

А.Д. Егоров, И.А. Потапова, Ю.Б. Ржонсницкая, Н.А. Саноцкая

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И МИКРОСТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ

A.D. Yegorov, I.A. Potapova, Yu.B. Rzhonsnitskaya, N.A. Sanotskaya

DETERMINING OF OPTICAL AND MICROSTRUCTURAL CHARACTERISTICS OF ATMOSPHERIC AEROSOLS

Рассмотрена проблема изменчивости рассеивающих свойств аэрозоля. Разработаны методы определения аэрозольной микроструктуры. Выполнены моделирование оптических свойств аэрозоля и анализ результатов измерения его параметров. Подтверждена эффективность метода оптических измерений микроструктуры. Проанализирован эффект коррекции рассеивающих свойств аэрозоля с учетом радиальной изменчивости его показателя преломления.

Ключевые слова: оптические измерения, атмосфера, аэрозольная микроструктура, моделирование свойств частиц.

Variability problem of the scattering aerosol properties is considered. Methods to determine aerosol microstructure are elaborated. Modeling of aerosol optical properties and analysis of the measurements the proper parameters are obtained. The effectiveness of the optical microstructure measurements has been confirmed. The effect of correction of scattering properties depending on the refractive index radial variability has been considered.

Key words: optical measurements, atmosphere, aerosol microstructure, modeling of properties of particles.

В работе [Yegorov, 2008] для анализа экспериментальных данных рассмотрена модель неоднородной частицы с радиально изменяющимся показателем преломления в оболочке, покрывающей однородное ядро. Отмечено, что рассмотренная модель может быть использована для интерпретации результатов измерения характеристик аэрозоля различными оптическими приборами. Важной особенностью интерпретации является необходимость знания оптико-микроструктурных связей частиц для определения аэрозольной микроструктуры по данным измерений оптических параметров среды. Задача нахождения этих связей особенно сложна в условиях загрязненной атмосферы крупных городов. При ее решении следует учитывать существование различных источников аэрозоля, поставляющих в атмосферу частицы, различающиеся по размеру, химическому составу, оптическим характеристикам. Среди факторов, усложняющих задачу, можно выделить значительную изменчивость характеристик рассеяния микроструктур, не укладывающуюся в рамки теории рассеяния света однородной частицей.

В настоящей работе рассматриваются особенности аэрозоля, учет которых способствует повышению достоверности результатов определения аэрозольных характеристик за счет уменьшения их зависимости от свойств частиц. С этой целью выполняется моделирование оптических свойств частиц атмосферного аэрозоля, учитывающее данные измерений.

**Моделирование оптических свойств
неоднородной аэрозольной частицы**

Математическое моделирование рассеяния частицей электромагнитных волн с круговой частотой $\omega = kc$ и напряженностями электрического $\mathbf{E} \exp(i\omega t)$ и магнитного $\mathbf{H} \exp(i\omega t)$ полей основано на методе, развивающем метод работы [Перельман, 2002], и предполагает решение относительно векторов \mathbf{E} , \mathbf{H} системы уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H} &= ikm^2 \mathbf{E}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -ik \mathbf{H}, \end{aligned} \quad (1)$$

где k – волновое число; c – скорость света; $m = n - i\chi$ – комплексный показатель преломления частицы.

Обозначим через r_1 радиус частицы, r – расстояние от центра, $\rho = kr$ – волновое расстояние, $\rho_1 = kr_1$ – приведенный радиус частицы, m_1 – показатель преломления атмосферы. Показатель преломления $m(\rho)$ частицы задается функцией от ρ ($0 \leq \rho \leq \rho_1$); частица характеризуется показателем преломления в виде:

$$\begin{aligned} m(\rho_0) &= m_0 & 0 \leq \rho \leq \rho_0, \\ m(\rho) & & \rho_0 < \rho \leq \rho_1, \\ m(\rho_1) &= m_1 & \rho > \rho_1. \end{aligned}$$

В рассмотрение вводятся потенциалы Дебая D , B , с которыми компоненты напряженностей электрического и магнитного полей в сферической системе координат ρ , θ , φ связаны соотношениями:

$$\begin{aligned} E_r &= i \left(D + \frac{\partial}{\partial \rho} [D' / m^2] \right) \cos \varphi, \\ E_\theta &= (B / \sin \theta + i D''_{\rho\theta} / m^2) \rho^{-1} \cos \varphi, \\ E_\varphi &= -(B'_\theta + i D'_\rho / m^2 \sin \theta) \rho^{-1} \sin \varphi, \\ H_r &= i (B m^2 + D''_{\rho\rho}) \sin \varphi, \\ H_\theta &= (D / \sin \theta + B''_{\rho\theta}) \rho^{-1} \sin \varphi, \\ H_\varphi &= (D'_\theta + i B'_\rho / \sin \theta) \rho^{-1} \cos \varphi. \end{aligned} \quad (2)$$

Уравнения, которыми описываются потенциалы D , B , можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \Delta(D\rho^{-1} \cos \varphi) + (D m^2 - 2 m' / m) \rho^{-1} \cos \varphi &= 0, \\ \Delta(B\rho^{-1} \sin \varphi) + B m^2 \rho^{-1} \sin \varphi &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Они решаются методом разделения переменных, в результате

$$D = \sum_1^{\infty} D_j(\rho) P_j^1(\cos \theta), \quad (4)$$

$$B = \sum_1^{\infty} B_j(\rho) P_j^1(\cos \theta),$$

где $P_j^1(\cos \theta)$ – присоединенная функция Лежандра, функции $D_j(\rho)$, $B_j(\rho)$ удовлетворяют уравнениям:

$$m^2 \frac{d}{d\rho} (D_j' / m^2) + (m^2 - j(j+1) \rho^{-2}) D_j = 0, \quad (5)$$

$$B_j'' + (m^2 - j(j+1) \rho^{-2}) B_j = 0.$$

Эти уравнения решаются для неоднородной оболочки, и используется представление потенциалов плоской волны:

$$D(\rho_1) = G \cos \varphi, \quad B(\rho_1) = -G \sin \varphi, \quad (6)$$

где $G = E_0[\exp(i\rho_1 \cos \theta) - 0,5(1 + \cos \theta) \exp(i\rho_1) - 0,5(1 - \cos \theta) \exp(-i\rho_1)] / k \sin \theta$.

На поверхностях раздела: ядро – оболочка, оболочка – среда задаются граничные условия, следующие из непрерывности тангенциальных составляющих векторов напряженностей полей:

$$D_j(\rho_0) = c_j \Psi_j(m_0 \rho_0),$$

$$D_j'(\rho_0) = c_j \Psi_j'(m_0 \rho_0) m^2(\rho_0) / m_0,$$

$$\alpha_j \Psi_j(m_1 \rho_1) + a_j \zeta_j(m_1 \rho_1) = D_j(\rho_1),$$

$$\alpha_j \Psi_j'(m_1 \rho_1) + a_j \zeta_j'(m_1 \rho_1) = D_j'(\rho_1) m_1 / m^2(\rho_1),$$

$$B_j(\rho_0) = d_j \Psi_j(m_0 \rho_0), \quad (7)$$

$$B_j'(\rho_0) = d_j m_0 \Psi_j'(m_0 \rho_0),$$

$$\beta_j \Psi_j(m_1 \rho_1) + b_j \zeta_j(m_1 \rho_1) = B_j(\rho_1),$$

$$\beta_j \Psi_j'(m_1 \rho_1) + b_j \zeta_j'(m_1 \rho_1) = B_j'(\rho_1) / m_1,$$

где $a_j = (-i)^j E_0$, $\beta_j = \frac{1}{m_1} \alpha_j$, c_j, d_j – постоянные коэффициенты поля в ядре; $D_j(\rho)$,

$B_j(\rho)$ – решения уравнений (5) в оболочке; a_j, b_j – коэффициенты в рассеянной

волне; E_0 – амплитуда вектора электрического поля облучающей волны; $\zeta_j = \Psi_j + i\chi_j$.

Функции $\Psi_j(\rho)$, $\chi_j(\rho)$ удовлетворяют рекуррентным соотношениям следующего вида:

$$\Psi_{j+1}(m\rho) = \frac{2j+1}{m\rho} \Psi_j(m\rho) - \Psi_{j-1}. \quad (8)$$

Производные этих функций выражаются через сами функции. Для обеих функций имеет место формула:

$$\Psi'_j(m\rho) = \Psi_{j-1} - \frac{j}{m\rho} \Psi_j(m\rho). \quad (9)$$

При этом

$$\begin{aligned} \Psi_{-1}(m\rho) &= \cos(m\rho), \quad \Psi_0(m\rho) = \sin(m\rho), \\ \chi_{-1}(m\rho) &= -\sin(m\rho), \quad \chi_0(m\rho) = \cos(m\rho). \end{aligned}$$

Для решения уравнений (5) с граничными условиями (6) их можно преобразовать введением функций

$$\begin{aligned} Y_j(\rho) &= \frac{1}{m^2(\rho)} \frac{D'_j(\rho)}{D_j(\rho)}, \quad (10) \\ Z_j(\rho) &= \frac{B'_j(\rho)}{B_j(\rho)}, \end{aligned}$$

в дифференциальные уравнения Риккати:

$$\begin{aligned} Y'_j(\rho) &= -m^2(\rho) Y_j^2(\rho) + \frac{j(j+1)}{\rho^2 m^2(\rho)} - 1, \quad (11) \\ Z'_j(\rho) &= -Z_j^2(\rho) + \frac{j(j+1)}{\rho^2} - m^2(\rho). \end{aligned}$$

Функции $Y_j(\rho)$, $Z_j(\rho)$ находятся путем численного решения дифференциальных уравнений (11), причем задаются следующие начальные условия:

$$\begin{aligned} Y_j(\rho_0) &= \frac{1}{m_0} \frac{\Psi'_j(m_0\rho_0)}{\Psi_j(m_0\rho_0)}, \quad (12) \\ Z_j(\rho_0) &= m_0 \frac{\Psi'_j(m_0\rho_0)}{\Psi_j(m_0\rho_0)}, \end{aligned}$$

учитывающие, что величина $m(\rho_0 - 0)$ – показатель преломления ядра, может не совпадать со значением $m(\rho_0)$. В отличие от метода работы [Перельман, 2002] в настоящей работе распределение показателя преломления в неоднородном слое не ограничивается гиперболической функцией благодаря использованию численного решения, что расширяет возможности метода.

Исходные для параметров рассеянной волны коэффициенты a_j, b_j находят-ся по формулам:

$$a_j = -\alpha_j \frac{m_1 Y_j(\rho_1) \Psi_j(m_1 \rho_1) - \Psi_j'(m_1 \rho_1)}{m_1 Y_j(\rho_1) \xi_j(m_1 \rho_1) - \xi_j'(m_1 \rho_1)}, \quad (13)$$

$$b_j = -\beta_j \frac{Z_j(\rho_1) \Psi_j(m_1 \rho_1) - m_1 \Psi_j'(m_1 \rho_1)}{Z_j(\rho_1) \xi_j(m_1 \rho_1) - m_1 \xi_j'(m_1 \rho_1)},$$

которые получаются с учетом равенств (7). При этом значение $m_1 - m(\rho_1 + 0)$ – показатель преломления среды, который может не совпадать со значением $m(\rho_1)$, ρ_1 – внешний приведенный радиус оболочки.

Для расчета коэффициента направленного рассеяния, зависящего от вектора Пойнтинга, вводится сумма $(i_1 + i_2)$, пропорциональная этому коэффициенту, где

$$i_1 = \left| \sum_1^{\infty} \frac{2j+1}{j(j+1)} (a_j S_j + b_j Q_j) \right|^2, \quad (14)$$

$$i_2 = \left| \sum_1^{\infty} \frac{2j+1}{j(j+1)} (a_j Q_j + b_j S_j) \right|^2,$$

S_j, Q_j – угловые функции, связанные с присоединенными функциями Лежандра:

$$S_{j+1} = \frac{(j+1)^2 Q_{j+2} - (j+2)^2 Q_j}{2j+3}, \quad (15)$$

$$Q_{j+2} = \frac{(2j+3)Q_{j+1} \cos \theta - (j+2)Q_j}{j+1},$$

$$Q_1 = 1, Q_2 = 3 \cos \theta, S_1 = \cos \theta.$$

Таким образом, имеется возможность решения как разрывных, так и непрерывных задач моделирования процесса рассеяния электромагнитных волн для неоднородных облучаемых структур.

Результаты исследования характеристик рассеяния аэрозольных частиц

Для оценки достоверности определения характеристик аэрозольной микроструктуры распределение числа частиц атмосферного аэрозоля по размерам находилось оптическими счетчиками, а также с помощью фильтровых устройств с просветлением и микроскопическим анализом. Между результатами, найденными различными методами (фотоэлектрическим и фильтровым), имело место удовлетворительное согласие в п. Воейково (13 км от восточной границы С.-Петербурга) в условиях замутненной атмосферы, в Репетеке (аридная зона вблизи восточной границы Туркмении) и в Абастумани (горная область Грузии). В условиях прозрачной атмосферы в п. Воейково найдено существенное различие этих результатов. Данные, полученные оптическими счетчиками, зависят от их градуировки, таким образом, в одних условиях оптические свойства градуировочных частиц соответствуют оптическим свойствам натуральных частиц, в других условиях – нет [Yegorov, 2008]. Результаты сравнения данных, полученных двумя приборами, показывают существование случаев расхождения, превышающего порядок величины.

Для объяснения результата предлагается описанная выше модель частицы с радиально изменяющимся показателем преломления $m(R)$ в оболочке, покрывающей однородное ядро.

Результаты анализа направленного рассеяния излучения (угол рассеяния 1,57, показатель преломления в ядре из сажи $m(\rho_0) = 1,82 - 0,64i$, приведенный размер частицы 30) представлены на рис. 1, 2. Здесь $L = k(r_1 - r_0)$ – приведенная толщина покрытия, IR – индикатриса рассеяния, отнесенная к её значению для $L = 0, j = 0, \dots, 4$ – индекс модельного рассеивающего центра ($j = 0, 1, 2$ означает присутствие воды в оболочке, $j = 3, 4$ – ее отсутствие).

Перечень характеристик рассеивающего центра представлен в табл. 1, где $d = (\rho - \rho_0)/(\rho_1 - \rho_0)$.

Как следует из рис. 1, 2, индикатриса направленного рассеяния может существенно изменяться при изменении структуры аэрозольной частицы (в частности, при ее обводнении). Характер модельных изменений структуры рассеивающего центра ($j = 2, 4$ – табл. 1, $L = 2,0$) соответствует экспериментальным результатам.

Таблица 1

Характеристики рассеивающего центра	
j	$m(\rho)$
0	1,33
1	$m_0 - (0,49 - 0,64i)d$
2	$(0,98 - 1,28i)/(1 + d) + 0,84 + 0,64i$
3	$m_0 - (0,82 - 0,64i)d$
4	$(1,64 - 1,28i)/(1 + d) + 0,18 + 0,64i$

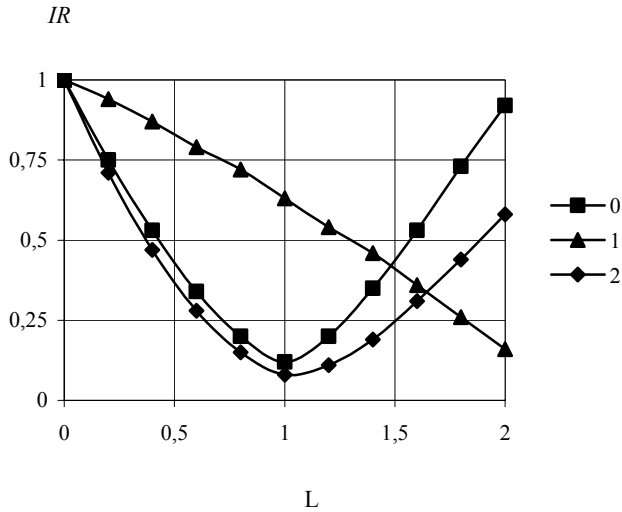


Рис. 1. Результаты анализа направленного рассеяния излучения при наличии обводнения

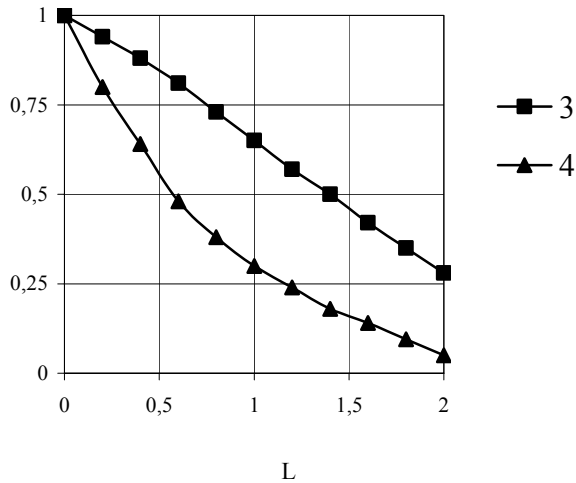


Рис. 2. Результаты анализа направленного рассеяния излучения при отсутствии обводнения

Предложенная оптическая модель неоднородной аэрозольной частицы использована в настоящей работе для объяснения экспериментальных результатов, описанных выше. Эта же модель может быть полезна для анализа точностных характеристик фотоэлектрической аппаратуры, предназначенной для аэрозольных измерений. В частности, известно, что зависимость результатов фотоэлектрических измерений от оптических свойств неоднородной частицы может быть уменьшена. С этой целью используется аппаратура, измеряющая рассеяние света под меньшими углами. В лабораторных условиях удалось радикально

уменьшить влияние неоднородности частицы на результаты измерений, уменьшая угол рассеяния до 30° .

В табл. 2 приведены результаты модельных расчетов для характеристик рассеивающего центра, представленных в табл. 1 для частиц с приведенным радиусом ядра $\rho_0 = 30$. Размер частиц выбран в диапазоне значительного влияния рассеивающих свойств. Здесь I , $I(j)$ – индикатрисы рассеяния однородной и неоднородной частицей сажи для моделей табл. 1 ($\rho_1 = 32$). Их отношение $I(j)/I$ может быть очень малой величиной (несколько процентов для $j = 4$) при рассеянии под углом $\theta = 90^\circ$. Оно существенно увеличивается при меньших углах рассеяния (составляет более 30 % при $\theta = 30^\circ$ для $j = 4$). Этот факт дает возможность повысить точность оптических измерений. Уменьшенные вариации, однако, существенно превышают вариации индикатрисы для различных неоднородностей частиц. В этой связи следует подчеркнуть, что исследование выполнялось в лабораторных условиях.

Таблица 2

Относительная индикатриса для различных направлений рассеяния

j	0	1	2	3	4	4
угол	90°					30°
$I(j)/I$	0,80	0,14	0,51	0,25	0,04	0,31

Настоящее исследование относится к условиям натуральных измерений в атмосфере, когда оптические свойства частиц изменяются в существенно более широких пределах. Тем не менее, и при измерениях характеристик атмосферного аэрозоля можно достичь существенного (в несколько раз) уменьшения влияния оптических свойств частиц на результаты измерений за счет выбора угла рассеяния излучения.

Заключение

Моделирование процесса рассеяния электромагнитных волн, основанное на решении уравнений Максвелла и осуществленное для условий натуральных экспериментов, оказалось эффективным для решения проблемы дифракции в случае сферических частиц, составленных из однородного ядра и неоднородной оболочки. Результаты моделирования позволили сделать вывод, что при измерениях характеристик атмосферного аэрозоля можно достичь существенного (в несколько раз) уменьшения влияния оптических свойств частиц на результаты измерений за счет выбора угла рассеяния излучения.

Литература

1. Yegorov A.D., Potapova I.A., Rzhonsnitskaya Yu.B. Atmospheric aerosols measurements and reliability problem // International Journal of Remote Sensing, 2008, vol. 29, 2449–2468.
2. Перельман А.Я., Зиновьева Т.В. Аппроксимация оптических свойств сферических частиц с радиально меняющимся показателем преломления // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2002, 38, № 4, с. 515–522.