

文章编号: 0253-2239(2004)05-696-4

光复散射对消光法粒径测量的影响: 复散射模型与数值模拟

苏明旭¹ 任宽芳² Grehan G² 蔡小舒¹ Rozé C² Girasole T²

(¹ 上海理工大学颗粒与两相流测量技术研究所, 上海 200093
² LESP, UMR6614/CORIA, INSA de Rouen, BP 12, 76801 Saint Etienne du Rouvray, France)

摘要: 复散射效应在光散射颗粒测量中不仅重要,且尚未得到很好解决。采用蒙特卡罗方法,对不同的光波长,颗粒浓度以及接收器条件下的光复散射进行了数值模拟,数值算法程序经与四通量模型进行对比验证,数值结果与单散射条件的郎伯-比尔模型进行比较,进而讨论了复散射效应对消光法颗粒粒径测量影响。表明复散射对消光法颗粒测量的影响不仅取决于颗粒系自身的浓度,而且接收器的几何尺寸和接收位置起着非常重要的作用,减小颗粒介质厚度和减小光接收器接收面积,增大接收距离以及减小接收角都能减小复散射效应对消光法粒径测量的影响。

关键词: 物理光学; 光散射; 蒙特卡罗方法; 粒度测量

中图分类号: TN96 文献标识码: A

The Affect of Light Multiple Scattering on Particle Sizing by Using Light Extinction Method

Su Mingxu¹ Ren Kuangfang² Grehan G² Cai Xiaosu¹ Rozé C² Girasole T²

(¹ Institute of Particle and Two Phase Flow Measurement, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093
² LESP, UMR 6614/CORIA CNRS-Université & INSA de Rouen 76801 Saint Etienne du Rouvray, France)

(Received 3 February 2003; revised 18 April 2003)

Abstract: By using Monte Carlo method, author present an exact prediction of light transmittance in multiple scattering condition for different configuration: concentrations, wavelengths and size and receiving angle of the detector. The program is verified by comparing with four-flux model. With comparison to the prediction of the Lambert-Beer law, how the multiple scattering influences the result of particle sizing is discussed. Decreasing area of detector, limiting the collection angle and increasing the distance from plane of media to detector can weaken the effect of multiple scattering on particle sizing.

Key words: physical optics; light scattering; Monte Carlo method; particle sizing

1 引 言

利用消光法等光散射方法测量颗粒粒径,无论在理论还是技术上已经趋于成熟,消光法基于对光通过颗粒离散介质后的消光谱进行测量,并由谱信息反演

得到颗粒分布,其核心是郎伯-比尔模型^[1]。该模型的一个重要前提就是光的单散射条件,而在颗粒浓度较大时,会不可避免的遇到光复散射情况——部分颗粒并不暴露在原始入射光线中,它们对其它颗粒的散射光再次进行散射。对于复散射效应的强弱,通常可根据光学厚度 $b(=NC_{\text{ext}}Z)$ 来表征,它是颗粒吸收散射特性 C_{ext} ,颗粒浓度 N 和介质厚度 Z 的综合反映。但是光学厚度 b 仅仅反映了颗粒系本身特点,未能体

E-mail: sumingxu2002@yahoo.com

收稿日期:2003-02-03;收到修改稿日期:2003-04-18

现光信号接收条件这一重要因素,因此更为准确的描述,必须借助光复散射理论模型,它们对于判定复散射对消光法颗粒粒度测量影响,乃至发展复散射条件的颗粒测量技术是至关重要的。

2 蒙特卡罗方法

蒙特卡罗方法^[2,3]用于光复散射数值模拟的核心思想就是用概率方法替换光散射过程,具体说,就是将入射光按照“光子”概念离散化处理(此概念不同于通常所说的光子,这里并没有考虑其动量和能量,而仅描述其与颗粒作用后的吸收,散射过程),光子在颗粒系中的单次散射过程,可以由消光效率 $k_{\text{ext}} = N C_{\text{ext}}$, 反照率 $a = C_{\text{sca}} / C_{\text{ext}}$ (即反照率散射截面与消光截面之比), 和相函数 P 确定。光子在两次散射之间的行程 l , 可以用一个在 $[0, 1]$ 区间的随机数 r_1 表示

$$l = -\frac{\ln r_1}{k_{\text{ext}}}. \quad (1)$$

同样,可以用另一个随机数 r_2 来判断该光子是否被吸收,即当 $r_2 \geq a$ 时,光子被吸收,反之则散射,光子散射方向由相函数决定,文中使用 Henyey-Greenstein 相函数 P_{HG} ^[4]

$$P_{\text{HG}}(\cos \theta) = \frac{a(1-g^2)}{(1+g^2-2g\cos \theta)^{3/2}}, \quad (2)$$

其中, θ 为散射角 g 称非对称因子,等效于相函数在不同方向上的权平均效果。

除了蒙特卡罗方法外,四通量(多通量)模型^[5~7]亦可用于光复散射的数值模拟。与四通量模型比较,蒙特卡罗方法的最大优点(如图 1 所示)在于能对复杂的几何结构;不同的光源(包括准直,发散,汇聚入射,不同尺寸的圆或方形光源等);介质中

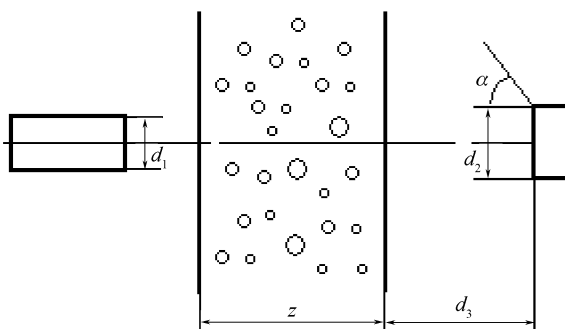


Fig. 1 Geometry of Monte Carlo method: collimated light source diameter d_1 , media thickness Z , the distance from plane of media to detector d_3 , diameter of the detector d_2 and collection half angle α

颗粒尺寸及分布,属性(如折射率)都可以用概率方法加以处理;不同的接收器位置、尺寸、角度,甚至三维结构进行数值模拟,这使得蒙特卡罗方法能够模拟更真实的情况。

3 数值模拟

我们发展了一个基于 FORTRAN 语言程序,可以模拟所有前述的光复散射情况。对蒙特卡罗法而言,数值模拟的精度很大程度上决定于是否满足统计效果,所以计算中选择适当的光子数尤为重要,太少的光子数目可能导致计算可靠性降低,而光子数目增大则会使计算时间递增(蒙特卡罗方法的计算通常是很耗时的),经过考核,我们选择了 100 万的光子数目。

本文中,选取水滴在空气中的离散介质为计算对象。图 2 为程序流程图,可描述为程序运行,计算参量 a, b, g 和相函数,并发射一个光子,使其运动至

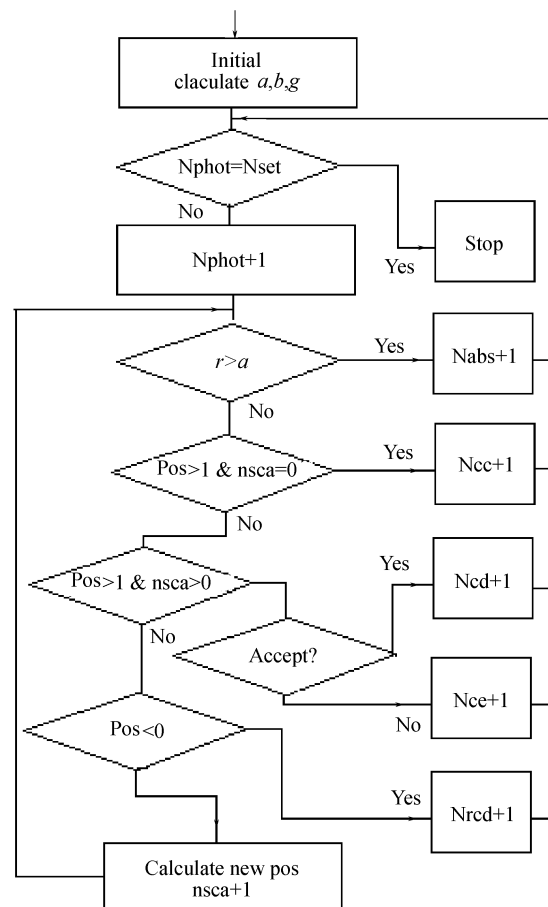


Fig. 2 Algorithm of the code for Monte Carlo method: the travel, absorption, scattering, collection and escape of photons are processed according to the probability

碰撞一颗粒止,判定此过程中光子的吸收,以及是否到达界面被接收或逃逸,如有,做相应处置后可发射新光子,如无上述现象(即原光子仍存活),则计算光子新的运动方向并继续上述过程。

图 3 反映算例中 3 个关键参量变化情况,反照率 a 定义为散射截面与消光截面之比,由于忽略水滴颗粒吸收作用,这里恒为 1;光学厚度 b 随光波长增加(等效于颗粒粒径减小)而相应减小,复散射效应减弱;非对称因子 g 减小,表明此时光散射前向效应减弱。

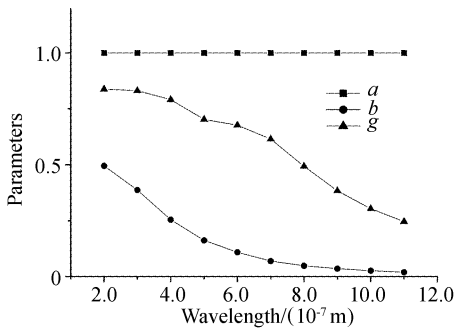


Fig. 3 The parameters used in simulation; calculated by using Lorenz-Mie theory (particle radius $R = 0.2 \mu\text{m}$, $N = 10^{14} \text{m}^{-3}$)

为校验蒙特卡罗程序,我们将其与四通量模型进行对比(四通量数值模拟可参见文献[2, 5~7]),为此选定完全相同模拟条件,如相同的颗粒大小和光波长,并认为所有前向散射光都可以被探测器收集到。光透射率结果比较见图 4,表明蒙特卡罗法和四通量模型的计算结果吻合得相当好。

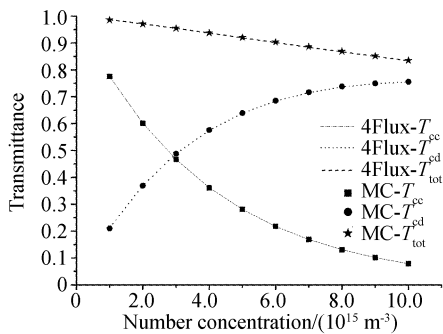


Fig. 4 The verification of Monte Carol method by comparison with Four-Flux model ($R = 0.2 \mu\text{m}$, wavelength $\lambda = 0.4 \mu\text{m}$)

图 4 中由于假定了所有前向散射光都被接收,与实际接收情况是相差很大的,下面我们考虑具有不同接收尺寸和接收距离以及接收角的情况。

图 5 中的透射率仅指代被接收器(参见图 1)所能接收到的光能,可以发现,实际接收器所接受的光

透射率与按通过界面上的整体光通量定义透射率(图 4)相差甚多,除非对前向光线采用积分球收集测量。由于复散射效果,使得接收器实际接收到的光能透射率 T_{tot} 大于准直光透射率 T_{cc} (准直光透射率 T_{cc} 即为郎伯-比尔模型预测结果),增大接收器尺寸可明显的接收到更多散射光能。随颗粒浓度的递增,复散射效果明显加强,这时前向接收的准直透射率 T_{cc} 和实际接收透射率 T_{tot} 都相应减小,而且散射光在总体接收光能中的比例更大。图 6 中,接收距离 d_3 从 2 mm 增加至 5 mm 后,接收到的散射光明显越少,当接收角从 0° 增大 5° 时,透射率几乎没有改变,可判定当前接收到的大部分散射光呈离轴发散效果。而当颗粒数目浓度大于 10^{15} 后,散射透射率 $T_{\text{cd}}(d_3=2, \alpha=5^\circ)$ 将超过准直透射率 T_{cc} 。此时复散射将会严重影响消光法粒径测量结果。

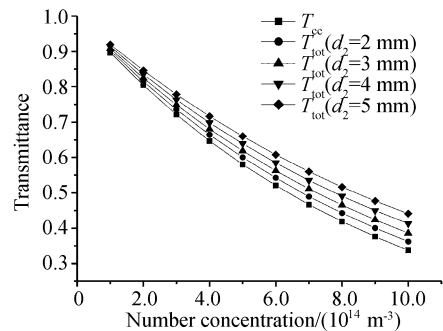


Fig. 5 Total transmittance received by detector in different detector diameters d_2 ($R = 0.2 \mu\text{m}$, $\lambda = 0.4 \mu\text{m}$, $d_1 = 1 \text{mm}$, $d_3 = 5 \text{mm}$, $\alpha = 15^\circ$)

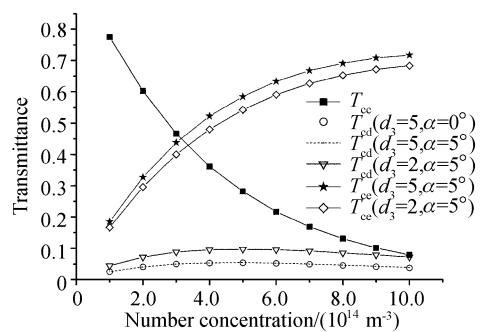


Fig. 6 Total transmittance received by detector in different collection half angles α and distance d_3 ($R = 0.2 \mu\text{m}$, $\lambda = 0.4 \mu\text{m}$, $d_1 = 2 \text{mm}$, $d_2 = 2 \text{mm}$)

上述分析表明,要减小复散射效应对消光法测量中的影响,可从两个方面着手:减小离散介质中颗粒浓度 N 和介质厚度 Z ,可明显减弱复散射效果(即减小了光子与颗粒发生碰撞的概率),增大光波长(或对应小颗粒情况)复散射效应亦更弱;而更重要的一方面,是限定测量条件,减小接收器的尺寸,

增大接收器的接收距离,甚至采用针孔等特定方法限制散射光的接收,并增加探测器灵敏度,亦可在即便有复散射的条件下进行消光法颗粒测量。

结论及展望 本文中利用蒙特卡罗方法对光复散射进行数值模拟,并据此初步讨论了复散射效应对颗粒测量中的影响。本文结果表明,借助蒙特卡罗方法可以对特定颗粒系以及测量条件给出复散射效果的量化标准,为减小复散射对消光法测量影响提供可靠理论依据。

同时,要在复散射条件下,有效地运用消光法对颗粒粒度进行测量,除测量手段和技术外,还不可避免会涉及到反演技术,目前发展的基于第一类弗雷德雷姆方程求解的反演方法,或非负最小二乘法曲线拟合都可能解决这一问题,将是后续工作要讨论的内容。

本文工作得到了法国驻华使馆提供博士后研究资金和 ADEME Priméqual 2 研究项目资助,研究过程中作者曾得到浙江大学王飞,陈玲红两位老师的帮助,谨此表示感谢。

参 考 文 献

- 1 Cai X S, Wang N L. Determination of particle size distribution using the light extinction method. *Advanced Powder Technol.*, 1992, **3**(3):153~162
- 2 Czewinski M *et al.*. Light transmittance prediction under multiple-light-scattering conditions. 1. Direct Problem; Hybrid-method approximation. *Appl. Opt.*, 2001, **40**(9):1514~1524
- 3 Briton J P, Maheu B, Gouesbet G *et al.*. Monte-Carlo simulation of multiple scattering in arbitrary 3-D geometry. *Part. Part.-Syst. Charact.*, 1992, **9**:52~58
- 4 Kerker M. *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*. New York: Academic Press, 1969
- 5 Ren Kuangfang. *The Study of Inversion on Particle Size and Concentration Using Modified Four-Flux Model* (用修正的四通量理论研究粒子直径及浓度的反演). [MS Dissertation]. Xi'an: Xidian University, 1987. 22~30 (in Chinese)
- 6 Claude Rozé *et al.*. Average crossing parameter and forward scattering ratio values in four-flux model for multiple scattering media. *Opt. Commun.*, 2001, **194**: 251~263
- 7 Wang Y P, Wu Z S, Ren K F. Four-Flux model with adjusted average crossing parameter to solve the scattering transfer equation. *Appl. Opt.*, 1989, **28**(1):24~26

告《光学学报》投稿者

今年以来,《光学学报》来稿量翻番,而发表容量基本不变,造成《光学学报》的发表周期过长。为了尽快缩短发表周期,提升《光学学报》的学术质量,从现在开始,大幅度提高录用水准,把《光学学报》办成刊登优质学术论文的品牌期刊。

录用的具体要求如下:

- 1) 创新性明显:物理思想新或所用方法新,结果新;
- 2) 可信性强:研究背景交代清楚,引用相应文献完整;
- 3) 实验数据丰富完整,详实可靠;理论分析参量、假设条件已清楚列出;
- 4) 理论分析详尽,深入透彻;并曾从多方面加以考虑、验证过;研究内容足以证明结论;
- 5) 研究结果具有足够的学术价值和普遍意义,在本分支学科或光学领域将会有一定影响;
- 6) 论文撰写条理清楚,重点突出,语言简洁,篇幅适中,摘要、关键词、字符、公式书写、图表、参考文献等均符合《光学学报》征稿简则中所载明的 10 项要求。

《光学学报》编辑部
2003 年 11 月 20 日

更 正

本刊 24 卷第 2 期目录和第 225 页中文题“用于二维光址分多址系统的代数同余码研究”应为“用于二维光码分多址系统的代数同余码研究”,特此更正。