

文章编号:1002-2082(2009)02-0202-08

利用HITRAN资料研究黑碳和沙尘 气溶胶粒子的光学特性

葛颢铭, 刘玉芝, 黄建平, 苏婧, 李积明, 闭建荣

(兰州大学 大气科学学院, 甘肃 兰州 730000)

摘要: 在IDL程序语言中实现Mie理论的数值算法, 利用HITRAN资料提供的气溶胶粒子复折射指数, 计算分析了沙尘、黑炭2种气溶胶粒子在不同半径(1 μm , 2.5 μm 和10 μm)时, 对波长为400 nm和860 nm光的散射效率以及散射相函数矩阵元素。结果表明: 黑炭与沙尘有明显的光学性质差别, 沙尘粒子不仅散射效率大于黑炭, 而且后向散射比黑炭粒子强。2种粒子对400 nm和860 nm太阳光的偏振也不同, 可以利用此特性鉴别这2种气溶胶。

关键词: 黑炭粒子; 沙尘粒子; 气溶胶; HITRAN; Mie理论

中图分类号: O436.2

文献标志码: A

Optical characteristics of black carbon and dust aerosols with HITRAN data

GE Jin-ming, LIU Yu-zhi, HUANG Jian-ping, SU Jing, LI Ji-ming, BI Jian-rong

(Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

Abstract: The numerical algorithm of Mie theory was realized in IDL. The scattering efficiency and phase matrix elements of black carbon and dust aerosols at 400 nm and 860 nm wavelength were calculated when their radius were 1 μm , 2.5 μm and 10 μm . The results show that the optical characteristics of the black carbon and dust are significantly different, and both the scattering efficiency and backward scattering of the dust are greater than those of the black carbon. Since the lighting polarizations of the two aerosols are different at the sun light of 400 nm and 860 nm, both the aerosols can be distinguished with the characteristics.

Key words: black carbon; dust; aerosol; HITRAN; Mie theory

引言

气溶胶粒子对气候系统的变化有重要的强迫作用,一方面它通过散射和吸收太阳辐射,直接影响地气系统的辐射能量收支;另一方面它可以作为凝结核改变云粒子大小分布、数浓度、组成成分、反照率等物理、化学特性,从而影响地气系统的能量平衡。Ramanathan^[1]等人研究指出:气溶胶对气候的直接和间接作用可以影响到全球的水循环,这将

成为本世纪最大的气候环境问题之一。黑碳和沙尘气溶胶粒子对气候变化的强迫作用已经引起了广泛关注^[2-3],在我国北方广大地区,冬季燃煤供暖,春季大范围的沙尘天气爆发,这使得黑碳和沙尘在冬、春季节成为这一地区主要的气溶胶粒子。通过分析黑碳和沙尘气溶胶不同的光学特性,可以帮助我们定量理解二者对北方地区辐射能量收支的影响和对气候变化不同的强迫作用。

收稿日期:2008-07-01; 修回日期:2008-08-08

基金项目:科技部973项目(2006CB403705);国家自然科学基金重点项目(40730949);国家自然科学基金(40633017)

作者简介:葛颢铭(1982-),男,甘肃省兰州市人,在读博士研究生,主要从事大气辐射研究工作。E-mail:gejm05@lzu.cn

本文基于各向均一的球形Mie 散射理论基础,在IDL(interactive data langue)程序语言中实现了该理论的数值算法,并利用最新版HITRAN2004 数据库提供的黑碳和沙尘气溶胶粒子的复折射指数,对二者的光学特性进行了计算和对比分析。

1 数据与方法

1.1 HITRAN 数据库介绍

HITRAN (high-resolution transmission)数据库作为目前世界范围内常用的大气分子光谱数据库,最初是由美国空军剑桥实验室在20世纪60年代为深入细致研究大气的红外辐射特性而创建的。到目前为止,HITRAN2004 可以列出逐线参数的大气气体已经扩展到39种,共有1 789 569条谱线;每条谱线的参数也已经从先前版本的16项

(100字符)增加到19项(160字符),为研究、模拟光在大气中的辐射、传输提供了详尽的光学参数。我们利用HITRAN数据集所提供(在实验室测得的沙尘与黑碳粒子)的复折射指数,并根据Mie 散射理论对二者进行了散射效率和散射相矩阵元素的计算。图1(a)和图1(b)分别是HITRAN资料0.2 μm~40 μm 波长复折射指数的实部和虚部变化,其中实线表示沙尘,虚线为黑碳。我们知道,复折射指数的实部和虚部分别反映了粒子的散射和吸收能力的强弱。由图1可以看出,黑碳的散射和吸收能力均强于沙尘粒子,特别是0.2 μm~10 μm 波段,黑碳折射指数的虚部大于0.4,该值明显大于沙尘粒子的虚部值,这说明在同等粒子谱分布的情况下,黑碳对太阳辐射的吸收比沙尘强很多。

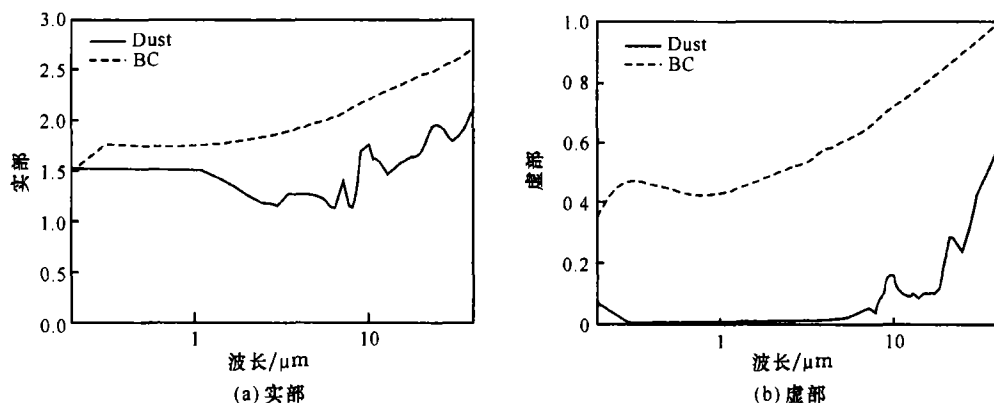


图1 黑碳和沙尘气溶胶粒子的复折射指数实部和虚部

Fig. 1 Real and imaginary parts of refractive index for black carbon and dust aerosols

(data from HITRAN 2004 database)

1.2 Mie 理论

国内外科学家已对Mie 理论及其数值算法作了深入研究^[4-7],本文根据经典的各向均匀球形粒子Mie 散射理论研究黑碳和沙尘粒子的光学特性。根据Mie 理论,设球坐标系中的人射波为

$$E_i = E_0 e^{i(kr \cos \theta - \omega t)} [\sin \theta \cos \varphi e_\theta + \cos \theta \cos \varphi e_\theta - \sin \varphi e_\varphi] \quad (1)$$

式中: r 为散射点与观察点的矢径; θ 为散射角;

φ 为入射光振动面与散射面之间的夹角。

当其照射到均匀介质球粒子(半径为 a) 上时,在远场点 $r(r, \theta, \varphi)$ 处激发的散射电场 E_s 可由Maxwell 方程组求得:

$$E_s = E_0 \frac{e^{i(kr - \omega t)}}{ikr} [-S_2(\theta) \cos \varphi e_\theta + S_1(\theta) \sin \varphi e_\varphi] \quad (2)$$

式中:

$$\begin{cases} S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(a_n \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} + b_n \frac{dP_n^1(\cos \theta)}{d\theta} \right) \\ S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(a_n \frac{dP_n^1(\cos \theta)}{d\theta} + b_n \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} \right) \end{cases} \quad (3)$$

$P_n^1(\cos \theta)$ 是 Associated Legendre 多项式:

$$P_n^1(\cos \theta) = \frac{\sin \theta}{2^n n!} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{n+1} (\cos^2 \theta - 1)^n \quad (4)$$

若记 $\mu = \cos \theta$, 并定义 $\pi_n(\mu) = \frac{P_n^1(\mu)}{\sin \theta}$, $\tau_n(\mu) = \frac{dP_n^1(\mu)}{d\theta}$, 则有:

$$\begin{cases} \pi_n(\mu) = \frac{d}{d\mu} P_n(\mu), \tau_n(\mu) = \mu\pi_n(\mu) - (1 - \mu^2) \frac{d}{d\mu} \pi_n(\mu) \\ \pi_n(\mu) = \frac{2n-1}{n-1} \mu\pi_{n-1}(\mu) - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2}(\mu), \tau_n(\mu) = n\mu\pi_n(\mu) - (n-1)\pi_{n-1}(\mu) \\ \pi_0(\mu) = 0, \pi_1(\mu) = 1 \end{cases} \quad (5)$$

式中 a_n 和 b_n 分别是尺寸参数 $x = ka = 2\pi a/\lambda$ 和粒子折射指数 $m = m_r + im_i$ (假定 $m_i \geq 0$) 的函数^[8]:

$$\begin{cases} a_n = \frac{m\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - \Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{m\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\Psi_n(mx)} \\ b_n = \frac{\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - m\Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\Psi_n(mx)} \end{cases} \quad (6)$$

式中 $\Psi_n(x) = xj_n(x)$ 和 $\xi_n(x) = xh_n^{(1)}(x)$ 分别是 Riccati-Bessel 函数和 Riccati-Hankel 函数。满足以下递推关系:

$$\begin{cases} \Psi_n(x) = \frac{(2n-1)\Psi_{n-1}(x)}{x} - \Psi_{n-2}(x) \\ \xi_n(x) = \frac{(2n-1)\xi_{n-1}(x)}{x} - \xi_{n-2}(x) \end{cases} \quad (7)$$

和初始值:

$$\begin{cases} \Psi_0(x) = \sin x \\ \Psi_1(x) = \frac{\sin x - x\cos x}{x^2} \\ \xi_0(x) = -i\exp(ix) \\ \xi_1(x) = -\frac{-i-x}{x}\exp(ix) \end{cases} \quad (8)$$

一般来说, 在某些条件下直接计算 a_n 与 b_n 会由于数据过大而溢出, 为避免这种情况发生, 可引入 $\Psi_n(x)$ 的对数导数^[9]:

$$A_n(z) = \frac{d \ln[\Psi_n(z)]}{dz} \quad (9)$$

于是有:

$$\begin{cases} a_n = \frac{[A_n(mx)/m + n/x]\Psi_n(x) - \Psi_{n-1}(x)}{[A_n(mx)/m + n/x]\xi_n(x) - \xi_{n-1}(x)} \\ b_n = \frac{[mA_n(mx) + n/x]\Psi_n(x) - \Psi_{n-1}(x)}{[mA_n(mx) + n/x]\xi_n(x) - \xi_{n-1}(x)} \end{cases} \quad (10)$$

Kattawar 和 Plass^[10] 证明 $A_n(z)$ 向下递推比较稳定, 本文我们采用向下递推:

$$A_{n-1}(z) = \frac{n}{z} - \frac{1}{\frac{n}{z} + A_n(z)} \quad (11)$$

由上可知, 只要求出 a_n 和 b_n 就可以求得表征

粒子光学特性的消光、散射、后向散射和吸收效率:

$$\begin{cases} Q_{\text{ext}} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} [(2n+1)\text{Re}(a_n + b_n)] \\ Q_{\text{sca}} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} [(2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2)] \\ Q_{\text{back}} = \frac{1}{x^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} [(2n+1)(-1)^n(a_n - b_n)] \right|^2 \\ Q_{\text{abs}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{sca}} \end{cases} \quad (12)$$

根据以上理论分析, 在 IDL 程序语言中实现了 Mie 散射的数值计算。由于 Mie 散射计算中涉及较多的循环结构, 这会明显占用较多 CPU 时间。利用 IDL 对数组处理的优势, 优化了结构, 增加了对数组的整体运算, 减少了循环, 节省了计算时间; 同时利用 IDL 良好的可视化功能, 使得出结果的同时完成了数据的图形化。

2 结果分析

利用(12)式计算黑碳和沙尘粒子在 400 nm 和 860 nm 波段散射效率 Q_{sca} 随尺度参数 X 的变化, 如图 2 所示。由于沙尘和黑碳在这 2 个波段的复折射指数变化不大, 因此黑碳和沙尘粒子在 400 nm 和 860 nm 波段散射效率 Q_{sca} 基本一致。选择分析粒子在这 2 个波段的 Mie 散射特性, 主要是因为目前世界上广泛应用地面测量短波总辐射以及散射、辐射的仪器——多滤波旋转影带辐射仪 (MFRSRs) 之故。2 个用来测量气溶胶辐射特性的通道中心频率分别为 415 nm 和 870 nm, HITRAN 在 400 nm 和 860 nm 提供的粒子复折射指数与 MFRSRs 的工作波段最为接近, 通过在理论上研究这 2 个波长下的粒子光学特性, 可以为实际观测反演气溶胶提供依据。图 2 中实线和点虚线分别是沙尘粒子在 400 nm 波段, 复折射指数为 $1.53 - 0.008i$, 在 860 nm 波段, 复折射指数为 $1.52 - 0.008i$ 时, 散射效率 Q_{sca} 随尺度参数 X 的变化。可以看出: 当 X 小于 10 时, Q_{sca} 随 X 有显著的震荡变化; 当尺度参数 X 趋于较大时, Q_{sca} 趋于常数。由于在 400 nm 和 860 nm 波段

沙尘的复折射指数相近,因此2条线基本一致,当X接近100时, Q_{sc} 趋于1.62。点线和虚线代表的是黑碳粒子在400 nm和860 nm波段复折射指数的 Q_{sc} 随X的变化。由于黑碳在这2个波长的复折射指数相差不大,除了在X为2.5附近,860 nm的 Q_{sc} 比400 nm处略大外,2条线基本重合,并随X增大 Q_{sc} 接近于1.1。

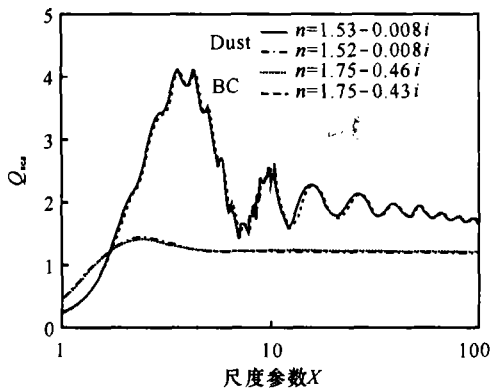


图2 黑碳和沙尘气溶胶粒子在400 nm和860 nm波长时散射效率 Q_{sc} 随尺度参数X的变化

Fig. 2 Variation of scattering efficiency Q_{sc} of black carbon and dust aerosols with size parameter X at wavelengths of 400 nm and 860 nm

图3~图5是400 nm波长下,2种粒子在半径分别为1 μm , 2.5 μm 和10 μm 时,散射矩阵元素 p_{11} , $-p_{12}/p_{11}$, p_{33}/p_{11} , p_{34}/p_{11} 随散射角的变化。其中虚线代表黑碳粒子,实线为沙尘粒子。可以看出黑碳和沙尘粒子散射矩阵随散射角的变化是有明显区别的。散射相函数 p_{11} 表示入射光强经过粒子散射后在各个方向上的散射强度分布,从图3~图5各图的 p_{11} 可以看出,黑碳和沙尘随着粒子半径从1 μm 增大到10 μm ,它们的散射光强随散射角的增大而减弱,二者对光能量的散射主要集中在散射角小于60°的前向方向上,并且散射角在小于30°的范围内,黑碳和沙尘气溶胶散射光强分布比较一致。但是当散射角度大于135°时,沙尘粒子后向散射明显加强,而黑碳粒子无此特性,仅仅当散射角大于160°时,后向散射略有增强。由此可见,大气中漂浮的黑碳粒子可以使400 nm波长更多的太阳光辐射进入地球,对地气系统有增暖作用,而沙尘粒子由于后向散射相对较大,可以使一部分辐射能量返回太空,阻止更多的能量进入地气系统,在大气层顶起到冷却作用。在图3~图5中,黑炭和沙尘的线偏振度 $-p_{12}/p_{11}$ 也有明显的差别,特别

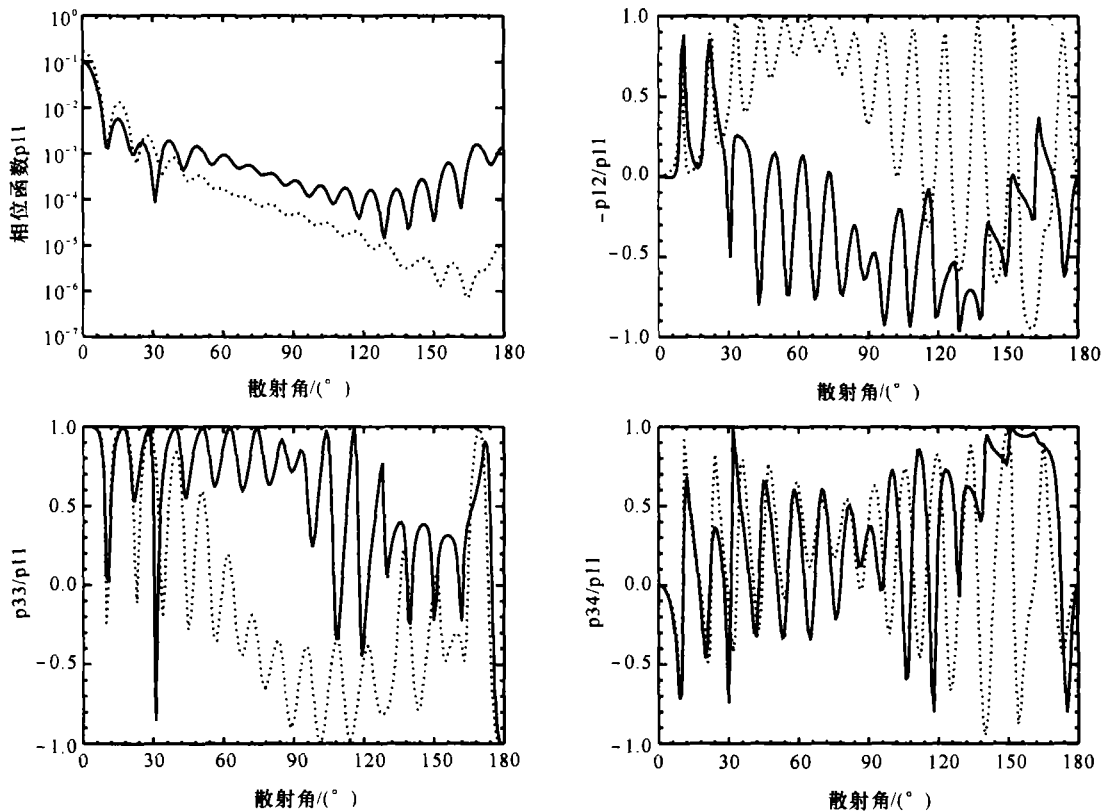


图3 400 nm 波段,半径1 μm 的黑碳和沙尘粒子散射矩阵元素随散射角的变化

Fig. 3 Variation of scattering phase matrix elements of black carbon and dust particles with scattering angle at 400 nm wavelength (particle radius = 1 μm)

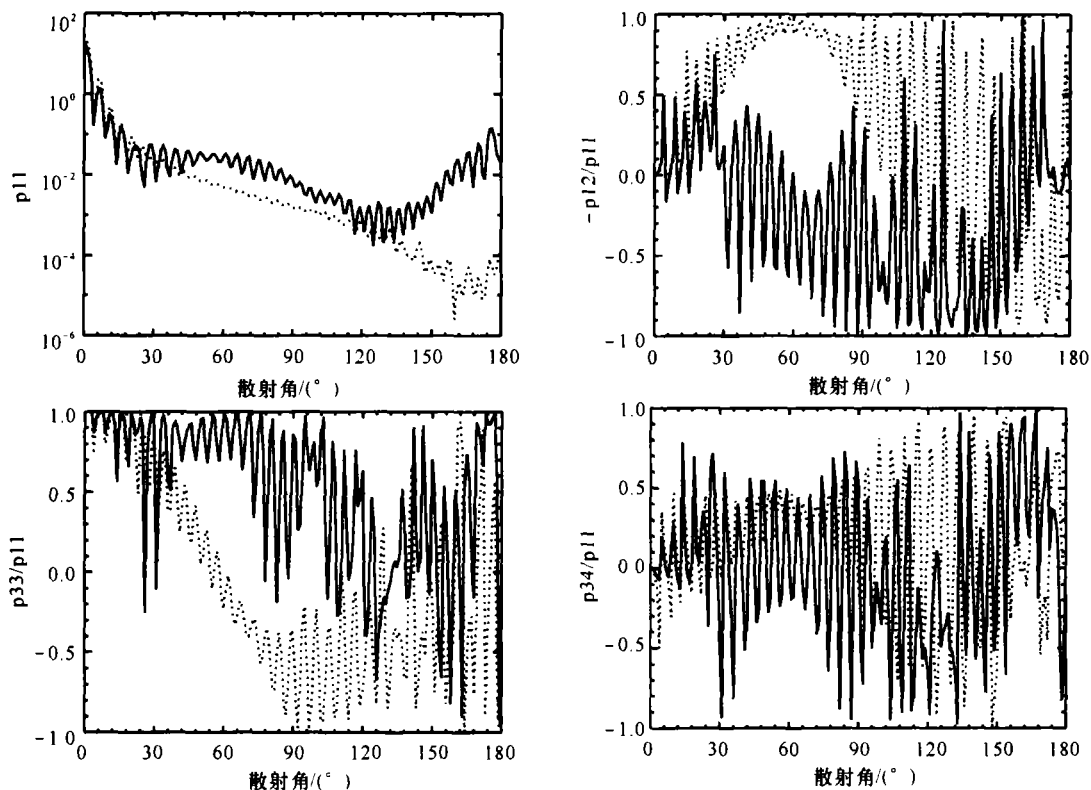


图4 400 nm 波段,半径 2.5 μm 的黑碳和沙尘粒子散射相矩阵元素随散射角的变化

Fig.4 Variation of scattering phase matrix elements of black carbon and dust particles with scattering angle at 400 nm wavelength (particle radius = 2.5 μm)

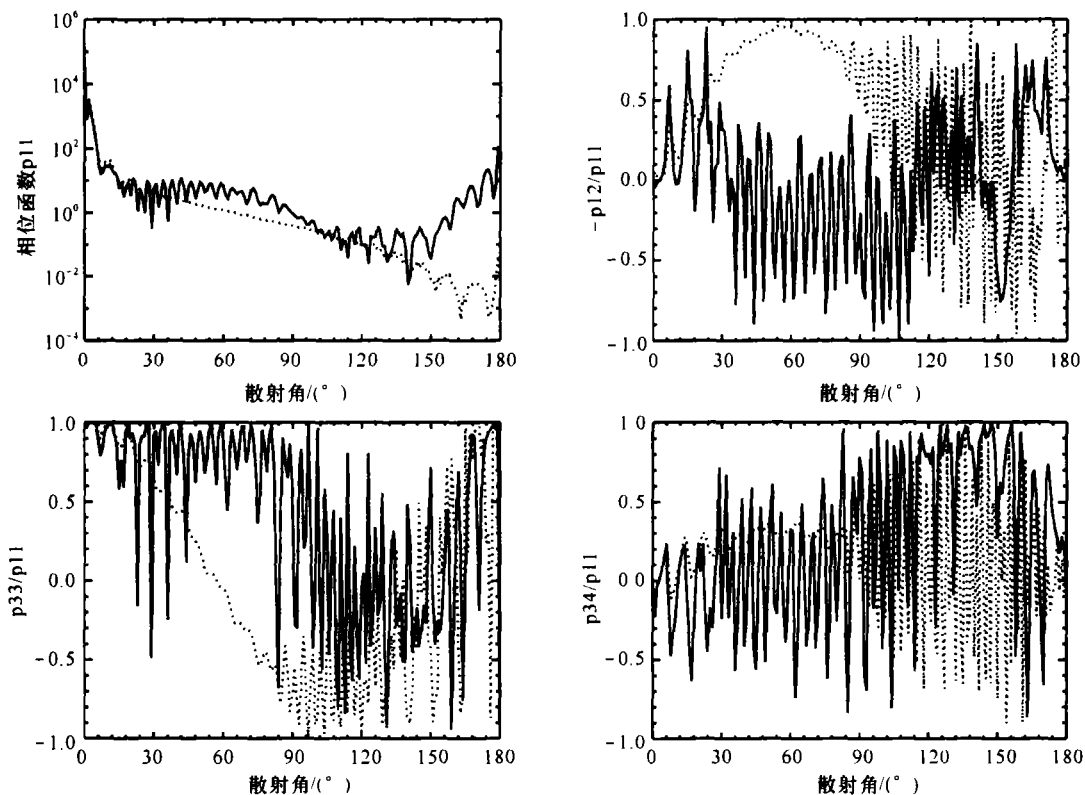


图5 400 nm 波段,半径 10 μm 的黑碳和沙尘粒子散射相矩阵元素随散射角的变化

Fig.5 Variation of scattering phase matrix elements of black carbon and dust particles with scattering angle at 400 nm wavelength (particle radius = 10 μm)

是在 30°~60° 的前向散射上,黑炭的线偏振度在 0.5 ~ 1 范围内变化,而沙尘则在 -1~0.1 之间变动。

图6~图8是860 nm波长下,2种粒子半径分别为 1 μm(图6)、2.5 μm(图7)和10 μm(图8)时,散射相

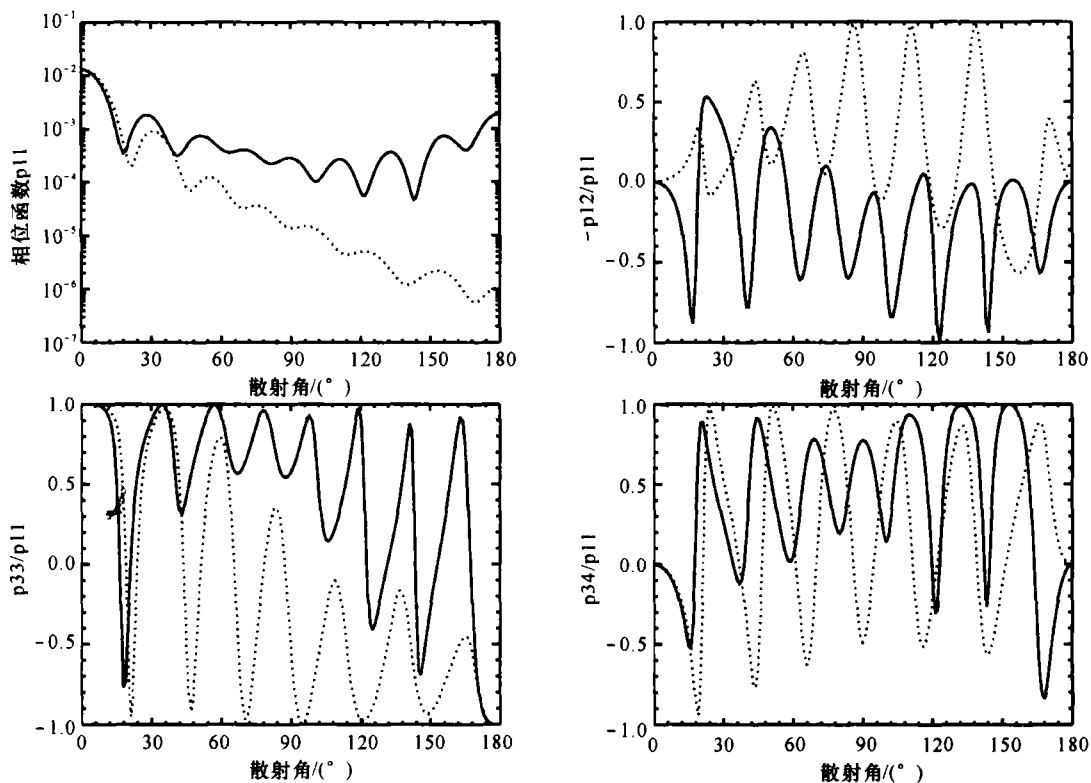


图6 860 nm波段,半径1 μm的黑碳和沙尘粒子散射相矩阵元素随散射角的变化

Fig. 6 Variation of scattering phase matrix elements of black carbon and dust particles with scattering angle at 860 nm wavelength (particle radius = 1 μm)

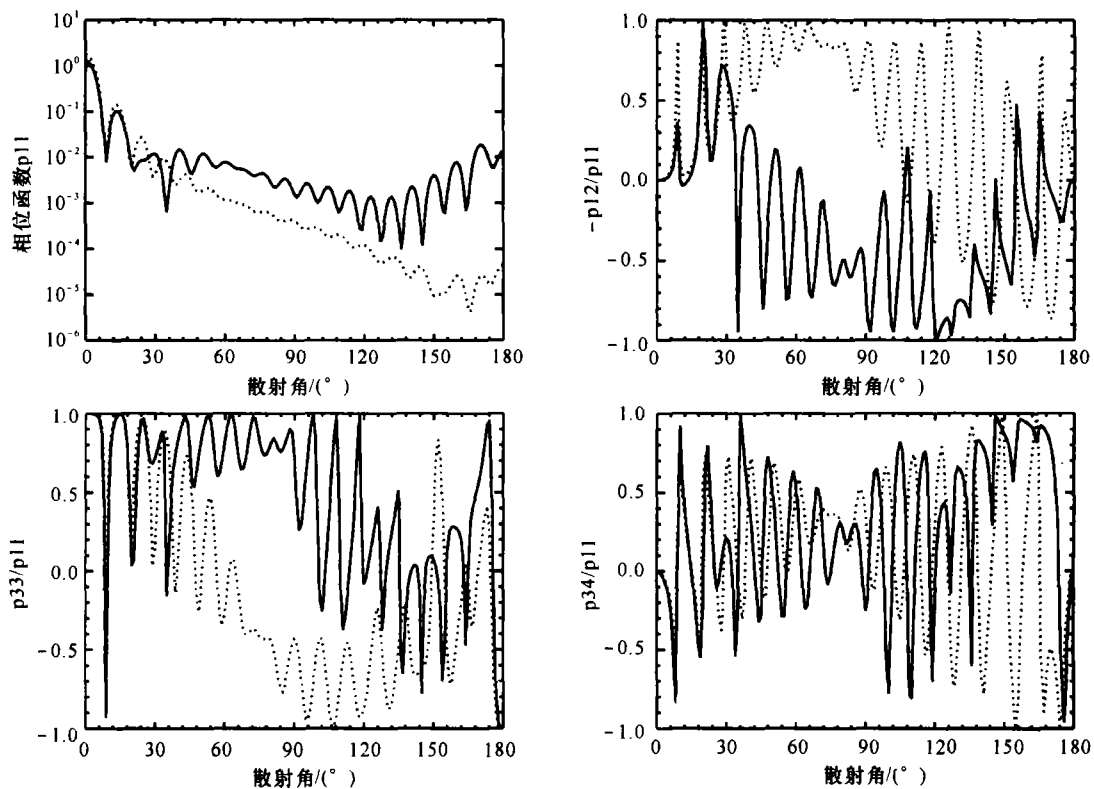


图7 860 nm波段,半径2.5 μm的黑碳和沙尘粒子散射相矩阵元素随散射角的变化

Fig. 7 Variation of scattering phase matrix elements of black carbon and dust particles with scattering angle at 860 nm wavelength (particle radius = 2.5 μm)

矩阵元素随散射角的变化。随着粒子半径的增加, p_{11} 随散射角的振动明显加剧, 并且与 400 nm 波段相似, 散射能量主要集中在散射角小于 60° 的前向散射上。当散射角小于 30° 时, 沙尘气溶胶散射光强分布比较一致, 当散射角度大于 135° 时, 沙尘粒子后向散射明显加强, 而黑碳粒子后向散射变化不明显。在 860 nm 处, 二者的偏振特性区别更为明

显, 当粒子半径为 $1 \mu\text{m}$ 时(图 6), 黑碳和沙尘的线偏振度 $-p_{12}/p_{11}$ 呈相反变化, 随着粒子半径增大到 $2.5 \mu\text{m}$ (图 7)~ $10 \mu\text{m}$ (图 8), 2 种粒子的 $-p_{12}/p_{11}$ 在 $30^\circ \sim 60^\circ$ 的前向散射上可以明显区别开来。如果大气中漂浮有沙尘或者黑炭气溶胶的时候, 通过地面的双极化通道观测, 就可以根据这 2 种气溶胶线偏振度的差别将二者区分开来。

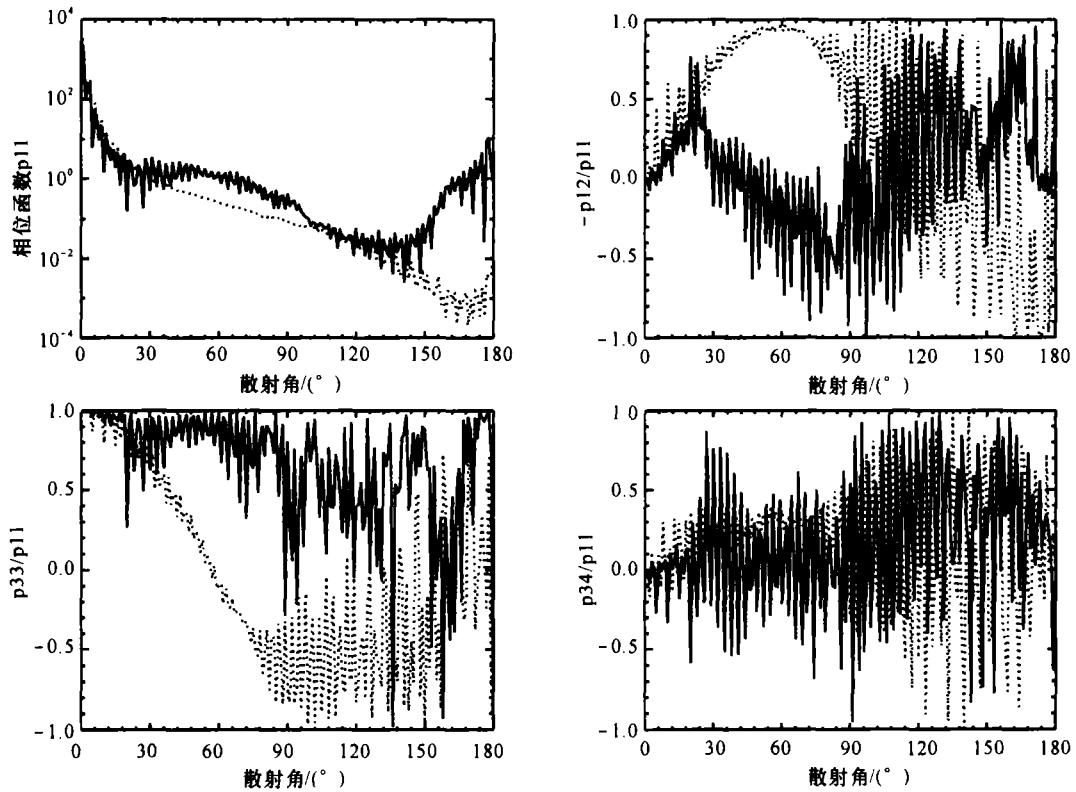


图 8 860 nm 波段, 半径 $10 \mu\text{m}$ 的黑碳和沙尘粒子散射相矩阵元素随散射角的变化

Fig. 8 Variation of scattering phase matrix elements of black carbon and dust particles with scattering angle at 860 nm wavelength (particle radius = $10 \mu\text{m}$)

3 结论与讨论

黑炭和沙尘是我国北方 2 种常见的重要大气气溶胶粒子, 通过 IDL 编写, 优化了 Mie 散射程序。利用该程序计算了粒子半径分别为 $1 \mu\text{m}$, $2.5 \mu\text{m}$ 和 $10 \mu\text{m}$ 时, 在 400 nm 和 860 nm 波段的散射效率以及散射相函数矩阵元素。通过分析得出黑炭与沙尘粒子对光能量的散射主要集中在散射角小于 60° 的前向方向上, 但当散射角大于 135° 时, 沙尘粒子的后向散射明显增强而黑碳则无此特性, 这种特征使得二者在大气中对太阳短波能量收支有不同的作用, 并会产生不同的气候效应(冷却或者加热地气系统)。黑碳和沙尘粒子对自然光(太阳光)的线偏振也有区别, 特别在 $30^\circ \sim 60^\circ$ 的前向散射上二者的偏振度不同, 可以利用此特性通过地面双极化通道观测来鉴别这 2 种气溶胶。

参考文献:

[1] RAMANATHAN V, CRUTZEN P J, KIEHL J T, et al. Aerosols, climate, and the hydrological cycle [J]. Science, 2001, 294: 2119-2124.

[2] 王宏, 石广玉, AOKI T. 2001 年春季东亚-北太平洋地区沙尘气溶胶的辐射强迫[J]. 科学通报, 2004, 49(19): 1993-2000.
WANG Hong, SHI Guang-yu, AOKI T. Radiative forcing due to dust aerosol over east Asia-North Pacific region in Spring 2001 [J]. Chinese Science Bulletin, 2004, 49(19): 1993-2000. (in Chinese)

[3] 马井会, 郑有飞, 张华. 黑碳气溶胶光学厚度的全球分布及分析[J]. 气象科学, 2007, 27: 549-556.
MA Jin-hui, ZHENG You-fei, ZHANG Hua. The optical depth global distribution of black carbon aerosol and its possible reason analysis [J]. Scientia

- Meteorologica Sinica, 2007, 27: 549-556. (in Chinese)
- [4] 王少清,任中京,张希明,等. Mie 散射系数计算方法的研究[J]. 应用光学,1997,18(2):4-9.
WANG Shao-qing, REN Zhong-jing, ZHANG Xi-ming. Study of calculating method of Mie scattering coefficient[J]. Journal of Applied Optics, 1997, 18(2):4-9. (in Chinese)
- [5] 杨晔,张镇西,将大宗. Mie 散射物理量的数值计算[J]. 应用光学,1997,18(4),17-19.
YANG Ye, ZHANG Zhen-xi, JIANG Da-zong. Numerical calculation of Mie scattering[J]. Journal of Applied Optics, 1997,18(4):17-19. (in Chinese)
- [6] 袁易君,任德明,胡孝勇. Mie 理论递推公式计算散射相位函数[J]. 光散射学报,2006,117(14):366-371.
YUAN Yi-jun, REN De-ming, HU xiao-yong. Computing scattering phase function by recursive formula of Mie theory[J]. Chinese Journal of Light Scattering, 2006,117(14):366-371. (in Chinese)
- [7] 项建胜,何俊华. Mie 光散射理论的数值计算方法[J]. 应用光学,2007,28(3):363-366.
XIANG Jian-sheng, HE Jun-hua. Numerical calculation of Mie theory[J]. Journal of Applied Optics, 2007,28(3):363-366. (in Chinese)
- [8] VAN DE HUIST H C. Lishi scattering by small particles[M]. New York: Dover Publication, 1981.
- [9] WISCOMBE W J. Improved Mie scattering algorithms[J]. Applied Optics, 1980, 19(5):1505-1509.
- [10] KATTAWAR G W, PLASS G N. Electromagnetic scattering from absorbing spheres[J]. Appl. Opt., 1967, 6(8):1377-1382.