

Projekt 11: Symulacja rozpraszania fotonów w ośrodku częściowo przezroczystym.

Kacper Połuszejko, 412183

1 Wstęp

Procesy rozpraszania i absorpcji są z natury losowe, dlatego metoda Monte Carlo (MC) doskonale nadaje się do ich symulacji. W wyniku absorpcji foton zanika, a jego symulacja musiałaby zostać zakończona. Aby uzyskać statystycznie znaczące wyniki, należałoby wygenerować bardzo dużą liczbę fotonów, co byłoby nieefektywne.

Zamiast tego stosuje się symulację trajektorii pojedynczej wiązki fotonów, której przypisuje się wagę $w = 1$. Przy każdym kroku symulacji (rozpraszania lub absorpcji) waga ta zmniejsza się o wartość Δw , aż osiągnie wartość graniczną (np. $w < 10^{-4}$), po czym wiązka jest usuwana. Dzięki temu oszczędzamy moc obliczeniową, a wynik odpowiada statystycznie wielu pojedynczym fotonom.

Swobodna propagacja wiązki

Najpierw określamy długość drogi, którą pokona wiązka do kolejnego aktu rozpraszania lub absorpcji. W tym celu wyznaczamy całkowity współczynnik oddziaływania z ośrodkiem:

$$\mu_{\text{tot}} = \mu_a + \mu_s, \quad (1)$$

gdzie μ_a to współczynnik absorpcji, a μ_s — rozpraszania.

Prawdopodobieństwo, że na odcinku $x \leq s$ nie dojdzie do oddziaływania, opisuje wyrażenie:

$$P\{x < s\} = e^{-\mu_{\text{tot}} s}. \quad (2)$$

Ponieważ mamy do czynienia z rozkładem wykładniczym, losową długość swobodnej drogi s możemy wyznaczyć z:

$$s = \frac{\ln(U_1)}{\mu_{\text{tot}}}, \quad U_1 \sim U(0, 1). \quad (3)$$

Etap rozpraszania/absorpcji

Po przejściu odległości s wiązka ulega rozproszeniu. Część energii zostaje zaabsorbowana, a reszta zmienia kierunek dalszej propagacji. Zaabsorbowaną frakcję wyznaczamy jako:

$$\Delta w = \frac{\mu_a}{\mu_a + \mu_s}. \quad (4)$$

Zaktualizowana waga wiązki wynosi:

$$w \leftarrow w - \Delta w. \quad (5)$$

Aby móc zarejestrować, gdzie następuje absorpcja, tworzy się dwuwymiarową siatkę, w której zapisuje się pochłoniętą energię. Jeśli wektor pozycji fotonu to $\vec{r} = [x, y]$, to indeksy siatki oblicza się jako:

$$i = \text{round} \left(\frac{x}{\Delta x} \right), \quad (6)$$

$$j = \text{round} \left(\frac{y}{\Delta z} \right), \quad (7)$$

a następnie zapisuje się absorpcję w tablicy:

$$\text{absorption}[i][j] = \text{absorption}[i][j] + \Delta w. \quad (8)$$

Zmienę kierunku wykonujemy losując kąt rozproszenia na podstawie współczynnika anizotropii (g) materiału. Rozkład prawdopodobieństwa dla kosinusa kąta rozproszenia względem kierunku pierwotnego

$$p(\cos \theta) = \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos \theta)^{3/2}} \quad (9)$$

pozwała określić jego wartość losową

$$\cos \theta = \left[\frac{1}{2g} \left(1 + g^2 - \left(\frac{1 - g^2}{1 - g + 2gU_1} \right)^2 \right) \right], \quad U_1 \sim U(0, 1) \quad \Longleftrightarrow \quad g \neq 0 \quad (10)$$

$$\cos \theta = 2U_1 - 1, \quad U_1 \sim U(0, 1) \quad \Longleftrightarrow \quad g = 0 \quad (11)$$

To jest zmiana kąta biegunowego, natomiast rozkład kąta azymutalnego (ϕ) jest izotropowy $\phi \in \langle 0, 2\pi \rangle$ (w przypadku 3D).

Rozpraszanie na granicy dwóch ośrodków.

Jeśli wiązka pada na granicę dwóch ośrodków należy sprawdzić zestaw warunków

- **Całkowite wewnętrzne odbicie**

Jeśli

$$n_i > n_s \quad \wedge \quad \alpha_i > \alpha^{\text{critical}} = \arcsin \frac{n_s}{n_i} \quad (12)$$

gdzie: n_i współczynnik załamania w obszarze w którym znajduje się foton, n_s to współczynnik załamania obszaru do którego kieruje się foton, to wiązka całkowicie się odbija i pozostaje w obszarze n_i .

- **Odbicie/przejsie przez interfejs**

Jeśli wykluczenie całkowitego odbicia rozważamy możliwość transmisji/częściowego odbicia na interfejsie dwóch materiałów. Znając kąt padania wiązki na interfejs (tj. liczony względem normalnej do interfejsu) z prawa Snella wyznaczamy kąt wiązki przechodzącej (α_s)

$$n_i \sin \alpha_i = n_s \sin \alpha_s \quad (13)$$

Jednak w trakcie tego przejścia część wiązki padającej zostaje odbita, wartość współczynnika odbicia wiązki można wyznaczyć z równania Fresnela (tu wzór jest średnią dla dwóch polaryzacji wiązki - wiązka niespolaryzowana jest mieszaniną fotonów o różnych polaryzacjach)

$$R(\alpha_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\alpha_i - \alpha_s)}{\sin^2(\alpha_i + \alpha_s)} + \frac{\tan^2(\alpha_i - \alpha_s)}{\tan^2(\alpha_i + \alpha_s)} \right] \quad (14)$$

Ponieważ wartość współczynnika odbicia zawiera się w $R(\alpha) \in [0, 1]$ więc w symulacji MC możliwość przejścia/odbicia obsługujemy w sposób losowy: tj. pozwalamy całej wiązce przejść przez interfejs lub całej się odbić (po wykonaniu symulacji wielkich taktów wiązek wynik średni się utożsamia ze wartością zbliżoną do oczekiwanych).

$$U_1 \sim U(0, 1), \quad \begin{cases} U_1 \leq R(\alpha_i) & \text{– odbicie całej wiązki} \\ U_1 > R(\alpha_i) & \text{– cała wiązka przechodzi} \end{cases} \quad (15)$$

Kasowanie wiązki – schemat ruletki.

Jeśli wiązka w trakcie swojej propagacji zbliża się na brzeg (gdzie jest absorbowana w całości) to podczas kolejnego rozproszenia jej się nie propaguje (np. zmienia się kierunek w losowy sposób). Jednak ewolucja wiązki o wagach np. $w < 10^{-4}$ nie ma sensu, ponieważ nie wnosi niczego do wyniku.

Problem ten można rozwiązać statystycznie. Jeśli waga spadnie do wartości $w < 10^{-4}$ to dokonujemy kasowania lub wzmocnienia wiązki określając wcześniej prawdopodobieństwo wzmocnienia (p_{amp})

$$w < 10^{-4} \Rightarrow \begin{cases} p_{\text{amp}} = 0.1 \\ U_1 \sim U(0, 1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} U_1 \leq p_{\text{amp}} \Rightarrow w \leftarrow \frac{w}{p_{\text{amp}}} & \text{wzmocnienie} \\ U_1 > p_{\text{amp}} \Rightarrow w = 0 & \text{kasowanie} \end{cases} \quad (16)$$

2 Metodyka

3. Zadania do wykonania

Przyjęto podstawowe parametry symulacji. Ewentualne zmiany w kolejnych punktach dotyczą jedynie wybranych parametrów. Wartości bazowe:

- nlayers = 3,
- x_max = 0.2,
- x_source = 0.1,
- dx_source = 0.0,
- x_detect = 0.15,
- dx_detect = 0.01,
- nx = ny = 100,
- rx = 0.0,
- ry = 1.0,
- N = 200000 — liczba wiązek fotonowych.

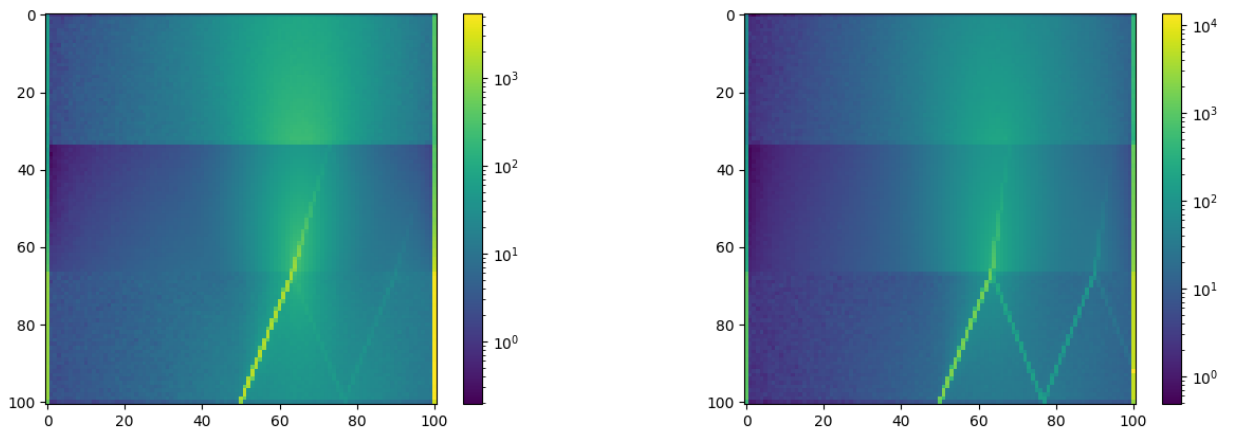
Zastosowano następujące parametry warstw ośrodka:

m	μ_a [1/cm]	μ_s [1/cm]	d [cm]	g [-]	n [-]
1	1	10	0.02	0.75	1.3
2	1	190	0.02	0.075	1.0
3	10	90	0.02	0.95	1.0

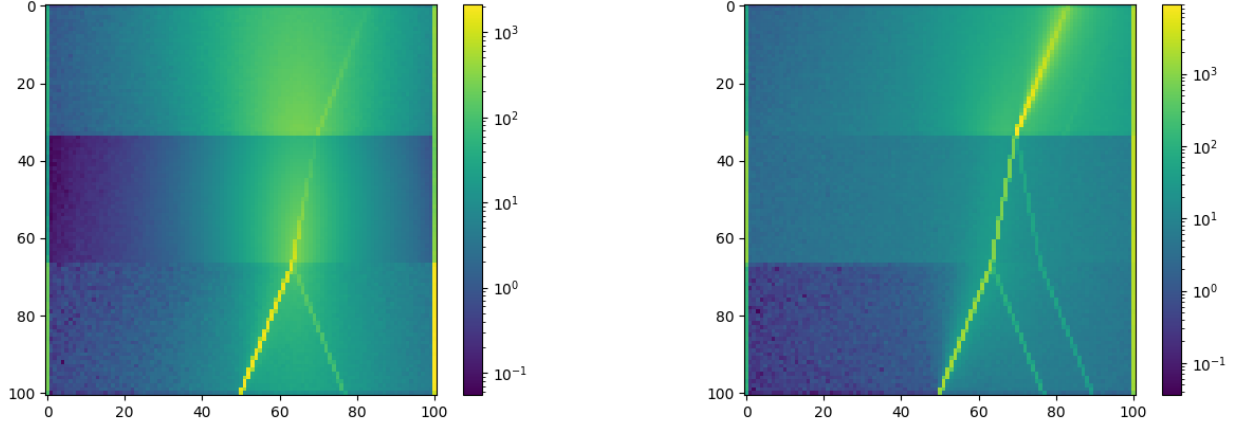
- Wykonano program wykorzystujący klasę PHOTON_DIFFUSION_2_D.
- Przeprowadzono symulacje dla przypadku z wewnętrznym odbiciem wiązki, dla następujących zestawów parametrów:
 - $rx = 0,8$, $ry = 0,6$, $n^{(2)} = 1,5$
 - $rx = 0,8$, $ry = 0,6$, $n^{(2)} = 2,5$
 - $rx = 0,8$, $ry = 0,6$, $n^{(1)} = 1,0$, $n^{(2)} = 1,5$
 - $rx = 0,8$, $ry = 0,6$, $n^{(1)} = 1,0$, $n^{(2)} = 1,5$, $\mu_s^{(2)} = 10$
- Przeprowadzono symulacje dla przypadku, w którym wiązka padała prostopadle na obiekt:
 - dla parametrów bazowych (jak w tabeli),
 - przy zmianie parametrów: $n^{(1)} = 1,0$, $\mu_a^{(2)} = 10$, $\mu_s^{(2)} = 210$, $n^{(2)} = 1,5$
 - przy zmianie parametrów: $n^{(1)} = 1,0$, $\mu_a^{(2)} = 1$, $\mu_s^{(2)} = 210$, $n^{(2)} = 1,5$
 - przy zmianie parametrów: $n^{(1)} = 1,0$, $\mu_a^{(2)} = 10$, $\mu_s^{(2)} = 210$, $n^{(2)} = 1,5$, $g^{(2)} = 0,75$

Dla każdego przypadku wykonano wykresy rozkładów przestrzennych absorpcji. Obliczono łączne wartości współczynników: absorpcji (A), odbicia (R) oraz transmisji (T). Wyniki zostały zestawione i porównane w celu analizy uzyskanych wyników.

3 Wyniki



Rys. 1: Rozkłady przestrzenne absorpcji dla przypadków 1 - a) (po lewej) oraz 1 - b) (po prawej).

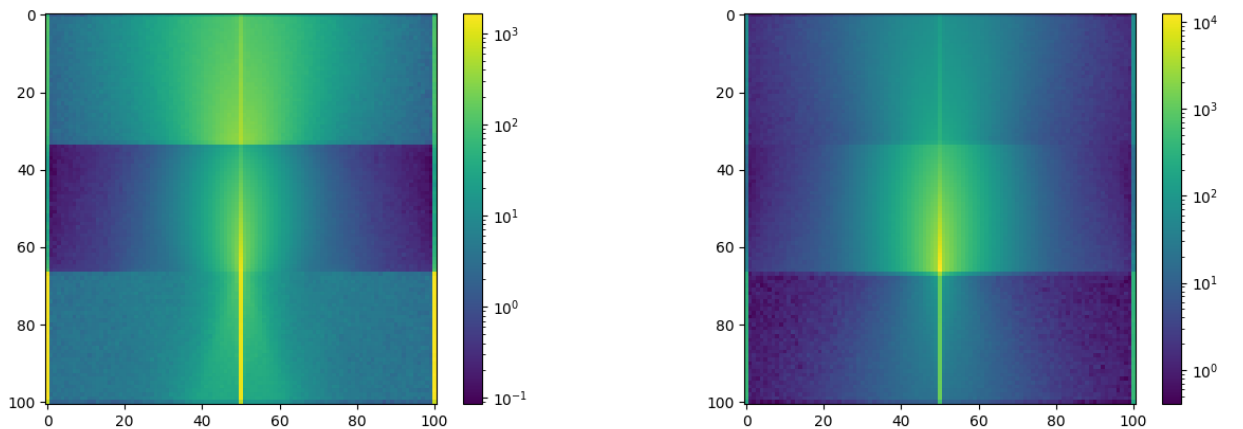


Rys. 2: Rozkłady przestrzenne absorpcji dla przypadków 1 - c) (po lewej) oraz 1 - d) (po prawej).

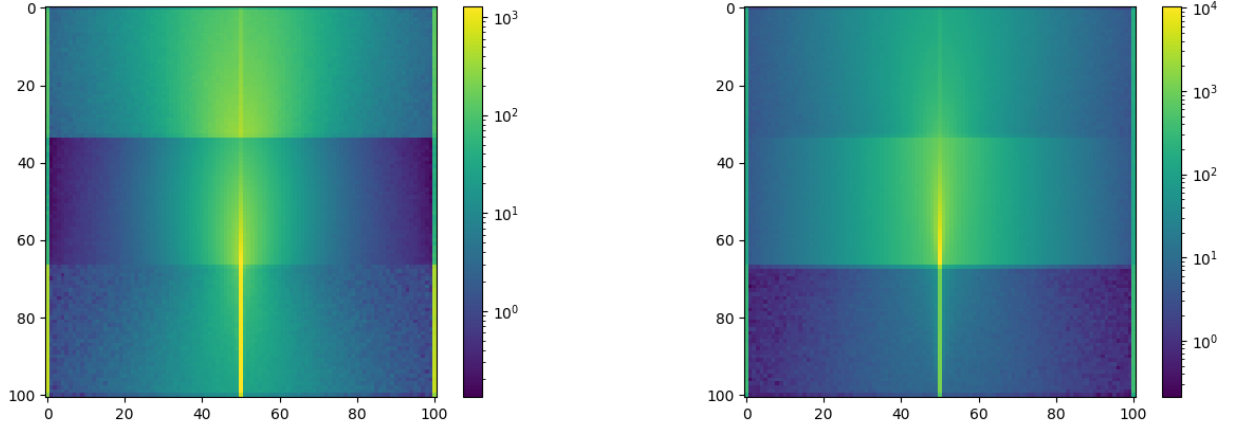
Otrzymane zakumulowane współczynniki absorpcji (A), transmisji (T) i odbicia (R).

- a) $A = 0.293654$, $R = 0.514851$, $T = 0.191496$, $SUM = 1$
- b) $A = 0.352614$, $R = 0.447342$, $T = 0.200044$, $SUM = 1$
- c) $A = 0.216726$, $R = 0.569038$, $T = 0.214237$, $SUM = 1$
- d) $A = 0.398062$, $R = 0.181105$, $T = 0.420833$, $SUM = 1$

W pierwszym przypadku obserwujemy niewielkie odbicie od granicy pierwszych 2 ośrodków z powodu niewielkiej różnicy między współczynnikami załamania. W przypadku b) odbicie jest już znacznie bardziej wyraźne z powodu zwiększenia współczynnika $n^{(2)}$. W przypadku d) znacznie zmniejszony został współczynnik rozpraszania w 2 obszarze. Dzięki temu znacznie większa część wiązki przechodzi do obszaru 3 i dopiero tam ulega absorpcji. Duża część przechodzi jednak przez wszystkie 3 obszary, co widać po wysokim zakumulowanym współczynniku absorpcji T .



Rys. 3: Rozkłady przestrzenne absorpcji dla przypadków 2 - a) (po lewej) oraz 2 - b) (po prawej).



Rys. 4: Rozkłady przestrzenne absorpcji dla przypadków 2 - c) (po lewej) oraz 2 - d) (po prawej).

Otrzymane zakumulowane współczynniki absorpcji (A), transmisji (T) i odbicia (R).

- a) $A = 0.208308$, $R = 0.557523$, $T = 0.234169$, $SUM = 1$
- b) $A = 0.438805$, $R = 0.412531$, $T = 0.148664$, $SUM = 1$
- c) $A = 0.193656$, $R = 0.559268$, $T = 0.247075$, $SUM = 1$
- d) $A = 0.489662$, $R = 0.217624$, $T = 0.292715$, $SUM = 1$

Przypadek 2(a)

Na rysunku 2(a) obserwujemy łagodne rozpraszanie wiązki. Znacząca absorpcja zachodzi już w pierwszej warstwie, zwłaszcza przy bocznych krawędziach.

Przypadek 2(b)

Zmiana współczynników załamania, absorpcji i rozpraszania prowadzi do zwiększonej absorpcji w drugiej warstwie. Wiązka rozprasza się intensywniej w obszarze interfejsu pomiędzy pierwszą a drugą warstwą. Efektem jest wzrost absorpcji i mniej wyraźna transmisja. Część wiązki odbija się w stronę źródła, część nadal propaguje do detektora.

Przypadek 2(c)

Zmniejszenie współczynnika absorpcji skutkuje bardziej zwartym przebiegiem wiązki. Mimo częściowej absorpcji w pierwszej warstwie, duża część fotonów odbija się bezpośrednio od interfejsu i zostaje zarejestrowana na detektorze odbicia. Widoczna jest także absorpcja przy ścianach układu.

Przypadek 2(d)

W tym wariancie dodatkowo zmieniono wartość współczynnika anizotropii rozpraszania. W efekcie rozkład absorpcji uległ rozszerzeniu, a wiązka mniej skupia się w jednej ścieżce. Obserwujemy bardziej równomierną absorpcję w głębi układu. Wzrost g sprawił, że fotony rozpraszały się mniej losowo, a ich trajektorie były bardziej kierunkowe.