

两种按比例混合颗粒系的多次散射模拟*

王海华 孙贤明†

(山东理工大学电气与电子工程学院, 淄博 255049)

(2011年8月25日收到; 2011年12月7日收到修改稿)

一种颗粒与其他种类的颗粒混合后, 会使其散射特性发生变化, 本文研究了水云中混有黑炭气溶胶后的散射特性变化. 根据 Mie 理论计算了水云和黑炭气溶胶散射相函数、单次散射反照率和不对称因子. 给出了混合颗粒系的蒙特卡罗模拟方法, 给出了颗粒碰撞类型抽样、自由程抽样和根据 Mie 相函数进行散射方向抽样的方法. 计算了光垂直入射时, 水云和黑炭气溶胶混合颗粒系的反射光强随观测角的变化, 并计算了平面反照率随入射角的变化, 讨论了黑炭气溶胶的有效半径、混合比例对整个混合颗粒系散射特性的影响. 计算结果表明, 水云中混合黑炭会加强其吸收, 且黑炭的比例和尺寸不同其散射特性差异较大.

关键词: 散射, 混合颗粒, 蒙特卡罗方法, 云

PACS: 42.25.Fx, 42.25.Bs

1 引言

大气气溶胶粒子作为地气系统的重要组成部分之一, 在紫外、可见到红外很宽的波段内对辐射传输产生影响, 一方面通过对电磁波的散射和吸收作用, 导致光波的能量衰减; 另一方面则把吸收的能量转化为其本身的热能, 起到加热大气的作用, 因此研究气溶胶的辐射以及气溶胶的遥感反演具有重要的意义^[1].

自然界中的气溶胶颗粒多种多样, 且在一些情况下会互相参杂混合, 比如冰水混合云, 混有污染物的云、雾等水凝物气溶胶等^[2]. 这些混合颗粒系的散射特性不同于单一颗粒系, 混合颗粒的类型、比例都会对其散射特性产生影响. 本文研究了水云中混合黑炭气溶胶后其多次散射特性的变化, 很多研究者利用双层球模型进行了模拟^[3]. Liu 等人^[4]利用一种结合蒙特卡罗和射线追踪的方法^[5,6]研究了单个水云滴中混有随机分布小黑炭颗粒后的散射特性, 并与利用 Mie 理论计算的外混合模型进行了比较, 计算主要针对单次散射反照率和不对称

因子, 计算结果表明外混合和内混合在计算单次散射时误差较小, 并得出了可以利用相对容易计算的外混合模型进行模拟的结论. Mishchenko 等人^[7]利用 T 矩阵方法研究了“半 - 外混合 (semi-external mixture)”和外混合气溶胶的单次散射特性, 研究表明外混合和“半 - 外混合”模型的单次散射特性差别很小, 文中同样得出了可以用外混合模型进行模拟的结论. 本文采用 Mie 理论数值计算了水云和黑炭气溶胶的单次散射特性 (散射相函数、单次散射反照率以及不对称因子), 并进行了比较和讨论. 当颗粒的浓度较大时, 需要考虑多次散射的影响, 计算颗粒系多次散射的方法有很多, 如离散纵标法^[8]、累加法^[9]等, 这些方法适用于计算各向同性或多层各向同性离散随机介质的散射问题. 本文采用蒙特卡罗方法计算水云和黑炭气溶胶混合颗粒系的多次散射, 其中混合颗粒系采用外混合模型进行模拟. 蒙特卡罗方法是通过跟踪每个光子的散射过程来记录其散射特性^[10], 光子进入颗粒系后, 可能与任意一种颗粒碰撞, 通过两种颗粒的混合比对碰撞颗粒的类型进行抽样, 碰撞的颗粒类型确定后, 再对其自由程和散射角进行抽样, 通过记录

* 山东省自然科学基金 (批准号: ZR2009AQ013) 资助的课题.

† E-mail: xianming_sun@yahoo.com.cn

出射的光子方向和光子数确定反射函数和透射函数. 蒙特卡罗方法是统计方法, 需要对大量的光子进行跟踪才能得到精确结果, 本文的计算是对 10^6 个光子进行跟踪. 最后, 利用计算结果分析了黑炭气溶胶的尺寸参数, 混合比例等对颗粒系多次散射的影响.

2 单次散射

云层对阳光的单次散射特性取决于云层的单次散射的相函数 $P(\theta)$ 和单次散射反照率 ω_0 , 其中 θ 为散射角. 单次散射反照率为云层中粒子的平均散射截面和消光截面的比值. 在我们的计算过程中, 假设黑炭气溶胶和云滴均为球形, 且均服从伽马分布, 即

$$n(r) = \text{const} \times r^{(1-3b)/b} \exp\left(\frac{-r}{ab}\right). \quad (1)$$

Hansen 等人 [11] 的研究发现具有相同的有效半径的不同尺寸分布的离散随机分布颗粒系具有相近的散射特性, 有效半径和方差定义为

$$r_{\text{ef}} = \frac{\int_0^\infty r \pi r^2 n(r) dr}{\int_0^\infty \pi r^2 n(r) dr}, \quad (2)$$

$$v_{\text{ef}} = \frac{\int_0^\infty (r - r_{\text{ef}})^2 \pi r^2 n(r) dr}{r_{\text{ef}}^2 \int_0^\infty \pi r^2 n(r) dr}. \quad (3)$$

对于伽马分布, $a = r_{\text{ef}}$, $b = v_{\text{ef}}$.

文中假设入射波长为 $0.6328 \mu\text{m}$, 水云的有效半径为 $6 \mu\text{m}$, 有效方差为 $1/9$, 对应于积云的有效半径; 黑炭气溶胶的有效半径分别为 $0.1, 0.5, 1.0, 3.0 \mu\text{m}$, 有效方差为 0.2 ; 水云的折射率为 1.33 , 黑炭的折射率为 $1.75 + 0.44i$ [4]. 图 1 给出了水云和黑炭气溶胶的相函数, 从图中可以看出, 两者的相函数差距较大, 随着黑炭气溶胶尺寸的增大, 其前向散射增强, 但是相比于水云, 整个散射图像更平缓, 没有“彩虹”和“宝光环”现象 [12].

表 1 给出了水云和黑炭气溶胶的不对称因子和单次散射反照率. 从表中可以看出, 黑炭气溶胶的单次散射反照率远小于水云的, 而且随着尺寸的增加, 单次散射反照率也随着增大; 黑炭的不对称因子在 $0.1 \mu\text{m}$ 时较小, 当大于 $0.5 \mu\text{m}$ 时, 其不对称因子和水云的差距缩小, 且随着尺寸的增大而增大.

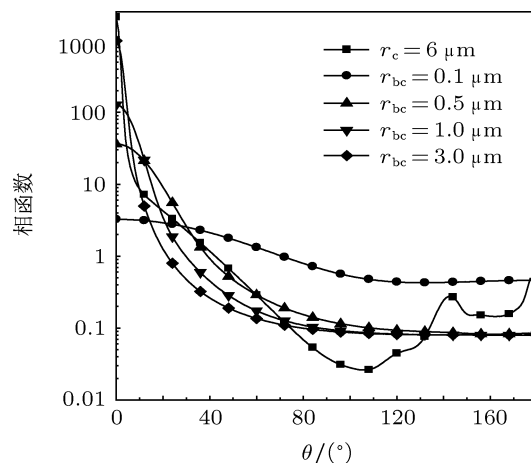


图 1 云和黑炭气溶胶的相函数

表 1 水云和黑炭气溶胶 (BC) 的不对称因子和单次散射反照率

	水云	BC	BC	BC	BC
有效半径 / μm	6	0.1	0.5	1.0	3.0
g	0.851	0.423125	0.816324	0.87353	0.90
ω_0	1	0.35209	0.48	0.508033	0.55

3 多次散射

我们利用蒙特卡罗方法, 通过跟踪光子散射方向和位置来模拟整个散射过程 [13]: 因为颗粒系中有两种颗粒, 因此光子每次随机游走会与哪种颗粒碰撞需要根据混合比例进行抽样控制.

3.1 碰撞粒子类型抽样

当光子进入颗粒系后, 会随机的与两种颗粒进行碰撞, 我们取 0 到 1 之间均匀分布的随机数 ξ_0 , 当 $0 < \xi_0 < \varepsilon$ 时, 表示与黑炭气溶胶碰撞, 当 $\varepsilon < \xi_0 < 1$ 时, 表示与云滴碰撞, 其中 ε 为黑炭气溶胶和水云的颗粒浓度比. 当确定了碰撞粒子的类型后, 还需要确定的是光子每次碰撞后的游走步长, 即自由程和每次碰撞后的散射方向.

3.2 自由程抽样

光子随机游走步长即自由程表示的是光子在两次碰撞之间所移动的距离, 它由比尔 - 布格 - 郎伯定律确定, 转化为概率模型为

$$\tau = \sigma_{\text{sca}} L = -\ln \xi_1, \quad (4)$$

其中 τ 为光学厚度, L 为光子游走的步长, ξ_1 为 0 到 1 之间的均匀分布的随机数, σ_{sca} 为平均散射系数, 定义为

$$\sigma_{\text{sca}} = N \int_{r_1}^{r_2} \sigma_{\text{sca}}(r) n(r) dr, \quad (5)$$

其中 $\sigma_{\text{sca}}(r)$ 为粒径为 r 的粒子的散射截面, $n(r)$ 为归一化的粒径分布函数, 本文我们取均匀分布, N 为粒子的数密度. 当确定了碰撞颗粒类型后, σ_{sca} 也就随之确定.

3.3 光子与粒子碰撞后的散射方向抽样

当确定了碰撞粒子类型后, 就可以按照图 2 中计算得到的 Mie 相函数进行散射方向角抽样^[14], 首先将 Mie 相函数进行归一化, 即

$$\sum_{i=1}^n P_i = 1. \quad (6)$$

取 n 的值足够大, 并将 P_i 作为已知的概率分布.

由计算机产生一个均匀分布于 0 到 1 之间的随机数 ξ_2 , 通过与归一化的 P_i 比较, 由下式确定出 n :

$$\sum_{i=1}^{n-1} P_i < \xi_2 \leq \sum_{i=1}^n P_i, \quad (7)$$

其中 n 表示第 n 个 θ_i . 这样便可由随机数来模拟出径向散射角 ν .

由于假设粒子内部为球形粒子, 因此其散射方位角在 $0-2\pi$ 内均匀分布, 因此方位角的抽样可取为

$$\psi = 2\pi\xi_3. \quad (8)$$

要对光子进行跟踪, 还需要首先建立坐标系. 设光子由第 m 个粒子散射到第 $m+1$ 个粒子时, 粒子的位置矢和光子运动方向的单位矢分别表示为 $\mathbf{r}_m, \hat{\mathbf{s}}_m$ 和 $\mathbf{r}_{m+1}, \hat{\mathbf{s}}_{m+1}$, 如图 2 所示. 选取原点固定在第 m 个粒子所在位置的坐标系为 x_1, y_1, z_1 . 令 z_1 的方向和 $\hat{\mathbf{s}}_m$ 一致, y_1 在包含 z_1 且垂直于原坐标系中 xy 平面的一个平面 p 内, x_1 则与 p 平面垂直, $\hat{\mathbf{s}}_{m+1}$ 是单位矢, 它在 xyz 系和 $x_1y_1z_1$ 系中的分量亦即其方向余弦分别用 u, v, w 和 u_1, v_1, w_1 表示. 在图 3 中已把 xyz 的原点平移到第 m 个散射粒子所在的位置, 由此, 这两组方向余弦之间的关系可以通过将 $x_1y_1z_1$ 系两次旋转变换到 xyz 系而求出. 设在 xyz 系中 \mathbf{r}_m 和 \mathbf{r}_{m+1} 的坐标分

别为 (x', y', z') 和 (x, y, z) , 则两次散射间的坐标关系为

$$x = x' + UL, \quad y = y' + VL, \quad z = z' + WL. \quad (9)$$

在原坐标系内方向余弦 (U, V, W) 满足

$$\begin{aligned} U &= U_1 \sin \phi' + V_1 \cos \theta' + W_1 \cos \phi' \sin \theta', \\ V &= -U_1 \cos \phi' + V_1 \sin \phi' \cos \theta' \\ &\quad + W_1 \sin \phi' \sin \theta', \\ W &= -V_1 \sin \theta' + W_1 \cos \theta'. \end{aligned} \quad (10)$$

这里 L 是从 \mathbf{r}_m 至 \mathbf{r}_{m+1} 的距离, 由 (4) 式计算. $\hat{\mathbf{s}}_{m+1}$ 在 $x_1y_1z_1$ 系中的三个方向余弦的算式为 $U_1 = \sin \nu \cos \psi$, $V_1 = \sin \nu \sin \psi$ 和 $W_1 = \cos \nu$, 如图 3 所示. 其中角 ν, ψ 用 (7) 式和 (8) 式计算. 重复应用 (7) 式到 (10) 式, 就能对光子的位置和散射方向跟踪.

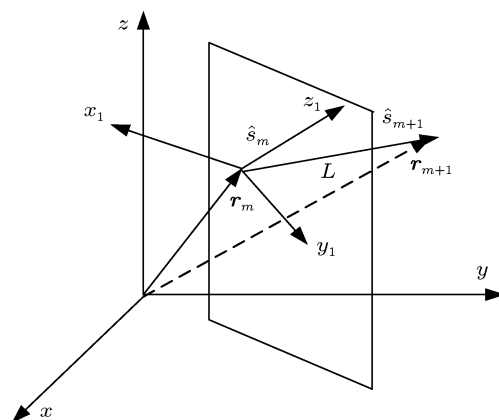


图 2 粒子位置与光子散射方向的关系

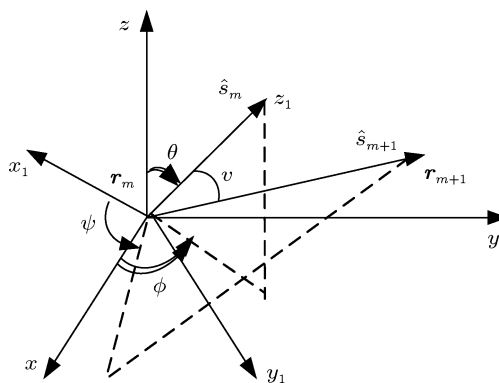


图 3 在粒子坐标系与原坐标系的关系

以上多次散射过程将一直重复下去, 直到光子入射到从粒子层的上边界或者下边界出射, 或者直

到其能量小于给定的阈值时, 本文所取阈值为入射能量的 10^{-5} 倍 [5].

首先假设光线垂直入射到光学厚度 $\tau = 8$ 的平面平行颗粒层, 研究从上边界反射出的光强. 通过记录光子的出射角度, 给出其后向散射函数, 也可称为反射函数 [12], 定义为

$$R(\tau; \mu, \mu_0, \phi - \phi_0) = \frac{I_r(\mu, \mu_0, \phi)}{\mu_0 F}, \quad (11)$$

其中 $\mu_0 F$ 为理想 Lambertian 反射体对光的反射强度, πF 为垂直于入射方向上单位面积的入射光的辐照度. 另外在求得反射函数后, 可以得到平面反照率 [12], 即

$$A_p(\mu_0) = \frac{1}{\pi} \int_0^1 d\mu \mu \int_0^{2\pi} d\phi R(\mu, \mu_0, \phi), \quad (12)$$

平面反照率反映了入射到颗粒层上面辐照度和出射的辐照度的比值.

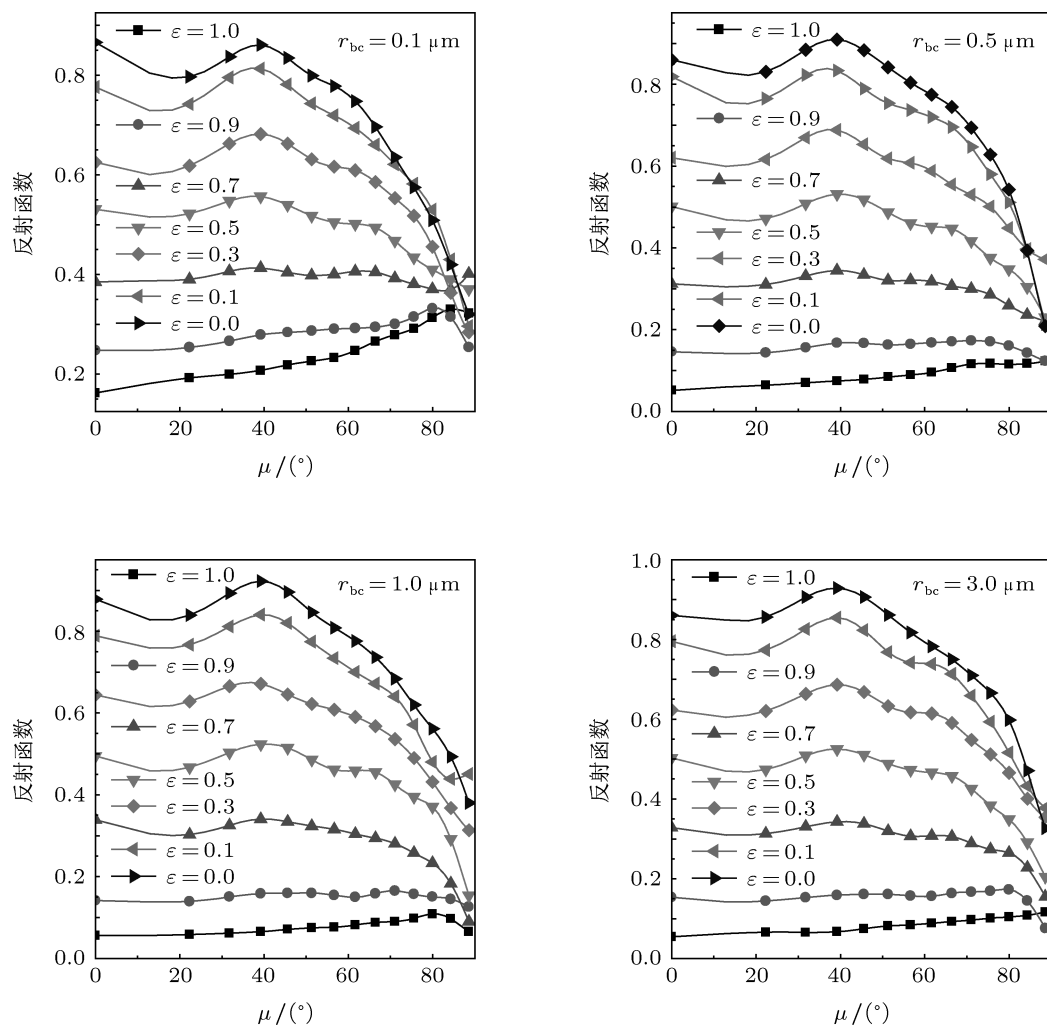


图 4 水云和黑炭气溶胶混合颗粒系的反射函数随观测角的变化

图 4 给出了光垂直入射, 即入射角 $\mu_0 = 0^\circ$ 时, 反射函数随观测角 μ 的变化曲线, 由于假设粒子层各向同性, 因此当光垂直入射时反射函数与方位角 ϕ 无关. 从图中可以看出, 随着黑炭气溶胶的浓度变化, 反射函数的变化很大, 当黑炭的浓度增大时, 其吸收增大, 因此反射强度减少, 当颗粒系完全为黑炭气溶胶时反射最少, 完全为水云时反射最强. 另外不同尺寸的黑炭气溶胶, 其散射特性也有

差异, 这与不同尺寸气溶胶的单次散射相函数的差异有关.

图 5 给出了黑炭气溶胶的有效半径分别为 $0.1 \mu\text{m}$ 和 $1.0 \mu\text{m}$ 时, 平面反照率随入射角余弦的变化曲线, 从图中可以看出, 随着黑炭气溶胶浓度的增大, 吸收明显增强, 反射的辐射度随着黑炭比例的增大而减少. 另外, 黑炭的尺寸也对反射强度有一定影响, 尤其在黑炭浓度较大的情况下.

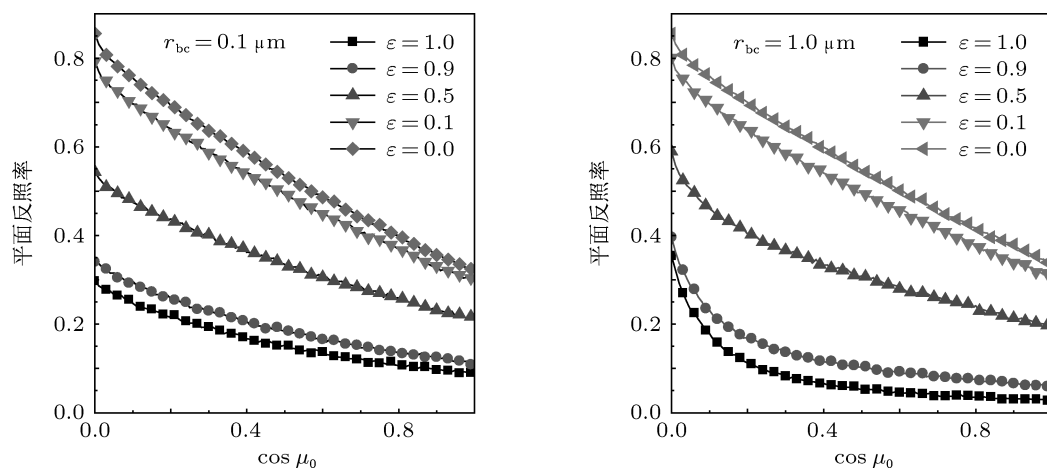


图5 水云和黑炭气溶胶混合颗粒系的平面反照率

4 结论

本文研究了两种不同类型颗粒混合后的多次散射特性,并给出了利用蒙特卡罗模拟方法进行模拟的具体步骤,给出了颗粒碰撞类型的抽样方法、自由程抽样方法以及对 Mie 相函数进行散射方向抽样的方法,该方法适用于离散随机介质的多次散射问题,但没有考虑相干散射,只考虑了弹性散射,因此不适用与浓密分布随机介质的散射研究.利用

文中给出的方法研究了水云中混有黑炭气溶胶后其散射特性的变化,并与纯水云的散射特性进行了比较,从计算结果可以看出,水云中混有黑炭气溶胶会加强其吸收特性,这主要是因为黑炭气溶胶本身的吸收特性,另外黑炭气溶胶的尺寸大小对散射特性也有影响.因此在计算大气的辐射特性以及利用反射太阳光进行气溶胶微观特性反演时,需要考虑颗粒混合造成的影响.

- [1] Han Y, Wang T J, Rao R Zh, Wang Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7396 (in Chinese) [韩永, 王体健, 饶瑞中, 王英俭 2008 物理学报 **57** 7396]
- [2] Sun X M, Han Y P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 682 (in Chinese) [孙贤明, 韩一平 2006 物理学报 **55** 682]
- [3] Videen G, Ngo D, Chýlek P 1994 *Opt. Lett.* **19** 1675
- [4] Liu L, Mishchenko M I, Surabi Menona, Andreas Macke, Andrew A 2002 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **74** 195
- [5] Macke A, Mishchenko M I, Cairns B 1996 *J. Geophys. Res.* **101** 23311
- [6] Sun X M, Wang H H, Liu W Q, Shen J 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1040
- [7] Mishchenko M I, Liu L, Travis L D, Laciš A A 2004 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **88** 139
- [8] Stamnes K, Tsay S C, Wiscombe W 1988 *Applied Optics* **27** 2502
- [9] Van de Hulst H C 1980 *Multiple lights scattering: Tables, Formulas and Application* (New York: Academic Press) p150-200
- [10] Xu H B, Peng X K, Chen Ch B 2010 *Chin. Phys. B* **19** 062901
- [11] Hansen J E, Travis L D 1974 *Space Science Reviews* **16** 527
- [12] Mishchenko M I, Travis L D, Laciš A A 2002 *Scattering, absorption, and emission of light by small particles* (Cambridge: Cambridge University Press) p256
- [13] Sun X M, Han Y P, Shi X W, 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2098 (in Chinese) [孙贤明, 韩一平, 史小卫 2007 物理学报 **56** 2098]
- [14] Dominique T 1996 *Appl. Opt.* **35** 3270

Multiple scattering of light by mixtures of two different aerosol types*

Wang Hai-Hua Sun Xian-Ming[†]

(School of Electrical and Electronic Engineering, Shandong University of Technology, Zibo 255049, China)

(Received 25 August 2011; revised manuscript received 7 December 2011)

Abstract

If particles are mixed with other type of particles, the light scattering characteristics will be changed. In this paper, the light scattering characteristics of water clouds mixed with black carbon are studied. Based on the Mie theory, the single scattering phase function, the single scattering albedo and the asymmetric parameters of water clouds and black carbon aerosols are computed. The Monte Carlo method for simulating the scattering of mixed particles is given, the methods of sampling particle types, sampling free path length, and the sampling scattering directions based on the Mie phase function are given. The changes of the scattering characteristics for water clouds mixed with black carbon aerosols are studied. Reflected light intensity varying with observation angle is calculated with the light normal incidence, and the plane albedo is computed as a function of incidence angle. The influences of mixing ratio and effective radius of black carbon on the scattering characteristic of mixture are discussed. The results show that the black carbon can greatly increase the absorption of the clouds, and the ratio and the size of black aerosols can greatly affect the scattering characteristics of the mixture.

Keywords: scattering, mixed particles, Monte-Carlo method, clouds

PACS: 42.25.Fx, 42.25.Bs

* Project supported by the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2009AQ013).

[†] E-mail: xianming_sun@yahoo.com.cn