

И.Н. Соколик

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИДИСПЕРСНОЙ АЭРОЗОЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

Построены простые параметризационные соотношения для вычисления коэффициента ослабления, альbedo однократного рассеяния и среднего косинуса индикатрисы рассеяния аэрозоля по параметрам его микроструктуры.

Аэрозоль является одним из важных компонентов атмосферы, влияющих на формирование и перенос радиации. Однако количественные оценки вклада аэрозолей в радиационные процессы затруднены рядом причин: сильной изменчивостью структуры, недостатком и большой неопределенностью экспериментальных данных и др. [1]. В связи с этим рассмотрим вопросы, связанные с моделированием оптических характеристик аэрозолей, с выявлением особенностей влияния микрофизики на оптические свойства и в первую очередь на те оптические характеристики, которые используются для вычисления переноса радиации в атмосфере.

Наиболее общепринятым методом расчета радиации в ряде радиационных блоков, развитых в климатических моделях, в настоящее время считается метод δ -Эддингтона [2]. При использовании этого метода необходимыми оптическими характеристиками являются: τ — оптическая толщина (или коэффициент ослабления K_{ext}), ω — альbedo однократного рассеяния, g — средний косинус индикатрисы рассеяния [3].

Как правило, для расчета оптических свойств аэрозоля используется теория Ми [4]. Согласно этой теории, в предположении однородности и сферичности частицы, для выбранной микроструктуры (n и κ — действительной и мнимой части показателя преломления и $\rho = 2\pi r/\lambda$ — параметра Ми, где r — размер частицы; λ — длина волны) можно вычислить требуемые оптические свойства монодисперсного аэрозоля. Ввиду того что аэрозольные системы являются полидисперсными, их оптические свойства зависят и от функции распределения частиц по размерам $f(r)$. Среди аналитических моделей $f(r)$ наиболее общепризнанным является логнормальное распределение [5, 6]:

$$f(r) = (\sqrt{2\pi\sigma^2})^{-1} \exp [\ln^2 (r/r_0)/2\sigma^2], \quad (1)$$

которое характеризуется σ^2 — дисперсией логарифма радиусов частиц и r_0 — медианным радиусом распределения счетной концентрации.

Однако непосредственное использование расчетов по теории Ми в радиационных блоках климатических моделей затруднено по техническим причинам. Применение простых аналитических решений теории Ми (приближения мелких и крупных частиц и т.д.) возможно лишь в ограниченных областях значений микрофизических параметров. В этой связи важно получение простых параметризаций оптических характеристик полидисперсного аэрозоля по исходным параметрам его микроструктуры. Принципиальная возможность построения таких параметризаций обусловлена тем, что учет распределения частиц по размерам существенно сглаживает зависимость оптических характеристик от параметров микроструктуры [7].

В настоящей работе представлены результаты построения параметризационных формул для расчетов K_{ext} , ω и g по параметрам микроструктуры в предположении логнормального распределения частиц по размерам. Диапазон значений параметров микроструктуры ρ_0 ($\rho_0 = 2\pi r_0/\lambda$), σ^2 , n и κ , для которого проводилось построение параметризаций, был выделен на основе анализа имеющегося обширного литературного материала как наиболее представительный для моделей атмосферного аэрозоля. В работе [8] приведены экспериментальные данные и современные модельные оценки возможных диапазонов изменений параметров логнормального распределения для фракций атмосферного аэрозоля. Для субмикронной (аккумулятивной) фракции возможные значения медианных радиусов r_0 лежат в диапазоне $r_0 = 0,016 \div 0,22$ мкм ($\rho_0 = 0,18 \div 2,5$ для $\lambda = 0,55$ мкм) и значения дисперсий $\sigma^2 = 0,1 \div 0,85$; для грубодисперсной фракции $r_0 = 0,18 \div 6,2$ мкм; $\sigma^2 = 0,1 \div 0,9$ ($\rho_0 = 2 \div 70$).

Для дымового аэрозоля, интерес к которому особенно возрос в последнее время в связи с проблемой возможных климатических последствий ядерной войны, параметр r_0 может изменяться в диапазоне $r_0 = 0,02 \div 0,6$ мкм ($\rho_0 = 0,28 \div 6$) в зависимости от типа дыма [9, 10].

Действительная и мнимая части показателя преломления для различных моделей аэрозоля лежат в основном в диапазонах $n = 1,5 \div 1,75$; $\kappa = 0 \div 0,5$ [11].

Для построения параметризаций были проведены детальные расчеты по теории Ми полидисперсных оптических характеристик в выделенной области значений параметров микроструктуры. Расчетный алгоритм был составлен с учетом результатов работы [12] и позволяет проводить вычисления

коэффициента ослабления, коэффициента рассеяния, альbedo однократного рассеяния, элементов приведенной матрицы рассеяния, коэффициента асимметрии индикатрисы рассеяния без ограничения диапазона изменения параметров микроструктуры атмосферного аэрозоля. Правильность выполнения расчетов контролировалась на этапах вычисления монодисперсных и полидисперсных характеристик путем сопоставления с известными расчетными данными, например [13, 14].

На основе проведенных расчетов были получены параметризационные формулы для вычисления K_{ext}^* (где $K_{\text{ext}}^* = K_{\text{ext}} / N\pi^2$; N — счетная концентрация аэрозольных частиц), ω и g в диапазонах изменения параметров: $\rho_0 = 1 \div 3,5$; $n = 1,5 \div 1,75$; $\kappa = 0 \div 0,5$. Выделенная область значений параметров позволяет проводить вычисления оптических характеристик, необходимых для расчета прохождения видимого света через слои аэрозоля с размерами частиц, лежащими в области субмикронной и грубо-дисперсной фракций.

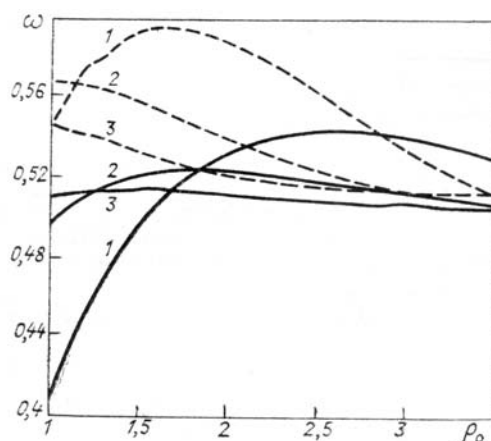
Параметризационные формулы получены следующим образом. При фиксированных κ и σ^2 каждая оптическая характеристика A представлялась как функция двух переменных:

$$A = A(\rho_0, n). \quad (2)$$

Функция (2) строилась по параметрам ρ_0 и n , поскольку именно эти параметры микроструктуры являются наиболее изменчивыми при трансформации атмосферного аэрозоля [11]. Сетка по κ и σ^2 выбиралась из соображений возможности применения линейной интерполяции для получения оптических характеристик в промежуточных точках. Была выбрана сетка, для которой σ^2 принимала значения 0,1; 0,3; 0,5, что соответствовало «узкому», «среднему» и «широкому» распределению. Сеточные значения κ для параметризации K_{ext}^* и g были равны 0; 0,01; 0,1; 0,35; 0,5; для параметризации ω — 0,01; 0,05; 0,1; 0,2; 0,35; 0,5.

Исследования, проведенные для выбора сетки, позволили сделать ряд общих выводов о характере поведения K_{ext}^* , ω и g при изменении σ^2 и κ в рассматриваемом диапазоне параметров. Уменьшение σ^2 от 0,5 до 0,1 приводит к уменьшению K_{ext}^* . Для среднего косинуса и альbedo однократного рассеяния установлен более сложный характер зависимости от σ^2 . В области сильного поглощения ($\kappa \geq 0,1$) средний косинус уменьшается с уменьшением σ^2 . В области слабого поглощения зависимость g от σ^2 определяется значениями параметров n и ρ_0 . При уменьшении σ^2 от 0,5 до 0,3 для слабого поглощения ($\kappa < 0,1$) ω увеличивается вне зависимости от остальных параметров. В других областях значений σ^2 и κ величина ω может как расти, так и падать, что определяется значениями n и ρ_0 . В качестве примера на рисунке показан ход ω для трех значений $\sigma^2 = 0,1$; 0,3; 0,5 при $n = 1,5$ и 1,75; $\kappa = 0,2$. На рисунке видно, что изменение ω при изменениях σ^2 зависит от диапазона значений ρ_0 и n .

Исследование влияния поглощения показало, что при увеличении поглощения средний косинус индикатрисы рассеяния g растет для «узкого» распределения $\sigma^2 = 0,1$ в области $\rho_0 \gtrsim 2$ (это значение ρ_0 зависит от n). Причем рост κ от 0 до 0,1 вызывает увеличение значения g для любых значений ρ_0 , дальнейшее изменение κ от 0,1 до 0,5 может приводить к уменьшению или к увеличению g . Такой же характер зависимости g от κ сохраняется для распределений с $\sigma^2 = 0,3$; 0,5, а значения ρ_0 , которые при $n = 1,75$ меньше 1, увеличиваются до 1,5 при $n = 1,5$.



Зависимость альbedo однократного рассеяния от ρ_0 для трех значений σ^2 , равных 0,1 (1); 0,3 (2); 0,5 (3); сплошные кривые для $n = 1,5$; штриховые — для $n = 1,75$

Наиболее чувствительной характеристикой к изменениям κ является альbedo однократного рассеяния ω . В области κ от 0 до 0,01 ω с достаточной точностью линейно зависит от κ . При больших

значениях κ линейная зависимость теряется, что обуславливает необходимость большего, чем для других оптических параметров, количества сеточных точек для вычисления ω .

Вид параметризационных выражений (2) выбирался на основе анализа зависимости оптических параметров от ρ_0 для конкретного набора сеточных значений κ_c и σ^2 .

Параметризационная формула для K_{ext}^* строилась с учетом известных приближений для коэффициента ослабления в пределах мелких и крупных частиц. При $\rho \ll 1$ в случае чистого рассеяния для фактора эффективности ослабления справедливо $Q_{\text{ext}} \sim \rho^4$; при преобладании поглощения $Q_{\text{ext}} \approx Q_{\text{abs}} \sim \rho$; при $\rho \gg 1$ $Q_{\text{ext}} = 2$ [4].

Если рассматривается ослабление полидисперсной аэрозольной системой с функцией распределения частиц по размерам вида (1), то при $\rho \ll 1$

$$K_{\text{ext}} \sim \lambda^2 \int \rho^2 Q_{\text{ext}} f(\rho) d\rho \sim \lambda^2 \int \rho^6 f(\rho) d\rho \sim \lambda^2 \rho_0^6, \quad (3)$$

а для случая преобладающего поглощения

$$K_{\text{ext}} \sim \lambda^2 \int \rho^2 Q_{\text{ext}} f(\rho) d\rho \sim \lambda^2 \int \rho^3 f(\rho) d\rho \sim \lambda^2 \rho_0^3, \quad (4)$$

при $\rho \gg 1$

$$K_{\text{ext}} \sim \lambda^2 \rho_0^2. \quad (5)$$

Принимая во внимание характер зависимости коэффициента ослабления от ρ_0 (3), (4), (5) в асимптотических режимах, параметризационную формулу для K_{ext}^* в рассматриваемой промежуточной области значений запишем в виде

$$K_{\text{ext}}^* = a_1 \rho_0^6 + a_2 \rho_0^5 + a_3 \rho_0^4 + a_4 \rho_0^3 + a_5 \rho_0^2, \quad (6)$$

где $a_i = a_i(n)$, $i = 1 \dots 5$ при $\kappa = \text{const}$, $\sigma^2 = \text{const}$. Для вышеуказанного диапазона изменений ρ_0 , n , κ , σ^2 были получены значения коэффициентов a_i методом нелинейной регрессии. Использование a_i в (6) позволяет восстанавливать значения K_{ext}^* с достаточно высокой точностью.

Дальнейшее исследование зависимости коэффициентов a_i от n показало, что a_i можно представить простыми аналитическими функциями, а это приводит к существенному упрощению параметризации K_{ext}^* при допустимом понижении точности. Окончательный результат параметризации K_{ext}^* представлен в табл. 1.

Для случая «широкого» распределения $\sigma^2 = 0,5$ коэффициенты a_i слабо чувствительны к изменениям действительной части показателя преломления, что позволяет пренебречь этой зависимостью. Коэффициенты a_i , представленные в табл. 1 для $\sigma^2 = 0,5$, выбирались для $n = 1,6$. При восстановлении K_{ext}^* по этим коэффициентам относительная ошибка не превышает 5%, и лишь для узкой области значений параметров ($\kappa < 0,35$; $1 \leq \rho_0 < 1,3$; $n = 1,5$ и $1,75$) максимальная относительная ошибка достигает 7–9%. Следует отметить, что с увеличением ρ_0 от 1 до 3,5 величина максимальной относительной ошибки падает до 1%.

Для случая «узкого» распределения зависимость a_i от n наиболее сильная:

$$a_i^* = \kappa_1 n^2 + \kappa_2 n + \kappa_3. \quad (7)$$

Вычисленные коэффициенты κ_i (см. табл. 1) позволяют восстанавливать K_{ext}^* с точностью до 5%.

Для распределения с $\sigma^2 = 0,3$ установлена линейная зависимость a_i от n . Использование полных выражений для a_i (см. табл. 1) позволяет определять K_{ext}^* с точностью до 3%.

Как показал анализ расчетных данных, зависимость ω и g от ρ_0 определяется тем, какие значения принимают параметры σ^2 и κ . Поэтому в зависимости от области значений κ и σ^2 параметризационные формулы для ω и g брались нескольких видов: для $\kappa = \text{const}$ и $\sigma^2 = \text{const}$

$$\omega = b_1(n) + b_2(n) \rho_0; \quad (8)$$

$$\omega = c_1(n) + c_2(n) / \rho_0; \quad (9)$$

$$\omega = d_1(n) + d_2(n) \rho_0 + d_3(n) \rho_0^2 \quad (10)$$

(аналогично для g).

Коэффициенты a_i для параметризации коэффициента ослабления

Коэффициенты	κ	$\sigma^2=0,1$	$\sigma^2=0,3$	$\sigma^2=0,5$
a_1	0	$-0,3350n^2+1,765n-0,8503$	$-0,0457n+0,0619$	$-0,0135$
	0,01	$-0,3121n^2+1,0003n-0,7880$	$-0,0437n+0,0592$	$-0,0132$
	0,1	$-0,1789n^2+0,5585n-0,4296$	$-0,0310n+0,0403$	$-0,0097$
	0,35	$-0,0300n^2+0,0799n-0,0540$	$-0,2079n+0,0076$	$-0,0039$
	0,5	$-0,0343n^2+0,0960n-0,0700$	$-0,0075n+0,0064$	$-0,0050$
a_2	0	$3,2518n^2-10,2561n+7,9544$	$0,4214n-0,5418$	$0,1438$
	0,01	$3,0600n^2-9,6211n+7,4468$	$0,4065n-0,5224$	$0,1401$
	0,1	$1,7543n^2-5,3679n+4,0573$	$0,2929n-0,3615$	$0,1056$
	0,35	$0,3029n^2-0,7809n+0,5147$	$0,0809n-0,0702$	$0,0456$
	0,5	$0,1936n^2-0,4589n+0,2924$	$0,0718n-0,0537$	$0,0525$
a_3	0	$-10,7295n^2+32,948n-24,958$	$-1,2889n+1,4696$	$-0,5672$
	0,01	$-10,0986n^2+30,9175n-23,358$	$-1,2518n+1,4297$	$-0,5550$
	0,1	$-5,7350n^2+17,0086n-12,5076$	$-0,9349n+1,0257$	$-0,4253$
	0,35	$-0,9228n^2+2,152n-1,296$	$-0,2708n+0,1703$	$-0,1956$
	0,5	$-0,5629n^2+1,1743n-0,6816$	$-0,2333n+0,1219$	$-0,2077$
a_4	0	$13,3878n^2-39,6012n+29,0813$	$1,2134n-0,7817$	$0,9503$
	0,01	$12,5786n^2-37,0615n+27,1283$	$1,1964n-0,7903$	$0,9319$
	0,1	$6,9786n^2-19,6691n+13,8963$	$0,9645n-0,6313$	$0,7339$
	0,35	$0,8785n^2-1,4504n+0,5758$	$0,2639n+0,0897$	$0,3544$
	0,5	$0,5071n^2-0,6297n+0,2067$	$0,2417n+0,0684$	$0,3513$
a_5	0	$-5,4216n^2+15,5890n-11,1565$	$0,1995n-0,7129$	$0,0398$
	0,01	$-5,0786n^2+14,5356n-10,3611$	$0,1830n-0,6664$	$0,0449$
	0,1	$-2,6800n^2+7,2458n-4,9084$	$0,1186n-0,4356$	$0,1233$
	0,35	$-0,1379n^2+0,1355n+0,3981$	$0,1811n-0,2829$	$0,3161$
	0,5	$-0,0536n^2+0,2191n+0,3637$	$0,1072n-0,1061$	$0,3257$

Таблица 2

Параметризация среднего косинуса

κ	σ^2	Параметризационное выражение	Δg
0	0,5	$(1,6395-0,6381n) + (-0,1289+0,0887n)\rho_0$	0,010
	0,3	$(1,4637-0,5202n) + (-0,0162+0,0089n)\rho_0$	0,015
	0,1	$(-0,6547+0,5633n) + (1,4516-0,691n)\rho_0 + (-0,2076+0,0855n)\rho_0^2$	0,020
0,01	0,5	$(1,6216-0,6233n) + (-0,1314+0,0989n)\rho_0$	0,007
	0,3	$(1,5380-0,5322n) + (-0,1510+0,0623n)\rho_0$	0,020
	0,1	$(-0,7031+0,5812n) + (1,4743-0,6981n)\rho_0 + (-0,2148+0,0905n)\rho_0^2$	0,020
0,1	0,5	$(1,3926-0,4408n) + (-0,0824+0,0856n)\rho_0$	0,013
	0,3	$(1,3151-0,2837n) + (-0,0891-0,0660n)\rho_0$	0,021
	0,1	$(1,8473-0,5929n) + (-1,3498+0,6059n)\rho_0$	0,019
0,35	0,5	$(1,0701-0,0787n) + (-0,0148-0,1114n)\rho_0$	0,006
	0,3	$(1,1223-0,1102n) + (-0,1806-0,0591n)\rho_0$	0,009
	0,1	$(1,337-0,2190n) + (-0,8608+0,2247n)\rho_0$	0,008
0,5	0,5	$(1,0657-0,0727n) + (-0,1091-0,0607n)\rho_0$	0,007
	0,3	$(1,0756-0,0817n) + (-0,2258-0,0418n)\rho_0$	0,007
	0,1	$(1,2455-0,1607n) + (-0,7997+0,1728n)\rho_0$	0,007

Параметризационные формулы вида (10) оказались необходимыми только для случая «узкого» распределения. Для «широкого» и «среднего» распределений ω и g при слабом поглощении линейно зависят от ρ_0 , а при увеличении поглощения зависимость описывается видом (9). Причем для g при сильном поглощении зависимость от ρ_0 описывается видом (9) для любой дисперсии.

Исследование полученных коэффициентов в параметризационных формулах (8)–(10) выявило их линейную зависимость от n для любого набора значений κ и σ^2 , что было использовано, как и в случае исследования K_{ext}^* , для упрощения параметризации.

Окончательные параметризационные выражения, полученные для g и ω , представлены соответственно в табл. 2 и 3. Здесь же указаны ошибки параметризации:

$$\Delta A = \max_{\substack{1 < \rho_0 < 3,5 \\ 1,5 \leq n \leq 1,75}} [\Delta A(n, \rho_0)], \quad (11)$$

т.е. ошибка ΔA является максимально возможной абсолютной погрешностью восстановления оптических характеристик по всему рассматриваемому диапазону параметров микроструктуры. Средняя ошибка параметризации будет существенно меньше, поскольку коэффициенты в параметризационных формулах вычислялись методом нелинейной регрессии.

Таким образом, на основе анализа прямых расчетов по теории Ми построены параметризационные формулы (см. табл. 1, 2, 3) для вычисления оптических характеристик K_{ext}^* , ω и g . Предлагаемые параметризации могут быть использованы для расчета оптических свойств аэрозоля в климатических моделях, а также для оперативной интерпретации экспериментальных данных по микрофизике аэрозоля.

Таблица 3

Параметризация альbedo однократного рассеяния

κ	σ^2	Параметризационное выражение	$\Delta\omega$
0,01	0,5	$(0,9635+0,0061n) + (-0,005-0,0222n)\rho_0$	0,003
	0,3	$(0,8766+0,0662n) + (0,0504-0,0489n)\rho_0$	0,005
	0,1	$(0,5704+0,2125n) + (0,2264-0,1109n)\rho_0 + (-0,0224+0,0059n)\rho_0^2$	0,005
0,05	0,5	$(0,7774+0,0225n) + (-0,02-0,0242n)\rho_0$	0,009
	0,3	$(0,5921+0,1696n) + (0,0933-0,0937n)\rho_0$	0,010
	0,1	$(-0,5749+0,7767n) + (0,8222-0,4219n)\rho_0 + (-0,0973+0,0381n)\rho_0^2$	0,010
0,1	0,5	$(0,5414+0,0896n) + (0,0111-0,0350n)\rho_0$	0,010
	0,3	$(0,2563+0,2954n) + (0,1705-0,1353n)\rho_0$	0,015
	0,1	$(-1,1545+1,0186n) + (1,0714-0,5353n)\rho_0 + (-0,1347+0,0521n)\rho_0^2$	0,015
0,2	0,5	$(0,2946+0,1505n) + (0,0574-0,0413n)\rho_0$	0,007
	0,3	$(0,0354+0,3241n) + (0,1603-0,1082n)\rho_0$	0,015
	0,1	$(-1,3276+1,0293n) + (1,0276-0,5148n)\rho_0 + (-0,1326+0,0563n)\rho_0^2$	0,015
0,35	0,5	$(0,516-0,0018n) + (-0,3302+0,1698n)/\rho_0$	0,005
	0,3	$(0,5924-0,0537n) + (-0,6001+0,3331n)/\rho_0$	0,005
	0,1	$(-1,0132+0,7739n) + (0,7676-0,3610n)\rho_0 + (-0,1012+0,0417n)\rho_0^2$	0,012
0,5	0,5	$(0,5152+0,0061n) + (-0,3199+0,1412n)/\rho_0$	0,005
	0,3	$(0,5494-0,0209n) + (-0,5168+0,2503n)/\rho_0$	0,003
	0,1	$(0,5915-0,0386n) + (-0,8541+0,4149n)/\rho_0$	0,009

В заключение автор благодарит Г.С. Голицына и А.С. Гинзбурга за полезные обсуждения.

1. World Climate Programme. WCP 55-Reports of the Experts meeting on aerosols and their climatic effects. WMO. 1983. 107 p.
2. Joseph I. K., Wiscombe W. J., Weinman J. A. // J. Atmos. Sci. 1976. V. 33. № 12. P. 2452–2459.
3. Stephens G. L. // Mon. Wea. Rev. 1984. V. 112. P. 826–867.
4. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир, 1971. 165 с.
5. Whitby K. T. Modeling of atmospheric aerosol particle size distribution. Progress report EPA RAPS 800971. Particle Tech. Lab. Minnesota, 1975. 168 p.

6. Емиленко А. С., Толстобров В. Г. Рассеяние света полидисперсным золев. М.: Наука, 1981. 210 с.
7. Розенберг Г. В. //УФН, 1968. Т. 95. № 1. С. 159–208.
8. Зуев В. Е., Креков Г. М. Оптические модели атмосферы. Т. 2. Л.: Гидрометеиздат, 1986. 256 с.
9. Penner J. E., William M. P. Coagulation in smoke plumes after a nuclear war /Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-93192. 1986. 21 p.
10. Соколик И. Н. //Изв. АН СССР. ФАО. 1988. Т. 24. № 3. С. 274–279.
11. Ивлев Л. С., Андреев С. Д. Оптические свойства атмосферных аэрозолей, Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1986. 360 с.
12. Wiscombe W. J. //Appl. Opt. 1980. V. 19. P. 1505–1509.
13. Шифрин К. С., Зельманович И. Л. Таблицы по светорассеянию. Т. 1, 2. Л.: Гидрометеиздат, 1968.
14. Козлов В. С., Фадеев В. Я. Таблицы оптических характеристик светорассеяния мелкодисперсного аэрозоля с логнормальным распределением по размерам. Томск, 1981. 64 с. (Препринт /Ин-т оптики атмосферы СО АН СССР, №31).

Институт физики атмосферы АН СССР,
Москва

Поступила в редакцию
12 декабря 1988 г.

I. N. Sokolik. Parametrization of Optical Characteristics of a Polydispersed Aerosol System,

Simple parametrization relations are constructed, which allow one to calculate the extinction coefficient, single scattering albedo, and the mean cosine of the aerosol scattering phase function using the microstructure parameters of the aerosol.