

MODELOVANJE U PODRUČJU PRIMENE RASEJANJA STATIČKOG I DINAMIČKOG TIPA U BIOMEDICINI I DIJAGNOSTIČKE SVRHE

Stanko Ostojić¹, Slavica Ristić², Vladimir Arsoški³, Jelena Ilić⁴, Vladimir Miljković³

1. Tehnološko-metalurški fakultet, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, 2. VTI, Žarkovo, Beograd 3. Elektrotehnički fakultet, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11000 Beograd, 4. Mašinski fakultet, Kraljice Marije 16

Sadržaj – Razmotreni su neki prilazi rasejanju putem angularne raspodele. Date su osnovne postavke raspodele čestica. Razmotrene su osetljivosti detektora, u odnosu na sastav atmosfere, pri raznim ubrzanjima vozila i nadmorskim visinama.

1. UVOD

Efektivnost rasejanja optičkog zračenja na čestici zavisi od odnosa dimenzija čestice i talasne dužine λ . Za čestice sfernog oblika radijusa a , ta zavisnost se izražava pomoću parametra $\rho=2\pi a/\lambda$. Za slučaj $\rho>1$ radi se o Mieovom rasejanju, pri $\rho<0,3-0,5$ o Rayleighovom; nalaze se i izjave da je za Rayleighovo rasejanje [1-3] neophodno da istovremeno budu ispunjena dva uslova: $\rho\ll 1$ i $|\ln \rho|\ll 1$, gde je n -kompleksni indeks prelamanja supstancije čestice, što je diskutabilno.

Dimenzije aerosola u atmosferi su širokog spektra od 10^{-3} do $10^4 \mu\text{m}$. Za molekule vazduha uvek su ispunjeni uslovi za Rayleighovo rasejanje.

a) Molekularno rasejanje. Teorija molekularnog rasejanja svetlosti Cabannes-Rayleigha daje sledeću relaciju za koeficijent zapreminskog rasejanja u gasovima [3]:

$$\sigma_R(\lambda) = \frac{8\pi^3(n_s^2 - 1)^2}{3N\lambda^4} \frac{6 + 3\Delta}{6 - 7\Delta} \quad (1)$$

gde je N -koncentracija molekula, n_s -indeks prelamanja sredine, Δ -faktor depolarizacije rasejanog zračenja (za molekule vazduha npr. $\Delta=0,035$). Veličina $(n_s^2 - 1)$ je proporcionalna koncentraciji molekula N ili gustini vazduha ρ_v . Tako je zapreminski koeficijent molekularnog rasejanja, pri zadatoj λ , proporcionalan ρ_v . Ako je poznata vrednost $\sigma_{R,0}(\lambda_0)$ pri λ_0 , pri normalnim atmosferskim uslovima ($p=p_0$ i $T=T_0$), onda je za druge uslove $\sigma_r(\lambda)$ određeno kao:

$$\sigma_R(\lambda) = \sigma_{R,0}(\lambda_0) \frac{p}{p_0} \frac{T}{T_0} \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^4 \quad (2)$$

Presekom molekularnog rasejanja za opseg 0,2-20 μm se bavio Pendorf [3]. Za $\lambda=0,55\mu\text{m}$ presek molekularnog rasejanja za atmosferu su $\sigma_{R,0}(\lambda=0,55\mu\text{m})=4,56 \cdot 10^{-27} \text{cm}^2$. Koncentracija molekula vazduha na nivou mora je $N_0=2,55 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$. Odatle sledi da je $\sigma_{R,0}(\lambda=0,55\mu\text{m})=1,16 \cdot 10^{-2} \text{km}^{-1}$. Iz podataka za atmosferu na standardnim uslovima može se oceniti $\sigma(R, \lambda)$ na visini do 100 km, gde atmosferski vazduh predstavlja homogenu sredinu gasova. Normirana matrica molekularnog Rayleighovog rasejanja za gasove daleko od apsorpcionih prelaza ima sledeći oblik:

$$f(\gamma) = \frac{3}{4+3\Delta} \begin{pmatrix} 1+\cos^2\gamma+\Delta & -\sin^2\gamma & 0 & 0 \\ -\sin^2\gamma & 1+\cos^2\gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\cos\gamma \end{pmatrix} \quad (3)$$

Indikatora molekularnog rasejanja

$$\chi(\gamma) = f_{11}(\gamma) = (3/4)(1+\cos^2\gamma) \quad (4)$$

je simetrična u odnosu na ravan, normalnu na pravac upadnog snopa i prolazi kroz centar zapremine rasejanja.

b) Aerosolno rasejanje i slabljenje. Rasejanje vidljivog i infracrvenog zračenja u atmosferi zavisi od prostornih i

vremenskih varijacija makroskopskih čestica u vazduhu. Savremen pristup obrazovanju atmosferskih aerosola pretpostavlja istovremeno dva procesa: dotok čestica spolja i generaciju čestice u atmosferi negasovite faze. Kao rezultat prvog procesa, u atmosferi se pojavljuju čestice grubo disperzne frakcije u opsegu 0,5-10 μm . Spektar dimenzija čestica zadovoljava normalnu raspodelu čiji je modalni radijus čestice $a_m=2-4 \mu\text{m}$. Čestice ove frakcije su „neoseitljive“ na varijacije vlažnosti (ako je ona deficitarna). Dostizanjem tačke rose postaju jezgra kondenzacija pri obrazovanju oblaka i magle. Generacija čestica je praktično neprekidna u celoj atmosferi. Jedan od važnijih procesa je fotohemijaska reakcija kada se dobija mikrod disperzna frakcija od 5-50 nm. Kao rezultat koagulacije i kondenzacije obrazuje se stalna submikronska frakciju od 50-500 nm. Vreme njihovog života u troposferi je nekoliko dana a u stratosferi i mezosferi oko godinu dana. Istovremeno sa generacijom submikronske frakcije dešava se i odlazak iz atmosfere sedimentacijom i na druge načine.

Teorija rasejanja elektromagnetnih talasa aerosolnim česticama daje izraz za zapreminski koeficijent $\sigma_a(\lambda)$:

$$\sigma_a(\lambda) = N_a \int_0^\infty \pi a^2 K_r(a, n, \lambda) f(a) da \quad (5)$$

gde je N_a -koncentracija, $K_r(a, n, \lambda)$ -faktor efektivnosti rasejanja od čestica radijusa a , $f(a)$ funkcija raspodele. Matematički izraz za K_r je glomazan i predstavljen u vidu slabo konvergentnog reda, gde sa fizičke tačke gledišta svaki član reda određuje efektivnost pobude električnim i magnetnim parcijalnim talasom. Za $a \gg \lambda$, veći je i broj parcijalnih talasa koje je potrebno uzeti pri izračunavanju veličine K_r .

Uglovna raspodela intenziteta rasejanog zračenja (I_{rasang}) izražava se Legendreovim polinomom n -tog reda sa argumentom $\cos\gamma$, gde je γ ugao rasejanja. Za razliku od molekularnog rasejanja, veličina energije, rasejane česticom o prednju i zadnju polusferu nisu jednake. Indikatora rasejanja je asimetrična. Sa povećanjem relativne dimenzije čestice, koeficijent asimetrije definisan kao odnos energije rasejanog o prednju i zadnju polusferu, se uvećava. Mieva teorija je strogo primenljiva samo na izotropne sfere. Obično se pretpostavlja da su atmosferske čestice sferne i izotropne. Uopšteno ovo važi za vlažne čestice dima, magle, oblaknih i malih kišnih kapi. Zakon rasejanja na nesfernim česticama je značajno složeniji i suštinski se razlikuje od rasejanja na izotropnim sferama. U [2,3]. su podrobno razmatrana rasejanja na elipsoidnim, cilindričnim i česticama u obliku diska. Proučavane su nehomogene čestice sa apsorpcijom, dvoslojne čestice, i ansambli čestica (izotropne sfere i nepravilni oblici). Preovladava rasejanje pod uglom od 100° , što se dobro slaže sa Mieovom teorijom, a za veće uglove I_{rasang} na česticama nepravilnog oblika je manji nego na izotropnim sferama.

c) Eksperimentalno utvrđivanje zakona rasejanja i slabljenja optičkog zračenja u atmosferi. Rezultati izučavanja spektralne prozračnosti i matrice rasejanja u prizemnom sloju atmosfere pokazuju nekoliko različitih

tipova optičkog sastava. Meteorološki pojmovi naziva magle i oblaka se karakterišu sa daljinama vidljivosti a) $S_M \gg 3\text{km}$; b) $1\text{km} < S_M < 3\text{km}$ i c) $S_M < 1\text{km}$.

Na osnovu eksperimentalnih merenja koeficijenta slabljenja $\alpha(\lambda)$ u opsegu 0,55-10 μm izvršena je podela na tri osnovna perioda: zimski, letnji i prolećno-jesenji. Za prozirnu atmosferu koeficijent aerolosnog slabljenja je:

$$\alpha(\lambda) = \alpha_{(\lambda=0,55,\mu\text{m})} [n_0 + n_1 \lambda^{-n_2}] \quad (6)$$

Empirijski koeficijenti n_0 , n_1 i n_2 dobijeni iz eksperimentalnih podataka dati su u Tab.1[3]

Tabela 1.

Period	Tip	n_0	n_1	n_2
Letnji	posle jake kiše $S_M \gg 4\text{km}$	0	0,4	1,88
		0,06	0,36	1,88
Prolećno-letnji	Izmaglica	0,1	0,45	1,3
	Magleni	0,01	0,8	0,5
	Vodenost veća	0,3	0,5	0,6
Zimski	Ledena izmaglica	0,248	0,447	1,24
	Zimska izmaglica	0	0,58	1,24
	Izmagl. sa snegom	0,77	0,145	1,24

d) Koeficijent slabljenja i aerosoli

Za poznato $f(a)$ i n veza između koncentracije homogenog aerosola M i koeficijenta rasejanja σ je $M = \mu \sigma$, gde je:

$$\mu = \frac{2\lambda}{3\pi} \rho_a \frac{\int_0^\infty x^3 f(x) dx}{\int_0^\infty x^2 f(x) K(n,x) dx} \quad (7)$$

Ovde je $x=2\pi a/\lambda$ -Miev parametar; $K(n,x)$ - faktor efektivnosti rasejanja na čestici radijusa a ; ρ_a -gustina supstancije aerosola. Postoje dva aproksimativna slučaja:

1) Izbor λ_{upad} tako da maksimalna vrednost parametra $M(x)$ za polidisperzni aerosol u dijapazonu x , $K(n,x)$ dostiže prvi maksimum. Tu važi $K(n,x) \cong \eta_x$, pa je $\mu = \frac{2\lambda}{3\pi} \rho_a \eta^{-1}$, tj. μ ne

zavisi od $f(x)$

2) Drugi granični slučaj se realizuje pri većim vrednostima x kada je $K(n,x) \approx 2$. Kada je $K(n,x) \cong 2$ sledi:

$$\mu = \frac{\lambda}{3\pi} \rho_a \frac{\int_0^\infty x^3 f(x) dx}{\int_0^\infty x^2 f(x) dx} \quad (8)$$

Ako je $f(a)$ modifikovana Γ -raspodela $f(a) = A_0 a^\alpha \exp[-ba^\nu]$,

A_0 , α , β , ν - su parametri koji se mogu odrediti eksperimentalno. Tada se dobija:

$$\mu = \frac{2}{3} \rho_a V^{1/\nu} \alpha^{-1/\nu} \frac{\Gamma(\alpha + 4/\nu)}{\Gamma(\alpha + 3/\nu)} a_m \quad (9)$$

$a_m = \left(\frac{\alpha}{b\nu}\right)^{\frac{1}{\nu}}$ je modalni radijus.

U tab. 2 je predstavljen proračun μ za tipične modele $f(x)$ aerosola sa krupnim kapljicama. Vrednost parametra μ varira u zavisnosti od tipa. Ocena koncentracije aerosola, npr. vodonosnost oblaka, po koeficijentu rasejanja, ako ništa ne znamo o parametrima mikrostrukture, može se razlikovati za red veličine. Uz poznato a_m tačnost raste.

Postoji interes za mogućnost realizacije graničnih slučajeva. Onda se sondiranje vrši na dve bliske λ_i , tako da se promena n može zanemariti. Obe λ_i nisu na liniji apsorpcije, pa je

$$\lambda_1 \sigma(\lambda_1) \cong \lambda_2 \sigma(\lambda_2), \quad (10)$$

a, kako je faktor efektivnosti nezavisan od λ_i , sledi $\sigma(\lambda_1) = \sigma(\lambda_2)$. (11)

Tabela 2 Parametri raspodele

Tip aerosolnog sistema	Parametri raspodele			μ [mg·kg/m ³]
	a_m, μ_m	α	ν	
Oblak S_1	4	6	1	4,0
Oblak S_2	4	8	3	2,9
Oblak S_3	2	8	3	1,44
Gusti oblaci	6	3	1	8,0
Oblaci	6	3	1	8,0
Oblačno-kišno	6	1	1	16,0
Slojeviti	5	2	1	8,3
Sloj.-oblačni	5	2	1	8,3
Sloj.-kišni	5	2	1	8,3
Višeslojni	5	2	1	8,3
Jaka oblač.	5	2	1	8,3
Magle-radijacione	5	6	1	5,0
Magle adv.	5	3	1	6,7

2. SIMULACIJA ANGULARNE RASPODELE

Rasejanje na sfernim česticama je razmatrano prema Mievoj teoriji [1], gde je amplituda polja rasejanog zračenja u dalekoj zoni za jediničnu vrednost upadnog polja data u sfernim koordinatama kao:

$$E_\theta = \frac{e^{ikr}}{-ikr} \cos \phi \cdot S_2(\cos \theta) \quad (12)$$

$$E_\phi = \frac{e^{ikr}}{ikr} \sin \phi \cdot S_1(\cos \theta) \quad (13)$$

gde su amplitude rasejanja date sa:

$$S_1(\cos \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \quad (14)$$

$$S_2(\cos \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (b_n \pi_n + a_n \tau_n)$$

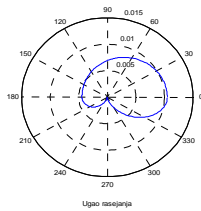
π_n i τ_n su specijalne funkcije Legendrea, a a_n i b_n , koeficijenti amplituda rasejanog polja izraženi pomoću Riccati-Besselovih funkcija (zavise od radijusa i materijala sfere). Rezultati su prikazani kao grafik funkcije $|S_1|^2$, gornja poluravan i $|S_2|^2$, donja poluravan (Sl.1-14).

Za λ_{upad} ($\lambda=632,8\text{nm}$ -HeNe laser, $\lambda=1060\text{nm}$ -Nd³⁺: YAG, $\lambda=690\text{nm}$ - rubinski laser) za kapljice vode (Sl.1-6) i karakteristične čestice aerosola i hidrosola idealnog sfernog oblika (Sl.7-14), dobijaju se različite angularne raspodele. Izvršen je numerički proračun za homogene sferne kapljice (sl.1-6 i sl.10-12) i dvoslojne kapljice (sl.7-9 i sl.13-14).

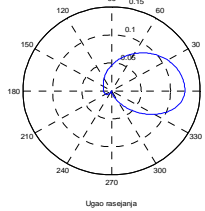
3. DISKUSIJA.

Dobijeni numerički rezultati se slažu za slučajeve iz literature, za aproksimativne prilaze. Za realne uslove mora se uzeti složeniji pristup koji uzima u obzir slučajeve, prelaznih režima, višestruko rasejanje, neidealnost kapljica, višeslojnost kapljica. Korektnost pristupa najvernije može da da samo eksperiment.

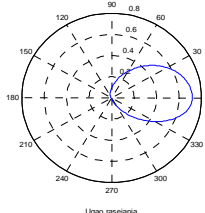
Merenja uglovne raspodele bi zavisno od intenziteta rasejanja imala složenije ili jednostavnije aparature u dinamičkom i statičkom slučaju. Posle merenja, pojavila bi se potreba za provlačenjem glatkih krivih i odabir optimalne. U tom cilju je razvijan program [7].



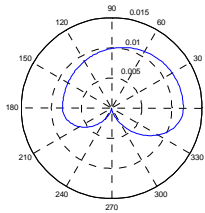
Sl. 1. Kapljica vode radijusa $a=0,1\mu\text{m}$, $632,8\text{ nm}$



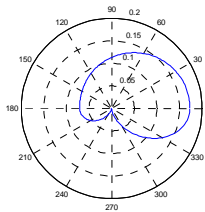
Sl. 2. Kapljica vode radijusa $a=0,15\mu\text{m}$, $632,8\text{ nm}$



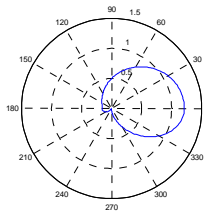
Sl. 3. Kapljica vode radijusa $a=0,2\mu\text{m}$, $632,8\text{ nm}$



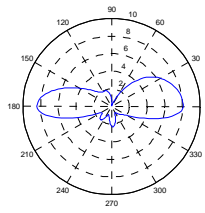
Sl. 4. Kapljica vode radijusa $a = 0,1\mu\text{m}$, 1060 nm



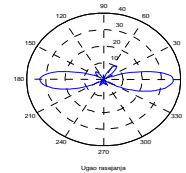
Sl. 5. Kapljica vode radijusa $a = 0,15\mu\text{m}$, 1060 nm .



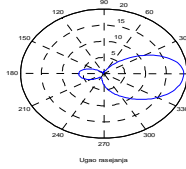
Sl. 6. Kapljica vode radijusa $a = 0,15\mu\text{m}$, 1060 nm



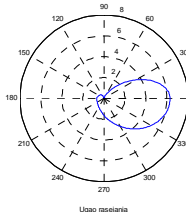
Sl. 7. Kapljice dioktilofalat+ H_2O u centru $n=1,49$, $a_{\text{tot}}=0,3\mu\text{m}$ ($a_v=0,1\mu\text{m}$), $\lambda=632,8\text{ nm}$



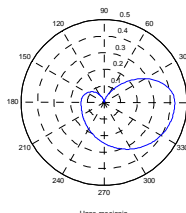
Sl. 8. Parametri sl. 7, $\lambda=690\text{nm}$



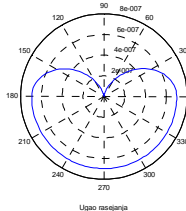
Sl. 9. Parametri sl. 7, $\lambda=1060\text{ nm}$



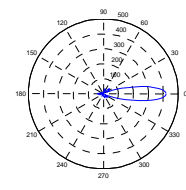
Sl.10. Hidrosoli V_2O_5 u vodi ($n_{\text{rel}}=1,20-0,17i$), $a=2\mu\text{m}$ (može se uočiti nesavršenost Rayleigh-Jeans teorije) $\lambda=632,8\text{ nm}$.



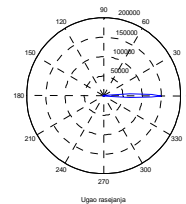
Sl. 11. Podaci i zaključak isti kao za sl.10, $\lambda=1060\text{ nm}$



Sl. 12. Podaci i zaključak isti kao za sl.10, $\lambda=10,6\mu\text{m}$



Sl.13. Čest primer čestica organskih jedinjenja u vazduhu polistiro (Gausovo klupko); $a_{\text{mutr}}=0,259\mu\text{m}$ ($n=1,59$, $\lambda=632,8\text{nm}$) + H_2O ($0,35\mu\text{m}$).



Sl.14. Čest slučaj aerosola sa CS_2 $a=1,88\mu\text{m}$, pri $\lambda=589,3\text{nm}$ kad je $n=1,632$ + H_2O , $d_{\text{tot}}=2,5\mu\text{m}$.

Saobraćajna problematika

Današnji napredak u mnogim oblastima nauke i tehnike daje podsticaj za brži razvoj kako automatskih vozila, tako i automatizacije samog saobraćaja. U širokoj upotrebi su mnogi podsistemi implementirani u drumska vozila: ABS i drugi sofisticirani kočioni sistemi, ICC-inteligentna navigacija, GPS-satelitsko praćenje i pomoć u navigaciji, Air Bags – vazdušni jastuci kao i drugi zaštitni sistemi, onboard kontrola – sistem senzora i procesorskih jedinica radi atomatizovanog nadzora i kontrole ponašanja. Dalja intencija je razvoj inteligentnih kontrolnih, zaštitnih, kočionih, pogonskih, navigacionih i dr. podsistema i povezivanje u autonomnu celinu (automatsko vozilo). Automatizacijom drumskog saobraćaja se postižu dva osnovna efekta: 1) Smanjenje potrošnje goriva usled dobre regulacije saobraćaja, 2) Smanjenje zagađenja kao posledica smanjenja gužvi. Uvođenje automatskih i poluautomatskih vozila se mora vršiti pažljivo i postepeno sa obaveznom kombinacijom vozila sa ručnim upravljanjem, poluautomatskih i automatskih vozila.

Tabela 3. Simulacija uštede potrošnje i smanjenja zagađenja pomešanog saobraćaja po Pajpovom modelu [6]:

	Blago-postepeno ubrzanje vozila	Naglo-incidentno ubrzanje vozila
CO emisija	18.4%	60.6%
CO ₂ emisija	8.1%	19.8%
NO _x emisija	13.1%	1.5%
HC emisija	15.5%	55.4%
Potroš. gor.	8.5%	28.5%

U svetu se uveliko uvode teoretski algoritmi i matematički modeli u cilju automatizacije saobraćaja. Posebno su interesantni teorijski modeli koji za glavne parametre uzimaju u obzir kombinovana ručna i poluautomatska vozila sa aspekta potrošnje goriva i smanjenja zagađenja [6]. Osnovni polazni parametar predstavlja ubrzanje vozila koje može biti blago i naglo. Ubrzanje i usporenje predstavljaju i osnovne deregulacione faktore u modelovaju automatskog saobraćaja i kao glavni negativan efekat, pojavljuje se povećano zagađenje.

Tabela 4. Rezultati eksperimenta i simulacije (po Pajpovom modelu [6]) sa tri vozila u kombinovanom saobraćaju (vodeće je ručno navigirano, a prateća poluautomatski) u režimima blagog i naglog ubrzanja vodećeg vozila.

	Blago ubrzanje vozila		Naglo-incidentno ubrzanje vozila	
	eksperiment	simulacija	eksperiment	simulacija
CO emisija	1.2%	0.8%	19.2%	12.3%
CO ₂ emisija	0.4%	0.2%	3.4%	3.3%
NO _x emisija	1.6%	1.3%	25.7%	19.2%
HC emisija	0.8%	0.4%	9.8%	6.6%
Potrošnja goriva	0.4%	0.2%	3.6%	3.4%

4. ZAKLJUČAK

U ovom radu je razmatrana problematika razvijanja primenljivih formula za potencijalne angularne raspodele. Angularne raspodele za male čestice daju podatke o optičkoj čistoći materijala (na osnovu simetrije). Merenjem sve četiri komponente dobija se podatak o depolarizaciji i o eventualnoj optičkoj aktivnosti.

Za makromolekule, postoji razvijena teorija od vremena Zimmovih dijagrama, koji su kasnije zamenjeni koeficijentima difuzije i DLVO aproksimacijom koja dovodi i do unutrašnjeg polja. Metodom kumulana dobijaju se koeficijenti difuzije i interpretacija monodisperznosti i polidisperznosti sistema. Potrebno je razviti druge formule gde su glavne veličine vezane za I_{ras} koji uključuje tri komponente: anizotropiju, funkciju kompresibilnosti i zavisnost od λ . Savremene aparature su snabdevene programima koji on-line daju sve podatke o makromolekulu od poluprečnika žiratacije, molekularna mase, do polidisperznosti i sl. Razvojem i aparatura i teorije, pojavljuje se niz novih zadataka koji mogu da daju dijagnostički prizvuk merenjima. Tako se matičnom analizom problema, iz Stokesovih parametrima ili sl. dobija mogućnost dalje angularne kontrole sistema rasejavača koja je razvijana i simulirana u ovom radu.

5. LITERATURA

- [1] Van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles*, transl. Moskva, Mir 1960.
- [2] Kerker M., *Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*, New York, AP, , 1969.
- [3] *Lazernoe zondirovanje industrialnih aerolej*, red. Kobanov, M.V, Novosibirsk, Nauka, 1986.
- [4] M. Srećković, et al., IV kongres metrologa, Zbornik radova, pp. 539-546, Beograd, 2003.
- [5] Bohren C. et al., *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley, NY, Moskva, Mir, 1986.
- [6] A. Bose, et al. *Analysis of Traffic Flow With Mixed Manual and Semiaut. Vehicles*, IEEE Trans on Intell. Transport. systems, vol.4, No. 4, pp.173-188, Dec., 2003.
- [7] B.Djokić, Priv.korespodencija.

Abstract – Some approaches to the angular laser scattering distribution are performed. The principal features of particles distributions are presented. The sensitivity of detectors are discussed comparing the acceleration vehicles states as well as with atmospheric contents with -height dependences.

MODELING IN THE AREA OF STATIC AND DYNAMIC SCATTERING IN BIOMEDICINE AND IN DIAGNOSTIC PURPOSES

S. Ostojić, S. Ristić, V. Arsoski, J. Ilić, V. Miljković