

蒙特卡罗追踪光子的散射方向确定及 两种追踪模式比较

杜永成 杨立

(海军工程大学动力工程学院, 湖北 武汉 430033)

摘要 通过对米氏累积概率分布函数(CPDF)进行自定义函数拟合,设计了一种获取显式 CPDF 的方法。通过对比分析事件法和权值法两种光子追踪模式的效率,证明了两种方法的计算耗时与样本容量成线性关系。事件法的计算速度要优于权值法,但权值法的收敛性要明显优于事件法。在达到相同收敛标准的前提下,权值法的样本容量可以比事件法小 1~2 个数量级;权值法阈值选取对计算精度和计算时间的影响主要发生在当阈值大于计算对象 1/100 时。总体讲权值法的计算效率要优于事件法。

关键词 散射;光子传输;抽样统计;各向异性散射;追踪模式;蒙特卡罗法

中图分类号 O436.2; TB13 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.0829002

Confirm of Scattering Direction and Comparison of Two Modes in Monte Carlo Photons Tracking

Du Yongcheng Yang Li

(College of Power Engineering, Naval University of Engineering, Wuhan, Hubei 430033, China)

Abstract A method is designed for acquiring the explicit cumulative probability distribution function (CPDF) based on curve fitting with a user defined function. By comparing and analyzing the efficiencies of two photons tracking modes named event method and weight method respectively, the relationship between sample size and calculation time in the two modes is found to be linear. The calculation speed of event method is faster than that of weight method, but the convergence of weight method is better than that of event method obviously. To achieve the same convergence standard, the sample size of weight method required can even be 1~2 orders of magnitudes less than that of event method. The influence of threshold value on the calculation accuracy and time of weight method always happens when the threshold value is larger than one percent of the computing object, and generally speaking, the calculation efficiencies of weight method are better than that of event method.

Key words scattering; photons transmission; sampling statistics; anisotropic scattering; tracking modes; Monte Carlo method

OCIS codes 290.4020; 290.4210; 290.5850; 030.5290; 030.5620

1 引 言

蒙特卡罗方法(MCM)在光电子传输、辐射热交换、颗粒运动等诸多领域应用广泛^[1-3]。在工程领域,光的传输往往采用基于单次散射线性叠加的指数衰减定律(LBL),但当多重散射较为明显时这种方法是不适用的^[4-5]。MCM 在解决光传输问题上

灵活方便^[6],且可以充分考虑多重散射,因而得到广泛应用。

MCM 模拟光传输很重要的一个环节是散射方向的确定^[7]。通过随机试验的方法获取光子各向异性散射的天顶角坐标需建立归一化散射相函数的累积概率分布函数(CPDF),再通过求 CPDF 的反函数

收稿日期: 2013-03-11; **收到修改稿日期**: 2013-04-08

基金项目: 国防预研基金(1010502020202)

作者简介: 杜永成(1985—),男,博士研究生,主要进行红外光谱隐身方面的研究。E-mail: dycheng@yeah.net

导师简介: 杨立(1962—),博士,教授,博士生导师,主要从事传热传质热流体学应用及量测方面的研究。

E-mail: lyang39@hotmail.com

来获取天顶角 θ_s 。但由于精确的米氏相函数并不能用显式表示,因此上述方法难以实现。为了解决该问题,很多研究采用近似的显式相函数,而应用最多的是基于不对称因子 g 并以天顶角余弦 $\mu = \cos \theta_s$ 为自变量的 H-G 相函数^[8-9],但该方法的计算精度比较低。文献[10-11]给出了一种基于米氏相函数的相对精确的方法,主要是通过建立离散的 CPDF 与散射角度间的关系数据库来反求散射角度,该方法在分辨率较高时会导致计算量大。

利用 MCM 追踪记录光子在粒子系中的传输,常用的方法有两种:1)将每个光子赋予初始权值 $\omega_i = 1$,认为光子与粒子碰撞时同时产生吸收与散射,每次碰撞之后 ω_i 都会相应的衰减,通过 ω_i 与一个阈值的比较来确定光子是否湮灭^[12-14];本文将这种方法称作权值法(WM);2)将光子与粒子的一系列碰撞视为独立事件,而将光子每次碰撞产生的散射与吸收视为相互排斥事件,根据伪随机数 ξ 与单次反照率 a 的关系决定光子是否湮灭^[15-16];本文将这种方法称作事件法(EM)。虽然这两种方法都应用广泛,但是它们的效率对比以及使用选择却缺乏参考资料。本文旨在设计一种简易的散射方向获取方法,并确定两种光子追踪模式的效率优劣,分析阈值选取对权值法计算精度和计算时间的影响。

2 物理模型

建立一个光子在粒子系中传输—反射—传输的物理模型,如图 1 所示。以脉冲激光垂直入射一个厚度为 d 的无限扩展粒子系为例,入射平面为 $x-y$ 平面(无限扩展平面);入射点为坐标原点 O ,位于 $x-y$ 平面中心;光子初始运动方向沿 z 轴;初始入射方向为天顶角正方向,天顶角范围为 $(0, \pi/2)$,反射方向为天顶角负方向,天顶角范围为 $(\pi/2, \pi)$;反射壁面为不透明朗伯体,即反射为漫反射,漫反射率为 ρ_L ;水雾粒子服从对数正态分布,光学参数的计算方

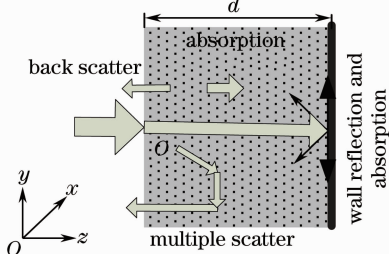


图 1 光子传输示意图

Fig. 1 Diagram for photons transmission

法同文献[11]。计算对象为粒子系对入射脉冲激光的表现反射率 ρ_A ,定义 ρ_A 为入射激光经水雾后向散射 E_b 、多重散射 E_m 及壁面反射 E_w 等所形成的在 $\pi/2 \sim \pi$ 的范围内有效激光能量与入射激光能量的比值,即

$$\rho_A = (E_b + E_m + E_w)/E_{in}. \quad (1)$$

3 蒙特卡罗模型

3.1 轨迹模型

设光子在全局坐标系和当地坐标系内的方向坐标分别为 (θ, φ) 和 (θ_s, φ_s) 。一般而言,粒子在天顶角方向为各向异性散射,而在方位角坐标上为各向同性,因此散射后方位角 $\varphi_s = 2\pi\xi_1$,其中 ξ_1 为伪随机数。天顶角的坐标确定需根据散射相函数计算,即 $P(\theta_s) = 4\pi\alpha(\theta_s)/\sigma_{scn}$,其中 $\alpha(\theta_s)$ 和 σ_{scn} 分别为角散射截面和散射截面。该 $P(\theta_s)$ 是一个无量纲量,满足归一化条件

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi P(\theta_s) \sin \theta_s d\theta_s = 1; \text{ 则 CPDF 为 } \xi_2 = F(\theta_s) = \frac{1}{2} \int_0^{\theta_s} P(\theta_s) \sin \theta_s d\theta_s, \theta_s \in (0, \pi), \text{ 所以 } \theta_s = F^{-1}(\xi_2).$$

光子在粒子系某点以全局方向坐标 (θ, φ) 入射并发生散射产生当地方向坐标 (θ_s, φ_s) ,则散射后的全局方向坐标 (θ', φ') 为

$$\begin{aligned} \theta' &= \arccos(\cos \theta_s \cos \theta + \sin \theta_s \sin \theta \cos \varphi_s), \\ \varphi' &= \begin{cases} \varphi + \arctan(\sin \theta_s \sin \varphi_s / \epsilon), & \epsilon > 0 \\ \varphi + \arctan(\sin \theta_s \sin \varphi_s / \epsilon) + \pi, & \epsilon < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

式中

$$\epsilon = \cos \theta_s \sin \theta - \sin \theta_s \cos \varphi_s \cos \theta. \quad (4)$$

光子在粒子系内的随机步长^[5,8-9] $l = -\ln(1 - \xi_3)/k_{ext}$,其中 k_{ext} 为消光系数。光子由位置 n 运动到位置 $n+1$,则第 $n+1$ 位置的坐标可表示为

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + l \sin \theta \cos \varphi \\ y_{n+1} = y_n + l \sin \theta \sin \varphi \\ z_{n+1} = z_n + l \cos \theta \end{cases} \quad (5)$$

若位置坐标 $z \geq d$,则光子将与壁面边界发生作用;若 $z < 0$,则光子逸出粒子系。经过方向坐标与位置坐标的确定与记录,可完成对所有光子的追踪。

3.2 散射方向的确定方法

基于米氏理论计算的 $F(\theta_s)$ 不能表达为显式,只是一组离散数据,因此无法通过求反函数的方法来获取天顶角。通常采用近似的显式相函数来解决该问题,其中应用最多的是 H-G 相函数,即

$$P_{\text{H-G}}(\mu) \approx (1 - g^2)/(1 + g^2 - 2g\mu)^{3/2}, \quad (6)$$

则

$$\theta_s = \arccos[F_{\text{H-G}}^{-1}(\xi_2)] = \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1 - g^2}{1 + g^2 - 2g\xi_2} \right)^2 \right]. \quad (7)$$

H-G 相函数作为近似式被广泛应用并非因其准确性,而是因为 H-G 相函数是通过米氏相函数的数学变换与近似得来的^[11],具有一定的合理性,同时运用方便。但 H-G 相函数在 $(0, \pi)$ 范围内是单调函数,而精确的米氏相函数并非单调。米相函数和 H-G 相函数的对比如图 2(a)、(b)两图所示,可以看到 H-G 相函数具有一定的误差。考虑到 CPDF 极其符合对数函数的曲线样式,定义目标函数为

$$F(X) = [\lg(X)]^\eta, \quad (8)$$

式中, $X \in (1, 10)$, 则 $F(X) \in (0, 1)$, 满足 CPDF 对值域的要求; η 为待定参数。 X 与天顶角 $\theta_s \in (0, \pi)$

可建立线性对应关系,即

$$X = \frac{9}{\pi}\theta_s + 1, \quad (9)$$

由(8)式和(9)式可得

$$F(\theta_s) = \left[\lg\left(\frac{9}{\pi}\theta_s + 1\right) \right]^\eta, \quad (10)$$

将 $F(\theta_s)$ 与伪随机数 ξ_2 建立对应关系,通过求反函数可获取相应的天顶角为

$$\theta_s = F^{-1}(\xi_2) = \frac{\pi}{9}(10^{\xi_2^{1/\eta}} - 1). \quad (11)$$

基于最小二乘原理,待定参数 η 可以用 Matlab 软件对(10)式进行曲线拟合求得。如图 3(a)所示, H-G CPDF 会使得前向散射剧烈,与米氏 CPDF 误差较大,而拟合的 CPDF 则更接近米氏 CPDF。通过大量的数据拟合发现,待定系数 η 与不对称因子 g 近似存在着线性关系,如图 3(b)所示。

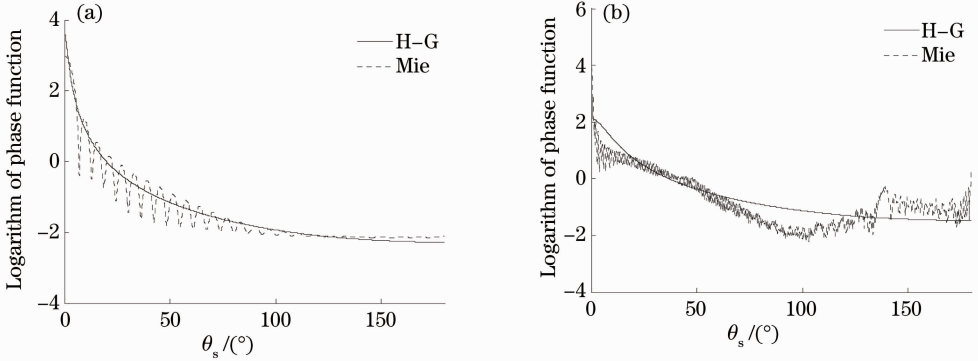


图 2 米氏相函数和 H-G 相函数的对比。(a) $\lambda=1.06 \mu\text{m}$, $r=50 \mu\text{m}$; (b) $\lambda=10.6 \mu\text{m}$, $r=50 \mu\text{m}$

Fig. 2 Comparison of Mie and H-G phase function. (a) $\lambda=1.06 \mu\text{m}$, $r=50 \mu\text{m}$; (b) $\lambda=10.6 \mu\text{m}$, $r=50 \mu\text{m}$

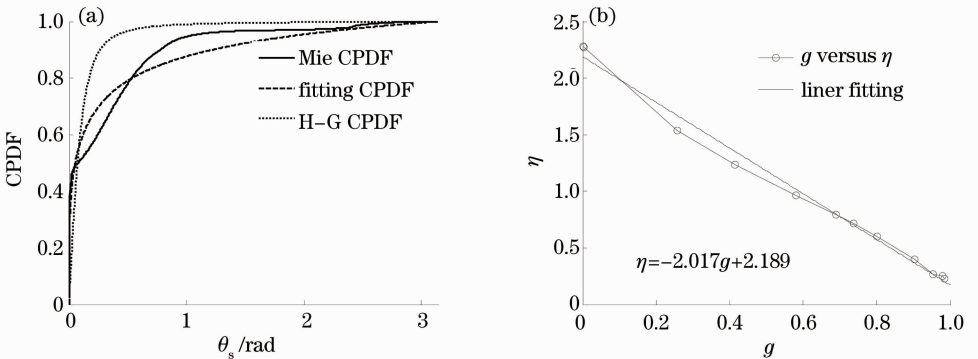


图 3 自定义函数拟合 CPDF。(a) Mie、Fitting 及 H-G CPDF 的对比; (b) 待定参数 η 和不对称因子 g 间的关系

Fig. 3 Fitting CPDF with user defined function. (a) Comparison among Mie, Fitting and H-G CPDF; (b) relationship between unknown parameter η and asymmetry g

3.3 光子追踪模式的对比分析

根据 WM 的思想,每一个光子被赋予初始权值 $\omega_d = 1$, 并设定一个判定光子湮灭的阈值 γ (γ 值往往是取一个极小值,比如 $\gamma = 10^{-10}$); 光子每与粒子碰

撞一次将同时产生吸收与散射,碰撞之后光子权值变为 $\omega_{d,n+1} = a \cdot \omega_{d,n}$, 其中 a 表示雾滴散射的单次反照率, $a = \kappa_{\text{sca}}/\kappa_{\text{ext}}$; 当 $\omega_d > \gamma$ 时,表示光子没有湮灭,若光子没有逸出粒子系则循环继续;若 $\omega_d < \gamma$ 则认

为该光子湮灭,循环终止。EM 是将光子单次碰撞的散射与吸收视为互相排斥事件,两者发生的概率分别为 a 和 $1-a$ 。根据伪随机数 ξ_i 与单次反照率 a 的关系决定发生吸收与散射事件的一种:若 $\xi_i \geq a$,则发生吸收事件,认为光子湮灭,循环终止;若 $\xi_i < a$,发生散射事件,若光子未逸出,则循环继续。

在边界上,当光子碰撞到漫反射率为 ρ_L 的朗伯体壁面时,对于 WM 有: $\omega_{d,n+1} = \rho_L \omega_{d,n}$; 对于 EM 有: 若 $\xi_5 < \rho_L$,光子被反射;若 $\xi_5 \geq \rho_L$,光子被吸收,循环终止。

两种方法的收敛性采用相对标准偏差(RSD)来评价,而 WM 因阈值选取产生的精度问题则用相对误差(ϵ_r)来评价。为了准确反映 WM 和 EM 的计算效率,在计算实例中单独进行光学参数 [$\alpha(\theta_s)$ 、

σ_{sca} 、 k_{ext} 和 a 等]的计算过程,并且避免大型稀疏矩阵的出现。

3.3.1 WM 和 EM 收敛性、计算耗时与样本容量的关系

WM 和 EM 计算耗时及收敛性与样本容量的关系,如图 4(a)、(b)所示,可见两种方法的计算耗时都与样本容量呈线性递增的关系;在相同样本容量下,WM 的计算耗时要明显大于 EM,但 WM 的收敛性要明显好于 EM;在本例中,EM 计算耗时约为 WM 的 1/3,但达到相同的收敛标准(即相同的 RSD)WM 的样本容量可以比 EM 要小 1~2 个数量级,这主要是因为 WM 中每个光子都对计算对象有贡献,使得计算的随机性降低,从这个角度来讲,WM 的模拟效率更高。

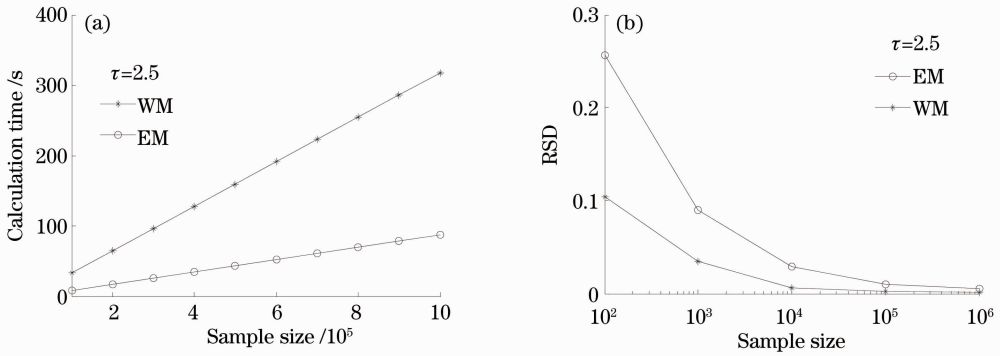


图 4 WM、EM 的(a)计算耗时及(b)收敛性与样本容量的关系

Fig. 4 (a) Calculation time and (b) convergence of WM and EM versus the sample size

3.3.2 WM 阈值选取对精度与计算耗时的影响

以 EM 在容量样本为 1×10^6 时的抽样统计结果作为精确值(两个计算实例的光学厚度分别为 1.5 和 2.5),以不同阈值 γ 下的抽样结果与精确值的相对误差(ϵ_r)小于 1% 作为判定 γ 选取成功的标准。如图 5(a)所示,当 γ 取极小值时,比如本例中 $\gamma \in (10^{-15}, 10^{-5})$,并不能实质性的提高计算精度,因为

MCM 本身存在的统计误差大于因 γ 值所产生的相对误差,只要 γ 值比计算对象(在本文中为表观反射率 ρ_A)小 1~2 个数量级便可足够保证计算精度。由图 5(b)知,当 γ 选取较大时(大于计算对象的 $1/100$),WM 的计算时间随着 γ 值的减小而增大,但当计算对象 ρ_A 趋于定值时计算时间也趋于定值;而由图 5(c)可见,WM 的计算时间随相对误差的减小

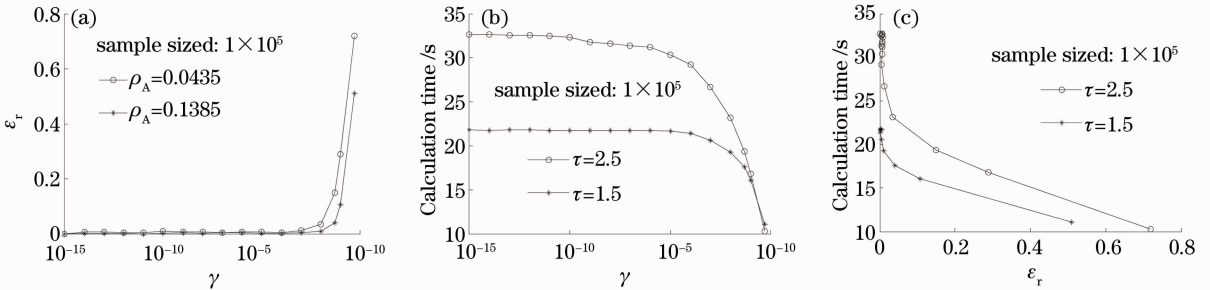


图 5 阈值选取对计算精度和计算时间的影响。(a)相对误差与阈值的关系;(b)计算时间与阈值的关系;(c)计算时间与相对误差的关系

Fig. 5 Influence of the threshold to the accuracy and time of the calculation. (a) Relative error versus threshold; (b) calculation time versus threshold; (c) calculation time versus relative error

而增大,当相对误差趋于定值时,计算时间也趋于定值。对于由图 5(a)~(c)所得结论实际可以描述为:当光子湮灭阈值大于计算对象的 1/100 时,计算时间随阈值的减小而增大,计算精度相应提高;当阈值小于计算对象的 1/100 时,计算时间随阈值的继续减小基本不变,计算精度也没有实质的提高。

4 结 论

主要研究了蒙特卡罗法模拟光子传输的两个问题:各向异性散射方向的确定以及两种光子追踪方法的效率比较,所得结论如下:

1) 基于 Matlab 软件的曲线拟合功能,通过对米氏 CPDF 进行自定义函数拟合获得了显式 CPDF;同时发现,自定义函数待定参数的拟合值与不对称因子 g 近似成线性关系,可以作为散射方向确定的一种简便方法;

2) 通过分析 WM 和 EM 两种光子追踪模式的原理,发现在不涉及到初始参数计算,不产生大型稀疏矩阵的情况下,两种方法的计算耗时与样本容量成线性关系,EM 的计算速度要好于 WM;但 WM 的收敛性要明显好于 EM,达到相同的收敛标准,WM 的样本容量往往可以比 EM 小 1~2 个数量级;

3) 阈值选取对 WM 计算精度和计算时间的影响主要发生在当阈值大于计算对象 1/100 时;当阈值大于计算对象的 1/100 时,计算时间随阈值的减小而增大,计算精度相应提高;当阈值小于计算对象的 1/100 时,计算时间随阈值的继续减小基本不变,计算精度也没有实质的提高;

4) 综合来讲,由于无限量的减小阈值并不实质影响计算耗时,并且 WM 使得问题计算的随机性降低,精度提高,因此更适宜工程计算。

参 考 文 献

- Zhang Lin, Li Xiaoxia, Qi Shengwen, *et al.*. Monte Carlo simulation of the focused beam propagation in a semi-infinite bio-tissue [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(4): 0417002.
张琳,李晓霞,祁胜文,等. 聚焦光束在半无限大生物组织内传播的 Monte Carlo 模拟[J]. *光学学报*, 2012, 32(4): 0417002.
- Xia Hui, Lin Xu, Xiao Yuanyuan, *et al.*. Monte-Carlo simulation of photon's transport properties in highly scattering media [J]. *Chinese J Lasers*, 2010, 37(12): 3019-3024.
夏辉,林旭,肖元元,等. 光子在高散射介质中传输特性的蒙特-卡罗模拟[J]. *中国激光*, 2010, 37(12): 3019-3024.
- Weimei Cai, Lin Ma. Improved Monte Carlo model for multiple

- scattering calculations [J]. *Chin Opt Lett*, 2012, 10(1): 012901.
- S Kumari, A K Nirala. Study of light propagation in human, rabbit and rat liver tissue by Monte Carlo simulation [J]. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 2011, 122(9): 807-810.
- S Roy, G A Ahmed. Monte Carlo simulation of light scattering from size distributed sub-micron spherical CdS particles in a volume element [J]. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 2011, 122(11): 1000-1004.
- Peng Bo, Ding Tianhuai, Wang Peng. Simulation and experiment of light scattering properties of textile fibers [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(8): 0829001.
彭波,丁天怀,王鹏. 纺织纤维光散射特性的模拟与实验 [J]. *光学学报*, 2012, 32(8): 0829001.
- Han Biao, Liu Jifang, Liu Kunlun, *et al.*. Study of backward optical detection method for ship wake bubbles [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(1): 0101001.
韩彪,刘继芳,刘昆仑,等. 舰船尾流气泡后向光学检测方法研究 [J]. *光学学报*, 2012, 32(1): 0101001.
- L H Wang, S L Jacques, L Steven, *et al.*. Mcm1-monte carlo modeling of light transport in multi-layered tissues [J]. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 1995, 47(2): 131-146.
- M Ilie, J C Kneip, S Mattei, *et al.*. Laser beam scattering effects in non-absorbent inhomogenous polymers [J]. *Optics and Lasers in Engineering*, 2007, 45(3): 405-412.
- B R Barkstorm. An efficient algorithm for choosing scattering directions in Monte Carlo work with arbitrary phase functions [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 1995, 53(1): 23-38.
- Tan Heping, Xia Xinlin, Liu Linhua, *et al.*. Numerical Calculation on Infrared Radiative Properties and Transfer-Calculating Thermal Radiation [M]. Harbin: Harbin Institute of Technology Press, 2006. 164.
谈和平,夏新林,刘林华,等. 红外辐射特性与传输的数值计算——计算热辐射学 [M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2006. 164.
- B Mayer, C Boutron. Radiative transfer in the cloudy atmosphere [C]. *EPJWeb of Conferences* 2008, 2009, 1: 75-99.
- N S Żołek, A Liebert, R Maniewski, *et al.*. Optimization of the Monte Carlo code for modeling of photon migration in tissue [J]. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 2006, 84(11): 50-57.
- Zhao Guoyan, Chang Haiping, Jin Feng, *et al.*. The determination of radiation spectrum based on Monte-Carlo method [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2009, 30(3): 54-58.
赵国艳,常海萍,金峰,等. 基于蒙特卡罗方法的辐射光谱的计算 [J]. *工程热物理学报*, 2009, 30(3): 54-58.
- H O Di Rocco, D I Iriarte, J A Pomarico, *et al.*. Acceleration of Monte Carlo modeling of light transport in turbid media; an approach based on hybrid, theoretical and numerical, calculations [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2009, 110(4): 307-314.
- Ma Changqun, Tang Zhenfang, Zhang Jie, *et al.*. Monte Carlo simulation of light multiple scattering in polymers [J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2007, 24(4): 457-462.
马常群,唐振方,张杰,等. 聚合物中多重光散射传导的 Monte Carlo 数值模拟 [J]. *计算物理*, 2007, 24(4): 457-462.