

Восстановление комплексного показателя преломления по лидарным измерениям: возможности и ограничения

С.В. Самойлова*

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Поступила в редакцию 11.07.2013 г.

Исследована корректность оценивания комплексного показателя преломления $m = m_R + im_I$, и представлены результаты численного моделирования по точности восстановления микрофизических характеристик аэрозоля по лидарным измерениям коэффициентов ослабления (355 и 532 нм) и обратного рассеяния (355, 532 и 1064 нм). Показано, что определение m при наличии погрешностей неоднозначно – набору значений оптических коэффициентов соответствует непрерывная область на плоскости (m_R, m_I) . Точность оценивания характеристик бимодальной функции распределения по размерам $U(r)$ зависит от величины вклада мелких частиц в объемную концентрацию. При совместном оценивании m , $U(r)$ и 10%-х шумах ошибки восстановления Δm_R и Δm_I составляют 3,5 и 80% соответственно. Использование информации о лидарном отношении позволяет почти в 2 раза уменьшить погрешность восстановления альбедо однократного рассеяния.

Ключевые слова: аэрозоль, лидар, функция распределения частиц по размерам, показатель преломления; aerosol, lidar, particle size distribution, complex refractive index.

Введение

Неопределенности в задачах предсказания климатических изменений зависят, в том числе, от точности оценок влияния аэрозоля на характеристики атмосферы. Исследование глобального горизонтального распределения микрофизических характеристик аэрозоля – функции распределения частиц по размерам $U(r)$ и комплексного показателя преломления $m = m_R + im_I$ – стало возможным с развитием сетевых наблюдений Aerosol Robotic Network (AERONET) [1] и разработкой методов интерпретации наблюдений [2, 3]. К настоящему времени классифицированы основные аэрозольные модели [4] и исследованы особенности распределения характеристик аэрозоля в различных географических регионах (см., например, [5, 6]).

По лидарным измерениям может исследоваться вертикальное распределение микрофизических характеристик. Теоретически эта возможность была показана в монографии [7]. Разработка практических методов началась в 1999 г. [8] с введением в цикл рутинных измерений КР-каналов зондирования, позволяющих одновременно определять коэффициенты обратного рассеяния (β) и ослабления (σ). Изначально методика была разработана для восьми рабочих длин волн – шести длин волн для β и двух длин волн для σ . К настоящему времени она усовершенствована и используется для меньшего числа рабочих длин волн – трех длин волн (355, 532, 1064 нм) для β и двух длин волн (355,

532 нм) для σ . По рекомендации руководителей проекта GALION (GAW Aerosol Lidar Observation Network, [9]) лидарные системы с подобным спектральным разрешением будут использоваться для изучения тропосферного аэрозоля в ближайшее десятилетие. Погрешности определения оптических коэффициентов для подобных систем максимальны в УФ-области и составляют $\sim 20\%$ (σ) и $\sim 10\%$ (β) в пограничном слое атмосферы [10]. Используемый нами алгоритм численного дифференцирования [11] позволяет снизить ошибки до $\sim 10\%$ (σ) и $\sim 5\%$ (β), в том числе и для свободной тропосферы. Отметим, что выделение аэрозольной составляющей коэффициентов требует априорного задания характеристик молекулярного рассеяния, что, в отсутствие одновременных радиозондовых измерений профилей температуры и давления, может увеличить ошибки еще примерно на 5% [12].

Большинство методов восстановления микрофизических характеристик аэрозоля [8, 13–16] основано на теории Ми [17], когда аэрозоль моделируется как полидисперсная система сферических частиц. В настоящее время алгоритмы адаптируются для исследования высотного изменения микрофизических характеристик [18]. Прогресс в моделировании оптических свойств частиц различной формы обусловил трансформацию методов для оценки несферичности аэрозольных частиц [19]. Однако однородные сферические частицы остаются доминантной моделью при оценке показателя преломления. Также используется предположение о неизменности m для различных фракций, которое обусловлено информационной ограниченностью лидарных измерений; с точки зрения используемых методов

* Светлана Викторовна Самойлова (ssv@seversk.tomsknet.ru).

нет препятствий для оценки спектрального хода m (см., например, [16]).

Теоретические аспекты совместного определения функции распределения частиц по размерам $U(r)$ и показателя преломления $m = m_R + im_I$ рассматривались в работах [20, 21]. Было показано, что точность оценивания параметров $U(r)$ зависит от значений мнимой части показателя преломления и резко ухудшается с увеличением поглощения (при $m_I > 0,2$ по оценкам [20]). В настоящей статье мы покажем, какие еще ограничения необходимо иметь в виду при оценке m . Ограничения связаны с особенностями рассеяния на сферических частицах; они существуют и для других оптических измерений, например фотометрических [22] и нефотометрических [23].

Основные результаты по точности определения $U(r)$ представлены для интегральных характеристик – счетной и объемной концентраций, эффективного радиуса (см. [20, 24]). Нам показалось целесообразным дополнить их результатами по восстановлению параметров, используемых при классификации различных типов аэрозоля [6] и характеризующих непосредственно $U(r)$. Они включают среднегеометрический радиус мелких частиц r_f и долю их вклада в объемную концентрацию $V_f/(V_f + V_c)$ – характеристики бимодальной функции распределения объемной концентрации частиц по размерам

$$U(r) = \frac{dV(r)}{d\ln r} = \sum_{i=f,c} \frac{V_i}{\sqrt{2\pi}\delta_i} \exp\left\{-\frac{(\ln r - \ln r_i)^2}{2\delta_i^2}\right\}, \quad (1)$$

где V_i – объемная концентрация частиц; r_i и δ_i – средний радиус и ширина соответствующей моды для мелкодисперсной ($i = f$) и грубодисперсной ($i = c$) фракций аэрозоля. Как показали исследования [25], данный вид распределения является наиболее обоснованным при описании функции распределения тропосферного аэрозоля.

Статья организована следующим образом. В разд. 1 описан математический формализм для восстановления функции распределения при известном показателе преломления. Наши исследования по проблемам определения m обсуждаются в разд. 2. В разд. 3 представлены результаты оценки характеристик аэрозоля по данным численного моделирования. Итоги подводятся в разд. 4.

1. Определение функции распределения при известном показателе преломления

Основная проблема определения $U(r)$ при известном показателе преломления – ограниченность доступной информации: по пяти независимым измерениям оптических коэффициентов необходимо восстановить функцию, имеющую несколько локальных экстремумов. Однако непосредственно функция распределения редко рассматривается в приложениях; в основном используются ее интегральные параметры – счетная концентрация, объемная кон-

центрация и т.п. Последние же могут быть оценены со вполне удовлетворительной точностью [7], если использовать стандартные процедуры решения некорректных обратных задач: 1) разложение искомой $U(r)$ по некоторой системе базовых функций и 2) введение априорных ограничений на решение.

С математической точки зрения микрофизические и оптические характеристики аэрозольного слоя, находящегося на расстоянии z от лидара, связаны между собой системой интегральных уравнений Фредгольма первого рода:

$$\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} K_j(m, r, z) V(r, z) dr + \varepsilon_j^{meas}(z) = g_j^{meas}(z), \quad (2)$$

$$j = \{\beta(355), \beta(532), \beta(1064), \sigma(355), \sigma(532)\} = 1, \dots, 5,$$

где $g_j^{meas}(z)$ задает набор измеряемых коэффициентов ослабления и обратного рассеяния для соответствующей длины волны; $\varepsilon_j^{meas}(z)$ – погрешности измерений; $K_j(m, r, z)$ – зависящие от показателя преломления ядра уравнений. Для сферических частиц при известном показателе преломления элементы $K_j(m, r, z)$ могут быть рассчитаны через соответствующие факторы эффективности согласно [17]. Переменная z , не существенная при описании методов, ниже опущена для упрощения формул.

Алгебраизация (2) проводится разложением искомой функции распределения по известной системе базисных функций $B_k(r)$ с неизвестными весовыми коэффициентами u_k [8, 16]:

$$U(r) = \sum_k B_k(r) u_k + \varepsilon^{base}(r). \quad (3)$$

С учетом разложения (3) система интегральных уравнений (2) сводится к системе линейных алгебраических уравнений относительно вектора весовых коэффициентов $\mathbf{u} = u_k$:

$$A\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{g}, \quad (4)$$

где $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_5)^T$; T – операция транспонирования; $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1^{meas} + \varepsilon_1^{math}, \dots, \varepsilon_5^{meas} + \varepsilon_5^{math})^T$ – сумма экспериментальных и математических погрешностей; $\varepsilon_j^{math} = \int K_j(m, r) \varepsilon^{base}(r) dr$. Элементы матрицы A представимы в виде

$$A_{jk}(m) = \int K_j(m, r) B_k(r) dr. \quad (5)$$

Для обеспечения устойчивости решения (4) к погрешностям измерения g_j в методы обращения включают различные априорные предположения об ожидаемых свойствах u_k . В зависимости от используемых предположений регуляризированное решение (4) может иметь вид

$$\mathbf{u} = (A^T A + \alpha H^T H)^{-1} A^T \mathbf{g}, \quad (6)$$

$$\mathbf{u} = (A^T W_\varepsilon^{-1} A + \alpha H^T H)^{-1} A^T W_\varepsilon^{-1} \mathbf{g}. \quad (7)$$

Здесь α – параметр регуляризации Тихонова (неопределенный множитель Лагранжа); H – матрица соответствующей производной; W_ε – ковариационная матрица для помехи. В (6) – методе регуляри-

зации Тихонова [26] – вводится предположение о гладкости искомого решения (гладкости второй производной u_k [8, 16]). В (7) – методе статистической регуляризации [27] – используется априорная информация о статистических характеристиках помехи (см., например, [2]). Использование (7) целесообразно при восстановлении высотного распределения характеристик функции распределения, поскольку оценка погрешностей определения оптических коэффициентов затруднений не представляет [11].

Спектральный диапазон лидарных измерений, в общем случае, не позволяет восстанавливать характеристики мелких ($r < 0,05$ мкм) и крупных ($r > 5$ мкм) частиц. Для частиц размера $0,05 \leq r \leq 5$ мкм существует возможность разделения различных аэрозольных фракций, если использовать не менее восьми базовых функций (их центры – равноотстоящие точки r_i на логарифмической шкале). Отметим, что конкретный вид $B_k(r)$ слабо влияет на качество восстановления функции распределения, а их количество (размерность k) может быть дополнительным варьируемым параметром при реализации (6) или (7) (см. подробнее [14]).

В собственном алгоритме вслед за авторами [8, 16] мы используем набор треугольных базисных функций с плавающими границами r_{\min}, r_{\max} . Помимо этого, непосредственно при обращении (4) мы обеспечиваем положительную определенность искомых коэффициентов разложения u_k согласно [11]. Наши результаты численного моделирования показывают, что введение более жестких ограничений вида $u^{\min} \leq u_k \leq u^{\max}$ оправданно только при наличии априорной информации об изменении границ при изменении r , т.е. если известно $u^{\min} = u_k^{\min}$, $u^{\max} = u_k^{\max}$. Требование же положительной определенности u_k является необходимым условием для оценки показателя преломления (см. [3]).

2. Совместное определение функции распределения и показателя преломления

Недоопределенность задачи, которую мы отмечали выше, в еще большей степени усложняет поиск решения, когда ядра уравнений (2) известны с точностью до параметра – показателя преломления. Хотя на практике задачи определения $U(r)$ и m решаются параллельно, следует отметить их принципиальное отличие: зависимость оптических коэффициентов g_j от m (в отличие от U) не является линейной. И оценка показателя преломления суть проблема более сложная, поскольку стандартных методов решения нелинейных обратных задач по-просту не существует (подробнее см. [3, 27]). Не просто даже ответить на вопрос: всегда ли возможно оценить m по лидарным измерениям? Анализ собственных значений матрицы A , разработанный для линейных обратных задач и используемый в работах [20, 21], видимо, вряд ли применим для оценивания возможностей восстановления m . Исследование вероятных погрешностей определения m также не полностью отвечает на вопрос, поскольку

^{4*} Восстановление комплексного показателя преломления по лидарным измерениям: возможности и ограничения 199

ошибки могут быть обусловлены и качеством алгоритмов обращения (4), и эффективностью используемой априорной информации.

В общем виде методы для оценки показателя преломления сводятся к минимизации функционала, задающего меру качества искомого решения:

$$\Phi(m) = \|g_j^{meas} - g_j^{calc}(m)\|, \quad (8)$$

где g_j^{meas} – набор значений соответствующих оптических коэффициентов, восстановленный по лидарным измерениям; $g_j^{calc}(m)$ – тот же набор, рассчитанный для фиксированного значения показателя преломления и оцененной согласно (3)–(7) функции распределения. Изменение нормировки, регуляризации или процедуры минимизации в (8) приводит к различным алгоритмам оценивания m . Выбор конкретного алгоритма определяется информационной обеспеченностью задачи – доступным набором оптических коэффициентов.

Для лидарных измерений целесообразно проводить прямую минимизацию (8) по всему физически обоснованному набору значений (m_R, m_I) действительной и мнимой частей m . Применение итерационных процедур, аналогичных [3], затрудняет зависимость решения от априори задаваемого начального приближения. Регуляризацию для показателя преломления можно проводить при восстановлении его вертикального распределения, для ансамбля измерений $g_j^{meas} = g_j^{meas}(z)$. При определении средних характеристик слоя, для единственной реализации g_j^{meas} , качество оценивания m определяется видом решающего функционала $\Phi(m)$.

Ниже будет использоваться функционал незвязки, задающий ошибку оценивания оптических коэффициентов:

$$\Phi(m) = \frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 \frac{|g_j^{meas} - g_j^{calc}(m)|}{g_j^{meas}} \cdot 100\%. \quad (9)$$

Относительную ошибку целесообразно использовать, поскольку значения коэффициентов σ и β могут отличаться на два порядка. Чтобы учесть погрешности измерения g_j^{meas} , при моделировании на первом этапе согласно [14] рассчитывались оптические коэффициенты g_j^{comp} для заданных значений $U(r)$ и m . На втором этапе накладывались погрешности вида

$$g_j^{meas} = (1 + \delta_j) g_j^{comp},$$

где δ_j – случайное число, соответствующее нормальному распределению с нулевым средним и стандартным отклонением ε^{meas} (значения ε^{meas} представлены в %).

Минимизация (8) сводится к *перебору* значений функционала на плоскости (m_R, m_I) , и области низких значений $\Phi(m) \leq E(\varepsilon^{meas}, \varepsilon^{math})$ совпадают с областями локализации возможных значений показателя преломления. Рис. 1 (цв. вклейка) представляет изображения изменений $\Phi(m)$ на сетке значений $m_R = 1,11 \div 1,95$ (шаг $\Delta m_R = 0,05$) и $m_I = 1 \cdot 10^{-8}, 5 \cdot 10^{-8}, \dots, 1 \cdot 10^0, 5 \cdot 10^0$. Значения g_j^{meas} , имитирующие

результаты оценки оптических коэффициентов по лидарным измерениям, рассчитывались для функции распределения вида (1) с параметрами $r_f = 0,15$ мкм, $\sigma_f = 0,38$, $r_c = 3$ мкм, $\sigma_c = 0,75$, $V_f/(V_f + V_c) = 0,5$.

Структура рисунка организована следующим образом:

1) изменение изображений по столбцам (слева направо) иллюстрирует влияние погрешностей: в левом столбце исключены все возможные ошибки ($\varepsilon = \varepsilon^{meas} = \varepsilon^{math} \equiv 0$), функция распределения при вычислении $g_j^{calc}(m)$ предполагается известной. Для центрального столбца справедливо $\varepsilon^{math} \equiv 0$, т.е. исключены только ошибки определения функции распределения; $\varepsilon^{meas} = 10\%$. Результаты в правом столбце приближены к условиям обработки реальных измерений, $\varepsilon^{math} \neq 0$, $\varepsilon^{meas} = 10\%$ (см. введение);

2) изменение изображений по строкам (сверху вниз) показывает изменение значений $\Phi(m)$ при увеличении поглощения — возрастании m_I для фиксированного значения $m_R = 1,50$.

Анализ рис. 1 показывает, что значения функционала $\Phi(m)$ на плоскости (m_R, m_I) представляют собой сложную, овражистую поверхность и области низких значений M : $\forall m \in M \Phi(m) \leq E(\varepsilon^{meas}, \varepsilon^{math})$ (синего цвета при $E = 15\%$) находятся на «дне» оврага. Если погрешности отсутствуют, для любого значения m существует единственный минимум $\Phi(m) \equiv 0$ (см. рис. 1, левый столбец). Наличие погрешностей искажает поверхность значений функционала, разрушает связность M и приводит к появлению дополнительных, так называемых «паразитических», минимумов. Их расположение на плоскости (m_R, m_I) не является случайным: минимумы всегда локализованы внутри M .

Проследим, как трансформируется область M с возрастанием поглощения. Для слабопоглощающих частиц ($m_I \leq 5 \cdot 10^{-4}$) область расположена вдоль оси изменения мнимой части показателя преломления (см. левую часть рис. 1, а). В отсутствие шумов глобальный минимум совпадает со значением $m^{mod} = 1,50 + 5 \cdot 10^{-8}i$, которое мы использовали при расчете g_j^{meas} . При добавлении $\varepsilon^{meas} = 10\%$ область минимума сглаживается (см. центральную часть рис. 1, а); внутри M значения $\Phi(m)$ постоянны и неразличимы относительно m_I . В то же время для любого $m_I \leq 5 \cdot 10^{-4}$ минимум $\Phi(m)$ определяется для $m_R = m_R^{mod} = 1,50$. Таким образом, для слабо поглощающих частиц лидарные измерения позволяют корректно определять только значение действительной части показателя преломления. Данное заключение справедливо для произвольной функции распределения; при изменении модельных значений m_R картина не меняется.

Для частиц со средним поглощением область M проявляется при одновременном возрастании обеих частей показателя преломления. На рис. 1, б—г представлены результаты для значений $m_I^{mod} = 5 \cdot 10^{-4}$, $5 \cdot 10^{-3}$, $5 \cdot 10^{-1}$ соответственно. В диапазо-

не ($5 \cdot 10^{-4} \leq m_I \leq 5 \cdot 10^{-1}$) лидарные измерения чувствительны к изменению как m_R , так и m_I , но с увеличением поглощения точность оценки мнимой части улучшается, а действительной — ухудшается.

Для сильно поглощающих частиц ($m_I \geq 5 \cdot 10^{-1}$) область M расположена вдоль оси изменения действительной части показателя преломления (на рис. 1, д представлены результаты для $m^{mod} = 1,50 + 1i$). Лидарные измерения позволяют корректно определить только мнимую часть показателя преломления, оценка же действительной части затруднена. Кроме того, как показали исследования [20, 21], при значениях $m_I \geq 0,2$ возникают серьезные проблемы с оценкой параметров функции распределения. Таким образом, применение методов (2), (4), (8) для совместного определения $U(r)$ и m обосновано только для частиц со средним поглощением ($5 \cdot 10^{-4} \leq m_I \leq 5 \cdot 10^{-1}$), если использовать лидарный набор g_j^{meas} .

Именно набор оптических коэффициентов задает локализацию области M на плоскости (m_R, m_I) . На рис. 2 (цв. вклейка) представлены изменения $\Phi(m)$ при изменении оптической информации для g_j^{meas} : 1) $j = \sigma(355), \sigma(440), \sigma(532), \sigma(670), \sigma(870), \sigma(1064) = 6$, значения $\Phi(m)$ представлены слева на рис. 2; 2) $j = \beta(355), \beta(440), \beta(532), \beta(670), \beta(870), \beta(1064) = 6$, центральная часть рис. 2.

Результаты получены для заданного значения $m^{mod} = 1,50 + 0,005i$ при известной функции распределения (ее параметры приведены при описании рис. 1); $\varepsilon^{math} \equiv 0$, $\varepsilon^{meas} = 10\%$. Значения функционала $\Phi(m)$ для набора g_j^{meas} , определяемого по лидарным измерениям, представлены в центральной части рис. 1, в; они получены для тех же условий эксперимента. И для наборов, состоящих только из коэффициентов ослабления, только из коэффициентов обратного рассеяния, и для смешанного лидарного набора локализация M зависит от поглощения. Различия проявляются при значениях $5 \cdot 10^{-4} \leq m_I \leq 5 \cdot 10^{-1}$: для набора σ область локализуется при одновременном возрастании m_I и убывании m_R (подробнее см. [19]). Для измерений при углах рассеяния $\phi \geq 20^\circ$ (и для β , $\phi = 180^\circ$) в области M большим значениям m_I соответствуют большие значения m_R (см. также [23]).

В правой части рис. 2 представлены результаты изменения лидарного отношения $S = \sigma/\beta$ на плоскости (m_R, m_I) . Они получены для длины волны $\lambda = 355$ нм и тех же условий эксперимента. Расположение областей фиксированных значений S коррелирует с локализацией области M на плоскости (m_R, m_I) для угловых измерений. Также можно показать, что на (m_R, m_I) существует корреляция между областями фиксированных значений параметров Ангстрема для σ и $\Phi(m)$ для набора g_j^{meas} , состоящего только из коэффициентов ослабления.

Итак, наличие шума сглаживает глобальный минимум и приводит к появлению нескольких локальных, расположенных в области низких значений функционала $\Phi(m)$. Покажем, что их общее коли-

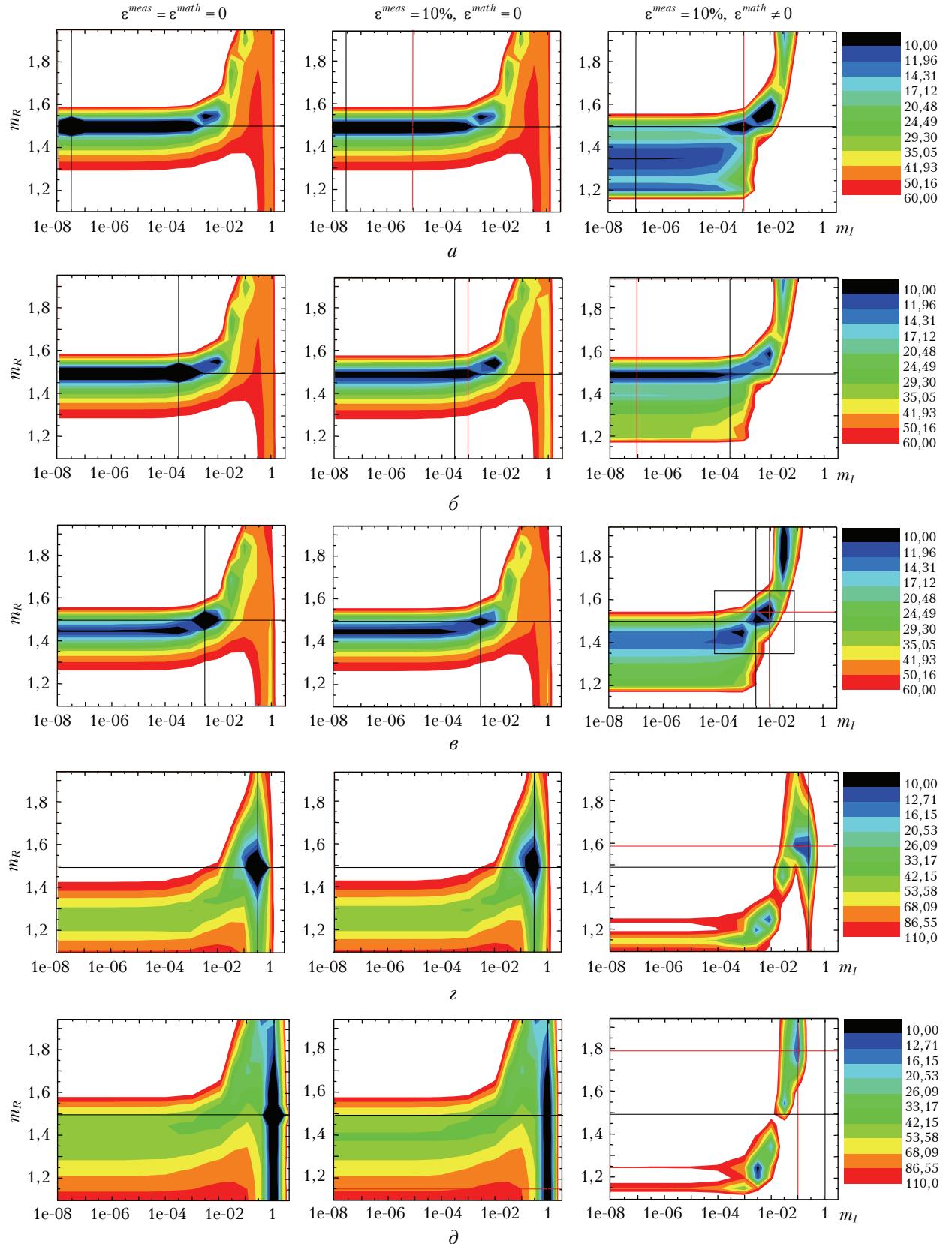


Рис. 1. Локализация областей низких значений решающего функционала $\Phi(m)$ на плоскости (m_R, m_I) ; $\alpha - m^{\text{mod}} = 1,50 + 5 \cdot 10^{-8}i$ (на пересечении черных линий); $\beta - 1,50 + 0,0005i$; $\gamma - 1,50 + 0,005i$; $\delta - 1,50 + 0,5i$; $\partial - 1,50 + 1i$. Изменения по столбцам показывают влияние погрешностей измерения оптических коэффициентов ($\varepsilon^{\text{meas}}$) и оценивания функции распределения ($\varepsilon^{\text{math}}$)

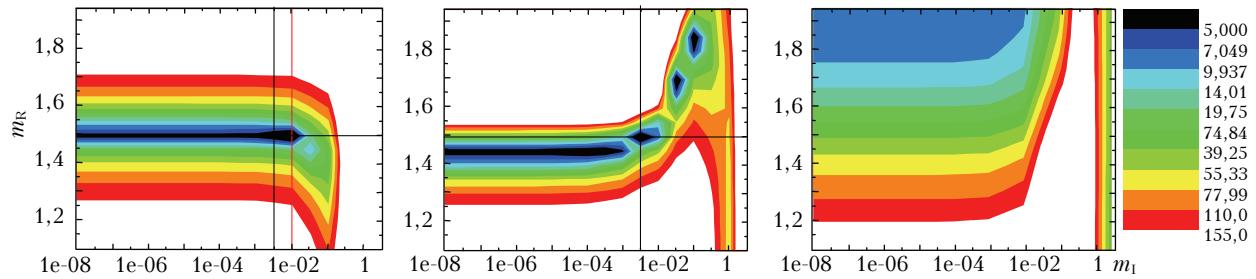


Рис. 2. Локализация областей низких значений функционала $\Phi(m)$ для различного набора оптических коэффициентов: только коэффициенты ослабления (слева); только коэффициенты обратного рассеяния (в центре). Изображение для набора, определяемого по лидарным измерениям, — в центре рис. 1, б. Справа — изменение лидарного отношения для 355 нм на плоскости (m_R, m_I)

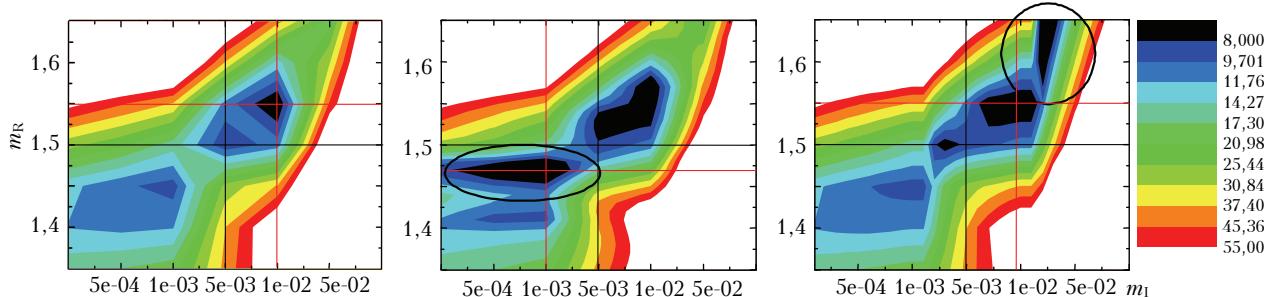


Рис. 3. Трансформация значений $\Phi(m)$ при изменении шага сетки показателя преломления ($\Delta m_R, \Delta m_I$): слева — исходное изображение; в центре — Δm_R уменьшен в 5 раз; справа — Δm_I уменьшен в 5 раз

чество зависит от шага сетки значений показателя преломления, используемой при численной минимизации (8). На рис. 3 (цв. вклейка) представлена трансформация $\Phi(m)$ при изменении (m_R, m_I) для задачи совместного оценивания m и $U(r)$; $m^{\text{mod}} = 1,50 + 0,005i$, модельные параметры аналогичны рис. 1, $\epsilon^{\text{math}} \neq 0$, $\epsilon^{\text{meas}} = 10\%$. Структура рис. 3 организована следующим образом:

1) слева: $m_R = 1,35 \div 1,65$ (шаг $\Delta m_R = 0,05$), 7 значений, и $m_I = 1 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-4}, \dots, 5 \cdot 10^{-2}, 1 \cdot 10^{-1}$, 7 значений; на рис. 1, *a* указанная область выделена прямоугольником;

2) в центре: шаг Δm_R уменьшен; $m_R = 1,35 \div 1,65$ ($\Delta m_R = 0,01$), 31 значение, и $m_I = 1 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-4}, \dots, 5 \cdot 10^{-2}, 1 \cdot 10^{-1}$, 7 значений;

3) справа: шаг Δm_I уменьшен; $m_R = 1,35 \div 1,65$ ($\Delta m_R = 0,05$), 7 значений, и $m_I = 1 \cdot 10^{-4}, 2 \cdot 10^{-4}, \dots, 9 \cdot 10^{-2}, 1 \cdot 10^{-1}$, 28 значений.

На рис. 3 слева существуют три локальных минимума: $m = 1,45 + 0,001i$; $m = 1,50 + 0,005i$; $m = 1,55 + 0,01i$, последний является глобальным. При уменьшении Δm_R (Δm_I остается прежним, см. рис. 3 в центре) появляется минимум для значений $m = 1,47 + 0,001i$. Если уменьшить Δm_I (см. рис. 3 справа), проявляются еще два дополнительных минимума для значений $m = 1,60 + 0,02i$; $m = 1,65 + 0,03i$.

Таким образом, получается, что заданному (измеренному) набору значений оптических коэффициентов g_j^{meas} соответствует некоторая непрерывная область значений M на плоскости (m_R, m_I) . Соответственно, в задаче оценки m отсутствует единственность и решение *недоопределенено*. Подчеркнем, что имеется в виду недоопределенность оценки показателя преломления, а не функции распределения, как в [20]. Она имеет место быть как для мнимой, так и для действительной частей m , и степень ее связана с уровнем значений m_I . Для слабо поглощающих частиц неоднозначность оценивания выше для m_I , что, вероятно, обусловлено сильными осцилляциями ядра (2) для β (см., например, [20, рис. 1]). С увеличением поглощения осцилляции сглаживаются, ошибки восстановления $U(r)$ растут (пропадают) информация о крупных частицах и даже разделение на фракции), но одновременно увеличивается точность оценивания m_I . Отметим, что вышеперечисленные особенности сохраняются для широкого диапазона изменения параметров функции распределения вида (1) (таблица). По нашему мнению, они будут справедливы для других моделей $U(r)$. Особенности сохраняются для других значений действительной части показателя преломления, только местоположение области M смещается вдоль оси изменения m_R .

Информационная недоопределенность задачи приводит к появлению локальных, «ложных» минимумов, которые не являются случайными и обусловлены используемым набором оптических коэффициентов (правая часть уравнений Фредольма). Если шумы отсутствуют, глобальный минимум (8) соответствует искомому значению показателя преломления. Наличие шумов приводит к тому, что глобальным может оказаться и «ложный» минимум. Помимо неопределенности восстановления собственно показателя преломления возникает некорректность определения альбедо однократного рассеяния ω . Точность его оценки напрямую связана с точностью оценки m : для $\lambda = 532$ нм и $m^{\text{mod}} = 1,50 + 0,005i$ погрешности $\Delta\omega_{532}$ могут изменяться от 0,9% («истинный» минимум) до 20% («ложный» минимум). Однако значения коэффициентов разложения $U(r)$ в минимумах близки между собой; соответственно, недоопределенность оценки показателя преломления не должна сильно сказываться на точности восстановления параметров функции распределения. Справедливость данного утверждения будет показана ниже в численном эксперименте. Обратное же утверждение очевидно неверно, поскольку ошибки разложения (3) суммируются с ошибками определения оптических коэффициентов [см. (4)].

3. Точность оценивания микрофизических характеристик

Проводились две серии численных экспериментов по восстановлению микроструктурных характеристик. В первой серии исследовались погрешности

**Значения микрофизических характеристик, используемые при моделировании;
результаты представлены в разд. 3***

Параметр	Диапазон изменения	Шаг (m известно)	Шаг (m оценивается)
Радиус частиц для МДФ r_f , мкм	0,05–0,25	0,01	0,02
Радиус частиц для ГДФ r_c , мкм	1,5–4,5	0,5	1
Ширина моды для МДФ δ_f	0,38	—	—
Ширина моды для ГДФ δ_c	0,75	—	—
Вклад МДФ в объемную концентрацию, V_f/V_{total}	0,1–0,9	0,1	0,2
Действительная часть показателя преломления, m_R	1,35–1,65	0,05	0,05
Мнимая часть показателя преломления, m_I	0,0001–0,1 0,0001 для [0,0001; 0,001] 0,001 для [0,001; 0,01] 0,01 для [0,01; 0,1]	0,0001 для [0,0001; 0,001] 0,001 для [0,001; 0,01] 0,01 для [0,01; 0,1]	0,0001 для [0,0001; 0,001] 0,001 для [0,001; 0,01] 0,01 для [0,01; 0,1]

* МДФ – мелкодисперсная фракция аэрозоля; ГДФ – грубодисперсная фракция аэрозоля.

оценивания только параметров функции распределения при известном показателе преломления, и основное внимание уделялось влиянию погрешностей измерений ϵ^{meas} на точность восстановления. Результаты других авторов можно найти в [20, 24]. Во второй серии экспериментов проверялись ошибки при совместном восстановлении t и $U(r)$, и акцент был направлен также на оптимальный выбор решающего функционала. При моделировании $U(r)$ выбиралась бимодальная функция распределения вида (1); ее параметры и используемая при минимизации функционала (8) сетка значений t представлены в таблице.

3.1. Показатель преломления известен

Комбинация параметров из таблицы дает для численного эксперимента 1323 различных модели $U(r)$. Пять значений показателя преломления использовались при расчете g_j^{meas} : $1,40 + 0,005i$; $1,50 + 0,0005i$; $1,50 + 0,005i$; $1,50 + 0,05i$; $1,60 + 0,005i$. Для исследования возможных погрешностей задавались два уровня ошибок возможного определения оптических коэффициентов: 0 и 10%. Чтобы повысить статистическую достоверность результатов, для каждой модели $U(r)$ и уровня ошибок 10% рассчитывались пять различных наборов ϵ_j^{meas} . Таким образом, в первой серии численных экспериментов было проверено $N \sim 6500$ реализаций для $\epsilon^{meas} = 0\%$ и $N \sim 30000$ реализаций для $\epsilon^{meas} = 10\%$.

Анализ результатов позволяет сделать вывод, что точность оценивания характеристик $U(r)$ зави-

сит от уровня вклада мелких частиц в суммарную концентрацию. Для V_{total} ошибки определения минимальны, когда в $U(r)$ доминируют крупные частицы — при $V_f^{\text{mod}}/V_{total}^{\text{mod}} = 0,1$ среднее значение погрешности $\Delta V_{total} \sim 5\%$ для $\epsilon^{meas} = 0\%$ ($\Delta V_{total} \sim 20\%$ для $\epsilon^{meas} = 10\%$). С ростом $V_f^{\text{mod}}/V_{total}^{\text{mod}}$ погрешности линейно возрастают и достигают максимальных значений, когда в $U(r)$ преобладают мелкие частицы. Для $V_f^{\text{mod}}/V_{total}^{\text{mod}} = 0,9$ средние значения составляют $\Delta V_{total} \sim 20\%$ при $\epsilon^{meas} = 0\%$ ($\Delta V_{total} \sim 55\%$ при $\epsilon^{meas} = 10\%$). Увеличение значений ΔV_{total} обусловлено уменьшением информации о крупных частицах, содержащейся в оптических коэффициентах, что, в свою очередь, не позволяет восстанавливать с контролируемой точностью характеристики грубодисперсной фракции.

Точность оценивания V_f/V_{total} в основном зависит от точностью определения характеристик мелкодисперсной фракции: при $V_f^{\text{mod}}/V_{total}^{\text{mod}} = 0,1$ погрешности максимальны; среднее значение составляет $\Delta V_f/V_{total} \sim 30\%$ для $\epsilon^{meas} = 0\%$ ($\Delta V_f/V_{total} \sim 50\%$ для $\epsilon^{meas} = 10\%$). Однако с увеличением $V_f^{\text{mod}}/V_{total}^{\text{mod}}$ погрешности быстро уменьшаются. Для $V_f^{\text{mod}}/V_{total}^{\text{mod}} \geq 0,3$ их средние значения составляют $\Delta V_f/V_{total} \sim 10\%$ при $\epsilon^{meas} = 0\%$ ($\Delta V_f/V_{total} \sim 20\%$ при $\epsilon^{meas} = 10\%$). Небольшое возрастание уровня ошибок также проявляется при значениях $r_f^{\text{mod}} < 0,1 \text{ мкм}$ и $r_c^{\text{mod}} > 3 \text{ мкм}$.

На рис. 4, а, б, в представлены распределения погрешностей при оценке характеристик функции распределения; указанные значения Δ — средняя (по выборке) ошибка соответствующего параметра.

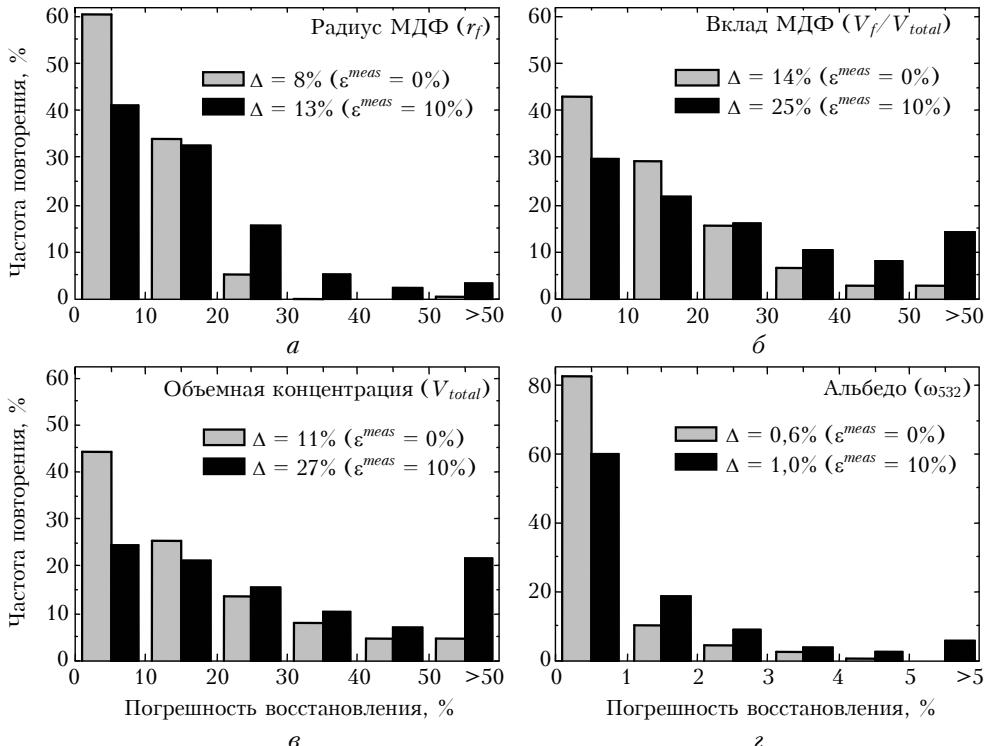


Рис. 4. Точность оценивания микрофизических характеристик при известном показателе преломления

Каждый столбец гистограммы показывает, в скольких реализациях (в % к N) погрешность восстановления попадала в указанный диапазон. В последнем столбце представлено общее количество так называемых «плохих» оценок с ошибками $> 50\%$. Если исключить из анализа все реализации с модельными значениями $V_f^{\text{mod}}/V_{\text{total}}^{\text{mod}} = 0,1$ и $0,9$, то при $\epsilon^{\text{meas}} = 10\%$ общее количество «плохих» оценок сокращается на 10% для V_{total} и на 14% для V_f/V_{total} .

На рис. 4, g показаны погрешности оценивания альбедо однократного рассеяния ω_{532} для длины волны 532 нм. При известном показателе преломления ошибки определения $U(r)$ слабо влияют на $\Delta\omega_{532}$. Точность оценивания альбедо напрямую зависит от порядка значений m_l и составляет (при $\epsilon^{\text{meas}} = 0\%$) 0,06, 0,46 и 1,2% для $m_l = 0,0005, 0,005, 0,05$ соответственно.

3.2. Показатель преломления неизвестен

При совместном определении m и $U(r)$ требуется существенно большие затраты машинного времени [примерно в $N(m_R) \times N(m_l)$ раз, где $N(m_R), N(m_l)$ – количество точек дискретизации m при минимизации $\Phi(m)$ в (8)]. Поэтому был увеличен шаг изменения каждого параметра $U(r)$ (см. таблицу) и использовались только 176 различных моделей функции распределения для расчета g_j^{meas} . Задавались два уровня возможных ошибок определения оптических коэффициентов (0 и 10%). Для

каждой модели $U(r)$ и уровня шума 10% также рассчитывались пять различных наборов ϵ_j^{meas} . При моделировании использовались пять значений показателя преломления ($1,40 + 0,005i; 1,50 + 0,0005i; 1,50 + 0,005i; 1,50 + 0,05i; 1,60 + 0,005i$), и представленные ниже оценки точности проводились примерно на 800 реализациях для $\epsilon^{\text{meas}} = 0\%$ и 4000 реализациях для $\epsilon^{\text{meas}} = 10\%$.

Рис. 5, a, b, c показывает, как распределены погрешности оценивания характеристик функции распределения при неизвестном m ; структуры рис. 5 и рис. 4 аналогичны. Анализ результатов позволяет сделать вывод, что точность оценивания $U(r)$ и при неизвестном показателе преломления зависит от уровня вклада мелких частиц в суммарную концентрацию. Сопоставление результатов рис. 4 и 5 подтверждает, что недоопределенность оценки m влияет на ошибки оценивания V_{total} и V_f/V_{total} , если отсутствуют погрешности определения оптических коэффициентов. Для $\epsilon^{\text{meas}} = 10\%$ средние значения, гистограммы и количество «плохих» оценок ($> 50\%$) близки между собой.

Ошибки оценивания характеристик $U(r)$ при заданном и оцениваемом m сопоставимы, однако ошибки определения альбедо ω_{532} увеличиваются с 0,9 до 3,6% (рис. 5, g). Изменение $\Delta\omega_{532}$ обусловлено тем, что точность оценки альбедо напрямую связана с точностью определения m : в «ложных» минимумах всегда $\Delta\omega_{532} > 5\%$. Нам удалось установить, что при использовании функционала вида (9)

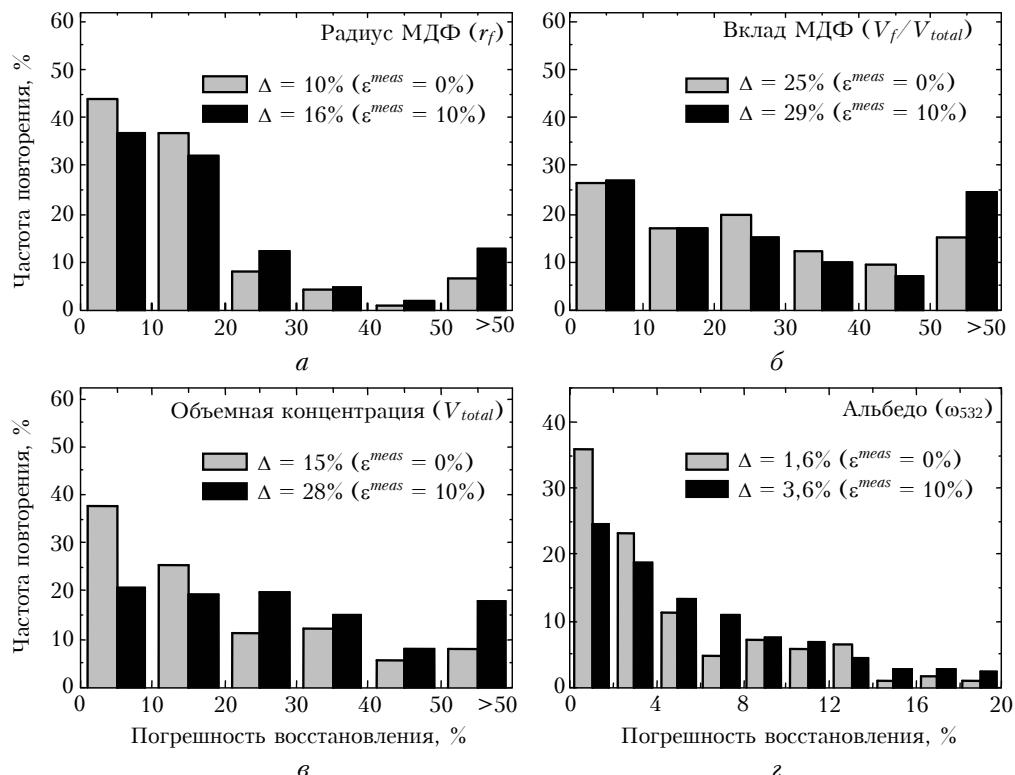


Рис. 5. Точность оценивания микрофизических характеристик при одновременной оценке показателя преломления
Восстановление комплексного показателя преломления по лидарным измерениям: возможности и ограничения 203

Δm резко возрастают при $r_f \leq 0,1$ мкм. Целесообразнее представляется использовать решающий функционал вида

$$\Phi(m) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 \frac{|S_k^{meas} - S_k^{calc}(m)|}{S_k^{meas}} \cdot 100\%, \quad (10)$$

где S_k^{meas} — измеренные значения лидарного отношения для $k = 355$ и 532 нм; $S_k^{calc}(m)$ — рассчитанные значения при фиксированном показателе преломления.

Средние ошибки определения показателя преломления составляют $\Delta m_R \sim 2,5\%$, $\Delta m_I \sim 40\%$ для $\varepsilon^{meas} = 0\%$ и $\Delta m_R \sim 3,5\%$, $\Delta m_I \sim 80\%$ для $\varepsilon^{meas} = 10\%$. На первый взгляд кажется, что действительная часть m по лидарным измерениям оценивается хорошо и проблемы существуют только при определении мнимой части (см., например, [24]). На самом деле это не верно, поскольку неопределенности при восстановлении составляющих показателя преломления одинаковы; мы показали это в разд. 2. Кажущееся противоречие обусловлено тем, что анализ относительных ошибок малоэффективен при оценке точности восстановления m : относительное изменение m_R для аэрозоля (от 1,30 до 1,70) составляет менее 30%, а изменение m_I — несколько порядков.

На рис. 6, *a, б* приведены распределения погрешностей оценивания составляющих показателя

преломления. В последнем столбце для m_I представлено общее количество так называемых «плохих» оценок с ошибками $>100\%$. Почти половина из них получена для $m_I^{\text{mod}} = 0,0005$ (проблемы оценивания m_I для слабо поглощающих частиц мы рассматривали в разд. 2). Из оставшихся оценок еще половина ($\sim 20\%$ к общему числу) получена для $V_f^{\text{mod}}/V_{total}^{\text{mod}} = 0,9$, т.е. когда в функции распределения преобладают мелкие частицы. В этом случае существуют проблемы с восстановлением характеристик грубодисперсной фракции (подробнее см. разд. 3.1). Ошибки определения $U(r)$ приводят к вырождению функционала $\Phi(m)$ и отсутствию минимумов внутри области (m_R, m_I) . Минимальные значения функционала находятся на границе (m_R, m_I) , обычно в области больших значений m_R, m_I , и, конечно же, являются «плохими» оценками m . Прочие погрешности восстановления $U(r)$ при использовании функционала вида (10) не оказывают существенного влияния на оценку показателя преломления.

Анализ результатов также показывает, что для m_R и m_I восстановленные значения покрывают всю заданную область изменения показателя преломления. С увеличением погрешности измерений для обеих частей m разброс уширяется и смещается в сторону больших значений. Представляется, что обе составляющие показателя преломления восстанавливаются с удовлетворительной точностью и граница «плохих» оценок m_R должна быть не выше 5%.

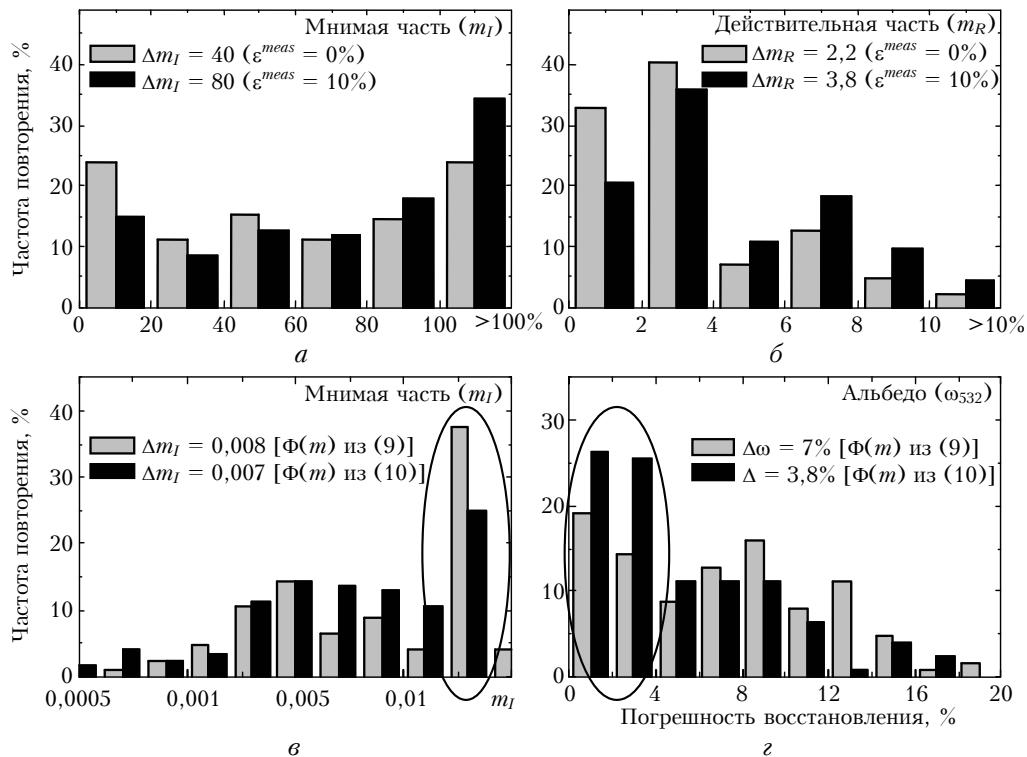


Рис. 6. Точность оценивания показателя преломления при его совместном восстановлении с функцией распределения: влияние ошибок измерения (*a, б*) и вида решающего функционала (*в, г*, представлены результаты для $m^{\text{mod}} = 1,50 + 0,0005i$ и $\varepsilon^{meas} = 10\%$)

По нашим расчетам, именно в эту область попадают значения Δm_R для сильно поглощающих частиц, $m_I^{\text{mod}} = 0,05$, и (или) $V_f^{\text{mod}} / V_{\text{total}}^{\text{mod}} = 0,9$.

Рис. 6, в, г показывает, как выбор решающего функционала влияет на точность восстановления микрофизических характеристик. На рис. 6, в представлен разброс m_I вокруг модельного значения $m_I^{\text{mod}} = 0,005$, на рис. 6, г – погрешности оценивания ω_{532} для решающих функционалов вида (9) и (10). Результаты получены примерно на 880 реализациях для $\varepsilon^{\text{meas}} = 10\%$ (при анализе учитывались восстановления только для $m^{\text{mod}} = 1,50 + 0,005i$). Для решающего функционала невязки (10) m_I определяется точнее, и ошибки оценивания альбедо уменьшаются почти в 2 раза.

Заключение

В статье рассмотрены особенности совместного определения показателя преломления и характеристик функции распределения по многоволновым лазарным измерениям коэффициентов ослабления (355 и 532 нм) и обратного рассеяния (355, 532 и 1064 нм). На основе анализа распределения значений решающего функционала показано следующее.

1. В отсутствие любых шумов лазарному набору оптических коэффициентов соответствует единственное значение показателя преломления; наличие шумов приводит к неоднозначности определения m – набору оптических коэффициентов соответствует непрерывная область на плоскости (m_R , m_I).

2. Некорректность определения составляющих показателя преломления связана с поглощением: с ростом значений m_I точность оценивания m_R уменьшается, m_I увеличивается.

Для получения единственного m , по возможности близкого к истинному, необходимы поиск доступной и качественной априорной информации об ожидаемых свойствах показателя преломления (с целью уменьшения размеров области M) и разработка методов ее использования. Если такая информация отсутствует, можно в качестве решающего функционала использовать невязку для лазарного отношения на длинах волн 355 и 532 нм. Как показали результаты численного моделирования, изменение функционала не оказывается на точности определения характеристик функции распределения, но позволяет в 2 раза уменьшить ошибку оценивания альбедо однократного рассеяния для 532 нм.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты № 13-05-00096-а, 13-08-98013 р_сибирь_а.

1. Holben B.N., Eck T.F., Slutsker I., Tanré D., Buis J.P., Setzer A., Vermote E., Reagan J.A., Kaufman Y., Nakajima T., Laven F., Jankowiak I., Smirnov A. AERONET – A federated instrument network and data archive for aerosol characterization // Remote Sens. Environ. 1998. V. 66, N 1. P. 1–16.
2. Dubovik O.V., Lapyonok T.V., Oshchepkov S.L. Improved technique for data inversion: Optical sizing of multicomponent aerosols // Appl. Opt. 1995. V. 34, N 36. P. 8422–8436.

3. Dubovik O., King M.D. A flexible inversion algorithm for retrieval of aerosol optical properties from Sun and sky radiance measurements // J. Geophys. Res. D. 2000. V. 105, N 16. P. 20673–20696.
4. Dubovik O., Holben B., Eck T.F., Smirnov A., Kaufman Y.J., King M.D., Tanre D., Slutsker I. Variability of absorption and optical properties of key aerosol types observed in worldwide locations // J. Atmos. Sci. 2002. V. 59, N 3. P. 590–608.
5. Cattrall C., Reagan J., Thome K., Dubovik O. Variability of aerosol and spectral lidar and backscatter and extinction ratios of keys aerosol types derived from selected Aerosol Robotic Network locations // J. Geophys. Res. 2005. V. 110, N D10S11. DOI: 10.1029/2004JD005124.
6. Omar A.H., Winker D.M., Vaughan M.A., Hu Y., Trepte Ch.H., Ferrare R.A., Lee K.-P., Hostetler Ch.A., Kit-taka Ch., Rogers R.R., Kuehn R.E., Lie Zh. The CALIPSO automated aerosol classification and lidar ratio selection algorithm // J. Atmos. Ocean. Technol. 2009. V. 26, N 10. P. 1994–2014.
7. Зуев Б.Е., Наац И.Э. Обратные задачи лазерного зондирования. Новосибирск: Наука, 1982. 240 с.
8. Müller D., Wandinger U., Ansmann A. Microphysical particle parameters from extinction and backscatter lidar data by inversion with regularization: Theory // Appl. Opt. 1999. V. 38, N 12. P. 2346–2357.
9. GAW Report N 178, www.wmo.int
10. Pappalardo G., Amodeo A., Pandolfi M., Wandinger U., Ansmann A., Bösenberg J., Matthias V., Amiridis V., De Tomasi F., Frioud M., Iarlori M., Komguem L., Papayannis A., Rocadenbosch F., Wang X. Aerosol lidar intercomparison in the framework of the EARLINET project: 3. Raman lidar algorithm for aerosol extinction, backscatter, and lidar ratio // Appl. Opt. 2004. V. 43, N 28. P. 5370–5385
11. Самойлова С.В., Балин Ю.С., Коханенко Г.П., Пеннер И.Э. Исследование вертикального распределения тропосферных аэрозольных слоев по данным многочастотного лазерного зондирования. Часть 1. Методы восстановления оптических параметров // Оптика атмосф. и океана. 2009. Т. 22, № 4. С. 344–357.
12. Böckmann C., Wandinger U., Ansmann A., Bösenberg J., Amiridis V., Boselli A., Delaval A., De Tomasi F., Frioud M., Vidéno-Grigorov I., Hegerl A., Horvat M., Iarlori M., Komguem L., Kreipl S., Larcheveque G., Matthias V., Papayannis A., Pappalardo G., Rocadenbosch F., Rodrigues J.A., Schneider J., Shcherbakov V., Wiegner M. Aerosol lidar intercomparison in the framework of the EARLINET project. 2. Aerosol backscatter algorithms // Appl. Opt. 2004. V. 43, N 4. P. 977–989.
13. Müller D., Wandinger U., Ansmann A. Microphysical particle parameters from extinction and backscatter lidar data by inversion with regularization: Simulation // Appl. Opt. 1999. V. 38, N 12. P. 2358–2368.
14. Böckmann C. Hybrid regularization method for the ill-posed inversion of multiwavelength lidar data in the retrieval of aerosol size distribution // Appl. Opt. 2001. V. 40, N 9. P. 1329–1342.
15. Veselovskii I., Kolgotin A., Griaznov V., Müller D., Wandinger U., Whiteman D.M. Inversion with regularization for the retrieval of tropospheric aerosol parameters from multiwavelength lidar sounding // Appl. Opt. 2002. V. 41, N 18. P. 3685–3699.
16. Veselovskii I., Kolgotin A., Griaznov V., Müller D., Franke K., Whiteman D.M. Inversion of multiwavelength Raman lidar data for retrieval of bimodal aerosol size distribution // Appl. Opt. 2004. V. 43, N 5. P. 1180–1195.

17. Bohren F.C., Huffman D.R. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. N.Y.: John Wiley & Sons, Inc., 1983. 530 p.
18. Kolgotin A., Müller D. Theory of inversion with two-dimensional regularization: profiles of microphysical particle properties derived from multiwavelength lidar measurements // Appl. Opt. 2008. V. 47, N 25. P. 4472–4490.
19. Veselovskii I., Dubovik O., Kolgotin A., Lapyonok T., Di Girolamo P., Summa D., Whiteman D.N., Mishchenko M., Tanré D. Application of randomly oriented spheroids for retrieval of dust particle parameters from multiwavelength lidar measurements // J. Geophys. Res. 2010. V. 115, N D21203. DOI: 10.1029/2010JD014139.
20. Böckmann C., Mironova I., Müller D., Schneidenbach L., Nessler R. Microphysical aerosol parameters from multiwavelength lidar // J. Opt. Soc. Amer. 2005. V. A22, N 3. P. 518–528.
21. Veselovskii I., Kolgotin A., Müller D., Whiteman D.M. Information content of multiwavelength lidar data with respect to microphysical particle properties derived from eigenvalue analysis // Appl. Opt. 2005. V. 44, N 25. P. 5292–5303.
22. Веретенников В.В. Совместное определение микроструктуры и показателя преломления по данным солнечной фотометрии // Оптика атмосф. и океана. 2007. Т. 20, № 3. С. 214–221.
23. Verhaege Ch., Shcherbakov V., Personne P. Limitations on retrieval of complex refractive index of spherical particles from scattering measurements // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2008. V. 109, N 14. P. 2338–2348.
24. Chemyakin E., Kolgotin A., Romanov A., Müller D. Automated, unsupervised inversion of multiwavelength Raman lidar data: Statistical analysis of microphysical parameters // Reviewed and revised papers presented at ILRC26. 2012. P. 265–268.
25. Розенберг Г.В. Восстановление микрофизических параметров аэрозоля по данным комплексных оптических измерений // Физика атмосф. и океана. 1976. Т. 12, № 11. С. 1159–1167.
26. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986. 285 с.
27. Турчин В.Ф., Козлов В.П., Малкевич М.С. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач // Успехи физ. наук. 1970. Т. 102, вып. 3. С. 345–386.

S.V. Samoilova. Retrieval of complex refractive index from lidar measurements: possibilities and limitations.

Studies of indeterminacy of the complex refractive index $m = m_R + im_I$ estimation and simulation results with respect to the analysis of the retrieval error of aerosol microphysical properties from multiwavelength lidar data (355 and 532 nm for extinction and 355, 532, and 1064 nm for backscatter) are presented. It is shown that m is not found unambiguously in the error-presence conditions, because a flat valley on (m_R, m_I) plane corresponds to a set of optical coefficients values. Accuracy of estimation of aerosol microphysical properties for bimodal size distribution function $U(r)$ depends on the value of the contribution of small particles into the volume concentration. Mean errors are $\Delta m_R \sim 3.5\%$, $\Delta m_I \sim 80\%$ for joint reconstruction of m and $U(r)$ and 10% input noise. Lidar ratio information allows the error of reconstructing the single-scattering albedo to be at least halved.