

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

<http://semr.math.nsc.ru>

Том 20, №1, стр. 486–500 (2023)
DOI 10.33048/semi.2023.20.029УДК 519.6, 519.245
MSC 65C05, 68U20ЧИСЛЕННОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ОПТИЧЕСКОЙ РАДИАЦИИ В
СЛУЧАЙНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СРЕДАХ

Б.А. КАРГИН, Ц. МУ, Е.Г. КАБЛУКОВА

ABSTRACT. The problem of numerical Monte Carlo simulation of the process of optical radiation transfer in scattering media, the scattering elements of which are transparent or semitransparent crystal particles, is considered. Among a large number of applications that require solving the equation for the transfer of electromagnetic radiation in the optical wavelength range in crystal media, the main attention is paid to solving one of the most important problems in atmospheric optics - the study of solar radiation transfer in cirrus clouds consisting of ice crystal particles. The main goal of such a study is to construct an adequate radiation model of crystal clouds, taking into account multiple scattering. In this paper, we consider two algorithms for numerical simulation of radiation transfer based on the Monte Carlo method and ray tracing. The first algorithm can be called traditional. It is well known and widely used by many authors for estimating linear functionals of the solution of the optical radiation transfer equation in isotropic media, in which the scattering phase functions do not depend on the direction of motion of photon, but are functions of the scattering angles. Such a model works well for media such as atmospheric aerosol or liquid drop clouds, in which scattering occurs on particles of spherical shape. In this context, this algorithm is adapted to the problems of radiation transfer in anisotropic crystal media. Its application to crystal media requires obtaining and storing a significant amount of initial data on the primary optical characteristics

KARGIN, B.A., MU, Q., KABLUKOVA, E.G., NUMERICAL STATISTICAL MODELING OF OPTICAL RADIATION TRANSFER IN RANDOM CRYSTAL MEDIA.

© 2022 КАРГИН Б.А., МУ Ц., КАБЛУКОВА Е.Г.

Работа выполнена при финансовой поддержке CSC (China Scholarship Council) и в рамках проекта гос. задания 0251-2021-0002.

Поступила 18 августа 2022 г., опубликована ?? июня 2023 г.

(attenuation coefficients and volume phase functions (second-rank tensors) of radiation scattering) necessary for modeling scattering processes. This volume especially increases for inhomogeneous stochastic scattering media, in which the shape, size, and orientation of particles are random functions of spatial coordinates. The key idea of the second, alternative algorithm is that in the process of modeling photon trajectories, the direction of scattering of a photon after a collision with a crystal is calculated using ray tracing, provided that the shape, size, and orientation of the particle are previously randomly selected from some random distribution that specifies the composition of the scattering environment. In this algorithm, there is no need for preliminary calculations of a large array of data on the primary optical characteristics of scattering media. The algorithm has a limitation on the size of crystal particles: their linear size must significantly exceed the radiation wavelength, since the laws of geometric optics are used in modeling the scattering angles and wave effects are not taken into account.

Keywords: Monte Carlo method, geometric optics, radiative transfer, Cirrus clouds.

1. ВВЕДЕНИЕ

Процесс переноса квантов света (фотонов) в рассеивающих и поглощающих средах в приближении геометрической оптики описывается интегро - дифференциальным кинетическим уравнением Больцмана (см., например, [1, 2]). Исходными параметрами и функциями, определяющими в этом уравнении процессы рассеяния и поглощения частиц в случайных точках столкновения, являются коэффициенты ослабления, альbedo однократного рассеяния и индикатрисы рассеяния (угловые распределения интенсивности однократно рассеянного излучения частицами заданных размеров, форм и ориентаций). Для расчета этих характеристик, в свою очередь, нужна детальная информация о структуре таких микрофизических параметров рассеивающих сред, как концентрации и распределения частиц по формам, размерам и пространственной ориентации (для частиц несферических форм). В силу чрезвычайной пространственной изменчивости этих характеристик в реальных рассеивающих кристаллических средах их микрофизические и оптические модели могут быть адекватно описаны только в терминах случайных функций, что, в свою очередь, позволяет строить не только статистически усредненные радиационные модели, но и оценивать пространственные вариации параметров радиационных полей. Решение этой стохастической задачи возможно только средствами статистического моделирования (методом Монте-Карло).

Для рассеивающих сред, различающихся по составу, размерам и пространственным ориентациям кристаллических частиц несферических форм, требуется вычислять отдельные наборы объемных индикатрис рассеяния в матричной форме (соответствующие матрицы являются тензорами второго ранга) для каждой отдельной частицы случайного размера со случайными ориентацией и формой. Особенностью этого процесса является то, что при попадании фотонов на прозрачные кристаллические частицы они проникают внутрь частиц и перед вылетом из них фотоны испытывают внутри многократные отражения от граней этих частиц. В большом количестве известных литературных источников (например, [3-9]) подобные задачи традиционно решаются методами

физической оптики для детерминированных сред с заранее заданным набором кристаллических частиц. Такой подход требует предварительного расчета матриц однократного рассеяния (тензоров третьего ранга) и эффективных сечений ослабления оптического излучения для огромного набора кристаллов разных размеров, форм и ориентаций. По оценкам, приведенным в работе [10], такой расчет методом Монте-Карло в приближении геометрической оптики при самых минимальных требованиях к точности модели и объему статистической выборки требует моделирования более 10^{14} траекторий фотонов. При этом в памяти компьютера необходимо хранить как минимум 10^{10} элементов тензора рассеяния. В данной работе наряду с традиционным алгоритмом представлен новый алгоритм, позволяющий в одном расчете вычислять характеристики переноса оптического излучения в кристаллических средах для любого набора частиц случайных форм, размеров и ориентаций без предварительного расчета вышеуказанного тензора рассеяния. Важно отметить, что в разработанном алгоритме, основанном на законах геометрической оптики, предполагается, что размер кристаллических частиц значительно превышает длину волны излучения. Вычисление нового направления движения фотона после рассеяния случайной кристаллической частицей производится непосредственно в ходе моделирования его траектории методом трассировки лучей. В данном случае нет необходимости хранить большие объемы данных об индикатрисах рассеяния излучения для различных углов падения фотона на кристаллические частицы разных размеров, форм и пространственных ориентаций. Этот алгоритм позволяет легко изменять состав рассеивающей среды даже в процессе работы программы. Оба рассмотренных алгоритма предназначены для численного решения одних и тех же задач переноса оптического излучения для стохастических моделей рассеивающих сред, в которых формы кристаллов, их концентрации и ориентации являются случайными функциями. При этом алгоритмы имеют разную трудоемкость и возможность расширения микрофизических моделей.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим задачу прохождения оптического излучения через плоской слой $0 \leq z \leq H$ однородного рассеивающего и поглощающего вещества. Взаимодействие фотонов с веществом будем характеризовать объемными коэффициентами ослабления σ_e , рассеяния σ_s и поглощения σ_a ($\sigma_e = \sigma_s + \sigma_a$) и индикатрисой рассеяния $g(\omega', \omega)$, нормированной условием $\int_{\Omega} g(\omega', \omega) d\omega = 1$. Здесь ω' и ω - единичные векторы направлений движения фотона до и после рассеяния соответственно. Для численного решения этой задачи методом Монте-Карло процесс распространения фотонов удобнее описывать вместо интегро - дифференциального уравнения переноса эквивалентным ему интегральным уравнением для плотности столкновений [11, стр. 16], для которой можно получить физическое моделирование процесса переноса

$$(1) \quad f(\mathbf{x}) = \int_X k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' + \psi(\mathbf{x}),$$

где $f(\mathbf{x})$ - плотность столкновений в точке \mathbf{x} фазового пространства X координат и направлений, $\psi(\mathbf{x})$ - плотность распределения источников. Ядро этого

уравнения имеет вид ([11, стр. 15])

$$(2) \quad k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \sigma_s g(\mu) \frac{e^{-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r})}}{2\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \delta\left(\boldsymbol{\omega} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right)$$

и является плотностью перехода из точки $\mathbf{x}' = (\mathbf{r}', \boldsymbol{\omega}')$ в точку $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega})$, определяющей марковскую цепь столкновений фотонов с элементами вещества. В (2) $\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \sigma_e |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$ - оптическая длина пути от точки \mathbf{r}' до точки \mathbf{r} . В самой общей постановке рассматривается задача оценки линейных функционалов от решения уравнения (1) в виде $J_\chi = (f(\mathbf{x}), \chi(\mathbf{x}))$, где $\chi(\mathbf{x}) \geq 0$ - некоторая неотрицательная функция. Уравнение (1) с ядром (2) описывает процесс переноса фотонов в изотропной среде, в которой коэффициенты $\sigma_e, \sigma_s, \sigma_a$ и индикатриса рассеяния $g(\mu)$ не зависят от направления $\boldsymbol{\omega}'$, здесь μ - косинус угла рассеяния: $\mu = (\boldsymbol{\omega}', \boldsymbol{\omega})$. Этот случай соответствует процессу переноса излучения, например, в аэрозольных и жидко капельных средах. В них рассеяние происходит на частицах сферической формы, равномерно распределенных в слое во всех направлениях. Оптические модели таких сред можно найти, например, в [12, 13]. В неоднородных средах коэффициенты $\sigma_e, \sigma_s, \sigma_a$ зависят от пространственных координат. В отличие от изотропных сред кристаллические среды вследствие разных типов, форм и ориентаций кристаллических частиц являются анизотропными. Это значительно усложняет оптическую модель рассеивающей среды. Предположим, что в единичном объеме среды присутствует набор кристаллов из m массивов частиц, сгруппированных по признаку форм, а общее число частиц в единице объема (счетная концентрация частиц) равно $M = \sum_{\nu=1}^m m_\nu$, где m_ν - счетная концентрация частиц ν -го типа. Все частицы каждой группы могут иметь разные размеры, которые являются случайными величинами, распределенными с плотностью $P_\nu(\rho), \nu = \overline{1, m}$. В качестве размеров частиц несферических форм ρ можно принимать величины так называемых форм-факторов, равных отношению длины выделенной главной оси частицы к выделенному эффективному диаметру основания. Для описания и моделирования случайных ориентаций кристаллов в трехмерном пространстве, заданных плотностями распределения вероятностей $P_{\Theta, \nu}(\alpha, \beta, \gamma)$, используется система угловых координат Эйлера α, β, γ [14], определяющих вращение частиц относительно лабораторной декартовой системы координат. Обозначим оси лабораторной системы координат через (x, y, z) , оси преобразованной системы координат как (X, Y, Z) . Пересечение координатных плоскостей xy и $X'Y'$ называется линией узлов N . (см. Рис.1).

В этой модели тензоры ослабления $\Sigma_e(\boldsymbol{\omega})$ и рассеяния $\bar{g}[\boldsymbol{\omega}', \boldsymbol{\omega}]$, входящие в ядро (2) уравнения (1), осредненные по распределениям размеров, форм и ориентаций кристаллов, вычисляются по формулам

$$(3) \quad \begin{aligned} \Sigma_e(\boldsymbol{\omega}) &= \frac{1}{m} \sum_{\nu=1}^m m_\nu \int_0^{2\pi} P_{\Theta, \nu}(\alpha, \beta, \gamma) \left[\int_0^\pi \left[\int_0^{2\pi} \left[\int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \times P_\nu(\rho_\nu) S_{e, \nu}(\boldsymbol{\omega}, (\alpha, \beta, \gamma), \rho_\nu) d\rho_\nu \right] d\alpha \right] d\beta \right] d\gamma, \\ \bar{g}[\boldsymbol{\omega}', \boldsymbol{\omega}] &= \frac{1}{m} \sum_{\nu=1}^m \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} P_\nu(\rho_\nu) \left[\int_0^{2\pi} \left[\int_0^\pi \left[\int_0^{2\pi} P_{\Theta, \nu}(\alpha, \beta, \gamma) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \times g_\nu(\boldsymbol{\omega}', \boldsymbol{\omega}, (\alpha, \beta, \gamma), \rho_\nu) d\gamma \right] d\beta \right] d\alpha \right] d\rho_\nu, \end{aligned}$$

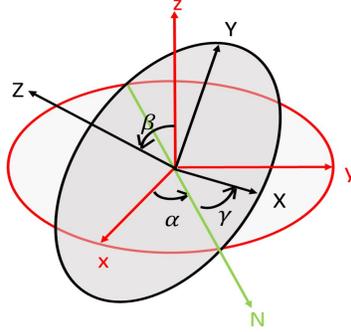


Рис. 1. К определению углов Эйлера (XYZ - система координат, полученная вращением лабораторной системы координат xyz на углы α, β, γ , пересечение координатных плоскостей xy и XY - линия узлов N)

В этих условиях ядро (2) при отсутствии поглощения приобретает вид

$$(4) \quad k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \Sigma_e(\omega) \bar{g}[\omega', \omega] \frac{e^{-\Sigma_e(\omega)l}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \delta\left(\omega - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right), \mathbf{r} = \mathbf{r}' + \omega l, l = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|.$$

Физический смысл функции $S_{e,\nu}(\omega, (\alpha, \beta, \gamma), \rho_\nu)$, входящей в выражение для $\Sigma_e(\omega)$, - это площадь проекции кристалла ν -го типа и размера ρ_ν с пространственной ориентацией, заданной углами Эйлера α, β, γ на плоскость, перпендикулярную вектору ω . По теореме оптической экстинкции дифракционная составляющая равна лучевой [6, стр.98], поэтому для учета эффекта дифракции функцию $S_{e,\nu}(\omega, (\alpha, \beta, \gamma), \rho_\nu)$ нужно умножить на 2. Здесь полезно добавить, что для некоторых частиц правильной формы существуют аналитические формулы для вычисления площади проекции частицы в заданном направлении. Рассмотрим, например, правильную гексагональную призму с диаметром основания d и высотой боковой стороны h , на которую падает излучение в направлении с зенитным углом θ и азимутальным углом η (см. рис. 2). Площадь проекции гексагональной призмы на плоскость, перпендикулярную направлению ω описывается формулой [6, стр.98]

$$S(\theta, \eta) = \frac{3\sqrt{3}d^2}{8} \sin\theta + dh \cos\theta \cos(\pi/6 - \eta).$$

Для хаотически ориентированных гексагональных призм, с учетом теоремы оптической экстинкции и интегрирования по всем входящим направлениям, сечение ослабления излучения равно $S_{e,\nu} = 3/4(\sqrt{3}d^2/4 + dh)$.

Углы Эйлера, определяющие вращения кристаллов относительно центра лабораторной декартовой системы координат, задаются в узлах сетки $\{\alpha_i, \beta_j, \gamma_k : i = \overline{1, n_\alpha}, j = \overline{1, n_\beta}, k = \overline{1, n_\gamma}\}$, $n_\alpha, n_\beta, n_\gamma$ - соответствующее количество узлов. Интегралы в (3) вычисляются комбинацией стандартного метода Монте-Карло [15] с использованием трассировки лучей, проникающих внутрь кристаллов, с заменой интегралов суммированием по узловым значениям подынтегральных функций в узлах $\alpha_i, \beta_j, \gamma_k$ с линейной интерполяцией между узлами. Эта модель позволяет для проведения требуемых расчетов применить традиционную

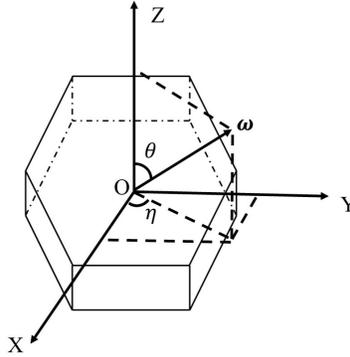


Рис. 2. Определение углов θ и η при вычислении коэффициента ослабления

схему моделирования (см. [11]), т. е. рассматривать акты рассеяния фотонов при столкновениях в случайных точках. Для определенности уточним сформулированную выше задачу. Граница $z = 0$ слоя $0 \leq z \leq H$, заполненного рассеивающими свет кристаллическими частицами, освещается бесконечно широким световым потоком единичной мощности в направлении ω_0 . Требуется вычислить долю светового потока, вышедшего из слоя через границу $z = H$. В этом случае в уравнении (1) функция источника $\psi(\mathbf{x}) = \psi((x, y, z), \omega) = \delta(z)\delta(\omega - \omega_0)$, а функция

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{при } z \geq H, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

При этом функционал J_χ есть ничто иное, как вероятность прохождения фотона через слой $0 \leq z \leq H$. Если требуется оценить угловое распределение выходящего из слоя излучения в полупространство $z > H$, то вектор направления вылета фотона из слоя ω удобно задавать в сферической системе координат θ, η с началом в точке пересечения фотоном плоскости $z = H$, $\theta \in [0, \pi/2]$ - широтный угол, отсчитываемый от оси, параллельной оси Oz , а $\eta \in [0, 2\pi]$ - азимутальный угол, отсчитываемый от оси Ox по часовой стрелке. Наиболее просто искомое угловое распределение вычислять в виде гистограммы по угловым переменным. Для этого область определения углов θ, η представляется в виде сетки узлов $\{\theta_i, i = 0, \dots, n_\theta\}$ и $\{\eta_j, j = 1, \dots, n_\eta\}$. В этом случае функция $\chi(\mathbf{x})$ задается следующим выражением:

$$\chi(\mathbf{x}) = \chi[(x, y, H), (\theta, \eta)] = \begin{cases} 1 & \text{при } \theta \in [\theta_{i-1}, \theta_i], \eta \in [\eta_j, \eta_{j+1}], \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Традиционный алгоритм решения методом Монте-Карло уравнения переноса излучения (1) в кристаллических средах, как указывалось в разделе 2, требует предварительного оценивания функций $\Sigma_e(\omega)$ и $\bar{g}[\omega', \omega]$. Процедура вычисления этих тензоров описана в [10]. Далее строятся траектории движения фотонов в виде ломаных линий со случайными длинами прямолинейных

участков и случайными углами изменения направления движения в точках рассеяния [11]. Прямой алгоритм моделирования методом Монте-Карло марковской цепи столкновений траекторий фотонов в рассеивающей среде состоит в следующем.

Пусть задана лабораторная декартова система координат $x y z$, в которой слой рассеивающего вещества ограничен плоскостями $z = 0$ и $z = H$. Пусть после $(k - 1)$ -го столкновения в точке \mathbf{r}_{k-1} фотон движется вдоль вектора $\boldsymbol{\omega}_{k-1}$ (для первого столкновения фотон испускается из точки \mathbf{r}_0 в направлении $\boldsymbol{\omega}_0$). Случайное значение длины свободного пробега l до следующей точки столкновения в соответствии с плотностью распределения вероятности $f_l(t) = \Sigma_e(\boldsymbol{\omega}_{k-1}) \exp(-\Sigma_e(\boldsymbol{\omega}_{k-1})t)$ вычисляется по формуле $l = -\ln(\zeta) / \Sigma_e(\boldsymbol{\omega}_{k-1})$, где ζ - случайное число, распределенное равномерно в интервале $(0, 1)$. Координаты точки k -го столкновения вычисляются по формуле $\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_{k-1} + \boldsymbol{\omega}_{k-1}l$. После каждого определения очередной точки столкновения производится проверка вылета из среды. Если фотон вылетел из среды, то траектория обрывается и моделируется новая траектория. Если фотон вылетел в полупространство $z > H$, то в счетчик для функционала J_χ заносится случайная величина W , которая зависит от оптических свойств кристаллов, определяемых комплексным показателем преломления $\mathbf{n} = n - i\kappa$, где $i = \sqrt{-1}$. Действительная часть показателя преломления отвечает за отражение и преломления света на гранях кристалла, а мнимая часть отвечает за ослабление пучка в результате поглощения внутри кристалла. В случае прозрачных кристаллов, т.е. в отсутствие поглощения, $W = 1$. Если $\kappa \neq 0$, то часть излучения поглощается в кристалле. В отличие от модели поглощения фотонов частицами аэрозолей или каплями воды, в которой поглощение в случае его наличия происходит при столкновениях, в данном случае пучок излучения ослабляется на пути от попадания фотонов внутрь кристаллов до вылета и определяется длинами этих путей для каждого отдельного фотона. Эти длины L являются случайными функциями, зависящими от направления движения фотона $\boldsymbol{\omega}'$ перед попаданием в кристалл, от формы и размера кристалла, заданными плотностью распределения $P_\nu(\rho_\nu)$, а также от ориентации кристалла, задаваемой углами Эйлера (α, β, γ) . Таким образом, в данной «столкновительной» модели, описываемой уравнением (1), ядро (4) нужно умножить на функцию

$$Q_a(\boldsymbol{\omega}') = \frac{1}{m} \sum_{\nu=1}^m \int_0^{2\pi} \left[\int_0^\pi \left[\int_0^{2\pi} \left[\int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} P_{\Theta,\nu}(\alpha, \beta, \gamma) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times P_\nu(\rho_\nu) e^{-\sigma_{a,cr} L(\boldsymbol{\omega}', (\alpha, \beta, \gamma), \rho_\nu)} d\rho_\nu \right] d\alpha \right] d\beta \right] d\gamma. \quad (5)$$

Здесь $\sigma_{a,cr}$ - коэффициент поглощения кристаллического вещества. Для частицы льда величину этого коэффициента можно найти, например, в [13, стр.99]. Функция $Q_a(\boldsymbol{\omega}')$ играет роль альбедо однократного рассеяния в модели, описываемой уравнением (1). Она, как и тензоры $\Sigma_e(\boldsymbol{\omega})$ и $\bar{g}[\boldsymbol{\omega}', \boldsymbol{\omega}]$ в (3), предельно вычисляется методом Монте-Карло с применением трассировки лучей внутри кристаллов. Вклад W в оценку функционала J_χ от произвольной случайной s -й траектории с $n_{s,k}$ столкновениями при наличии поглощения

вычисляется по формуле $W_s = \prod_{n=1}^{n_{s,k}} Q_n(\omega'_{n-1})$. Таким образом, по результатам моделирования ансамбля из S независимых траекторий фотонов оценивается искомый функционал $J_\chi \approx 1/S \sum_{s=1}^S W_s$ с относительным среднеквадратическим отклонением $\delta_W \approx \sqrt{DW}/J_\chi$, где DW оценивается по формуле $DW \approx 1/S [1/S \sum_{s=1}^S W_s^2 - [1/S \sum_{s=1}^S W_s]^2]$.

Далее опишем подробнее процедуру случайного выбора нового направления движения фотона после рассеяния в «столкновительной» модели. Единичный вектор направления движения фотона ω , исходящий из точки столкновения \mathbf{r} , будем задавать в сферической системе координат θ, η с полюсом в точке \mathbf{r} относительно локальной декартовой системы координат с началом в точке \mathbf{r} : $\omega = (\theta, \eta)$, $\theta \in [0, \pi]$ - зенитный угол, отсчитываемый от оси, параллельной оси Oz , а $\eta \in [0, 2\pi]$ - азимутальный угол, отсчитываемый от оси Ox по часовой стрелке. Предполагаем, что полный телесный угол 4π представлен в виде сетки узлов по координатам $\theta \in [0, \pi]$ и $\eta \in [0, 2\pi]$: $\{\theta_i, i = 0, \dots, n_\theta\}$ и $\{\eta_j = 1, \dots, n_\eta\}$. Согласно процедуре, представленной в [10], методом трассировки лучей внутри кристаллов для тензора $\bar{g}[\omega', \omega]$ получена оценка в виде гистограммы по угловым сегментам телесного угла 4π по переменным θ, η . В этих условиях моделирование нового направления ω после рассеяния фотона, имевшего до рассеяния направление движения ω' , осуществляется по следующей схеме. По определению $\int_{4\pi} \bar{g}[\omega', \omega] d\omega = 1$. Отсюда $\sum_{i=0}^{n_\theta} \sum_{j=1}^{n_\eta} \bar{g}_{i,j}[\omega', \omega] \Delta_{\omega,i,j} = 1$ при $\omega(\theta, \eta) \in \Delta_{\omega,i,j}$, где угловые сегменты $\Delta_{\omega,i,j}$ определены условиями $\theta_{i-1} < \theta \leq \theta_i, \eta_j < \eta \leq \eta_{j+1} : \{i = 1, \dots, n_\theta, j = 1, \dots, n_\eta - 1\}$. Разыгрывается очередное случайное число ς , распределенное равномерно в интервале $(0, 1)$. Выполняется суммирование рекуррентной последовательности $\Sigma_\varsigma = \sum_{i=0}^{n_\theta} [\sum_{j=1}^{n_\eta} \bar{g}_{i,j}[\omega', \omega] \Delta_{\omega,i,j}]$ до первого момента, когда выполняется неравенство $\Sigma_\varsigma > \varsigma$. Если это происходит при индексах $i = i_\varsigma$ и $j = j_\varsigma$, то это означает, что новое направление $\omega \in \Delta_{\omega,i_\varsigma,j_\varsigma}$. Внутри сегмента $\Delta_{\omega,i_\varsigma,j_\varsigma}$ выбираются случайные значения $\theta_\varsigma, \eta_\varsigma$ по правилу: $\theta_\varsigma = \theta_{i_\varsigma-1} + (\theta_{i_\varsigma} - \theta_{i_\varsigma-1}) \times \varsigma_1$ и $\eta_\varsigma = \eta_{j_\varsigma} + (\eta_{j_\varsigma+1} - \eta_{j_\varsigma}) \times \varsigma_2$. Здесь ς_1 и ς_2 - два очередных независимых случайных числа, распределенных равномерно на отрезке $(0, 1)$. В качестве вектора нового направления после рассеяния берется вектор $\omega(\theta_\varsigma, \eta_\varsigma)$.

Этот алгоритм имеет ограничения. Первое из них – необходимость обширных предварительных расчетов тензоров $\bar{g}[\omega', \omega]$ и $\Sigma_e(\omega)$, требующих значительных вычислительных ресурсов и последующего хранения большого банка данных в памяти компьютера. Второе ограничение связано с тем, что каждое изменение микрофизических параметров рассеивающей среды (например, изменение концентраций частиц разного типа или учет разных форм шероховатости граней кристаллов) требует пересчета этих тензоров.

Далее рассматривается альтернативный алгоритм, основанный на сочетании прямого моделирования методом Монте-Карло траекторий фотонов, испытывающих рассеяния кристаллическими частицами, при этом рассеяние попавших внутрь кристаллов фотонов моделируется методом трассировки лучей. В этом алгоритме процедура предварительных расчетов тензоров рассеяния $\bar{g}[\omega', \omega]$ и $\Sigma_e(\omega)$ не требуется. Здесь схема моделирования следующая. В очередной точке столкновения \mathbf{r}' фотон, имеющий некоторое направление движения ω' , попадает на поверхность случайного кристалла. Из соответствующих распределений случайным образом выбирается тип частицы, размер и

пространственная ориентация. В опорную сферу с центром в точке r' помещается выбранная частица, которая из направления ω освещается некоторым количеством фотонов до тех пор, пока фотон не попадет в некоторую случайную точку на поверхности кристалла. Для определения точки пересечения вектора ω и кристаллической частицы используется следующая процедура (см. Рис. 3). Радиус опорной сферы R должен быть такого размера, чтобы случайно выбранная частица с внутренней центральной точкой, помещенной в центр сферы, при всех вращениях помещалась внутри сферы. Моделируется случайная точка (x', y', z') , равномерно распределенная в круге $(x - x')^2 + (y - y')^2 \leq R^2$, $z = z'$. Далее производится поворот плоскости $z = z'$ таким образом, чтобы вектор ω' стал нормальным вектором для преобразованной плоскости. Для этого выполняется поворот плоскости относительно оси Ox на угол θ и относительно оси Oz на угол η :

$$\begin{bmatrix} x_\zeta \\ y_\zeta \\ z_\zeta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\eta & -\sin\eta & 0 \\ \sin\eta & \cos\eta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x'_\zeta \\ y'_\zeta \\ z'_\zeta \end{bmatrix}.$$

Способом, описанным в [16], определяется точка пересечения вектора $-\omega$, исходящего из точки $(x_\zeta, y_\zeta, z_\zeta)$, с гранью кристалла. В случае, если вектор $-\omega$ не пересекает кристалл, процедура повторяется с моделирования следующей случайной точки $(x'_\zeta, y'_\zeta, z'_\zeta)$. Отражение или преломление луча ω поверхностью

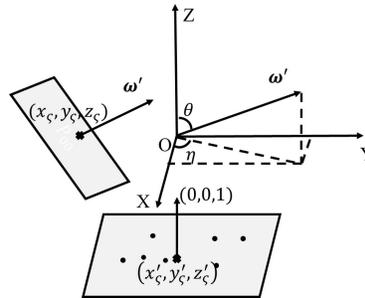


Рис. 3. Геометрическое представление алгоритма моделирования случайной точки и вычисления вектора направления до рассеяния

кристалла происходит по законам лучевой оптики на элементарной площадке с вектором нормали s , касательной к поверхности кристалла в точке пересечения. С вероятностью $P(\omega, s)$ происходит зеркальное отражение в направлении $\omega_{refl} = \omega - 2(\omega, s)s$, а с вероятностью $1 - P(\omega, s)$ происходит преломление в направлении $\omega_{refr} = v\omega - Ds$. Здесь $P(\omega, s)$ - коэффициент отражения Френеля, который для удобства вычислений записывается в следующей преобразованной форме

$$P(\omega, s) = \frac{(|A| - B)^2(A^2B^2 + C^2)}{(|A| + B)^2(|A|B + C)^2}, \quad A = (\omega, s),$$

$$B = \begin{cases} \sqrt{n_{i,a}^2 - 1 + A^2} & A < 0, \\ \sqrt{1/n_{i,a}^2 - 1 + A^2} & A > \sqrt{1 - 1/n_{i,a}^2}, \\ 0 & 0 \leq A \leq \sqrt{1 - 1/n_{i,a}^2}. \end{cases}$$

$$C = 1 - A^2, \quad D = A - \text{sign}(A)B, \quad v = \begin{cases} 1/n_{i,a} & A \leq 0, \\ n_{i,a} & A > 0. \end{cases}$$

Здесь $n_{i,a}$ - действительная часть комплексного коэффициента преломления света гранью кристалла.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

При проведении численных расчетов было использовано 4 типа частиц (см. Рис. 4): эллипсоид с полуосями (a_e, b_e, c_e) , эллиптический цилиндр с полуосями основания (a_c, b_c) и высотой h_c , призма правильной или неправильной формы с числом вершин при основании N_V , высотой h_p и полуосями эллипса a_p, b_p , описанного около основания. Четвертой моделью кристаллов является выпуклый многогранник случайной формы, который представляет собой выпуклую оболочку случайно сгенерированных точек в некотором заданном объеме [17-21].

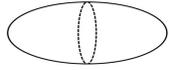
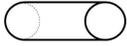
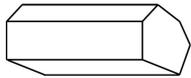
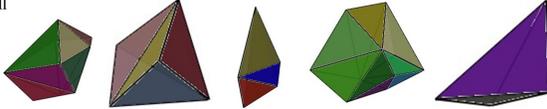
1	Ellipsoid 	Special typical model -- Sphere 
2	Elliptic cylinder 	Special typical model -- Circular column 
3	Prism 	Special typical model -- hexagonal prism 
4	Convex hull 	

Рис. 4. Типы тестируемых моделей частиц в случайных перистых облаках

Для проверки правильности моделирования проводилось сравнение вычисленных индикатрис с расчетами других авторов. Так как основные шаги в процессе нахождения направления рассеяния, описанные выше, совпадают с процессом вычисления индикатрисы рассеяния методом геометрической оптики и трассировки лучей, то для проверки корректности предложенного алгоритма были разработаны коды программ для определения индикатрис рассеяния частицами различных форм, результаты численных экспериментов сравнивались с расчетами из работ [8, 9]. В расчетах показатель преломления льда был равен $n = 1.311$. На рис. 5 (слева) представлены вычисленные индикатрисы рассеяния для кругового цилиндра (с параметрами $h_c/2 = a_c = b_c$) и правильной

гексагональной призмы (с параметрами $a_p = b_p = h_p/2$) с хаотической ориентацией, которые визуальнo совпадают с результатами из работы [8, fig.2]. На рис. 5 (справа) вычисленные индикатрисы рассеяния для сфероидов (с соотношением осей 3 : 3 : 4) и сфер сравниваются с результатами из работы [9]. Сравнения показали хорошее согласие результатов, из чего делаем вывод, что разработанные программы работают корректно. Также были проведены расчеты пропус-

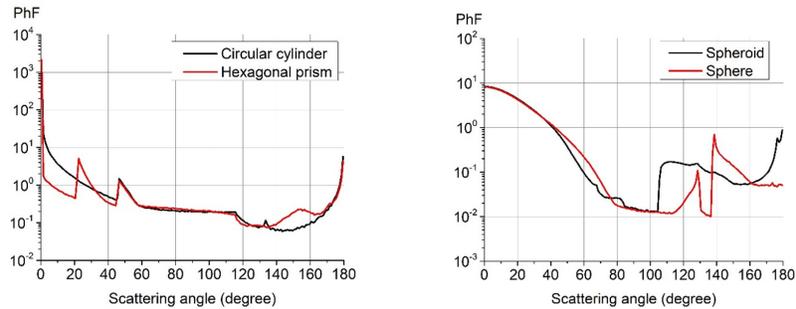


Рис. 5. Индикатрисы рассеяния для кругового цилиндра и правильной гексагональной призмы с хаотической ориентацией (слева). Индикатрисы рассеяния для сфероидов и сфер (справа)

кания и отражения излучения для плоского однородного рассеивающего слоя, состоящего из одинаковых хаотически ориентированных правильных гексагональных ледяных призм (действительная часть показателя преломления 1.31), двумя способами: с использованием предварительно вычисленных индикатрис рассеяния и с вычислением направлений рассеяния непосредственно при моделировании траекторий фотонов («in situ tracing»). Вероятность выживания фотона при столкновении равна $q = 0.9936$. На рис. 6 приведены значения вероятности отражения R_1, R_2 , пропускания T_1, T_2 и поглощения A_1, A_2 горизонтального слоя с оптической толщиной τ . Начальный угол падения излучения равен 0. Индексом 1 обозначены величины, рассчитанные методом «in situ tracing», значения с индексом 2 получены с использованием заранее вычисленных индикатрис рассеяния. В двух описанных алгоритмах при одинаковом числе моделируемых фотонов относительная погрешность вычисления вероятностей отражения, поглощения и пропускания статистически совпадает. В таблице 1 приведены результаты расчетов вероятности отражения R_1 , поглощения A_1 , пропускания T_1 и относительная погрешность $\Delta R_1, \Delta A_1, \Delta T_1$ алгоритмом с вычислением угла рассеяния непосредственно при моделировании траектории фотона для кристаллических облаков, состоящих из гексагональных призм, с оптической толщиной τ . Максимальная относительная погрешность расчета равна 0,024 при числе траекторий 10^5 . Но время моделирования траекторий фотонов алгоритмом 1 более, чем в 2 раза превышает время моделирования траекторий фотонов алгоритмом 2. В частности, для рассеивающего и поглощающего слоя с оптической толщиной $\tau = 1$, время моделирования одной траектории алгоритмом 1 равно $t_1 = 4,65 \times 10^{-6}$ с, а алгоритмом 2, $t_2 = 2,01 \times 10^{-6}$

ТАБЛИЦА 1. Результаты расчетов вероятности отражения R_1 , поглощения A_1 , пропускания T_1 и относительная погрешность $\Delta R_1, \Delta A_1, \Delta T_1$ алгоритмом с вычислением угла рассеяния непосредственно при моделировании траектории фотона для кристаллических облаков, состоящих из гексагональных призм, с оптической толщиной τ

τ	R_1	A_1	T_1	ΔR_1	ΔA_1	ΔT_1
1	0.1346	0.0195	0.8459	0.00795	0.02448	0.00134
5	0.4534	0.1013	0.4453	0.00304	0.00921	0.00408
10	0.5890	0.1885	0.2225	0.00245	0.00646	0.00673
15	0.6107	0.2641	0.1252	0.00233	0.00538	0.00973
20	0.6284	0.2981	0.0735	0.00226	0.00498	0.01378

с, для $\tau = 5$, $t_1 = 3,75 \times 10^{-5}$ с, $t_2 = 1,49 \times 10^{-5}$ с. Но, учитывая, что на вычисление тензоров ослабления и рассеяния затрачивается значительное количество времени, предложенный алгоритм будет эффективнее алгоритма 2 при необходимости предварительной оценки данных тензоров.

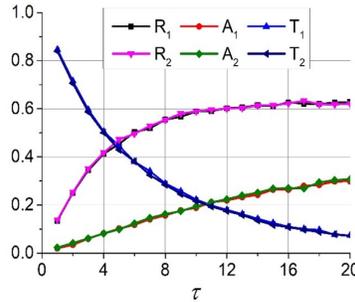


Рис. 6. Результаты расчетов вероятности отражения R_1, R_2 , пропускания T_1, T_2 и поглощения A_1, A_2 алгоритмами с вычислением угла рассеяния непосредственно при моделировании траектории фотона (индекс 1), и с использованием заранее вычисленной индикатрисы (с индексом 2) для кристаллических облаков, состоящих из гексагональных призм, с оптической толщиной τ

В следующих численных экспериментах проведено исследование влияния состава рассеивающего слоя на его альbedo и пропускание для хаотически ориентированных крупных частиц различных форм. Рассмотрены два варианта состава среды: 1) все частицы одинаковы и хаотически ориентированы. 2) частицы одного типа, но различны по соотношениям параметров. При моделировании полуоси эллипсоидов равны 5 для первого состава среды и a_e, b_e, c_e равномерно распределены в области $[1, 6]$ для второго варианта состава. В первом случае используются гексагональные призмы правильной формы с высотой $h_p = 5$, и стороной основания 5, во втором - значения a_p, b_p, h_p равномерно

распределены в области [5, 15]. Для среды, состоящей из многогранников нерегулярной формы в первом варианте моделировались координаты вершин x, y, z в области $[-1, 1]$ и фиксировался один многогранник с количеством граней 8, во втором варианте использовались случайные многогранники с вершинами, равномерно распределенными в области $[-1, 1]$. Остальные параметры среды задавались одинаковыми для всех экспериментов: толщина слоя $150(m)$, коэффициент ослабления среды $0,02(m^{-1})$, показатель преломления кристаллов 1,33, поглощение отсутствует. Число траекторий для каждого варианта расчета 10^6 , максимальная относительная погрешность расчёта 0,0026. На рис. 7 представлено угловое распределение вероятности отражения рассеивающего слоя в зависимости от зенитного угла падения излучения (угол между направлением падения и нормалью к слою) $\theta \in [0, 90^\circ]$, для среды, состоящей из одинаковых частиц (слева), и для среды, состоящей из частиц с различным соотношением линейных размеров (справа). Из рис. 7 видно, что форма частиц значительно влияет на значения альбеда слоя. Кроме того, для слоя, состоящего из одинаковых хаотически ориентированных гексагональных призм, вероятность отражения при зенитных углах $\theta < 70^\circ$ больше, чем для слоя, состоящего гексагональных призм с различным соотношением размеров.

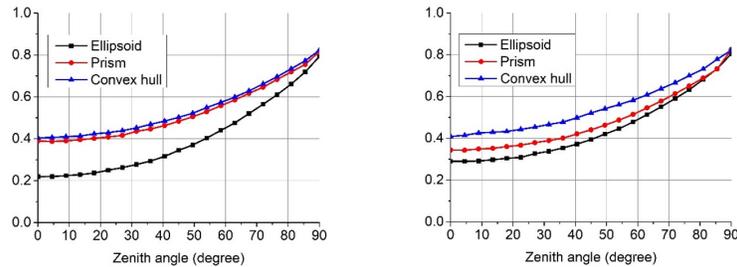


Рис. 7. Угловое распределение альбеда слоя, состоящего из хаотически ориентированных кристаллических частиц в форме эллипсоидов (ellipsoid), призм (prism) и многогранников неправильной формы (convex hull). Слева все частицы имеют одну и ту же форму, справа - параметры формы частиц имеют случайные значения

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе для решения задачи переноса излучения в кристаллических облаках, состоящих из частиц с размером существенно большим длины волны излучения, рассмотрено два алгоритма. В отличие от традиционной схемы моделирования в альтернативном алгоритме новое направление рассеяния вычисляется непосредственно при моделировании траектории фотона методом трассировки лучей по законам геометрической оптики. Валидация алгоритмов произведена путем сравнения результатов расчетов двумя алгоритмами между собой, а также путем сравнения с расчетами из работ [8, 9].

В традиционном алгоритме для решения задачи переноса излучения необходимо заранее вычислять набор тензоров рассеяния различными частицами

с необходимой точностью. Альтернативный алгоритм позволяет избежать вычисления и хранения больших массивов данных, требуемых для моделирования рассеяния в кристаллических облаках, в составе которых имеются частицы различных форм и ориентаций. Также при использовании второго алгоритма можно изменять характеристики частиц (форма, шероховатость, ориентация) в зависимости от пространственной координаты без увеличения объема предварительных расчетов и используемой машинной памяти.

Дальнейшим планом исследований является расширение данных алгоритмов для решения задач переноса излучения с учетом поляризации, которая является весьма важной характеристикой, в частности, в обратных задачах дистанционного аэрокосмического пассивного и активного (лазерного) зондирования кристаллических облаков. В силу того, что в общем случае все 16 элементов тензора поляризационного рассеяния являются пятимерными объектами, зависящими от направления падения и направления рассеяния излучения, при альтернативном подходе ожидается, что сокращение объемов исходной информации, требуемой для моделирования рассеяния и пересчета поляризации, будет еще более значительно по сравнению с моделированием по тензорам рассеяния.

REFERENCES

- [1] K.M. Case, P.F. Zweifel, *Linear transport theory*, Addison-Wesley Publishing Company, Mass.-Palo Alto-London-Don Mills, 1967. Zbl 0162.58903
- [2] D.I. Nagirner, *Lectures on the theory of radiation transfer*, St. Petersburg, 2001.
- [3] M.I. Mishchenko, J.W. Hovenier, L.D. Travis, *Light scattering by nonspherical particles: Theory, measurements and geophysical applications*, Academic Press, San Diego, 1999.
- [4] K.-N. Liou, *An Introduction to atmospheric radiation*, Academic Press, San Diego, 2002.
- [5] A. Macke, J. Mueller, E. Raschke, *Single scattering properties of atmospheric ice crystals*, Journal of Atmospheric Sciences, **53**:19 (1996), 2813–2825.
- [6] K.-N. Liou, P. Yang, *Light scattering by ice crystals: fundamentals and applications*, Cambridge University Press, Cambridge, 2016.
- [7] Y. Takano, K.-N. Liou, *Solar radiative transfer in cirrus clouds. Part I: single-scattering and optical properties of hexagonal ice crystals*, Journal of the Atmospheric Sciences, **46**:1 (1989), 3–19.
- [8] A. Macke, M.I. Mishchenko, *Applicability of regular particle shapes in light scattering calculations for atmospheric ice particles*, Appl. Opt., **35**:11 (1996), 4291–4296.
- [9] A.A. Kokhanovsky, T.Y. Nakajima, *The dependence of phase functions of large transparent particles on their refractive index and shape*, Journal of Physics D: Applied Physics, **31**:11 (1998), 1329–1335.
- [10] B.A. Kargin, E.G. Kablukova, Q. Mu, *Numerical stochastic simulation of optical radiation scattering by ice crystals of irregular random shapes*, Computational Technologies, **27**:2 (2022), 4–18.
- [11] G.I. Marchuk, G.A. Mikhailov, M.A. Nazaratiev, R.A. Darbinjan, B.A. Kargin, B.S. Elepov, *The Monte Carlo methods in atmospheric optics*, Springer, Berlin-Heidelberg, 1980.
- [12] V.E. Zuev, G.M. Krekov, *Optical models of the atmosphere*, Gidrometeoizdat, 1986.
- [13] D. Deirmendjian, *Electromagnetic scattering on spherical polydispersions*, American Elsevier Pub Co, New York, 1969.
- [14] G.A. Korn, T.M. Korn, *Mathematical handbook for scientists and engineers: definitions, theorems, and formulas for reference and review*, Dover Publications, Mineola, 2003. Zbl 1326.00020
- [15] G.A. Mikhailov, A.V. Voitishchek, *Numerical statistical modeling. Monte Carlo methods*, Publishing Center Academy, 2006.
- [16] Z.B. Zhang, et al, *Geometrical-optics solution to light scattering by droxtal ice crystals*, Appl. Opt., **43**:12 (2004), 2490–2499.

- [17] D.B. Mark, et al, *Computational geometry algorithms and applications*, Spinger, 2008.
- [18] M.A. Jayaram, F. Hasan, *Convex hulls in image processing: A scoping review*, American Journal of Intelligent Systems, **6**:2 (2016), 48–58.
- [19] R.V. Chadnov, A.V. Skvortsov, *Convex hull algorithms review*, Proceedings. The 8th Russian-Korean International Symposium on Science and Technology, 2004, 112–115.
- [20] D. Pichardie, B. Yves, *Formalizing convex hull algorithms*, In: Boulton, R.J., Jackson, P.B. (eds), *Theorem Proving in Higher Order Logics. TPHOLs 2001*, Lecture Notes in Computer Science, **2152** Springer, Berlin, Heidelberg 2001, 346–361.
- [21] Q. Mu, B.A. Kargin, E.G. Kablukova, *Computer-aided construction of three-dimensional convex bodies of arbitrary shapes*, Computational technologies, **27**:2 (2022), 54–61.

BORIS ALEXANDROVICH KARGIN
THE INSTITUTE OF COMPUTATIONAL MATHEMATICS AND MATHEMATICAL GEOPHYSICS SB
RAS,

PR. AC.LAVRENTIEVA, 6,
630090, NOVOSIBIRSK, RUSSIA
NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY,
1, PIROGOVA STR.,
630090, NOVOSIBIRSK, RUSSIA
Email address: bkargin@osmf.ssc.ru

QUAN MU
NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY,
1, PIROGOVA STR.,
630090, NOVOSIBIRSK, RUSSIA
Email address: mutsyuev@gmail.com

EVGENIYA GENNADEVNA KABLUKOVA
THE INSTITUTE OF COMPUTATIONAL MATHEMATICS AND MATHEMATICAL GEOPHYSICS SB
RAS,

PR. AC.LAVRENTIEVA, 6,
630090, NOVOSIBIRSK, RUSSIA
Email address: jane_k@ngs.ru