С. Л. Ощепков, Д. М. Онопко

К РЕШЕНИЮ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В ЛАЗЕРНОЙ ДИАГНОСТИКЕ АТМОСФЕРЫ

Развитие методов и потребностей мониторинга атмосферных объектов требует дальнейшего совершенствования методов решения обратных задач. Разрабатываемые методы должны включать возможности анализа информационного содержания измерений, описывать вклад априорных оценок искомых величин в информационное содержание опорных оптических измерений.

Постановка обратной задачи определения ФРЧ из спектральных измерений ослабления

Обратная задача определения функции распределения частиц (ФРЧ) по размерам из спектральных измерений ослабления в приближении однократного рассеяния излучения может быть сформулирована в виде интегральных уравнений, записанных для набора длин волн света λ_j $(j=1, 2, \ldots, m)$

$$k_j = k(\lambda_j) = \int_0^{\infty} \alpha_v(\lambda_j, m(\lambda_j), r)\frac{dV}{d\ln r}d\ln r, \qquad (1)$$

где k_j – коэффициент ослабления излучения элементарным объемом дисперсной среды на длине волны λ_j; α_v – объемный коэффициент ослабления излучения отдельной частицей радиуса r (нормированная величина) с комплексным показателем преломления $m(\lambda_j)$; $dV/d\ln r$ – функция распределения объемов частиц по логарифмам размеров.

При численном решении уравнения типа (1) без существенной потери общности рассмотрения обычно сводят к системе линейных алгебраических уравнений

$$k_j = \sum_{i=1}^{n} K_{ji}\varphi_i, \qquad (2)$$

где $i=1, 2, \ldots, n$; $n \leq m$; $\varphi_i = dV(\ln r_i)/d\ln r$ – значения функции распределения в узлах алгебраизации по размеру частиц; K_{ji} – элементы матрицы алгебраизации.

В случае набора экспериментальных результатов измерений $k_j^* = k^*(\lambda_j)$ систему уравнений можно записать в виде

$$\bar{k}^* = K\bar{\varphi} + \Delta\bar{k}, \qquad (3)$$

где K – матрица алгебраизации размерности $m \times n$, $\bar{k}^*$ и $\bar{\varphi}$ – векторы, определенные компонентами k_j и φ_i, $\Delta\bar{k}$ – вектор ошибок действительной реализации k_j, вызванных случайными погрешностями измерений

В предположении, что ошибки оптических измерений распределены по нормальному закону и статистически независимы, ковариационная матрица случайных величин $\bar{k}^*$ имеет вид

$$C^2(\bar{k}^*) = I_m \varepsilon_0^2, \tag{4}$$

где I_m – единичная матрица размерности $m \times m$; ε_0^2 – дисперсия ошибки оптических измерений.

Тогда решение (3) методом наименьших квадратов приводит к следующему выражению для дисперсии оценки φ_i [1]

$$D^2(\bar{\varphi}_i) = (K^T K)_{ii}^{-1} \varepsilon_0^2, \tag{5}$$

где $(...)^T$ означает транспонирование, а $(...)^{-1}$ - операцию инверсии матрицы.

Величины $D^2(\bar{\varphi}_i)$ выражаются через диагональные элементы матрицы, обратной информационной матрице Фишера Φ, которая при сделанных предположениях имеет следующие элементы

$$\Phi_{ik} = \frac{(K^T K)_{ik}}{\varepsilon_0^2}$$

или

$$\Phi_{ik} = \frac{\bar{K}_i^T \bar{K}_k}{\varepsilon_0^2} = \frac{1}{\varepsilon_0^2} \|\bar{K}_i\| \, \|\bar{K}_k\| \cos(\bar{K}_i, \bar{K}_k), \tag{6}$$

где $\bar{K}_j$ – j-й вектор-столбец матрицы K; $\|\bar{K}_i\|$ – норма вектора $\bar{K}_i$.

В соответствии с [2], нормы $\|\bar{K}_i\|$ и $\|\bar{K}_k\|$ описывают чувствительности измерений $\bar{k}^*$ к вариациям параметров φ_i и φ_k соответственно, а $\rho_{ik} = \cos(\bar{K}_i, \bar{K}_k)$ представляют собой коэффициенты корреляции между чувствительностями $\|\bar{K}_i\|$ и $\|\bar{K}_k\|$.

Выражение (6) содержит два простых фактора изменения информации [2]. Эти факторы: ошибки измерений и ограниченное число $m' \geq n$ наиболее независимых оптических измерений, которые обеспечивают минимальные значения величин ρ_{ik}. Другие значения $k^*(\lambda_j)$ ($j = 1,...,m - m'$) могут играть роль фоновой информации, которая присутствует, например, при излишней дискретизации диапазона длин волн, используемого в измерениях показателя ослабления света. Эти факторы можно исключить, если разделить $D^2(\tilde{\varphi}_i)$ на величину $\left\langle \varepsilon^2 \right\rangle$, равную ε_0^2 / m. В результате получим [2, 3]

$$(\delta\overline{\varphi}_i)^2 = \frac{D^2(\overline{\varphi}_i)}{\left\langle \varepsilon^2 \right\rangle} = m(K^T K)_{ii}^{-1}. \tag{7}$$

Здесь $\delta\overline{\varphi}_i$ – коэффициент, характеризующий степень усиления первоначальной ошибки измерений показателя ослабления в процессе решения обратной задачи. Так как величина $1/\left\langle \varepsilon^2 \right\rangle$ характеризует суммарную точность измерений, то с уменьшением $\delta\overline{\varphi}_i$ повышается информативность набора измеренных значений k_i^* по отношению к параметрам функции распределения φ_i.

В дальнейшем вместо k_i^* и φ_i будут использоваться логарифмы этих величин. Это означает, что в этом случае значения ε_0 следует рассматривать как относительную ошибку оптических измерений, а значения $D^2(\overline{\varphi}_i)$ – как относительную ошибку определения параметров φ_i.

Целесообразность перехода к логарифмическому представлению измеряемых и искомых величин обуславливается следующими причинами:

- Описание статистики исходных данных логарифмически-нормальным законом отвечает их положительной определенности. Такими величинами являются измеряемые световые потоки и параметры микроструктуры. Предположение о логарифмически-нормальной функции плотности вероятности исходных данных согласуется с экспериментальными статистическими наблюдениями больших случайных вариаций положительных по своей природе величин и представляет собой наиболее естественный путь учета априорной информации о неотрицательности искомых решений.
- При малых ошибках измерений диагональные элементы их ковариационной матрицы становятся квадратами относительно ошибок измерений. Это позволяет свести к минимуму последствия традиционного исключения весовой матрицы, особенно при больших динамических диапазонах изменения измеряемых величин.

Для практического анализа информативности измерений спектров ослабления удобно использовать следующую параметризацию ФРЧ [2]: r_v – наиболее вероятный или модальный радиус частиц, который характеризует положение максимума ФРЧ; δ_v – относительная полуширина, равная отношению абсолютной полуширины ФРЧ к r_v; C_v – объемная концентрация частиц, которая определяет условие нормировки выбранной ФРЧ

$$C_v = \int_0^\infty \frac{dV}{d\ln r} d\ln r \tag{8}$$

Следует отметить, что зависимости $\ln k_j(\ln\delta_v, \ln r_v, \ln C_v)$ в общем случае носят нелинейный характер. Предположим однако, что линейная зависимость имеет место в некоторой окрестности $\Delta\ln\delta_v$, $\Delta\ln r_v$ и $\Delta\ln C_v$ истинных значений параметров ФРЧ. Это соответствует первому приближению разложения $\ln k_j(\ln\delta_v, \ln r_v, \ln C_v)$ в ряд Тейлора. Тогда элементы матрицы K, которая в случае выбранной выше параметризации ФРЧ имеет размерность $m\times 3$, выглядят следующим образом:

$$K_{jr_v} = K_{j1} = \frac{\partial \ln k_j}{\partial \ln r_v};\ K_{j\delta_v} = K_{j2} = \frac{\partial \ln k_j}{\partial \ln \delta_v};\ K_{jC_v} = K_{j3} = \frac{\partial \ln k_j}{\partial \ln C_v}. \tag{9}$$

Выражения (7) и (9) будут использоваться ниже для количественного анализа информативности измерений показателя ослабления света относительно указанных параметров ФРЧ.

Математическая процедура и алгоритм моделирования

Задача восстановления размеров частиц из измерений спектрального ослабления, как уже отмечалось выше, может быть сформулирована в виде интегральных уравнений (1). В качестве определяемой ФРЧ фигурирует распределение частиц по размерам

$$v(\ln r) = \frac{dV}{d\ln r}, \tag{12}$$

описывающее объем частиц dV, с размерами от $\ln r$ до $\ln r + d\ln r$ в единице объема дисперсной системы и удовлетворяющее условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} v(\ln r) d\ln r = C_v. \tag{13}$$

Выражение (1) рассматривается как основное интегральное уравнение для восстановления функции распределения $v(\ln r)$ по результатам измерения $k^*(\lambda_j)$ для заданного набора длин волн λ_j ($j = 1, 2, \ldots, m$).

Рассмотрим математическую процедуру и алгоритм решения обратной задачи. Полное описание метода содержится в работах [3, 4]. Здесь мы ограничимся изложением ключевых положений метода и приведем алгоритм, используемый при выполнении настоящей работы. Используемый метод развит в рамках теории статистического оценивания и базируется на предположении о логарифмически-нормальной функции плотности вероятности как для измеряемых, так и для искомых величин. Таким образом, он позволяет учесть положительно-определенный характер измеряемых оптических характеристик и определяемых параметров микроструктуры наиболее естественным путем.

В соответствии с предположением о логарифмически нормальной функции плотности вероятности для измеряемых $\bar{k}^*$ и искомых $\bar{\varphi}$ величин, целесообразно перейти от (3) к рассмотрению системы нелинейных алгебраических уравнений вида

$$\bar{f}^* = \bar{f}(\bar{a}) + \bar{\xi}, \tag{14}$$

где $\left\{\bar{f}^*\right\}_j = \ln\left\{\bar{k}^*\right\}_j$, $\{\bar{a}\}_i = \ln\{\bar{\varphi}\}_i$, $\left\{\bar{f}(\bar{a})\right\}_j = \ln K_{ji}\exp\{\bar{a}\}_i$, $\bar{\xi}$ – вектор-столбец ошибок измерения $\bar{f}^*$, которые определяются, согласно сделанным предположениям, нормальной статистикой.

Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений (14) предлагается использовать двойной итерационный процесс [3, 4]. Данный процесс является результатом совмещения основной процедуры поиска решения и итерационного процесса обращения матрицы. Указанная комбинация позволяет значительно повысить стабильность поиска решения. Это особенно важно при большом числе искомых параметров микроструктуры, что имеет место в нашем случае.

Учитывая возможность использования ограничений, связанных со "сглаживанием" функции распределения частиц, основная итерационная формула метода может быть записана в следующем виде:

$$\bar{a}^{q+1} = \bar{a}^q - H^q\left\{\left[U^q\right]^T\left(\bar{f}^q - \bar{f}^*\right) + \gamma\,\Omega\,\bar{a}^q\right\}, \tag{15}$$

где H^q – диагональная матрица

$$H^q_{ii'} = \left(\left|\left\{\left[U^q\right]^T U^q + \gamma\,\Omega + \gamma\,I\right\}_{ii'}\right|\right)^{-1}\delta_{ii'}, \tag{16}$$

U^q – матрица с элементами

$$\left\{U^q\right\}_{ji} = \left.\frac{\partial f_j(\bar{a})}{\partial a_i}\right|_{\bar{a}^q,\bar{a}^q}, \tag{17}$$

I – единичная матрица с размерностью n; Ω – матрица гладкости с размерностью n, которая используется для ограничения вариаций вторых производных искомого решения; q – номер итерации; $\delta_{ii'}$ – символ Кронекера. В рамках статистического подхода параметр гладкости γ однозначно определяется гладкостью ожидаемых решений. В частности, выражения (14), (15) записаны для равноточных оптических измерений k^*_j.

Отметим, что важным достоинством метода является то, что он может быть сведен к хорошо известным методам Филипса [5] и Шахине [6] при определенных предположениях. Для метода Филипса [5] эти предположения связаны с асимптотическим переходом от логарифмически нормальной функции плотности вероятности погрешностей измерений в нормальную и с равенством числа искомых и измеряемых величин для метода Шахине [6].

Точность решения обратной задачи анализируется путем проведения численных экспериментов по следующей схеме. Некоторые функции распределения берутся как "истинные" $(v'(\ln r))$ и для них по формуле (1) рассчитываются "измеряемые" спектральные зависимости показателя ослабления $k^*(\lambda_j)$. Погрешности оптических измерений носят случайный характер с нулевым средним и одинаковой дисперсией ε_0^2 величин ξ_j.

Алгебраизация интегрального уравнения (1) при вычислении матрицы в формуле (3) проводится по формулам трапеций на сетках равноотстоящих значений $\ln r_i$:

$$K_{ji} = \frac{1}{4}\int\limits_{\ln r_{i-1}}^{\ln r_i} a_i \frac{\alpha_v(kr, m(r))}{\pi r^3} d\ln r + \frac{1}{4}\int\limits_{\ln r_i}^{\ln r_{i+1}} b_i \frac{\alpha_v(kr, m(r))}{\pi r^3} d\ln r,$$

где

$$a_i = \frac{\ln r - \ln r_i}{\ln r_i - \ln r_{i-1}}, b_i = \frac{\ln r_{i+1} - \ln r}{\ln r_{i+1} - \ln r_i}, (a_1 = b_n = 0),$$

r_{i-1}, r_i, r_{i+1} – соседние узловые точки значений радиуса частиц.

Затем итерационным методом (15) решается обратная задача и восстановленные распределения $\hat{v}(\ln r)$ сравниваются с истинными распределениями $v'(\ln r)$. По результатам восстановления функций распределения частиц контролируется точность оценок интегральных параметров: концентрации (13) и среднего объемно-поверхностного или эффективного размера частиц, определяемого по формуле:

$$R_{eff} = \frac{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} v(\ln r) d\ln r}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} r^{-1} v(\ln r) d\ln r} \qquad (18)$$

Заключение

Предлагаемый в работе статистический подход при решении обратных задач светорассеяния имеет ряд достоинств. Так, при одновременном рассмотрении статистических свойств результатов оптических измерений и априорных оценок искомых величин данный подход позволяет:

- устранить субъективизм при внесении априорной информации;
- придать понятию устойчивости решения обратной задачи строгие количественные критерии;
- на основе метода максимального правдоподобия строить оптимальные процедуры решения обратной задачи.

Предлагаемая теория может быть использована при создании математического обеспечения и конструировании многоцелевой и специализированной аппаратуры лазерного контроля и диагностики, предназначенной для решения разнообразных задач экологического мониторинга атмосферных объектов.

Литература

1. Линник Ю. В. Метод наименьших квадратов и основы теории обработки наблюдений. – М: Гос. изд. физ. - мат. лит., 1958. – 185с.
2. Oshchepkov S. L., Dubovik O. V. Specific features of the method of laser diffraction spectromerty in the condition of anomalous diffraction // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1993. – Vol. 26. – P. 728 – 732.
3. Dubovik O. V., Lapyonok T. V., Oshchepkov S. L. Impruved technique for data invertion: optical sizing of multicomponent aerosols // Appl. Opt. – 1995. - Vol. 34, N36. – P. 8422 – 8436.
4. Dubovik O. V., Lapyonok T. V., Oshchepkov S. L. Impruved numerical technique for experimental data invertion: optical sizing of multicomponent aerosols // 4th International Congress Optical Particle Sizing. Nurnberg. Germany. – 1995. – P. 107 – 116
5. Phillips B. L. A technique for numerical solution of certain integrai equation of first kind // J. Assoc. Comp. Mach. – 1962. – Vol. 9. – P.84 – 97.
6. Chahine M. T. Determination of the temperature profile in an atmosphere from its outgoing radiance // J. Opt. Soc. Am. – 1968. – Vol. 58. – P. 1634 –1637.