

$$f_{z_m}(z_m) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{z_m}{2}\right) \quad f_{\theta_m}(\theta_m) = \frac{1}{2\pi}$$

随机信号 $Y(t)$ 用新的形式表示为:

$$Y(t) = \sum_{m=-n}^n \sqrt{2G_y(f_m)\Delta f} z_m \cos(2\pi f_m t + \theta_m)$$

对每一个 f_m , 从 z_m 和 θ_m 的分布中进行抽样得到一个 z_m 和 θ_m , 则由上式就可以重建随机信号 $Y(t)$ 的一个样本, 它是关于时间 t 的波形.

§ 3.2 动态光散射信号的时间波形重建

由前分析可知, 动态光散射光强度的相对涨落 $I(t)$ 是一个时间上的随机变量, 它的自相关函数为: $C(\tau) = \langle I(t)I(t+\tau) \rangle = \exp(-2Dq^2\tau)$

相对应的功率谱密度是自相关函数的 Fourier 变换

$$G(\omega) = \frac{2Dq^2/\pi}{\omega^2 + (2Dq^2)^2} \quad -\infty < \omega < +\infty$$

根据前一节的讨论可知, $I(t)$ 的一个时间样本函数可以表示为:

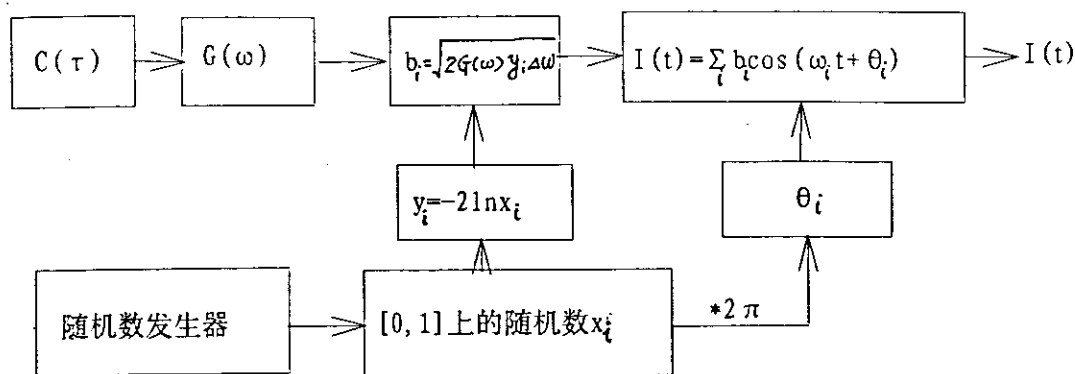
$$I(t) = \sum_{i=-M}^M b_i \cos(\omega_i t + \theta_i) \quad \text{其中 } b_i = \sqrt{2G(\omega_i)\Delta\omega}$$

$\omega_i = i\Delta\omega$ $\Delta\omega = \omega_{\max}/M$ $\omega_{\max}$ 的取值使得 $G(\omega_{\max})$ 小到可以不计, 即为信号的带宽. M 为频率离散化的个数.

θ_i 满足 $[0, 2\pi]$ 上的均匀分布

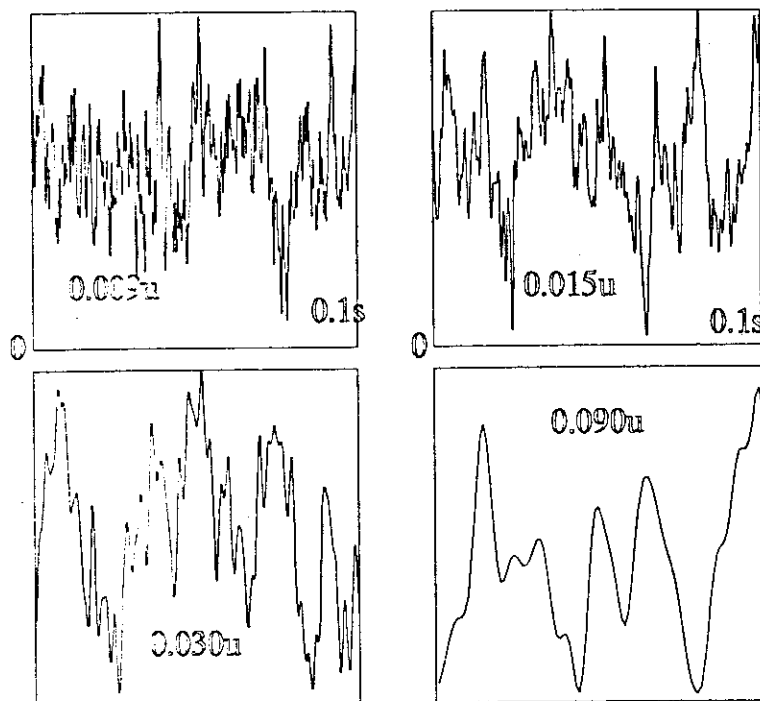
y_i 满足二自由度的 χ^2 分布, $f(y) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{y}{2}\right)$

由此得到用计算机模拟 $I(t)$ 时间波形的样本函数的过程, 如下图所示:



计算机模拟产生动态光散射相对光强涨落流程图

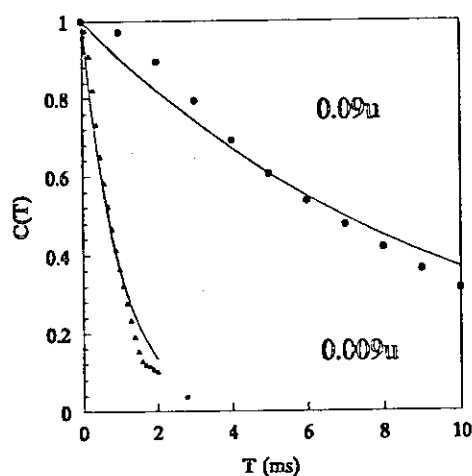
对于大部分的动态光散射实验而言, 相关时间 τ_q 都在 μs -- ms 的范围, 即 $\ll 0.1\text{s}$, 所以在计算中取 $\omega_{\max} = 10/\tau_q$, M 取 100, 不会引起可观的误差. 以下给出了当 $\lambda = 0.68\mu\text{m}$, $n = 1.33$, $\theta = 90^\circ$, $\eta = 0.85 \times 10^{-2} \text{Pa}$, $a = 0.009 - 0.09\mu\text{m}$, (对应的 τ_q 在 1ms -- 10ms) 时的, 在 0 -- 0.1s 内的计算机模拟产生的 $I(t)$ 的波形图的一个样本.



计算机模拟产生的动态光散射相对强度涨落时间波形图

(横坐标为时间从 0 — 0.1s , 纵坐标为相对涨落)

可见粒子的尺寸越小, 动态光散射光强度的相对涨落随时间的变化越快, 也就是说相关时间越短. 如果对于上面的 $I(t)$ 波形图进行时间域上的相关分析, 就得到了下面的图. 图中的实线是由理论得到的对于一个确定大小的粒子的散射光强度相对涨落的时间相关函数, 而点则代表由计算机模拟产生的信号的时间相关函数, 可见两者拟合得很好, 这表明我们模拟产生的 $I(t)$ 信号是正确的.



计算机模拟信号的时间相关函数分析图(实线为理论值,虚线为计算值)

对随机信号 $I(t)$ 的进行时间序列分析的方法有许多,时间相关函数只是其中的一种方法.由于与时间相关函数相对应的功率谱密度也能表征随机信号的时间特征,因此用经典的随机信号功率谱分析法也能够得到关于粒子尺度的信息.在此,我们不对它们进行讨论,总之如果得到了散射光强度的时间变化波形,从随机信号理论分析出发,是可以求出粒子的尺寸的.在下面的一节中,我们引入另一种对于信号的分析法,它是基于分形几何学的理论,从信号的复杂性出发,得出粒子尺度与分数维的关系.

§ 4. 散射光强涨落的分形几何学描述

由计算机模拟的信号 $I(t)$ 可以看出,不同尺寸的球形粒子,其相对光强涨落表现在时间轴上的变化具有不同的曲线复杂性,或时间复杂性.描述曲线的复杂性,可以由 Mandlbort 所创的分形几何学来加以定量的分析,由该理论可知,对于一条曲线的复杂性,可用它的分数维数度量.

§ 4.1 分形和分数维

分形 (Fractal) 和分数维 (Fractal Dimension) 是 B.Mandlbort 在 1975 年提出的.这一理论的出现,使人们对自然界中许多常见的,变化莫测的,不稳定的以及不规则现象的认识大大提高了一步.近年来国外对分数维在信号分析和处理中的

应用产生了浓厚的兴趣,在此我们对动态光散射光强的涨落信号用分形几何学的方法作一初步的研究.

(一) 分形的概述

根据众所周知的经验,线段是一维的,正方形是二维的,而正方体是三维的.若从相似性来看它们的维数,我们可以把它们的各边分成二等分,这时线段,正方形,正方体就被分为由 $2^1, 2^2, 2^3$ 个相似的子单元组成,这里的上标 $1, 2, 3$ 即为它们各自的几何维数,下标 2 则表示用于度量边长的尺子的长度缩小到 $1/2$.推广到一般的情况,如果某个图形是由度量边长的尺子的长度缩小成 $1/a$ 的 b 个相似形组成,则此图形的维数 D 为:

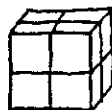
$$D = \log b / \log a$$



线段



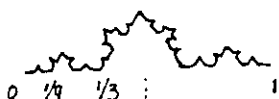
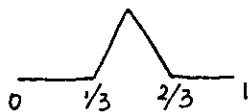
平面



立体

以上面的公式对线段 ($D = \log 2 / \log 2 = 1$), 正方形 ($D = \log 4 / \log 2 = 2$), 正方体 ($D = \log 8 / \log 2 = 3$) 作分析, 可见是正确的. 事实上, 用尺去度量一个图形是我们在实际的操作上的基本手段, 若一条线的长度为 1 米, 它意味是用 1 米的尺子长度去量得到数 1 , 但也可用 1 厘米的尺去量, 得到数 100 , 但是线的维数始终是 1 . 这就是说, 线的几何学维数是一种内在的性质, 并不因为在实际中如何去度量它而变化. 反过来讲, 我们也能用上面所述的公式去计算一个图形的几何学维数, 因为根据上述对几何学维数的定义, 它完全没有必要是一个整数. 同时从该式出发, 通过改变尺子的大小, 就能计算出图形的维数. 下面就举个分数维的例子, 称为 **Koch 曲线**, 计算它的维数.

Koch 曲线是这样生成的, 如下图所示. 将一条线段分为 $1/3$, 在其中的中间



Koch 曲线生成过程

一段上向上生出一个等边三角形的两条边, 这样得到了 4 条边长为 $1/3$ 的线段. 再对于每一条 $1/3$ 长的线段重复上面的过程... 将此过程作无穷次的重复, 可即得到 **Koch 曲线**. **Koch 曲线**中, 将 $[0, 1/3]$ 中的图形放大 3 倍, 则与原来的 **Koch 曲线** 形状完全相同; 若将 $[0, 1/9]$ 中的图形放大 9 倍, 则同样可以得到原来的相同图形, 这就是说 **Koch 曲线** 具有自相似的性质. 可见, 当用尺子

长度为1的尺去量 Koch 曲线得到长度为1, 而用1/3长的尺子去量时则长度为4, 用1/9的尺子去量则为16. 所以该曲线的维数为: $D = \log 4 / \log 3 = \log 16 / \log 9 = 1.2618$. 因此 Koch 曲线的维数是一个分数.

分数维的基本观点是图形没有特征长度, 它表现出自相似性. 它的研究对象是复杂的, 不平滑的, 不可微分的图形或曲线. 自然界中许多体系, 现象和过程都具有分数维的性质, 例如海岸线的形状, 河流的主流和支流, 树叉结构, 云层的空间分布, 湍流……, 甚至蚂蚁的行走路线有人认为是具有 1.2 维左右的分数维曲线. 分形几何学的研究还与混沌动力学有密切的关系.

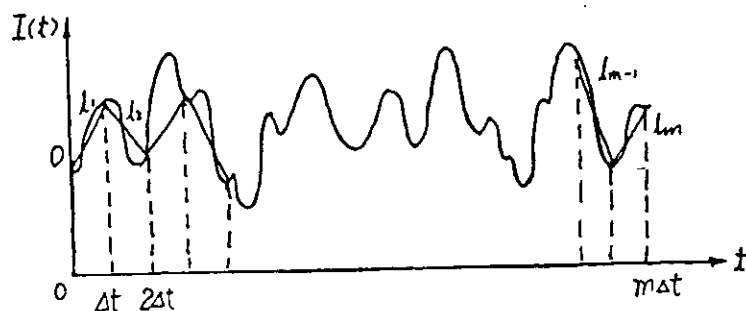
(二) 曲线的分数维求法

用长度为 r 的线段集合去近似具有分数维的复杂曲线, 首先把曲线的一端作为起点, 以它为圆心作一半径为 r 的圆, 此圆与曲线的交点作为新的起点, 以后重复同样的过程, 这样当度量完整条曲线时则得到折线段的总数 $N(r)$. 改变尺子的长度 r , 可以得到不同的折线段总数 $N(r)$. 若对于该曲线有近似的关系式 $N(r) \sim r^{-D}$, 则该曲线的维数就是 D . 从严格的数学意义上讲, 只有当 r 趋向于无穷小时得到的 D 才是真正意义上的分形维数. 但在实际的计算中, 当取 r 为曲线长度的 1/1000 时, 得到的 D 就可以认为是代表曲线在一定近似程度上的分数维. 这称为改变粗视化程度的算法.

显然对于一条直线段, 由于直线段的长度是一定的, 必有 $N(r) \sim r^{-1}$, 所以它的维数是 1. 对于 Koch 曲线, 由前可知, $N(1/3) = 4 = (1/3)^{-(\log 4 / \log 3)}$, 则它的分形几何学维数是 $D = \log 4 / \log 3 = 1.2618$.

§ 4.2 动态光散射光强涨落信号的分数维计算

动态光散射光强的相对涨落 $I(t)$ 的时间波形可以看作为一条复杂的曲线, 如下图所示.



我们采用上节所讲的变化粗视化程度的方法来计算它的分形几何学维数. 在此稍作一定的近似, 即用改变取样时间间隔的长度去度量该曲线的长度. 整条曲线的长度即为图中各折线段的长度之和. 由于曲线复杂性的存在, 当改变取样间

隔 Δt 度量曲线的长度时, 会得到不同的折线段的长度和. 从图中可以看出, 当 Δt 大时, 计算长度时实际上是忽略了局部复杂性的贡献, 而当 Δt 小时, 则计及了局部复杂性的贡献, 所以可以想象度量得到的曲线长度会随 Δt 的减小而增加. 如果计算结果能表示为:

$$L(\Delta t) \sim (\Delta t)^{-f}$$

则该曲线的分形几何学维数就是 $D=1+f$

对于任何实际的复杂曲线, 其分数维的意义是在一定的观测尺度内去衡量的, 即 Δt 不可能趋近于 0. 因而分数维 D 的获得, 即 f 的计算都是取 Δt 较小时进行计算的. 当用不同的 Δt 计算得到 $L(\Delta t)$ 后, 则对 $\ln[L(\Delta t)] \sim \ln \Delta t$

进行直线拟合就可以求得 f , 然后得到 D . 具体的过程如下.

设最小的时间取样间隔为 Δt , 当取不同时间尺子为 $\Delta t_i = i \Delta t (i=1, 2, \dots, n)$ 时, (即为改变取样时间间隔), 得到曲线的长度为:

$$L_i = \sum_{j=1}^m l_j \quad \text{其中 } m \Delta t_i \text{ 为曲线的最后一点横坐标, } l_j \text{ 是每一小段折线的长度.}$$

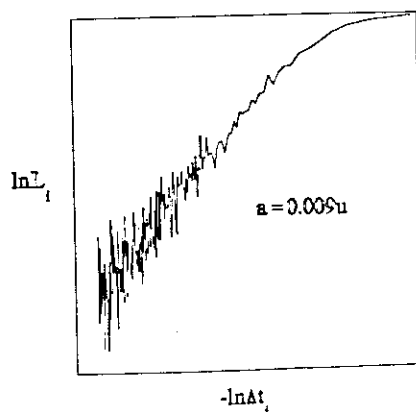
$$l_j^2 = [I(j \Delta t_i) - I((j-1) \Delta t_i)]^2 + (\Delta t_i)^2$$

当 i 遍及 $1 \dots n$ 后, 得到曲线: $L_i = L_i(\Delta t)$

用最小二乘法对下式进行拟合: $\ln L_i = g - f \ln(\Delta t_i)$, 有:

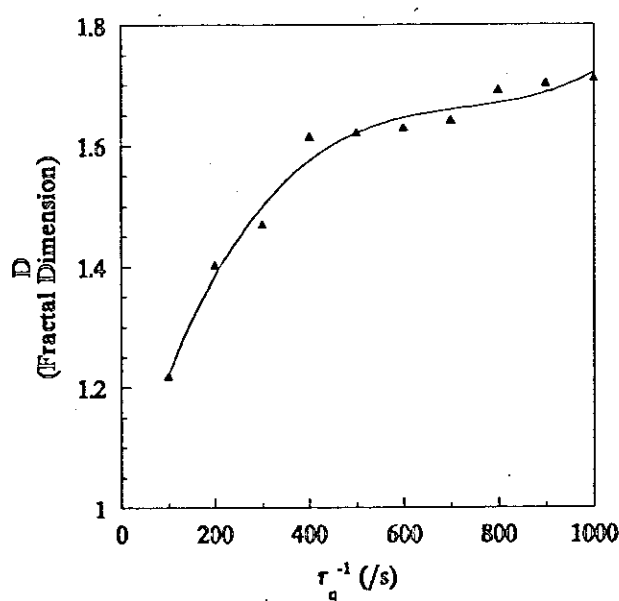
$$f = \frac{n \sum_{i=1}^n \ln \Delta t_i \ln L_i - \sum_{i=1}^n \ln \Delta t_i \sum_{i=1}^n \ln L_i}{\left(\sum_{i=1}^n \ln \Delta t_i \right)^2 - n \sum_{i=1}^n (\ln \Delta t_i)^2}$$

则曲线的分数维 D 是: $D=1+f$



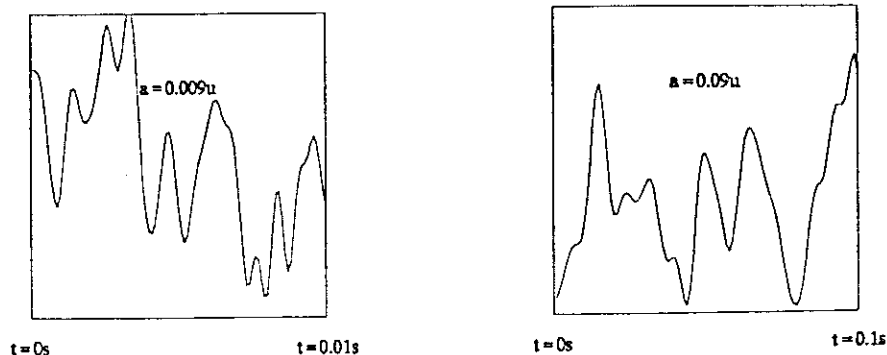
对 $a = 0.009\mu\text{m}$ 的粒子的 $I(t)$ 时间波形进行分数维的计算, 如上图所示. 从整体上看 $L(\Delta t) \sim (\Delta t)^{-f}$ 的性质是比较明显的, 这表明动态光散射光强的相对涨落 $I(t)$ 在时间上的复杂性的确具有分形几何学的特征. 当 Δt_i 较小时, 即在横坐标的右边部分, 曲线的起伏已很小. 所以曲线的斜率就是 $f = D - 1$.

当粒子的大小变化时, 由于 $I(t)$ 时间波形表现出不同的复杂性, 所以它们的分数维数也不同. 粒子的大小与相关时间成反比关系, 所以下图是计算了在不同



的相关时间下的 $I(t)$ 的时间波形 ($0 \sim 0.1\text{s}$ 内) 的分数维数. 可以看出粒子越小, 即相关时间越短, 分数维数越大, 具有一一对应的关系. 这也就是说, 由时间波形计算出分数维数就可以估计出粒子的大小.

运用分形概念对信号的时间复杂性进行分析时, 应该注意时间区间必须取在同一个范围, 如都在 $0 \sim 0.1\text{s}$ 内分析, 这是因为对于相关时间为若时间区间的大小不同, 则不能比较时间的复杂性. 如 $a = 0.009\mu$ 的粒子在 $0 \sim 0.01\text{s}$ 内的时间变化的程度与 $a = 0.09\mu$ 的粒子在 $0 \sim 0.1\text{s}$ 内的变化程度是相近的, 如下图所示.



分形法与自相关函数法估计粒子的尺寸相比较, 前者是在同一区间内进行的, 而后者是在不同的时间区间内计算相关函数, 因为对于大的粒子, 其相关间长, 小

分形法与自相关函数法估计粒子的尺寸相比较,前者是在同一区间内进行的,而后者是在不同的时间区间内计算相关函数,因为对于大的粒子,其相关间长,小的粒子相关时间短.所以在某种意义上可以说这两种方法是从不同的角度去反映真实粒子的动态光散射的光强涨落.在实际的测量中,如果事先并不知道粒子大小的范围,用相关函数法去分析时间信号,则取样时间难以确定.但有了分形方法后,就可以先确定一固定的取样时间,计算出一段时间内的 $I(t)$ 波形的分数维,就可大致估计出粒子的尺寸.若要精确地测量粒子的尺寸,则可依此重新调整取样时间,用自相关函数法得到相关时间,最后得到粒子的尺寸.这是用分形方法分析动态光散射光强涨落的意义所在.在分析的过程中,我们也看到了光强涨落的时间波形的确具有分形几何学的特征,因此使我们对它的理解有了新的认识.

§ 5. 小结

在这一节中,我们从理论上给出了用动态光散射方法计算尺寸小于或远小于光波长的球形粒子的原理;根据随机信号的理论用计算机模拟产生了动态光散射的相对光强度涨落的时间波形,并讨论了经典的时间相关分析法和分形几何学分数维估计法,作了相应的比较.

动态光散射方法作为分析粒子尺度的一种应用,补充了角谱分析和成像方法的着重于从散射光空间分布上对粒子尺度的分析.在实际的应用上,动态光散射法所涉及的内容还需要很多的细致分析,如当粒子浓度并不是很小时,则要计及多重光散射的影响;另外一个主要的问题是,由于动态光散射的光强度一般都很小,在信号的探测上和处理上也要运用一定的手段来降低噪声.计算机模拟中,在此我们只是对于理想的信号进行了模拟,当在其中加入噪声后,对于它的分析可以完全用信号分析的一些现有的方法进行,所以本章的内容只在动态光散射用于粒度分析的研究中开了一个头,并且对于粒子形状不是球形时,虽然在理想的情况下时间相关函数仍可为指数衰减,但是相关时间与粒子大小和形状的关系就已不是 Einstein 关系,它涉及粒子的水动力学原理等因素,这是一个力学上的问题.

分形几何学方法应用于随机信号的分析的理论远不是成熟的,在本章中我们只是作了最初步的讨论,它的目的在于使我们对于动态光散射光强涨落信号从新的角度得到了一定的认识.

第4章 多重光散射的蒙特卡罗算法

在前几章中,我们计算了小粒子的光散射角分布图以及衰减,吸收和散射截面.当粒子浓度较低时,粒子体系的光散射特性可以用单次散射来近似.在单次散射近似下,光散射的强度角分布函数就是单个粒子的角分布图,最多加上由于大量粒子在空间有一分布,以至于强度角分布叠加变得平坦的效应,但是在本质上仍然是单次散射,没有更多的物理内容,当粒子浓度增加时,多次散射将起作用,就是说由粒子一次散射的光又被另一些粒子所散射,这在实际中是经常出现的,如雾雨天气的能见度计算都必须考虑多次散射的影响.

对于多次散射问题有两种不同的理论方法:解析理论和输运理论.解析理论从诸如 **Maxwell** 方程或波动方程这些基本微分方程出发,引进粒子的散射和吸收特性,并求出方差和相关函数这些统计量的适当的微分方程或积分方程.原则上这种理论考虑了多重散射,衍射和干涉效应,在这个意义上说,它在数学上是严格的.但是由于方程的复杂性,且边界条件难以表达,几乎无法得到解的形式,即使对于最简单的 **Rayleigh** 多重散射也没有严格的解析解表达式.

另一方面,输运理论不是从波动方程出发,而是讨论光能量通过包含粒子的介质层时的输运问题.该理论的研究比较直观,它缺少解析理论那种数学上的严谨.尽管在描述单个粒子的散射和吸收特性时考虑了衍射和干涉效应,但输运理论本身并不包括衍射和干涉,在该理论中假定了辐射场之间不存在相关性,因此用到的是光功率的叠加而不是场振幅的叠加.

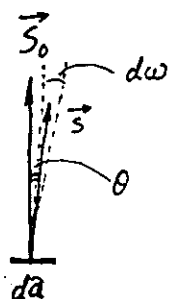
输运理论也称为辐射传输理论,光波在大气中的多重散射过程可以称为光波在大气中的传输过程.它在分子动力学和统计物理学中对应的方程 **Boltzmann** 方程.该方程能够灵活地处理多种物理现象,尤其在中子输运问题,大气能见度,水下能见度等问题中发挥出优势.

从名称上讲,输运方程或辐射传输方程体现的是一个物理过程,涉及到碰撞,散射等基本现象,因而它的应用之广泛是可见一斑的.在传输理论中对于传输方程又有许多不同的解法,其中 **Monte Carlo** 方法就是运用中子散射和碰撞方法进行研究的.在本论文中将对该解法作详细的分析.

解析方法和输运理论处理的现象相同,但尽管它们的出发点不同,仍可以预料它们两者之间有某种基本的关系.理论证明,输运理论中所用的光强度和解析理论中的互相关函数通过 **Fourier** 变换可以互相联系起来,这也意味着即使输运理论是根据功率叠加的原则发展的,但也包含辐射场相关的某些信息.

§ 1. 多重光散射的基本输运方程

以下考虑随机分布的粒子介质体系中 $\mathbf{r}$ 点的波动能量流. 对于由单位矢量 $\mathbf{s}$ 确定的方向而言, 可以设定位于中心频率 ν 的单位频宽, 单位立体角 $d\omega$ 以内的平均功率通量密度, 这个量 $I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ 叫做辐射强度, 度量单位是 $W \cdot m^{-2} \cdot rad^{-1} \cdot Hz^{-1}$, 它是多重光散射的输运理论中最基本的物理量之一.



参考左图, 在立体角 $d\omega$ 内, $\mathbf{s}$ 方向上, 通过以单位矢量 $\mathbf{s}_0$ 为法线的面元 da , 频率间隔 $(\nu, \nu + d\nu)$ 内的光功率为

$$P = I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \cos \theta da d\omega d\nu$$

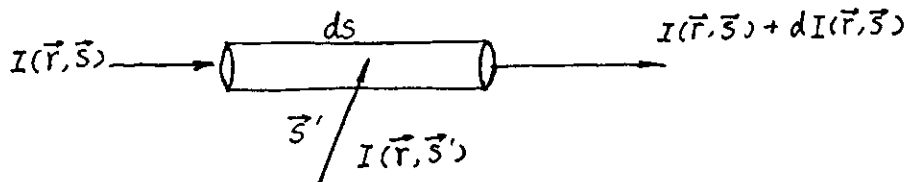
$$\cos \theta = \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}_0$$

现在来考察在包含随机分布粒子介质体系中辐射强度 $I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ 的特性. 粒子散射和吸收光波的能量, 在辐射强度所满足的微分积分方程中应包括这些特性. 该输运方程与中子散射理论中所用的 Boltzmann 方程是一样的.

设入射到一个具有单位截面, 长度为 ds 的柱形体元上的辐射强度为 $I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, 体积 ds 包含 ρds 个粒子, ρ 是单位体积内的粒子数, 称之为数密度. 被每个粒子吸收的功率为 $\sigma_a I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, 散射的功率为 $\sigma_s I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, 因而通过体积 ds 后辐射强度的减少为

$$dI(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = -\rho ds (\sigma_a + \sigma_s) I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = -\rho ds \sigma_t I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$$

同时, 从其它方向 $\mathbf{s}'$ 入射到这个体积上的一部分辐射强度被散射到 $\mathbf{s}$ 方向, 从而附加到强度 $I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ 上, 使辐射强度增加



为了确定这部分散射贡献, 可以认为从 $\mathbf{s}'$ 方向上入射到单个粒子上的光强度在立体角 $d\omega'$ 内的入射通量密度为 $I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') d\omega'$, 则这些光能被散射到 $\mathbf{s}$ 方向上的辐射强度为:

$$\rho ds p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') d\omega'$$

其中 $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ 是单个粒子的散射角分布函数.

将所有 $\mathbf{s}'$ 上来的入射通量加起来, 就是体积 ds 的 ρds 个粒子在 $\mathbf{s}$ 方向上, 由于多重散射贡献而增加的辐射强度, 即

$$\int_{4\pi} \rho \, ds \, p(s, s') I(r, s') \, d\omega'$$

其中

$$\int_{4\pi} p(s, s') \, d\omega = \sigma_s$$

如果对 $p(s, s')$ 以 σ_s 归一化, 则由所有 s 方向散射到 s' 方向的功率为

$$\int_{4\pi} \rho \, \sigma_s \, ds \, p(s, s') I(r, s') \, d\omega'$$

$$\int_{4\pi} p(s, s') \, d\omega = 1$$

由此得到输运方程

$$\frac{dl(r, s)}{ds} = -\rho \, \sigma_t I(r, s) + \int_{4\pi} \rho \, \sigma_s \, ds \, p(s, s') I(r, s') \, d\omega'$$

如果再考虑体积 ds 内存在独立的辐射源, 其强度为 $\varepsilon(r, s)$, 则完整的辐射输运方程为

$$\frac{dl(r, s)}{ds} = -\rho \, \sigma_t I(r, s) + \int_{4\pi} \rho \, \sigma_s \, ds \, p(s, s') I(r, s') \, d\omega' + \varepsilon(r, s) \quad (1)$$

该方程是描述多重光散射的微分积分方程, 所有的对于多重光散射的分析和讨论都归结为在适当的边界条件下, 对该方程的解.

§ 2. 输运方程等价的积分方程

对于方程(1), 设

$$\chi(r, s) = \int \rho \sigma_s p(s, s') I(r, s') \, d\omega' + \varepsilon(r, s)$$

于是 (1) 式变为

$$s \cdot \nabla I(r, s) + \rho \sigma_t I(r, s) = \chi(r, s)$$

我们称 $\chi(r, s)$ 为发射密度或离开碰撞密度.

方程 (1) 对应的格林函数 $G(r, s; r')$ 满足

$$\begin{cases} s \cdot \nabla G(r, s; r') + \rho \sigma_t G(r, s; r') = \delta(r, r') \\ G(r, s; r') \Big|_{r' \rightarrow \infty} = 0 \end{cases}$$

其解为

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \mathbf{r}') = \exp\left(-\int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \rho\sigma_t dl\right) \times \frac{\delta\left(\mathbf{s} - \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}$$

则 (1) 式的解为

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \int_V \chi(\mathbf{r}', \mathbf{s}) G(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \mathbf{r}') dV'$$

进一步令:
$$T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s}) = \rho\sigma_t \exp\left(-\int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \rho\sigma_t dl\right) \frac{\delta\left(\mathbf{s} - \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}$$

有
$$G(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \mathbf{r}') = T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s}) / \rho\sigma_t$$

则

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \int_V \varepsilon(\mathbf{r}', \mathbf{s}) \frac{T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})}{\rho\sigma_t} dV' + \iint I(\mathbf{r}', \mathbf{s}') \rho\sigma_s p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') \frac{T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})}{\rho\sigma_t} dV' d\omega'$$

$$S_t(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \int_V \varepsilon(\mathbf{r}', \mathbf{s}) \frac{T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})}{\rho\sigma_t} dV'$$

令:

$$K_t(\mathbf{r}', \mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{r}, \mathbf{s}) = \rho\sigma_s p(\mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{s}) \frac{T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})}{\rho\sigma_t}$$

其中 $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ 表示为 $p(\mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{s})$ 意义是从 $\mathbf{s}'$ 散射到 $\mathbf{s}$ 方向, 则

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = S_t(\mathbf{r}, \mathbf{s}) + \iint I(\mathbf{r}', \mathbf{s}') K_t(\mathbf{r}', \mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{r}, \mathbf{s}) dV' ds'$$

该方程就是输运方程的积分方程表达形式.

根据积分方程的理论, $K_t(\mathbf{r}', \mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{r}, \mathbf{s})$ 称为核函数, 它包含了两个部分 $T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})$ 和 $p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$ 两个部分, 下面对其进行分析:

1. $T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})$

由前所知, $G(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \mathbf{r}')$ 表示在 $\mathbf{r}'$ 的单位点源, 在散射介质中 $\mathbf{r}$ 点引起的通量. 所以 $T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})$ 就是由 $\mathbf{r}'$ 发出的光粒子在 $\mathbf{r}$ 点进入碰撞的密度. 或者说 $T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s}) dV$ 表示由 $\mathbf{r}'$ 出发, 方向为 $\mathbf{s}$ 的光子, 在 $\mathbf{r}$ 点的体积内碰撞发生散射的几率.

设

$$L = \int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \rho\sigma_t dl \quad l = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$$

$$dL = \rho\sigma_t dl$$

称为 $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ 光子飞行的平均自由程

则碰撞点 $\mathbf{r}$ 的分布, 就是沿 $\mathbf{s}$ 方向上路程 l 的分布, 也就是 $\mathbf{s}$ 方向上自由程 L 的分布, 即 L 满足分布

$$f(L) = \begin{cases} \exp(-L) & L \geq 0 \\ 0 & \text{others} \end{cases}$$

如果介质是全空间, 则有

$$\begin{aligned} \int T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s}) dV &= \int_0^\infty \rho \sigma_t \exp(-\int_0^l \rho \sigma_t dl) dl \\ &= \int_0^\infty \exp(-x) dx = 1 \end{aligned}$$

即 $T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})$ 在全空间上是一个三维概率分布.

也就是说, 当已知本次散射点 $\mathbf{r}'$ 和散射方向 $\mathbf{s}$, 则下一次的光散射点位置 $\mathbf{r}$ 的分布可由 $T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s})$ 的分布抽样得到, 即

$$T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}; \mathbf{s}) dV = \rho \sigma_t \exp(-\rho \sigma_t l) dl$$

2. $p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$

如前所述, $p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$ 是对 σ_s 归一化的, 即

$$\int_{4\pi} p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') d\omega = \sigma_s$$

如果取以下形式 $\int_{4\pi} p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') d\omega = \sigma_s / \sigma_t$

则 $p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$ 的物理意义就是当一个单位光粒子由 $\mathbf{s}'$ 进入碰撞, 有 σ_s / σ_t 单位的光粒子被散射出去, 而 $(1 - \sigma_s / \sigma_t)$ 单位粒子被吸收. 而对于 σ_s / σ_t 单位的光子在全角度上的分布以单次散射相函数 $p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$ 进行分布. 概括地讲, 当一个单位光粒子从 $\mathbf{s}'$ 方向入射, 则散射到 $\mathbf{s}$ 方向的光子数概率为

$$\sigma_s / \sigma_t p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$$

如果散射粒子不存在吸收, 则 $\sigma_s / \sigma_t = 1$, $\sigma_a = 0$

3. 关于 $p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$

在前几章的球粒子单次散射角分布计算中, 表示散射角分布的 Mie 解形式为

$$F(\theta) \propto i_1(\theta) + i_2(\theta) = p(\mathbf{s}', \mathbf{s})$$

其中 $i_1(\theta)$ 和 $i_2(\theta)$ 是散射角 $\cos\theta$ 的函数, 所以是以宗量 $\cos\theta$ 即 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}'$ 表示的函数形式.

而在输运方程中, 包含项 $\int p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') d\omega'$, 虽然当 $\mathbf{s}, \mathbf{s}'$ 已知时, $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ 的值与 $p(\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}')$ 即 $F(\theta)$ 是相同的, 但是为了对 $d\omega'$ 求积分, 在这里 $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ 必须是以单独的 $\mathbf{s}, \mathbf{s}'$ 为宗量的函数形式出现, 这有很大的不同. 举一个简单的例子来加以说明:

如果粒子是无损耗的, 且它的尺度比波长小许多, 同时入射波是完全非偏振的, 则 $F(\theta)$ 为简单的 Rayleigh 函数

$$p(\mu, \phi, \mu', \phi') = \frac{3}{4} (1 + \cos^2 \gamma) \quad \mu = \cos \theta$$

在这里为了不同球坐标 θ, ϕ 混淆, 以 γ 表示散射角

则有 $\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi')$

对 ϕ 方向求积后, 得到

$$p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = p(\cos \theta \rightarrow \cos \theta) = \frac{3}{4} \left[1 + \mu^2 \mu'^2 + \frac{1}{2} (1 - \mu^2)(1 - \mu'^2) \right]$$

所以即使以夹角 γ 为宗量的函数形式 $\frac{3}{4}(1 + \cos^2 \gamma)$ 很简单, 但当以两个变量 $\mathbf{s}, \mathbf{s}'$ 为宗量表示时, $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ 的形式就变得复杂了, 更不用说 Mie 散射角分布的形式了. 因此, 当输运方程中要求以 $\mathbf{s}'$ 为宗量, 对 $\mathbf{s}'$ 进行积分时, 几乎是无法进行的, 也就是说, 要得到解析解也几乎是不可能的, 必须寻找其它方法加以研究.

§ 3. 输运积分方程的形式解

本节我们讨论以下输运积分方程的形式解:

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = S_I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) + \iint I(\mathbf{r}', \mathbf{s}') K_I(\mathbf{r}', \mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{r}, \mathbf{s}) dV' ds'$$

为讨论的简便起见, 引入下列符号

$\mathbf{P}=(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ 表示五维相空间中的一点, 则 $d\mathbf{P}=drds$, 表示三维求积的元

$$\text{积分方程化为 } I(\mathbf{p}) = S_I(\mathbf{p}) + \iint I(\mathbf{p}') K_I(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) d\mathbf{p}'$$

积分是对整个相空间取的, 不失一般性, 可设

$$\begin{cases} S_I(\mathbf{p}) \geq 0 \\ \int S_I(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1 \end{cases}$$

由积分方程的理论可得有以下形式的 Neumann 解

$$I(\mathbf{p}) = \sum_{m=0}^{\infty} I_m(\mathbf{p})$$

$$I_0(\mathbf{p}) = S_I(\mathbf{p})$$

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{p}) &= \int I_0(\mathbf{p}_0) K_I(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p}) d\mathbf{p}_0 \\ &= \int S_I(\mathbf{p}_0) K_I(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p}) d\mathbf{p}_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_2(\mathbf{p}) &= \int I_1(\mathbf{p}_1) K_I(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}) d\mathbf{p}_1 \\ &= \iint S_I(\mathbf{p}_0) K_I(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p}_1) K_I(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_m(\mathbf{p}) &= \int \cdots \int S_I(\mathbf{p}_0) K_I(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p}_1) K_I(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) \cdots K_I(\mathbf{p}_{m-1} \rightarrow \mathbf{p}) \\ &\quad d\mathbf{p}_{m-1} d\mathbf{p}_{m-2} \cdots d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_0 \end{aligned}$$

可以证明, 如果 $0 < \sup \int K_I(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}') d\mathbf{p}' < 1$

($\sup$ 是上确界), 那么 Neumann 级数是收敛的, 而且它的确是输运方程的解. 这个条件在大多数实际问题中, 都是可以得到满足的.

$I_m(\mathbf{p})$ 的物理意义:

首先, $I_0(\mathbf{p})$ 表示由于辐射源粒子的存在引起的在相空间任一点 $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ 的辐射通量密度或光强度

其次 $I_1(\mathbf{p})$ 表示所有的源发出的光粒子经过一次空间输运, 一次碰撞散射后在空间任一点 $\mathbf{r}$, 方向 $\mathbf{s}$ 上的光强度

同理 $I_m(\mathbf{p})$ 表示所有的源发出的光粒子经过 m 次空间输运, m 次碰撞散射后在空间任一点 $\mathbf{r}$, 方向 $\mathbf{s}$ 上的光强度

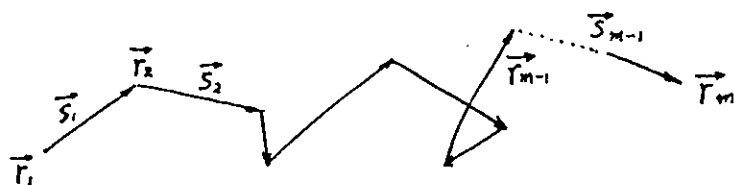
由此可以看出, 积分方程的形式解 $I(\mathbf{p}) = \sum_{m=0}^{\infty} I_m(\mathbf{p})$ 包含了所有散射次数的光粒子在空间任一点的强度, 即包含了多重散射从 0 次到 m 次的过程.

§ 4. 多重光散射计算的 Monte Carlo 方法

由上节的分析可知, 求多重光散射的问题归结为求 $I_m(p)$ 级数的问题. 根据 $I_m(p)$ 的形式

$$I_m(p) = \int \cdots \int S_I(p_0) K_I(p_0 \rightarrow p_1) K_I(p_1 \rightarrow p_2) \cdots K_I(p_{m-1} \rightarrow p) dp_{m-1} dp_{m-2} \cdots dp_1 dp_0$$

可见这是一个级联的 Markov 过程. 因为 $K_I(p_1 \rightarrow p_2)$ 表示光子从相空间位置 $p_1 \rightarrow p_2$, 即 $(r_1, s_1) \rightarrow (r_2, s_2)$, 明显的物理表示是由在 r_1 点由 s_1 方向出射的光子到达 r_2 点后被散射到 s_2 方向, 直到散射到 p 即空间 r_m 点, s_m 方向



由
$$S_I(p_0) = \int_V \varepsilon(r', s_0) \frac{T(r' \rightarrow r_0; s_0)}{\rho \sigma_t} dV' \quad \text{可知}$$

其中 $l = |r_0 - r'|$ 满足的分布为 $f(l) = \rho \sigma_t \exp(-\rho \sigma_t l)$

那就是说光子由源光子点发出的光强 $\varepsilon(r', s_0)$ 到达 r_0 点以 s_0 出射的强度在路程 $l = |r_0 - r'|$ 上由于散射和吸收而衰减, 当有一单位的光子由源发出, 到达 r_0 点的概率就是 $S_I(p_0)$. 由 Monte Carlo 积分方法的思想可知, 只要对

$\frac{T(r' \rightarrow r_0; s_0)}{\rho \sigma_t}$ 即对 $|r_0 - r'|$ 抽样 N 次, 其中 $l = |r_0 - r'|$ 的次数为 M , 则 $S_I(p_0)$ 的估计就是:

$$S_I(p_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{N} \right)$$

由此可见, 空间中任意一点 r , 在 s 方向上的光强, 由 0 次散射贡献的量, 就是由源 $\varepsilon(r', s_0)$ 发出的光到达 r 点在 s 方向上出射的概率. 很显然, 对于源发出 s_0 方向的光, 则空间任一点 r 也只有 s_0 方向的光, 只是它的强度变化为 $\exp(-\rho \sigma_t l)$, $l = |r - r'|$ 也就是对分布 $f(l) = \rho \sigma_t \exp(-\rho \sigma_t l)$ 抽样 l 的概率.

我们再来看空间任一点 r , 在 s 方向上的光强, 由 m 次多重散射的贡献量.

由积分的形式看

$$I_m(\mathbf{p}_m) = \int I_{m-1}(\mathbf{p}_{m-1}) K_I(\mathbf{p}_{m-1} \rightarrow \mathbf{p}_m) d\mathbf{p}_{m-1}$$

所以可以和分析 $I_0(\mathbf{p})$ 类似进行讨论. 当已知 $I_{m-1}(\mathbf{p}_{m-1})$ 时, 再经过一次输运和散射过程, 就可以得到第 m 次多重散射的贡献.

$$K_I(\mathbf{p}_{m-1} \rightarrow \mathbf{p}_m) = \rho\sigma_s p(s_{m-1} \rightarrow s_m) \frac{T(\mathbf{r}_{m-1} \rightarrow \mathbf{r}_m; s_m)}{\rho\sigma_t}$$

$\frac{T(\mathbf{r}_{m-1} \rightarrow \mathbf{r}_m; s_m)}{\rho\sigma_t}$ 与前讨论相同, 表示输运过程, 从 $\mathbf{r}_{m-1} \rightarrow \mathbf{r}_m$ 的概率.

而 $\rho\sigma_s p(s_{m-1} \rightarrow s_m)$ 则表示从 s_{m-1} 入射的光被散射到 s_m 方向的概率, 因此整个的散射过程 (m 次多重散射) 可以描述为下列 Markov 过程.

由源光粒子位置 $(\mathbf{r}_0, s_0)$ 的光输运到 $(\mathbf{r}_1, s_1)$ 点, (其中 $l = |\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|$ 是一个概率分布), 被第 1 次散射到 s_1 方向, (概率为 $p(s_0 \rightarrow s_1)$); 接着又飞行到 $\mathbf{r}_2$ 点, 第 2 次被散射到 s_2 方向...直到飞出系统之外, 不再被散射.

所以, 多重光散射的问题可以化为对大量光粒子在散射介质中飞行踪迹的跟踪. 如果有 N 个光子输入到散射系统中, 则对于一个光子可以跟踪它从进入到离开的过程, 记录离开系统时的坐标和出射方向, 则对大量的 N 进行统计之后, 就是原多重散射问题的解.

§ 5. 平行平面介质层的多重光散射

以平行平面为界的散射粒子层中的多重散射问题, 代表了许多实际的物理体系. 例如受太阳和其它辐射源照明的大气层, 云层, 海水能近似为平面平行介质. 诸如光从血液和组织的薄层反射和透射的生物实验, 图像通过大气, 雨, 雾的成像, 以及表面散射浊度仪等问题, 都涉及到平面平行介质层的多重光散射. 当然解决的方法有很多, 但是 Monte Carlo 方法是一种比较直观, 物理概念清晰, 计算程序容易的方法. 前面我们已经讨论了 Monte Carlo 方法用于多重光散射问题的理论和思想方法, 接下去就针对平面平行问题进行实际的讨论和计算.

物理假设: 光子在两次散射之间的飞行路程的直线, 光子之间的相互作用忽略. 实际上光子的相干已包含在辐射输运方程之中. 这里讲的无相互作用是指模拟的 Monte Carlo 过程中无相互作用.

光子的输运问题带有明显的随机过程性质, 这不仅在前面的讨论之中可以从理论上对 I_m 喻为随机变量的统计平均估计, 事实上光子的散射和运动行为在本质上也具有随机性. 在现实世界中, 我们所观测到的光现象的确定性, 只不过是大量光子随机性质的集体表现.

从散射的意义上讲,光被单个球形粒子的散射解(Mie解),是从Maxwell 导出来的,而 Maxwell 方程从量子力学的角度看,就是光子散射问题的 Schrodinger 方程.以量子论的思想来看,散射的强度角分布就是一个概率分布,它代表了被散射到 θ 角方向的光子的几率,这是量子论思想的本质.因此, Monte Carlo 方法虽然是从积分方程解的形式上过渡来的,但完全也可以从实际的物理过程中得到.

光子的运动规律是根据大量粒子的运动情况总结出来的,是一种统计规律.模拟,实际上就是模拟一批(数量很大)光子在散射介质中的运动状况,使光粒子的统计规律得以重现,不过不是用实验方法,而是利用数值方法和技巧,即利用随机数来实现的.

§ 5.1. 状态参数和状态序列

我们讨论平面波入射到厚度为 l 的平行介质中,在 $z=0$ 点有源单位强度的光波入射,求解的是在 θ 方向,在两个边界 $z=0, z=l$ (对应前向和后前散射)的光强度.

光子在介质中运动的状态,可用一组参数来描述,称之为状态参数,它通常包括光子的位置和运动方向,以 $p=(r,s)$ 表示

有时还需要另一参数 表示光子附带的权重, (例如有吸收存在时)

$$p=(r,s,W)$$

对于平行平面几何构形,可取 $p=(z,\cos\alpha,W)$

z 为光子的位置, $\cos\alpha$ 为光子运动的方向与 z 轴的夹角.

在球几何中,取 $p=(r,\cos\theta,W)$

r 为粒子空间位置到球心的距离, $\cos\theta$ 为粒子运动方向与粒子所在位置的径向夹角.

散射点的状态参数,用 $p_m=(r_m, s_m, W_m)$ 表示一个从源发出的光子在介质中经过 m 次散射后的状态,其中

r_m : 光子第 m 次散射点的位置

s_m : 光子第 m 次散射后的运动方向

W_m : 光子第 m 次散射后的权重

状态序列:

一个由源发出的光子,在介质中运动,通常经过若干次的散射,或者飞出介质层,或者被介质层所吸收.由于两次散射之间的光子按直线飞行,因此光子在介质层中的运动,可用以下散射点的状态序列加以描述

$$p_0, p_1, \dots, p_{m-1}, p_m$$

详细表述为

$$\begin{pmatrix} r_0, r_1, \dots, r_m \\ s_0, s_1, \dots, s_m \\ W_0, W_1, \dots, W_m \end{pmatrix}$$

这里 p_0 是从源发出的光子状态, 称为初态, p_m 为终止状态, m 为光子游动的链长.

§ 5.2. Monte Carlo 模拟运动过程

1. 确定初始状态 p_0

对于平面入射波

$$\begin{cases} p_0(r_0, s_0, W_0) = \delta(z_0) \delta(\cos \alpha_0) \\ W_0 = 1 \end{cases}$$

α_0 为入射方向, 正入射时 $\alpha_0 = 0, z_0 = 0$

2. 确定下一个散射点

已知状态 p_{m-1} 要确定 p_m , 首先要确定下一个散射点坐标 z_m . 物理上知道, 光子相邻两次散射点之间的距离, 满足下面的统计规律

$$T(z_{m-1} \rightarrow z_m; \cos \alpha_{m-1}) dz_m = \begin{cases} \frac{\rho \sigma_t}{|\cos \alpha_{m-1}|} \exp(-\rho \sigma_t \frac{z_m - z_{m-1}}{\cos \alpha_{m-1}}) dz_m, & \frac{z_m - z_{m-1}}{\cos \alpha_{m-1}} > 0 \\ 0, & \text{other} \end{cases}$$

$m = 0, 1, 2, \dots$

$\rho \sigma_t$ 为介质的衰减截面, 由这指数分布规律, 决定 z_m 可利用下面的公式

$$z_m = z_{m-1} - \frac{\ln \xi}{\rho \sigma_t} \cos \alpha_{m-1}$$

以后, 无进一步的申明, ξ 均表示 $(0, 1)$ 上均匀分布的随机数.

如果 $z_m \geq l$, 或 $z_m \leq 0$, 光子游动历史终止, 前者表示光子正向飞出介质层, 而后者表示光子从反向反射回来

$$W_m = W_{m-1} \frac{\sigma_s}{\sigma_t}$$

因为 $\frac{\sigma_s}{\sigma_t}$ 表示光子发生散射的概率.

3. 确定散射后的方向

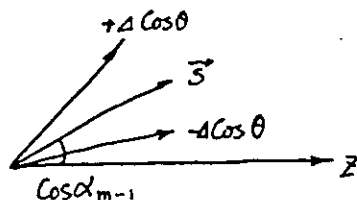
对于由 s_{m-1} 方向入射的光子发生第 m 次散射后方向 s_m 的确定是根据归一化单次散射解 (Mie 解) 确定的.

设 $\int p(s', s) ds = 1$, $p(s', s)$ 为归一化函数.

应该注意的是 Mie 解的形式 $F(\theta)$ 是对于单位立体角 $\sin\theta d\theta$ 的强度分布, 因而是对于 $d\cos\theta$ 内的分布, 角度方向要以 $\cos\theta$ 表示, 不能用 θ 表示. 但是由于光子的运动方向 s 是一矢量, 所以状态参量中的可以用 $(\cos\theta, \sin\theta)$ 来表示. 因为只用 $\cos\theta$ 表示方向是不能区分 1,2 象限和 3,4 象限的.

对于由 s_{m-1} 入射的光子, 其方向参数为 $\cos\alpha_{m-1}$, $\sin\alpha_{m-1}$

则由 $F(\cos\theta)$ 取样得到 $\Delta\cos\theta$, 即 s 的变化, 由于对应于一个 $\Delta\cos\theta$, θ 可以有两种取法, 如图所示,



所以 $\cos\alpha_m = \cos\alpha_{m-1} \pm \Delta\cos\theta$

正负号的取法可以以二分之一的均分概率进行抽样.

由此可以归纳出整个求解平面平行介质层在平面波入射下的多重光散射问题的 Monte Carlo 解法:

1. 源光子位置, 出射方向抽样
2. 散射点间飞行距离的抽样
3. 计算下一次散射点的位置

判断光子是否已飞出系统之外?

YES: 计数, 并录下出射位置 x , 方向 $\cos\theta$

GOTO 1., 进行下一个光子的抽样跟踪

NO: 由 $p(s', s)$ 对光子散射角 $s \cdot s'$ 抽样

计算出光子新的飞行方向 s , GOTO 2.

总的光子数可以事先确定为 N , (N 为几十万到几千万次). 最后由计数的结果, 即对每一出射角度计数 M , 则 M/N 就是一个确定角度的多重光散射出射角强度分布值 $I(x, \cos \theta)$. 由此可以得到前后向的散射角分布.

对于无穷大的平面波入射, 只要参出射角方向 $\cos \theta$ 计录即可. 而对于有一定宽度的平面波入射, 则出射点位置是必须计录的. 设横向坐标为 x , 则如果设 Δx 为最小的横向分辨率, 那么

$$\hat{I}(x, \cos \theta) = \int_{x - \frac{\Delta x}{2}}^{x + \frac{\Delta x}{2}} I(x, \cos \theta) dx$$

或者在计数的过程中判断出射点的位置是否在所要求的 $\left(x - \frac{\Delta x}{2}, x + \frac{\Delta x}{2}\right)$ 内, 凡是落入此区间, 则计数加1.

§ 6. Monte Carlo 计算法结果

我们对三种典型尺寸的粒子在无穷大平面波入射下的平面平行介质的多重散射问题给出了计算的结果.

首先给出的是单次散射的 Mie 散射分布图 (图 4-1).

$$\lambda_0 = 1.06 \mu\text{m}; \quad m = 1.33; \quad d = 0.1, 1, 10 \mu\text{m}$$

对于 $d=0.1 \mu\text{m}$ 的粒子, 单次散射的角分布接近于 Rayleigh 散射的分布.

对于 $d=1.0 \mu\text{m}$ 的粒子, 尺寸与波长相差不多, 表现出前向大于后向, 但是前向散射的角半宽仍比较大, 且局部峰不多.

当粒子的尺寸 $d=10 \mu\text{m}$ 时, 对应于大粒子的情况, 即前向散射远大于其它方向的散射, 且前向十分尖锐, 同时有许多的局部峰值.

这三种粒子的大小从相函数上看是具有代表性的. 在一定程度上决定了多重散射后的角分布的情况.

在 ϕ 方向上对 $p(s, s')$ 进行积分, 这是因为若以纸平面为准, 散射在前后两部份是对称的. 这相当于在几何光学中的光路计算是以轴对称为准计算的. 从光学上讲是容易理解的, 这样一个三维空间问题就可以简化为二维平面问题来加以解决. 当然, 在原理上纯解三维构型问题没有任何的困难, 只在计算和表达上增加一定的复杂性.

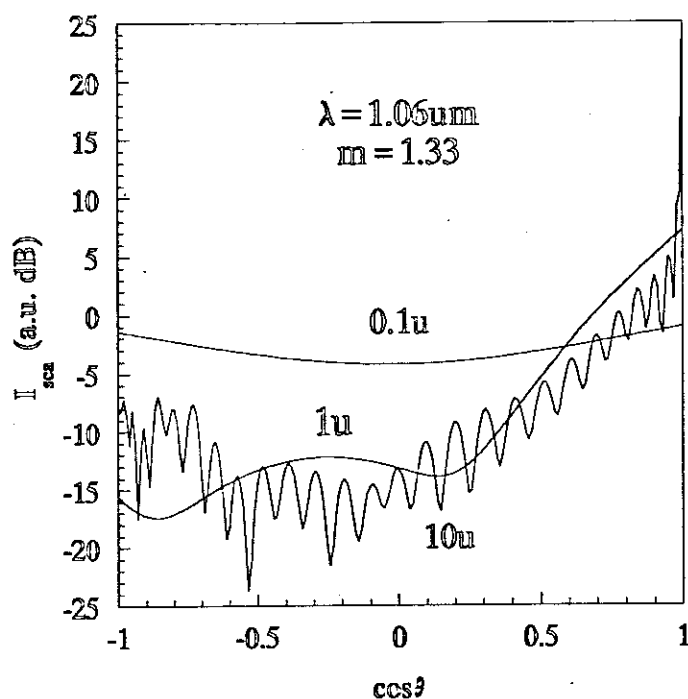
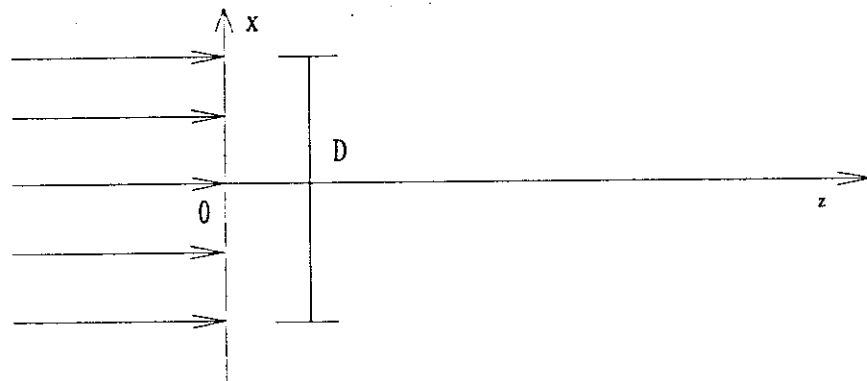


图4-1 三种典型尺寸的粒子的单次散射相函数图(横坐标用散射角的余弦)

§ 6.1 抽样过程的具体数学表达公式

1. 初始状态抽样, 即源光子位置, 方向

如果是平面波入射, 设光束宽度为 D , 以光束中心为 z 轴, 如图所示



则对于平行平面波 $\mathbf{r}_0 = (x_0, z_0) = (D(\xi - 0.5), 0)$

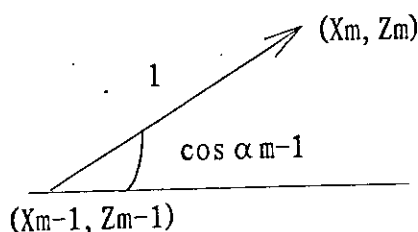
其中 ξ 为 $[0, 1]$ 上的随机数, $\mathbf{s}_0$ 为入射光方向

若是无穷大平面波, 则只要以 z 坐标及 $\mathbf{s}_0$ 表示即可, 无须对 x 进行抽样.

2. 两次散射间的飞行距离抽样, 即求下一个碰撞散射点

因为 $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| = l$ 满足 $f(l)dl = \rho\sigma_t \exp(-\rho\sigma_t l)dl$ 分布

$$\text{所以 } l = -\frac{\ln \xi}{\rho\sigma_t}$$



由图可知, (以 $\cos \alpha$ 为角方向参数)

$$\begin{cases} z_m = z_{m-1} - \frac{\ln \xi}{\rho\sigma_t} \cos \alpha_{m-1} \\ x_m = x_{m-1} - \frac{\ln \xi}{\rho\sigma_t} \sin \alpha_{m-1} \end{cases}$$

3. 判断光子是否飞出系统之外

对于平面平行介质层而言, 设 L 为层厚度, 如果

$z_m > L$ 或者 $z_m < 0$, 则表示飞出系统边界

4. 在飞出系统时, 光子的位置和方向

设第 m 个散射位置坐标已位于系统之外 (图 4-2)

① $z_m > L$

$$\begin{aligned} x_e &= x_{m-1} + (L - z_{m-1}) \sin \alpha_{m-1} \\ z_e &= L \end{aligned}$$

② $z_m < 0$ 有

$$\begin{aligned} x_e &= x_{m-1} + (0 - z_{m-1}) \sin \alpha_{m-1} \\ z_e &= 0 \end{aligned}$$

角度 s_e 即 $\cos \alpha_e, \sin \alpha_e$ 都等于 $\cos \alpha_{m-1}, \sin \alpha_{m-1}$

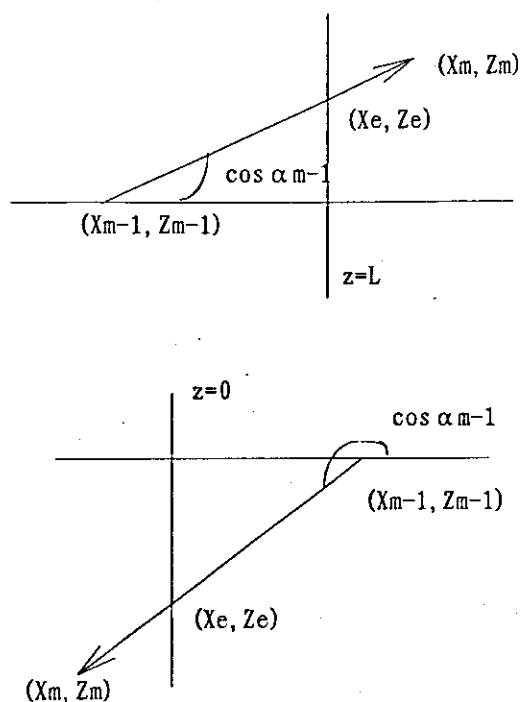


图 4-2

5. 散射方向取样

从概率论的角度讲, 单次散射是以 $\cos \theta$ 为分布的概率分布密度函数, 为 $F(\cos \theta)$, $-1 < \cos \theta < 1$. 为了抽样 $\cos \theta$, 先对 $F(\cos \theta)$ 求累积分布, 这是因为 $F(\cos \theta)$ 无法用解析式子表示, 只能用一般的抽样方法进行.

因为对球形粒子而言, 散射角分布对于 $\theta=180^\circ$ 是上下对称的, 这时为了区分 $\cos \theta$ 对应的 θ 倒底是在上下哪一部分, 则再抽样另一随机数以概率二分之一均分决定处于上下哪一部分.

§ 6.2 计算结果

设 $l=0.5$, 我们计算了在无穷大平面波入射下, 各不同的 τ 下(数密度不同)的, 入射角不同时的散射角分布图. 对于平行平面介质层, 在 $Z=0$ 的后向平面上出射的散射光相当于 $\cos \theta < 0$ 的区域, 而在 $Z=l$ 的前向平面即透过的散射光强度角分布相当于 $\cos \theta > 0$ 的区域.

图 4-3 是入射角为 0° , $d=0.1\mu\text{m}$ 的散射分布图, 分开的目的是为了看清正前向散射强度的变化.(抽样 100000 次). 而图 4-4 则是将它们一起图在一张图中, 为了分析散射分布随光学厚度变化.

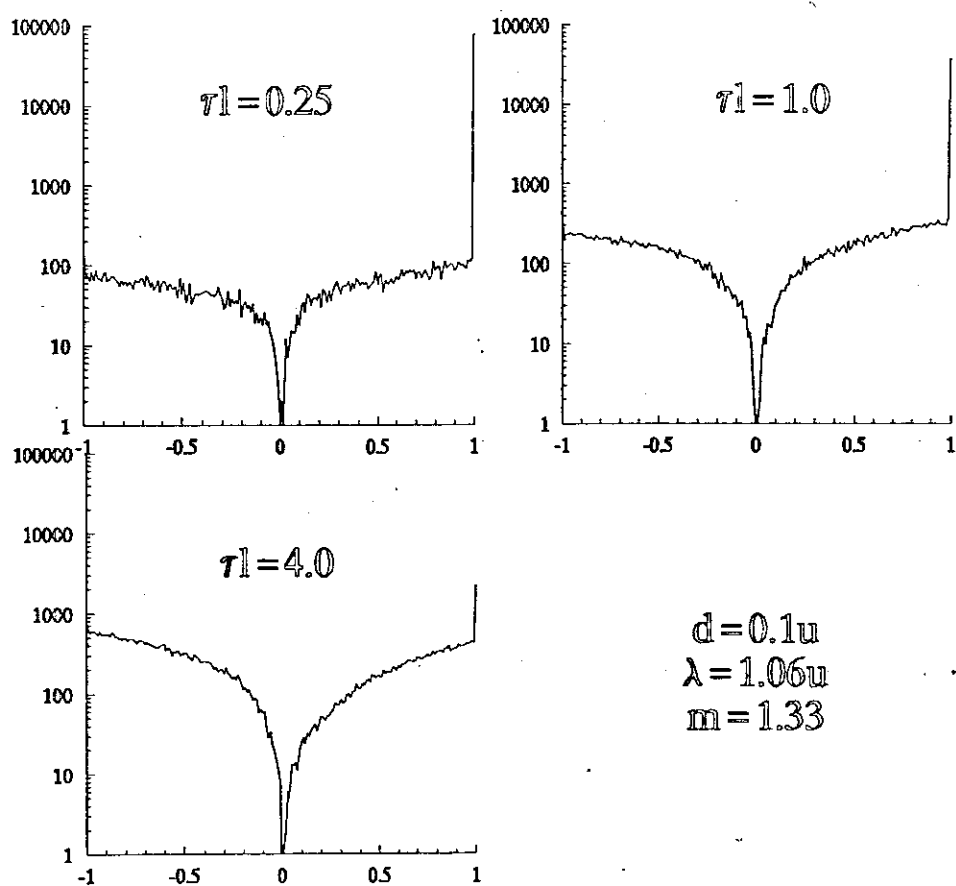


图 4-3 多重散射角分布图(纵坐标为散射强度,横坐标为散射角的余弦)

局部的类似于噪声的起伏,是由于 Monte Carlo 方法本身的计算造成的,因为 Monte Carlo 计算的方差(指某角度 $\cos \theta$ 的散射强度的方差)大小是由抽样数和该角度上的散射几率的大小决定的,抽样次数越大,该角度上的散射几率越大,则方差越小,也就是在计算的结果上,起伏越小。从图 4-3 看,当光学厚度增加时,在非 0 度的角度上,总的散射几率是增加的,因此起伏就变小。所以在 Monte Carlo 计算图中的起伏并不是意味实际的散射是有起伏的;当抽样次数趋于无穷大时,可以预计 Monte Carlo 的计算曲线将是平滑的。

$\cos \theta = 1$ 的峰是由于未经散射而直接透过粒子层的光子形成的,随光学厚度的增加,未经散射而透过粒子层的光子数将减少,因此在 $\cos \theta = 1$ 的散射峰也将减小。从散射的意义上讲,这个尖峰不意味着散射。

从图 4-4 看,前向散射部分 ($\cos \theta > 0$) 当光学厚度由 0.25 开始增加时,前向散射强度是增加的,这是由未经散射的那部分光子输运过来的;当光学厚度继续增加,则前向散射将下降,这是因为光程长,总的透过几率开始减小;光子这时要经过许多次的散射过程才能透过粒子个质层,而次数很大的散射过程发生的概率是小的。

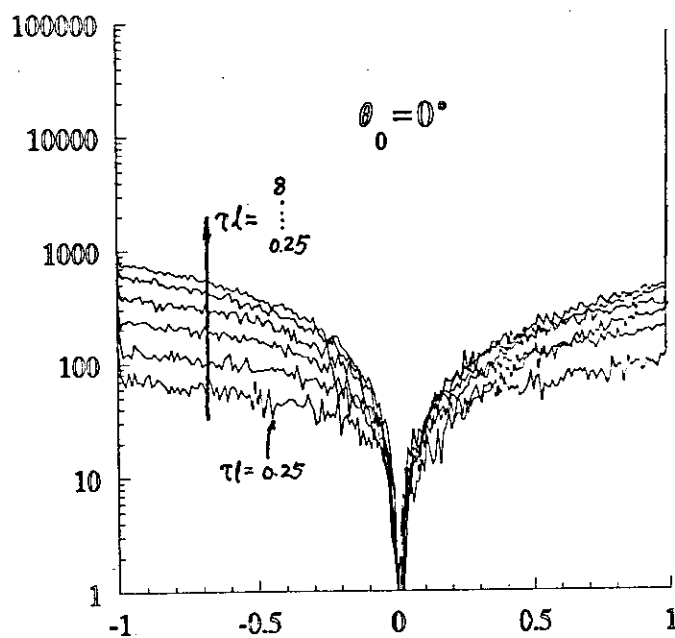


图4-4 多重散射角分布随光学厚度的变化图 ($\tau l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$, 入射角0度)

后向散射的光强度总是随光学厚度的增加(即粒子数密度的增加)而增大,最终趋于饱和.这是由于光学厚度越大,第一次散射后的光子平均位置离 $Z=0$ 越近,那么对后向散射而言,光子从 $Z=0$ 点,即从后向散射出来的概率就越大

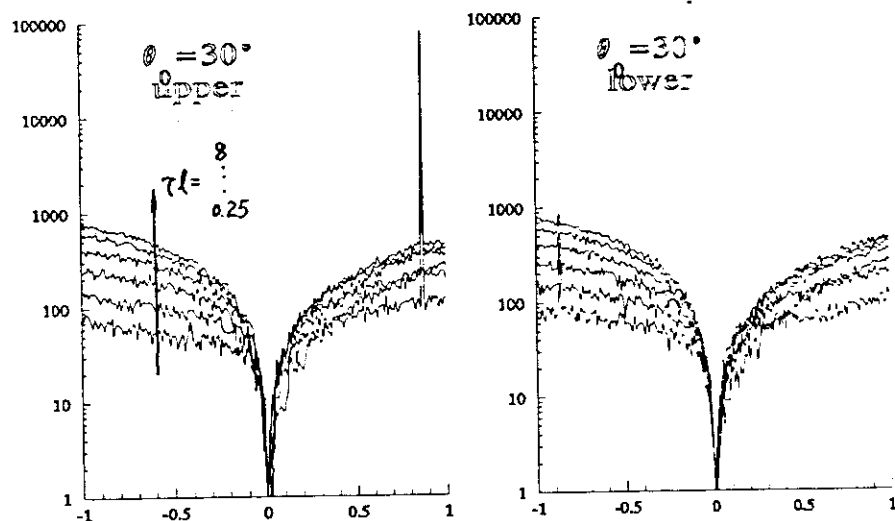


图4-5 入射角为30度时,在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度分布图
(纵坐标为散射强度,横坐标为散射角的余弦, $\tau l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

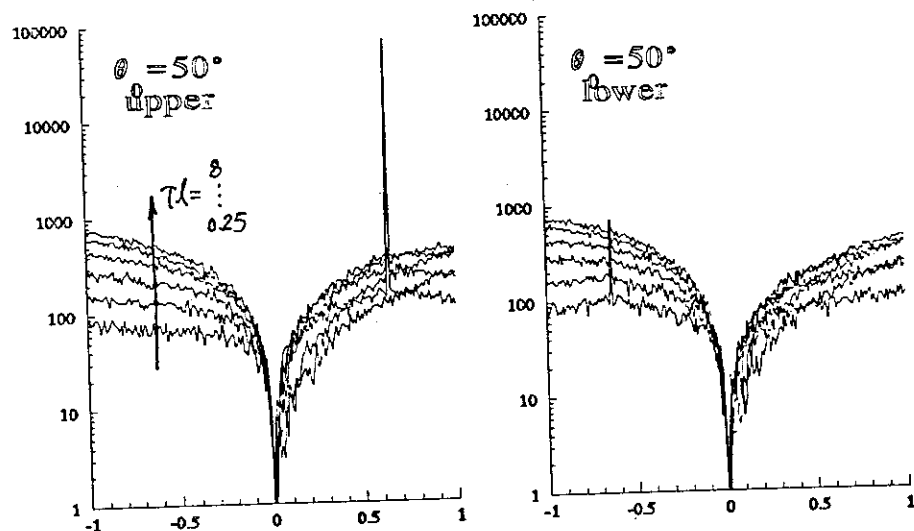


图4-6 入射角为50度时,在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度,横坐标为散射角的余弦, $\tau/l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

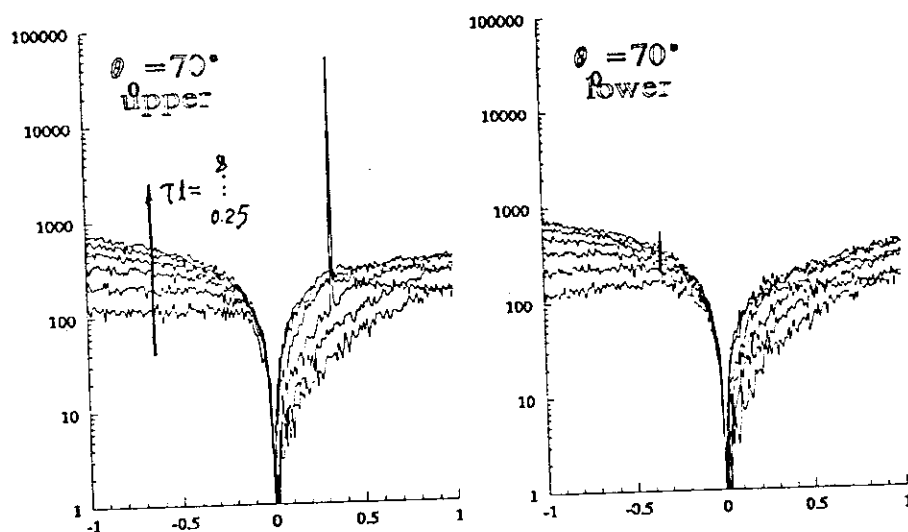
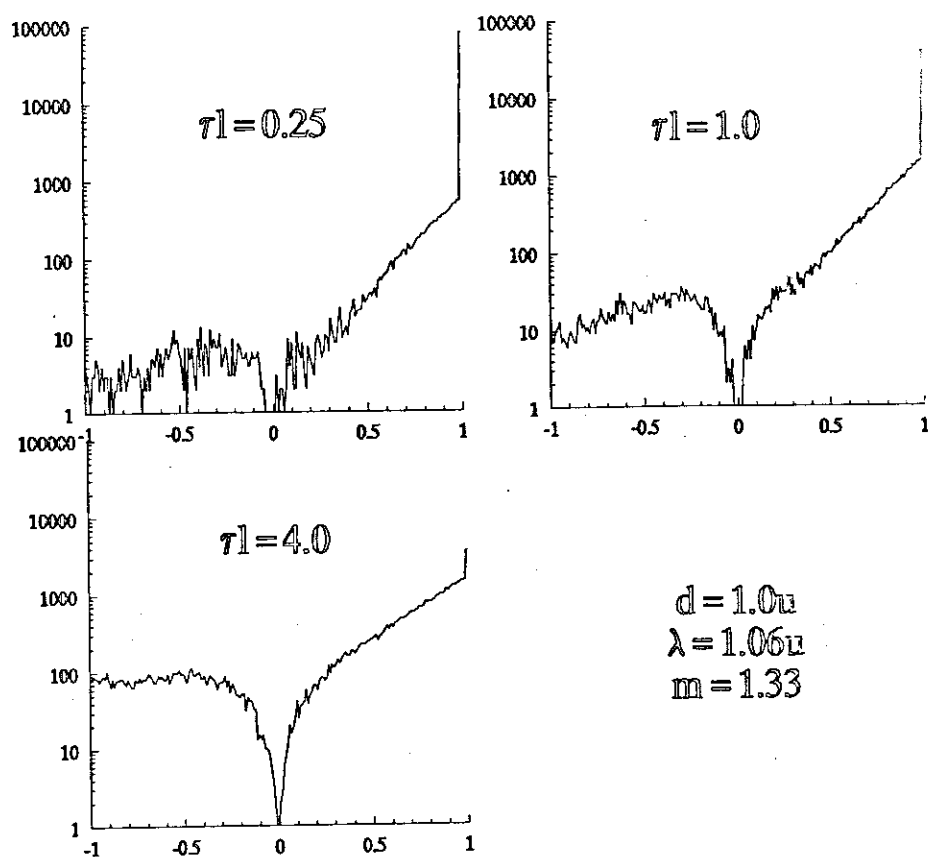


图4-7 入射角为70度时,在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度,横坐标为散射角的余弦, $\tau/l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

图 4-5 到图4-7 是 $d=0.1\mu\text{m}$ 时,入射角倾斜的多重散射计算结果.

图 4-8 到图 4-12 是 $D=1.0$ 的计算结果.

 图 4-8 入射角为0度时,多重散射强度角分布随光学厚度的变化图
(纵坐标为散射强度, 横坐标为散射角的余弦)

从计算的结果可以看, 当 τl 和总的取样次数相同时, 由于 $d=1.0\mu\text{m}$ 的粒子的在前向比 $d=0.1\mu\text{m}$ 的粒子的散射有更大的几率, 因此前者在前向的计算结果的起伏明显地小于后者. 而在后向的散射却相反, $1.0\mu\text{m}$ 的粒子的散射几率是小于 $0.1\mu\text{m}$ 的粒子的. 由此看来, 如果在对 $d=10.0\mu\text{m}$ 的粒子计算时, 前向多重散射的计算是会更加的, 即方差小, 但在后向方差则会比 $0.1\mu\text{m}$ 和 $1.0\mu\text{m}$ 的更大. 所以在对 $10.0\mu\text{m}$ 的粒子的计算中, 我们将总的抽样次数增加 10 倍, 即 100 百万次, 而在计算完后再除以 10, 这样在后向的多重散射的方差就不会太大. 从实际的计算结果看的确以增加抽样次数的代价换取了计算的精度. 在这里, Monte Carlo 算法的特点再一次的表现了出来, 它要求我们在计算中为了保证对于散射几率小的地方计算的方差不能太大, 则只能通过增加总的抽样数来完成, 尽管在散射几率大的地方计算方差已足够的小了. 当然这主要指在低粒子数密度的情况下会出现这种现在, 从散射的计算看, 对于粒子数密度大时, 计算的方差完全随数密度的增加而减小. 由此可见, Monte Carlo 算法对于粒子浓度大时的计算比低浓度时更为有效. 幸好在粒子浓度低时可以有单次散射的近似, 所以对于真正的多重散射, Monte Carlo 算法不失为一种好的方法.

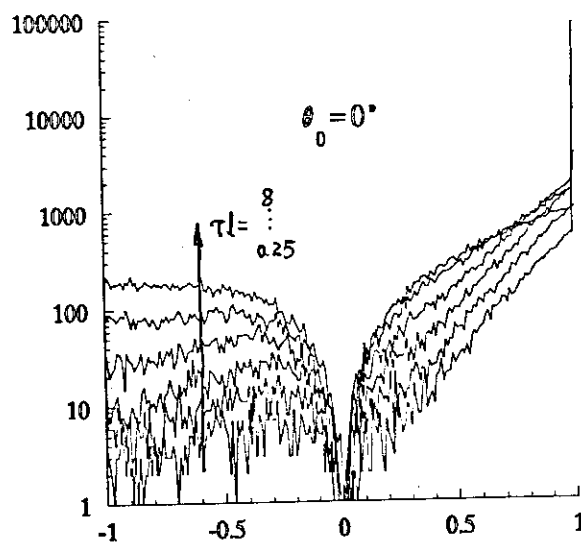


图4-9 入射角为0度时, 散射强度角分布随光学厚度的变化图
(纵坐标为散射强度, 横坐标为散射角的余弦)

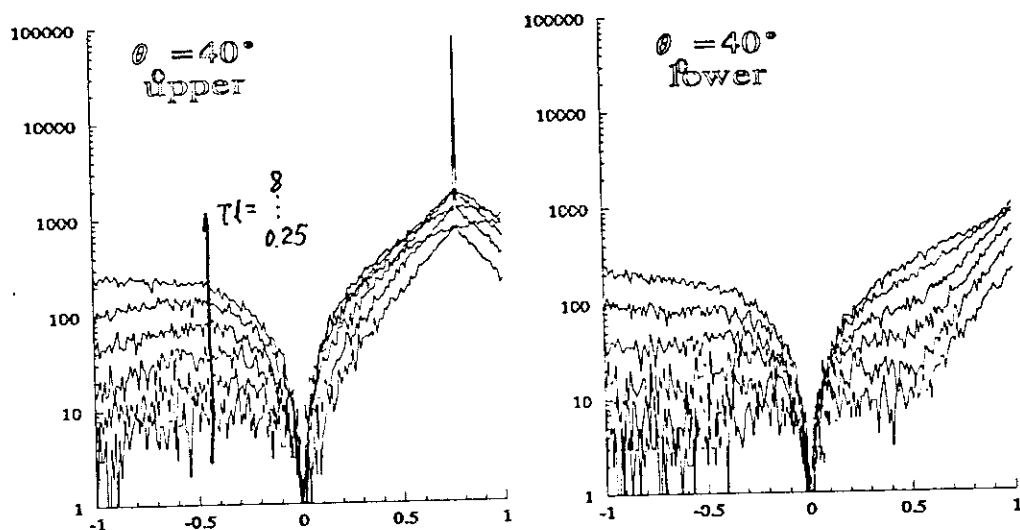


图4-10 入射角为40度时, 在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度, 横坐标为散射角的余弦, $\tau_l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

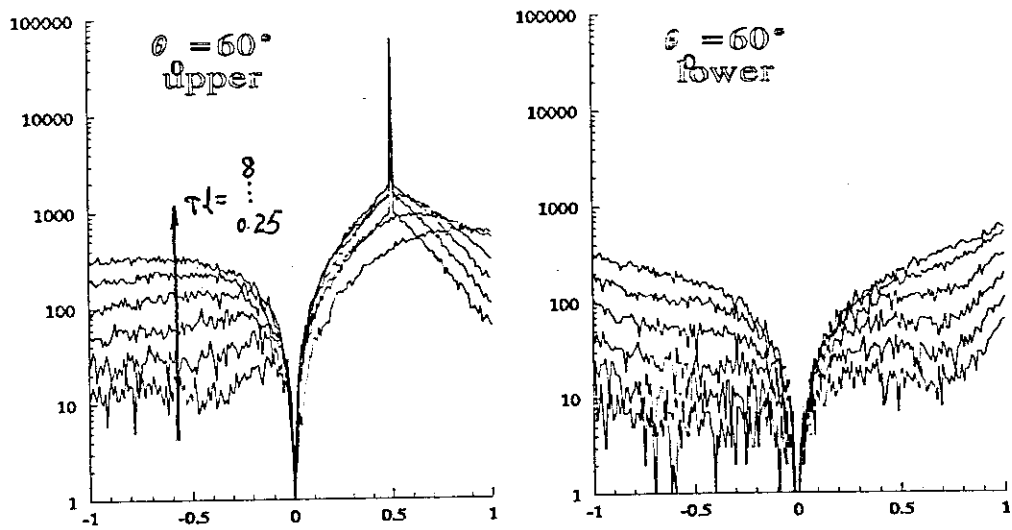


图4-11 入射角为60度时,在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度,横坐标为散射角的余弦, $\tau l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

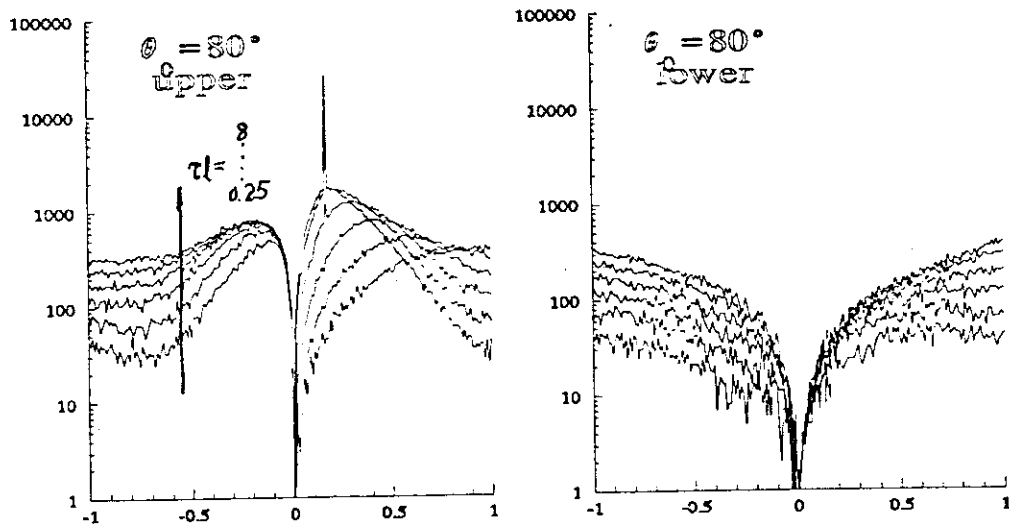


图 4-12 入射角为50度时,在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度,横坐标为散射角的余弦, $\tau l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

图 4-13 到图 4-17 是 $D=10^4$ 的计算结果.

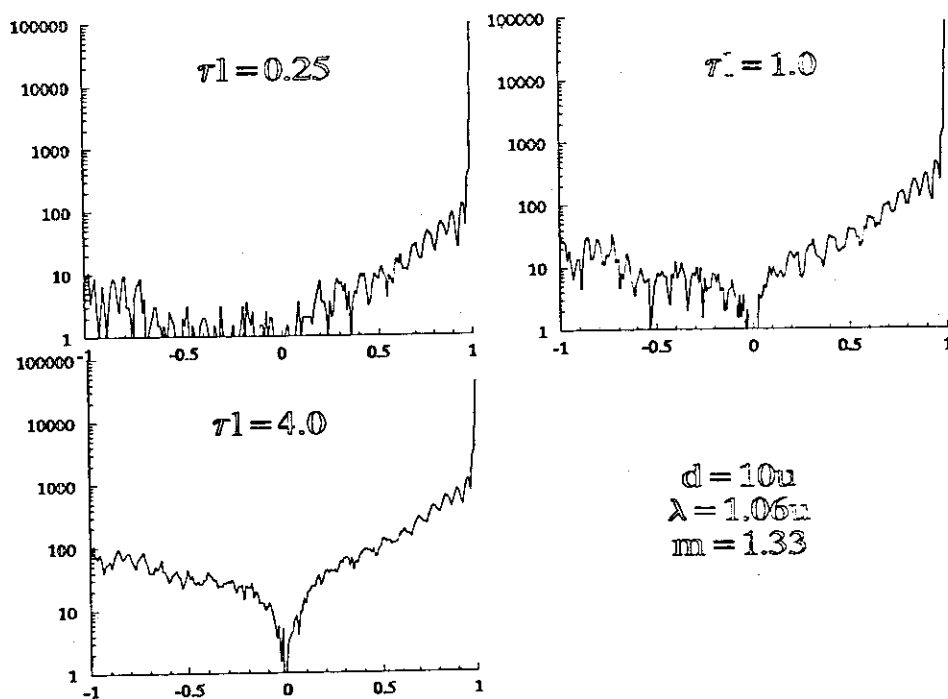


图 4-13 入射角为0度时, 散射强度角分布随光学厚度的变化图
(纵坐标为散射强度, 横坐标为散射角的余弦)

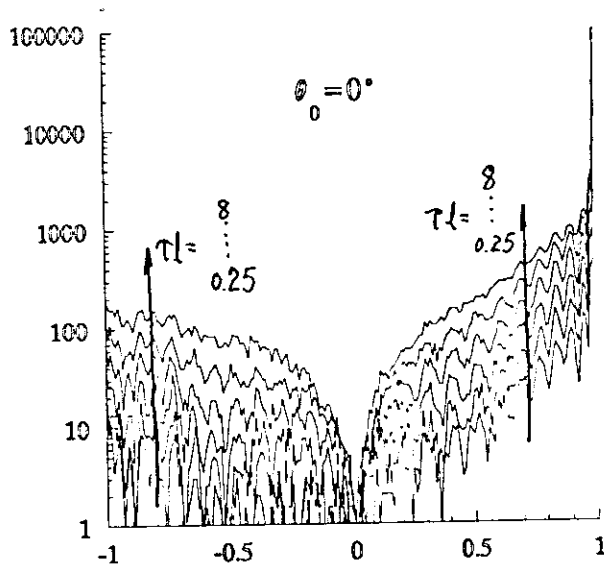


图 4-14 入射角为0度时, 散射强度角分布光学厚度的变化图
(纵坐标为散射强度, 横坐标为散射角的余弦, $\tau l = 0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

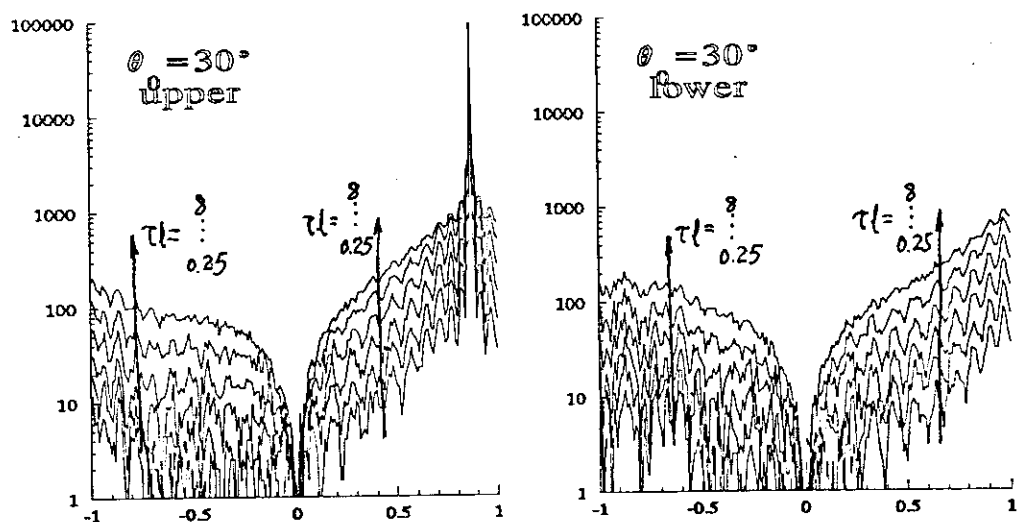


图 4-15 入射角为30度时, 在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度, 横坐标为散射角的余弦, $\tau l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

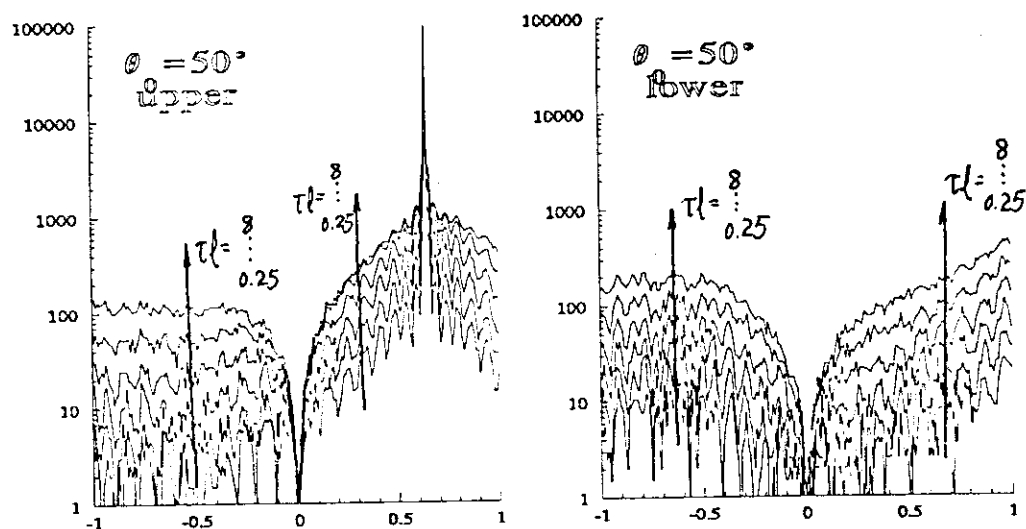


图 4-16 入射角为50度时, 在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度, 横坐标为散射角的余弦, $\tau l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

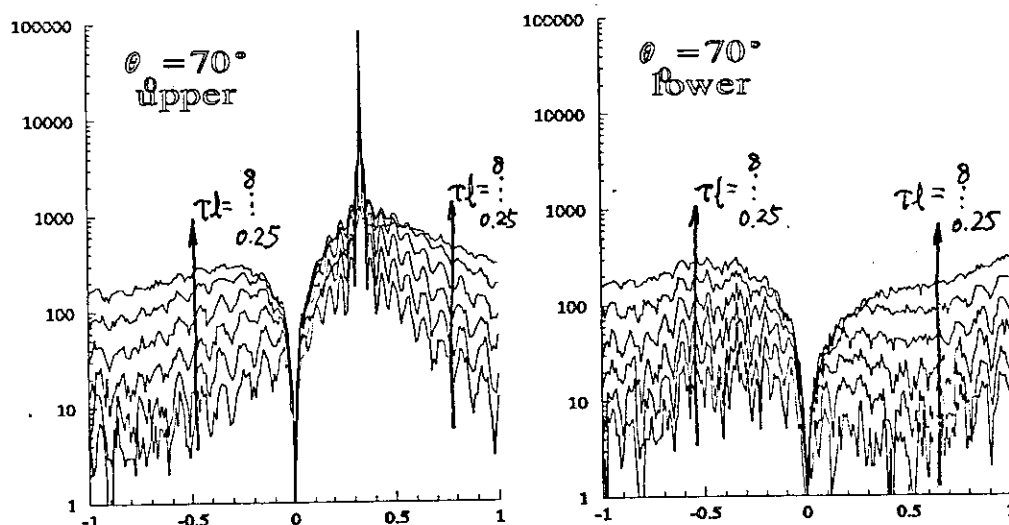


图4-17 入射角为70度时,在 Z 轴上下两个半平面内的散射强度角分布图
(纵坐标为散射强度,横坐标为散射角的余弦, $\tau l=0.25, 0.5, 1, 2, 4, 8$)

比较 $D=0.1\mu, D=1.0\mu, D=10\mu$ 的计算图:

1. 以入射角为 0 度的作比较,由于相函数的差别(从 $D=0.1$ 增加到 $D=10.0$ 相函数的前后向散射强度的差别增大),因此在相同的光学厚度下,多重散射的结果是粒子越大,前向散射强度的下降越慢.如在 $\tau l=4$ 时,0.1 的粒子的多重散射的前向强度已小于后向的散射强度,1.0 的粒子前向大于后向,但差别不明显;而 10. 的粒子则前向仍比后向的散射强度大很多.

2. 对同一尺寸的粒子而言,倾斜入射的角度越大,多重散射的后向散射强度也越大.这是因为入射的角度越大,相当于倾斜的光学厚度越大,所以从正向穿过的几率减小,而相应的从后前散射回来的几率就增大.同时由于斜光学厚度的增加,对相同的 τl ,前向散射的强度比入射角为 0 度的多重散射就要小,相应的后向散射也就大.

3. 对于入射角度不为 0 度时,散射强度对散射角度在 1,2 象限和 3,4 象限是不同的,所以计算的结果是分别表示的.在 1,2 象限的我们称为是上半平面,3,4 象限称为下半平面.

上半平面的后向散射,对同一粒子而言,都随 τl 的增加,也就是粒子浓度的增加而增加.增加的快慢是入射的角度越大而越快.其大小是粒子越小越大,因为小的粒子相函数的后向越大.

上半平面的前向散射,对同一粒子而言,随 τl 的增加,依粒子的大小表现出不同的变化,无统一的规律.

下半平面的后向散射,对同一粒子而言,都随 τl 的增加,也就是粒子浓度的增加而增加.增加的规律与上半平面的后向散射相似.

下半平面的前向散射,与下半平面的前向散射的变化类似.但对 $D=1.0$ 和 $D=10.0$ 的粒子,对同一粒子而言,都随 τl 的增加而增加.

因此,散射强度随粒子浓度的变化有明显规律的区域是上半平面的后向散射.或者也可以包括在粒子比较大时(如 $D=1.0, D=10.0$)的下半平面的后向散射.我们将在下一节中作详细的分析.

§ 7. 计算结果的详细分析

在上一节中我们已计算了多重散射在典型的三种粒子尺寸下的全角度散射强度的分布.接下去作具体的讨论.首先来看在不同入射角和不同的 τl 下,光子的前向穿透,和后向返回的整体几率.计算结果如下(图 4-18, 19 $D=0.1\mu\text{m}$;图 4-20, 21, $D=1.0\mu\text{m}$;图 4-22, 23; $D=10.0\mu\text{m}$)

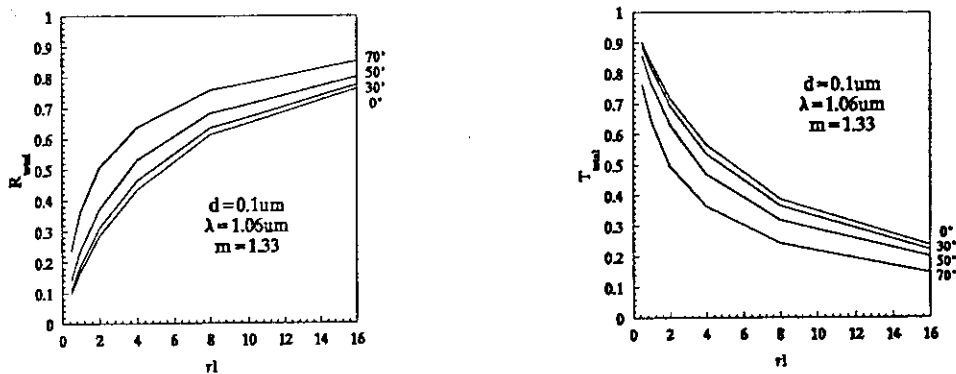


图4-18 不同入射角度下总体反射率(左)和总体透过率(右)随光学厚度的变化 图4-19

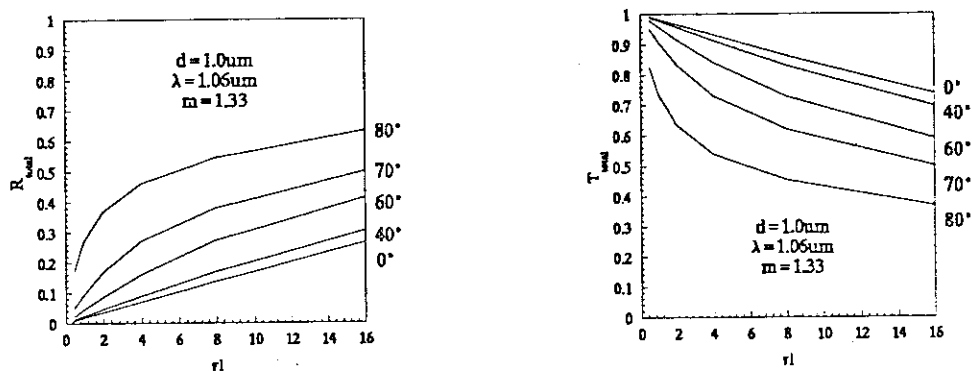


图4-20 不同入射角度下总体反射率(左)和总体透过率(右)随光学厚度的变化 图 4-21

随粒子尺寸的增加,总的前向穿过几率是增加的,因为粒子越大,相函数的前向强度越大.相应的粒子越大,后向返回几率也就越小.

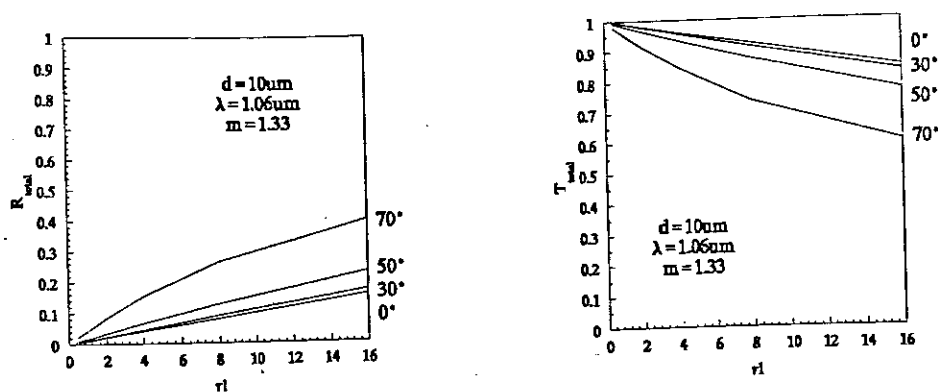
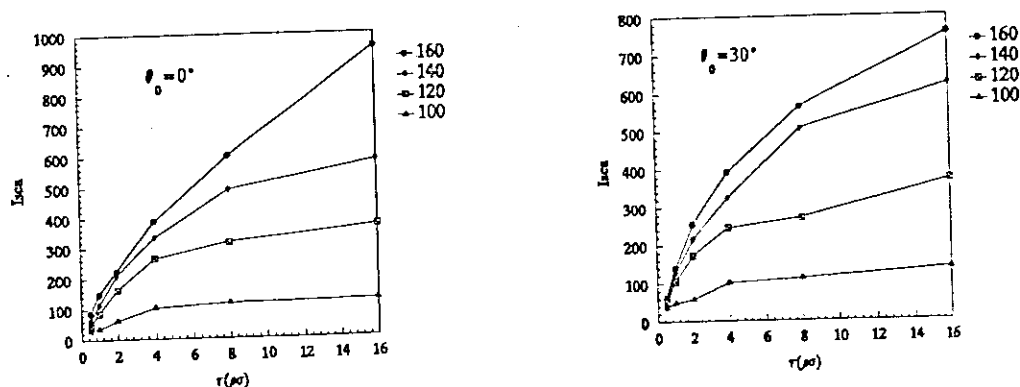


图4-22 不同入射角度下总体反射率(左)和总体透过率(右)随光学厚度的变化 图4-23

在 τl 小于 16 的计算范围内, 对 $D=10$ 的粒子, 前向散射的总几率始终是大后向的散射总几率; 而 $D=1.0$ 的粒子只有在入射角大于 70 度, $\tau l > 8$ 时, 后向散射的总几率开始大于前向; 但对于 $D=0.1$ 的粒子, 在任何入射角度上, 都有可能某一浓度(即 τl)后使得后向散射的总几率大于前向散射。也就是说, 当光学厚度相同时, 包含较小粒子的介质层的后向多重散射的总几率大。

再从总的后向散射几率随 τl , 即粒子浓度的变化上看, 粒子较大时的线性度较粒子尺寸小的为好。当然这并不意味着在任一角度上的散射强度对于粒子浓度的线性一定好。所以接下来分析某角度上的多重散射光强度与粒子浓度的关系。这是多重光散射计算的主要目的。

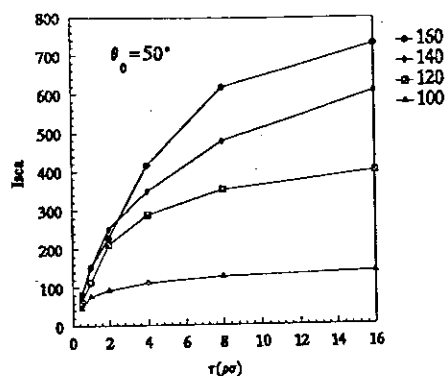
在上一节中我们分析得出的结果中有一条是, 上半平面的后向散射强度与粒子的浓度有明显的关系, 所以以下的分析都是针对于这一接收角度区间来讨论的。图 4-24 是 $D=0.1\mu m$ 时, 不同的入射角度下, 在不同的接收角度上的多重散射光强度值。(图4-25为 $D=1.0\mu m$, 图4-26为 $D=10\mu m$ 。)



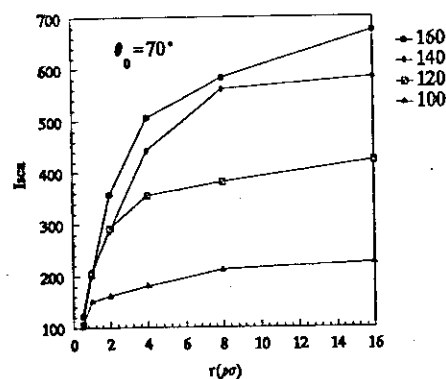
入射角为0度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图

入射角为30度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图

图 4-24 不同入射角下(0度,30度)在不同的接收角(100,120,140,160度)
的多重光散射强度与光学厚度的关系图($D=0.1\mu m$)

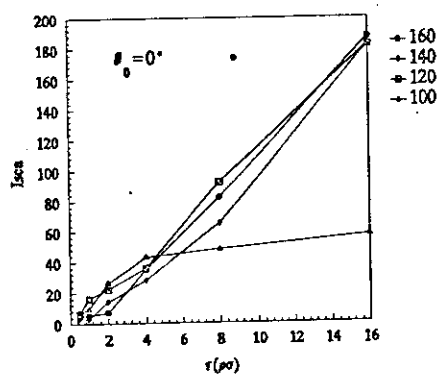


入射角为50度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图

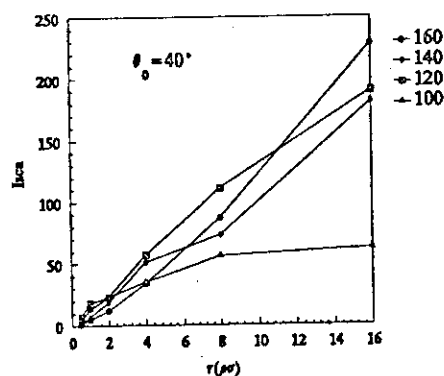


入射角为70度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图

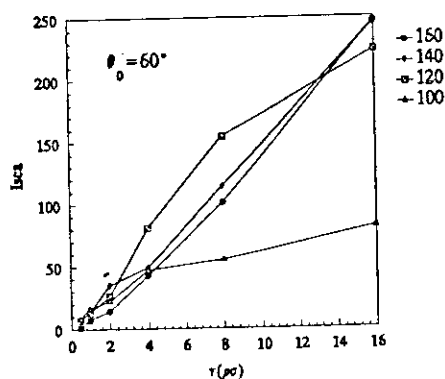
图 4-24 不同入射角下(50度,70度)在不同的接收角(100,120,140,160度)的多重光散射强度与光学厚度的关系图($D=0.1\mu\text{m}$)



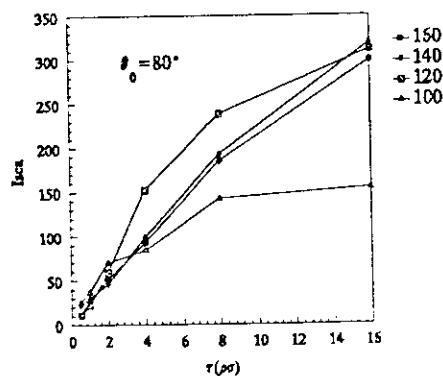
入射角为0度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图



入射角为40度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图

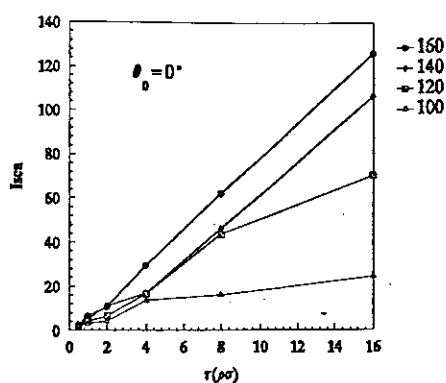


入射角为60度

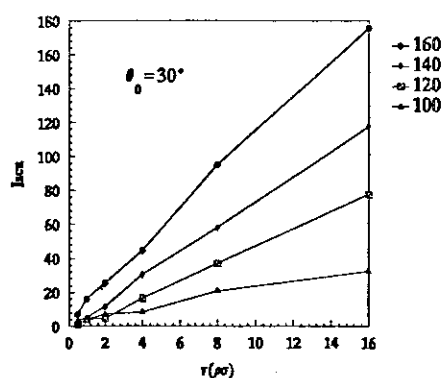


入射角为80度

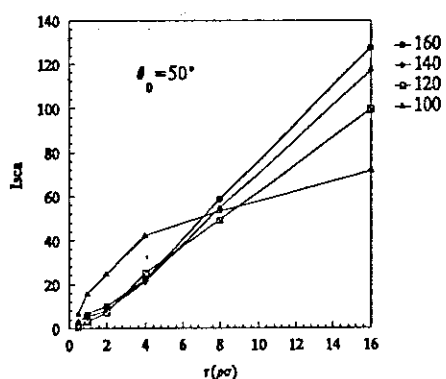
图 4-25 不同入射角下(0,40,60,80度)在不同的接收角(100,120,140,160度)的多重光散射强度与光学厚度的关系图($D=1.0\mu\text{m}$)



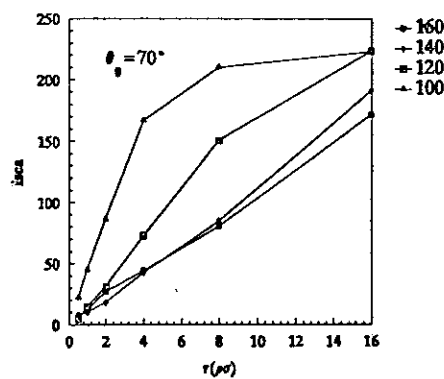
入射角为0度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图



入射角为30度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图



入射角为50度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图

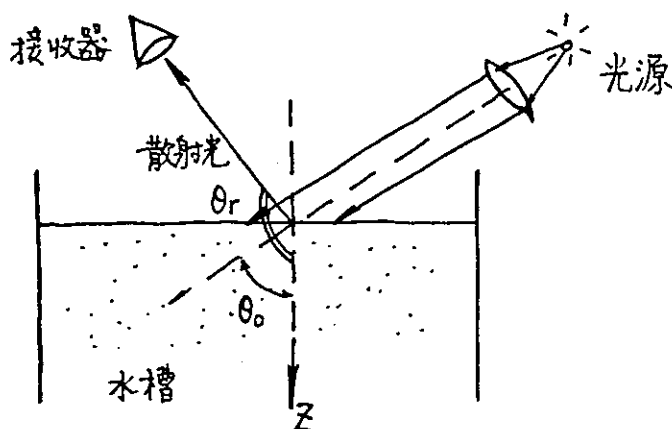


入射角为70度时不同接收角下的
散射强度与光学厚度的关系图

图 4-26 不同入射角下(0,30,50,70度)在不同的接收角(100,120,140,160度)
的多重光散射强度与光学厚度的关系图($D=10\mu\text{m}$)

下面我们将结合表面散射浊度仪来分析以上的计算结果。

所谓表面散射浊度仪, 是一种水处理中的仪器, 它的目的是为了检测水中不溶解物的含量大小。其原理图如下:



当光向水的表面入射时,一部分光线将进入水中,由于水中有不溶解物的存在,相当于小粒子的不溶解物对光产生散射,散射光又从水的表面出射被光电接收器所接收,根据光信号的强度大小来相对地表示浊度的大小,不溶解物的浓度越高,浊度应越高;因此,入射角度和接收角度的确定,应使得接收到的散射光强值要明显地与粒子的浓度有一定的对应关系.在分析过程中,假设粒子是球形的,当然这是离实际情况非常远的,但是可以近似认为非球形粒子由于取向的平均作用,其综合效应与球粒子相差不多;另外一个假设球形粒子的原因是,表面散射浊度仪的定标是用一种称为 **Formazine** 的悬浊液定义的,它是通过定量反应得到的,并在不同的确定稀释下定义不同的浊度,如 400 浊度,它的确切浓度值是不知道的,但总是一个确定的值,因此表面散射浊度仪的定标是参照物相对定标,即 40 浊度和 400 浊度只是说明不溶解物的浓度相差 10 倍.对于 **Formazine** 悬浊液可以通过显微镜观察其中的粒子的大小和形状,大致是在 $1-2\mu$ 的球形粒子,所以对表面散射浊度仪的分析可以针对球形粒子进行讨论.

从设计仪器的思想出发,应有关于检测信号与被研究对象之间的确定关系的曲线,对于表面散射浊度仪就是散射光强度与浊度或者说粒子浓度之间的关系.信号值大(有利于提高信噪比),动态范围大(即散射信号随粒子浓度的变化明显),和线性度好对仪器的设计是有利的.根据这一要求,可以从理论的计算中确定入射光角度和接收器的角度.

当浊度很小时,从理论上讲是属于单次散射($\tau l < 0.1$),因此在任何角度上的散射光强度都应与粒子的浓度成正比.而浓度再上升时,就必须以多重散射作分析.

由图4-24 到图4-26 的计算看,对于 $D=0.1$ 的粒子,在入射角一定的情况下,接收角越大,即越接近于 180° 度,信号的动态范围越大.且虽然线性度都不好,但从适合于仪器的角度看,接收角大是有利的.而当确定为大角度接收角后,入射角从计算结果看则是小为好.所以总结对 $D=0.1$ 左右的粒子浓度通过表面散射方法的检测应采用小角入射(向 0° 度接近)和大角(向 180° 度接近)接收.

实际水质检测中的大多数情况是 D 大于光波长,即可用 $D=1$ 和 $D=10$ 的粒子的多重散射结果来进行分析.首先从线性度上看,接收角为 160° 和 140° 时明显优于 120° 和 100° . 因此可以先确定接收角大一些为好.在此基础上,并考虑到信号大小和动态范围,比较在不同入射角时的情况,得出的结论是入射角大为好.但不能太大,这是因为实际中的粒子处于水中,参加散射的光是折射入水中的那部分光强,当入射角越靠近 90° 度,折射率越小,所以散射的光强度值会变小,权衡之后一般取入射角为 70° 左右为宜.细致地对入射角为 70° 的粒子大小为 $D=1$ 和 $D=10$ 的图分析, 160° 的散射光强值在 140° 之下,所以接收角宜取 140° 到 160° 之间.要注意的是,这些角度值都是指在水中的角度,因为水的表面是有折射的,因此换算到空气中应作修正.

§ 8. 小结

本章主要讲述了用蒙特卡罗方法计算小粒子的多重散射, 并从理论上和物理意义上证明了该方法与解多重散射微分积分方程的等效性. 对于平面平行介质层的小粒子多重散射进行了大量的计算, 表明散射强度在后向散射角度上与粒子的浓度具有明显的对应关系 ($90^\circ < \theta < 270^\circ$), 因此可以利用这一区间对粒子的浓度进行相对的计量.

对粒子的大小落在不同的范围内时, 当入射光与介质界面的入射角以及接收器的接收角度不同时, 散射的强度与粒子浓度的关系的线性度和动态范围都是不相同的. 通过多重散射的计算, 我们就可以得到对于这些参数的散射图, 来确定光的入射角和接收角, 使对于粒子浓度的测量为最佳的参数条件.

我们的计算都是在无穷大平行光入射和对在横向尺度上为无穷大的粒子介质层进行的, 能在一定的程度上反映实际中的情况. 但对于散射体系是有边界的, 则在计算的方法上是大致相同的, 只要在程序中加入光子在体系边界上的散射行为, 一般就是透过率和反射率即可. 这要比其它的基于解析方法的计算要简单得多, 尤其当边界很用解析式子表达时.

本章中所用的蒙特卡罗算法的具体算法是最简单的一种, 蒙特卡罗算法本身是一门独立的学问, 为了提高该算法的精度 (减小计算方差), 节约计算机的计算时间和对内存的要求, 有许多技巧和方法. 如为了充分地利用对于跟踪一个光子的散射过程中的所有散射次数的散射信息, 如两次散射间的运动距离和方向, 有首次飞行估计和末次飞行估计法等. 当散射粒子较大时, 由于单次散射的角分布总体上在前向要比后向大很多, 所以为了提高计算的精度, 对散射角的取样应采用偏移抽样或分层抽样技巧. 总之对运用蒙特卡罗算法计算小粒子的多重光散射还有很多工作可以做.

第5章 任意形状物体散射的初步讨论

从第2章到第4章,我们对小粒子光散射的讨论,都是针对于球状粒子的.如果粒子的形状不是球形,散射问题将变得十分的复杂.由电磁场理论可知,散射问题是一个电磁场的边值问题的解,只有当物体的边界正好对应于正交坐标系的某一坐标时,才会有解析形式的解.如球形粒子的边界是球坐标的径向坐标,无限长柱体的表面是柱坐标中的径向坐标等,因为解析解法中是用分离变量的方法做的.所以从文献中看,球形和无限长的园柱体有好的和完全的解,但有限长的园柱也没有好的结果.对于椭球体,虽然可以用解析的方法加以求解,但是将涉及非常复杂的椭圆函数和椭球坐标转换的计算.因此对许多形状简单,但边界并不满足以上所说的条件时,解析方法是无能为力的.

任意形状物体的散射在工程电磁场中是用数值方法来求解的,但大都是对于导体的散射计算,如在天线,波导问题中的计算.因为导体内部的电场总是为0,所以散射问题可以化为一个表面积分方程.当对表面进行一定的划分之后,可以发展为边界元素法,有限元法等.

电介质体的散射,可以直接从体积分方程出发,对体积进行划分,先求出散射体的内部场,再计算远场散射强度.它的理论计算精度只依赖于体积划分的细度,从方法上讲可以对任何形状的物体散射进行计算.同时,如果散射体的介电常数或折射率是不均匀的话,那么只有通过体积划分的方法才能计算散射.

在本章中,我们的目的不是对任意形状的物体散射进行全面的分析,而是给出一种计算方法,并对简单形状的物体进行散射计算.因为任意形状的物体的全面的散射计算决不是用几页纸能完成的.

即使得到了散射的体积分方程,对于它的解法也有许多,大规模的方法有有限元法等,在本章的解法中,我们从数学上将体积分方程用矩量法来解,因为矩量法是有限元方法的基础,弄清了该方法的过程可以为今后的进一步工作打好方法上的基础.

§ 1. 矩量法的基本原理

矩量法是一种将连续性方程化为代数方程组的方法,它既适用于求解微分方程,又适用于求解积分方程.由于已有有效的数值计算方法求解微分方程,故目前矩量法大都用来求解积分方程.对于不同问题应采用不同形式的矩量法才能有效.

根据线性空间的理论, N 个线性方程的联立方程组,微分方程,差分方程,积分方程均属于Hilbert空间中的算子方程,这类算子方程可化为矩阵方程求解.由于在求解过程中需要计算广义矩量,故这种方法又称为矩量法.事实上,矩量法是

将算子方程化为矩阵方程, 然后求解该矩阵方程的方法, 进一步分析将会看到, 它实质上是内域基加权余量法.

设问题的算子方程

$$L(f)=g$$

式中 L 为算子, 算子可以是微分方程, 差分方程, 积分方程, g 是已知函数如激励源, f 为未知函数如电流. 假定算子方程的解存在且是唯一的, 于是有逆算子 L^{-1} 存在, 则使 $f=L^{-1}(g)$ 成立. 算子 L 的定义域为算子作用于其上的函数 f 的集合, 算子 L 的值域为算子在其定义域上运算而得的函数 g 的集合.

假定两个函数 f_1 和 f_2 以及两个任意常数 a_1 和 a_2 有如下关系

$$L(a_1f_1+a_2f_2)=a_1L(f_1)+a_2L(f_2)$$

则称 L 为线性算子.

在矩量法处理问题的过程中, 需要求内积 (f, g) 的运算, 内积定义为: 在 Hilbert 空间中两个元素 f 和 g 的内积是一个标量(实数或复数), 计为 (f, g) , 内积运算满足下列关系

$$(1) (f, g)=(g, f)$$

$$(2) (af+bg, h)=a(f, h)+b(g, h)$$

$$(3) (f, f^*) > 0, f \text{ 不等于 } 0$$

$$(f, f^*)=0, f=0$$

式中 a, b 为标量, f^* 为 f 的共轭量

下面用线性空间和算子的概念来解释矩量法的含义. 假定有一算子方程为第一类 Fredholm 积分方程

$$\int_a^b G(z, z')f(z')dz'=g(z)$$

式中 $G(z, z')$ 为核, $g(z')$ 为已知函数, $f(z')$ 为未知函数. 首先用线性独立的正交函数集 $f_n(z)$ 来近似表示未知函数, 即

$$f(z')=\sum_{n=1}^N a_n f_n(z')$$

a_n 为待定系数, $f_n(z)$ 是算子域内的基函数. N 为正整数, 其大小根据要求的计算精度确定. 将 $f(z')$ 的近似表达式代入算子方程的左端, 则得

$$\sum_{n=1}^N a_n L[f_n(z')] \approx g(z)$$

由于 $f(z')$ 用近似式表示, 因此算子方程的左端近似值与右端精确值 $g(z)$ 之间存在如下关系

$$e(z) = \sum_{n=1}^N a_n L[f_n(z)] - g(z)$$

$e(z)$ 称为余量. 如果令余量的加权平均值为零, 即

$$(e(z), W_n) = 0, \quad n=1, 2, \dots, N$$

式中 W_n 是权函数序列, 这就是加权余量法. 将上式展开便可得到典型形式的矩量方程. 所谓内域基, 是指基函数 f_n 必须在算子 L 的定义域内选择并且满足边界条件.

矩量法是数值求解场的统一的处理方法, 对于算子方程 $L(f)=g$ 的矩量法解, 可以归纳成统一的求解步骤, 它包括三个基本的求解过程.

1. 离散化过程

这一过程的主要目的在于将算子方程化为代数方程, 具体过程是

- (1) 在算子域内适当地选择一组基函数 $f_1, f_2, \dots, f_N$ 它们应该是线性无关的.
- (2) 将未知函数 $f(x)$ 表示为该组基的线性组合, 并取有限项近似, 即

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n f_n \approx f_N(x) = \sum_{n=1}^N a_n f_n(x)$$

- (3) 代入算子方程, 利用算子的线性, 将算子方程化为代数方程,

$$\sum_{n=1}^N a_n L(f_n) = g \quad (a)$$

于是, 求解 $f(x)$ 的问题转化为求解 f_n 的系数 a_n 的问题.

2. 取样检验过程

为了使 $f(x)$ 的近似函数 $f_N(x)$ 与 $f(x)$ 之间的误差极小, 必须进行取样检验, 在抽样点上使加权平均误差为零, 从而确定未知系数 a_n , 这一过程如下

- (1) 在算子 L 的值域内适当地选择一组权函数 $W_1, W_2, \dots, W_m, W_n$ (又称检验函数), 它们也是线性无关的.

- (2) 将 W_m 与式 (a) 取内积进行抽样检验, 因为要确定 N 个未知数, 需要进行 N 次抽样检验, 则

$$(L(f_n), W_m) = (g, W_m), \quad m=1, 2, \dots, N$$

- (3) 利用算子的线性和内积的性质, 将式 (a) 化为矩阵方程, 即

$$\sum_{n=1}^N a_n (L(f_n), W_m) = (g, W_m) \quad m = 1, 2, \dots, N$$

写成矩阵形式

$$[l_{mn}][a_n] = [g_m] \quad m = 1, 2, \dots, N$$

式中

$$[a_n] = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad [g_m] = \begin{pmatrix} (g, W_1) \\ (g, W_2) \\ \vdots \\ (g, W_N) \end{pmatrix}$$

$$[l_{mn}] = \begin{pmatrix} (L(f_1), W_1), (L(f_2), W_1), \dots, (L(f_N), W_1) \\ (L(f_1), W_2), (L(f_2), W_2), \dots, (L(f_N), W_2) \\ \vdots \\ (L(f_1), W_N), (L(f_2), W_N), \dots, (L(f_N), W_N) \end{pmatrix}$$

于是, 求解代数方程问题转化为求解矩阵方程的问题.

3. 矩阵求逆过程

(1) 一旦得到了矩阵方程, 通过常规的矩阵求逆或求解线性方程组, 就可以得到矩阵方程的解

$$[a_n] = [l_{mn}]^{-1} [g_m]$$

式中 $[l_{mn}]^{-1}$ 是矩阵 $[l_{mn}]$ 的逆矩阵. 求得的展开系数 a_n 代入到式中, 便得到原来算子方程 $L(f)=g$ 的近似解

$$f(x) \approx \sum_{n=1}^N a_n f_n(x)$$

§ 2. 三维任意形状物体散射的体积积分法

考虑空间 V_1 内的 Maxwell 电磁场, $V \subset V_1$, V 是散射体.(图 5-1)

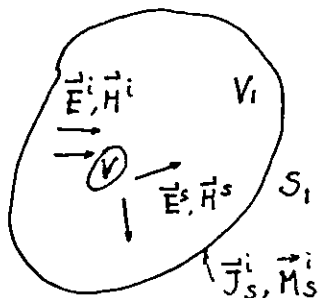


图 5-1

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J}_i + j\omega\epsilon\mathbf{E} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\mathbf{M}_i - j\omega\mu\mathbf{H} \end{aligned} \quad \text{in } V_1 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) &= \mathbf{J}_s \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2) &= -\mathbf{M}_s \end{aligned} \quad \text{on } S_1$$

当 V 不存在时, V_1 内的电磁场为入射场 $\mathbf{E}^i, \mathbf{H}^i$, 它们是由电流源和磁流源 $\mathbf{J}_i, \mathbf{M}_i$ 引起的. 因此有

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H}^i &= \mathbf{J}_i + j\omega\epsilon\mathbf{E}^i \\ \nabla \times \mathbf{E}^i &= -\mathbf{M}_i - j\omega\mu\mathbf{H}^i \end{aligned} \quad \text{in } V_1 \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_1^i - \mathbf{H}_2^i) &= \mathbf{J}_s^i \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_1^i - \mathbf{E}_2^i) &= -\mathbf{M}_s^i \end{aligned} \quad \text{on } S_1$$

当引入散射体 V 后, 设其中没有电流源和磁流源, 这时设 V_1 内的电场和磁场为 $\mathbf{E}, \mathbf{H}$, 满足方程

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}^i + \mathbf{E}^s \\ \mathbf{H} &= \mathbf{H}^i + \mathbf{H}^s \end{aligned} \quad (3)$$

将(2)式代入(1)式中, 并利用式(3)的关系, 可以得到散射场 $\mathbf{E}^s, \mathbf{H}^s$ 所满足的电磁场方程.

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H}^s &= j\omega(\epsilon - \epsilon_1)\mathbf{E} + j\omega\epsilon\mathbf{E}^s \\ \nabla \times \mathbf{E}^s &= -j\omega(\mu - \mu_1)\mathbf{H} - j\omega\mu\mathbf{H}^s \end{aligned} \quad \text{in } V_1 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_1^s - \mathbf{H}_2^s) &= \mathbf{J}_s^s \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_1^s - \mathbf{E}_2^s) &= -\mathbf{M}_s^s \end{aligned} \quad \text{on } S_1$$

由此可见, 散射场是由以下的等效电流源和磁流源引起的

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{eq} &= j\omega[\varepsilon(\mathbf{r}) - \varepsilon_1]\mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{M}_{eq} &= j\omega[\mu(\mathbf{r}) - \mu_1]\mathbf{H}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad \text{in } V_1$$

由于在 V 外的介质满足 $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_1$ $\mu(\mathbf{r}) = \mu_1$, 所以 $\mathbf{J}_{eq}, \mathbf{M}_{eq}$ 只在 V 内不为零,

即

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{eq} &= j\omega[\varepsilon(\mathbf{r}) - \varepsilon_1]\mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{M}_{eq} &= j\omega[\mu(\mathbf{r}) - \mu_1]\mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad , \mathbf{r} \text{ in } V \end{aligned}$$

方程 (4) 的解为

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^s(\mathbf{r}) &= -j\omega\mu_1 \int_V \overline{\mathbf{G}}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \int_V \overline{\mathbf{G}}_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ \mathbf{H}^s(\mathbf{r}) &= -j\omega\mu_1 \int_V \overline{\mathbf{G}}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \int_V \overline{\mathbf{G}}_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad \mathbf{r} \text{ in } V_1$$

$\overline{\mathbf{G}}_e, \overline{\mathbf{G}}_m$ 分别电场和磁场的张量 Green 函数, 当 V_1 趋向于无穷大时, 就是我们通常所说的电介质对外部入射电磁场的散射问题. 这时的 Green 函数为

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{G}}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \left(\bar{\mathbf{I}} + \frac{1}{k^2} \nabla \nabla \right) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \overline{\mathbf{G}}_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \nabla \times [\bar{\mathbf{I}} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \\ g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{e^{-jk|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \end{aligned}$$

其中 $\bar{\mathbf{I}}$ 为单位张量.

当我们把 $\mathbf{r}$ 限定在 V 内时, 就得到关于在 V 内的电磁场 $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ 的积分方程(因为在 $\mathbf{J}_{eq}, \mathbf{M}_{eq}$ 中也包含了 $\mathbf{E}, \mathbf{H}$).

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^s(\mathbf{r}) &= -j\omega\mu_1 \int_V \overline{\mathbf{G}}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \int_V \overline{\mathbf{G}}_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ \mathbf{H}^s(\mathbf{r}) &= -j\omega\mu_1 \int_V \overline{\mathbf{G}}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \int_V \overline{\mathbf{G}}_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad \mathbf{r} \text{ in } V$$

如果是非磁性介质, 则等效磁流源为零, 并且由于电场和磁场是相联系的, 所以只要解关于电场的积分方程, 如下

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^i - j\omega\mu_0 \int_V \overline{\mathbf{G}}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

(在接下去的讨论中不再写下标 e, eq)

由于 $\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 在 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ 点是奇异的, 则方程在理论上可以化为