Symulacja rozpraszania fotonów w ośrodku częściowo przeźroczystym

Metody Monte Carlo w Fizyce

Julia Potempa (411073)



Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

4. czerwca 2025r.

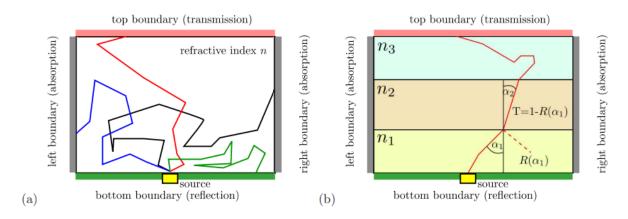
Cel ćwiczenia

Symulacja rozpraszania fotonów w układzie warstwowym o różnych współczynnikach załamania metodą Monte Carlo.

1 Wstęp

1.1 Rozpraszanie fotonów w układzie jedno- i wielowarstwowym

Rozpraszanie fotonów w jednorodnym ośrodku przedstawia Rysunek 1a. W źródle są one generowane a następnie przemieszczają się w losowych kierunkach. Podlegają one zarówno rozpraszaniu jak i absorpcji. Oba te procesy są stochastyczne, więc można je zasymulować metodami Monte Carlo. Kiedy foton dotrze do brzegu może zostać zaabsorbowany (brzegi po bokach), ulec transmisji (górny brzeg) lub się odbić (dolny brzeg). W przypadku zastosowania układu o zmiennym współczynniku załamania, np. w postaci warstw o różnych współczynnikach załamania (Rysunek 1b). Wtedy dodatkowo foton przechodząc między warstwami ulega prawom optyki geometrycznej - jego tor ugina się - w związku z czym należy ustalić jakie są kąty padania, odbicia, współczynnik odbicia oraz transmisji.



Rysunek 1: Rozpraszanie fotonów w a) ośrodku o jednym współczynniku załamania, b) ośrodku składającym się z warstw o różnych współczynnikach załamania n_1 , n_2 , n_3 .

1.2 Algorytm Monte Carlo

Metoda Monte Carlo symuluje trajektorię wiązki fotonów (ze względu na kiepską wydajność symulowania pojedynczych fotonów). Wiązka otrzymuje wagę, która w trakcie kolejnych procesów absorpcji ulega zmniejszeniu aż osiągnie zaniedbywalnie małą wartość. Taka symulacja statystycznie odpowiada symulacji pojedynczych fotonów, ale jest optymalniejsza.

• Swobodna propagacja wiązki

Określamy długość ścieżki, po której będą się poruszały fotony do kolejnej absorpcji/rozproszenia. Całkowity współczynnik oddziaływania z ośrodkiem wyniesie:

$$\mu_{tot} = \mu_a + \mu_s$$

oraz prawdopodobieństwo, że nie dojdzie do rozproszenia na drodze o długości s:

$$P\{x < s\} = e^{-\mu_{tot}s}$$

Jest to dystrybuanta rozkładu eksponencjalnego $F(s) = P\{x < s\}$, więc możemy określić losową długość drogi swobodnej:

$$s = -\frac{\ln(U_1)}{\mu_{tot}}, \ U_1 \sim U(0, 1)$$

• Rozpraszanie lub absorpcja

Po zakończeniu swobodnej propagacji dochodzi do rozproszenia: część wiązki jest absorbowana a pozostałość zmienia kierunek propagacji. Zaabsorbowaną frakcję liczymy za pomocą relacji między współczynnikami absorpcji i rozpraszania:

$$\Delta w = \frac{\mu_a}{\mu_a + \mu_s}$$

a następnie usuwamy ją z wiązki

$$w \leftarrow w - \Delta w$$

Depozycję takiej części wiązki fotonowej można rejestrować w tablicy, żeby móc określić, które obszary silniej absorbują, a które słabiej.

Zmiana kierunku jest wykonana przez wylosowanie kąta rozproszenia na podstawie współczynnika anizotropii materiału (g). Rozkład prawdopodobieństwa w tym przypadku dla kosinusa kąta rozproszenia względem kierunku pierwotnego wynosi:

$$p(\cos \theta) = \frac{1 - g^2}{2(1 + g^2 - 2g\cos \theta)^{\frac{3}{2}}}$$

co pozwala określić jego wartość losową:

$$\cos \theta = \begin{cases} \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1 - g^2}{1 - g + 2gU_1} \right)^2 \right]^2, \ U_1 \sim U(0, 1) & \iff g \neq 0 \\ 2U_1 - 1, \ U_1 \sim U(0, 1) & \iff g = 0 \end{cases}$$

Rozpraszanie na granicy dwóch ośrodków

Tu sprawdzamy szereg warunków:

1. Całkowite wewnętrzne odbicie:

$$n_i > n_s \wedge \alpha_i \geqslant \alpha_i^{\text{critical}} = \arcsin \frac{n_s}{n_i}$$

gdzie : n_i - współczynnik załamania w obszarze, w którym jest fotn, n_s - współczynnik załamania obszaru, do którego kieruje się foton. W takim wypadku wiązka całkowicie się odbija i pozostaje w obszarze o współczynniku n_i .

2. Odbicie/przejście przez interfejs Jeżeli wykluczamy całkowite wewnętrzne odbicie, to możemy w następnej kolejności sprawdzić prawo Snella, aby wyznaczyć kąt wiązki przechodzącej:

$$n_i \sin \alpha_i = n_s \sin \alpha_s$$

Jednak część wiązki zostanie odbita - tu można skorzystać z równania Fresnela:

$$R(\alpha_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\alpha_i - \alpha_s)}{\sin^2(\alpha_i + \alpha_s)} + \frac{\tan^2(\alpha_i - \alpha_s)}{\tan^2(\alpha_i + \alpha_s)} \right]$$

Wartość współczynnika odbicia zawiera się w [0,1], więc w symulacji można prawdopodobieństwo przejścia/odbicia regulować losowo - pozwalać całej wiązce przejść lub się odbić:

$$U_1 \sim U(0,1) \longrightarrow \left\{ \begin{array}{ll} U_1 \leqslant R(\alpha_i) & \text{- odbicie całej wiązki} \\ U_1 > R(\alpha_i) & \text{- cała wiązka przechodzi} \end{array} \right.$$

3. Kasowanie wiązki - schemat ruletki Jeżeli wiązka po rozproszeniu nie trafia na brzeg to jej waga się zmniejsza. Nigdy nie osiągnie zera, ale jeżeli spadnie poniżej 10^{-4} to jej rozpatrywanie nie ma sensu, bo nie wnosi ona nic do rozwiązania. Ten problem też można rozwiązać statystycznie, jeżeli waga spadnie poniżej wspomnianego poziomu to dokonujemy jej kasowania lub wzmocnienia. Prawdopodobieństwo wzmocnienia określamy jako p_{amp} .

$$w < 10^{-4}? \rightarrow \begin{cases} p_{amp} = 0, 1 \\ U_1 \sim U(0, 1) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} U_1 \leqslant p_{amp} & w \leftarrow w \frac{1}{p_{amp}} \text{ - wzmocnienie} \\ U_1 > p_{amp} & w = 0 \text{ - kasowanie} \end{cases}$$

2 Metodyka

Symulacja została przeprowadzona za pomocą klasy PHOTON_DIFFUSION_2_D w języku C++. Podstawowe przyjęte parametry to:

- nlayers = 3, nx = ny = 100, $r_x = 0$, $r_y = 1$,
- $x_{\text{max}} = 0, 2, x_{\text{source}} = 0, 1, x_{\text{detect}} = 0, 15, dx_{\text{source}} = 0, dx_{\text{detect}} = 0, 01,$
- N = 200000

Tabela 1: Parametry podstawowe warstw w symulacji.

Nr warstwy	$\mu_a \left[\frac{1}{\mathrm{cm}} \right]$	$\mu_s \left[\frac{1}{\mathrm{cm}} \right]$	d [cm]	g [j.u.]	n [j.u.]
1	1	10	0,02	0,75	1,3
2	1	190	0,02	0,075	1
3	10	90	0,02	0,95	1

Dokonano różnych zmian tych parametrów, co można podzielić na dwa zestawy zmian - wiązka z wewnętrznym odbiciem oraz wiązka padająca prostopadle.

Tabela 2: Parametry dla wiązki z wewnętrznym odbiciem.

Nr zestawu	r_x	r_y	$n^{(1)}$	$n^{(2)}$	$\mu_s^{(2)}$
1	0,8	0,6	-	1,5	-
2	0,8	0,6	-	2,5	-
3	0,8	0,6	1	1,5	-
4	0,8	0,6	1	1,5	10

Tabela 3: Parametry dla wiązki padającej prostopadle.

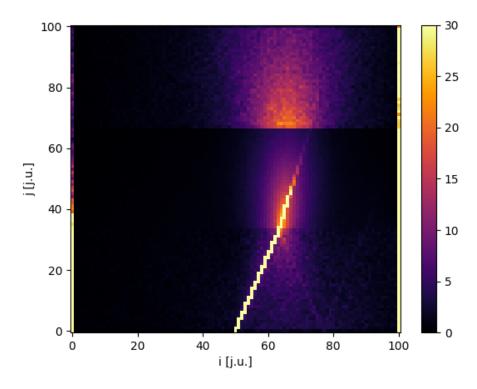
Nr zestawu	$n^{(1)}$	$n^{(2)}$	$\mu_s^{(2)}$	$\mu_a^{(2)}$	$g^{(2)}$
1	-	-	-	-	-
2	1	1,5	210	10	-
3	1	1,5	210	1	-
4	1	1,5	210	10	0,75

Za pomocą biblioteki matplotlib zostały przygotowane mapy 2D absorbancji oraz wykresy transmitancji i reflektancji w badanych przypadkach.

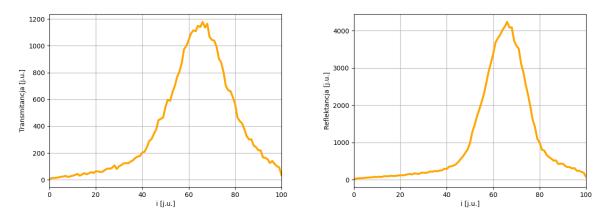
3 Wyniki

Rysunki 2-17 prezentuja wyniki uzyskane w przeprowadzonej symulacji.

3.1 Wewnętrzne odbicie wiązki

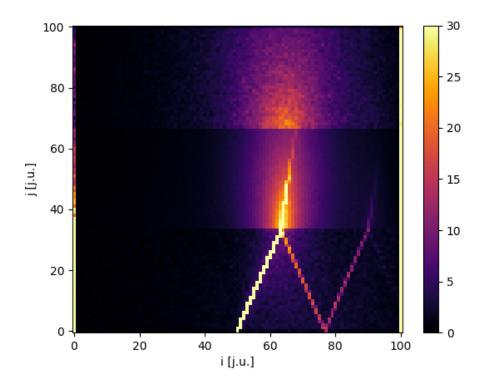


Rysunek 2: Mapa absorbancji dla parametrów z zestawu nr 1 (tabela 2).

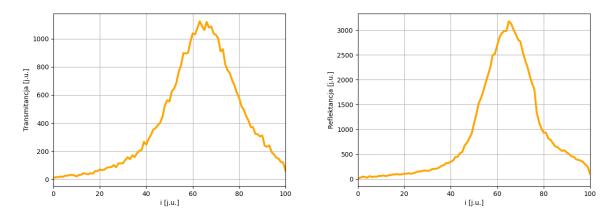


Rysunek 3: Wykresy transmitancji oraz reflektancji dla parametrów z zestawu nr 1 (tabela 2).

Na mapie widzimy jak przemieszczała się wiązka fotonów, która w drugiej warstwie się lekko ugięła i marginalna jej część dotarła do trzeciej warstwy. Widzimy, że zarówno maksimum transmitancji, jak i reflektancji są lekko przesunięte względem źródła.

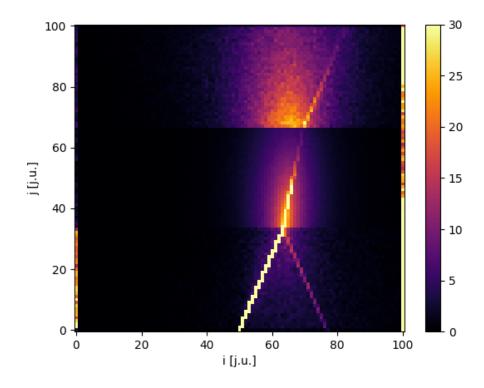


Rysunek 4: Mapa absorbancji dla parametrów z zestawu nr 2 (tabela 2).

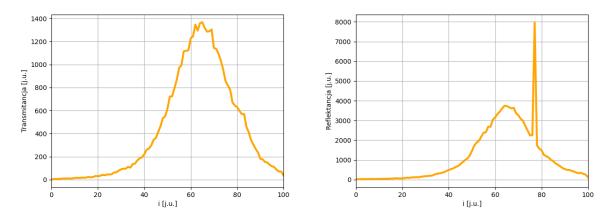


Rysunek 5: Wykresy transmitancji oraz reflektancji dla parametrów z zestawu nr 2 (tabela 2).

Tutaj również widzimy jak wiązka się ugina, ale wyraźniej widać część która się odbiła od granicy warstw 1 i 2., która następnie odbija się od brzegu i ponownie ugina na granicy. Na wykresie reflektancji widać lekko zarysowany pik w pozycji, w której wiązka odbija się od brzegu.

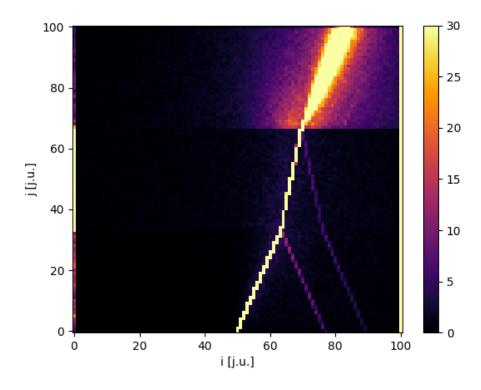


Rysunek 6: Mapa absorbancji dla parametrów z zestawu nr 3 (tabela 2).

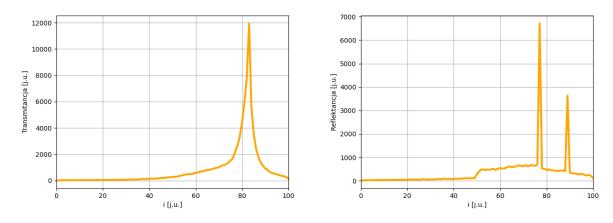


Rysunek 7: Wykresy transmitancji oraz reflektancji dla parametrów z zestawu nr 3 (tabela 2).

Dla tego zestawu parametrów dużo lepiej widać na wykresie reflektancji pik odpowiadający za reflektancję skoncentrowanej wiązki.



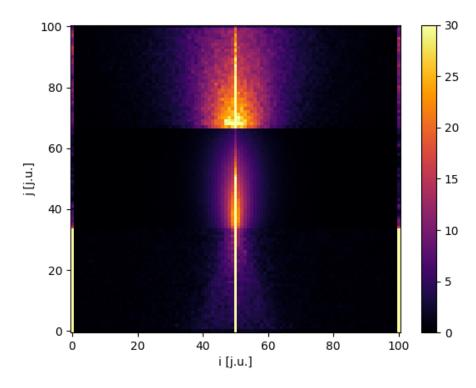
Rysunek 8: Mapa absorbancji dla parametrów z zestawu nr 4 (tabela 2).



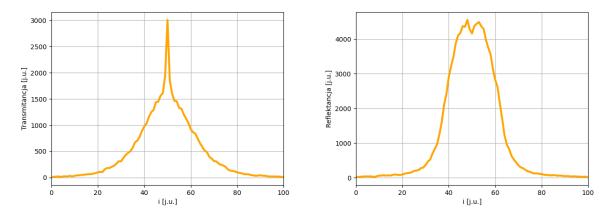
Rysunek 9: Wykresy transmitancji oraz reflektancji dla parametrów z zestawu nr 4 (tabela 2).

Dla ostatniego zestawu wiązka dwukrotnie wraca do pierwszej warstwy po odbiciu, co widać dokładnie na wykresie reflektancji. Dodatkowo wiązka transmitowana jest dużo bardziej skoncentrowana, co obrazuje ostry pik na wykresie transmitancji.

3.2 Wiązka padająca prostopadle

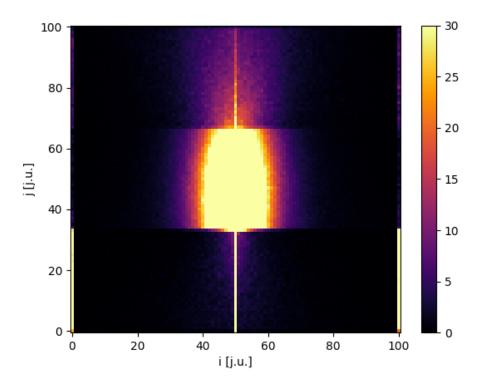


Rysunek 10: Mapa absorbancji dla podstawowego zestawu parametrów (tabela 1).

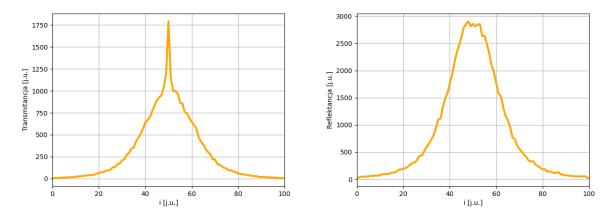


Rysunek 11: Mapa absorbancji dla podstawowego zestawu parametrów (tabela 1).

Parametry podstawowe generują wiązkę prostopadłą, która w postaci bardzo skoncentrowanej dociera do brzegu rejestrującego transmitancję, co obrazuje ponownie ostry pik na wykresie. Natomiast zostają one również zawrócone na granicy z drugą warstwą i docierają spowrotem do okolicy źródła, co widać na wycentrowanym piku na wykresie reflektancji.

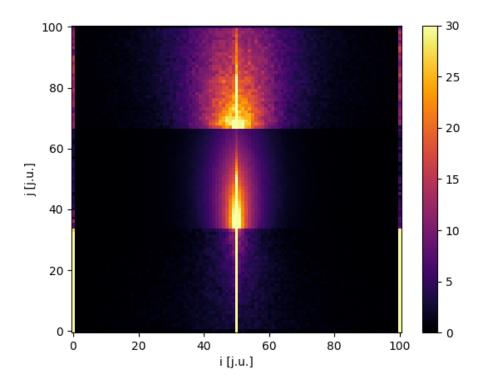


Rysunek 12: Mapa absorbancji dla parametrów z zestawu nr 2 (tabela 3).

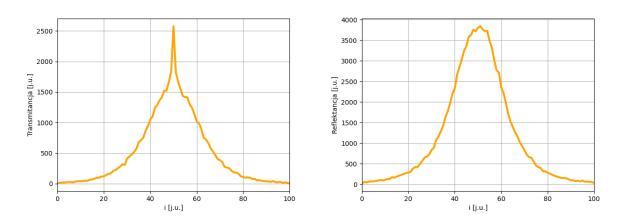


Rysunek 13: Wykresy transmitancji oraz reflektancji dla parametrów z zestawu nr 2 (tabela 3).

Przez zwiększenie współczynnika odpowiadającego za rozpraszanie fotonów w drugiej warstwie widzimy rozbłysk wiązki, ponieważ absorbuje się ona na większej części przestrzeni. Do górnej krawędzi dociera ponownie wiązka skoncentrowana i reflektancja jest centrowana wokół źródła.

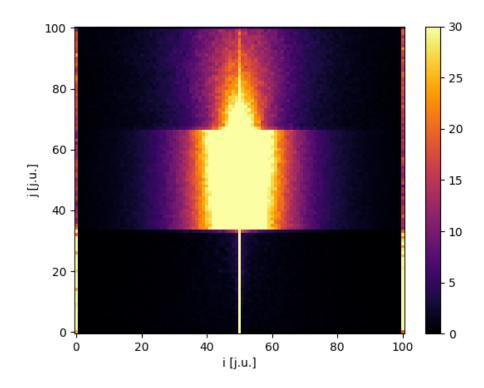


Rysunek 14: Mapa absorbancji dla parametrów z zestawu nr 3 (tabela 3).

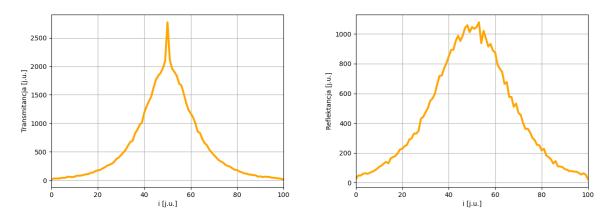


Rysunek 15: Wykresy transmitancji oraz reflektancji dla parametrów z zestawu nr 3 (tabela 3).

Tutaj wsspółczynnik odpowiadający za absorbancję zostaje zmniejszony przez co rozbłysk jest mniej intensywny.



Rysunek 16: Mapa absorbancji dla parametrów z zestawu nr 4 (tabela 3).



Rysunek 17: Wykresy transmitancji oraz reflektancji dla parametrów z zestawu nr 4 (tabela 3).

Dla ostatniego zestawu parametrów współczynniki $\mu_a^{(2)}$ oraz $\mu_s^{(2)}$ są takie same jak w zestawie nr 2, natomiast zostaje zwiększony czynnik odpowiadający za anizotropię materiału w warstwie drugiej przez co wiązka wychodząca z granicy między 2 a 3 jest bardziej rozproszona.

4 Wnioski

Metoda Monte Carlo bardzo dobrze symuluje wiązkę fotonów i zmiany jej geometrii pod wpływem zmian materiałowych. Zostało zasymulowane zarówno odbicie wiązki od granicy warstw o różnych współczynnikach załamania, jak i padanie prostopadłe sprawdzające zmiany rozpraszania i absorpcji poprzez sterowanie odpowiednimi współczynnikami.