文章编号：1002-2082(2007)03-0363-04

Mie 光散射理论的数值计算方法

项建胜[1,2]， 何俊华[1]
（1. 中国科学院 西安光学精密机械研究所，陕西 西安 710068；2. 中国科学院研究生院，北京 100039）

摘 要： Mie 散射级数的计算速度和精度对颗粒测量结果有着重要的影响。针对不同颗粒直径和相对折射率，一般采用前向递推，后向递推，连分式法等计算 Mie 散射级数。在这 3 种方法的基础上提出一种改进算法，即首先通过连分式法计算 Mie 散射级数的初始值，然后后向递推其余各值。该算法在 Matlab 中实现时，数据以数组的数据类型存储和调用，程序采用递归算法。通过比较计算结果发现，该算法耗时短且结果不易溢出，具有快速、稳定、不受颗粒直径和折射率范围影响等优点。

关键词： Mie 散射；颗粒直径；Matlab；Dave 倒推算法
中图分类号： TN247；O436.2 **文献标志码：** A

Numerical calculation of Mie theory

XIANG Jian-sheng[1,2], HE Jun-hua[1]
(1. Xi'an Institute of Optics and Precision Machanics, CAS, Xi'an 710068, China;
2. Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract: The Mie scattering theory is used to measure the particle size by light scattering. The calculation speed and precision of Mie scattering series are very important to the measurement results. Mie scattering series are calculated usually by forward recursion, backward recursion and link recursion for the different particle sizes and relative refractive indexes. The improved method based on the above mentioned three methods is reported, in which the initial value of Mie scattering series is calculated by continuous fractions and the others are calculated by backward recursion. The data are saved in the array data type and the program uses the recurrent method while the algorithm is realized in Matlab. The comparison of the results indicates that the calculation time is very short and the results are hard to overflow. Numerical calculation shows that the algorithm is efficient, reliable and robust in extremely wide range of particle size and refractive index.

Key words: Mie scattering; particle size; Matlab; Dave downward recursion

引言

Mie 散射理论在通过光散射来测量颗粒大小的方法中起着极其重要的作用，是激光测粒仪的关键技术。 Mie 散射理论中 Mie 散射级数的计算很重要，它牵扯复杂的贝塞尔无穷级数[1]，计算非常麻烦。几十年来，国内外学者陆续发表许多有关 Mie 散射理论的数值计算方法[2]，特别是近几年随着计算机技术的迅速发展，Mie 散射理论大大提高了计算速度和准确度。然而，Mie 散射理论的计算方法还不够完善，各个学者的计算结果也有很大差异，所以 Mie 散射理论的计算仍然在继续探讨中。笔者在前人的基础上通过 Matlab 进行了相关计算。

收稿日期：2005-10-15； 修回日期：2005-11-20

作者简介：项建胜(1982—)，男，河南濮阳人，硕士研究生，主要从事水下光电探测技术研究。E-mail：gogoman2000@126.com

1 Mie 散射理论

Mie 散射理论是麦克斯韦方程对处在均匀介质中的均匀颗粒在平面单色波照射下的严格数学解。由Mie 散射知道,距离散射体r 处p 点的散射光强为

$$I_{sca}=I_0 g\ \frac{\lambda^2}{8\pi^2 r^2} g I(\theta,\varphi) \tag{1}$$

$$I(\theta,\varphi)=|S_1(\theta)|^2\sin^2\varphi+|S_2(\theta)|^2\cos^2\varphi \tag{2}$$

式中:λ 为光波波长;I_0 为入射光强;I_{sca}为散射光强;θ 为散射角;φ 为偏振光的偏振角。

$$S_1(\theta)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2n+1}{n(n+1)}[a_n\pi_n+b_n\tau_n] \tag{3}$$

$$S_2(\theta)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2n+1}{n(n+1)}[a_n\tau_n+b_n\pi_n] \tag{4}$$

式中:$S_1(\theta)$和$S_2(\theta)$是振幅函数;a_n 和b_n 是与贝塞尔函数和汉克尔函数有关的函数;π_n 和τ_n 是连带勒让得函数的函数,仅与散射角θ 有关。其中

$$a_n=\frac{\varphi_n(\alpha)\varphi'_n(m\alpha)-m\varphi'_n(\alpha)\varphi_n(m\alpha)}{\varepsilon_n(\alpha)\varphi'_n(m\alpha)-m\varepsilon'_n(\alpha)\varphi_n(m\alpha)} \tag{5}$$

$$b_n=\frac{m\varphi_n(\alpha)\varphi'_n(m\alpha)-\varphi'_n(\alpha)\varphi_n(m\alpha)}{m\varepsilon_n(\alpha)\varphi'_n(m\alpha)-\varepsilon'_n(\alpha)\varphi_n(m\alpha)} \tag{6}$$

式中:$\varphi_n(\alpha)$和$\varepsilon_n(\alpha)$分别是贝塞尔函数和第一类汉克尔函数;$\varphi'_n(m\alpha)$和$\varepsilon'_n(m\alpha)$是$\varphi_n(\alpha)$和$\varepsilon_n(\alpha)$的导数;α 为无因次直径,$\alpha=\frac{\pi D}{\lambda}$,$D$ 为颗粒的实际直径;λ 是入射光的波长;m 是散射颗粒相对于周围介质的折射率,它是一个复数,虚部是颗粒对光的吸收的量化。

由以上公式可见,Mie 散射计算的关键是振幅函数$S_1(\theta)$和$S_2(\theta)$,它们是一个无穷求和的过程,理论上无法计算。求解振幅函数的关键是计算a_n 和b_n,所以Mie 散射的计算难点是求解a_n 和b_n。

2 Mie 散射理论的数值计算

通过以上分析可知,Mie 散射计算的核心是求解a_n 和b_n,我们编制程序也是围绕它进行编写。在a_n 和b_n 的表达式中$\varphi_n(\alpha)$,$\varphi'_n(\alpha)$,$\varepsilon_n(\alpha)$和$\varepsilon'_n(\alpha)$满足下列递推关系[3,5]:

$$\varphi_n(\alpha)=\frac{2n-1}{\alpha}\varphi_{n-1}(\alpha)-\varphi_{\varphi-2}(\alpha) \tag{7}$$

$$\varphi'_n(\alpha)=-\frac{n}{\alpha}\varphi_n(\alpha)+\varphi_{n-1}(\alpha) \tag{8}$$

$$\varepsilon_n(\alpha)=\frac{2n-1}{\alpha}\varepsilon_{n-1}(\alpha)-\varepsilon_{n-2}(\alpha) \tag{9}$$

$$\varepsilon'_n(\alpha)=-\frac{n}{\alpha}\varepsilon_n(\alpha)+\varepsilon_{n-1}(\alpha) \tag{10}$$

这些函数的初始值为

$$\varphi_{-1}(\alpha)=\cos\alpha \tag{11}$$

$$\varphi_0(\alpha)=\sin\alpha \tag{12}$$

$$\varepsilon_{-1}(\alpha)=\cos\alpha-\mathrm{i}\sin\alpha \tag{13}$$

$$\varepsilon_0(\alpha)=\sin\alpha+\mathrm{i}\cos\alpha \tag{14}$$

与散射角有关的π_n 和τ_n 满足下列递推公式:

$$\tau_n=\pi_n\cos\theta-\pi'_n\sin^2\theta \tag{15}$$

$$\pi_n=\frac{2n-1}{n-1}\pi_{n-1}\cos\theta-\frac{n}{n-1}\pi_{n-2} \tag{16}$$

$$\pi'_n=(2n-1)\pi_{n-1}+\pi'_{n-2} \tag{17}$$

$$\pi_0=0 \tag{18}$$

$$\pi_0=0 \tag{19}$$

$$\pi'_0=\pi'_1=0 \tag{20}$$

有了这些递推公式可以很方便地通过计算机程序求解。 但是对于n 的大小,因为计算机不可能计算无穷个数据,所以n 在计算之前就要被确定。

3 在Matlab 中Mie 散射理论的计算方法

关于n 的估计可按Wiscombe 给出的经验公式[4]得出。本文将a_n 适当处理为

$$a_n=\frac{\varphi_n(\alpha)D_n-m\varphi'_n(\alpha)}{\varepsilon_n(\alpha)D_n-m\varepsilon'_n(\alpha)} \tag{21}$$

$$D_n=\frac{\varphi'_n(m\alpha)}{\varphi_n(m\alpha)} \tag{22}$$

这样,对a_n 的求解变为对$\varphi_n(\alpha)$,$\varphi'_n(\alpha)$,$\varepsilon_n(\alpha)$,$\varepsilon'_n(\alpha)$和D_n 的求解。计算机计算程序流程如图1 所示。

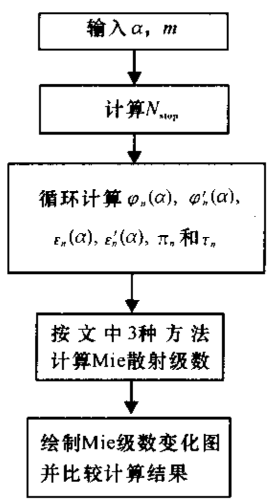

图1 程序流程图

Fig. 1 Flow chart of program

下面图2～图7 中纵坐标是a_n 的模(即Mie 散射级数中的1 个,是无量纲的),横坐标是n_{stop}。图2

～图 7 分别是在 $\alpha=4$，$m=0.75$ 针对非吸收性颗粒和 $\alpha=100$，$m=1.2-1.2\mathrm{i}$ 针对吸收性颗粒的条件下,按照前向递推,后向递推和连分式法计算得到的级数模。

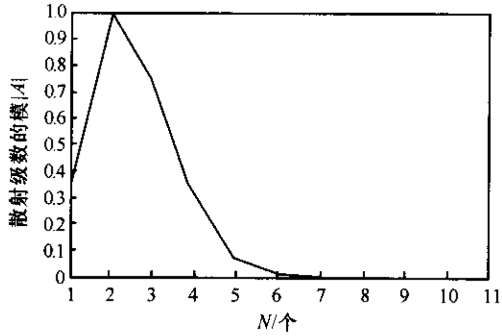

图 2　前向递推米氏散射级数的变化

($a=4$，$m=0.75$)

Fig. 2　Mie scattering series by forward recursion

($a=4$，$m=0.75$)

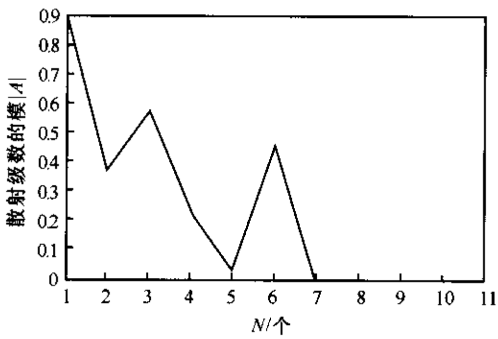

图 3　后向递推米氏散射级数

($a=4$，$m=0.75$)

Fig. 3　Mie scattering series by backward recursion

($a=4$，$m=0.75$)

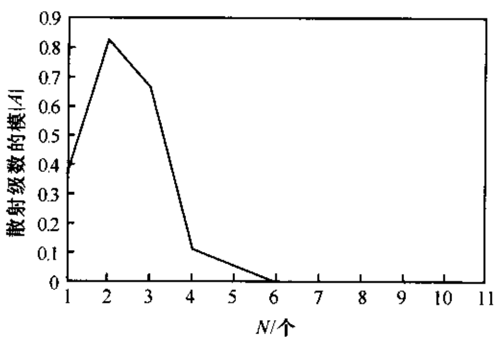

图 4　连分式下的米氏散射级数

(a=4，m=0.75)

Fig. 4　Mie scattering series by link recursion

($a=4$，$m=0.75$)

表1 是本程序计算的消光系数 k_{ext} 与 Wiscombe(MIEVO)和 Du(MIECPP)[3] 计算结果的比较。表 1 表明计算结果基本一致,说明本文算法正确。

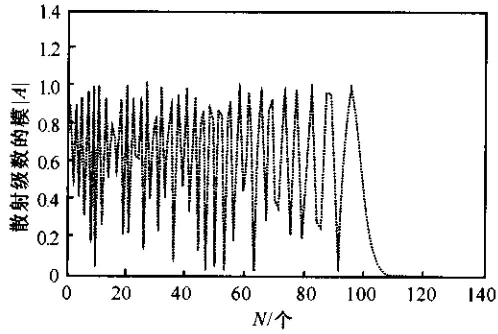

图 5　前向递推米氏散射级数

($a=100$，$m=1.2-1.2\mathrm{i}$)

Fig. 5　Mie scattering series by forward recursion

($a=100$，$m=1.2-1.2\mathrm{i}$)

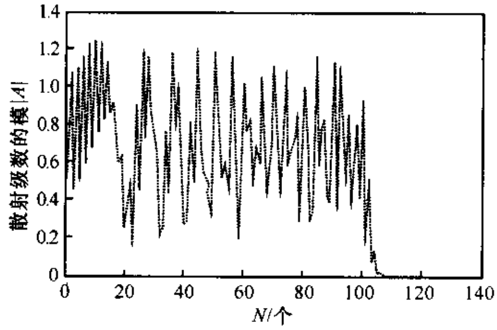

图 6　后向递推米氏散射级数

($a=100$，$m=1.2-1.2\mathrm{i}$)

Fig. 6　Mie scattering series by backward recursion

($a=100$，$m=1.2-1.2\mathrm{i}$)

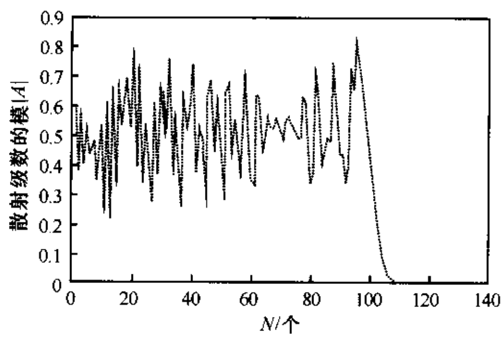

图 7　连分式下的米氏散射级数

($a=100$，$m=1.2-1.2\mathrm{i}$)

Fig. 7　Mie scattering series by link recursion

($a=100$，$m=1.2-1.2\mathrm{i}$)

从以上图中可以看出 $|a_n|$ 的震荡是很剧烈的,特别是在 α 较大的情况下($\alpha=100$)，n 的选择是比较正确的,每幅图在接近 n_{stop} 时 $|a_n|$ 衰减得很快。然而,3 种方法的计算结果不尽相同,在 $\alpha=4$，$m=0.75$ 时后向递推和连分式结果很接近,前向递推结果整体偏小,但变化趋势与其他方法大致相同;在 $\alpha=100$，$m=1.2$ 时前向递推和连分式结果相似,但后向

递推结果和它们差别较大,变化趋势却大致相同。

表 1　消光系数的计算结果比较

Table 1　Comparison of k_{ext} calculated by the method with that of MIECPP

m	α	MIEVO	
		MIECPP	本文方法
0.75	10	2.232 26	2.224 676
0.75	1 000	1.997 91	2.008 177
1.5−i	0.055	0.101 491	0.102 094
1.5−i	100	2.097 50	2.086 088
10−10i	10 000	2.005 91	2.005 754
10−10i	100	2.071 12	2.072 381

4　结论

利用 Matlab 编写的程序计算不同颗粒直径及其相对折射率下的 Mie 散射级数可以看到, 3 种方法的计算结果不尽相同,但是 Mie 散射级数震荡很剧烈。通过计算多种 α 和 m 发现,在它们较小的情况下前向递推还是比较稳定的,随着 α 和 m 的增大,特别是 α 的增大前向递推计算结果极易溢出。单纯的后向递推法由于选择的初始值很难保证正确,仅靠经验确定,因此计算结果和其他 2 种方法差别较大,并且计算耗时较长,故不推荐使用单纯的向后递推。通过综合比较,选取连分式算法最好。首先通过连分式算出向后递推的初始值,然后再采用向后递推的方法计算。这种方法耗时短且满足实时处理的要求,计算稳定,不易由于参数 α 过大而使结果溢出。

参考文献:

[1]　吴崇试. 数学物理方法[M]. 北京:北京大学出版社, 2001.
WU Chong-shi. Methods of mathematical physics [M]. Beijing: Peking University Press, 2001. (in Chinese)

[2]　DAVE J V. Scattering of visible light by large water spheres[J]. Applied Optics, 1969, 1(8): 155-164.

[3]　沈建琪, 刘蕾. 经典 Mie 散射的数值计算方法改进[J]. 中国粉体技术, 2005, 4(1): 1-5.
SHEN Jian-qi, LIU Lei. An improved algorithm of classical Mie scattering calculation [J]. China Powder Science and Technology, 2005, 4(1): 1-5. (in Chinese)

[4]　WISCOMBE W J. Improved Mie scattering algorithms[J]. Applied Optics, 1980, 19(5): 1505-1509.

[5]　SHYBANOV E B, HALTRIN V I. Scattering of light by hydrosol particles suspended in coastal waters[J]. IEEE, 2002, 11(4): 2374-2382.

[6]　王君, 何俊发, 王莲芬, 等. 简易 Mie 散射数值计算方法的研究[J]. 应用光学, 2005, 26(4): 13-16.
WANG Jun, HE Jun-fa, WANG Lian-fen, et al. The implementation of straightforward Mie scattering numerical calculation[J]. Journal of Applied Optics, 2005, 26(4): 13-16. (in Chinese)