

基于时域多分辨算法的非球形气溶胶散射特性仿真模拟

胡帅 高太长 李浩 杨波 江志东 陈鸣 李书磊

Simulating scattering properties of nonspherical aerosol particles using multiresolution timedomain method

Hu Shuai Gao Tai-Chang Li Hao Yang Bo Jiang Zhi-Dong Chen Ming Li Shu-Lei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 044207 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.044207

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.044207>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I4>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种利用布里渊增益谱边带解调提高布里渊光时域反射系统测温精度的方法

Temperature measurement accuracy enhancement in the Brillouin optical time domain reflectometry system using the sideband of Brillouin gain spectrum demodulation

物理学报.2016, 65(24): 244203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.244203>

非球形椭球粒子参数变化对光偏振特性的影响

Research of the influence of non-spherical ellipsoid particle parameter variation on polarization characteristic of light

物理学报.2016, 65(6): 064205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.064205>

双Pearcey光束的构建及数学机理研究

Construction of Bi-Pearcey beams and their mathematical mechanism

物理学报.2016, 65(21): 214208 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.214208>

沙尘大气电磁波多重散射及衰减

Multiple scattering and attenuation for electromagnetic wave propagation in sand and dust atmosphere

物理学报.2016, 65(9): 094205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.094205>

Pearcey光束簇的实验产生和光学结构研究

Generation of a family of Pearcey beams and their optical structure

物理学报.2015, 64(23): 234205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.234205>

基于时域多分辨算法的非球形气溶胶 散射特性仿真模拟*

胡帅¹⁾ 高太长^{1)2)†} 李浩¹⁾ 杨波²⁾ 江志东³⁾ 陈鸣¹⁾ 李书磊¹⁾

1) (解放军理工大学气象海洋学院, 南京 211101)

2) (解放军理工大学, 电磁环境效应与电光工程国家级重点实验室, 南京 210007)

3) (海军航空工程学院, 青岛 266041)

(2016年9月19日收到; 2016年11月30日收到修改稿)

非球形气溶胶的散射特性是影响辐射传输模拟准确性的重要因素. 为实现非球形、非均质气溶胶散射特性的模拟, 基于MRTD (multi-resolution time-domain) 方法建立了一个新的气溶胶散射模型. 采用MRTD技术实现了近场电磁场的计算; 考虑气溶胶的特殊性, 推导了基于体积积分方法的近远场外推方法, 实现了粒子散射振幅矩阵和穆勒矩阵的仿真; 构建了粒子吸收和消光截面的计算模型, 实现了粒子积分散射特性的高精度模拟. 将MRTD散射模型的结果与Mie理论、T矩阵法进行了对比, 验证了模型的准确性; 讨论了空间网格粗细对模拟精度的影响, 并定量分析了模型的运行效率. 结果表明, MRTD散射模型的相函数模拟误差小于8%, 其中前向散射方向小于4%; 当粒径与入射光波长相当时, 消光和散射效率因子的相对误差小于0.1%; 空间网格粗细对模拟精度影响显著, 当粒子尺度参数小于20时, 在相同模拟精度要求下, 所需网格尺寸随尺度参数呈先增大后减小的特征.

关键词: 非球形气溶胶, 散射特性, 时域多分辨算法, 穆勒矩阵

PACS: 42.68.Mj, 42.68.Ay, 95.30.Jx, 42.25.Bs

DOI: 10.7498/aps.66.044207

1 引言

非球形气溶胶散射特性的不确定性一直是制约辐射传输和气候模拟精度的重要因素^[1,2]. 对比多年的IPCC报告可发现^[3], 气溶胶直接辐射强迫的评估精度虽然有所提高, 但仍存在较大的不确定性 ($-0.9 \sim -0.1 \text{ W/m}^2$), 其中气溶胶和卷云中冰晶等非球形粒子的散射特性就是制约其评估精确性的一个重要原因^[4,5]. 气溶胶光学遥感及大气校正等均需要以辐射传输模式为基础^[6,7], 而无论是标量还是矢量辐射传输模式, 均需要气溶胶散射特性作为输入; 目前考虑多次散射的辐射传输求解模型如DISORT (discrete-ordinate-method),

RT3/PolRadtran及SHDOM (spherical harmonics discrete ordinate method) 等已得到广泛检验^[8,9], 但作为模式输入参数的气溶胶散射特性, 如穆勒矩阵和散射相函数等^[10], 仍主要通过Mie散射计算得到, 并未充分考虑气溶胶及冰晶的非球形效应, 而实际非球形粒子与等效球形粒子的散射特性存在较大差异^[11,12], 这将影响遥感正演模型的准确性, 进而影响反演精度, 因此准确获取非球形气溶胶的散射特性, 提高正演模型模拟精度已成为发展大气遥感技术的关键环节之一^[13,14].

为模拟非球形气溶胶的散射特性, 目前已经建立了许多气溶胶散射模型, 大致可分为两大类: 一类是近似计算模型, 主要针对粒子尺度参数较为极端的情形 (当入射光波长远大于粒径或远小

* 国家自然科学基金 (批准号: 41575025, 41575024) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gaotc@gmail.com

于粒径的情形), 主要的模型包括 Rayleigh 近似、Rayleigh-Gans-Stevenson 近似 (RGA)、异常衍射近似和几何光学近似 GOA (geometric optics approximation) 等^[15], 其中 GOA 方法广泛用于大尺度冰晶粒子的散射特性计算^[14,16]; 第二类是精确求解模型, 这类模型通过在一定边界条件下数值求解 Maxwell 方程组或亥姆霍兹方程, 获取模拟粒子电磁散射特性^[15]. 按照计算原理, 精确求解模型可大致分为三类: 基于基函数展开的散射模型、基于体积积分方程的散射模型及基于微元法的散射模型. 基于基函数展开的散射模型的特点是基于矢量波函数对电磁入射场、内场及散射场进行展开, 然后求解微分方程或积分方程建立入射场与散射场展开系数间的关系, 进而实现对散射过程的求解. 这一类模型主要包括 T 矩阵法 (T matrix method)^[17], EBCM (extended boundary condition method)^[18], SVM (separation of variables method)^[19] 和 PMM (point matching method)^[20] 等. 这类方法具有计算精度高、速度快、内存消耗小的优点, 但当粒子尺度参数较大、形状较为极端或复折射率较大时, 易出现数值求解的不稳定; 散射场及内部场采用基函数展开时, 展开系数存在截断误差; 此外, 受求解边界条件的限制, 这类模型只能模拟一些形状简单的粒子, 如椭球粒子、圆柱粒子等. 体积积分方程法是通过数值求解亥姆霍兹方程的格林函数形式解来模拟散射场, 典型代表是矩量法 MoM (method of moments)^[21], DDA (discrete dipole approximation)^[22,23] 和 FIEM (fredholm integral equation method) 积分方程法. DDA 是 MoM 的改进, 其本质差异在于自身感应电场的计算, 可适用于任意形状、非均质的气溶胶粒子, 但是模拟过程涉及大型矩阵方程的求解, 存在不稳定性; 同时, 计算精度取决于偶极子的数目, 计算精度与内存消耗、收敛速度存在突出矛盾. 因此, 该方法主要适合尺度参数较小的粒子的散射特性模拟, 且计算精度不高. FIEM 积分方程法的优点是积分过程仅和粒子尺度参数和形状有关, 而与入射光的入射角和偏振状态无关, 但只适用于尺度和复折射率较小的规则粒子, 且模型计算量很大^[15]. 基于微元法思想的散射模型主要包括时域有限差分法 (finite difference time domain, FDTD)^[15,16] 和有限元法 (finite element method, FEM)^[24]. 其中 FDTD 已广泛应用于气溶胶散射特性模拟^[16], 由于该方法

避免了积分方程法的奇异核问题, 因此更适用于复杂形状、非均质气溶胶的光散射特性模拟. 但与 DDA 相似, 该方法存在计算精度与计算量的矛盾. 为解决上述问题, Liu 等^[25] 将时域伪谱法 (pseudo spectral time domain, PSTD) 引入气溶胶散射过程模拟中, 由于该方法取相对较少的采样点便可获得较高模拟精度, 因此可显著降低内存消耗与运行时间. 目前, Liu 等^[26] 已采用该方法实现了尺度参数达 200 的粒子散射特性模拟, 但受原理限制, 该方法只能采用纯散射场技术引入入射波, 因此在计算不同形状粒子的散射特性时, 相应程序也要进行修改, 过程繁琐. MRTD 是矩量法和 FDTD 的结合体^[27,28], 是 Maxwell 方程的高阶差分展开, 具有良好数值色散特性, 也广泛用于大目标的散射特性的模拟^[29]. 基于此, 本文将引入非球形气溶胶的散射特性的模拟中, 结合研究对象和学科需求的特殊性, 建立了一套新的非球形气溶胶散射模型.

本文思路如下: 首先介绍了一些物理概念和 MRTD 散射模型的基本框架, 然后简单介绍了基于 MRTD 近场计算方案, 包括基本离散迭代格式、吸收边界设计及总场散射场技术; 针对气溶胶的特殊性, 推导了基于体积积分的近远场外推方案和粒子散射特性计算方法; 最后对模型的准确性和性能进行了分析和验证.

2 基本概念

2.1 Maxwell 旋度方程组及电磁参数转换

电磁场传播规律可用 Maxwell 旋度方程组描述. 无源条件下, 该方程的矢量表达形式如下:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma \mathbf{E}, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \sigma_m \mathbf{H}, \quad (2)$$

上式中, $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{H}$ 分别表示电场和磁场的强度矢量; ε 表示介质的介电常数; μ 表示磁导系数; σ 和 σ_m 分别表示介质的电导率和磁导率.

在大气科学领域, 粒子的光学属性通常采用复折射率 m 表示, 其实部和虚部分别表征了粒子散射效应和吸收效应的强弱. 粒子复折射率 m 与复介电常数 ε_c 存在以下转换关系:

$$\varepsilon_c = \varepsilon_0 m^2 = \varepsilon - \frac{j\sigma}{\omega}, \quad (3)$$

若假设复折射率 $m = m_r - jm_i$, 则有关系式 $\varepsilon = \varepsilon_0(m_r^2 - m_i^2)$, $\sigma = 2\omega m_r m_i \varepsilon_0$ 成立. 采用以上关系便可将粒子的复折射率转化为电磁散射模拟所需的电磁参数.

2.2 穆勒矩阵和Stokes矢量

穆勒矩阵 $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}}_{\text{sca}}, \hat{\mathbf{r}}_{\text{inc}})$ 是辐射传输模式的重要参数, 它不仅表征了散射能量的空间分布, 同时也定量描述了入射光Stokes矢量 $\mathbf{S}_{\text{inc}}$ 和散射光Stokes矢量 $\mathbf{S}_{\text{sc}}$ 转换关系. 穆勒矩阵 $\mathbf{F}$ 的定义如(4)式所示^[30], 其中 F_{11} 也称为散射相函数.

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\text{sc}}(\hat{\mathbf{r}}_{\text{sca}}) &= \frac{1}{k^2 r^2} \mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}}_{\text{sca}}, \hat{\mathbf{r}}_{\text{inc}}) \mathbf{S}_{\text{inc}} \\ &= \frac{1}{k^2 r^2} \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} & F_{14} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} & F_{24} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} & F_{34} \\ F_{41} & F_{42} & F_{43} & F_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{\text{inc}} \\ Q_{\text{inc}} \\ U_{\text{inc}} \\ V_{\text{inc}} \end{bmatrix}, \quad (4) \end{aligned}$$

式中 $\hat{\mathbf{r}}_{\text{sca}}, \hat{\mathbf{r}}_{\text{inc}}$ 分别表示散射光观测方向以及入射光方向, k 表示入射光波数, r 为观测点距离散射体中心的长度; 偏振光Stokes矢量定义为

$\mathbf{S} = (I, Q, U, V)^T$, 其中 I 表示光强, Q 为水平与垂直偏振分量之差, U 为 45° 方向与 135° 方向偏振分量之差, V 表示左旋与右旋偏振分量之差.

3 MTRD非球形气溶胶散射模型

3.1 模型的基本框架

MTRD非球形气溶胶散射模型包括三个模块: 电磁场近场计算模块、近远场外推模块及气溶胶散射特性计算模块. 电磁场近场计算模块主要实现包含散射体空间的电磁场模拟, 其中关键技术包括Maxwell方程离散迭代格式、吸收边界的设计以及基于总场散射场技术的入射波引入; 近远场外推模块的功能是将近场电磁场变换至频域, 并实现近远场场变换; 气溶胶散射特性计算模块主要实现粒子吸收、消光和散射截面及穆勒矩阵等参数的模拟. 由于气溶胶一般为电介质, 本文基于介质中的Maxwell方程组推导了基于体积积分远场变换方法; 在粒子散射特性计算方面, 本文从大气辐射学需求出发, 推导了粒子的吸收截面和消光截面计算模型.

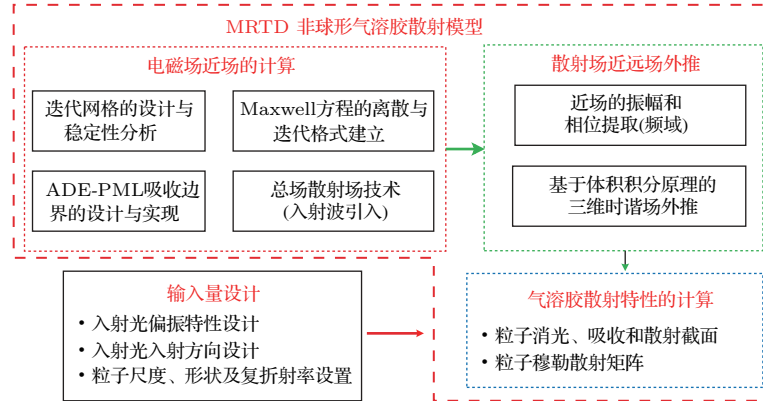


图1 MTRD非球形气溶胶散射模型基本框架

Fig. 1. The basic frame of MTRD scattering model for nonspherical aerosol particles.

MTRD散射模型的计算域是在直角坐标系下进行离散的, 电磁场空间离散格式采用Yee元胞. 由于散射体形状不规则, 在不同介质的交界处, 单个Yee元胞内可能存在多种介质混合的现象, 若直接对其进行截断, 则可造成较大的“阶梯误差”^[4], 因此需要对元胞内电磁参数进行等效平均. 本模型采用Maxwell-Garnett公式进行计算^[4], 具体计算方法如(5)式所示.

$$\begin{aligned} &\frac{\bar{\varepsilon}_r(i, j, k) - 1}{\bar{\varepsilon}_r(i, j, k) + 2} \\ &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \iiint_{\text{cell}(i, j, k)} \frac{\varepsilon_r(x, y, z) - 1}{\varepsilon_r(x, y, z) + 2} dx dy dz, \quad (5) \end{aligned}$$

式中, $\varepsilon_r(x, y, z)$ 表示位置 (x, y, z) 处的相对介电常数, 表示复介电常数 ε_c 与 ε_0 之比, $\bar{\varepsilon}_r$ 是元胞的平均相对介电常数值.

3.2 基本迭代格式的建立和稳定性条件

在直角坐标系下, 分别采用 Daubechies 尺度函数 $\phi_i(x)$ 与矩形脉冲函数 $h_n(t)$ 在时间和空间上对电磁场分量进行展开^[31]:

$$E_x(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{+\infty} E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n} \phi_{i+1/2}(x) \phi_j(y) \times \phi_k(z) h_n(t), \quad (6)$$

$$E_y(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{+\infty} E_{i,j+1/2,k}^{\phi y,n} \phi_i(x) \phi_{j+1/2}(y) \times \phi_k(z) h_n(t), \quad (7)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{+\infty} E_{i,j,k+1/2}^{\phi z,n} \phi_i(x) \phi_j(y) \phi_{k+1/2}(z) h_n(t), \quad (8)$$

$$H_x(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{+\infty} H_{i,j+1/2,k+1/2}^{\phi x,n+1/2} \phi_i(x) \phi_{j+1/2}(y) \times \phi_{k+1/2}(z) h_{n+1/2}(t), \quad (9)$$

$$H_y(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{+\infty} H_{i,j+1/2,k+1/2}^{\phi y,n+1/2} \phi_{i+1/2}(x) \times \phi_j(y) \phi_{k+1/2}(z) h_{n+1/2}(t), \quad (10)$$

$$H_z(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{+\infty} H_{i+1/2,j+1/2,k}^{\phi z,n+1/2} \phi_{i+1/2}(x) \times \phi_{j+1/2}(y) \phi_k(z) h_{n+1/2}(t), \quad (11)$$

式中 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 为场分量的位置向量; $E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n}$, $E_{i,j+1/2,k}^{\phi y,n}$, $E_{i,j,k+1/2}^{\phi z,n}$ 为电场分量的展开系数; $H_{i,j+1/2,k+1/2}^{\phi x,n+1/2}$, $H_{i,j+1/2,k+1/2}^{\phi y,n+1/2}$ 和 $H_{i+1/2,j+1/2,k}^{\phi z,n+1/2}$ 表示磁场分量的展开系数; i, j, k 分别表示场分量的空间坐标; n 表示时间迭代步数. $h_n(t)$ 满足正交性, 其定义如下:

$$h_n(t) = h(t/\Delta t - n), \quad (12)$$

$$h(t) = \begin{cases} 1 & |t| < 1/2, \\ 1/2 & |t| = 1/2, \\ 0 & |t| > 1/2. \end{cases} \quad (13)$$

Daubechies 尺度函数 $\phi_i(x)$ 定义如下:

$$\phi_i(x) = \phi(x/\Delta x - i + \mathbf{M}_1), \quad (14)$$

式中 $\mathbf{M}_1$ 为 Daubechies 函数 $\phi(x)$ 的一阶矩. 尺度函数 $\phi_i(x)$ 不仅满足正交性, 同时还近似满足位移内插特性, 即 $\phi_i(x) \approx \delta_{i,0}$, $\delta_{i,i'}$ 为狄拉克函数.

简单而不失一般性, 以电场分量 E_x 为例, 对 Maxwell 离散迭代格式进行简单说明. 将 (6) 式入 Maxwell 旋度方程, 可得

$$\begin{aligned} & \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{+\infty} \varepsilon E_{i'+1/2,j',k'}^{\phi x,n'} \phi_{i'+1/2}(x) \phi_{j'}(y) \phi_{k'}(z) \frac{\partial h_{n'}(t)}{\partial t} \\ & + \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{+\infty} \sigma E_{i'+1/2,j',k'}^{\phi x,n'} \phi_{i'+1/2}(x) \phi_{j'}(y) \phi_{k'}(z) h_{n'}(t) \\ & = \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{+\infty} H_{i'+1/2,j'+1/2,k'}^{\phi z,n'+1/2} \phi_{i'+1/2}(x) \frac{\partial \phi_{j'+1/2}(y)}{\partial y} \phi_{k'}(z) h_{n'+1/2}(t) \\ & - \sum_{i',j',k',n'=-\infty}^{+\infty} H_{i'+1/2,j',k'+1/2}^{\phi y,n'+1/2} \phi_{i'+1/2}(x) \phi_{j'}(y) \frac{\partial \phi_{k'+1/2}(z)}{\partial z} h_{n'+1/2}(t). \end{aligned} \quad (15)$$

采用 Galerkin 法则, 在方程两侧同时乘以 $\phi_{i+1/2}(x) \phi_j(y) \phi_k(z) h_{n+1/2}(t)$, 并求取对应项的内积, 结合函数 $h_n(t)$ 和 $\phi_i(x)$ 的正交性, (15) 式可简化为

$$\begin{aligned} & \varepsilon \Delta x \Delta y \Delta z \sum_{i',j',k'=-\infty}^{+\infty} (E_{i'+1/2,j',k'}^{\phi x,n+1} - E_{i'+1/2,j',k'}^{\phi x,n}) \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \delta_{k,k'} \\ & + \frac{\sigma \Delta x \Delta y \Delta z}{2} \sum_{i',j',k'=-\infty}^{+\infty} (E_{i'+1/2,j',k'}^{\phi x,n+1} + E_{i'+1/2,j',k'}^{\phi x,n}) \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \delta_{k,k'} \\ & = \Delta t \Delta x \Delta z \sum_{i',j',k'=-\infty}^{+\infty} H_{i'+1/2,j'+1/2,k'}^{\phi z,n'+1/2} \delta_{i,i'} \delta_{k,k'} \sum_{l=-Ls}^{Ls-1} a(l) \delta_{j+l,j'} \end{aligned}$$

$$-\Delta t \Delta x \Delta y \sum_{i',j',k'=-\infty}^{+\infty} H_{i'+1/2,j'+1/2,k'+1/2}^{\phi y,n'+1/2} \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \sum_{l=-Ls}^{Ls-1} a(l) \delta_{k+l,k'}, \quad (16)$$

式中, $a(l)$ 称为连接系数, l 的变化范围为 $-Ls-1$ 到 $Ls-1$, $Ls = 2N - 1$ 称为基函数的有效支撑尺寸, N 为小波函数消失矩, 文中取 $N = 2$. $a(l)$ 可由尺度函数在傅里叶频域的内积计算得到:

$$a(l) \equiv \left\langle \frac{d\phi_{j+1/2}(x)}{dx}, \phi_{j-l}(x) \right\rangle = \int_0^\infty \omega |\hat{\phi}(\omega)|^2 \sin(\omega(l+1/2)) d\omega, \quad (17)$$

式中 $|\hat{\phi}(\omega)|$ 为尺度函数 ϕ 的傅里叶变换. 整理并化简 (16) 式可得电场分量的迭代步进方程:

$$\begin{aligned} E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} &= CA(m) E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n} + CB(m) \\ &\times \sum_{l=-Ls}^{Ls-1} a(l) \left(H_{i+0.5,j+l+0.5,k}^{\phi z,n+1/2} / \Delta y \right. \\ &\left. - H_{i+0.5,j,k+l+0.5}^{\phi y,n+1/2} / \Delta z \right), \end{aligned} \quad (18)$$

式中, $m = (i+1/2, j, k)$ 为场分量的网格离散坐标, CA 和 CB 的计算方法如下:

$$\begin{aligned} CA(m) &= \frac{2\varepsilon - \sigma \Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t}, \\ CB(m) &= \frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t}. \end{aligned} \quad (19)$$

由于函数 $\phi_i(x)$ 的位移内插特性, 空间 $\mathbf{r}_0$ 的电磁场值就等于该处的场展开系数, 也即有 $E_x(\mathbf{r}_0, t_0) = E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n}$ 成立, 因此可避免对场分量的重构, 这是采用 Daubechies 尺度函数作为基函数展开的优势所在.

同理, 电场分量 E_y , E_z 和磁场分量的 MRTD 迭代步进方程也有类似形式. 由于 MRTD 是 Maxwell 方程的一种显式差分格式, 因此为保证迭代过程的收敛性, 时间差分间隔 Δt 与网格差分步长必须满足 Courant 稳定性条件, 其中对于基于 Daubechies 尺度函数的 MRTD 算法, 时间迭代步长 Δt 必须满足以下关系式 [31]:

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sum_{l=0}^{Ls-1} |a(l)| \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}, \quad (20)$$

式中, c 为光速; Δx , Δy 和 Δz 分别为 x , y 和 z 方向的离散步长.

3.3 ADE-PML 吸收边界

采用基于辅助微分方程的 PML 边界 (perfectly matched layer with auxiliary differential equation, ADE-PML) 作为吸收边界. 本文在刘亚文等 [32] 提出的二维 ADE-PML 边界基础上, 将其推广至三维情形. 下面仍以 E_x 分量为例, 介绍吸收边界的处理过程. 在频域情形下, 坐标伸缩的 Maxwell 旋度方程组如下:

$$\mathbf{j}\omega\varepsilon\mathbf{E} + \sigma\mathbf{E} = \nabla_s \times \mathbf{H}, \quad (21)$$

$$-\mathbf{j}\omega\mu\mathbf{H} - \sigma_m\mathbf{H} = \nabla_s \times \mathbf{E}, \quad (22)$$

其中 $\nabla_s = \frac{1}{s_x} \frac{\partial}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} + \frac{1}{s_z} \frac{\partial}{\partial z} \hat{\mathbf{z}}$, s_i ($i = x, y$ 或 z) 为坐标伸缩因子, 具体形式如下:

$$s_i = \kappa_i + \frac{\sigma_i}{\alpha_i + \mathbf{j}\omega\varepsilon_0}, \quad (23)$$

求取 s_i 的倒数可得 $\frac{1}{s_i} = \frac{1}{\kappa_i} + \frac{\sigma'_i}{\alpha'_i + \mathbf{j}\omega\varepsilon'_i}$, 其中 $\sigma'_i = -\sigma_i$, $\varepsilon'_i = \varepsilon_0 \kappa_i^2$, $\alpha'_i = \kappa_i^2 \alpha_i + \kappa_i \sigma_i$, κ_i 和 α_i 为非负实数, 且 $\kappa_i \geq 1$ [32]. 将其代入 (21) 式 E_x 分量的计算公式中, 并引进辅助变量 ψ_{exy} 和 ψ_{exz} 可得:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\kappa_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\kappa_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \psi_{exy} - \psi_{exz} \\ &= \mathbf{j}\omega\varepsilon E_x + \sigma E_x, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \psi_{exy} &= \frac{\sigma'_y}{\alpha'_y + \mathbf{j}\omega\varepsilon'_y} \frac{\partial}{\partial y} H_z, \\ \psi_{exz} &= \frac{\sigma'_z}{\alpha'_z + \mathbf{j}\omega\varepsilon'_z} \frac{\partial}{\partial z} H_y. \end{aligned} \quad (25)$$

进一步将上式改写为时域形式:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\kappa_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\kappa_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \psi_{exy} - \psi_{exz} \\ &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} E_x + \sigma E_x, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon'_y \frac{\partial}{\partial t} \psi_{exy} + \alpha'_y \psi_{exy} &= \sigma'_y \frac{\partial}{\partial y} H_z, \\ \varepsilon'_z \frac{\partial}{\partial t} \psi_{exz} + \alpha'_z \psi_{exz} &= \sigma'_z \frac{\partial}{\partial z} H_y. \end{aligned} \quad (27)$$

参照 3.2 节的处理方法, 采用 Galerkin 法对三个偏微分方程进行离散, 可得场分量 $E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1}$ 的迭代步进方程:

$$E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} = CA_{i+1/2,j,k}E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n} + CB_{i+1/2,j,k}\left[\frac{1}{\kappa_y\Delta y}\sum_{l=-L_s}^{L_s-1}a(l)H_{i+1/2,j+l+1/2,k}^{\phi z,n+1/2} - \frac{1}{\kappa_z\Delta z}H_{i+1/2,j,k+l+1/2}^{\phi y,n+1/2}\right] + CB_{i+1/2,j,k}\left(\psi_{exy,i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} - \psi_{exz,i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1}\right), \quad (28)$$

$$\psi_{exy,i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} = b_y\psi_{exy,i+1/2,j,k}^{\phi x,n} + \frac{a_y}{\Delta y}\sum_{l=-L_s}^{L_s-1}a(l)H_{i+1/2,j+l+1/2,k}^{\phi z,n+1/2}, \quad (29)$$

$$\psi_{exz,i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} = b_z\psi_{exz,i+1/2,j,k}^{\phi x,n} + \frac{a_z}{\Delta z}\sum_{l=-L_s}^{L_s-1}a(l)H_{i+1/2,j,k+l+1/2}^{\phi y,n+1/2}. \quad (30)$$

以上各式中, a_i 和 b_i ($i = x, y, z$) 满足以下公式:

$$b_i = \frac{2\varepsilon'_i - \alpha'_i\Delta t}{2\varepsilon'_i + \alpha'_i\Delta t}, \quad a_i = \frac{2\sigma'_i\Delta t}{2\varepsilon'_i + \alpha'_i\Delta t}. \quad (31)$$

ADE-PML吸收边界通常采用PEC边界进行截断. 在边界处, 由于MRTD迭代过程涉及边界外的场分量, 因此为保证边界附近场分量的正常迭代, 需要采用镜像原理对边界外的场分量进行拓展.

3.4 MRTD的总场-散射场技术

与FDTD模型类似, 采用总场散射场技术引入平面入射波. 在该方案中, 计算域被分为总场区和散射场区, 总场区电磁分量为散射场 $\mathbf{E}_{\text{sca}}$ 和 $\mathbf{H}_{\text{sca}}$ 与入射场 $\mathbf{E}_{\text{inc}}$ 和 $\mathbf{H}_{\text{inc}}$ 之和(如(32)式), 散射场区仅包含散射场 $\mathbf{E}_{\text{sca}}$ 和 $\mathbf{H}_{\text{sca}}$ [33].

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}_{\text{sca}}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_{\text{inc}} + \mathbf{H}_{\text{sca}}. \quad (32)$$

由MRTD的步进迭代方程可知, 在计算连接边界附近节点的场分量时, 需要同时使用散射场和总场区的切向分量, 因此需要通过引入入射波对相应计算节点进行订正, 考虑各场分量迭代公式的相似性, 下面仅以电场分量 E_x 为例进行简单说明.

图2所示为 E_x 分量的总场和散射场节点订正区域, 其中图2(a)为散射场需要进行订正的节点区域, 共4个; 图2(b)为总场区需要订正的节点区域, 共8个. 考虑各区域订正方法的基本一致, 仅以个散射场区域1和总场区域5作为例子进行解释.

区域1的范围为: $i \in [I_{\min}, I_{\max} - 1]$, $j \in [J_{\min}, J_{\max}]$, $k \in [K_{\max} + 1, K_{\max} + L_s - 1]$. 由于该区域为散射场区, 在迭代计算过程中, 所涉及的总场节点需要扣除入射场的值, 因此, 该区域内各元胞 E_x 的计算方法如下:

$${}_sE_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} = {}_sE_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} + \frac{\Delta t}{\varepsilon\Delta y}\sum_{l=-L_s}^{L_s-1}a(l){}_sH_{i+1/2,j+l+1/2,k}^{\phi z,n+1/2} - \frac{\Delta t}{\varepsilon\Delta z}\left[\sum_{l=K_{\max}-k}^{L_s-1}a(l){}_sH_{i+1/2,j,k+l+1/2}^{\phi y,n+1/2}\right]$$

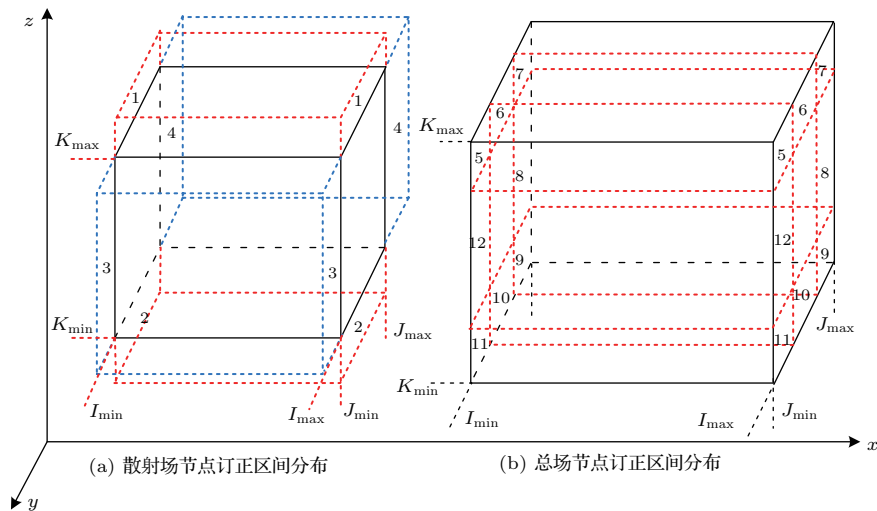


图2 E_x 分量的总场和散射场节点订正区域

Fig. 2. Correction area for the Yee cell distributed in scattering field and total field.

$$+ \sum_{l=-Ls}^{K_{\max}-k-1} a(l) \left(\text{tol} H_{i+1/2, j, k+l+1/2}^{\phi y, n+1/2} - \text{inc} H_{i+1/2, j, k+l+1/2}^{\phi y, n+1/2} \right). \quad (33)$$

区域5的范围为 $i \in [I_{\min}, I_{\max} - 1]$, $j \in [J_{\min} - Ls + 1, J_{\min} - 1]$, $k \in [K_{\max} - Ls + 1, K_{\max}]$, 由于该区域为总场区, 计算过程中所涉及的散射场节点需要增加入射场的值. 因此, 该区域内各节点的计算公式可修正为:

$$\begin{aligned} \text{tol} E_{i+1/2, j, k}^{\phi x, n+1} &= \text{tol} E_{i+1/2, j, k}^{\phi x, n+1} + \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta y} \left[\sum_{l=-J_{\min}-j}^{Ls-1} a(l) \text{tol} H_{i+1/2, j+l+1/2, k}^{\phi z, n+1/2} + \sum_{l=-J_{\min}-j}^{Ls-1} a(l) \left({}_s H_{i+1/2, j+l+1/2, k}^{\phi z, n+1/2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \text{inc} H_{i+1/2, j+l+1/2, k}^{\phi z, n+1/2} \right) \right] - \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta z} \left[\sum_{l=K_{\max}-k}^{Ls-1} a(l) \text{tol} H_{i+1/2, j, k+l+1/2}^{\phi y, n+1/2} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{l=-Ls}^{K_{\max}-k-1} a(l) \left({}_s H_{i+1/2, j, k+l+1/2}^{\phi y, n+1/2} + \text{inc} H_{i+1/2, j, k+l+1/2}^{\phi y, n+1/2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

以上各式中, 下标 s, tol 和 inc 分别表示该场分量为散射场、总场和入射场分量. 连接边界附近各节点的入射波切向分量采用一维 MRTD 投影至三维总场边界的方案计算. 该方法基本流程与 FDTD 相似, 其中一维 MRTD 和三维 MRTD 的时间步长必须相同.

3.5 基于体积积分的远场计算模型

气溶胶和冰晶一般为非导磁电介质, 因此在介质内, 存在电极化矢量 $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, 而磁极化矢量 $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = 0$. 取电磁波随时间的变化因子为 $\exp(j\omega t)$, 则在频域中, 介质中的 Maxwell 方程可改写为 [34]

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= j\omega \varepsilon_0 (\mathbf{E} + \mathbf{P}(\mathbf{r})), \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -j\omega \mu_0 \mathbf{H}, \end{aligned} \quad (35)$$

上式中 $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \chi \mathbf{E}(\mathbf{r}) = (\varepsilon(\mathbf{r})/\varepsilon_0 - 1) \mathbf{E}(\mathbf{r})$, χ 为电极化率.

对 (35) 式第一个方程两端取旋度, 并将第二个方程代入可得

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} \\ = \nabla \times (-j\omega \mu_0 \mathbf{H}) = \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 (\mathbf{E} + \mathbf{P}(\mathbf{r})), \end{aligned} \quad (36)$$

采用矢量恒等式 $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E}$ 进一步化简可得到

$$\begin{aligned} (\Delta + \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0) \mathbf{E} \\ = -(\omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 \mathbf{I} + \nabla \nabla) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (37)$$

式中 Δ 为拉普拉斯算子, 由数学知识, 该方程的格林函数形式解应满足 (38) 式和 (39) 式.

林函数形式解应满足 (38) 式和 (39) 式.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 \mathbf{I} + \nabla \nabla) \\ &\quad \times \mathbf{P}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}', \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (39)$$

其中格林函数的具体形式如下:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(-jk|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (40)$$

其中 $k = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$. 将格林函数的具体形式代入, 远场的电场矢量可写为

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \iiint_V \frac{\exp(-jk|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &\quad \times (k^2 \mathbf{I} + \nabla \nabla) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (41)$$

在远场, 取近似 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r - \mathbf{r}' \cdot \mathbf{e}_r$, 并将上式写成频域形式, 可得散射场的表达形式如下:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{sca}}(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{k^2 \exp(-jkr)}{4\pi r} \iiint_V \left[\frac{\varepsilon(\mathbf{r}')}{\varepsilon_0} - 1 \right] \\ &\quad \times \{ \mathbf{E}(\mathbf{r}') - \mathbf{e}_r \cdot [\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}')] \} \\ &\quad \times \exp(jk \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (42)$$

由于 MRTD 计算区域是离散的, $\mathbf{E}_{\text{sca}}$ 需要采用数值计算方案求解, 本文采用以下方法计算:

$$\begin{aligned} E_{\text{sca}}^x(\mathbf{r}) &= \frac{k^2 \exp(-jkr)}{4\pi r} \\ &\quad \times \sum_{i'} \sum_{j'} \sum_{k'} \left[\frac{\bar{\varepsilon}(i', j', k')}{\varepsilon_0} - 1 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \{\bar{E}_x(i', j', k') - \sin \theta_{\text{ob}} \cos \varphi_{\text{ob}} \cdot Ts\} \\ & \times \exp(jk_x \cdot i' \Delta x + jk_y \cdot j' \Delta y \\ & + jk_z \cdot k' \Delta z) \Delta x \Delta y \Delta z, \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} E_{\text{sca}}^y(\mathbf{r}) &= \frac{k^2 \exp(-jkr)}{4\pi r} \\ & \times \sum_{i'} \sum_{j'} \sum_{k'} \left[\frac{\bar{\varepsilon}(i', j', k')}{\varepsilon_0} - 1 \right] \\ & \times \{\bar{E}_y(i', j', k') - \sin \theta_{\text{ob}} \sin \varphi_{\text{ob}} \cdot Ts\} \\ & \times \exp(jk_x \cdot i' \Delta x + jk_y \cdot j' \Delta y \\ & + jk_z \cdot k' \Delta z) \Delta x \Delta y \Delta z, \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} E_{\text{sca}}^z(\mathbf{r}) &= \frac{k^2 \exp(-jkr)}{4\pi r} \\ & \times \sum_{i'} \sum_{j'} \sum_{k'} \left[\frac{\bar{\varepsilon}(i', j', k')}{\varepsilon_0} - 1 \right] \\ & \times \{\bar{E}_z(i', j', k') - \cos \theta_{\text{ob}} \cdot Ts\} \\ & \times \exp(jk_x \cdot i' \Delta x + jk_y \cdot j' \Delta y \\ & + jk_z \cdot k' \Delta z) \Delta x \Delta y \Delta z, \end{aligned} \quad (45)$$

式中 $(\theta_{\text{ob}}, \varphi_{\text{ob}})$ 为观测方位角; $\bar{\varepsilon}$ 为 Yee 元胞的平均介电常数; $\bar{E}_x$, $\bar{E}_y$ 和 $\bar{E}_z$ 为电场分量在坐标 (i', j', k') 的平均值 (采用相邻两个 Yee 元胞平均); $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_r = (k_x, k_y, k_z)$ 为波矢量. Ts 为中间变量, 如下式所示:

$$\begin{aligned} Ts &= \sin \theta_{\text{ob}} \cos \varphi_{\text{ob}} \bar{E}_x(i', j', k') \\ &+ \sin \theta_{\text{ob}} \sin \varphi_{\text{ob}} \bar{E}_y(i', j', k') \\ &+ \cos \varphi_{\text{ob}} \bar{E}_z(i', j', k'). \end{aligned} \quad (46)$$

进一步将直角坐标系下的场分量变换至球坐标系下, 可得

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} E_{\text{sca}}^\varphi(\mathbf{r}) \\ E_{\text{sca}}^\theta(\mathbf{r}) \\ E_{\text{sca}}^r(\mathbf{r}) \end{bmatrix} &= \mathbf{U}^T \begin{bmatrix} E_{\text{sca}}^x(\mathbf{r}) \\ E_{\text{sca}}^y(\mathbf{r}) \\ E_{\text{sca}}^z(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -\sin \varphi_i & \cos \varphi_i & 0 \\ \cos \theta_i \cos \varphi_i & \cos \theta_i \sin \varphi_i & -\sin \theta_i \\ \sin \theta_i \cos \varphi_i & \sin \theta_i \sin \varphi_i & \cos \theta_i \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} E_{\text{sca}}^x(\mathbf{r}) \\ E_{\text{sca}}^y(\mathbf{r}) \\ E_{\text{sca}}^z(\mathbf{r}) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (47)$$

值得注意的是, $E_{\text{sca}}^r(\mathbf{r})$ 计算结果应为 0, 在计算过程, 可用该结论验证计算过程的准确性, 一般

情况下也可省略其计算.

3.6 粒子散射特性的计算

3.6.1 散射振幅矩阵与穆勒矩阵的计算

散射振幅矩阵 $\mathbf{S}(\hat{\mathbf{r}}_{\text{sca}}, \hat{\mathbf{r}}_{\text{inc}})$ 是描述入射电场和散射电场变换关系的重要参数, 其定义如下^[35]:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} E_{\text{sca}}^\perp \\ E_{\text{sca}}^\parallel \end{bmatrix} &= \frac{\exp j(-kr + z)}{jkr} \mathbf{S}(\hat{\mathbf{r}}_{\text{sca}}, \hat{\mathbf{r}}_{\text{inc}}) \begin{bmatrix} E_{\text{inc}}^\perp \\ E_{\text{inc}}^\parallel \end{bmatrix} \\ &= \frac{\exp j(-kr + z)}{jkr} \begin{bmatrix} S_1 & S_4 \\ S_3 & S_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{\text{inc}}^\perp \\ E_{\text{inc}}^\parallel \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (48)$$

式中, $E_{\text{inc}}^\perp$ 和 $E_{\text{inc}}^\parallel$ 表示垂直和平行于散射平面的入射光电场分量, $E_{\text{sca}}^\perp$ 和 $E_{\text{sca}}^\parallel$ 是散射光的电场分量, 两者满足 $E_{\text{sca}}^\perp = -E_{\text{sca}}^\varphi$ 和 $E_{\text{sca}}^\parallel = E_{\text{sca}}^\theta$ ^[15]. 根据 (48) 式, 散射振幅矩阵可通过以下方式得到: 分别取入射光偏振方向垂直和平行于散射平面, 入射光电场强度 $E_{\text{inc}}^\perp = E_{\text{inc}}^\parallel = E_0$, 对应分别可得到两情形下的散射光的电场矢量为 $(E_{\text{sca},\perp}^\perp, E_{\text{sca},\perp}^\parallel)^T$ 和 $(E_{\text{sca},\parallel}^\perp, E_{\text{sca},\parallel}^\parallel)^T$, 基于矩阵运算则有:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} E_{\text{sca},\perp}^\perp & E_{\text{sca},\parallel}^\perp \\ E_{\text{sca},\perp}^\parallel & E_{\text{sca},\parallel}^\parallel \end{bmatrix} &= \frac{\exp j(-kr + z)}{jkr} \begin{bmatrix} S_1 & S_4 \\ S_3 & S_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{\text{inc}}^\perp & 0 \\ 0 & E_{\text{inc}}^\parallel \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (49)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\hat{\mathbf{r}}_{\text{sca}}, \hat{\mathbf{r}}_{\text{inc}}) &= \frac{jkr E_0}{\exp j(-kr + z)} \begin{bmatrix} E_{\text{sca},\perp}^\perp & E_{\text{sca},\parallel}^\perp \\ E_{\text{sca},\perp}^\parallel & E_{\text{sca},\parallel}^\parallel \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (50)$$

通过 (50) 式便可获得散射振幅矩阵, 在此基础上, 通过穆勒矩阵 $\mathbf{F}$ 与散射振幅矩阵 $\mathbf{S}$ 的转换关系, 便可计算穆勒矩阵, 详细请参见文献^[15, 30].

3.6.2 吸收截面的推导

吸收截面表征的是粒子吸收电磁波的能力, 实质是损耗电磁能而将其转化为热能. 记电磁波损耗功率为 P_{ab} , 则 P_{ab} 可采用下式表示:

$$\begin{aligned} P_{\text{ab}} &= -\text{Re} \left[\iint_S \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r} \right] \\ &= -\text{Re} \left[\iiint_V \nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \right] \\ &= -\frac{1}{2} \text{Re} \left[\iiint_V \nabla \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{r})) \right] \end{aligned}$$

$$\times \mathbf{H}^*(\mathbf{r}))d^3\mathbf{r}], \quad (51)$$

上式中, $\mathbf{n}_s$ 为积分面的外法向矢量, $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ 为电磁场的坡印廷矢量. 采用矢量恒等式 $\nabla \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r})) = \mathbf{H}^*(\mathbf{r}) \cdot \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r})$ 对体积分部分进行化简可得

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r})) \\ &= j\omega(\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r})\mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}^*(\mathbf{r})) \\ & \quad - \sigma(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (52)$$

代入(51)式, 可得电磁波损耗功率 P_{ab} 的形式为

$$P_{ab} = \frac{1}{2} \iiint_V \sigma(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}. \quad (53)$$

上式表明粒子吸收的能量转化为焦耳热, 与吸收截面的定义相符. 进一步, 入射场的坡印廷矢量 $\mathbf{S}_{inc}$ 可表示为

$$\mathbf{S}_{inc} = \frac{1}{2}(\mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{inc}^*) = \frac{1}{2Z_0}|\mathbf{E}_{inc}|^2\hat{\mathbf{k}}_{inc}, \quad (54)$$

式中 Z_0 为波阻抗, $\hat{\mathbf{k}}_{inc}$ 为归一化的入射波波矢量. 根据吸收截面的定义, 粒子吸收截面 C_{ab} 可表示为损耗功率 P_{ab} 与入射功率 P_{inc} 之比, 可采用下式计算:

$$\begin{aligned} C_{ab} &= \frac{P_{ab}}{P_{inc}} \\ &= \frac{Z_0 \iiint_V \sigma(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}}{|\mathbf{E}_{inc}|^2}. \end{aligned} \quad (55)$$

3.6.3 消光截面的推导

频域条件下, 总场的坡印廷矢量可分解为以下三部分: 入射坡印廷矢量 $\mathbf{S}_{inc}$, 散射坡印廷矢量 $\mathbf{S}_{sca}$ 和消光坡印廷矢量 $\mathbf{S}_{ext}$ ^[30]. 其中消光坡印廷矢量 $\mathbf{S}_{ext}$ 可表示为^[30]

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_s^*(\mathbf{r}) \\ & \quad + \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{inc}^*(\mathbf{r})). \end{aligned} \quad (56)$$

对坡印廷矢量 $\mathbf{S}_{ext}$ 曲面积分并取实部计算粒子消光功率, 如下式所示:

$$\begin{aligned} P_{ext} &= -\operatorname{Re}\left(\iint_S \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_s d^2\mathbf{r}\right) \\ &= -\frac{1}{2}\operatorname{Re}\left\{\iiint_V \nabla \cdot (\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_s^*(\mathbf{r}) \right. \\ & \quad \left. + \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{inc}^*(\mathbf{r}))d^3\mathbf{r}\right\}. \end{aligned} \quad (57)$$

采用矢量恒等式 $\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot \nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \nabla \times \mathbf{B}$, 结合麦克斯韦方程组对上式进行化简可以得到:

$$\begin{aligned} P_{ext} &= -\frac{1}{2}\operatorname{Re}\left\{\iiint_V \left[j\omega\mu_0(\mathbf{H}_{inc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_s^*(\mathbf{r}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \mathbf{H}_{inc}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_s(\mathbf{r})) + j\omega\left(\varepsilon\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_s^*(\mathbf{r}) \right. \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \varepsilon_0\mathbf{E}_{inc}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{\sigma}{j\omega}\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_s^*(\mathbf{r})\right)\right]d^3\mathbf{r}\right\}. \end{aligned} \quad (58)$$

对上式进一步化简, 可以得到

$$\begin{aligned} P_{ext} &= -\frac{1}{2}\left\{\iiint_V \operatorname{Im}\left[\omega\left(\varepsilon\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_s^*(\mathbf{r}) \right. \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \varepsilon_0\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_s^*(\mathbf{r}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{\sigma}{j\omega}\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_s^*(\mathbf{r})\right)\right]d^3\mathbf{r}\right\}. \end{aligned} \quad (59)$$

在获取消光功率的基础上, 采用入射波功率对其归一化, 即可得到消光截面 C_{ext} , 具体计算方法如下:

$$\begin{aligned} C_{ext} &= \frac{P_{ext}}{P_{inc}} \\ &= -\frac{Z_0}{|\mathbf{E}_{inc}|^2}\left\{\iiint_V \operatorname{Im}\left[\omega\left(\varepsilon - \varepsilon_0 - j\frac{\sigma}{\omega}\right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. \times \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_s^*(\mathbf{r})\right]d^3\mathbf{r}\right\}. \end{aligned} \quad (60)$$

在获得消光截面 C_{ext} 和吸收截面 C_{ab} 的基础上, 求取两者之差便可得到粒子的散射截面 C_{sc} . 进一步, 采用粒子几何截面对粒子消光截面、吸收截面及散射截面进行归一化, 即可得到消光、吸收和散射效率因子, 具体公式请参见文献[4].

4 模型验证与性能分析

基于 FORTRAN 实现了 MRTD 散射模型的编码, 下面分别将该模型模拟的穆勒矩阵与积分散射参数(消光、吸收及散射效率因子)和 Mie 理论、T 矩阵法进行对比以验证模型的准确性, 并对模型的性能进行定量评估.

4.1 与 Mie 散射理论的对比较验证

4.1.1 穆勒矩阵的对比较验证

取入射光波长 λ 为 0.55 μm , 粒子半径为 0.5 μm , 复折射率为 1.53 - 0.008i, 设置离散网

格步长为 $\lambda/50$, 采用MRTD模拟粒子的穆勒矩阵, 并将其与Mie理论的模拟结果进行对比, 结果如图3所示. 左图为穆勒矩阵随散射角的变化, 其中 F_{12} , F_{34} 和 F_{44} 采用 F_{11} 进行了归一化处理; 右侧

为两模型的相对偏差分布, 由于 F_{12} 和 F_{34} 在散射角 0° 和 180° 附近值趋于, 因而相对误差极大, 无实际意义, 因此仅给出散射角 20° — 170° 区间的相对误差.

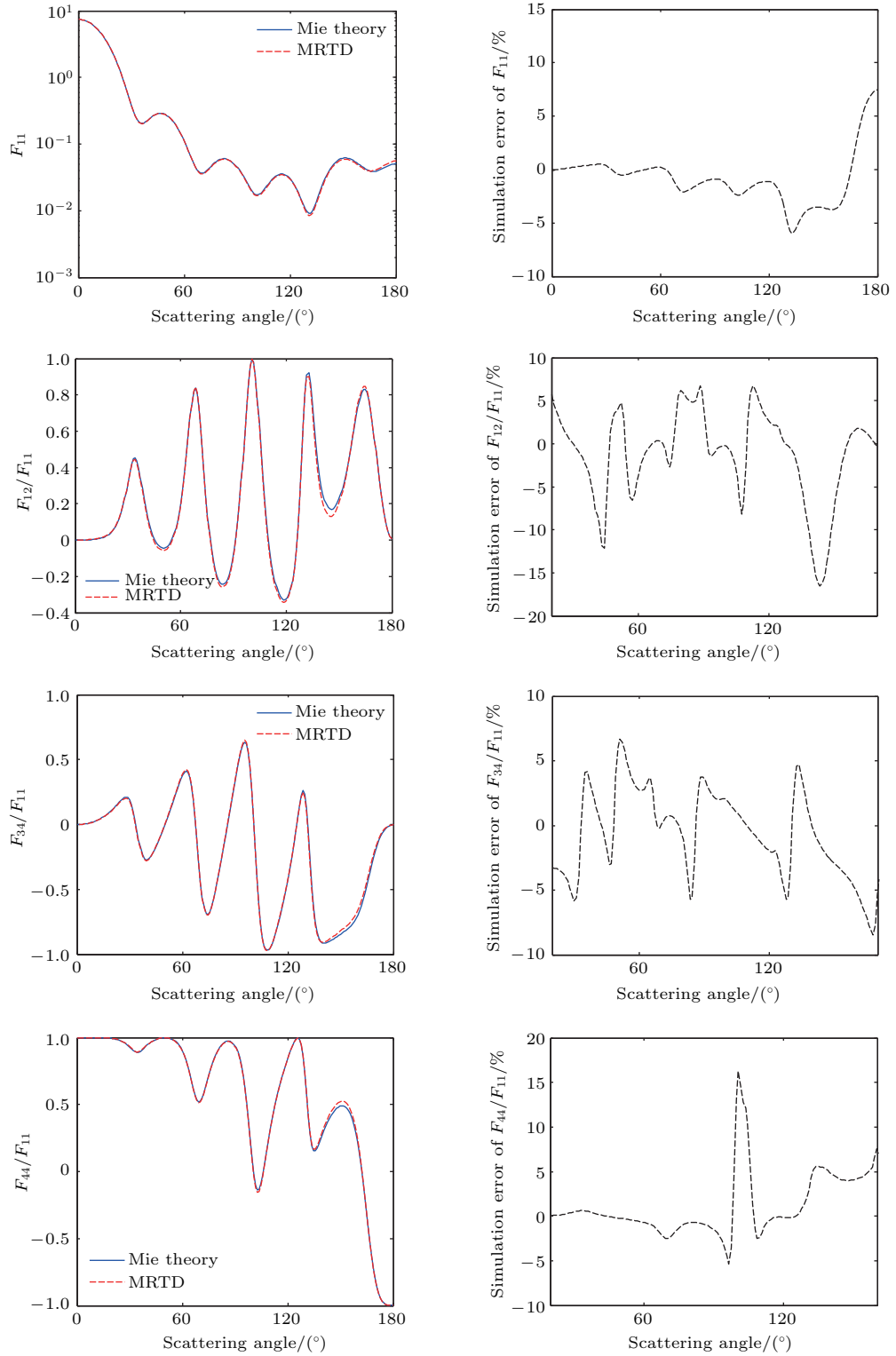


图3 (网刊彩色) MRTD与Mie散射模型模拟的穆勒矩阵及相对误差分布

Fig. 3. (color online) Comparison of Müller matrix between MRTD and Mie scattering model and the distribution of relative simulation error.

如图3所示, MRTD模型模拟结果与Mie散射模型一致性较好, 两者曲线基本重合. 对于散射相函数 F_{11} , 两模型的相对误差在7%以内, 其中在散射角 0° — 120° 区间, 两者相对误差小于3%; 对于 F_{12}/F_{11} 和 F_{34}/F_{11} , 其相对误差随散射角波动显著, 但整体而言, 其相对误差在10%以内, F_{44}/F_{11} 的模拟相对误差小于 F_{12}/F_{11} 和 F_{34}/F_{11} , 其中前向散射方向的相对误差在3.5%以内. 从相对误差分布上看, 前向散射方向的相对误差整体小于后向

散射方向, 其原因是由于采用网格对光滑球形粒子近似存在“阶梯误差”, 即形状存在差异, 而这种形状的差异对后向散射的影响强于前向散射^[36].

4.1.2 散射、消光及吸收效率因子的对比验证

入射光波长、粒子复折射率及网格设置与穆勒矩阵验证实验相同, 在不同粒径条件下采用MRTD模拟粒子的消光、吸收和散射效率因子, 并将其与Mie理论结果对比, 结果列于表1.

表1 MRTD与Mie理论模拟的消光、吸收和散射效率因子结果对比
Table 1. Extinction, absorption and scattering efficiency simulated by MRTD and Mie scattering model.

粒径/ μm	消光效率因子			吸收效率因子			散射效率因子		
	Mie	MRTD	误差/%	Mie	MRTD	误差%	Mie	MRTD	误差/%
0.1	0.4046	0.3831	-5.6121	0.0282	0.0273	-3.2967	0.3764	0.3558	-5.7898
0.5	2.9268	2.9266	-0.0068	0.2630	0.2624	-0.2287	2.6638	2.6642	0.0150
1.0	2.5596	2.5184	-1.6359	0.3711	0.3678	-0.8972	2.1884	2.1506	-1.7577
2.0	2.3970	2.2874	-4.7915	0.5652	0.5537	-2.0769	1.8317	1.7337	-5.6527

由表1可知, 不同粒径条件下, MRTD与Mie理论模拟的消光、吸收和散射效率因子相对偏差均在6%以内, 验证了两模型模拟结果的一致性. MRTD与Mie理论模拟结果的相对误差多数为负值, 说明该MRTD模拟结果整体小于Mie散射理论的模拟值; 随着粒子半径的增大, 消光、吸收和散射效率因子三个参数的模拟误差整体呈先减小后增大的特征, 其中当粒径和入射光波长相当时, MRTD模型的计算精度最高, 三个参数的模拟误差

均小于0.5%.

4.2 与T矩阵法的对比验证

T矩阵法是计算非球形粒子散射特性的有力工具, 其准确性已得到广泛验证. 本文将MRTD散射模型与T矩阵法对比, 进一步在非球形条件下验证MRTD模型的准确性, 其中模拟的粒子形状包括椭球和圆柱粒子. 如图4所示, 椭球形状采用横纵轴比 a/b 表示, 圆柱粒子采用直径高度比 D/L

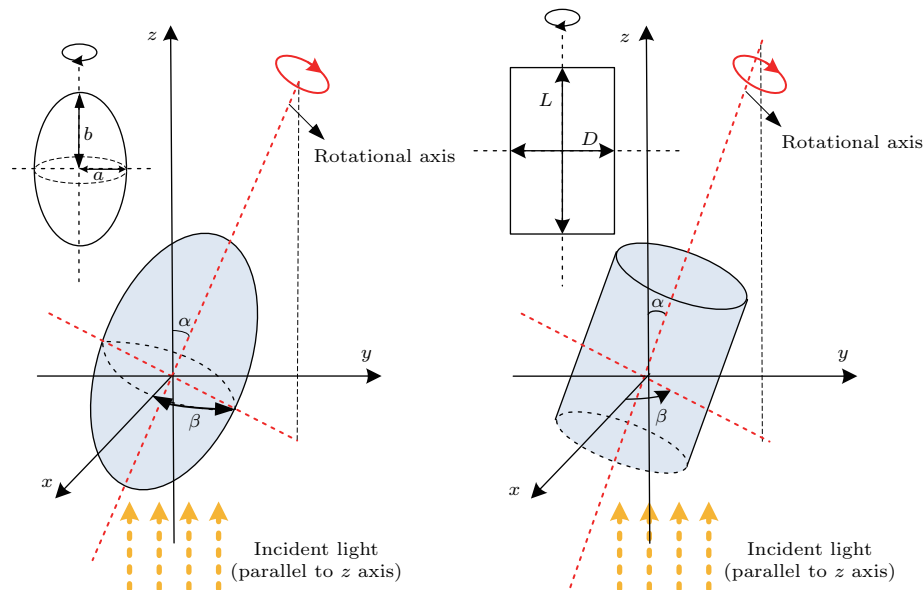


图4 (网刊彩色) 椭球及圆柱粒子的参数说明

Fig. 4. (color online) The illustrations of the parameters for spheroids and cylinders.

表示, 粒子的空间取向采用旋转轴 (rotational axis) 的天顶角 α 和方位角 β 表示.

4.2.1 椭球粒子的情形

4.2.1.1 穆勒矩阵的对比验证

取入射光波长 λ 为 $0.55 \mu\text{m}$, 计算域离散网格间距为 $\lambda/5$, 设置椭球粒子的等效球形半径 (等体积法) 为 $0.5 \mu\text{m}$, 横纵轴比 $a/b = 0.5$, 粒子取向 $(\alpha, \beta) = (0, 0)$, 复折射率为 $1.53 - 0.008i$, 采用 MRTD 模型与 T 矩阵法分别计算粒子的穆勒矩阵并进行对比, 结果如图 5 所示.

由图 5 可知, MRTD 散射模型与 T 矩阵法模拟的穆勒矩阵一致性较好, 其中对于 F_{11} , 在前向散射方向, 两模型的相对偏差小于 3.3%; 在后向散射方向, 平均相对偏差仅为 4.6%. 与球形粒子结果类似, 对于 F_{12}/F_{11} , F_{34}/F_{11} 和 F_{44}/F_{11} , 散射角 0° — 90° 区间的模拟误差明显小于 90° — 180° 方向, 其中在侧向散射方向 (120° — 140°), 由于曲线变化剧烈, 两模型计算值相差略大, 但整体变化趋势是一致的, 最大相对误差为 9.7%, 这可能是由于对粒

子形状建模存在误差所致.

4.2.1.2 散射、消光及吸收效率因子的对比验证

入射光、网格粗细、粒子复折射率及取向的设置与上面穆勒矩阵验证实验相同; 取粒子横纵轴比 a/b 取 0.6, 等效粒径为 0.1, 0.5, 1.0 和 $2.0 \mu\text{m}$, 分别采用 MRTD 散射模型与 T 矩阵法模拟椭球粒子消光效率因子、吸收效率因子和散射效率因子, 并求取两者相对偏差, 结果如表 2 所列, 其中, 粒子的几何截面采用等效球形半径计算.

由表 2 可知, 椭球粒子情形下, MRTD 与 T 矩阵法模拟的粒子积分散射参数误差较小, 其中散射效率因子和消光效率因子的误差小于 5%, 吸收效率因子误差小于 7.5%. 与球形粒子相似, 当粒子尺度与入射光波长相当时, 散射参数的模拟精度最高, 其中当粒径为 $0.5 \mu\text{m}$ 时, 消光效率因子的模拟误差小于 0.01%, 吸收效率因子的模拟误差优于 0.25%. 从误差分布上看, MRTD 计算的椭球粒子的散射参数略小于 T 矩阵法, 说明 MRTD 模型可能略低估实际粒子的散射吸收能力.

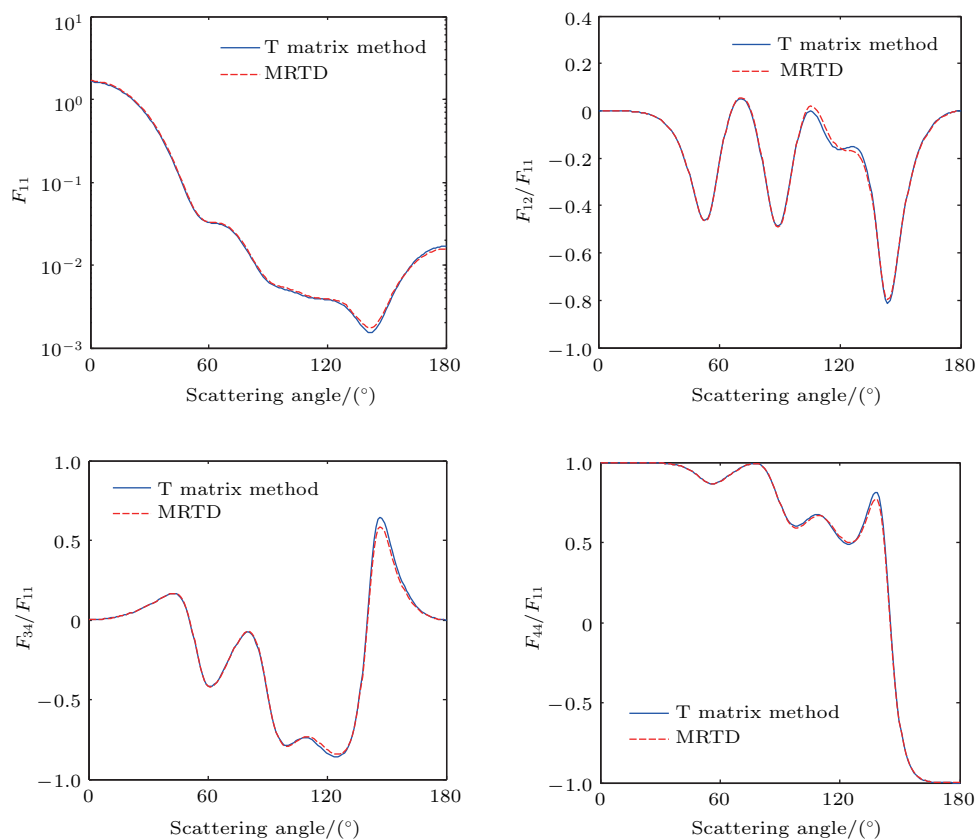


图 5 (网刊彩色) MRTD 与 T 矩阵模型模拟的椭球粒子穆勒矩阵

Fig. 5. (color online) Comparison of Mueller matrix of spheroid simulated by MRTD and T matrix method.

表2 MRTD与T矩阵模型模拟的消光、吸收和散射效率因子结果对比

Table 2. Extinction, absorption and scattering efficiency simulated by MRTD and T matrix method.

粒径/ μm	消光效率因子			吸收效率因子			散射效率因子		
	T矩阵	MRTD	误差/%	T矩阵	MRTD	误差/%	T矩阵	MRTD	误差/%
0.1	0.4016	0.3843	-4.5017	0.0284	0.0265	-7.1698	0.3732	0.3578	-4.3041
0.5	3.2121	3.2118	-0.0093	0.2377	0.2372	-0.2108	2.9744	2.9746	0.0067
1.0	2.7763	2.7376	-1.4137	0.4156	0.4108	-1.1685	2.3608	2.3268	-1.4612
2.0	2.2755	2.1893	-3.9373	0.5841	0.5673	-2.9614	1.6914	1.6220	-4.2787

4.2.2 圆柱粒子情形

4.2.2.1 穆勒矩阵的对比较证

在圆柱粒子情形下, 比较MRTD和T矩阵法模拟的穆勒矩阵, 结果如图6所示. 模拟过程中, 入射光波长、网格粗细及粒子取向设置与椭球粒子情形相同, 粒子复折射率为 $1.53 - 0.008i$, 直径高度比为 $D/L = 1.0$.

由图6可知, 圆柱粒子情形下, MRTD模拟的穆勒矩阵变化曲线与T矩阵结果一致性程度较高,

其中对于 F_{11} , 在散射角 $0^\circ - 90^\circ$ 区间, 两者的相对偏差在3%以内, 在后向散射方向, 两者最大相对误差仅为7.6%. 对于 F_{12}/F_{11} , F_{34}/F_{11} 和 F_{44}/F_{11} , 在 $0^\circ - 140^\circ$ 散射角区间, MRTD与T矩阵法模拟结果基本重合, 最大相对偏差小于10%, 在 F_{12}/F_{11} 和 F_{34}/F_{11} 随散射角剧烈变化的区间, 两者的一致性程度稍差, 特别是在散射角 $160^\circ - 170^\circ$ 附近. 整体而言, 在前向散射方向, 两模型的一致性程度高于后向散射方向.

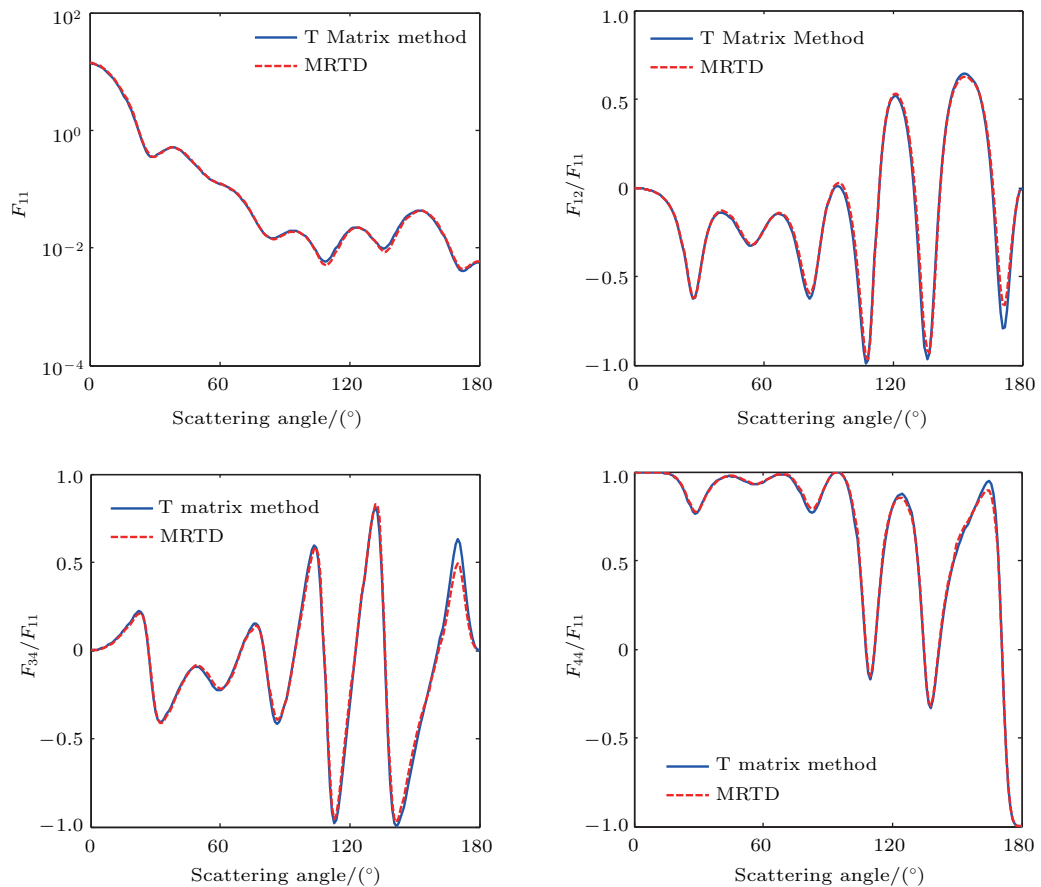


图6 (网刊彩色) MRTD与T矩阵模型模拟的圆柱形粒子穆勒矩阵

Fig. 6. (color online) Comparison of Mueller matrix of cylinder simulated by MRTD and T matrix method.

4.2.2.2 散射、消光及吸收效率因子的对比验证

参数设置与穆勒矩阵验证实验相同, 在不同等效球形粒径(等体积法)条件下, 分别采用MRTD模型与T矩阵法模拟圆柱粒子消光、吸收和散射效率因子, 并计算两者相对偏差, 结果如表3所列, 与椭球粒子情形类似, 粒子几何截面采用等效球形半径计算.

由表3可知, MRTD模拟的粒子积分散射特性与T矩阵法模拟值相符, 其中消光效率因子的模拟

相对偏差小于5.5%, 吸收效率因子最大偏差仅为8.745%. 相比而言, 吸收效率因子的相对偏差略大于消光和散射效率因子, 其原因是由于吸收截面值相对较小所致. 与球形和椭球粒子情形类似, 当粒子等效球形半径与入射光波长相当时, 粒子散射特性模拟的精度最高, 随着粒子半径偏离该尺寸, 模拟误差随之增大. 从误差符号分布上看, MRTD模型整体上也是略微低估了圆柱形粒子的散射吸收特性.

表3 MRTD与T矩阵理论模拟的消光、吸收和散射效率因子结果对比
Table 3. Extinction, absorption and scattering efficiency simulated by MRTD and T matrix method.

粒径 / μm	消光效率因子			吸收效率因子			散射效率因子		
	T 矩阵	MRTD	误差/%	T 矩阵	MRTD	误差/%	T 矩阵	MRTD	误差/%
0.1	0.4041	0.3835	-5.37158	0.0286	0.0263	-8.74525	0.3756	0.3572	-5.1512
0.5	2.9408	2.9402	-0.02041	0.2373	0.2368	-0.21115	2.7035	2.7034	-0.0037
1.0	2.8215	2.7916	-1.07107	0.4251	0.4184	-1.60134	2.3964	2.3732	-0.9776
2.0	2.5791	2.4997	-3.17638	0.6283	0.6069	-3.52612	1.9508	1.8928	-3.0642

4.3 网格粗细对模拟精度的影响

网格粗细决定了粒子形状描述的精度, 也决定了粒子散射特性模拟的准确性. 网格精细, 粒子形状特征描述越好, 但同时计算量与内存消耗随之迅速增长, 因此针对不同尺度粒子选择适当粗细的网格, 对缓解平衡计算量与精度的矛盾是十分有必要的. 基于此, 本节主要讨论网格粗细对不同尺度粒子散射特性模拟精度的影响.

取入射光波长 λ 为0.55 μm , 粒子形状为球形, 复折射率为1.33—0.010i, 分别取粒子半径为0.1, 0.5, 1.0和2.0 μm , 设置网格间距 δ 为 $\lambda/10$, $\lambda/20$, $\lambda/30$, $\lambda/40$, $\lambda/50$ 和 $\lambda/60$, 分别采用MRTD和Mie散射模型模拟粒子的消光、吸收效率因子及穆勒矩阵. 为定量评估MRTD模型的模拟精度, 消光和吸收效率因子的精度采用MRTD与Mie散射模型模拟结果的相对偏差表征; 散射光空间分布特性的模拟精度采用 F_{11} 的均方根误差 RSE 表征, 其定义如下:

$$RSE = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{F_{11}(\theta_i)_{\text{MRTD}} - F_{11}(\theta_i)_{\text{Mie}}}{F_{11}(\theta_i)_{\text{Mie}}} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (61)$$

计算得到不同粒径条件下MRTD模型与Mie散射模型的散射参数模拟相对偏差如表4所列.

由表4可知, 随着计算网格的细化, 粒子散射特性的模拟精度迅速提升, 其中对于粒径为1.0 μm 的粒子, 当 δ 从 $\lambda/10$ 变化至 $\lambda/60$ 时, Q_{ex} 和 Q_{ab} 的模拟误差分别由13.5122%和10.2059%减小至1.0634%和1.1583%. 当粒子尺度参数小于22时, 相同网格粗细条件下, 粒子半径与入射光波长越相近, MRTD方法模拟的粒子散射特性精度越高; 对于尺度参数 x 约为1, 5, 10和20的粒子, 空间离散网格步长分别取 $\lambda/60$, $\lambda/30$, $\lambda/40$ 和 $\lambda/40$ 即可满足精度需求.

4.4 模型运行效率分析

进一步分析MRTD模型的运行效率. 所用计算机的CPU是Intel(R) Core i5, 主频3.1 GHz, 内存8 GB, 软件系统为Win7操作系统和Fortran 90 Compiler. 根据4.3节中确定的保精度网格间隔, 分别模拟大折射率实部、大折射率虚部及一般复折射率三种情形的粒子散射特性, 并统计所需运行时间, 如表5所列.

由表5可知, 随着粒径的增大, 相应的散射特性模拟时间迅速增长, 其中当粒径为0.1 μm 时, 运行时间仅仅为285 s, 当粒径为3.0 μm 时, 模拟时间高达 2.8855×10^5 s; 折射率实部和虚部的变化并不会显著地改变程序运行的时间.

表4 计算域网格间距对粒子散射特性模拟精度的影响
Table 4. The influence of grid size on the simulation accuracy of aerosol scattering properties.

粒径/ μm	$\lambda/\delta(\text{个})$	10	20	30	40	50	60
0.1 ($x = 1.142$)	Q_{ex}	—	-17.5293	-9.3715	-7.9723	-6.3938	-5.8603
	Q_{ab}	—	-18.3243	-10.3584	-8.0765	-6.1977	-5.2646
	$RSE \text{ of } F_{11}$	—	8.1120	7.6647	6.8100	5.9114	5.8387
0.5 ($x = 5.71$)	Q_{ex}	-11.5634	-4.2063	-1.7057	-0.5397	-0.0075	-0.0065
	Q_{ab}	-10.2059	-6.2234	2.0043	-0.4373	-0.0105	-0.0072
	$RSE \text{ of } F_{11}$	11.3452	7.0741	3.9094	2.6861	2.0295	1.9237
1 ($x = 11.4$)	Q_{ex}	13.5122	6.8600	-2.0246	1.7472	-1.5665	-1.0634
	Q_{ab}	15.6431	7.3178	-3.1255	-2.9433	-2.4672	-1.1583
	$RSE \text{ of } F_{11}$	26.7099	11.8215	6.6020	5.0634	4.0572	3.8512
2.0 ($x = 22.8$)	Q_{ex}	-8.9119	-6.4559	3.2945	-1.9842	-1.5256	-1.3567
	Q_{ab}	-9.9452	-7.7522	3.7521	-2.2554	-1.6259	-1.2655
	$RSE \text{ of } F_{11}$	20.4248	14.9946	8.6539	6.5628	5.7854	4.2212

注: 若取 $\lambda/\delta = 10$, 粒径为 $0.1 \mu\text{m}$ 的粒子仅用 4 个元胞代替, 无法体现粒子形状特征, 因而略去.

表5 不同粒径粒子散射特性模拟所需的时间统计
Table 5. Computational time for particles with different radius and space resolution.

半径/ μm	$m = 1.33 - 0.008i$		$m = 2.53 - 0.000i$		$m = 1.33 - 0.75i$	
	Time/s	λ/δ	Time/s	λ/δ	Time/s	λ/δ
0.1	285	60	279	60	294	60
0.5	1854	30	1903	30	1887	30
1.0	20014	40	20058	40	20158	40
2.0	1.7046×10^5	40	1.7067×10^5	40	1.7093×10^5	40
3.0	2.8855×10^5	30	2.8843×10^5	30	2.8899×10^5	30

5 结 论

非球形气溶胶的散射特性是影响辐射传输过程的重要因素. 为提高复杂非球形气溶胶的散射特性模拟能力, 将计算电磁学中的 MRTD 技术引入至粒子近场散射场的计算, 推导了仅基于电场分量体积积分的近远场外推方案, 建立了基于体积积分的粒子吸收截面、消光截面等散射特性计算方案, 将 MRTD 散射模型与 Mie 散射模型、T 矩阵法的模拟结果进行了对比验证, 并分析网格大小对模拟精度的影响. 主要结论如下:

1) MRTD 散射模型与 Mie 理论、T 矩阵法的模拟结果一致性较好, 其中相函数的最大相对误差小

于 8%, 前向散射方向小于 4%; 当粒径与入射光波长相当时, 消光和散射效率因子的相对误差小于 0.1%;

2) 空间网格粗细对模拟精度影响显著, 当粒子尺度参数小于 20 时, 在相同精度要求下, 所需网格间距随粒子尺度参数呈先减小后增加的特征, 其中当入射光波长与粒子半径相当时, 需要的 Yee 元胞数量最少;

3) 与 FDTD 及 PSTD 相似, 本模型的运行时间也随着粒子半径的增大而迅速增加, 下一步需要对模型进行并行化处理以提高模型的运行效率.

感谢解放军理工大学野战工程学院电磁环境效应与电光工程国家级重点实验室陈彬教授及刘亚文博士在电磁场理论方面提供的指导.

参考文献

- [1] Dou T, Xiao C, Shindell D T, Liu J, Ming J, Qin D 2012 *Atmos. Chem. Phys.* **12** 7995
- [2] Liou K N, Takano Y 1994 *Atmos. Res.* **31** 271
- [3] Intergovernmental Panel of Global Climate Change 2007 *IPCC: Climate Change*
- [4] Liou K N 2003 *An Introduction to Atmospheric Radiation* (San Diego: Academic Press)
- [5] Liou K N, Takano Y, Yang P 2013 *J. Quantit. Spectrosc. Radiat. Transfer* **127** 149
- [6] Rao R Z 2012 *Modern Optics* (Beijing: Scientific Express) p31[饶瑞中 2012 现代大气光学 (北京: 科学出版社) 第31页]
- [7] Hu S, Gao T C, Li H, Liu L, Liu X C, Zhang T, Cheng T J, Li W T, Dai Z H, Su X J 2016 *J. Geophys. Res.* **121** doi:10.1002/2015JD024105
- [8] Evans K F, Stephens G L 1991 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **46** 413
- [9] Evans K F 1998 *J. Atmos. Sci.* **55** 429
- [10] Han Y, Wang T J, Rao R Z, Wang Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7396 (in Chinese) [韩永, 王体健, 饶瑞中, 王英位 2008 物理学报 **57** 7396]
- [11] Hu S, Gao T C, Liu L 2014 *J. Meteorolog. Sci.* **34** 612 (in Chinese) [胡帅, 高太长, 刘磊 2014 气象科学 **34** 612]
- [12] Zhang X L, Huang Y B, Rao R Z 2013 *High Power Laser and Particle Beams* **25** 1675 (in Chinese) [张小林, 黄印博, 饶瑞中 2013 强激光与粒子束 **25** 1675]
- [13] Herman M, Deuzé J L, Marchand A, Roger B, Lallart P 2005 *J. Geophys. Res.* **110** D10S02
- [14] Yang P, Liou K N, Bi L, Liu C, Yi B, Baum B A 2015 *Adv. Atmos. Sci.* **32** 32
- [15] Mishchenko M I, Hovenier J W, Travis L D 2000 *Light Scattering by Nonspherical Particles, Theory, Measurements, and Application* (New York: Academic Press)
- [16] Yang P, Liou K N 1995 *J. Opt. Soc. Am. A* **12** 12
- [17] Mishchenko M I, Travis L D 1998 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **60** 309
- [18] Bi L, Yang P 2016 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **178** 93
- [19] Voshchinnikov N V, Farafonov V G 1993 *Astrophys. Space Sci.* **204** 19
- [20] Al-Rizzo H M, Tranquilla J M 1995 *J. Computat. Phys.* **119** 356
- [21] Harrington R F 1968 *Field Computation by Moment Methods* (New York: Macmillan)
- [22] Draine B T 1988 *Astrophys. J.* **333** 848
- [23] Draine B T, Flatau P J 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 1491
- [24] Morgan M A, Mei K K 1979 *IEEE Trans. Antenn. Propagat.* **27** 202
- [25] Liu C, Panetta R L, Yang P 2013 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **129** 169
- [26] Liu C, Panetta R L, Yang P 2012 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **113** 1728
- [27] Liu Y, Chen Y, Zhang P 2013 *Prog. Electromagn. Res.* **143** 223
- [28] Cheong Y W, Lee Y M, Ra K H, Kang J G, Shin C C 1999 *IEEE Microw. Guided Wave Lett.* **9** 297
- [29] Dai S Y, Wu Z S 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7636 (in Chinese) [代少玉, 吴振森 2008 物理学报 **57** 7636]
- [30] Bohren C F, Huffman D R 1983 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (New York: John Wiley & Sons)
- [31] Tentzeris E M, Cangellaris A, Katehi L P B, Harvey J 2003 *IEEE Trans. Microw. Tech.* **50** 501
- [32] Liu Y W, Chen Y W, Xu X, Liu Z X 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 034101 (in Chinese) [刘亚文, 陈亦望, 徐鑫, 刘宗信 2013 物理学报 **62** 034101]
- [33] Gao Q, Cao Q, Zhou J 2009 *International Forum on Information Technology and Applications* **2009** 359–362
- [34] Griffiths D J 2014 *Introduction to Electrodynamics* (third edition) (New York: Pearson Education)
- [35] van der Hulst H C 1981 *Light Scattering by Small Particles* (New York: Dover Publications)
- [36] Curtis D B, Meland B, Aycibin M 2008 *J. Geophys. Res.* **113** D08210

Simulating scattering properties of nonspherical aerosol particles using multiresolution timedomain method*

Hu Shuai¹⁾ Gao Tai-Chang^{1)2)†} Li Hao¹⁾ Yang Bo²⁾ Jiang Zhi-Dong³⁾
Chen Ming¹⁾ Li Shu-Lei¹⁾

1) (College of Meteorology and Oceanography, PLA University of Science and Technology, Nanjing 211101, China)

2) (National Key Laboratory on Electromagnetic Environment and Electro-optical Engineering, PLA University of Science and Technology, Nanjing 210007, China)

3) (Navy Aeronautical and Astroautical University, Qingdao 266041, China)

(Received 19 September 2016; revised manuscript received 30 November 2016)

Abstract

Scattering process of aerosol particles plays an important role in atmospheric radiative transfer since it can modify the transmission, reflection and absorption ability of atmospheric system. Owing to the uncertainty of aerosol particles' scattering properties, which results from their complicated geometries and inhomogeneous compositions, there still exists a considerable uncertainty in the radiative transfer numerical simulation, and simulating the scattering properties of aerosol with irregular shapes has become a hotspot in meteorological study. To this end, a new aerosol scattering model is developed based on multi-resolution time-domain (MRTD), by which the scattering processes of nonspherical and inhomogeneous particles can be simulated. In this model, the near electromagnetic field is calculated by MRTD technique. Considering the particularity of aerosol medium, a transformation technique from near field to far field is derived based on volume integration method, and then the scattering amplitude matrix and Müller matrix can be calculated by the obtained far electric field as well. The models for particle extinction and absorption cross section are derived from Maxwell's curl equations in the frequency domain, by which the integration scattering properties can be simulated accurately. The MRTD scattering model is validated by comparing with Mie theory and T matrix method for spherical particle, ellipsoidal particle and cylindrical particle, and the influence of grid size on the simulation accuracy is analyzed subsequently. In the last part, the efficiency of the MRTD scattering model is quantitatively discussed. The simulation results show that the relative errors of scattering phase function simulated by our model are less than 8%, and the errors in forward scattering direction are much smaller, which are less than 4%. The precisions for extinction and absorption efficiency are much higher than the results from the scattering phase function, and the relative errors can reduce to 0.1% for particles with their radii comparable to the wavelength of incident light. The grid size has a significant influence on model precision; to achieve the same accuracy, the grid size first increases with increasing particle radius, and then decreases as a function of particle size for particles with size parameter less than 20. In the next step, we will try to establish the scattering property database of nonspherical particles based on the MRTD scattering model developed here.

Keywords: nonspherical aerosol, scattering properties, multi-resolution time-domain, Müller matrix

PACS: 42.68.Mj, 42.68.Ay, 95.30.Jx, 42.25.Bs

DOI: 10.7498/aps.66.044207

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 41575025, 41575024).

† Corresponding author. E-mail: gaotc@gmail.com