

文章编号 1004-924X(2010)08-1691-08

主成分分析在光全散射特征波长选择中的应用

唐红¹, 郑文斌², 李宪霞¹

(1. 中国计量学院 计量测试工程学院, 浙江 杭州 310018;

2. 中国计量学院 信息工程学院, 浙江 杭州 310018)

摘要:为了能在用光全散射法测量颗粒粒径时选择对粒径影响较显著的特征波长进行测量,通过在可见及可见-红外波段内对粒径服从单峰 R-R 分布颗粒系的消光光谱,一阶微分以及二阶微分消光光谱进行主成分变换,提出一种特征波长选择方法。该方法首先对颗粒系的一阶微分消光光谱进行主成分变换,然后将每个波长下的一阶微分消光光谱对主成分贡献率的大小作为特征波长选择的主要依据,并将光谱范围的边界波长也作为特征波长。分别对粒径服从单峰及双峰 R-R 分布的颗粒系进行数值仿真,并采用标准颗粒的实测数据进行验证。验证结果显示,采用基于主成分分析的波长选择方法计算方便、易于实现,得到的标准颗粒粒径反演误差均小于 3%,表明采用提出的波长选择方法能够保证选出的光谱消光值具有较高的信息量。

关键词: 粒径测量; 光全散射; 特征波长选择; 主成分分析

中图分类号: TB92; O436.2 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20101808.1691

Application of principal component analysis to selection of characteristic wavelengths with total light scattering

TANG Hong¹, ZHENG Wen-bin², LI Xian-xia¹

(1. *College of Metrological Technology & Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China*; 2. *College of Information & Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China*)

Abstract: To select the characteristic wavelengths which contain important information about particle sizes and refractive indexes in a total light scattering particle sizing method, a wavelength selection method was proposed by performing the Principal Component Analysis (PCA) for the extinction spectra, the first-order differential extinction spectra and the second-order differential extinction spectra of monomodal R-R particle system in visible and visible-infrared regions. This method firstly used the principal component transform to dispose the first-order differential extinction spectra, and then regarded the contribution rate of the principal component to the first-order differential extinction spectra at each wavelength as the mainly criterion to select the characteristic wavelengths. Meanwhile, the boundary wavelengths in the spectral region were also selected as the characteristic wavelengths. The numerical simulations on the monomodal and bimodal R-R distributions were performed, and the ex-

收稿日期: 2009-11-17; 修订日期: 2009-12-11.

基金项目: 国家自然科学基金专项资助项目 (No. 10947154)

perimental data of reference materials were also validated. Experimental results show that the inversion errors of reference materials based on the PCA selection method are less than 3%. It is concluded that the selection method has advantages of convenient computation and easy realization, and can ensure to the extinction values of selected characteristic wavelengths to show the most valuable information about the particle size distribution.

Key words: particle size measurement; total light scattering; selection of characteristic wavelength; Principal Component Analysis(PCA)

1 引言

光全散射法是光散射颗粒粒径测量技术的一种,其测量范围从亚微米至上百微米,并可同时测得颗粒系的浓度。由于在线粒度监测的需求十分迫切,该项技术已逐渐显示出较大的发展空间和应用潜力^[1-2]。

光全散射粒径测量方法分为独立模式算法和非独立模式算法。独立模式算法事先无须假定粒径分布,通过求解离散线性方程组来得到粒径分布。非独立模式算法事先假设被测颗粒系符合某一分布函数,如 R-R 分布,正态分布等,通过计算给定多个波长下的消光值,并对计算值和消光测量值进行比较,最后用优化算法寻得最佳的粒径分布函数^[1]。在光全散射法颗粒粒径测量中,一般采用白光作为光源并配合光谱仪或其他分光元件,通过对消光光谱的测量和反演,得到颗粒系的粒径分布。在粒径反演过程中,每个波长下的消光值都不同程度地包含被测颗粒系的粒径信息。如果选择波长时选用了粒径影响小的波长,遗漏了重要的波长,可能导致粒径分布反演结果不准确。较多的测量波长数目虽能提高系统的光谱分辨率,但是波长数目越大,数据处理的速度就越慢,而且多波长消光数据本身包含了大量的冗余信息,邻近波长之间的相关性要高于相距较远的波长之间的相关性。所以,在选择波长时,应对多波长消光数据进行降维,即尽量选择对粒径影响比较显著的特征波长进行测量^[3]。选择特征波长一方面可以简化数据处理模型,更主要的是由于相关变量的剔除,选择特征波长可以从得到的消光光谱中提取最有效的光谱信息,从而提高粒径分布反演结果的准确性。

主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)作为一种多元数据统计分析的工具,普遍用于去除相关、特征提取和数据压缩中。PCA 的中心目的是将数据降维,将原变量进行转换,使少数几个新变量(主成分)是原变量的线性组合,同时这些变量要尽可能多地表征原变量的数据特征而不丢失信息。经转换得到的新变量是互不相关的,用以消除众多信息共存中相互重叠的部分^[4-6]。

本文提出一种基于主成分分析的特征波长选择方法。该方法首先对颗粒系一阶微分消光光谱进行主成分变换,然后将每个波长下的一阶微分消光光谱对主成分贡献率的大小作为波长选择的主要依据,并且把光谱范围的边界波长也作为测量波长,这样的选择方法保证了选出的光谱消光值具有较高的信息量。

2 测量原理

光全散射法粒径测量的基本原理是 Lambert-Beer 定律。当一束光强为 I_0 , 波长为 λ_j 的平行单色光照射到厚度为 L 的悬浮被测颗粒时,由于颗粒对入射光的吸收和散射作用,穿过颗粒系透射光的光强 I 减弱。由于实际颗粒系都是具有一定尺寸分布范围的多分散系,在颗粒满足不相关单散射的前提下,对于具有一定尺寸范围的多分散颗粒系有^[1]:

$$\ln\left(\frac{I(\lambda_j)}{I_0(\lambda_j)}\right) = -\frac{3}{2} \times L \times N \int_{D_{\min}}^{D_{\max}} \frac{Q(\lambda_j, m, D) \times f(D)}{D} dD, \quad (1)$$

式中, $(I/I_0)_j$ 为第 j 个波长的消光值, N 为颗粒系的粒子总数, $Q(\lambda_j, m, D)$ 为消光系数,它表征

每个颗粒对入射光的散射量是颗粒粒径 D , 波长 λ_j , 以及相对介质折射率 m 的函数, 其值可由经典的米氏理论求得^[7-9]; $f(D)$ 是粒径体积频度分布函数, 表示单位体积内直径在 D 和 $D+dD$ 范围内的粒子体积频度百分比。

在实际测量中, 许多被测颗粒的尺寸常常符合某种分布函数, 这时采用非独立模式算法求解粒径分布则更为简便。较为常用的粒径分布函数有 R-R 分布, 它的体积频度分布数学表达式如下^[1]:

$$f_{\text{R-R}}(D) = \frac{k}{D} \left(\frac{D}{\bar{D}}\right)^{k-1} \exp\left(-\left(\frac{D}{\bar{D}}\right)^k\right), \quad (2)$$

式中, \bar{D} 和 k 分别是 R-R 分布函数的特征参数。

3 主成分变换及特征波长的选择算法

在光全散射法粒径分布的反演过程中, 设对 M 个波长下的消光值重复进行 p 次测量, 记为 $\mathbf{X} = [x_{ij}]$, x_{ij} 表示对第 j 个波长下的消光值进行第 i 次测量, $i=1, 2, \dots, p, j=1, 2, \dots, M$, 则 \mathbf{X} 的均值向量 \mathbf{n} 和协方差矩阵 $\Sigma_{\mathbf{X}}$ ^[4,10]:

$$\mathbf{n} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p x_i, \quad (3)$$

$$\Sigma_{\mathbf{X}} = E\{(\mathbf{X} - \mathbf{n})(\mathbf{X} - \mathbf{n})^T\}. \quad (4)$$

令 $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_M$ 为 $\Sigma_{\mathbf{X}}$ 的特征根 ($\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \dots \geq \gamma_M \geq 0$), $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \dots, \mathbf{t}_M$ 为相应的单位特征向量。主成分变换实际上就是一种线性变换, 其形式为:

$$\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_M)^T = \mathbf{A}\mathbf{X}, \quad (5)$$

式中, \mathbf{A} 是主成分变换矩阵, Y_1, Y_2, \dots, Y_M 之间互不相关, \mathbf{Y} 的分量 Y_1, Y_2, \dots, Y_M 依次为 \mathbf{X} 的第一, 第二, \dots , 第 M 个主成分。

在主成分变换中, 前 z 个主成分 Y_1, Y_2, \dots, Y_z 的累计方差贡献率为:

$$V_z = \sum_{i=1}^z \gamma_i / \sum_{i=1}^M \gamma_i. \quad (6)$$

累积方差贡献率越大, 表明通过所选的少数几个主成分解释原变量差异的能力越强。如果选取的主成分太少, 将会丢失原始光谱较多的有用信息, 如果选取的主成分太多, 会包括过多的测量噪声。实际应用中通常取 V_z 大于某一值 (一般取 $V_z \geq 90\%$) 的前 z 个主成分代替原来的光谱。

设 δ_{jj} 是 $\Sigma_{\mathbf{X}}$ 对角线上的值, 则主成分 Y_k 与第 j 个波长下的消光值 x_j 的相关系数为:

$$\rho(Y_k, x_j) = \sqrt{\gamma_k} \mathbf{t}_{jk} / \sqrt{\delta_{jj}}, \quad k=1, 2, \dots, M. \quad (7)$$

可以得出, 能代表原始数据的 z 个主成分对于第 j 个波长的贡献率 v_j 是 x_j 分别与 Y_1, Y_2, \dots, Y_z 相关系数的平方和, 即:

$$v_j = \sum_{k=1}^z \gamma_k \mathbf{t}_{jk}^2 / \delta_{jj}, \quad (8)$$

v 的大小反映了该波长下有多少信息被映射到了前 z 个主成分中, 而主成分本身包含了原始数据的大部分信息。因此, v 本身也反映了该波长所包含的信息量。由式(5)可以看出, 由累积方差贡献率选取的 z 个主成分 Y_1, Y_2, \dots, Y_z 改变了光谱消光值的物理意义。为了保证原数据的物理意义, 本文采用 v 作为波长选择的主要依据。

4 仿真实验及数值模拟

图 1 为利用协方差矩阵 $\Sigma_{\mathbf{X}}$ 计算出的一待测颗粒系消光光谱的相关矩阵图。协方差矩阵归一化后即可得相关系数矩阵。已知该待测颗粒系粒径服从 $(\bar{D}, k) = (5.5, 10)$ 单峰 R-R 分布, 颗粒物的相对复折射率 $m = 1.33$, 粒径限制在 $0.1 \sim 10 \mu\text{m}$ 。在可见光波段 $0.4 \sim 0.8 \mu\text{m}$ 内均匀选择 21 个波长作为测量波长, 每个波长下的消光值均重复测量 10 次, 即 $p = 10, M = 21$ 。由于在测量过程中会不可避免地引入噪声, 这里对每个波长下的消光值都加入了 $\pm 1\%$ 的随机噪声。图 1 中小方格的颜色越浅, 表示不同波长下消光值之间的相关性越强。对角线上纯白色的小方格表示同一波长下光谱消光值的相关系数等于 1, 它们的相关程度为完全相关。相关性越强说明这两个波长之间的光谱消光值所包含的信息量越相近。如果相关程度接近的两个波长同时被选中作为测量波长反演粒径分布的话, 就会导致光谱数据的冗余。从图 1 中可以看出, 相邻波长的消光值之间的相关程度是比较接近的, 从整体上看这 21 个消光值之间相关性的区分不是很明显。在这种情形下很难从 21 个波长中选择不相关的波长作为特征波长。在光谱学中, 光谱变化最明显的区域也应当对应光谱信息最丰富的区域, 所以为了更有效地选择有代表性的特征波长, 这里分别对消光光谱进行一阶微分和二阶微分处理。微分光谱既可以

提供比原光谱更高的分辨率和更清晰的光谱轮廓变换,很方便地把握原光谱的变化趋势,也可以消除平缓背景干扰的影响。

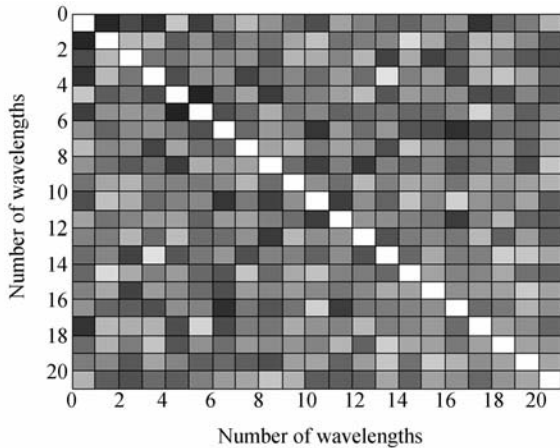


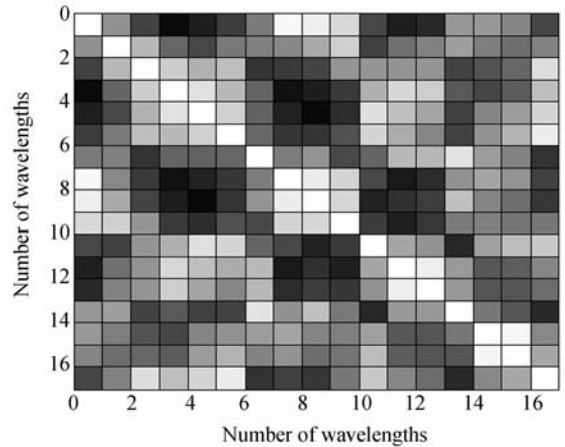
图 1 单峰 R-R 分布的可见消光光谱的相关矩阵图
Fig. 1 Correlation matrix of visible extinction spectra for monomodal R-R distribution

图 2 为对图 1 所示的颗粒系的消光光谱进行一阶微分和二阶微分处理后得到的相关矩阵图。对光谱微分一般有直接微分法和 Savitzky-Golay 微分法。对于分辨率高、波长采样点多的光谱,直接微分法求取的微分光谱与实际相差不大,但对于稀疏波长采样点的光谱,该方法所求的微分则存有较大误差,这时可采用 Savitzky-Golay 卷积微分法计算^[11]。该方法既能克服直接微分法的弱点,且微分光谱不发生位移,又可较好地保持光谱中的有用信息。所以本文采用五点二次多项式的 Savitzky-Golay 卷积微分法对原消光光谱进行一阶微分和二阶微分处理^[11-12]。

通过图 1 和图 2 可以看出,一阶微分消光光谱的部分邻近波长之间的光谱相关程度是非常接近的,并且它的相关矩阵图出现了明显的分块现象,而原始光谱和二阶微分光谱之间的光谱相关性区分却不是很明显,也没有明显的分块现象。

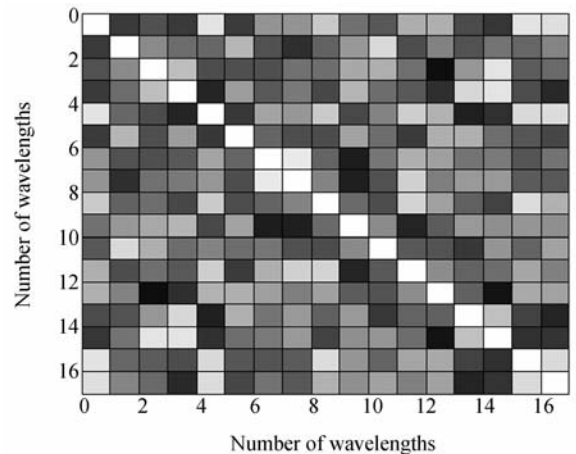
表 1 列出了该颗粒系的可见消光光谱,一阶微分以及二阶微分可见消光光谱利用主成分分析法得到的结果。根据表 1 的结果可以看出,经过主成分变换后,一阶微分消光光谱的前 4 个主成分的累积方差贡献率超过了 90%,并且前 4 个主成分对应的特征值均大于 1,而原始消光光谱和二阶微分消光光谱的累积方差贡献率超过了 90%的主成分个数均大于 4。所以从它们各自的

主成分分析结果中也可看出一阶微分消光光谱以最少的主成分,最大可能地利用了原始光谱的有用信息,从而强化了谱带特征。因此,本文将原始消光光谱先做一阶微分处理后再对其进行主成分变换。



(a) 一阶微分可见消光光谱

(a) First-order differential visible extinction spectra



(b) 二阶微分可见消光光谱

(b) Second-order differential visible extinction spectra

图 2 单峰 R-R 分布的相关矩阵图

Fig. 2 Correlation matrixes for monomodal R-R distribution

图 3 为对消光光谱进行一阶微分处理后选取前 4 个主成分得到的主成分对一阶微分可见消光光谱的贡献率,该待测颗粒系与图 1 的测定对象相同。由于在进行主成分变换之前首先要对原始消光光谱进行五点二次的 Savitzky-Golay 一阶微分,一阶微分之后需要舍弃 21 个波长的前两个和后两个波长。每个波长下的消光值对主成分的

贡献率是不同的,贡献率越大,说明该波长的消光值所包含的信息越丰富。

表 2 为采用 3 种不同波长选择方法得到的反演结果。该待测颗粒系与图 1 的测定对象相同。在非独立模式下,对于单峰 R-R 分布的颗粒系来说,粒径分布的反演转化为两个待定参数(\bar{D}, k)的优化求解问题,参数(\bar{D}, k)确定之后,即可获得待测颗粒系的粒径分布。本文选取 5 个波长下的消光值求解粒径分布参数,反演方法采用非独立模式下的遗传算法。由于 v 的大小反映了该波长下有多少信息被映射到了选取的主成分中,所以这里将 v 从大到小排序。从图 3 可以看出,第 4, 5, 9, 12, 19 等 5 个波长对应的 v 是比较大的。在表 2 中,序号 1 表示采用从大到小排序最靠前的第 4, 5, 9, 12, 19 等 5 个波长作为特征波长进行反演;序号 2 表示采用最靠前的第 4, 5, 12, 19 等 4 个波长,另外把第 1 个波长也作为特征波长进行反演。这里没有选择第 21 个波长是因为选择的第 19 个波长已经与可见光的最大边界波长(第 21 个波长)非常接近了。序号 3 表示从 21 个波长中随机任选 5 个波长作为反演波长。

表 1 单峰 R-R 分布的主成分分析结果

Tab. 1 Results of PCA for monomodal R-R distribution

| PCA 处理对象 | 主成分 | 特征值 | 方差贡献率 | 累积方差贡献率 |
|------------|-----|---------|-------|---------|
| 可见消光光谱 | 1 | 4.412 5 | 21% | 21% |
| | 2 | 3.789 7 | 18% | 39% |
| | 3 | 3.140 5 | 14% | 54% |
| | 4 | 2.732 3 | 13% | 67% |
| | 5 | 2.417 0 | 11% | 78% |
| | 6 | 1.770 1 | 8% | 86% |
| | 7 | 1.461 9 | 6% | 93% |
| | 8 | 0.943 6 | 4% | 98% |
| 一阶微分可见消光光谱 | 1 | 7.749 7 | 45% | 45% |
| | 2 | 3.854 6 | 22% | 68% |
| | 3 | 2.830 | 16% | 84% |
| | 4 | 1.474 2 | 8% | 93% |
| | 5 | 0.536 5 | 3% | 96% |
| 二阶微分可见消光光谱 | 1 | 6.600 2 | 38% | 38% |
| | 2 | 3.845 7 | 22% | 61% |
| | 3 | 2.723 9 | 16% | 77% |
| | 4 | 2.339 6 | 13% | 91% |
| | 5 | 1.063 7 | 6% | 97% |
| | 6 | 0.373 2 | 2% | 99% |

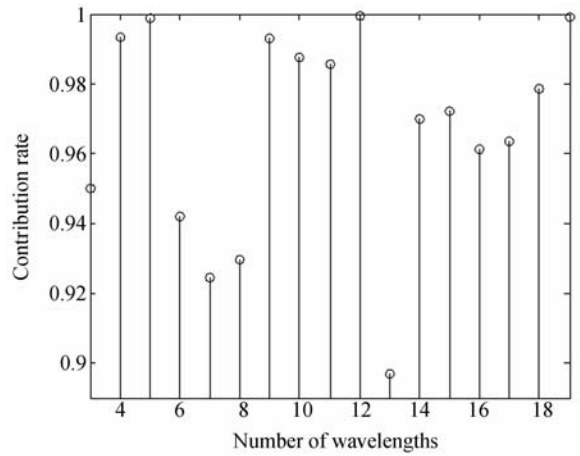


图 3 主成分对一阶微分可见消光光谱的贡献率
Fig. 3 Contribution rate of principle component to the first-order differential visible extinction spectra

从表 2 给出的结果不难看出采用第 2 种方法得到的反演结果是最好的,而单独利用 v 的大小作为特征波长的选择依据是不够充分的,还应当把光谱范围的边界波长也作为测量波长。光全散射颗粒粒径的测量方法是通过测量多个波长下的消光值来获得待测颗粒系的粒径分布,在这种测量方法的数据处理中都会遇到第一类 Fredholm 积分方程的求解问题,因此需要事先确定积分方程的上下限即粒径测量范围。在光谱范围边界处选取波长,主要是因为光全散射法的粒径测量范围与波长范围有着密切的关系,光全散射法的粒径测量范围由波长范围决定。在可见光范围内,光全散射法能测量的最佳粒径为 $0.1 \sim 10 \mu\text{m}$,所以如果待测颗粒系的粒径在 $0.1 \sim 10 \mu\text{m}$ 内,那么选择的反演波长最好分散于整个可见光波段,即尽量把边界波长也作为反演波长。

表 2 单峰 R-R 分布在可见光波段内的反演结果
 $((\bar{D}, k) = (5.5, 10))$

Tab. 2 Inversion results of monomodal R-R distribution in visible region $((\bar{D}, k) = (5.5, 10))$

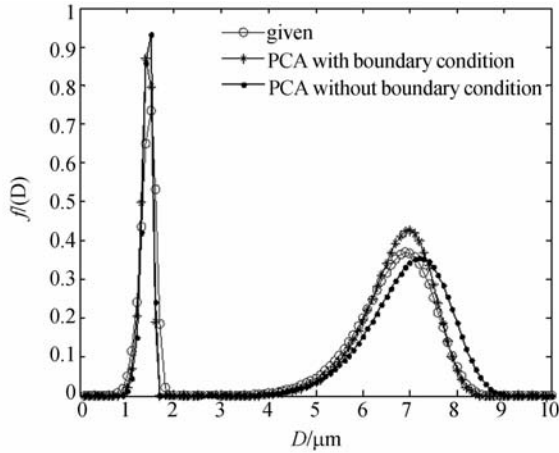
| 序号 | 反演值/ $(\pm 1\%)$ | 反演误差/ $(\pm 1\%)$ | 反演值/ $(\pm 2\%)$ | 反演误差/ $(\pm 2\%)$ |
|----|---------------------|-------------------|---------------------|-------------------|
| 1 | (5.572 1, 11.102 5) | 0.264 1 | (5.616 0, 12.288 1) | 0.490 1 |
| 2 | (5.521 6, 10.580 6) | 0.112 9 | (5.540 7, 11.210 9) | 0.229 2 |
| 3 | (5.594 5, 9.431 8) | 0.278 2 | (5.769 4, 9.370 9) | 0.686 6 |

图 4 为粒径服从双峰 R-R 分布的颗粒系采

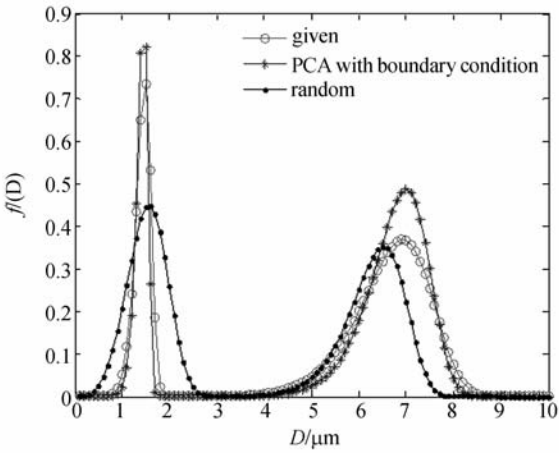
用不同波长选择方法得到的反演结果。粒径分布参数为 $\bar{D}_1, k_1, \bar{D}_2, k_2, n=1.5, 10, 7, 10, 0.3$, 颗粒物的相对复折射率 $m=1.235$ 。在可见光波段 $0.4 \sim 0.8 \mu\text{m}$ 内均匀选择 21 个波长作为测量波长, 每个波长下的消光值均重复测量 10 次, 测量粒径限制在 $0.1 \sim 10 \mu\text{m}$ 。在非独立模式下, 对于双峰分布的颗粒系来说, 粒径分布的反演转化为 5 个待定参数 $(\bar{D}_1, k_1, \bar{D}_2, k_2, n)$ 的优化求解问题, 本文选取 7 个波长下消光值求解粒径分布参数。从图 4 显示的反演结果可以看出, 利用 v 的大小作为特征波长选择的主要依据并且把光谱范围的边

界波长也作为测量波长这样的选择方法得到的反演结果好于单独将 v 的大小作为选择依据以及随机任选的波长选择方法。

图 5 为对可见-红外消光光谱进行一阶微分处理后选取前 4 个主成分得到的主成分对一阶微分消光光谱的贡献率。该待测颗粒系粒径服从 $(\bar{D}, k)=(5.5, 10)$ 单峰 R-R 分布, 颗粒物的相对复折射率 $m=1.33$ 。在可见-红外波段 $\lambda=0.4 \sim 2 \mu\text{m}$ 内均匀选择 21 个波长作为测量波长, 每个波长下的消光值均重复测量 10 次, 即 $p=10, M=21$, 测量粒径限制在 $0.1 \sim 10 \mu\text{m}$ 。从图 5 可以看出, 第 4, 5, 9, 11, 18 等 5 个波长对应的值是从大到小排序最靠前的。



(a) $\pm 1\%$ 随机噪声
(a) $\pm 1\%$ random noise



(b) $\pm 2\%$ 随机噪声
(b) $\pm 2\%$ random noise

图 4 双峰 R-R 分布在可见光波段内的反演结果
($\bar{D}_1, k_1, \bar{D}_2, k_2, n=1.5, 10, 7, 10, 0.3$)

Fig. 4 Inversion results of bimodal R-R distribution in visible region ($\bar{D}_1, k_1, \bar{D}_2, k_2, n=1.5, 10, 7, 10, 0.3$)

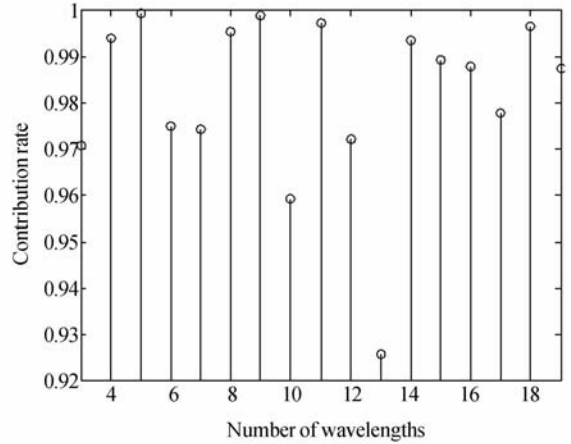


图 5 主成分对一阶微分可见-红外消光光谱的贡献率
Fig. 5 Contribution rate of principle component to the first-order differential VIS-IR extinction spectra

表 3 为采用 3 种不同波长选择方法得到的反演结果。该待测颗粒系与图 5 的测定对象相同。序号 1 表示的是采用 v 从大到小排序最靠前的第 4, 5, 9, 11, 18 等 5 个波长作为测量波长进行反演。序号 2 表示的是采用 v 从大到小排序最靠前的第 5, 8, 11 等 3 个波长, 另外把第 1 波长和第 21 波长也作为测量波长进行反演。序号 3 表示的是从 21 个波长中随机任选 5 个波长作为测量波长进行反演。从表 3 列出的结果不难看出采用第 2 种方法得到的反演结果仍然是最好的。

表 3 单峰 R-R 分布在可见-红外波段内的反演结果
($\bar{D}, k=5.5, 10$)

Tab. 3 Inversion results of monomodal R-R distribution in VIS-IR region($\bar{D}, k=5.5, 10$)

| 序号 | 反演值/(±1%) | 反演误差/ (±1%) | 反演值/(±2%) | 反演误差/ (±2%) |
|----|-------------------|----------------|-------------------|----------------|
| 1 | (5.493 4,9.875 0) | 0.026 9 | (5.486 9,9.735 4) | 0.055 7 |
| 2 | (5.508 3,9.972 3) | 0.023 9 | (5.517 1,9.925 9) | 0.050 1 |
| 3 | (5.510 4,9.871 3) | 0.039 3 | (5.521 1,9.726 3) | 0.081 0 |

5 实验验证

为了更可靠地验证本文提出的方法,本文进行了实验验证,实验数据由上海理工大学的蔡小舒教授提供。实验采用标准聚苯乙烯颗粒,颗粒均匀地分散在水中。颗粒的相对折射率 $m = 1.235$,标称直径分别为 $1.98 \mu\text{m}$ 和 $3.26 \mu\text{m}$,标准颗粒粒径服从单峰 R-R 分布,样品池厚度 $L = 10 \text{ mm}$,测量波长为可见光。根据测得的 16 个波长下的消光值,将一阶微分消光光谱进行主成分变换,然后按照每个波长下的一阶微分消光光谱对主成分贡献率的大小排序,选择值排在最前面所对应的 3 个波长和测量波长的 2 个边界波

表 4 标准颗粒系反演结果

Tab. 4 Inversion results of standard particles

| 标签 直径 | PCA | | 任意选择 | |
|----------|-------|--------|-------|--------|
| | 反演结果 | 反演误差/% | 反演结果 | 反演误差/% |
| 1.98 | 2.031 | 2.58% | 2.042 | 3.13% |
| 3.26 | 3.195 | 1.99% | 3.171 | 2.73% |

参考文献:

[1] 王乃宁. 颗粒粒径的光学测量技术及应用[M]. 北京:原子能出版社,2000.
WANG N N. *Optic Measurement Technology of Particle Size and Its Application*[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 2000. (in Chinese)

[2] 徐峰,蔡小舒,苏明旭,等. 光谱消光法测量高压湿蒸汽的研究[J]. 动力工程,2009,29(3):254-261.
XU F, CAI X SH, SU M X, et al.. Research on the measurement of high pressure wet steam by spectral light extinction method[J]. *Journal of Power Engineering*, 2009, 29 (3): 254-261. (in

长作特征波长,采用这种选择方法得到的反演结果如表 4 所示。可以看出,采用基于主成分分析的特征波长选择方法后,反演结果与真实标称粒径相当吻合,并且采用该方法的反演结果优于采用波长任意选择方法得到的结果。

6 结 论

本文在对单峰 R-R 分布的颗粒系在可见及可见-红外波段内的消光光谱,一阶微分和二阶微分消光光谱进行主成分分析的基础上,提出了一种基于主成分分析的特征波长选择方法。该方法首先对一阶微分消光光谱进行主成分变换,然后按每个波长下的一阶微分消光光谱对主成分贡献率的大小进行特征波长的选择,将贡献率从大到小排序选择最靠前的几个波长作为特征波长,同时把光谱范围的边界波长也作为特征波长。主成分分析在最大可能利用光谱有用信息的前提下,尽可能地去除了无关信息,同时还抑制了测量噪声对反演结果的影响。文中分别对单峰及双峰 R-R 分布的颗粒系进行了仿真实验验证,并采用标准聚苯乙烯颗粒进行实测数据的验证。采用本文提出的波长选择方法得到的标准颗粒粒径反演误差均小于 3%。该方法较好地解决了光全散射法光谱消光测量中波长随机任选的问题,因而具有很好的应用前景。

Chinese)

[3] 孙晓刚,唐红,原桂彬. 颗粒系的可见消光光谱分析及最佳波长的选择[J]. 光谱学与光谱分析, 2008,28(9):1968-1973.
SUN X G, TANG H, YUAN G B. Analysis of visible extinction spectrum of particle system and selection of optimal wavelength[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2008, 28 (9): 1968-1973. (in Chinese)

[4] 刘智深,丁宁,赵朝方,等. 主成分分析法在油荧光光谱波段选择中的应用[J]. 地理空间信息, 2009, 7(3):12-15.
LIU ZH S, DING N, ZHAO CH F, et al.. Appli-

- cation of the PCA method to band selection for oil fluorescence spectrums[J]. *Geospatial Information*, 2009,7(3):12-15. (in Chinese)
- [5] 曹璞, 潘涛, 陈星旦. 小型近红外玉米蛋白质成分分析仪器设计的波段选择[J]. *光学精密工程*, 2007,15(12):1952-1958.
CAO P, PAN T, CHEN X D. Choice of wave band in design of minitype near-infrared corn protein content analyzer[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2007, 15(12):1952-1958. (in Chinese).
- [6] 许法强, 万晓霞, 朱元泓. 基于旋转主成分分析的颜色组分预测[J]. *光学精密工程*, 2008,16(3):518-523.
XU F Q, WAN X X, ZHU Y H. Color component prediction based on rotated principal component analysis[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2008,16(3):518-523. (in Chinese)
- [7] 徐峰, 蔡小舒, 沈建祺. 米氏理论的近似及在粒度测量中的应用[J]. *光学学报*, 2003,23(12):1464-1469.
XU F, CAI X SH, SHEN J Q. Geometric approximation of light scattering in arbitrary diffraction regime for absorbing particles: application in laser particle sizing[J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, 23(12):1464-1469. (in Chinese).
- [8] LEVIN E J T, KREIDENWEIS S M, MCMEEK-ING G R, *et al.*. Aerosol physical, chemical and optical properties during the Rocky Mountain Airborne Nitrogen and Sulfur study[J]. *Atmospheric Environment*, 2009,43(11):1932-1939.
- [9] MASSOLI P, MURPHY D M, LACK D A, *et al.*. Uncertainty in light scattering measurements by TSI nephelometer: results from laboratory studies and implications for ambient measurements[J]. *Aerosol Science and Technology*, 2009, 42(11):1064-1074.
- [10] 杨诸胜, 郭雷, 罗欣, 等. 基于分段主成分分析的高光谱图像波段选择算法研究[J]. *测绘工程*, 2006,15(3):15-18.
YANG ZH SH, GUO L, LUO X, *et al.*. Research on segmented PCA based on band selection algorithm of hyperspectral image[J]. *Engineering of Surveying and Mapping*, 2006,15(3):15-18. (in Chinese)
- [11] 褚小立, 袁洪福, 陆婉珍. 近红外分析中光谱预处理及波长选择方法进展与应用[J]. *化学进展*, 2004,16(4):528-542.
CHU X L, YUAN H F, LU W ZH. Progress and application of spectral data pretreatment and wavelength selection methods in NIR analytical technique[J]. *Progress In Chemistry*, 2004, 16(4):528-542. (in Chinese)
- [12] 赵强, 张工力, 陈星旦. 多元散射校正对近红外光谱分析定标模型的影响[J]. *光学精密工程*, 2005, 13(1):53-58.
ZHAO Q, ZHANG G L, CHEN X D. Effects of multiplicative scatter correction on a calibration model of near infrared spectral analysis[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005,13(1):53-58. (in Chinese)

作者简介:



唐红(1980—),女,辽宁锦州人,博士,讲师,2005年、2008年于哈尔滨工业大学分别获得博士学位,主要从事光散射理论研究及光电仪器的检测。E-mail: tangbenben@126.com



郑文斌(1973—),男,四川彭州人,讲师,博士研究生,2004年于西南交通大学获得硕士学位,2006年起为浙江大学博士研究生,主要从事智能优化算法、模式识别等方面的研究。E-mail: zhengwb@cjlu.edu.cn



李宪霞(1986—),女,黑龙江双鸭山人,硕士研究生,主要从事优化算法及虚拟仪器设计与开发方面的研究。E-mail: li-xianxia@163.com