

Janusz MROCZKA, Piotr BINEK

KATEDRA METROLOGII ELEKTRONICZNEJ I FOTONICZNEJ, UL. B. PRUSA 53/55, 50-317, WROCŁAW (POLITECHNIKA WROCŁAWSKA)

Metoda dodawania-podwajania w modelowaniu rozproszenia światła przez cząstki niesferyczne

prof. dr hab. inż. Janusz MROCZKA

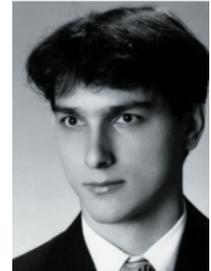
Kierownik Katedry Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej Politechniki Wrocławskiej. Zajmuje się metodologią obserwacji i eksperymentu, algorytmizacją problemu odwrotnego, modelowaniem matematycznym pól fizycznych, analizą spektralną i polaryzacyjną promieniowania rozproszonego, reprezentacjami czasowo-częstotliwościowymi w przetwarzaniu danych.



e-mail: janusz.mroczka@pwr.wroc.pl

dr inż. Piotr BINEK

Doktor Politechniki Wrocławskiej. Zajmuje się badaniem rozpraszania światła w ośrodkach dyspersyjnych, tj. atmosfera, ośrodki medyczne, oraz aplikacją i praktycznym wykorzystaniem metod numerycznych w modelowaniu i symulacji problemów rozproszenia wielokrotnego w tym: równania transferu, pojedynczego rozpraszanie.



e-mail: piotr.biniek@pwr.wroc.pl

Streszczenie

Artykuł przedstawia analizę problemu rozpraszania promieniowania przez cząstki niesferyczne. Pojedyncze rozproszenie jest analizowane przy użyciu metody macierzy T, która doskonale nadaje się do niesferycznych, osiowo-symetrycznych obiektów. Wielokrotne rozproszenie z cząstkami niesferycznymi modelowane jest z wykorzystaniem metody dodawania-podwajania warstw. Celem pracy jest zbadanie wpływu kształtu cząstek na funkcje makroskopowe opisujące badany ośrodek.

Słowa kluczowe: macierz T, metoda dodawania-podwajania, niesferyczne cząstki

Adding-doubling method in modeling of scattering of light by nonspherical particles

Abstract

The problem of scattering of light by nonspherical particles is described. The single scattering is analyzed on the basis of the T matrix method, which is suitable for nonspherical, axially symmetrical particles. The multiple scattering of light is described using the adding-doubling method. The main topic of the research is to examine the effect of particles' shape on reflectance and transmittance.

Keywords: T matrix, adding-doubling method, nonspherical particles.

1. Wprowadzenie

Badanie wpływu kształtu cząsteczki na optyczne właściwości ośrodka ma duże znaczenie w wielu obszarach nauki: pomiarach zdalnych [1], pomiarze wielkości cząstek [2], modelowaniu zmian klimatycznych [3] oraz badaniach rozpraszania światła we krwi [4]. Wpływ kształtu cząstek w jednokrotnym rozproszeniu był analizowany przez wielu autorów. Mishchenko [5] zauważył, że obliczenia dla cząstek niesferycznych opisanych przez równoważną kulę z teorii Mie, wskazują na duże różnice w sferyczności-niesferyczności funkcji fazowej i są one znaczne, zwłaszcza dla rozpraszania w przód i wstecz. Mniejsze różnice występuje dla przekroju czynnego na rozpraszanie i tłumienia oraz albedo. Także Takano i Liou [3] demonstrują, że zarówno kula o równoważnej powierzchni oraz równoważnej objętości nie może adekwatnie aproksymować dużych sześciokątnych cylindrów w przeliczeniu na ich właściwości optyczne w pojedynczym rozproszeniu, co zostało także zweryfikowane doświadczalnie dla wypukłych i wklęsłych cząstek przez Zerull i Giese [6,7].

Wpływ kształtu cząstki na wielokrotne rozproszenia światła w ośrodku dyspersyjnym jest mniej wyraźny niż jej właściwości w pojedynczym rozproszeniu. Jest to spowodowane losowym kierunkiem fotonów w ośrodku wywołanych wieloma zdarzeniami. Badania wpływu kształtu kryształów na natężenie światła był analizowane przez wielu autorów [9-11]. Analizę wielokrotnego rozproszenia światła dla dużych cząstek przeprowadził Kochanowski [12]. W badaniach wielokrotnego rozproszenia użyto rozwiązanie równania transferu. Znalezione, że kształt cząstek zmienia makroskopowe właściwości rozpraszające ośrodka dyspersyjnego.

Celem tego artykułu jest badanie wpływu kształtu cząstek oraz ich właściwości chemicznych na makroskopowe optyczne wielkości opisujące rozpraszanie światła w płaszczyźnie równoległej ośrodka tj. odbicie i transmisję.

2. Metoda

2.1. Pojedyncze rozproszenie

Właściwości rozpraszające pojedynczej cząstki są obliczone z użyciem metody macierzy-T. Metoda macierzy-T jest elastyczną metodą doskonale nadającą się do obliczania właściwości rozpraszających osiowo-symetrycznych, niesferycznych cząstek o różnej wielkości [13].

W badaniach zakładamy, że cząstki w ośrodku są losowo zorientowane i mają tę samą wielkość. Macierz T umożliwia szybkie wyznaczenie średnich właściwości rozpraszających losowo zorientowanych cząstek, w porównaniu z metodami całkowymi [15-18].

Właściwości rozpraszające cząstki w losowej orientacji są wyznaczone poprzez uśrednienie właściwości rozpraszających cząstki po wszystkich możliwych orientacjach:

$$\langle T_{mm'n'}^{ij} \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma T_{mm'n'}^{ij}(\mathbf{B}; \alpha, \beta, \gamma), \quad (1)$$

dla $i, j = 1, 2$. Przypadki różnych orientacji cząstek rozpatrywali Mishchenko [19,20], Skaropoulos [21], Borghese [22].

Z obliczonej macierzy T uśrednionej po orientacji wyznaczony jest następnie przekrój czynny na tłumienie dla losowo zorientowanych cząsteczek, przekrój czynny na rozpraszanie oraz macierz fazowa F dla losowo zorientowanych cząsteczek osiowo-symetrycznych. W obliczeniach wielokrotnego rozproszenia

światła często wykorzystujemy współczynniki rozwinięcia macierzy fazowej \mathbf{F} [13]. Kiedy współczynniki rozszerzenia są znane, wtedy elementy macierzy rozpraszania mogą być łatwo obliczone dla praktycznie dowolnej liczby kątów z minimalnym czasem obliczeń. Stąd zamiast wyszczególniać elementy macierzy rozpraszania dla dużej liczby rozpraszanych kątów i używając interpolacji do obliczenia macierzy rozpraszania w pośrednich punktach, możemy użyć ograniczonej (ale zwykle małej) liczby numerycznie znaczących współczynników rozszerzenia.

W praktyce współczynniki rozszerzenia są szczególnie wygodne w uśrednieniu zbioru cząsteczek. Zamiast obliczać macierz rozpraszania uśrednionego zbioru elementów, możemy uśrednić dużo mniejszą liczbę współczynników rozszerzenia.

2.2. Wielokrotne rozproszenie

Do badania wielokrotnie rozproszonego promieniowania w ośrodku dyspersyjnym wykorzystano równanie transportu RTE. Funkcje odbicia i transmitancji są obliczane przy użyciu metody dodawania-podwajania warstw, wzory (6)-(9) [24,25]. Idea metody dodawania-podwajania wynika z zasady niezmienności [26], i polega na zastąpieniu badanego ośrodka o grubości τ , N nieskończenie cienkimi warstwami, Rys. 1, których grubość dt jest rzędu 10^{-06} . Dla tak cienkiej warstwy wielokrotne rozproszenie światła może być pominięte. Każda z warstw (AB) oraz (BC) jest charakteryzowana przez macierze odbicia \mathbf{R} i transmisji \mathbf{T} , które są wyznaczone z aproksymacji pojedynczego rozproszenia w warstwie [27]. Zauważmy, że metoda dodawania podwajania umożliwia przeprowadzenie obliczeń dla ośrodków homogenicznych i niehomogenicznych. Z zależności podanych przez Granta i Hunta [24] oraz van de Hulsta [28], możemy obliczyć funkcje odbicia i transmitancji dla całej warstwy przez kolejne dodawanie i podwajanie poszczególnych warstw. Równania dla dodawania warstw są następujące:

$$\mathbf{T}^{CA} = \mathbf{T}^{BA} (\mathbf{E} - \mathbf{R}^{BC} \mathbf{R}^{BA})^{-1} \mathbf{T}^{CB}, \quad (2)$$

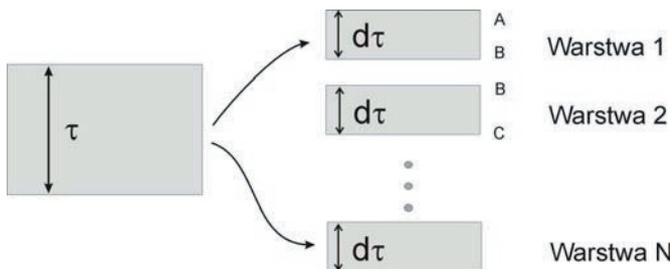
$$\mathbf{R}^{AC} = \mathbf{T}^{BA} (\mathbf{E} - \mathbf{R}^{BC} \mathbf{R}^{BA})^{-1} \mathbf{R}^{CB} \mathbf{T}^{AB} + \mathbf{R}^{AB}, \quad (3)$$

oraz

$$\mathbf{T}^{AC} = \mathbf{T}^{BC} (\mathbf{E} - \mathbf{R}^{BA} \mathbf{R}^{BC})^{-1} \mathbf{T}^{AB}, \quad (4)$$

$$\mathbf{R}^{CA} = \mathbf{T}^{BC} (\mathbf{E} - \mathbf{R}^{BA} \mathbf{R}^{BC})^{-1} \mathbf{R}^{BA} \mathbf{T}^{CB} + \mathbf{R}^{CB}, \quad (5)$$

gdzie: \mathbf{E} jest macierzą jednostkową, natomiast macierze \mathbf{R}^{xx} oraz \mathbf{T}^{xx} są macierzami odpowiednich warstw (AB) i (BC), przy przyjęciu że promieniowanie pada raz na górną warstwę, tj. na stronę A warstwy (AB), a następnie na jej spód tj. B.



Rys.1. Koncepcja metoda dodawania-podwajania.
Fig. 1. The idea of the adding-doubling method.

Kiedy macierze $\mathbf{R}(\mu', \mu)$ i $\mathbf{T}(\mu', \mu)$ dla warstwy o grubości τ są

obliczone z równań (2)-(5), kolejnym krokiem pozostaje wyznaczenie funkcje odbicia i transmitancji dla oświetlenia skolimowanego [28]:

$$\mathbf{R}_c(\mu_0) = \int_0^1 \mathbf{R}(\mu_0, \mu) 2\mu d\mu, \quad (6)$$

$$\mathbf{T}_c(\mu_0) = \int_0^1 \mathbf{T}(\mu_0, \mu) 2\mu d\mu, \quad (7)$$

i dyfuzyjnego:

$$\mathbf{R}_d = \int_0^1 \int_0^1 \mathbf{R}(\mu, \mu') 2\mu' d\mu' 2\mu d\mu, \quad (8)$$

$$\mathbf{T}_d = \int_0^1 \int_0^1 \mathbf{T}(\mu, \mu') 2\mu' d\mu' 2\mu d\mu, \quad (9)$$

gdzie μ_0 jest kierunkiem padania promieniowania na badany ośrodek dyspersyjny.

3. Wyniki

W badaniach rozważano cząstki lodu, których wielkość jest większa od długości padającej fali elektromagnetycznej λ tj. $x \gg 1$, gdzie $x = 2\pi a / \lambda$, oraz a jest promieniem cząstki. Współczynnik załamania cząstek dla rozpatrywanych długości fali promieniowania elektromagnetycznego przedstawiono w Tabeli 1.

Tab. 1. Współczynnika załamania $m = n - in'$ dla cząstki lodu przy różnych długościach fali λ .

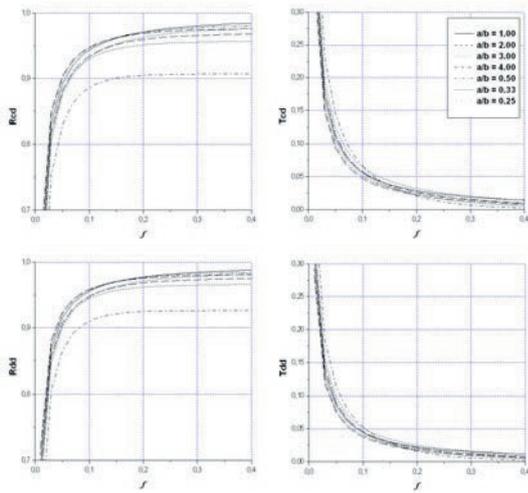
Tab. 1. The refraction index $m = n - in'$ for ice particle for different lengths of light λ .

$\lambda, \mu\text{m}$	n	n'
0.645	1.3082	1.325 E-05
1.24	1.2972	1.220 E-05
1.64	1.2881	2.670 E-04
2.13	1.2674	5.650 E-04

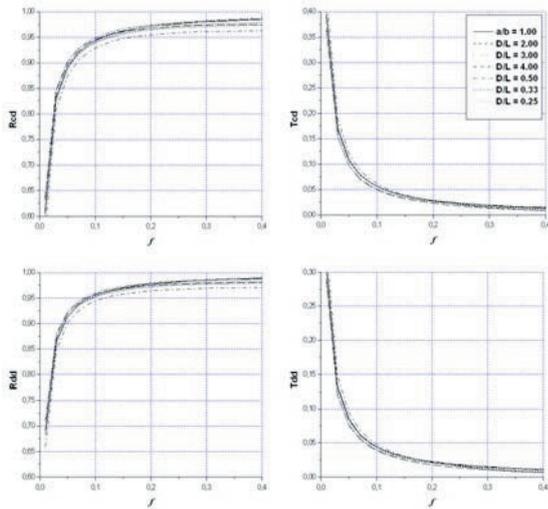
W symulacjach rozpatrywane są losowo zorientowane cząstki niesferyczne. Zakładamy, że wszystkie cząsteczki w warstwie są identyczne pod względem kształtu i wielkości, tj. rozkład monodispersyjny. Obliczenia zostały przeprowadzone dla różnego kształtu cząstek począwszy od kuli, sferoidy spłaszczonej i wydłużonej, cylindra o skończonej długości także spłaszczonego oraz wydłużonego. Dla powyższych cząstek wyznaczono uśrednione przekroje czynne na rozpraszanie, tłumienie, albedo, parametr anizotropowości g oraz współczynniki rozwinięcia funkcji fazowej na podstawie których wyznaczano wartości funkcji fazowej wykorzystanej w obliczeniach wielokrotnego rozproszenia promieniowania.

Parametr wielkościowy cząstek x został tak dobrany aby objętość badanej cząstki była stała i wynosiła $10 \mu\text{m}^3$, co odpowiada promieniowi równoważnej kuli równemu $1.3365 \mu\text{m}$. Parametr wielkościowy równoważnej kuli x_{ev} zmienia się z długością padającej fali i przyjmuje następujące wartości: 13.02, 6.77, 5.12 oraz 3.94 ($2.13\mu\text{m}$), które zależą od długości padającego promieniowania elektromagnetycznego. Właściwości rozpraszające zbioru cząstek losowo zorientowanych cząstek niesferycznych, dla podanych długości fali, zostały obliczone programem TMQ [30].

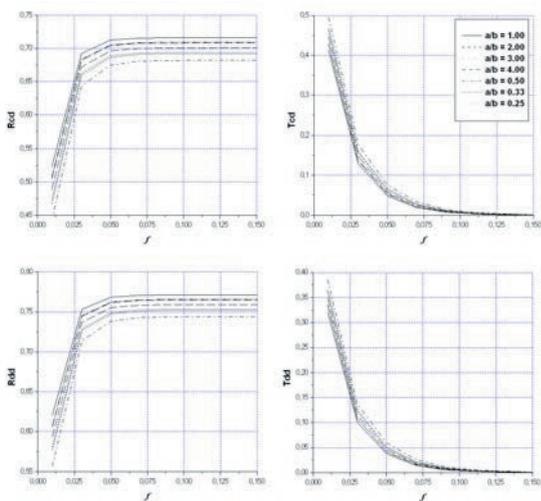
Podstawowym celem przeprowadzenia badań było sprawdzenie wpływu części urojonej współczynnika załamania na funkcje odbicia i transmitancji. Zmiany funkcji odbicia i transmitancji dla poszczególnych cząsteczek zostały wyznaczone w funkcji koncentracji cząstek i głębokości w badanej warstwie.



Rys. 2. Odbicia i transmitancja dla cząstek sferoidalnych - 0.645 μm .
 Fig. 2. Reflectance and transmittance for spheroids - 0.645 μm .



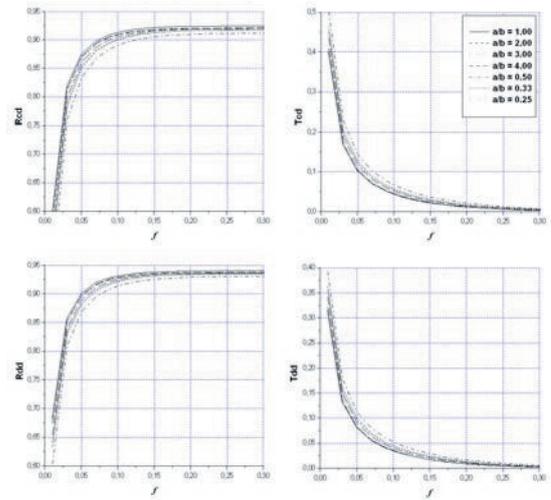
Rys. 3. Wykres funkcji odbicia i transmitancji dla skończonego cylindra - 0.645 μm .
 Fig. 3. Reflectance and transmittance for a finite cylinder - 0.645 μm .



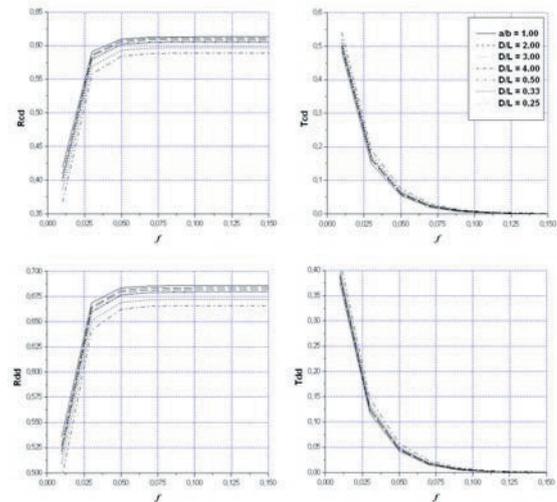
Rys. 4. Wykres funkcji odbicia i transmitancji dla skończonego cylindra - 1.64 μm .
 Fig. 4. Reflectance and transmittance for a finite cylinder - 1.64 μm .

Wyniki otrzymane przy stałej koncentracji cząstek zostały przedstawione na Rys. 2 – 6, gdzie można zaobserwować duże zmiany w funkcjach transmitancji i odbicia. Zmiany te silnie

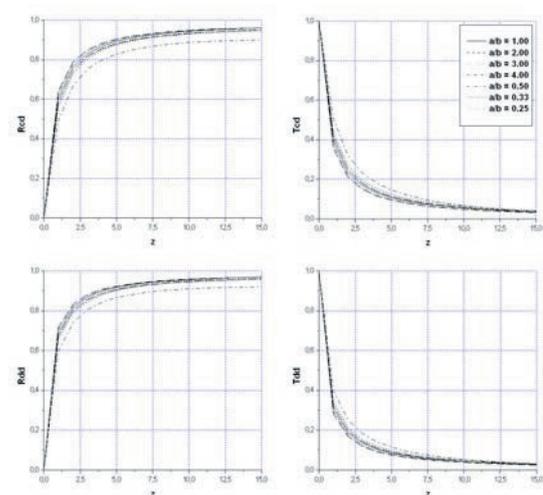
zależą od długości padającego promieniowania, wielkości i kształtu badanych cząstek.



Rys. 5. Odbicia i transmitancja dla cząstek sferoidalnych - 1.24 μm .
 Fig. 5. Reflectance and transmittance for spheroids - 1.24 μm .

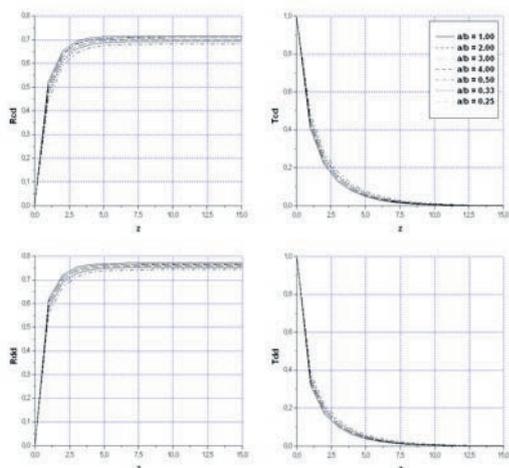


Rys. 6. Wykres funkcji odbicia i transmitancji dla skończonego cylindra - 2.13 μm .
 Fig. 6. Reflectance and transmittance for a finite cylinder - 2.13 μm .



Rys. 7. Odbicia i transmitancja dla cząstek sferoidalnych - 0.645 μm .
 Fig. 7. Reflectance and transmittance for spheroids - 0.645 μm .

Obliczenia zostały także przeprowadzone dla zmian funkcji odbicia i transmitancji w stałej koncentracji cząstek (1% i 11%) i zmiennej głębokości z w warstwie, co zostało przedstawione na Rys. 7 i 8, ale tylko dla przypadku 1% koncentracji cząstek.



Rys. 8. Odbicie i transmitancja dla cząstek sferoidalnych – 1.64 μm .

Fig. 8. Reflectance and transmittance for spheroids - 1.64 μm .

4. Podsumowanie

Przeprowadzone badania wykazały wpływ kształtu cząsteczek na właściwości makroskopowe ośrodka, wyrażone przez funkcje odbicia i transmitancji. Ogólnie przyjmuje się, że wpływ kształtu cząstki może być zaniedbany dla cząstek dużo mniejszych niż długość fali padającego promieniowania. Nie jest to prawdziwe dla dużych cząstek, co podkreśla wielu autorów. Mishchenko [5] zauważył, że obliczenia dla cząstek niesferycznych opisanych przez równoważną kulę z teorii Mie, wskazują na duże różnice w sferyczności-niesferyczności funkcji fazowej i są one znaczne, zwłaszcza dla rozpraszania w przód i wstecz. Mniejsze różnice występuje dla przekroju czynnego na rozpraszanie i tłumienia oraz albedo. Także Takano i Liou [3] demonstrują, że zarówno kula o równoważnej powierzchni oraz równoważnej objętości nie może adekwatnie aproksymować dużych sześciokątnych cylindrów w przeliczeniu na ich właściwości optyczne w pojedynczym rozproszeniu, co zostało także zweryfikowane doświadczalnie dla wypukłych i wklęsłych cząstek przez Zerull i Giese [6, 7].

Często wierzymy, że różnice w transmitancji i odbiciu promieniowania z warstwy cząstek niesferycznych będą mniej zależały od kształtu cząsteczki, co jest wywołane losowym kierunkiem fotonów oraz wieloma zdarzeniami mającymi miejsce w badanym ośrodku. Zauważmy, że właściwości cząsteczek o różnych kształtach są uśredniane przez zjawisko wielokrotnego rozproszenia przy losowej orientacji cząstek w ośrodku, co jest prawdziwe, ale tylko dla małych cząsteczek. W tym wypadku, cząstka niesferyczna może być zastąpiona przez cząstkę sferyczną o równoważnej objętości. Stąd wynika, że dla dużych cząstek różnice w ich kształcie muszą być uwzględnione, co zostało potwierdzone w obecnych badaniach.

Podziękowania

Artykuł i badania zostały finansowane przez Komitet Badań Naukowych KBN grant 3 T10C 030 26.

6. Literatura

[1] S. Havemann, A. J. Baran; Calculation of the phase matrix of elongated hexagonal ice columns using the T-matrix method, *JQSRT*, 89, 2004, 87-96.

- [2] A.A. Kochanowski; Determination of the refractive index of large strongly absorbing particles under multiple scattering conditions. *Proceedings of the Seventh European Symposium on Particle Characterization*, vol. 2. Nurnberg Messe GmbH, 1998, 517-526.
- [3] Y. Takano, K.N. Liou; Light scattering by nonspherical particles: remote sensing and climatic implications, *Atmospheric Research* 31, 1994, 271-298.
- [4] J. Mroczka, D. Wysoczański, F. Onofri; Optical parameters and scattering properties of red blood cells, *Optica Applicata*, vol. 32, (4), 2002, 691-700.
- [5] M.I. Mishchenko, Modeling phase functions for dustlike tropospheric aerosols using a shape mixture of randomly oriented polydisperse spheroids, *Journal of Geophysical Research*, 102, 1997, 16,831-16,847.
- [6] R.H. Zerull, Scattering measurements of dielectric and absorbing nonspherical particles, *Beitr. Phys. Atmos.*, 49, 1976, 168-188.
- [7] R.H. Zerull, G.H. Giese, K. Weiss; Scattering measurements of irregular particles vs. Mie theory, *Opt. Polar.*, 49, 1977, 191-199.
- [8] A.A. Kokhanovski; *Optics of light scattering media; Problems and Solutions* (II wydanie) Praxis Publishing, 2001.
- [9] S. Kinne, and K.N. Liou; The effects of the nonsphericity and size distribution of ice crystals on the radiative properties of cirrus clouds. *Atmos. Res.*, 24, 1989, 273-284.
- [10] P. Minnis, K.N. Liou, and Y. Takano; Inference of cirrus cloud properties using satellite-observed visible and infrared radiances, Part I: Parameterization of radiance fields. *J. Atmos. Sci.*, 50, 1993, 1279-1304.
- [11] M.I. Mishchenko, W.B. Rossow, A. Macke, and A.A. Lacis; Sensitivity of cirrus cloud albedo, bidirectional reflectance and optical thickness retrieval accuracy to ice particle shape. *J. Geophys. Res.* 101, 1996, 16973-16985.
- [12] A.A. Kokhanovsky, A. Macke; The dependence of the radiative characteristics of optically thick media on the shape of particles, *JQSRT*, 63, 1999, 393-407.
- [13] M.I. Mishchenko, L.D. Travis, A.A. Lacis; *Scattering, absorption, and emission of light by small particles*; Cambridge University Press, 2002, Cambridge.
- [14] H. Laitinen, K.T. Lumme; T-matrix method for general star-shaped particles: first results; *JQSRT* 60, 1998, 325-34.
- [15] P.W. Barber, D-S.Y. Wang, M.B. Long; Scattering calculations using a microcomputer, *Appl. Opt.* 20, 1981, 1121-1123.
- [16] A. Lakhtakia, V.K. Varadan, V.V. Varadan; Scattering by highly aspherical targets: EBCM coupled with reinforced orthogonalization; *Appl. Opt.* 23, 1984, 3502-3504.
- [17] P.E. Geller, T.G. Tsuei, P.W. Barber; Information content of the scattering matrix by spheroidal particles; *Appl. Opt.* 24, 1985, 2391-2396.
- [18] W.J. Wiscombe, A. Mugnai; *Single scattering from nonspherical Chebyshev particles: a compendium of calculations*; NASA Ref. Publ. NASA RP-1157, 1986.
- [19] M.I. Mishchenko, Extinction and polarization of transmitted light by partially aligned nonspherical grains, *The Astrophysical Journal*, 367, 1991, 561-574.
- [20] M.I. Mishchenko; Light scattering by randomly oriented axially symmetric particles; *J. Opt. Soc. Am. A* 8, 1991, 871-82, (Errata: 9, 1992, 497).
- [21] N.C. Skaropoulos, H.W.J. Russchenberg; "Light scattering by arbitrarily oriented rotationally symmetric particles", *J. Opt. Soc. Am. A* 19, 2002, 1583-1591.
- [22] F. Borghese, P. Denti, R. Saija, M.A. Iati, O.I. Sindoni; Optical properties of a dispersion of anisotropic particles with non-randomly distributed orientations. The case of atmospheric ice crystals, *JQSRT*, 70, 2001, 237-251.
- [23] C.F. Bohren, D.R. Huffman; *Absorption and scattering of light by small particles*. New York: Wiley, 1983.
- [24] I.P. Grant, G.E. Hunt; Solution of radiative transfer problems using the invariant S_n method, *Mon. Not. R. Astr. Soc.* 141, 1968, 27-41.
- [25] I.P. Grant, G.E. Hunt; Discrete space theory of radiative transfer I. Fundamentals, *Proc. Roy. Soc. Lond.* A313, 183-197, 1969.
- [26] A. Peraiah; Principles of invariance in radiative transfer, *Space Science Reviews*, 87, 1999, 465-538.
- [27] W.J. Wiscombe; On initialization, error and flux conservation in the doubling method, *JQSRT*, 16, 1976, 637-658.
- [28] H.C. van de Hulst; *Multiple light scattering tables, formulas and applications*, vol. I and II, Academic Press, 1980.
- [29] H.C. van de Hulst; *Light scattering by small particles*. New York: Dover, 1981.
- [30] <http://www.giss.nasa.gov/~crmm/>