

一种基于 Mie 散射的颗粒物浓度测量方法

周利斌^{1,2}, 张大臣¹, 姜鹏飞¹, 狄传勇³, 李莎³, 王江南³

1. 陕西科技大学理学院, 西安 710021
2. 西北大学物理学系, 西安 710069
3. 陕西科技大学电气与信息工程学院, 西安 710021

摘要 根据 Mie 散射理论, 采用连分式递推算法, 进行了微粒散射的数值模拟。借助特殊函数库得出简化的 Mie 散射理论的数值模拟方法, 省去了推导的复杂性, 同时提高了计算程序运算速度。利用水溶胶模拟大气溶胶进行光散射实验, 采用三波长法计算得到各样本的平均粒径, 根据消光定律模拟出微粒浓度与光强变化之间的关系, 为空气中微粒浓度的测量提供了理论依据。

关键词 Mie 散射理论; 消光定律; 连分式递推算法; 三波长法; 水溶胶

中图分类号 O436.2

文献标志码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2014.18.002

A Method for Measuring Particle Concentration Based on Mie Scattering

ZHOU Libin^{1,2}, ZHANG Dachen¹, JIANG Pengfei¹, DI Chuanyong³, LI Sha³, WANG Jiangnan³

1. College of Science, Shaanxi University of Science and Technology, Xi'an 710021, China
2. Department of Physics, Northwest University, Xi'an 710069, China
3. College of Electrical and Information Engineering, Shaanxi University of Science and Technology, Xi'an 710021, China

Abstract Numerical simulation of particle scattering was realized using the continued fraction recursion method based on Mie scattering theory. An easy numerical simulation method was obtained by the aid of special function library in the Mie scattering theory, improving the computing speed. The extinction coefficient was obtained by numerical simulation with a different refractive index variation of particle diameters. The result revealed that light scattering effects of particles with different refractive index were similar to those of water and dust, when the particles' diameter is larger than a certain value. The light scattering experiment of aerosols in the atmosphere was simulated using hydrosol, while the dust samples collected in different areas were used as particles. Light scattering data of the dust sample at different wavelengths and different concentrations were obtained and compared with those of SiO₂ particles whose diameter is 400 nm. Three wavelength method was used to obtain an average particle size of the sample, which is verified by SiO₂ particles' experiment results. Using the average particle sizes of each sample, the relationships between particle concentration and light intensity variation were simulated according to the law of extinction. The experimental results are consistent with those obtained theoretically. It provides a good theoretical basis for measuring the concentration of particles in the air.

Keywords Mie scattering theory; extinction law; continued fraction recursion method; three wavelength method; hydrosol

进入 20 世纪 70 年代以来, 大气污染已成为全球性重大环境问题。悬浮颗粒是空气污染的一个主要来源。PM10 和 PM2.5 的污染已引起全世界的普遍关注, 随着科学研究的进一步深入, 各国科学家逐步认识到, 导致城区人群患病和死

收稿日期: 2014-02-28; 修回日期: 2014-04-10

基金项目: 国家自然科学基金项目(61377087); 陕西省 2013 大学生创新创业训练计划项目(1070)

作者简介: 周利斌, 讲师, 研究方向为信息光学、光学传感等, 电子信箱: zhouzhulibin@sohu.com

引用格式: 周利斌, 张大臣, 姜鹏飞, 等. 一种基于 Mie 散射的颗粒物浓度测量方法[J]. 科技导报, 2014, 32(18): 22-25.

亡率增加的主要因素是总粉尘中可吸入颗粒物PM10和可入肺颗粒物PM2.5^[1]。直径小于2.5 μm的颗粒称为PM2.5,对人体危害最大,因为它可以直接进入肺泡,并能够聚积在肺部。科学家用PM2.5表示每立方米空气中这种颗粒的含量,这个值越高,表示空气污染越严重^[2]。本文利用Mie散射理论建立微粒的数值计算方法,并用水溶胶进行实验模拟测量,利用三波长法得到微粒的平均粒径,结合Lambert-Beer消光定律^[3]算出微粒浓度。

1 Mie 散射理论的数值模拟方法

1.1 单个粒子对光的散射

波长为λ、光强为I₀的单色光入射到微粒时,根据Mie散射理论^[4,5],垂直散射面的散射光强为

$$I_r = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} |S_1(\theta)|^2 I_0 \sin^2 \varphi \quad (1)$$

平行散射面的散射光强为

$$I_l = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} |S_2(\theta)|^2 I_0 \cos^2 \varphi \quad (2)$$

总的散射为

$$I_s = I_r + I_l = \frac{\lambda^2 I_0}{4\pi^2 r^2} (|S_1(\theta)|^2 \sin^2 \varphi + |S_2(\theta)|^2 \cos^2 \varphi) \quad (3)$$

式中,r为散射颗粒与观测点之间的距离,φ为入射光震动面与散射面的夹角(方位角),S₁和S₂为振幅函数:

$$S_1(\theta) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} [a_m \pi_m \cos \theta + b_m \tau_m \cos \theta] \quad (4)$$

$$S_2(\theta) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} [a_m \tau_m \cos \theta + b_m \pi_m \cos \theta] \quad (5)$$

式中τ_m、π_m只与θ有关,a_m、b_m为Mie散射系数,表达式分别为

$$\begin{cases} \tau_m \cos \theta = \frac{dP_m^{(1)} \cos \theta}{d\theta} \\ \pi_m \cos \theta = \frac{dP_m^{(1)} \cos \theta}{d \cos \theta} \\ a_m = \frac{n\psi_m(n\alpha)\psi_m'(\alpha) - \psi_m(n\alpha)\psi_m'(\alpha)}{n\psi_m(n\alpha)\xi_m'(\alpha) - \psi_m(n\alpha)\xi_m'(\alpha)} \\ b_m = \frac{\psi_m(n\alpha)\psi_m'(\alpha) - n\psi_m(n\alpha)\psi_m'(\alpha)}{\psi_m(n\alpha)\xi_m'(\alpha) - n\psi_m(n\alpha)\xi_m'(\alpha)} \end{cases} \quad (6)$$

式中,θ为散射角,α=πD/λ为粒径无因次参数,D为颗粒直径,n为复折射率,P_m⁽¹⁾为一阶m次连带勒让德函数,ψ_m和ξ_m分别为m阶第一类和第二类Bessel函数有关的函数。即ψ_m(z)=(πz/2)^{1/2}J_{1+1/2}(z), ξ_m(z)=(πz/2)^{1/2}H_{1+1/2}(z)。

m阶第一类和第二类Bessel函数J_{1+1/2}(z)和H_{1+1/2}(z)可在程序函数库中直接调用^[6],不仅提高了运算速度,还省去了推导的复杂性。

1.2 消光定律

根据Mie散射系数,定义消光系数K_{ext}:

$$K_{ext} = \frac{2}{\alpha^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) \text{Re}(a_m + b_m) \quad (7)$$

根据Lambert-Beer消光定律^[3](图1),当一束光强为I₀,波长为λ的单色平行光通过一含有均匀悬浮颗粒的介质时,由

于颗粒对入射光的散射和吸收作用,出射光强会得到一定程度的衰减,出射光强I与入射光强I₀的关系为

$$I = I_0 \exp\left(-N_v K_{ext} \frac{\pi D^2}{4} L\right) \quad (8)$$

式中,N_v为单位体积的粒子数,K_{ext}为消光系数,L为介质厚度。

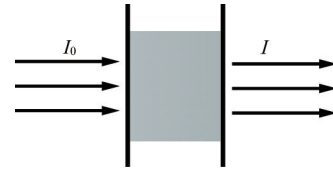


图1 微粒散射示意

Fig. 1 Particle scattering

1.3 数值模拟

采用连分式递推算法^[7],并且直接调用计算程序函数库中的m阶第一类和第二类Bessel函数J_{1+1/2}(z)和H_{1+1/2}(z),不仅提高了运算速度,也省去了推导的复杂性。图2是折射率在n=1.50、n=1.50-0.1i、n=1.33、n=1.33-0.1i情况下,消光系数随粒径的变化。

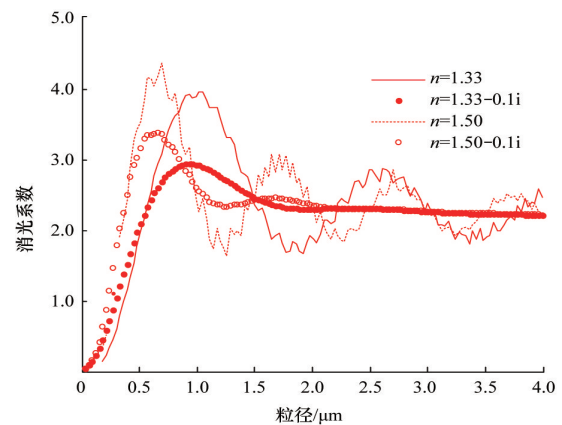


图2 不同折射率下消光系数随粒径变化

Fig. 2 Light dissipation coefficient varying with particle size under different index of refraction

由图2可以看出,在复折射率下,当粒径大于0.5 μm后,消光系数随粒径的增大而很快趋于平衡,曲线较为平滑,实折射率下的曲线虽上下波动,但两者的大致变化趋势一致,复折射率对光具有吸收效果,这也仅是影响了散射光的强弱,就透射光来说,两者的消光特性相近。而当粒径大于1.5 μm后,不同折射率下微粒对光的消光系数也趋于一致。因此将微尘溶于水,利用水溶胶模拟气溶胶进行消光实验,可以大致得出大气中微尘的消光特性。

2 利用水溶胶模拟空气悬浮物进行光谱测量

由于水中易获得大浓度的颗粒分散系,实验效果比较明显,有利于操作检验,分别从西安市I区域和西安市II区域采

集微尘样本,其中I区域处于开发建设时期,II区域属于经济繁华地带,具有较强代表性。

将微尘样本溶于水形成水溶胶来代替空气中的微粒,并对水溶胶的实验规律及特点加以总结,理论结果可以推广到空气悬浮物散射中。实验测量平台如图3所示。

主要实验步骤:

- 1) 取2药匙微尘样品,用140 mL的蒸馏水稀释形成浊液,并用磁力搅拌机搅拌;
- 2) 每次用滴管定量取上层浊液2 mL,加入到测量烧杯中,并用磁力搅拌机始终保持低速、匀速搅动;
- 3) 从30°方向用光谱仪探测,波长从400~1000 nm,步长为5 nm,同时从0°方向用光功率计探测;
- 4) 用分析天平称小烧杯质量,再取上层浊液40 mL,加入到小烧杯中,并进行蒸干、称量。

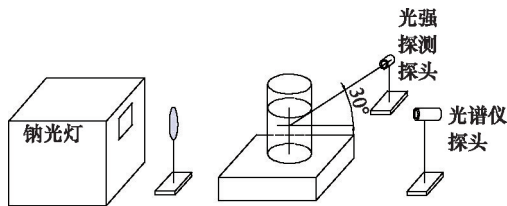


图3 实验装置

Fig. 3 Experimental apparatus

3 实验数据处理

3.1 三波长法处理实验数据

多波长法^[8]是采用3个波长($\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$)的单色光同时对颗粒系进行消光测量。对3个波长测量中的任意两个波长,按双波长法原理,可得到下方程

$$\ln(I/I_0)_i / \ln(I/I_0)_j = K_i/K_j \quad i \neq j, i, j = 1, 2, 3 \quad (9)$$

序数1、2、3与 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 分别对应。根据方程就可唯一地确定颗粒系的平均直径 $D^{[9]}$ 。

实验中测量了平均粒径为400 nm的SiO₂微球散射数据,利用这一原理进行计算,实验中利用水测得的光强相当于 I_0 ,加入微粒后的光强为 I 。按照三波长法,图4为 $\lambda_1=500$ nm, $\lambda_2=550$ nm, $\lambda_3=600$ nm时的粒径测量,3条变化曲线为分别是 K_2/K_1 、 K_1/K_3 、 K_2/K_3 ,取实验数据中加入2 mL溶液时的光强, $a = \ln(I/I_0)_2 / \ln(I/I_0)_1 = 0.8901$ 、 $b = \ln(I/I_0)_1 / \ln(I/I_0)_3 = 1.1557$ 、 $c = \ln(I/I_0)_2 / \ln(I/I_0)_3 = 1.2912$ 。

在图4中作 a 、 b 、 c 3条直线, a 与曲线 K_2/K_1 相交, b 与曲线 K_1/K_3 相交, c 与曲线 K_2/K_3 相交,其中, a 与曲线 K_1/K_2 相交中的某一点 A , b 与曲线 K_1/K_3 相交中的某一点 B , c 与曲线 K_2/K_3 相交中的某一点 C 。 A 、 B 、 C 3点的横坐标相近,取平均值387 nm。

对单组实验数据处理会存在一定误差,按照这种方法,对不同浓度、不同波长下的数据分别进行处理,取其平均值,

最终得到的SiO₂平均粒径为395.1 nm,这与实际值400 nm的误差仅为1.23%。

图5为加入2 mL的I区域样本溶液时的数据处理结果。

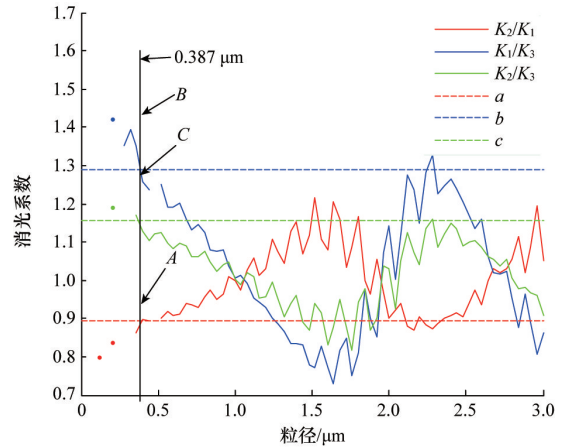
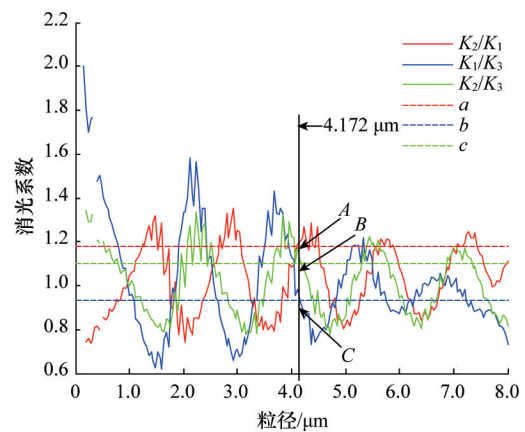
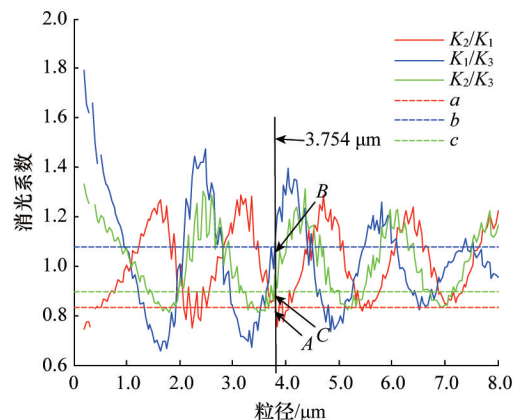


图4 SiO₂微球粒径的测量

Fig. 4 Particle size measurement of SiO₂ microspheres



(a) $\lambda_1=450$ nm, $\lambda_2=500$ nm, $\lambda_3=550$ nm



(b) $\lambda_1=500$ nm, $\lambda_2=550$ nm, $\lambda_3=600$ nm

图5 不同波长下I区域样本粒径的测量

Fig. 5 Particle size measurement of sample I at different wave lengths

图5(a)中测得的微粒直径为4.172 μm ,图5(b)中测得的微粒直径为3.754 μm 。对不同浓度、不同波长下的数据分别进行处理,取其平均值,得到的I区域样品的平均粒径为4.074 μm ,II区域样本的平均粒径为3.232 μm 。

3.2 数据分析

设 ρ 为质量浓度,则可得质量浓度 ρ 与单位体积粒子数 N_v 的关系^[9]:

$$\rho = \frac{\pi}{6} \rho_1 N_v D^3 \quad (10)$$

式中, ρ_1 为土壤容重。结合 Lambert-Beer 消光定律(7)式得

$$\rho = -\frac{2\rho_1 D}{3LK_{ext}} \ln(I/I_0) \quad (11)$$

代入三波长法处理得到的微粒直径 D ,取土壤容重 $1.4 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$,光波穿过的介质厚度 L 取为 1 km。即可得出 $\lambda = 500 \text{ nm}$ 时质量浓度 ρ 与光强变化的对数值 $\ln(I/I_0)$ 的关系曲线(图6)。

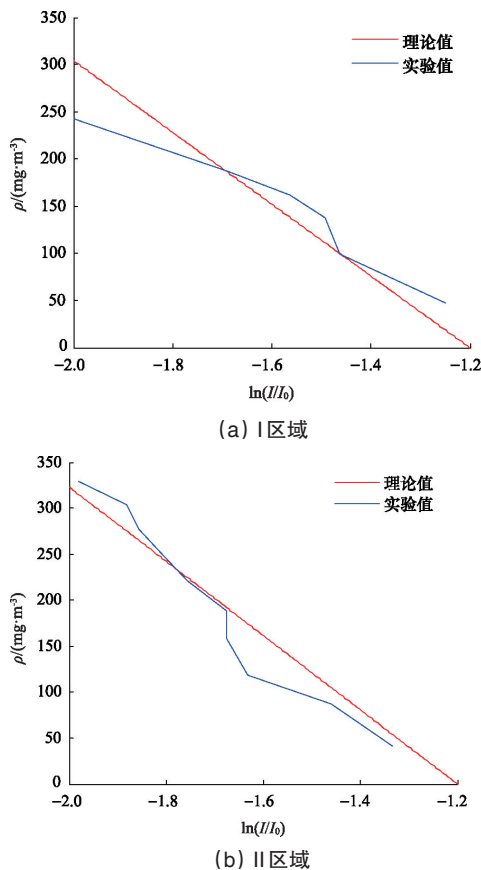


图6 I区域II区域微粒浓度与光强变化

Fig. 6 Particle concentration change with light intensity variation in zone I and II

图6中,理论与实验值基本吻合,可将此作为微粒浓度测量的理论依据。由图2近似取消光系数2.2,由(11)式可知,若能能见度为1 km时(光在大气中传播1 km后光强衰减为1/20),则I区域和II区域对应的悬浮颗粒物(PM10、PM2.5)质量浓度将分别达到517、410 mg/m^3 。

在实际的大气悬浮颗粒物测量中,由于颗粒物的组成非常复杂,但各种颗粒物对光的散射引起的衰减作用总体相当,因而可以利用有较强吸收的颗粒物近似代替。由于大气中的颗粒物浓度很小,引起的衰减很弱,因而需要使光经过较长的传播距离以获得足够的衰减。可以利用光学长程池来增大光在气体中的传播距离,或采用长杆式的结构来解决这一问题。在此基础上采用本文所述三波长法进行测量即可得到悬浮颗粒物的平均粒径和浓度。

4 结论

通过理论推导,借助特殊函数库得出 Mie 散射的数值计算方法,该方法不仅提高了运算速度,也省去了倒推的复杂性。借助三波长法对西安市两个区域的微粒样本分别进行处理,得出各自的微粒平均粒径,并利用消光定律得到光强变化与微粒浓度变化的关系,并与实验值基本吻合,这为空气或溶胶中的颗粒物直径和浓度测量提供了良好的理论依据,可用于 PM2.5、水中微油、水污染及微生物浓度等的测量。

参考文献(References)

- [1] Watson J G, Chow J C, Moosmuller H, et al. Guidance for using continuous monitors in PM2.5 monitoring networks[EB/OL]. (1998-05-29)[2011-10-19]. <http://www.epa.gov/ttnamti1/files/ambient/pm25/r-98-012.pdf>.
- [2] 谭知还. 关于PM2.5的十个问答[EB/OL]. (2011-12-06)[2011-12-10]. <http://songshuhui.net/archives/62570>.
Tan Zhihuan. Ten questions and answers about PM2.5[EB/OL]. (2011-12-06)[2011-12-10]. <http://songshuhui.net/archives/62570>.
- [3] Novick V J. Use of series light extinction cells to determine aerosol number concentration[J]. Aerosol Science and Technology, 1988, 9(3): 251-262.
- [4] Van de Hulst H C. Light scattering by small particles[M]. London: Chapman and Hall, 1957.
- [5] Kerker M. The scattering of light and other electromagnetic radiation[M]. New York: Academic Press, 1969.
- [6] 杨冰, 闫循领. 特殊函数教学中 Matlab 绘图功能的应用[J]. 科技信息, 2010(12): 23-24.
Yang Bing, Yan Xunling. The teaching of the special function Matlab graphics applications[J]. Science and Technology Information, 2010(12): 23-24.
- [7] 王莲芬, 刘光斌, 郑重, 等. Mie 散射向前递推连分式算法及其数值模拟[J]. 光学与技术, 2009, 35 (4): 541-543.
Wang Lianfen, Liu Guangbin, Zheng Zhong, et al. Continued fraction algorithm for Mie scattering and numerical simulation[J]. Optical Technique, 2009, 35(4): 541-543.
- [8] 卫敬明, 张志伟, 王乃宁. 用光散射法测量饱和湿蒸汽的湿度[J]. 工程热物理论, 1989, 10(2): 196-199.
Wei Jingming, Zhang Zhiwei, Wang Naining. Light scattering method measuring wet saturated steam humidity[J]. Journal of Engineering Thermal Physics, 1989, 10(2): 196-199.
- [9] 卫敬明, 蔡小舒, 张志伟, 等. 光全散射法测量颗粒粒径分布技术的进展[J]. 上海机械学院学报, 1992, 14(3): 11-19.
Wei Jingming, Cai Xiaoshu, Zhang Zhiwei, et al. All light scattering method of particle size distribution measurement technology progress[J]. Journal of Shanghai Institute of Mechanical, 1992, 14(3): 11-19.

(责任编辑 赵业玲)