

多分散高浓度介质偏振光后向扩散散射的 Monte Carlo 仿真

王 凌^{1,2)†} 徐之海¹⁾ 冯华君^{1)‡}

¹⁾ 浙江大学现代光学仪器国家重点实验室 杭州 310027, 中国)

²⁾ 北海道大学电子科学研究所 札幌 0600812, 日本)

(2004 年 10 月 15 日收到, 2004 年 11 月 18 日收到修改稿)

建立了针对多分散高浓度介质偏振光后向扩散散射的 Monte Carlo 仿真模型, 导出了多分散系统的有效自由程分布函数. 给出了半径为 50nm 与 550nm 及其三种不同体积浓度比混合的聚苯乙烯微球作为散射粒子的高浓度介质的仿真结果. 定性分析了多分散介质偏振光后向扩散散射的光强空间分布特征与粒子的体积浓度比的关系.

关键词: 后向扩散散射, 偏振光, 多分散高浓度介质, Monte Carlo 仿真

PACC: 4225J, 0380

1. 引 言

偏振光在高浓度介质中的传输特性已经成为近年来光散射技术和组织光学的研究热点之一. 散射光的偏振状态包含了大量的极具价值的介质属性信息, 从而给高浓度介质属性的测量提供了一个非常有效的手段. 其应用领域涉及大气探测、海洋遥感、医学检测等多个方面.

光的多散射是自然界的一个普遍现象. 一般来说, 只有介质中散射粒子浓度非常低的情况下, 才可以近似地当作单散射来处理. 但是, 随着介质中散射粒子浓度逐渐增大, 光子在介质中受到散射的次数也随之增多. 光的多散射是一个及其复杂的过程, 目前的研究只限制于一些特殊的情况或者近似处理. 传统上对于光在高浓度介质中的传输过程的描述可以划分为四种不同方法: 1) 电磁场解析理论; 2) 能量辐射传递理论; 3) 随机步行模型; 4) Monte Carlo 仿真^[1]. 其中, Monte Carlo 仿真方法是定量分析光在高浓度介质中的传输过程的有力工具, 已经获得了非常广泛的应用^[2-7].

偏振光的后向扩散散射会生成特殊的苜蓿叶形光强空间分布 (cloverleaf intensity pattern), 其空间分

布特征与介质中散射粒子的物理性质有关. 因此, 通过分析高浓度介质偏振光扩散散射的空间光强分布, 可以反推散射粒子的物理性质. 目前对于球形粒子均一 (homogeneous) 介质偏振光后向扩散散射的理论、Monte Carlo 仿真和实验的研究已经有了一些进展^[6, 8-15]. 但是与完善的理论和成熟应用之间, 还是有有很大的距离. 例如 Mueller 等人对于 VRT (vector radiative transfer) 方程的解仅仅适用于 Rayleigh 散射范围, 即使如此, 其解的过程已经是极其复杂^[13, 15]. 而 Monte Carlo 方法若要获得精度较高的结果, 又需要耗费巨大的计算时间. 自然界中, 均一介质是一种理想状态, 云层、星际尘埃、生物体组织等事实上都是非均一介质 (inhomogeneous). 因此, 对于非均一介质的多散射现象研究具有更加重要的现实意义. 而对于非均一介质的偏振光后向扩散散射, 目前来说还没有获得解析解的可能, 其他方面的研究也是很少有所涉及. 特殊情况下, 如生物体皮肤组织, 则可以看成多个均一介质平层的组合, 基本理论还是基于均一介质, 只是增加了边界的处理^[4, 16, 17].

多分散介质是非均一介质一种比较简单的情况, 其散射体为若干种相同物理性质粒子的混合. 当粒子为相同化学性质、不同尺寸的球形粒子时, 其球心则是处于均一态. 本文建立了针对多分散高浓

[†] E-mail: violin@zju.edu.cn

[‡] E-mail: fenghj@zju.edu.cn

度介质的偏振光后向扩散散射的 Monte Carlo 仿真模型 对不同混合比例情况下的光强空间分布进行了比较.

2. 自由程分布函数与粒子散射概率

自由程分布函数 (free pathlength distribution function) 是多散射一个非常关键的函数. 众所周知, 在单分散系统中, 光子自由程分布满足负指数函数 $p_s(r) = \frac{1}{l} \exp(-r/l)$, 其中 $l = 1/\rho \sigma_s$ 为平均自由程^[18]. 对于多分散系统的自由程分布函数, 可以从其定义导出.

光子自由程分布函数 $p(r)$ 定义为光子能够无碰撞地传输距离 r 的概率与其在位置 r 处被散射的概率之积. 对于多分散系统, 在位置 r 处被散射的概率等于分别被各种粒子散射的概率之和 $\sum \rho_i \sigma_{si}$, ρ_i 与 σ_{si} 表示第 i 种粒子的数密度与散射截面积. 因此, 光子在多分散高浓度介质中被某种粒子散射的概率 (粒子散射概率) 与 $\rho_i \sigma_{si}$ 成正比. 于是, 多分散高浓度介质的自由程分布函数满足方程

$$p_p(r) dr = [1 - \int_0^r p_p(r') dr'] \sum \rho_i \sigma_{si} dr. \quad (1)$$

解上式得

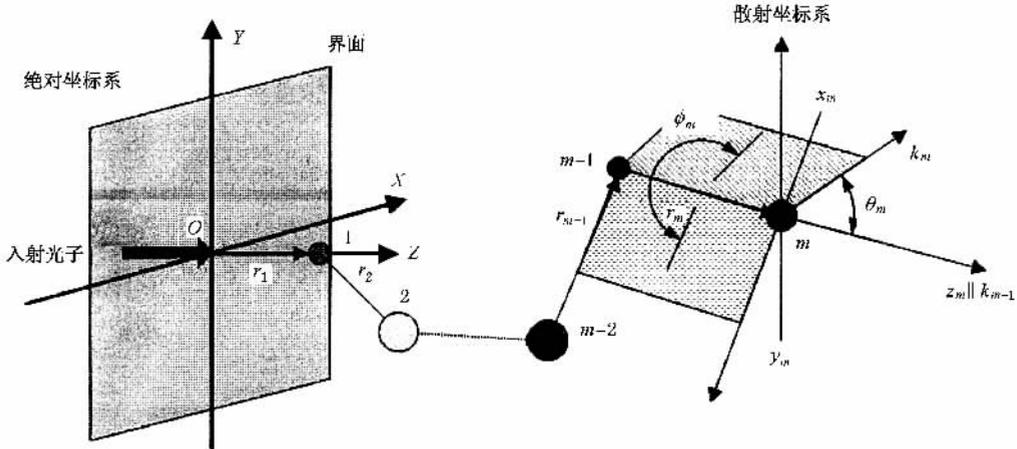


图1 Monte Carlo 仿真的坐标系

连续两个散射粒子之间的距离 r 遵循自由程分布函数. 通常, 一束入射波的散射方向包括了整个立体角, 形成一个光强分布 $I(\theta, \phi)$, θ 与 ϕ 分别为散射角与方位角, 此为散射方向的概率密度函数. 与单分散系统不同, 多分散系统涉及一个散射粒子

$$p_p(r) = \frac{1}{l_e} \exp(-r/l_e), \quad (2)$$

其中 $l_e = 1/\sum \rho_i \sigma_{si}$ 为有效平均自由程.

3. Monte Carlo 仿真

Monte Carlo 仿真跟踪光子所有的散射过程和传输路径. 在扩散散射中, 假设散射介质占据半无限空间, 一束无限细光束从空气垂直入射介质与空气界面. 图 1 中出现的 2 个直角坐标系分别为绝对坐标系 (X, Y, Z) 和第 m 个散射坐标系 (x_m, y_m, z_m) . 绝对坐标系中, XY 平面为介质与空气的界面, 原点 O 为光子入射点, Z 轴为入射波矢方向, YOZ 平面定义为第一次散射时的参考平面. 在第 m 个散射坐标系中, 原点为第 m 个散射粒子中心所在位置, z_m 轴为第 $m-1$ 次散射光的波矢 k_{m-1} 方向, 第 $m-1$ 次散射的散射平面定义为第 m 次散射的参考平面. 因此 y_m 轴处于第 $m-1$ 次散射的散射平面内并且垂直于 k_{m-1} . 入射光子经过位于 r_1, r_2, \dots, r_n 位置的 n 个粒子的散射之后, 或从界面射出, 或被介质吸收. 方便起见, 在本文的仿真中, 假设粒子的吸收忽略不计且光子始终垂直于界面从介质中射出.

的选择问题, 即光子在某次散射事件中被哪一种粒子散射, 此为第 2 节中的粒子散射概率. 球形粒子的散射过程由 Mie 散射理论完全描述为 Stokes-Mueller 方程^[19]

$$S' = M(\theta)R(\phi)S, \quad (3)$$

式中 $S = \begin{bmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{bmatrix}$ 为光子 Stokes 矢量, $M(\theta) =$

$$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} & S_{34} \\ 0 & 0 & -S_{34} & S_{33} \end{bmatrix}$$
 为球形粒子散射的 Mueller

$$\text{矩阵, } R(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2\phi) & \sin(2\phi) & 0 \\ 0 & -\sin(2\phi) & \cos(2\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
 为散

射旋转矩阵. 入射光子的偏振态由 Stokes 矢量的参数决定, 散射光子偏振态的检验通过改变模拟检偏器的状态实现.

整个算法由 Matlab 编译完成, 并转化成 Linux 系统下的 C 可执行文件.

4. 结果与讨论

本文仿真聚苯乙烯 (Polystyrene) 微球悬浮液作为散射介质, 其吸收率几乎为 0, 折射率 1.59, 稀释用去离子水折射率 1.33, 入射激光真空中波长 514.5nm. 散射介质由半径为 50nm 与 550nm 两种粒子按照体积比 4:1, 1:1, 1:4 混合而成, 总体积浓度为 0.2%, 有效平均自由程见表 1. 仿真过程在 Linux server 下进行, 服务器装备 dual 3000MHz P4 CPUs, 1Gb 内存, 计算 300 万光子约需要 30h.

表 1 介质有效平均自由程

体积浓度比(50:550nm)	1:0	4:1	1:1	1:4	0:1
有效平均自由程 l_e/mm	2.183	0.443	0.202	0.130	0.106

通过改变入射光的偏振状态以及检偏器状态可以获取偏振光后向扩散散射的不同光强空间分布. 文献 [3] 中, 入射光经起偏器形成偏振光, 出射光经检偏器, 由 CCD 获取为数字图像. 起偏器与检偏器均为线偏振器, 两者方向一致形成 co-polarized pattern, 两者方向垂直形成 cross-polarized pattern, 移走起偏器与检偏器, 则形成 unpolarized pattern. 其中 co-polarized pattern 的形状与散射粒子尺寸大小有明显相关性, 通过分析可以反推粒子的半径. 本文沿用文献 [8] 提出的特征参数分析 co-polarized pattern 的形状与散射介质性质的关系.

图 2 第一排为偏振光后向扩散散射光强空间分布的仿真 co-polarized pattern 图像, 50nm 与 550nm 粒子的体积比从左至右依次为 1:0, 4:1, 1:1, 1:4, 0:1. 其中第一幅和最后一幅事实上分别为 50nm 与 550nm 粒子的单分散系统. 为了消除光强从中心向四周成指数下降的效应, co-polarized pattern 通过公式

$$I_{\text{norm}}(X, Y) = \frac{I_{\text{co}}(X, Y)}{I_{\text{un}}(X, Y)} \quad (4)$$

归一化. 上式中 I_{co} , I_{un} 与 I_{norm} 分别表示 co-polarized pattern, unpolarized pattern 与 normalized pattern. 图 2 第二排为对应第一排的 normalized pattern 图像.

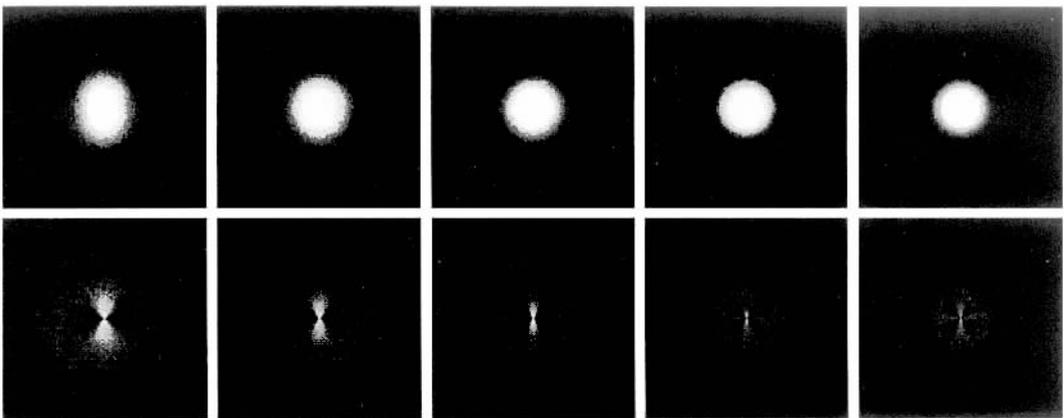


图 2 偏振光后向扩散散射光强空间分布 (第一排: co-polarized pattern, 第二排: normalized pattern)

由图 2 可以得出, 随着 550nm 粒子比例的增加, pattern 的尺寸减小. 该现象与表 1 中有效平均自由

程的变化趋势相一致. 最重要的变化特征是 pattern 的对称性, 从左至右逐渐由双叶对称向四叶对称过

渡,这种变化趋势与单分散系统的对称性随粒子尺寸大小的变化一致.图3给出了一个描述偏振光后向扩散散射光强空间分布特征的办法,绕坐标原点(光子入射点)一周的光强随方位角呈周期性变化,该变化在远离原点的区域逐渐消失.定义光强变化的对比度开始小于5%的位置为 pattern 的尺寸半径 ρ_p ,半径为 $\rho_p/3$ 的圆周上的光强为标准特征光强变化曲线.

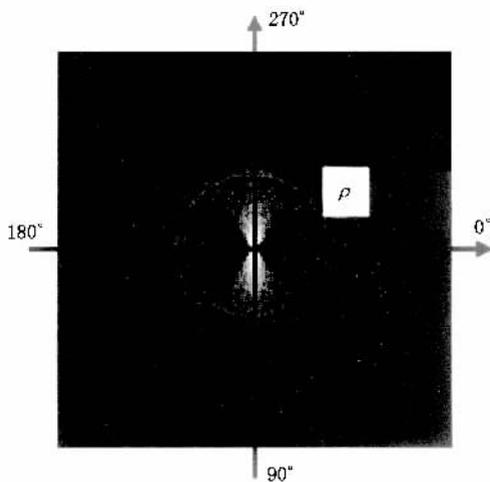


图3 光强随方位角的周期性分布

5. 结 论

本文建立了针对多分散高浓度介质的偏振光后向扩散散射的 Monte Carlo 仿真模型,首次将 Monte Carlo 仿真方法扩展到了非均一介质的偏振光后向扩散散射.算法根据 Mie 散射理论精确模拟了单个粒子的散射过程,跟踪了偏振光在高浓度介质中传输的偏振状态,给出了半径为 50nm 与 550nm 及其三种不同体积浓度比混合的聚苯乙烯作为散射粒子的高浓度介质的仿真结果.定性地分析了多分散介质的偏振光后向扩散散射的光强空间分布特征与粒子的体积浓度比的关系.该算法为将来系统研究非均一生物体组织的偏振光散射现象提供了一种新的研究手段.

图4给出了五种散射介质的标准特征光强变化曲线.多分散系统的曲线均处于两种粒子单分散系统的两条曲线之间,哪种粒子的体积浓度较大,其曲线就更靠近哪种粒子.说明多分散系统的偏振光后向扩散散射的光强空间分布特征与粒子的体积浓度比的关系呈单调性.这个现象为分析多分散高浓度介质的散射粒子成分提供了一种新的手段.

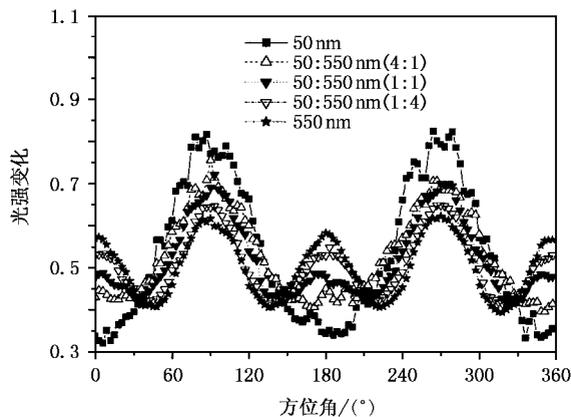


图4 标准特征光强变化曲线

另外我们也看到仿真结果的精确度跟计算的光子数量有关.虽然目前计算机的性能已经有了非常大的提高,但是 Monte Carlo 方法需要计算大量的光子才具有统计意义,散射的复杂性增加一些,CPU 消耗的计算时间增加量却要乘以一个巨大的光子数量.这是该方法所面临的最严重的问题.

有关多分散高浓度介质偏振光后向扩散散射的实验研究正在进行当中.

特别感谢北海道大学电子科学研究所岩井俊昭博士与石井胜弘博士对本文工作的指导.感谢北海道大学电子科学研究所纳米材料实验室提供高性能计算机服务器平台.感谢日本文部科学省 21 世纪 COE 项目——Advanced Life Science on the Base of Bioscience and Nanotechnology 对本文作者在北海道大学进行学术交流的资助.

- [1] Dogariu M 1996 *Polarization Effects in Multiple Light Scattering* (Ph. D. dissertation. Hokkaido University)
- [2] Flock S T *et al* 1989 *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **36** 1162
- [3] Bruscaaglioni P , Zaccanti G and Wei Q N 1993 *Appl. Opt.* **32** 6142
- [4] Wang L W , Jacques S L and Zheng L Q 1995 *Comp. Meth. Prog. in Biomed.* **46** 131
- [5] Yao G and Wang L V 2000 *Opt. Exp.* **7** 198
- [6] Bartel S and Hielscher A H 2000 *Appl. Opt.* **39** 1580
- [7] Wang X D *et al* 2003 *J. Biomed. Opt.* **8** 60
- [8] Hielscher A H , Mourant J R and Bigio I J 1997 *App. Opt.* **36** 125
- [9] Hielscher A H *et al* 1997 *Opt. Exp.* **1** 44
- [10] Camero B D *et al* 1998 *Opt. Lett.* **23** 485
- [11] Rakovic M J and Kattawar G W 1998 *Appl. Opt.* **37** 3333
- [12] Rakovic M J *et al* 1999 *Appl. Opt.* **38** 3399
- [13] Mueller Jr D W and Crosbie A L 2000 *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* **67** 395
- [14] Kokhanovsky A A 2002 *Meas. Sci. Technol.* **13** 233
- [15] Mueller Jr D W and Crosbie A L 2002 *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* **75** 423
- [16] Schmitt J M , Zhou G X and Walker E C 1990 *J. Opt. Soc. Am. A* **7** 2141
- [17] Morgan S P and Ridgway M E 2000 *Opt. Exp.* **7** 395
- [18] Ishimaru A 1978 *Wave Propagation and Scattering in Random Media* Vol. I (New York : Academic) 116
- [19] Bohren C F and Huffman D R 1983 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (New York : John Wiley & Sons Inc) p82

Monte Carlo simulation for diffuse backscattering of polarized light from poly-disperse highly dense media

Wang Ling¹✉† Xu Zhi-Hai¹) Feng Hua-Jun¹‡

¹) State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

²) Research Institute for Electronic Science, Hokkaido University, Sapporo 0600812, Japan)

(Received 15 October 2004 ; revised manuscript received 18 November 2004)

Abstract

A Monte Carlo simulation model for the diffuse backscattering of the polarized light from the poly-disperse highly dense media is developed and the effective free pathlength distribution function of the poly-disperse system is given. Simulation is conducted for the mono-disperse polystyrene suspensions with particle sizes of radii 50 and 550nm, and poly-disperse suspensions containing the above two particles with the volume fraction ratios of 4 : 1, 1 : 1 and 1 : 4. The relation between the spatial intensity variations of the light diffuse backscattering pattern and the volume fraction ratio of the poly-disperse suspensions is analyzed qualitatively.

Keywords : diffuse backscattering, polarized light, poly-disperse highly dense media, Monte Carlo simulation

PACC : 4225J, 0380

†E-mail : violin@zju.edu.cn

‡E-mail : fenghj@zju.edu.cn