arXiv:2602.08601v1 [physics.comp-ph] 9 Feb 2026

基于 Tikhonov 正则化重建通过对比度变化小角中子散射获得的部分散射函数

Manabu Machida[1*]和 Koichi Mayumi[2*]

[1*]近畿大学工学部信息学系，日本广岛县东广岛市高屋乌梅之边 1 号，邮编 739-2116。[2*]东京大学固体物理研究所，日本千叶县柏市柏之叶 5-1-5，邮编 277-8581。

*通讯作者。电子邮箱：machida@hiro.kindai.ac.jp；kmayumi@issp.u-tokyo.ac.jp；

摘要

对比度变化小角中子散射（CV-SANS）已广泛用于多组分体系的纳米结构分析。在 CV-SANS 实验中，通过奇异值分解（SVD），将具有不同散射对比度的样品的散射强度分解为部分散射函数，这些函数分别对应各组分的结构以及不同组分之间的交叉相关。然而，由于奇异值之间存在显著差异，绝对值较小的部分散射函数往往难以稳定估算。本文提出通过引入 Tikhonov 正则化来解决这一不稳定性，从而确保更稳定地重建部分散射函数。

关键词：对比度变化小角中子散射、聚轮烷、奇异值分解、Tikhonov 正则化

1 引言

小角中子散射（SANS）已被用于观察材料在纳米至亚微米长度尺度上的微观结构 [1]。中子散射的一个独特之处在于，散射对比度会因

材料中组分的氘代 [1]。通过氘代进行对比度变化的小角中子散射（CV-SANS）能够对多组分体系进行纳米结构分析，例如共聚物胶束 [2], 聚合物/无机填料复合材料 [3, 4], 蛋白质复合物[5]以及超分子组装体 [6–9]。

例如，CV-SANS 被用于研究聚轮烷（PR）。聚轮烷是一种项链状超分子组装体，其中环糊精（CD）穿套在聚乙二醇（PEG）链上（图 1(a)） [6–9]。对于 PR溶液，散射强度$I(Q)$表示如下：

$$I(Q) = \Delta\rho_{\mathrm{C}}^2 S_{\mathrm{CC}}(Q) + \Delta\rho_{\mathrm{P}}^2 S_{\mathrm{PP}}(Q) + 2\Delta\rho_{\mathrm{C}}\Delta\rho_{\mathrm{P}} S_{\mathrm{CP}}(Q), \tag{1}$$

其中， Q 是散射矢量的模， $\Delta\rho_i$ 是组分 i (C：CD 或 P：PEG) 与溶剂之间的散射长度密度（SLD）差， S_{ij} 是对应于自相关（$i = j$）或不同组分间交叉相关（$i \neq j$）的部分散射函数。如图 1(a) 所示， S_{CC}、 S_{PP} 和 S_{CP}分别表示 CD 的结构、PEG 的构象以及 CD 与 PEG 之间的拓扑连接。在我们先前的工作中，利用不同氘代水平的 PR溶液的 CV-SANS 数据，通过奇异值分解法确定了部分散射函数 S_{ij}。然而，如图 1(b) 所示，所得 S_{PP} 中绝对值最小的那些存在噪声。为克服确定部分散射函数时的不稳定性，本研究将 Tikhonov 正则化应用于 PR溶液的 CV-SANS 数据。该方法可确保从 CV-SANS 数据中稳定地重建部分散射函数。

2 方法

2.1 PR溶液的氘代对比度变化小角中子散射实验

PR溶液的CV-SANS数据已在我们此前的论文中报道 [6]。在PR溶液的CV-SANS测量中，我们使用由氢化（h-）PEG或氘化（d-）PEG作为线性聚合物链，以及 α-环糊精（CD）作为环组成的PR（图1(b)）。h-PEG、d-PEG和CD的散射长度密度 ρ 分别为 0.65×10^6、 7.1×10^6 和 $2.0 \times 10^{6}\ ^{-2}$。h-PR和d-PR溶解于氢化二甲基亚砜（h-DMSO）与氘化二甲基亚砜（d-DMSO）的混合溶剂中。溶液中PR的体积分数为8%。溶剂 φ_{d} 中d-DMSO的体积分数分别为1.0、0.95、0.90和0.85，对应的溶剂散射长度密度分别为 5.3×10^6、 5.0×10^6、 4.7×10^6 和$4.5 \times 10^{6}\ ^{-2}$。

PR溶液的小角中子散射测量在 298K 下进行，使用的是东京大学固体物理研究所的 SANS-U衍射仪。该仪器位于日本东海村日本原子能研究开发机构的 JRR-3研究堆。入射束波长为 7.0，波长分布为 10%。样品到探测器的距离分别为 1 和 4m。散射中子由二维探测器收集。二维散射图样通过圆周平均转换为一维剖面。

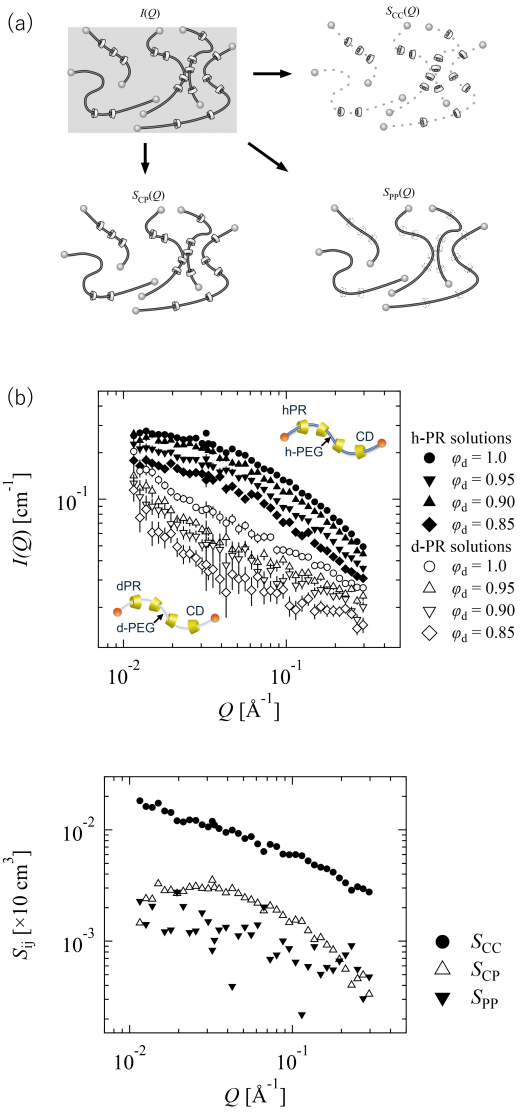

图 1 (a) PR溶液部分散射函数示意图 S_{ij} 。(b) 不同氘代水平的PR溶液的CV-SANS强度 $I(Q)$ 以及通过奇异值分解法 $S_{ij}(Q)$ 获得的部分散射函数 [6]。转载自参考文献 [6] ，经美国化学会许可。

扣除背景和样品池散射后，使用聚乙烯薄膜作为标准样品，将散射强度归一化为绝对散射强度。将校正后的散射强度 I 绘制为相对于 Q 的曲线。 $I(Q)$ 的误差棒由圆周平均的标准差给出。

2.2 根据 CV-SANS 数据确定部分散射函数的逆问题

我们引入一个三维实向量 $\mathbf{S}(Q) = (S_{\mathrm{PP}}(Q)\ S_{\mathrm{CC}}(Q)\ S_{\mathrm{CP}}(Q))^T$，其中 T 表示转置。设 m 为散射对比度的数量（我们假设 $m > 3$）。也就是说，我们有 $I^{(i)}(Q)\ (i = 1, \ldots, m)$。于是，散射强度可表示为一个 m 维实向量 $\mathbf{I} = \mathbf{I}(Q)$。之后，我们将设定 $m = 8$。由 (1) 可得

$$\mathbf{I} = A\mathbf{S}, \tag{2}$$

其中 A 是一个 $m \times 3$ 实矩阵，其元素可由（1）读出。

问题（2）可表述为以下最小化问题。

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\mathbf{S}} \|A\mathbf{S} - \mathbf{I}\|_{\ell^2} \\ &= \arg\min_{S^{(1)},S^{(2)},S^{(3)}} \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{3} A_{ij}S^{(j)} - I^{(i)}\right)^2}. \end{aligned} \tag{3}$$

由于$\mathbf{I}$ 是通过实验获得的，该向量包含噪声，可表示为$\mathbf{I}^{\delta}$。设

$$\|\mathbf{I}^{\delta} - \mathbf{I}\|_{\ell^2} \le \delta, \tag{4}$$

其中常数 $\delta > 0$ 表示噪声水平。注意，$\mathbf{I}$ 由（2）给出。下文中，我们将写作$\mathbf{I} = A\mathbf{S}_{\mathrm{true}}$，即$\mathbf{S}_{\mathrm{true}}$ 是一个包含介质中真实部分散射函数的向量。通常，$\mathbf{I}^{\delta}$ 不属于 A的值域，因此不存在$\mathbf{S}$ 使得 $A\mathbf{S} = \mathbf{I}^{\delta}$。因此，最小化问题的解$\arg\min_{\mathbf{S}} \|A\mathbf{S} - \mathbf{I}^{\delta}\|_{\ell^2}$ 可能与真实的$\mathbf{S}$相差甚远。

为解决这一问题，我们通过适当的正则化 [10],求解该问题，并尝试寻找最小值点 $\mathbf{S}_*$:

$$\mathbf{S}_* = \arg\min_{\mathbf{S}} \left(\|A\mathbf{S} - \mathbf{I}^{\delta}\|_{\ell^2}^2 + \alpha^2\|L\mathbf{S}\|_{\ell^2}^2\right), \tag{5}$$

其中 L 是一个 3×3 矩阵，且 $\alpha > 0$ 是一个标量。右侧的第二项（5）用于稳定解。在（5）中，除了正则化参数 α 和惩罚项外，我们还引入了对角矩阵 L。这是因为重建的部分散射函数可能具有不同的数量级。引入 L 可以实现公平的正则化。

定义

$$\mathbf{s} = L\mathbf{S}, \quad B = AL^{-1}, \tag{6}$$

并将最小化问题（5）改写为

$$\mathbf{s}_* = \arg\min_{\mathbf{s}} \Phi(\mathbf{s}), \tag{7}$$

其中

$$\Phi(\mathbf{s}) = \|B\mathbf{s} - \mathbf{I}^{\delta}\|_{\ell^2}^2 + \alpha^2\|\mathbf{s}\|_{\ell^2}^2. \tag{8}$$

方程（5）的解为 $\mathbf{S}_* = L^{-}\ \mathbf{s}_{*}$。

2.3 Tikhonov 正则化

我们考虑奇异值分解（SVD）：

$$B = UDV^T, \tag{9}$$

其中， $m \times m$ 矩阵 U 和 3×3 矩阵 V 是正交矩阵， D 是一个 $m \times 3$ 对角矩阵。矩阵 D 包含奇异值 $\mu_j \geq 0 (j = 1、2、3)$，其中 $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3$。设 $\lambda_j (j = 1、2、3)$ 是 $B^T B$ $(\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq 0)$ 的特征值。我们有关系式 $\mu_j = \sqrt{\lambda_j} (j = 1、2、3)$。记作

$$U = (\cdots \boldsymbol{\psi}_i \cdots), \quad V = (\cdots \boldsymbol{\varphi}_k \cdots), \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{\psi}_i$ 是一个 m 维实向量（$i = 1, \ldots\ldots, m$），而 $\boldsymbol{\varphi}_k$ 是一个3维实向量（$k = 1、2、3$）。我们注意到， $\{\boldsymbol{\psi}_i\}$ 和 $\{\boldsymbol{\varphi}_k\}$ 构成标准正交集。下面将介绍 α，它是式（5）中的正则化参数 [10, 11]。

定义一个 3×3 矩阵 M_α 为

$$M_\alpha = (\ldots \mathbf{t}_j(\alpha) \cdots), \tag{11}$$

其中

$$\mathbf{t}_j(\alpha) = \sum_{k=1}^{3} \frac{\varphi_k^{(j)}}{\alpha^2 + \mu_k^2} \boldsymbol{\varphi}_k, \quad j = 1, 2, 3. \tag{12}$$

我们有

$$\begin{aligned} \left(\alpha^2 E + B^T B\right) M_\alpha &= \alpha^2 M_\alpha + B^T B M_\alpha \\ &= (\cdots \alpha^2 \mathbf{t}_j(\alpha) \cdots) + (\cdots B^T B \mathbf{t}_j(\alpha) \cdots), \end{aligned} \tag{13}$$

其中 $E \in \mathbf{R}^{3\times3}$ 为单位矩阵。由于

$$\begin{aligned} \left\{B^T B \mathbf{t}_j(\alpha)\right\}_i &= \left\{V D^T D V^T \mathbf{t}_j(\alpha)\right\}_i \\ &= \sum_{k=1}^{3} \frac{\mu_k^2}{\alpha^2 + \mu_k^2} \varphi_k^{(i)} \varphi_k^{(j)} \end{aligned} \tag{14}$$

对于 $i = 1, 2, 3$，我们得到

$$\left\{\alpha^2 \mathbf{t}_j(\alpha) + B^T B \mathbf{t}_j(\alpha)\right\}_i = \sum_{k=1}^{3} \varphi_k^{(i)} \varphi_k^{(j)}. \tag{15}$$

因此，

$$\left(\alpha^2 E + B^T B\right) M_\alpha = V V^T = E. \tag{16}$$

同样，

$$M_\alpha \left(\alpha^2 + B^T B\right) = E. \tag{17}$$

方程（16）和（17）意味着

$$M_\alpha = \left(\alpha^2 + B^T B\right)^{-1}. \tag{18}$$

因此，矩阵 $\alpha^2 + B^T B$ 可逆。

定义矩阵 B^+_{reg} 如下

$$B^+_{\text{reg}} = \left(\alpha^2 + B^T B\right)^{-1} B^T. \tag{19}$$

这是一个正则化摩尔-彭若斯伪逆。注意， B 的摩尔-彭若斯伪逆写作 $B^+ = (B^T B)^{-1} B^T = V(D^T D)^{-1} D^T U^T$。

接下来，我们考虑如何利用 B^+_{reg} 得到$\mathbf{s}_*$。令$\mathbf{s}^\delta_\alpha$ 为以下方程的解

$$\alpha^2 \mathbf{s}^\delta_\alpha + B^T B \mathbf{s}^\delta_\alpha = B^T \mathbf{I}^\delta. \tag{20}$$

对于任意三维实向量$\mathbf{s}$，有

$$\begin{aligned}
&\|B\mathbf{s} - \mathbf{I}^\delta\|^2_{\ell^2} + \alpha^2 \|\mathbf{s}\|^2_{\ell^2} \\
&= \|B\mathbf{s}^\delta_\alpha - \mathbf{I}^\delta\|^2_{\ell^2} + \alpha^2 \|\mathbf{s}^\delta_\alpha\|^2_{\ell^2} \\
&+ 2(\mathbf{s} - \mathbf{s}^\delta_\alpha) \cdot \left(\alpha^2 \mathbf{s}^\delta_\alpha + B^T (B\mathbf{s}^\delta_\alpha - \mathbf{I}^\delta)\right) \\
&+ \|B(\mathbf{s} - \mathbf{s}^\delta_\alpha)\|^2_{\ell^2} + \alpha^2 \|\mathbf{s} - \mathbf{s}^\delta_\alpha\|^2_{\ell^2} \\
&= \|B\mathbf{s}^\delta_\alpha - \mathbf{I}^\delta\|^2_{\ell^2} + \alpha^2 \|\mathbf{s}^\delta_\alpha\|^2_{\ell^2} + \|B(\mathbf{s} - \mathbf{s}^\delta_\alpha)\|^2_{\ell^2} \\
&+ \alpha^2 \|\mathbf{s} - \mathbf{s}^\delta_\alpha\|^2_{\ell^2}.
\end{aligned} \tag{21}$$

这意味着，对于 $\alpha > 0$，存在唯一的$\mathbf{s}^\delta_\alpha$，使得

$$\Phi(\mathbf{s}^\delta_\alpha) = \inf_{\mathbf{s}} \Phi(\mathbf{s}). \tag{22}$$

根据 $\nabla\Phi = (\partial\Phi/\partial s^{(1)},\ \partial\Phi/\partial s^{(2)},\ \partial\Phi/\partial s^{(3)})^T = 2B^T(B\mathbf{s} - \mathbf{I}^\delta) + 2\alpha^2\mathbf{s} = 0$，我们发现，20是$\mathbf{s}^\delta_\alpha$ 使蒂霍诺夫泛函（22）达到最小值的必要且充分条件。因此，$\mathbf{s}_*$ 可计算为（回顾（8））

$$\mathbf{s}_* = \mathbf{s}^\delta_\alpha = B^+_{\text{reg}} \mathbf{I}^\delta. \tag{23}$$

我们注意到，$\mathbf{s}_*$ 和 B^+_{reg} 都取决于 α。

我们可以写作

$$\begin{aligned}\mathbf{s}_* &= (\alpha^2 E + B^T B)^{-1} B^T \mathbf{I}^\delta \\ &= MVD^T U^T \mathbf{I}^\delta \\ &= \sum_{k=1}^{3} \frac{1}{\alpha^2+\mu_k^2} \boldsymbol{\varphi}_k \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} \varphi_k^{(i)} \varphi_j^{(i)} {\mu_j}^t \boldsymbol{\psi}_j \mathbf{I}^\delta \\ &= \sum_{k=1}^{3} \frac{\mu_k}{\alpha^2+\mu_k^2} \left(\boldsymbol{\psi}_k \cdot \mathbf{I}^\delta\right) \boldsymbol{\varphi}_k \\ &= \sum_{k=1}^{3} \frac{1}{\mu_k} q(\alpha,\mu_k) \left(\boldsymbol{\psi}_k \cdot \mathbf{I}^\delta\right) \boldsymbol{\varphi}_k,\end{aligned} \tag{24}$$

其中

$$q(\alpha,\mu) = \frac{\mu^2}{\alpha^2+\mu^2}. \tag{25}$$

我们注意到，$0 < q(\alpha,\ \mu) < 1$ 和 $q(\alpha,\ \mu) \le \mu/(2\alpha)$，因为

$$\frac{1}{2\alpha} - \frac{\mu}{\alpha^2+\mu^2} = \frac{(\alpha-\mu)^2}{2\alpha(\alpha^2+\mu^2)} \ge 0. \tag{26}$$

当 $\alpha \ll \mu$ 时，Tikhonov 滤波器 $q(\alpha,\ \mu)$ 接近 1；当 $\alpha \gg \mu$ 时，它接近 0。因此，粗略地说，α 控制了 $\mathbf{s}_*$ 中包含的 SVD 分量数量。

让我们估算所得解$\mathbf{s}_*$的误差。令 $\mu_{n_0} > 0$ 为最小的非零奇异值。我们有

$$\begin{aligned}&\|\mathbf{s}_* - B^+_{\mathrm{reg}}\mathbf{I}\|_{\ell^2} = \|B^+_{\mathrm{reg}}\mathbf{I}^\delta - B^+_{\mathrm{reg}}\mathbf{I}\|_{\ell^2} \\ &= \left\| \sum_{k=1}^{3} \frac{1}{\mu_k} q(\alpha,\mu_k) \left(\boldsymbol{\psi}_k \cdot (\mathbf{I}^\delta - \mathbf{I})\right) \boldsymbol{\varphi}_k \right\|_{\ell^2} \\ &\le \min\left(\frac{1}{2\alpha}, \frac{1}{\mu_{n_0}}\right) \left\| \sum_{k=1}^{3} \left(\boldsymbol{\psi}_k \cdot (\mathbf{I}^\delta - \mathbf{I})\right) \boldsymbol{\varphi}_k \right\|_{\ell^2} \\ &= \min\left(\frac{1}{2\alpha}, \frac{1}{\mu_{n_0}}\right) \left(\sum_{k=1}^{3} \left|\boldsymbol{\psi}_k \cdot (\mathbf{I}^\delta - \mathbf{I})\right|^2 \right)^{1/2} \\ &\le \min\left(\frac{1}{2\alpha}, \frac{1}{\mu_{n_0}}\right) \|\mathbf{I}^\delta - \mathbf{I}\|_{\ell^2} \\ &\le \min\left(\frac{1}{2\alpha}, \frac{1}{\mu_{n_0}}\right) \delta.\end{aligned} \tag{27}$$

注意，$\mathbf{I}_{\|B^+_{\text{reg}} - \text{true}\|_{\ell^2}} = B_{\text{true}} \quad \text{true} = L_{\text{true}} \quad \|_* - \text{true}\|_{\ell^2} \le \|_* - B^+_{\text{reg}}\|_{\ell^2} + \mathbf{s}$，其中$\mathbf{sS}$。由于$\mathbf{sssII}\,\mathbf{s}$，因此有以下不等式成立。

$$\begin{aligned}\|\mathbf{s}_* - \mathbf{s}_{\text{true}}\|_{\ell^2} \le \min\left(\frac{1}{2\alpha}, \frac{1}{\mu_{n_0}}\right)\delta \\ + \|B^+_{\text{reg}} B\mathbf{s}_{\text{true}} - \mathbf{s}_{\text{true}}\|_{\ell^2}.\end{aligned} \tag{28}$$

(28) 的右侧表明，当 $\alpha = 0$ 足够小时，我们可以令 δ/μ_{n_0} 。否则，如果 $\alpha = 0$（不进行正则化）且 μ_{n_0} 较小，则（28）意味着重建的 $\mathbf{s}_*$ 可能与 $\mathbf{s}_{\text{true}}$有显著差异。然而，当 δ 较大或 μ_{n_0} 较小时，可以通过有限的 $\alpha > 0$得到更好的解。

由于正则化，即使在没有噪声的理想情况下，重建的 $\mathbf{s}_*$ 也与$\mathbf{s}_{\text{true}}$不同。我们写作

$$\mathbf{s}_{\text{proj}} = B^+_{\text{reg}} B\mathbf{s}_{\text{true}}. \tag{29}$$

这个 $\mathbf{s}^{\text{proj}}$ 是我们能够得到的最佳结果。注意，（29）可以改写为

$$\begin{aligned}\mathbf{s}_{\text{proj}} &= \left(\alpha^2 + B^T B\right)^{-1} B^T B\mathbf{s}_{\text{true}} \\ &= \mathbf{s}_{\text{true}} - \alpha^2 M_\alpha \mathbf{s}_{\text{true}}.\end{aligned} \tag{30}$$

这里用到了伍德伯里公式。方程（30）说明，引入 $\mathbf{s}^{\text{proj}}$ 后，$\mathbf{s}_{\text{true}}$ 与其并不一致。 $\alpha > 0$。

为了深入理解正则化，我们写作

$$\|B\mathbf{s} - \mathbf{I}^\delta\|^2_{\ell^2} + \alpha^2\|\mathbf{s}\|^2_{\ell^2} = \left\|\widetilde{B}_\alpha \mathbf{s} - \begin{pmatrix}\mathbf{I}^\delta \\ \mathbf{0}\end{pmatrix}\right\|^2_{\ell^2}, \tag{31}$$

其中 $\mathbf{0} = (0\ 0\ 0)^T$ 以及

$$\widetilde{B}_\alpha = \begin{pmatrix} B \\ \alpha E\end{pmatrix}. \tag{32}$$

我们有

$$\mathbf{s}^\delta_\alpha = B^+_{\text{reg}}\mathbf{I}^\delta = \widetilde{B}^+_\alpha \begin{pmatrix}\mathbf{I}^\delta \\ \mathbf{0}\end{pmatrix}, \tag{33}$$

其中

$$\widetilde{B}^+_\alpha = \left(\widetilde{B}^T_\alpha \widetilde{B}_\alpha\right)^{-1} \widetilde{B}^T_\alpha. \tag{34}$$

我们将正交投影矩阵 $P_\alpha \in \mathbf{R}^{(m+1)\times(m+1)}$ 引入为

$$P_\alpha = \widetilde{B}_\alpha \widetilde{B}^+_\alpha. \tag{35}$$

事实上，通过直接计算，我们可以证明 $P^T_\alpha = P_\alpha$ 和 $P^2_\alpha = P_\alpha$。我们已经看到， B $\mathbf{s}^\delta_\alpha$ 与 $\mathbf{I}^\delta$不同。前一个向量满足以下等式：

$$\widetilde{B}_\alpha \mathbf{s}^\delta_\alpha = P_\alpha \begin{pmatrix}\mathbf{I}^\delta \\ \mathbf{0}\end{pmatrix}. \tag{36}$$

这意味着，在 $(m+1)$维空间中，我们只考虑一个良好子空间来得到 $\mathbf{s}_{\alpha}^{\delta}$。代价函数（8）可计算为

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{s}_{\alpha}^{\delta}) &= \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_{\ell^2}^2 \\ &= \left\| \mathbf{I}^{\delta} \right\|_{\ell^2}^2 - \left\| P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_{\ell^2}^2 .\end{aligned} \tag{37}$$

一般来说， $\Phi(\mathbf{s}_{\alpha}^{\delta})$ 在非零 α 时取最小值。为了解关系式（37），注意到

$$\begin{aligned}&\left\| \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_{\ell^2}^2 = \left\| P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_{\ell^2}^2 \\ &= \left\| P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_{\ell^2}^2 + \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_{\ell^2}^2 \\ &+ 2P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \cdot \left[\begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right].\end{aligned} \tag{38}$$

右侧的最后一项为零：

$$\begin{aligned}&P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \cdot \left[\begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right] \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}^{T} P_{\alpha}^{T} \left[\begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right] \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}^{T} \left[P_{\alpha} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - P_{\alpha}^{2} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^{\delta} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right] \\ &= 0.\end{aligned} \tag{39}$$

2.4 重建质量

令

$$x = \ln Q, \quad y = \ln S^{(j)} \quad (j = 1, 2, 3). \tag{40}$$

我们可以通过计算 $(x,\ y)$ 到主轴的典型距离，来评估重建中的涨落。

假设 Q 被离散化为 $Q_i (i = 1、\ldots\ldots、N_Q)$，并将 $x,\ y$ 离散化为N_Q 个点 $x_i,\ y_i (i = 1、\ldots\ldots、N_Q)$。平均值 $\bar{x},\ \bar{y}$ 计算如下：

$$\bar{x} = \frac{1}{N_Q} \sum_{i=1}^{N_Q} x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{N_Q} \sum_{i=1}^{N_Q} y_i. \tag{41}$$

我们引入一个实矩阵 $Z \in \mathbb{R}^{N \times 2}$。 Z 的元素表示为

$$Z_{1i} = x_i - \bar{x}, \quad Z_{2i} = y_i - \bar{y} \tag{42}$$

对于 $i=1$，……，N_Q。定义

$$\Sigma=\begin{pmatrix}\frac{1}{N_Q}\sum_{i=1}^{N_Q}Z_{1i}^2 & \frac{1}{N_Q}\sum_{j=1}^{N_Q}Z_{1i}Z_{2i}\\ \frac{1}{N_Q}\sum_{i=1}^{N_Q}Z_{2i}Z_{1i} & \frac{1}{N_Q}\sum_{i=1}^{N_Q}Z_{2i}^2\end{pmatrix}. \tag{43}$$

令 λ_1,λ_2 为 Σ 的最大和次大特征值。令 $\mathbf{v}^{(1)},\mathbf{v}^{(2)}$ ($|\mathbf{v}^{(1)}|=|\mathbf{v}^{(2)}|=1$) 分别为对应于 λ_1，λ_2 的特征向量。我们可以写成

$$\Sigma=(\mathbf{v}^{(1)}\ \mathbf{v}^{(2)})\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}(\mathbf{v}^{(1)}\ \mathbf{v}^{(2)})^T. \tag{44}$$

令 $\mathbf{p}^{(i)}$ 为一个二维向量（$i=1,\ldots,N_Q$）：

$$\mathbf{p}^{(i)}=\begin{pmatrix}x_i\\ y_i\end{pmatrix}. \tag{45}$$

$\mathbf{p}^{(i)}$ 沿单位向量 $\mathbf{v}$ ($|\mathbf{v}|=1$) 方向的投影为$\mathbf{v}\cdot\mathbf{p}^{(i)}$。投影点的方差为

$$\begin{aligned}\frac{1}{N_Q}\sum_{i=1}^{N_Q}\left(\mathbf{v}\cdot\begin{pmatrix}Z_{1i}\\ Z_{2i}\end{pmatrix}\right)^2&=\mathbf{v}^T\left(\frac{1}{N_Q}\sum_{i=1}^{N_Q}\begin{pmatrix}Z_{1i}\\ Z_{2i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}Z_{1i}\\ Z_{2i}\end{pmatrix}^T\right)\mathbf{v}=\mathbf{v}^T\Sigma\mathbf{v}\\&=\lambda_1(\mathbf{v}\cdot\mathbf{v}^{(1)})^2+\lambda_2(\mathbf{v}\cdot\mathbf{v}^{(2)})^2.\end{aligned} \tag{46}$$

因此，当 $\mathbf{v}=\mathbf{v}^{(1)}$ 时，方差达到最大值 λ_1。

由于向量 $\mathbf{v}^{(1)}$ 是沿主轴方向的单位向量，而 $\mathbf{v}^{(2)}$ 垂直于该轴。我们可以将主成分和次主成分写为

$$X_i=\mathbf{v}^{(1)}\cdot\mathbf{p}^{(i)},\quad Y_i=\mathbf{v}^{(2)}\cdot\mathbf{p}^{(i)},\quad i=1,\ldots,N_Q. \tag{47}$$

然后我们可以计算标准差 σ：

$$\sigma=\left(\frac{1}{N_Q}\sum_{j=1}^{N_Q}(Y_i-\bar{Y})^2\right)^{1/2},\quad \bar{Y}=\frac{1}{N_Q}\sum_{i=1}^{N_Q}Y_i. \tag{48}$$

我们注意到，如果 $S^{(j)}(Q_i)$ 沿主轴方向排列，则 σ 较小；如果图形粗糙，则 σ 较大。

3 结果与讨论

3.1 数值测试

本节中，我们使用数值计算得到的正向数据来检验我们的反演算法I^δ。根据参考文献 [6],，我们设定 $m=8$。我们取 N_Q 个 $Q\,(Q_i、\ i=1、\ldots\ldots、\ N_Q)$的值。

其中 $N_Q = 39$。如（1）和（2）所示， A 的每一行有 $\Delta\rho_{\mathrm{P}}^2$， $\Delta\rho_{\mathrm{C}}^2$ 且 $2\Delta\rho_{\mathrm{C}}\Delta\rho_{\mathrm{P}}$。我们采用参考文献 A 中使用的矩阵 [6]:

$$A_{11} = 21.2652051242863,$$

$$A_{12} = 10.8267092340648,$$
$$A_{13} = 30.3808246232,$$
$$A_{21} = 18.8919928157135,$$
$$A_{22} = 9.15345279381885,$$
$$A_{23} = 26.3003394974132,$$
$$A_{31} = 16.6591554144896,$$
$$A_{32} = 7.62057126092164,$$
$$A_{33} = 22.5346205632921,$$
$$A_{41} = 14.5666929206144,$$
$$A_{42} = 6.22806463537323,$$
$$A_{43} = 19.0496514438685,$$
$$A_{51} = 3.54675562126379,$$
$$A_{52} = 10.8267092340648,$$
$$A_{53} = -12.3934969779652,$$
$$A_{61} = 4.61481630508689,$$
$$A_{62} = 9.15345279381885,$$
$$A_{63} = -12.9986927343881,$$
$$A_{71} = 5.82325189625878,$$
$$A_{72} = 7.62057126092164,$$
$$A_{73} = -13.3231386761134,$$
$$A_{81} = 7.17206239477945,$$
$$A_{82} = 6.22806463537323,$$
$$A_{83} = -13.3668348031411.$$

A 的奇异值为 $\mu_1 = 64.836$、 $\mu_2 = 30.846$ 和 $\mu_3 = 4.5481$。在此数值测试中，我们假设 $\mathbf{S}(Q) = (S_{\mathrm{PP}}(Q)\ S_{\mathrm{CC}}(Q)\ S_{\mathrm{CP}}(Q))^T$ 由下式给出

$$S_{\mathrm{PP}}(Q) = \frac{e^{-9}}{\sqrt{Q}},$$

$$S_{\mathrm{CC}}(Q) = \frac{e^{-6}}{\sqrt{Q}},$$
$$S_{\mathrm{CP}}(Q) = \frac{e^{-8}}{\sqrt{Q}}.$$

此外，我们通过向$\mathbf{I} = A\mathbf{S}$添加 3% 的噪声，使用均匀分布伪随机数生成实验数据$\mathbf{I}^{\delta}$。我们将$\mathbf{S}_*$的各分量表示为$S_*^{(1)}(Q) = S_{\mathrm{PP},*}(Q)$、$S_*^{(2)}(Q) = S_{\mathrm{CC},*}(Q)$和$S_*^{(3)}(Q) = S_{\mathrm{CP},*}(Q)$。

首先，令 $L = E$和 $\alpha = 0$（不进行正则化）。使用（23），我们得到$\mathbf{S}_* = \mathbf{s}_* = B^{+}\mathbf{I}^{\delta} = A^{+}\mathbf{I}^{\delta}$。结果如图 2（上）所示。尽管重建的$S_{\mathrm{CC}}$、$S_{\mathrm{CP}}$准确，但重建的$S_{\mathrm{PP}}$（它是$\mathbf{S}_*$中最小的分量）不稳定。

接下来，我们进行正则化，并将 $\alpha = 10$ 设定为 $L = E$保持不变，即$\mathbf{S}_* = A_{\mathrm{reg}}^{+}\mathbf{I}^{\delta}$（本例中为$A_{\mathrm{reg}}^{+} = B_{\mathrm{reg}}^{+}$）。结果如图2（下）所示。在这种情况下，重建的$\mathbf{S}_*$与真实的 S 不同。粗略地说，我们通过设定 $\alpha = 10$来忽略最小的奇异值 μ_3。我们注意到，与 $q(\alpha, \mu_1)$ 和 $q(\alpha, \mu_2)$ 相比，$q(\alpha, \mu_3)$ 较小。

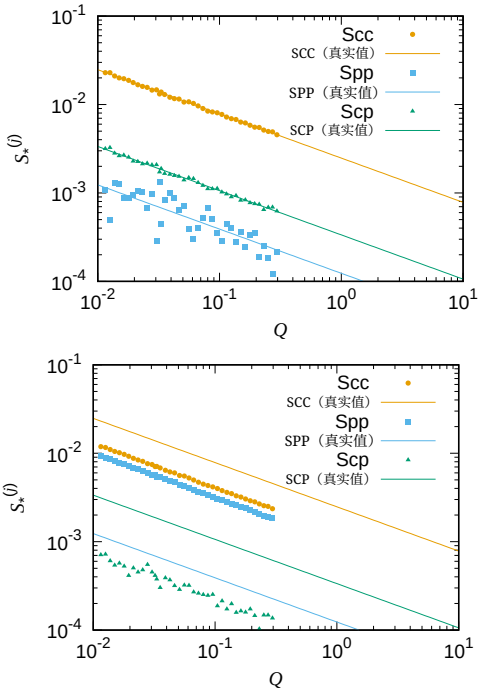

图2 正则化矩阵设为 $L = E$。正则化参数设为（上）$\alpha = 0$（不进行正则化）和（下）$\alpha = 10$。此处，$S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP}}$、$*$、$S_*^{(2)} = S_{\mathrm{CC}}$、$*$和$S_*^{(3)} = S_{\mathrm{CP}}$、$*$。

引入以下符号

$$\|\mathbf{S}_*\|_{2,1} = \sum_{i=1}^{N_Q} \sqrt{\sum_{j=1}^{3} \left(S_*^{(j)}(Q_i)\right)^2}, \tag{49}$$

$$\|S_*^{(j)}\|_1 = \sum_{i=1}^{N_Q} |S_*^{(j)}(Q_i)|, \tag{50}$$

and

$$\|A\mathbf{S}_* - \mathbf{I}^\delta\|_{2,1} = \sum_{i=1}^{N_Q} \|A\mathbf{S}_*(Q_i) - \mathbf{I}^\delta(Q_i)\|_{\ell^2}. \tag{51}$$

在图3中，我们绘制了不同 α下的（上图） $\|\mathbf{S}_*\|_{2,1}$和（下图）$\|S_{\mathrm{PP},*}\|_1$, $\|S_{\mathrm{CC},*}\|_1$, $\|S_{\mathrm{CP},*}\|_1$ 与$\|A\mathbf{S}_* - \mathbf{I}^\delta\|_{2,1}$的关系。在图3的两个面板中， $\alpha = 10$ 的点均以黑色表示。在图3的所有曲线上，随着 α 增大，各点向右移动（$\|A\mathbf{S}_* - \mathbf{I}^\delta\|_{2,1}$变大）。图3（下图）表明，不可能同时对所有 $S_{\mathrm{PP}}, S_{\mathrm{CC}}, S_{\mathrm{CP}}$ 进行适当的正则化，因为 α 小于10会使$\|S_{\mathrm{PP}},_*\|_1$ 小于 $\alpha = 10$ 对应的数值，但会使$\|S_{\mathrm{CC},*}\|_1$ 和$\|S_{\mathrm{CP},*}\|_1$变大。按照 L-曲线方法的思路，我们比较代价函数中的两项（见（5）），并绘制 $\|\mathbf{S}_*\|_{2,1}$和 $\|S_*^{(j)}\|_1$ 与 $\|A\mathbf{S} - \mathbf{I}^\delta\|_{\ell^2}^2$的关系。图3中曲线的左端对应于字母 L的拐角。

为了改善重建效果，我们将矩阵 L 设为对角矩阵$L = \mathrm{diag}(L_1, L_2, L_3)$ 其中 $L_1 = 1, L_2 = 0.1, L_3 = 1$。由于第二个分量$S_{\mathrm{CC},*}$ 是 $\mathbf{S}_*$ 中最大的（见图 2），我们可以通过设定L_2 小于 L_1, L_3来实现适当的正则化。实际上，真实的 S_{CC} 显著大于真实的$S_{\mathrm{PP}}, S_{\mathrm{CP}}$。

我们使用上述对角矩阵 L 来设定 $\alpha = 10$ 。在图4中，我们绘制了不同 α 下 $\|\mathbf{S}_*\|_{2,1}$（上图）和$\|S_{\mathrm{PP},*}\|_1$, $\|S_{\mathrm{CC},*}\|_1$, $\|S_{\mathrm{CP},*}\|_1$ （下图）相对于 $\|A\mathbf{S}_* - \mathbf{I}^\delta\|_{2,1}$ 的曲线。 $\alpha = 10$ 对应的点以黑色显示。在这种情况下，曲线单调变化（图4两个面板中的点在 α 减小时向左移动）。对于所有 $S_{\mathrm{PP}}, S_{\mathrm{CC}}, S_{\mathrm{CP}}$，都能实现适当的正则化。重建的 $\mathbf{S}_*$ 如图5所示。

为了解噪声对重建的影响，我们针对$\mathbf{I}^\delta$，分别加入1、5和 10% 噪声，重复上述重建（图 5），结果如图 $\mathbf{6}^\delta$ 所示。当$\mathbf{I}^\delta$ 中的噪声较小时，重建结果更精确。

3.2 PR溶液实验CV-SANS数据的重建

我们来考察参考文献 [6] 中 PR溶液的实验 CV-SANS 数据。矩阵 A 已在上文给出，我们设定 $m = 8, N_Q = 39$。我们使用上一节采用的对角矩阵 L： $L = \mathrm{diag}(1, 0.1, 1)$。这意味着对 S_{CC} 进行了弱正则化。

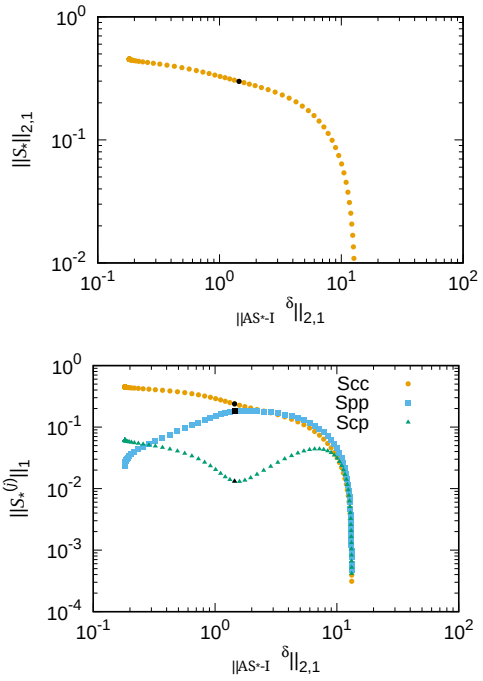

图 3 $L = E$。此处，$S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP},*}$、$S_*^{(2)} = S_{\mathrm{CC},*}$ 和 $S_*^{(3)} = S_{\mathrm{CP},*}$。

为了选择 $\alpha > 0$，我们通过重建 $S_{\mathrm{CC},*}$, $S_{\mathrm{PP},*}$ 和 $S_{\mathrm{CP},*}$ 在不同 α 值下的结果，在图7中绘出了 $\|S_*\|_{2,1}$ 和 $\|S_*^{(j)}\|_1$ $(j = 1, 2, 3)$ 随 $\|AS_* - I^\delta\|_{2,1}$ 变化的曲线。$\alpha = 10$ 对应的点在图7中以黑色表示。

图 8 对应于参考文献 [6] 中的图4，并展示了重建的$S_{\mathrm{CC},*}$、$S_{\mathrm{CP},*}$、$S_{\mathrm{PP},*}$ 随 Q变化的函数。采用正则化得到的重建结果见下图 8。这些曲线的获取更加稳定。

在图 8中，我们针对 $\sigma = 0.704$ （见第 2.4节）得到了 $S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP}}$，采用 $\alpha = 0$ （无正则化），以及针对 $\sigma = 0.197$，采用 $*(1) = S_{\mathrm{PP}}$ 和 $\alpha = 10$ 以及 $L = \mathrm{diag}(1, 0.1, 1)$。因此，所提出的正则化抑制了朴素重建中的涨落，使我们能够定量确认正则化的效果。

我们指出，对比条件的数量可以少于 8 $(m < 8)$。此外，A 的条件数（最大奇异值与最小奇异值之比）不应过大，尽管所提出的正则化方法能够抑制大条件数导致的不稳定性。为了解这一情况，我们来看以下 3×3 矩阵 $A^{(123)}$ 和 $A^{(456)}$:

$$A_{i,j}^{(123)} = A_{ij} \quad (i = 1, 2, 3,\ j = 1, 2, 3), \quad A_{i-3,j}^{(456)} = A_{ij} \quad (i = 4, 5, 6,\ j = 1, 2, 3). \quad (52)$$

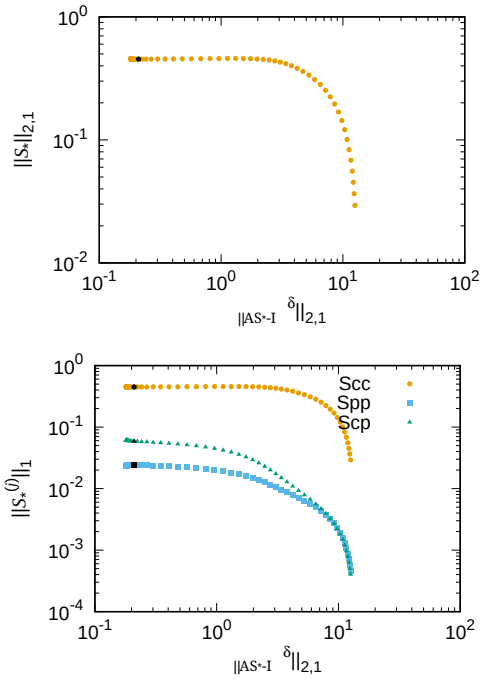

图 4 $L_1 = 1$、$L_2 = 0.1$、$L_3 = 1$。此处为 $S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP}}$、$*$、$S_*^{(2)} = S_{\mathrm{CC}}$、$*$ 和 $S_*^{(3)} = S_{\mathrm{CP}}$、$*$。

图1(b)中的上方三条曲线（h-PR 解：$\varphi_{\mathrm{d}} = 1.0$、0.95、0.90）用于 $A^{(123)}$，第4、5、6条曲线（h-PR 解：$\varphi_{\mathrm{d}} = 0.85$，d-PR 解：$\varphi_{\mathrm{d}}$ =1.0、0.95）用于 $A^{(456)}$。$A^{(123)}$、$A^{(456)}$ 的条件数分别为 1.45×10^3和 19.2。如图9和图10所示，$A^{(123)}$ 未能成功重建，而 $A^{(456)}$则获得了良好的重建效果。在图9和图10中，α 均设为（左）0、（中）10、（右）20；所有面板中的矩阵 L 均设为 $L = \mathrm{diag}(1, 0.1, 1)$。图11将 $A^{(123)}$ 和 $A^{(456)}$ 在 $\alpha = 10$ 条件下的重建结果，与 A 在 $\alpha = 20$条件下的重建结果进行了比较；后者见图8（底部）。可以看出，即使 $m < 8$，只要条件数不是极大，正则化仍能实现良好的重建。

4 结论

直接使用奇异值分解来重建 S 时结果不稳定，原因在于矩阵 A 的奇异值不在同一数量级。正如本文所示，Tikhonov正则化项可以稳定逆问题的解。

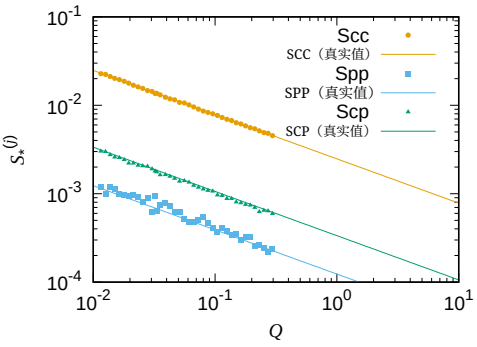

图5 $L_1 = 1$的 $L_2 = 0.1$、$L_3 = 1$ 和 $\alpha = 10$的重建。这里，$S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP}、*}$、$S_*^{(2)} = S_{\mathrm{CC}、*}$ 和 $S_*^{(3)} = S_{\mathrm{CP}、*}$。

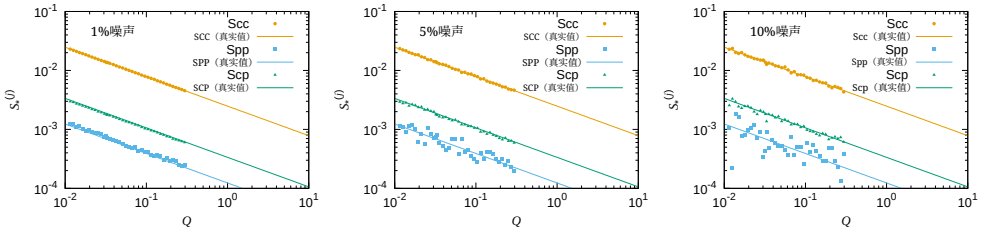

图6 与图5 （噪声水平为3%）相同，但正向数据的噪声水平分别为（左）1%、（中）5%和（右）10%。

上一节中的计算给出了重建部分散射函数的步骤。重建过程如下。

步骤*1*。 首先，$\mathbf{s} = \mathbf{S}$，$B = A$ （$L = E$）见（6）。我们计算$\mathbf{s}_*$ 见（23），并得到一幅与图2 （上）类似的图。
步骤 *2.* 利用上述结果，可以确定 L 的对角元素。L 可以有不同的选择，但 $\mathbf{s}_*$ 的元素具有相同的阶。引入 L 很重要，但 L 的选择对最终结果 $\mathbf{S}_*$ 的影响不大。

步骤 *3.* 令 $\mathbf{s} = L\mathbf{S}$，$B = AL^{-}$见式（6）。
步骤 *4.* 通过奇异值分解求解逆问题 $B\mathbf{s} = \mathbf{I}^{\delta}$，如式（23）、（24）所示。因此，对于 α 的不同取值，我们得到 $\mathbf{s}_*$。
步骤*5*。 通过绘制 $\|\mathbf{S}_*\|_{2,1}$ 和 $\|S_*^{(j)}\|_1 (j = 1,2,3)$ 随$\|A\mathbf{S}_* - \mathbf{I}^{\delta}\|_{2,1}$ 变化的图形（如图4和图 7所示），即可得到 $\alpha > 0$。我们可以选取满足$\|AS_* - I^{\delta}\|_{2,1}$的 α，使其

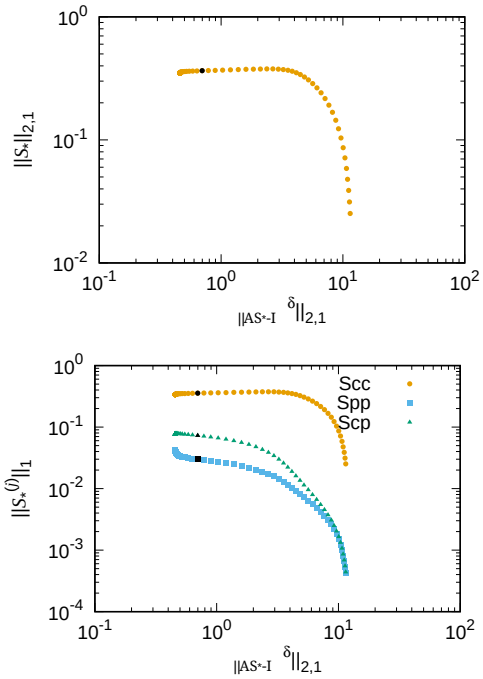

图7 重建的 $\|S_*^{(j)}\|_1 (j = 1,\ 2,\ 3)$ 随 $\|A\mathbf{S}_\alpha^\delta - \mathbf{I}^\delta\|_{2,\ 1}$ 的变化绘制。 S_{CC}、 S_{PP} 和 S_{CP} 对应的实心黑圆点表示 $\alpha = 20$ 的点。此处， $S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP},\ *}$、 $S_*^{(2)} = S_{\mathrm{CC},\ *}$ 和$S_*^{(3)} = S_{\mathrm{CP},\ *}$。

较小，且 $\|S_*^{(j)}\|_1$ 相对于$\|AS_* - I^\delta\|_{2,1}$的变化也较小。更直观地说，我们可以在 $\alpha > 0$ 区间内选择较小的值，在该区间上$\mathbf{s}_*$ 几乎不依赖于 α。我们注意到，重建结果不应对 α的选择敏感。步骤*6*。 利用确定的 L, α，根据式（23）计算 $\mathbf{s}_*$ in (L, α。然后得到 $\mathbf{S}_* = L^{-1}\mathbf{s}_*$。

上述步骤汇总于图 12 的流程图中。在上述步骤中，通常不难确定 α， L_1， L_2 和 L_3 ，因为只要选择得当，重建结果不会随 α， L 的选择而敏感变化。

尽管本文假设的是三组分系统，且 A 是一个 m ××3 矩阵，但该正则化方案可轻松应用于具有 $m \times p$ 矩阵 A 的一般 p 组分系统。

致谢 本研究源于第7届JST未解问题研讨会（日本盛冈，2023年），谨此致谢。小角中子散射实验由东京大学固体物理研究所管理的JRR-3普通用户计划实施（提案编号7607）。

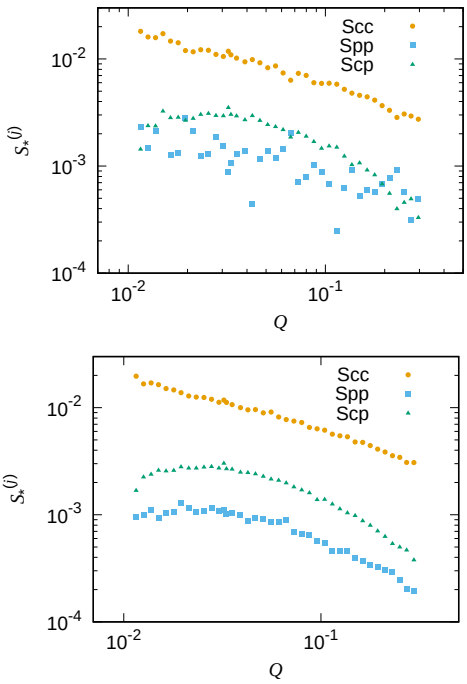

图8 （上）绘制了无正则化时重建的 $S_{\mathrm{CC},*}$, $S_{\mathrm{PP},*}$ 和 $S_{\mathrm{CP},*}$ 相对于 $Q_i\,(i = 1,\ldots, N_Q)$ 的关系。（下）绘制了 $\alpha = 0$ 和 $L = \mathrm{diag}(1, 0.1, 1)$ 时重建的 $S_{\mathrm{CC},*}$, $S_{\mathrm{PP},*}$ 和 $S_{\mathrm{CP},*}$ 相对于 $Q_i\,(i = 1,\ldots, N_Q)$ 的关系。这里，$S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP},*}$, $S_*^{(2)} = S_{\mathrm{CC},*}$ 和 $S_*^{(3)} = S_{\mathrm{CP},*}$。

资助 第二作者：JST FOREST 计划（JPMJFR2120）。

遵守伦理标准

利益冲突作者声明不存在利益冲突。

参考文献

[1]Higgins JS、Benoît HC.《聚合物与中子散射》。牛津：牛津大学出版社；1998年。[2] Richter D、Schneiders D、Monkenbusch M、Willner L、Fetters LJ、Huang JS、Lin M、Mortensen K、Farago B. 具有结晶核的聚合物聚集体：聚乙烯-聚（乙烯-丙烯）体系。《大分子》。1997年；30：1053–68。

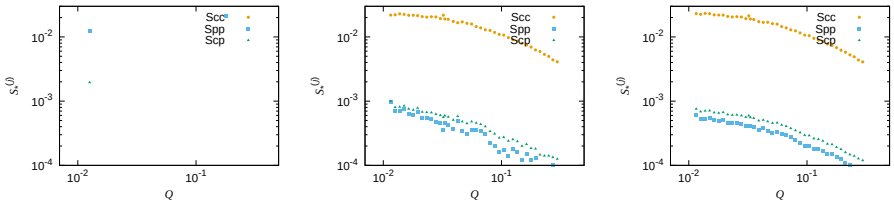

图 9 重建的 $S_{\mathrm{CC},\ *}$, $S_{\mathrm{PP},\ *}$ 和 $S_{\mathrm{CP},\ *}$ 相对于 $Q_i (i = 1,\ \ldots\ldots,\ N_Q)$ 作图，针对 $A^{(123)}$ 分别采用（左）$\alpha = 0$（无正则化）、（中）$\alpha = 10$和（右）$\alpha = 20$。所有情况下，$L = \mathrm{diag}(1,\ 0。1,\ 1)$。此处，$S_*^{(1)} = S_{\mathrm{PP},\ *}$, $S_*^{(2)} = S_{\mathrm{CC},\ *}$ 和 $S_*^{(3)} = S_{\mathrm{CP},\ *}$。

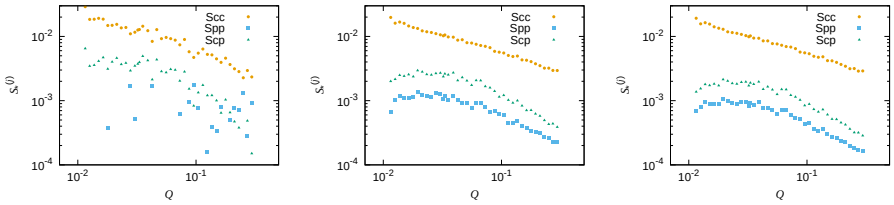

图 10 与图 10 相同，$A^{(456)}$ 已被使用。

[3] Endo H、Miyazaki S、Haraguchi K、Shibayama M. 通过对比度变化小角中子散射研究纳米复合水凝胶的结构。《大分子》。2008；41：5406–11。

[4] Takenaka M, Nishitsuji S, Amino N, IshikawaY, YamaguchiD, KoizumiS. 利用对比度变化小角中子散射分析溶胀橡胶-填料体系的结构。《大分子》。2009;42:308–11。

[5] Jeffries CM、Graewert MA、Blanchet CE、Langley DB、Whitten AE、Svergun DI。制备用于成功开展生物学小角 X 射线和中子散射实验的单分散大分子样品。《Nature Protocols》。2016；11：2122–53。

[6]Mayumi K、Endo H、Osaka N、Yokoyama H、Nagao M、Shibayama M、Ito K。通过对比变化小角中子散射研究聚轮烷的机械互锁结构。《大分子》。2009；42：6327–9。

[7] Endo H，Mayumi K，Osaka N，Ito K，Shibayama M。采用对比度变化小角中子散射研究溶液中聚轮烷的静态结构。Polymerjournal。2011；43：155–63。

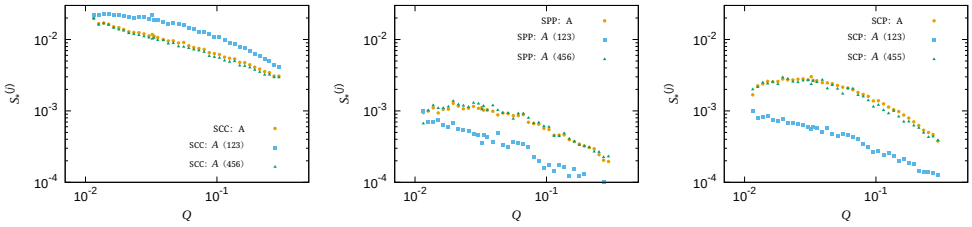

图 11 重建的 $S_{\mathrm{CC},*}$、$S_{\mathrm{PP},*}$ 和 $S_{\mathrm{CP},*}$ 对于 $m = 6$。重建使用了图 9 和 10）中的相同参数。对于上面的六个强度，未使用图 $\varphi_{\mathrm{d}} = 0.90$ 和 $\varphi_{\mathrm{d}} = 0.85$ 11（b）中 d-PR 解的数据。对于下面的六个强度，未使用图 $\varphi_{\mathrm{d}} = 1$ 和 $\varphi_{\mathrm{d}} = 0.90$ 11（b）中 h-PR 解的数据。

[8] Mayumi K，Oda T，Miyajima S，Obayashi I，Tanaka K。对比度变化小角中子散射所得部分散射函数的误差评估。应用晶体学杂志。2025；58：4–17。[9] Obayashi I，Miyajima S，Tanaka K，Mayumi K。利用高斯过程回归并结合平滑先验知识，改进对比度变化小角中子散射中部分散射函数的估算方法。应用晶体学杂志。2025；58：976–91。[10] Colton D，Kress R。反声学与电磁散射理论。第2版。柏林：施普林格；1998年。[11] EnglHW，HankeM，NeubauerA。反问题正则化。多德雷赫特：克卢维尔学术出版社；1996年。[12] Hansen PC。L 曲线及其在逆问题数值处理中的应用。载于《心电学中的计算反问题》，编者 Johnston P（WIT 出版社）。2001；119–42

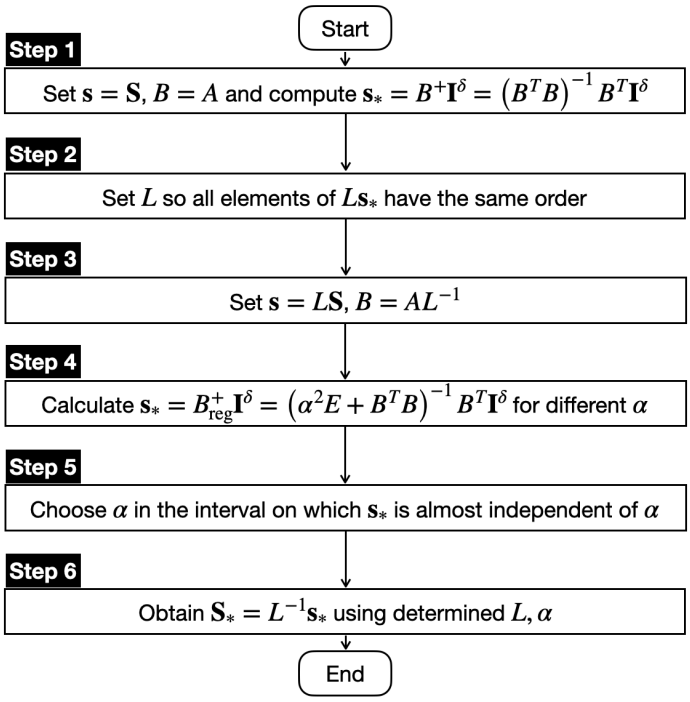

图12 获取重建结果的流程图：由矩阵 A 和测量数据 $\mathbf{I}^{\delta}$得到重建结果 $\mathbf{S}_*$ 。