

从光波的衰减测量决定大气 气溶胶的谱分布*

陶 荣 甲

提 要

本文对从光波的衰减测量决定大气气溶胶谱分布进行理论研究。应用泛函理论,证明了在消光截面取 Van de Hulst 近似公式时,第一类 Fredholm 积分方程有唯一解。从而确证频谱法探测大气气溶胶是可能的。同时还研究了这种探测的反演计算、误差分析、有效信息量 and 如何选择最优波段等问题。

一、引 言

根据大气气溶胶对光波的散射、衰减,决定气溶胶的浓度和谱分布,这是探测大气气溶胶的一个重要方法。频谱法探测气溶胶,最后归结为求解一个第一类 Fredholm 积分方程。对方程进行理论分析,确证它是否有唯一解,研究如何进行反演计算和误差分析,都是大气遥感探测中十分关心的问题。

近年来,国外利用频谱法探测气溶胶的工作虽然很多,但是主要限于:测定浓度和平均半径^[1],或者根据假定的谱分布模式决定气溶胶尺度分布参数^[2]。关于积分方程是否存在唯一解的理论分析还没有人做过,对于频谱法探测气溶胶的其他理论问题也还没有详尽的讨论。

为此,本文首先根据泛函理论,证明在消光截面取 Van de Hulst 近似公式时,积分方程有唯一解,从而确证频谱法探测气溶胶是可能的。接着讨论反演计算、误差分析、有效信息量和选择最优波段等理论问题。

二、积分方程有唯一解的证明

假设球形气溶胶粒子,在半径 r 和 $r + dr$ 之间的粒子数浓度 $dN = f(r)dr$, 对波数 $k = 1/\lambda$ 的光波消光截面是 $C(k, r)$ 。由实验测定,气溶胶半径一般分布在亚微米到数微米之间。若用 b, a 记最大和最小半径,则 $b > a > 0$ 。气溶胶对光波的衰减系数为

$$\sigma(k) = \int_a^b C(k, r)f(r)dr. \quad (1)$$

(1) 式就是一个第一类 Fredholm 积分方程。频谱法探测气溶胶的可能性就在于积分方程(1)是否存在唯一解。很显然,只有积分方程(1)有唯一解,探测才能得到真实的气溶

* 1978年12月25日收到。

胶谱分布 $f(r)$.

下面证明积分方程(1)确有唯一解.

从实验测到的衰减系数 $\sigma(k)$ 是 k 的连续函数. 未知函数 $f(r)$ 属于 $L_2[a, b]$ 空间, 即满足

$$\|f(r)\|^2 = \int_a^b |f(r)|^2 dr < N^2 < +\infty, \quad (2)$$

符号 $\|f(r)\|$ 表示 $f(r)$ 的模, N 是常数. 事实上, 因为根据谱分布 $f(r)$ 的物理意义, 它在 $[a, b]$ 上有界, 有界函数是 $L_2[a, b]$ 空间中的一个子空间, 所以(2)式是满足的.

消光截面 $C(k, r)$ 是方程(1)的核函数. 从 Mie 精确散射公式计算 $C(k, r)$ 很繁杂. Van de Hulst 近似公式^[3]能相当好地近似 Mie 公式, 所以在我们的讨论中 $C(k, r)$ 取 Van de Hulst 近似公式. 气溶胶对近紫外到近红外光波的衰减主要是由于气溶胶对光的散射, 吸收很小. 根据 R. A. McClatchey^[4] 等人近年的测定, 例如对于波长从 $0.300 \mu\text{m}$ 到 $1.2 \mu\text{m}$ 的辐射, 气溶胶折射率 $n - in'$, 实部 $n \doteq 1.530$, 虚部 n' 很小, 约在 0.008 左右. 因此忽略吸收, 认为 $n' \doteq 0$, 在消光截面计算中只引起很小的误差.

$$C(k, r) = \pi r^2 \left[2 - \frac{4}{\rho} \sin \rho + \frac{4}{\rho^2} (1 - \cos \rho) \right], \quad (3)$$

其中

$$\rho = 4\pi k r (n - 1) = \alpha k r = \frac{\alpha r}{\lambda},$$

$$\alpha = 4\pi(n - 1) \doteq 6.657.$$

即

$$Q(\rho) = Q(\alpha k r) = Q(k, r) = 2 - \frac{4}{\rho} \sin \rho + \frac{4}{\rho^2} (1 - \cos \rho), \quad (3')$$

$Q(\rho)$ 的曲线如图 1 所示. 消光截面 $C(k, r) = \pi r^2 \cdot Q(k, r)$, 在 $\rho > 100$ 时, $C(k, r)$ 接近几何光学的极限, 在 $\rho < 3.0$ 时, $C(k, r)$ 变得平滑, 接近 Rayleigh 散射. 约在 $3.0 < 2\pi r/\lambda < 100$ 的范围内, $C(k, r)$ 随 r 变化灵敏, 可用于决定粒子谱分布^[5].

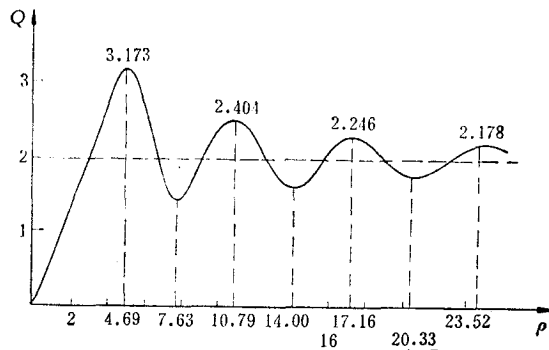


图 1. $Q(\rho) = 2 - \frac{4}{\rho} \sin \rho + \frac{4}{\rho^2} (1 - \cos \rho)$ 的曲线

引入 $\phi(r) = \pi r^2 f(r)$, $\phi(r)$ 是单位体积内半径 r 的气溶胶粒子的总截面. 显然 $\phi(r)$ 也属于 $L_2[a, b]$ 空间, 所以有

$$\|\phi\| < N < +\infty. \quad (4)$$

把泛函方程(1)写成

$$\sigma(k) = \int_a^b Q(k, r)\phi(r)dr = Q \cdot \phi. \quad (5)$$

这时核函数 $Q(k, r)$ 是实对称的连续函数.

由泛函理论知道^[6], 对于实对称紧致的核函数(其中包括实对称连续函数) $Q(k, r)$, 有本征值 $\{\mu_n\}$ 和对应的正交归一本征函数 $\{\phi_n\}$, $Q\phi_n = \mu_n\phi_n$. 第一类 Fredholm 积分方程 $Q \cdot \phi = \sigma$ 在满足如下两条件时有唯一解:

- (1) $Q \cdot \phi = 0$, 只有 $\phi = 0$ 一个解, 即 Q 的零空间是空集;
- (2) σ 属于 Q 的值域, 即

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{|(\sigma, \phi_i)|^2}{\mu_i^2} < \infty.$$

这里条件(1)保证了 Q 的本征函数组成完备集, Q^{-1} 存在.

$$\sigma = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_i(\sigma, \phi_i),$$

得到

$$\phi = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\phi_i}{\mu_i} (\sigma, \phi_i). \quad (6)$$

条件(2)保证了 ϕ 的存在, 即

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{\phi_i}{\mu_i} (\sigma, \phi_i)$$

平均收敛. 同时由于条件(1), 积分方程的解是唯一的.

对于积分方程(5), 从物理上考虑 $\sigma(k)$ 是气溶胶粒子对光波的散射所得到的结果, 即算子 Q 对 $\phi(r)$ 作用后得到的结果. 因此从实验得到的 $\sigma(k)$ 一定属于 Q 的值域. 就是说, 根据积分方程(5)的物理意义, 条件(2)是满足的.

把 $Q(k, r)$ 按 kr 的幂级数展开,

$$\begin{aligned} Q(k, r) &= 2 - \frac{4}{\alpha k r} \sin(\alpha k r) + \frac{4}{(\alpha k r)^2} [1 - \cos(\alpha k r)] \\ &= 4 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1}(2l+1)}{(2l+2)!} (\alpha k r)^{2l}. \end{aligned} \quad (7)$$

(7) 式中的级数在有界区域上绝对一致收敛. 记

$$Q_m = 4 \sum_{l=1}^m \frac{(-1)^{l+1}(2l+1)}{(2l+2)!} (\alpha k r)^{2l}. \quad (8)$$

对任意 $\varepsilon > 0$, 存在正整数 M , 当 $m > M$ 时, 有

$$|Q - Q_m| < \varepsilon. \quad (9)$$

因此在 $m > M$ 时, 有

$$|Q \cdot \phi - Q_m \cdot \phi| \leq \int_a^b |Q - Q_m| \cdot |\phi| dr \leq \left[\int_a^b |Q - Q_m|^2 dr \right]^{1/2}$$

$$\times \left[\int_a^b |\phi|^2 dr \right]^{1/2} < \varepsilon N \sqrt{b-a}.$$

ε 是任意的, $N\sqrt{b-a}$ 是常数, 所以有

$$\begin{aligned} Q \cdot \phi &= \lim_{m \rightarrow \infty} \int_a^b Q_m \phi dr \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \int_a^b 4 \sum_{l=1}^m \frac{(-1)^{l+1}(2l+1)}{(2l+2)!} (\alpha k r)^{2l} \phi(r) dr \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} 4 \sum_{l=1}^m \frac{(-1)^{l+1}(2l+1)}{(2l+2)!} \alpha^{2l} \cdot k^{2l} \int_a^b r^{2l} \phi(r) dr. \end{aligned} \quad (10)$$

频谱法中 k 是一个变量, 要求 ϕ 满足 $Q \cdot \phi = 0$ 时必须有

$$\int_a^b r^{2l} \phi(r) dr = 0 \quad (l = 1, 2, 3, \dots). \quad (11)$$

为了看清楚 $\phi(r)$ 在满足 (11) 式时应有 $\phi(r) = 0$, 作 $x = r^2$ 的变换, (11) 式变成

$$\int_{\sqrt{a}}^{\sqrt{b}} x^{l-1} \left[\frac{1}{2} \phi(\sqrt{x}) \sqrt{x} \right] dx = 0 \quad (l = 1, 2, \dots).$$

记

$$\frac{1}{2} \phi(\sqrt{x}) \sqrt{x} = \phi_1(x), \quad a_1 = \sqrt{a}, \quad b_1 = \sqrt{b}, \quad l_1 = l - 1.$$

因为 $b > a > 0$, 上述变换是合理的, 且 $b_1 > a_1 > 0$, 这时有

$$\int_{a_1}^{b_1} x^{l_1} \phi_1(x) dx = 0 \quad (l_1 = 0, 1, 2, \dots). \quad (11')$$

显然, $x^0, x^1, x^2, \dots$ 在区间 $[a_1, b_1]$ 上构成完备集. 所以在 $\phi_1(x)$ 满足 (11') 式时必定有

$$\phi_1(x) = 0, \quad \text{则 } \phi(r) = 0. \quad (12)$$

这样就证明了积分方程 (5) 满足条件 (1). 所以在消光截面取 Van de Hulst 近似公式时, 积分方程 (5) 和 (1) 有唯一解.

$$\phi(r) = Q^{-1} \cdot \sigma,$$

或者

$$f(r) = \frac{1}{\pi r^2} (Q^{-1} \cdot \sigma).$$

从光波的衰减测量能够决定大气气溶胶的谱分布.

证明了可能性, 自然要问: 那末从光波的衰减探测大气气溶胶, 到底可测的精度是多少? 怎样进行反演计算和误差分析? 选择什么波段最好?

三、反演计算、解的不稳定性和误差分析

泛函方程 (1) 是无限维的, 在实际测量和反演计算时, 总是用有限维去近似无限维. 比如用一台可调谐染料激光器测量了从近紫外到近红外的衰减, 从中选择 M 个点, 即 M 个波段, 除去由大气分子吸收和散射对衰减的影响, 得到了气溶胶对光波的衰减系数. 再

从这 M 个 $\sigma(k)$ 确定气溶胶谱分布参数.

在 $[a, b]$ 区间上取 L 个点 $r_l (l = 1, 2, \dots, L)$. 一般, 这 L 个点根据测量要求事先给定. 把 $f(r)$, $C(k, r)$, $\sigma(k)$ 分别在 $1/\text{cm}^3 \cdot \mu\text{m}$, $(\mu\text{m})^2$, $1/\text{km}$ 的单位中表示, 用矩形公式计算 (1) 式.

$$\begin{aligned}\sigma(k_m) &= \sigma_m = 10^{-3} \int_a^b C(k_m, r) f(r) dr \approx 10^{-3} \sum_{l=1}^L C(k_m, r_l) f(r_l) \Delta r_l \\ &= 10^{-3} \sum_{l=1}^L C_{ml} \cdot f_l,\end{aligned}\quad (13)$$

其中

$$C_{ml} = C(k_m, r_l), \quad f_l = f(r_l) \Delta r_l.$$

上述方程可简写成

$$\sigma = 10^{-3} \mathbf{C} \cdot \mathbf{f}, \quad (14)$$

这里

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1L} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2L} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ C_{M1} & C_{M2} & \cdots & C_{ML} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_L \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \vdots \\ \sigma_M \end{pmatrix}.$$

若记 $Q(k_i, r_j) = Q(\alpha k_i r_j)$, 则有

$$\begin{aligned}C_{ij} &= \pi r_j^2 Q_{ij}, \\ \mathbf{C} &= \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1L} \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2L} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{M1} & Q_{M2} & \cdots & Q_{ML} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \pi r_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \pi r_2^2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \pi r_L^2 \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R},\end{aligned}\quad (15)$$

其中

$$\mathbf{Q} = \{Q_{ij}\}, \quad \mathbf{R} = \{\pi r_j^2 \delta_{ij}\}.$$

根据气溶胶的性质, 可以把气溶胶谱分布的某种模式 $f_0(r)$ 作为 $f(r)$ 的初级近似 (例如, 选择大陆性模式或海洋性模式作为 $f_0(r)$). 记

$$\begin{aligned}f'(r) &= f(r) - f_0(r), \\ \sigma_0(k) &= 10^{-3} \mathbf{C} \cdot \mathbf{f}_0, \\ \sigma'(k) &= \sigma(k) - \sigma_0(k) = 10^{-3} \mathbf{C} \cdot \mathbf{f}'.\end{aligned}$$

在 $M = L$ 时, 方程 (14) 有解

$$\mathbf{f} = 10^3 \mathbf{C}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \text{或} \quad \mathbf{f}' = 10^3 \mathbf{C}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma}'. \quad (16)$$

也可写成

$$\mathbf{f} = 10^3 (\mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{Q}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad \text{或} \quad \mathbf{f}' = 10^3 (\mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{Q}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma}') \quad (16')$$

根据前面的证明, 泛函方程 $C \cdot f = 0$ 只有 $f = 0$ 一个解, C^{-1} 存在. 因此在有限维近似中, 一般, 行列式 $|C| \neq 0$, C^{-1} 存在, (16) 式成立.

在 $M > L$ 时, 用最小二乘法处理, 得到

$$f = 10^3(C^T \cdot C)^{-1} \cdot C^T \cdot \sigma, \quad (17)$$

其中 C^T 是矩阵 C 的转置.

下面, 在讨论最优光滑解和误差分析等问题之前, 先研究第一类 Fredholm 积分方程对解的不稳定性.

所谓解是否有稳定性就是: 对于积分方程

$$Q \cdot \phi = \sigma,$$

在 σ 有误差 $\delta\sigma$ 时, 引起解 ϕ 的误差 $\delta\phi$, 任意给定 $\varepsilon > 0$ 是否存在 $\eta > 0$, 使在 $\|\delta\sigma\| < \eta$ 时满足 $\|\delta\phi\| < \varepsilon$?

结论是否定的, 对于以自伴随紧致函数为核函数的第一类 Fredholm 积分方程, 如果解是唯一的, 则解也一定是不稳定的.

事实上, 自伴随紧致的核函数 Q 有正交归一的本征函数 $\{\phi_n\}$ 和本征值 $\{\mu_n\}$, 其中若

$$\mu_1 > \mu_2 > \cdots > 0,$$

则有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n = 0.$$

所以只要取

$$\delta\sigma = \frac{1}{2} \eta \phi_n,$$

则

$$\|\delta\sigma\| = \frac{1}{2} \eta < \eta,$$

这时

$$\delta\phi = \frac{\eta}{2\mu_n} \phi_n,$$

但是

$$\|\delta\phi\| = \frac{\eta}{2\mu_n},$$

在 n 足够大时, $\|\delta\phi\|$ 就可以任意大. 由此显见, 积分方程 (1) 的解是不稳定的.

解的不稳定性, 这是在反演计算中必须要加以考虑和注意克服的. 从大气物理的实际出发, 气溶胶谱分布函数 $f(r)$ 应该是一个连续的光滑函数, 所以在这个对积分方程 (1) 的附加条件下, 用最优光滑解求解, 可以有效地克服解的不稳定性^[7-9]. 这时

$$f' = 10^3(C^T \cdot C + rE)^{-1} \cdot C^T \cdot \sigma' \quad (18)$$

或者

$$f = 10^3(C^T \cdot C + rE)^{-1} \cdot C^T \cdot (\sigma - \sigma_0) + f_0, \quad (18')$$

其中 r 是光滑因子, 它是一个小量, 凭经验合理选定, 一般可取 $r = \varepsilon^2 \cdot \varepsilon$ 是每个波段测

量的标准误差.

把(16), (17)和(18)式综合写成

$$f = A \cdot \sigma \text{ 或 } f' = A \cdot \sigma'. \quad (19)$$

于是注意到

$$\delta f = \delta f', \quad \delta \sigma = \delta \sigma',$$

则有

$$\begin{aligned} \delta f &= A \cdot \delta \sigma, \\ \delta f_i^2 &= \left(\sum_j A_{ij} \delta \sigma_j \right)^2 = \sum_{j,m} A_{ij} A_{im} \delta \sigma_j \delta \sigma_m. \end{aligned} \quad (20)$$

严格说, $\delta \sigma$ 中除了测量误差外还要考虑方程的截断误差, 但是在取点较多时方程的截断误差可比测量误差小, 所以这里只考虑测量误差这个主要因素.

因为 $\delta \sigma_j$ 和 $\delta \sigma_m$ ($j \neq m$) 统计无关, 所以取平均时,

$$\begin{aligned} \overline{\delta \sigma_j \delta \sigma_m} &= 0 \quad (j \neq m), \\ \overline{\delta f_i^2} &= \sum_j A_{ij}^2 \overline{\delta \sigma_j^2} = \sum_j A_{ij}^2 \varepsilon_j^2. \end{aligned} \quad (21)$$

如果每个波段的标准测量误差 ε_j ($j = 1, 2, \dots, M$) 都等于 ε , 则有

$$v_i = \sqrt{\overline{\delta f_i^2}} = \varepsilon \cdot \sqrt{\sum_j A_{ij}^2} = \varepsilon \cdot x_i, \quad (22)$$

其中

$$x_i = \sqrt{\sum_j A_{ij}^2}, \quad (23)$$

x_i 是 f_i 的误差放大系数, v_i 是 f_i 的均方误差.

$$\delta f^2 = \delta f^T \cdot \delta f = \sum_i \delta f_i^2 = \varepsilon^2 \sum_{ij} A_{ij}^2 = \varepsilon^2 \cdot x^2, \quad (24)$$

$$x^2 = \sum_{ij} A_{ij}^2 = \text{Sp}(A^T \cdot A) = a_1 + a_2 + \dots + a_M, \quad (25)$$

其中 $a_1, a_2, \dots, a_M$ 是 $A^T A$ 的特征值.

在 $A = 10^3 C^{-1} = 10^3 (Q \cdot R)^{-1}$ 时,

$$\begin{aligned} x_i^2 &= 10^6 \sum_j (C_{ji}^{-1})^2 = 10^6 \sum_j |\bar{C}_{ji}|^2 / |C|^2 \\ &= 10^6 \sum_j |\bar{Q}_{ji}|^2 / (\pi^2 r_i^4 |Q|^2). \end{aligned} \quad (26)$$

这里 $|\bar{C}_{ji}|$ 和 $|\bar{Q}_{ji}|$ 分别是行列式 $|C|$ 和 $|Q|$ 中, C_{ji} 和 Q_{ji} 的代数余子式.

$$\begin{aligned} x^2 &= 10^6 \sum_{i,j} (C_{ji}^{-1})^2 = 10^6 \sum_{ij} |\bar{C}_{ji}|^2 / |C|^2 \\ &= 10^6 \sum_{i,j} [|\bar{Q}_{ji}|^2 / (\pi^2 r_i^4 |Q|^2)]. \end{aligned} \quad (27)$$

若记正定矩阵 $C \cdot C^T$ 的特征值为 $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_M > 0$, 则有

$$x^2 = 10^6 \text{Sp}(C \cdot C^T)^{-1} = 10^6 \sum_{i=1}^M \frac{1}{\mu_i}. \quad (28)$$

在 f 按 (18) 式求解时

$$\begin{aligned} x^2 &= 10^6 \text{Sp} [\mathbf{C} \cdot (\mathbf{C}^T \cdot \mathbf{C} + r\mathbf{E})^{-1} \cdot (\mathbf{C}^T \cdot \mathbf{C} + r\mathbf{E})^{-1} \cdot \mathbf{C}^T] \\ &= 10^6 \text{Sp} [(\mathbf{C}^T \cdot \mathbf{C} + r\mathbf{E})^{-1} \cdot (\mathbf{C}^T \cdot \mathbf{C} + r\mathbf{E})^{-1} \cdot \mathbf{C}^T \cdot \mathbf{C}] \\ &= 10^6 \sum_{i=1}^M \frac{\mu_i'}{(\mu_i' + r)^2}, \end{aligned} \quad (29)$$

其中 μ_i' 是 $\mathbf{C}^T \cdot \mathbf{C}$ 的特征值.

同样易证, f 在按 (17) 式求解时

$$x^2 = 10^6 \sum_{i=1}^M \frac{1}{\mu_i}. \quad (28')$$

比较 (28), (28') 和 (29) 式, 就容易明白, 为什么最优光滑解可以克服解的不稳定性. 光滑因子 r 是一个小量, 在波段取得较少时, 最优光滑解 (18) 式和普通解 (16), (17) 式没有本质的区别. 但是在取点足够多时, μ_M , μ_M' 要趋于零, 普通解的误差放大系数 $x^2 \rightarrow \infty$, 很小的测量误差 ε 就可能引起 f 中较大的误差, 即普通解对误差不稳定. 对于最优光滑解, 因为分母上出现一个不等于零的量 r , x^2 保持有限, 所以对误差是稳定的. 在取点较多时, 宜用最优光滑解作计算.

四、有效信息量

每个波段 K_m 的衰减系数测量总有一定的误差 $\varepsilon(K_m) = \varepsilon_m$, 这不仅引起最后结果的误差, 而且如果 M 个波段选择不当, 会在误差范围内这 M 个 $\sigma(K_m)$ 本身统计相关. 这时, 从统计的意义上说, 独立的波段数目 M' 就小于 M , 其余 $M - M'$ 个 $\sigma(k)$ 可以从这 M' 个衰减系数推算出来. 最大有效信息量为 M' . 假定每个波段测量的标准误差都是 ε . 引入正方对称矩阵

$$\phi_{mm'} = \int_a^b C(K_m, r) C(K_{m'}, r) dr \quad (m, m' = 1, 2 \cdots, M), \quad (30)$$

它的全部特征值 μ_m 都是正的, $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \cdots \geq \mu_M > 0$, 且记

$$\bar{f} = \left[\int_a^b |f'(r)|^2 dr \right]^{1/2},$$

M 个波段线性相关的充分条件是^[7]

$$\sqrt{\mu_M} \leq 10^3 \varepsilon / \bar{f}. \quad (31)$$

如有 r 个特征值满足

$$\sqrt{\mu_i} \leq 10^3 \varepsilon / \bar{f},$$

则至少有 r 个波段线性相关.

在用 $\{f_i\}$ 近似 $[a, b]$ 上的 $f(r)$ 时, M 个波段线性相关的充分条件是, $\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}^T$ 的特征值 $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \cdots \geq \mu_M > 0$ 满足

$$\sqrt{\mu_M} \leq 10^3 \varepsilon / \bar{f}. \quad (32)$$

这时

$$\bar{f} = \left[\sum_{i=1}^M |f_i|^2 \right]^{1/2},$$

是谱分布对模式离差的均方值。所以,若要求 M 个波段线性无关,则必须满足

$$10^3 \varepsilon < \bar{f} \cdot \sqrt{\mu_M}. \quad (33)$$

实用上 $\bar{f}$ 取某个平均值。在事前对被测气溶胶特性毫无所知时,取 $f_0(r) = 0$, 于是 $\bar{f} = \|f\|$, (33) 式变成

$$10^3 \cdot \varepsilon < \|f\| \cdot \sqrt{\mu_M}. \quad (34)$$

$\bar{f} \leq \|f\|$, 所以 (33) 式是比 (34) 式更强的不等式。

要满足 (33) 或 (34) 式当然可以由减小 ε 来实现, 但这时对测量精度提出了更高的要求。一般说, 标准误差 ε 由仪器的性能所规定, 有一个下界, 不可能任意减小。因此 (33), (34) 式也是对选择波段的限制。

从 (33) 式知道, M 个波段线性无关的必要条件是: 矩阵

$$\left\{ \phi_{mm'} - \frac{10^6 \varepsilon^2}{\bar{f}^2} \delta_{mm'} \right\}$$

或

$$CC^T - \frac{10^6 \varepsilon^2}{\bar{f}^2} E$$

为正定的。

从 (28) 式得到

$$\frac{10^6 M}{\mu_M} \geq x^2 = 10^6 \sum_{i=1}^M \frac{1}{\mu_i} > 10^6 / \mu_M. \quad (35)$$

以此代入 (33) 式, 并进一步强化不等式, 则得到 M 个波段线性无关必要条件的另一种形式:

$$\bar{f} > x \cdot \varepsilon. \quad (36)$$

(36) 式的物理意义很清楚: 粒子数浓度的均方误差 $x \cdot \varepsilon$ 要小于粒子数浓度对模式的均方离差值 $\bar{f}$, 才有可能波段线性无关。

$\{\phi_{mm'}\}$ 的特征值在 $K_m, K_{m'}$ 足够接近时, μ_M 接近于零, 所以要求各波段线性无关, K_m 和 $K_{m'}$ 间必须有一定的间隔 ΔK 。

$$|\sigma'(K_m) - \sigma'(K_{m'})| = 10^{-3} \left| \int_a^b [C(K_m, r) - C(K_{m'}, r)] f'(r) dr \right|$$

$$C(K_m, r) - C(K_{m'}, r) = (K_m - K_{m'}) \frac{\partial C(k, r)}{\partial K} \Big|_{K=K'},$$

其中 K' 是 K_m 和 $K_{m'}$ 间的某个值。因为

$$\left| \frac{\partial C(k, r)}{\partial K} \right| = 4\pi\alpha\gamma^3 \left| \frac{2}{\rho^2} \sin \rho - \frac{1}{\rho} \cos \rho - \frac{2}{\rho^3} (1 - \cos \rho) \right|.$$

以 $\alpha = 6.657$ 代入,

$$4\pi\alpha \left| \frac{2}{\rho^2} \sin \rho - \frac{1}{\rho} \cos \rho - \frac{2}{\rho^3} (1 - \cos \rho) \right|$$

作为 ρ 的函数, 有最大值 ≈ 25.85 , 则

$$\left| \frac{\partial C(K, r)}{\partial K} \right| \leq 25.85 r^3,$$

所以有

$$|\sigma'(K_m) - \sigma'(K_{m'})| \leq 25.85 \times 10^{-3} |K_m - K_{m'}| \int_a^b |r^3 f'(r)| dr.$$

因为

$$\int_a^b |r^3 f'(r)| dr \leq \left[\int_a^b r^6 dr \right]^{1/2} \left[\int_a^b (f'(r))^2 dr \right]^{1/2} \leq \bar{f} \cdot \sqrt{(b^7 - a^7)/7},$$

于是

$$|\sigma'(K_m) - \sigma'(K_{m'})| \leq 25.85 \times 10^{-3} |K_m - K_{m'}| \cdot \bar{f} \cdot \sqrt{(b^7 - a^7)/7}.$$

要求两波段线性独立, 必须有

$$|\sigma'_m - \sigma'_{m'}| > \varepsilon,$$

从而得到

$$\begin{aligned} \Delta K = |K_m - K_{m'}| &\geq \frac{10^3 \varepsilon}{25.85 \int_a^b |r^3 f'(r)| dr} \\ &\geq \frac{10^3 \varepsilon}{25.85 \bar{f} \sqrt{(b^7 - a^7)/7}}. \end{aligned} \quad (37)$$

现由(37)式作数值估计. 若取大陆性模式作为 $f_0(r)^{(10)}$. $f_0(r) = Nr^{-4}$, $a = 0.1$, $b = 10 \mu\text{m}$, 以 $|f'(r)| \leq 0.1 f_0(r)$ 估计, 有

$$\Delta K > 0.084 \times 10^3 \varepsilon / N.$$

在 23km 能见度时, 总粒子数浓度约是 $2.828 \times 10^3 (1/\text{cm}^3)^{(11)}$, 这时 $N = 8.484$, 以 $\varepsilon = 0.01 (1/\text{km})$ 估计, $\Delta K > 0.099 (1/\mu\text{m})$, 所以在波数 0.8333—3.333 $(1/\mu\text{m})$ 间 (即波长 1.2—0.3 μm 间), 至多可选 24 个波段.

当然, 这个数目只是线性独立波段数的上限, 实际应用中选取的波段要少于 24.

五、最优波段的选择

在给定标准误差 ε 时, 如何选择最优波段, 这是很重要的.

显然, 最优波段应使 x^2 取最小值, 所以 K_m 应满足

$$\frac{\partial(x^2)}{\partial K_m} = 0. \quad (38)$$

因为如前所述, 在波段取得较少时, 普通解和最优光滑解的误差放大系数没有本质区别, 所以在下面我们利用(27)式, 但是所述的方法也适用最优光滑解等.

把(27)式代入(38)式, 化简得到, 最优波段 $K_m (m = 1, 2, \dots, M)$ 须满足

$$\begin{aligned} \varphi_m(K_1, K_2, \dots, K_M) = \sum_{ij} \frac{|\bar{Q}_{ij}|}{\pi^2 r_j^4} \left[|\bar{Q}| \frac{\partial |\bar{Q}_{ij}|}{\partial K_m} - |\bar{Q}_{ij}| \frac{\partial |\bar{Q}|}{\partial K_m} \right] = 0 \\ (m = 1, 2, \dots, M). \end{aligned} \quad (39)$$

求解(39)式一般比较困难, 宜用逐步迭代逼近法. 先在 0.3 到 1.2 μm 内取 m 个波段, 使它们满足线性独立的条件, 作为 $K_m^{(0)}$. 定义

$$\Phi = \sum_{m=1}^M \varphi_m^2, \quad (40)$$

从 $K_m^{(0)}$ 出发, 得到

$$K_m^{(1)} = K_m^{(0)} - S_0 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial K_m} \right), \quad (41)$$

其中

$$S_0 = \frac{\Phi(K_1^{(0)}, K_2^{(0)}, \dots, K_M^{(0)})}{\sum_{m=1}^M \left(\frac{\partial \Phi}{\partial K_m} \right)^2}$$

检查 $\Phi(K_1^{(1)}, K_2^{(1)}, \dots, K_M^{(1)})$ 是否小于指定的精度, 不然再求出 $K_m^{(2)}, K_m^{(3)}, \dots$, 依次迭代, 直至 Φ 满足小于指定的精度为止。

例如, 气溶胶粒子半径 r_i 分别取为 0.3, 0.5, 0.8, 1.5 和 $3 \mu\text{m}$, 经一次迭代, 可选用波段 0.4883, 0.8138, 0.31035, 0.92544 和 $1.16381 \mu\text{m}$. 这时有

$$Q = \begin{pmatrix} 3.173 & 1.7120 & 2.40319 & 1.8145 & 2.0125 \\ 2.145 & 3.173 & 1.8436 & 2.0945 & 2.0904 \\ 1.9052 & 2.4038 & 2.2460 & 1.9141 & 1.9389 \\ 1.7935 & 3.0773 & 2.365 & 2.404 & 1.9444 \\ 1.1792 & 2.5731 & 3.0828 & 1.7433 & 2.246 \end{pmatrix}.$$

计算结果如表 1 所示. 在 5km 能见度时地面气溶胶总浓度^[11] 为 $1.378 \times 10^4 (1/\text{cm}^3)$. 假定仪器测量的标准误差是 $0.01 (1/\text{km})$, 这时气溶胶粒子总浓度的均方误差是

$$\sqrt{\delta f^2} = 20.446 \times 10^3 \cdot \varepsilon = 204.46 (1/\text{cm}^3).$$

相对误差为 1.48%. 如以 $\hat{f} = 0.05 \times 1.378 \times 10^4 = 689 (1/\text{cm}^3)$ 估计, $\hat{f} > x \cdot \varepsilon$, 满足波段线性独立的条件。

总之, 在消光截面取 Van de Hulst 近似公式的假设下, 从光波的衰减系数能够决定大气气溶胶的谱分布. 但是精度受仪器测量误差的限制. 要提高精度必须减小测量误差. 在消光截面用 Mie 精确公式计算时, 情况要更复杂些. 这时积分方程 (1) 是否有唯一解, 还有待证明。

表 1 计算结果

l	1	2	3	4	5
$r_i (\mu\text{m})$	0.3	0.5	0.8	1.5	3
$\lambda_i (\mu\text{m})$	0.4883	0.81381	0.31035	0.92544	1.16381
$K_i (\mu\text{m}^{-1})$	2.04792	1.22880	3.22217	1.08061	0.859247
$x_i^2 (10^4)$	284.92	119.064	11.832	1.989	0.2497

参 考 文 献

- [1] Jean P. Phelps, Particles Size Determination Using a Laser Light Transmission Technique AD832909 (1968).
- [2] J. Heitzenberg and M. Baker, *Appl. Opt.*, 15(5) (1976), 1178.
- [3] H. C. Van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles* (Wiley, New York, 1957).
- [4] R. A. McClatchey *et al.*, *Atmospheric Attenuation of Laser Radiation from 0.76 to 31.25 μm* .
- [5] J. T. Twitty, *J. Atmos. Sci.*, 32(1975), 584.
- [6] H. Hochstalt, *Integral Equations* (John Wiley & Sons, Inc. 1973), p. 108.
- [7] 曾庆存, 大气红外遥测原理, 科学出版社(1974).

- [8] D. L. Philips, A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind, *J. of the association for computing machinery*, 9(1)(1962).
- [9] S. Twomey, The application of numerical filtering to the solution of integral equations encountered in indirect sensing measurements, *J. of the Franklin Institute*, 279(2) (1965).
- [10] E. A. Barnhardt and J. L. Streete, *Appl. Opt.*, 9(1970), 1337.
- [11] R. A. McClatchey *et al.*, Optical Properties of the Atmosphere (Revised), AD726116 (1974), p. 9.

DETERMINATION OF THE SIZE DISTRIBUTION OF ATMOSPHERIC AEROSOLS BY MEANS OF MEASUREMENT OF OPTICAL ATTENUATION

TAO RONG-JIA

ABSTRACT

In this article we made a theoretical investigation on determination of size distribution of atmospheric aerosols by means of measurement of optical attenuation. We showed that the Fredholm integral equation of the first kind has only one solution when attenuation cross-section is given by Van de Hulst approximate equation. We thus proved that remote sensing of atmospheric aerosols by variation of optical wave lengths is possible. We also studied the problems of inversion computation, analyses of errors, effective information and selection of the optimal optical wave lengths associated with this remote sensing process.