

含有密集随机分布内核的椭球粒子光散射特性研究^{*}

孙贤明[†] 申 晋 魏佩瑜

(山东理工大学电气与工程学院电子信息科学系, 淄博 255049)

(2009 年 1 月 3 日收到 2009 年 1 月 19 日收到修改稿)

给出了一种结合射线追踪和蒙特卡罗方法计算含核粒子光散射的方法, 内核粒子可以为稀疏分布也可为浓密分布. 粒子外边界的反射和折射由射线追踪方法计算, 而粒子内部的多次散射过程由蒙特卡罗方法模拟. 当内核粒子为浓密随机分布时, 其单次散射特性由基于静态结构因子 (static structure factor) 的浓密介质光散射理论计算. 最后讨论了含核椭球粒子模型的单次散射特性.

关键词: 射线追踪技术, 蒙特卡洛方法, 光散射, 椭球粒子

PACC: 4225B, 9265D, 4110H

1. 引 言

研究粒子散射的数值计算问题, 具有非常重要的实际意义. 自然界中的很多粒子都具有复杂的形状, 如大气中的气溶胶、雨滴、以及冰晶粒子等, 研究这些粒子的光散射特性可以更好地解释大气遥感过程中的一些重要现象. 另外在目标识别与成像、遥测遥感、地下目标探测、生物体皮下组织的无创伤诊断、环境监测方面都需要研究粒子的电磁散射特性. 对于小粒子光散射特性的研究已经非常系统, 从球形到非球形, 从无耗到有耗, 从各向同性到各向异性, 从平面波入射到波束入射, 以及波束的离轴、在轴入射等, 并且研究成果已被广泛应用于各种光学测量中, 取得了很好的社会效益和经济效益. 但对于所有的尺度参数和所有形状粒子的散射计算来说, 每种方法都有其缺陷和局限性. 其中含核粒子的散射计算仍然受内核的数量、位置以及整个粒子尺寸和形状的限制^[1-4]. 很多研究者利用基于 Mie 理论的多层球形模型来代替含核粒子的研究^[5], 但当粒子内核数目较多时, 折射进粒子内部的光线将经历多次散射, 出射光线将变得更为各向同性, 而多层球形粒子模型显然无法考虑这一过程, 目前国际上对含核椭球粒子的研究较少, Han 等人研究了共焦和非共焦多层椭球粒子的散射特性^[6], Macke 等^[7,8]研

究了含有多个稀疏分布内核冰晶粒子的散射, 但没有考虑粒子浓密分布的情况.

近年来由于工业污染、沙尘暴等的影响, 大气中的凝结核增多, 使云、雨、雾以及城市气溶胶中的含核粒子数量增多, 它们的存在将极大地影响大气辐射传输, 进而影响气候的变化, 因此对于它们的研究非常重要. 大气气溶胶中很多粒子可以看作是椭球形^[9], 如下落中的雨滴等, 本文主要研究了含有内核的旋转椭球粒子 (如图 1) 的散射特性.

本文的结构如下: 第二部分给出了随机分布内核的单次散射特性; 第三部分介绍了结合射线追踪和蒙特卡罗计算整个粒子散射特性的方法; 最后一部分为结论.

2. 密集分布粒子的单次散射特性

对于稀疏分布的随机介质来说, 假定来自各散射元的散射是独立的, 即场是非相干的. 其单次散射相函数为^[10]

$$P(\theta) = \frac{4\pi}{C_{\text{sca}}} \frac{dC_{\text{sca}}}{d\Omega}, \quad (1)$$

其中 θ 为散射角 $dC_{\text{sca}}/d\Omega$ 为微分散射横截面^[10].

$$C_{\text{sca}} = \int_{4\pi} d\Omega \frac{dC_{\text{sca}}}{d\Omega} \quad (2)$$

为总的散射截面.

当散射粒子所占体积浓度较大时, 散射独立不

^{*} 国家自然科学基金 (批准号 60877050) 资助的课题.

[†] E-mail: xmsun@mail.xidian.edu.cn

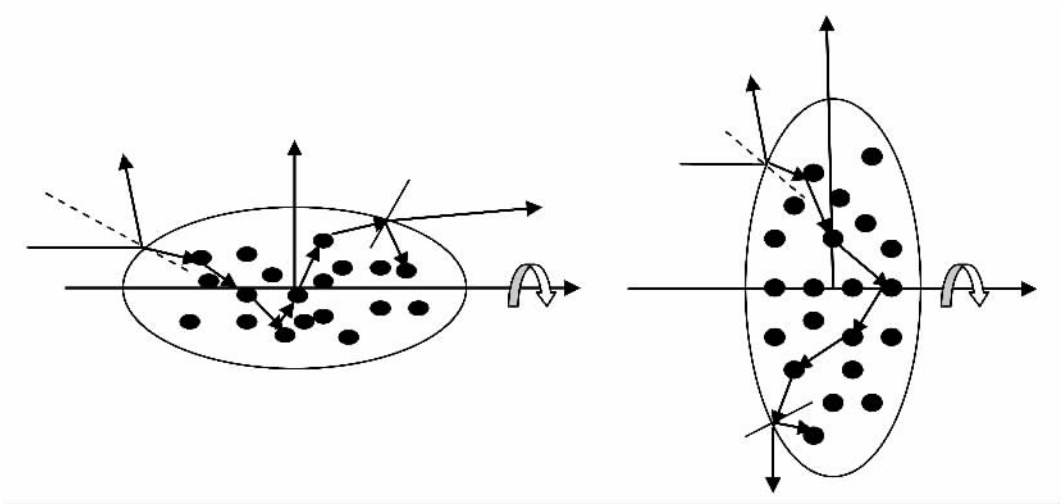


图 1 含核椭球粒子光散射示意图

相干的假定会过高地估计散射,因此利用稀疏分布的相函数来求解辐射传输方程对于密集分布的散射粒子介质是不合适的^[11],应该从场的更严格理论进行修正.通过引入静态结构因子(static structure factor) $S(\theta)$,稀疏分布随机粒子单次散射相函数仍然可以用于密集分布粒子的光散射计算^[11, 12].修正后的微分散射截面等于独立散射的微分散射截面和静态结构因子的积.因此(1)式和(2)式可改写为

$$P(\theta) = \frac{4\pi}{C_{\text{sca}}} \frac{dC_{\text{sca}}}{d\Omega} S(\theta), \quad (3)$$

$$C_{\text{sca}} = \int_{4\pi} d\Omega \frac{dC_{\text{sca}}}{d\Omega} S(\theta). \quad (4)$$

对于任意粒子尺寸分布和粒子形状的静态结构因子,其计算非常困难.因此我们采用了两个基本假设,1)粒子的形状为球形,2)粒子的尺寸分布近似为单分散的.基于以上假设,静态结构因子为^[13]

$$S(\theta) = \frac{1}{1 - NC(p)}, \quad (5)$$

其中

$$p = [4\pi \sin(\theta/2)]/\lambda, \quad (6)$$

N 为内核粒子的数密度, λ 为入射光的波长, $C(p)$ 为

$$\begin{aligned} C(p) = & 24 \frac{f}{N} \left[\frac{\alpha + \beta + \delta}{u^2} \cos u - \frac{\alpha + 2\beta + 4\delta}{u^3} \sin u \right. \\ & - \frac{2(\beta + 6\delta)}{u^4} + \frac{2\beta}{u^4} \\ & \left. + \frac{24\delta}{u^5} \sin u + \frac{24\delta}{u^6} (\cos u - 1) \right], p \neq 0, \quad (7) \end{aligned}$$

且

$$C(0) = -24 \frac{f}{N} \left(\frac{\alpha}{3} + \frac{\beta}{4} + \frac{\delta}{6} \right), \quad (8)$$

其中

$$u = 2pr_0, \quad (9)$$

$$\alpha = \frac{(1 + 2f)^2}{(1 - f)^4}, \quad (10)$$

$$\beta = -6f \frac{(1 + f/2)^2}{(1 - f)^4}, \quad (11)$$

$$\delta = \alpha f/2, \quad (12)$$

其中 $f = 4/3\pi N r_0^3$ 为填充系数(即,内核粒子所占单位体积的比例).当椭球粒子内部不含有内核粒子时($N = 0$),静态结构因子等于 1.

修正后的相函数可以用于非吸收或者吸收较少粒子的多次散射计算^[11].因此可以基于这种相函数,利用蒙特卡罗方法模拟内核粒子的多次散射特性过程^[14].在本文的计算中,取内核粒子为一种硫酸盐气溶胶粒子,粒子形状假设为球形,平均半径假设为 $0.5 \mu\text{m}$.内核粒子的单次散射相函数可利用Mie

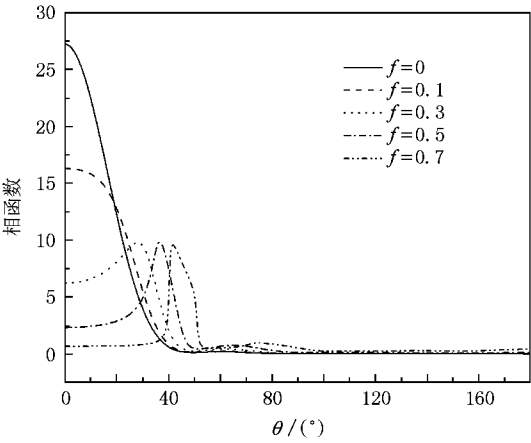


图 2 球形硫酸盐气溶胶粒子的相函数随散射角和填充系数的变化曲线

理论和静态结构因子计算,入射光波长假设为 $0.55 \mu\text{m}$,硫酸盐粒子相对于外部粒子的折射率为 $n = 1.15 + 0.0i$. 图 2 给出了密集随机分布内核的相函数随填充系数的变化,作为比较我们给出了稀疏分布的情况.从图中可以看出,随着填充系数的增大,即密集程度的增强,散射相函数的变化很大,尤其在 $\theta < 50^\circ$ 范围内,这与文献结果相符合^[11].

3. 整个含核椭球粒子的光散射特性

我们结合利用蒙特卡罗和射线追踪方法计算了整个含核椭球粒子的光散射特性^[7].当椭球粒子远大于入射波长时,根据几何光学的射线追踪理论,可以考虑将光线看作一束由一系列的分离平行光线组成,当光线入射到椭球粒子上时,光学将分为三部分:衍射光线、反射光线和折射光线.其中衍射光线会绕过冰晶,而照在冰晶上的光线会经历局域的反射和折射,反射角可由反射定律确定,折射角由菲涅耳定律确定;反射强度和折射强度由 Fresnel 公式确定.

折射进粒子内部的光线将经历多次散射,如图 1.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其散射过程^[14, 15].

1) 光子入射的初始方向和位置由折射定律确定.

2) 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,它由郎伯-比尔定律确定,转化为概率模型为

$$\tau = \sigma_{\text{sca}} L_1 = -\ln \xi_1, \quad (13)$$

其中 τ 为光学厚度, L_1 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

$$\sigma_{\text{sca}} = N \int_{r_1}^{r_2} \sigma_{\text{sca}}(r) n(r) dr, \quad (14)$$

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,本文取均匀分布, N 为粒子的数密度.

3) 光子与内核粒子碰撞后的散射方向抽样.

我们对图 2 中计算得到的 Mie 相函数进行了散射径向角抽样^[16],首先将 Mie 相函数进行归一化,即

$$\sum_{i=1}^n P_i = 1. \quad (15)$$

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 :

$$\sum_{i=1}^{n-1} P_i < \xi_2 \leq \sum_{i=1}^n P_i, \quad (16)$$

其中 n 表示第 n 个 θ_i .这样便可由随机数来模拟出散射角 θ .

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

$$\psi = 2\pi\xi_3. \quad (17)$$

以上多次散射过程将一直重复下去,直到光子入射到外层的椭球粒子的表面.一部分能量将被反射回内部,而另一部分将被折射出椭球粒子,折射到椭球外的能量将被记录下来,反射回内部的能量将继续经历多次散射,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.

由于椭球粒子为非球形粒子,因此其散射特性由粒子相对于入射光束的方位来决定,我们在计算中将粒子的空间取向进行了平均,即散射相函数为^[17]

$$P(\theta) = \frac{1}{2\pi\sigma_s} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} P'(\alpha', \gamma') \sigma'_s(\alpha', \gamma') \times \sin\alpha' d\alpha' d\gamma', \quad (18)$$

其中 α' 和 γ' 是椭球粒子相对于入射光束的径向角和方位角; P' 为任一取向椭球粒子的散射相函数, σ_s 为散射截面,定义为

$$\sigma_s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \sigma'_s(\alpha', \gamma') \sin\alpha' d\alpha' d\gamma', \quad (19)$$

σ'_s 为任一取向椭球粒子的散射截面.

为了研究内核粒子对粒子散射的影响,我们计算了旋转椭球散射相函数,如图 3,其中旋转椭球的半长轴 $a = b = 200 \mu\text{m}$,半短轴 $c = 100 \mu\text{m}$.外层的椭球粒子对入射波长 ($0.55 \mu\text{m}$) 的折射率假设为 $1.33 + 0i$,即水的折射率^[18].

从图 3 中可以看出,当不含内核时,空间取向平均后的椭球粒子,其光散射特性除了衍射峰之外,在 80° 和 150° 上散射光强有两个峰值,而在 $60^\circ-70^\circ$ 以及 $120^\circ-140^\circ$ 上有两个低谷.但随着 f 的增大,散射相函数振荡特性减弱,当填充系数达到 0.1 时,除了衍射峰外,粒子的散射接近于各向同性散射.这主要是因为随着粒子浓度的增大,光子在椭球粒子内部传输时要经历很多次散射,因此光子在出射时,其散射方向将更为均匀.

光散射的不对称因子定义为^[17]

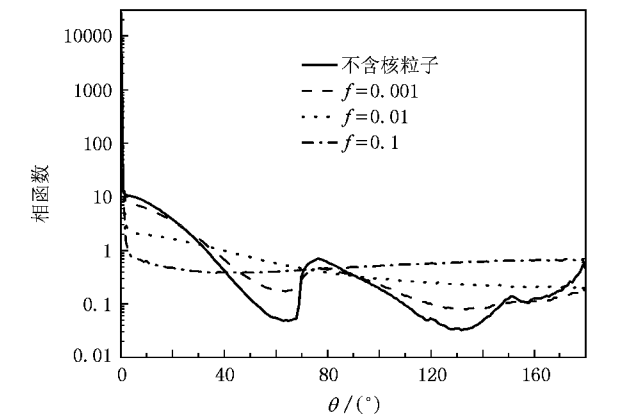


图3 含有内核的椭球粒子的总散射函数(填充系数分别为 $f=0.001, 0.01, 0.1$. 作为比较不含核粒子的散射函数也示于图中).

$$g = \int_{-1}^1 P(\theta) \cos\theta d(\cos\theta), \tag{20}$$

其中 θ 为散射角,它反映了光散射的各向同性程度,当 $g=0$ 时为各向同性, g 越大各向同性程度越低.表1给出了含核椭球粒子的不对称因子随填充系数的变化,其中 g_{total} 为计及衍射时的不对称因子, g_{nodiff} 为不计及衍射时的不对称因子.从表中可以看出,随着填充系数的增大,不对称因子 g_{total} 和 g_{nodiff} 都减小,且当 $f=0.1$ 时, $g_{nodiff} \rightarrow 0$,即当不计及衍射

光时,含核椭球粒子的散射接近于各向同性散射.

表1 不对称因子随填充系数的变化

填充系数	g_{total}	g_{nodiff}
0	0.815	0.63
0.001	0.797	0.594
0.01	0.683	0.366
0.1	0.456	0.008

4. 结 论

我们采用了一种射线追踪和蒙特卡罗相结合的方法,计算了一个椭球形含核粒子的单次散射相函数和不对称因子,其中内核粒子可以为稀疏分布也可以为密集分布.椭球粒子的外部散射由射线追踪方法计算,内部的散射过程通过蒙特卡罗方法仿真得到.从我们的计算结果可以看出,内核粒子对整个粒子的散射影响很大,随着内核数密度的增大,整个椭球粒子的散射更趋各向同性,这主要是因为光子在粒子内部经历的散射次数越多,其出射方向越均匀.因此如果自然界中的粒子,如雨滴中含有多个微小的凝结核时,将可能对整个雨区的散射产生重大的影响,其影响的大小有待进一步深入研究.

[1] Fikioris J G, Uzunoglu N K 1979 *J. Opt. Soc. Am.* **69** 1359

[2] Borghese F, Denti P, Saija R 1992 *J. Opt. Soc. Am. A* **9** 1327

[3] Fuller KA 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 3251

[4] Videen G, Ngo D, ChFylek P E 1994 *Opt. Lett.* **19** 1675

[5] Wu Z S, Guo L X, Ren K F, Gouesbet G, Grehan G 1997 *Appl. Opt.* **36** 5188

[6] Han Y, Zhang H, Sun X 2006 *Appl. Phys. B* **84** 489

[7] Macke A, Mishchenko M I, Cairns B 1996 *J. Geophys. Res.* **101** 23311

[8] Mishchenko M I, Macke A 1997 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **57** 767

[9] Han Y P, Wu Z S 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 57 (in Chinese) [韩一平、吴振森 2000 *物理学报* **49** 57]

[10] Bohren C F, Huffman D R 1983 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Wiley Press, New York,) p223

[11] Mishchenko M I 1994 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **52** 95

[12] Twersky V 1962 *J. Opt. Soc. Am.* **52** 145

[13] Balescu R 1975 *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (New York :Wiley Press) p200

[14] 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]

[15] Shi N, Gu J Q, Yi Y M *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 844

[16] Dominique T 1996 *Appl. Opt.* **35** 3270

[17] Liou K N 2002 *An Introduction to Atmospheric Radiation* (Elsevier Science Press, USA) p233

[18] Warren S G 1984 *Appl. Opt.* **23** 1206

Light scattering by a spheroid particle with many densely packed inclusions^{*}

Sun Xian-Ming[†] Shen Jin Wei Pei-Yu

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

(Received 3 January 2009 ; revised manuscript received 19 January 2009)

Abstract

Light scattering by a particle containing inclusions is calculated by a combination of ray-tracing and Monte Carlo techniques. The distribution of the inclusions can be sparse or dense. While the individual reflection and refraction events at the outer boundary of a sphere particle are considered by a ray-tracing program, the Monte Carlo routine simulates the internal scattering processes. A dense – medium light – scattering theory based on the introduction of the static structure factor is used to calculate the single scattering characteristics for densely packed inclusions. Numerical results of the single scattering characteristics for a spheroid containing inclusions are discussed.

Keywords : ray-tracing technique, Monte Carlo method, light scattering, spheroid particle

PACC : 4225B, 9265D, 4110H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60877050).

[†] E-mail : xmsun@mail.xidian.edu.cn