

董文. 2011. 气溶胶粒子反演的约束优化方法 [J]. 大气科学, 35(5): 977–981. Dong Wen. 2011. Constrained optimization methods for inversion of aerosol particle size distribution functions [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 35 (5): 977–981.

气溶胶粒子反演的约束优化方法

董文

西华师范大学计算机学院, 四川 南充 637002

摘 要 气溶胶粒子大小分布是地球环境科学研究中最重要的方向之一。由数学物理模型来估计气溶胶的粒子分布是一个不适定的反问题, 反演的目的就是用适定的问题来代替不适定问题, 并获得原问题解的近似。本文研究气溶胶粒子分布的约束优化反演方法。首先探讨了问题的病态性, 接着基于对待反演参数施加先验约束给出了正则化模型。在正则化的具体实现上, 研究了带线搜索技巧的 BFGS 算法。数值试验表明了本文的算法可以用来稳定地求解气溶胶粒子分布的反演问题, 基于正则化模型的 BFGS 方法可以很好地反演气溶胶粒子分布函数。

关键词 地球环境反问题 病态反演 计算方法

文章编号 1006–9895 (2011) 05–0977–05 **中图分类号** TP301、TP399、X144 **文献标识码** A

Constrained Optimization Methods for Inversion of Aerosol Particle Size Distribution Functions

DONG Wen

School of Computer Science, China West Normal University, Si Chuan Province, Nanchong 637002

Abstract Aerosol particle size distribution function is a key environmental parameter. Retrieval of the aerosol particle size distribution function is an improperly posed inverse problem. To deal with this problem and obtain the stable approximation of the particle size distribution function, proper inversion technique is necessary. In this paper, the author studies the constrained optimization methods for retrieval of aerosol particle size distribution functions. The ill-conditioning properties are discussed and a regularizing model is established. To solve the minimization problem, the author develops a BFGS method. Numerical experiments indicate that the method introduced in this paper can be used for solving the inversion problem in retrieval of aerosol particle size distribution functions.

Key words senvironmental inverse problems, ill-conditioning inversion, computational methods

1 引言

气溶胶是指悬浮在空气中的微小的固体或液体颗粒构成的多分散系, 是重要的地球化学组分之一。大气气溶胶通过吸收和散射直接影响地—气系

统接收的太阳辐射。由于气溶胶粒子在大气中的物理与化学反应及其对人类社会和自然环境的影响, 我们有必要对气溶胶粒子的生成和分布进行深层次的探索, 因而气溶胶粒子大小分布就成为地球环境科学研究中的最重要的方向之一 (Bohren and

收稿日期 2011–04–29, 2011–07–14 收修定稿

资助项目 国家自然科学基金资助项目 10871191, 西华师范大学科研启动基金 05B062, 西华师范大学学科建设资助

作者简介 董文, 女, 1972 年出生, 硕士, 副教授, 研究领域: 科学计算、可视化计算、计算机软件与理论、计算机应用技术。

E-mail: wen_sc@yahoo. cn

Huffman, 1983; Davies, 1974; Ramachandran et al., 1994; Twomey, 1975; 王彦飞等, 2011)。气溶胶的粒子大小分布通常是由其粒子半径 r 决定的, 在数学上可以表征为不同的粒子大小分布函数 $n(r)$, 它表征了单位面积或单位体积上不同气溶胶粒子的数量分布, 如果假定大气中的微粒可足够准确地用已知折射率的等效球体来模拟, 则大气气溶胶光学厚度 (AOT) 和其粒子大小谱的积分方程可表示为

$$\tau(\lambda) = (Kn)(\lambda) = \int_0^\infty \pi r^2 Q_{\text{ext}}(r, \lambda, \eta) n(r) dr, \quad (1)$$

其中, r 是气溶胶粒子半径, 单位为 μm ; λ 是波长, 单位为 μm ; η 是气溶胶粒子的复折射率指数; K 为算子, 作用到粒子分布函数 $n(r)$ 上由 (1) 式右端表示。求解上述问题来反演分布函数 $n(r)$ 的方法有很多, 但各有特点, 大致分为基于统计推理的极大后验估计方法、最小二乘法、正则化方法和最优正则化方法 (Twomey, 1975; Wang et al., 2006; Wang et al., 2007; Wang, 2008; Wang et al., 2009; Wang and Ma, 2009)。本文考虑基于正则化模型的 BFGS 方法。BFGS 方法具有稳定性和快速计算的特征, 我们期望该方法在处理气溶胶粒子反演问题上能带来好的效果。

在本文中我们采用以下记号: “ $:$ ” 表示“按某公式定义”, “min” 表示“极小化某个函数”, “ $\|\cdot\|$ ” 表示 l_2 模 (比如, 对于向量 z , $\|z\| = [\sum_i (z_i)^2]^{1/2} < \infty$), “diag(\cdot)” 表示对角化, “ A^T ” 表示矩阵 A 的转置, “s. t.” 表示“在某种条件下”。

2 问题的病态性

注意到由数学物理模型 (1) 来估计气溶胶的粒子分布是一个不适定的反问题 (王彦飞, 2007)。这里的不适定性通常指的是在有限的观测下我们不可能获得粒子分布函数 $n(r)$ 的唯一解, 或者有时候不存在粒子分布函数的解, 或者有解但不稳定。反演的目的就是用适定的问题来代替不适定问题, 并获得原问题解的近似。为了克服不适定性, 我们需要建立合适的正则化模型并研究可行的计算方法。

3 正则化建模

把 (1) 写成紧致的形式

$$Kn = \tau, \quad (2)$$

可以证明 K 为紧算子 (肖庭延等, 2003)。反演就是由观测数据 τ 和算子 K 反求分布函数 n 。在离散化的情形, n 表示待反演向量, K 为矩阵。正则化指的是寻找一簇有界算子 $\Pi^\alpha (\alpha > 0)$ 使得

$$\Pi^\alpha Kn = n, \text{ 对任意的 } n \in Z,$$

其中 Z 为参数空间。只要 $\Pi^\alpha K$ 收敛于一个恒等算子, 则正则化算法就收敛。

记 $r = Kn - \tau$, 人们熟悉的最小二乘法要求求解下面的优化问题

$$\|r\|_{l_2} \rightarrow \min. \quad (3)$$

其中向量 x 的 $\|x\|_{l_2}$ 指的是 $[\sum_i (x_i)^2]^{1/2} < \infty$ 。很明显, 若 $K^T K$ 非奇异, 则分布函数 n 可以方便地由下式估计得到:

$$n = (K^T K)^{-1} K^T \tau. \quad (4)$$

然而, 如前所述, 问题的不适定性导致 $K^T K$ 的条件数很坏, 因而需要寻求正则化方法。人们通常熟悉的 Tikhonov 正则化要求解下面的极小化问题 (Tikhonov and Arsenin, 1977)

$$J^\nu[n] = \frac{1}{2} \|Kn - \tau\|^2 + \frac{\nu}{2} \Omega[n], \quad (5)$$

其中 $\Omega[n]$ 为稳定子, 对分布函数 n 施加先验约束; $\nu > 0$ 为正则参数, 用来平衡问题的不适定性和光滑逼近。比如说可以取 $\Omega[n]$ 为 $\Omega[n] = (Dn, n)$, 其中 D 为正定或半正定算子。在标准的 Tikhonov 正则化中, $\Omega[n]$ 可取为 Sobolev 模的形式, 即 $\Omega[n] = \|n\|_{W^{1,2}}^2$ (肖庭延等, 2003)。

容易看出, 在 Tikhonov 正则化的形式下 Π^α 具有形式

$$\Pi^\alpha = (K^* K + \alpha D)^{-1} K^*, \quad (6)$$

其中 K^* 为 K 的伴随算子, $\alpha \in (0, 1)$ 。

4 正则化模型的 BEGS 算法

由于粒子分布的非负性, 我们研究下面的极小化模型

$$\min J^\nu[n], \quad (7)$$

$$\text{s. t. } n > 0, \quad (8)$$

其中 $J^\nu[n]$ 为 (8) 的形式, $\Omega[n] = (n, Dn)$, D 为三对角矩阵, 具有形式

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{h_N^2} & -\frac{1}{h_N^2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{h_N^2} & 1 + \frac{2}{h_N^2} & -\frac{1}{h_N^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{1}{h_N^2} & 1 + \frac{2}{h_N^2} & -\frac{1}{h_N^2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{h_N^2} & 1 + \frac{1}{h_N^2} \end{bmatrix},$$

该矩阵的导出可见 (Wang et al., 2006; 肖庭延等, 2003), 其中 $h_N = (b-a)/(N-1)$, $[a, b]$ 为气溶胶粒子的半径区间, N 为离散的格点数。

下面来研究问题(7)和(8)的求解方法。 $J^v[\mathbf{n}]$ 的极小化可以通过拟牛顿方法来实现 (袁亚湘, 1993)。在算法的每一步, 需要更新

$$\mathbf{n}_{k+1} = \mathbf{n}_k - \alpha_k \mathbf{A}^{-1} \mathbf{g}_k, \quad (9)$$

其中, α_k 为步长, 需要先搜索得到; \mathbf{A} 定义为 $\mathbf{A} = \mathbf{K}^T \mathbf{K} + \nu \mathbf{D}$; \mathbf{g}_k 为梯度, 通过下式算得

$$\mathbf{g}_k = (\mathbf{A} + \nu \mathbf{D}) \mathbf{n}_k - \mathbf{K}^T \boldsymbol{\tau}. \quad (10)$$

对于大计算量问题, 直接对 \mathbf{A} 求逆的运算量很大, 通常转化为一个易于求解的迭代问题。于是 BFGS 拟牛顿法通过对 \mathbf{A} 做逼近得到:

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k - \frac{\mathbf{H}_k \mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^T + \mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{H}_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k} + \left(1 + \frac{\mathbf{y}_k^T \mathbf{H}_k \mathbf{y}_k}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k}\right) \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k}, \quad (11)$$

其中, $\mathbf{s}_k = \mathbf{n}_{k+1} - \mathbf{n}_k$, $\mathbf{y}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k$, \mathbf{H}_k 通过迭代更新得到。步长因子 α_k 由 Wolfe 线搜索得到 (袁亚湘, 1993):

$$\begin{cases} J^v[\mathbf{n}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k] \leq J^v[\mathbf{n}_k] + \gamma_1 \alpha_k \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k, \\ |\mathbf{g}(\mathbf{n}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k)^T \mathbf{d}_k| \leq \gamma_2 |\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k|. \end{cases} \quad (12)$$

其中, γ_1 和 γ_2 为预先选定的常数。

由于极小化模型中有非负约束, 在用 BFGS 方法计算出结果后, 我们接着进行了投影, 即把计算出的结果投影到可行集 $S = \{\mathbf{n}: \mathbf{n} \geq 0\}$ 上, 投影计算通过下式计算得到 (Wang and Ma, 2009):

$$P_S(\mathbf{n}) = \underset{\mathbf{z}}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{n} - \mathbf{z}\|, \quad (13)$$

其中 $P_S: \mathbb{R}^N \rightarrow S$ 为正交投影算子。

5 数值试验

我们考虑半径介于 $0.1 \mu\text{m}$ 和 $10 \mu\text{m}$ 之间的粒子, 也就是我们感兴趣的粒子半径区间为 $[0.1, 10] \mu\text{m}$ 。其中 $0.1 \mu\text{m}$ 大小的粒子是悬浮在大气中

几乎不受布朗运动和重力沉降作用的影响的尺度, 在空气中单独存在的时间最长, 而 $10 \mu\text{m}$ 的粒子代表的则是云滴的近似大小。注意到当差分网格点数 $N \leq 20$ 时, 会导致非常大的求积误差, 因此我们选择比较大的差分格点数 $N=200$ 。

我们给出一个通常用来模拟气溶胶粒子谱分布的例子 (Twomey, 1975; Wang et al., 2007)。首先注意到, 由于观测有限, 连续形式的粒子大小分布函数 $n(r)$ 是不能给出的。我们只能获得一个逼近原始分布函数的近似解。对区间 $[a, b]$ 做 N 等份剖分, 则得到采样点 $\{r_j\}_{j=1}^N$ 。记 $\mathbf{K} = (\mathbf{K}_{ij})_{N \times N}$, \mathbf{n} 及 \mathbf{d} 为相应的向量, 我们有 (肖庭延等, 2003)

$$\mathbf{K} \mathbf{n} = \mathbf{d}.$$

更现实一点, 我们考虑到观测数据有误差, 则向量 \mathbf{d} 可以表示为

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}_0 + \delta \cdot \text{rand}(\text{size}(\mathbf{d}_0)),$$

其中 \mathbf{d}_0 表示真实的观测, δ 为误差界, $\text{rand}(\text{size}(\mathbf{d}_0))$ 表示施加与 \mathbf{d}_0 同样长度的随机噪音。

作为例子, 我们取 $n_{\text{true}}(r) = 10.5 r^{-3.5} \exp(-10^{-12} r^{-2})$ 为真实的气溶胶粒子分布函数, 并设 $[0.1, 2] \mu\text{m}$ 是我们感兴趣的区间。该粒子很好地模拟了气溶胶粒子的变化趋势 (Wang et al., 2007; Wang, 2008; Wang et al., 2009; Wang and Ma, 2009)。在实际计算中, 考虑到气溶胶粒子的变化特性, 我们令 $n_{\text{true}}(r) = h(r) f(r)$, 其中 $h(r)$ 为快变函数, $f(r)$ 为慢变函数。根据陆相观测, 大部分快变函数满足 Junge 分布 (Wang et al., 2007): $h(r) = r^{-(\nu^*+1)}$, 其中 ν^* 为 $2.0 \sim 4.0$ 之间的一个常数, 在本次试验中我们取 $\nu^* = 3$, $f(r) = 10.5 r^{1/2} \exp(-10^{-12} r^{-2})$ 。其它类似的粒子分布函数已经在 (Twomey, 1975) 中给出。在数值模拟上, 我们选取复折射指数 η 分别为 $1.45 - 0.00i$, $1.45 - 0.03i$, $1.50 - 0.00i$ 和 $1.50 - 0.02i$ 。定义均方根误差 (rmse) 为

$$\text{rmse} = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{(\tau_{\text{comp}}(\lambda_i) - \tau_{\text{meas}}(\lambda_i))^2}{(\tau_{\text{comp}}(\lambda_i))^2}},$$

其中, τ_{comp} 表示反演计算得到的信号, τ_{meas} 表示观测得到的信号 (真实值), m 为观测向量的长度。显然均方根误差刻画了反演得到的信号与真实信号的平均相对偏移度。我们把由正则化模型的 BFGS 方法计算得到的均方根误差列于表 1 中; 把粒子分布绘于图 1 中。显然可见基于正则化模型的 BFGS 方法可以很好地反演气溶胶粒子分布函数。

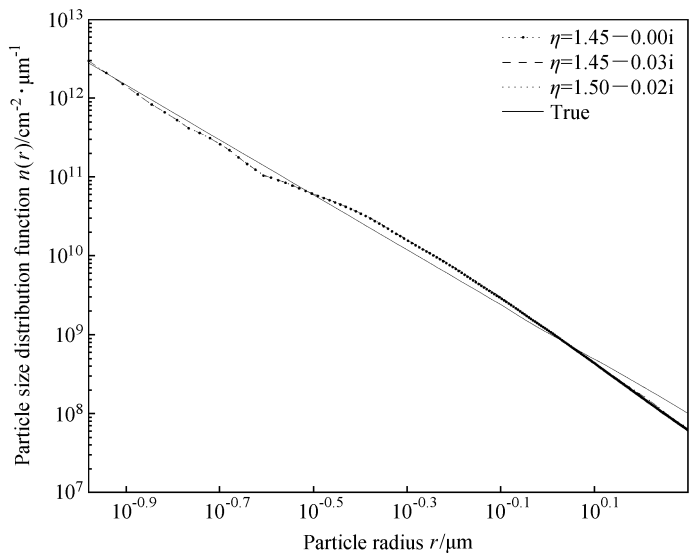


图 1 不同复折射率条件下的气溶胶粒子谱分布与真实分布的对比

Fig. 1 The input and retrieved particle size distribution function for different complex refractive indices using the method in this paper

表 1 不同噪音水平和不同复折射指数条件下的均方根误差对比.

Table 1 The root mean square errors for different noise levels and different complex refractive indices

	rmse		
	$\eta=1.45-0.00i$	$\eta=1.45-0.03i$	$\eta=1.50-0.02i$
$\delta=0.005$	8.73×10^{-5}	1.64×10^{-4}	1.30×10^{-4}
$\delta=0.01$	1.45×10^{-4}	2.52×10^{-4}	2.02×10^{-4}
$\delta=0.05$	5.49×10^{-3}	5.98×10^{-3}	8.15×10^{-4}

6 结论

为了克服气溶胶粒子谱分布反演的病态性，本文研究了正则化处理手段和拟牛顿计算方法。在正则化建模过程中，我们考虑到了对待反演参数的先验约束问题，特别是给出了用规范化的三对角矩阵对气溶胶粒子分布函数加权；计算上采用了稳定性较强的 BFGS 计算方法，并用到了 Wolfe 线搜索技巧。计算结果表明本文的方法在不同噪音水平条件下均可以获得较小的均方根误差，且对于不同的复折射指数均可以收敛到问题的真实解，因此本文的方法具有较好的适用性。

致谢 本文是在作者访问中国科学院地质与地球物理研究所期间完成的，作者十分感谢中国科学院地质与地球物理研究所王彦飞博士的指导。

参考文献 (References)

Bohren G F, Huffman D R. 1983. Absorption and Scattering of Light by Small Particles[M]. New York: John Wiley and Sons.

Davies C N. 1974. Size distribution of atmospheric particles [J]. J. Aerosol Sci., 5: 293–300.

Ramachandran G, Leith D, Todd L. 1994. Extraction of spatial aerosol distribution from multispectral light extinction measurements with computed tomography [J]. J. Opt. Soc. Am. (A), 11: 144–154.

Tikhonov A N, Arsenin V Y. 1977. Solutions of Ill-Posed Problems [M]. New York: John Wiley and Sons.

Twomey S. 1975. Comparison of constrained linear inversion and an iterative nonlinear algorithm applied to the indirect estimation of particle size distributions [J]. J. Comput. Phys., 18: 188–200.

Wang Y F, Fan S F, Feng F, et al. 2006. Regularized inversion method for retrieval of aerosol particle size distribution function in $W^{1,2}$ space [J]. Appl. Optics, 45: 7456–7467.

王彦飞. 2007. 反演问题的计算方法及其应用[M]. 北京: 高等教育出版社. Wang Y F. 2007. Computational Methods for Inverse Problems and Their Applications (in Chinese) [M]. Beijing: Higher Education Press.

Wang Y F, Fan S F, Feng X. 2007. Retrieval of the aerosol particle size distribution function by incorporating *a priori* information [J]. J. Aerosol Sci., 38: 885–901.

Wang Y F. 2008. An efficient gradient method for maximum entropy regularizing retrieval of atmospheric aerosol particle size distribution function [J]. J. Aerosol Sci., 39: 305–322.

Wang Y F, Ma S Q, Yang H, et al. 2009. On the effective inver-

sion by imposing a priori information for retrieval of land surface parameters [J]. Science in China (Ser. D), 52: 540–549.

Wang Y F, Ma Q H. 2009. A gradient method for regularizing retrieval of aerosol particle size distribution function [J]. J. Ind. Manag. Optim., 5: 115–126.

王彦飞, 斯捷潘诺娃, 提塔连科, 等. 2011. 地球物理数值反演问题 [M]. 北京: 高等教育出版社. Wang Y F, Stepanova I E, Titarenko V N, et al. 2011. Inverse Problems in Geophysics and Solution Methods (in Chinese) [M]. Beijing: Higher Education Press.

肖庭延, 于慎根, 王彦飞. 2003. 反问题的数值解法[M]. 北京: 科学出版社. Xiao T Y, Yu S G, Wang Y F. 2003. Numerical Methods for the Solution of Inverse Problems (in Chinese) [M]. Beijing: Science Press.

袁亚湘. 1993. 非线性规划数值方法 [M]. 上海: 上海科学技术出版社. Yuan Y X. 1993. Numerical Methods for Nonlinear Programming (in Chinese) [M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Publication.