 213-224.
- WU CH ZH, LI W, FANG Q, et al. Underdetermined blind source separation method based on wavelet packet hybrid optimization [J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2023, 37(9): 213-224.
- [24] 孟耀,张秀凤,陈雨农. 基于改进灰狼算法的船舶数学模型参数辨识[J]. 哈尔滨工程大学学报, 2023, 44(8): 1304-1312.
- MENG Y, ZHANG X F, CHEN Y N. Parameter identification of a ship mathematical model based on the modified grey wolf algorithm [J]. Journal of Harbin Engineering University, 2023, 44(8): 1304-1312.

作者简介



马龙飞,现为山东理工大学硕士研究生,主要研究方向为精密测试技术及仪器。

E-mail: malongfei1005@163.com

Ma Longfei now is a M. Sc. candidate at Shandong University of Technology. Her main research interest includes precision testing technology and instruments.



王雅静(通信作者),2011年于上海理工大学获得博士学位,现为山东理工大学教授、博士生导师,主要研究方向为精密测试技术及仪器。

E-mail: wangyajing@sdut.edu.cn

Wang Yajing (Corresponding author) received her Ph. D. degree from University of Shanghai for Science and Technology in 2011. Now she is a professor and Ph. D. supervisor in Shandong University of Technology. Her main research interest includes precision testing technology and instruments.