

生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型构建

胡以华^{1,2}, 黄宝昆^{1,2}, 顾有林^{1,2}, 赵义正^{1,2}

- (1. 脉冲功率激光技术国家重点实验室, 安徽 合肥 230037;
2. 电子制约技术安徽省重点实验室, 安徽 合肥 230037)

摘要: 针对当前军、民用领域对新型生物消光材料的需求, 将制备出的絮状颗粒等效为子弹玫瑰花型粒子, 将其作为单元颗粒构建不同结构的生物颗粒, 并对生物颗粒结构进行参数化表征, 采用离散偶极子近似法(DDA)计算生物颗粒远红外波段平均消光效率因子。结果表明: 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子与尺度因子和孔隙率成正相关。在研究平均消光效率因子与尺度因子和孔隙率关系的基础上, 构建了生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型, 计算时间较 DDA 法缩短, 计算误差在 10% 以内。模型的构建将为生物消光材料发展以及形态控制提供理论基础。

关键词: 生物颗粒; 消光效率因子; 远红外波段; 离散偶极子近似

中图分类号: O433.1; O436.2 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201847.1004003

Model construction of biological particles' average extinction efficiency factor in far infrared band

Hu Yihua^{1,2}, Huang Baokun^{1,2}, Gu Youlin^{1,2}, Zhao Yizheng^{1,2}

- (1. State Key Laboratory of Pulsed Power Laser, Hefei 230037, China;
2. Key Laboratory of Electronic Restriction, Hefei 230037, China)

Abstract: With the increasing demands for new biological extinction materials in military and civilian fields, the artificially prepared flocculent particles were equivalent to bullet rosette particles, which were further used to build the biological particles with different structures as a unit particle. And the structures of biological particles were characterized by parameterization. Then the discrete dipole approximation (DDA) method was used to calculate the average extinction efficiency factor for biological particles in the far infrared band. The results indicate that the average extinction efficiency factor of biological particles is positively correlated to the size factor and porosity in the far infrared band. Based on studying the relationship of average extinction efficiency factor with size factor and porosity, the biological particles average extinction efficiency factor model in the far infrared band was constructed. Using that model, the computation time was shorter than that of the DDA method, and the calculation error is less than 10%. The model provides a theoretical basis for the further development and morphology control of biological extinction materials.

Key words: biological particles; extinction efficiency factor; far infrared band; discrete dipole approximation

收稿日期: 2018-05-10; 修订日期: 2018-06-20

基金项目: 国家自然科学基金(61271353, 60908033); 安徽省自然科学基金(1408085MKL47)

作者简介: 胡以华(1962-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事空间光电信息处理方面的研究。Email: skl_hyh@163.com

0 引言

当前,传统的无机消光材料被广泛应用于航天、医药、军事等各个领域,但由于其材料类型固定、消光对象单一、持续时间短、环境危害大等不足^[1],在一定程度上制约了其长远发展。生物材料具有生产成本低、密度小、形态多样且可控、安全环保等优点,可作为一种新型消光材料,弥补传统无机消光材料的不足。生物材料由生物颗粒组成,这些生物颗粒往往并不是单体形状,而是一些小的单元颗粒由于静电、碰撞、黏附等作用形成的具有复杂空间结构和分形结构的随机取向聚集颗粒体系^[2]。研究生物材料的消光性能首先需要对生物颗粒的消光特性进行研究。由于实际生物颗粒结构的复杂性,不能按照单体理论计算其消光特性^[3]。构建生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型,将为生物消光材料远红外波段消光性能研究以及形态控制提供理论基础。

目前,针对聚集颗粒消光特性的研究已经取得了一些成果。Wu Y 等^[4-5]采用 T 矩阵法计算了规则形状烟尘颗粒聚集体的光学特性,采用离散偶极子近似法计算了不规则形状新鲜干碳烟颗粒聚集体的光学特性。Min M 等^[6]提出了一种方法计算复杂结构灰尘聚集颗粒的多波长消光特性。林莉^[7]采用广义 Mie 理论和多体 T 矩阵法计算了规则和不规则排列聚集颗粒的散射特性参数。在生物颗粒方面, Moskalensky A E 等^[8]构建了生物颗粒聚集模型,结合离散偶极子近似法计算了血小板细胞聚集体的光散射特性。赵欣颖等^[9]采用团簇—团簇凝聚模型(CCA)构建了微生物凝聚粒子,结合离散偶极子近似法计算了消光截面,使用蒙特卡洛法研究了微生物凝聚粒子群中激光的衰减特性,进行了实验验证。上述研究对于单元颗粒的建模,大部分将其等效为旋转对称且表面平缓变化的球体、椭球体、切比雪夫等颗粒。由于生物颗粒形态丰富多样,此种等效未将生物颗粒结构的多样性突显出来,不能逼真地表征多态生物颗粒。

针对一种人工制备絮状生物消光材料,为精确计算生物颗粒远红外波段平均消光效率因子,文中构建了单元颗粒模型以及单元颗粒在不同空间排列方式下的生物颗粒模型,采用离散偶极子近似法计算

了生物颗粒远红外波段平均消光效率因子,进而构建了生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型。

1 生物颗粒参数化表征

由于絮状生物单元颗粒分枝数多,分枝长短不一,结构较为松散,颗粒之间易于咬合。再加上颗粒之间碰撞、粘附作用的随机性,导致单元颗粒以一种随机排列的方式聚集在一起形成随机排列生物颗粒。构建生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型,首先需对其结构进行参数化表征。

1.1 离散偶极子近似法(DDA)和絮状生物单元颗粒几何描述模型

目前 T 矩阵^[10]、射线跟踪^[11]、有限时域差分^[12]以及 DDA^[13]等方法常被用于计算复杂结构粒子的消光参量。由于 DDA 法适用于计算任意形状、组分粒子的消光参量而得到广泛应用。其基本思想为:将任意形状、组分的粒子离散成等间距排列的偶极子阵列,这些偶极子通过入射电磁波辐射场的极化作用依次获得偶极矩^[14]。粒子的有效半径可由以下公式计算^[15]:

$$r_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{5}{3n} \sum_{i=1}^n |r_i - \langle r \rangle|^2} \quad (1)$$

式中: n 为偶极子个数,在使用 DDA 法构建单元颗粒形状时确定; r_i 为偶极子的相对位置; $\langle r \rangle$ 为粒子的中心位置。

课题组制备出某真菌菌丝类消光材料,图 1 为该生物材料显微镜图。由图 1 可以看出该絮状生物颗粒是由若干个大小不等的单元颗粒(如图中椭圆圈所示)聚集在一起形成的颗粒聚集体。颗粒聚集体空间尺寸从几微米到几百微米,该生物颗粒尺度范围分布极其广泛,能对多波长电磁波产生衰减作用。

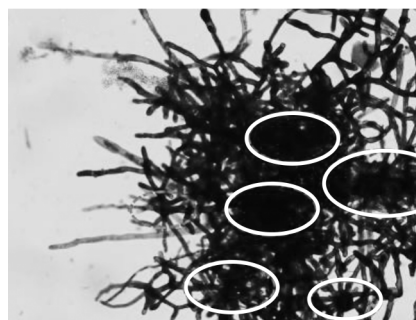


图 1 某生物材料光学显微镜图

Fig.1 Microscope image of a biological material

将图 1 中絮状单元颗粒等效为子弹玫瑰花型粒子,该结构可表示为^[16]:

$$r = [a \cos^{2\alpha}(m\theta) + c]^e [b \cos^{2\beta}(n\varphi) + d]^f \quad (2)$$

式中: $a, b, c, d, e, f, m, n, \alpha, \beta$ 为控制子弹玫瑰花型粒子形状和结构的变量。当 $a=b=-1, c=d=1, e=f=50, m=n=3, \alpha=\beta=2$ 时, 可得到一个 14 枝的子弹玫瑰花型粒子, 如图 2 所示。为简单起见, 对子弹玫瑰花型粒子进一步抽象简化, 将粒子分枝等效为圆柱加圆锥即尖角圆柱。尖角圆柱的个数为子弹玫瑰花型粒子的枝数 N 。分枝长度 L 和分枝半径 R 如图 3 所示。



图 2 一个 14 枝的子弹玫瑰花型粒子

Fig.2 A bullet rosette particle with fourteen branches

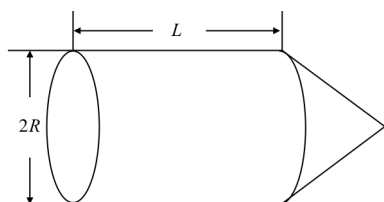


图 3 子弹分支结构参数

Fig.3 Idealized bullet structural parameters

1.2 生物颗粒的参数化表征

CCA 模型^[17]是一种常用的粒子凝聚模型。采用 CCA 模型生成生物颗粒如图 4 所示。图 4 为单元颗粒空间位置示意图, 不考虑单元颗粒分枝长度, 因此

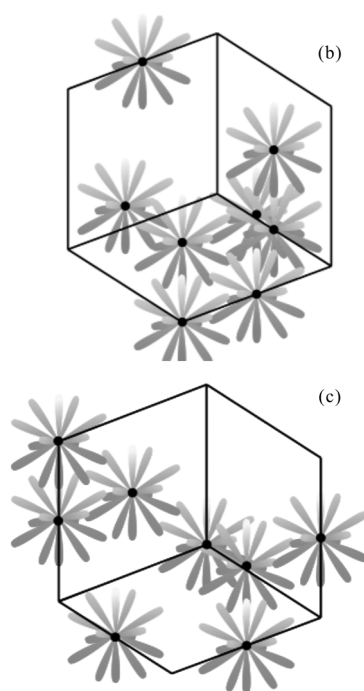
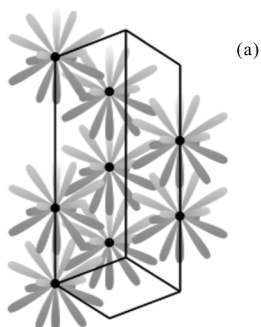


图 4 三种生物颗粒结构示意图

Fig.4 Schematic diagram of three biological particles

出现了单元颗粒脱离生物颗粒的情况。

对于生物颗粒, 描述参数包括: 单元颗粒数目 M ; 单元颗粒有效半径 r_{eff} , 可用公式(1)计算得出; 生物颗粒尺度因子 $\xi = \frac{L_{\text{max}}}{r_{\text{eff}}}$, 为生物颗粒在垂直于电磁波入射方向平面上投影截面最大长度的平均值 L_{max} 与单元颗粒有效粒径 $2r_{\text{eff}}$ 的比值; 单元颗粒相对坐标点; 生物颗粒孔隙率 P ^[18]。

孔隙率是指生物颗粒相互连通的微小空隙内的总体积与生物颗粒外表面体积的比值, 反映了生物颗粒的松散程度。采用如下公式^[19]计算:

$$P = 1 - M \left[\frac{r_{\text{eff}}}{\sqrt{\frac{5}{12}} \frac{1}{M^2} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M |r_i - r_j|^2} \right]^3 \quad (3)$$

式中: r_i 和 r_j 分别为第 i 个和第 j 个单元颗粒在空间中的相对坐标。

2 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型构建

采用 DDA 法计算生物颗粒的消光参量, 生物材料的复折射率至关重要。由于该生物材料在远红外

波段复折射率的变化不大,文中采用远红外波段平均复折射率计算。该生物材料远红外波段平均复折射率 m 为 $1.499\ 3+0.434\ 9i$, 满足 DDA 法的应用条件 $|m-1|\leq 2^{[20]}$ 。

2.1 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子计算

在文中以下所有计算中,单元颗粒数目 $M=8$,单元颗粒形态固定,分枝数目 $N=14$ 、分枝长度 $L=40\ \mu\text{m}$ 、分枝半径 $R=5\ \mu\text{m}$ 、有效半径 $r_{\text{eff}}=22\ \mu\text{m}$ 。构建如图 5 所示的六种结构的生物颗粒。

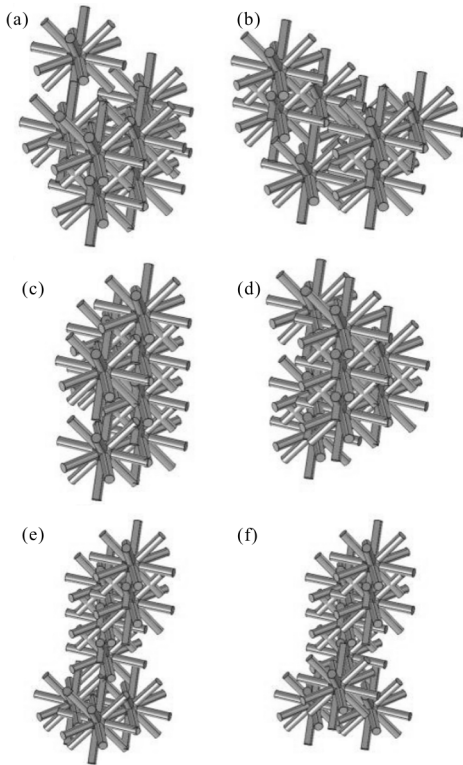


图 5 生物颗粒

Fig.5 Biological particles

生物颗粒描述参数如表 1 所示。

表 1 描述参数

Tab.1 Parameters of description

Aggregated particle	M	ξ	P	Relative coordinate point		
				x	y	z
(a)	8	4.242 6	0.835 7	2	1	0
				1	0	1
				1	0	0
				0	0	0
				0	0	1
				0	1	1
				2	1	1
1	2	2				

续表 1

Continued Tab.1

Aggregated particle	M	ξ	P	Relative coordinate point		
				x	y	z
(b)	8	4.242 6	0.881 7	2	2	0
				2	0	1
				1	0	1
				1	2	1
				0	2	1
				0	2	2
				1	0	0
0	1	0				
(c)	8	4.472 1	0.803 6	0	0	0
				1	0	0
				1	0	2
				1	0	1
				1	1	1
				1	1	2
				0	0	2
1	0	3				
(d)	8	4.472 1	0.813 3	0	1	0
				1	0	2
				1	0	1
				0	0	1
				0	1	3
				0	0	2
				0	0	3
0	1	1				
(e)	8	5.385 2	0.928 7	0	0	0
				0	1	0
				1	0	0
				1	1	1
				1	1	2
				1	0	3
				1	1	3
1	0	4				
(f)	8	5.385 2	0.914 9	0	0	1
				0	1	0
				1	0	0
				1	1	1
				1	1	2
				1	0	3
				1	1	3
1	0	4				

文中采用 DDA 法计算上述生物颗粒远红外波段平均消光效率因子,结果如表 2 所示。

表 2 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子

Tab.2 Average extinction efficiency factor of biological particles in far infrared band

Biological particle	Average extinction efficiency factor
(a)	6.523 1
(b)	7.182 3
(c)	6.734 8
(d)	6.915 7
(e)	7.830 6
(f)	7.579 1

由表 2 可以看出, 虽然上述生物颗粒的单元颗粒数目及单元颗粒描述参数均相同, 但由于单元颗粒位置不同, 使得生物颗粒的空间形态和取向完全不同, 从而导致和入射电磁波辐射场的相互作用不同, 生物颗粒的远红外波段平均消光效率因子有很大区别。同时, 在尺度因子相同的条件下, 生物颗粒在远红外波段的消光能力与孔隙率成正相关; 在孔隙率相同的条件下, 生物颗粒在远红外波段的消光能力与尺度因子成正相关。

2.2 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型构建

由上节可以看出, 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子与尺度因子和孔隙率密切相关, 为构建生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型, 针对性地进行了两组计算实验, 每组包含十种不同结构的生物颗粒, 采用 DDA 法计算它们在远红外波段的平均消光效率因子。组(1)固定生物颗粒的尺度因子 $\xi=4.472$ 1, 孔隙率不同; 组(2)固定生物颗粒的孔隙率 $P=0.911$ 5, 尺度因子不同。取它们的消光效率因子在远红外波段的平均值, 如表 3 所示。

表 3 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子

Tab.3 Average extinction efficiency factor of biological particles in far infrared band

Group (1) $\xi=4.472$ 1		Group (2) $P=0.911$ 5	
P	$Q_{ext,ave}$	ξ	$Q_{ext,ave}$
0.600 9	5.224 8	2.828 4	6.125 6
0.635 7	5.949 9	3.162 3	6.501 8
0.667 9	6.028 8	3.605 6	6.496 3
0.698 3	5.996 0	3.872 9	6.758 6
0.732 8	6.062 0	4.242 6	7.148 5
0.769 5	6.863 5	4.472 1	7.284 1
0.803 6	6.734 8	5	7.335 4
0.830 5	6.958 4	5.099 0	7.607 1
0.865 5	6.999 2	5.385 2	7.822 7
0.907 7	7.295 2	5.831 0	7.881 4

由表 3 可以看出, 在尺度因子一定的条件下, 生物颗粒的平均消光效率因子随孔隙率呈上升趋势。说明孔隙率越大, 生物颗粒的消光能力越好。这是因为生物颗粒结构越松散, 对入射电磁波的散射能力越强。为构建远红外波段平均消光效率因子与孔

隙率之间的关系, 对组(1)数据进行拟合。根据数值拟合结果, 在尺度因子一定的条件下, 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型为:

$$Q_{ext,ave} = -7.06P^2 + 16.7P - 2.1 \quad (0 < P < 1) \quad (4)$$

由表 3 还可以看出, 在孔隙率一定的条件下, 生物颗粒的平均消光效率因子随尺度因子呈上升趋势。说明尺度因子越大, 生物颗粒的消光能力越好。为构建远红外波段平均消光效率因子与尺度因子之间的关系, 对组(2)数据进行拟合。由 Mie 散射理论可知, 消光效率因子随散射颗粒尺寸呈非线性变化。根据数值拟合结果, 在孔隙率一定的条件下, 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型为:

$$Q_{ext,ave} = -0.0317\xi^2 + 0.872\xi + 3.93 \quad (0 < \xi < 13) \quad (5)$$

远红外波段平均消光效率因子随尺度因子和孔隙率变化趋势如图 6 所示。其中, Adjusted R^2 为调整的拟合优度, 它是表征模型对样本观测值拟合程度的量。Adjusted R^2 值越接近于 1, 表示拟合程度越好。由图中的 Adjusted R^2 值可以看出, 上述两次拟合程度均较好。

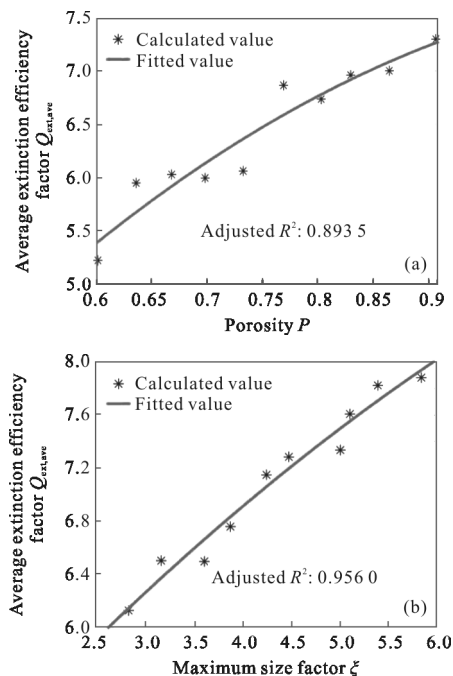


图 6 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子

Fig.6 Average extinction efficiency factor of biological particles in the far infrared band

综上所述, 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型为:

$$Q_{\text{ext,ave}} = -7.06P^2 + 16.7P - 0.0317\xi^2 + 0.872\xi + \varphi$$

$$(0 < P < 1, 0 < \xi < 13) \quad (6)$$

式中： φ 为常数，根据表 3 中数据可求得 20 组 φ 值，取平均值 $\varphi = -5.4038$ 。因此，生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型为：

$$Q_{\text{ext,ave}} = -7.06P^2 + 16.7P - 0.0317\xi^2 + 0.872\xi - 5.4038$$

$$(0 < P < 1, 0 < \xi < 13) \quad (7)$$

为验证该模型，对图 5 中六种生物颗粒采用公式(7)计算，其结果与 DDA 法计算值相比误差在 10% 以内，能够满足使用要求，体现了尺度因子和孔隙率对聚集颗粒消光性能的影响。因此公式(7)所示的生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型可用于快速计算生物颗粒消光效率因子，计算时间相比于 DDA 法大大缩短，能够对生物颗粒远红外波段消光能力进行有效评估和比较。

综上所述，生物颗粒远红外波段平均消光效率因子与尺度因子和孔隙率成正相关，可用公式(7)所示的生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型简化计算。文中所得模型适用于计算由该结构单元颗粒聚集形成的生物颗粒远红外波段平均消光效率因子，对于其他结构单元颗粒聚集形成的生物颗粒平均消光效率因子的计算，可采用同样方法拟合出 $Q_{\text{ext,ave}} = f(P, \xi)$ 即可。

3 结 论

生物材料因其独有的特性，可作为一种新型功能材料，弥补传统无机消光材料不足。将制备出的絮状单元颗粒等效为子弹玫瑰花型粒子，对生物颗粒进行参数化表征，DDA 法计算生物颗粒远红外波段平均消光效率因子，构建生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型。

(1) 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子与尺度因子和孔隙率成正相关；

(2) 由该结构单元颗粒聚集形成的生物颗粒远红外波段平均消光效率因子可用公式(7)所示的生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型快速计算，计算时间相比于 DDA 法大大缩短，与 DDA 法相比计算误差小于 10%。

上述结论可用于指导如何改变生物颗粒结构，提高生物消光材料远红外波段的消光性能，例如施

放材料时通过加大空气湿度的方法使生物颗粒大量聚集提高生物颗粒尺度因子等方法提高消光性能。实际上生物颗粒尺寸变化更大，结构更为复杂，聚集类型更为多样，单元颗粒形态更加丰富多变。文中旨在提出一种表征生物颗粒并快速计算其消光效率因子的方法，用来丰富电磁衰减技术的类型，拓展消光材料的来源，为生物材料消光性能研究以及生物消光材料形态控制等一系列后续工作提供理论基础。

参考文献：

- [1] Liu Hongxia. Preparation and spectral characteristics of electromagnetic attenuation microbial materials [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2015. (in Chinese)
刘红霞. 电磁衰减微生物材料的制备和光谱特性研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2015.
- [2] Huang Chaojun, Wu Zhensen, Liu Yafeng. Scattering characteristics of aerosol aggregation particles of 1.06 μm laser[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(9): 2353-2357. (in Chinese)
黄朝军, 吴振森, 刘亚锋. 1.06 μm 激光气溶胶凝聚粒子散射特性[J]. 红外与激光工程, 2013, 42(9): 2353-2357.
- [3] Wang Hongxia, Zhu Youzhang, Ma Jin, et al. Study in the infrared extinction properties of nano-graphite aggregates [J]. *Journal of Functional Materials*, 2011, 42(4): 616-618. (in Chinese)
王红霞, 竹有章, 马进, 等. 纳米石墨凝聚粒子红外消光特性研究[J]. 功能材料, 2011, 42(4): 616-618.
- [4] Wu Y, Cheng T, Zheng L, et al. A study of optical properties of soot aggregates composed of poly-disperse monomers using the superposition T-matrix method [J]. *Aerosol Science and Technology*, 2015, 49(10): 941-949.
- [5] Wu Y, Cheng T, Zheng L, et al. Effect of morphology on the optical properties of soot aggregated with spheroidal monomers [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2016, 168: 158-169.
- [6] Min M, Rab C, Woitke P, et al. Multiwavelength optical properties of compact dust aggregates in protoplanetary disks [J]. *Astronomy & Astrophysics*, 2015, 585: 26048.
- [7] Lin Li. Morphological characterization of particles and

- aggregates and scattering properties simulation [D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2013. (in Chinese)
- 林莉. 粒子及其聚集体形貌表征和散射特性模拟 [D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2013.
- [8] Moskalensky A E, Strokotov D I, Chernyshev A V, et al. Additivity of light-scattering patterns of aggregated biological particles [J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2014, 19(8): 85004.
- [9] Zhao Xinying, Hu Yihua, Gu Youlin, et al. Transmittance of laser in the microorganism aggregated particle swarm [J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(6): 0616001. (in Chinese)
- 赵欣颖, 胡以华, 顾有林, 等. 微生物凝聚粒子群的激光透射率研究[J]. 光学学报, 2015, 35(6): 0616001.
- [10] Karsten Schmidt, Jochen Wauer. Scattering database or spheroidal particles [J]. *Applied Optics*, 2009, 48(11): 2154-2164.
- [11] Yang P, Liou K N, Wyser K, et al. Parameterization of the scattering and absorption properties of individual ice crystals [J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2000, 105(D4): 4699-4718.
- [12] Gedney S D. An anisotropic perfectly matched layer absorbing medium for the truncation of FDTD lattices [J]. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 1996, 44(12): 1630-1639.
- [13] Hannakaisa Lindqvist. Light scattering by coated Gaussian and aggregate particles [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2009, 110(9-11): 262-273.
- [14] Liu Jianbin, Zeng Yingxin, Yang Chuping. Light scattering study of biological cells with the discrete dipole approximation [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, 43(7): 2204-2208. (in Chinese)
- 刘建斌, 曾应新, 杨初平. 基于离散偶极子近似生物细胞光散射研究[J]. 红外与激光工程, 2014, 43(7): 2204-2208.
- [15] Honeyager R, Liu G, Nowell H. Voronoi diagram-based spheroid model for microwave scattering of complex snow aggregates[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2015, 170: 28-44.
- [16] Sun Xianming. Study on wave propagation and scattering characteristics of atmospheric discrete random media[D]. Xi'an: Xidian University, 2007.
- [17] Li C, Xiong H. 3D simulation of the cluster-cluster aggregation model[J]. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(12): 3424-3429.
- [18] Karageorgiou V, Kaplan D. Porosity of 3D biomaterial scaffolds and osteogenesis [J]. *Biomaterials*, 2005, 26(27): 5474-5491.
- [19] Kozasa T, Blum J, Mukai T. Optical properties of dust aggregates [J]. *Astronomy and Astrophysics*, 1992, 263(1-2): 423-432.
- [20] Draine B T. User Guide for the Discrete Dipole Approximation Code DDSCAT 7.3[Z].