Применение диффузионного приближения при исследовании оптических свойств конденсированных мелкодисперсных сред

В. А. Фираго, К. И. Шулико

Белорусский государственный университет, Минск, e-mail: firago@bsu.by

Проведен анализ известных аналитических выражений для описания интенсивности обратно рассеянного мелкодисперсными средами светового излучения, основанных на диффузионном приближении. Разработаны алгоритмы моделирования спектров диффузного отражения, основанные на их применении. Достоверность аналитических выражений оценивалась путем сравнения результатов моделирования с экспериментально полученными авторами доклада спектрами обратного диффузного отражения при разных расстояниях между излучающим и приемным зондами. При измерениях использовались образцы наиболее распространенных мелкодисперсных материалов. В докладе описана созданная экспериментальная установка и рассмотрены результаты подгонки моделируемых спектров к экспериментально измеренным спектральным зависимостям. Показано, что применение известных выражений приводит к значительным отклонениям моделируемых спектров от измеренных экспериментально.

Ключевые слова: спектры диффузного отражения, диффузионное приближение, оптическая неразрушающая диагностика, оптоволоконные спектрометры, показатели рассеяния и поглощения

Введение

Неразрушающий контроль свойств различных материалов и сред активно развивающееся направление современной науки и техники. При оперативном анализе состава мелкодисперсных рассеивающих сред используют методы оптической отражательной спектроскопии [1, 2]. Достоверность получаемых результатов при их применении должна возрастать, если использовать измерения спектров диффузного отражения при нескольких расстояниях р между излучающим и приемным зондами [3, 4]. Связь между общим ослаблением диффузно отраженного излучения и показателями рассеяния µ_s и поглощения µа сложная. В случаях, когда показатель их приведенного рассеяния $\mu'_{s} = \mu_{s}(1 - g)$, где $g - \phi$ актор анизотропии, намного превышает показатель поглощения µ_{*a*}, эта связь упрощается. Поэтому поиск возможных упрощений решения интегро-дифференциального уравнения переноса излучения в сильно рассеивающих средах является актуальной задачей. При ее решении усилия исследователей в основном сосредоточены на моделировании процессов диффузного рассеяния методом Монте-Карло с учетом основных оптических свойств моделируемой среды. Поскольку этот метод требует трудоемких многочасовых расчетов, ряд авторов предложили приближенные выражения для описания интенсивности обратно рассеянных потоков зондирующего излучения [5, 6]. Для уточнения возможности их применения при неразрушающем оперативном контроле оптических свойств рассеивающих сред необходима экспериментальная апробация этих упрощений. Цель работы – оценка применимости имеющихся приближенных аналитических выражений для описания спектров диффузно отраженного излучения мелкодисперсных сред.

1. Известные приближения

При необходимости получения аналитического выражения для описании процессов обратного рассеяния используют диффузионное приближение и формулируют задачу описания зависимости величины локального коэффициента диффузного отражения *R*(ρ) среды от показателей рассеяния μ_s , поглощения μ_a

$$R\left[\rho,\mu_{s},p(\theta),\mu_{a}\right] = \int_{0}^{\infty} p\left[\rho,l,\mu_{s},p(\theta)\right] e^{-\mu_{a}l} dl$$
(1)

где ρ – расстояние между точкой ввода узкого коллинеарного пучка излучения в полубесконечную рассеивающую среду и точкой его выхода из нее, $p[\rho, l, \mu_s, p(\Theta)]$ – распределение длин путей l, который проходят фотоны в рассеивающей среде между этими точками, $p(\Theta)$ – фазовая функция, представляющая собой распределение вероятностей углов рассеяния фотонов в сферической системе координат Θ, φ

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} p(\Theta) d\Theta d\phi = 1.$$
⁽²⁾

Имеется несколько решений этой задачи [4–7], основанных на использовании дипольных источников зондирующего излучения и задании показателей рассеяния μ_s и поглощения μ_a , а также фактора анизотропии *g*, авторы которых показывают их применимость на образцовых средах. Наиболее простое из них описывает отражающую способность рассеивающего образца в виде полубесконечной среды при условии, что источник и приемник, состоящие из двух оптоволоконных зондов, разделены расстоянием ρ и ориентированы нормально к поверхности образца [4]

$$R(\rho) = \frac{z_0 A}{2\pi} \left[\frac{\mu_{eff}}{\rho^2 + z_0^2} + \frac{1}{\left(\rho^2 + z_0^2\right)^{3/2}} \right] e^{-\mu_{eff} \left(\rho^2 + z_0^2\right)^{1/2}},$$
(3)

где $z_0 = K/\mu'_s$ – длина экстраполяции, K – безразмерная постоянная, величина которой зависит от параметра анизотропии рассеивающих частиц и коэффициента отражения поверхности, A – площадь приемника, т. е. торца оптоволокна, μ_{eff} – эффективный показатель ослабления определяемый равенством $\mu_{eff} = \sqrt{3\mu_a(\mu_a + \mu'_s)}$. Известно приближенное описание локального коэффициента диффузного отражения $R(\rho)$ [7], основанное на его представлении в виде произведения, состоящего из двух сомножителей $R(\rho) = R_0 [\rho, \mu_s, p(\Theta)] e^{-\mu_a \langle l \rangle}$. Первый из них R_0 описывает коэффициент отражения в виде функции, зависящей только от расстояния между зондами ρ , показателя рассеяния μ_s и фазовой функции $p(\Theta)$, т. е. не учитывает поглощение средой. Второй сомножитель определяет ослабление излучения за счет показателя поглощения μ_a и усредненного значения длины пути $\langle l \rangle$, проходимого фотонами между точкой ввода излучения и его выхода из среды.

В докладе приведены и другие известные выражения, имеющие громоздкий вид.

2. Экспериментальная установка

Для экспериментальной проверки имеющихся приближений авторами доклада создана экспериментальная установка, позволяющая получать спектры диффузного отражения сильно рассеивающих сред при разных расстояниях между точками ввода излучения в среду и регистрации излучения, выходящего из среды. В ней используется компактный оптоволоконный спектрометр Avaspec 2048 (фирмы Avantes, Голландия). Освещение образцов осуществляется одним из двух управляемых источников излучения на основе галогенной лампы или мощного светодиода с белым цветом свечения. Излучение управляемых источников вводится в неподвижное оптоволокон- источников оптоволоконное перемещение подвижного приемного оптоволоконного зонда с таким же диаметром световода относительно неподвижного излучающего осуществляется с помощью малогабаритного шагового двигателя, управляемого компьютером через микропроцессор Arduino. Зонды разделены светонепроницаемой

перегородкой. Расстояние между торцами излучающего и приемного оптоволокон и поверхностью среды выбрано равным 100–200 мкм, чтобы не было их непосредственного контакта со средой. Работой спектрометра Avaspec 2048L управляет компьютер через интерфейс USB.

Для выяснения влияния состояния поверхности образцов рассеивающих сред на регистрируемые спектры локального диффузного отражения предусмотрена возможность симметричного перемещения подвижного зонда относительно неподвижного, т. е. получения двух семейств спектров (справа и слева от излучающего зонда) с одинаковыми значениями ρ_k . С целью исключение влияния спектральных характеристик спектрометра на регистрируемые спектры применяется эталонный диффузно рассеивающий образец WS-2 фирмы Avantes.

3. Результаты сравнения моделируемых и экспериментальных спектров

В докладе рассматриваются зависимости нормированных спектральных яркостей диффузного отражения $L_n(\lambda,\rho_k) = L(\lambda,\rho_k)/L(\lambda,\rho_1)$ нескольких образцов сильно рассеивающих сред от расстояния ρ_k между оптоволоконными зондами. На рис. 1 приведен пример измеренных зависимостей $L_n(\lambda,\rho_k/\rho_1)$ для образца из пластика молочного цвета GEHR POM-C, имеющего зеркально гладкую поверхность.



Рис. 1. – Семейство нормированных локальных яркостей $L_n(\lambda, \rho_k)$ обратно рассеянного излучения пластика молочного цвета при разных значениях $\Delta \rho_k$.

При анализе нескольких образцов мелкодисперсных сред установлено, что при существенных вариациях спектрального показателя рассеяния $\mu_s(\lambda)$ не удается разделить выражение для спектрального коэффициента локального отражения $R(\lambda,\rho_k)$ на два независимых сомножителя. Это указывает на ограничения, свойственные приближению в виде $R(\rho) = R_0 [\rho, \mu_s, p(\Theta)] e^{-\mu_a \langle l \rangle}$. Также показано, что применение более сложных приближенных выражений для моделирования $L_n(\lambda,\rho_k)$ с последующей подгонкой их параметров приводит к существенному отклонению моделируемых зависимостей $L^*_n(\lambda,\rho_k)$ от зависимостей, получаемых экспериментально.

Заключение

Результаты подгонки спектров, которые моделируются с помощью известных приближенных аналитических выражений, к экспериментально измеряемым спектрам, получаемым при нескольких расстояниях между излучающим и приемным зондами, показывают их существенное несовпадение. Требуется корректировка этих аналитических выражений, которая должна учитывать особенности экспериментально получаемых спектральных зависимостей и состояние поверхности контролируемой мелкодисперсной среды.

Литература

- 1. Aernouts B., Van Beers R., Watté R., Huybrechts T. et al. Visible and near-infrared bulk optical properties of raw milk. J. of Dairy Science. 2015.Vol. 98, No. 10. P. 6727–6738.
- Nicolaï, B., Beullens, K., Bobelyn, E., Peirs A. and all. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review. J. Postharvest Biology Technology. 2007. Vol. 46. P. 99–118.
- Nguyen N., Tsuta M., Erkinbaev C., Mathijs F. end all. Spatially resolved diffuse reflectance in the visible and near-infrared wavelength range for non-destructive quality assessment of 'Braeburn' apples. Postharvest Biology and Technology. 2014. Vol. 91, P. 39–48.
- 4. Тучин В.В. Оптика биологических тканей: методы рассеяния света в медицинской диагностике. Пер. с англ. В. Л. Дербова; под ред. В. В. Тучина. М.: Физмат-лит, 2012.
- 5. Farrell T. J., Patterson M. S. Experimental verification of the effect of refractive index mismatch on the light fluence in a turbid medium. J. Biomed. Opt. 2001. Vol. 6, № 4. P. 468–473.
- Kanick S.C., Sterenborg H.J.C.M., Amelink A. Empirical model of the photon path length for a single fiber reflectance spectroscopy device. Optics Express, 2009, Vol. 17, No. 2. P. 860–871.
- 7. Kanick S. C. et al. Method to quantitatively estimate wavelengthdependent scattering properties from multidiameter single fiber reflectance spectra measured in a turbid medium. Optics Letters. 2011, Vol. 36, No 15. P. 2997–2999.

Application of the diffusion approximation in research of optical properties of condensed finely dispersed environments

V.A. Firago, K.I. Shuliko

Belarusian State University, Minsk, e-mail: firago@bsu.by

The analysis of the known analytical expressions for the description of the intensity of light backscattered by fine media based on the diffusion approximation is carried out. Algorithms for modeling diffuse reflection spectra based on their application have been developed. The reliability of the analytical expressions was assessed by comparing the simulation results with the experimentally obtained spectra of backward diffuse reflection by the authors of the report at different distances between the emitting and receiving probes. Samples of the most common finely dispersed materials were used in the measurements. The report describes the created experimental setup and considers the results of fitting the simulated spectra to the experimentally measured spectral dependences. It is shown that the use of known expressions leads to significant deviations of the simulated spectra from those measured experimentally.

Keywords: diffuse reflectance spectra, diffusion approximation, optical non-destructive diagnostics, fiber optic spectrometers, scattering and absorption indices