

ОПТИКА КЛАСТЕРОВ, АЭРОЗОЛЕЙ И ГИДРОЗОЛЕЙ

УДК 551.501.793

**Модифицированный алгоритм восстановления
микроструктуры аэрозоля из измерений
спектрального ослабления света
на основе гибридной модели**

В.В. Веретенников, С.С. Меньщикова*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 7.07.2015 г.

Рассмотрены особенности определения микроструктуры аэрозоля из спектральных измерений аэрозольной оптической толщины, связанные с малой информативностью решения в области больших частиц. Такие условия реализуются в случаях, когда в аэрозоле присутствуют частицы, размеры которых намного превышают длины волн измерений. Предложен модифицированный алгоритм обращения аэрозольной оптической толщины, в котором используется гибридная модель микроструктуры аэрозоля. Модель включает описание дисперсного состава аэрозоля в информативной области размеров на основе интегральной функции распределения, дополненное параметрическим представлением микроструктуры больших частиц. Эффективность разработанного алгоритма исследована методом численного моделирования. Представлены результаты апробации алгоритма при обращении данных натуральных экспериментов, которые показали возможность восстановления микроструктурных параметров грубодисперсной фракции аэрозоля при уменьшении верхней границы спектрального диапазона с 4 до 1,56 мкм.

Ключевые слова: аэрозольная оптическая толщина, микроструктура аэрозоля, обратные задачи; aerosol optical depth, aerosol microstructure, inverse problem.

Введение

При определении дисперсного состава аэрозоля из спектральных характеристик ослабления прошедшего среду излучения оптимальными по отношению к информационному содержанию оптических измерений являются длины волн, близкие к размерам частиц. Для исследования оптико-микрофизического состояния аэрозольной атмосферы широко используются измерения аэрозольной оптической толщины (АОТ) в видимой и ближней ИК-областях спектра. При этом экспериментальные данные содержат недостаточно информации о дисперсном составе аэрозоля вблизи границ функции распределения по размерам.

Причинами этого на левом краю диапазона дисперсности являются два обстоятельства. Во-первых, частицы размерами много меньше длины волны света имеют низкую оптическую активность, что связано с малыми значениями фактора эффективности ослабления излучения. Во-вторых, специфика поведения фактора эффективности ослабления малыми частицами состоит в том, что близкую спектральную зависимость могут иметь как большое количество

очень мелких частиц, так и меньшее число более крупных частиц. Такая неоднозначность усложняет интерпретацию измерений АОТ относительно содержания микродисперсных частиц, радиус которых меньше 0,1–0,15 мкм.

Для устранения неоднозначности решения обратной задачи необходимо привлекать априорную дополнительную информацию об искомом решении. Такой подход был применен в [1, 2] при разработке численных алгоритмов обращения АОТ на основе метода интегральных распределений с выделением микродисперсных частиц в обособленную фракцию, которая представлялась в виде параметрической модели.

Для больших частиц, размер которых превышает длину волны света, фактор эффективности ослабления асимптотически стремится к константе, равной двум, при увеличении параметра дифракции [3]. В результате коэффициент ослабления света большими частицами будет определяться преимущественно их суммарным геометрическим сечением независимо от распределения по размерам.

Как показано в [4], данное обстоятельство является источником неоднозначности в оценке параметров микроструктуры грубодисперсного аэрозоля при вариациях верхней границы λ_{\max} спектрального диапазона измерений. Решение обратной задачи без учета дополнительной априорной информации о функции распределения в области размеров частиц, превышаю-

* Виктор Васильевич Веретенников (vuv@iao.ru); Светлана Сергеевна Меньщикова (mss@iao.ru).

щих максимальную длину волны спектрального диапазона измерений, приводит к недооценке вклада больших частиц.

Для повышения точности восстановления микроструктуры грубодисперсного аэрозоля в условиях недостаточной ширины спектрального диапазона измерений в настоящей статье предложен способ определения обратной задачи и рассмотрен новый алгоритм ее решения в рамках метода интегральных распределений.

1. Модифицированный алгоритм решения обратной задачи

Для обращения спектральных измерений АОТ $\tau(\lambda)$ в работе [5] предложен численный алгоритм, который основан на использовании интегральной функции распределения частиц по размерам для описания дисперсного состава аэрозоля. В алгоритме в качестве искомой рассматривается функция $S(r)$, определяющая суммарное геометрическое сечение частиц с радиусом, большим или равным r . При решении обратной задачи в [5] осуществляется переход к конечно-разностному аналогу интегрального уравнения относительно функции распределения $S(r)$:

$$\sum_{j=1}^n Q_j(\lambda) S_j = \tau(\lambda), \quad (1)$$

где $S_j = S(r_j)$ – значения искомой функции в узлах r_j ; $j = 1, \dots, n$; коэффициенты $Q_j(\lambda)$ находятся по формулам

$$Q_j(\lambda) = \bar{K}_j(\lambda) - \bar{K}_{j-1}(\lambda), \quad (2)$$

$$\bar{K}_j(\lambda) = \frac{1}{r_{j+1} - r_j} \int_{r_j}^{r_{j+1}} K(\lambda, r) dr,$$

$$j = 1, \dots, n; \quad \bar{K}_0(\lambda) = 0. \quad (3)$$

Здесь $K(\lambda, r)$ – фактор эффективности ослабления света на длине волны λ частицей радиуса r , который рассчитывается по теории Ми при априорном задании комплексного показателя преломления $n - i \cdot \kappa$. Для дискретного набора измерений АОТ $\tau(\lambda_i)$, $i = 1, \dots, m$ обратная задача сводится к минимизации функционала невязки

$$F^2 = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n Q_{ij} S_j - \tau_i \right)^2, \quad Q_{ij} = Q_j(\lambda_i), \quad (4)$$

для уравнения (1) на множестве векторов $\bar{S} \in M_n = \{\bar{S} : \bar{S} \in R^n, C \geq S_1 \geq S_2 \geq \dots \geq S_n \geq 0\}$. Константа C определяет верхнюю границу суммарного сечения частиц S и должна задаваться априорно. В качестве приближенного решения уравнения (1) выбирается любой вектор \bar{S}_δ , для которого функционал $F^2 \leq \delta^2$, где δ^2 характеризует ошибку в исходных данных. В рассмотренной постановке обеспечивается устой-

чивое решение обратной задачи без привлечения каких-либо дополнительных предположений об искомом решении и использования регуляризирующих процедур. По восстановленному вектору решения \bar{S}_δ можно рассчитать такие микроструктурные параметры аэрозоля, как объемная концентрация V , геометрическое сечение S и средний радиус аэрозольных частиц r_s , как для полного ансамбля частиц (*tot*), так и его отдельных фракций: субмикронной (*f*) и грубодисперсной (*c*).

Для частиц, размеры которых значительно превышают длину волны, фактор эффективности ослабления $K(\lambda, r)$ близок к константе, равной двум, и осциллирует с ростом r в ее окрестности с убывающей амплитудой [3]. При этом средние значения фактора эффективности ослабления $\bar{K}_j(\lambda)$ (3) на соседних участках будут мало отличаться и их разность $Q_j(\lambda)$ (2) стремится к нулю. Отсюда следует, что для длин волн, малых по сравнению с размером частиц, близкими к нулю будут веса, с которыми представлены в уравнении (1) компоненты решения $S_j = S(r_j)$. Как показано в [4], это приводит к большим погрешностям решения для больших частиц в случае недостаточно широкого спектрального интервала измерений.

Рассмотрим способ модификации уравнения (1) при учете дополнительной информации о решении в области больших размеров частиц. Используя для описания дисперсного состава аэрозоля интегральную функцию распределения $S(r)$, ограничимся нахождением решения на «усеченном» интервале, где функция $S(r)$ может быть восстановлена с приемлемой точностью при заданном значении λ_{\max} (область A). Если положить точку r_{n1} в качестве границы области A , то вклад частиц, принадлежащих области A , в АОТ можно представить в виде

$$\tau_A(\lambda) = \sum_{j=1}^{m-1} Q_j(\lambda) S_j - \bar{K}_{n-1} S_{n1}. \quad (5)$$

Особенности в дисперсном составе больших частиц на интервале $r_{n1} < r \leq r_n$ (область B) будут слабо проявляться в спектральной зависимости $\tau(\lambda)$. Поэтому вклад больших частиц в АОТ можно учесть в рамках модельных представлений с использованием априорной информации. Как правило, распределения по размерам больших частиц имеют вид гладких, монотонно убывающих функций.

Предположим, что в качестве микроструктурной модели таких частиц рассматривается функция распределения геометрического сечения $s_B(r) = B s_{B0}(r)$. Вклад больших частиц, принадлежащих области B , в оптическую толщину определяется выражением

$$\tau_B(\lambda) = B \int_{r_{n1}}^{r_n} K(\lambda, r) s_{B0}(r) dr, \quad (6)$$

а их суммарное сечение на интервале $r_{n1} < r \leq r_n$ равно

$$S_B = B \int_{r_{n1}}^{r_n} s_{B0}(r) dr. \quad (7)$$

С другой стороны, заметим, что по смыслу функции $S(r)$ величина $S_{n1} = S(r_{n1})$ также определяет геометрическое сечение частиц с радиусом, большим или равным r . Поэтому, полагая $S_B = S_{n1}$, свяжем параметр B микроструктурной модели больших частиц с компонентой S_{n1} искомого вектора:

$$B = S_{n1} / \int_{r_{n1}}^{r_n} s_{B0}(r) dr. \quad (8)$$

При этом вклад в АОТ частиц малоинформативной области B можно параметризовать следующим образом:

$$\tau_B(\lambda) = S_{n1} \bar{K}_B(\lambda), \quad (9)$$

где множитель

$$\bar{K}_B(\lambda) = \int_{r_{n1}}^{r_n} K(\lambda, r) s_{B0}(r) dr / \int_{r_{n1}}^{r_n} s_{B0}(r) dr \quad (10)$$

имеет смысл полидисперсного фактора эффективности ослабления света в области B .

В итоге, располагая информацией о значении интегрального распределения $S(r)$ в точке r_{n1} и средней по области B величине фактора эффективности ослабления, мы можем получить оценку вклада больших частиц в аэрозольное ослабление света.

Наконец, объединив (5) и (9), получим следующее уравнение относительно компонент «укороченного» вектора $\bar{S} = (S_1, S_2, \dots, S_{n1})$:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{m-1} Q_j(\lambda) S_j + [\bar{K}_B(\lambda) - \bar{K}_{m-1}(\lambda)] S_{n1} = \\ = \tau_A(\lambda) + \tau_B(\lambda) = \tau(\lambda). \end{aligned} \quad (11)$$

Нетрудно заметить, что множитель, стоящий перед последней из искомым компонент S_{n1} , отличается от обычного множителя $Q_{n1}(\lambda) = \bar{K}_{n1}(\lambda) - \bar{K}_{m-1}(\lambda)$ в уравнении (1) заменой среднего на отрезке $[r_{n1}, r_{n1+1}]$ фактора эффективности $\bar{K}_{n1}(\lambda)$ средним фактором эффективности $\bar{K}_B(\lambda)$ в области B .

Таким образом, для построения уравнения (11) нами использована гибридная модель, которая включает представление дисперсного состава аэрозоля

в информативной области размеров на основе интегральной функции распределения, дополненное параметрическим описанием микроструктуры больших частиц.

2. Результаты численного моделирования

Рассмотрим результаты моделирования прямой и обратной задачи для уравнения (11) в рамках замкнутого численного эксперимента. Условия моделирования были аналогичны рассмотренным в [4]. При моделировании граничного значения r_{n1} в (11) выбиралось из интервала 0,55–0,95 мкм. В качестве аппроксимационной модели $s_B(r)$ в области $r_{n1} < r \leq r_n$ рассматривалось степенное распределение с показателем $\nu = 2$.

Примеры восстановления микроструктурных параметров аэрозоля при обращении АОТ $\tau(\lambda)$ в численном эксперименте с использованием модифицированного уравнения (11) представлены в таблице.

Сравнивая данные таблицы с результатами [4], можно заключить, что параметры микроструктуры, которые восстановлены с помощью исходного (базового) алгоритма из измерений $\tau(\lambda)$ в широком спектральном интервале ($\lambda_{\max} = 3,973$ мкм), могут быть определены приблизительно с такой же точностью при уменьшении λ_{\max} до 1,052 мкм за счет доопределения обратной задачи с использованием модифицированного уравнения (11). При этом снизились ошибки определения геометрического сечения $S^{(c)}$ (с 20 до 4%) и объемной концентрации $V^{(c)}$ (с 42 до 3–4%) грубодисперсных частиц при обращении в узком спектральном интервале ($\lambda_{\max} = 1,052$ мкм).

На рис. 1 представлен спектральный ход $\tau(\lambda)$, рассчитанный по распределениям $S(r)$, которые восстановлены с помощью базового (кривая 2) и модифицированного (m) (кривая 3) алгоритмов при $\lambda_{\max} = 1,052$ мкм. Видно, что при $\lambda > 1,052$ мкм кривая 3 в отличие от кривой 2 сохраняет высокую степень близости к точной зависимости $\tau(\lambda)$ (кривая 1). Максимальное расхождение не превышает 10%. Для сравнения на рис. 2 представлены спектральные зависимости $\tau(\lambda)$, восстановленные при выборе других значений λ_{\max} . Видно, что в отличие от результатов [4],

Микроструктурные параметры аэрозоля, восстановленные при обращении АОТ с использованием модифицированного алгоритма

Параметр	Точные данные	λ_{\max} , МКМ			
		2,203	1,557	1,246	1,052
$S^{(tot)}$	0,389	0,382	0,372	0,373	0,375
$S^{(f)}$	0,316	0,310	0,297	0,302	0,299
$S^{(c)}$	0,073	0,072	0,075	0,071	0,076
$V^{(tot)}$, $\text{см}^3/\text{М}^2$	0,232	0,233	0,230	0,225	0,231
$V^{(f)}$, $\text{см}^3/\text{М}^2$	0,106	0,106	0,102	0,104	0,102
$V^{(c)}$, $\text{см}^3/\text{М}^2$	0,126	0,127	0,128	0,121	0,129
$r_s^{(tot)}$, МКМ	0,447	0,457	0,464	0,454	0,463
$r_s^{(f)}$, МКМ	0,251	0,256	0,258	0,259	0,255
$r_s^{(c)}$, МКМ	1,295	1,321	1,281	1,281	1,281

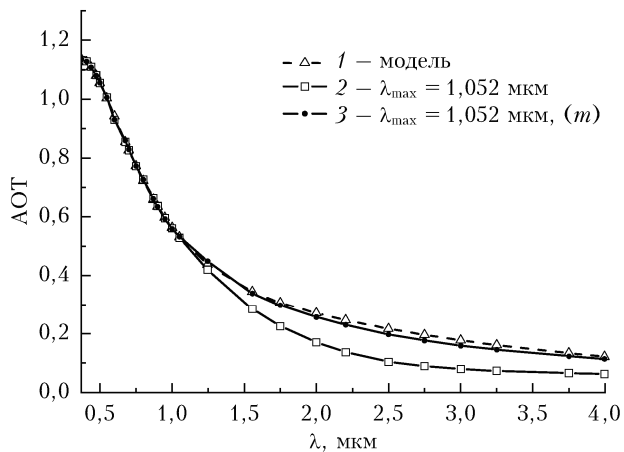


Рис. 1. Спектральные зависимости АОТ $\tau(\lambda)$, рассчитанные по аэрозольным распределениям, восстановленным при решении обратной задачи с использованием базового (2) и модифицированного (3) алгоритмов при $\lambda_{\max} = 1,052$ мкм; 1 – модельная зависимость

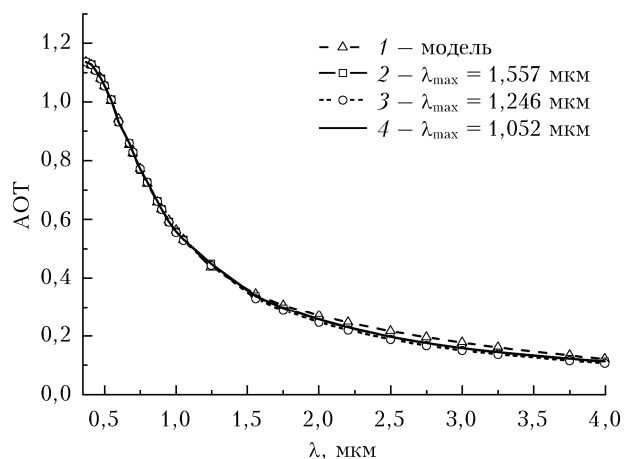


Рис. 2. Спектральные зависимости АОТ $\tau(\lambda)$, рассчитанные по аэрозольным распределениям, восстановленным при решении обратной задачи для различных значений λ_{\max}

полученных с использованием базового алгоритма, все приведенные здесь зависимости практически совпадают в спектральном диапазоне 0,37–3,973 мкм и локализованы вблизи модельной кривой 1.

3. Примеры обращения данных натуральных экспериментов

Рассмотрим возможности, которые обеспечивает применение модифицированного алгоритма при обращении реальных измерений АОТ в случае ограничения спектрального диапазона сверху. Для проведения сравнительного анализа были взяты те же экспериментальные данные, что и в работе [4], представляющие собой среднечасовые реализации АОТ, полученные с помощью солнечного фотометра SP-6 [6] в широком спектральном диапазоне 0,371–3,973 мкм.

Влияние сдвига верхней границы спектрального диапазона во входных данных с 3,973 до 2,203 мкм при восстановлении параметров микроструктуры грубодисперсных частиц представлено на рис. 3. На

рис. 3, а изображен временной ход объемной концентрации $V^{(c)}$ частиц c -фракции, восстановленный при обращении АОТ с применением двух алгоритмов: базового (кривые 0 и 1) и его модификации (кривая 2). Кривая 0 восстановлена при максимальном значении $\lambda_{\max} = 3,973$ мкм и может рассматриваться в качестве эталона при сравнении с результатами, полученными при меньших значениях верхней границы λ_{\max} .

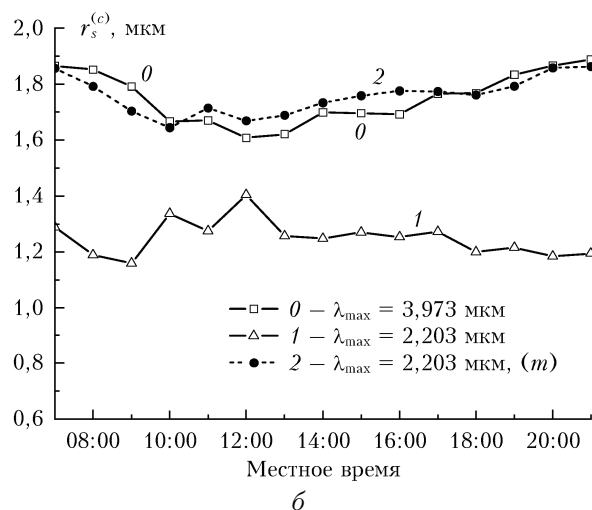
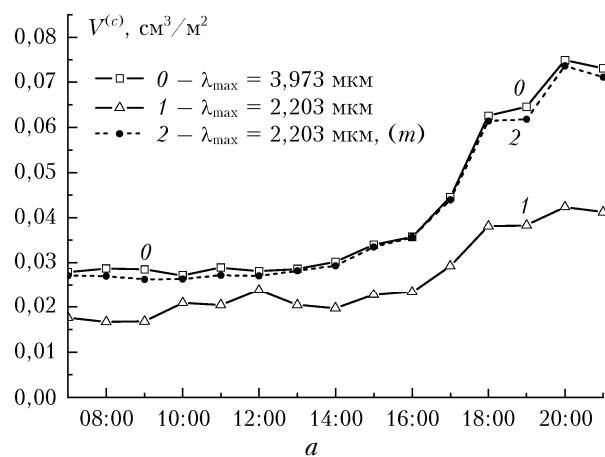


Рис. 3. Дневной ход объемной концентрации $V^{(c)}$ (а) и среднего радиуса $r_s^{(c)}$ (б) грубодисперсных частиц, восстановленный с применением базового (кривые 0 и 1) и модифицированного (2) алгоритмов

Видно, что уменьшение λ_{\max} в базовом алгоритме привело к существенной недооценке объемной концентрации $V^{(c)}$. Отношение параметров $V^{(c)}(2,203)/V^{(c)}(3,973)$, восстановленных с использованием базового алгоритма, изменяется в течение дня, опускаясь до минимального уровня 0,54.

Зависимость, представленная кривой 2, свидетельствует о положительном эффекте, который достигнут за счет применения модифицированного алгоритма при восстановлении объемной концентрации $V^{(c)}$ грубодисперсных частиц. Для аппроксимации функции распределения больших частиц в модифицированном алгоритме использована степенная модель. Результаты восстановления микроструктурных

параметров, наиболее близкие к эталонным, получены для показателя степени ν в модельной функции распределения $s_{B0}(r)$, заключенного в промежутке 1,2–1,7, и граничного значения $r_{n1} = 0,95$ мкм.

На рис. 3, б приведены соответствующие результаты восстановления среднего радиуса грубодисперсных частиц $r_s^{(c)}$. Видно, что поведение параметра $r_s^{(c)}$ по данным базового алгоритма (кривая 1) при $\lambda_{\max} = 2,203$ мкм качественно и количественно отличается от эталонных результатов, полученных при $\lambda_{\max} = 3,973$ мкм (кривая 0). При уменьшении граничного значения λ_{\max} с 3,973 до 2,203 мкм оценка среднего радиуса $r_s^{(c)}$ по данным базового алгоритма снизилась в среднем с 1,75 до 1,25 мкм, или на 0,5 мкм. Напротив, модифицированный алгоритм позволяет восстановить дневной ход параметра $r_s^{(c)}$ (кривая 2), который располагается намного ближе к эталонной кривой 0. Среднеквадратическое отклонение кривой 2 от эталонной зависимости составляет всего 0,05 мкм.

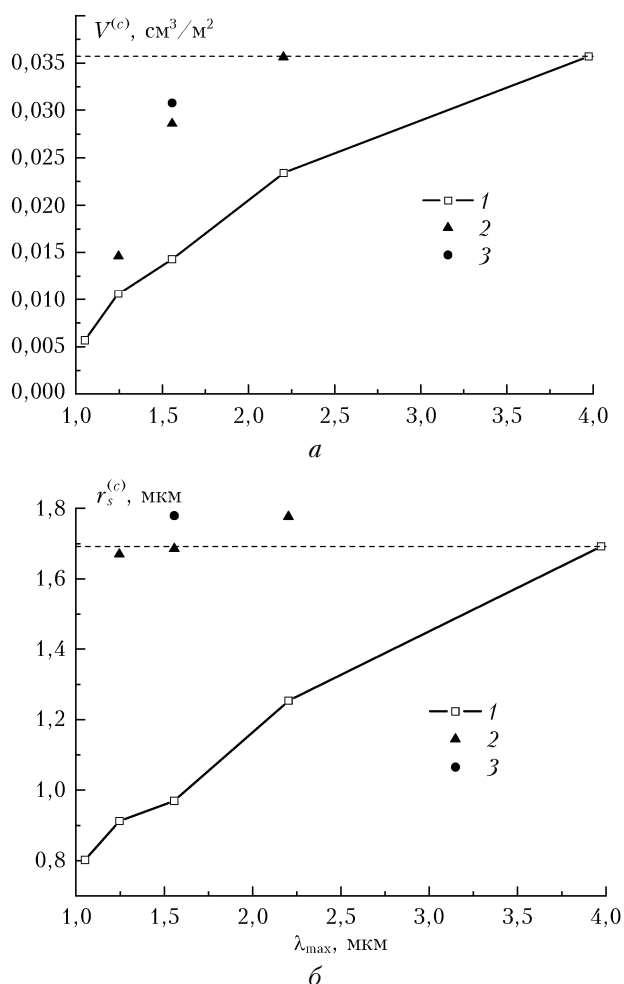


Рис. 4. Зависимости объемной концентрации $V^{(c)}$ (а) и среднего радиуса $r_s^{(c)}$ (б) частиц грубодисперсной фракции от верхней границы λ_{\max} спектрального диапазона измерений для фиксированного момента времени, восстановленные с использованием базового (кривые 1) и модифицированного (2, 3) алгоритмов

На рис. 4 представлена динамика восстановления объемной концентрации $V^{(c)}(\lambda_{\max})$ (а) и среднего радиуса $r_s^{(c)}(\lambda_{\max})$ (б) частиц c -фракции из экспериментальных данных при изменении граничной длины волны λ_{\max} для фиксированного момента времени (16 ч). Кривые 1 соответствуют результатам, полученным с помощью базового алгоритма. Пунктирными горизонтальными линиями показан реперный уровень искомым параметров. Изолированными символами обозначены данные, полученные с использованием модифицированного алгоритма при вариациях λ_{\max} .

Как видно из представленных результатов, за счет доопределения обратной задачи удовлетворительную оценку параметра $V^{(c)}(\lambda_{\max})$ удалось получить для значений $\lambda_{\max} \geq 1,557$ мкм. При $\lambda_{\max} = 1,246$ мкм величина $V^{(c)}(\lambda_{\max})$ составляет уже менее половины эталонного значения, но на 38% выше оценки, полученной с помощью базового алгоритма. Ошибки восстановления среднего радиуса $r_s^{(c)}(\lambda_{\max})$, возникающие из-за ограничения спектрального диапазона, могут быть скомпенсированы при использовании модифицированного алгоритма для $\lambda_{\max} \geq 1,246$ мкм.

Заключение

Нами рассмотрены особенности определения микроструктуры аэрозоля из измерений АОТ в случае, когда аэрозоль содержит частицы, размер которых значительно превышает максимальную длину волны спектрального диапазона измерений. Для таких условий предложен способ учета априорной информации о решении в области больших размеров применительно к алгоритму обращения АОТ, который изначально базировался на использовании интегральной функции распределения частиц по размерам.

В рамках замкнутого численного эксперимента на основе модифицированного алгоритма показано, что при уменьшении λ_{\max} до 1,052 мкм микроструктурные параметры модельной среды могут быть определены приблизительно с точностью, обеспечиваемой базовым алгоритмом по исходным данным в широком спектральном диапазоне ($\lambda_{\max} = 3,973$ мкм).

Модифицированный алгоритм апробирован при обращении данных реального эксперимента. Результаты апробации показали возможность восстановления объемной концентрации грубодисперсных частиц при уменьшении λ_{\max} с 3,973 до 1,557 мкм без существенной потери точности. При оценке среднего радиуса грубодисперсных частиц с использованием модифицированного алгоритма допустимо еще большее уменьшение λ_{\max} (до 1,246 мкм).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Президента РФ по поддержке ведущих научных школ НШ-4714.2014.5.

1. Веретенников В.В., Меньщикова С.С. Микрофизическая экстраполяция в задаче обращения спектральных измерений аэрозольной оптической толщины // Оптика атмосфер. и океана. 2011. Т. 24, № 10. С. 880–886.
2. Веретенников В.В., Меньщикова С.С. Особенности восстановления микроструктурных параметров аэрозоля

- из измерений аэрозольной оптической толщины. Часть I. Методика решения обратной задачи // Оптика атмосф. и океана. 2013. Т. 26, № 4. С. 306–312.
3. Хюлст Г. ван де. Рассеяние света малыми частицами. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. 536 с.
 4. Веретенников В.В., Меньщикова С.С. Восстановление микроструктуры аэрозоля из измерений ослабления света в атмосфере при ограничении спектрального диапазона // Оптика атмосф. и океана. 2015. Т. 28, № 10. С. 883–891.
 5. Веретенников В.В. Обратные задачи солнечной фотометрии для интегральных аэрозольных распределений. I. Теория и численный эксперимент в субмикронной области размеров частиц // Оптика атмосф. и океана. 2006. Т. 19, № 4. С. 294–300.
 6. Сакерин С.М., Кабанов Д.М., Ростов А.П., Турчинович С.А., Турчинович Ю.С. Система сетевого мониторинга радиационно-активных компонентов атмосферы. Часть I. Солнечные фотометры // Оптика атмосф. и океана. 2004. Т. 17, № 4. С. 354–360.

V.V. Veretennikov, S.S. Men'shchikova. **Modified algorithm of retrieval of aerosol microstructure from spectral extinction measurements based on a hybrid model.**

Special features of determining the aerosol microstructure from spectral measurements of the aerosol optical depth (AOD) caused by low information content of solution for large particles are considered. Such conditions are observed when sizes of aerosol particles are much larger than the measurement wavelength. We propose the AOD inversion algorithm based on a hybrid model of the aerosol microstructure. The model includes the description of the disperse aerosol composition in the informative range of particle sizes based on the integral distribution function supplemented with a parametric representation of the microstructure of large particles. The efficiency of the algorithm is studied by numerical simulation. Results of testing the algorithm for inversion of the field experiment data are shown; they demonstrate the feasibility of retrieving the microstructural parameters of the coarse aerosol fraction when the upper limit of the spectral range decreases from 4 to 1.56 μm .