



Pro Gradu -tutkielma  
Teoreettinen fysiikka

## Tarkkoihin vuorovaikutuksiin perustuva säteilynkuljetus tiheissä väliaineissa

Timo Väisänen  
2016

Ohjaajat: TkT Johannes Markkanen  
Prof. Karri Muinonen  
FT Antti Penttilä  
Tarkastajat: Prof. Karri Muinonen  
Prof. Kai Nordlund

HELSINGIN YLIOPISTO  
FYSIKAN LAITOS

PL 64 (Gustaf Hällströmin katu 2)



Tiedekunta/Osasto – Fakultet/Sektion – Faculty Matemaattis-luonnontieteellinen		Laitos – Institution – Department Fysiikan Laitos	
Tekijä – Författare – Author Timo Väisänen			
Työn nimi – Arbetets titel – Title Tarkkoihin vuorovaikutuksiin perustuva säteilynkuljetus tiheissä väliaineissa			
Oppiaine – Läroämne – Subject Teoreettinen fysiikka			
Työn laji – Arbetets art – Level Pro gradu -tutkielma		Aika – Datum – Month and year Elokuu 2016	Sivumäärä– Sidoantal – Number of pages 43
Tiivistelmä – Referat – Abstract			
<p>Sähkömagneettisen aallon käyttäytymisen simuloimisesta on tullut tärkeä työkalu nykyaikana. Laskentaresurssien kasvu on mahdollistanut Maxwellin yhtälöiden ratkaisemisen mitä monimutkaisemmille systeemeille ilman, että systeemiä tarvittaisiin fyysisesti rakentaa. Tästä on hyötyä tähtitieteelle, sillä kaukaisten kohteiden ominaisuuksia voidaan tutkia vertaamalla kohteesta sironnutta valoa laskennalliseen dataan. Ongelmana laskennallisen datan tuottamisessa on, että sähkömagneettisen aallon käyttäytymistä kuvaavia Maxwellin yhtälöitä ei pystytä ratkaisemaan nykyisillä menetelmillä eksaktisti, kun mallinnettava kohde on suuri. Tästä syystä ongelmaa pitää yksinkertaistaa, kuten tehdään säteilynkuljetusohjelmissa.</p> <p>Säteilynkuljetusohjelmissa seurataan sähkömagneettisen aallon kulkua aineessa ja näin pyritään ratkaisemaan, kuinka aine sirottaa säteilyä. Säteilynkuljetusohjelmat onnistuvat ratkaisemaan harvojen aineiden sirontaongelmia, koska sirottajien väliset vuorovaikutusten oletetaan tapahtuvan kaukokenttien kautta, mikä on pätevä approksimaatio harvojen aineiden tapauksessa. Tiheiden aineiden sirontaongelmissa lähikenttien vaikutusta ei voi kuitenkaan sivuuttaa ja siksi säteilynkuljetuksen tulokset tiheille aineille eroavat eksaktista ratkaisusta huomattavasti.</p> <p>Tässä pro gradu -tutkielmassa on esitetty uudenlaisen säteilynkuljetusohjelma <math>R^2T^2</math> (Radiative Transfer with Reciprocal Transactions) kehitystyötä. Oletamme, että käyttämällä niin sanottua vapaan avaruuden sirontakenttää kaukokenttien sijaan, pystymme laskemaan säteilynkuljetusohjelma <math>R^2T^2</math>:lla myös tiheiden aineiden sirontaongelmia. Sähkökentät esitetään palloharmonisilla funktioilla ja säteilynkuljetuksessa yksittäiset sirottajat korvataan palloklustereilla, joiden väliset vuorovaikutukset lasketaan käyttämällä superpositio T-matriisimenetelmää.</p> <p>Tutkielmassa perehdytään säteilynkuljetusyhtälön johtoon, sähkömagneettisen kentän esittämiseen palloharmonisilla funktioilla ja superpositio T-matriisimenetelmään.</p> <p>Tutkielmassa käydään läpi <math>R^2T^2</math>:n algoritmia, jatkosuunnitelmia ja näytetään, että <math>R^2T^2</math> onnistuu kelvollisesti ratkaisemaan absorboimattomien aineiden ongelmia. Absorption huomioiminen vaatii kuitenkin vielä menetelmän jatkekehitystä.</p>			
Avainsanat – Nyckelord – Keywords säteilynkuljetus, säteilynkuljetusyhtälö, menetelmäkehitys, tähtitiede, sironta, monisironta			
Säilytyspaikka – Förvaringställe – Where deposited Helsingin yliopisto, Kumpulan kampuskirjasto			
Muita tietoja – Övriga uppgifter – Additional information			

# Sisältö

<b>1</b>	<b>Johdanto</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Teoria</b>	<b>5</b>
2.1	Säteilynkuljetus ja monisirona . . . . .	5
2.2	Palloharmoniset funktiot ja $\mathbf{T}$ -matriisi . . . . .	13
2.3	Superpositio $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmä . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Algoritmi</b>	<b>17</b>
3.1	Tulosten suppenevuus ja laskenta-aika . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Tulokset</b>	<b>27</b>
4.1	Tapaukset . . . . .	27
4.2	Analyysi: absorboimaton aine . . . . .	30
4.3	Analyysi: absorboiva aine . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Jatkokehitys</b>	<b>38</b>
<b>6</b>	<b>Johtopäätökset</b>	<b>41</b>
<b>7</b>	<b>Viitteet</b>	<b>43</b>

# 1 Johdanto

Sähkömagneettisen aallon käyttäytymisen simuloimisesta on tullut tärkeä työkalu nykyaikana. Laskentaresurssien kasvu on mahdollistanut Maxwellin yhtälöiden ratkaisemisen mitä monimutkaisemmille systeemeille ilman, että systeemiä tarvittaisiin fyysisesti rakentaa. Laskennallinen lähestymistapa mahdollistaa esimerkiksi antennien suunnittelemisen matkapuhelimen koteloihin [1], realistisemmat tietokonegraafikat viihdeteollisuuden tarpeisiin [2] ja parempia ilmastomalleja ilmastomuutoksen tutkimiseksi [3]. Tähtitieteen kannalta mielenkiintoisia ovat inversio-ongelmat, joiden ratkaiseminen antaa työkalun tutkia kaukaisia kohteita valon avulla ilman, että tutkimuslaitteita tarvitsee viedä paikan päälle. Inversio-ongelmissa yritetään saada tietoa kappaleesta vertaamalla mitattua dataa laskennalliseen dataan. Tutkitun kohteen havaittuja ominaisuuksia, kuten intensiteettiä ja polarisaatiota pitää pystyä kuitenkin mallintamaan ja siksi laskennallisia menetelmiä sirontaongelmien ratkaisemiseksi kehitetään.

Sähkömagneettisen aallon ominaisuudet, kuten etenemissuunta, aallonpituus tai intensiteetti voivat muuttua aallon osuessa avaruudessa olevaan kappaleeseen. Tällöin kappaleen sanotaan sirottavan aallon ja kyseisen prosessin matemaattista tai laskennallista mallintamista kutsutaan sirontaongelmaksi. Sirontaongelma voidaan periaatteessa ratkaista Maxwellin yhtälöistä eksaktisti ja tällaisia lähestymistapoja edustavat esimerkiksi superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmä (*superposition  $\mathbf{T}$ -matrix method*) [4] tai tilavuusintegraaliyhtälömenetelmä (*Volume integral equation*) [5]. Eksaktien menetelmien ongelma on kuitenkin, että ne ovat vaikeita ratkaista tai vaativat paljon laskentaresursseja. Siksi eksakteja ratkaisuja ei aina pystytä tuottamaan, vaan tarvitaan ongelmaa yksinkertaistavia approksimatiivisia menetelmiä.

Approksimatiiviset ratkaisut ovat laskennallisesti nopeampia ratkaista kuin eksaktit, mutta menetelmien oletukset tuottavat omat virheensä tai kaikkia kappaleen ominaisuuksia, kuten kuinka kappale polarisoi valoa, ei voida laskea. Virhelähteiden takia tulokset eivät vastaa täysin todellista systeemiä ja oletuksien takia menetelmää voidaan käyttää vain tietynlaisiin ongelmiin. Esimerkiksi oletukset voivat asettaa rajoituksia sirottavalle kappaleelle, säteilyn lähteelle tai havaitsijalle. Tässä pro gradu -tutkielmassa esitetään uudenlainen säteilykuljetusohjelma  $R^2T^2$ , jolla yritetään laajentaa approksimatiivisten säteilykuljetusohjelmien pätevyysaluetta.

Säteilynkuljetusohjelmissa seurataan säteilyn tai säteen kulkua diskreettejä sirottajia sisältävässä tilavuudessa. Annettuun tilavuuteen generoidaan säteitä, joiden annetaan propagoida eli edetä kappaleen sisällä ja generoimalla tarpeeksi säteitä saadaan sirontaongelma ratkaistua riittävällä tarkkuudella. Sähkömagneettinen kenttä voidaan jakaa lähi- ja kaukokenttään, joista kaukokenttä on yksinkertaisin, koska kenttä näyttää lokaalisti tasoaalolta. Perinteiset säteilynkuljetusohjelmat olettavat, että kaikki vuorovaikutukset sirottajien välillä tapahtuvat ainoastaan kaukokenttien kautta, jolloin lähikenttien vaikutus jätetään huomioimatta [6]. Kaukokenttien käyttö on oikeutettua, kun sirottajien välinen etäisyys on pitkä eli kun sirottajista koostuva tilavuus on harvaan pakattu [7, 8, 9]. Jos sirottajien välinen etäisyys lyhenee eli aine tihenee, kasvaa lähikenttien merkitys sirontaongelmassa ja tästä syystä myös menetelmän antamat tulokset huononevat. Oletamme, että ottamalla huomioon lähikentät voimme laajentaa säteilynkuljetusohjelmien ratkaisualueen myös tiheille aineille.

$R^2T^2$  on kehitystyön alla oleva Monte Carlo -algoritmiin perustuva monisירותasäteilynkuljetusohjelma, jonka nimi on kirjainlyhenne sanoista *Radiative Transfer with Reciprocal Transactions* eli säteilynkuljetus resiprookkisilla vuorovaikutuksilla ( $RTRT = (RT)^2 = R^2T^2$ ).  $R^2T^2$ :lla yritetään parantaa tiheän aineen sirontaongelmia laskemalla vuorovaikutukset eksaktisti, jolloin myös lähikenttä on mukana. Niin sanotun vapaan avaruuden sirontakentät on otettu huomioon käyttämällä superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmää, joka ratkaisee eksaktisti, kuinka joukko palloja sirottaa sähkömagneettista kenttää. Superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän ohjelmoinnista on vastannut Johannes Markkanen.  $R^2T^2$ :n kehitystiimissä työskentelee minun ja Markkasen lisäksi Karri Muinonen, Antti Penttilä sekä Jouni Peltoniemi.

$R^2T^2$  on ohjelmoitu Karri Muinosen kehittämän säteilynkuljetusohjelma RT-CB (*Radiative Transfer Coherent Backscattering*, [10]) pohjalta. RT-CB on Monte Carlo-algoritmiin perustuva monisירותasäteilynkuljetusohjelma, missä on erillinen koherentin takaisinsirontaefektin lisäävä osa. RT-CB pystyy ratkaisemaan harvojen aineiden sirontaongelmia hyvin, mutta ei kuitenkaan tiheiden aineiden [7, 9]. RT-CB ohjelmoitiin uudelleen vuoden 2015 kesällä modernille Fortranille ja se tulee vapaasti ladattavaksi lähdekoodeineen syyskuussa [11].

$R^2T^2$ :n kehitys alkoi syksyllä 2015 ja ensimmäinen versio  $R^2T^2$ :sta saatiin vuoden 2016 alussa. Ensimmäisessä versiossa laskettiin vapaan avaruuden sirontakentät kahden pallo-

sirottajan välillä ja se antoi oikeanlaisia intensiteettikuvaajia, mutta polarisaatiokuvaajat olivat huonompia verrattuna RT-CB:n tuloksiin. Kyseisen version kehitys jäi kesken vuoden 2016 keväällä, kun  $R^2T^2$  päätettiin toteuttaa korvaamalla pallosirrotajat palloklustereilla. Kyseinen kehitysversio  $R^2T^2$ :sta saatiin nopeasti ohjelmoitua korvaamalla osia ensimmäisestä versiosta ja ohjelmalla laskettuja tuloksia käsitellään tässä tutkielmassa.

Tutkielman alussa käydään läpi hieman teoriaa. Teorialuvussa on käyty läpi säteilykuljetusyhtälön teoreettista johtoa mikrofysikaalisista Maxwellin yhtälöistä, vektoripalloharmonisten funktioiden käyttöä ja kuinka näillä lasketaan vuorovaikutuksia  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmällä. Teorialuku auttaa ymmärtämään  $R^2T^2$ :ssa käytettyjä menetelmiä, mistä on hyötyä  $R^2T^2$ :n analysoimisessa sekä jatkokehityksessä. Algoritmi-luvussa käydään läpi  $R^2T^2$ :n toimintaperiaatteen yksityiskohtia ja tuloksissa näytetään  $R^2T^2$ :lla laskettuja esimerkkitapauksia, joita verrataan RT-CB:hen ja eksaktiin ratkaisuun. Lopuksi käsitellään hieman  $R^2T^2$ :n jatkokehitystä.

$R^2T^2$ :n kehitys on rahoitettu ERC Advanced Grant -rahoituksella numero 320773 nimellä Scattering and Absorption of Electromagnetic Waves in Particulate Media eli (SAEMPL) [12]. Laskennalliset resurssit tarjoaa CSC - Tieteen tietotekniikan keskus Oy.

## 2 Teoria

Tässä luvussa käydään läpi  $\mathbb{R}^2\mathbb{T}^2$ :n kannalta olennaisia teoreettisia kohtia. Ensimmäisessä aliluvussa käsitellään säteilynkuljetusta ja monisirontaa, mitä seuraa esitys vapaan avaruuden sirontakenttien esittämisestä palloharmonisilla funktioilla ja kuinka sironta lasketaan  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmällä näitä käyttämällä.

### 2.1 Säteilynkuljetus ja monisironta

Seuraava johto käyttää lähteenään Mishchenkon oppikirjaa monisironnasta ja säteilynkuljetuksesta [6] sekä hänen tiivistelmänsä aiheesta [13]. Säteilynkuljetusyhtälö voidaan johtaa myös energian säilymisperiaatteista [14], mutta Mishchenkon johto antaa huomattavasti paremman kuvan monisironnan tärkeistä yksityiskohdista. Johtaminen tehdään satunnaisille systeemeille, jotka koostuvat diskreeteistä sirottajista, mistä esimerkkinä on kuva 1.

Oletetaan tyhjä avaruus, jolla ei ole reunoja ja lisätään sen sisälle aaltovektorin  $\mathbf{k}^{\text{inc}}$  suuntaan etenevä sähkömagneettinen tasoaalto. Tasoaalto taajuusalueella (*frequency domain*) voidaan johtaa tavallisista aikariippuvista Maxwellin yhtälöistä Fourier-muunnoksen avulla [17]. Oletetaan lisäksi tasoaallon taajuudeksi  $\omega$ , jolloin kompleksisen sähkömagneettisen kentän komponentit avaruuden pisteessä  $\mathbf{r}$  voidaan kuvata sähkökentän  $\mathbf{E}_0^{\text{inc}}$  avulla seuraavasti:

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0^{\text{inc}} e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{k}^{\text{inc}} \cdot \mathbf{r}}. \quad (1)$$

Kutsutaan kyseistä kenttää herättäväksi kentäksi ja merkintöjen helpottamiseksi poistetaan aikariippuvuus  $e^{-i\omega t}$ , sillä kyseisellä tekijällä ei ole vaikutusta lopputulokseen. Kaikki operaatiot tehdään paikan suhteen ja aika vaikuttaa vain aallon vaiheeseen.

Seuraavaksi lisätään avaruuteen kappale, jolloin tarvitaan uusi kuvaus  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  sähkömagneettisesta aallosta, koska kappale vuorovaikuttaa aallon kanssa. Ottamalla erotus herättävän kentän kanssa, on mahdollista saada esille lisätyn kappaleen aiheuttama muutos  $\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r})$  sähkömagneettiseen kenttään

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Tätä muutosta kutsutaan sirontaprosessiksi. Yleisin esitysmuoto sirontaprosessille on esittää kokonaiskenttä  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  herättävän kentän  $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$  ja siroavan kentän  $\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r})$  summana

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Yhtälö (3) ei itsessään kerro ratkaisua sirontaongelmalle, vaan täytyy löytää kuvaus  $\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r})$ , jotta kokonaiskenttä voitaisiin ratkaista. Maxwellin yhtälöistä saadaan johdettua aaltoyhtälö muodossa

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (4)$$

jossa esiintyvä  $k$  on aaltoluku ja lähdevirta  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  on nolosta poikkeava vain kappaleen sisällä. Yhtälö (4) on epähomogeeninen, koska yhtälön oikea puoli voi olla nolosta poikkeava, ja siksi kokonaisratkaisu on homogeenisen ratkaisun ja erikoistapauksen summa. Homogeenisen yhtälön ratkaisuksi kelpaa yhtälö (1) ja erikoistapaus saadaan tutkimalla vapaan avaruuden dyadista Greenin funktiota  $\mathbf{G}$ . Greenin funktio on ratkaisu yhtälölle

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{I} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5)$$

jossa  $\mathbf{I}$  on identiteettidyadi,  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  on deltafunktio ja  $\mathbf{r}'$  on sirottajan paikka avaruudessa. Yhdistämällä epähomogeenisen yhtälön ratkaisu (5) sekä homogeeninen ratkaisu (1), voidaan löytää yhtälölle (4) ratkaisu muodossa

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + k^2 \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') [m^2(\mathbf{r}') - 1]. \quad (6)$$

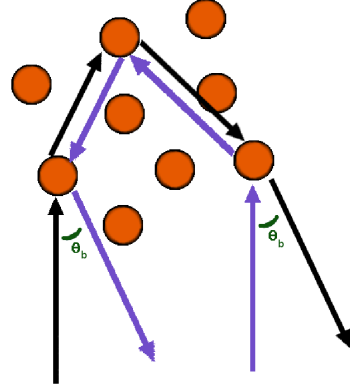
Yhtälöä (6) kutsutaan tilavuusintegraaliyhtälöksi (*volume integral equation, VIE*), koska yhtälössä ratkaistaan kappaleen  $V$  sisälle muodostuva kenttä ja tutkitaan kentän vaikutusta pisteeseen  $\mathbf{r}$ . Yhtälössä (6)  $m(\mathbf{r}')$  on kappaleen taitekerroin pisteessä  $\mathbf{r}'$  ja  $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  on Greenin funktio, josta myöhemmin päästään lähikentän ja kaukokentän käsitteeseen.

Tähän asti on oletettu, että sironta tapahtuu yksittäisestä kappaleesta, mikä ei vastaa vielä oletettua tilannetta diskreeteistä sirottajista koostuvasta kappaleesta. Yhtälö (3) voidaan laajentaa vastaamaan tilannetta, jossa sirottavia kappaleita on  $N$  kappaletta. Tällöin kokonaiskenttä  $\mathbf{E}$  saadaan summaamalla yksittäisten kappaleiden kontribuutioita  $\mathbf{E}_i^{\text{sca}}$ :





**Kuva 1:** Esimerkki pallomaisesta systeemistä, joka koostuu diskreeteistä pallomaisista sirotaajista.



**Kuva 2:** Havainnollistava kuva koherentin takaisinsironnan aiheuttavista poluista, missä  $\theta_b$ -kulma kuvaa tulevan ja siroavan kentän välistä kulmaa.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^N \mathbf{E}_i^{\text{sca}}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Yhtälö (7) on mahdollista johtaa samankaltaiseen muotoon kuin yhtälö (6):

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^N \int_{V_i} d\mathbf{r}' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \int_{V_i} d\mathbf{r}'' \mathbf{T}_i(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \cdot \mathbf{E}_i(\mathbf{r}''), \quad (8)$$

jossa

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \sum_{j(\neq i)=1}^N \int_{V_j} d\mathbf{r}' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \int_{V_j} d\mathbf{r}'' \mathbf{T}_j(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \cdot \mathbf{E}_j(\mathbf{r}''). \quad (9)$$

Yhtälö (8) kuvaa, että kokonaiskenttä on herättävän kentän ja sirotaajista tulevan kentän summa. Toisaalta yksittäiseen sirotaajaan vaikuttavat muut sirotaajat, kuten nähdään yhtälöstä (9). Yhtälöissä (8) ja (9) esiintyvä  $\mathbf{T}_j(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$  on dyadinen transitio-operaattori, joka kuvaa herättävän kentän siroavaksi kentäksi sirotaajan  $j$  vaikutuksesta. Yhtälöitä (6)-(9) kutsutaan Foldy Lax-yhtälöiksi [6].

Kirjoitetaan seuraavaksi Foldy Lax-yhtälöt yksinkertaisemmassa muodossa, jottei tarvitse kirjoittaa kaikkia integraaleja näkyville:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_i \mathbf{E}_i, \quad (10)$$

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \sum_{j(\neq i)=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_j \mathbf{E}_j, \quad (11)$$

jossa  $\hat{\mathbf{T}}$  sisältää operaattorin  $\int_{V_j} d\mathbf{q} \mathbf{T}_j(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$  ja  $\hat{\mathbf{G}}$  on operaattori  $\int_{V_j} d\mathbf{r}' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ . Yhtälöä (10), jossa  $\mathbf{E}_i$  on auki kirjoitettu, kutsutaan kertalukusirontakehitelmäksi (*order-of-scattering expansion*) [6].

Nyt sironnut kenttä, johon kaikki sirottajat kontribuoivat, saadaan kokonaiskentän määritelmästä (10)

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_i \mathbf{E}_i, \quad (12)$$

johon sijoittamalla  $\mathbf{E}_i(\mathbf{r})$  yhtälöstä (11) saadaan

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_i \mathbf{E}^{\text{inc}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j(\neq i)=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_{ij} \mathbf{E}_j, \quad (13)$$

johon edelleen sijoittamalla yksittäisen sirottajan kontribuutiota  $\mathbf{E}_i(\mathbf{r})$  yhtälöstä (11) saadaan [13]

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_i \mathbf{E}^{\text{inc}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j(\neq i)=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_i \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_j \mathbf{E}^{\text{inc}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j(\neq i)=1}^N \sum_{k(\neq j)=1}^N \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_i \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_j \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{T}}_k \mathbf{E}^{\text{inc}} + \dots \quad (14)$$

Tämä kuvaa sironneen kentän summana kenttiä, jotka ovat käyneet kaikki mahdolliset sirontapolut kappaleen sisällä olevien sirottajien välillä, josta tulee nimitys monisironta [13]. Esimerkiksi ensimmäinen kuvaa kaikkia kenttiä, jotka ovat sironneet vain kerran jokaisesta sirottajasta ja toinen termi käy läpi kaikki kaksi kertaa sironneet kentät ja niin edelleen. Sirontapolku voi kulkea useita kertoja saman sirottajan kautta, kunhan kappale ei herätä itseään peräkkäisissä sironnoissa. Kutsumme yhtälössä (14) esiintyvää eksaktia  $\mathbf{E}^{\text{sca}}$  sironnutta kenttää vapaan avaruuden sirontakentäksi (tästä edes VAS-kenttä), koska haluamme pystyä käyttämään sanaa "sironnut kenttä" eri yhteyksissä ilman, että se sekoitetaan VAS-kenttiin.

VAS-kenttä voidaan jakaa yhtälön

$$\mathbf{E}^{\text{sca}} = \mathbf{E}_{\text{coh}}^{\text{sca}} + \mathbf{E}_{\text{incoh}}^{\text{sca}}, \quad (15)$$

mukaisesti kahteen osaan, missä  $\mathbf{E}_{\text{coh}}^{\text{sca}}$  on koherentti ja  $\mathbf{E}_{\text{incoh}}^{\text{sca}}$  epäkoherentti sironnut kenttä. Koherentti kenttä tarkoittaa keskiarvoistettua kenttää, joka saadaan keskiarvoista-

malla erilaisista realisaatioista sironneita kenttiä

$$\mathbf{E}_{\text{coh}}^{\text{sca}} = \frac{1}{N_{\Gamma}} \sum_{\epsilon=1}^{N_{\Gamma}} \mathbf{E}_{\epsilon}^{\text{sca}}, \quad (16)$$

jossa  $\mathbf{E}_{\epsilon}^{\text{sca}}$  on realisaation  $\epsilon$  VAS-kenttä ja realisaatioita on  $N_{\Gamma}$  kappaletta [15]. Realisaatiolla tarkoitetaan kuvassa 1 esiintyvien sirottajien tiloja eli paikkoja ja orientaatioita kappaleen sisällä.

On tärkeää huomata, että yhtälö (14) on eksakti, johon ei ole siis tehty mitään approksimaatioita. Yhtälöä (14) on kuitenkin tällöin vaikea laskea, koska polkujen lukumäärä kasvaa nopeasti systeemissä olevien pallojen lukumäärän kasvaessa. Toiseksi kaikki dyadisessa operaattorissa  $\hat{\mathbf{T}}_i$  olevat integraalit vaikeuttavat yhtälön (14) ratkaisemista. Palataan takaisin Greenin funktioon sekä kauko- ja lähikentän käsitteeseen, mitä käyttämällä yritetään helpottaa sirottajien välistä vuorovaikutusta.

Greenin funktio  $\mathbf{G}$  yhtälössä (5) kuvaa, kuinka pisteessä  $\mathbf{r}'$  impulssivaste, kuten hetkellinen varaus, saa aikaan vaikutuksen pisteessä  $\mathbf{r}$ . Greenin funktio auki kirjoitettuna on muotoa

$$\mathbf{G} = \left( I + \frac{1}{k^2} \nabla \otimes \nabla \right) \frac{e^{ik|\mathbf{n}|}}{4\pi|\mathbf{n}|}, \quad (17)$$

jossa  $\mathbf{n} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ .

Seuraavaksi oletetaan, että diskreeteistä sirottajista koostuva kappale on hyvin harvaa, jolloin sirottajat ovat kaukana toisistaan. Täten oletetaan, että tarkasteltavalle sirottajalle  $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ ,  $k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg 1$  ja  $|\mathbf{r}| \gg \frac{k\mathbf{r}'^2}{2}$ , joiden avulla  $\nabla$  ja pallokoordinaatiston  $\otimes$ -operaattoria tarkastelemalla yhtälö (17) voidaan johtaa muotoon [6]

$$\mathbf{G} \approx (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}) \frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-ik\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r}'}. \quad (18)$$

Ratkaistaan seuraavaksi  $\mathbf{E}^{\text{sca}}$  yhtälöstä (3) ja (6), mihin sijoitetaan saatu (18). Tällöin päästään kaukokenttäapproksimaatioon

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) \approx \frac{e^{ikr}}{r} \frac{k^2}{4\pi} (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{r}} \otimes \hat{\mathbf{r}}) \cdot \int_V d\mathbf{r}' [m^2(\mathbf{r}') - 1] \mathbf{E}(\mathbf{r}') e^{-ik\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}. \quad (19)$$

Kaukokenttäapproksimaatiolla on muutamia tärkeitä seurauksia, jotka on hyvä ymmärtää. Ensimmäiseksi huomataan, ettei radiaalista sähkökenttää ole olemassa, sillä

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}) = 0, \quad (20)$$

vaan kaikki kentät ovat atsimuutti-  $\phi$  ja elevaatiokulman  $\theta$  suuntaisia. Toinen tärkeä ominaisuus tulee esiin tekijästä  $\frac{e^{ikr}}{r}$ , mikä implikoi sitä, että kaukana sirotaajasta kenttä näyttää tulevan pistemäisestä lähteestä. Täten kaukokenttäapproksimaatio tekee kaikista sirotaajista pistelähteitä. Sähkökenttä voidaan siis jakaa lähikenttään ja kaukokenttään.

Käydään seuraavaksi läpi kuinka nämä vaikuttavat sirotaajan ja aallon väliseen vuorovaikutukseen. Esitetään yhtälö (6) samankaltaisen dyadisen transitio-operaattorin kanssa, mikä esiintyi yhtälössä (8). Tällöin

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \int_V d\mathbf{r}'' \mathbf{T}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \cdot \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}''), \quad (21)$$

ja koska herättävä kenttä on tasoaalto  $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0^{\text{inc}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  niin huomataan, että integraalit  $\int_V d\mathbf{r}'$  ja  $\int_V d\mathbf{r}''$  eivät operoi herättävän kentän amplitudiin  $\mathbf{E}_0^{\text{inc}}$ . Tällöin amplitudi saadaan ulos integraalista ja yhtälö (21) voidaan kirjoittaa muodossa

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{r} \mathbf{S} \cdot \mathbf{E}_0^{\text{inc}}. \quad (22)$$

Yhtälössä (22) amplitudisirontamatriisi  $\mathbf{S}$  voidaan laskea erikseen ja käyttää sitä siroavan kentän laskemiseksi. Oletuksena oli siis, että herättävä kenttä on tasoaalto ja sirotaajaa havainnoidaan kaukana.

Samankaltainen kaukokenttäapproksimaatio onnistuu myös monelle sirotaajalle yhtälön (14) tapauksessa. Yhtälö (14) voidaan redusoida samankaltaiseksi tuloksi herättävän kentän kanssa kuin (22), jolloin vuorovaikutukset sirotaajien välillä tapahtuvat vain kaukokenttien kautta [6],

$$\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{A}_{ri0} \mathbf{E}^{\text{inc}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j(\neq i)=1}^N \mathbf{A}_{rij} \mathbf{A}_{ij0} \mathbf{E}^{\text{inc}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j(\neq i)=1}^N \sum_{k(\neq j)=1}^N \mathbf{A}_{rij} \mathbf{A}_{ijk} \mathbf{A}_{jk0} \mathbf{E}^{\text{inc}} + \dots \quad (23)$$

Yhtälössä (23)  $\mathbf{A}_{zyx}$  on kuvaus, kuinka sirotaaja  $y$  sirotaa kaukokenttään tasoaaltona sirotaajalta  $x$  (tai  $x=0$  herättävästä kentästä) tulevan tasoallon sirotaajalle  $z$  (tai  $z=r$  ulkopuoliselle havaintasijalle). Yhtälö (23) on yksinkertainen verrattuna yhtälöön (14), koska operaattori  $\mathbf{A}_{zyx}$  sisältää tiedon sirotaajan sirontaominaisuuksista vastaavan amplitudisirontamatriisin  $\mathbf{S}$  (yhtälö (22)), jolloin transitio-operaattorissa  $\hat{\mathbf{T}}_i$  esiintyvää integraalia ei tarvitse laskea erikseen jokaisen sirontaprosessin kohdalla.

Määritellään seuraavaksi koherenssidyadi (*coherency dyadic*)  $\mathbf{C}(\mathbf{r})$  kenttien keskiarvoistettuna dyaditulona

$$\mathbf{C}(\mathbf{r}) \approx \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \otimes \mathbf{E}^*(\mathbf{r}) \rangle, \quad (24)$$

jossa keskiarvoistus tehdään kaikkien systeemirealisaatioiden yli [6]. Yhtälö  $\mathbf{C}(\mathbf{r})$  voidaan ajatella summana tuloja, jotka saadaan kertomalla jokainen kentän kulkema polku toisen mahdollisen polun kanssa. Juuri tämä kaikkien polkujen läpikäyminen tekee yhtälöstä (24) analyyttisesti monimutkaisen.

Ensimmäinen yksinkertaistus yhtälöön (24) saadaan niin sanotusta Twersky-approksimaatiosta, joka voidaan tehdä, kun sirottajat ovat toistensa kaukokenttäalueella ja havaitsija havainnoi sirottajien kaukokenttää [6]. Twersky-approksimaatiossa kielletään, ettei säde saa kulkea saman sirottajan kautta useasti [16], mikä vähentää mahdollisten polkujen lukumäärää huomattavasti. Approksimaatio tuottaa häviävän virheen kokonaisratkaisuun, kunhan systeemin koko on iso [6].

Twersky-approksimaation jälkeen koherenssidyadiin (24) jää vielä kenttäpareja, jotka menevät ristiin: esimerkiksi kenttä kulkee sirottajien 1-2-3-4 kautta ja toinen kenttä kulkee polun 1-3-2-4 kautta. Ristiin menevät kentät saadaan kuitenkin poistettua dyadista  $\mathbf{C}$  havainnolla, että kentän vaiheesta vastuussa oleva eksponenttitermi  $e^{ikr}$  saa kenttien välisen tulon oskilloimaan paikan suhteen ja täten myös häviämään keskiarvoituksen yhteydessä [13]. Näiden approksimaatioiden jälkeen koherenssidyadiin on jäänyt vain kenttäpareja, jotka ovat riippumattomia toisistaan.

Lopuksi tehdään tikapuuapproksimaatio, joka jättää koherenssidyadiin vain ne polku-parit, jotka kulkevat samaa reittiä [6]. Tikapuuapproksimaatiota voi perustella samankaltaisella vaihe-eroista johtuvilla oskillaatioilla, jotka poistivat ristiin menevät polut [13]. Tikapuuapproksimaatio aiheuttaa kuitenkin sen, että tuloksesta jätetään huomioimatta niin kutsuttu koherentti takaisinsironta, joka aiheuttaa intensiteetti- ja negatiivisen polarisaatiopiikin takasirontasuunnassa. Koherentti takaisinsironta syntyy, kun kaksi polkua kulkevat vastakkaisiin suuntiin (katso kuva 2). Efekti saadaan kuitenkin lisättyä säteilynkuljetukseen erillisellä käsittelyllä [10].

Etsitään nyt approksimaatioilla yksinkertaistetun koherenssidyadin  $\mathbf{C}_L(\mathbf{r}) \approx \mathbf{C}(\mathbf{r})$  avulla tikapuuominaisen koherenssidyadi  $\Sigma_L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}})$  (*ladder specific coherency dyadic*)

$$\mathbf{C}_L(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} d\hat{\mathbf{q}} \Sigma_L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}}), \quad (25)$$

jossa integrointi tehdään koko avaruuskulman yli ja  $\mathbf{r}$  vastaa havaitsijan paikkaa [13]. Tikapuuominainen koherenssidyadi  $\Sigma_L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}})$  kuvaa havaitsijaa paikassa  $\mathbf{r}$ , joka havainnoi suunnasta  $\hat{\mathbf{q}}$  tulevaa säteilyä. Tikapuuominainen koherenssidyadi voidaan jakaa vielä diffuusi-  $\Sigma_d(\mathbf{r})$  ja koherenttiosaan  $\mathbf{C}_C(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}})$

$$\Sigma_L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}}) = \Sigma_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}}) + \delta(\hat{\mathbf{q}} - \hat{\mathbf{s}})\mathbf{C}_C(\mathbf{r}), \quad (26)$$

joista diffuusi osa (epäkoherentti) kuvaa kaikkea pisteessä  $\mathbf{r}$  havaittavaa suuntaan  $\hat{\mathbf{q}}$  sironutta säteilyä ja koherenttiosa kuvaa suunnasta  $\hat{\mathbf{s}}$  tulevaa herättävän kentän säteilyä, johon kontribuoivat kaikki suunnassa  $\hat{\mathbf{q}}$  havaittavat sirottajat [6].

Esittämällä koherentti Stokesin vektori  $\mathbf{I}_C$  tikapuuominaisen koherenssidyadin koherentin osan

$$\mathbf{I}_C(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) + \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}}) \\ \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) - \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}}) \\ -\hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) - \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}}) \\ i(\hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) - \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{C}_C(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{s}})) \end{bmatrix}, \quad (27)$$

ja ominaisdiffuusi-intensiteettivektori (*diffuse specific intensity column vector*)  $\mathbf{I}_d$  diffuusin osan

$$\mathbf{I}_d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) + \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}}) \\ \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) - \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}}) \\ -\hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) - \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}}) \\ i(\hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) - \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \Sigma_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}})) \end{bmatrix} \quad (28)$$

avulla, voidaan johtaa vektorisäteilynkuljetusyhtälöä (*Vector Radiative Transfer Equation, VRTE*) vastaavat yhtälöt [6]

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla \mathbf{I}_C(\mathbf{r}) = -\frac{N}{V} \langle \mathbf{K}(\hat{\mathbf{s}}) \rangle \mathbf{I}_C(\mathbf{r}), \quad (29)$$

ja

$$\hat{\mathbf{q}} \cdot \nabla \mathbf{I}_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}}) = -\frac{N}{V} \langle \mathbf{K}(\hat{\mathbf{q}}) \rangle \mathbf{I}_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}}) + \frac{N}{V} \int_{4\pi} \langle \mathbf{Z}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}') \rangle \mathbf{I}_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{q}}') d\hat{\mathbf{q}}' + \frac{N}{V} \langle \mathbf{Z}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{s}}) \rangle \mathbf{I}_C(\mathbf{r}). \quad (30)$$

Yhtälöissä (27) ja (28) esiintyvät kulmafunktiot ovat määritelty niin, että  $\hat{\mathbf{q}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}(\hat{\mathbf{q}}) \times \hat{\boldsymbol{\phi}}(\hat{\mathbf{q}})$ . Lisäksi yhtälöissä  $\epsilon_0$  on tyhjän avaruuden permittiivisyys, ja  $\mu_0$  permeabiliteetti,  $V$  kappaleen koko,  $N$  sirottajien lukumäärä ja  $\langle \mathbf{K}(\hat{\mathbf{q}}) \rangle$  sekä  $\langle \mathbf{Z}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}') \rangle$  ovat kaikkien

sirottajien tilojen yli keskiarvoistettu Stokesin ekstinktiomatriisi ja vaihematriisi [6]. Ekstinktiomatriisi kuvaa säteilyn heikkenemistä sironnan ja absorption takia ja vaihematriisi kuvaa säteilyn taittumista suuntaan  $\hat{\mathbf{q}}'$ . Yhtälöitä (27) ja (28) tarvitaan säteilynkuljetusohjelmissa, kun säteilyä seurataan kappaleen sisällä, mutta tarvitsemme yhtälöt myös ulkopuolisen havainnoitsijan näkökulmasta.

Olkoon herättävän kentän suunta yhä  $\hat{\mathbf{s}}$  ja havaitsija suunnattu suuntaan  $\hat{\mathbf{q}}$ . Nyt jos havaitsija katsoo suuntaan  $\hat{\mathbf{q}} = -\hat{\mathbf{s}}$  ja suunnassa  $\hat{\mathbf{q}}$  havaitsijan edessä ei ole kappaletta, niin havaitsija havaitsee pelkän herättävän kentän ulkoisessa koherentissa kentässä  $\mathbf{I}_C^{\text{ext}}(\mathbf{r})$ . Jos havaitsijan edessä on kuitenkin kappale, havaitsee tämä koherentin kentän, johon vaikuttaa ekstinktio yhtälön (29) mukaisesti, missä yhtälön oikealla puolella oleva sisäinen koherentti kenttä  $\mathbf{I}_C$  on vain korvattu herättävällä kentällä  $\mathbf{I}^{\text{inc}}$  [6]. Ulkoinen diffuusi intensiteettivektori  $\mathbf{I}_d^{\text{ext}}(\mathbf{r})$  on puolestaan kaikki kappaleesta detektorin  $\hat{\mathbf{q}}$  suunnassa havaittu diffuusi intensiteetti  $\mathbf{I}_d$ . Jos suunnassa  $\hat{\mathbf{q}}$  ei havaita kappaletta, on ulkoinen diffuusi vektori  $\mathbf{I}_d^{\text{ext}}(\mathbf{r}) = 0$ .

## 2.2 Palloharmoniset funktiot ja T-matriisi

Tässä aliluvussa esitetään, kuinka sähkömagneettiset kentät saadaan esitettyä palloharmonisilla funktioilla, mikä perustuu Bohren ja Huffmannin kirjaan [17].

Kyseinen esitys löydetään, kun yhtälön (4) homogeenista ratkaisua etsitään muodossa, jossa ratkaisu on jaettu erikseen skalaarifunktioon  $\psi_{mn}^{(\nu)}$  ja vektorifunktioon  $\mathbf{v}$ . Oletetaan, että tällainen ratkaisu on olemassa muodossa

$$\mathbf{M}_{mn}^{(\nu)} = \nabla \times (\mathbf{v} \psi_{mn}^{(\nu)}), \quad (31)$$

johon on merkitty indeksit  $m, n$  ja  $\nu$ , koska ratkaisumahdollisuuksia on ääretön määrä. Maxwellin yhtälöiden mukaan sähkökenttä saadaan ottamalla roottori magneettikentästä ja tästä syystä toinen ratkaisu on

$$\mathbf{N}_{mn}^{(\nu)} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{mn}^{(\nu)}}{k}. \quad (32)$$

Johdetaan nyt yhtälö (4) (ulkopuolella  $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ ) yritteen (31) avulla muotoon

$$\nabla^2 \mathbf{M}_{mn}^{(\nu)} + k^2 \mathbf{M}_{mn}^{(\nu)} = \nabla \times (\mathbf{v} (\nabla^2 \psi_{mn}^{(\nu)} + k^2 \psi_{mn}^{(\nu)})). \quad (33)$$

Systemi, johon  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmää aiotaan käyttää, koostuu pallomaisista sirottajista, joten on myös loogista käyttää pallokoordinaatistoa. Pallokoordinaatisto mahdollistaa, että avaruuden piste voidaan esittää radiaalisen muuttujan  $r$  ja kahden kulman  $\theta$  sekä  $\phi$  avulla. Valitaan  $\mathbf{r}$  vektorifunktioksi  $\mathbf{v}$ , jolloin ratkaisuksi saadaan

$$\mathbf{M}_{mn}^{(\nu)} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi_{mn}^{(\nu)}), \quad (34)$$

ja

$$\mathbf{N}_{mn}^{(\nu)} = \frac{\nabla \times (\nabla \times (\mathbf{r}\psi_{mn}^{(\nu)}))}{k}. \quad (35)$$

Seuraavaksi pitää ratkaista minkälainen on skalaarifunktio  $\psi_{mn}^{(\nu)}$ . Lähdetään etsimään skalaarifunktion ratkaisua yhtälön (33) oikealta puolelta:

$$\nabla^2 \psi_{mn}^{(\nu)} + k^2 \psi_{mn}^{(\nu)} = 0, \quad (36)$$

Yhtälö (36) ja yhtälön (33) vasen puoli tunnetaan yleisesti Helmholtzin yhtälöinä, joille ratkaisu löydetään muuttujien separoinnilla. Esitetään aluksi  $\psi_{mn}^{(\nu)}(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$  ja ratkaistaan funktiot  $R(r)$ ,  $\Theta(\theta)$  sekä  $\Phi(\phi)$ , joita käyttämällä saadaan ratkaisut sisään-tulevalle ja ulosmenevälle ratkaisulle erikseen

$$\psi_{mn}^{(1)} = \sqrt{\frac{2}{n(n+1)}} j_n(kr) Y_{mn}(\cos(\theta), \phi), \quad (37)$$

ja

$$\psi_{mn}^{(3)} = \sqrt{\frac{2}{n(n+1)}} h_n(kr) Y_{mn}(\cos(\theta), \phi). \quad (38)$$

Yhtälöissä (37) ja (38)  $Y_{mn}$  on palloharmoninen funktio (*spherical harmonics*),  $j_n$  Besselin pallo- ja  $h_n$  Hankelin funktio [18, 4]. Nyt yhtälöiden (37) ja (38) avulla saadaan johdettua kaavat  $\mathbf{M}_{mn}^{(\nu)}$ :lle ja  $\mathbf{N}_{mn}^{(\nu)}$ :lle, joissa  $\nu$  voi saada arvot 1 tai 3. Vektorit ovat nähtävissä esimerkiksi lähteistä [18, 4].

Yhtälössä (33) etsittiin, kuinka sähkökenttä voidaan esittää vektorien  $\mathbf{M}_{mn}^{(\nu)}$  ja  $\mathbf{N}_{mn}^{(\nu)}$  avulla, mutta näiden vektorien lineaarikombinaatiolla saadaan laskettua myös yksiselitteisiä mielivaltaisia kenttiä. Vektorit  $\mathbf{M}_{mn}^{(\nu)}$  ja  $\mathbf{N}_{mn}^{(\nu)}$  toteuttavat vektoriaaltoyhtälön, jos ne kelpaavat kantavektoreiksi  $\nu$ :n ollessa vakio kaikilla  $m$  ja  $n$  arvoilla. Kirjassa [18] on osoitettu, että kyseiset vektorit ovat lineaarisesti riippumattomia ja siksi ne kelpaavat kan-



tavektoreiksi. Tästä syystä on mahdollista esittää mielivaltainen kenttä, joka toteuttaa Maxwellin yhtälöt muodossa

$$\mathbf{E} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (a_{mn1} \mathbf{M}_{mn}^{(\nu)} + a_{mn2} \mathbf{N}_{mn}^{(\nu)}), \quad (39)$$

ratkaisemalla kenttää vastaavat kertoimet  $a_{mn1}$  ja  $a_{mn2}$ .

Esittämällä herättävä  $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ , sironnut  $\mathbf{E}^{\text{sca}}$  ja kappaleen sisäinen kenttä  $\mathbf{E}^{\text{int}}$  kehittämän (39) mukaisesti, on mahdollista löytää reunaehtoa

$$(\mathbf{E}^{\text{inc}} + \mathbf{E}^{\text{sca}} - \mathbf{E}^{\text{int}}) \times \hat{\mathbf{e}}_r = (\mathbf{H}^{\text{int}} + \mathbf{H}^{\text{sca}} - \mathbf{H}^{\text{int}}) \times \hat{\mathbf{e}}_r = 0 \quad (40)$$

tutkimalla relaatio, jota kutsutaan  $\mathbf{T}$ -matriisiksi [19].  $\mathbf{T}$ -matriisilla voidaan laskea, kuinka siroavan kentän kertoimet  $a_{mnp}$  saadaan laskettua herättävän kentän kertoimista  $f_{mnp}$  matriisitulon avulla

$$\begin{pmatrix} a_{mn1} \\ a_{mn2} \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} f_{mn1} \\ f_{mn2} \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Toisin sanoen  $\mathbf{T}$ -matriisilla voidaan kuvata, kuinka sirottaja sirottaa herättävän kentän. Jos sirottaja on yksittäisen pallo, niin  $\mathbf{T}$ -matriisi voidaan korvata Lorenz-Mie kertoimilla, jolloin puhutaan Mie-ratkaisusta [17].

## 2.3 Superpositio $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmä

Palloharmonisten funktioiden ja  $\mathbf{T}$ -matriisin jälkeen on aika esittää näitä hyödyksi käytävä superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmä, jolla pystytään laskemaan herättävän kentän ja usean kappaleen välinen vuorovaikutus. Kutsutaan tätä sirottajajoukkoa klusteriksi. Seuraava esitys perustuu Mackowskin artikkeliin [20] ja hänen kirjoittamaansa MSTM-manuaaliin (*Multiple Sphere  $\mathbf{T}$ -Matrix*) [4].

Superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmä perustuu yhtälössä (41) esiintyvän  $\mathbf{T}$ -matriisin etsimiseen sirottajajoukolle. Olkoon sirottajia  $N$  kappaletta. Yhtälöstä (7) nähdään, että siroava kenttä on herättävän kentän sekä yksittäisistä sirottajista sironneiden kenttien summa. Esitetään herättävä kenttä palloharmonisten funktioiden (39) kanssa seuraavasti

$$E_0^i = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [f_{mn1}^i \mathbf{M}_{mn}^{(1)}(kr^i, \theta^i, \phi^i) + f_{mn2}^i \mathbf{N}_{mn}^{(1)}(kr^i, \theta^i, \phi^i)], \quad (42)$$

sekä yksittäisestä sirottajasta  $i$  sironnut kenttä

$$E_s^i = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [a_{mn1}^i \mathbf{M}_{mn}^{(3)}(kr^i, \theta^i, \phi^i) + a_{mn2}^i \mathbf{N}_{mn}^{(3)}(kr^i, \theta^i, \phi^i)]. \quad (43)$$

Koska sironneen kentän herättää muista sirottajista tullut kenttä sekä alkuperäinen herättävä kenttä (katso yhtälö (11)), niin voidaan kirjoittaa [4]

$$a_{mnp}^i = \sum_{p'=1}^2 \bar{a}_{np'p} (f_{mnp'}^i + \sum_{j(\neq i)=1}^N \sum_{l=1}^{L_j} \sum_{k=-l}^l \sum_{q=1}^2 H_{mnp'klq}^{i-j} \alpha_{klq}^j), \quad (44)$$

jossa  $H_{mnp'klq}^{i-j}$  on Hankelin funktioihin perustuva translaatiomatriisi, joka kuvaa kenttien koordinaatistojen välisiä muunnoksia,  $L_s$  katkaisuraja, jolla säädellään ratkaisun suppevuutta ja  $\bar{a}_{np'p}$  ovat  $\mathbf{T}$ -matriisin elementtejä, jotka ovat pallon tapauksessa Lorenz-Mie kertoimia. On hyvä huomata, että jos asetetaan sirottajien lukumäärä  $N = 1$  niin yhtälö (44) saadaan yhtälön (41) tapaiseen muotoon eli yhden sirottajan ongelmaksi.

Yhtälö (44) saadaan muutettua muotoon (41), missä klusterin vuorovaikutus voidaan esittää yksittäisenä  $\mathbf{T}$ -matriisin avulla eli toisin sanoen klusteri alkaa käyttäytyä yksittäisen sirottajan kaltaisesti [4].

### 3 Algoritmi

$R^2T^2$  on ohjelmoitu korvaamalla osia RT-CB-ohjelmasta [10], joka ratkaisee säteilynkuljetusyhtälön (yhtälö (30) ulkoisen havaitsijan kannalta) käyttämällä Monte Carlo -menetelmää (MC). MC-menetelmän peruseräite on, että ongelmia voidaan ratkaista generoimalla laskennallisesti esimerkkitaipauksia ja tulos paranee, mitä enemmän näitä esimerkkitaipauksia pystytään laskemaan. Tämä on analoginen sen suhteen, että kun tarkastelee yhtälöä (23), niin kappaleesta sironnut kenttä koostuu kentistä (tai säteistä), jotka ovat sironneet kaikkia mahdollisia polkuja. MC-menetelmällä voidaan generoida näitä polkuja ja tulos on sitä parempi, mitä enemmän polkuja saadaan generoitua. MC-algoritmin suppenevuutta  $R^2T^2$ :n tapauksessa on tutkittu tämän luvun lopussa. Analogiassa on kuitenkin tärkeää ymmärtää, että fysiikan kannalta tämän kaltaista polkujen läpikäyntiä ei ole olemassa, vaan monisironna on pelkkä matemaattinen konstruktio [13]. Algoritmin perusidea on generoida säteitä annettuun tilavuuteen, seurata säteiden satunnaista kulkua tilavuudessa, kerätä säteiden energiaa ja generoida uusi säde, kun vanha säde menettää tarpeeksi energiaansa. Tämän teoksen kirjoitushetkellä koherentin takaisinsironnan laskeva osaa (CB) ei ole vielä  $R^2T^2$ -ohjelmaan implementoitu ja siksi vain säteilynkuljetuksen laskeva osa on toiminnassa. Koherentti takaisinsironna johtuu takaisirontasuunnassa havaittavasta konstruktiiivisesta interferenssistä, joka poistui teorialuvussa mainitun tikapuuapproksimaation takia.

Suurin ero RT-CB:n ja  $R^2T^2$ :n välillä on se, kuinka  $R^2T^2$  käsittelee kenttiä. RT-CB:ssä käsitellään kaikki kaukokenttinä (yhtälö (23)), kuten säteilynkuljetusyhtälön johdossa on näytetty, mutta  $R^2T^2$  ottaa myös lähikentät huomioon (yhtälö (14)), mikä saadaan aikaan esittämällä sähkökentät palloharmonisten funktioiden avulla ja laskemalla vuorovaikutukset käyttämällä superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmää. Kaukokenttien käyttö mahdollistaa sen, että seuraava sirotaaja näkee aina kohti tulevan kentän tasoaaltona, mikä mahdollistaa Markovin ketjut, joissa edellisellä sironnalla ei ole vaikutusta seuraavaan sirontaprosessiin. Sen sijaan  $R^2T^2$ :ssa peräkkäiset vuorovaikutukset lasketaan VAS-kenttien avulla, missä peräkkäiset klusterit vuorovaikuttavat keskenään. Täten ensimmäisen klusterin vuorovaikutus näkyy myös kentässä, joka on sironnut  $n$  kertaa. Tämä on yhteensopiva kertalukusirontakehitelmän (11) kanssa, sillä kaikki polut käydään läpi ja kenttä muuttuu sirotaajien välisessä vuorovaikutuksessa.

Aloitetaan käymään  $R^2T^2$ :n algoritmia läpi. Tekstin tueksi kannattaa katsoa kuvaa 3, jonka avulla määritellään tässä luvussa käytettyjä käsitteitä. Kutsutaan kuvassa 1 olevaa diskreetteistä sirottajista koostuvaa systeemiä kappaleeksi ja esittäkään kuva 3 kappaleen sisusta. Määritellään sirottaja yksittäisenä pallona, jonka sädettä merkitään yksiköttömänä  $kr$ :na, jossa  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  on aaltoluku ja  $r$  on fysikaalinen säde samassa yksikössä kuin aallonpituus  $\lambda$ . Sirottajat ovat kuvassa merkittynä oransseina palloina. Jokainen sirottaja kuuluu klusteriin, jossa on ajon aikana aina vakiomäärä  $n$  sirottajia. Klusterin kokoa merkitään  $kR_k$ , jossa  $R_k$  on klusterin fysikaalinen koko ja se saadaan tiheyden  $\rho$  määritelmästä  $R_k = r\sqrt[3]{\frac{n}{\rho}}$ . Klusterien keskipiste voi sijaita missä vain sisäkuoren sisällä, joka määritellään kaavasta  $R_1 = R - R_k$ , jossa  $R$  on  $R^2T^2$ :lle annettu ulkokuoren säde, jonka sisällä sirottajat täytyy sijaita. Vertailuksi voidaan sanoa, että  $R^2T^2$ :n klusteri korvaa RT-CB:ssä esiintyvät yksittäiset sirottajat.

Ennen  $R^2T^2$ :n käyttöä tarvitsee laskea palloklusterien koherentti  $\mathbf{T}$ -matriisi, jota käytetään koherenttien kenttien (katso yhtälö (15)) laskemiseen herättävän kentän kertoimista yhtälön (41) mukaisesti.  $R^2T^2$  käyttää Johannes Markkasen ohjelmoimaa superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmää, joka laskee koherentin  $\mathbf{T}$ -matriisin generoimalla erilaisia palloklustereita ja keskiarvoistamalla näistä syntyvät  $\mathbf{T}$ -matriisit. Ohjelma antaa myös epäkoherentin sirontakertoimen  $\kappa_{\text{sca\_incoh}}$  ja vapaan avaruuden absorptiokertoimen  $\kappa_{\text{abs}}$ , jotka kuvaavat kuinka väliaine sirottaa tai absorboi aineessa propagoivaa säteilyä. Näitä kertoimia käytetään sitten vapaan matkan  $l$  laskemiseen kaavasta

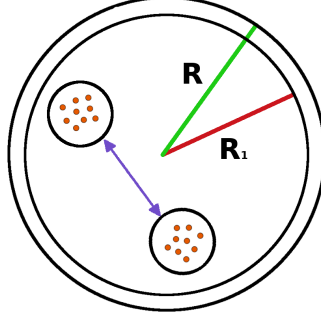
$$l = \frac{1}{\kappa_{\text{sca\_incoh}} + \kappa_{\text{abs}}}, \quad (45)$$

joka kuvaa matkaa, jonka säde etenee keskimäärin väliaineessa törmäämättä sirottajaan. Näin saadaan arvioitua klustereista johtuva vapaa matka, mikä on parempi approksimaatio verrattuna RT-CB:n vapaaseen matkaan, jota arvioidaan tilastollisesta kaavasta

$$l = \frac{4\pi a^3}{C_{\text{ext}}3v_f}, \quad (46)$$

jossa  $C_{\text{ext}}$  on yksittäisen sirottajan ekstinktiiovaikutusala,  $a$  sirottajan säde ja  $v_f$  tilavuustiheys.

Superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän arvio vapaasta matkasta (yhtälö (45)) on myös realistisempi, sillä kentän ekstinktion pitää ottaa huomioon, että sironta tapahtuu  $R^2T^2$ -ohjelmassa klustereista, eikä yksittäisistä sirottajista. Toiseksi tilastollinen vapaa matka-arvio ei vastaa todellisuutta, kun aine on tiheää, koska sirontaprosessit eivät ole enää



**Kuva 3:** Havainnollistava kuva  $R^2T^2$ :n geometrian käsittelystä ja klustereista. Kutsutaan ulkokuoreksi palloa, jonka säde  $R$  on merkitty vihreällä. Sisäkuoren säde  $R_1$  on merkitty punaisella ja pienet oranssit sirottajat sisältävät pallot ovat klustereita. Sisäkuoren ja ulkokuoren välinen erotus on klusterin säde  $R_k$ . Klusterit vuorovaikuttavat keskenään vapaan avaruuden sirontakentässä, joka lasketaan aina kun säde propagoi uuteen paikkaan.

riippumattomia [22]. Täten tarvitaan toisenlaisia keinoja vapaan matkan laskemiseen, kuten superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmä. Tästä herää mielenkiintoinen kysymys, voiko RT-CB:tä parantaa pelkästään käyttämällä parempaa vapaata matkaa [23]. Tapauksissa joita tähän tutkielmaan on laskettu, on huomattu, että 20 palloa klusterissa on sopiva määrä oikean vapaan matkan laskemiseen ainakin pienille systeemeille, sillä vapaissa matkoissa ei ole suurta eroa 20 tai 40 sirottajan klusterien välillä.

Edellä mainitut koherentti  $\mathbf{T}$ -matriisi ja vapaa matka  $l$  ovat ainoat esilaskettavat arvot  $R^2T^2$ :n alustusta varten. Alustuksen yhteydessä on hyvä huomioida, kuinka  $R^2T^2$  käsittelee kappaleen kokoa ja yksiköitä.  $R^2T^2$ :lle annetaan ulkokuoren säde  $R$ , mutta jotta kokoa voidaan käsitellä vaivatta, arvotaan klustereiden paikka sisäkuoren  $R_1$  sisältä. Käyttäjän tarvitsee vain syöttää ohjelmalle pakkaustiheys  $\rho$ , sirottajan säde, taitekerroin ja ulkokuoren säde. Tämän jälkeen  $R^2T^2$ :ssa, kuten myös RT-CB:ssä, kaikki yksiköt muutetaan optisiksi syvyyksiksi jakamalla pituudet vapailla matkoilla, jolloin eksponenttitekijä propagoinnin yhteydessä yksinkertaistuu kaavaan  $e^{-\tau}$ , jossa  $\tau$  on kuljettu matka väliaineessa optisina syvyyksinä. Tästä eteenpäin myös kaikki luvussa ilmoitetut etäisyydet ovat optisina syvyyksinä. Pakkaustiheys tai tilavuustiheys määritellään kaavasta

$$\rho = \frac{V_{\text{sca}}}{\frac{4}{3}\pi R^3}, \quad (47)$$

jossa  $V_{\text{sca}}$  on sirottajien yhteenlaskettu tilavuus kappaleen sisällä.

Algoritmin suoritus alkaa sillä, että valitaan yksi kuudesta polarisaatiotilasta, jotka esitetään ominaisdiffuusi-intensiteettivektorin (yhtälö (28)). Kutsutaan tästä eteenpäin

Stokesin parametreiksi) avulla seuraavasti:

$$\mathbf{I}_{\pm Q} = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{I}_{\pm U} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{I}_{\pm V} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad (48)$$

jossa  $\mathbf{I}_{\pm Q}$  ja  $\mathbf{I}_{\pm V}$  kuvaa neljää lineaari- sekä  $\mathbf{I}_{\pm U}$  kahta mahdollista ympyräpolarisaatiota [17].

Valitulla polarisaatiotilalla generoidaan  $N$  kappaletta säteitä, joilla algoritmi generoi yksittäisiä tuloksia, jotka kerätään lopulliseen tulokseen. Käymällä läpi kaikki polarisaatiotilat saadaan kokonaisratkaisu, joka on esitetty Muellerin matriisilla. Muellerin matriisi kuvaa, kuinka kappale muuttaa Stokesin parametreilla esitetyn herättävän kentän siraavaksi kentäksi [17]. Kappaleen ollessa pallomainen (pallogeometria) kaikki lineaariset Muellerin matriisielementit on mahdollista laskea käyttämällä yhtä lineaaripolarisaatiota. Ympyräpolarisaatiosta riippuvat Muellerin matriisielementit täytyy puolestaan ratkaista käyttämällä ympyräpolarisaatiota.  $\mathbf{R}^2\mathbf{T}^2$ :ssa ympyräpolarisaatiota ei ole vielä toteutettu ja siksi vain lineaariosat voidaan laskea.

Säteitä aloitetaan generoimaan valitsemalla satunnainen paikka pallon alapuolelta. Olkoon  $u_x$  tasaisesti jakautunut satunnaisluku väliltä  $[0, 1[$ . Ensimmäinen sirontapaikka saadaan täten pallokoordinaatistossa kaavoista

$$r_1 = R_1 \cdot \sqrt{u_1}, \quad \phi = 2\pi u_2, \quad (49)$$

minkä jälkeen säde propagoi aineeseen herättävän kentän suuntaisesti, koska kappaleella ei ole selvää rajapintaa, jossa taittumista voisi tapahtua. Säteen propagoima matka  $r_p$  kappaleeseen saadaan muutetusta kosinilauseesta

$$r_p = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{X} + \sqrt{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X})^2 + \mathbf{R}_1^2 - \mathbf{X}^2} \quad (50)$$

jossa  $\mathbf{X}$  on säteen paikka ennen propagointia ja  $\mathbf{k}$  on säteen kulkusuunta. Tämä on nyt piste, jossa ensimmäinen sirontaprosessi tapahtuu.

Aluksi generoidaan tasoaalto esittämällä se palloharmonisilla funktioilla ja generoidaan ensimmäinen klusteri pisteeseen, jonne säde ensimmäisen kerran propagoi. Palloharmoniset funktiot vaativat tietyn verran kertoimia, jotta koko sirottava kappale saadaan katettua.  $\mathbf{R}^2\mathbf{T}^2$ :n tapauksessa tämä tarkoittaa klusterin kokoa. Tasoaallon kertoimet

laitetaan alkamaan aina pisteestä, jossa ensimmäinen klusteri sijaitsee ja tämän jälkeen siirrot tehdään suhteessa ensimmäiseen sirottajaan. Tästä voi kuitenkin seurata ongelmia liittyen detektoreihin.

Detektorit ovat kaukokentässä sijaitsevia ja tasaisesti pallon pinnalla jakautuneita havaitssijaita, jotka keräävät intensiteettiä. Jotta sähkökentät saadaan laskettua kaukokentässä, detektorin luona tarvitaan kantavektoreita. Detektorit ovat suunnattu ensimmäisen sirottajan suhteen origoon ja siksi detektorien paikat muuttuvat aina sironnan aikana. Tämä ei kuitenkaan ole ongelma, jos detektorien etäisyys origosta on pitkä (esimerkiksi kehitysvaiheessa on käytetty etäisyyttä 2400 kertaa aallonpituus), jolloin origon paikan pienellä muutoksella ei pitäisi olla suurta vaikutusta. Koherentin takaisinsironnan laske-  
misessa tällä voi kuitenkin olla negatiivinen vaikutus tuloksiin, koska vaihe-erot täytyy ottaa huomioon.

Säteen mukana kulkee kenttä, joka esitetään palloharmonisilla funktioilla samalla tavalla kuin yhtälössä (42). Siirontaprosessissa siroavan kentän kertoimet  $\mathbf{a}_i$  lasketaan herättävän kentän  $\mathbf{a}_{in,i}$  kertoimista yhtälön (44) mukaisesti. Halutaan kuitenkin myös saada laskettua epäkoherentin kertoimet  $\mathbf{a}_{incoh,i}$  käyttämällä epäkoherentin kentän yhtälöä (15), johon koherentin kentän osuus saadaan sijoittamalla  $\mathbf{T}$ -matriisiyhtälö (41) ja käyttämällä esilaskettua koherenttia  $\mathbf{T}$ -matriisia:

$$\mathbf{a}_{incoh,i} = \mathbf{a}_i - (\mathbf{T}_{ii}\mathbf{a}_{in,i} + \mathbf{T}_{ij}\mathbf{a}_{in,j}), \quad i \neq j \quad (51)$$

Tässä ensimmäisen sironnan yhteydessä kertoimet  $\mathbf{a}_{in,i}$  on asetettu tasoaalloille, mutta muilla siirontakerroilla kertoimet saadaan edellisen sironnan siirontakertoimista.

Intensiteetti ensimmäisellä säteellä on aina 1 ja propagoidessaan sisään aineeseen, siitä vähennetään osuus, joka pääsee läpi siroamatta. Tämän jälkeen suoraan läpi pääsevää intensiteettiä ei tarvitse laskea kyseiselle säteelle, vaan säde menettää ainoastaan intensiteettiään absorptioon ja kuorinnan takia.

Absorptio saadaan selvitettyä ekstinktiokertoimista yhtälöä (51) laskettaessa. Aina kun säde propagoi uuteen paikkaan ja lasketaan kentän kertoimet, saadaan samalla laskettua VAS-kenttien siirontavaikutusalat absorptiolle  $C_{\text{abs}}$  ja siironnalle  $C_{\text{sca}}$ . Vuorovaikutusalojen avulla saadaan laskettua ekstinktiokerroin, jota käyttämällä lasketaan säteelle jäänyt intensiteetti  $I_{n+1}$  absorptioon jälkeen kaavasta

$$I_{n+1} = I_n \frac{C_{\text{sca}}}{C_{\text{sca}} + C_{\text{abs}}}, \quad (52)$$

jossa  $I_n$  on säteen intensiteetti ennen absorptiota.

Kun absorptio on otettu huomioon, päästään kuorintaan. Yksinkertaisissa säteilynkuljetusohjelmassa säteitä kuljetetaan kappaleessa ja kun säde tulee ulos kappaleesta, se kerätään ja uusi säde generoidaan. Tulos suppenee huonosti verrattuna kuorintaan, sillä kuorinnassa tavallaan generoidaan monta sädettä samanaikaisesti, jolloin myös tulos saadaan nopeammin.  $R^2T^2$ :ssa käytetään RT-CB:n tapaan kuorintaa, jossa säde ei koskaan kulje ulos kappaleesta vaan se pakotetaan propagoimaan kappaleen sisällä. Kuorinta tulee siitä, että sirontaprosessin yhteydessä energiaa kerätään kaukokentässä sijaitsevilla detektoreilla. Kuorintatekniikan on kehittänyt Yusef-Zadeh, Morris ja White [21]. Kuorinnassa täytyy ottaa huomioon kappaleen muoto, sillä detektorin suuntaan lähtenyt säde ei saa kaikkea energiaa detektorille asti kappaleessa esiintyvän ekstinktion takia. Esimerkiksi, jos detektori on suunnassa  $\mathbf{k}$  ja sironta tapahtui paikassa  $\mathbf{X}$ , niin eksponentiaalinen vaimeneminen täytyy ottaa huomioon matkalla  $\Delta X$  detektorin suunnassa yhtälön

$$\Delta X = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{X} + \sqrt{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X})^2 + \mathbf{R}^2 - \mathbf{X} \cdot \mathbf{X}} - \mathbf{R}_k \quad (53)$$

mukaisesti.

$R^2T^2$ :ssa kulkee kaksi eri intensiteettiä, joista toinen saadaan sähkökentistä (merkitään  $I_i^T$ ) ja toinen on algoritmin seuraama arvo  $I_n$ . Sähkökenttiä käytetään Stokesin parametrien laskemiseen ja tämä skaalataan algoritmin intensiteetillä  $I_n$ , jolloin yhtälössä (51) esiintyviä kentän kertoimia ei tarvitse skaalata erikseen. Näitä kahta intensiteettiä käytetään kuorinnan yhteydessä kerätyn kokonaisintensiteetin  $I_d$  laskemiseen kaavasta

$$I_d = I_n \sum_{i=1}^N \frac{I_i^T}{\sum_{j=1}^N I_j^T} e^{-\Delta X_i} A_i, \quad (54)$$

jossa  $N$  on detektorien lukumäärä,  $I_i^T$  detektorilla  $i$  havaittu pinta-alalla painotettu Stokesin parametrit kaukokentässä,  $e^{-\Delta X_i}$  kuvaa intensiteetin vaimenemista kappaleessa,  $A_i$  on normituskerroin, jolla intensiteetti normitetaan arvoon yksi avaruuskulman yli integroitaessa, ja  $I_n$  on algoritmin seuraama intensiteetti. Intensiteetti  $I_i^T$  voidaan laskea epäkoherentista kentistä  $\mathbf{E}_{\text{incoh}}^{\text{sca}}$  tai vapaan avaruuden sirontakentistä  $\mathbf{E}^{\text{sca}}$  riippuen valinnasta. Valinnan vaikutuksesta kuorintaan on käsitelty luvussa tulokset. Sironneelle säteelle jää kuorinnan jälkeen intensiteettiä  $I_{n+1} = I_n - I_d$ . Nyt säde on sironnut ensimmäisen kerran ja tarvitaan löytää seuraava paikka, johon säde propagoi. Seuraavan paikan arpoaminen tapahtuu muodostamalla intensiteetikartta avaruuskulman yli epäkoherenteista



tai VAS-kentistä. Intensiteettikartta lasketaan samoissa pisteissä, joissa myös detektorit sijaitsevat. Riippumatta siitä käytettiinkö kuorinnassa epäkoherenttia- vai VAS-kenttää, intensiteettikartta voidaan muodostaa käyttämällä samoja intensiteettejä, joita käytettiin kuorinnan yhteydessä. Lasketuista intensiteeteistä luodaan kumulatiivinen kertymäfunktio  $P$ , josta valitaan suunta  $k$  tasajakautuneen satunnaisluvun  $u \in [0,1[$  avulla kaavan

$$P_k \leq u \sum_{i=1}^N P_i < P_{k+1}, \quad (55)$$

mukaan, jossa  $N$  on detektorien lukumäärä. Tämän jälkeen valitaan pistettä  $P_k$  vastaavat kulma  $\theta_i$  ja  $\phi_i$ , mutta koska detektorien lukumäärä on harva, täytyy tarkempi suunta arpoa kulma-alueen sisällä, sillä muuten sironta tapahtuisi aina diskreetistä hilasta.

Arvonta tehdään olettamalla detektorin ympäristö tasajakautuneeksi. Tarkempi  $\phi$ -kulma saadaan kaavasta

$$\phi = \phi_i - \Delta\phi + 2\Delta\phi u, \quad (56)$$

jossa  $\Delta\phi$  on detektorien välinen etäisyys  $\phi$ -kulmalla ja  $\phi_i \in [0, \pi[$ . Kulma  $\theta$  saadaan puolestaan satunnaisen luvun arvonnasta pallokoordinaatistosta.

Merkitään yhtälöstä (55) valittua detektorin  $i$   $\theta$ -kulmaa  $\theta_b$ :llä ja olkoon detektorista  $i$  molemmilla puolilla  $\theta$ -kulmaa detektorit  $\theta_a$  ja  $\theta_c$  niin, että  $\theta_a < \theta_b < \theta_c$ . Olkoon  $\theta_x \in ]0, \pi[$ ,  $\theta_i = \frac{1}{2}(\theta_a + \theta_b)$  ja  $\theta_{i+1} = \frac{1}{2}(\theta_b + \theta_c)$  jolloin  $\theta$  kulma saadaan arvottua kaavoista

$$\Delta y = \frac{1}{2}(\cos(\theta_i) + 1) - \frac{1}{2}(\cos(\theta_{i+1}) + 1), \quad (57)$$

$$y_1 = \frac{1}{2}(\cos(\theta_{i+1}) + 1), \quad (58)$$

ja

$$\theta = \arccos(2(y_1 + \Delta y \cdot u) - 1), \quad (59)$$

mitkä on johdettu tasajakaumasta pallon pinnalta. Yhtälöissä (56)–(59)  $u_x$ :t ovat tasajakautuneita satunnaislukuja väliltä  $[0, 1[$ . Pallon navat täytyy käsitellä erikseen.

Paikan arvonnassa menetelmässä on omat huonot puolensa, sillä todellisuudessa pisteen  $(\theta_i, \phi_i)$  ympäristö ei ole tasaisesti jakautunut, mistä tulee virhettä tuloksiin. Pitämällä kulmien lukumäärää suurena, voidaan virheitä minimoida ja siksi kehitysprosessin aikana  $\theta$ -kulma on jaettu 64:ään ja  $\phi$ -kulma 48:aan kulmaan. Silti  $R^2T^2$ :n ensimmäistä versiota

tehdessä huomattiin, että vielä näillä kulmilla aiheutuu pientä muutosta tuloksiin. Kaksinkertaistamalla pisteiden lukumäärän tulokset hieman muuttuivat, mutta tämä ei ole kehityksen kannalta merkittävää.

Kun paikka on arvottu, säde propagoi matkan

$$\tau = -\ln(u), \quad (60)$$

jossa  $u$  on tasajakautunut satunnaisluku  $u \in [0,1[$ , mikä muutetaan edelleen paikkavektoriaksi kaavalla

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} + 2R_k\mathbf{K} + \tau\mathbf{K}, \quad (61)$$

jossa  $R_k$  on klusterin säde ja  $\mathbf{K}$  on säteen suunta. Lisäämällä etäisyyteen kaksi klusterin sädettä, estetään kahden klusterin päällekkäisyys, mikä ei ole sallittua  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän takia. Jos säde propagoi sisäkuoren ulkopuolelle  $Y^2 > R_1^2$ , niin arvotaan uusi suunta ja paikka.

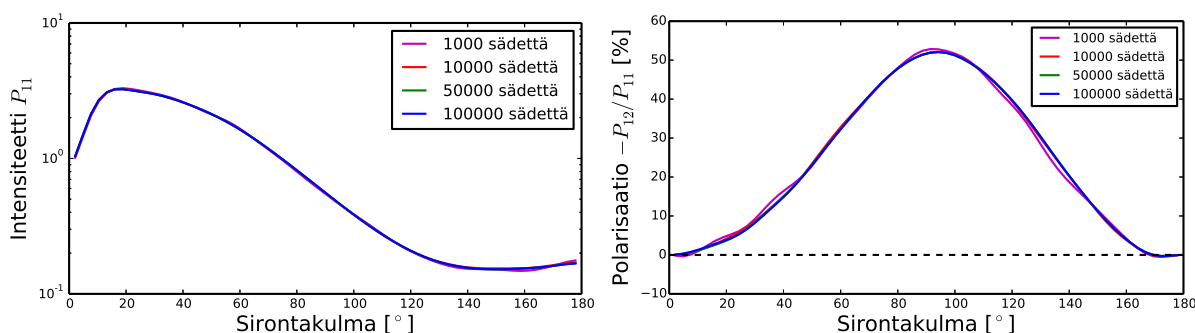
Seuraava klusteri generoidaan edellä saatuun paikkaan ja algoritmi jatkaa laskemalla uudesta klusterista sironneen kentän kertoimet yhtälön (51) mukaisesti. Tämän jälkeen arvontaan uusi paikka ja otetaan absorptio, mitä seuraa kuorinta. Tätä tehdään niin kauan kunnes algoritmin seuraama intensiteetti  $I_n$  pysyy tietyn rajan yläpuolella, mitä kutsutaan katkaisuintensiteetiksi. Kun katkaisuintensiteetti alitetaan, niin generoidaan uusi säde alkamaan satunnaisesta paikasta yhtälöistä (49) ja säteen annetaan propagoida jälleen kappaleeseen edellä esitetyllä tavalla. Säteitä generoidaan  $N$  kertaa yhdellä polarisaatiotilalla, jonka jälkeen vaihdetaan toiseen polarisaatiotilaan ja generoidaan jälleen  $N$  sädettä. Kun kaikki polarisaatiotilat on käyty läpi, algoritmi on valmis.

### 3.1 Tulosten suppenevuus ja laskenta-aika

Aluksi R<sup>2</sup>T<sup>2</sup>-ohjelmaa tutkittiin käyttämällä suuria määriä säteitä ( $10^6$ ) ja matalaa katkaisuintensiteettiä  $10^{-7}$  mahdollisen kohinan poistamiseksi. Laskentaresurssien säästämiseksi jo ohjelman kehitysvaiheessa on kuitenkin hyvä tutkia algoritmista saatavien tuloksien suppenevuutta ja siksi tässä luvussa käsitellään katkaisuintensiteetin ja säteiden määrän vaikutusta (katso kuvaajat 4 ja 5).

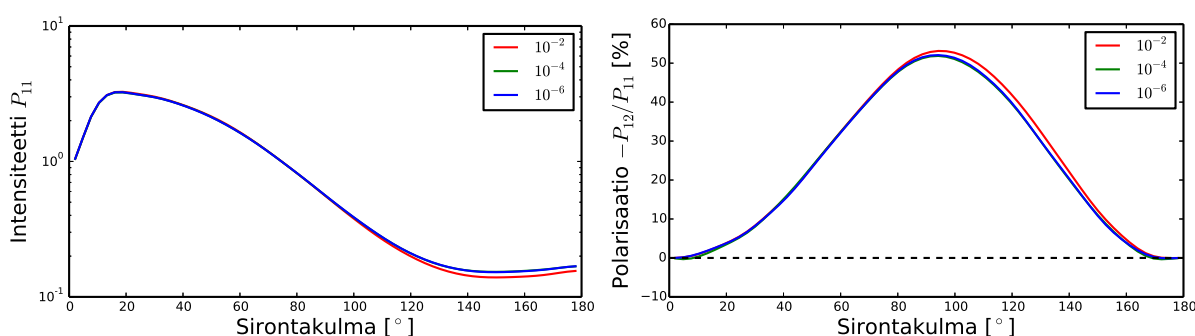
Kuvaajasta 4 nähdään, ettei  $10^5$  ja  $10^3$  säteen välillä ole suurta eroa, mutta jo  $10^4$  tapauksessa alkaa näkyä pientä eroavaisuutta  $10^6$  tuloksiin. Kuvaajasta 5 nähdään, ettei

## Säteiden määrän vaikutus tulosten konvergoitumiseen



**Kuva 4:** Säteiden määrän vaikutus tulosten suppenevuuteen. Kappaleen koko  $kR=86.028$ , tiheys  $\rho=0.05$  ja vapaa matka  $kl=119.43$ . Sirottajan koko  $kr = 2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Katkaisuintensiteetti oli  $10^{-6}$ .

## Katkaisuintensiteetin vaikutus tulosten konvergoitumiseen



**Kuva 5:** Katkaisu intensiteetin vaikutus tulosten suppenevuuteen. Kappaleen koko  $kR=86.028$ , tiheys  $\rho=0.05$  ja vapaa matka  $kl=119.43$ . Sirottajan koko  $kr = 2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Säteiden määrä oli  $10^5$ .

katkaisuintensiteeteillä  $10^{-4}$ – $10^{-6}$  ole suurta eroa, mutta  $10^{-3}$  on liian korkea, mikä nähdään pienenä intensiteettifunktion muutoksena takasiirontakulmilla sekä huomattavana muutoksena polarisaatiossa. Täten päätin, että esitetyissä tuloksissa käytetään vähintään  $5 \cdot 10^4$  sädettä ja katkaisuintensiteettiä  $10^{-4}$ , jottei koon tai sirottajan ominaisuuksien varioimisella olisi suurta vaikutusta lopullisiin tuloksiin. Silti muutamissa 40 pallon tapauksessa käytetyt arvot eivät tuottaneet täysin konvergoitunutta tulosta, vaikkakin virhe oli hyvin vähäinen, kuten kuvaajassa 4 tapauksien  $10^3$  ja  $10^5$  välillä. Näissä tapauksissa lisäsin säteiden määrää ja/tai laskin katkaisuintensiteettiä.

Toinen tärkeä asia algoritmin kehityksen kannalta on laskenta-ajan käyttö. Gprof-profilointityökalua käytettiin laskenta-ajan analysoimiseksi ja tilastoista nähtiin odotetusti, että valtaosa ajasta kuluu superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmässä. Kiinnostavinta oli kuitenkin huomata, että suurin osa ajasta kuluu vaiheessa, jossa klusterit vuorovaikuttavat keskenään. Kuorinnassa käytetään funktiota, joka laskee intensiteetin yksittäisen detektorin kohdalla, ja tämä käytti vain 10% laskenta-ajasta. Tämä tarkoittaa, että jos

halutaan nostaa detektorien lukumäärää, ei toimenpiteellä ole suurta vaikutusta ohjelman kokonaissuoritus aikaan. Yleinen kesto on ollut 100–400 tuntia riippuen pallojen lukumäärästä klusterista ja siitä, onko systeemissä absorptiota. Lyhyimmät tapaukset ovat kestäneet muutamia kymmeniä tunteja (esimerkiksi 20 pallon tapaus  $10^3$  säteellä).

Lisäksi hyvin harvoja kappaleita ( $\rho < 0.05$ ) laskettaessa on tärkeä huomioida, että  $R^2T^2$ :n käyttämä superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän tulos saattaa konvergoitua huomomin verrattuna tiheiden kappaleiden ( $\rho > 0.05$ ) tuloksiin. Tämä johtaa kasvaviin laskenta-aikoihin kappaleen harventuessa.

Yksi ylimääräinen mielenkiintoinen huomio vertailukuvaajasta 4, josta nähdään, että jo pelkällä tuhannella säteellä saadaan aikaan melko hyvin konvergoituneita tuloksia. Intensiteettifunktio on lähes sama ja polarisaatiofunktioilla on vain pientä aaltoilua konvergoituneen tuloksen ympärillä. Tulos konvergoituu nopeasti, vaikka konvergoitumisnopeus on pelkästään kuorinnan takia ja pienen kappaleen takia odotetusti suuri. Toisaalta klusterien käytöllä otetaan huomioon enemmän sirontapolkuja, niin teoreettisesti tulos pitäisi konvergoitua nopeammin, vaikka laskennallisesti tämä olisikin raskaampaa. Täten voi olla mahdollista, että suurilla systeemeillä klusterien käyttö antaa nopeammin konvergoituneemman tuloksen kuin RT-CB.

## 4 Tulokset

Tässä luvussa käsitellään kaikki  $R^2T^2$ :n vertailutapaukset ja keskustellaan tulosten merkityksestä kehityksen kannalta.

### 4.1 Tapaukset

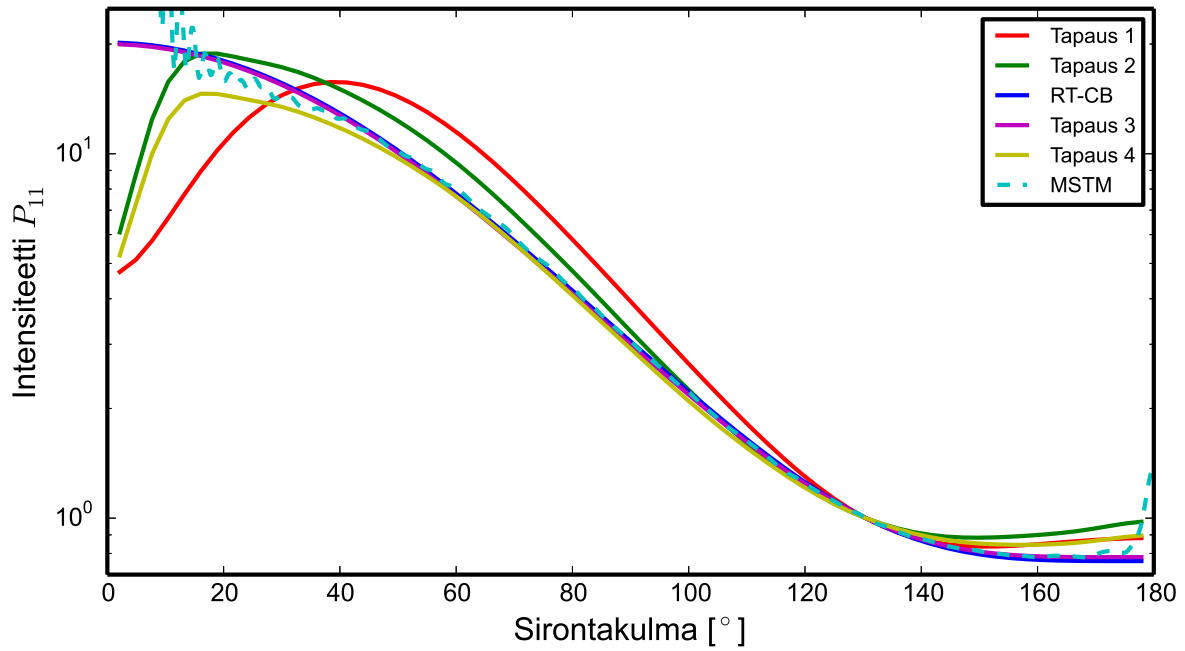
$R^2T^2$ -ohjelmaa verrattiin RT-CB:hen ja superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän (MSTM [4] ja FaSTMM [24]) antamiin tuloksiin, joiden laskemisesta on vastannut Antti Penttilä ja Johannes Markkanen. Päämääränä oli tuottaa  $R^2T^2$ :lla parempia tuloksia kuin RT-CB, eli saada tulokset vastaamaan superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän tuloksia. Superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän tulokset ovat eksakteja ja täten lähempänä todellisuutta ja siksi  $R^2T^2$ :n tulokset halutaan mahdollisimman samankaltaisiksi. Laskettujen tapausten koot perustuvat  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmään syötettyihin parametreihin, sillä se on ainoa rajoittava tekijä verifiointiprosessissa.  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmällä ison pallon kokoa arvioidaan tilavuustiheyden kaavasta  $R = r\sqrt[3]{\frac{N}{\rho}}$ , kun pallojen lukumäärä on  $N=4080$ . Tuloksia on laskettu eri taitekertoimilla, erikokoisilla kappaleilla sekä tilavuustiheyksillä. Klusterissa olevien pallojen lukumäärän vaikutusta on haluttu tutkia ja siksi tuloksia on laskettu pallojen lukumäärillä 1, 20 sekä 40. Oletuksena on, että pallojen lukumäärän nostaminen pitäisi parantaa tulosta, koska pallojen lukumäärän lähestyessä maksimiarvoansa 4080 tulos on sama kuin eksakti tulos. Osa RT-CB:n tuloksista on julkaistu [9].

Algoritmi-luvussa keskustellun VAS- ja epäkoherentin kentän käytön valintaa suunnan arpomisessa on myös tutkittu. Kuvaajissa 6–7 on käsitelty, kuinka VAS- tai epäkoherentin kentän valinta arvonta- ja kuorintaprosesseissa vaikuttavat tuloksiin. Kuvaajat 6–7 on tarkoitettu koonniksi ja tästä eteenpäin kaikki tulokset on eroteltu omiksi ryhmiksi riippuen kentän valinnasta kuorintaprosessissa. Kuvaajan 6–7 tulokset on laskettu tapauksissa, joissa tilavuustiheys  $\rho=0.05$ , sirottajien säde  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ , eli ei ole absorptiota. Tapauksessa 1 arvonta tehdään VAS-kentistä, mutta kuorinta epäkoherentista kentästä yhden pallon tapauksessa. Vapaa matka on saatu  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmästä yhtälön (45) mukaisesti. Tapaus 2 on melkein sama tapaus kuin 1, mutta klusterissa pallojen lukumäärä on nostettu 20:een. Tapaus 3 jäljittelee RT-CB:tä käyttämällä vain yhtä palloa klusterissa ja arvonta sekä kuorinta tehdään VAS-kentillä. Vapaana matkana käytetään samaa karkeaa tilastollista vapaata matkaa (46), jota myös

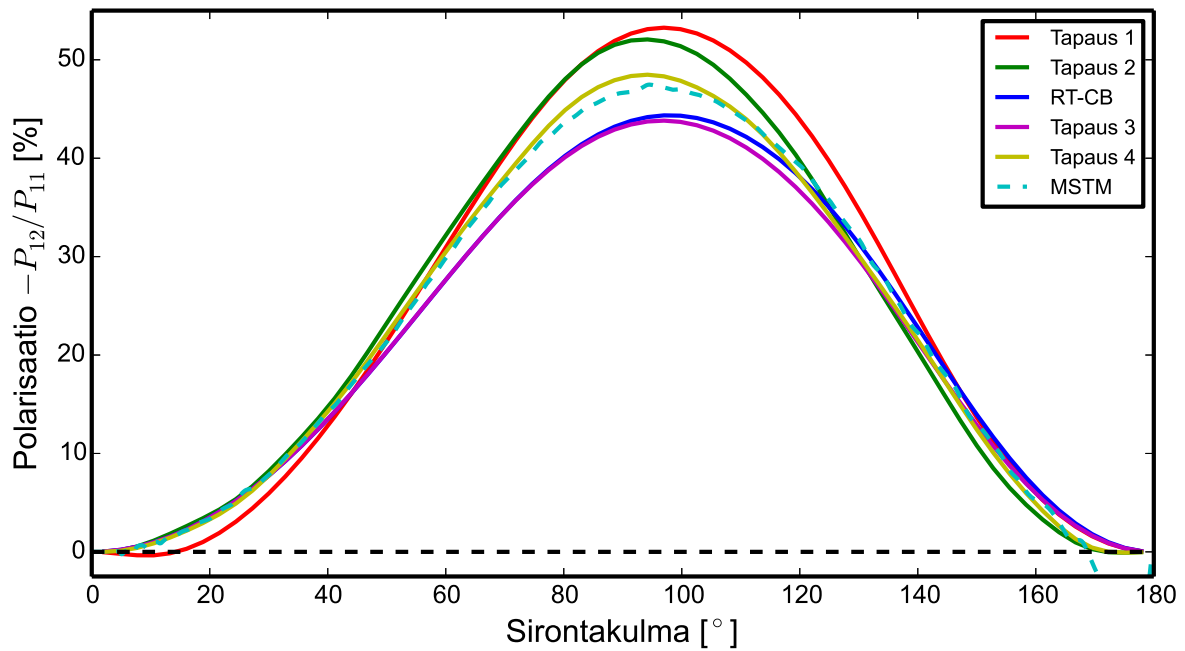
RT-CB käyttää. Tapauksessa 4 arvonta ja kuorinta tehdään epäkoherentista kentästä, kun klusterissa pallojen lukumäärä on 20.

Loput tulokset 8–16 on eroteltu kahteen ryhmään. Ensimmäisessä ryhmässä arvonta ja kuorinta tehdään epäkoherentteja kenttiä käyttämällä kun puolestaan toisessa ryhmässä arvonta tehdään VAS-kentästä ja kuorinta epäkoherentista kentästä. Lasketut tapaukset on tehty sirottajilla  $kr=2.0$ , taitekertoimella  $m=1.31+0.0i$  tilavuustiheyksillä 0.05 (kuvaajat 8,12), 0.15 (kuvaajat 9,13) ja 0.2 (kuvaaja 10). Lisäksi on laskettu erillinen tapaus, jossa sirottajan säde on  $kr=1.0$ , taitekerroin  $m=2.0+0.0i$  ja kappaleen tilavuustiheys on  $\rho=0.05$  (kuvaaja 11). Absorptiota on tutkittu tapauksissa (kuvaajat 14 ja 15) ja erikoistapauksessa (kuvaaja 16), lisäämällä kuvaajan 10 tapaukseen absorptio taitekertoimella  $m=1.31+0.1i$ . Erikoistapauksessa 16, vapaan matkan absorptiokertoimen on asetettu nolnaan (katso yhtälö (45)).

Lasketuissa RT-CB tuloksista on esitetty vain säteilykuljetuksen antama tulos vertailun helpottamiseksi. Tämän ei pitäisi olla ongelma, sillä koherentin takasirontapiikin vaikutus on rajoittunut pienelle kulma-alueelle takasirontasuunnassa ( $180^\circ$ , jolloin etusirontasuunta on  $0^\circ$  asteessa). Kaikki intensiteettikuvaajat on esitetty suhteellisina arvoina ja vertailukohdaksi on valittu  $130.5^\circ$ , joka sattui olemaan tarpeeksi kaukana molemmista interferenssipiikeistä. Lisäksi kaikki käytetyt algoritmit antoivat arvon tässä pisteessä, joten ylimääräistä interpolointeja ei tarvittu. Kaikissa tuloksissa aaltoluku on asetettu arvoon  $k=1$ .



**Kuva 6:** Intensiteetin vertailua erilaisilla lähestymistavoilla. Tapaus 1: Arvonta tehdään VAS-kentistä ja klusterissa palloja vain yksi. Tapaus 2: Arvonta tehdään VAS-kentistä ja klusterissa palloja 20. Tapaus 3:  $R^2T^2$ :lla jäljitellään RT-CB:tä käyttämällä VAS-kenttiä arvonnassa ja kuorinnassa. Tapaus 4: Arvonta ja kuorinta tehdään epäkoherentista kentstä. Kappaleen koko  $kR=86.7481$ , tiheys  $\rho=0.05$  ja vapaa matka  $kl=119.43$ . Sirottajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Vapaa matka RT-CB tapauksessa 86.028.



**Kuva 7:** Polarisaation vertailua erilaisilla lähestymistavoilla, katso tiedot kuvaajasta 6.

## 4.2 Analyysi: absorboimaton aine

Kuvaajista 6 ja 7 nähdään, että  $R^2T^2$  antaa hyviä tuloksia, sillä polarisaatio- ja intensiteettifunktion yleinen muoto on lähellä oikeaa ratkaisua. Huomattavia eroja takasirontapiikin lisäksi on MSTM-tuloksissa esiintyvä etusirontasuunnassa havaittava korkea diffraktiopiikki, mikä toisaalta häviää myös FaSTMM-tuloksista (katso kuvaaja 11), joissa lasketaan epäkoherentti sironnut kenttä.  $R^2T^2$ :n tuloksissa on jyrkkä lasku johtuen epäkoherenttien kenttien käytöstä, mutta samankaltainen lasku on myös havaittavissa epäkoherenttien kenttien FaSTMM-tuloksissa, joten jätämme funktiossa havaitun laskun huomioimatta. Vapaan avaruuden sironneita kenttiä käyttämällä kyseistä jyrkkää laskua ei havaita, mikä selviää tapauksesta 3 ja sama pätee myös RT-CB-tuloksiin.

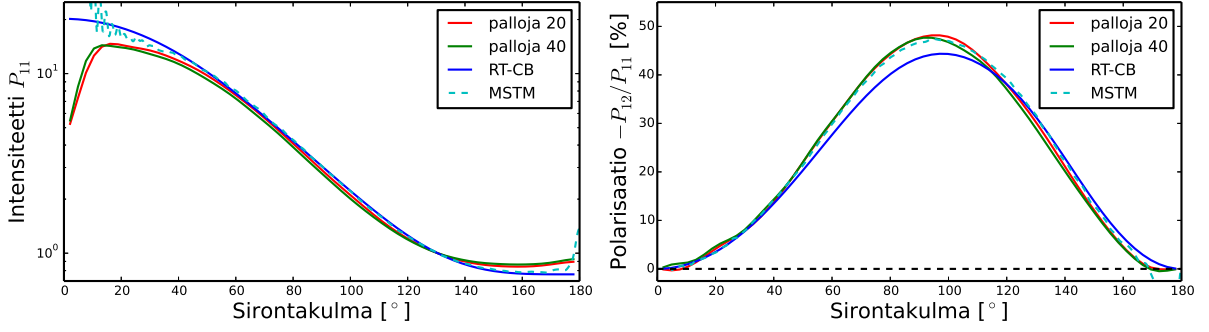
Hyvä vertailukohta  $R^2T^2$ :n toiminnan takaamiseksi on kuvaajassa 6 esiintyvä tapaus 3, jossa jäljitellään RT-CB:tä käyttämällä ainoastaan VAS-kenttiä. Pallojen lukumäärä klusterissa on yksi ja vapaana matkana käytetään RT-CB:n kanssa samaa tilastollista arvoa (46). Intensiteettifunktio on lähes identtinen RT-CB:n kanssa ja samoin polarisaatiofunktio. Pieniä eroja kuitenkin löytyy, sillä polarisaatiofunktion oikea puoli eroaa hieman RT-CB tuloksesta. Tämän efektin voi huomata myös muissakin tuloksista ja samankaltaista käyttäytymistä havaitsin jo  $R^2T^2$ :n ensimmäisessä versiossa. Toisaalta tämä efekti voidaan tulkita parannukseksi, sillä  $R^2T^2$ :ssa polarisaatiofunktion huipun paikka  $x$ -akselilla osuu paremmin yhteen MSTM-tuloksien kanssa tai sitten kyseessä voi olla myös systemaattinen virhe, joka näyttää vain parantavan tuloksia. Efektiä tarkkaillaan tulevissa versioissa.

Epäkoherenttien kenttien käyttö arvonnassa ja kuorinnassa näyttää antavan tuloksia, jotka eivät eroa paljon eksakteista tuloksista (katso kuvaajat 8–11) niin harvoilla kuin tiheillä aineilla. Kaikissa tapauksissa polarisaatiofunktio on parempi verrattuna RT-CB:n antamiin polarisaatiofunktioihin tiheydestä riippumatta.

RT-CB-ohjelma antaa silti parempia intensiteettifunktioita harvojen aineiden tapauksessa ( $\rho=0.05$ , kuvaaja 8). MSTM:n ja RT-CB:n intensiteettifunktiot ovat melkein identtiset, mutta  $R^2T^2$ :lla etusirontasuuntaan pääsee vähemmän intensiteettiä kuin pitäisi ja takasirontasuuntaan puolestaan enemmän. Myöskään pallojen lukumäärän kaksinkertaistuminen klusterissa ei paranna tulosta. Kuvaajaa tarkasteltaessa nähdään, että  $R^2T^2$  kuitenkin onnistuu ratkaisemaan polarisaatiofunktion paremmin kuin RT-CB. Muoto on lähempänä MSTM tulosta, sillä RT-CB:llä polarisaatiofunktion huippu on enemmän oikeal-

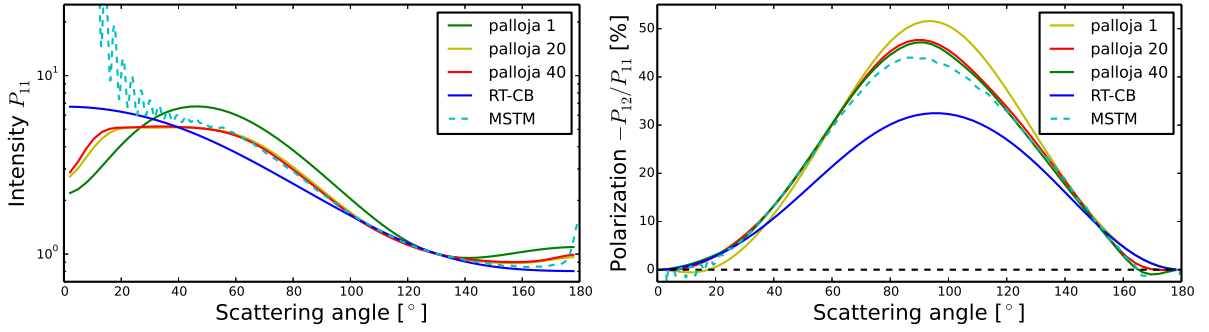


### Arvonta epäkoherentista kentästä, $\rho=0.05$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.0i$



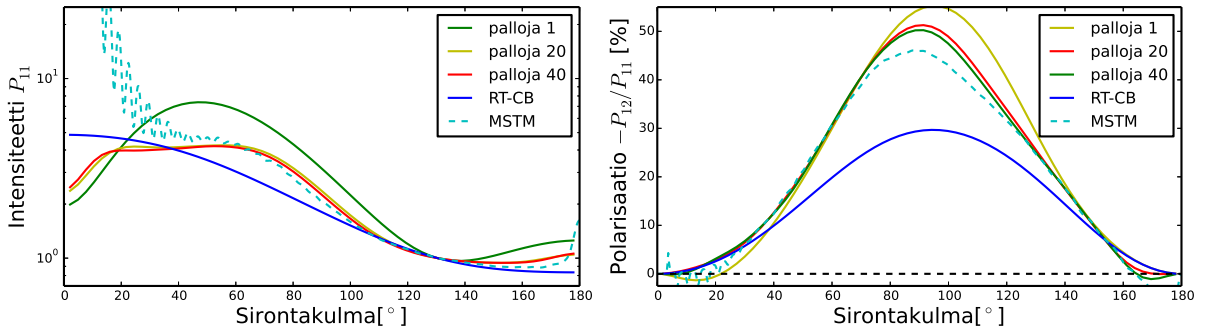
**Kuva 8:** Arvonta ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kR=86.7481$ , tiheys  $\rho=0.05$ . Sirottaajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Vapaa matka 20 pallon tapauksessa  $kl=118.91$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=119.47$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=86.028$ .

### Arvonta epäkoherentista kentästä, $\rho=0.15$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.0i$



**Kuva 9:** Arvonta ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kR=60.1478$ , tiheys  $\rho=0.15$ . Sirottaajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Vapaa matka yhden pallon tapauksessa  $kl=89.089$ , 20 pallon tapauksessa  $kl=65.789$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=65.789$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=28.676$ .

### Arvonta epäkoherentista kentästä, $\rho=0.20$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.0i$



**Kuva 10:** Arvonta ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kR=54.6479$ , tiheys  $\rho=0.2$ . Sirottaajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Vapaa matka yhden pallon tapauksessa  $kl=101.70$ , 20 pallon tapauksessa  $kl=62.685$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=61.527$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=21.507$ .

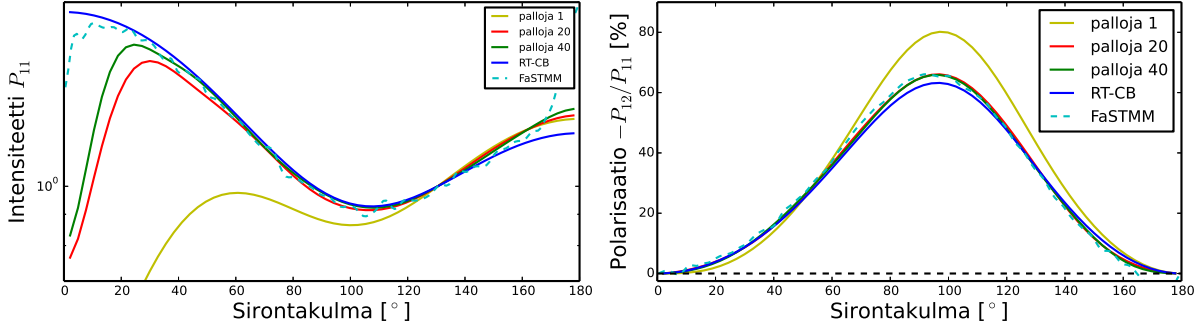
la ja maksimiarvo on noin 10% pienempi todellisesta arvosta.  $R^2T^2$ :n tuloksissa huippu on huomattavasti lähempänä todellista arvoa, mutta ongelmana on, että pallojen lukumäärän noustessa klusterissa, kulkee huippu vasemmalle todellisen huipun yli  $x$ -akselilla. Etusirontasuunnassa havaittava pieni oskillaatio johtunee korkeasta katkaisuintensiteetistä tai riittämättömästä säteiden määrästä, joten tämä huomio sivuutetaan. Vapaa matka on korkeampi  $R^2T^2$ :lla kuin RT-CB:llä, joten on selvää, että  $R^2T^2$ :lla polarisaatiofunktion maksimi on korkeampi, kuten on myös VAS-kenttiä käytettäessä (kuvaaja 12). Toiseksi intensiteettikuvaajista nähdään, että enemmän säteilyä pitäisi päästä etusirontasuuntaan. Tästä päätellen vapaata matkaa voitaisiin korottaa, mikä voisi johtaa parempiin tuloksiin, mutta korottamisen perusteleminen voi olla ongelmallista fysikaalisesti. Toisaalta tuloksia voidaan myös yrittää parantaa käyttämällä arvonnassa VAS-kenttiä ja sitä varten myös tätä mahdollisuutta on tutkittu (kuvaajat 12–13).

Kuvaajassa 9 ollaan alueella, jossa RT-CB alkaa eroamaan todellisesta ratkaisusta. Pakkaustiheys 15% on suhteellisen tiivis, jolloin lähikenttien vaikutus on odotetusti korkeampi [9]. RT-CB ei ota huomioon lähikenttiä, kuten teorialuvussa näytettiin, joten lähikenttien käyttämisen pitäisi parantaa tuloksia  $R^2T^2$ :n tapauksessa. Otetaan aluksi tapaus epäkoherenttien kenttien käytöstä arvonnassa ja kuorinnassa kuvaajista 9 tarkasteluun. Intensiteettifunktio näyttää mukailevan paremmin MSTM-tuloksien kanssa ja pallojen lukumäärän lisääminen parantaa tulosta. Myös  $R^2T^2$ :n polarisaatiofunktio antaa parempia tuloksia kuin RT-CB. Funktioiden maksimit lähenevät oikeaa tulosta pallojen lukumäärää lisäämällä ja yleismuoto vaikuttaa oikealta. Toisaalta kun ottaa huomioon, että vapaa matka on melkein kolme kertaa korkeampi RT-CB tapaukseen verrattuna, ei pitäisi olla yllätys, että polarisaatiofunktion maksimi on korkeampi.

Tihein tutkittu tapaus on 20% (kuvaaja 10).  $R^2T^2$  tuottaa selvästi parempia intensiteetti- ja polarisaatiofunktioita verrattuna RT-CB:hen. Molemmissa funktioissa on kuitenkin pieniä eroja eksaktiin tulokseen verrattuna, mutta voidaan sanoa, että  $R^2T^2$  toimii kyseisessä tapauksessa. Pallojen lukumäärän nostaminen tuo tuloksen lähemmäksi eksaktia tulosta, kuten on oletettu. Tiheiden aineiden tapauksissa (kuvaajat 9–10)  $R^2T^2$  siis onnistuu ratkaisemaan aineen sirontaongelman paremmin kuin RT-CB.

Kuvaajassa 11 käsitellään tapausta, jossa sirottajat ovat pienempiä ja taitekerroin on eri kuin edellisessä tapauksessa. Tulokset laskettiin jotta nähtäisiin, ettei kuvaajan 8 tapauksessa ole kyse sattumasta. Arvonta ja kuorinta epäkoherenteista kentistä näyttää

### Arvonta epäkoherentista kentästä, $\rho=0.05$ , $kr=1.0$ , $m=2.00+0.0i$



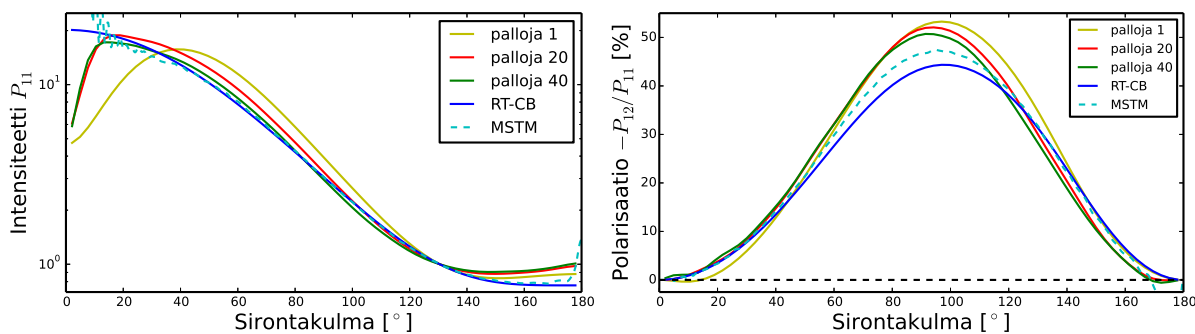
**Kuva 11:** Arvonta ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kR=43.374$ , tiheys  $\rho=0.05$ . Sirottajan koko  $kr=1.0$  ja taitekerroin  $m=2.00+0.0i$ . Vapaa matka yhden pallon tapauksessa  $kl=64.571$ , 20 pallon tapauksessa  $kl=48.206$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=47.265$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=33.466$ . Vertailu on tehty epäkoherenttiin superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmään.

yhä toimivan, sillä tulokset ovat lähellä FaSTMM-tuloksia ja pallojen lisääminen parantaa tulosta oikeaan suuntaan. Tulokset eivät ole yllättäviä, vaikkakin intensiteettiä alentamalla voitaisiin saada aikaan parempia tuloksia. Toinen huomio on diffraktiopiikin kaltainen nousu etusirontasuunnassa, mitä ei havaita  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmällä, koska tulokset on esitetty epäkoherentteja kenttiä käyttämällä.  $R^2T^2$ :n polarisaatiofunktioit ovat jälleen paremmat verrattuna RT-CB:n polarisaatiofunktioihin.

Lisäksi tutkittiin VAS-kentän käyttöä kuorinnassa ja siksi kuvaajassa 12 arvonta tehtiin käyttämällä VAS-kenttiä epäkoherenttien kenttien sijaan. Intensiteettifunktiot näyttävät yhä sopivilta, mutta lähemmässä tarkastelussa RT-CB tuottaa paremmat intensiteetti-, mutta myös polarisaatiofunktioit. Klusterissa olevien pallojen lukumäärän nostaminen parantaa tuloksia intensiteettikuvaajissa, mutta muoto näyttää aaltoilevan oikean ratkaisun molemmiin puolin ja intensiteetti on korkea takasirontasuunnassa. Muoto on lähellä eksaktia ratkaisua, mutta epäkoherentissa tapauksessa 8 intensiteettifunktio on vielä parempi. Polarisaatiokuvaajassa pallojen lukumäärän nostaminen tuo tuloksen lähemmäksi todellista arvoa, mutta maksimi on liikkunut  $x$ -akselilla ohi todellisesta arvosta ja polarisaatiofunktion maksimi on huomattavasti korkeampi kuin kuvaajassa 8. Lisäksi kuvaajan muoto on huonompi maksimin oikealla puolella. Näyttää siltä, että kun RT-CB tulokset antavat liian matalan polarisaation, niin  $R^2T^2$ :n VAS-kenttä arvonnalla funktio nousee liian ylös. Samanlainen ilmiö nähdään myös tulevaisu VAS-kenttäarvonta tapauksissa.

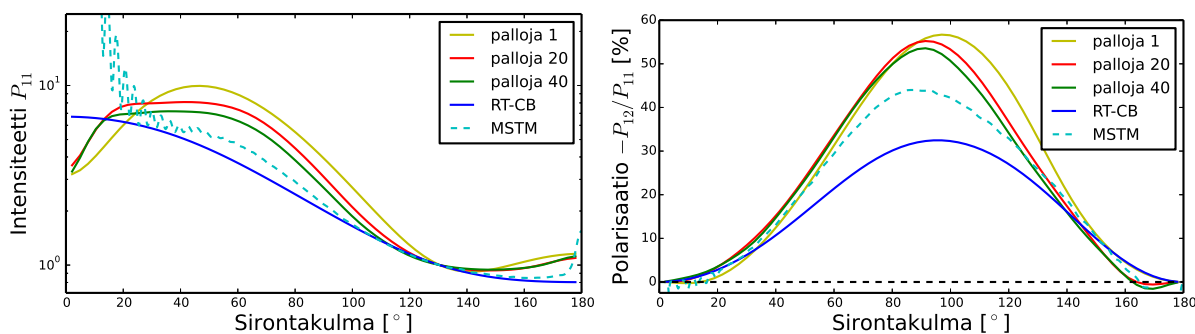
Arvonta VAS-kentästä (katso kuvaaja 13) ei näytä tuottavan hyviä tuloksia myöskään tiheillä aineilla. Intensiteettifunktiot menevät lähemmäksi oikeita arvoja kun pallojen

### Arvonta VAS-kentästä, $\rho=0.05$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.0i$



**Kuva 12:** Arvonta VAS-kentistä ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kr=86.7481$ , tiheys  $\rho=0.05$ . Sirottajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Vapaa matka yhden pallon tapauksessa  $kl=132.79$ , 20 pallon tapauksessa  $kl=118.43$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=119.47$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=86.028$ .

### Arvonta VAS-kentästä, $\rho=0.15$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.0i$



**Kuva 13:** Arvonta VAS-kentistä ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kr=60.1478$ , tiheys  $\rho=0.15$ . Sirottajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.0i$ . Vapaa matka yhden pallon tapauksessa  $kl=89.089$ , 20 pallon tapauksessa  $kl=65.789$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=65.789$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=28.676$ . T-matriisimenetelmän tulos on esitetty epäkoherenteilla kentillä.

lukumäärä lisätään klusterissa, mutta muoto on huonompi verrattuna siihen, että arvonta tehtäisiin epäkoherentteja kenttiä käyttämällä (vertaa kuvaajaan 9). Intensiteettiä valuu liikaa etusirontakulmille verrattuna takasirontasuuntaan. Polarisaatiofunktion huippu on eksaktia tulosta korkeampi ja muoto ei vastaa ollenkaan MSTM-tulosta.

### 4.3 Analyysi: absorboiva aine

Luonnossa ei ole absorboimattomia materiaaleja ja siksi on tärkeää, että  $R^2T^2$  pystyy mallintamaan myös absorboivia materiaaleja ja siksi tapaus 10 laskettiin myös absorptioon kanssa erilaisilla lähestymistavoilla (kuvaajat 14–16).

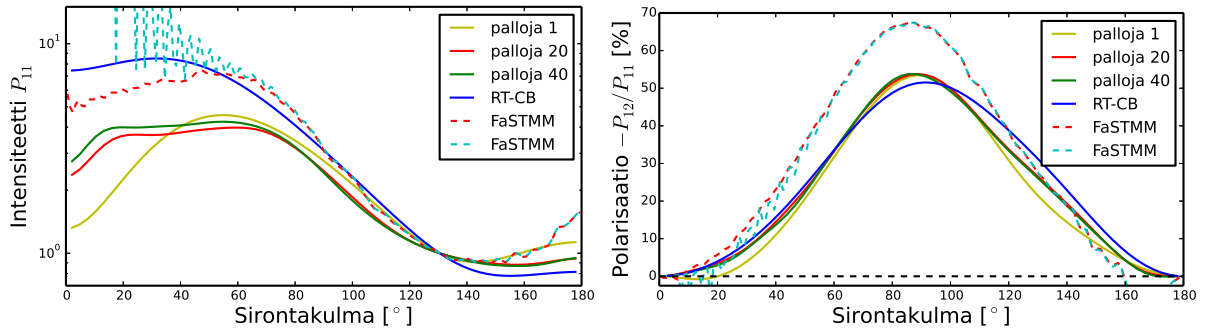
Kuvaajissa 14 on tapaus, jossa arvonta ja kuorinta tehdään epäkoherenteista kentistä. Kun absorboimattomille aineille  $R^2T^2$  näytti parantavan tuloksia, niin absorboivissa aineissa parannusta ei havaita. Toisaalta polarisaatiofunktion muoto on parempi verrattuna RT-CB:hen, sillä RT-CB tuloksissa polarisaatiofunktion muoto on leveämpi maksimin oikealla puolella eksaktiin tulokseen verrattuna.

Verrattuna absorboimattomaan tapaukseen (kuvaaja 10), absorptioon lisääminen parantaa intensiteettifunktiota RT-CB:tä käytettäessä, mutta  $R^2T^2$ :n tapauksessa intensiteettifunktio huononee. Kuitenkin absorptioon lisääminen saa RT-CB:ssä aikaan korkeamman polarisaatiomaksimin, mutta funktion yleinen muoto on leveämpi.  $R^2T^2$ :lla intensiteettifunktio huononee absorptiota lisäämällä.

Tapauksessa (kuvaaja 15), jossa arvonta tehtiin VAS-kenttiä käyttämällä, on tulos parempi verrattuna epäkoherenttien kenttien käyttöön  $R^2T^2$ :ssä. Intensiteettifunktio on samankaltainen oikean tuloksen kanssa, ja jopa parempi kuin RT-CB:n tulos. Myös polarisaatiofunktion maksimi on korkeampi kuin RT-CB:n ja edellisen (kuvaaja 14) tapauksen polarisaatiomaksimi. Toisaalta muodossa on ongelmana, että maksimi  $x$ -akselilla on enemmän oikealla verrattuna tapaukseen 14, jolla maksimi  $x$ -akselilla on lähempänä eksaktia tulosta. Tuloksen 15 yhteensopivuus todellisten tulosten kannalta on kyseenalainen, sillä absorboimattomien aineiden tapauksessa VAS-kenttäarvonta ei toiminut (kuvaajat 12–13). VAS-kenttäarvonta saa aikaan suurempia intensiteettiä etusirontasuunnista ja korkeampia maksimeja polarisaatiofunktioissa, joten ei ole yllätys, että VAS-kenttäarvonta antaa parempia tuloksia verrattuna edelliseen absorptiotapaukseen (kuvaaja 14).

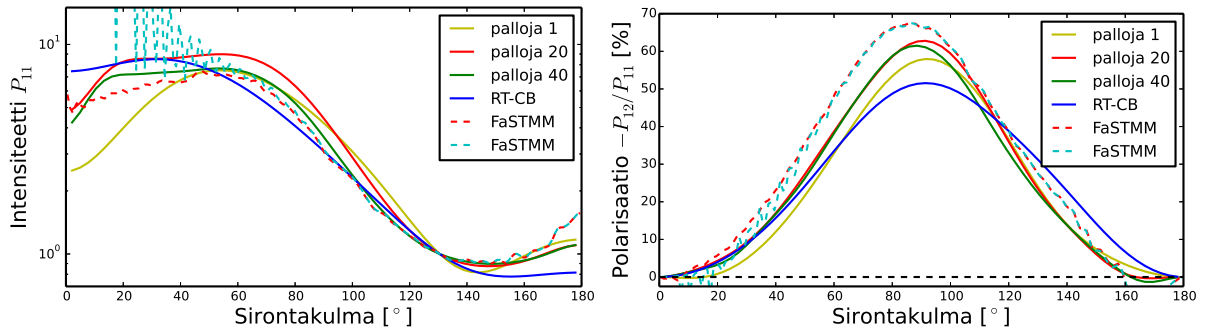
Lisäksi tutkittiin tapausta, jossa vapaaseen matkaan ei oteta huomioon absorptiokerrointa (kuvaaja 16). Algoritmin aikana saatetaan ottaa huomioon kahdesti absorptio: vapaassa matkassa (katso kaava (45)) sekä absorptiossa (katso kaava (52)) ja siksi vaikutusta on hyvä tutkia. Kuvaajasta 16 nähdään, että polarisaatiofunktio on parempi verrattuna tapaukseen 14, koska funktion yleinen muoto ja maksimi ovat lähempänä todellisia arvoja. Intensiteettifunktioissa ei puolestaan ole suurta eroa. Tulokseen 15 verrattuna

### Arvonta epäkoherentista kentästä, $\rho=0.20$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.1i$



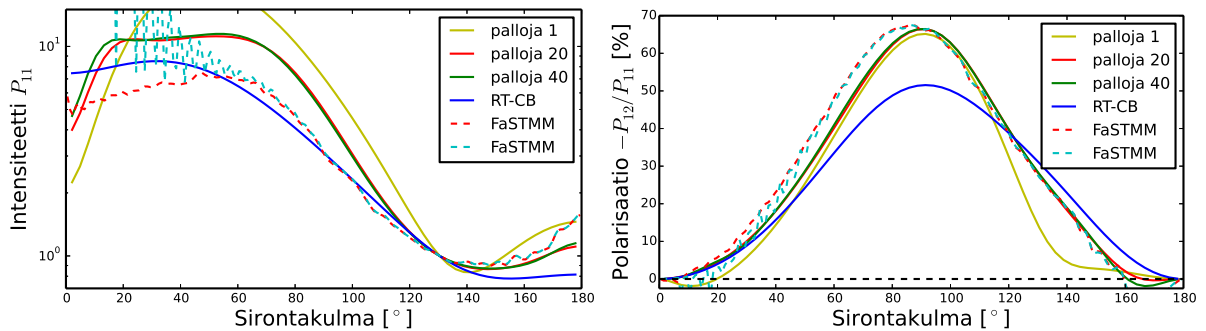
**Kuva 14:** Absorption kanssa arvonta ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kR=54.648$ , tiheys  $\rho=0.2$ . Sirottajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.1i$ . Vapaa matka yhden pallon tapauksessa  $kl=19.914$ , 20 pallon tapauksessa  $kl=23.413$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=25.594$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=12.372$ . Punainen katkoviiva on epäkoherentti superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän tulos.

### Arvonta VAS-kentästä, $\rho=0.20$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.1i$



**Kuva 15:** Absorption kanssa arvonta VAS-kentästä ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Katso tiedot kuvaajasta 14

### Arvonta epäkoherentista kentästä, erikoistapaus, $\rho=0.20$ , $kr=2.0$ , $m=1.31+0.1i$



**Kuva 16:** Absorption kanssa arvonta ja kuorinta epäkoherentista kentästä eri määrällä palloja klusterissa. Kappaleen koko  $kR=54.648$ , tiheys  $\rho=0.2$ . Sirottajan koko  $kr=2.0$  ja taitekerroin  $m=1.31+0.1i$ . Vapaa matka yhden pallon tapauksessa  $kl=127.60$ , 20 pallon tapauksessa  $kl=121.85$  ja 40 pallon tapauksessa  $kl=137.70$ . RT-CB:llä vapaa matka  $kl=12.372$ . Punainen katkoviiva on epäkoherentti superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän tulos.

intensiteettifunktio on huonompi, mutta polarisaatiofunktio on parempi.

Näistä päätellen absorptiokertoimen poistaminen kaavasta (45) voi olla oikea ratkaisu algoritmin kannalta. Huomio ei vaikuta absorboimattomien kappaleiden tapauksiin 6–13, koska näissä absorptiokerroin on ollut häviävän pieni. RT-CB:hen verrattuna polarisaatiofunktio ovat parantuneet absorptiotapauksessa, mutta vertailua on hyvä jatkaa, sillä intensiteettifunktiot eivät ole parempia.

## 5 Jatkokehitys

$R^2T^2$  näyttää toimivan absorboimattomilla aineilla, sekä myös absorptiotapauksissa, vaikkakin absorptiotapauksessa on vielä parantamisen varaa.  $R^2T^2$ :ta voidaan muuttaa vielä monella tavalla ja siksi riittää vielä tutkittavaa. Kappaleen pienen koon vaikutus on yksi asioista, joka pitää poistaa. Eräissä tuloksissa, joita ei ole esitetty tässä tutkielmassa, huomattiin, että kappaleen pienellä koolla voisi olla negatiivinen vaikutus tuloksiin. Suurien kappaleiden käyttö on suositeltavaa, mutta vertailukelpoisten tulosten puute on  $R^2T^2$ :n testaamisen suurin ongelma. Superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmällä ei pystytä laskemaan suuria systeemejä ja tästä syystä testaaminen rajoittuu kohtuullisen pieniin vain muutaman kymmenen aallonpituuden suuruisiin systeemeihin. RT-CB:lla ja  $R^2T^2$ :lla on tarkoitus ratkaista suuria systeemejä ja siksi olisi tärkeää saada laskennallista ja mitattua dataa isoille systeemeille. Vertailudataa tullaan saamaan lähitulevaisuudessa, sillä SAEMPL-projektiin [12] kuuluu sirontamittauslaite, jolla on tarkoitus tutkia ultraäänellä levitoivan näytteen sirontaominaisuuksia. Tämän laitteen avulla on tarkoitus tuottaa mittausdataa, jota voidaan käyttää myös  $R^2T^2$ :n verifiointiin. Sirontamittauslaite rakennetaan yhteistyössä Edward Haeggströmin tutkimusryhmän kanssa.

Pallogeometriasta puuttuu lisäksi ympyräpolarisaation laskeminen, joka tulee kaksinkertaistamaan laskenta-ajan, koska kaikki säteet pitää laskea vielä yhdellä ylimääräisellä polarisaatiolla. Kuten Algoritmi-luvussa keskusteltiin, vaatii tämä ympyräpolarisoituneen kentän esittämistä palloharmonisilla funktioilla, mutta esityksen tekeminen ei pitäisi olla ongelma. Tasogeometrian toteuttaminen tulee kuitenkin olemaan ongelmallinen laskenta-aikaa ajatellen. Tasogeometria vaatii kuuden polarisaatiotilan (yhtälöt (48)) laskemista, mikä tarkoittaa laskenta-ajan kuusinkertaistumista.

$R^2T^2$  tarvitsee vielä lisää osia, kuten koherentin takaisinsironnan sekä tasogeometrian. Geometrioiden lisääminen ei ole ongelma laskenta-aikaa lukuun ottamatta, sillä etäisyyksien mittaaminen kappaleen pinnalle kuorinnassa ja suunnan arpomisessa on helppo muuttaa. Paljon työtä tulee kuitenkin tuottamaan koherentin takaisinsironta, joka on vastuussa takasirontasuunnassa näkyvästä piikistä. Efektin aikaansaamiseksi vaaditaan, että koko sirontaketju käydään läpi molempiin suuntiin sirotajalta sirotajalle ja kenttien välinen interferenssi pitää pystyä laskemaan. Pelkästään toteutuksen lisäksi, ongelmia tulee tuottamaan myös laskenta-aika. RT-CB:n koherentti takaisinsironta lisää laskenta-aikaa



vain 20%–50% riippuen detektorien lukumäärästä, mutta lisäys  $R^2T^2$ -ohjelmaan saattaa kaksinkertaistaa laskenta-ajan. Väite perustuu profilointityökalulla havaittuihin aikoihin, joista nähtiin, että kaukokenttien laskeminen on nopeaa. Kaukokenttiä laskeva funktio kuluttaa vain 10% laskenta-ajasta, koska kantavektorit on laskettu etukäteen ja täten detektointi koherentin takaisinsironnan yhteydessä ei tule siis olemaan ongelma. Laskennallisesti kalliiksi tulee kenttien laskeminen sirottajien välillä, sillä nämä vievät yhteensä melkein 80% ajasta. Optimoimattomassa koherentissa takaisinsironnassa koko kenttä joudutaan laskemaan aina uudelleen uuden sirontaprosessin jälkeen, mikä tulee olemaan laskennallisesti kallista.

Suunnan arpominen ja detektorien sijainti tarvitsee myös päivitystä. Tasainen jakautuma valitun suunnan ympärillä pallon pinnalla on huono approksimaatio, jos detektorit ovat harvassa.  $R^2T^2$ :ssa kuten myös RT-CB:ssä detektorien  $\phi$ -kulmat on jaettu tasaisesti jokaiselle  $\theta$ -kulmalle, ja  $\theta$ -kulma on saatu Gauss-Legendren kvadratuureja käyttämällä [10]. Tästä syystä etusironta- ja takasirontasuunnassa on todella suuri resoluutio verrattuna muihin suuntiin. Yksi vaihtoehto on nostaa detektorien lukumäärää, mikä ei ole esitetyn profilointidatan kannalta huono idea, vaikkakin detektorien lukumäärää navoilla voisi vähentää. Suunnan arpomisessa voitaisiin luoda karkea kolmiulotteinen kartta valitun pisteen ympäristössä ja arpoa paikka ”Hit or miss”-menetelmää käyttämällä.

Kolmas tärkeä asia on itse superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmässä olevien koodien optimoiminen, koska ne kuluttavat odotetusti melkein kaiken laskenta-ajasta. Pakettia on jo optimoitu esimerkiksi käyttämällä harvoja matriiseja, mutta  $R^2T^2$ :n erillistarpeita tutkimalla voi löytyä uusia tapoja nopeuttaa ohjelmaa. Näiden optimoiminen ei vielä kehitysvaiheessa ole tärkeää vaikka tällä voisi säästää tuhansia laskentatunteja. Ongelmana on, että mitä enemmän optimoi, sitä enemmän modulaarisuus heikkenee, mikä tekee taas osien vaihtamisesta hankalaa, varsinkin kun paketin kehittäjä on eri henkilö. Tämä tuotti ongelmia jo ensimmäisen  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän paketin kanssa, sillä pakettia optimoitiin ensimmäistä  $R^2T^2$  versiota varten. Tästä syystä, kun päivitetty versio valmistui, täytyi uusi  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmäpaketti liittää vanhan paketin rinnalle.

Toiseksi optimoiminen voi nostaa virheiden määrää ja johtaa kehitystä väärään suuntaan. Optimoinnin kannalta yleinen suunnitelma on ollut laskea mahdollisimman paljon etukäteen ja käyttää laskettua dataa hyödyksi, kuten kantavektorien suhteen on tehty kaukokenttiä laskettaessa. Ongelmaksi voi kuitenkin muodostua muistiongelmat johtuen

kentän ja kappaleen kertoimien tallentamisesta keskusmuistiin.

Osa  $R^2T^2$ -ohjelmasta täytyy kirjoittaa uudelleen, koska ohjelmaan on kertynyt koodia eri kehitysversioista. Ohjelmassa on paljon turhia parametreja ja sen käyttö ei ole yksinkertaista ulkopuoliselle. Tällä hetkellä ohjelmassa on kaksi erillistä superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän hoitavaa osaa ja optimointiin on varaa. Uudelleenkirjoituksen yhteydessä pystyy myös varmistamaan osien toimivuuden kertaalleen ja lisäksi on hyvä alkaa kartuttamaan koherentin takaisinsironnan tarpeita.

Lopullisessa versiossa on mahdollista, että RT-CB ja  $R^2T^2$  voidaan sulauttaa yhteen, mutta se tulee vaatimaan jopa RT-CB:n muokkaamista.

## 6 Johtopäätökset

Säteilykuljetusohjelmat onnistuvat laskemaan diskreeteistä sirottajista koostuvien harvojen aineiden sirontaongelmia. Tämä johtuu siitä, että harvoilla aineilla sirottajat vuorovaikuttavat vain kaukokenttien kautta ja tästä syystä vuorovaikutukset sirottajien välillä ovat yksinkertaisia, mikä on yksi säteilykuljetusyhtälön tärkeistä approksimaatioista. Säteilykuljetusohjelmien ratkaisujoukkoon eivät kuitenkaan kuulu tiheät aineet, koska lähikenttä täytyy ottaa huomioon sirottajien välisen etäisyyden ollessa lyhyt. Tällöin sirontapolut monimutkaistuvat ja säteilykuljetusohjelmat eivät ole enää päteviä ratkaisuun sirontaongelmaa.

Tässä pro gradu -tutkielmassa käsiteltiin uudenlaista säteilykuljetusohjelmaa, joka kulkee kehitysnimellä  $R^2T^2$ .  $R^2T^2$  ohjelmoitiin osana SAEMPL-projektia, jonka yksi päämäärinä on löytää tapoja parantaa perinteisiä säteilykuljetusohjelmia.  $R^2T^2$ :ssa käytetään vapaan avaruuden sirontakenttiä, jotka sisältävät myös lähikentät. Paikalliset vapaan avaruuden sirontakentät saadaan aikaan kuvaamalla kentät palloharmonisilla funktioilla, joita käytetään klusterien välisen vuorovaikutuksen laskemiseen.

Tutkielmassa on näytetty, että kaikista tutkituista tapauksista, kuorinta ja arvonta täytyy tehdä epäkoherenteilla kentillä ja absorptiokertoimen poistaminen vapaasta matkasta voi olla oikea tapa toteuttaa absorptio. Käyttämällä kyseisiä oletuksia,  $R^2T^2$ :n kehitysversio pystyy tuottamaan kohtuullisen oikeita tuloksia ja varsinkin tiheille aineille parempia tuloksia kuin RT-CB. Absorboivissa tilanteissa  $R^2T^2$ :lla näyttää olevan pieniä ongelmia etenkin intensiteetissä ja siksi kehitystä sekä verifiointia on vielä jatkettava.

Verifiointin ongelmana on superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän ongelmat isoilla systeemeillä ja kokeellisten tulosten puute, mutta kokeellisia tuloksia tullaan saamaan lähitulevaisuudessa. Superpositio  $\mathbf{T}$ -matriisimenetelmän ja muiden eksaktien menetelmien laskenta-aikaan liittyvät ongelmat suurten systeemien tapauksessa on juuri yksi syistä, miksi  $R^2T^2$ -ohjelmaa kehitetään.

$R^2T^2$ -ohjelma pitää kirjoittaa uudelleen ja siinä yhteydessä on hyvä myös tarkistaa kertaalleen, että jokainen funktio toimii kuten pitääkin. Toisaalta tuloksissa näytetyt tapaukset vaikuttaa lupaavilta ollakseen vain virheen tuotosta. Lisäksi  $R^2T^2$ -ohjelmaan tarvitsee lisätä ominaisuuksia, kuten tasogeometria, ympyräpolarisaatio ja parempi suunnan arpominen. Vaikeimman osan kehityksessä tulee kuitenkin tuottamaan koherentin takai-

sinsironnan lisääminen niin teoreettisesti kuin laskennallisesti.

Jos  $R^2T^2$  onnistuu laajentamaan säteilykuljetusyhtälöiden ratkaisualuetta tiheisiin aineiseen, se tulee olemaan osa inversio-ongelmaketjua, jossa yksittäisen sirottaajan mallista päästään laskemaan suurien kappaleiden inversio-ongelmia.  $R^2T^2$  tulee olemaan oiva työkalu perinteisten approksimatiivisten ja eksaktien menetelmien rinnalla, mutta  $R^2T^2$ :n kehitys jo itsessään on auttanut ymmärtämään perinteisten säteilykuljetusohjelmien olettuksien merkityksen sirontaongelmien ratkaisuihin.

## 7 Viitteet

- [1] O. Sotoudeh, T. Wittig, “Electromagnetic Simulation of Mobile Phone Antenna Performance”, *Microwave Journal*, tammikuu, 2008.
- [2] J. Frisvad, N. Christensen, H. W. Jensen, “Computing the Scattering Properties of Participating Media Using Lorenz-Mie Theory”, SIGGRAPH, 2007.
- [3] R. Yu, T. Zhou, T. Wu, W. Xue, G. Zhou, *Development and Evaluation of High Resolution Climate System Models*, Springer, 2016.
- [4] D. W. Mackowski, “MSTM, A multiple sphere  $T$ -matrix FORTRAN code for use on parallel computer clusters, Version 3.0”, 2013, <http://eng.auburn.edu/users/dmckwski/scatcodes/>
- [5] P. Ylä-Oijala, J. Markkanen, S. Järvenpää, S. P. Kiminki, “Surface and Volume Integral Equation Methods for Time-Harmonic Solutions of Maxwell’s Equations”, *Progress in electromagnetics Research*, 149, 2014.
- [6] M. I. Mishchenko, L. D. Travis, A. A. Lacis, “Multiple Scattering of Light by Particles: Radiative Transfer and Coherent Backscattering”, Cambridge University Press, 2006.
- [7] K. Muinonen, M. I. Mishchenko, J. M. Dlugach, E. Zubko, A. Penttilä, G. Videen, “Coherent backscattering verified numerically for a finite volume of spherical particles”, *The Astrophysical Journal*, 760:118, 2012.
- [8] M. I. Mishchenko, D. Goldstein, H. Chowdhary, A. Lompado, “Radiative transfer theory verified by controlled laboratory experiments”, *Optics Letters*, 38, 2013.
- [9] T. Väisänen, A. Penttilä, J. Markkanen, K. Muinonen, “Validation of Radiative Transfer and Coherent Backscattering for Discrete Random Media”, [Abstrakti], 2016 URSI International Symposium on Electromagnetic Theory (EMTS).
- [10] K. Muinonen, “Coherent backscattering of light by complex random media of spherical scatterers: numerical solution”, *Waves in Random Media*, 14, 2004.
- [11] RT-CB: Tulee ladattavaksi syyskuussa 2016, <https://wiki.helsinki.fi/display/PSR/>
- [12] ERC SAEMPL-projektin wiki, <https://wiki.helsinki.fi/display/PSR/SAEMPL>
- [13] M. I. Mishchenko, “Multiple Scattering, Radiative Transfer and Weak Localization in Discrete Random Media: Unified Microphysical Approach”, *Reviews of Geophysics*, 46, RG2003.
- [14] S. Chandrasekhar, *Radiative transfer*, Dover Publications, Inc, New York, 1960.
- [15] L. M. Zurk, L. Tsang, D. P. Winebrenner, “Scattering Properties of Dense Media from Monte Carlo Simulations with Application to Active Remote Sensing of Snow”, *Radio Science*, 31(4), 1996.
- [16] V. Twersky, “On propagation in random media of discrete scatterers”, konferenssijulkaisu, Symposium of Applied Mathematics, 16, 1964.
- [17] C. Bohren, D. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, John Wiley & sons, 1983.
- [18] G. Kristensson, *Spherical Vector Waves*, 2014.
- [19] P. C. Waterman, “Matrix formulation of electromagnetic scattering”. Proceedings of the IEEE 53, 1965.
- [20] D. W. Mackowski, “Calculation of total cross sections of multiple-sphere clusters”, *The Journal of the Optical Society of America*, 11, 1994.
- [21] F. Yusef-Zadeh, M. Morris, R. L. White, “Bipolar reflection nebulae - Monte Carlo simulations”, *Astrophysical Journal*, 278, 1984.
- [22] L. M. Zurk, L. Tsang, K. H. Ding, D. P. Winebrenner, “Monte Carlo Simulations of the Extinction Rate of Densely Packed Spheres with Clustered and Nonclustered Geometries”, *The Journal of the Optical Society of America*, 12, 1995.
- [23] K. Muinonen, J. Markkanen, A. Penttilä, T. Väisänen, J. Peltoniemi, “Multiple Scattering by Dense Random Media: Numerical Solution”, [Abstrakti], 2016 URSI International Symposium on Electromagnetic Theory (EMTS).
- [24] J. Markkanen, A. Yuffa, “Fast superposition  $T$ -matrix solution for clusters with arbitrary-shaped constituents particles”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, lähetetty julkaistavaksi.