

DOI: <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2020-86-8-43-48>

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ АЭРОЗОЛЬНЫМИ СРЕДАМИ

© Владимир Владимирович Семенов

Донской государственный технический университет, Россия, 346500, Ростовская область, г. Шахты, ул. Шевченко 147;
e-mail: vvsemenov@mail.ru

*Статья поступила 22 апреля 2020 г. Поступила после доработки 19 мая 2020 г.
Принята к публикации 25 мая 2020 г.*

Одно из важных направлений в области оптического приборостроения — развитие технологий симуляции оптических процессов в произвольной дисперсной среде. Это позволит в будущем отказаться от физических испытаний с использованием дорогостоящего оборудования в пользу компьютерной симуляции эксперимента. В работе представлены результаты моделирования процессов рассеяния оптического излучения аэрозольными средами с использованием метода конечных элементов. Приведен алгоритм построения модели со следующими исходными условиями: радиус сферической частицы дистиллированной воды — 1 мкм, длина волны падающего оптического излучения — 0,6328 мкм, окружающая частицу среда — воздух. На основе модели разработана компьютерная программа, позволяющая, помимо автоматизации виртуального эксперимента, создавать случайное расположение частиц с изменением их геометрической формы и размеров в заданных пределах. Представлены модельные зависимости интенсивности излучения от углов рассеяния для одной частицы и их группы. Полученные результаты симуляции прохождения светового луча сквозь дисперсную среду и анализа индикатрисы рассеяния группой частиц могут быть использованы для проектирования требуемой конструкции детекторов (фотодатчиков) и определения минимального количества фотоприемных устройств при измерении параметров исследуемой среды.

Ключевые слова: аэрозольные среды; рассеяние оптического излучения; метод конечных элементов для группы частиц; компьютерная модель.

COMPUTER SIMULATION OF OPTICAL RADIATION SCATTERING BY AEROSOL MEDIA

© Vladimir V. Semenov

Don State Technical University, 147, ul. Shevchenko, Shakhty, Rostov obl., 346500, Russia; e-mail: vvsemenov@mail.ru

Received April 22, 2020. Revised May 19, 2020. Accepted May 25, 2020.

Development of the technologies simulating optical processes in an arbitrary dispersed medium is one of the important directions in the field of optical instrumentation and can provide computer simulation of the processes instead of using expensive equipment in physical experiments. The goal of the study is simulation of scattering of optical radiation by aerosol media using the finite element method to show a practical significance of the results of virtual experiments. We used the following initial conditions of the model: radius of a spherical particle of distilled water is 1 μm , wavelength of the incident optical radiation is 0.6328 μm , air is a medium surrounding the particle. An algorithm for implementation of the model by the finite element method is proposed. A subprogram has been developed which automates a virtual experiment for a group of particles to form their random arrangement in the model and possibility of changing their geometric shape and size within predetermined intervals. Model dependences of the radiation intensity on the scattering angle for single particle and groups of particles are presented. Simulation of the light transmission through a dispersed medium provides development of a given photosensor design and determination of the minimum number of photodetectors when measuring the parameters of the medium under study via analysis of the indicatrix of scattering by a group of particles.

Keywords: aerosol media; scattering of optical radiation; finite element method for a group of particles; computer model.

Введение

Исследование дисперсных сред — актуальная задача, определяющая перспективу разработки

различных устройств (детекторов) для фиксации присутствия дисперсных частиц в тех или иных газовых или жидких средах. Одно из важных

направлений в этой области — развитие технологий симуляции оптических процессов в произвольной дисперсной среде. Это позволит в будущем отказаться от физических опытов с использованием дорогостоящего оборудования, сократить временные и прочие затраты в пользу компьютерной симуляции эксперимента.

Цель работы — компьютерное моделирование процессов рассеяния оптического излучения аэрозольными средами.

Метод моделирования

Методы моделирования разделяют на строгие и приближенные. Считается, что строгие дают результаты, максимально близкие к реальным физическим опытам, но оставляют открытой проблему решения обратной оптической задачи. В то же время результаты с применением приближенных методов менее точны, однако полученные с их помощью данные упрощают решение обратной задачи [1]. Из приближенных методов выделим приближения Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна, Релея – Ганса – Дебая, аномальной дифракции и эйконала [1 – 5], среди строгих — методы разделения переменных, конечных элементов, конечных разностей во временной области, обобщенный мультипольный метод [6 – 13, 15].

Приближенные методы позволяют получить обобщенные характеристики среды, например, с помощью анализа индикатрис рассеяния. При этом они дают возможность использовать программные средства для автоматизации процесса получения данных. Однако поскольку система дисперсных частиц в моделях часто рассматривается как одна частица, достоверно рассчитать множественное рассеяние для группы частиц не представляется возможным. Кроме того, моделируют только частицы правильной формы, и даже при введении соответствующих коэффициентов отклонения точно смоделировать рассеяние частицей произвольной формы также невозможно.

Точные (строгие) методы применяют при моделировании оптических процессов в более сложных системах, что приближает модельные результаты к экспериментальным данным. Это связано с максимальным соответствием моделируемой дисперсной среды реальному эксперименту.

В данном случае использовали метод конечных элементов (МКЭ), как наиболее универсальный и обеспечивающий достаточную точность. МКЭ — численный метод решения волновых уравнений Максвелла. Он заключается в разбиении области, в которой ищется решение уравнений, на конечное число дискретных подобластей — элементов. При этом в каждом элементе выбирают вид функции приближения (напри-

мер, полином 1-й степени). Вне элемента функция равна нулю, значения ее на границах элементов — решения задачи — заранее известны. Коэффициенты аппроксимирующих функций находят, используя равенство значений соседних функций на смежных границах элементов. Далее коэффициенты выражают через значения функций в узлах элементов. Затем составляют систему линейных алгебраических уравнений, в которой количество уравнений равно количеству неизвестных в узлах, где ищется решение системы, и прямо пропорционально числу элементов. В сетке элементов существуют ограничения на количество соседних элементов с любым выбранным элементом, что упрощает решение полученной системы уравнений. Достоинство МКЭ — возможность моделировать рассеяние частицей (или частицами) произвольной формы и размеров, а также частицами, состоящими из неоднородного материала, не меняя алгоритм моделирования, но динамически изменяя плотность нанесения сетки (увеличивая ее в местах, где требуется повышенная точность вычислений, и уменьшая там, где высокая точность не требуется).

Компьютерное моделирование

Отметим, что вследствие влияния расположения и геометрии объектов в экспериментах с одинаковыми параметрами среды, но различными положениями частиц и отклонениями от их начальной формы, результаты могут различаться. Для получения надежного решения как прямой, так и обратной оптической задачи необходим ряд опытов, которые потребуют циклических вычислений и регенерации геометрии. Количество циклов вхождения определяли эмпирически и задавали входным параметром при запуске модели.

Обычно считают, что группа частиц ведет себя аналогично одной рассеивающей частице, поэтому расчеты ведут для одной частицы заданного размера, состоящей из материала с указанными оптическими параметрами. Если моделировать рассеяние оптического излучения группой частиц, то будет необходимо множество экспериментов для сравнения результатов с разным расположением и параметрами частиц. Для реализации такой модели понадобятся циклические структуры в алгоритме и процедура генерации геометрии исследуемой группы в соответствии с заданными параметрами.

Блок-схема алгоритма построения модели приведена на рис. 1 ($N_{\max}$, $N_{\text{эксп}}$ — максимальное количество планируемых и текущее количество проведенных экспериментов). Модель реализовывали с использованием программы COMSOL

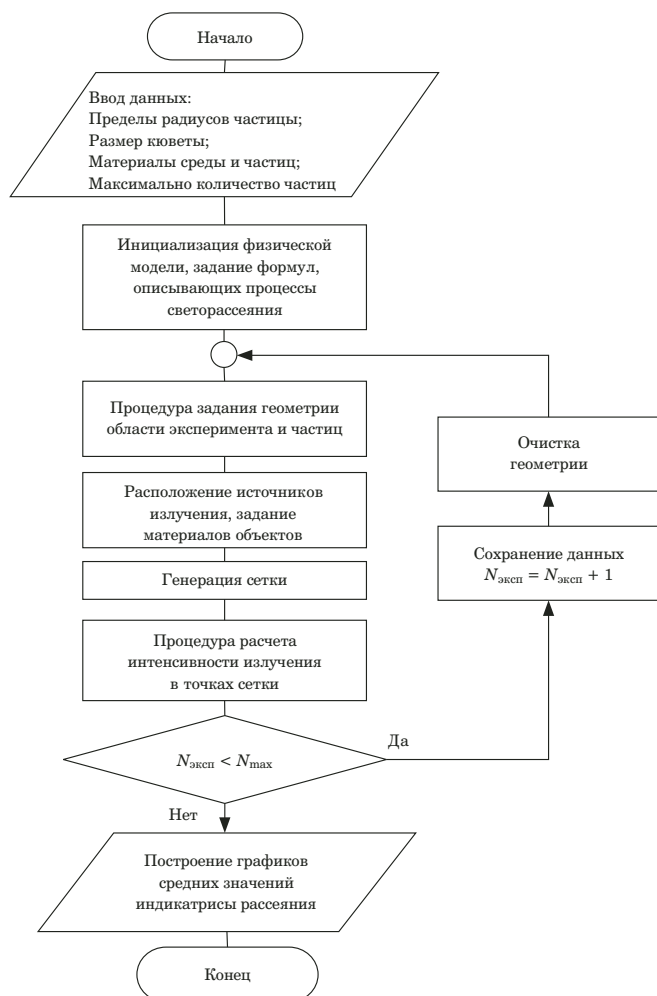


Рис. 1. Блок-схема алгоритма построения модели

Fig. 1. The block diagram of the algorithm of model formation

Multiphysics (включая дополнение Electromagnetic Waves, Frequency Domain).

Для нахождения решения электромагнитных полей внутри моделируемой области приняли следующие допущения: 1) поля имеют гармоническую зависимость от времени с известной угловой частотой $\omega = 2\pi f$; 2) свойства материала линейны относительно напряженности поля. Тогда система основных уравнений Максвелла в трех измерениях сводится к выражению

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times E) - \frac{\omega^2}{c_0^2} \left(\varepsilon_r - \frac{i\sigma}{\omega \varepsilon_0} \right) E = 0,$$

где ∇ — оператор дивергенции (потока); μ_r — относительная магнитная проницаемость; E — напряженность электрического поля; ε_r — относительная диэлектрическая проницаемость; σ — электропроводность; c_0 — скорость света в вакууме; ε_0 — электрическая постоянная; i — мнимая единица.

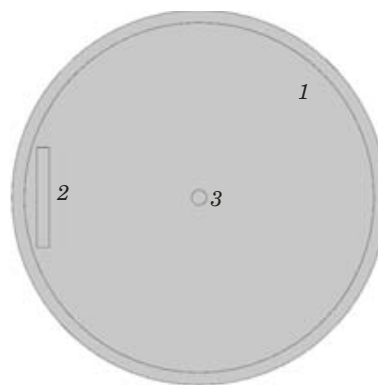


Рис. 2. Схема моделирования

Fig. 2. Modeling diagram

Решение приведенного уравнения находили относительно вектора напряженности электрического поля $E = E(x, y, z)$ во всей области моделирования (E — вектор с компонентами $E = \langle E_x, E_y, E_z \rangle$). Все остальные физические величины (магнитные поля, токи, поток энергии) получали как ее производные.

Для автоматизации эксперимента использовали разработанную подпрограмму на языке Java с библиотечными (поставляемыми в комплекте с COMSOL Multiphysics) API-функциями.

Приняли следующие начальные условия: радиус сферической частицы дистиллированной воды — 1 мкм; длина волны падающего оптического излучения — 0,6328 мкм; окружающая частицу среда — воздух. Схема моделирования приведена на рис. 2 (1 — окружающая среда, 2 — источник оптического излучения, 3 — сферическая частица).

Далее задавали основные характеристики материалов (воздуха и воды), включая относительный показатель преломления, дифракционный параметр и др. После создания геометрии, назначения материалов и настройки физической модели определяли границы экспериментальной области. Затем осуществляли построение сетки для геометрических объектов (ячейка сетки была намного меньше (как минимум, в четыре раза) длины волны). Это необходимо для задания точек, в которых будет решаться волновое уравнение.

Обсуждение результатов

На рис. 3 приведен результат симуляции процесса рассеяния излучения в исследуемом пространстве в случае одной частицы и их группы (синие тона — интенсивность практически нулевая, красные — интенсивность максимальна). Отчетливо прослеживаются области локального максимума и минимума интенсивности в плоскости распространения.

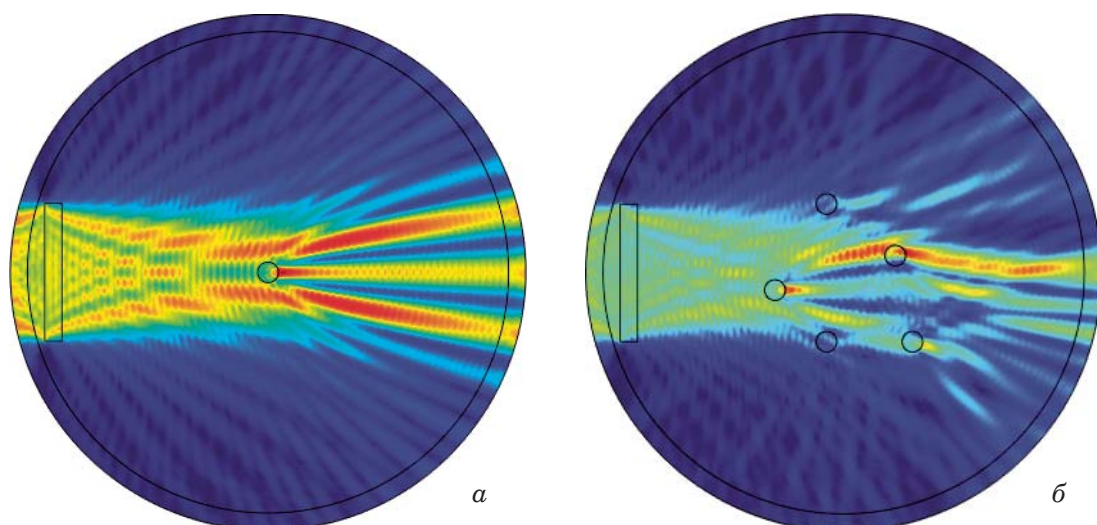


Рис. 3. Результат симуляции процесса рассеяния для одной частицы (а) и их группы (б)

Fig. 3. The simulation results of light scattering for a single particle (a) and group of particles (b)

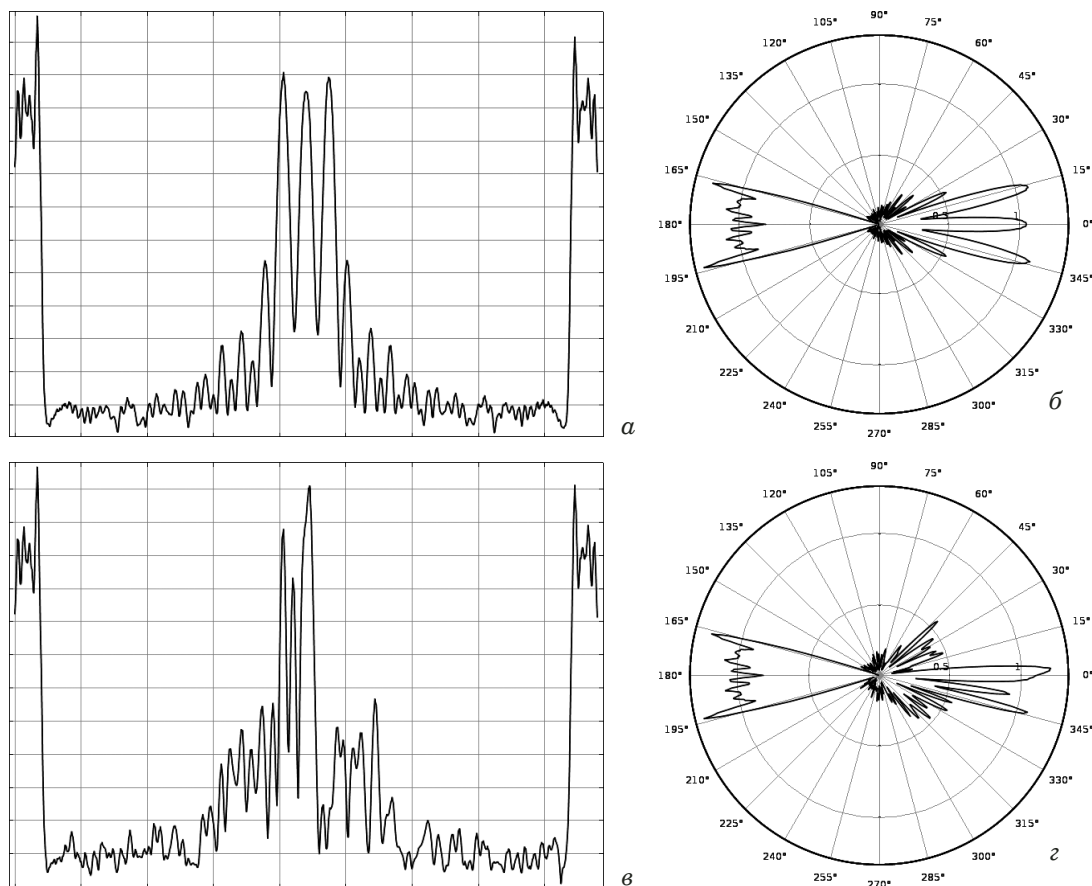


Рис. 4. Зависимости интенсивности излучения от длины окружности и угла рассеяния в декартовых и полярных координатах для одной частицы (а, б) и их группы (в, г) соответственно

Fig. 4. Dependences of the radiation intensity on the circumference and scattering angle in Cartesian and polar coordinates for a single particle (a, b) and group of particles (c, d), respectively

Зависимости интенсивности излучения от длины окружности (ее радиус несколько меньше радиуса окружности, ограничивающей область проведения эксперимента) и угла рассеяния (ин-

дикатрисы рассеяния) в декартовых и полярных координатах для одной частицы и их группы соответственно представлены на рис. 4.

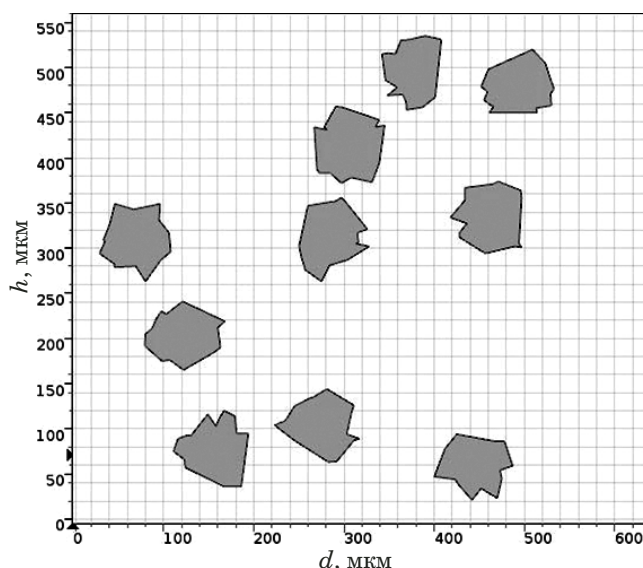


Рис. 5. Пример генерации произвольной геометрии частиц с помощью подпрограммы

Fig. 5. An example of generating an arbitrary geometry of particles using a subprogram

Видно, что локальные максимумы интенсивности расположены как по оптической оси, так и в 15° от нее. Причем в случае одной частицы интенсивность излучения на 360° ниже, чем на 15° . Отметим, что излучение, рассеянное частицами, расположенными ближе к источнику, попадает на другие частицы не параллельно оптической оси. Следует также учитывать, что максимум интенсивности около 180° создается источником излучения.

Для анализа общих свойств дисперсной среды при множественном рассеянии в модели с помощью подпрограммы (язык Java) варьировали размеры частиц и их расположение. Основная задача подпрограммы — создание произвольной геометрии исследуемой среды по заданным параметрам. Пример такой генерации произвольной геометрии частиц приведен на рис. 5 (h , d — высота и ширина частицы).

Отметим, что многократная симуляция прохождения оптического излучения сквозь дисперсную среду позволяет при помощи анализа и усреднения полученных индикатрис рассеяния группой частиц создавать такую конструкцию фотодатчиков, которая будет соответствовать поставленным задачам измерения.

Заключение

Таким образом, проведенное компьютерное моделирование рассеяния оптического излучения показало, что используемый метод конечных элементов адекватен поставленной задаче, достаточно точен и обладает широкими перспективами модернизации и автоматизации. На основе

построенной модели разработана подпрограмма, позволяющая автоматизировать виртуальный эксперимент, создавать случайное расположение частиц и варьировать их геометрическую форму и размеры в заданных пределах. Симуляция прохождения оптического излучения сквозь дисперсную среду позволяет при помощи анализа индикатрис рассеяния использовать полученные данные для проектирования необходимой конструкции детекторов (фотодатчиков) и определения минимального количества фотоприемных устройств при измерении параметров исследуемой среды [14, 16].

ЛИТЕРАТУРА

1. Маслов В. П., Федорюк М. В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. — М.: Наука, 1976. — 296 с.
2. Лопатин В. Н., Приезжев А. В., Апонасенко А. Д. и др. Методы светорассеяния в анализе дисперсных биологических сред. — М.: Физматлит, 2004. — 384 с.
3. Akkermans E., Wolf P., Maynard R. Coherent backscattering of light by disordered media: analysis of the peak line shape / Phys. Rev. Lett. 1986. Vol. 56. N 14. P. 1471 – 1474.
4. Солимено С., Крозиньяни Б., Ди Порто П. Дифракция и волноводное распространение оптического излучения / Пер. с англ. — М.: Мир, 1989. — 664 с.
5. Drake R. M., Gordon J. E. Mie scattering / The American Journal of Physics. 1985. Vol. 53(10). Oct. 1. P. 955 – 963.
6. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами / Пер. с англ. — М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. — 536 с.
7. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами / Пер. с англ. — М.: Мир, 1986. — 660 с.
8. Лопатин В. Н., Сидько Ф. Я. Введение в оптику взвесей клеток. — Новосибирск: Наука, 1988. — 240 с.
9. Lopatin V. N., Shepelevitch N. A., Lopatin V. V. The use of Wentzel – Kramers – Brillouin approximation for the solution of inverse light scattering problem / Proc. International Workshop “Electromagnetic and light scattering: theory and application”. — Moscow, 1997. P. 67 – 70.
10. Mishchenko M. L., Hovenier J. W., Travis L. D. Light scattering by nonspherical particles. — San Diego: Academic Press, 2000. — 690 p.
11. Mishchenko M. L., Hovenier J. W. Depolarization of light backscattered by randomly oriented nonspherical particles / Optics Lett. 1995. Vol. 20. N 12. P. 1356 – 1358.
12. Загороднюк В. Т., Семенов В. В. Модель рассеяния оптического излучения угольной пылью / Изв. вузов. Сев.-кав. регион. Тех. науки. 2001. № 2. С. 19 – 20.
13. Семенов В. В. Результаты компьютерного моделирования оптических пылемеров для контроля угольной пыли / Изв. вузов. Сев.-кав. регион. Тех. науки. 2001. № 3. С. 23 – 24.
14. Семенов В. В., Асатуров Ю. Г., Фетисов В. М., Ханжонков Ю. Б. Разработка системы проектирования абсорбционных пылемеров / Изв. вузов. Сев.-кав. регион. Тех. науки. 2004. Прил. 6. С. 121 – 126.
15. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2012618319 от 14.09.2012. Расчет параметров рассеяния и ослабления излучения пылью / Семенов В. В.; заявка № 2012616394 от 27.07.2012.
16. Беляев С. П., Никифорова Н. К., Смирнов В. В. и др. Оптико-электронные методы изучения аэрозолей. — М.: Энергоиздат, 1981. — 232 с.

REFERENCES

1. **Maslov V. P., Fedoryuk M. V.** Quasiclassical approximation for equations of quantum mechanics. — Moscow: Nauka, 1976. — 296 p. [in Russian].
2. **Lopatin V. N., Priezzhev A. V., Aponasenko A. D., et al.** Light scattering methods in the analysis of dispersed biological media. — Moscow: Fizmatlit, 2004. — 384 p. [in Russian].
3. **Akkermans E., Wolf P., Maynard R.** Coherent backscattering of light by disordered media: analysis of the peak line shape / *Phys. Rev. Lett.* 1986. Vol. 56. N 14. P. 1471 – 1474.
4. **Solimeno S., Crozignani B., Di Porto P.** Diffraction and waveguide propagation of optical radiation. — Moscow: Mir, 1989. — 664 p. [Russian translation].
5. **Drake R. M., Gordon J. E.** Mie scattering / *The American Journal of Physics.* 1985. Vol. 53(10). Oct. 1. P. 955 – 963.
6. **Van de Hulst G.** Light scattering by small particles. — Moscow: Izd. inostr. liter., 1961. — 536 p. [Russian translation].
7. **Boren K., Hafman D.** Absorption and scattering of light by small particles. — Moscow: Mir, 1986. — 660 p. [Russian translation].
8. **Lopatin V. N., Sid'ko F. Ya.** Introduction to cell suspension optics. — Novosibirsk: Nauka, 1988. — 240 p. [in Russian].
9. **Lopatin V. N., Shepelevitch N. A., Lopatin V. V.** The use of Wentzel – Kramers – Brillouin approximation for the solution of inverse light scattering problem / *Proc. International Workshop "Electromagnetic and light scattering: theory and application"*. — Moscow, 1997. P. 67 – 70.
10. **Mishchenko M. L., Hovenier J. W., Travis L. D.** Light scattering by nonspherical particles. — San Diego: Academic Press, 2000. — 690 p.
11. **Mishchenko M. L., Hovenier J. W.** Depolarization of light backscattered by randomly oriented nonspherical particles / *Optics Lett.* 1995. Vol. 20. N 12. P. 1356 – 1358.
12. **Zagorodniuk V. T., Semenov V. V.** The model of scattering of optical radiation by coal dust / *Izv. vuzov. Sev.-kav. region. Tekhn. nauki.* 2001. N 2. P. 19 – 20 [in Russian].
13. **Semenov V. V.** Results of computer simulation of optical dust meters for monitoring coal dust / *Izv. vuzov. Sev.-kav. region. Tekhn. nauki.* 2001. N 3. P. 23 – 24 [in Russian].
14. **Semenov V. V., Assaturov Yu. G., Fetisov V. M., Khanzhonkov Yu. B.** Development of a design system for absorption dust meters / *Izv. vuzov. Sev.-kav. region. Tekhn. nauki.* 2004. Appl. 6. P. 121 – 126 [in Russian].
15. Certificate of state registration of a computer program N 2012618319, 09.14.2012. Calculation of the parameters of scattering and attenuation of radiation by dust / *Semenov V. V.; application N 2012616394, 27.07.2012* [in Russian].
16. **Belyaev S. P., Nikiforova N. K., Smirnov V. V., et al.** Optoelectronic methods for the study of aerosols. — Moscow: Énergoizdat, 1981. — 232 p. [in Russian].