

Оценка точности контрольных измерений в задачах оптической диагностики микрофизических параметров аэрозоля

А.В. Васильев¹, Л.С. Ивлев¹, М.М. Кугейко², С.А. Лысенко², Н.Ю. Терёхин^{1*}

¹Санкт-Петербургский государственный университет
198504, г. Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, 1, НИИФ СПбГУ, Россия
²Белорусский государственный университет
220030, г. Минск, пр. Независимости, 4, Беларусь

Поступила в редакцию 16.02.2009 г.

Рассмотрено приложение накопленной априорной информации об атмосферных аэрозолях к задачам анализа информативности измерений различных оптических аэрозольных характеристик относительно микрофизических параметров аэрозоля. Отмечена необходимость моделирования вариаций микрофизических параметров, описывающих реальную изменчивость аэрозолей. На указанных принципах предложена статистическая микрофизическкая модель аэрозолей приземного слоя. На ее основе рассчитаны вариационные коэффициенты оптических аэрозольных характеристик по микрофизическим параметрам. Они оформлены в виде компьютерной базы данных и соответствующего вычислительного кода. Указанные средства применимы для различных задач анализа информативности измерений оптических аэрозольных характеристик, в частности оценки необходимой точности одновременных (контрольных) микрофизическими. В качестве примера рассмотрены оценки информативности конкретных лазарных измерений. Для этих измерений на основе предложенной модели в рамках численных экспериментов получены регрессионные соотношения между оптическими и микрофизическими аэрозольными характеристиками. Показано хорошее соответствие результатов восстановления параметров аэрозоля по предложенным регрессионным соотношениям соответствующим данным сети AERONET.

Ключевые слова: аэрозольные модели, вариация параметров, информативность оптических измерений, лазарное зондирование, регрессионные соотношения.

Введение

Систематические прямые (контактные) измерения различных параметров аэрозолей как в натуральных, так и в лабораторных условиях ведутся рядом научных коллективов уже около 50 лет. Некоторый общий их обзор имеется в монографии [1]. Обобщением прямых и косвенных измерений параметров аэрозоля являются аэрозольные модели (см., например, [2–11]), которые обычно описывают моделируемые величины как функции длины волны, высоты, метеорологических (дальности видимости, относительной влажности), географических (региона, сезона) переменных.

К настоящему времени накоплено огромное количество экспериментальных материалов, выявлены многочисленные статистические зависимости между различными метеорологическими параметрами, микрофизическими и оптическими аэрозольными ха-

рактеристиками [1–14]. Однако получение из моделей надежных данных для требуемых практикой и научными задачами аэрозольных параметров в большинстве случаев продолжает оставаться проблематичным: аэрозоли чрезвычайно разнообразны и изменчивы по микроструктуре и физико-химическим свойствам, обработка результатов микрофизическими измерений требует больших временных затрат, комплекс оптических измерений ограничен по спектральному диапазону и углам наблюдений, практически никогда не наблюдается полного соответствия оптических и микрофизическими данных [13, 14]. Конечно, использование накопленной к настоящему времени априорной информации об аэрозолях несколько улучшает положение дел, но требует адекватности априорной информации конкретной атмосферной ситуации, что далеко не всегда выполнимо.

В этом плане можно выделить следующие три основные задачи аэрозольного моделирования применительно к интерпретации прямых (контактных) и косвенных (дистанционных оптических) измерений параметров аэрозоля.

1. Разработка моделей, отражающих априорные сведения об исследуемых аэрозолях и позволяющих варьировать их параметры во всем диапазоне возможных изменений.

* Александр Владимирович Васильев (vs@lich.phys.spbu.ru); Лев Семенович Ивлев (lev@aero.phys.spbu.ru); Михаил Михайлович Кугейко (kugeiko@bsu.by); Сергей Александрович Лысенко (lisenko@bsu.by); Николай Юрьевич Терёхин (aeroter@aero.phys.spbu.ru).

2. При этом важнейшим является вопрос о возможности отражения этих изменений в измеряемых оптических характеристиках, т.е. вопрос об информативности оптических измерений и о том, какие микрофизические параметры аэрозоля могут быть в принципе получены с использованием реального оборудования в рамках предположения об их общей вариативности (не жесткой фиксации отдельных «неизменяемых» параметров, как, например, часто поступают с комплексным показателем преломления). Установление же регрессионных соотношений между ними и измеряемыми оптическими характеристиками при различных ситуациях позволяет осуществить переход от данных оптических измерений к микрофизическим параметрам без решения некорректных обратных задач [15–17]. Для планирования различных аэрозольных оптических измерений необходимо также решать задачу подбора измеряемых оптических характеристик для определения конкретных микрофизических параметров аэрозоля.

3. При контроле различных, в том числе упомянутых регрессионных, алгоритмов обработки данных косвенных оптических измерений микрофизических параметров аэрозоля могут использоваться прямые (контактные) – назовем их контрольными – измерения указанных параметров. Соответственно возникает вопрос: с какой точностью требуется выполнять контрольные измерения, чтобы из сравнения их с данными косвенных можно было делать обоснованные выводы о соответствии последних реальности.

Данная работа является примером комплексного решения указанных трех задач применительно к моделированию и измерениям параметров аэрозолей приземного слоя.

Статистическая микрофизическая аэрозольная модель

Для численного моделирования вариаций оптических аэрозольных характеристик выбрана модель оптических характеристик аэрозолей приземного слоя [6–8].

В ее основе лежит идея блочного моделирования: оптические характеристики аэрозолей получаются как сумма характеристик различных фракций. В [6–8] констатируется, что, по данным экспериментальных измерений, в приземном слое всегда присутствуют частицы трех основных фракций: «мелкодисперсные», «среднедисперсные» и «крупнодисперсные». Реальные микрофизические данные для этих фракций в [6–8] получены на основе обобщения многочисленных экспериментальных измерений, что является основным достоинством модели, определившим ее выбор для задач интерпретации оптических измерений.

Для каждой из трех фракций в [7] задан комплексный показатель преломления аэрозольного вещества (КПП) как функция длины волны. Эта зависимость задана в виде таблицы, спектральный

диапазон которой и, следовательно, всей модели равен 0,3–15 мкм. Следует отметить достаточно подробный шаг таблицы по длинам волн, позволяющий использовать для получения КПП как непрерывной функции длины волны линейную интерполяцию.

Модальные размеры частиц трех фракций, согласно [7], – $r_0 = 0,03; 0,3$ и 1 мкм. Для описания функции распределения аэрозольных частиц по размерам использовано обратное гамма-распределение, его нормированная функция записывается через модальный радиус r_0 , согласно [18], как

$$f(r) = \frac{1}{r\Gamma(a)} \left(\frac{r_0}{r} (a+1) \right)^a \exp\left(-\frac{r_0}{r}(a+1)\right), \quad (1)$$

где $\Gamma(a)$ – гамма-функция. Распределение (1) имеет два параметра (r_0 и a). В [7] для всех трех фракций предложено значение $a = 5$. В [7] предложена также зависимость функции распределения от влажности воздуха, однако здесь ее можно не учитывать, так как в рамках рассматриваемой ниже статистической модели вариации ее параметров будут существенно перекрывать диапазон вариаций, вызванных изменением влажности.

Концентрации частиц каждой фракции для средних условий модели [6–8] есть $N_1 = 4,7 \cdot 10^3$, $N_2 = 58$, $N_3 = 3,75 \text{ см}^{-3}$.

Таким образом, микрофизическая часть модели содержит все необходимые данные для расчетов оптических аэрозольных характеристик. Расчеты осуществляются по известным формулам теории Ми с интегрированием с функцией распределения (1), конкретно использованы алгоритмы из [19, 20]. Оптические характеристики каждой фракции вычислялись отдельно, общие находились согласно известным «правилам сложения» [21, 22].

В данной статье модель [6–8] преобразована в статистическую микрофизическую, для чего использованы общие принципы, изложенные в [10, 11].

Модель определяется 15 микрофизическими параметрами – по 5 для каждой фракции: вещественная и мнимая части КПП, параметры r_0 и a функции распределения частиц по размерам (1), концентрация частиц фракции. Таким образом, для превращения ее в статистическую необходимо задать модели вариаций указанных 15 параметров. Будем считать эти вариации независимыми друг от друга, поскольку именно такая идеология (трех независимых фракций) использована в исходной модели [6–8].

Припишем, согласно [10, 11], параметрам модели свойства случайных величин с определенными функциями распределения. В работе [10] для этого использовались нормальные и логнормальные распределения, однако в более поздней [11] отмечено, что при больших вариациях, характерных для аэрозольных параметров, удобнее равномерные распределения. Действительно в силу своей неограниченности нормальные распределения приводят к физически нереальным отрицательным значениям аэрозольных параметров (16% случаев при вариации в 100%), любая «борьба» с которыми (в том числе – переход

к логнормальной функции [10]) неизбежно приводит к асимметричному распределению, параметры которого уже не соответствуют исходным среднему и дисперсии. Для равномерных же распределений достаточно указать лишь общий диапазон возможных вариаций параметров. Это соответствует модельным представлениям о возможных границах вариабельности аэрозоля. Именно равномерные распределения и используются в данной статье.

Отметим, что для оценок вариаций параметров использован обширный материал прямых микрофизических аэрозольных измерений, осуществлявшихся в лаборатории физики аэрозолей ЛГУ (СПбГУ) на протяжении более чем 30 лет [6–8, 10, 11].

Вещественная часть КПП, как известно, подвержена незначительным вариациям. Примем ее для всех фракций равной $\pm 15\%$ (примерно 0,2 в абсолютных единицах для видимой области спектра), что гарантирует, с одной стороны, близость КПП в минимуме к таким веществам, как вода и лед, а с другой – невыход КПП за значения, меньшие единицы. С мнимой частью ситуация сложнее, поскольку вариации для нее существенно больше, а в данных [7] имеются нулевые значения мнимой части. В связи с этим предлагается следующая модель вариаций. Если исходное (по [7] на конкретной длине волны) значение мнимой части меньше 0,001, то она варьируется в диапазоне 0–0,002, если исходное значение меньше 0,01, то диапазон вариаций 0,002–0,05, если исходное значение меньше 0,3, то диапазон вариаций 0,05–0,6, и наконец, для оставшегося случая (больше 0,3) берем диапазон $\pm 50\%$.

Характерные модели вариаций параметров функции распределения приведены в [11]. Согласно [11] для модального радиуса r_0 функции распределения (1) всех фракций установим диапазон вариаций 50%. Параметр a описывает спад функции распределения в области крупных частиц, который различен для разных фракций (концентрация крупных обычно убывает медленнее, чем мелких). Исходя из этого и согласуясь с данными [11], положим диапазон вариаций параметра a от 4 до 6 для мелких частиц, от 4 до 5,5 для средних и от 2,5 до 5,5 для крупных.

Наиболее сильно меняется концентрация аэрозольных частиц, соответствующие вариации могут достигать порядка и более, причем вариации концентрации мелких частиц существенно выше, чем более крупных. Исходя из этого, будем варьировать не саму концентрацию, а ее десятичный логарифм. Для мелких частиц положим диапазон указанных вариаций ± 2 , для средних $\pm 1,5$, для крупных ± 1 .

Таким образом, модель преобразована в микрофизическую статистическую. При каждом конкретном акте ее использования по известным правилам моделирования равномерно распределенных случайных величин для каждого из 15 параметров получаются конкретные значения, по которым затем рассчитываются требуемые оптические аэрозольные характеристики [10, 21, 23].

Оценки информативности оптических измерений аэрозольных характеристик

Для решения задач оценки информативности и потенциальной точности измерений, как известно (см., например [21, 24]), необходимы частные производные измеряемых величин по восстанавливаемым параметрам. В рассматриваемой задаче они рассчитывались численно, более того, с учетом их сильной зависимости от конкретных микрофизических параметров аэрозольной модели и производилось усреднение по статистике случайных реализаций модели. Назовем полученные таким путем величины «вариационными коэффициентами». Для их расчета и оформления в виде базы данных создан соответствующий компьютерный код.

Далее, имея базу данных вариационных коэффициентов, можно решать следующие задачи.

Пусть измеряются N величин, зависящие от M параметров, т.е. имеется вектор измерений \mathbf{Y} с компонентами y_i , $i = 1, \dots, N$, зависящий от вектора параметров \mathbf{X} с компонентами x_j , $j = 1, \dots, M$.

Оценка случайной погрешности определения параметров из измерений (см. подробности в [21, 24]) получается из матрицы апостериорной дисперсии

$$\mathbf{F} = (\mathbf{B}^+ \Sigma^{-1} \mathbf{B})^{-1}, \quad (2)$$

где \mathbf{B} – матрица вариационных коэффициентов; Σ – диагональная матрица из квадратов случайных погрешностей измерений; символом « $+$ » здесь и далее обозначено транспонирование матрицы, символом « -1 » – обращение. Случайные погрешности определения параметров x_j есть $\delta x_j = \sqrt{f_{jj}}$ (отметим необходимость согласования единиц измерений погрешностей и вариационных коэффициентов в (2), в данной статье погрешности рассматривались как безразмерные – относительные).

В ряде случаев, в частности при фактическом превышении числа параметров над числом реально независимых измерений, обратная задача становится некорректной и возникают проблемы с обращением матрицы в приведенном соотношении. Тогда используют оценку, которую дает метод статистической регуляризации [21, 24]:

$$\mathbf{F} = (\mathbf{B}^+ \Sigma^{-1} \mathbf{B} + \mathbf{D}^{-1})^{-1}, \quad (3)$$

где, в простейшем случае некоррелированных параметров, \mathbf{D} – диагональная матрица априорной неопределенности параметров \mathbf{X} с элементами $d_{jj} = s^2(x_j)$, а $s(x_j)$ – априорная, т.е. известная до измерений, относительная неопределенность (погрешность) задания параметра. Ее оценки, например, могут быть получены по приведенным выше моделям вариаций микрофизических параметров. Отметим, что соотношение (3) предпочтительнее, чем (2), не только с математической, но и с физической точки зрения, поскольку (2) является частным случаем (3) при стремлении априорной неопределенности к бесконечности,

чего реально не бывает. Поэтому будем использовать именно соотношение (3).

Оценка погрешности восстановления искомых параметров (в нашем случае – аэрозольных микрофизических) по (3) получается на основе случайной погрешности измерений. То есть для конкретных измерений (набора компонент вектора \mathbf{Y} с заданными точностями) – это предельная теоретически возможная точность определения параметров, и она не может быть уменьшена алгоритмически. Следовательно, ее при проведении совместных с оптическими контрольных измерений микрофизических параметров аэрозоля (компонент вектора \mathbf{X}) можно принять за предельную точность.

Однако на самом деле измерения оптических характеристик и особенно алгоритмы восстановления из них параметров \mathbf{X} помимо случайных содержат и систематические ошибки. Это обстоятельство следует учесть при планировании указанных сопутствующих контрольных микрофизических измерений. В случае, когда измеряются все 15 микрофизических параметров аэрозольной модели, систематические ошибки их восстановления легко могут быть найдены и в перспективе учтены (исправлены). Но более реален на практике случай, когда удается провести контрольные измерения лишь для части микрофизических параметров. Тогда сложно говорить о коррекции систематических ошибок, так как не для всех микрофизических параметров известны значения, соответствующие конкретному оптическому измерению, и, возможно, именно эти неконтролируемые параметры ответственны за систематические отклонения контролируемых. Тем не менее, основываясь на общих принципах, изложенных в работе [21], можно попытаться учесть влияние неконтролируемых параметров на решение обратной задачи. Для этого будем считать их априорную неопределенность случайной ошибкой отсутствующих измерений (т.е. если бы были соответствующие контрольные измерения, то ошибка микрофизических параметров определялась бы по ним, а так в качестве нее приходится брать максимальную – априорную величину) и оценим ее влияние на общую погрешность измерений.

Как известно, матрица $\mathbf{T} = \mathbf{BDB}^+$ описывает вариации измерений, вызванные априорной неопределенностью параметров. Рассмотрим матрицу $\mathbf{T}^{(2)} = \mathbf{BD}^{(2)}\mathbf{B}^+$, где $\mathbf{D}^{(2)}$ – матрица априорных неопределенностей с нулевыми элементами для контролируемых компонент $\mathbf{X}^{(1)}$. Далее добавим этот вклад в погрешность измерений и вычислим по (3) точность восстановления контролируемых параметров $\mathbf{X}^{(1)}$, оставив в матрицах \mathbf{D} и \mathbf{B} только компоненты вектора $\mathbf{X}^{(1)}$. Полученная таким образом оценка точности контрольных измерений учитет их неполноту – влияние неконтролируемых измерений. Эту оценку можно принять за нижний предел точности контрольных измерений.

В общем случае, чем меньше компонента вектора \mathbf{X} контролируется, тем с меньшей точностью достаточно их измерять. Этот несколько парадок-

сальный вывод связан с ухудшением фактической (в рамках замкнутой математической модели комплекса оптических, контрольных измерений и априорной аэрозольной информации) точности измерений \mathbf{Y} из-за влияния неопределенностей неконтролируемых параметров $\mathbf{X}^{(2)}$, рассматриваемых здесь как источники систематических ошибок \mathbf{Y} (случайная ошибка \mathbf{Y} , естественно, остается неизменной). В предельном случае он переходит в очевидное утверждение, что если никакие параметры \mathbf{X} не контролируются, то точность их отсутствующих измерений может быть сколь угодно низкой.

Помимо оценок потенциальной точности восстановления параметров, база данных вариационных коэффициентов позволяет получать важную информацию и для планирования измерений оптических аэрозольных характеристик. Действительно, отношение корней диагональных элементов упомянутой выше матрицы $\mathbf{T} = \mathbf{BDB}^+$ к погрешности измерений есть не что иное, как отношение сигнал-шум, где под сигналом понимается вариация измеряемой величины вследствие априорной вариации параметров. Это позволяет ранжировать измерения по информативности как относительно всего комплекса параметров, так и для каждого параметра индивидуально (рассматривая одномерную матрицу \mathbf{D}).

Для практического решения рассмотренной задачи оценки информативности оптических измерений аэрозольных характеристик создан универсальный компьютерный код. Универсальность обеспечивается рассмотрением любых комбинаций аэрозольных оптических характеристик, реально осуществляемых на практике. В качестве указанных характеристик рассматривались: объемный коэффициент ослабления, объемный коэффициент обратного рассеяния, объемный коэффициент направленного рассеяния (ненормированная индикаториса) и степень линейной поляризации при рассеянии. Причем указанные характеристики могут измеряться в любой области спектрального диапазона от 0,3 до 15 мкм, в том числе и как интегральные по спектру, для индикаторис и степени поляризации может быть выбран любой диапазон углов. Задавая конкретные измерения (включая их точность) как входные для созданного компьютерного кода, пользователь получает на выходе оценки потенциальной точности восстановления микрофизических параметров из оптических измерений, на основе которых можно делать выводы о требованиях к условиям и точности прямых измерений соответствующих микрофизических параметров. Кроме того, выходные данные кода включают ранжирование измеряемых оптических характеристик по информативности как относительно всего комплекса микрофизических параметров, так и по каждому параметру в отдельности.

Таким образом, разработанный универсальный компьютерный код предназначен для решения рассматриваемого класса задач в условиях конкретного планирования самых различных аэрозольных оптических экспериментов с учетом особенностей реальной аппаратуры.

Примеры расчета информативности оптических характеристик

Для мониторинга аэрозолей в атмосфере широко используется лидарное зондирование. В настоящее время для контроля параметров аэрозоля на пространстве Евразийского континента созданы региональные лидарные сети в Европе (EARLINET) [25], Юго-Восточной Азии (AD-Net) [26], на пространстве СНГ (CIS-LINET) [27]. В 2006–2007 гг. под эгидой Всемирной метеорологической организации начался процесс формирования глобальной лидарной сети GALION.

Лидарное зондирование атмосферы осуществляется, как правило, на 2–3 длинах волн в видимой и ближней ИК-области спектра, поскольку такие лидары более просты, дешевы и эксплуатационно надежны. Среди них наибольший интерес представляют системы, построенные на основе Nd:YAG-лазеров с преобразованием частоты во вторую и третью гармоники: длины волн (λ) несмещенных каналов 1064, 532 и 355 нм и каналов комбинационного рассеяния 387, 607 нм [28, 29]. Важным достоинством таких лидаров является возможность независимого и одновременного определения профилей аэрозольных коэффициентов ослабления на $\lambda = 355$ и 532 нм и обратного рассеяния на $\lambda = 1064$, 532 и 355 нм.

Тем не менее получение функции распределения аэрозольных частиц по размерам на основе таких измерений с использованием общих и строгих методов решения обратных задач является весьма проблематичным ввиду недостаточного объема оптической информации. В связи с этим возникает необходимость исследования информативности лидарных измерений относительно микрофизических характеристик аэрозолей и возможности получения регрессионных соотношений между оптическими и микрофизическими характеристиками при широких диапазонах изменения последних, соответствующих как городскому, так и фоновому аэрозолю.

Используя описанный выше подход, проведем анализ информативности данных совместных измерений объемных коэффициентов аэрозольного ослабления $\epsilon(\lambda)$ и обратного рассеяния $\beta_\pi(\lambda)$ на длинах волн 335, 532 и 1064 нм (соответствующих лидарной системе зондирования на основе Nd:YAG-лазеров) при точности измерений 10% (см. ниже). Отметим, что подобный анализ уже выполнялся в работах [30, 31]. Мы, однако, повторим его для приведенной выше аэрозольной модели трех фракций, более адекватной реальности, чем использованное в [30] двухмодальное распределение с единственным КПП, и дополним физическим толкованием полученных результатов. Кроме того, проанализируем и требуемую точность контрольных измерений. При этом будем ориентироваться на возможности контрольных измерений только параметров функции распределения аэрозольных частиц по размерам среднедисперсной и крупнодисперсной фракций (измерения счетчиком типа АЗ-5).

Оптические измерения оказываются весьма информативными относительно восстановления вещественной части КПП всех трех фракций (с точностью примерно 7% для мелкодисперсной и 5% для средне- и крупнодисперсной). Этот результат согласуется с данными [30] (0,05 в абсолютных единицах) и легко объясним физически, так как известна сильная зависимость индикаторы рассеяния и, следовательно, коэффициента обратного рассеяния от вещественной части КПП аэрозольного вещества (см., например, [32]). Это дает повод еще раз отметить, что алгоритмы восстановления микрофизических аэрозольных параметров при фиксации КПП не всегда являются достоверными. Мнимая же часть КПП восстанавливается хуже – погрешность порядка 100% (в [30] – 50%, но там КПП одно для всех фракций), что опять-таки легко объясняется существенно более слабой зависимостью от нее параметров аэрозольного рассеяния в коротковолновом диапазоне спектра (с учетом реальной малости в указанном диапазоне мнимой части КПП основных аэрозольных веществ, за исключением сажи).

Что касается параметров функции распределения аэрозольных частиц по размерам, то здесь картина достаточно сложная, хотя легко объяснима физически. По измерениям в коротковолновой области спектра модальный радиус крупнодисперсной и среднедисперсной фракций восстанавливается несколько лучше, чем мелкодисперсной (примерно 20% против 25%). Для параметра α , отвечающего за полуширину функции распределения, имеем 10% для мелкодисперсной фракции, 8% для среднедисперсной и 20% для крупнодисперсной. Такой результат объясняется известным фактом максимально сильного взаимодействия с излучением частиц в диапазоне размеров, близких к длине волны. Для модальных радиусов – это среднедисперсная и крупнодисперсная фракции (335 и 1064 нм), но не мелкодисперсная. Для параметра α надо рассматривать диапазон размеров области спада функций распределения, лежащий правее максимума, что и дает характерные длины волн для мелких (335 нм) и средних (1064 нм), но уже не для крупных частиц. Отметим, что в работах [30, 31] оценивается точность восстановления лишь эффективного радиуса функции распределения, но не полуширины.

Наконец, с точки зрения физики, максимально информативны рассматриваемые измерения относительно концентрации крупных частиц (чуть менее одного порядка десятичной шкалы), менее информативны для средних (1,3 порядка) и еще менее – для мелких (почти два порядка). Впрочем, из приведенных оценок видно, что информативность восстановления счетной концентрации аэрозольных частиц практически равна априорной; следовательно, можно делать вывод о малой информативности оптических измерений относительно восстановления концентраций. Это согласуется с результатами работы [33] и расходится с данными [30, 31] (70%), по-видимому, из-за использования там слишком идеализированной (упрощенной) аэрозольной модели.

Что касается требований точности к контрольным измерениям микрофизических параметров, то они становятся очевидными из приведенных выше оценок. Собственно абсолютные величины объемных концентраций аэрозольных частиц определять фактически не требуется, а необходимо по их измерениям находить параметры нормированной функции распределения частиц по размерам вида (1). Соответствующие алгоритмы имеются в лаборатории физики аэрозолей физического факультета СПбГУ [18].

Формулы регрессии для восстановления микрофизических аэрозольных параметров

Описанная выше статистическая аэрозольная модель была использована для решения задачи регрессии при восстановлении микрофизических аэрозольных параметров из оптических лидарных измерений. При этом, однако, на данном этапе исследований мы ограничились лишь некоторым набором восстанавливаемых микрофизических параметров, хотя подчеркнем, что в рамках соответствующих численных экспериментов варьировались все 15 параметров модели.

На основе генерированного ансамбля реализаций микрофизических параметров аэрозоля и расчетов соответствующих оптических характеристик получены уравнения множественных регрессий между объемными концентрациями фракций C_{Vi} ($\text{мм}^3/\text{м}^3$), суммарной площадью геометрического сечения S ($\text{мкм}^2/\text{см}^3$), счетной концентрацией частиц N (см^{-3}) и отмеченными выше оптическими характеристиками (ОХ): объемными коэффициентами ослабления ϵ и обратного рассеяния β_π :

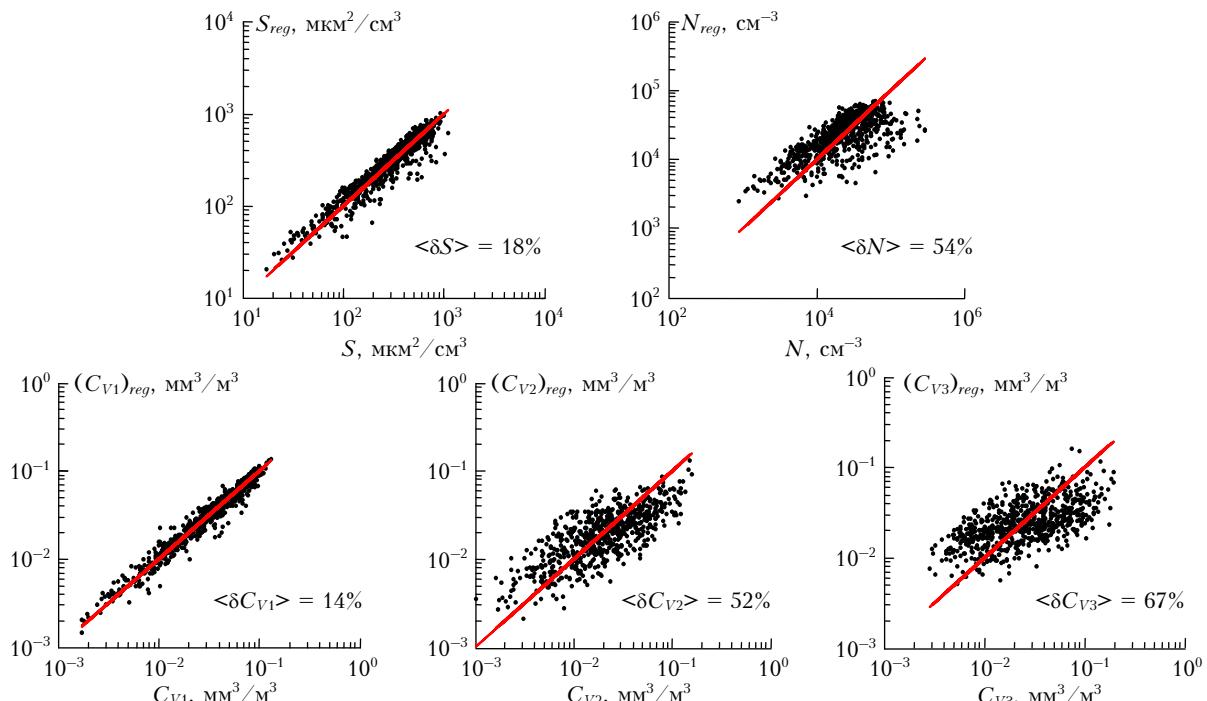


Рис. 1. Результаты восстановления интегральных микрофизических параметров аэрозоля с использованием уравнения (4) при наложении на значения оптических характеристик случайных погрешностей в пределах 10%

$$\mathbf{x} = \mathbf{a} + B\mathbf{y}, \quad (4)$$

где $\mathbf{x} = (\ln C_{V1} \ln C_{V2} \ln C_{V3} \ln N \ln S)^+$ – вектор искомых интегральных микрофизических параметров (ИМП); $\mathbf{y} = [\ln \epsilon(\lambda_1) \ln \epsilon(\lambda_2) \ln \beta_\pi(\lambda_1) \ln \beta_\pi(\lambda_2) \ln \beta_\pi(\lambda_3)]^+$ – вектор измерений ОХ, $\lambda_1 = 355 \text{ нм}$, $\lambda_2 = 532 \text{ нм}$, $\lambda_3 = 1064 \text{ нм}$;

$$\mathbf{a} = (a_k) = (-3,6113 - 2,6829 - 1,4768 5,789 10,673)^+;$$

$$B = (b_{kj}) =$$

$$\begin{bmatrix} 2,3446 & -1,2051 & -0,5783 & 0,4977 & -0,0675 \\ -2,3892 & 3,5087 & -1,0622 & 0,3486 & 0,3042 \\ -1,1746 & 1,6250 & -0,4218 & -0,9108 & 1,3850 \\ 1,6432 & -0,5830 & -0,6798 & 0,5364 & -0,0206 \\ 1,4496 & -0,6954 & -0,7479 & 0,8161 & -0,0741 \end{bmatrix}.$$

Коэффициенты a_k и b_{kj} получены с использованием метода наименьших квадратов. В (4) используются логарифмы x_k и y_j , так как в этом случае мы имеем дело с числами одного порядка, а абсолютная ошибка логарифма дает оценку относительной ошибки самой величины.

С использованием уравнения (4) оценены погрешности восстановления ИМП для 1000 реализаций характеристик аэрозоля. Для каждой реализации по (4) для заданного набора измеряемых ОХ (вектора \mathbf{y}), с учетом добавления в расчетные значения ОХ случайных погрешностей измерения (10%), рассчитывались значения ИМП, которые сравнивались с заданными значениями. После перебора всех реализаций вычислялись среднеквадратические по ансамблю характеристики погрешности восстановления.

Результаты восстановления ИМП в различных атмосферных ситуациях представлены на рис. 1.

На осях ординат отложены заданные значения ИМП, а на осях абсцисс – их значения, полученные из уравнения (4) при наложении на ОХ случайных погрешностей в пределах 10%. Также указаны средние по выборке погрешности определения искомых параметров.

Несмотря на то что в отдельных атмосферных ситуациях погрешности определения некоторых ИМП могут достигать сотни процентов, их средние значения, ввиду широких диапазонов возможных значений параметров (3 порядка и более), являются вполне приемлемыми для удовлетворения практических потребностей как экологических, так и климатических задач. При этом важное значение имеет то, что полученное регрессионное уравнение (4) носит универсальный характер (показывается ниже), т.е. позволяет без использования априорной информации определять параметры как городских, так и фоновых аэрозолей. Очевидно, что при меньших диапазонах изменений микрофизических параметров, которые могут быть заложены в модель с учетом особенностей конкретного географического региона, или при наличии данных сопутствующих оптическим микрофизическим измерений, параметры аэрозоля можно определять и с более высокой точностью.

Полученные нами регрессионные уравнения были опробованы для выборки ОХ, накопленной на одной из станций AERONET (г. Минск). Поскольку оптические характеристики, получаемые на станциях AERONET на основе измерений оптической толщины атмосферы и угловой зависимости яркости неба, являются интегральными по всему слою атмосферы, то имеет смысл проводить сравнение лишь для независящих от полной концентрации частиц аэрозоля параметров и работать с безразмерными комбинациями оптических характеристик (например, с их отношениями на разных длинах волн). Сравнение производилось по следующим микрофизическим параметрам: относительное содержание в объеме мелких частиц

$$L = (C_{V1} + C_{V2}) / \sum_{i=1}^3 C_{Vi} = 1 - \left[C_{V3} / \sum_{i=1}^3 C_{Vi} \right]$$

и эффективный размер частиц

$$r_{32} = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^3 \frac{dN}{d\ln r} d\ln r / \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^2 \frac{dN}{d\ln r} d\ln r.$$

Регрессионные уравнения для этих параметров и оптических характеристик, определяемых лидаром комбинационного рассеяния [28, 29], полученные с использованием модели аэрозоля, имеют вид

$$\begin{aligned} L &= -0,0821 + 0,2490 \frac{\varepsilon(\lambda_1)}{\varepsilon(\lambda_2)} + \\ &+ 0,0108 \frac{\beta_\pi(\lambda_1)}{\beta_\pi(\lambda_2)} + 0,1804 \frac{\beta_\pi(\lambda_2)}{\beta_\pi(\lambda_3)}; \\ r_{32} &= 0,881 - 0,2697 \frac{\varepsilon(\lambda_1)}{\varepsilon(\lambda_2)} - \end{aligned} \quad (5)$$

$$-0,0100 \frac{\beta_\pi(\lambda_1)}{\beta_\pi(\lambda_2)} - 0,0972 \frac{\beta_\pi(\lambda_2)}{\beta_\pi(\lambda_3)}.$$

Для сравнения аналогичные уравнения получены также и по массиву данных AERONET [34]:

$$\begin{aligned} L &= -0,0372 + 0,0735 \frac{\varepsilon(\lambda_1)}{\varepsilon(\lambda_2)} + \\ &+ 0,2839 \frac{\beta_\pi(\lambda_1)}{\beta_\pi(\lambda_2)} + 0,1054 \frac{\beta_\pi(\lambda_2)}{\beta_\pi(\lambda_3)}; \\ r_{32} &= 0,8011 - 0,2933 \frac{\varepsilon(\lambda_1)}{\varepsilon(\lambda_2)} + \\ &+ 0,0610 \frac{\beta_\pi(\lambda_1)}{\beta_\pi(\lambda_2)} - 0,0862 \frac{\beta_\pi(\lambda_2)}{\beta_\pi(\lambda_3)}. \end{aligned} \quad (6)$$

Следует отметить, что интегральные коэффициенты направленного рассеяния непосредственно не измеряются, а рассчитываются по формуле

$$\beta(\theta, \lambda) = g(\theta, \lambda) \tau(\lambda) \Lambda(\lambda),$$

где $\tau(\lambda)$, $g(\theta, \lambda)$ и $\Lambda(\lambda)$ – соответственно оптическая толщина, индикаторика рассеяния и вероятность выживания фотона, которые рассчитываются по микроструктуре аэрозоля, восстановленной путем интерпретации данных исходных измерений AERONET, и приведены для различных регионов в [34]; θ – угол рассеяния.

На рис. 2 представлены результаты восстановления L и r_{32} с использованием уравнений (5) и (6).

Видно хорошее соответствие наших результатов данным AERONET, что свидетельствует об их общности и универсальности.

Заключение

Итак, «модель оптических характеристик аэрозолей приземного слоя», преобразованная в статистическую микрофизическую, позволяет при ее использовании получать конкретные значения 15 параметров, по которым рассчитываются требуемые оптические аэрозольные характеристики. Для удобства анализа вариаций введено понятие «вариационные коэффициенты». Универсальный алгоритм (и соответствующий компьютерный код), созданный в результате работы, использован для анализа информативности измерений оптических характеристик атмосферного аэрозоля относительно возможности восстановления его микрофизических параметров. Показана их высокая информативность относительно вариаций вещественной части КПП аэрозольного вещества и параметров функции распределения аэрозольных частиц по размерам в условиях самых различных аэрозольных оптических экспериментов с учетом особенностей реальной аппаратуры, в частности для конкретных лидарных измерений. Однако указанные измерения практически не дают возможности определять счетную концентрацию аэрозольных частиц.

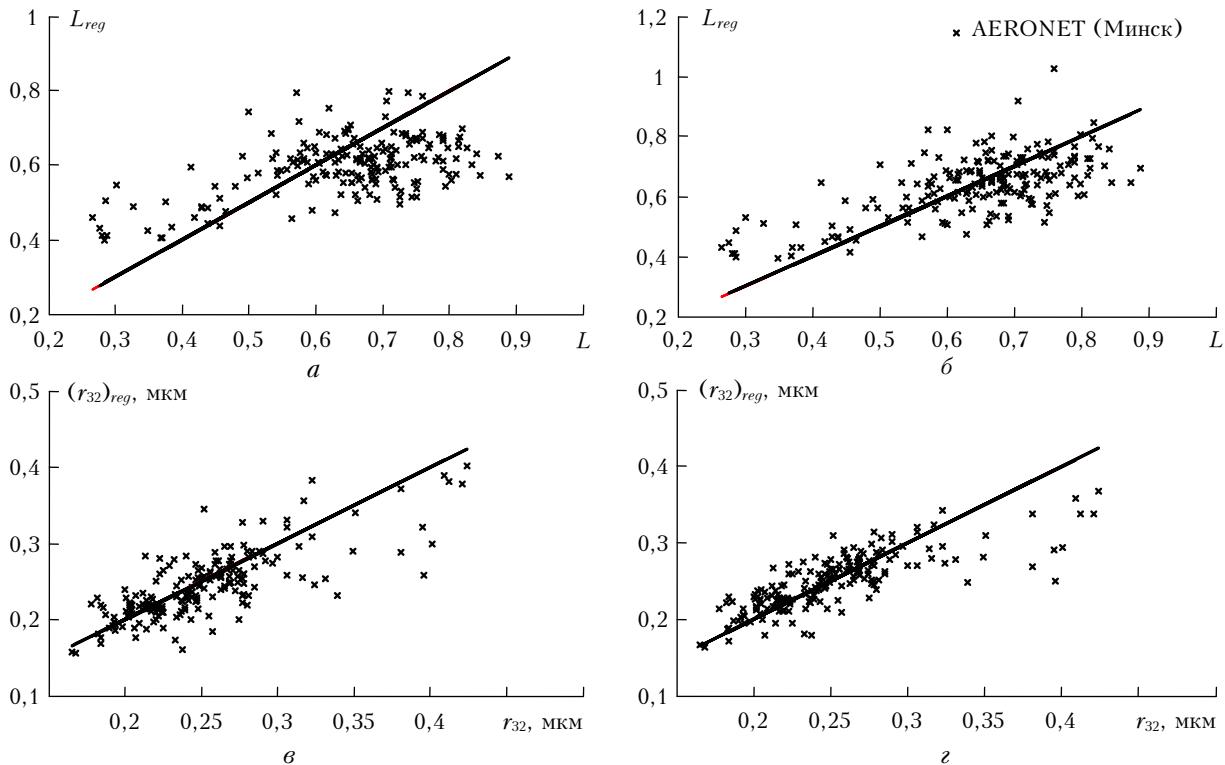


Рис. 2. Результаты восстановления микрофизических характеристик аэрозоля с использованием регрессионных уравнений (5) – (a, α) и (6) – (β, ε)

Для восстановления микрофизических параметров аэрозольных частиц по лидарным измерениям их оптических характеристик приведены конкретные параметры формул линейной регрессии.

Работа выполнена в рамках совместного Российско-белорусского гранта РФФИ № 08-05-90008 Бел_а.

1. Кондратьев К.Я., Ивлев Л.С., Кративин В.Ф. Свойства, процессы образования и последствия воздействия атмосферного аэрозоля: от нано- до глобальных масштабов. СПб.: Изд-во «ВВМ», 2007. 860 с.
2. Зуев Е.Е., Креков Г.М. Оптические модели атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1986. 256 с.
3. Креков Г.М., Рахимов Р.Ф. Оптические модели атмосферного аэрозоля. Томск: Изд-е Томского филиала СО АН СССР, 1986. 294 с.
4. Креков Г.М., Звенигородский С.Г. Оптическая модель средней атмосферы. Новосибирск: Наука, 1990. 278 с.
5. d'Almeida G.A., Koepke P., Shettle E. Atmospheric aerosol: global climatology and radiative characteristics. Hampton, USA. A. Deepak Publication, 1991. 549 р.
6. Андреев С.Д., Ивлев Л.С. Моделирование оптических характеристик аэрозолей приземного слоя атмосферы в области спектра 0,3–15 мкм. Часть 1. Принципы построения модели // Оптика атмосф. и океана. 1995. Т. 8. № 5. С. 788–795.
7. Андреев С.Д., Ивлев Л.С. Моделирование оптических характеристик аэрозолей приземного слоя атмосферы в области спектра 0,3–15 мкм. Часть 2. Модель состава и структуры аэрозолей // Оптика атмосф. и океана. 1995. Т. 8. № 8. С. 1227–1235.
8. Андреев С.Д., Ивлев Л.С. Моделирование оптических характеристик аэрозолей приземного слоя атмосферы

в области спектра 0,3–15 мкм. Часть 3. Результаты моделирования // Оптика атмосф. и океана. 1995. Т. 8. № 8. С. 1236–1243.

9. Kneizis F.X., Abreu L.W., Anderson G.P., Chetwynd G.H., Shettle E.P., Berk A., Bernstein L.S., Robertson D.S., Acharya P., Rothman L.S., Selby J.E.A., Gallery W.O., Clouth S.A. The Modtran 2/3. Report and Lowtran 7 model. Phillips Laboratory, Hanscon, Massachusetts. 1996. 230 p.
10. Васильев А.В., Ивлев Л.С. Оптическая статистическая модель атмосферы для района Ладожского озера // Оптика атмосф. и океана. 2000. Т. 13. № 2. С. 198–203.
11. Ивлев Л.С., Васильев А.В., Белан Б.Д., Панченко М.В., Терпугова С.А. Оптико-микрофизические модели городских аэрозолей // Третья Междунар. конф. «Естественные и антропогенные аэрозоли»: Сб. трудов. Санкт-Петербург, 24.09–27.09.2001. СПб.: Изд-во НИИХ СПбГУ, 2003. С. 161–170.
12. Исаков А.А., Бегунов С.Л., Головягинский С.А., Тихонов А.В. Спектрополяриметрические исследования натурных аэрозолей // Оптика атмосф. и океана. 1999. Т. 12. № 6. С. 556–561.
13. Розенберг Г.В., Горчаков Г.И., Георгиевский Ю.С., Любовцева Ю.С. Физика атмосферы и проблемы климата. М.: Наука, 1980. 320 с.
14. Чавро А.И., Георгиевский Ю.С., Малкевич М.С., Шукров А.Х. Связь между статистическими характеристиками, спектральной структурой ослабления радиации и метеорологическими параметрами // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. 1978. Т. 14. № 2. С. 157–169.
15. Кугейко М.М., Лысенко С.А. Уравнения множественной регрессии для фракционных концентраций атмосферного аэрозоля и спектральных значений коэффи-

- циента ослабления // Ж. прикл. спектроск. 2006. Т. 73. № 6. С. 807–812.
16. Кугейко М.М., Лысенко С.А. Спектро-корреляционный метод измерения фракционного состава аэродисперсных сред с реализацией измерительного и вычислительного алгоритмов // Измерительная техника. 2008. № 3. С. 53–57.
 17. Кугейко М.М., Лысенко С.А. Определение параметров атмосферных аэрозолей по данным Раман-лидара // Лазерная физика и оптические технологии: Сб. науч. трудов VII Междунар. науч. конф., Минск, 17–19 июня 2008 г. Минск: Изд-во Ин-та физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, 2008. С. 235–238.
 18. Васильев А.В. Об использовании аналитических выражений при аппроксимации экспериментально измеренных функций распределения аэрозольных частиц по размерам // Третья Междунар. конф. «Естественные и антропогенные аэрозоли»: Сб. трудов. Санкт-Петербург, 24.09–27.09.2001. СПб.: Изд-во НИИХ СПбГУ, 2003. С. 98–103.
 19. Васильев А.В. Универсальный алгоритм расчета оптических характеристик однородных сферических частиц. I. Одиночные частицы // Вестн. СПбГУ. Сер. 4. 1996. Вып. 4 (№ 25). С. 3–11.
 20. Васильев А.В. Универсальный алгоритм расчета оптических характеристик однородных сферических частиц. II. Ансамбли частиц // Вестн. СПбГУ. Сер. 4. 1997. Вып. 1 (№ 4). С. 14–24.
 21. Васильев А.В., Мельникова И.Н. Коротковолновое солнечное излучение в атмосфере Земли. Расчеты. Изменения. Интерпретация. СПб.: Изд-во НИИХ СПбГУ, 2002. 388 с.
 22. Тимофеев Ю.М., Васильев А.В. Теоретические основы атмосферной оптики. СПб.: Наука, 2003. 474 с.
 23. Рахимов Р.Ф., Панченко М.В. Об однопараметрической модели атмосферной изменчивости угловых функций аэрозольного светорассеяния // Оптика атмосф. и океана. 1999. Т. 12. № 2. С. 109–120.
 24. Тимофеев Ю.М., Поляков А.В. Математические аспекты решения обратных задач атмосферной оптики. СПб.: Изд-во СПб. ун-та, 2001. 188 с.
 25. Busenberg J., Ansmann A., Baldasano J., Balis D., Buckman C., Calpini B., Chaikovsky A., Flamant P., Hagard A., Mitev V., Papayannis A., Pelon J., Resendes D., Schneider J., Trickle T., Vaughan G., Vis-
- conti G., Wiegner M. // Advances in laser remote sensing. Selected papers 20-th Int. Lader Radar Conference (ILRC) (Vichi, France, 2000). P. 155–158.*
26. Murayama T., Sugimoto N., Matsui I., Lio Zh., Sakai T., Shibata T., Iwasaka Y., Won J.G., Yoon S.C., Zhou T., Li J., Hu H. // Advances in laser remote sensing. Selected papers 20-th Int. Lader Radar Conference (ILRC) (Vichi, France, 2000). P. 169–177.
 27. Чайковский А.П., Иванов А.П., Балин Ю.С., Ельников А.В., Тулинов Г.Ф., Плюснин И.И., Букин О.А., Чен Б.Б. Лидарная сеть CIS-LiNet для мониторинга аэрозоля и озона: методология и аппаратура // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 18. № 12. С. 1066–1072.
 28. Ельников А.В., Бурлаков В.Д., Долгий С.И., Зуев В.В., Невзоров А.В., Плюснин И.И., Сысоев С.М., Бушмелева К.И., Черный М.С. Лидарная система для зондирования аэрозоля в г. Сургут в рамках проекта CIS-LiNet // Оптика атмосф. и океана. 2006. Т. 19. № 11. С. 982–985.
 29. Самохвалов И.В., Бобровников С.М., Гейко П.П., Ельников А.В., Кауль Б.В. Развитие высотного лидара Томского государственного университета как уникального комплекса для мониторинга атмосферы // Оптика атмосф. и океана. 2006. Т. 19. № 11. С. 995–999.
 30. Veselovskii I., Kolgotin A., Griaznov V., Muller D., Franke K., Whiteman D.N. Inversion of multiwavelength Raman lidar data for retrieval of bimodal aerosol size distribution // Appl. Opt. 2004. V. 43. Iss. 5. P. 1180–1195.
 31. Veselovskii I., Kolgotin A., Muller D., Whiteman D.N. Information content of multiwavelength lidar data with respect to microphysical particle properties derived from eigenvalue analysis // Appl. Opt. 2005. V. 44. Iss. 25. P. 5292–5303.
 32. Васильев А.В., Ивлев Л.С. Численное моделирование спектральной аэрозольной индикаторы рассеяния света // Оптика атмосф. и океана. 1996. Т. 9. № 1. С. 129–133.
 33. Чайка А.М., Тимофеев Ю.М., Поляков А.В. Стратосферный аэрозоль по данным измерений аппаратуры SAGE III // Исслед. Земли из космоса. 2007. № 2. С. 10–18.
 34. <http://aeronet.gsfc.nasa.gov>. Данные сети AERONET, 2009.

A.V. Vasilyev, L.S. Ivlev, M.M. Kugeiko, S.A. Lisenko, N.Yu. Terekhin. The measurement accuracy estimation in the tasks of microphysical aerosol parameter diagnostics.

The application of accumulated a priori information about atmospheric aerosols to the tasks of information analysis of different aerosol optical characteristics of measurements for aerosol microphysical parameters is considered. The necessity of simulation of some variation of aerosol microphysical parameters describing the real variability is noted. A statistical microphysical aerosol model of near-ground layer based on these principal is proposed. Variation coefficients for optical aerosol characteristics and microphysical parameters are calculated by this model. These coefficients organized as the computer database and appropriate computer code. We can use these tools in different tasks of information analysis of aerosol optical characteristic measurements, in particular, for estimation of necessary accuracy of synchronous (control) microphysical measurements. For example, some estimation of particular lidar measurements are considered. For these measurements a regression ratio between optical and microphysical aerosol characteristics is carried out based on this model and numerical simulations. A good agreement between the results of aerosol parameter retrieval on this regression ratio and appropriate AERONET web data is shown.