

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2018.02.020

含气泡粒子辐射特性的有效介质理论适用性研究

翟波¹, 黄晓玉²

(1. 中航工业洛阳电光设备研究所, 洛阳 471000; 2. 南阳师范学院, 南阳 473061)

摘要: 采用离散偶极近似法和 Bruggeman 有效介质理论分别计算了气泡个数为 49、99、149、199、249 和 299 的含气泡粒子的辐射特性参数. 比较分析后发现: 对于衰减因子、吸收因子和散射因子, 在气泡数目小于一定值时, 有效介质理论具有较好的适用性, 反之适用性较差; 对于单次散射反照率和非对称因子, 有效介质理论均具有较好的适用性. 同时证明了 Michael 教授关于有效介质理论对含气泡粒子适用性推测的片面性.

关键词: 含气泡粒子; 有效介质理论; 辐射特性参数; 适用性

中图分类号: TK121 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2018)02-0334-05

Validity of effective medium theory in radiative properties of porous particles

ZHAI Bo¹, HUANG Xiao-Yu²

(1. Luoyang Institute of Electro-Optical Devices, China Aviation Industry Corporation, Luoyang 471000, China;

2. Nanyang Normal University, Nanyang 473061, China)

Abstract: The model of porous particles is built in this paper, and the optical properties of them were carried out utilizing discrete dipole approximation and Bruggeman effective medium theory for the number of air pockets from 49 to 299. After analyzing and comparing the scattering properties of porous particles obtained by two computing methods, we found that the effective medium theory has a good validity for the extinction efficiency, the absorption efficiency and the scattering efficiency when the number of air pockets less than a certain value, but not vice versa. While for the single-scattering albedo and the asymmetric factor, the effective medium theory always keeps a good validity in the research scope of this paper. The results also revealed that the inference of the doctor Michael about the validity of effective medium theory in light scattering of porous particles was not comprehensive.

Keywords: Porous particles; Effective medium theory; Radiative parameters; Validity

1 引言

粒子辐射作为辐射研究领域的一个重要分支, 在气象、通信、环保、生物、医学、材料、天文以及军事等众多领域中均有广泛的应用^[1-3]. 现实存在的粒子往往不是均匀的, 而由多种材料组成, 如含气泡粒子就大量存在于自然界中, 其中火山灰粒子、彗星尘埃粒子以及冰晶粒子中大多都含有气泡^[4].

气泡的存在会对粒子的辐射特性造成较大的影响, 然而目前国内外对此种粒子辐射特性的研究还较少.

在多相粒子辐射特性的研究中, 很多学者进行了有效介质理论的适用性分析. 其中, 张小林等^[5]学者采用离散偶极近似法 (DDA) 和有效介质理论对材料为黑炭和硫酸盐的致密内混合粒子的辐射特性参数进行了计算. 在分析比较后发现: 对于单

收稿日期: 2016-09-26

作者简介: 翟波(1972-), 男, 河南济源人, 工程师, 主要研究方向为环境和可靠性试验. E-mail: 1044310393@qq.com

通讯作者: 黄晓玉. E-mail: huangxiaoyu198510@163.com

分散系致密内混合粒子,有效介质理论在瑞利散射区具有较好的适用性,而在米散射区则有较大偏差.殷金英和刘林华^[6]基于电磁场平均的概念,利用 Maxwell-Garnett 和 Bruggeman 有效介质理论对三种煤灰粒子的光学常数进行了计算,并将计算结果与实验值进行了比较.对于含气泡的粒子,Michael 教授^[7]推测:当粒子内部气泡的尺寸明显小于入射电磁波波长时,或许能够采用有效介质理论来等效其辐射特性,但是目前还没有研究结果能够对此证明.本文首先建立含气泡粒子模型与有效介质模型(下文称为等效粒子),然后采用 DDA 法计算两种模型在特定入射电磁波波长下的辐射特性.通过对比分析计算结果的差别,验证在特定条件下有效介质理论对含气泡粒子辐射特性研究的适用性.

2 含气泡粒子模型

本文的重点不在于研究粒子表面形态特性对辐射特性的影响,所以如图 1 所示,我们采用了最简单的球形粒子作为含气泡粒子模型的基体.然后在基体内部随机填充上 N_g 个小的球形气泡,基体半径 R 与气泡半径 r 满足 $R/r = 10$. 由此含气泡粒子就被分成了两个部分:实体部分和气泡部分.同时为了不破坏基体表面的形态特性,本文规定气泡不与基体表面重叠而全部分布于粒子内部.这样就可以明确地区分开基体表面形态和内部气泡对粒子辐射特性的影响.

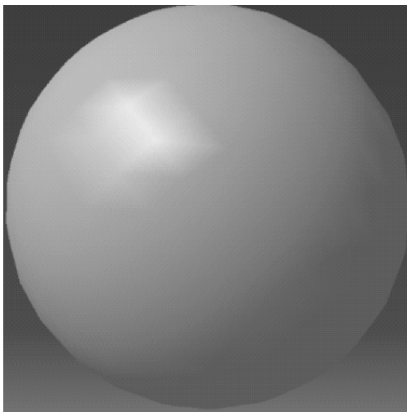


图 1 含气泡粒子模型基体

Fig. 1 The primary structure of the porous particles

研究发现当气泡在粒子内部的分布足够随机时含气泡粒子在各个方位角的辐射特性参数平均值相差不大.由此本文采用随机数产生器来计算每个气泡在基体内部的位置,以保证气泡在基体内部

的位置满足随机分布.为满足气泡尺寸远小于入射波长^[8],本文规定气泡之间不能够相互叠加,同时设定含气泡粒子模型中实体部分的等效半径 R_{eff} 为定值 $0.8 \mu\text{m}$,入射电磁波波长 λ 满足 $\lambda = 0.628 \mu\text{m}$.按上述方法建立起的含气泡粒子的模型如图 2 所示.

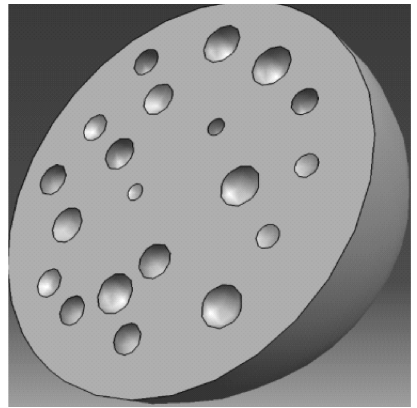


图 2 含气泡粒子模型剖面图

Fig. 2 The cross section of the porous particles

为了分析不同气泡数目下有效介质理论特性的适用性,我们分别建立了 $N_g = 49, 99, 149, 199, 249$ 和 299 的含气泡粒子模型.假设含气泡粒子的体积为 V ,单个气泡的体积为 V_0 ,则气泡的体积之和 V_1 满足 $V_1 = N_g V_0$,气泡的体积分数 f_1 满足:

$$f_1 = \frac{V_1}{V} = \frac{N_g}{1000} \quad (1)$$

基体的体积分数 f_2 为:

$$f_2 = 1 - f_1 \quad (2)$$

3 计算方法

DDA 法将散射体近似为 N 个偶极子的点阵,通过计算入射电磁波与这些偶极子点的相互作用,可以得到任意形状和组成的非球形粒子的辐射特性^[9].此方法可以计算得到粒子的衰减因子 Q_{ext} 、吸收因子 Q_{abs} 、散射因子 Q_{sca} 、单次散射反照率 ω 以及非对称因子 g 等辐射特性参量. DDA 算法 DDSCAT7.3^[10]在粒子尺度参数 x 满足 $x \leq 25$ 时,能得到较为精确的计算结果,其中 $x = 2\pi R/\lambda$, R 为粒子的等效半径.文中所有模型均由超过 100000 个偶极子点构成.

由于气泡的分布是随机的,含气泡粒子内部具有千变万化的结构,其辐射特性应是所有方位下的平均值.为此我们对含气泡粒子所处不同位置的所有方位角求平均,从而得到特性辐射特性参量辐射

特性参数的统计平均值.

$$[Q] = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \int_0^{2\pi} Q(\beta, \theta, \Phi) d\beta d(\cos\theta) d\Phi \quad (3)$$

式中: $[Q]$ 为含气泡粒子某辐射特性参数的平均值, $Q(\beta, \theta, \Phi)$ 为系统坐标系中某特定取向时含气泡粒子的辐射特性参数值, β, θ 和 Φ 为粒子的空间方位角.

有效介质理论将含气泡粒子近似为相同形状的均质粒子, 结合 DDA 算法可以实现含气泡粒子辐射特性参数的计算. 一种常用的有效介质理论是 Bruggeman 理论^[11], 计算公式为:

$$f_1 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} + f_2 \frac{\epsilon_2 - \epsilon_m}{\epsilon_2 + 2\epsilon_m} = 0 \quad (4)$$

式中: ϵ_m 为等效介电常量, ϵ_1 和 ϵ_2 分别为气泡和基体的介电常量. 在电磁理论中, 对于非铁磁性物质的介电常数与复折射率有关系:

$$\epsilon = m^2 \quad (5)$$

假设气泡内的气体为空气, 复折射率为 $m_1 = 1 + 0i$. 基体的复折射率为 $m_2 = 1.55 + 0.3i$. 根据有效介质理论可以计算出不同 N_g 下等效粒子的复折射率 m_e , 如下表 1 所示.

表 1 不同 N_g 下气泡的体积比和等效粒子的复折射率

Tab. 1 The volume ratios of air pockets and the complex refractive indexes of equivalent models with different N_g

$N_g/\text{个}$	49	99	149	199	249	299
f_1	0.049	0.099	0.149	0.199	0.249	0.299
m_e	1.524 + 0.286i	1.499 + 0.272i	1.476 + 0.260i	1.456 + 0.249i	1.436 + 0.238i	1.419 + 0.228i

为了便于比较, 文中同时求得了两种模型的衰减因子相对偏差 $\delta_{Q_{ext}}$ 、吸收因子相对偏差 $\delta_{Q_{abs}}$ 、散射因子相对偏差 $\delta_{Q_{sca}}$ 、单次散射反照率相对偏差 δ_ω 和非对称因子相对偏差 δ_g :

$$\left. \begin{aligned} \delta_{Q_{ext}} &= \left| \frac{Q_{ext} - Q_{ext,m}}{Q_{ext}} \right| \times 100\% \\ \delta_{Q_{abs}} &= \left| \frac{Q_{abs} - Q_{abs,m}}{Q_{abs}} \right| \times 100\% \\ \delta_{Q_{sca}} &= \left| \frac{Q_{sca} - Q_{sca,m}}{Q_{sca}} \right| \times 100\% \\ \delta_\omega &= \left| \frac{\omega - \omega_m}{\omega} \right| \times 100\% \\ \delta_g &= \left| \frac{g - g_m}{g} \right| \times 100\% \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

式中, $Q_{ext}, Q_{abs}, Q_{sca}, \omega$ 和 g 分别为含气泡粒子的辐

射特性参数; $Q_{ext,m}, Q_{abs,m}, Q_{sca,m}, \omega_m$ 和 g_m 分别为等效粒子的辐射特性参数.

4 结果与讨论

图 3 给出了入射波长为 $0.628 \mu\text{m}$ 情况下, 含气泡粒子与等效粒子的辐射特性参量, 即衰减因子 Q_{ext} 、吸收因子 Q_{abs} 、散射因子 Q_{sca} 、单次散射反照率 ω 以及非对称因子 g 随气泡数目 N_g 的变化规律. 由图 3(a) 可以看出, 含气泡粒子的衰减因子要大于等效粒子. 且当气泡数目较小时, 含气泡模型粒子的衰减因子与等效粒子之间差别不大. 随着气泡数目的增多, 含气泡粒子的衰减因子不断增大, 但等效粒子基本保持不变. 即含气泡粒子的衰减因子与等效粒子的差别随着气泡数目的增大而增大. 同时吸收因子和散射因子也表现出相同的规律, 如图 3(b) 和 (c) 所示. 然而两种粒子的单次散射反照率与非对称因子随气泡数目 N_g 的变化却不同于以上三种参量, 如图 3(d) 和 3(e) 所示: 含气泡粒子的单次散射反照率与非对称因子均要小于等效粒子, 并且当气泡数目较小时, 含气泡粒子与等效粒子间具有较小差别. 随着气泡数目的增多, 这种差别也随之增大, 但总体保持在较小范围内.

上述现象同样可以从表 2 中看出, 随着气泡数目的增大, 含气泡粒子特性与等效粒子的辐射特性参量相对偏差也随之增大. 对于衰减因子、散射因子和吸收因子: 当 $N_g = 99$ 时, 三种参量的相对偏差分别为 $\delta_{Q_{ext}} = 7.933\%$ 、 $\delta_{Q_{abs}} = 7.017\%$ 和 $\delta_{Q_{sca}} = 8.906\%$, 均小于 9% ; 当 $N_g = 149$ 时, 三种相对偏差都大于 10% , 分别为 $\delta_{Q_{ext}} = 12.118\%$ 、 $\delta_{Q_{abs}} = 10.672\%$ 和 $\delta_{Q_{sca}} = 13.652\%$; 而当 $N_g = 299$ 时, 三种相对偏差都超过 20% , 分别达到 $\delta_{Q_{ext}} = 25.324\%$ 、 $\delta_{Q_{abs}} = 22.416\%$ 和 $\delta_{Q_{sca}} = 28.322\%$. 这就说明在一定误差范围内 (如 $\delta_Q \leq 10\%$), 当气泡的体积比小于一定值 (如 $f_1 = 0.099$) 时, 衰减因子、吸收因子和散射因子可以采用有效介质理论进行等效; 反之, 含气泡粒子与有效介质理论之间有较大偏差, 即证明了 Michael 教授推测的片面性. 而对于单次散射反照率和非对称因子, 两种粒子在六种气泡数目下的相对偏差均较小 (小于 4%). 其中, 单次散射反照率最大相对偏差分别为 $\delta_\omega = 3.763\%$, 非对称因子为 $\delta_g = 1.986\%$. 此即说明, 单次散射反照率和非对称因子在本文研究的体积比内 ($f_1 \leq 0.299$) 可以采用有效介质理论来等效.

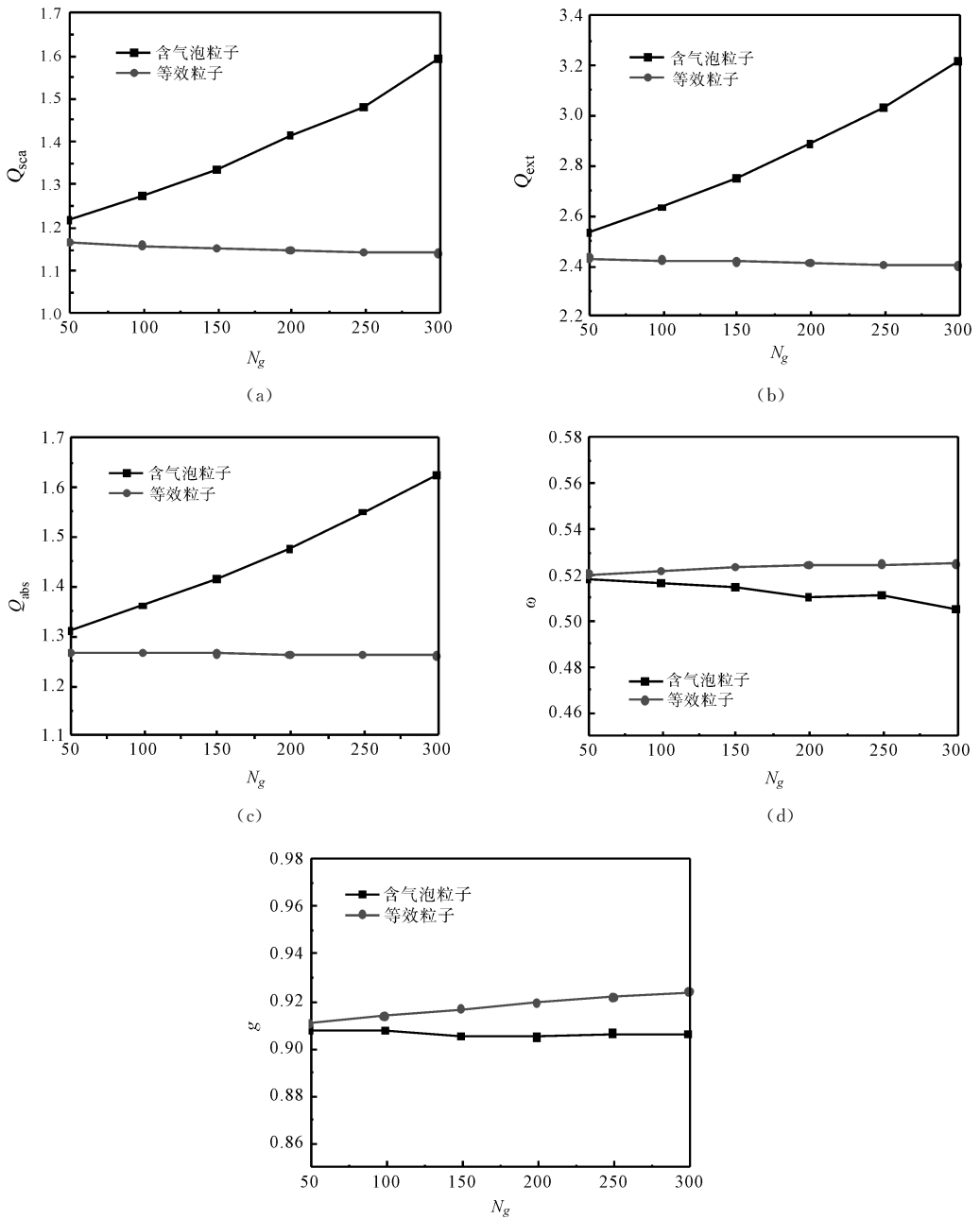


图 3 含气泡粒子与等效粒子在不同 N_g 下的辐射特性参量

(a) 衰减因子; (b) 吸收因子; (c) 散射因子; (d) 单次散射反照率; (e) 非对称因子

Fig. 3 Radiative parameters of porous particles and equivalent models with different N_g
 (a) the extinction efficiency; (b) the absorption efficiency; (c) the scattering efficiency; (d) the single-scattering albedo; (e) the asymmetric factor

表 2 不同 N_g 下含气泡粒子与等效粒子辐射特性参量的相对偏差

Tab. 2 The relative deviations of porous particles and the equivalent models with different N_g

N_g /个	49	99	149	199	249	299
$\delta_{Q_{ext}} / \%$	3.854	7.933	12.118	16.589	20.660	25.342
$\delta_{Q_{abs}} / \%$	3.507	7.017	10.672	14.412	18.568	22.416
$\delta_{Q_{sca}} / \%$	4.236	8.906	13.652	18.861	22.848	28.322
$\delta_{\omega} / \%$	0.368	0.978	1.619	2.543	2.569	3.763
$\delta_g / \%$	0.286	0.679	1.248	1.599	1.695	1.986

5 结 论

本文建立了气泡尺寸远小于入射电磁波波长的含气泡粒子, 并利用离散偶极近似法和 Bruggeman 有效介质理论计算了含气泡粒子在不同气泡数目(气泡体积比)下的辐射特性. 特性研究分析了在特定条件下有效介质理论对含气泡粒子辐射特性等效的适用性. 结果表明: 含气泡粒子的衰减因

子、吸收因子和散射因子,当气泡体积比小于一定值时,有效介质理论具有较好的适用性.而当体积比大于此值时,三种辐射特性参量与有效介质理论的偏差均较大,适用性较差;而对于含气泡粒子的单次散射反照率和非对称因子,有效介质理论在文中所研究的气泡体积比范围内均具有很好的适用性.本文同时也证明了 Michael 教授推测的片面性.

本文在研究有效介质理论对含气泡粒子辐射特性等效的适用性时,仅选择了特定的基体复折射率和固定的实体体积,并且假定了所有气泡的大小相等.针对更全面的含气泡粒子辐射特性的有效介质理论适用性有待进一步地分析研究.

参考文献:

- [1] Bahador M, Sundén B. Investigation on the effects of fly ash particles on the thermal radiation in biomass fired boilers [J]. *Int J Heat Mass Tran*, 2008, 51: 2411.
- [2] Kovler K. Does the utilization of coal fly ash in concrete construct present a radiation hazard [J]. *Constr Build Mater*, 2012, 29: 158.
- [3] 王青, 张旭东, 魏智强, 等. $Zn_{(1-x)}Mn_xS$ 纳米颗粒的制备及发光性质[J]. *四川大学学报:自然科学版*, 2016, 53: 152.
- [4] Lindqvist H, Nousiainen T, Zubko E, *et al.* Optical modeling of vesicular volcanic ash particles [J]. *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*, 2011, 112: 1871.
- [5] 张小林, 黄印博, 饶瑞中. 有效介质理论对致密内混合粒子光散射适用性[J]. *红外与激光工程*, 2014, 43: 1477.
- [6] 殷金英, 刘林华. 煤灰辐射特性的有效介质理论适用性分析[J]. *中国电机工程学报*, 2008, 28: 50.
- [7] Kahnert M, Nousiainen T, Lindqvist H. Model particles in atmospheric optics[J]. *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*, 2014, 146: 41.
- [8] Mishchenko M I, Dlugach J M, Mackowski D W. Light scattering by wavelength-sized particles "dusted" with subwavelength-sized grains [J]. *Opt Lett*, 2011, 36: 337.
- [9] Draine B T, Flatau P J. Discrete dipole approximation for scattering calculations[J]. *J Opt Soc Am A*, 1994, 11: 1491.
- [10] Draine B T, Flatau P J. User guide for the discrete dipole approximation code DDSCAT 7.3[J]. *Eprint Arxiv*, 2013(20): 75.
- [11] Bruggeman D A G. Calculation of various physics constants in heterogeneous substances. I. Dielectricity constants and conductivity of mixed bodies from isotropic substances [J]. *Ann Phys Berlin*, 1935, 24: 636.