

Symulacja rozpraszania fotonów w ośrodku częściowo przeźroczystym

Metody Monte Carlo w fizyce
Nanoinżynieria materiałów

Łukasz Ruba



Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

21 maja 2024

Spis treści

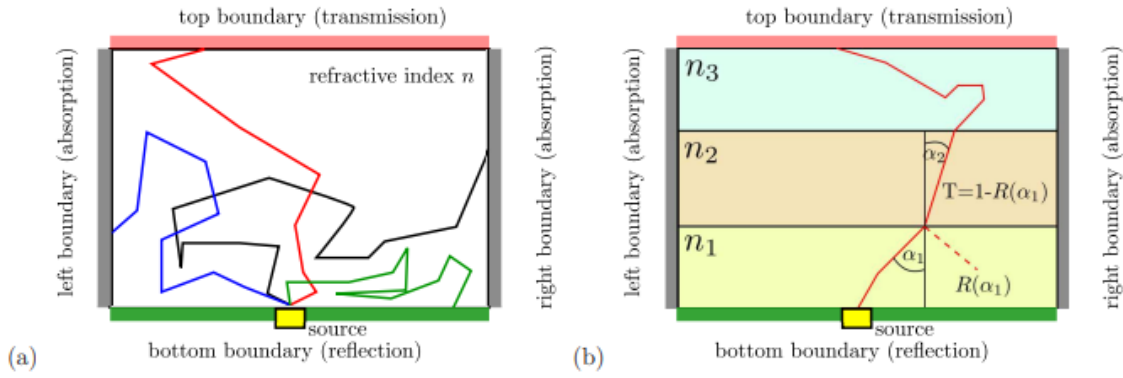
| | | |
|---|-------------------|----|
| | Cel ćwiczenia | 3 |
| 1 | Wstęp teoretyczny | 3 |
| 2 | Metodyka | 5 |
| 3 | Wyniki | 6 |
| 4 | Wnioski | 10 |
| | Literatura | 11 |

Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia było wykorzystanie gotowej klasy *PHOTON_DIFFUSION_2D* napisanej w języku *C++* do zrozumienia zagadnień związanych z symulacjami zjawisk optycznych oraz analizy wyników absorpcji, transmitancji i refleksyjności utworzonych układów.

1 Wstęp teoretyczny

Na Rysunku 1 zaprezentowano schemat wędrówki fotonów w ośrodku, który obrazuje cel wykonanych symulacji. Fotony generowane w źródle (żółty prostokąt) rozpoczynają swoją wędrówkę, w trakcie której podlegają dwóm zjawiskom: rozpraszaniu i absorpcji. Oba mechanizmy mają naturę stochastyczną. W trakcie rozpraszania foton zmienia swój kierunek ruchu co może prowadzić do jego powrotu do dolnego brzegu dając wkład do dyfuzyjnego współczynnika odbicia, może dotrzeć do górnej granicy dając wkład do współczynnika transmisji lub może zostać zaabsorbowany w obszarze czynnym lub na lewym albo prawym brzegu. Jako, że w punktach absorpcji deponowana jest energia to w algorytmie Monte Carlo zbierana jest informacja na ten temat. Ośrodek może składać się z wielowarstw o różnych parametrach fizycznych, przez co koniecznym jest również uwzględnienie równań optyki geometrycznej.



Rysunek 1: a) Schemat rozpraszania fotonów w ośrodku o współ. załamania n ; b) Schemat rozpraszania fotonów w układach wielowarstwowych o równych współ. załamania światła [1].

W celu optymalizacji obliczeń zamiast fotonu symuluje się trajektorię wiązki fotonowej. Na starcie każdej wiązce nadaje się wagę $w = 1$ i w trakcie kolejnych procesów absorpcji waga ulega zmniejszeniu o czynnik Δw :

$$w - \Delta w \rightarrow w, \quad (1)$$

aż osiągnie wartość zanedbywalnie małą (np. $w \leq 10^{-4}$). Statystycznie symulacja takiej wiązki odzwierciedla obliczenia dla wielu pojedynczych fotonów, co przekłada się na znaczący zysk wydajności.

Koniecznym jest określenie przewidywanej długości ścieżki, po której będzie się poruszać wiązka do kolejnego aktu rozpraszania/absorpcji. W tym celu należy ustalić współczynnik oddziaływania z ośrodkiem:

$$\mu_{tot} = \mu_a + \mu_s, \quad (2)$$

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

$$P\{x < s\} = e^{-\mu_{tot}s}. \quad (3)$$

Powyższe wyrażenie określa dystrybuantę rozkładu eksponencjalnego $F(s) = P\{x < s\}$, tak więc można określić losową długość drogi swobodnej wiązki jako:

$$s = -\frac{\ln(U_1)}{\mu_{tot}}, \quad U_1 \sim U(0, 1). \quad (4)$$

Kolejnym etapem jest ustalenie warunków rozproszenia. Kiedy propagacja wiązki na drodze swobodnej minie, część wiązki jest absorbowana (Δw), a pozostała część zmienia kierunek ruchu. Frakcję zaabsorbowaną można obliczyć jako:

$$\Delta w = \frac{\mu_a}{\mu_a + \mu_s}. \quad (5)$$

Depozycję części wiązki fotonowej (energii) rejestruje się w tablicy, aby móc na tej podstawie określić które obszary najsilniej absorbują energię. W tym celu dokonuje się obliczeń:

$$\vec{r} = [x, y], \quad i = \text{round}\left(\frac{x}{\Delta x}\right), \quad j = \text{round}\left(\frac{y}{\Delta y}\right), \quad (6)$$

$$\text{absorption}[i][j] += \Delta w. \quad (7)$$

Zmianę kierunku propagacji wiązki oblicza się poprzez wylosowanie kąta rozpraszania na podstawie współczynnika anizotropii g dla warstwy. Rozkład prawdopodobieństwa dla kosinusa kąta rozproszenia względem kierunku pierwotnego można opisać jako:

$$p(\cos\theta) = \frac{1 - g^2}{2(1 + g^2 - 2g\cos\theta)^{3/2}}, \quad (8)$$

co pozwala określić jego wartość losową:

$$\cos\theta = \begin{cases} \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1 - g^2}{1 + g^2 - 2gU_1} \right)^2 \right]^{1/2}, & U_1 \sim U(0, 1) \quad \Leftrightarrow g \neq 0 \\ 2U_1 - 1, & U_1 \sim U(0, 1) \quad \Leftrightarrow g = 0 \end{cases} \quad (9)$$

Ostatnim etapem który należy określić jest dotarcie wiązki do granicy dwóch ośrodków. W tym celu sprawdza się zestaw warunków:

- *Całkowite wewnętrzne odbicie.* Jeśli:

$$n_i > n_s \quad \wedge \quad \alpha_i \geq \alpha_i^{\text{critical}} = \arcsin \frac{n_s}{n_i}, \quad (10)$$

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

- *Odbicie/przejście przez interfejs.* Po wykluczeniu całkowitego odbicia rozważamy możliwość transmisji/częściowego odbicia na interfejsie dwóch materiałów. Znając kąt padania wiązki na interfejs (α_i liczony względem normalnej do interfejsu) z prawa Snella wyznaczamy kąt wiązki przechodzącej (α_s):

$$n_i \sin \alpha_i = n_s \sin \alpha_s. \quad (11)$$

W trakcie takiego przejścia następuje jednak częściowe odbicie, a wartość tą definiuje współczynnik odbicia wiązki wyznaczony z równania Fresnela (uśredniony dla dwóch polaryzacji światła):

$$R(\alpha_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\alpha_i - \alpha_s)}{\sin^2(\alpha_i + \alpha_s)} + \frac{\tan^2(\alpha_i - \alpha_s)}{\tan^2(\alpha_i + \alpha_s)} \right]. \quad (12)$$

Ponieważ wartość współczynnika odbicia $R(\alpha)$ zawiera się w $[0,1]$, to w obliczeniach MC można zastąpić jego obliczanie poprzez losowanie tej wartości, tj. pozwala się całej wiązce przejść przez interfejs lub się od niego odbić. Po wielokrotnym wykonaniu symulacji dla wielu wiązek wyniki się uśredniają do wartości zbliżonych do oczekiwanych:

$$U_1 \sim U(0, 1) \quad \rightarrow \quad \begin{cases} U_1 \leq R(\alpha_i) & - \text{ odbicie całej wiązki} \\ U_1 > R(\alpha_i) & - \text{ transmisja całej wiązki.} \end{cases} \quad (13)$$

- *Kasowanie wiązki - schemat ruletki.* Jeśli wiązka w trakcie wędrówki będzie wielokrotnie się rozpraszać, ale nie trafi na brzeg absorbujący. to podczas kolejnych rozprożeń jej waga ulegnie pomniejszeniu, ale zawsze będzie większa od zera. Ewolucja wiązek $w < 10^{-4}$ nie ma sensu, ponieważ nic nie wnoszą do rozwiązania ze względu na niską energię. Dlatego też w celu zoptymalizowania obliczeń dokonuje się schematu ruletki. Jeśli waga spadnie do wartości $w < 10^{-4}$ to następuje wykasowanie lub wzmocnienie wiązki określając wcześniej prawdopodobieństwo wzmocnienia (p_{amp}):

$$if(w < 10^{-4}) \quad \rightarrow \quad \begin{cases} p_{amp} = 0.1 \\ U_1 \sim U(0, 1) \end{cases} \quad \rightarrow \quad \begin{cases} U_1 \leq p_{amp} & \rightarrow w = w \cdot \frac{1}{p_{amp}} \quad (\text{wzmocnienie}) \\ U_1 > p_{amp} & \rightarrow w = 0 \quad (\text{kasowanie}) \end{cases} \quad (14)$$

2 Metodyka

W programie napisanym w języku *C++* zaimplementowano gotową klasę *PHOTON_DIFFUSION_2D*, która spełnia równania opisane we wstępie teoretycznym (1). Na tej podstawie dokonano obliczeń propagacji wiązki fotonowej w materiale trójwarstwowym. Parametry charakteryzujące układ zostały ustalone na wartości podane w Tabeli 1.

Tabela 1: Podstawowe parametry układu symulowanej struktury trójwarstwowej.

| xmax | x_source | dx_source | x_detect | dx_detect | nx | ny | rx | ry | nlayers | N |
|-------------|-----------------|------------------|-----------------|------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------------|----------|
| 0.2 | 0.1 | 0.0 | 0.15 | 0.01 | 100 | 100 | 0.0 | 1.0 | 2 | 200 000 |

gdzie: **xmax** - to rozmiar obszaru badanego w kierunku x, **x_source** - położenie środka źródła światła na dolnym brzegu, **dx_source** - szerokość źródła światła, **x_detect** - położenie detektora na tym samym brzegu co źródło, **dx_detect** - szerokość detektora, **nx** i **ny** - zakres liczby węzłów w kierunku "x" i "y" w tablicy *absorption[0:nx][0:ny]*, **rx** i **ry** - początkowy kierunek (wersor) wiązki, **nlayers** - liczba warstw, **N** - liczba wiązek fotonowych.

Parametry podstawowe każdej warstwy, czyli współczynniki absorpcji, rozpraszania, anizotropii i załamania oraz grubość warstwy, zdefiniowano na wartości podane w Tabeli 2.

Tabela 2: Podstawowe parametry kolejnych warstw *m* tworzących układ.

| 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 |

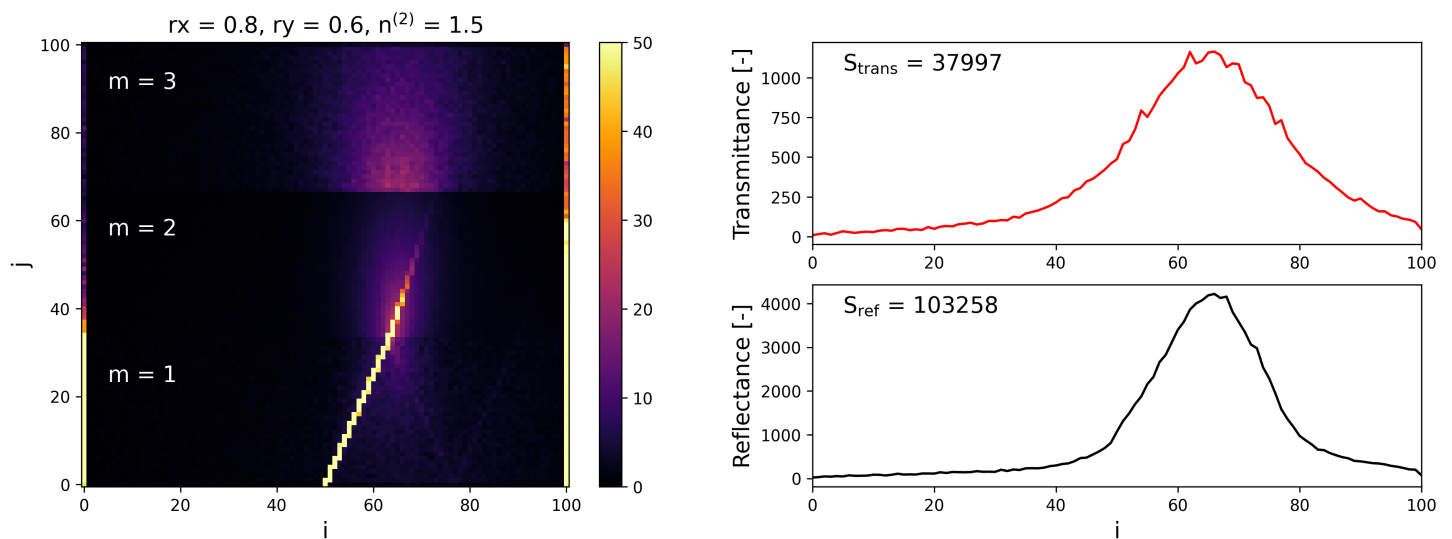
Następnie wykonano osiem symulacji, w których zmieniano poszczególne wartości współczynników podanych w Tab. 2 (wspomniano jedynie wartości parametrów zmienionych, pozostałe z nich mają wartości takie jak zapisano w Tab. 1 i 2):

1. $r_x = 0.8$, $r_y = 0.6$, $n^{(2)} = 1.5$,
2. $r_x = 0.8$, $r_y = 0.6$, $n^{(2)} = 2.5$,
3. $r_x = 0.8$, $r_y = 0.6$, $n^{(1)} = 1.0$, $n^{(2)} = 1.5$,
4. $r_x = 0.8$, $r_y = 0.6$, $n^{(1)} = 1.0$, $n^{(2)} = 1.5$, $\mu_s^{(2)} = 10$,
5. zestawu podstawowego parametrów (takich jak w Tab 1 i 2),
6. $n^{(1)} = 1.0$, $\mu_a^{(2)} = 10$, $\mu_s^{(2)} = 210$, $n^{(2)} = 1.5$,
7. $n^{(1)} = 1.0$, $\mu_a^{(2)} = 1$, $\mu_s^{(2)} = 210$, $n^{(2)} = 1.5$,
8. $n^{(1)} = 1.0$, $\mu_a^{(2)} = 10$, $\mu_s^{(2)} = 210$, $n^{(2)} = 1.5$, $g^{(2)} = 0.75$.

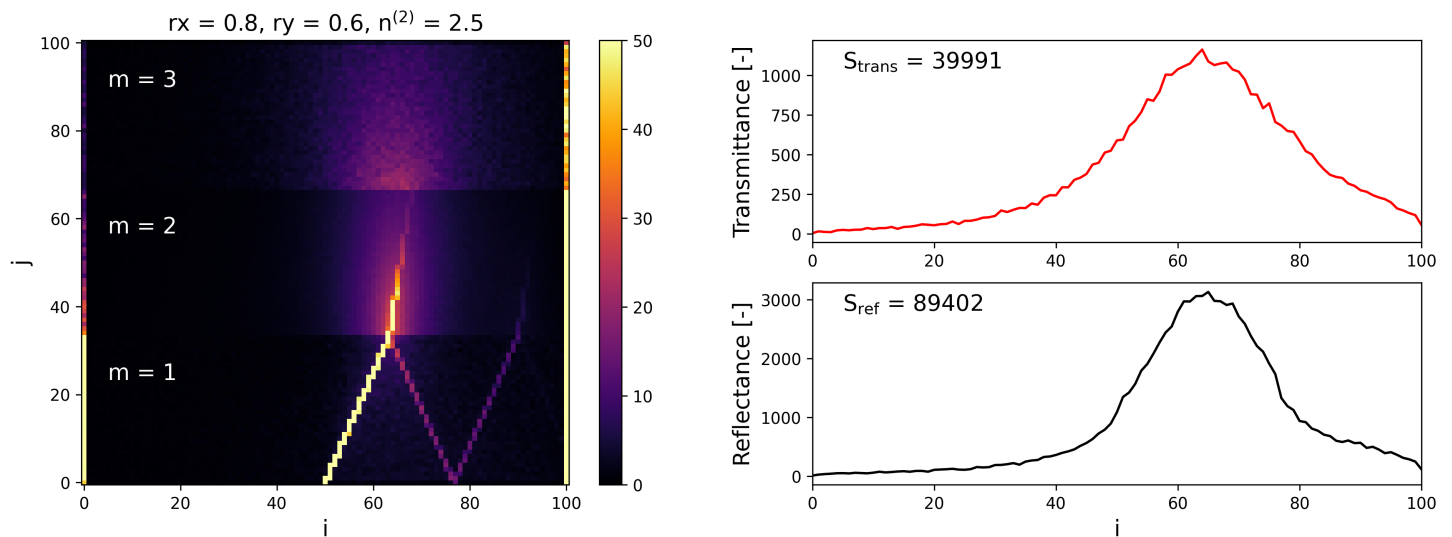
W każdym przypadku obliczono wartość pola powierzchni pod krzywymi transmitancji i reflektancji w celu lepszego ich porównania. Mapy rozkładu absorpcji oraz wykresy transmitancji i reflektancji wykonano przy pomocy biblioteki *matplotlib* w *Python*.

3 Wyniki

Na Rysunkach 2 - 9 przedstawiono wyniki wszystkich symulacji. Dwa pierwsze Rysunku (Rys. 2, 3) pokazują, jakie zmiany występują w układzie dla zmiany współczynnika załamania światła warstwy drugiej z wartości 1.5 do 2.5. Pierwszą oczywistą obserwacją jest zmiana kąta załamania wiązki w warstwie drugiej, zgodnie z prawem Snella [11]. Widać również, że w symulacji drugiej zwiększyła się liczba wiązek docierająca do górnego brzegu i spadła refleksja. Obserwacja ta jest zaskakująca, ponieważ zgodnie ze wzorem Fresnela [12] powinno być dokładnie na odwrót. Może wynikać to ze stochastycznej natury algorytmu i obliczenia należałoby przeprowadzić dla większej ilości wiązek. Położenia pików dla drugiej symulacji przesunęły się nieznacznie w stronę mniejszych i , co jest zgodne z intuicją ze względu na mniejszy kąt załamania wiązki.

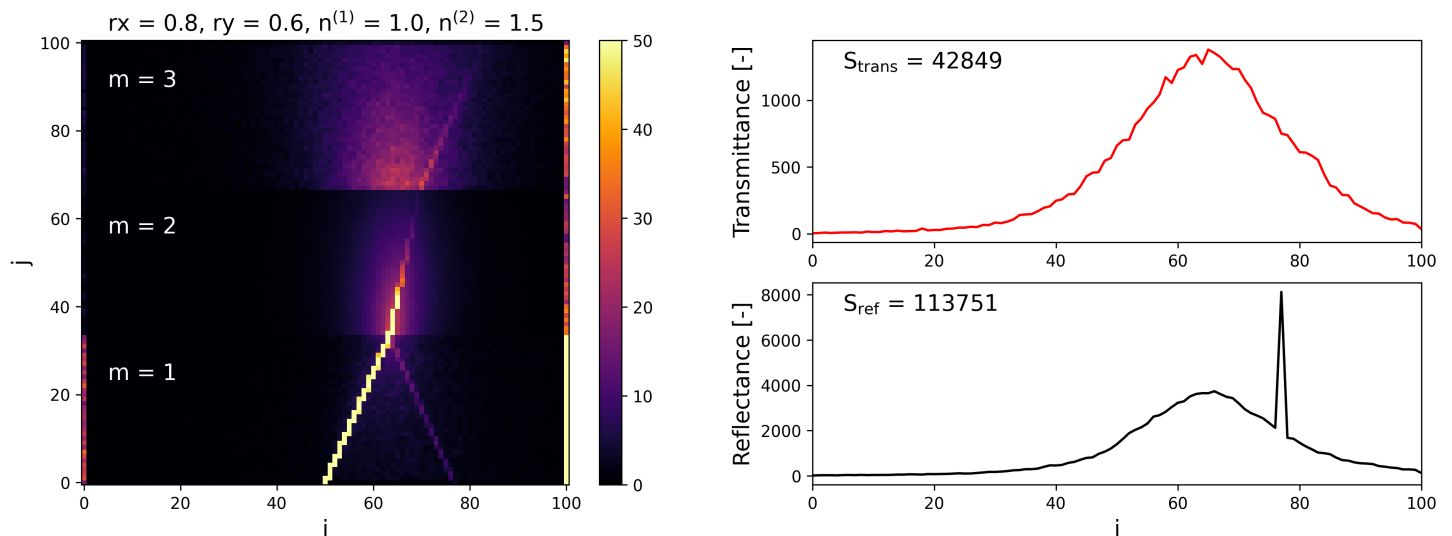


Rysunek 2: Wyniki symulacji nr 1.



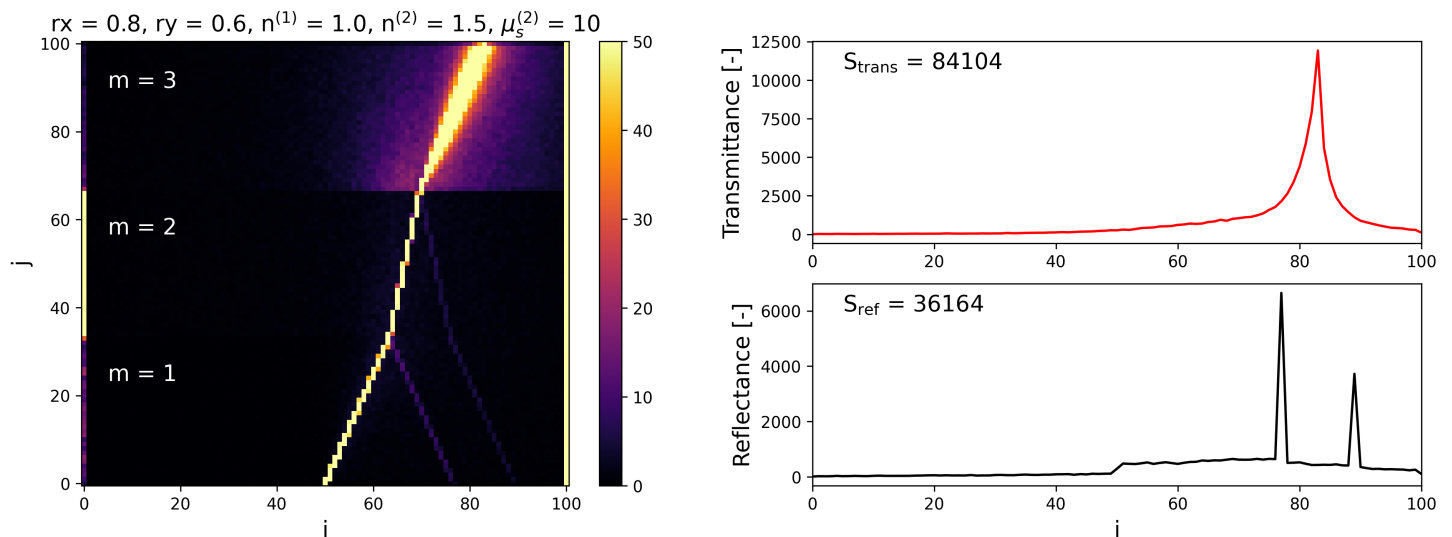
Rysunek 3: Wyniki symulacji nr 2.

Dla symulacji trzeciej (Rys. 4) zmniejszenie wartości współ. załamania światła dla warstwy pierwszej poskutkowało znaczącym wzrostem reflektancji oraz powstaniem wyraźnego pik, pochodzącego od wiązek bezpośrednio odbitych zgodnie z prawem odbicia i nierozproszonych. Wynik ten jest już zgodny z równaniem Fresnela 12. Mimo wzrostu reflektancji zwiększyła się też transmitancja. Choć może wydawać się to nieprawdłowe, należy zauważyć, że w warstwie drugiej występuje znacznie mniej absorpcji na prawej ścianie, czyli więcej promieni dotarło do górnego detektora.



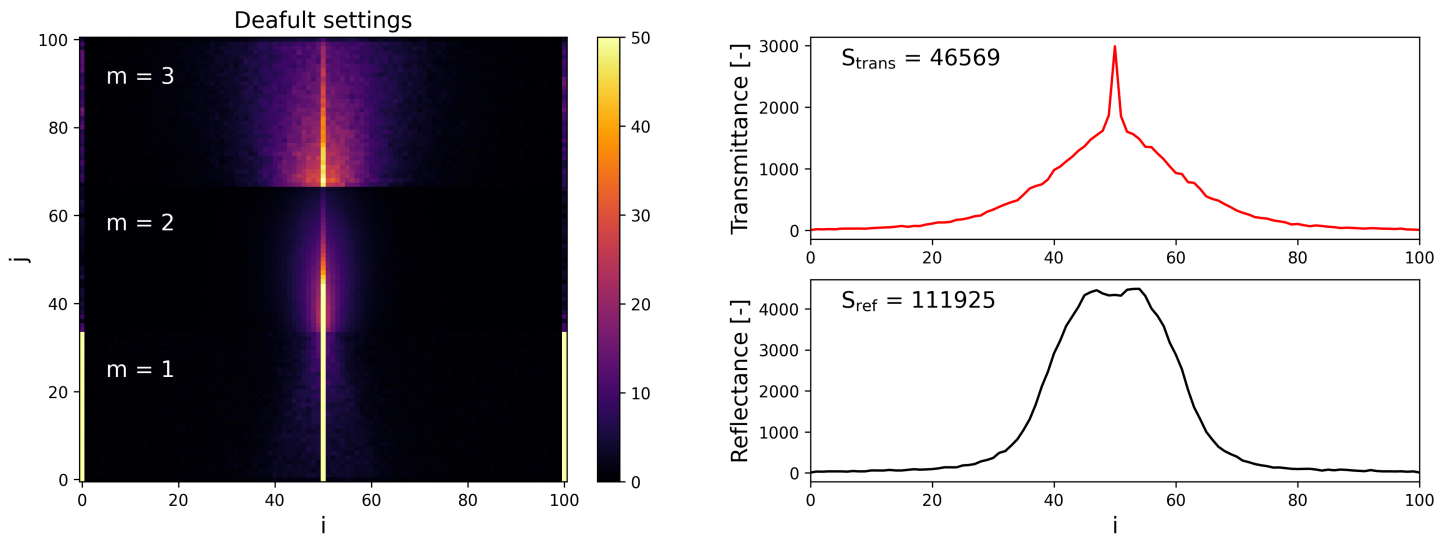
Rysunek 4: Wyniki symulacji nr 3.

W kolejnym podejściu znacząco zmniejszono współczynnik rozpraszania $\mu_s^{(2)}$ (z wartości 190 do 10). Dzięki temu większość wiązek poruszało się niezaburzonym torem zgodnie z równaniami optyki geometrycznej (Rys. 5). W efekcie na wykresie transmitancji widnieje wyraźny pik (poszerzony, ponieważ $\mu_s^{(3)}$ wciąż jest stosunkowo duże) oraz występuje dwa bardzo wyraźne piki dla reflektancji. Oba pochodzą bezpośrednio od nierozproszonych promieni wstecznych.



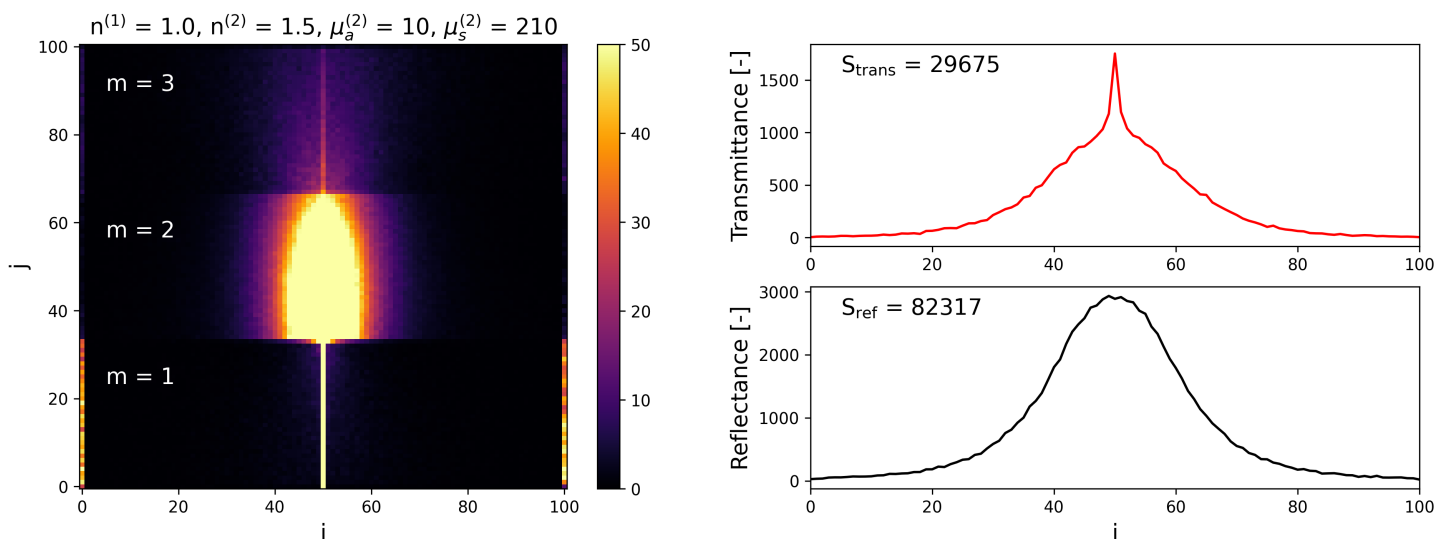
Rysunek 5: Wyniki symulacji nr 4.

W symulacji piątej (Rys. 6) wiązki zostały puszczone prostopadle do interfejsów międzywarstwowych. W efekcie powstaje pik transmisji w środku przedziału - bezpośrednio nad emiterym. Wykres reflektancji wykazuje symetryczność względem środka, co jest intuicyjne - prawdopodobieństwo powrót wiązki do dolnej ścianki maleje wraz z oddalaniem się od toru ruchu pierwotnej wiązki oraz odchył w kierunku jednej z dwóch połówek przestrzeni przy takich warunkach początkowych jest równie prawdopodobny.



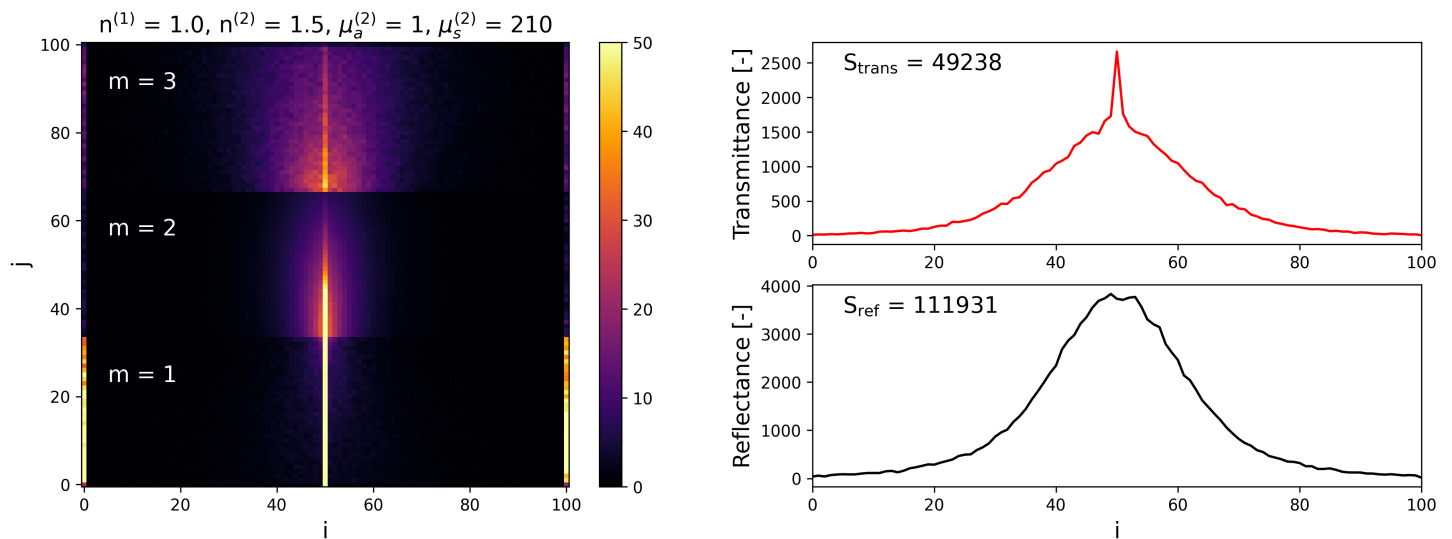
Rysunek 6: Wyniki symulacji nr 5.

Na Rysunku 7 pokazano wyniki symulacji, w której radykalnie zwiększono współczynnik absorpcji i rozpraszania warstwy drugiej. W efekcie prawie dwukrotnie mniej energii dociera do detektora górnego w porównaniu do symulacji piątej (Rys. 6), chociaż sam kształt krzywej został zachowany. Wynika to z większego deponowania energii wiązek w warstwie drugiej. Zmienił się za to kształt wykresu reflektancji, gdzie zniknął dołek w centralnej części. Jest to efekt zwiększonego współczynnika rozpraszania. Wiązka w warstwie drugiej ma większe prawdopodobieństwo tak zmienić swój tor ruchu, aby powrócić do centrum ośrodka pierwszego, co jak widać z wykresu, jest teraz najbardziej prawdopodobnym stanem. Dodatkowo ze względu na depozycję energii wiązek w warstwie drugiej, wartość energii docierającej do dolnego brzegu jest również mniejsza.



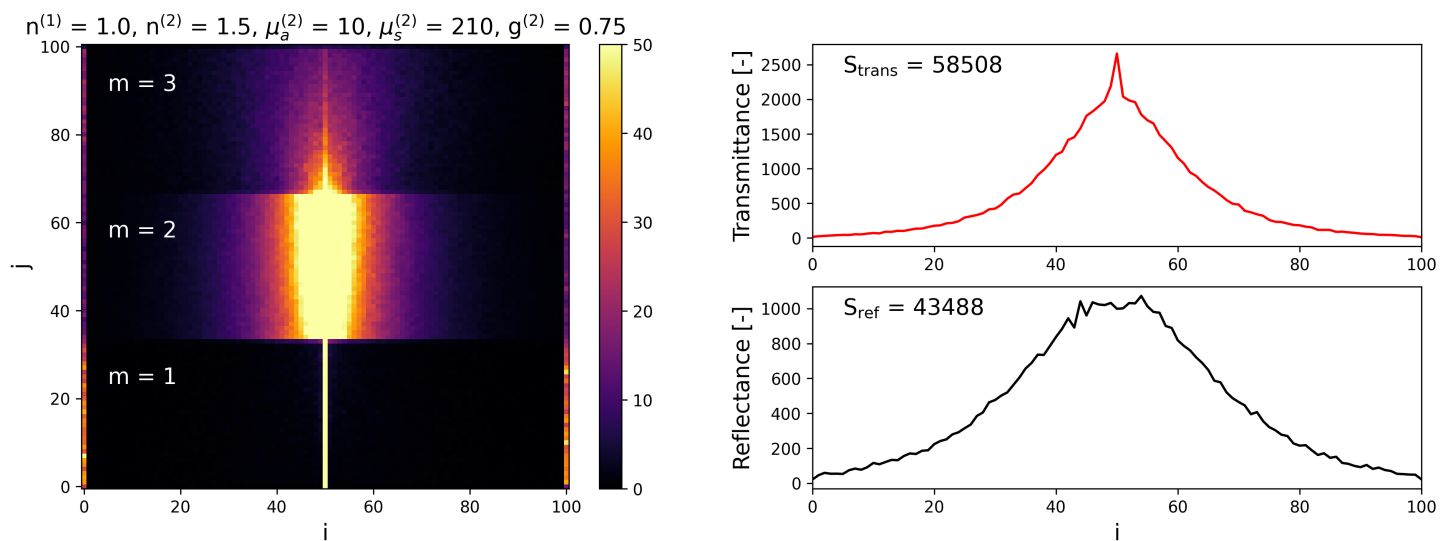
Rysunek 7: Wyniki symulacji nr 6.

W symulacji siódmej (Rys. 8) wioski są w większości te same co dla symulacji poprzedniej. Jediną zmianą jest obniżenie współczynnika absorpcji dla warstwy drugiej co poskutkowało większą ilością detekcji na górnej i dolnej ścianie.



Rysunek 8: Wyniki symulacji nr 7.

Dla ostatniego eksperymentu wartości były takie same jak w symulacji szóstej, z wyjątkiem współczynnika anizotropii $g^{(2)}$, którego wartość zwiększono o rząd wielkości. W teorii bardziej uprzywilejowane są procesy w których wiązka rozprzestrzenia się wprzód, tzn. dla prezentowanej symulacji w kierunku górnej krawędzi. Jak widać, założenie to zostało zrealizowane w praktyce, czyli wyniki transmitancji znacząco wzrosły, zaś refleksja zmalała dwukrotnie.



Rysunek 9: Wyniki symulacji nr 8.

4 Wnioski

Symulacje stochastyczne bardzo dobrze nadają się do modelowania zjawisk optycznych. Wynika to z samej natury optyki, w której oddziaływanie fotonów z materią nie jest jednoznaczne i zależy od wielu parametrów. Zaprezentowane wyniki dają satysfakcjonujące rezultaty i mimo nielicznych mankamentów pozwalają na przeprowadzenie jakościowych analiz.

Literatura

- [1] Tomasz Chwiej, dr hab. inż., skrypt do zadania “*Monte Carlo: symulacja rozpraszania fotonów w ośrodku częściowo przezroczystym*”, AGH, Kraków, 1 czerwca 2023.