Marek CZERWIŃSKI, Janusz MROCZKA
POLITECHNIKA WROCŁAWSKA
KATEDRA METROLOGII ELEKTRONICZNEJ I FOTONICZNEJ

Metoda hybrydowa w opisie transmisji światła w warunkach rozproszenia wielokrotnego

Dr inż. Marek S. Czerwiński

Adiunkt w Katedrze Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej Politechniki Wrocławskiej studia magisterskie w zakresie Inżynierii Biomedycznej na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej ukończył w 1994 roku. Pracę doktorską obronił z wyróżnieniem w 1998 w Laboratoire d'Energetique des Systemes et Procedes na Uniwersytecie w Rouen we Francji (promotor prof. J. Mroczka). Obszar zainteresowań naukowych obejmuje zagadnienia związane z problemem odwrotnym, wielokrotnym rozproszeniem światła oraz modelowaniem zjawisk fizycznych.

Prof. dr hab. inż. Janusz Mroczka

Kierownik Katedry Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej na Wydziale Elektroniki Politechniki Wrocławskiej. Zajmuje się algorytmizacją problemu odwrotnego i jego aplikacją w pomiarach oraz analizą spektralną i polaryzacyjną promieniowania rozproszonego w układach dyspersyjnych gęstych.

Streszczenie

W artykule tym zaprezentowana została metoda hybrydowa opisu transmitancji światła przez gęsty optycznie ośrodek dyspersyjny. Metoda hybrydowa powstała przez połączenie metody 4 strumieni ze statystycznym modelem Monte Carlo co pozwoliło na uwzględnienie rzeczywistej geometrii układu pomiarowego źródło – detektor.

Abstract

The aim of this paper is to present a method to predict light transmittances through dense 3D media. A hybrid method is introduced as a combination of 4 flux method with coefficients predicted from a Monte Carlo statistical model to take into account the actual 3D geometry of the problem under study. In this paper we present the principles of the hybrid method.

Wstęp

Podstawy wielokrotnego rozproszenia promieniowania elektromagnetycznego zostały opisane ponad 50 lat temu [1], wciąż pozostaje ono złożonym zjawiskiem o dużej ilości potencjalnych zastosowań. W niektórych zastosowaniach jak przepływy wielofazowe, badanie zawiesin w cieczach, wtryskiwacze paliwa itp. wielokrotnie rozproszenie światła może być dominującym procesem w transferze radiacyjnym i jednym z najlepszych zjawisk fizycznych, które mogą być wykorzystane w celach diagnostycznych.

Istnieje wiele sposobów opisu zjawiska wielokrotnego rozproszenia światła. Jedna z nich zbudowana została w oparciu o statystyczną metodę Monte-Carlo. Polega ona na analizowaniu drogi pokonywanej przez światło wyemitowane przez źródło. W tym celu zakłada się, że źródło światła emituje określoną ilość promieni świetlnych (nazywanych fotonami) charakteryzujących się określonym natężeniem i kierunkiem poruszania. Metoda ta jest dokładna, aczkolwiek bardzo czasochłonna ponieważ jej dokładność zależy od ilości przeanalizowanych promieni świetlnych. Ze względu na statystyczny charakter metody niemożliwe staje się również zastosowanie klasycznych metod inwersyjnych. Inna, wykorzystywana przez nas metoda opisu wielokrotnego rozproszenia światła – metoda 4 strumieni – zakłada, że interesująca nas układ dyspersyjny posiada średnie właściwości rozproszeniowe zdeterminowane przez cząstki. Jest to bardzo szybka metoda analityczna, zakładająca jednowymiarowość ośrodka rozproszeniowego (zespół cząstek modelowany jest jako ośrodek o nieskończonych wymiarach pionowych ograniczony dwiema nieskończonymi płaszczyznami). Założenia te sprawiają iż niemożliwe jest bezpośrednie zastosowanie metody 4 strumieni w analizie rzeczywistych układów pomiarowych.

Opracowane metody hybrydowe łączą zalety wynikające z metody Monte-Carlo z zaletami metody 4 strumieni. Są one oparte na metodzie 4 strumieni, posiadają więc jego zalety prostoty, wydajności obliczeniowej oraz analitycznej formy. Dzięki współczynnikom obliczonym metodą symulacji Monte-Carlo uwzględniają rzeczywiste parametry geometryczne badanego układu jak i detektorów.

Metoda 4 strumieni

Problem rozproszeniowy.

Rozpatruje się warstwę (o nieskończonych wymiarach bocznych) ograniczoną dwiema płaszczyznami I (płaszczyzna wejściowa) oraz O (płaszczyzna wyjściowa) zamykającą ośrodki rozproszeniowe Mie charakteryzowane przez średnicę d, zespolony współczynnik załamania światła m oraz stężenie ilościowe N. Ośrodek rozpraszający (lub/i absorbujący) rozpatrywany jest jako homogeniczny i izotropowy. Oś z prostopadła do płaszczyzn I oraz O, przecina je w punktach $z=Z$ (*oś I*) oraz $z=0$ (*oś O*). Rozpatrywana jest również płaszczyzna tła S równoległa do rozpatrywanej warstwy umiejscowiona po ujemnej stronie osi z. Światło pada na płaszczyznę I, a celem rozważań jest związanie transmitancji i reflektancji światła z właściwościami cząstek jak średnica d, zespolony współczynnik załamania światła m oraz stężenie cząstek N. Medium samoistnie nie emituje światła pod żadną postacią więc problem jest typowym problemem gdzie występuje jedynie zjawisko rozproszenia.

Całkowite pole radiacyjne w punkcie z zamodelować można jako składające się z czterech części – czterech strumieni [2, 3, 4]:

- wiązki skolimowanej o natężeniu $I_c(z)$ zdążającej w kierunku ujemnych wartości z (natężenie oznacza ilość energii przepływającej w jednostce czasu przez jednostkę powierzchni na płaszczyźnie prostopadłej do osi z,
- wiązki skolimowanej skierowanej przeciwnie (tj. w kierunku dodatnich z) o natężeniu $J_c(z)$,
- promieniowania rozproszonego (zdyfundowanego) w kierunku ujemnych z o natężeniu $Id(z)$ oraz
- promieniowania zdyfundowanego o natężeniu $Jd(z)$ w kierunku dodatnich z. Na warstwie tła S, którą może stanowić np. soczewka umieszczona przed detektorem zachodzić może np. odbicie wiązki skolimowanej.

Elementy objętościowe znajdujące się w warstwie charakteryzowane są przez:

- współczynnik absorpcji k taki, że relatywny spadek energii wiązki skolimowanej przechodzącej przez warstwę o grubości dz, na drodze absorpcji wynosi kdz,
- współczynnik rozproszenia s zdefiniowany dla rozproszenia tak samo jak k dla absorpcji,
- współczynnik rozproszenia w przód ζ równy stosunkowi energii rozproszonej przez cząstkę w kierunku „do przodu" (przednia półkula) do całkowitej ilości rozproszonej energii.

$$\zeta = \frac{C^f_{sca}}{C_{sca}} \tag{1}$$

W przypadku promieniowania skolimowanego wchodzącego pod kątem prostym do warstwy o grubości dz współczynnik rozproszenia do przodu jest równy stosunkowi energii rozproszonej w kierunku przedniej półkuli do całkowitej ilości energii rozproszonej w warstwie. W przypadku promieniowania zdyfundowanego sytuacja jest nieco bardziej skomplikowana ponieważ przednia półkula dla cząsteczki nie musi być zgodna z półkulą przednią dla warstwy, dla uproszczenia zagadnienia przyjmuje się, że współczynnik rozproszenia do przodu dla promieniowania zdyfundowanego wynosi również ζ. Rozproszenie w tył (tylna półkula) wynosić będzie zatem $(1-\zeta)$ dla wszystkich rodzajów promieniowania,

- średni parametr przejścia ε, który określa faktyczną drogę przebytą przez światło w warstwie o grubości dz – tzn. kiedy światło zdyfundowane przebywa w warstwie drogę dz, faktyczna droga którą musi pokonać wynosi εdz. W przypadku wiązki skolimowanej ε wynosi oczywiście 1, a łatwo można wykazać, że dla semi-izotropowej zdyfundowanej wiązki ε wynosi 2. W obliczeniach stosuje się również zależności analityczne opisujące parametr ε [5].

W dalszym ciągu definiuje się: współczynniki rozproszenia w przód dla wiązki skolimowanej ζs oraz zdyfundowanej $\varepsilon\zeta s$, współczynniki rozproszenia w tył dla wiązki skolimowanej $(1-\zeta)s$ i zdyfundowanej $\varepsilon(1-\zeta)s$ oraz współczynnik absorpcji dla wiązki zdyfundowanej εk.

Zgodnie z teorią rozproszenia Lorenza-Mie zapisać można:

$$k = NC_{abs} = N(C_{ext} - C_{sca}) = NC_{ext}(1-a), \tag{2}$$

$$s = NC_{sca} = aNC_{ext}, \tag{3}$$

gdzie C_{sca} – rozproszeniowy przekrój Mie, C_{abs} – absorpcyjny przekrój Mie i C_{ext} – ekstynkcyjny przekrój Mie, natomiast a jest albedem rozproszenia pojedynczego zdefiniowanym jako:

$$a = \frac{C_{sca}}{C_{ext}} = \frac{Q_{sca}}{Q_{ext}} = \frac{s}{k+s}, \tag{4}$$

gdzie Q_{sca} i Q_{ext} są faktorami efektywności Mie dla rozproszenia i ekstynkcji. Wielkości Q_{sca}, Q_{ext}, Q_{fsca}, g wyznacza się zgodnie z teorią Mie [6, 7].

Całkowita transmitancja wyznaczona z modelu 4 strumieni jest sumą trzech składników:

- transmitancji skolimowanej-skolimowanej odpowiadającej transmitancji światła wpływającego i opuszczającego badane medium w formie skolimowanej (τ_{CC}),
- transmitancji skolimowanej-zdyfundowanej odpowiadającej transmitancji światła wpływającego do warstwy w formie skolimowanej i opuszczającego medium w formie rozproszonej (τ_{CD}),
- transmitancji zdyfundowanej-zdyfundowanej odpowiadającej transmitancji przez badane medium światła zdyfundowanego (τ_{DD}).

Zakładając, że badany ośrodek oświetlany jest wiązką skolimowaną, trzeci składnik sumy jest równy zero. Ostatecznie więc całkowitą transmitancję światła przez badaną warstwę zapisać można w następującej postaci:

$$\frac{dJ_d}{dz} = -\varepsilon kJ_d - \varepsilon(1-\varsigma)sJ_d + \varepsilon(1-\varsigma)sI_d + (1-\varsigma)\, sI_c + \varsigma\, sJ_c \tag{5}$$

Transmitancja τ_{CD} odpowiada tej części promieniowania, która dotarła do płaszczyzny tła S po kolizjach z cząstkami fazy rozproszonej wewnątrz badanej warstwy. Dlatego też, ten składnik τ_{tot} jest bardzo uzależniony od rzeczywistych wymiarów układu pomiarowego. W przeciwieństwie do niego transmitancja τ_{CC} nie zależy od geometrii układu pomiarowego. Zależy jedynie od fizycznych właściwości ośrodka dyspersyjnego i od szerokości badanej warstwy. Przy założeniu, że reflektancje płaszczyzn ograniczających są równe 0, transmitancja ta jest równa transmitancji wyznaczonej z prawa Lamberta-Beera.

Metoda Monte Carlo.

W prezentowanej pracy do metody Monte-Carlo wprowadzone zostały następujące założenia dotyczące zjawiska rozproszenia światła [8,9]:

- stan ustalony,
- rozproszenie quasi elastyczne,
- wewnątrz nieskończenie cienkiej warstwy nie zachodzi rozproszenie wielokrotne,
- światło opisywane jest przy pomocy wektora natężeniowego (bez uwzględniania polaryzacji ani interferencji),
- badany ośrodek uważa się za homogeniczny i izotropowy.

Opis zjawiska wielokrotnego rozproszenia światła przy pomocy parametrów rozproszenia pojedynczego oparty jest na opisie elementu objętościowego przy pomocy trzech parametrów: albedo rozproszenia pojedynczego a, współczynnika ekstynkcji K_{ext} oraz funkcji fazowej $P(\theta)$ wyznaczonych za pomocą teorii rozproszeniowej Lorenza-Mie.

Podstawową ideą modelu jest badanie trajektorii ruchu elementów nazywanych fotonami. Trajektoria ruchu każdego z fotonów od opuszczenia źródła światła do dotarcia do detektora bądź wygaśnięcia (przez absorpcję lub opuszczenie medium bez dotarcia do detektora), rekonstruowana jest stochastycznie w oparciu o gęstości prawdopodobieństwa określonych zdarzeń. Wraz ze wzrostem liczby wyemitowanych fotonów statystyczny opis zjawiska fizycznego zbliża się do dokładnego, deterministycznego rozwiązania problemu.

Każde ze zdarzeń mogących zajść w czasie życia fotonu jest opisane przy pomocy funkcji probabilistycznych:

- dla każdego punktu źródła i dla każdego z kierunków liczba wyemitowanych fotonów zależna jest od luminancji danego punktu na powierzchni źródła światła,
- prawdopodobieństwo absorpcji bądź rozproszenia fotonu pomiędzy odległościami l i $l+dl$ wyrażone jest wzorem $k_{ext}\exp(-k_{ext}l)dl$ gdzie $k_{ext}=NC_{ext}$. Cext jest przekrojem ekstynkcyjnym a N jest ilościową gęstością cząstek. Jeżeli r oznacza losową liczbę z przedziału [0, 1], odległość pokonaną przez foton przed kolizją z cząstką fazy rozproszonej dana jest wzorem:

$$l = -\frac{\log r}{k_{ext}}, \tag{6}$$

- prawdopodobieństwo absorpcji fotonu zdeterminowane jest przez albedo a. Dla r, kolejnej liczby losowej z przedziału [0, 1], foton jest zaabsorbowany jeżeli $r<a$, w przeciwnym wypadku foton jest rozproszony,
- kierunek propagacji fotonu po jego rozproszeniu określa się na podstawie funkcji fazowej zdefiniowanej dla dwóch kątów rozproszeniowych oraz kątów θ i φ. Wykorzystują kolejne dwie liczby losowe z zakresu [0,1] otrzymujemy:

$$\varphi = 2\pi r \quad \text{oraz} \quad r' = \frac{\int_0^{\theta} P(\theta)\cdot d\Omega}{\int_0^{\pi} P(\theta)\cdot d\Omega}, \tag{7}$$

gdzie Ω jest stałym kątem.

Metoda Monte-Carlo, pozwala na uwzględnienie dowolnego układu pomiarowego, dowolnego kształtu badanego ośrodka, parametrów charakterystycznych dla ścian ograniczających (współczynników odbicia i absorpcji) oraz właściwości źródeł i detektorów światła. Dla każdego z wyemitowanych fotonów program przechowuje liczbę odbytych kolizji co pozwala na wyznaczenie transmittancji: τ_{MC0} – odpowiadającej stosunkowi liczby fotonów, które dotarły do detektora baz kolizji wewnątrz badanego ośrodka do całkowitej liczby wyemitowanych fotonów (transmitancja ta bezpośrednio odpowiada transmitancji wyznaczonej z prawa Bouguera-Lamberta-Beera) oraz τ_{MCm} odpowiadającej stosunkowi liczby fotonów, które dotarły do detektora po jednej bądź więcej kolizji z cząstkami fazy rozproszonej do całkowitej ilości wyemitowanych fotonów. Całkowita transmitancja wyznaczona przy pomocy aproksymacji Monte-Carlo dana jest wzorem:

$$\tau_{MC} = \tau_{MC0} + \tau_{MCm} \tag{8}$$

Metody hybrydowe.

W celu połączenia zalet obu prezentowanych wcześniej metod opracowane zostały metody hybrydowe łączące właściwości poprzednio prezentowanych metod, prostoty i wydajności obliczeniowej metody 4 strumieni z dokładnością i ogólnością aproksymacji Monte-Carlo. Jak przedstawiono całkowite transmitancje wyznaczone zarówno pomocą modelu 4 strumieni jak i metody Monte-Carlo składają się z dwóch składników (i) z transmitancji skolimowanej-skolimowanej (τ_{CC}) oraz tansmitancji skolimowanej-zdyfundowanej (τ_{CD}) w modelu czterech strumieni oraz (ii) τ_{MC0} i τ_{MCm} w aproksymacji metodą Monte-Carlo. Zauważyć można, że w obydwu przypadkach pierwsze składniki sum są niezależne od geometrii układu pomiarowego i bezpośrednio odpowiadają transmitancji wyznaczonej z prawa Bouguera-Lamberta-Beera [10, 11]. Drugie składniki sum (τ_{CD} oraz τ_{MCm}) związane są z fotonami, które na swojej drodze wewnątrz badanego układu dyspersyjnego zostały przynajmniej raz rozproszone. Transmitancja τ_{MCm} uwzględnia jednakże efekty związane z trójwymiarowością badanego układu.

Podstawą metod hybrydowych jest założenie, że τ_{MCm} jest proporcjonalne do τ_{CD}. Zadanie polega na wyznaczeniu współczynników proporcjonalności zależnych od długości fali, geometrii układu pomiarowego i właściwości układu dyspersyjnego.

Tak postawioną hipotezę opisać można następującą zależność [12, 13]:

$$\tau_{MC} = \tau_{CC} + K\tau_{CD} \tag{9}$$

Metoda hybrydowa 1.

W metodzie hybrydowej 1 podstawowym założeniem jest zależność współczynnika K od τ_{CD} ($K=h(\tau_{CD})$). Wartość współczynnika τ_{CD} wyznacza się dla danej długości fali, średnicy cząsteczkowej oraz stężenia fazy rozproszonej.

Na drodze symulacji numerycznych uzyskano następującą zależność matematyczną określającą zależność pomiędzy współczynnikiem K a τ_{CD}:

$$K = B\cdot \exp(\tau_{CD}\cdot A) \tag{10}$$

gdzie A i B są wielkościami stałymi dla danego λ i *d*.

Metoda hybrydowa 2.

Metoda hybrydowa 2 opracowana została w oparciu o zależność pomiędzy współczynnikiem K i transmitancją τ_{MC} ($K=f(\tau_{MC})$). Sytuacja ta odpowiada warunkom eksperymentalnym kiedy dla danej długości fali λ, τ_{MC} jest jedyną wielkością pomiarową. Zależności opisuje następująca zależność funkcyjna:

$$K = C\cdot \tau_{MC}^{D}, \tag{11}$$

gdzie współczynniki C i D są stałe dla danego λ i d.

Oczywistym jest, że ponieważ K wyznaczane jest jako funkcja τ_{MC}, wyniki uzyskane przy pomocy metody hybrydowej 2 są zawsze zgodne z wartościami τ_{MC} wyznaczonymi przy pomocy metody Monte Carlo.

Podsumowanie

Metody hybrydowe zostały zweryfikowane na drodze eksperymentów numerycznych. Oparte o analityczny opis zjawiska wielokrotnego rozproszenia światła metodą 4-strumieni łączą jego zalety z zaletami uniwersalności wynikającymi z metody Monte-Carlo. Co więcej dzięki metodom hybrydowym udało się znacznie uprościć procedury inwersyjne związane z rozwiązywaniem problemu odwrotnego (określania rozkładu wielkości cząstek i ich stężenia na podstawie badania transmitancji światła) w warunkach wielokrotnego rozproszenia światła [14].

Literatura

[1] S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer* (Oxford U. P., London, 1950)

[2] B. Maheu, J.N. Le Toulouzan, G. Gouesbet, *Four-flux models to solve the scattering transfer equation in terms of Lorenz-Mie parameters*, Applied Optics, Vol. 23 (No. 19), pp. 3353-3362, 1/10/1984

[3] M. Czerwiński, J. Mroczka, *4 flux model in real disperse media examination: the results of computer simulation*. National conference 'Computer added metrology', Zegrze 19-22/05/97 (in polish).

[4] B. Maheu, G. Gouesbet, *Four flux models to solve the scattering transfer equation*: special cases, Applied Optics, Vol. 25, No. 7. 01/04/1984.

[5] Yi Ping Wang, Zheng Sen Wu, Kuan Fang Ren *Four flux model with adjusted average crossing parameter to solve the scattering transfer equation*, Applied Optics, Vol. 28, No. 1, 28, 1989.

[6] K. Kerker *The Scattering of light and other electromagnetic radiation* (Academic, New York 1969)

[7] C. F. Bohren, D. R. Huffman *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (1983), John Willey and Sons, New York.

[8] B. Maheu, J. P. Briton, G. Grehan, G. Gouesbet, *Monte-Carlo Simulation of Multiple Scattering in Arbitrary 3-D Geometry*, Part. Part. Syst. Charact. 9. (1992). pp. 52-58.

[9] C. Roze, B. Maheu, G. Grehan, J. Menard, *Evaluations of the distance of visibility in a foggy atmosphere by Monte-Carlo simulation*, Atmospheric Environment 25(5): 769-775, 1994.

[10] M. Czerwiński, J. Mroczka, K. F. Ren, T. Girasole, G. Grehan, G. Gouesbet *Scattered Light Predictions Under Multiple Scattering Conditions with Application to Inversion Scheme*, 7th European Symposium Particle Characterisation, Nurnberg, Germany, 10-12 March 1998, 507-516

[11] M. Czerwiński, J. Mroczka, T. Girasole, G. Grehan, G. Gouesbet *Hybrid Method to Predict Scattered Light Transmittances Under Multiple Scattering Conditions*, 5th International Congress on Optical Particle Sizing, Minneapolis, Minnesota USA, 10-14 August 1998, pp. 261-264

[12] M. Czerwiński *Modelisation de la turbidite spectrale d'un milieu multidiffusif et son application au probleme inverse*, PhD thesis Universite de Rouen, 1998.

[13] M. Czerwiński, J. Mroczka, T. Girasole, G. Grehan, G. Gouesbet, „Light-Transmittance Predictions Under Multiple-Light-Scattering Conditions. I. Direct Problem: Hybrid-Method Approximation" Appl. Opt Vol. 40, Issue 9, 1514-1524 (2001).

[14] M. Czerwiński, J. Mroczka, T. Girasole, G. Grehan, G. Gouesbet: „Light-Transmittance Predictions Under Multiple-Light-Scattering Conditions. II. Inverse Problem – Particle Size Determination" Appl. Opt., Vol. 40, Issue 9, 1525-1530 (2001).