«Оптика атмосферы», **2**, № 10 (1989)

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИКИ АТМОСФЕРЫ

УДК 551.510.42

И.Э. Наац

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ СВЕТОРАССЕЯНИЯ АЭРОЗОЛЬНЫМИ СИСТЕМАМИ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИМИ С ФИЗИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ

В работе излагается теория обратных задач оптики аэрозоля, взаимодействующего в условиях реальной атмосферы с различными физическими полями. Показано, что на основе их численного решения можно разрабатывать методы дистанционного исследования физических процессов в атмосфере и пространственно-временной изменчивости параметрических полей. Исходной информацией служат аэрозольные характеристики светорассеяния, измеряемые средствами оптического зондирования атмосферы. Приведены основные интегральные уравнения для рассматриваемых обратных задач и указаны методы их численного решения.

Изучение физических процессов, в которые вовлекаются аэрозольные системы в атмосфере, может осуществляться методами оптического зондирования путем обращения измеряемых характеристик аэрозольного светорассеяния. При этом важным является то, что пространственно-временная изменчивость этих характеристик находится в прямой зависимости от состояния физических полей в атмосфере. Поскольку оптические методы не «возмущают» исследуемую среду, то имеется возможность получить наиболее достоверную информацию о параметрических полях. Основные трудности этого подхода в значительной степени связаны с обращением оптических измерений и однозначным извлечением из них физической информации. Настоящая статья посвящена разработке численных методов интерпретации данных оптического зондирования полидисперсных систем частиц, взаимодействующих с физическими полями. В целях наибольшей ясности излагаемого материала в качестве основного примера рассматривается аэрозольная система, находящаяся в поле влажности. Заметим, что взаимодействие аэрозолей с полем влажности играет важную роль при решении прогностических задач, связанных с временем пребывания дисперсных загрязнений в атмосфере [1].

При разработке теории оптического зондирования полидисперсной системы частиц, взаимодействующих с полем влажности, существенное ее упрощение достигается в том случае, если допустить, что за время эксперимента общее число частиц в рассеивающем объеме оставалось неизменным. Иными словами, ниже предполагается, что седиментацией частиц, сопровождающей их конденсационный рост в поле влажности, в первом приближении можно пренебречь.

Формулировку обратных задач, связанных с исследованием подобных аэрозольных систем, удобно начать с интегрального представления их оптических характеристик, которое обычно записывается в виде следующего интеграла:

$$\beta(\lambda) = \int_{R_1}^{R_2} K(\bar{m}, r, \lambda)\, \pi r^2 dN(r), \tag{1}$$

в котором $K(\bar{m}, r, \lambda)$ — фактор эффективности рассеяния света с длиной волны λ, частицей размера $r(R_1 \le r \le R_2)$ и $N(r)$ — интегральное распределение числа частиц в локальном рассеивающем объеме. Роль функции $K(\bar{m}, r, \lambda)$ может играть фактор эффективности ослабления $K_{ex}(\bar{m}, r, \lambda)$, если в эксперименте измеряется спектральный ход аэрозольного коэффициента ослабления $\beta_{ex}(\lambda)$ либо фактор обратного рассеяния $K_{\pi}(\bar{m}, r, \lambda)$ при использовании лидаров для зондирования аэрозолей и т. п. Во всех указанных случаях величина $\bar{m}$ характеризует комплексный показатель преломления вещества частиц. Известно, что размер частицы, находящейся в поле влажности, увеличивается по мере ее увеличения. Для описания этого процесса используют приближенное соотношение $r(f) = r_c\varphi(f)$, в котором f означает относительную влажность, а функция называется фактором роста. Предполагается, что при некотором значении $f = f_0$ (обычно $f_0 \le 40-50\%$) $\varphi(f_0) = \varphi_0 = 1$. Ясно, что $\varphi(f) \ge 1$ и $r(f_0) = r_c$. Величина r_c обычно связывается с так называемой сухой фракцией атмосферных аэрозолей [2].

Что же касается изменения показателя преломления частиц, обусловленного поглощением влаги из воздуха, то можно принять следующую аналитическую модель: $\bar{m}(f) = \bar{m}_{в} + (\bar{m}_{с} - \bar{m}_{в})\varphi^{-3}(f)$, где $\bar{m}_{в}$ — показатель преломления воды, а $\bar{m}_{с}$ — аэрозольного вещества в его исходном (сухом) состоянии. Зависимость размера частицы и показателя преломления ее вещества от фактора роста φ позволяет сформулировать обратную оптическую задачу, в которой измеренной функцией выступает спектральный ход $\beta(\lambda)$ ($\lambda_{\min} \le \lambda \le \lambda_{\max}$), а искомой — распределение $\varphi(f)$ ($f_0 \le f \le 1$). Функция $\varphi(f)$ описывает процесс взаимодействия исследуемой системы частиц с исходным распределением $N_c(r_c)$ ($R_{c1} \le r_c \le R_{c2}$) и показателем $\bar{m}_c$ с полем влажности. Информация о распределении $N_c(r_c)$ может быть получена из оптических измерений $\beta(\lambda, t_0)$, отнесенных к начальному моменту времени t_0, которому должно в эксперименте соответствовать значение влажности $f_0 = f(t_0)$, для чего требуется численно обратить интегральное уравнение

$$\int_{R_{c1}}^{R_{c2}} K(\bar{m}_c, r, \lambda)\, \pi r^2 dN_c(r) = \beta(\lambda, f_0). \tag{2}$$

Индекс «с» у переменной интегрирования опущен, поскольку он присутствует в обозначении пределов интегрирования R_{c1}, R_{c2}. Методы численного решения (2) излагались ранее в работе автора [3]. В дальнейшем будем полагать, что в эксперименте имело место последовательное по времени повышение относительной влажности f. В силу того что функция $\varphi(f)$ монотонно возрастает с ростом f и, следовательно, преобразования $f \to \varphi$ и $\varphi \to f$ взаимно однозначны, поставленную выше задачу можно свести к последовательности уравнений вида

$$\int_{R_j} K(\bar{m}(\varphi_j), r, \lambda)\, \pi r^2 dN_j(r) = \beta(\lambda, f_j), \ j = 1, \ldots, m, \tag{3}$$

из которой требуется найти значения φ_j по $\beta_j = \beta(\lambda, f_j)$. В соответствии с предположением о сохранении числа частиц в любом единичном объеме исследуемой среды можно записать следующее равенство:

$$\int_{R_j} dN_j(r) = N, \tag{4}$$

справедливое для всех моментов времени t_j, в которые регистрируются значения f_j и проводятся измерения β_j. Исходя из аналитических свойств интегральных распределений, можно показать, что между функциями $N_j(r)$ и соответственно интервалами R_j имеет место более сильное соотношение, а именно:

$$dN_{j'}(r') = dN_{j''}(r''), \tag{5}$$

где $r' \in R_{j'}$, $r'' \in R_{j''}$ и $r'\varphi_{j'}(r') = r''\varphi_{j''}(r'')$. Считая, что $N_c(r)$ соответствует $j = 0$ (начало роста влажности в эксперименте, т.е. $\varphi_{j=0} \equiv 1$), систему (3) можно переписать в виде

$$\int_{R_c} K(\bar{m}(\varphi_j), r\varphi_j, \lambda)\, \pi r^2 \varphi_j^2 dN_c(r) = \beta_j(\lambda), \ j = 0, 1 \ldots, m. \tag{6}$$

Поскольку распределение $N_c(r)$ и интервал R_c считаются известными, о чем уже говорилось выше, уравнения (6) определены для всех j. Решая их численно, найдем совокупность $\{\varphi_j\}$ по вектору $\beta_f = \{\beta(f_j, \lambda)\}$, где длина волны λ фиксирована. Таким образом, алгоритмически вполне определено преобразование $\beta_f \to \varphi$, а следовательно, и функция $\varphi(f)$ в силу однозначного соответствия значений β_j и f_j.

В изложенной схеме интерпретации оптических измерений, представленных вектором β_j, главным, конечно, является численное решение нелинейного уравнения вида

$$\varphi = \{\beta F^{-1}(\varphi)\}^{1/2}, \tag{7а}$$

в записи которого использованы обозначения $F(\varphi) = \int_{R_c} K(\bar{m}(\varphi), r\varphi) dS_c(r)$ и $S_c(r) = \pi r^2 dN_c(r)$. Аналитическая структура этого уравнения, естественно, влечет применение итерационной схемы

$$\varphi^{(p)} = \{\beta F^{-1}(\varphi^{(p-1)})\}^{1/2}, \tag{7б}$$

где p — номер итерации. При разработке теории интерпретации экспериментальных данных на основе итерационных процессов важно не только оптимизировать их логическую схему, но и указать те условия, при которых они сходятся. Последнее обстоятельство имеет самое непосредственное отношение к проблеме планирования эксперимента, оптимизации объема требуемой измерительной информации и достижения большей достоверности результатов интерпретации при наличии той или иной априорной неопределенности в обратной задаче. Напомним, что величины β и F зависят от λ и потому выбор длины волны зондирования можно попытаться связать, в частности, с условием быстрейшей сходимости итерационной схемы (7б). Следует также иметь в виду, что сходимость (7б), помимо всего прочего, свидетельствует о наличии нетривиальных решений уравнений (6). Что же касается их нелинейности, то соответствующие исследования предпочтительно проводить методами численного моделирования с учетом специфических особенностей конкретных экспериментов.

Итерационная схема (7б) соответствует так называемой простой итерации, условие сходимости которой хорошо известно и может быть записано в рассматриваемом случае в виде неравенства

$$| -\varphi F'_{\varphi}/2F \,| < 1. \tag{8}$$

При исследовании этого условия прибегнем к некоторым упрощениям, вполне приемлемым в оптике атмосферного аэрозоля. В частности, будем считать, что фактор $K(\bar{m}(\varphi), r\varphi, \lambda)$ является функцией одной переменной, скажем, ρ, как, например, в случае фактора ослабления мягкими частицами, где $\rho = 2(\bar{m}-1)2\pi r\lambda^{-1}$. Подобное предположение нами используется лишь для упрощения вычислений производной фактора $K(\cdot)$ по переменной φ и ни с какими иными принципиальными ограничениями само по себе не связано. В соответствии с этим можно рассматривать фактор $K(\rho(\varphi))$, где $\rho(\varphi) = q(\varphi)\cdot r$ и $q(\varphi) = 2(\bar{m}(\varphi)-1)2\pi\varphi\lambda^{-1}$. Поскольку $K'_{\varphi} = K'_{\rho}\cdot\rho'_{\varphi}$ и $K'_r = K'_{\rho}\cdot\rho_r$, то, воспользовавшись соотношением

$$K'_{\varphi} = K'_r\rho'_{\varphi}/\rho'_r = K'_r q'_{\varphi}/q, \tag{9}$$

найдем

$$F'_{\varphi} = (q'_{\varphi}/q)\int_{R_1}^{R_2} K'_r r s(r)\,dr. \tag{10}$$

Последующее использование формулы интегрирования по частям избавляет нас от необходимости вычислять производные от фактора, что весьма нетривиально, если исходить из расчетных формул теории Ми, в которой указанные факторы выражаются плохо сходящимися рядами [4]. В результате остается оценить две величины, а именно

$$q'_{\varphi}/q \text{ и } \left\{-\int_{R_1}^{R_2} K(r,\lambda)(rs)'dr\right/\int_{R_1}^{R_2} K(r,\lambda)\,s(r)\,dr.$$

Первая из них не превосходит значений $(-1/2\varphi)$. Что же касается отношения интегралов, то в соответствии с теорией дифференцирования спектральных оптических характеристик светорассеяния полидисперсными системами частиц, развитой в работах [3, 5, 6], оно является функцией $\omega(\lambda) = \lambda\beta'\lambda/\beta$, играющей важную роль в анализе спектральной изменчивости оптических аэрозольных характеристик [3]. В итоге находим, что неравенство (8) эквивалентно условию

$$|\omega(\lambda)| < 2. \tag{11}$$

Как показывают расчетно-аналитические исследования [3, 5, 6] для типичных аэрозольных образований в атмосфере, описываемых, в частности, оптическими моделями, систематизированными в монографии [7], величина $|\omega(\lambda)|$ близка к единице для видимого диапазона длин волн. Поэтому ограничение (11) не является жестким. Аналитическое представление функции $\omega(\lambda)$ через β и производную β'_{λ} удобно в том отношении, что позволяет оценить ее значения непосредственно по спектральному ходу $\beta(\lambda)$. Заканчивая рассмотрение вычислительной схемы (7), напомним, что размерность обращаемого вектора $\beta_f = \{\beta(f_j, \lambda),\ j = 1,\ldots,m\}$ равна размерности искомого $\varphi = \{\varphi_j = \varphi(f_j)\}$ и носителем информации о $\varphi(f)$ выступает изменчивость оптической характеристики β по параметру f. Вместе с тем нетрудно заметить, что при известной априори функции роста $\varphi(f)$ уравнения (6) могут также служить источником информации об исходном распределении $N_c(r)$ $(r \in R_c)$. Конечно, возникает вопрос об информативности вектора β_f и ее сопоставлении с информативностью вектора $\beta_{\lambda} = \{\beta(\lambda_i),\ i = 1,\ldots,\ n\}$, который предполагалось ранее использовать для предварительной оценки $N_c(r)$. Этот сопоставительный анализ проведем в рамках сугубо качественного подхода, используя для $\varphi(f)$ известную эмпирическую зависимость $\varphi(f) = (1-f)^{-\nu}$, где $0{,}2 \le \nu \le 0{,}3$ [2]. Ясно, что если все значения φ_j, соответствующие $f_j = f(t_j)$, известны, то, вводя некий опорный вектор $\boldsymbol{N}_c = \{N_c.(r_l),\ l = 1,\ldots,m\}$ и алгебраизируя (6), придем к линейной системе уравнений относительно его компонент N_{cl} $(l = 1,\ldots,m)$. Обусловленность полученной системы, которую можно рассматривать в качестве аналога понятия «информативность», зависит от изменчивости фактора рассеяния по параметру φ. Судить об этой изменчивости можно по размаху функции $q(\varphi)$, т. е. по величине отношения $\alpha_\varphi = \max q(\varphi)/\min q(\varphi)$. При изменении f в пределах (0,7; 0,9) значение α_φ достигает примерно 2,5. Почти таких же значений достигает и величина $\alpha_\lambda = (\max q(\lambda)/\min q(\lambda))$ при изменении λ в пределах интервала (0,4; 1 мкм). Это указывает на то обстоятельство, что изменчивость фактора рассеяния $K(\bar{m}(\varphi), \varphi r, \lambda)$ по параметрам задачи φ и λ примерно одинакова. Однако если учесть наличие множителей φ_j^2, присутствующих в уравнениях (6), то все же размах функции $\beta(\lambda, f)$ по f должен заметно превышать ее размах по параметру λ, что и подтверждается экспериментальными исследованиями [8]. Вместе с тем нужно иметь в виду, что если в натурном эксперименте представляется возможным получить оптическую информацию в полном объеме, т. е. получить совокупность данных $\beta(\lambda_i,\ t_j),\ i,\ j = 1,\ldots\ \}$, то это следует делать. Последующее обращение дает семейство распределений $\{N(r,\ t_j) = N_j(r)\}$ и соответствующих им интервалов $\{R_j{=}[R_{1j},\ R_{2j}]\}$ без каких-либо допущений частного характера, например, равенства (4). Подобная микрофизическая информация позволяет перейти к обратным задачам для уравнения аэрозольной кинетики и провести совокупный анализ всех физических процессов, определивших временную изменчивость спектра размеров за время эксперимента [3].

В заключение обратим внимание на то обстоятельство, что развитый выше расчетно-аналитический подход к обратным задачам оптики реального (взаимодействующего с воздухом) аэрозоля может быть использован и в тех случаях, когда аэрозольная система взаимодействует с иными физическими полями, нежели поле влажности. В частности, можно сослаться на полидисперсную систему частиц, находящуюся в поле силы тяжести, для которой временная изменчивость спектра размеров определяется седиментацией. Уместно заметить, что конденсационный рост частиц, о котором речь шла выше, обязательно сопровождается выпадением больших частиц и, следовательно, наши построения носили несколько идеализированный характер. Предположим, что в начальный момент времени $t = t_0$ спектр размеров описывался функцией $s_0(r) = \pi r^2 n_0(r)$, где $R_{1,0} \le r \le R_{2,0}$. Если допустить, что с указанного момента началась седиментация частиц, то оптическую характеристику исследуемой полидисперсной системы в первом приближении можно представить параметрическим интегралом

$$\beta(\lambda,\ t) = \int_{R_1}^{R(t_2)} K(r,\ \lambda)\, s_0(r)\, dr. \tag{12}$$

Приложение этого интеграла к интерпретации оптических данных по светорассеянию жидкокапельным аэрозолем, полученных в камере искусственных туманов, можно найти в работе [9]. Неизвестная функция $R_2(t)$ несет физическую информацию о состоянии воздуха. В частности, для $R_2(t)$ может использоваться эмпирическое приближение вида $\alpha t^{-1/2}$, где коэффициент α определяется кинематической вязкостью воздуха [2, 9]. Как и ранее, нас интересует обратная задача для вектора $\beta_t = \{\beta_j = \beta(t_j,\ \lambda),\ j = 1,\ldots,\ m\}$, решаемая с целью определения функции $R_2(t)$, т.е. с целью получить физическую информацию о среде, в которой пребывает аэрозольная система. Для того чтобы использовать при обращении интеграла (12) стандартные алгоритмические схемы, скажем, метод линейных систем, последнему необходимо придать надлежащую аналитическую форму. Это можно сделать, вводя вспомогательную функцию $r(t,\ q) = R_1 + (R_2(t) - R_1)q$, где $0 \le q \le 1$. Обозначая $(R_2(t) - R_1)$ через $\Psi(t)$, интеграл (12) перепишем следующим образом:

$$\Psi(t) \int_0^1 K(\Psi(t),\ q,\ \lambda)\, s_0(\Psi(t),\ q)\, dq = \beta(\lambda,\ t). \tag{13}$$

Поскольку $\Psi(t)$ монотонно убывает с ростом t, то преобразования и $t \to \Psi$ и $\Psi \to t$ взаимнооднозначны, и, следовательно, фиксируя в эксперименте моменты времени t_j, из (13) получим последовательность уравнений относительно чисел $\Psi_j = \Psi(t_j)$ а именно:

$$\Psi_j \int_0^1 K(\Psi_j,\ q,\ \lambda)\, s_0(\Psi_j,\ q)\, dq = \beta_j,\ j = 1,\ldots,\ m. \tag{14}$$

Уравнения (14) аналогичны уравнениям типа (6) и могут быть исследованы и численно решены теми же методами, которые подробно излагались выше. По аналогии с предыдущей задачей распределение $n_0(r) = n(r,\ t = 0)$ считается известным. Другим примером возможного использования развитой выше техники анализа обратных задач оптики аэрозоля и их численного решения может служить зондирование полидисперсной системы жидкокапельного аэрозоля, взаимодействующего с полем мощного излучения [10]. Теперь радиус капли r является сложной функцией времени t и начального радиуса $r_0 = r(t = 0)$. Здесь уже не удается представить функцию $r(t, r_0, E)$, где E — энергетическая характеристика поля, в виде $r = r_0\varphi(E, t)$. Правда, принципиального значения это не имеет для постановки и решения обратных задач. Поскольку не удается построить схему обращения на основе итерационных процессов типа (76), то требуется численно решать нелинейное интегральное уравнение общего вида, а именно: уравнение типа Гаммерштейна первого рода. Рассмотрение подобных обратных задач оптики аэрозоля, взаимодействующего с физическими полями, выходит за рамки настоящей статьи.

1. Хайди Г. М. //Химия нижней атмосферы. М.: Мир, 1976. С. 153—222.
2. Ивлев Л. С. Химический состав и структура атмосферных аэрозолей. Л.: Изд-во ЛГУ, 1982. 366 с.
3. Наац И. Э. Метод обратной задачи в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1986. 198 с.
4. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 607 с.
5. Наац И. Э. //Вопросы лазерного зондирования атмосферы. Новосибирск: Наука, 1976. С. 84—92.
6. Наац И. Э. /Дистанционное зондирование атмосферы. Новосибирск: Наука, 1978. С. 69—83.
7. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир, 1971. 166 с.
8. Георгиевский Ю. С., Розенберг Г. В. //Изв. АН СССР. ФАО. 1973. Т. 9. № 2. С. 126—137.
9. Deepak A., Vaughan O. H. //Appl. Opt. 1978. V. 17. № 3. P. 374—378.
10. Гордин М. П., Соколов А. В., Стрелков Г. М. //Радиотехника и электроника. 1975. № 11. С. 2241—2249.

Институт оптики атмосферы
СО АН СССР, Томск

Поступила в редакцию
30 мая 1989 г.

I. E. Naats. **Inverse Problems of Light Scattering by Aerosol System Interacting With the Physical Fields**.

The paper presents the theory of inverse problems of optics of the aerosol interacting with different physical fields under real atmospheric conditions. It is shown that numerical solutions of these problems can be used as a basis for remote methods of studying the atmospheric processes including spatiotemporal variability of the parametric fields. The aerosol scattering characteristics measured with optical sensing facilities make the initial information. The paper presents basic integral equations of the inverse problems considered as well as the methods of their numerical solution.