

# 两种反演半透明液体光学常数的方法对比

李 栋<sup>1,2</sup>, 夏新林<sup>1</sup>, 艾 青<sup>1</sup>

(1. 哈尔滨工业大学 能源科学与工程学院, 150001 哈尔滨; 2. 东北石油大学 土木建筑工程学院, 163318 黑龙江 大庆)

**摘 要:** 基于光线跟踪法建立求解半透明液体透射比的正问题模型, 研究基于蒙特卡罗法(MC)和简化方程迭代法(SEI)的反演半透明液体光学常数(吸收指数 $k$ 、折射指数 $n$ )的两种方法, 分析两种反演方法的适用范围. 将已知文献中庚烷的光学常数作为“真实值”, 用正问题模型求解的透射比作为“实验测量值”, 采用反问题模型反演 $n$ 和 $k$ , 并分析实验偏差对反演的影响. 研究表明: 两种方法反演的庚烷 $k$ 的计算误差的标准差均小于 $10^{-6}$ , 而 $n$ 的标准差高于0.1%; 当实验数据存在偏差时, 光学常数 $n$ 、 $k$ 的反演计算精度呈现降低趋势.

**关键词:** 半透明液体; 光学常数; 吸收指数; 折射指数; 反演模型

中图分类号: TK314; O241.7

文献标志码: A

文章编号: 0367-6234(2012)09-0073-05

## Comparison of two inversion methods on optical constants of semitransparent liquid

LI Dong<sup>1,2</sup>, XIA Xin-lin<sup>1</sup>, AI Qing<sup>1</sup>

(1. School of Energy Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, 150001 Harbin, China;

2. School of Architecture and Civil Engineering, Northeast Petroleum University, 163318 Daqing, Heilongjiang, China)

**Abstract:** Based on ray trace method, Monte-Carlo method and Simplified-Equation iterative method, the spectral transmittance ratio calculation model for semitransparent liquid was developed and two inversion methods of optical constants (extinction coefficient  $k$  and refractive index  $n$ ) of semitransparent liquid were analyzed. The application range of two inversion methods were investigated. The optical constants of Heptane attained in the references were selected as the true values, and the spectral transmittance ratio of the semitransparent liquid based on the direct model simulation were regarded as the experimental values. The optical constants of Heptane were achieved by the inverse models. Then the influence of measurement error on the inverse results were also investigated. The results show that the standard deviation of  $k$  calculation error by the MC and SEI inversion methods are less than  $10^{-6}$ , while that of  $n$  are higher than 0.1%, and the influence of measurement error on the inverse results is urgent distinctness, and inverted calculation precision of optical constants becomes lower when the measurement error are higher.

**Key words:** semitransparent liquid; optical constants; extinction coefficient; refractive index; inverse model

半透明液体的热辐射物性在化工、航天、动力、生物等多个领域具有重要的应用背景. 例如: 半透

明液态碳氢燃料的热辐射物性是航空航天发动机、内燃机、汽轮机、燃烧炉等热能装置辐射传热过程定量研究<sup>[1-4]</sup>, 主动冷却热防护壁面高温辐射机理研究<sup>[5-6]</sup>, 光学吸收诊断研究<sup>[7-9]</sup>的基础物性参数. 半透明液体热辐射物性吸收系数、散射系数是其光学常数(亦称复折射指数, 即吸收指数和折射指数)的函数. 半透明液体的光学常数不能通过实验测量直接得到, 必须通过测量其相关量并结合相应的反问题模型计算得出. 目前, 测量半透明液体

收稿日期: 2011-10-21.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51106036, 51176038); 哈尔滨市科技创新人才研究专项资金资助项目(2012RFQXG079).

作者简介: 李 栋(1979—), 男, 讲师, 博士研究生;  
夏新林(1966—), 男, 教授, 博士生导师.

通信作者: 夏新林, xiaxl@hit.edu.cn.

光学常数的方法很多,主要包括 Attenuated total reflection(ATF,衰减全反射)方法<sup>[10-11]</sup>、结合 Kramers - Kronig(K - K)色散关系式的透射法<sup>[12-13]</sup>、双厚度透射法<sup>[14]</sup>.前两种方法均需联立 K - K 色散关系式求解反演模型,是目前应用较为广泛的方法;但是,采用简化方法构造 K - K 关系式实现折射指数的求解过程繁琐.双厚度透射法原理简单,不需要采用 K - K 关系式,但目前的研究者较少,且没有分析其适用范围<sup>[14]</sup>.

本文采用光线跟踪法分析了半透明液体透射特性,给出了求解其透射比的正问题模型,然后建立了基于 Monte-Carlo(MC,蒙特卡罗)法和 Simplified-Equation Iterative(SEI,简化方程迭代)法的两种反演半透明液体光学常数的双厚度模型,并分析了其适用范围,最后利用文献中已有的实验数据进行了模型验证,分析了实验偏差对反演计算的影响.

## 1 数理模型

### 1.1 正问题模型

半透明液体透射光线跟踪示意如图1所示.其光谱吸收指数为 $k$ ,光谱折射指数为 $n$ ,且均与温度无关.上、下界面的光谱反射率均为 $\rho$ .透射光线在液膜各表面处均遵循 Fresnel 定律和 Snell 定律.假设液膜层的厚度 $L$ 远大于透射光线波长,因此不考虑来自上下两个界面上的透射光线之间的干涉效应.

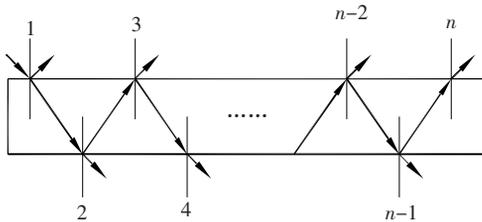


图1 半透明液体透射光线跟踪示意

当透射光线沿法线方向进入时,满足光线是非偏振和漫射,且介质各向同性.采用光线跟踪法得到半透明液体光谱透射比<sup>[15]</sup>

$$\tau = \frac{(1 - \rho)^2 e^{-4\pi kL/\lambda}}{1 - \rho^2 e^{-8\pi kL/\lambda}}. \quad (1)$$

其中,光谱反射率<sup>[15]</sup>

$$\rho = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2}. \quad (2)$$

### 1.2 SEI 反演模型

在已知波长 $\lambda$ 下厚度 $L_1$ 、厚度 $L_2$ 对应的光谱透射比测量值 $\tau_{m1}$ 、 $\tau_{m2}$ 时,理论上可通过式(1)和式(2)确定 $n$ 、 $k$ 和 $\rho$ ,但式(1)无解析解,需合理简化以满足求解要求.

为此,提出 SEI 法的反演半透明液体光学常数的双厚度模型.考虑到多数半透明液体吸收指数较小,可忽略式(1)中 $e^{-8\pi kL/\lambda}$ 的影响,则式(1)变为

$$\tau = (1 - \rho)^2 e^{-4\pi kL/\lambda}. \quad (3)$$

已知 $\tau_{m1}$ 、 $\tau_{m2}$ 时,由式(3)得 $k$ 值和 $\rho$ 值:

$$k = -\frac{\lambda \ln(\tau_{m1}/\tau_{m2})}{4\pi(L_1 - L_2)}, \quad (4)$$

$$\rho = 1 - \frac{(\tau_1 e^{\frac{4\pi kL_1}{\lambda}})^{\frac{1}{2}} + (\tau_2 e^{\frac{4\pi kL_2}{\lambda}})^{\frac{1}{2}}}{2}. \quad (5)$$

由式(2)得

$$n = \frac{(1 + \rho) + [(1 + \rho)^2 - (1 - \rho)^2(1 + k^2)]^{\frac{1}{2}}}{1 - \rho}. \quad (6)$$

具体计算过程:

- 1) 分别通过式(4) ~ (6)计算 $k$ 、 $\rho$ 、 $n$ .
- 2) 通过式(1)确定正问题计算值 $\tau_{c1}$ 和 $\tau_{c2}$ ,分析其与实际测量值的计算误差.
- 3) 计算过程控制.若计算误差小于最小精度,则结束计算,否则 $\tau_{c1}$ 和 $\tau_{c2}$ 替换 $\tau_{m1}$ 、 $\tau_{m2}$ 后返回第1)步.

### 1.3 MC 反演模型

由于 SEI 模型简化了式(1),使其适用范围受限.为此,保持式(1)的完整,采用 Monte-Carlo(MC,蒙特卡罗)法确定半透明液体的光学常数,即采用实验测量的半透明液体光谱透射比作为光学常数反问题计算的测量值,直接利用式(1)构造目标函数

$$OF = \sqrt{(\tau_{c1} - \tau_{m1})^2 + (\tau_{c2} - \tau_{m2})^2}. \quad (7)$$

其中, $\tau_{c1}$ 、 $\tau_{c2}$ 分别为在同一波长下半透明液体厚度1和厚度2所对应的光谱透射比正问题计算值, $\tau_{m1}$ 和 $\tau_{m2}$ 分别为同一波长下厚度1和厚度2所对应的光谱透射比测量值.

采用 MC 法和区间逼近法相结合的混合方法求解反演模型.采用 MC 法反演时,当反演值偏离真值较远时收敛速度很慢.为此,首先采用 MC 法进行搜索,当达到一定精度后,利用区间逼近法缩小反演范围,从而提高反演计算效率.具体反演计算过程如下:

- 1) 给出 $n$ 和 $k$ 的合理取值范围,以及迭代最大次数、最小精度、初始计算精度、区间逼近步长.
- 2) 利用 MC 法给 $n$ 和 $k$ 赋值.
- 3) 通过式(1)计算 $\tau_{c1}$ 和 $\tau_{c2}$ ,并通过式(7)确定计算误差.若计算误差小于初始计算精度,则采用区间逼近法缩小 $n$ 和 $k$ 的取值范围,并用计算误

差取代初始计算精度.

4) 计算过程控制. 若计算误差小于最小精度, 则计算结束, 否则返回第2)步.

1.4 模型适用范围

一定厚度的半透明液体光谱透射比主要受其光学常数  $n, k$  的影响. 假设  $n$  的范围为  $1 \sim 3, k$  的

范围为  $10^{-6} \sim 0.8$ , 在  $n, k$  范围内合理取值将其作为“真实值”, 利用正问题模型计算当量厚度(当量厚度为液膜厚度和波长之比)1、当量厚度2对应的光谱透射比作为“实验测量值”, 并利用两种反演模型计算  $n, k$ , 结果如图2所示.

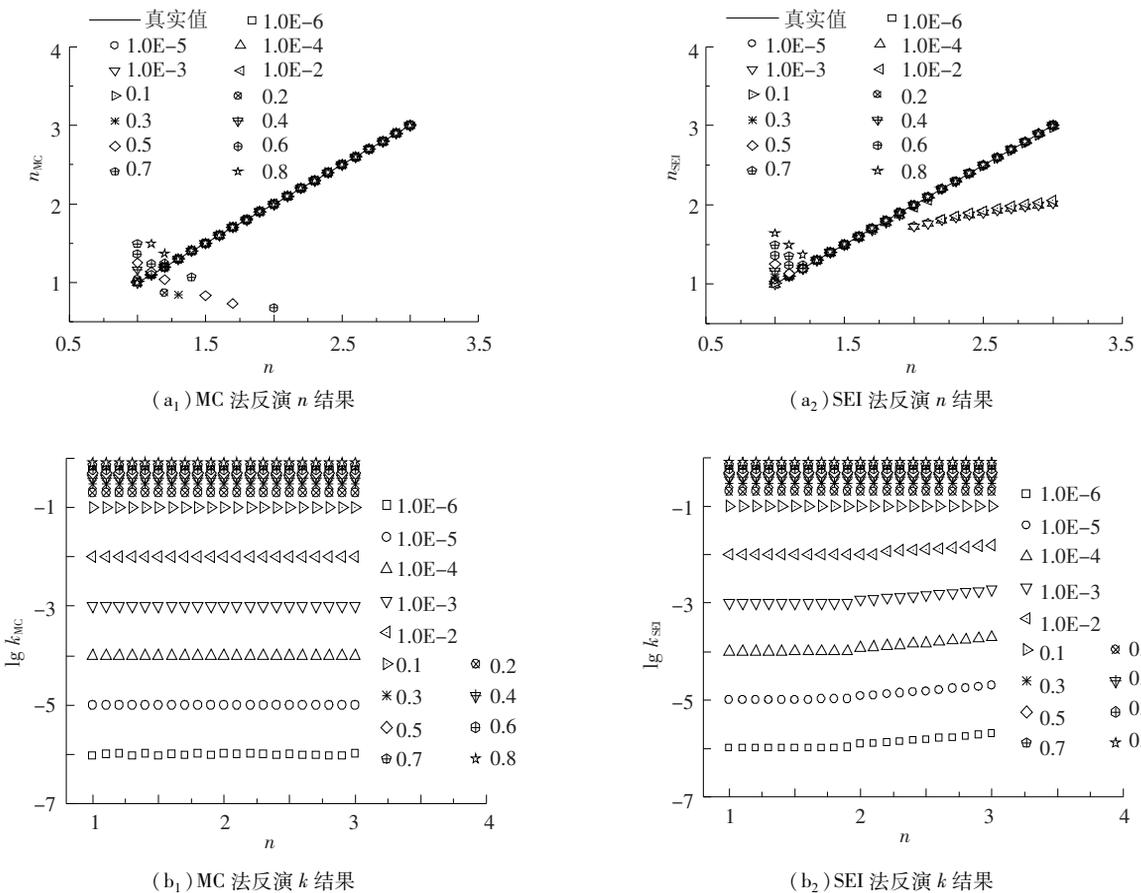


图2 两种反演模型求解的光学常数

由图2可见, 实际的  $n, k$  对反演半透明液体的光学常数具有较大的影响. 反演  $n$  时, 在  $n > 2$  区域, 用 MC 法反演结果同“真实值”较吻合, SEI 法仅在  $k < 0.01$  区域反演精度较好, 说明 MC 法在  $n > 2$  区域适应性更强.  $n < 2$  区域, MC 法仅在  $k < 0.1$  区域反演精度较好, 而 SEI 法在  $k > 0.1$  区域反演精度较好, 说明 MC 法和 SEI 法反演  $n$  时存在一定的互补性. 同时由图2可知, 反演  $k$  时, 在整个反演范围内 MC 法反演  $k$  的结果较好, 而 SEI 法仅在  $k > 0.1$  区域且满足折射指数  $1 \sim 3$  范围内反演  $k$  精度较好, 但同时可见 SEI 法在折射指数  $1.0 \sim 1.9$  范围内反演  $k$  精度较好.

结合反演误差分析  $n, k$  对反演半透明液体光学常数的影响, 其中, 相对误差和标准差为

$$\Delta = \left| \frac{D_{cal} - D_{exp}}{D_{exp}} \right| \times 100\% , \quad (8)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (D_{cal} - D_{exp})^2}{N}} \times 100\% . \quad (9)$$

式中,  $\Delta$  为相对误差;  $\sigma$  为标准差.  $D_{cal}, D_{exp}$  分别为计算值和“真实值”,  $N$  为数据数.

MC 法反演  $n$  时, 实际  $n$  为  $1 \sim 3, k$  为  $10^{-6} \sim 0.1$ , 反演误差最大为  $1.03\%$ , 出现在实际  $n$  为  $1, k$  为  $0.1$  处; 若不考虑  $n$  为  $1$ , 其余的反演误差最大为  $10^{-6}$ .  $k$  超过  $0.1$  后, 利用 MC 法反演  $n$  数据中出现较大误差, 且  $k$  值增大反演误差较大者数量增加, 其中最大误差在  $n = 2, k = 0.6$  处为  $66\%$ . 利用 SEI 法反演  $n$  时, 当实际  $n$  为  $1.1 \sim 1.9, k$  为  $10^{-6} \sim 0.4$ , 反演最大误差  $< 1.6\%$ ;  $n$  超过  $1.2$  时,  $k$  为  $10^{-6} \sim 0.01$ , 误差较大. MC 法反演  $k$  时, 仅在  $k$  为  $10^{-6}$  时反演最大误差为  $7.49\%$ , 其余均小于  $1\%$ . SEI 法反演  $k$  时,  $k > 0.1$  时反演最大误差均小于  $1\%$ , 但  $k < 0.1$  且  $n < 1.9$  时反演误差均小于  $2\%$ , 而  $k < 0.1$  且

$n > 1.9$  时其反演误差随  $n$  的增大而增加.

## 2 算例与误差分析

### 2.1 反演算例分析

为检验模型,采用文献[14]中庚烷(Hep-tane)的光学常数  $n, k$  作为“真实值”,利用正问题模型计算庚烷液膜厚度分别为 50、100  $\mu\text{m}$  时对应的透射比作为“实验值”,如图3所示.

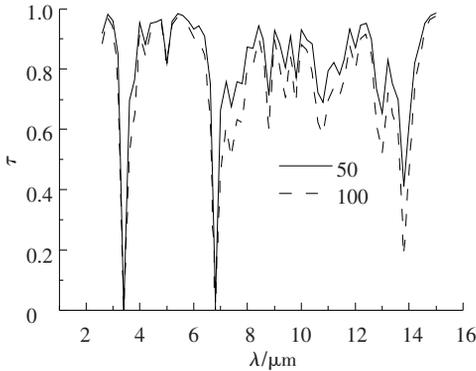


图3 庚烷的光谱透射比

采用 MC 法和 SEI 法的反演模型,分别利用“实验值”反演计算庚烷的  $n, k$ , 结果如图4所示.

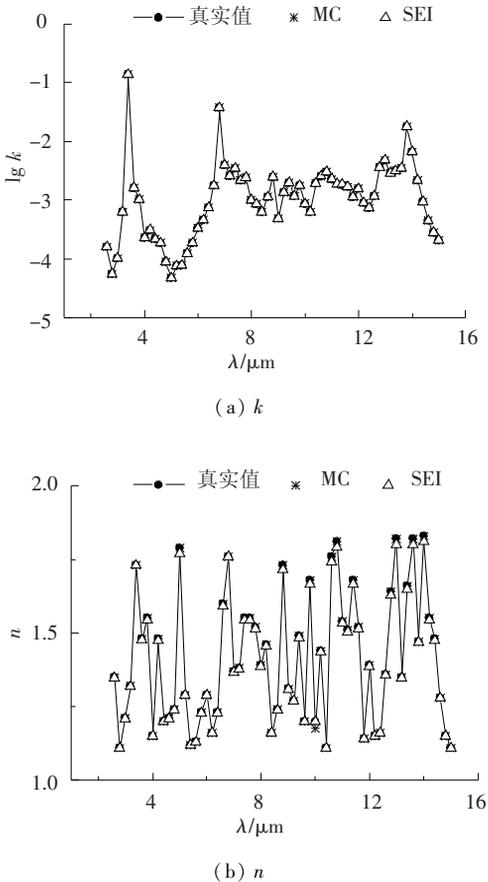


图4 庚烷光学常数反演结果

由图4可知,MC法和SEI法反演结果的最大计算误差在  $n = 1.2, k = 8.65 \times 10^{-4}$  处,其  $k$  误差分别为 0.03%、0.01%,  $n$  误差分别为 2.06%、

3.27%. 采用式(9)分析所有反演数据误差的标准差可知,MC和SEI反演  $n$  误差的标准差分别为 0.31%、0.77%,反演  $k$  误差的标准差均  $< 10^{-6}$ , 说明MC法和SEI法模型反演液体庚烷的光学常数差别较小,可见MC法和SEI法反演计算庚烷的光学常数是可靠的.

### 2.2 实验偏差对反演的影响分析

上述反演计算半透明液体的光学常数所用的“实验值”是精确的. 而由于仪器精度、环境、操作等影响,实验数据存在一定偏差,分析实验偏差对反演模型的影响是保证反演精度的关键.

假设在实验光谱范围内,半透明液体庚烷透射比的实验数据分别存在  $\gamma = 1\%、2\%、5\%$  的相对误差,并将该“实验值”作为反演的已知量,其余条件不变,反演计算光学常数  $n, k$ , 并采用式(8)计算与“真实值”的相对误差,结果如图5所示.

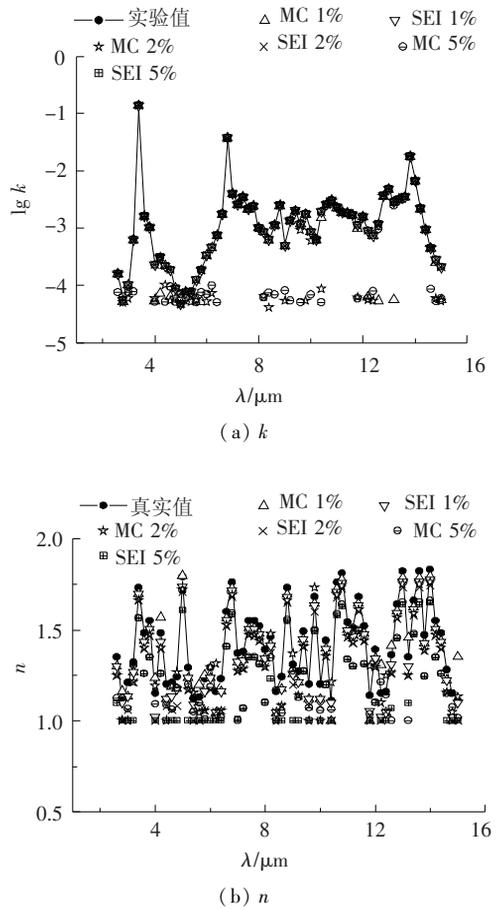


图5 庚烷光学常数反演误差分析

由图5可看出,当实验数据存在偏差时,光学常数  $n, k$  的反演计算精度均较呈现降低趋势. 偏差对SEI法反演  $k$  的影响较小,而对MC法则影响较大. 同时可知,实验数据存在偏差对两种模型反演  $n$  的影响均较大.

### 3 结 论

1) 基于双厚度透射法测量,结合半透明液体透射比的 MC 法和 SEI 法反演模型,可以实验获取半透明液体的光学常数.

2) MC 和 SEI 反演模型受实际的光学常数  $n$ 、 $k$  影响较大,在其适用范围内反演计算精度高.

3) 当实验数据存在偏差时,光学常数  $n$ 、 $k$  的反演计算精度均呈现降低趋势.对 SEI 方法反演吸收指数  $k$  的影响较小,而对 MC 方法则影响较大,且透射比存在偏差对两种模型反演折射指数  $n$  的影响均较大.

### 参考文献:

- [1] JILL M S, THOMAS K B, ALLEN J R, *et al.* Characterization of thermal radiation spectra in 2 m pool fires [C]//Proceedings of the Combustion Institute-32nd International Symposium on Combustion. United Kingdom: Elsevier Ltd, 2009: 2567 - 2574.
- [2] 张鹤声,黄国权,谢承隆. 油煤混合燃料(COM)的火焰辐射特性[J]. 燃料化学学报,1984, 11(1): 22 - 27.
- [3] ZHONG Fengquan, FAN Xuejun, YU Gong, *et al.* Heat transfer of aviation kerosene at supercritical conditions [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2009, 23(3): 543 - 550.
- [4] NICOLAS G, PHILIPPE G, YOUSOUFI T. Validation of transient cooling modeling for hypersonic application [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2007, 27(1): 86 - 94.
- [5] WANG Qiuwang, WU Feng, ZENG Min. Numerical simulation and optimization on heat transfer and fluid flow in cooling channel of liquid rocket engine thrust chamber [J]. International Journal for Computer-Aided Engineering and Software, 2006, 23(8): 907 - 924.
- [6] HUANG H, LOUIS J S, DAVID R S. Fuel-cooled thermal management for advanced aeroengines [J]. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2004, 126(2): 284 - 293.
- [7] ADAM E K, JASON M P, JAY B J, *et al.* Two-wavelength mid-IR absorption diagnostic for simultaneous measurement of temperature and hydrocarbon fuel concentration [C]//Proceedings of the Combustion Institute-32nd International Symposium on Combustion. [S. l.]: Elsevier Ltd, 2009: 821 - 829.
- [8] 尹海亮,周同娜,柳云骐,等. 激光拉曼光谱研究 NiMoP 浸渍液活性组分的结构 I. 磷含量的影响 [J]. 燃料化学学报,2010, 38(6): 707 - 709.
- [9] CAI Tingdong, JIA Hui, WANG Guishi, *et al.* A sensor for measurements of temperature and weater concentration using a single tunable diode laser near 1.4  $\mu\text{m}$  [J]. Sensors and Actuators A: Physical, 2009, 152(1): 5 - 12.
- [10] LU Yutian, ALFONS P. Optical constants measurements of strongly absorbing media [J]. Applied Optics, 1986, 25(2): 221 - 225.
- [11] HANS R Z. Temperature dependence of the optical constants for liquid  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{D}_2\text{O}$  in the far IR region [J]. Journal of Molecular Structure, 1995, 350(2): 95 - 114.
- [12] JASON M P, JAY B J, RONALD K H. Mid-infrared absorption measurements of liquid hydrocarbon fuels near 3.4  $\mu\text{m}$  [J]. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 2009, 110(18): 2135 - 2147.
- [13] KEEFE C D, JANET E P. Infrared optical constants, dielectric constants, molar polarizabilities, transition moments, dipole moment derivatives and raman spectrum of liquid cyclohexane [J]. Spectrochimica Acta-Part A Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2009, 72(5): 947 - 953.
- [14] TUNTOMO A, TIEN C L, PARK S H. Optical constants of liquid hydrocarbon fuels [J]. Combustion Science and Technology, 1992, 84(1): 133 - 140.
- [15] 谈和平,夏新林,刘林华,等. 红外辐射特性与传输的数值计算——计算热辐射学[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2006: 18 - 40.

(编辑 杨波)