«Оптика атмосферы», **3**, № 6 (1990)

РАССЕЯНИЕ И ПЕРЕНОС ОПТИЧЕСКИХ ВОЛН
В АТМОСФЕРЕ

УДК 551.521.3

Г.О. Задде, А.В. Поданев

УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ДЛЯ КОНСЕРВАТИВНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК АТМОСФЕРЫ

На основе динамики многофазных сред излагается вывод уравнений переноса для коэффициентов поглощения, рассеяния и оптических толщин молекулярных и аэрозольных фракций. Уравнения для молекулярных оптических характеристик выводятся для класса задач, в котором зависимостью коэффициентов от температуры и давления можно пренебречь. Дается физический анализ полученных уравнений.

Известно, что изменение во времени и в пространстве молекулярных и аэрозольных коэффициентов поглощения и рассеяния, а также соответствующих им оптических толщин, полностью обусловливается динамикой газоаэрозольной смеси, которая описывается уравнениями сохранения ее компонент, полученными в теории многофазных сред [1].

Динамика конкретной спектральной оптической характеристики определяется движением оптически активных для нее компонент и в силу этого может обладать особыми закономерностями, не свойственными динамике отдельных составляющих атмосферы. Изучение этих закономерностей представляется актуальным в плане установления связей между распространением загрязняющих примесей в атмосфере и динамикой оптического признака.

Традиционный подход, позволяющий моделировать динамику той или иной оптической характеристики, заключается в том, что в действующую математическую модель после расчета уравнений движения газовых и аэрозольных компонент добавляется блок расчета оптических характеристик (в типичном случае многомерный интеграл). В настоящей работе предлагается разорвать эту цепочку, т. е. заменить в математической модели блок динамики газов и аэрозолей на блок динамики оптических характеристик. Вывод соответствующих уравнений сохранения для ряда оптических характеристик из законов сохранения массы молекулярной и аэрозольной компонент и является целью настоящей статьи.

Объемные коэффициенты молекулярного и аэрозольного рассеяния ($\sigma_{\lambda mi}$, $\sigma_{\lambda ai}$) и поглощения ($\kappa_{\lambda mi}$, $\kappa_{\lambda ai}$) связаны через соответствующие массовые оптические характеристики (индекс «0» сверху) с плотностями компонент соотношениями

$$\varphi_{\lambda b} = \varphi^0_{\lambda b}\rho_b = \sum_{i=1}^{N_b} \varphi^0_{\lambda bi}\rho_{bi} = \sum_{i=1}^{N_b} \varphi_{\lambda b_i}, \tag{1}$$

где $\varphi_{\lambda b}$ будет $\sigma_{\lambda m}$ и $\kappa_{\lambda m}$ при $b = m$, $\sigma_{\lambda a}$ и $\kappa_{\lambda a}$ при $b = a$, индекс «m» — соответствует молекулярной компоненте; индекс «a» — аэрозольной; ρ_{mi} — плотность i-й газовой компоненты; ρ_{ai} — плотность i-й аэрозольной, $\rho_m = \sum^{N_m} \rho_{mi}$ — плотность газовой смеси, $\rho_a = \sum_{i=1}^{N_a} \rho_{ai}$ — плотность аэрозольной смеси.

Массовый коэффициент молекулярного рассеяния — величина практически постоянная. Массовый коэффициент поглощения молекулярной компоненты отдельной линии, описываемый лорентцовским контуром, зависит от давления и температуры. Степень зависимости можно оценить по выражению для центра линии [2]

$$\varkappa^0_{\lambda mi} = \frac{S_0}{\pi\gamma_0 p}\left(\frac{T_0}{T}\right)^n \exp\left\{-1{,}44\frac{E}{T_0}\left(\frac{T_0}{T}-1\right)\right\}, \tag{2}$$

где $T = 296$°K; S_0, γ_0, π — константы; E — энергия уровня (300—400 для сильной полосы, 1500 — для слабой); p — давление, $n = 1{,}5 \div 2$.

Положение экстремума для (2) определяется значением $T_* = \dfrac{E\cdot 1{,}44}{n}$. Пусть $T_{\text{ср}}$ — некоторая характерная температура (например, среднесуточная), тогда отклонение $\Delta\varkappa^0_{\lambda mi}$ от $(\varkappa^0_{\lambda mi})_{\text{ср}}$ в зависимости от отклонения температуры ΔT от средней будет

$$\frac{\Delta \varkappa^0_{\lambda mi}}{(\varkappa^0_{\lambda m})_{\text{ср}}} = n\left[\frac{T_{\text{ср}} - T_*}{T_{\text{ср}}}\ \frac{\Delta T}{T_{\text{ср}}}\right].$$

Следовательно, относительное изменение $\kappa^0_{\lambda mi}$ будет малым в случае относительно малых $(T_{\text{ср}} - T_*)$ и ΔT.

Таким образом, можно выделить класс задач, в котором массовые коэффициенты ослабления можно считать практически постоянными. К таким задачам, в частности, можно отнести задачу распространения газообразных промышленных выбросов с малыми градиентами давления и температуры (что наблюдается при достаточном удалении от источника).

В дальнейшем считаем, что $\sigma_{\lambda mi}$, и $\varkappa_{\lambda mi}$ не зависят от давления, плотности и температуры. Это предположение позволяет простым линейным преобразованием перейти от законов сохранения газовых компонент, представленных в [1], к законам сохранения соответствующего молекулярного оптического признака. В общем случае это уравнение для газоаэрозольной смеси будет иметь вид

$$\frac{d\varphi_{mi}}{dt} + \varphi_{mi}\,\text{div}\,\mathbf{v}_m = \sum_{j=1}^{N_m}\Phi^{mm}_{ji} + \sum_{j=1}^{N_a}\Phi^{am}_{ji} - \text{div}\,(\varphi_{mi}\mathbf{w}_{mi}), \tag{3}$$

где

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_m\cdot\nabla = \frac{\partial}{\partial t} + v_x\frac{\partial}{\partial x} + v_y\frac{\partial}{\partial y} + v_z\frac{\partial}{\partial z};$$

$\boldsymbol{v}_m$ — среднемассовая скорость газовой смеси; $\varphi_{mi} = \{\sigma_{\lambda mi}, \varkappa_{\lambda mi}, \alpha_{\lambda mi}\}$; $\alpha_{\lambda mi}$ — коэффициент ослабления i-й газовой компоненты; $\Phi^{mm}_{ji} = J^{mm}_{ji}\varphi^0_{mi}$ — интенсивность изменения i-й молекулярной оптической характеристики за счет газофазной реакции перехода j-й молекулярной компоненты в i-ю молекулярную; Φ^{am}_{ji} — то же для реакции перехода j-й аэрозольной фракции в i-ю молекулярную; $\mathbf{w}_{mi} = (\mathbf{v}_m - \mathbf{v}_m)$ — скорость диффузии i-й компоненты.

Отметим, что если $\sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_m} J^{mm}_{ji} = 0$ в силу закона сохранения массы, то

$$\sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_m}\Phi^{mm}_{ji} = \sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_m} J^{mm}_{ji}\varphi^0_{mi} = \sum_{j=1}^{N_m}\sum_{i=j}^{N_m} J^{mm}_{ji}\,(\varphi^0_{mj} - \varphi^0_{mi}) \neq 0,$$

то есть в общем случае сумма источников оптических характеристик не равна нулю.

Отметим также, что из постоянства $\sigma^0_{\lambda mi}$ не следует постоянство $\sigma^0_{\lambda m}$ в силу ее зависимости от плотностей компонент. Поэтому для суммарного объемного молекулярного оптического признака $\varphi_m = (\sigma_{\lambda m}, \varkappa_{\lambda m}, \alpha_{\lambda m})$ будем иметь

$$\frac{d\varphi_m}{dt} + \varphi_m\,\text{div}\,\mathbf{v}_m = \sum_{j=1}^{N_m}\sum_{i=j}^{N_m} J^{mm}_{ji}\,(\varphi^0_{mj} - \varphi^0_{mi}) + \sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_a}\Phi^{am}_{ji} - \text{div}\sum_{i=1}^{N_m}\varphi_{mi}\mathbf{w}_{mi}. \tag{4}$$

Физическая интерпретация членов этого уравнения, совпадающая с таковой для более общего уравнения (8), будет представлена позднее.

Спектральный массовый коэффициент аэрозольного взаимодействия $\varphi^0_{\lambda a} = (\sigma^0_{\lambda a}, \varkappa^0_{\lambda a}, \alpha^0_{\lambda a})$ для однородных частиц зависит от радиуса r и комплексного показателя преломления m:

$$\varphi^0_{\lambda a} = 3/(4\rho^*_{ai}r)\,K\,(\mu,\ m),\ \text{м}^2/\text{кг}, \tag{5}$$

где ρ^*_{ai} — собственная плотность i-го аэрозольного вещества; K — фактор (эффективное сечение) взаимодействия; $\mu = 2\pi r/\lambda$ — параметр взаимодействия.

Следовательно, если в качестве i-й аэрозольной компоненты мы выберем совокупность частиц одинакового размера (r) и состава ρ^*_{ai} (m), то из закона сохранения этой аэрозольной компоненты ρ_{ai} [1] легко получить соответствующее уравнение эволюции для спектрального объемного коэффициента оптического взаимодействия:

$$\frac{d\varphi_{ai}}{dt} + \varphi_{ai}\,\text{div}\,\mathbf{v}_m = \sum_{j=1}^{N_m}\Phi^{ma}_{ji} + \sum_{j=1}^{N_a}\Phi^{aa}_{ji} - \text{div}\,(\varphi_{ai}\mathbf{w}_{am}) - \text{div}\,(\varphi_{ai}\boldsymbol{\omega}_{ai}), \tag{6}$$

где $\varphi_{ai} = (\sigma_{\lambda ai}, \varkappa_{\lambda ai}, \alpha_{\lambda ai})$, $\alpha_{\lambda ai}$ — коэффициент ослабления i-й аэрозольной компоненты; $\Phi_{ji}^{ma} = J_{ji}^{ma}\varphi_m^0$ — интенсивность изменения i-й аэрозольной оптической характеристики за счет газоаэрозольной реакции перехода j-й молекулярной компоненты в i-ю аэрозольную; I_{ji}^{ma} — массовая скорость соответствующей реакции; Φ_{ji}^{aa} — то же для реакции перехода j-й аэрозольной фракции в i-ю аэрозольную, $\mathbf{w}_{am} = (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_m)$ — диффузионная скорость аэрозольной смеси в целом относительно среднемассовой скорости газа; $\mathbf{w}_{ai} = (\mathbf{v}_{ai} - \mathbf{v}_a)$ — диффузионная скорость i-й аэрозольной фракции относительно центра масс аэрозольной смеси.

Соответствующее (4) уравнение для совокупного объемного аэрозольного оптического коэффициента взаимодействия будет иметь вид

$$\frac{d\varphi_a}{dt} + \varphi_a \operatorname{div} \mathbf{v}_m = \sum_{i=1}^{N_a}\sum_{j=1}^{N_m}\Phi_{ji}^{ma} + \sum_{j=1}^{N_a}\sum_{i=j}^{N_a} J_{ji}^{aa}(\varphi_{aj}^0 - \varphi_{ai}^0) - \operatorname{div}(\varphi_a \mathbf{w}_{am}) - \operatorname{div}\left(\sum_{i=1}^{N_a}\varphi_{ai}\mathbf{w}_{ai}\right), \quad (7)$$

где $\varphi_{ai} = (\sigma_{\lambda ai}, \varkappa_{\lambda ai}, \alpha_{\lambda ai} = (\sigma_{\lambda ai}+\varkappa_{\lambda ai}), \varphi_a = (\sigma_{\lambda a}, \varkappa_{\lambda a}, \alpha_{\lambda a})$.

Для суммарной молекулярно-аэрозольной оптической характеристики из (4) и (7) получаем следующее эволюционное уравнение:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi\cdot\mathbf{v}_m) = \sum_{j=1}^{N_m}\sum_{i=j}^{N_m} J_{ji}^{mm}(\varphi_{mj}^0 - \varphi_{mi}^0) + \sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_a} J_{ij}^{ma}(\varphi_{aj}^0 - \varphi_{mi}^0) +$$

$$+ \sum_{j=1}^{N_a}\sum_{i=j}^{N_a} J_{ji}^{aa}(\varphi_{aj}^0 - \varphi_{ai}^0) - \operatorname{div}\left[\sum_{i=1}^{N_m}\varphi_{mi}\mathbf{w}_{mi} + \varphi_a\mathbf{w}_{am} + \sum_{i=1}^{N_a}\varphi_{ai}\mathbf{w}_{ai}\right], \quad (8)$$

где $\varphi = (\sigma_{\lambda m}+\sigma_{\lambda a}, \varkappa_{\lambda m}+\varkappa_{\lambda a}, \alpha_{\lambda m}+\alpha_{\lambda a})$.

Это балансовое соотношение показывает, что изменение по времени коэффициентов поглощения, рассеяния и ослабления в заданной точке пространства при движении газоаэрозольной смеси происходит за .счет конвективно-адвективного перемещения среды (2-й член), газофазных химических реакций (3-й член), газоаэрозольпых межфазных переходов (4-й член), аэрозоль-аэрозольных взаимодействий и преобразований (5-й член) и трех типов диффузии: диффузии молекулярных компонентов, диффузии аэрозоля как целого относительно газовой фазы и движения аэрозольных фракций относительно движения центра масс аэрозоля.

Имея в виду приложение к задачам охраны окружающей среды, разместим ось OZ декартовой системы координат перпендикулярно поверхности земли и введем в рассмотрение вертикальные оптические толщины

$$\tau_{\lambda mz} = \int_0^z \alpha_{\lambda m} dz;$$

$$\tau_{\lambda az} = \int_0^z \alpha_{\lambda a} dz. \quad (9)$$

Для того чтобы получить соответствующие эволюционные уравнения для оптических толщ, проинтегрируем уравнения распространения молекулярного (4) и аэрозольного (7) оптических признаков по z от 0 до z. Тогда из (4) для $\tau_{\lambda mz}$ будем иметь

$$\frac{\partial\tau_{\lambda mz}}{\partial t} + (\alpha_{\lambda m}v_z)|_{z=z} - (\alpha_{\lambda m}v_z)|_{z=0} + \int_0^z\left[\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_{\lambda m}v_y) - \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_{\lambda m}v_y)\right]dz =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_m}\sum_{i=j}^{N_m}\int_0^z J_{ji}^{mm}(\alpha_{\lambda mj}^0 - \alpha_{\lambda mi}^0)dz + \sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_a}\int_0^z J_{ji}^{am}\alpha_{\lambda mi}^0 dz - \left(\sum_{i=1}^{N_m}\alpha_{\lambda mi}w_{miz}\right)\Bigg|_{z=z} +$$

$$+ \left(\sum_{i=1}^{N_m}\alpha_{\lambda mi}w_{miz}\right)\Bigg|_{z=0} - \int_0^z\frac{\partial}{\partial x}\left(\sum_{i=1}^{N_m}\alpha_{\lambda mi}w_{mix}\right)dz - \int_0^z\frac{\partial}{\partial y}\left(\sum_{i=1}^{N_m}\alpha_{\lambda mi}w_{miy}\right)dz. \quad (10)$$

Учитывая, что

$$\int_0^z \alpha_{\lambda m} v dz = \int_0^z v \left(\frac{\partial}{\partial z} \int_0^z \alpha_{\lambda m} dz \right) dz = \int_0^z v d\tau_{\lambda m z} =$$

$$= v\tau_{\lambda m z}\Big|_{z=z} - v\tau_{\lambda m z}\Big|_{z=0} - \int_0^z \tau_{\lambda m z} \frac{\partial v}{\partial z} dz, \text{ и } \tau_{\lambda m z}\Big|_{z=0} = 0, \tag{11}$$

четвертому члену в (10) можно придать следующий вид:

$$\int_0^z \left[\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_{\lambda m} v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_{\lambda m} v_y) \right] dy = \frac{\partial}{\partial x}\left[(v_x \tau_{\lambda m z})|_{z=z} - (v_x \tau_{\lambda m z})|_{z=0} - \right.$$

$$\left. - \int_0^z \tau_{\lambda m z} \frac{\partial v_x}{\partial z} dz + \frac{\partial}{\partial y}\left[(v_y \tau_{\lambda m z})|_{z=z} - (v_y \tau_{\lambda m z})|_{z=0} - \int_0^z \tau_{\lambda m z} \frac{\partial v_y}{\partial z} dz. \right. \right. \tag{12}$$

Эволюционное уравнение для вертикальной аэрозольной оптической толщины получается аналогичным образом — интегрированием уравнения (7)

$$\frac{\partial \tau_{\lambda a z}}{\partial t} + (\alpha_{\lambda a} v_z)|_{z=z} - (\alpha_{\lambda a} v_z)|_{z=0} + \frac{\partial}{\partial x}\left[(v_x \tau_{\lambda a z})|_{z=z} - \int_0^z \tau_{\lambda a z} \frac{\partial v_x}{\partial z} dz \right] +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial y}\left[(v_y \tau_{\lambda a z})|_{z=z} - \int_0^z \tau_{\lambda a z} \frac{\partial v_y}{\partial z} dz \right] = \sum_{j=1}^{N_a} \sum_{i=j}^{N_a} \int_0^z J_{ji}^{aa} (\alpha_{\lambda a j}^0 - \alpha_{\lambda a i}^0) dz +$$

$$+ \sum_{i=1}^{N_m} \sum_{j=1}^{N_a} \int_0^z J_{ji}^{ma} \alpha_{\lambda a i}^0 dz - (\alpha_{\lambda a} w_{amz})|_{z=z} + (\alpha_{\lambda a} \cdot w_{amz})|_{z=0} - \frac{\partial}{\partial x}\left[(w_{amx} \tau_{\lambda a z})|_{z=z} - \right.$$

$$\left. - \int_0^z \tau_{\lambda a z} \frac{\partial w_{amx}}{\partial z} dz - \frac{\partial}{\partial y}\left[(w_{amy} \tau_{\lambda a z})|_{z=z} - \int_0^z \tau_{\lambda a z} \frac{\partial w_{amy}}{\partial z} dz \right] - \left(\sum_{i=1}^{N_a} \alpha_{\lambda a i} w_{aiz} \right)\Big|_{z=z} + \right.$$

$$+ \left(\sum_{i=1}^{N_a} \alpha_{\lambda a i} w_{aiz} \right)\Big|_{z=0} - \int_0^z \frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=1}^{N_a} \alpha_{\lambda a i} w_{aix} dz - \int_0^z \frac{\partial}{\partial y} \sum_{i=1}^{N_a} \alpha_{\lambda a i} w_{aiy} dz. \tag{13}$$

Это динамическое уравнение показывает, что изменение по времени оптической толщины на вертикальной приземной трассе от 0 до z (1-й член) происходит за счет вертикального оттока аэрозоля с трассы сверху (2-й член), вдува аэрозоля на трассу с поверхности земли (3-й член) и адвективного перемещения оптической толщины (4, 5, 6, 7-й члены). Восьмой член в (13) отвечает за изменение оптической толщины вследствие всех аэрозоль-аэрозольных реакций, происходящих с изменением коэффициента ослабления ($\alpha_{\lambda aj}^0 - \alpha_{\lambda ai}^0$), а девятый — за счет молекулярно-аэрозольных преобразований.

Замечательной особенностью уравнений динамики для оптических толщ (10) и (13) является то, что в отличие от уравнений динамики соответствующего оптического признака их размерность на единицу меньше. Это обстоятельство существенно облегчит в дальнейшем аналитический и численный анализ этих уравнений и, следовательно, увеличит их практическую ценность.

В заключение отметим ряд интересных свойств эволюционного уравнения:

1. При $v_z|_{z=z} = v_z|_{z=0} = 0$ $\tau_{\lambda az}$ не будет зависеть от распределения вертикальной скорости газа на трассе.

2. Если $dv_x/dz = 0$, то v_x — продольная составляющая адвективной скорости газа, которая будет оказывать влияние па величину $\tau_{\lambda az}$ посредством ее простого сноса. Данное заключение справедливо и для v_y.

Надеемся, что представленный выше новый подход к динамике элементов оптической погоды, позволяющий взглянуть на происходящие процессы через призму уравнений сохранения, окажется продуктивным и полезным.

1. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. Ч. 1. 464 с.
2. Макушкин Ю. С., Мицель А. А., Несмелова Л. И. и др. Автоматизированная система для расчета характеристик поглощения атмосферы. М., 1984. Ч. I. 38 с. Ч. II. 58 с. Деп. в ВИНИТИ. № 3685-84.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,
Томск

Поступила в редакцию
18 июля 1989 г.

G. O. Zadde, A. V. Podanev. **Transfer Equations for the Conservative Optical Characteristics of the Atmosphere.**

Based on the dynamics of multiphase media the derivation of transfer equations for the absorption and scattering coefficients, as well as for optical depths of the molecular and aerosol atmospheric components is carried out. The equations for the molecular optical characteristics are derived for the class of problems, which allow one to neglect their dependence on temperature and pressure. The equations derived are analyzed from the physical point of view.