

А.В. Васильев, Л.С. Ивлев

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

Проведено численное моделирование сечений рассеяния и направленного рассеяния однородными полидисперсными сферическими частицами с различными функциями распределения в широком диапазоне изменения комплексного показателя преломления длины волны 550 нм. Построены кривые зависимости сечений направленного рассеяния от комплексного показателя преломления (КПП).

Использование в расчетах характеристик поля радиации в атмосфере микрофизических аэрозольных моделей (счетной концентрации частиц, распределения частиц по размерам и комплексного показателя преломления аэрозольного вещества) при несомненных достоинствах полноты модели, возможности получения требуемых оптических характеристик в широком спектральном интервале имеет и серьезные недостатки, связанные с огромным числом варьируемых параметров, зависящих от природы аэрозольных частиц, их времени и условий пребывания в атмосфере (метеорологических факторов) [1–3].

В ряде случаев, особенно в видимой области спектра, получены эмпирические формулы и соотношения для оптических характеристик атмосферных аэрозолей в зависимости от различных метеофакторов и типов воздушных масс, весьма удовлетворительно описывающие реальные ситуации [4–5]. Это обусловлено в основном не очень большим разбросом микроструктурных параметров в аэрозольных системах, их усреднением в больших объемах воздуха и определяющим влиянием на структуру аэрозолей некоторых метеорологических факторов и процессов, в частности величины относительной влажности [6–8].

Количественно значимые изменения оптических характеристик аэрозолей, переходы от одного типа их оптических свойств к другим могут быть обусловлены фазовым переходом (изменением формы частиц), изменением химического состава аэрозольного вещества (комплексного показателя преломления) и сильным укрупнением частиц (конденсационный рост при высокой относительной влажности). Ограничиваясь случаем полидисперсных систем однородных сферических частиц, рассмотрим трансформацию индикатрисы рассеяния для возможных изменений дисперсности и химического состава аэрозольных частиц. Расчеты проведены для одномодальных распределений, описываемых различными аналитическими выражениями.

При расчетах используются эффективные параметры функций распределения частиц по размерам – эффективный радиус r_{ef} и эффективная ширина распределения V_{ef} :

$$r_{ef} = M_3 / M_2; \quad V_{ef} = M_2 M_4 / M_3^2 - 1; \quad M_i = \int_0^{\infty} r^i f(r) dr, \quad (1)$$

где $f(r)$ – нормированная функция распределения частиц по размерам. Как показано в [9], оптические характеристики ансамблей аэрозольных частиц, описываемых различными функциями распределения с одинаковыми эффективными параметрами, слабо зависят от конкретного вида функции распределения. Поэтому при расчетах в качестве единых параметров функций распределения аэрозольных частиц по размерам использовался набор значений r_{ef} и V_{ef} .

Расчеты проводились для значений V_{ef} , равных 0,1; 0,25; 0,5; 1; 2,5 и r_{ef} , равных 0,05; 0,1; 0,5; 1; 2,5; 5, 10 мкм.

Для вычислений использованы 4 функции распределения.

1. Логнормальное распределение (два параметра r_0 и σ):

$$f(r) = (C/r) \exp(-\ln^2(r/r_0)/2\sigma^2). \quad (2)$$

Для него

$$r_{ef} = r_0 \exp(2,5 \sigma^2); \quad V_{ef} = \exp(\sigma^2) - 1. \quad (3)$$

Следовательно,

$$\sigma = \sqrt{\ln(V_{ef} + 1)}; \quad r_0 = r_{ef} / \exp(2,5 \sigma^2). \quad (4)$$

2. Гамма-распределение (два параметра $\alpha > 1$ и β):

$$f(r) = Cr^{\alpha-1} \exp(-r/\beta). \quad (5)$$

Для него

$$r_{ef} = (\alpha + 2)\beta; \quad V_{ef} = (\alpha + 3) / (\alpha + 2) - 1. \quad (6)$$

Следовательно,

$$\alpha = 1/V_{ef} - 2; \quad \beta = r_{ef} / (\alpha + 2). \quad (7)$$

Из условия $\alpha > 1$ следует, что V_{ef} для гамма-распределения не может превышать 0,333.

3. Распределение Юнге (два параметра r_1 и β):

$$f(r) = \begin{cases} C, & \text{если } r < r_1, \\ C(r/r_1)^{-\beta}, & \text{если } r \geq r_1. \end{cases} \quad (8)$$

Параметры r_1 и β для заданных значений V_{ef} и r_{ef} вычислялись для распределения Юнге методом подбора.

4. Обратное гамма-распределение (два параметра $\alpha > 1$ и β):

$$f(r) = Cr^{1-\alpha} e^{-\beta/r}. \quad (9)$$

Параметры α и β для заданных значений V_{ef} и r_{ef} вычислялись для обратного гамма-распределения методом подбора.

Значения параметров распределений, соответствующие заданным эффективным, приведены в таблице.

Для всех указанных функций распределения и набора параметров были проведены расчеты сечений рассеяния и сечений направленного рассеяния при следующих значениях параметров: длина волны света 0,55 мкм; вещественная часть показателя преломления: 1,33; 1,40; 1,45; 1,50; 1,60; 1,65; 1,80 и 2,20; мнимая часть показателя преломления: 0; 0,0005; 0,001; 0,005; 0,01; 0,03; 0,05 и 0,1. Указанный набор показателей преломления практически полностью перекрывает диапазон возможного изменения показателя преломления аэрозольного вещества. Расчеты сечений направленного рассеяния были выполнены для углов: 0–20° с шагом 5°; 30–170° с шагом 10 и 175, 180° (всего 22 угла).

Результаты расчетов подтвердили два известных вывода [4,9]: 1) сечения рассеяния и сечения направленного рассеяния почти не зависят от конкретного вида функции распределения частиц по размерам, а зависят от эффективных параметров распределения (от r_{ef} и V_{ef}); 2) зависимость между сечением направленного рассеяния и сечением рассеяния хорошо аппроксимируется линейно-логарифмическим соотношением

$$\lg S(\gamma) = A(\gamma) + B(\gamma) \lg \sigma, \quad (10)$$

где $S(\gamma)$ – сечение направленного рассеяния для угла γ ; σ – сечение рассеяния.

Значения параметров функций распределения

V_{ef}	r_{ef}	Распределение							
		логнормальное		гамма		Юнге		обратное гамма	
		r_0	σ	α	β	r_1	β	α	β
0,1	0,05	0,039	0,309	8	0,005	0,0565	9,6	16	0,5
	0,1	0,079	0,309	8	0,01	0,113	9,7	16	1,1
	0,5	0,394	0,309	8	0,05	0,56	9,6	16	5,5
	1	0,788	0,309	8	0,1	1,139	9,7	16	11
	2,5	1,969	0,309	8	0,25	2,82	9,67	16	27
	5	3,938	0,309	8	0,5	5,65	9,61	16	55
0,25	10	7,876	0,309	8	1	11,3	9,7	16	110
	0,05	0,0286	0,472	2	0,0125	0,048	6,62	10	0,2
	0,1	0,0573	0,472	2	0,025	0,097	6,62	10	0,5
	0,5	0,286	0,472	2	0,125	0,48	6,62	10	2,5
	1	0,573	0,472	2	0,25	0,965	6,62	10	5
	2,5	1,432	0,472	2	0,625	2,41	6,62	10	12
0,5	5	2,865	0,472	2	1,25	4,82	6,61	10	25
	10	5,729	0,472	2	2,5	9,64	6,61	10	50
	0,05	0,018	0,637			0,043	5,86	8	0,15
	0,1	0,0363	0,637			0,087	5,86	8	0,3
	0,5	0,181	0,637			0,43	5,86	8	1,5
	1	0,363	0,637			0,867	5,86	8	3
1	2,5	0,907	0,637			2,16	5,85	8	7,5
	5	1,813	0,637			4,33	5,85	8	15
	10	3,626	0,637			8,62	5,83	8	30
	0,05	0,00882	0,833			0,0397	5,46	7	0,1
	0,1	0,0176	0,833			0,079	5,45	7	0,2
	0,5	0,088	0,833			0,393	5,44	7	1
2,5	1	0,176	0,833			0,785	5,43	7	2
	2,5	0,441	0,833			1,95	5,41	6,99	4,98
	5	0,882	0,833			3,86	5,38	6,97	9,85
	10	1,764	0,833			7,62	5,33	6,97	19,7
	0,05	0,00219	1,119			0,0357	5,146	6,385	0,069
	0,1	0,00437	1,119			0,071	5,134	6,379	0,138
5	0,5	0,022	1,119			0,348	5,093	6,356	0,678
	1	0,044	1,119			0,688	5,064	6,377	1,34
	2,5	0,109	1,119			1,675	5,009	6,297	3,24
	5	0,219	1,119			3,25	4,945	6,246	6,24
	10	0,437	1,119			6,18	4,847	6,159	11,7

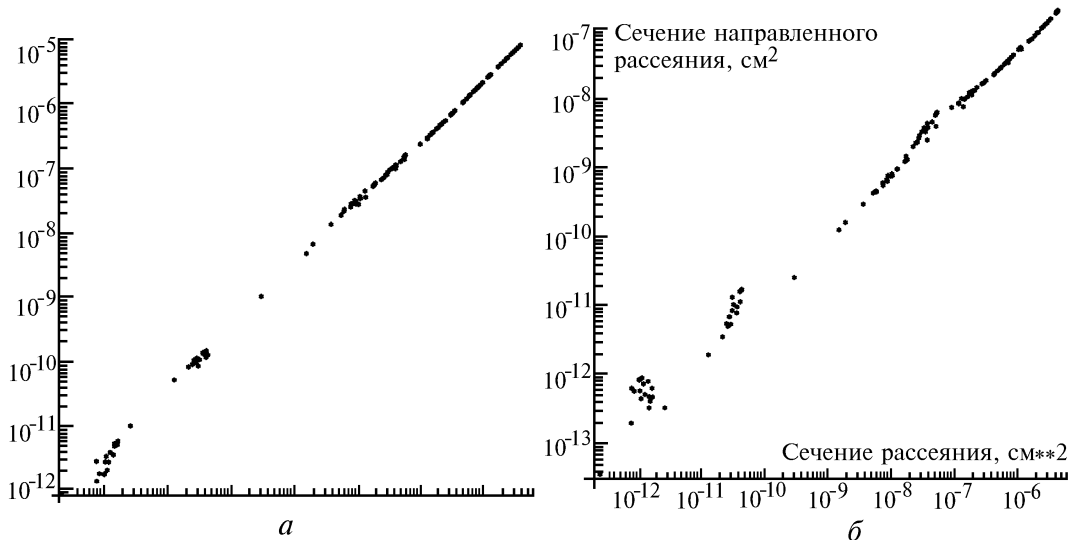


Рис. 1. Зависимость сечения направленного рассеяния от сечения рассеяния. Вещественная часть показателя преломления $n = 1,33$, мнимая часть $k = 0$; a – угол рассеяния $\gamma = 30^\circ$; b – угол рассеяния $\gamma = 120^\circ$

Сечение аэрозольного рассеяния $\sigma(0,55)$ можно получить из измерений метеорологической дальности видимости. Конкретный вид функции распределения аэрозольных частиц по

размерам при проведении экспериментальных измерений обычно неизвестен. Однако, основываясь на выводе 1, можно объединить все функции распределения при построении зависимости (10). Таким образом, мы строили зависимость (10) сразу по всем 128 точкам таблицы. Пример зависимости (10) для $\gamma = 30$ и 120° приведен на рис. 1.

Из рисунка видно, что для $\sigma(0,55) \geq 10^{-11} \text{ см}^2$ действительно практически безразличен конкретный вид аналитической функции распределения частиц по размерам. Для области $\sigma(0,55) < 10^{-11} \text{ см}^2$ наблюдается зависимость от вида функции распределения. Следует, однако, заметить, что эта область соответствует малоинтересному случаю ансамбля очень мелких, оптически неактивных частиц.

Исследовалась зависимость коэффициентов $A(\gamma)$ и $B(\gamma)$ формулы (10) от комплексного показателя преломления. Эта зависимость оказалась достаточно сложной и имеющей различный вид для разных углов, т.е. наблюдалась трансформация формы индикатрисы рассеяния с изменением величины комплексного показателя преломления. Следует также отметить, что зависимости $A(\gamma)$ и $B(\gamma)$ от комплексного показателя преломления оказались практически одинаковыми. Поэтому на рис. 2–4 представлены лишь примеры зависимости $A(\gamma)$ от вещественной и мнимой частей показателя преломления.

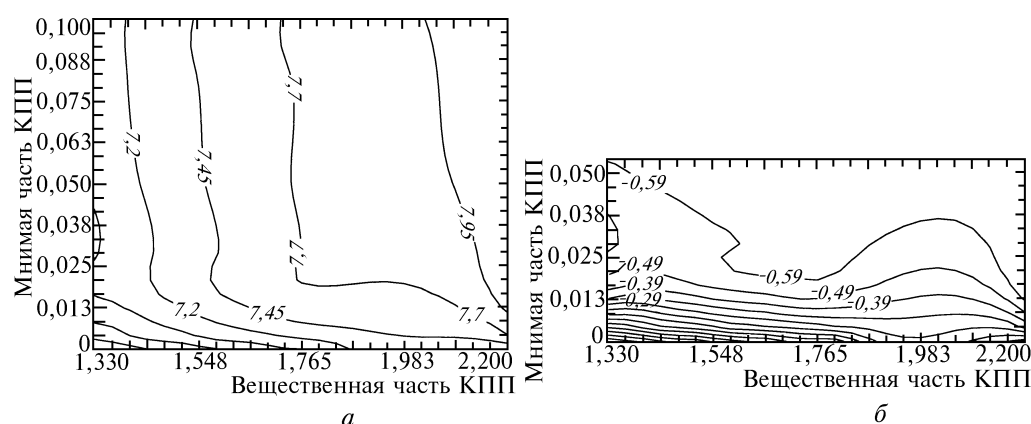


Рис. 2. Зависимость коэффициента $A(\gamma)$ от комплексного показателя преломления; a – угол рассеяния $\gamma = 0^\circ$; b – угол рассеяния $\gamma = 20^\circ$

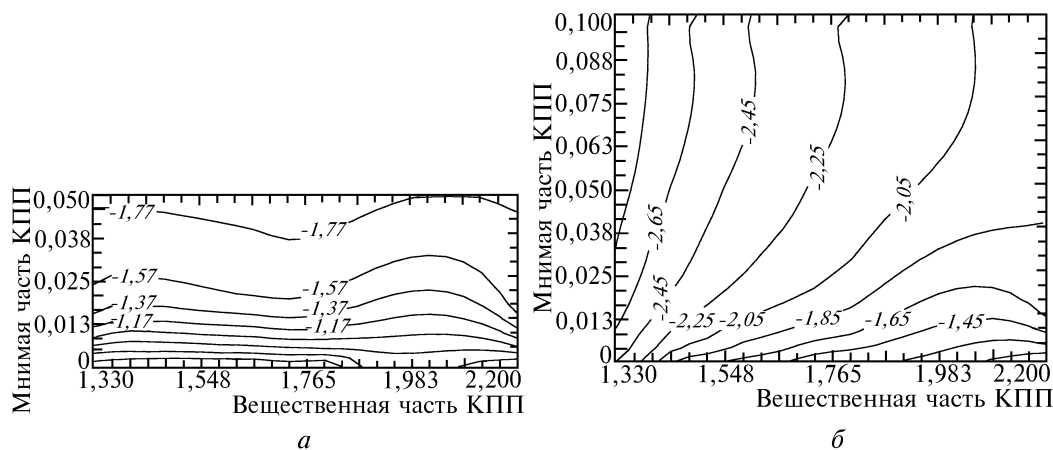


Рис. 3. Зависимость коэффициента $A(\gamma)$ от комплексного показателя преломления; a – угол рассеяния $\gamma = 40^\circ$; b – угол рассеяния $\gamma = 90^\circ$

Наблюдается несколько областей различных зависимостей $A(\gamma)$ и $B(\gamma)$ от комплексного показателя преломления вещества аэрозольных частиц: 1) область вблизи $n = 1,33$ с малыми значениями мнимой части показателя преломления ($\kappa < 0,01$); 2) область со значениями вещественной части показателя преломления $n > 1,70$; 3) область со значениями мнимой части показателя преломления $\kappa \geq 0,025 \div 0,030$.

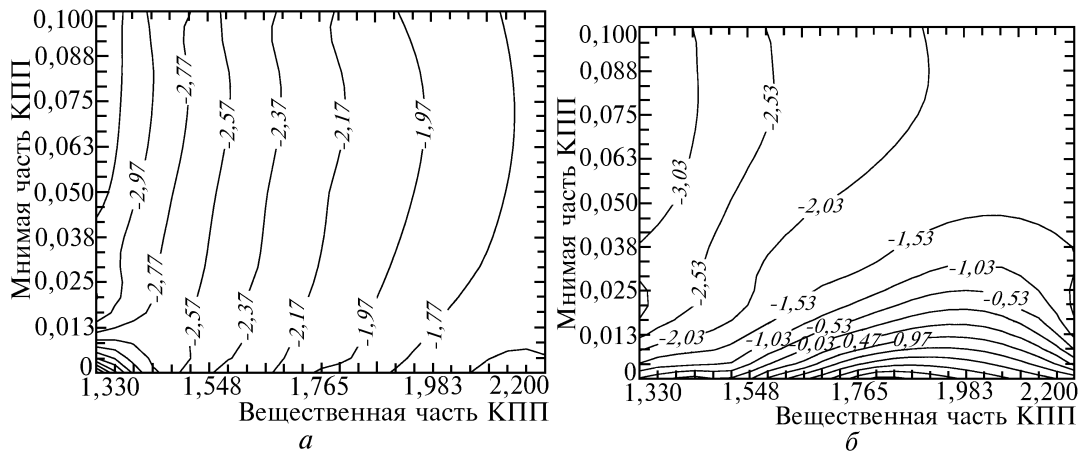


Рис. 4. Зависимость коэффициента $A(\gamma)$ от комплексного показателя преломления; a – угол рассеяния $\gamma = 140^\circ$; b – угол рассеяния $\gamma = 180^\circ$

В реальной несильно загрязненной атмосфере эффективное значение мнимой части комплексного показателя преломления редко превышает значение $\kappa = 0,01$, а вещественная часть изменяется в диапазоне от 1,33 до 1,65. Поэтому было более детально исследовано поведение $A(n, \kappa, \gamma)$ и $B(n, \kappa, \gamma)$ в области значений $n = 1,33 \div 1,65$ и $\kappa = 0 \div 0,03$. Некоторые результаты расчетов $A(n, \kappa)$ для разных углов рассеяния γ представлены на рис. 5 и 6. Для углов $30 \div 60^\circ$ почти не наблюдается зависимости от n , а в области углов $70 \div 110^\circ$ и $165 \div 180^\circ$ возрастание n ведет к росту коэффициента $A(n, \kappa)$. В малых углах $\gamma = 0 \div 20^\circ$ возрастание n ведет к уменьшению $A(n, \kappa)$. В углах $120 \div 140^\circ$ при значениях $n > 1,45$ наблюдается почти постоянство $A(n, \kappa)$ при разных κ , появляются области аномального поведения $A(n, \kappa)$ (смены зависимости) при углах $100 \div 160^\circ$.

Очевидно, эти особенности поведения индикатрисы рассеяния могут быть использованы при решении обратных задач оптики аэрозолей. Они должны соотноситься с эмпирически найденными типами (классами) оптической погоды, типами индикатрис.

Общие закономерности изменения поведения индикатрис на одной длине волны или интегральных в видимом диапазоне спектра обусловлены оптической плотностью полидисперсных аэрозолей (соотношением коэффициентов аэрозольного и молекулярного рассеяния) и величиной комплексного показателя преломления. Вид интегральной индикатрисы рассеяния фактически не несет информации о том, является ли распределение частиц по размерам одномодальным или полимодальным. Вероятно, более полную информацию о распределении аэрозольных частиц по размерам можно получить из измерений индикатрисы рассеяния в разных длинах волн.

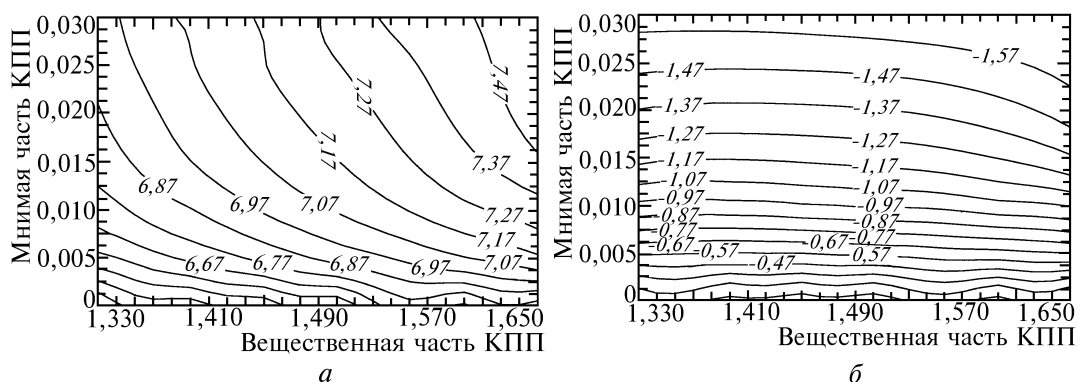


Рис. 5. Зависимость коэффициента $A(\gamma)$ от комплексного показателя преломления в области $n = 1,33 \div 1,65$; $\kappa = 0 \div 0,03$; a – угол рассеяния $\gamma = 0^\circ$; b – угол рассеяния $\gamma = 40^\circ$

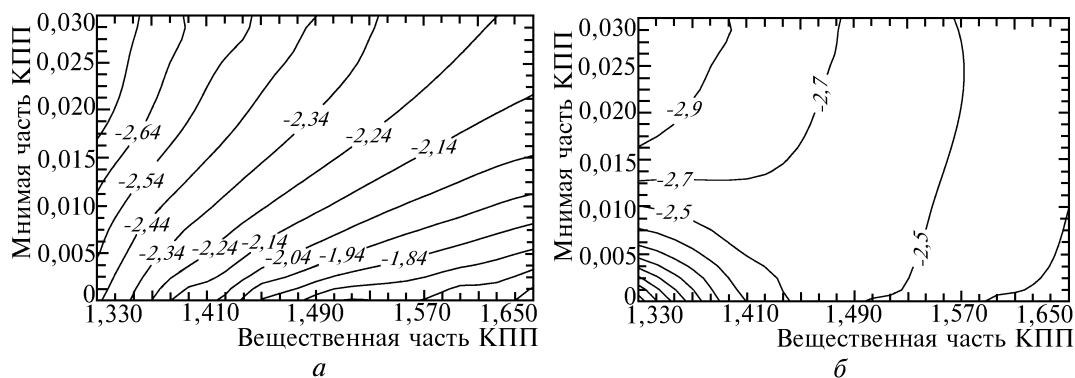


Рис. 6. Зависимость коэффициента $A(\gamma)$ от комплексного показателя преломления в области $n = 1,33-1,65$, $\kappa = 0-0,03$; a – угол рассеяния $\gamma = 90^\circ$; b – угол рассеяния $\gamma = 140^\circ$

Важным обстоятельством является отсутствие заметной зависимости $A(n, \kappa)$ от n в области $\gamma = 30 \div 60^\circ$ [10,11], для которой достаточно хорошо выполняется соотношение

$$\sigma = \text{const } S(30 \div 60^\circ). \quad (11)$$

С одной стороны, все это позволяет достаточно просто и с удовлетворительной точностью моделировать ряд оптических характеристик атмосферных аэрозолей (коэффициентов рассеяния и направленного рассеяния, индикатрис, оптической толщины) по неполным экспериментальным оптическим или микрофизическим данным.

С другой стороны, очевидно, что для решения обратных задач оптики аэрозолей недостаточно данных по индикатрисе рассеяния на одной длине волны. Необходимы также, как минимум, сведения о спектральном ходе коэффициента рассеяния и комплексного показателя преломления аэрозольного вещества. При этом возможно различие не более 3-4 мод.

Для нахождения решения удобно использовать априорно заданные функции распределения для разных мод и полученный массив данных для r_{ef} , V_{ef} , n , κ . Использование в этом случае эмпирических зависимостей между оптическими и микрофизическими параметрами аэрозолей затруднительно.

1. Аэрозоль и климат / Под ред. К.Я. Кондратьева. Л.: Гидрометеоздат, 1991. 541 с.
2. Зуев В.Е., Креков Г.М. Оптические модели атмосферы. Л.: Гидрометеоздат, 1986. 256 с.
3. Ивлев Л.С., Андреев С.Д. Оптические свойства атмосферных аэрозолей. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 358 с.
4. Горчаков Г.И., Свириденков М.А. // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1979. Т. 15. N 1. С. 53–59.
5. Бартенева О.Д., Довгялло Е.Н., Полякова Е.А. // Труды ГГО. Вып. 220. 1967. 244 с.
6. Розенберг Г.В., Горчаков Г.И., Георгиевский Ю.С., Любимцева Ю.С. // Физика атмосферы и проблемы климата. М.: Наука, 1980. С. 236–249.
7. Ивлев Л.С. Химический состав и структура атмосферных аэрозолей. Л.: Изд-во ЛГУ, 1982. 368 с.
8. Лившиц Г.Ш., Соловьева А.Н., Травина Т.Б. // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1974. Т. 10. N 8. С. 991–993.
9. Лукашевич Н.Л., Шари В.П. // Численное решение задач атмосферной оптики. М.: Изд. Ин. прикл. матем. им. М.В. Келдыша АН СССР, 1984. С. 199–211.
10. Пясковская-Фесенкова Е.В. Исследование рассеяния света в земной атмосфере. М.: Изд. АН СССР, 1957. 218 с.
11. Шифрин К.С., Чаянова Э.А. // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1967. Т. 3. N 3. С. 274–283.

Институт физики при Санкт-Петербургском государственном университете

Поступила в редакцию
21 октября 1994 г.

A.V. Vasilyev, L.S. Ivlev. Numerical Simulation of Optical Characteristics of Spherical Polydispersions.

Numerical simulation of scatter and directed scatter cross-sections by homogeneous spherical polydispersions with different distribution functions within wide range of complex refractive index of 550 nm wavelength was performed. Dependences of the directed scatter cross-sections on the complex refractive index are shown graphically.