

非球形气溶胶粒子短波红外散射特性研究*

范萌¹⁾²⁾ 陈良富^{1)†} 李莘莘¹⁾ 陶金花¹⁾ 苏林¹⁾ 邹铭敏¹⁾²⁾ 张莹¹⁾ 韩冬¹⁾

1) (中国科学院遥感应用研究所, 遥感科学国家重点实验室, 北京 100101)

2) (中国科学院研究生院, 北京 100049)

(2012年2月7日收到; 2012年4月17日收到修改稿)

利用 T 矩阵方法, 以及基于扩散限制凝聚理论的广义多粒子米散射方法, 研究了多种气溶胶粒子在 1.6 和 2.0 μm 波段处, 非球形单粒子和团簇粒子的光散射辐射特性, 并分析了粒子有效半径、复折射指数、粒子形状、相对湿度等因素对非球形粒子散射特性的影响. 分析表明, 除了粒子有效半径和形状会在不同程度上引起粒子散射特性变化, 相对湿度对其影响也比较大, 球形粒子与非球形粒子在不同相对湿度下后向散射相对差异均在 18% 以上; 当粒子体积较小时, 水溶性气溶胶的后向散射强度随相对湿度的增加而增强, 而当粒子体积较大时, 则随相对湿度的增加而减弱; 在体积相同的条件下, 体积较小的团簇粒子的不对称因子比非球形单粒子平均偏大 0.023, 而体积较大的团簇粒子, 却比非球形单粒子不对称因子平均偏小 0.055; 单粒子或等体积的团簇粒子, 其不同波段之间单次散射反照率差异较大, 最大可达 0.226. 该工作对研究气溶胶多次散射对 CO_2 浓度卫星反演精度影响具有重要的科学意义.

关键词: 非球形粒子, 散射特性, T 矩阵, 广义多粒子米散射方法

PACS: 42.25.Fx, 42.68.-w, 92.60.Mt

1 引言

相对于地面监测站点在空间尺度上的不足, 卫星遥感技术由于具备获取区域 CO_2 浓度分布情况的优势而成为当前研究热点之一^[1,2]. 然而, 在用于 CO_2 浓度反演的短波近红外波段 (约 1.6 和 2.0 μm) 处, 大气气溶胶多次散射引起光子路径的改变 (增加或减少光程) 是反演的主要误差来源之一^[3]. 因此, 准确估计气溶胶散射, 可以进一步改进 CO_2 浓度反演精度. 通过蒙特卡罗方法可以有效地模拟气溶胶多次散射及估算光子路径, 而散射相函数、单次散射反照率等气溶胶散射特性参数作为该方法的重要输入参数, 将直接影响气溶胶散射模拟结果的准确性^[4]. 在目前的 CO_2 浓度反演过程中, 一般会对气溶胶粒子进行简单的球形假设, 或仅对沙尘型气溶胶粒子进行非球形假

设^[5,6]. 但在实际情况中, 大气气溶胶往往不只是球形的, 甚至会形成多种气溶胶粒子的积聚体 (团簇粒子)^[7,8]. 已有大量实验和理论研究结果表明, 球形粒子与随机取向的非球形粒子间的散射特性存在很大的差异. 近年来, 随着非球形粒子散射计算方法的不断改进, 处理非球形粒子散射问题时采用的主要方法有 T 矩阵方法^[9,10]、离散偶极子近似法 (DDA)^[11]、时域有限差分法 (PDTD)^[12] 以及计算团簇粒子散射特性的广义多粒子米散射方法 (GMM)^[13] 等. 其中, T 矩阵方法是目前公认的计算非球形粒子散射特性较为有效的方法, GMM 方法具有可以计算任意尺寸大小的团簇粒子散射及收敛速度较快的优势. 目前, 针对 CO_2 近红外反演波段处, 关于非球形气溶胶粒子, 特别是团簇粒子散射特性的研究非常少.

由于在 CO_2 反演过程中, 通常以 1.6 μm 为主要反演波段, 2.0 μm 为辅助反演波段. 为此, 本文

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 41130528) 资助的课题.

† E-mail: lfchen@irsa.ac.cn

主要针对 1.6 μm 波段, 并辅助以 2.0 μm 波段, 研究短波近红外波段非球形粒子散射特性. 首先利用 T 矩阵方法模拟了在 1.6 μm 以及 2.0 μm 波长处不同有效粒径、形状参数对煤烟型气溶胶、雾、沙尘型气溶胶、水溶性气溶胶等 11 种气溶胶非球形粒子的散射特性的影响, 然后应用扩散限制凝聚模型 (DLA)^[14] 仿真模拟了多种单一气溶胶类型的团簇粒子, 并利用 GMM 研究分析了相应波长处团簇粒子的散射特性. 这为进一步准确模拟气溶胶多次散射、获得更准确的太阳辐射光子路径提供了理论依据, 也是解决气溶胶多次散射对 CO₂ 高估效应的关键问题, 具有十分重要的意义.

2 非球形粒子光散射理论

2.1 T 矩阵理论

随着非球形粒子测量和识别技术的不断发展, 以及其散射计算方法的不断改进, 已有很多实验和研究表明, 非球形粒子的光散射特性与其对应的等效球形粒子有着不可忽略的差异性. T 矩阵理论首先由 Waterman^[9] 提出, 之后又经过了 Mishchenko 等^[10,15,16] 的不断完善. 该方法的优点在于其只与粒子的形状、尺度因子、复折射指数以及粒子在坐标系中的方位有关, 而与入射场无关.

由于 Maxwell 方程和边界条件的线性特征, 散射波系数 p_{mn} , q_{mn} 和入射波系数 a_{mn} , b_{mn} 具有线性相关关系:

$$p_{mn} = \sum_{n'=1}^{n_{\max}} \sum_{m'=n'}^{n'} [T_{mnm'n'}^{11} a_{m'n'} + T_{mnm'n'}^{12} b_{m'n'}], \quad (1)$$

$$q_{mn} = \sum_{n'=1}^{n_{\max}} \sum_{m'=n'}^{n'} [T_{mnm'n'}^{21} a_{m'n'} + T_{mnm'n'}^{22} b_{m'n'}], \quad (2)$$

写为矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T^{11} & T^{12} \\ T^{21} & T^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (3)$$

公式 (3) 即为 T 矩阵方法的基本方程. 入射波系数 a_{mn} , b_{mn} 可通过近似解析形式进行计算, 当 T 矩阵已知时, 散射波系数 p_{mn} , q_{mn} 可由该式得到, 进而可以得到非球形粒子的归一化散射相函数、消光截面、散射截面、单次散射反照率和不对称

因子等散射参数. 本文中使用的散射相函数均为归一化散射相函数, 即满足

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi P(\theta) \sin\theta d\theta = 1, \quad (4)$$

其中, $P(\theta)$ 为归一化散射相函数, θ 为散射角.

本文所用的 T 矩阵算法程序由 Mishchenko 提供 (<http://www.nasa.giss.gov/~crmim>), 该算法可用于计算大尺度参数和随机取向的非球形粒子的散射特性^[17,18], 此外, 由于算法中内嵌有自动收敛测试模块而具有较高的计算速度和计算精度^[19].

2.2 GMM 理论

本文中对具有轴对称形状的非球形单粒子利用 T 矩阵方法进行模拟, 而对于具有更为复杂形状的积聚态气溶胶粒子的散射特性, 选择利用文献 [13] 给出的 GMM 方法对由球形微粒组成的团簇粒子进行模拟研究. GMM 理论是 Mie 理论向多粒子散射的扩展, 具有收敛速度较快的优势. 该方法首先将空间内所有球形微粒的电磁场展开为某个固定中心的一系列球谐波函数. 对于第 j 个球形微粒, 可以根据其球面处的边界条件方程得到 4 个包含相互作用系数的线性方程 ((5) 式), 并通过求解这些线性方程, 从而得到散射相互作用系数和内部场的相互作用系数:

$$\begin{aligned} a_{mn}^j &= a_n^j p_{mn}^j, & b_{mn}^j &= b_n^j q_{mn}^j, \\ c_{mn}^j &= c_n^j q_{mn}^j, & d_{mn}^j &= d_n^j p_{mn}^j, \end{aligned} \quad (5)$$

其中, a_{mn}^j , b_{mn}^j , c_{mn}^j , d_{mn}^j 为相互作用系数, p_{mn}^j , q_{mn}^j 为扩展系数, a_n^j , b_n^j , c_n^j , d_n^j 为第 j 个球形微粒的 Mie 散射系数. 当相互作用系数确定后, 通过矢量加法定理, 将其他粒子散射到第 j 个球形微粒的的散射波转化为以第 j 个球形微粒为中心的入射波, 进而可以确定初始坐标系中团簇粒子的总散射场, 继而得到归一化散射相函数、消光截面、散射截面、不对称因子等散射参数.

3 实验结果与分析

本文选取煤烟型气溶胶、沙尘型气溶胶、雾以及 8 种相对湿度条件下的水溶性气溶胶, 共 11 种气溶胶粒子进行讨论. 表 1 和表 2 分别给出了各类型气溶胶在 1.6 和 2.0 μm 波长下的复折射指数

表, 所有数值均为由 OPAC^[20] 和 HITRAN2008^[21] 两个数据库获取并经过插值计算后的结果.

表 1 1.6 μm 处不同粒子的负折射指数

	实部	虚部
煤烟	1.778	0.46800
沙尘	1.383	0.00800
雾	1.317	0.00016
气溶胶 (0%)	1.494	0.02050
气溶胶 (50%)	1.411	0.01093
气溶胶 (70%)	1.391	0.00853
气溶胶 (80%)	1.376	0.00692
气溶胶 (90%)	1.357	0.00476
气溶胶 (95%)	1.344	0.00321
气溶胶 (98%)	1.334	0.00196
气溶胶 (99%)	1.329	0.00143

表 2 2.0 μm 处不同粒子的负折射指数

	实部	虚部
煤烟	1.800	0.49000
沙尘	1.260	0.00800
雾	1.306	0.00110
气溶胶 (0%)	1.420	0.00800
气溶胶 (50%)	1.366	0.00476
气溶胶 (70%)	1.353	0.00394
气溶胶 (80%)	1.344	0.00339
气溶胶 (90%)	1.332	0.00266
气溶胶 (95%)	1.323	0.00214
气溶胶 (98%)	1.316	0.00171
气溶胶 (99%)	1.313	0.00153

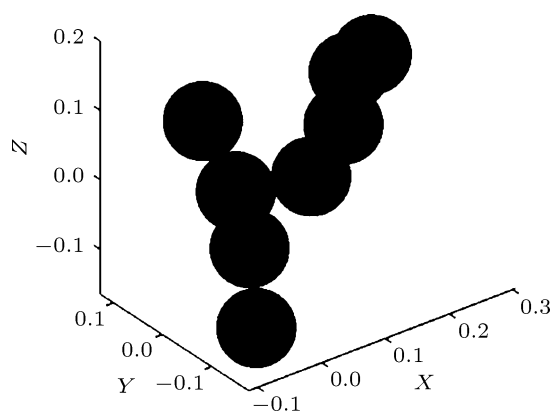


图 1 由 8 个球形微粒组成的团簇粒子示意图 (体积等效半径为 0.1 μm)

在计算中, 对于简单的轴对称非球形气溶胶粒子散射, 利用 T 矩阵方法模拟和分析了椭球体、

圆柱体及切比雪夫粒子三种轴对称粒子的散射特性参数随粒子形状、体积等效半径、气溶胶类型和相对湿度的变化. 对于形状更为复杂的气溶胶粒子, 则首先基于 DLA 分形模型, 仿真构建由 8 个球形微粒组成的团簇粒子 (图 1 为体积等效半径为 0.1 μm 的团簇粒子, 其他尺度的团簇粒子按比例缩放), 然后利用 GMM 方法计算并讨论了团簇粒子的散射特性, 及其与相同体积下单椭球粒子的差异. 本文中使用的粒子半径均为体积等效半径 r .

3.1 非球形粒子散射相函数

图 2 为利用 T 矩阵模拟得到的近红外波段 1.6 μm 处椭球体 (长短轴比 $a/b = 1, 1/2, 1/3, 2, 3$)、圆柱体 (直径与长度比 $D/L = 1, 1/2, 1/3, 2, 3$) 及切比雪夫粒子 (多项式阶数 $n = 2$; 变形参数 $\varepsilon = -0.1, 0.1$) 三种粒子形状下煤烟型气溶胶、沙尘型气溶胶、雾和水溶性气溶胶 (相对湿度 0%) 四种气溶胶粒子散射相函数分布 (以体积等效半径为 0.5 和 1.5 μm 为例). 2.0 μm 波段处不同类型气溶胶粒子散射相函数分布与其在 1.6 μm 处基本相同. 由图 1 可以看出, 不同类型气溶胶粒子在不同形状和粒径状态下散射的能量都主要集中在前向, 且差异较小, 而后向散射相函数分布差异则较为明显. 不同粒子的散射相函数值在 $0^\circ - 35^\circ$ 内随散射角的增大而迅速减小, $35^\circ - 120^\circ$ 其下降速率降低, 并在 120° 之后均有不同程度的增加趋势. 同时, 随着粒子半径的增加, 散射相函数震荡加剧, 散射前向峰也更为突出.

无论是 1.6 μm 还是 2.0 μm 波长处, 煤烟型气溶胶由于其复折射指数虚部较大, 使得不同形状粒子的散射相函数整体趋于一致, 仅半径为 1.5 μm 的粒子在 $30^\circ - 50^\circ$ 散射角范围内存在一定的差异. 对于沙尘、雾和相对湿度为 0% 的水溶性粒子, 在三种粒子形状中, 切比雪夫粒子与球形粒子 ($a/b = 1$) 的散射相函数几乎相同, 即使是后向散射二者的差异也不会很大. 体积等效半径为 0.5 μm 时, 球形粒子会比椭球体和圆柱体对后向散射值产生低估, 其中, 在 1.6 μm 波段低估部分最高可达到球形粒子散射强度的 13 倍左右 ($D/L = 1/3$ 的雾圆柱体粒子, 散射角为 137°), 即使在 2.0 μm 波段也可达到球形粒子散射强度的 2.2 倍左右 ($D/L = 1/3$

的煤烟圆柱体粒子, 散射角为 180°); 而在 $1.5 \mu\text{m}$ 处, 则会比椭球体和圆柱体出现高估的现象, 其中, 在 $1.6 \mu\text{m}$ 波段最高可高估到球形粒子散射强度的 91.2% ($D/L = 1/3$ 的相对湿度为 0% 的水溶

性圆柱体粒子, 散射角为 151°), 在 $2.0 \mu\text{m}$ 波段可高估到球形粒子散射强度的 74.9% ($D/L = 1/3$ 的相对湿度为 0% 的水溶性圆柱体粒子, 散射角为 143°).

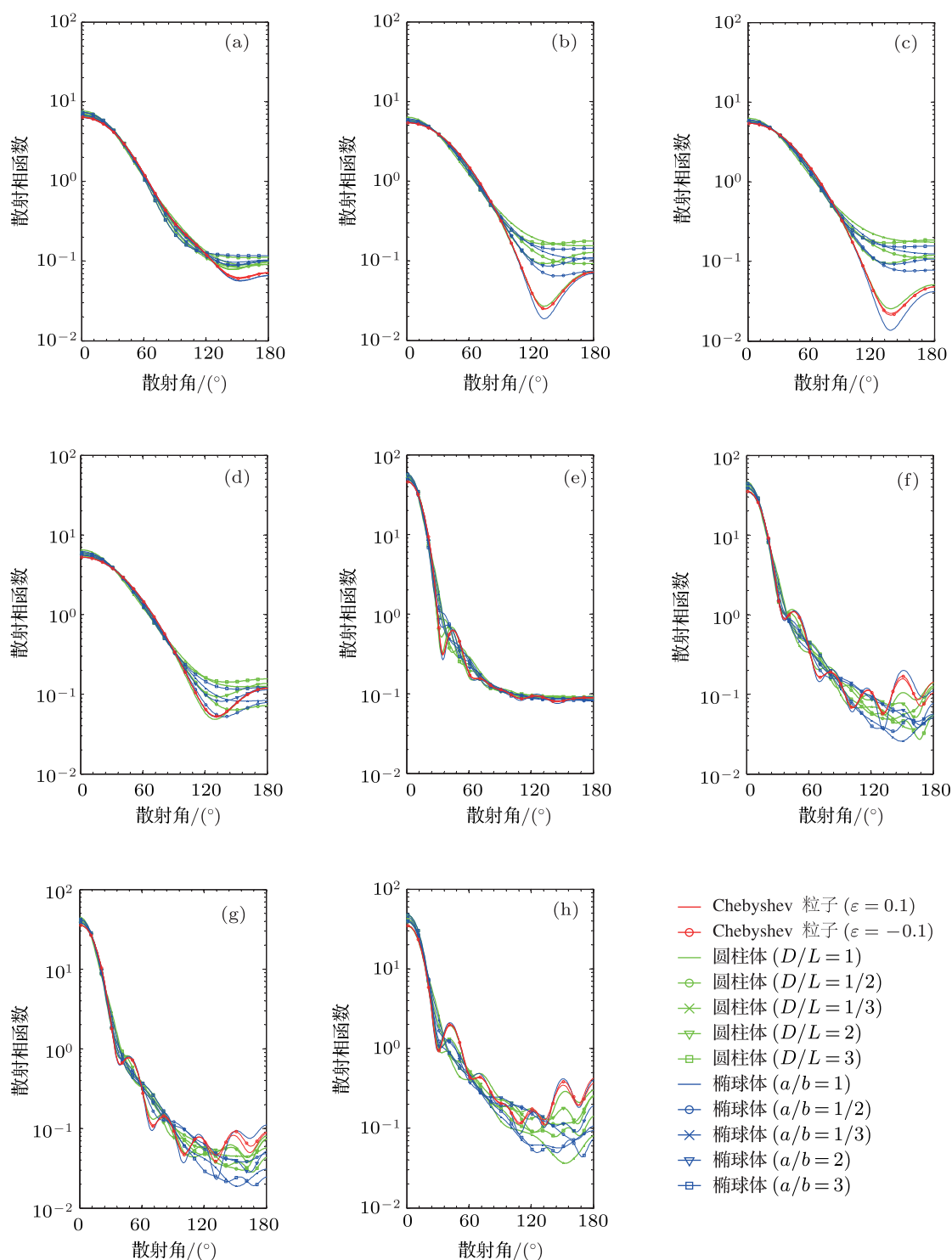


图 2 $1.6 \mu\text{m}$ 波长处不同种类气溶胶粒子的散射相函数随等效粒径、粒子形状和散射角变化 (a) 煤烟, $r = 0.5 \mu\text{m}$; (b) 沙尘, $r = 0.5 \mu\text{m}$; (c) 雾, $r = 0.5 \mu\text{m}$; (d) 水溶性粒子, $r = 0.5 \mu\text{m}$; (e) 煤烟, $r = 1.5 \mu\text{m}$; (f) 沙尘, $r = 1.5 \mu\text{m}$; (g) 雾, $r = 1.5 \mu\text{m}$; (h) 水溶性粒子, $r = 1.5 \mu\text{m}$

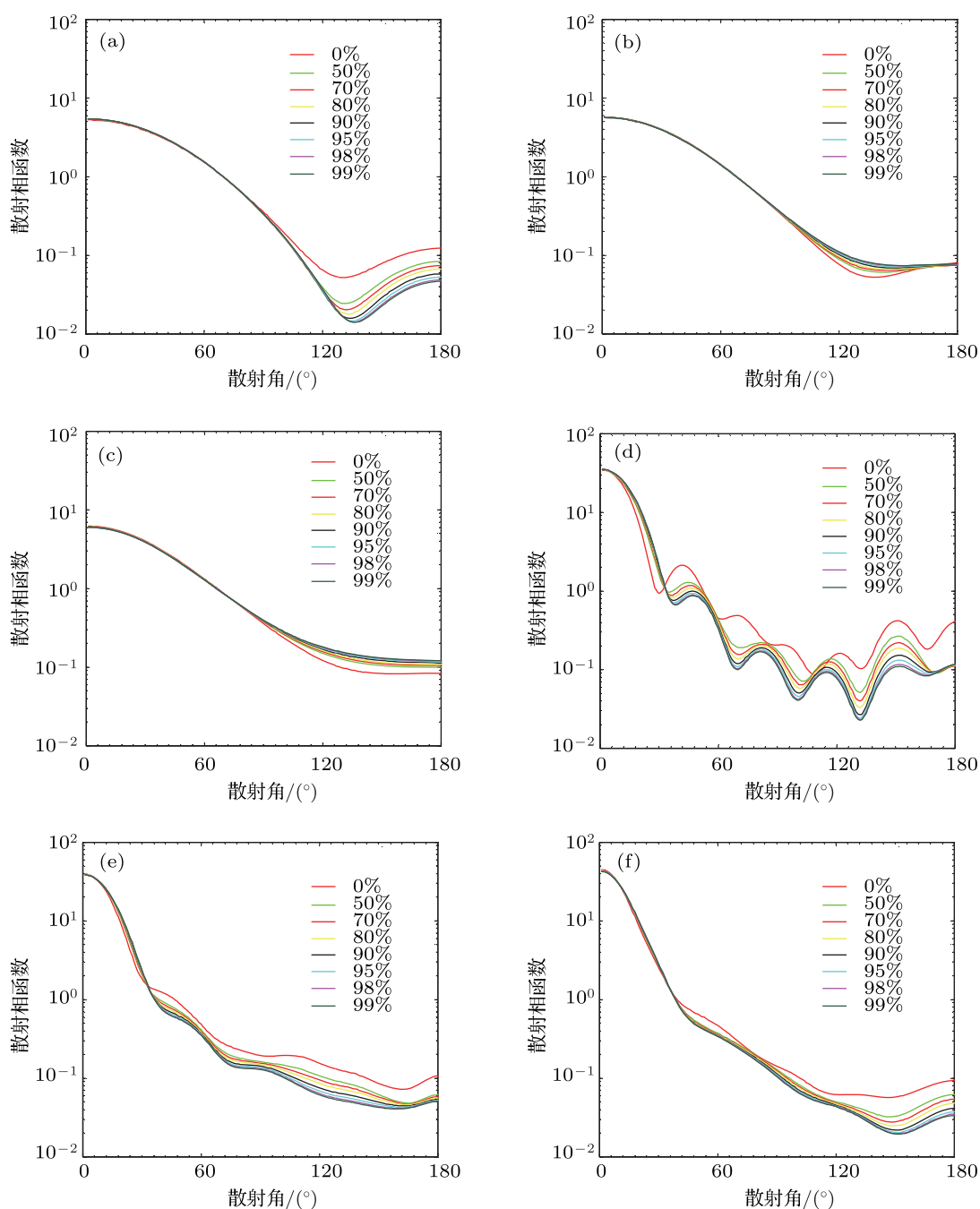


图3 1.6 μm 波长处不同相对湿度条件下, 水溶性椭球体粒子的散射相函数随散射角变化 (a) $a/b = 1, r = 0.5 \mu\text{m}$; (b) $a/b = 1/2, r = 0.5 \mu\text{m}$; (c) $a/b = 1/3, r = 0.5 \mu\text{m}$; (d) $a/b = 1, r = 1.5 \mu\text{m}$; (e) $a/b = 1/2, r = 1.5 \mu\text{m}$; (f) $a/b = 1/3, r = 1.5 \mu\text{m}$

水溶性气溶胶是受空气中相对湿度变化影响比较大的一类气溶胶, 气溶胶的吸湿增长不仅会改变粒子半径, 同时也可能会改变粒子成分, 因此不同相对湿度条件下水溶性气溶胶的复折射指数的实部和虚部均有所不同 (如表 1 和表 2 所示). 图 3 中显示了波长为 1.6 μm 时, 相对湿度对椭球体水

溶性气溶胶散射相函数分布的影响. 与水溶性的椭球体粒子相比, 球体粒子的散射相函数 (图 3 (a) 和 (d)) 具有更强烈的震荡. 当椭球粒子的体积等效半径为 0.5 μm 时 (图 3 (b) 和 (c)), 水溶性气溶胶的后向散射强度 (散射角 $> 120^\circ$) 随相对湿度的增加而增强, 且 $a/b = 1/3$ 的粒子比 $a/b = 1/2$ 的粒

子在不同相对湿度下后向散射差异更为明显,二者相对湿度为 0%与 99%的水溶性粒子散射强度百分比的最小值分别为 62.3%和 64.6%;在体积等效半径为 1.5 μm 时,后向散射强度则随相对湿度的增加有明显的降低,在 $60^\circ\text{--}120^\circ$ 范围内, $a/b = 1/3$ 的粒子比 $a/b = 1/2$ 的粒子在不同相对湿度下散射相函数值差异性较小,而在 $120^\circ\text{--}180^\circ$ 区域内, $a/b = 1/3$ 的粒子却比 $a/b = 1/2$ 的粒子差异性较大,二者相对湿度为 0%与 99%的水溶性粒子散射强度百分比的最大值分别为 309%和 251%. 鉴于波长为 2.0 μm 时相对湿度对椭球体水溶性气溶胶散射相函数分布的影响规律与波长为 1.6 μm 时基本一致,本文中不做详细分析.

表 3 给出了波长为 1.6 和 2.0 μm 处,相对湿度为 0%和 99%两种较为极端条件下,在三个散射角

区间内椭球粒子 ($a/b = 1/2$) 与球形粒子 ($a/b = 1$) 散射强度相对差异 ((椭球粒子散射强度 - 球形粒子散射强度)/球形粒子散射强度 $\times 100\%$) 的均值. 可以看出,球形粒子与非球形粒子在后向散射部分 ($120^\circ\text{--}180^\circ$) 的相对差异还是相当大的,最大值为 233.49%,且各项绝对值均在 18%以上. 由此可见,在对水溶性气溶胶的实际应用中,考虑非球形粒子以及实际大气的相对湿度都是十分必要的.

由于大气中的气溶胶粒子间会由于碰撞而形成形状结构复杂的团簇,因此,本文基于 DLA 分形模型,构建了一个由 8 个球体微粒组成的团簇粒子,并利用 GMM 方法计算了团簇粒子的散射特性参数. 1.6 和 2.0 μm 波长处 11 种气溶胶团簇粒子的散射相函数计算结果在图 4 和图 5 中分别进

表 3 椭球粒子 ($a/b = 1/2$) 与球形粒子 ($a/b = 1$) 散射强度相对差异 (%)

半径/波长	$r = 0.5 \mu\text{m}/\lambda = 1.6 \mu\text{m}$		$r = 0.5 \mu\text{m}/\lambda = 2.0 \mu\text{m}$		$r = 1.5 \mu\text{m}/\lambda = 1.6 \mu\text{m}$		$r = 1.5 \mu\text{m}/\lambda = 2.0 \mu\text{m}$	
	0%	99%	0%	99%	0%	99%	0%	99%
$0^\circ\text{--}60^\circ$	2.74	-1.62	-0.59	0.74	6.90	-1.12	2.18	7.69
$60^\circ\text{--}120^\circ$	0.54	35.51	0.55	-1.78	10.89	36.57	41.54	20.00
$120^\circ\text{--}180^\circ$	-18.68	233.49	36.68	19.92	-48.99	-19.76	-33.70	-23.58

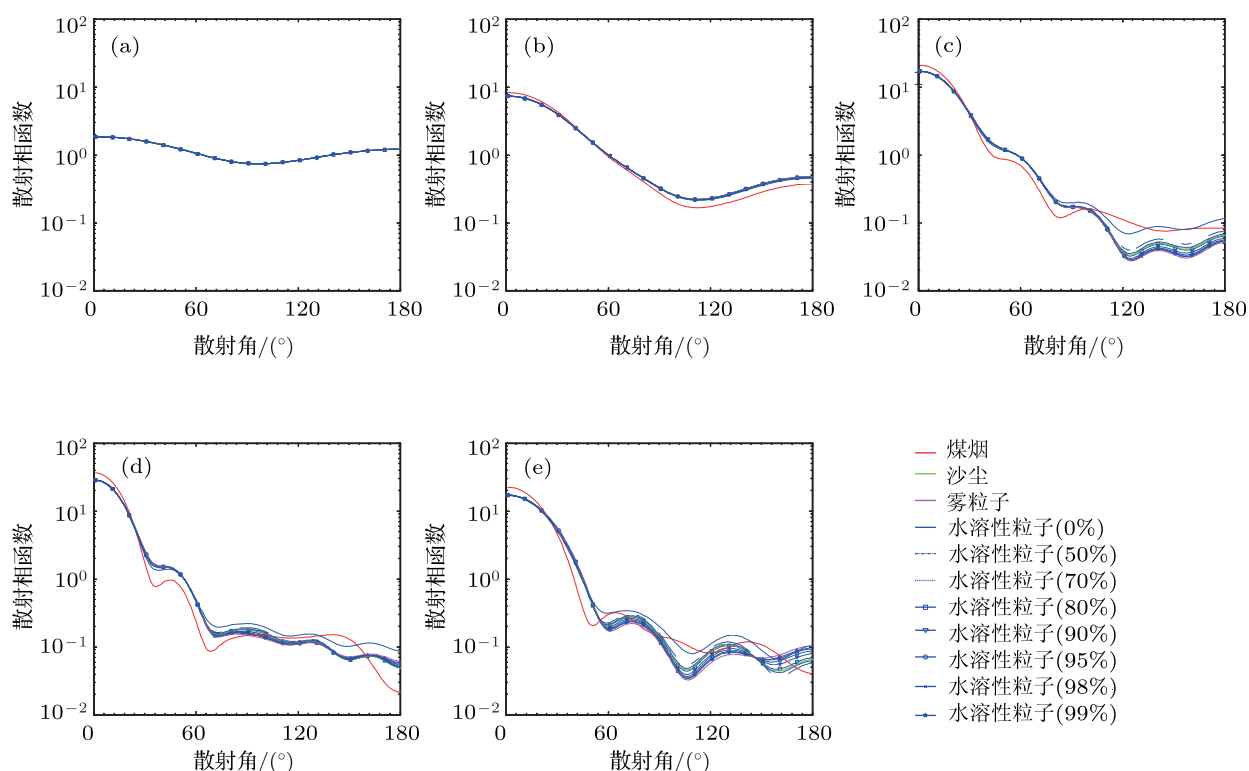


图 4 1.6 μm 波长处团簇粒子 ($N = 8$) 散射相函数随散射角的变化 (a) $r = 0.1 \mu\text{m}$; (b) $r = 0.5 \mu\text{m}$; (c) $r = 1.0 \mu\text{m}$; (d) $r = 1.5 \mu\text{m}$; (e) $r = 2.0 \mu\text{m}$

行了展示. 与非球形的单粒子相同, 不同气溶胶类型的团簇粒子, 其散射相函数差异也主要集中在后向散射部分. 其中, 由图 4 和图 5 均可看出煤烟型团簇粒子的散射强度分布与其他几种类型的粒子差异较为明显, 且对于体积较大的粒子 ($r = 1.5$ 和 $2.0 \mu\text{m}$) 而言, 在散射角大于 150° 的区域散射强度有迅速减弱的趋势, 这主要与煤烟的强吸收性有关. 60° — 180° 范围内, 相对湿度为 0% 的水溶性团簇粒子明显高于其他相对湿度下的水溶性团簇粒子, 且体积等效半径为 1.0 和 $2.0 \mu\text{m}$ 时, 相对湿度对散射相函数值变化引起

的影响更大. 结合图 2 和图 3 可以看出, 在体积相同的条件下, 不同气溶胶类型团簇粒子的散射相函数间差异与单粒子相比有所减弱, 但散射相函数分布还是有所不同的. 其中, 以煤烟型粒子的差异性最大, 煤烟型团簇粒子比非球形单粒子的散射相函数震荡更为剧烈, 且对半径大于 $1 \mu\text{m}$ 的团簇粒子, 其后向散射存在明显的下降趋势, 而这种趋势在单粒子的计算结果中并未得到体现. 同时, 不同相对湿度对团簇粒子的散射相函数分布差异的影响要小于对非球形单粒子的影响.

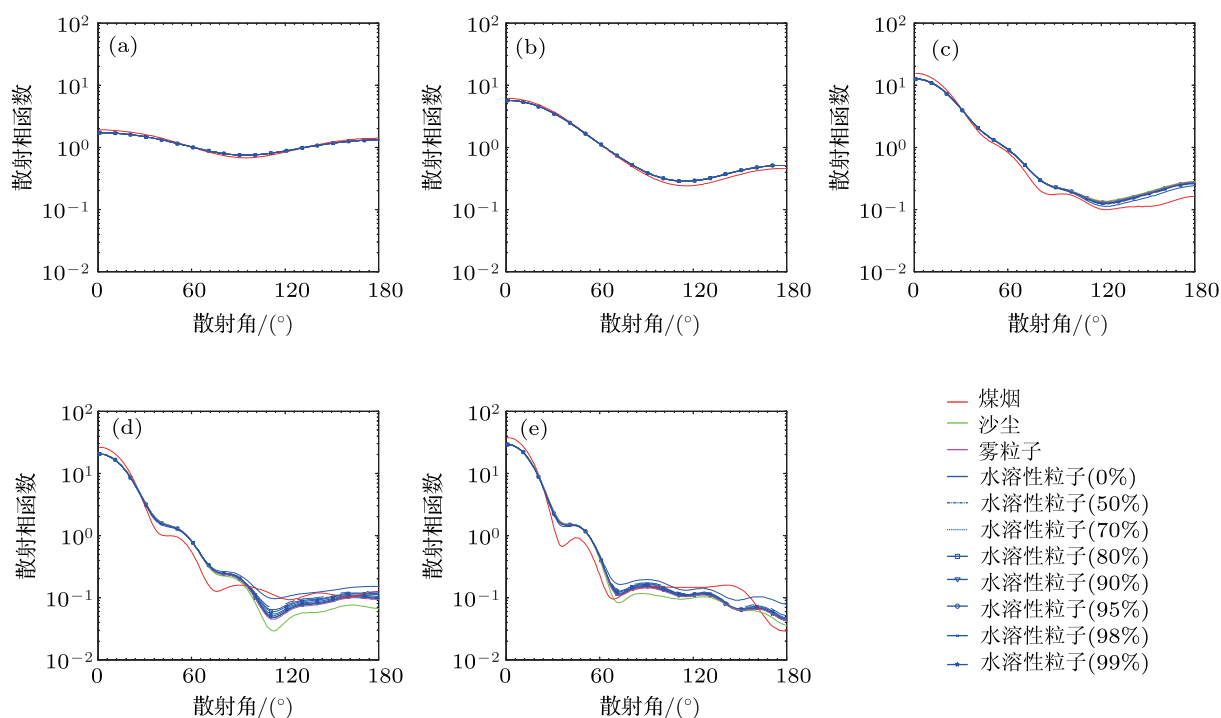


图 5 $2.0 \mu\text{m}$ 波长处团簇粒子 ($N = 8$) 散射相函数随散射角的变化 (a) $r = 0.1 \mu\text{m}$; (b) $r = 0.5 \mu\text{m}$; (c) $r = 1.0 \mu\text{m}$; (d) $r = 1.5 \mu\text{m}$; (e) $r = 2.0 \mu\text{m}$

3.2 非球形粒子的单次散射反照率和对称因子

图 6 和图 7 分别显示了单椭球粒子 ($a/b = 2$) 和团簇粒子 ($N = 8$) 的不对称因子及单次散射反照率随粒子体积等效半径增加而变化的情况. 单椭球粒子和团簇粒子的不对称因子随半径的变化规律在 $1.6 \mu\text{m}$ (图 6) 和 $2.0 \mu\text{m}$ 波长处基本一致, 且差异较小, 单椭球粒子或团簇粒子的不对称因子在两个波段处之差绝对值的均值仅为 0.037 左右. 在 $1.6 \mu\text{m}$ 波长处, 当粒子的体积等效半径较小

时 ($0.01, 0.05, 0.1 \mu\text{m}$), 团簇粒子的不对称因子大于体积相同的单个椭球粒子 (平均偏大 0.023), 即团簇粒子前向和后向散射的差异性较大; 但当粒子半径较大时 ($0.5, 1, 1.5, 2 \mu\text{m}$), 团簇粒子的不对称因子却小于体积相同的单个椭球粒子 (平均偏小 0.055), 即团簇粒子的前向和后向散射的差异性相对较小. 这种区别是由组成团簇粒子的每个单体的入射场为两部分之和而引起的: 一是原始入射场, 二是团簇粒子中其他邻近单体的散射波投射到该单体上而形成的入射场. 因此, 在粒子体积较小时, 团簇粒子由于其形状结构的复杂性, 使得其非球形散射特

征要强于单个轴对称粒子;而在粒子体积较大时,团簇粒子则会由于各个单体间的相互作用导致单体散射特性的部分抵消,从而使得其前向和后向散射差异有所减小。

对于单次散射反照率而言,同一波长处同一

类型的气溶胶粒子,无论是其单粒子还是等体积的团簇粒子几乎是一致的,差别很小.但在不同波长处,单粒子或等体积的团簇粒子其单次散射反照率差异比较显著,尤其以沙尘粒子的差异性最大,其 1.6 与 2.0 μm 两波段间单次散射反照

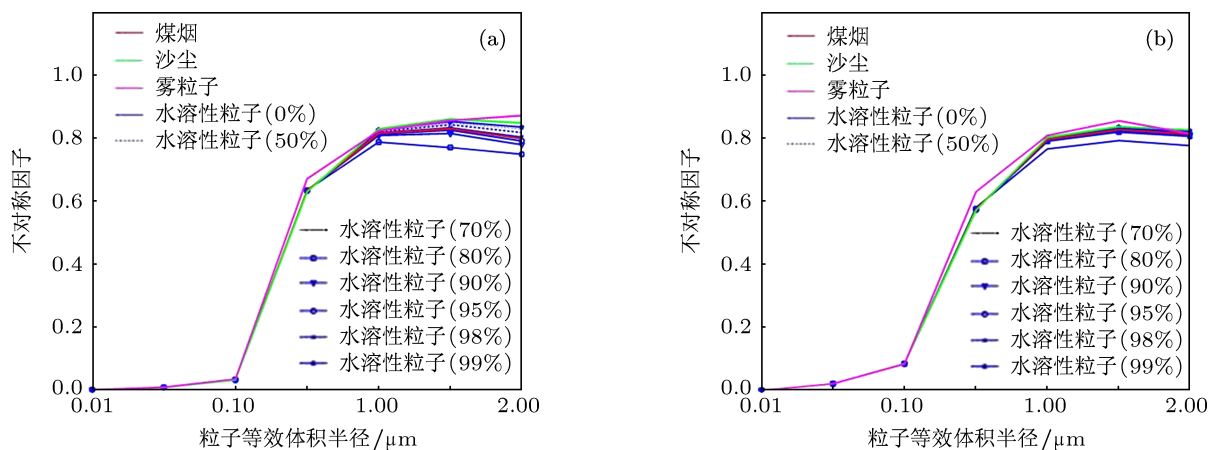


图 6 1.6 μm 处非球形粒子不对称因子随半径的变化 (a) 单椭球粒子 ($a/b = 2$); (b) 团簇粒子 ($N = 8$)

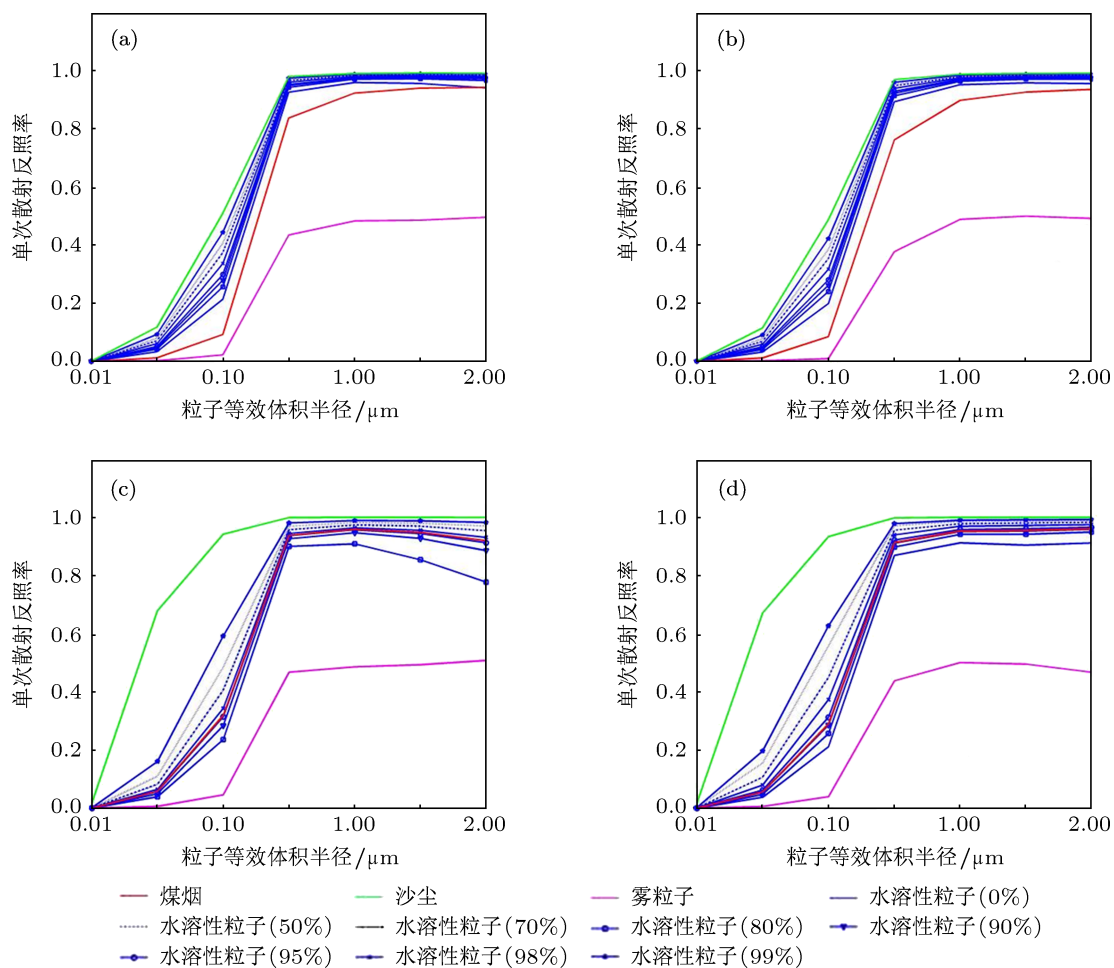


图 7 非球形粒子单次散射反照率随半径的变化 (a) 单椭球粒子 ($a/b = 2, \lambda = 1.6 \mu\text{m}$); (b) 团簇粒子 ($N = 8, \lambda = 1.6 \mu\text{m}$); (c) 单椭球粒子 ($a/b = 2, \lambda = 2.0 \mu\text{m}$); (d) 团簇粒子 ($N = 8, \lambda = 2.0 \mu\text{m}$)

率差值最大可达 0.226. 由图 7 可以看出, 对于同一波段, 只有在体积等效半径大于 $1\ \mu\text{m}$ 时, 不同相对湿度条件下水溶性单椭球体粒子和水溶性团簇粒子的单次散射反照率会略有不同, 且湿度对单椭球粒子单次散射反照率的影响要略强于相应的团簇粒子. 此外, 雾粒子的单次散射反照率始终低于其他类型粒子, 而沙尘粒子则始终高于其他类型的粒子.

值得注意的是, 对于半径小于 $1\ \mu\text{m}$ 的非球形粒子, 无论是非球形单粒子或是团簇粒子, 大气相对湿度对等体积非球形粒子的单次散射反照率的影响都相当显著, 其中以对等效体积半径为 $0.1\ \mu\text{m}$ 的粒子影响最大, 此时, 相对湿度为 0% 的粒子与相对湿度为 99% 的粒子间单次散射反照率的差异可达到 0.4. 在一般情况下, 由于水汽在 $1.6\ \mu\text{m}$ 波长处的吸收几乎可以忽略不计, 因此该波段在气体反演时往往忽略水汽对消光的影响. 但从图 7 (a) 和 (b) 的结果可以看出, 在有水溶性气溶胶存在的情况下, 水汽的浓度会影响大气的相对湿度, 进而对气溶胶的单次散射反照率产生较大的影响, 这最终会导致对整个大气消光作用影响. 因此, 在后期研究气溶胶多次散射对 CO_2 浓度估计影响的时候, 大气水汽的影响应加以重视.

此外, 由于 CO_2 浓度反演辅助通道 $2.0\ \mu\text{m}$ 波段位于水汽的饱和吸收通道, 其信号主要来自于气溶胶后向散射 (无云晴空条件). 而通过前面的分析, 可以看出不同类型气溶胶、粒子形状、粒子大小之间, 部分情况下其后向散射强度分布及单次散射反照率差异还是较为明显的. 因此, 通过进一步研究这些差异对该通道处信号强弱的影响, 可利于更好地利用 $2.0\ \mu\text{m}$ 波段信息提高反演精度.

4 结论

在短波近红外波段, 气溶胶散射是影响 CO_2 浓度反演精度的重要原因之一, 因此, 对气溶胶, 特别是非球形气溶胶粒子散射特性的研究具有重要的意义. 本文通过在 1.6 与 $2.0\ \mu\text{m}$ 波长处, 对煤烟型气溶胶、沙尘型气溶胶、雾和 8 种相对湿度条件下的水溶性气溶胶的非球形散射特性参数 (包

括散射相函数、单次散射反照率和不对称因子) 的模拟, 并结合粒子形状、等效半径等对实验结果进行了深入分析研究.

研究表明, 球形粒子与等体积的非球形单粒子及团簇粒子在散射特性方面存在明显差异, 且差异主要集中在后向散射部分, 等体积非球形粒子散射强度相对球形粒子在后向散射的高估部分最高可达球形粒子的 13 倍, 低估部分最高也可达 91.2%, 因此, 实际应用中需适当考虑气溶胶粒子的非球形特性, 不能简单假设为球形粒子. 相对湿度对半径较大的水溶性粒子的散射相函数分布影响较大, 且与水溶性的椭球体粒子相比, 球体粒子的散射相函数有更强烈的震荡; 当椭球粒子的体积较小时, 水溶性气溶胶的后向散射强度随相对湿度的增加而增强, 然而当体积较大时, 水溶性气溶胶的后向散射强度却随相对湿度的增加而减弱; 不同相对湿度下, 球形粒子与非球形粒子后向散射部分的相对差异均在 18% 以上. 与非球形单粒子相比, 不同气溶胶类型团簇粒子的散射相函数间差异有所减弱. 就单一类型气溶胶而言, 煤烟型团簇粒子与非球形单粒子的散射相函数差异性最大, 此外, 相对湿度对团簇粒子的散射相函数分布差异的影响要相对小于对非球形单粒子的影响. 在体积相同的前提下, 体积较小的团簇粒子, 其前向和后向散射强度的差异要比单个椭球粒子偏大 (不对称因子平均偏大 0.023); 而体积较大的团簇粒子, 其前向和后向散射强度的差异要比单个椭球粒子偏小 (不对称因子平均偏小 0.055); 同一波长处, 同一气溶胶类型的单粒子和等体积的团簇粒子其单次散射反照率几乎一致, 但单粒子或等体积的团簇粒子, 其单次散射反照率在不同波长间差异则较为显著, 最大可达 0.226. 在 $1.6\ \mu\text{m}$ 波段处, 虽然大气中的水汽相对于 CO_2 对电磁波的吸收弱很多, 但其会通过影响空气中相对湿度, 从而间接对水溶性粒子单次散射反照率产生较为显著的影响, 这使得在后期研究气溶胶多次散射对 CO_2 浓度估计影响的时候, 需将大气水汽对粒子散射特性的影响加以考虑.

感谢 NASA 的 Michael Mishchenko 教授提供的 T 矩阵程序, 以及 Florida 大学的 Yulin Xu 教授提供的 GMM 程序.

- [1] Crevoisier C, Chédin A, Matsueda H, Machida T, Armante I R, Scott N A 2009 *Atmos. Chem. Phys.* **9** 4797
- [2] Buchwitz M, Beek R, Burrows J P, Bovensmann H, Warneke T, Notholt J, Meirink J F, Goede A P H, Bergamaschi P, Körner S, Heimann M, Schulz A 2005 *Atmos. Chem. Phys.* **5** 941
- [3] Aben I, Hasekamp O, Hartmann W 2007 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **104** 450
- [4] Mayer B 2009 *Eur. Phys. J. Conf.* **1** 75
- [5] Boesch H, Baker D, Connor B, Crisp D 2011 *Remote Sens.* **3** 270
- [6] Natraj V, Boesch H, Spurr R J D, Yung Y L 2008 *J. Geophys. Res.* **113** D11212
- [7] Xie Q Y, Zhang Y M, Yuan H Y, Zhao J H, Qiao L F, Jiang Y L 2006 *J. Univ. Sci. Technol. China* **36** 320 (in Chinese) [谢启源, 张永明, 袁宏永, 赵建华, 乔利锋, 蒋亚龙 2006 中国科学技术大学学报 **36** 320]
- [8] Tanré D, Deschamps P Y, Devaux C, Herman M 1998 *J. Geophys. Res.* **93** 15955
- [9] Waterman P C 1999 *J. Opt. Soc. Am. A* **16** 2968
- [10] Mishchenko M I, Travis L D, Mackowski D W 1996 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **55** 535
- [11] Draine B T, Flatau P J 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 1491
- [12] Yee K 1966 *IEEE Trans. Antenn. Prop.* **14** 302
- [13] Xu Y, Gustafson B S 2001 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **70** 395
- [14] Witten T, Sander L 1983 *Phys. Rev. B* **27** 5686
- [15] Mishchenko M I, Travis L D 1998 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **60** 309
- [16] Mishchenko M I, Travis L D, Mackowski D W 2010 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **111** 1700
- [17] Mishchenko M I, Travis L D 1994 *Opt. Commun.* **109** 16
- [18] Mishchenko M I 1991 *J. Opt. Soc. Am. A* **8** 871
- [19] Mishchenko M I 1993 *Appl. Opt.* **32** 4652
- [20] Hess M, Koepke P, Schult I 1998 *Bull. Am. Met. Soc.* **79** 831
- [21] Rothman L S, Gordon I E, Barbe A, Benner D C, Bernath P F, Birk M, Boudon V, Brown L R, Campargue A, Champion J P, Chance K, Coudert L H, Dana V, Devi V M, Fally S, Flaud J M, Gamache R R, Goldman A, Jacquemart D, Kleiner I, Lacombe N, Lafferty W J, Mandin J Y, Massie S T, Mikhailenko S.N, Miller C E, Moazzen-Ahmadi N, Naumenko O V, Nikitin A V, Orphal J, Perevalov V I, Perrin A, Predoi-Cross A, Rinsland C P, Rotger M, Šimečková M, Smith M A H, Sung K, Tashkun S A, Tennyson J, Toth R A, Vandaele A C, Vander Auwera J 2009 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **110** 533

Scattering properties of non-spherical particles in the CO₂ shortwave infrared band*

Fan Meng¹⁾²⁾ Chen Liang-Fu^{1)†} Li Shen-Shen¹⁾ Tao Jin-Hua¹⁾ Su Lin¹⁾
Zou Ming-Min¹⁾²⁾ Zhang Ying¹⁾ Han Dong¹⁾

1) (State Key Laboratory of Remote Sensing Science, Institute of Remote Sensing Application, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China)

2) (Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(Received 7 February 2012; revised manuscript received 17 April 2012)

Abstract

Based on the T-matrix method and the generalized multiparticle Mie-solution (GMM) method combined with diffusion-limited aggregation simulator, the scattering properties of non-spherical particles and aggregates are simulated at 1.6 μm and 2.0 μm . And the effects of the equal-volume sphere radius, the complex refractive index, the particle shape and the relative humidity (RH) on the scattering characteristics parameters of non-spherical aerosol are analyzed. The results show that besides the equal-volume sphere radius and the particle shape, the RH could also lead to a large change of the scattering properties. And the relative differences in back scattering between spherical particles and non-spherical particles in different relative humidities are all larger than 18%. If the RH increases, the back scattering will increase for small-size particles, while the back scattering of large-size ones will decrease. The asymmetry factors of the smaller aggregates are 0.023 averagely greater than those of the single equal-volume non-spherical particles, which the asymmetry factors of the bigger aggregates are 0.055 averagely less than those of the single equal-volume non-spherical particles. The differences in single scattering albedo between the two wavelengths 1.6 μm and 2.0 μm are all much larger for either aggregates or single equal-volume particles, and the biggest difference reaches 0.226. This research has scientific significance for studying the aerosol multiple scattering influencing on the accuracy of CO₂ satellite retrieval.

Keywords: non-spherical particles, scattering properties, T-matrix method, generalized multi-sphere Mie-solution method

PACS: 42.25.Fx, 42.68.-w, 92.60.Mt

* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 41130528).

† E-mail: lfchen@irsa.ac.cn