

# 随机分布烟尘簇团粒子缪勒矩阵的数值计算<sup>\*</sup>

类成新<sup>†</sup> 张化福 刘汉法

(山东理工大学理学院, 淄博 255049)

(2009 年 1 月 20 日收到 2009 年 3 月 2 日收到修改稿)

利用蒙特卡罗方法根据团簇-团簇凝聚(CCA)模型对由球形原始粒子凝聚而成的烟尘簇团粒子进行了模拟,用离散偶极子近似(DDA)方法对随机分布的烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素进行了数值计算,给出了不同入射波长情况下随机分布烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素与组成簇团粒子的基本粒子的粒径和数目的数值关系,为进一步研究随机分布簇团粒子的形成机理、形态特性、散射特性提供了一种理论方法.

关键词: 烟尘簇团粒子, 缪勒矩阵, 离散偶极子近似方法

PACC: 7220D, 7820

## 1. 引 言

烟尘簇团粒子是燃料不充分燃烧或者燃烧生成的气态污染物和粉尘混合体组成的凝聚粒子,是烟和各种悬浮粒子的总称,主要含有烟、碳黑、灰分以及浮游物质等成分.形成烟尘的基本粒子粒度非常小,烟尘中的碳粒子的典型半径大小在 10—100 nm 之间,且粒子非常密集,与可见光相比可看作是近似度很好的群聚球形微粒所组成的簇<sup>[1,2]</sup>.烟尘簇团粒子在形成过程中,由于基本粒子之间存在相互作用而产生随机的碰撞,因此形成的烟尘簇团粒子具有十分复杂的分形结构<sup>[3]</sup>.

簇团粒子的散射特性是近年来研究的一个重要方向.随着军事的高科技化、人们对于环境保护的越来越重视、生物医学的发展以及通讯、遥感、雷达目标识别技术的发展,簇团粒子散射特性的研究不断地被推向新的阶段.对随机分布的簇团粒子的研究可以掌握烟尘簇团粒子的散射特性,进而研究其形成机理以及形态特性,达到人为地利用其有利方面,控制、监测其不利方面的目的.同时对于簇团粒子的研究,还可以进一步推动大气光学的进展和对尘埃粒子散射特性的研究<sup>[4]</sup>.这对于人们加深对星际空间的认识也起到巨大的促进作用.

以往对簇团粒子散射特性的研究大多是基于瑞

利-迪拜-甘斯散射近似<sup>[5]</sup>,这种方法仅适用于簇团原始粒子半径非常小的情况,不能解决常见的粒子半径与波长相当的问题,因此局限性很大.离散偶极子近似方法有着非常好的灵活性和通用性,只要粒子或散射体的尺寸参数和复折射率满足它的使用条件,就能很好地运用该方法研究目标或者散射体的散射、极化特性.缪勒矩阵元素是描述目标散射体散射特性的一个重要物理参量,通过对缪勒矩阵元素的研究,可以了解目标散射体的一切散射信息以及散射体结构的一些特性<sup>[6]</sup>.本文利用离散偶极子近似方法研究了由蒙特卡罗方法模拟的随机分布的烟尘簇团粒子的散射特性,数值计算了随机分布的烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素,给出了不同入射波长情况下烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素随组成簇团粒子的基本粒子的粒径和数目的变化结果,为进一步研究簇团粒子的形成机理、形态特性、散射特性以及电磁(光)波在随机分布簇团粒子中的传输特性提供了有效的计算方法.

## 2. 基本理论

### 2.1. 离散偶极子近似方法

离散偶极子近似方法(discrete dipole approximation,简称 DDA)是一种计算任意形状几何

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 60371020)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: chengxinlei@yahoo.com.cn

体的电磁波散射和吸收的灵活而有力的工具,由 Purcell 和 Pennypacker<sup>[7]</sup>于 1973 年提出,经过 Draine 等<sup>[8,9]</sup>的进一步改进,逐步发展成一种成熟的算法,并广泛应用于分析星际灰尘和大气气溶胶的光散射特性。DDA 方法的基本思想是:将连续散射物体近似为有限个可极化的点阵,每个点通过对局域电场(入射场以及其他点的辐射场)的响应获得偶极矩,散射体上所有点在远场的辐射的总和构成散射场。若将散射体离散为  $N$  个点,每个点的极化率为  $\alpha_j$ ,坐标为  $\mathbf{r}_j(j=1, 2, \dots, N)$ ,所处的电场为  $\mathbf{E}_j$ ,则该点的偶极矩  $\mathbf{P}_j$  为

$$\mathbf{P}_j = \alpha_j \mathbf{E}_j = \alpha_j (\mathbf{E}_{\text{inc},j} - \sum_{k \neq j} \mathbf{A}_{jk} \mathbf{P}_k), \quad (1)$$

式中  $\mathbf{E}_j$  是入射场  $\mathbf{E}_{\text{inc},j}$  与其他  $N-1$  个偶极子的散射场的总和,系数  $\mathbf{A}_{jk}$  为一个  $3 \times 3$  矩阵

$$\mathbf{A}_{jk} = \frac{\exp(i k r_{jk})}{r_{jk}} \left[ k^2 (\hat{\mathbf{r}}_{jk} \hat{\mathbf{r}}_{jk} - \bar{\mathbf{I}}_3) + \frac{i k r_{jk} - 1}{r_{jk}^2} (3 \hat{\mathbf{r}}_{jk} \hat{\mathbf{r}}_{jk} - \bar{\mathbf{I}}_3) \right], \quad (2)$$

式中  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  为入射波长; $r_{jk} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|$ ,  $\hat{\mathbf{r}}_{jk} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)/r_{jk}$ ,  $\bar{\mathbf{I}}_3$  为  $3 \times 3$  单位矩阵。

若定义  $A_{ij} = \alpha_j^{-1}$ , 则偶极矩  $\mathbf{P}_j$  满足  $3N$  个复线性方程组

$$\sum_{k=1}^N \mathbf{A}_{jk} \mathbf{P}_k = \mathbf{E}_{\text{inc},j}, \quad (3)$$

由(3)式可解出  $\mathbf{P}_k$ , 解出  $\mathbf{P}_k$  后就可以求得簇团粒子的一切散射特征量。至于缪勒矩阵元素的具体表达形式见文献[6]。

## 2.2. 计算物理模型

本文所用的烟尘簇团粒子是基于 Jullien 和 Botet 等<sup>[10]</sup>提出得 cluster-cluster aggregation (CCA) 模型的基础上利用蒙特卡罗方法进行模拟的,具体的模拟过程见文献[11]。烟尘簇团粒子具有分形结构,其结构可用下式表示<sup>[10]</sup>:

$$N = k_f \left( \frac{R_g}{d_p} \right)^{D_f}, \quad (4)$$

式中  $N$  为凝聚粒子包含原始微粒的数量,  $k_f$  为分形系数(本文取值为 5.8),  $d_p$  为原始微粒粒径,  $D_f$  为凝聚粒子的分形维数(取值为 1.8),  $R_g$  为凝聚粒子的平均回转半径。

自然界中烟尘簇团原始粒子的凝聚过程是随机的,实际的簇团粒子具有千变万化的结构,所反映出

的散射特性是所有形态的统计平均值。文中将随机分布的烟尘簇团粒子所处不同位置的所有方位角求其统计平均,从而得到缪勒矩阵元素的统计平均值,计算公式如下<sup>[8]</sup>:

$$Q = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} Q(\beta, \Theta, \Phi) \sin\beta d\cos\Theta d\Phi \quad (5)$$

式中  $Q$  为烟尘簇团粒子某缪勒矩阵元素的统计平均值; $Q(\beta, \Theta, \Phi)$  为系统坐标中某特定取向时烟尘簇团粒子缪勒矩阵元素值。理论上讲,方位角的取值应该取尽所有的值,即  $\beta \in [0, 2\pi)$ ,  $\Theta \in [0, \pi)$ ,  $\Phi \in [0, 2\pi)$ , 但是,由于受到计算资源的限制,只要所取的方位角的个数能够满足要求即可。Xing 等<sup>[12]</sup>的研究表明,方位角的选取,  $n_\beta, n_\Theta, n_\Phi$  分别为 10, 7, 7 时,即 490 个方位角在一定条件下可以满足计算要求。本文中所有计算结果均采用此方案。

## 3. 结果与分析

计算中烟尘簇团粒子的基本粒子的粒径  $d_p$  分别取为 20, 40, 60 nm;基本粒子数  $N$  分别取为 25, 50, 75, 100, 125;入射波的波长分别取为 532, 1000 nm, 对应的复折射率分别为  $m = 1.85 + 0.5i$ ,  $m = 1.8 + 0.5i$ , 因烟尘簇团粒子的复折射率是入射波长的函数<sup>[13]</sup>。

### 3.1. 缪勒矩阵元素 $M_{11}$

图 1 给出了不同入射波长下  $M_{11}$  与基本粒子的粒径  $d_p$  及数目  $N$  的关系。从图 1 可以看出:对于不同波长,烟尘簇团粒子的前向( $\theta = 0^\circ$ )缪勒矩阵元素  $M_{11}$  的值均比较大,散射都集中在前向散射上。随着入射波长的减小,烟尘簇团粒子的后向散射有所增加,但是增加的幅度没有前向散射增加得快,而对于特定的入射波长,随着基本粒子数目  $N$  (或者粒径  $d_p$ ) 的增大,烟尘簇团粒子的  $M_{11}$  值均增加,只不过前向散射增加的优势更加明显。这说明入射波长、基本粒子数目以及粒径均对烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素  $M_{11}$  散射角分布产生了影响。根据图 1 所示的  $M_{11}$  的角分布曲线,我们可以获得组成烟尘簇团粒子的基本粒子的数目  $N$  和粒径  $d_p$ 。

为了进一步研究烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素  $M_{11}$  与基本粒子数目  $N$  和粒径  $d_p$  的关系,我们取图 1 所示的缪勒矩阵元素  $M_{11}$  随散射角的变化曲线下面所围面积即总散射能量来研究它们之间的关系。

烟尘簇团粒子的总散射能量与组成簇团粒子的基本

粒子的数目和粒径的关系,如图2所示.

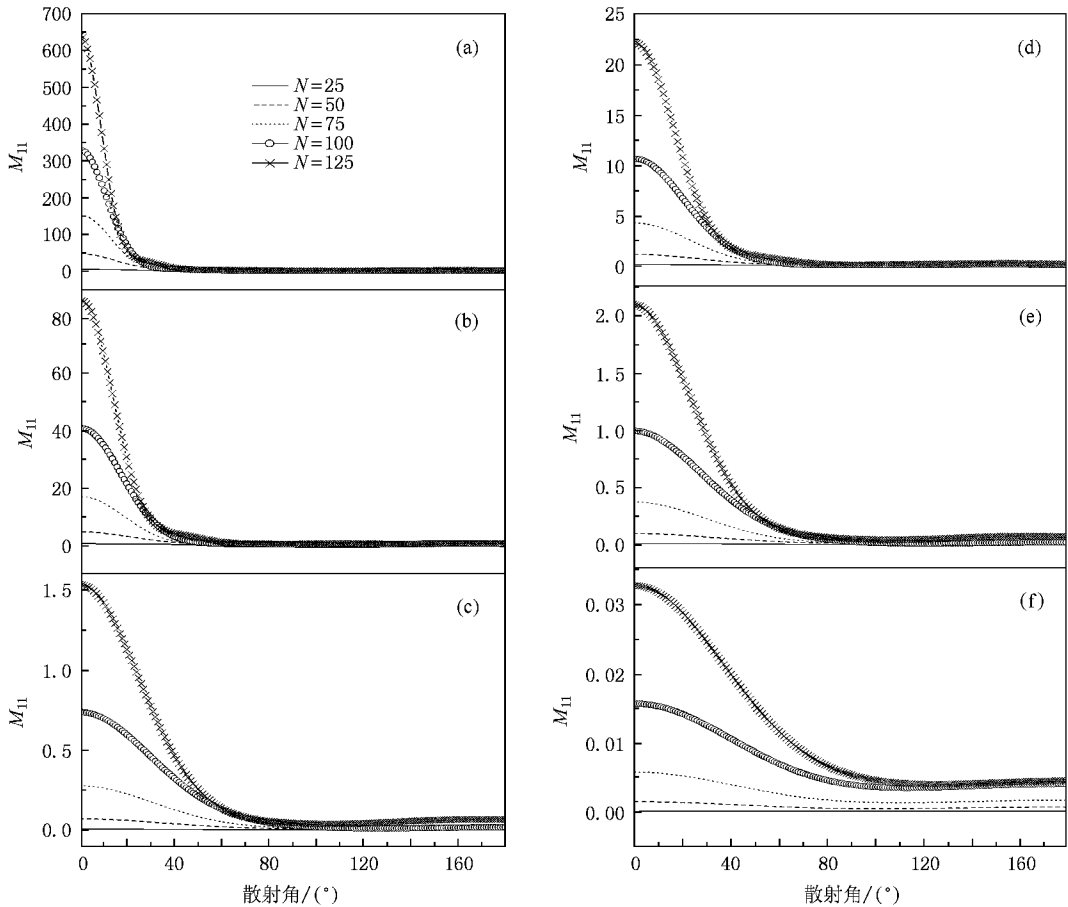


图1 不同入射波长下  $M_{11}$  随  $d_p$  与  $N$  变化的角分布图 (a)(b)(c)  $\lambda = 532 \text{ nm}$ ,  $m = 1.85 + 0.5i$ ,  $d_p$  分别为 60, 40, 20 nm (d)(e)(f)  $\lambda = 1000 \text{ nm}$ ,  $m = 1.8 + 0.5i$ ,  $d_p$  分别为 60, 40, 20 nm

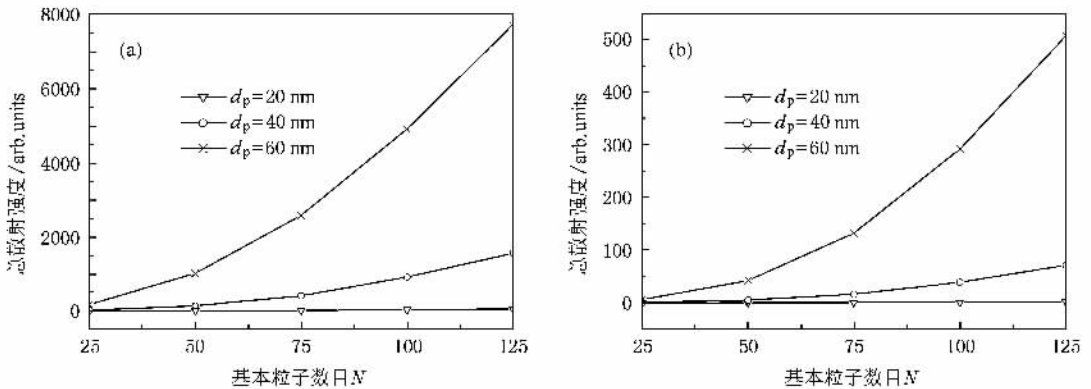


图2 不同入射波长下总散射强度随  $d_p$  与  $N$  的变化规律曲线 (a)  $\lambda = 532 \text{ nm}$ ,  $m = 1.85 + 0.5i$  (b)  $\lambda = 1000 \text{ nm}$ ,  $m = 1.85 + 0.5i$

从图2可以很清楚地看到烟尘簇团粒子的总散射强度与基本粒子数目  $N$  和粒径  $d_p$  的关系:任意

波长情况下,总散射强度随着基本粒子数目  $N$  和粒径  $d_p$  的增大均增大,当基本粒子数目  $N$  比较大时,

总散射强度随着粒径  $d_p$  增大而增大的趋势变得比较明显;当然,当粒径  $d_p$  比较大时,总散射强度随着基本粒子数目  $N$  增大而增大的趋势也变得很强烈.通过总散射强度与基本粒子数目  $N$  和粒径  $d_p$  之间的近似线性关系,我们可以确定出烟尘簇团粒子的基本粒子数目  $N$  和粒径  $d_p$ .

### 3.2. 缪勒矩阵元素 $M_{12}$

不同入射波长下  $M_{12}$  与基本粒子的粒径  $d_p$  及数目  $N$  的关系如图 3 所示.从图 3 可以得知:随着烟尘簇团粒子中基本粒子数目  $N$  (或者基本粒子粒径  $d_p$ ) 的增大或者入射波长的减小,烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素  $M_{12}$  的极值点呈现出向前移动的趋势.例如  $\lambda = 1000$  nm 情况下,对于  $N = 100$ , 粒径  $d_p$

从 20 40 nm 增大到 60 nm 时,  $M_{12}$  的极值点分别出现在散射角为  $72^\circ$   $45^\circ$   $31^\circ$  处.对于  $d_p = 20$  nm, 当基本粒子数目  $N$  从 25 增加到 125 时,  $M_{12}$  的极值点从  $\theta = 86^\circ$  处减小到  $\theta = 61^\circ$  处;另外,对  $N = 125$ ,  $d_p = 20$  nm 的情况,入射波长从 1000 nm 变化到 532 nm 时,  $M_{12}$  极值点从  $\theta = 61^\circ$  移动到  $\theta = 38^\circ$  处.以上情况说明,如果事先得知烟尘簇团粒子基本粒子的粒径  $d_p$ , 根据以上规律我们可以确定粒子数目  $N$  的值,反之亦然.另外,从图 3 还可以发现:当基本粒子的粒径  $d_p$  和粒子数  $N$  增大到一定值时,烟尘簇团粒子的后向散射(散射角大于  $90^\circ$  时的散射)  $M_{12}$  的角分布曲线都开始出现振荡,并且随着两者的增大振荡越来越剧烈.我们认为这是烟尘簇团粒子结构的不均匀性以及电多极子和磁多极子共同作用的结果.

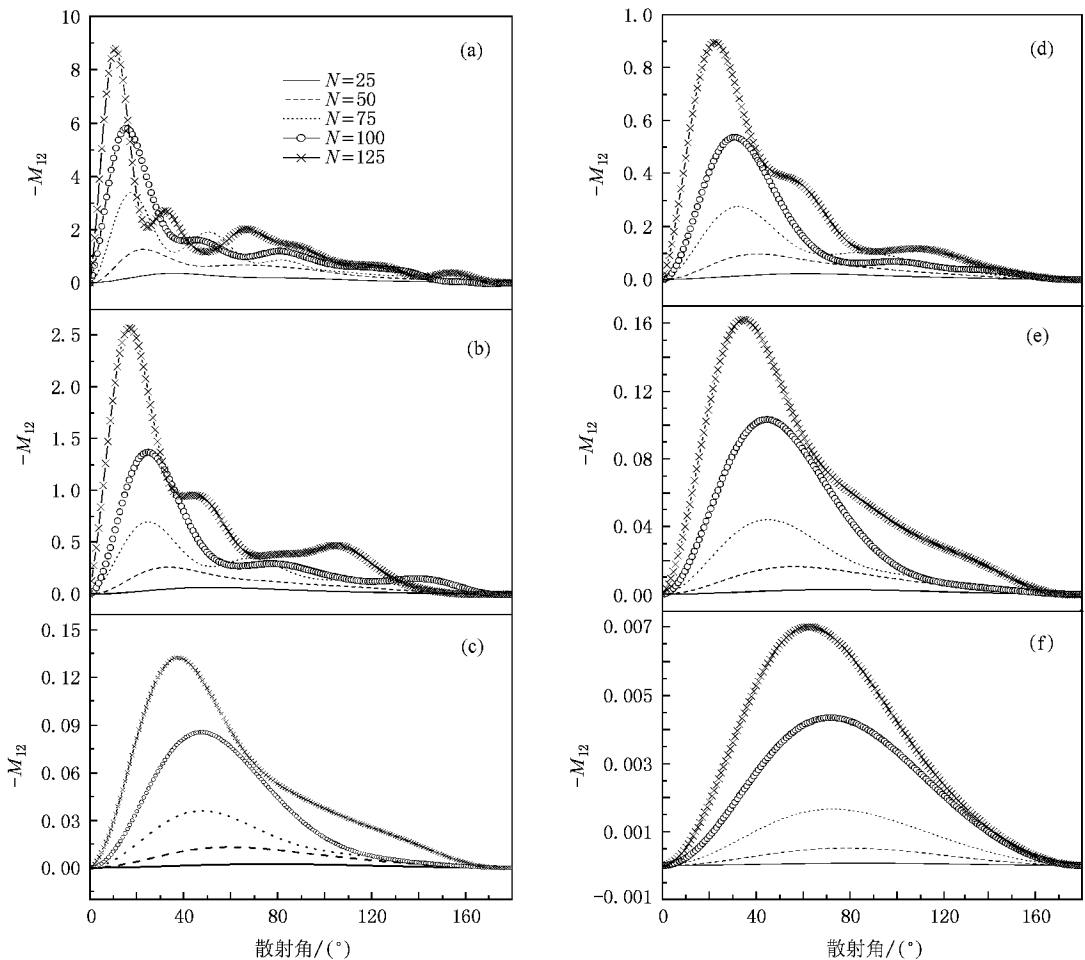


图 3 不同入射波波长下  $M_{12}$  随  $d_p$  与  $N$  变化的角分布图 (a)(b)(c)  $\lambda = 532$  nm,  $m = 1.85 + 0.5i$ ,  $d_p$  分别为 60, 40, 20 nm (d)(e)(f)  $\lambda = 1000$  nm,  $m = 1.8 + 0.5i$ ,  $d_p$  分别为 60, 40, 20 nm

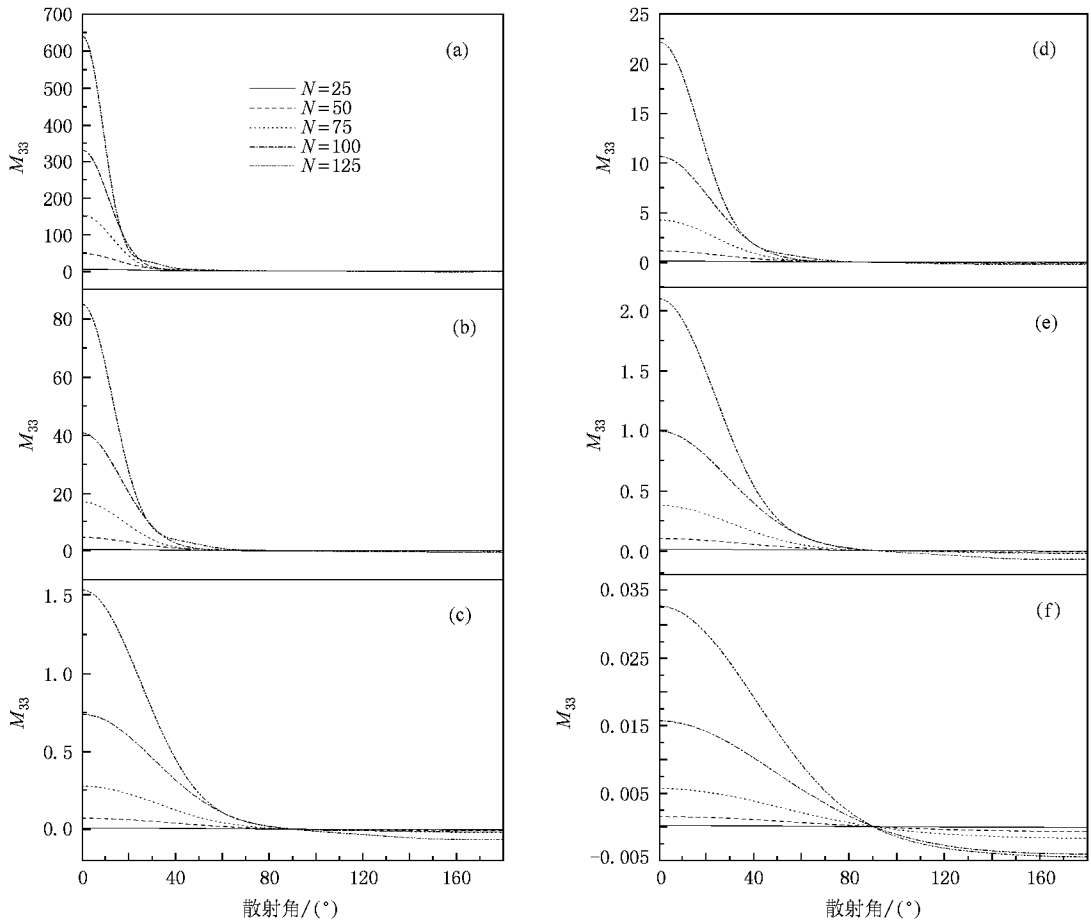


图4 不同入射波长下  $M_{33}$  随  $d_p$  与  $N$  变化的角分布图 (a)(b)(c)  $\lambda = 532 \text{ nm}$ ,  $m = 1.85 + 0.5i$ ,  $d_p$  分别为 60 40, 20 nm (d)(e)(f)  $\lambda = 1000 \text{ nm}$ ,  $m = 1.8 + 0.5i$ ,  $d_p$  分别为 60 40 20 nm

### 3.3. 缪勒矩阵元素 $M_{33}$

图4给出了不同入射波长下  $M_{33}$  与基本粒子的粒径  $d_p$  与数目  $N$  关系.从图4可以发现: $M_{33}$  随  $N$  和  $d_p$  变化规律和  $M_{11}$  的变化规律有点类似,但也有

不同之处.不同之处在于:簇团粒子前向散射的  $M_{33}$  值与后向散射的  $M_{33}$  值关于零值点对称.为了方便起见,定义  $M_{33}$  的不对称比率  $\alpha$  等于前向散射曲线下面积与后向散射曲线下面积的比值, $\alpha$  与  $N$  和  $d_p$  的变化关系如图5所示.

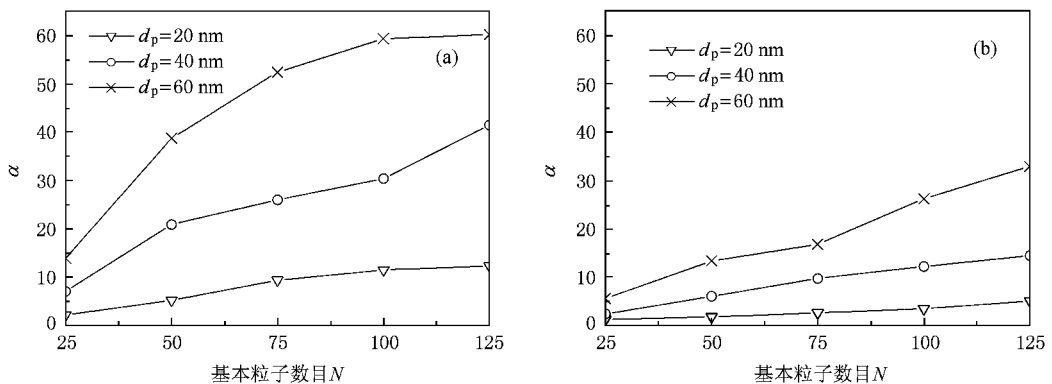
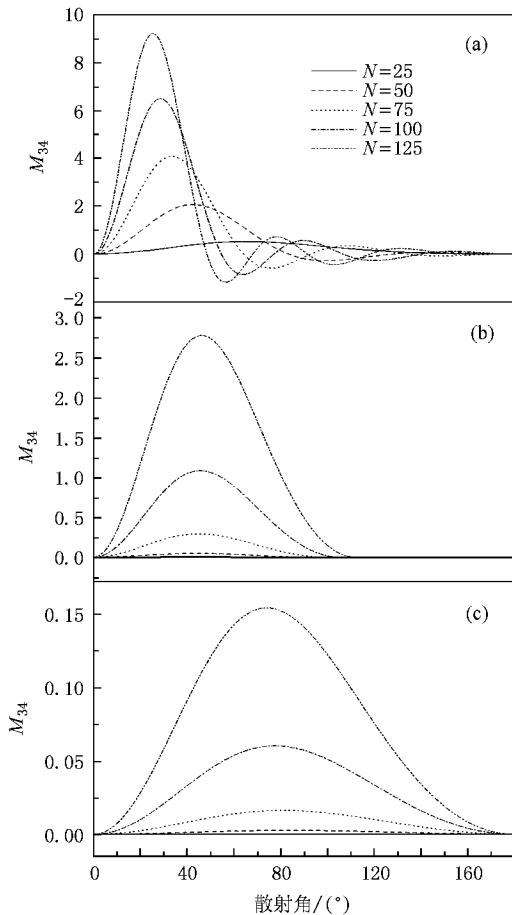


图5  $M_{33}$  的不对称比率  $\alpha$  随  $N$ ,  $d_p$  变化的规律曲线 (a)  $\lambda = 532 \text{ nm}$ ,  $m = 1.85 + 0.5i$  (b)  $\lambda = 1000 \text{ nm}$ ,  $m = 1.85 + 0.5i$

由图 5 知：对于任意给定入射波长， $M_{33}$  的不对称比率随着  $N$  和  $d_p$  的增大均增大。这是由于  $N$  和  $d_p$  的增大促使烟尘簇团粒子的尺寸参数变大，簇团粒子的前向散射强于后向散射造成的；对于不同入射波长， $M_{33}$  的不对称比率随入射波长的增大而减小。其原因是波长增大，烟尘簇团粒子尺寸参数相对变小，其前向散射与后向散射趋于对称。这一结论从图 3 也可以得到。除此之外，从图 5 还可以发现：不同波长情况下， $N$  和  $d_p$  的不同取值可能得到相同的  $\alpha$  值（例如  $\lambda = 532 \text{ nm}$  情况下  $d_p = 40 \text{ nm}$ ， $N = 75$  所对应的  $\alpha$  值与  $\lambda = 1000 \text{ nm}$  情况下  $d_p = 60 \text{ nm}$ ， $N = 100$  所对应的  $\alpha$  值相等），但是只要我们考虑一定入射波长情况下  $M_{33}$  的不对称比率  $\alpha$  的谱线变化规律，就可以确定出基本粒子数目以及粒径的确切数值。

### 3.4. 缪勒矩阵元素 $M_{34}$

不同入射波长下，烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元



素  $M_{34}$  随粒径  $d_p$  与数目  $N$  的变化关系如图 6 所示。由图 6 知，与其他缪勒矩阵元素相比较， $M_{34}$  有其独特的一些性质。在入射波长和基本粒子粒径（ $d_p = 20 \text{ nm}$  或  $d_p = 40 \text{ nm}$ ）一定的情况下，随着粒子数目  $N$  的变化，缪勒矩阵元素  $M_{34}$  的极值点位置不变。例如，在  $\lambda = 1000 \text{ nm}$ ， $d_p = 20 \text{ nm}$  情况下，当  $N = 25$  增大到  $N = 125$  过程中， $M_{34}$  的极值点均出现在  $\theta = 90^\circ$  处。换句话说， $M_{34}$  的极值点所对应的散射角与粒子数目  $N$  无关，它是基本粒子粒径  $d_p$  的函数，当粒径增大时， $M_{34}$  的极值点左移，并且当  $d_p = 60 \text{ nm}$  时  $M_{34}$  的角分布曲线出现了双模状态（出现极大值和极小值）。根据  $M_{34}$  这一比较独特特点，如果能够精确测出其角分布曲线，我们就可以精确地确定出粒径  $d_p$  值。

### 3.5. 其他缪勒矩阵元素

缪勒矩阵元素总共有 16 个，只是相互独立的仅仅 9 个。对于随机分布的簇团粒子具有某种对称性，

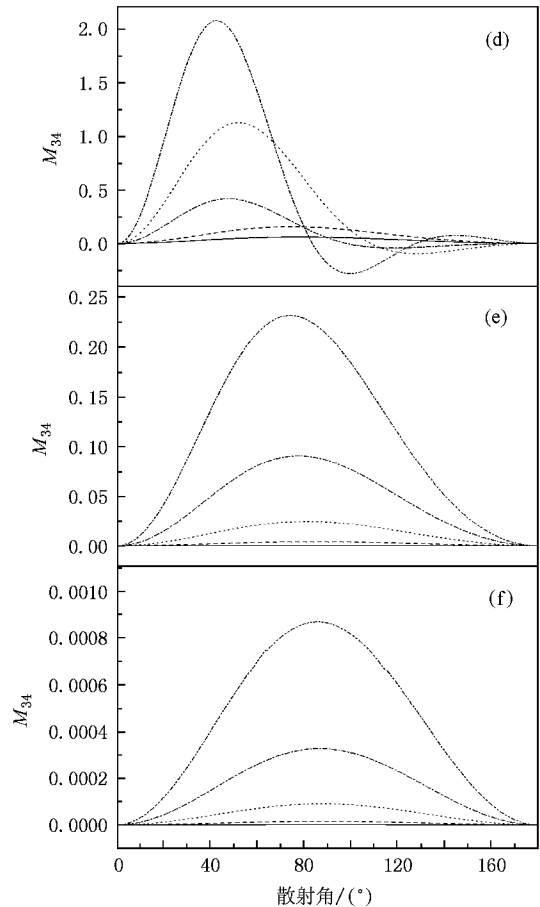


图 6 不同入射波长下  $M_{34}$  随  $d_p$  与  $N$  变化的角分布图 (a)(b)(c)  $\lambda = 532 \text{ nm}$ ， $m = 1.85 + 0.5i$ ， $d_p$  分别为 60 40，20 nm (d)(e)(f)  $\lambda = 1000 \text{ nm}$ ， $m = 1.8 + 0.5i$ ， $d_p$  分别为 60 40 20 nm

其缪勒矩阵元素可以减少为 6 个<sup>[14]</sup>:  $M_{11}$ ,  $M_{12}$ ,  $M_{22}$ ,  $M_{33}$ ,  $M_{34}$ ,  $M_{44}$ , 另外  $M_{22}$  与  $M_{11}$ ,  $M_{44}$  与  $M_{33}$  的变化规律类似, 本文不再赘述.

## 4. 结 论

利用离散偶极子近似方法研究了由蒙特卡罗方法模拟的随机分布的烟尘簇团粒子的散射特性, 给出了不同入射波长情况下烟尘簇团粒子的缪勒矩阵元素随组成簇团粒子的基本粒子的粒径和数目的变化关系. 研究表明, 随机分布的烟尘簇团粒子的缪勒

矩阵元素与组成簇团粒子的基本粒子的大小和数目的关系非常密切. 根据缪勒矩阵元素( $M_{11}$ ,  $M_{12}$ ,  $M_{33}$ ,  $M_{34}$ )的散射角分布图, 我们可以确定出组成簇团粒子的基本粒子的数目以及粒径, 从而可以更深入地研究烟尘簇团粒子的形成机理及分形结构, 为研究簇团粒子的散射特性和形态学特性提供了一种行之有效的理论方法.

特别感谢美国普林斯顿大学的 B. T. Draine 教授向本文作者提供的 DDA 程序.

- 
- [ 1 ] Haynes B S, Wagner H G 1981 *Prog. Energy Combust. Sci.* **7** 229
- [ 2 ] Charalampopoulos T T 1992 *Prog. Energy Combust. Sci.* **18** 13
- [ 3 ] Dobbins R A, Megaridis C M 1987 *Langmuir* **3** 254
- [ 4 ] Holler S, Auger J C, Stout B, Pan Y, Bottiger J R, Chang R K, Videen G 2000 *Appl. Opt.* **39** 6873
- [ 5 ] Dobbins R A, Mulholland G W, Bryner N P 1994 *Atmospheric Environment* **28** 889
- [ 6 ] Bohren C F, Huffman E R 1983 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* ( New York : Wiley )
- [ 7 ] Purcell E M, Pennypacker C R 1973 *Astrophys. J.* **186** 705
- [ 8 ] Draine B T 1988 *Astrophys. J.* **333** 848
- [ 9 ] Draine B T, Flatau P J 1994 *Journal of the Optical Society of America A* **11** 1491
- [ 10 ] Jullien R, Botet R 1987 *Aggregation and Fractal Aggregates* ( Singapore : World Scientific Publishing ) p46
- [ 11 ] Samson R J, Mulholland G W, Gentry J W 1987 *Langmuir* **3** 272
- [ 12 ] Xing Z F, Hanner M S 1997 *Astronomy and Astrophysics* **324** 805
- [ 13 ] Wu J S, Krishnan S S, Faeth G M 1997 *ASME Journal of Heat Transfer* **119** 230
- [ 14 ] van de Hulst H C 1981 *Light Scattering by Small Particles* ( New York : Dover ) p46

# Numerical calculation of Mueller matrices of randomly distributed soot cluster agglomerates<sup>\*</sup>

Lei Cheng-Xin<sup>†</sup> Zhang Hua-Fu Liu Han-Fa

( School of Science ,Shandong University of Technology ,Zibo 255049 ,China )

( Received 20 January 2009 ; revised manuscript received 2 March 2009 )

## Abstract

Cluster-cluster aggregation model based on Monte Carlo method is used to simulate the structure of the fractal-like soot cluster agglomerates consisting of spherical primary particles and Mueller-matrix elements of fractal-like soot cluster agglomerates are calculated based on the discrete dipole approximation method. The numerical relations between the Mueller-matrix elements and the total number and the diameter of the primary sphere in agglomerate are discussed for different incident wavelengths ,which provides an effective theoretical method for studying the formation mechanism , structural characteristics and scattering characteristics of randomly distributed cluster agglomerates .

**Keywords** : soot clustered agglomerates , Mueller matrices , discrete dipole approximation method

**PACC** : 7220D , 7820

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 60371020 ).

<sup>†</sup> E-mail : chengxinlei@yahoo.com.cn