

KOMITET METROLOGII I APARATURY NAUKOWEJ  
POLSKIEJ AKADEMII NAUK

**PROBLEMY  
METROLOGII  
ELEKTRONICZNEJ  
I FOTONICZNEJ**

**6**

Praca zbiorowa  
pod redakcją Janusza Mroczi



Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej



PROBLEMY METROLOGII  
ELEKTRONICZNEJ I FOTONICZNEJ



KOMITET METROLOGII I APARATURY NAUKOWEJ  
POLSKIEJ AKADEMII NAUK

**PROBLEMY METROLOGII  
ELEKTRONICZNEJ  
I FOTONICZNEJ**  
**6**

*Praca zbiorowa  
pod redakcją Janusza Mroczki*



Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej  
Wrocław 2013

Opracowanie redakcyjne i korekta  
Hanna JUREK

Projekt okładki  
Janusz MROCZKA

Wszelkie prawa zastrzeżone. Żadna część niniejszej książki, zarówno w całości, jak i we fragmentach, nie może być reprodukowana w sposób elektroniczny, fotograficzny i inny bez zgody wydawcy i właścicieli praw autorskich.

© Copyright by Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2013

OFICYNA WYDAWNICZA POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ  
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław  
<http://www.oficyna.pwr.wroc.pl>  
e-mail: [oficwyd@pwr.wroc.pl](mailto:oficwyd@pwr.wroc.pl)  
[zamawianie.książek@pwr.wroc.pl](mailto:zamawianie.książek@pwr.wroc.pl)

ISBN 978-83-7493-784-9

Drukarnia Oficyny Wydawniczej Politechniki Wrocławskiej. Zam. nr 668/2013.

## SPIS RZECZY

Przedmowa .....	7
Janusz MROCZKA, Krzysztof SKORUPSKI, Wpływ zjawiska przenikania się cząsteczek na właściwości optyczne agregatów sadzy .....	9
Zbigniew BIELECKI, Tadeusz STACEWICZ, Jacek WOJTAS, Absorpcyjna spektroskopia laserowa .....	57
Piotr KISAŁA, Metrologiczne uwarunkowania pomiarów pośrednich wielkości fizycznych wykorzystujących metody analizy i syntezy światłowodowych siatek dyfrakcyjnych .....	113
Piotr M. SZCZYPIŃSKI, Andrzej MATERKA, Geometryczne modele deformowalne do analizy i rozpoznawania obrazów .....	175





*Fizyka nie zamierza wyjaśniać przyrody. Jeśli chodzi o ścisłość, sukcesy fizyki wynikają z zawężenia jej celów: próbuje ona wyjaśnić prawidłowości zachowania się rzeczy. Wyrzucenie się szerszych celów i świadome ograniczenie dziedziny, w której poszukuje się wyjaśnień, wydaje się nam obecnie oczywiste i konieczne. Jednakże największym może odkryciem fizyki w ciągu całego jej rozwoju, aż po dzień dzisiejszy, było właśnie określenie rzeczy nadających się do wyjaśnienia.*

*Prawidłowości zjawisk, które nauki fizyczne próbują odkryć, nazywa się prawami przyrody. Nazwa ta jest rzeczywiście bardzo właściwa. Tak jak prawo karne czy cywilne regulują działanie i zachowanie się ludzi w pewnym zakresie, ale nie ustalają wszelkiego działania i zachowania się, tak prawa fizyki określają również zachowanie się obiektów, którymi ta nauka się zajmuje, tylko w pewnych ściśle zdefiniowanych warunkach, w pozostałych sytuacjach pozostawiając nam w tym względzie wiele swobody.*

Eugene P. Wigner,  
Science, 1964, 145, No. 3636, p. 995

## PRZEDMOWA

Szybki rozwój nauki w obecnym wieku uzmysławia nam postępujące jej różnicowanie, ale również poszerza nasze pole widzenia, dzięki temu możemy zauważyć tendencje unifikujące. Wynika to po pierwsze stąd, że za bardziej szczegółową analizą rzeczywistości postępuje jej pełniejsza synteza pojęciowa. Po drugie fizyczne badania naukowe bez względu na to, w jakiej dyscyplinie są wykonywane, zawsze dotyczą tej samej materii i jedynie w procesie oddziaływania materii z energią przejawiają nieskończone bogactwo zjawisk. Fakty te wskazują na to, że zdobyta wiedza nie jest nigdy absolutna, a wszelka informacja o otaczającej rzeczywistości nie jest doskonała; uwidaczniają one również potrzebę zajmowania się dzisiaj wieloma, szczegółowymi zagadnieniami.

Dziedziną wiedzy zawartą w niniejszej książce jest metrologia, co odpowiada w pojęciu zjawiskowym empirycznemu poznawaniu, w pozornie stosunkowo wąskim zakresie nauki. Mimo to opracowania, które otrzymuje Czytelnik w postaci kolejnych tomów serii „Problemy Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej”, nie są w stanie ani

w pełni odzwierciedlić bogactwa przedstawianej dyscypliny naukowej, ani ukazać dynamiki jej rozwoju.

Słowo pisane, w odróżnieniu od mówionego, daje Czytelnikowi czas na medytację, porównanie i ocenę. Trzeba mieć jednak świadomość, że raz napisana treść nie podąża już za upływem czasu, nie umożliwia więc wprowadzenia „na gorąco” uwag z nowych rozważań i z dyskusji.

Autorzy kolejnych rozdziałów w prezentowanej serii wydawniczej starają się zapisywać i pokazać swoją działalność twórczą. To forma przekazywania swoich wartości, swojej podmiotowości, a zarazem sposób ukazywania swojej wewnętrznej wizji tego, co postrzegamy, tego co przeżywamy, tego z czym się utożsamiamy. Forma jaką się posługujemy, pisząc, jest właściwa każdemu z nas. Ukazujemy naszą codzienność, pozostając ciągle takim samym, trwamy przy raz zaakceptowanych wartościach, tyleż oczywistych i może nie zawsze uznawanych. Czas bogaci nasze wartości merytoryczne, doskonali naszą formę i styl przekazu, wzbogaca słownictwo, ale również może ukazywać spadek naszych zdolności twórczych. Jest to następstwo wpływającego czasu. Przez to jesteśmy zwyczajni w swej upartej, a może naiwnej wartości, ale też zwyczajni w swych przywarach, błędach czy upadkach.

*Janusz Mroczka*

Janusz MROCZKA\*  
Krzysztof SKORUPSKI\*

## **WPLYW ZJAWISKA PRZENIKANIA SIĘ CZĄSTECZEK NA WŁAŚCIWOŚCI OPTYCZNE AGREGATÓW SADZY**

W niniejszym opracowaniu omówiono problem rozpraszania światła przez mikro- i nanocząsteczki. Ponadto przedstawione zostały podstawy geometrii fraktalnej oraz sposoby jej wykorzystywania do modelowania agregatów występujących w przyrodzie. W dalszej części porównane zostały dwa popularne kody symulacyjne: DDScat i T-Matrix. Ostatnia część opracowania poświęcona jest zmianie sposobu rozpraszania światła przez agregaty fraktalne sadzy w zależności od poziomu przenikania się cząsteczek.

### **1. WSTĘP**

Nanocząsteczki i ich agregaty są obiektem zainteresowania naukowców na całym świecie. Lepsze zrozumienie praw fizyki obowiązujących w tak małej skali może prowadzić do nowych odkryć oraz znacząco wpłynąć na rozwój licznych gałęzi zarówno nauki, jak i przemysłu. Systemy detekcji, filtracji oraz pomiaru nanocząsteczek umożliwiają usprawnienie procesów produkcyjnych. Wykorzystanie wiedzy z dziedziny nanotechnologii (do której zalicza się omawiane zagadnienie) może prowadzić do powstania nowych materiałów o unikatowych właściwościach. Niektóre związki stanowią zagrożenie dla zdrowia lub nawet życia człowieka (np. prowadzą do chorób układu krążenia [1]). Ponieważ są one nieodłącznym elementem naszego środowiska, nie jest możliwa ich całkowita eliminacja, jednak przez zastosowanie specjalnych układów można znacząco ograniczyć ich emisję. Analiza właściwości optycznych nanostruktur jest wykorzystywana również podczas badania atmosfery [2–4]. Przykładem może być określanie wpływu cząsteczek sadzy na budzące wiele kontrowersji zjawisko globalnego ocieplenia.

---

\* Katedra Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej, Politechnika Wroclawska, ul. B. Prusa 53/55, 50-317 Wrocław.

W niniejszym opracowaniu omawiane jest wykorzystanie światła rozproszonego do badania agregatów fraktalnych. Jest to stosunkowo nowe zagadnienie, którego rozkwit nastąpił w drugiej połowie XX wieku i był napędzany szybkim rozwojem maszyn liczących. W obecnych czasach mamy do dyspozycji potężne serwery obliczeniowe, będące w stanie symulować zjawisko rozpraszania światła na dowolnych strukturach z określoną dokładnością. Niestety, wciąż jest to proces bardzo czasochłonny, zwłaszcza jeżeli zależy nam na dokładnych wynikach, a cząsteczki nie znajdują się w kontakcie punktowym lub ich model nie jest sferyczny. W wielu przypadkach, z powodu deficytu czasu przeznaczanego na badania, stosowane są różne uproszczenia mające niekorzystny wpływ na dokładność obliczeń. Innym elementem, mającym znaczący wkład w omawiane zagadnienie, jest rozwój geometrii fraktalnej, wypromowanej przez matematyka polskiego pochodzenia Benoit Mandelbrota [5]. Zostało udowodnione, że pewne cechy agregatów pozostają stałe niezależnie od ich wielkości [6]. Wiedza ta ułatwiła lepsze zrozumienie rzeczywistych struktur oraz stworzenie nowych algorytmów agregacji, które dokładniej odwzorowują procesy zachodzące w przyrodzie. Do listy parametrów morfologicznych dodane zostały dwie nowe pozycje – wymiar ( $D_f$ ) oraz współczynnik fraktalny ( $k_f$ ), umożliwiające dokładniejszą identyfikację i charakteryzację badanych obiektów. Obecnie dużą uwagę poświęca się zjawisku spiekania, które jest powszechnie wykorzystywane w przemyśle do łączenia materiałów poniżej ich temperatury topnienia. Początkowe etapy tego procesu mogą być modelowane za pomocą przenikających się cząsteczek. Niestety do dnia dzisiejszego powstało mało artykułów omawiających to zagadnienie. Celem niniejszego opracowania jest wypełnienie tej właśnie luki.

W rozdziale 2 przedstawiono podstawy matematyczne geometrii fraktalnej oraz jej wykorzystanie zarówno w analizie, jak i w generacji agregatów cząsteczek. Omówione zostały podstawowe algorytmy, takie jak DLA (ang. *Diffusion-Limited Aggregation*) czy DLCA (ang. *Diffusion-Limited Cluster Aggregation*) ich implementacje, a także modyfikacje umożliwiające generowanie agregatów złożonych ze sferycznych, przenikających się cząsteczek. W dalszej części rozdziału przedstawione zostały popularne metody analizy agregatów fraktalnych, takie jak klasyczna analiza TEM (ang. *Transmission Electron Microscopy*) czy nowsza i bardziej dokładna ET (ang. *Electron Tomography*). Rozdział 3 traktuje o fizycznych podstawach rozpraszania światła oraz omawia najważniejsze sposoby modelowania danego zjawiska ze szczególnym uwzględnieniem dwóch metod: *Null-Field* (znanej również jako T-Matrix), związanej z obliczeniem macierzy przejścia T, oraz DDA (ang. *Discrete Dipole Approximation*), polegającej na dekompozycji badanej struktury na siatkę sprzężonych ze sobą dipoli, a następnie przeprowadzeniu symulacji rozpraszania światła na każdym z nich. W rozdziale 4 omówiono cechy agregatów sadzy powszechnie spotykanych w atmosferze, wykorzystanych w dalszych badaniach przeprowadzonych na potrzeby niniejszego opracowania. W rozdziale 5 porównano dwa powszechnie wykorzystywane programy umożliwiające symulację rozpraszania światła na agregatach fraktalnych:

T-Matrix (autorstwa D.W. Mackowskiego) oraz DDScat (autorstwa B.T. Draine i P.J. Flatau). Oba z nich zostały wykorzystane w niniejszym opracowaniu, jednak pierwszy z nich nie przeprowadza symulacji z wykorzystaniem agregatów zbudowanych z cząsteczek niebędących w kontakcie punktowym (przenikających się), natomiast drugi charakteryzuje się znacznie dłuższym czasem obliczeń. Z tego powodu nie mogą być traktowane jako zamienniki, a przed rozpoczęciem badań różnica w wynikach dla określonych przypadków (cząsteczek będących w kontakcie punktowym) powinna zostać jasno zdefiniowana. Rozdział 6 zawiera omówione wyniki symulacyjne rozpraszania światła na agregatach o różnym stopniu przenikania się cząsteczek. Ostatnim elementem niniejszego opracowania jest podsumowanie (rozd. 7) oraz spis literatury.

## 2. AGREGATY FRAKTALNE

### 2.1. PODSTAWY MATEMATYCZNE

Nazwa „fraktal” została wprowadzona przez Benoit Mandelbrota w drugiej połowie XX wieku. Jest on uważany za ojca geometrii fraktalnej, aczkolwiek nie jest pierwszą osobą mającą styczność z tego typu obiektami. Początkowo były one uważane za wychodzące poza ramy geometrii klasycznej patologicznej struktury, którym nie warto poświęcać większej uwagi [7]. Oprócz Mandelbrota duży wkład w ich zrozumienie miały takie osoby, jak: G. Leibniz, K. Weierstrass, G. Cantor, G. Peano, D. Hilbert czy F. Hausdorff. Termin „fraktal” pochodzi od łacińskiego przymiotnika „fractus”, nawiązującego do czasownika „frangere”, który znaczy „rozbijać” lub „tworzyć nieregularne fragmenty”. W tym znaczeniu termin może być również przetłumaczony na język polski jako „nieregularny” [5]. Obecnie fraktale są wykorzystywane w grafice czy modelowaniu zjawisk i struktur występujących w przyrodzie. Mają zastosowanie w kompresji obrazów i optymalizacji danych. Definicja pojęcia „fraktal” jest intuicyjna i nie jest opisana żadną sztywną regułą. Generalnie uznaje się, że jest to struktura samopodobna o wymiarze większym lub równym wymiarowi topologicznemu (klasycznemu). Oba te pojęcia nie są oczywiste i wymagają dokładniejszych definicji.

- **samopodobieństwo** – struktura jest samopodobna, gdy w dowolnej skali każdy jej fragment przypomina kształtem pierwowzór. Wynika z tego, że może ona zostać odtworzona, w całości lub części, na podstawie dowolnie małego jej wycinka. Jest to kolejna definicja, którą można interpretować na wiele różnych sposobów, ponieważ nie określa jednoznacznie, w jaki sposób, ani w jakim stopniu procentowym dany fragment powinien odwzorować oryginał. Tworzenie struktur samopodobnych metodą rekurencyjną jako pierwszy zaproponował G. Leibniz, niemiecki matematyk i filozof, urodzony w drugiej połowie XVII wieku. Zdaniem uczonego, idealną figurą samopodobną była prosta, która

w swoim dowolnie małym fragmencie przypomina pierwowzór. Jego algorytm, odnoszący się do bardziej skomplikowanej struktury, polegał na narysowaniu pojedynczego okręgu, a następnie wpisaniu w niego trzech kolejnych o jak największym promieniu. Dalsze postępowanie, zarówno z powstałymi okręgami jak i przerwami pomiędzy nimi, było analogiczne, a procedurę powtarzano w nieskończoność. Należy zaznaczyć, iż prosta, pomimo że jest doskonałym przykładem figury samopodobnej, nie jest powszechnie uważana za fraktal.

- **wymiar fraktalny** – problem alternatywnego sposobu określania wymiaru stał się szczególnie widoczny pod koniec XIX wieku, kiedy Guiseppe Peano zaproponował rodzinę krzywych przechodzących przez każdy punkt w określonej, dwuwymiarowej przestrzeni. Ponieważ podczas generowania struktury należy wykonać nieskończoną liczbę kroków, operacje matematyczne wykonywane na krzywej są bardzo utrudnione lub wręcz niemożliwe (np. określenie odległości między dwoma punktami). Problemy te znikają po przejściu do przestrzeni dwuwymiarowej. Ponieważ krzywa przechodzi przez wszystkie punkty kwadratu o określonym boku, do jednoznacznego określenia położenia możemy wykorzystać dwie współrzędne zamiast jednej. Ponadto pomimo że operujemy na krzywej, możemy w prosty sposób wyznaczyć jej pole. Przedstawiona struktura wykazuje cechy figury dwuwymiarowej, jednak z definicji za taką nie może być uznana. Odkrycie G. Peano zapoczątkowało nowy sposób postrzegania struktur dwuwymiarowych, które od tego momentu mogły zostać przeniesione w sposób jednoznaczny do przestrzeni jednowymiarowej. Rozwiązanie problemu określania wymiaru nastąpiło dopiero wtedy, gdy niemiecki matematyk Felix Hausdorff zaproponował nowy sposób jego obliczania. Okazało się, że dla danej struktury wynosi on dokładnie 2. Obecnie krzywe Peano zaliczają się do rodziny krzywych wypełniających przestrzeń (ang. *space-filling curves*), stanowiących pomost między przestrzeniami jedno- i  $n$ -wymiarowymi. Wykorzystywane są między innymi do kompresji obrazów i optymalizacji danych [8].

Wymiar fraktalny różni się od topologicznego tym, że może być od niego większy i przyjmować wartości niecałkowite (przykłady znajdują się w tab. 1). Uogólniając, określa on, jaką część przestrzeni zajmuje figura w pobliżu każdego ze swoich punktów [7]. Pierwszy sposób jego obliczania, do dnia dzisiejszego uważany za najważniejszy i mający zastosowanie w przypadku dowolnej struktury, zaproponował F. Hausdorff w pierwszej połowie XX w. [9]. Od tego czasu zostało wprowadzonych wiele alternatywnych definicji wymiaru, jedną z ważniejszych jest wymiar pudełkowy (ang. *box-counting dimension*). Algorytmy opierające się na nim, głównie z powodu prostej implementacji, stały się niezwykle popularne. Ich dodatkową zaletą jest fakt, że klasyczny wymiar Hausdorffa, w przypadku niektórych struktur, może być trudny do określenia. Należy przy tym pamiętać, że przytoczone definicje wymiarów nie są równoważne. W wielu przypadkach wyniki są jednakowe, aczkolwiek dla niektórych struktur mogą się różnić [7]. Idea wymiaru pudełkowego wyrażona jest równaniem:

$$\dim F = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(F)}{-\log \varepsilon} \quad (1)$$

w którym  $F$  definiuje analizowaną strukturę, natomiast  $N(F)$  liczbę hipersześcianów o boku  $\varepsilon$  potrzebnych do jej zasłonięcia. Łatwo zauważyć, że dla figur podstawowych, takich jak odcinek, kwadrat czy sześcian wymiar fraktalny pokrywa się z wymiarem topologicznym.

Tabela 1 Wymiary fraktalne wybranych struktur  
Table 1. Fractal dimensions of selected structures

Rodzaj struktury	Wymiar fraktalny
Zbiór Mandelbrota	2,0
Zbiory Julii	2,0
Zbiór Cantora	~0,6309
Krzywa Kocha	~1,2619
Kostka Mengera	~2,7268
Dywan Sierpińskiego	~2,8928
Trójkąt Sierpińskiego	~1,5849

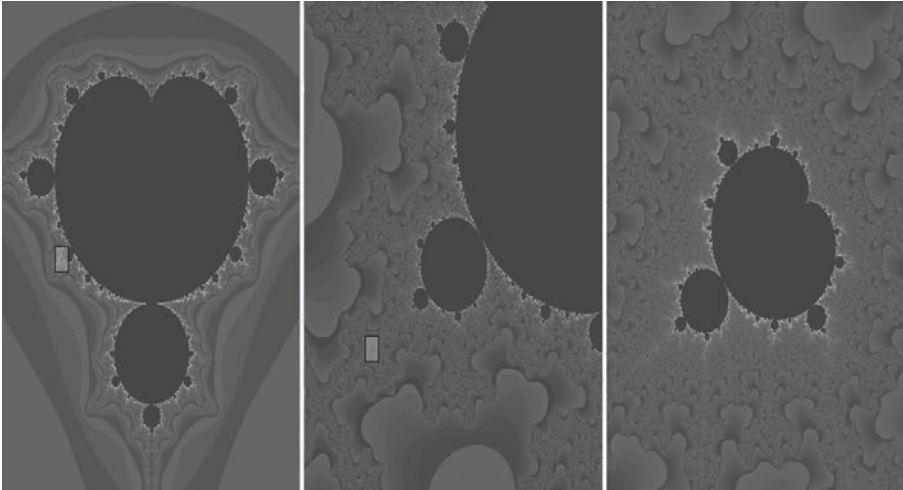
Geometria fraktalna umożliwia zapisywanie niezwykle skomplikowanych figur geometrycznych w prosty sposób, co nie zawsze jest możliwe w geometrii klasycznej. Jednym z najlepiej znanych przykładów jest zbiór Mandelbrota generowany na podstawie prostego, rekurencyjnego algorytmu wyrażonego zależnością:

$$Z_0 = 0 \quad (2a)$$

$$Z_{n+1} = Z_n^2 + C \quad (2b)$$

Punkt  $C$  należy do przestrzeni liczb zespolonych i zawarty jest w zbiorze tylko wtedy, gdy powstały ciąg jest ograniczony. Badanie ciągu nie jest prostym zadaniem, można jednak przyjąć, że gdy po określonej liczbie iteracji punkt  $Z_n$  nie opuści okręgu o środku umieszczonym w początku układu współrzędnych i promieniu  $1 + \sqrt{2}$ , jest on ograniczony [10]. Oczywiście dokładność obliczeń wzrasta wraz z liczbą iteracji. Wizualizacja zbioru Mandelbrota jest przedstawiona na rysunku 1, gdzie widać, że dowolnie mały wycinek obrazu zachowuje cechy oryginału. Bardzo często fraktale są wykorzystywane w grafice i przedstawiane w określonej przestrzeni barw. Mogą być kolorowane na wiele sposobów, jednym z nich jest określenie barwy na podstawie liczby iteracji niezbędnych do ustalenia, że analizowany ciąg nie jest zbieżny. Jak każdy fraktal zbiór Mandelbrota ma swój wymiar, który został określony jako 2 [11]. Obecnie znanych jest wiele sposobów tworzenia fraktali, innym popularnym przykładem są przekształcenia afiniczne IFS (ang. *Iterated Function System*). Bardzo często

dodawany jest również element losowości, który powoduje, że tworzone modele bardziej przypominają rzeczywiste struktury (np. agregaty cząsteczek).



Rys. 1. Wizualizacja zbioru Mandelbrota. Odcienie szarości zostały dobrane na podstawie liczby iteracji potrzebnej do ustalenia czy analizowany ciąg (dla każdego punktu w przestrzeni) jest zbieżny.

Prostokąt przedstawia, powiększony na ilustracji z prawej strony, wycinek obrazu

Fig. 1. Visualization of the Mandelbrot set. Different shades of gray are associated with the number of iterations required to determine whether the analyzed sequence (for each point in the two-dimensional space) is convergent. Area within the rectangle is magnified and presented in the adjacent figure

## 2.2. MODELE AGREGATÓW FRAKTALNYCH

Do tej pory omawiane były fraktale matematyczne, czyli idealne. Wykorzystywane są do opisywania przyrody, jednak w przypadku modelowania rzeczywistych struktur występują pewne ograniczenia. Za przykład może służyć agregat cząsteczek, który w pewnym przybliżeniu przestaje wykazywać właściwości charakterystyczne dla fraktali; mianowicie możliwości powiększania jego dowolnego elementu są bardzo ograniczone. Agregat zbudowany jest z cząsteczek, które są najczęściej przedstawiane jako sfery. Są to jego najmniejsze elementy składowe, definiujące granice możliwości (lub raczej sensowności) dalszego wnikania w głąb struktury. W przypadku rzeczywistych agregatów, na obecnym poziomie nauki, nie możemy zbadać niczego więcej niż kwarki czy leptony. Fizyka kwantowa wciąż stanowi dla nas pewnego rodzaju barierę. Innym elementem działającym na niekorzyść modeli fraktalnych jest to, że nie zostało jasno sprecyzowane, od jakiej liczby cząsteczek dany agregat może być uznany za fraktal. Z tych właśnie powodów niektórzy nazywają takie agregaty fraktalami naturalnymi [12] lub pseudofraktalnymi, ponieważ zachowują tylko część ich niezwyklej właściwości.



Agregaty cząsteczek wykazują pewne stałe cechy niezależne od ich wielkości, ponadto sam proces agregacji może zostać uznany za uniwersalny [13, 6]. W celu uproszczenia obliczeń, lub skrócenia czasu symulacji, badana struktura może zostać przedstawiona jako pojedyncza sfera o identycznej objętości. Niestety, takie uproszczenie prowadzi niekiedy do bardzo dużych różnic w wynikach. Idea wykorzystania fraktali do modelowania agregatów cząsteczek wyrażona jest następującą zależnością:

$$M \sim L^{D_f} \quad (3)$$

w której  $M$  oznacza całkowitą masę struktury,  $L$  jej wielkość,  $D_f$  wymiar fraktalny. W obliczeniach najczęściej wykorzystywane jest następujące równanie:

$$N_p = k_f \left( \frac{R_g}{r_p} \right)^{D_f} \quad (4)$$

gdzie  $N_p$  określa liczbę cząsteczek o promieniu  $r_p$ . Współczynnik fraktalny przedstawiony jest jako  $k_f$ , natomiast  $R_g$  symbolizuje promień bezwładności struktury. Należy mieć na uwadze, że w niektórych przypadkach promień cząsteczki jest zastępowany jej średnicą ( $d_p$ ), co pociąga za sobą zmianę wartości pozostałych parametrów. Promień bezwładności dany jest zależnością:

$$R_g^2 = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} (r_i - r_0)^2 \quad (5)$$

w której  $r_i$  przedstawia pozycję  $i$ -tej cząsteczki w agregacie, a wektor  $r_0$  środek masy układu. Jest to oczywiście tylko przybliżenie wykorzystywane w przypadku, gdy cząsteczki nie nakładają się na siebie, a agregat jest monodispersyjny (wszystkie cząsteczki mają jednakowy rozmiar). Nie jest to jedyny wykorzystywany wzór, Filippov wraz ze swoją grupą [14] sugerują następującą poprawkę:

$$R_g^2 = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} (r_i - r_0)^2 + r_p^2 \quad (6)$$

Zakładają oni, że promień bezwładności powinien zawierać wszystkie punkty na powierzchni sfery, a nie tylko średniokwadratową odległość cząsteczek od środka masy układu. Różnica w wynikach widoczna jest wyłącznie wtedy, gdy agregat złożony jest z niewielkiej liczby elementów. Przypuśćmy, że analizujemy pojedynczą sferę. W przypadku równania (5) promień bezwładności jest równy  $R_g = 0$ , co oczywiście nie jest zgodne z prawdą (w rzeczywistości wynosi  $\sqrt{0,6} \cdot r_p$ ). Poprawka Filippova daje wynik bardziej zbliżony do rzeczywistego. Niestety sytuacja się komplikuje w przypadku analizy przenikających się cząsteczek. Taka struktura w dalszym ciągu wykazuje właściwości fraktalne [15], jednak promień bezwładności jest odpowiednio

mniejszy. Nawiązując do badań grupy Brasila [16], przeprowadzonych na przenikających się cząsteczkach sadzy, może być on aproksymowany następującą zależnością:

$$R_g = R_{g0}(1 - C_{ov}) \quad (7)$$

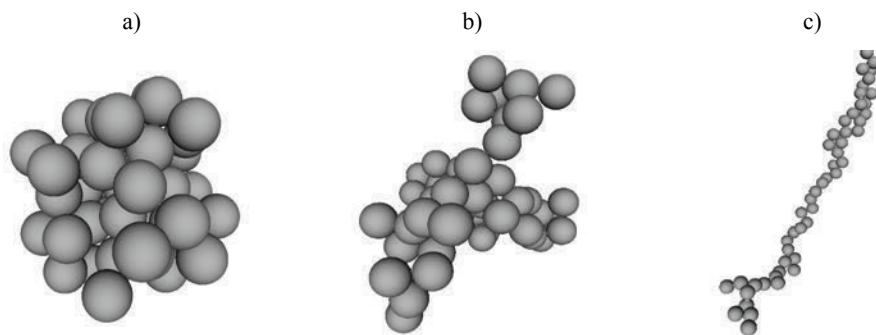
w której parametr  $C_{ov}$  określa poziom nakładania się wszystkich par nachodzących na siebie, sferycznych cząsteczek, a  $R_{g0}$  jest promieniem bezwładności struktury, gdy znajdują się one w kontakcie punktowym. Parametr  $C_{ov}$  może mieć wiele definicji. W przytoczonej pracy wyrażony jest wzorem [16]:

$$C_{ov} = 1 - \frac{1}{2r_p} \quad (8)$$

gdzie  $l$  określa odległość między środkami dwóch sfer o promieniu  $r_p$ . Niestety, w przypadku jednoczesnego nakładania się wielu cząsteczek pojawia się problem podczas wyznaczania współczynnika  $C_{ov}$ , który w niniejszym opracowaniu zdefiniowany został jako uśredniony poziom nakładania się wszystkich cząsteczek będących w jakimkolwiek kontakcie. Ponadto, na potrzeby pracy, wprowadzony został alternatywny parametr  $C_{sp}$ . Z jego zastosowaniem odległość cząsteczek od środka masy układu przeskalowana jest o  $1 - C_{sp}$  względem ich oryginalnych odległości, ustalonych dla kontaktu punktowego. Oba parametry przyjmują identyczne wartości na krańcach przedziału i są do siebie zbliżone, gdy nie zachodzi problem wielokrotnego przenikania (w przeciwnym razie występuje zależność  $C_{ov} < C_{sp}$ ). Podana definicja  $C_{sp}$  jest wykorzystana wyłącznie w rozdziale 7, w którym współczynnik przenikania się cząsteczek może przyjmować ekstremalne wartości. W innych częściach opracowania, z powodu względnie niskich wartości tego parametru, wykorzystana jest zależność (8). Równanie (7) jest dobrym przybliżeniem promienia bezwładności agregatu, aż do poziomu przenikania się cząsteczek zbliżonego do  $C_{ov} \approx 0,25$ . Dla większych wartości  $C_{ov}$  wynik może okazać się mniejszy niż w rzeczywistości. Ponieważ w badaniach przeprowadzonych na potrzeby opracowania  $C_{ov}$  zawiera się w zamkniętym przedziale od 0 (sfery znajdują się w kontakcie punktowym) do 1 (środki wszystkich sfer znajdują się w tym samym punkcie), opracowany został alternatywny algorytm obliczania  $R_g$ . Analizowany agregat podzielony zostaje na dużą liczbę elementów objętościowych o jednakowej gęstości (np. na pojedynczą cząsteczkę przypada 65 000 elementów), a następnie promień bezwładności obliczany jest na podstawie standardowego równania (5). W przypadku większych agregatów jest to procedura niezwykle czasochłonna, jednak otrzymane wyniki mogą zostać uznane za poprawne. Ponadto opisany algorytm może zostać zastosowany do dowolnej, skończonej struktury.

Kolejnym parametrem równania (4) jest wymiar fraktalny  $D_f$ . Jest on niezależny od wielkości agregatu i określa stopień upakowania cząsteczek w przestrzeni. Zawiera się w przedziale od 1 (linia) do 3 (kula). Przykłady agregatów o różnym wymiarze fraktalnym przedstawione są na rysunku 2. Powszechnie przyjmuje się, że wymiar

fraktalny świeżo wygenerowanych agregatów znajduje się w przedziale od około 1,8 dla agregacji DLCA (ang. *Diffusion-Limited Cluster Aggregation*) do około 2.1 dla agregacji RLCA (ang. *Reaction-Limited Cluster Aggregation*). Należy przy tym pamiętać, że są to struktury termodynamicznie metastabilne o dużym stosunku powierzchni do objętości, które pod wpływem czasu ulegają restrukturyzacji, co może być bezpośrednią przyczyną zwiększenia wymiaru fraktalnego [17]. Proces spiekania i tworzenia się dodatkowych płaszczy (np. wodnego) [18] może mieć również wpływ na  $D_f$ . Ponadto parametr ulega modyfikacji pod wpływem zmiany poziomu przenikania się cząsteczek  $C_{ov}$ , jednakże różnice te nie są tak wyraźne jak w przypadku współczynnika fraktalnego  $k_f$  lub promienia bezwładności  $R_g$ .



Rys. 2. Agregaty złożone z  $N_p = 50$  sferycznych cząsteczek w kontakcie punktowym i współczynnikiem fraktalnym  $k_f = 1,5$ , wygenerowane za pomocą algorytmu PC (Particle-Cluster).

Wymiar fraktalny wynosi odpowiednio: a)  $D_f = 2,7$ , b)  $D_f = 2,0$ , c)  $D_f = 1,3$

Fig. 2. Aggregates, generated with the PC (Particle-Cluster) algorithm, composed of  $N_p = 50$  spherical, non-overlapping particles. Other fractal parameters are:  $k_f = 1.5$  and a)  $D_f = 2.7$ , b)  $D_f = 2.0$ , c)  $D_f = 1.3$

Ostatnim parametrem równania (4) jest współczynnik fraktalny (skalujący)  $k_f$ , który razem z  $D_f$  opisuje właściwości fraktalne agregatu cząsteczek. Stanowi on pewnego rodzaju zagadkę, ponieważ jego funkcja nie została do dnia dzisiejszego jasno sprecyzowana, a wartość, w zależności od publikacji, zmienia się w zakresie od poniżej 1 do 3,4 i jest zależna zarówno od budowy układu pomiarowego, jak również warunków środowiskowych [19, 2]. Brasil ze swoją grupą, zakładając, że dla agregatów sadzy złożonych z cząsteczek znajdujących się w kontakcie punktowym, współczynnik fraktalny wynosi  $k_{f0} = 1,3$ , wyprowadził następującą zależność [16]:

$$k_f = 1,3e^{2,2 \cdot C_{ov}} \quad (9)$$

W celu uogólnienia obliczeń można przyjąć, że początkowy współczynnik fraktalny  $k_{f0}$  nie jest stały, co prowadzi do następującej modyfikacji wzoru:

$$k_f = k_{f0}e^{2,2 \cdot C_{ov}} \quad (10)$$

### 2.3. GENERACJA AGREGATÓW FRAKTALNYCH

Modele procesu agregacji można podzielić na dwie główne kategorie:

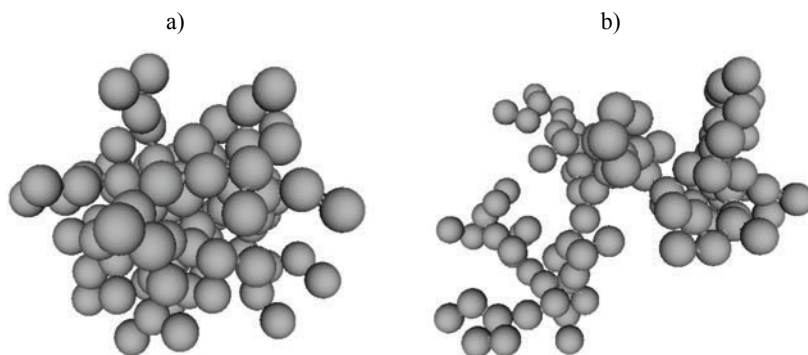
- **Cząsteczka-Klaster (PC, Particle-Cluster)** – w której do rosnącego agregatu dołączane są kolejno pojedyncze cząsteczki. Algorytm jest prosty w implementacji i umożliwia utworzenie struktur o bardzo dużym wymiarze fraktalnym [20]. Za największą wadę można wymienić fakt, że jego właściwości fraktalne nie są w pełni niezależne od skali (jak np. w przypadku agregacji CC) i agregaty wygenerowane za jego pomocą, według niektórych grup badawczych, nie powinny być uznawane za prawdziwe fraktale [16].
- **Klaster-Klaster (CC, Cluster-Cluster)** – w której łączone są ze sobą klastry cząsteczek. Algorytm prowadzi do powstania bardziej realistycznych struktur, jednak bardzo trudne jest wygenerowanie agregatu charakteryzującego się dużym wymiarem fraktalnym  $D_f$ . W przypadku agregacji hierarchicznej łączone są ze sobą klastry o tej samej wielkości [20]. Niektóre algorytmy uwzględniają również proces restrukturyzacji, mianowicie po każdej iteracji otwarte gałęzie struktury zostają w miarę możliwości zamknięte, co skutkuje powstaniem bardziej spójnych agregatów (np. po zetknięciu jeden z klastrów jest obracany w taki sposób, aby utworzyło się co najmniej jedno dodatkowe połączenie) [16].

Większość modeli nie uwzględnia zjawiska polidispersji (w przypadku której wymiar fraktalny nieznacznie rośnie) i bazuje na założeniu, że cząsteczki znajdują się wyłącznie w kontakcie punktowym. Dotychczas zostało zaproponowanych wiele różnych jedno- i wielostopniowych sposobów modelowania procesów agregacji [20]. Wszystkie przedstawione w dalszym opisie wartości wymiaru fraktalnego są określone dla trójwymiarowych, monodispersyjnych struktur zbudowanych z cząsteczek w kontakcie punktowym.

Jednym z pierwszych sposobów generowania agregatów fraktalnych była agregacja balistyczna [20]. W najprostszym przypadku polegała ona na projekcji w kierunku rosnącego agregatu pojedynczych cząsteczek (PC) lub klastrów (CC) wzdłuż losowo wybranych, liniowych ścieżek. W razie kolizji elementy ulegały nieodwracalnemu połączeniu. Przykład takiej agregacji przedstawiono na rysunku 3. Jak można łatwo zauważyć, algorytmy tego typu prowadzą do powstania struktur o dużym wymiarze fraktalnym, który w przypadku agregacji PC wynosi  $D_f \approx 3,0$ , a dla CC jest zdefiniowany jako  $D_f \approx 1,9$  [20].

Innym przykładem jest model DLA (ang. *Diffusion-Limited Aggregation*) zaproponowany przez Wittena i Sandera w 1981 roku [21]. Jest to rodzaj agregacji limitowanej dyfuzją, która może przebiegać zarówno na  $n$ -wymiarowej siatce, jak i w otwartej przestrzeni. Drugi sposób, chociaż mniej wydajny, prowadzi do powstania bardziej realistycznych struktur. Do modelowania przemieszczania się cząsteczek najczęściej wykorzystywana jest mechanika ruchów Browna. Podobnie jak

w poprzednim przypadku, cząsteczka podczas zetknięcia z rosnącym agregatem zostaje do niego nieodwracalnie przyłączona (nie występuje bariera potencjałów). Dla struktur tego typu wymiar fraktalny wynosi  $D_f \approx 2,5$  [20]. Algorytm DLCA (ang. *Diffusion-Limited Cluster Aggregation*) opiera się na bardzo podobnej zasadzie, różnica polega na tym, że na początku agregacji na siatce (lub w przestrzeni) znajduje się duża liczba pojedynczych cząsteczek, które mogą się niezależnie łączyć w klastry. Skutkuje to powstaniem bardziej realistycznych modeli i jest to obecnie jedna z najpopularniejszych metod tworzenia agregatów fraktalnych o wymiarze zbliżonym do  $D_f \approx 1,8$  [22].



Rys. 3. Agregaty złożone z  $N_p = 100$  sferycznych cząsteczek w kontakcie punktowym, wygenerowane przy pomocy algorytmu agregacji balistycznej typu: a) PC (Particle-Cluster), b) CC (Cluster-Cluster)

Fig. 3. Aggregates composed of  $N_p = 100$  spherical, non-overlapping particles, generated with the following ballistic algorithm: a) PC (Particle-Cluster), b) CC (Cluster-Cluster)

Kolejnymi popularnymi modelami są agregacje limitowane reakcją, czyli RLA (ang. *Reaction-Limited Aggregation*) i RLCA (ang. *Reaction-Limited Cluster Aggregation*). Pierwszy algorytm RLA został zaproponowany przez Edena w 1958 r. i modelował hipotetyczny rozwój kolonii komórek [23, 20]. Wykorzystywał on dwuwymiarową siatkę i polegał na losowym dodawaniu elementów w jej wolnych, mających styczność z obrysem powstającej struktury, polach. Wymiar agregatów powstałych w ten sposób jest zbliżony do  $D_f \approx 3,0$  [20]. Zasada działania algorytmu RLCA jest podobna do opisanej w poprzednim akapicie agregacji limitowanej dyfuzją, aczkolwiek cząsteczki nie łączą się podczas każdego zetknięcia. Niekiedy wymagana jest bardzo duża liczba kolizji, aby utworzyły klastry. Zachowanie to modeluje działanie bariery potencjału. Omówiony algorytm agregacji prowadzi do powstania struktur o wymiarze fraktalnym  $D_f \approx 2,1$  [22].

W niniejszym opracowaniu wykorzystany został dostrajalny algorytm (o regulowanych parametrach), zaproponowany przez grupę Filippova [14], gwarantujący spełnienie równania fraktalnego (4) na każdym etapie agregacji. Zakłada on, że środek

nowej cząsteczki odległy jest o wartość  $\Gamma$  od środka geometrycznego rosnącej struktury. W przypadku agregacji PC dana jest ona zależnością

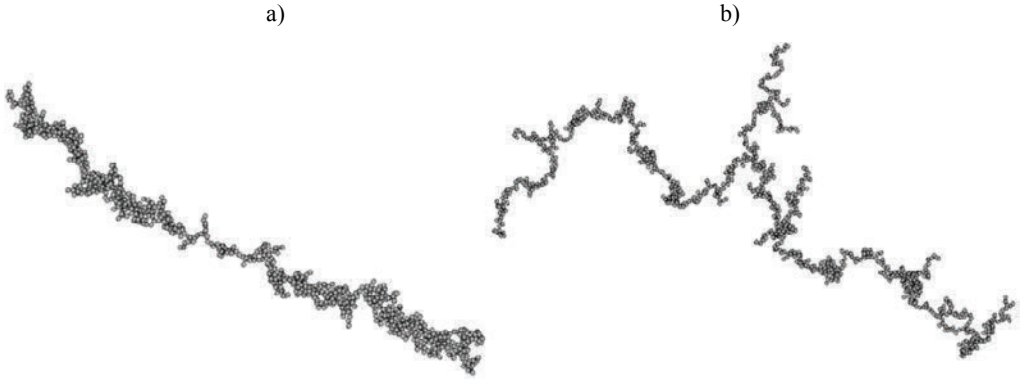
$$\Gamma^2 = \frac{N_p^2 r_p^2}{N_p - 1} \left( \frac{N_p}{k_f} \right)^{\frac{2}{D_f}} - \frac{N_p r_p^2}{N_p - 1} - N_p r_p^2 \left( \frac{N_p - 1}{k_f} \right)^{\frac{2}{D_f}} \quad (11)$$

natomiast w przypadku agregacji CC odległość między środkami geometrycznymi dwóch klastrów wyrażona jest równaniem

$$N_p = N_{1p} + N_{2p} \quad (12a)$$

$$\Gamma^2 = \frac{N_p^2 r_p^2}{N_{1p} N_{2p}} \left( \frac{N_p}{k_f} \right)^{\frac{2}{D_f}} - \frac{N_p}{N_{2p}} R_{1g}^2 - \frac{N_p}{N_{1p}} R_{2g}^2 \quad (12b)$$

gdzie  $N_{ip}$  i  $R_{ig}$  są odpowiednio liczbą cząsteczek i promieniem bezwładności  $i$ -tego klastru. W tym przypadku, na początku procesu agregacji, tworzonych jest metodą PC  $n$  agregatów złożonych z maksymalnie  $m$  cząsteczek (w niniejszym opracowaniu  $m = 7$ ), a podczas każdej iteracji łączone są za sobą struktury o najmniejszej liczbie elementów. Algorytm kończy działanie w momencie, gdy pozostaje tylko jedna, ostateczna struktura. Przykład agregatu wygenerowanego metodą PC i CC przedstawiony jest na rysunku 4. Nie jest to oczywiście jedyny sposób tworzenia agregatów fraktalnych o ściśle określonych parametrach [24].



Rys. 4. Agregaty o wymiarze  $D_f = 1,5$  i współczynniku fraktalnym  $k_f = 1,5$  złożone z  $N_p = 1000$  sferycznych cząsteczek w kontakcie punktowym,

wygenerowane za pomocą algorytmu: a) PC (Particle-Cluster), b) CC (Cluster-Cluster)

Fig. 4. Aggregates composed of  $N_p = 1000$  spherical, non-overlapping particles, generated with:

a) PC (Particle-Cluster) and b) CC (Cluster-Cluster) aggregation algorithms.

Other morphological parameters are:  $D_f = 1.5$ ,  $k_f = 1.5$

Aby stworzyć agregat zbudowany z nakładających (przenikających) się cząstek, należy wyliczyć  $k_{f0}$  z równania (10). Ogólny wzór grupy Filippova [14] zarówno dla agregacji PC, jak również CC dany jest zależnością

$$N_p^2 R_{3g}^2 = N_p (N_{1p} R_{1g}^2 + N_{2p} R_{2g}^2) + N_{1p} N_{2p} \Gamma^2 \quad (13)$$

gdzie  $R_{3g}$  oznacza teoretyczny promień bezwładności struktury po połączeniu dwóch klastrów (lub cząsteczki i klastru). Na każdym kroku agregacji wartość  $R_g$  obliczana jest, z wykorzystaniem  $k_{f0}$ , za pomocą standardowego równania fraktalnego (4), a następnie ulega modyfikacji według następującej zależności:

$$R_{3g} = R_g (1 - C_{ov}) \quad (14)$$

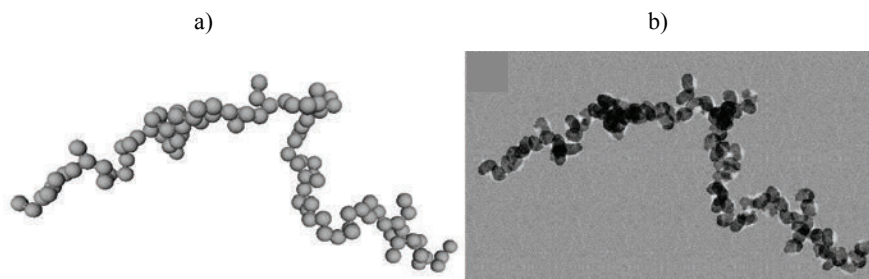
Przyłączona cząsteczka musi charakteryzować się odpowiednią wartością  $C_{ov}$  względem swoich sąsiadów. Wymiar fraktalny  $D_f$  również ulega modyfikacji pod wpływem zmiany poziomu przenikania się cząsteczek. Jednak w celu uproszczenia obliczeń, dla niewielkich wartości  $C_{ov}$ , może on zostać pominięty [25].

#### 2.4. PARAMETRY MORFOLOGICZNE AGREGATÓW FRAKTALNYCH

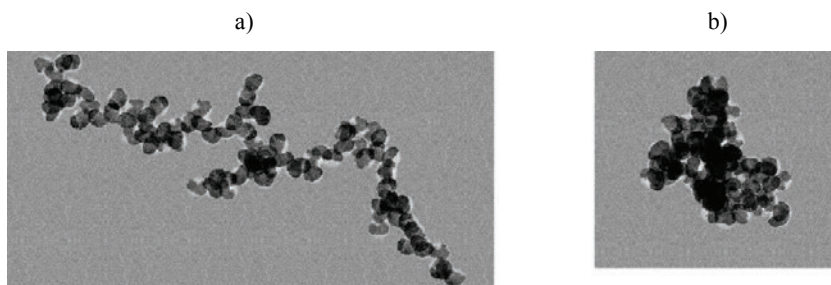
Z najbardziej znanych, niezwiązanych bezpośrednio ze światłem rozproszonym, metod pomiaru parametrów morfologicznych agregatów fraktalnych wyróżnić można analizę TEM (ang. *Transmission Electron Microscopy*) oraz ET (ang. *Electron Tomography*). Pierwsza z nich polega na badaniu obrazów uzyskanych za pomocą elektronowego mikroskopu transmisyjnego. Niestety, pomimo swojej popularności, ma ona wiele wad. Przede wszystkim przekształca trójwymiarowe struktury w ich dwuwymiarowe reprezentacje, co nie może się odbyć bez znaczącej utraty informacji [26–28]. Należy mieć również na uwadze to, że ta sama struktura po zmianie położenia może wykazywać zupełnie inne cechy (co zostało zobrazowane na rys. 5). Kolejnym problemem jest niejednoznaczność w sposobie odzyskiwania parametrów morfologicznych (przykładowe postępowanie można znaleźć w artykule grupy Brasila [29]). Współczynnik fraktalny, obliczony na podstawie obrazów TEM, jest zwykle większy od tego wykorzystywanego w symulacjach. Może być to spowodowane tym, że rzutowanie agregatów na płaszczyznę dwuwymiarową prowadzi do powstania zjawiska nadmiarowego (sztucznego) nakładania się cząsteczek. Sorensen i Oh w swojej publikacji sugerują, że to właśnie sposób połączeń międzycząsteczkowych przyczynia się do gwałtownych zmian współczynnika fraktalnego  $k_f$  [15], którego wartość może różnić się nawet o 200% w zależności od źródła [16]. Model agregatu i jego teoretyczny obraz TEM przedstawione są na rysunku 6.

Metodą bardziej skomplikowaną, aczkolwiek dającą dokładniejsze wyniki, jest ET. Polega ona na przekształceniu serii dwuwymiarowych obrazów agregatu, zrobionych pod różnym kątem, w reprezentację, z których można odtworzyć trójwymiarowe pa-

rametry morfologiczne [30, 31]. W tej metodzie wymiar fraktalny struktury  $D_f$  może okazać się większy niż w wykorzystaniu standardowej analizy TEM [30].



Rys. 5. Niejednoznaczność obrazów TEM. Ilustracje: a) i b) przedstawiają ten sam agregat ( $D_f = 1,5$ ,  $k_f = 1,5$ ,  $N_p = 100$ ,  $r_p = 100$ ) widziany pod innym kątem  
Fig. 5. Ambiguity of TEM images. Figures a) and b) present the same aggregate ( $D_f = 1.5$ ,  $k_f = 1.5$ ,  $N_p = 100$ ,  $r_p = 100$ ) from different points of views



Rys. 6. Agregat o parametrach fraktalnych  $D_f = 1,5$  i  $k_f = 1,5$  złożony z  $N_p = 100$  sferycznych cząsteczek w kontakcie punktowym, wygenerowany za pomocą algorytmu CC. Ilustracje przedstawiają:  
a) trójwymiarowy model struktury, b) teoretyczny obraz TEM  
Fig. 6. A sample aggregate, composed of  $N_p = 100$  spherical, non-overlapping particles, generated with the CC algorithm and characterized by the following fractal parameters:  $D_f = 1.5$ ,  $k_f = 1.5$ .  
The figures show: a) a 3D model of the structure, b) a theoretical TEM image

Do określenia parametrów morfologicznych całej rodziny agregatów zazwyczaj nie wystarcza pomiar pojedynczej struktury. Wartości te mogą się gwałtownie zmieniać w zależności od analizowanego obiektu. Na przykład liczba cząsteczek  $N_p$  wchodzących w skład agregatów sadzy waha się od kilku do nawet kilkuset [3]. Najczęściej wykorzystywany jest rozkład „log-normalny” [32], który lepiej charakteryzuje opisywane struktury niż jakakolwiek średnia (harmoniczna, geometryczna, arytmetyczna czy kwadratowa). Należy mieć również na uwadze, że wraz z wielkością agregatu zwiększa się promień cząsteczek wchodzących w jego skład [4]. Ponadto geometryczne odchylenie standardowe  $r_p$  jest węższe w poszczególnych agregatach niż pomiędzy nimi [32].



Analogicznie postępujemy w przypadku symulacji rozpraszania światła dla całej rodziny agregatów. Pojedyncza symulacja nie jest w stanie dać rzetelnych wyników, dlatego stosujemy jedną z dwóch metod uśredniania:

- **Orientacyjne** – Wykorzystywany jest tylko jeden model agregatu ustawiony w  $n$  pozycjach w przestrzeni, a symulacje wykonywane są  $n$  razy (dla każdego położenia osobno). Ostatecznie wszystkie wyniki są uśredniane. Niestety w wielu przypadkach, nawet gdy  $n \rightarrow \infty$ , wyniki nie mogą być uznane za wiarygodne (agregat o liczbie cząsteczek  $N_p = 20$  nie wykaże cech agregatu złożonego z  $N_p = 800$  cząsteczek).
- **Konfiguracyjne** – Wykorzystanych jest  $n$  modeli agregatów reprezentujących różne struktury. Symulacje wykonywane są  $n$  razy, a wyniki o wiele bardziej zbliżone są do rzeczywistych niż w poprzednim przypadku.

Pojawia się również problem zdefiniowania liczby  $n$ . W różnych przypadkach nawet zbiór zbudowany z kilku tysięcy agregatów może okazać się niewystarczający.

### 3. ZJAWISKO ROZPRASZANIA ŚWIATŁA

#### 3.1. PODSTAWY FIZYCZNE

Światło jest widzialnym widmem promieniowania elektromagnetycznego, zawartym w przedziale od około 380 do około 780 nanometrów. Ponieważ wzrok każdego człowieka charakteryzuje się inną zdolnością postrzegania barw, przytoczony zakres jest wyłącznie orientacyjny, a jego granice nie powinny być traktowane za dokładne. Ponadto według niektórych źródeł do widma światła zalicza się również podczerwień i nadfiolet.

Rozpraszanie światła jest ogółem zjawisk interakcji fal elektromagnetycznych z materią, prowadzących do zmiany kierunku ich propagacji. Za najważniejsze z nich można uznać:

- **Odbicie** – Na granicy dwóch ośrodków, o różnym współczynniku załamania światła, fala elektromagnetyczna zmienia kierunek swojej propagacji, nie opuszczając jednocześnie ośrodka pierwotnego. Wyróżniamy dwa rodzaje odbicia:
  - **Zwierciadlane** – w którym kąt odbicia fali, względem prostopadłej do płaszczyzny odbijającej, jest równy kątowi jej padania.
  - **Dyfuzyjne** – w którym światło odbijane jest w różnych kierunkach. Spowodowane jest to chropowatością powierzchni oraz wielokrotnymi odbiciami zachodzącymi wewnątrz struktury [33].
- **Transmisja** – Zmiana kierunku propagacji fali po przejściu przez strukturę. Zjawisko jest ściśle związane z prawem załamania (refrakcji), które określa zachowanie fali po przejściu przez granicę dwóch ośrodków o różnym współ-

czynniku załamania światła. Należy pamiętać, że w problemie rozpraszania światła zjawisko absorpcji nie jest uwzględniane.

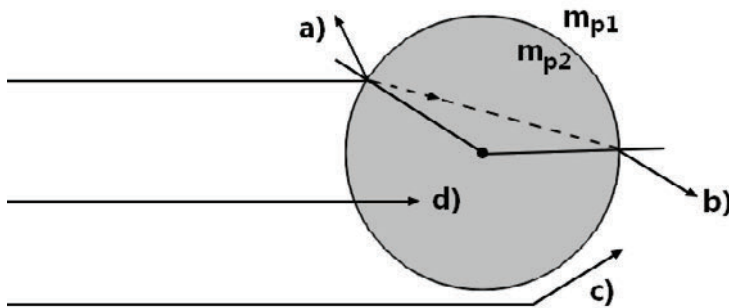
- **Dyfrakcja** – Zakrzywienie pierwotnej ścieżki rozchodzenia się fali elektromagnetycznej występujące w pobliżu materii.

Ponieważ najczęściej rozpatrywane jest odbicie sprężyste, w którym nie jest uwzględniany efekt Ramana ani Dopplera, długość fali  $\lambda$  nie ulega zmianie. Podczas interakcji fali elektromagnetycznej z materią wyróżniamy jeszcze jedno zjawisko:

- **Absorpcja** – Zmiana energii promieniowania na jej inny rodzaj (np. energię reakcji chemicznych, ciepło). Określona jest w głównej mierze przez część urojona zespolonego współczynnika załamania światła [2].

Wprawdzie nie jest ono brane pod uwagę w problemie rozpraszania, ale uwzględnia je ekstynkcja (całkowite osłabienie wiązki światła). Omówione zjawiska są przedstawione na rysunku 7.

Wyróżniamy trzy podstawowe sposoby analizy rozpraszania światła. W przypadku gdy długość padającej fali jest znacznie większa niż średnica struktury ( $\lambda \gg d_p$ ), możemy traktować ją jako oscylujący dipol generujący fale elektromagnetyczne w określonym kierunku. Takie przybliżenie opisuje teoria Rayleigha, wyjaśniona w dalszej części opracowania. Jeżeli długość padającej fali jest znacznie mniejsza niż średnica struktury ( $\lambda \ll d_p$ ), wykorzystywane są metody geometryczne polegające na śledzeniu biegu promieni. Najtrudniejszy przypadek występuje, gdy długość padającej fali jest zbliżona do średnicy struktury ( $\lambda \approx d_p$ ). W tym celu wykorzystywane są szczegółowe teorie rozpraszania. Często są to wyłącznie aproksymacje, ponieważ dokładne rozwiązanie jest obecnie możliwe tylko dla struktur o ściśle określonym kształcie. Na przykład rozpraszanie światła na sferze (o dowolnej wielkości) opisuje rozwiązanie Mie.



Rys. 7. Najważniejsze zjawiska wchodzące w skład ekstynkcji:

a) odbicie, b) transmisja, c) dyfrakcja, d) absorpcja.

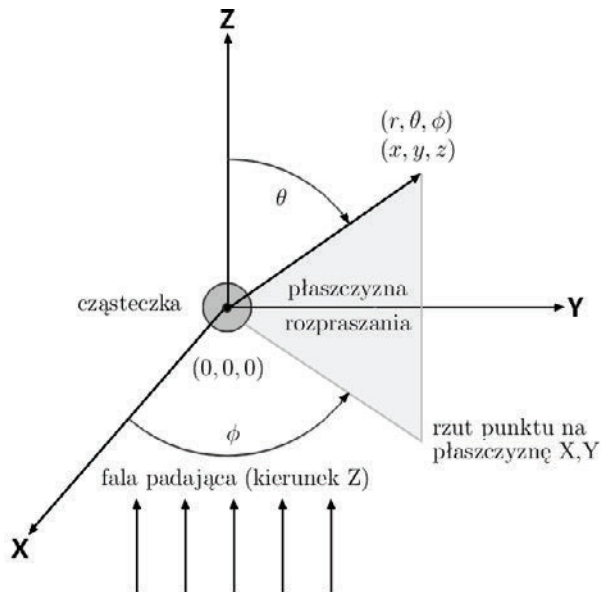
Parametry  $m_{pi}$  oznaczają współczynnik załamania światła obu ośrodków

Fig. 7. The most important elements of the extinction phenomenon:

a) reflection, b) transmission, c) diffraction, d) absorption.

$m_{pi}$  denotes the indices of refraction of two media

Schemat rozpraszania światła na pojedynczej cząsteczce (lub całej strukturze) przedstawiony został na rysunku 8. Ulokowana jest ona w środku układu kartezjańskiego o współrzędnych w punkcie  $(0, 0, 0)$ . Fala elektromagnetyczna (o natężeniu oświetlenia  $I_0$ ) propaguje wzdłuż jednej z osi układu (na ilustracji jest to oś Z, aczkolwiek nie jest to określone żadną uniwersalną regułą). W celu uproszczenia obliczeń często wykorzystywane są współrzędne sferyczne, w których  $r$  oznacza promień wzdający (odległość danego punktu od środka układu),  $\theta$  jest szerokością, a  $\varphi$  długością geograficzną. W symulacjach najczęściej wykorzystywana jest fala płaska, ponadto w niektórych programach istnieje możliwość zdefiniowania wiązki Gaussowskiej (zbliżonej do wiązki laserowej). Występuje rozróżnienie na dwa rodzaje polaryzacji: równoległą i prostopadłą do płaszczyzny rozpraszania. Analogicznie występuje podział na obszar pola bliskiego i dalekiego. W niniejszym opracowaniu pod uwagę brane jest tylko drugie z nich. Do najważniejszych parametrów, uwzględnianych w problemie rozpraszania światła, zaliczyć można:



Rys. 8. Schemat rozpraszania światła na pojedynczej cząsteczce [34]

Fig. 8. The phenomenon of light scattering by a single particle [34]

- **Natężenie optyczne ( $I, I_0$ )** – zdefiniowane jako strumień energii promieniowania  $\Phi_E$  (mocy optycznej  $P_E$ ) na obszar jednostkowy, prostopadły do kierunku propagacji fali  $dS_{\perp} = dS \cos \gamma$  [35]:

$$\Phi_E = P_E = \frac{dE}{dt} \quad (15)$$

$$I = \frac{d\Phi_E}{dS_{\perp}} = \frac{d\Phi_E}{dS \cos \gamma} \quad (16)$$

W układzie SI jednostka wyrażona jest jako  $[\text{W}/\text{m}^2]$ , natomiast w CGS przyjmuje wartość  $[\text{erg}/\text{cm}^2/\text{s}]$ . Zakładając, że źródło jest punktowe i promieniuje równomiernie we wszystkich kierunkach, można przyjąć, że  $I$  jest odwrotnie proporcjonalne do kwadratu odległości detektora od źródła. W przypadku interakcji płaskiej fali elektromagnetycznej z cząsteczką, jej amplituda zmniejsza się. W obszarze pola dalekiego (dużej odległości w porównaniu z długością fali  $\lambda$  i średnicą cząsteczki  $d_p$ ), rozpraszona energia może zostać przedstawiona jako fala sferyczna o początku w punkcie  $(0, 0, 0)$ . Energia przepływająca w określonym czasie przez obszar, będący wycinkiem sfery dana jest równaniem [34]

$$P_E = Ir^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (17)$$

Jak można zauważyć, zależna jest ona wyłącznie od kątów  $\theta$  i  $\varphi$ . Ponadto jest proporcjonalna do natężenia fali padającej  $I_0$  według równoważnych relacji [34]

$$Ir^2 \sin \theta d\theta d\varphi = I_0 \left( \frac{\lambda}{2\pi} \right)^2 F(\theta, \varphi, \lambda) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (18a)$$

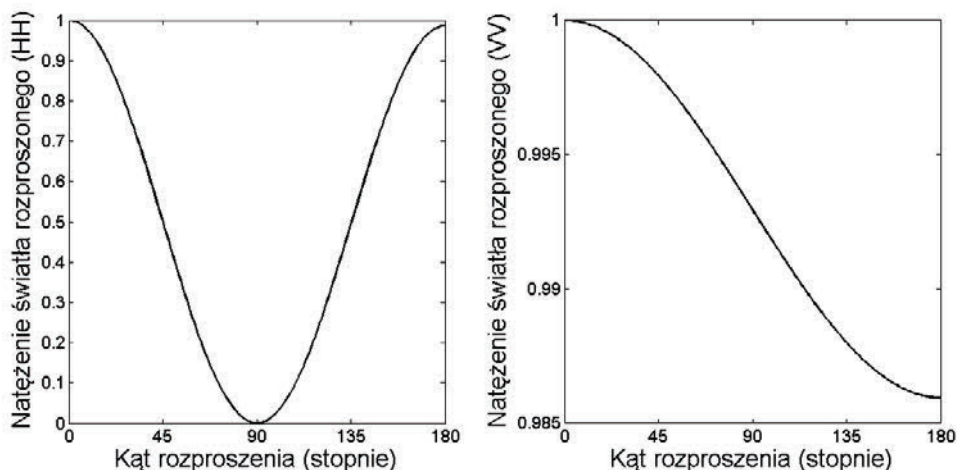
$$I = \frac{I_0 F(\theta, \varphi, \lambda)}{(2\pi r / \lambda)^2} \quad (18b)$$

w których  $F(\theta, \varphi, \lambda)$  jest funkcją rozpraszania. Aby pozbawić ją wymiaru, do mianownika została wprowadzona długość fali  $\lambda$ . Funkcja ta jest zależna od długości fali, kształtu, wielkości i własności optycznych badanego układu, lecz nie od  $r$ . Dodatkowo dla cząsteczek sferycznych nie występuje zależność od  $\varphi$  [34]. Innym sposobem opisywania omawianej wartości jest natężenie promieniowania źródła w danym kierunku, wyrażone zależnością

$$I(\xi) = \frac{d\Phi_E(\xi)}{d\Phi_E(\xi)} \quad (19)$$

w której  $d\Omega$  reprezentuje kąt bryłowy, a  $\xi$  jest rozpatrywanym wektorem kierunkowym. Jednostka, w układzie SI, jest wyrażona jako  $[\text{W}/\text{st}]$ . W analizie zjawiska rozproszenia wykorzystywane są diagramy światła rozproszonego, przedstawione na rysunku 9. Symulacje zostały przeprowadzone za pomocą programu T-Matrix, w środku układu współrzędnych znajduje się sferyczna cząsteczka o promieniu  $r_p = 10$  nm. Nie jest chiralna, nie ma dodatkowych warstw i charakteryzuje się stałą gęstością  $\rho$ . Oświetlona została falą płaską długości  $\lambda = 532$  nm, zespolony współczynnik załamania światła został ustalony jako  $m_p = 1,85 + 0,71 i$  (przykładowe  $m$  dla agregata

tów sadzy) [36]. Podczas normalizacji wszystkie wyniki (dla każdego kąta) zostały podzielone przez moduł maksymalnej otrzymanej wartości.



Rys. 9. Diagramy światła rozproszonego dla pojedynczej cząsteczki o promieniu  $r_p = 10$  nm. Długość fali padającej wynosiła  $\lambda = 532$  nm, a współczynnik załamania światła został ustawiony jako  $m_p = 1,85 + 0,71 i$

Fig. 9. Light scattering diagrams of a single particle with radius  $r_p = 10$  nm. The incident wavelength was  $\lambda = 532$  nm and the refractive index was taken as  $m_p = 1.85 + 0.71 i$

- **Przekroje czynne ( $C_{\text{sca}}$ ,  $C_{\text{abs}}$ ,  $C_{\text{ext}}$ )** – przekazują informację o stopniu ekstynkcji, absorpcji i rozproszenia energii w odniesieniu do całkowitej energii fali padającej. Jednostka w układzie SI wyrażona jest jako pole powierzchni [ $\text{m}^2$ ]. W przypadku zjawiska rozpraszania światła przekrój czynny na powierzchni dany jest następującymi, równoważnymi zależnościami [34]

$$C_{\text{sca}} = \frac{I}{I_0} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} I r^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (20a)$$

$$C_{\text{sca}} = \frac{1}{(2\pi/\lambda)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} F(\theta, \theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (20b)$$

Wartość przekroju czynnego nie jest jednoznaczna z polem rzutu struktury na płaszczyznę dwuwymiarową. Przedstawia ona teoretyczny, ulegający rozproszeniu, wycinek wiązki fali padającej [34, 37]. W analogiczny sposób można wyznaczyć przekrój czynny na powierzchnię dla zjawiska absorpcji  $C_{\text{abs}}$  i ekstynkcji  $C_{\text{ext}}$ . Ponadto zachowana jest zależność:

$$C_{\text{ext}} = C_{\text{sca}} + C_{\text{abs}} \quad (21)$$

- **Współczynniki wydajności** ( $Q_{\text{sca}}$ ,  $Q_{\text{abs}}$ ,  $Q_{\text{ext}}$ ) – są kolejnymi parametrami powszechnie wykorzystywanymi w analizie światła rozproszonego. Związane są z przekrojami czynnymi według następujących zależności:

$$Q_{\text{ext}} = \frac{C_{\text{ext}}}{S}, \quad Q_{\text{sca}} = \frac{C_{\text{scat}}}{S}, \quad Q_{\text{abs}} = \frac{C_{\text{abs}}}{S} \quad (22a)$$

$$Q_{\text{ext}} = Q_{\text{sca}} + Q_{\text{abs}} \quad (22b)$$

w których parametr  $S$  oznacza pole rzutu struktury na przestrzeń dwuwymiarową. Jeżeli analizowany obiekt jest bardziej złożony niż pojedyncza sfera, zamiast parametru  $S$  wykorzystywana jest zwykle wartość  $\pi R_v^2$ , w której  $R_v$  przedstawia promień kuli o pojemności identycznej z objętością analizowanej struktury. W przypadku agregatu złożonego z  $N_p$  sferycznych cząsteczek o promieniu  $r_p$ , będących w kontakcie punktowym, można go wyliczyć na podstawie równania:

$$R_v = r_p N_p^{1/3} \quad (23)$$

- **Albedo rozpraszania** ( $\omega$ ) – przedstawia stopień rozpraszania światła na strukturze w odniesieniu do ekstynkcji. Wyrażone jest równaniem [2]

$$\omega = \frac{C_{\text{sca}}}{C_{\text{ext}}} = \frac{Q_{\text{sca}}}{Q_{\text{ext}}} \quad (24)$$

- **Przekrój czynny w odniesieniu do masy** ( $MAC$ ) – jest parametrem opisującym stosunek przekroju czynnego na absorpcję do całkowitej masy obiektu. Dany jest zależnością [2, 4]:

$$MAC = \frac{C_{\text{abs}}}{\frac{4}{3}\pi R_v^3 \rho}, \quad (25)$$

w której  $\rho$  oznacza gęstość struktury. Jednostka, w układzie SI, jest przedstawiona jako  $[\text{m}^2/\text{kg}]$ . Akronim  $MAC$  pochodzi od angielskiego wyrażenia *Mass Absorption Cross section*.

- **Parametr asymetrii** ( $g$ ) – opisuje sposób rozpraszania światła na badanej strukturze. Jest dodatni w przypadku, gdy rozpraszanie w przód jest dominujące, ujemny dla struktur rozpraszających głównie w tył oraz bliski zeru w przypadku zachowania symetrii. Przedstawia go następujące równanie

$$g = \langle \cos \theta \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) F_{11}(\theta) \cos \theta \quad (26)$$

w którym  $F_{11}$  jest pierwszą pozycją 16-elementowej macierzy rozpraszania (zwanej również macierzą Muellera), definiującej zależność między stanem

i polaryzacją fali rozproszonej a stanem i polaryzacją fali padającej [37, 38]. Macierz ta umożliwia jednoznaczny opis rozpraszania światła na dowolnej strukturze, jednak określenie jej parametrów jest zadaniem skomplikowanym, wymagającym zastosowania metod dopasowanych do właściwości struktury. Ze względu na przeglądowy charakter niniejszego opracowania, macierz Muellera oraz wektor Stokesa (określający stan i polaryzację fali) nie zostaną omówione. Ich szczegółowy opis znajduje się, np. w książce van de Hulsta [37] lub Bohre-na i Huffmana [39].

### 3.2. SYMULACJE ROZPRASZANIA ŚWIATŁA

Dotychczas powstało bardzo wiele teorii omawiających zjawisko rozpraszania światła. Dalej są przedstawione tylko niektóre z nich.

#### 3.2.1. TEORIA RAYLEIGHA

Za moment przełomowy w nauce dotyczącej rozpraszania światła, można uznać pracę brytyjskiego profesora Johna Williama Strutta (trzeciego barona Rayleigha) opublikowaną w 1871 roku. Omówiono w niej problem rozpraszania światła na cząsteczkach o dowolnym kształcie, jednak o wymiarach dużo mniejszych niż długości padającej fali. Pomimo tego ograniczenia, autor wyjaśniał proste zjawiska z zakresu rozpraszania światła (np. tłumaczyła kolor nieba) oraz dał podwaliny nowym, bardziej zaawansowanym teoriom. Aby mogły zostać zastosowane muszą zostać spełnione następujące zależności [39]:

$$x \ll 1 \quad (27a)$$

$$|m_p| x \ll 1 \quad (27b)$$

w których  $m_p$  definiuje zespolony współczynnik załamania światła cząsteczki. Parametr  $x$  (zwany parametrem Mie) dany jest zależnością [37]

$$x = \frac{2\pi r_p m_0}{\lambda_0} = \frac{2\pi r_p}{\lambda} \quad (28)$$

gdzie  $m_0$  oznacza współczynnik załamania światła ośrodka, w którym propaguje fala, natomiast  $\lambda_0$  oznacza jej długość w próżni. Z pierwszego równania (27a) wynika, że cząsteczka jest umiejscowiona w zewnętrznym, jednorodnym polu elektrycznym. Z drugiego (27b), że promieniowanie przechodzi przez cząsteczkę w takim tempie, że czas potrzebny na ustalenie jej własnego pola jest krótki w porównaniu z okresem fali padającej [40]. W przypadku spełnienia przytoczonych zależności cząsteczka może

być traktowana jako oscylujący dipol wysyłający fale elektromagnetyczne w określonym kierunku. Ich natężenie wyrażone jest zależnością

$$I(\theta) = I_0 \frac{8\pi^4 r_p^6}{r^2 \lambda^4} \left( \frac{m_p^2 - 1}{m_p^2 + 2} \right)^2 (1 + \cos^2 \theta) \quad (29)$$

gdzie  $r$  jest odległością od środka cząsteczki do punktu na powierzchni sfery. Przekroje czynne dane są wzorami

$$C_{\text{sca}} = \frac{2\lambda^2}{3\pi} x^6 \operatorname{Re} \left\{ \frac{m_p^2 - 1}{m_p^2 + 2} \right\} \quad (30a)$$

$$C_{\text{abs}} = \frac{-\lambda^2}{\pi} x^3 \operatorname{Im} \left\{ \frac{m_p^2 - 1}{m_p^2 + 2} \right\} \quad (30b)$$

Ekstynkcja może zostać wyznaczona jako suma obu parametrów. Łatwo zauważyć, że rozpraszanie światła jest proporcjonalne do  $1/\lambda^4$  (mocniejsze rozpraszanie koloru niebieskiego), natomiast absorpcja do  $1/\lambda$ . Z powodu występowania we wzorze wyrażenia  $\cos^2$  rozkład natężenia światła rozproszonego jest symetryczny.

Klasyczna teoria Rayleigha jest obecnie rzadko wykorzystywana. Na jej podstawie powstała teoria RGD (Rayleigh–Gans–Deybey), stosowana w przypadku gdy struktura jest na tyle duża, że nie może być traktowana jako pojedynczy dipol [39], oraz RGD-FA (ang. *Rayleigh–Gans–Deybey for Fractal Aggregates*), zoptymalizowana do symulacji rozpraszania światła na agregatach fraktalnych.

### 3.2.2. ROZWIĄZANIE MIE

Kolejnym krokiem milowym okazała się praca Gustava Mie z 1908 roku, w której zawarte zostały rozwiązania równań Maxwella dla cząsteczek sferycznych o dowolnej wielkości [41]. Pomimo tego, że obecnie jest ona uważana za jedną z kluczowych prac o tematyce rozpraszania światła, zauważona została dopiero po około 50. latach od czasu swojej publikacji. Najprawdopodobniej było to spowodowane brakiem odpowiednich maszyn liczących, będących w stanie dokonywać skomplikowanych obliczeń (m.in. rozwiązywać funkcje Ricattiego–Bessela). Ze względu na późne odkrycie potencjału omawianego artykułu, Max Planck Society nadał mu nazwę „Śpiąca Królowna”. Według klasycznej teorii, natężenie rozproszonego światła dane jest następującymi zależnościami [37]

$$I(\theta) = \frac{I_0}{2x^2} (i_1(\theta) + i_2(\theta)) \quad (31a)$$



$$I_{vv}(\theta) = \frac{I_0}{x^2} i_1(\theta), \quad I_{HH}(\theta) = \frac{I_0}{x^2} i_2(\theta) \quad (31b)$$

w których HH i VV określają rodzaj polaryzacji fali, natomiast  $i_1$ ,  $i_2$  są funkcjami rozpraszania światła [37, 42]:

$$i_1(\theta) = |S_1(\theta)|^2 = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ a_n \frac{P_n^{(1)} \cos(\theta)}{\sin \theta} + b_n \frac{dP_n^{(1)} \cos(\theta)}{d\theta} \right] \right]^2 \quad (32a)$$

$$i_2(\theta) = |S_2(\theta)|^2 = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ a_n \frac{dP_n^{(1)} \cos(\theta)}{d\theta} + b_n \frac{P_n^{(1)} \cos(\theta)}{\sin \theta} \right] \right]^2 \quad (32b)$$

$P_n^{(1)}$  jest wielomianem Legendre'a pierwszego rodzaju. Jak łatwo zauważyć, przytoczone wzory mają rozwinięcie nieskończone, jednakże podczas obliczeń wyrazy wyższych rzędów są pomijane. Parametry  $a_n$ ,  $b_n$  są nazywane współczynnikami Mie i są zdefiniowane w następujący sposób [37, 42]:

$$a_n = \frac{\Psi_n(x)\Psi_n(m_p x) - m_p \Psi_n(m_p x)\Psi_n(x)}{\xi_n(x)\Psi_n(m_p x) - m_p \Psi_n(m_p x)\xi_n(x)} \quad (33a)$$

$$b_n = \frac{m_p \Psi_n(x)\Psi_n(m_p x) - \Psi_n(m_p x)\Psi_n(x)}{m_p \xi_n(x)\Psi_n(m_p x) - \Psi_n(m_p x)\xi_n(x)} \quad (33b)$$

gdzie:

$$\Psi_n(z) = \left( \frac{\pi z}{2} \right)^{1/2} J_{n+\frac{1}{2}}(z) \quad (34a)$$

$$\xi_n(z) = \left( \frac{\pi z}{2} \right)^{1/2} H_{n+\frac{1}{2}}(z) \quad (34b)$$

W przytoczonych zależnościach parametr  $J$  jest funkcją Bessela pierwszego rodzaju rzędu połówkowego, a  $H$  jest funkcją Hankela drugiego rodzaju rzędu połówkowego. Przekroje czynne wyrażone są wzorami [37, 42]

$$C_{\text{sca}} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (35a)$$

$$C_{\text{ext}} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \text{Re}\{a_n + b_n\} \quad (35b)$$

Przekrój czynny na absorpcję można wyznaczyć na podstawie omówionej wcześniej zależności  $C_{\text{abs}} = C_{\text{ext}} - C_{\text{sca}}$ .

Rozwiązanie Mie (zwane również rozwiązaniem Lorenza–Mie) jest powszechnie wykorzystywane do symulacji rozpraszania światła na cząsteczkach sferycznych. W dalszym ciągu pojawiają się ulepszenia teorii, np. umożliwiające przeprowadzanie symulacji na sferach chiralnych i wielowarstwowych. Powstają również programy umożliwiające wykorzystanie rozwiązania Mie do symulacji rozpraszania światła na całych zbiorach cząsteczek (np. agregatach fraktalnych) [43]. Rozwiązanie ma także zastosowanie do testowania dokładności nowych algorytmów, w tym przypadku wyniki otrzymane za jego pomocą są najczęściej uznawane za dokładne i traktowane jako punkt odniesienia do wyznaczenia błędu.

### 3.2.3. T-MATRIX

Metoda polega na wyznaczeniu macierzy przejścia  $\mathbf{T}$  określającej zależność między falą padającą a rozproszoną. Macierz może być wyznaczona na wiele sposobów, na przykład za pomocą metody momentów, separacji zmiennych, dyskretnej aproksymacji dipolowej i innych. Najczęściej jednak jest łączona z metodą Null-Field, zaproponowaną przez P.C. Watermana w 1971 r. [44], która ułatwiała analizę rozpraszania światła na pojedynczej, homogenicznej cząsteczce. Z biegiem czasu została udoskonalona, między innymi dodano możliwość wykorzystania cząsteczek chiralnych i wielowarstwowych o dowolnym kształcie [45]. W przypadku problemu rozpraszania światła na pojedynczej sferze, wzory upraszczały się do omówionego wcześniej rozwiązania Mie.

Powstało dotychczas wiele programów bazujących na teorii T-Matrix, umożliwiających symulację rozpraszania światła na całym zbiorze cząsteczek (np. agregacie fraktalnym). Teoretycznie cząsteczki mogą mieć dowolny kształt, w praktyce ich proporcje nie powinny przekraczać wartości 1:4. W przeciwnym wypadku obliczenia mogą się wydłużyć i być obciążone znacznym błędem [43]. Podobna sytuacja występuje po użyciu dużej wartości części urojonej zespolonego współczynnika załamania światła  $m_p$  [46]. Innym ograniczeniem metody jest brak możliwości wykonywania obliczeń na przenikających się cząsteczkach. Aby obliczenia były poprawne, muszą one znajdować się w kontakcie punktowym lub być od siebie odsunięte. Za największą zaletę T-Matrix można uznać szybkość obliczeń i dokładność wyników. Ponieważ macierz przejścia nie zależy zarówno od parametrów fali padającej, jak i rozproszonej, przedstawienie wyników dla przesuniętej lub obróconej w przestrzeni struktury nie wymaga powtarzania całego cyklu obliczeniowego.

W teorii T-Matrix wykorzystywany jest fakt, że pola fali padającej i rozproszonej mogą zostać opisane zależnościami [46, 47]

$$E_{\text{inc}}(\mathbf{R}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-1}^{\infty} a_{mn} M_{mn}^{(1)}(k\mathbf{R}) + b_{mn} N_{mn}^{(1)}(k\mathbf{R}) \quad (36a)$$

$$E_{\text{sca}}(\mathbf{R}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-1}^{\infty} f_{mn} M_{mn}^{(3)}(k\mathbf{R}) + g_{mn} N_{mn}^{(3)}(k\mathbf{R}) \quad (36b)$$

w których  $\mathbf{R}$  jest wektorem zaczepionym w początku układu współrzędnych  $M_{mn}^{(3)}$ ,  $M_{mn}^{(1)}$ ,  $N_{mn}^{(3)}$ ,  $N_{mn}^{(1)}$  są sferycznymi wektorowymi funkcjami falowymi. Rozwiązanie problemu rozpraszania światła polega na określeniu  $f_{mn}$  i  $g_{mn}$  jako funkcji  $a_{mn}$  i  $b_{mn}$ . Ze względu na liniowość praw Maxwella może to zostać wyrażone w następujący sposób [46, 47]:

$$\begin{bmatrix} f_{mn} \\ g_{mn} \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} a_{mn} \\ b_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T^{11} & T^{12} \\ T^{21} & T^{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{mn} \\ b_{mn} \end{bmatrix} \quad (37)$$

Przekroje czynne dla omawianej metody mogą zostać wyliczone z zależności [47]:

$$C_{\text{sca}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-1}^n |f_{mn}|^2 + |g_{mn}|^2 \quad (38a)$$

$$C_{\text{ext}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-1}^n \text{Re}\{f_{mn} a_{mn}^* + g_{mn} b_{mn}^*\} \quad (38b)$$

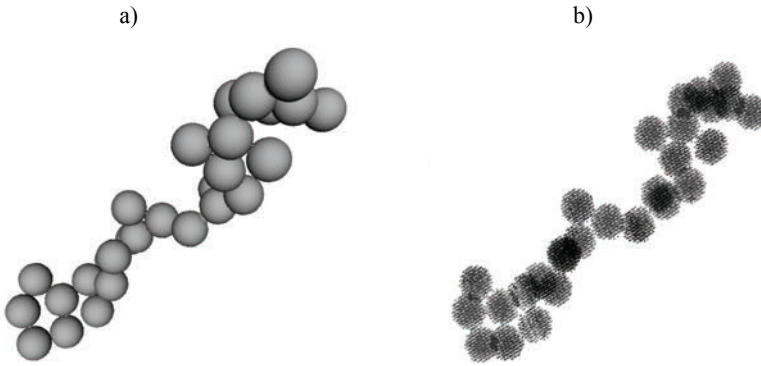
w których \* oznacza wartości sprzężone. Dokładny opis metody i wyprowadzenia wzorów znajduje się między innymi w publikacji grupy M. Mishchenki [46] i książce A. Doicu, T. Wriedta i Y. Eremina [47].

Na potrzeby niniejszego opracowania wykorzystany został program napisany przez D.W. Mackowskiego, umożliwiający symulację rozpraszania światła na agregatach fraktalnych [48]. Przykładowe diagramy światła rozproszonego, wyznaczone za pomocą omawianego programu, przedstawiono na rysunku 9.

### 3.2.4. DYSKRETNA APROKSYMACJA DIPOŁOWA

Ostatnią metodą omawianą w niniejszym opracowaniu jest DDA (ang. *Discrete Dipole Approximation*). Umożliwia ona przeprowadzenie symulacji rozpraszania światła na dowolnej, w szczególnych przypadkach nawet nieograniczonej, strukturze. Metoda znana jest również pod alternatywną nazwą CDA (ang. *Coupled Dipole Approximation*). Pomimo że jej główna idea zaproponowana została przez Howarda DeVoe w 1964 r., jej obecną postać zawdzięczamy pracy Purcella i Pennypackera, zaprezentowanej około dziesięciu lat później [49, 50]. Jej autorzy przedstawili prostopadłościan dielektryczny w postaci polaryzowalnych atomów, zawieszonych w próżni, z których każdy był osobnym oscylatorem (zwanym również dipolem). Pole elektromagnetyczne każdego z nich było zależne zarówno od fali padającej, jak i odpowiedzi pozostałych oscylatorów. Ponieważ nie było możliwe podzielenie struktury na tak

wielką liczbę elementów, „atomem” nazwany został pewien polaryzowalny punkt w przestrzeni reprezentujący odpowiednio mały element objętościowy. Punkty te mogły być umieszczone w dowolnych lokalizacjach, jednak tylko umiejscowienie ich na symetrycznej siatce umożliwiało wykorzystanie, znacznie przyspieszającego obliczenia, algorytmu FFT [50]. Niestety, nawet pomimo tego zabiegu, w wielu przypadkach były one bardzo czasochłonne w porównaniu do konkurencyjnych metod (np. Null-Field). Przykładowa dekompozycja struktury na siatkę dipoli przedstawiona została na rysunku 10.



Rys. 10. Agregat o parametrach:  $D_f = 1,5$ ,  $k_f = 1,5$  i  $r_p = 10$  nm złożony z  $N_p = 50$  sferycznych cząsteczek w kontakcie punktowym, wygenerowany za pomocą algorytmu agregacji PC. Na ilustracji przedstawiono:

a) postać pierwotną b) przykładową siatkę dipoli złożoną z 9694 elementów objętościowych  
 Fig. 10. An aggregate with the following morphological parameters:  $D_f = 1.5$ ,  $k_f = 1.5$  and  $r_p = 10$  nm, composed of  $N_p = 50$  spherical particles in point contact, generated with the PC aggregation algorithm. The figures show: a) the initial structure, b) a sample dipole mesh, made up of 9694 volume elements

Aby metoda mogła być zastosowana, odległość między dipolami  $d$  na siatce nie może być większa od wymiarów struktury oraz długości padającej fali  $\lambda$ . Warunek może być wyrażony następującą zależnością [51]:

$$|m_p| kd < Q \quad (39)$$

w której  $Q$  określa dokładność wyników. W większości przypadków wartość  $Q \approx 1$  jest wystarczająca, jednakże dla dokładniejszych obliczeń (np. określania funkcji rozpraszania) powinna wynosić  $Q \approx 0,5$ . Innym powodem zmniejszenia jej wartości może być duża część urojona zespolonego współczynnika załamania światła  $m_p$ . Taki przypadek może prowadzić do przeszacowania wartości przekroju czynnego na absorpcję  $C_{\text{abs}}$ . Niestety, nawet gdy podana zależność jest spełniona, a moduł  $m_p$  jest znacznie większy od jedności [51]

$$|m_p| \gg 1 \quad (40)$$

metoda nie gwarantuje poprawnych wyników. DDA nie powinno być stosowane również w przypadku niespełnienia równania [51]

$$X_v = \frac{2\pi R_v}{\lambda} < \frac{62,04}{|m_p|} \left( \frac{N}{10^6} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (41)$$

w którym  $X_v$  oznacza parametr wielkości struktury. Ponadto, w razie potrzeby wykonania dokładniejszych obliczeń, podana wartość powinna zostać zredukowana o potęgę. Liczba dipoli  $N$  dana jest wzorem

$$N \approx \frac{4\pi R_v^3}{3d^3} > \frac{4\pi}{3} |m_p|^3 (kR_v)^3 \quad (42)$$

i jest zależna od wymaganej dokładności wyników oraz możliwości obliczeniowych komputera. Ponieważ dipole układane są na określonej, trójwymiarowej siatce, może wystąpić problem z dokładnym umiejscowieniem elementów odpowiedzialnych za kształt powierzchni.

Moment dipolowy dla każdego elementu struktury przedstawia zależność

$$P_j = \alpha_j E_j \quad (43)$$

w której  $\alpha_j$  oznacza polaryzowalność, a  $E_j$  pole elektryczne w punkcie  $j$ . Efekt pola magnetycznego jest pomijalnie mały, dlatego zazwyczaj nie jest uwzględniany w obliczeniach.  $E_j$  jest zależne od fali padającej oraz odpowiedzi pozostałych dipoli według zależności [50]

$$E_j = E_{\text{inc},j} - \sum_{k \neq j} A_{jk} P_k \quad (44a)$$

$$A_{jk} = \frac{e^{ikr_{jk}}}{r_{jk}} \times \left[ k^2 (\hat{r}_{jk} \hat{r}_{jk} - 1_3) + \frac{ikr_{jk-1}}{r_{jk}^2} (3\hat{r}_{jk} \hat{r}_{jk} - 1_3) \right] \quad (44b)$$

pod warunkiem, że  $j \neq k$ . W równaniach  $r_{jk}$  oznacza odległość między dipolami a  $\hat{r}_{jk}$  jest wektorem kierunkowym:

$$\hat{r}_{jk} = \frac{(r_j - r_k)}{r_{jk}} \quad (45)$$

Znak  $1_3$  jest macierzą jednostkową o wymiarach  $3 \times 3$ . Po założeniu, że  $A_{jj} = \alpha_j^{-1}$ , równanie się upraszcza i przybiera następującą formę [50]

$$\sum_{k=1}^N A_{jk} P_k = E_{\text{inc},j} \quad (46)$$

Z powodu skomplikowania i długości trwania obliczeń, rzadko jest ono liczone bezpośrednio. Aby przyspieszyć ten proces, wykorzystywane są różne algorytmy aproksymacji, do których można zaliczyć między innymi metodę gradientu sprzężonego. Kolejnym problemem jest wybór odpowiedniego wzoru na polaryzowalność. Istnieją różne sposoby jej określenia, jednak do tej pory żaden z nich nie został uznany za najlepszy. Purcell i Pennypacker w swojej pracy wykorzystali wzór Clausiusa–Mossottiego [50]

$$\alpha_j^{CM} = \frac{3d^3}{4\pi} \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \quad (47)$$

w którym  $\varepsilon_j$  jest funkcją dielektryczną materiału w punkcie  $r_j$ . Powstało wiele ulepszeń i poprawek podanego równania. W programie, wykorzystanym na potrzeby niniejszego opracowania, zalecany jest wzór autorstwa Draine’a i Goodmana, który związany jest ze wzorem Clausiusa–Mossottiego zależnością [50]

$$\alpha_j^{LDR} = \frac{\alpha^{CM}}{1 + \left( \frac{\alpha^{CM}}{d^3} \right) \left[ (b_1 + m_p^2 b_2 + m_p^2 b_3 S)(kd)^2 - \left( \frac{2}{3} \right) i(kd)^3 \right]} \quad (48a)$$

$$S = \sum_{j=1}^3 (\hat{a}_j \hat{e}_j)^2 \quad (48b)$$

w której  $b_1 = -1,891531$ ,  $b_2 = 0,1648469$ ,  $b_3 = -1,7700004$ . Wektory jednostkowe  $\hat{a}_j$  i  $\hat{e}_j$  definiują kierunek fali padającej i stan polaryzacji. Przekroje czynne przedstawione są następująco

$$C_{\text{ext}} = \frac{4\pi k}{|E_0|^2} \sum_{j=1}^n \text{Im} \{ E_{\text{inc},j}^* P_j \} \quad (49a)$$

$$C_{\text{abs}} = \frac{4\pi k}{|E_0|^2} \sum_{j=1}^n \left\{ \text{Im} \{ P_j (\alpha_j^{-1})^* P_j^* \} - \frac{2}{3} k^3 |P_j|^2 \right\} \quad (49b)$$

Przekrój czynny na rozpraszanie może być wyliczony z zależności  $C_{\text{sca}} = C_{\text{ext}} - C_{\text{abs}}$ . Dokładny opis metody DDA można znaleźć między innymi w publikacjach autorstwa Draine’a i Flatau [50–53].

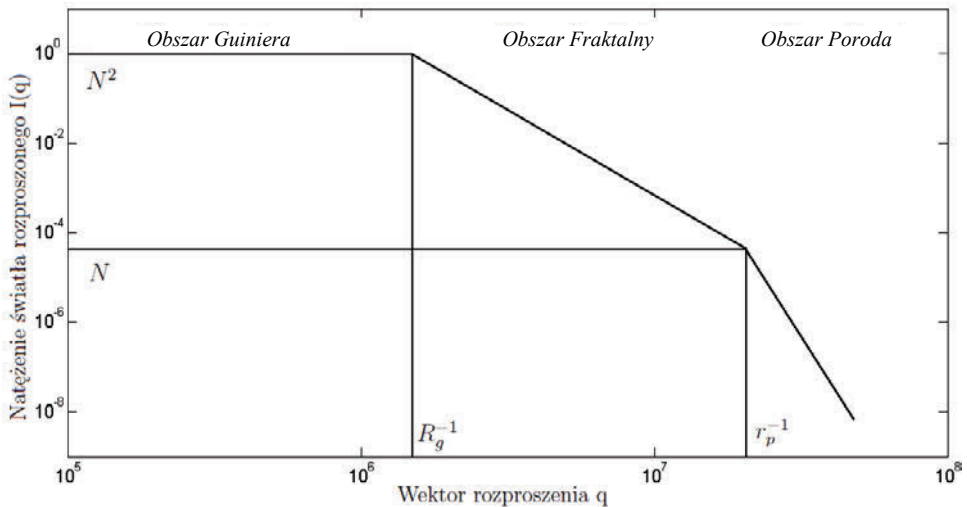
### 3.3. BADANIE PARAMETRÓW MORFOLOGICZNYCH

Istnieje wiele metod optycznych służących do badania cząsteczek i agregatów. Jedną z nich, wykorzystywaną w przypadku sadzy, jest LII (ang. *Laser-Induced In-*

*candescence*). Za jej pomocą można określić wielkość cząsteczek, a pomiary przeprowadzane są w trybie on-line z minimalną ingerencją w badany obiekt [54–56]. Inną metodą umożliwiającą szybkie, nieinwazyjne pomiary jest WALS (ang. *Wide-Angle Light Scattering*) [26, 57]. Popularny sposób aproksymacji parametrów morfologicznych agregatów fraktalnych polega na wyznaczeniu wykresu natężenia światła  $I$  od wektora rozproszenia  $\mathbf{q}$  według wzoru [24, 58]

$$\mathbf{q} = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (50)$$

Przykład został przedstawiony na rysunku 11. Może on zostać podzielony na cztery obszary:



Rys. 11. Funkcja natężenia światła  $I$  w zależności od wektora rozproszenia  $\mathbf{q}$

Fig. 11. The intensity of light  $I$  as a function of the scattering wave vector  $\mathbf{q}$

- **Obszar Rayleigha (niezaznaczony na ilustracji)** – występuje wyłącznie dla  $\mathbf{q} \sim 0$ . Natężenie światła jest proporcjonalne do kwadratu liczby cząsteczek wchodzących w skład agregatu.
- **Obszar Guiniera** – występuje dla  $\mathbf{q} < R_g^{-1}$ . Na jego podstawie można wyznaczyć promień bezwładności struktury. Natężenie światła może być przybliżone równaniem  $I(0)/I(\mathbf{q}) \approx 1 - R_g^2 \mathbf{q}^2 / 3$ .
- **Obszar Fraktalny** – występuje dla  $R_g^{-1} < q < r_p^{-1}$ . Zbocze funkcji natężenia światła definiuje wymiar fraktalny według zależności  $I(\mathbf{q}) \sim \mathbf{q}^{-D_f}$ . Na jego kształt ma ponadto wpływ polidispersyjność struktury.

- **Obszar Poroda** – występują dla  $q > r_p^{-1}$ . Natężenie światła jest zależne w głównej mierze od poszczególnych cząsteczek w agregacie i jest proporcjonalne do czwartej potęgi wektora rozproszenia  $I(\mathbf{q}) \sim \mathbf{q}^{-4}$ .

Należy uwzględnić, że podczas rzeczywistych pomiarów wyznaczenie granic przytoczonych obszarów nie jest zadaniem trywialnym, a otrzymane wykresy nie są tak precyzyjne jak na rysunku 11. Istnieją różne sposoby wyznaczania parametrów, jednakże większość z nich oparta jest wyłącznie na analizie kształtu otrzymanej funkcji.

Do badania właściwości agregatów fraktalnych (oraz fazy rozproszonej układów dyspersyjnych) metodami optycznymi wykorzystywane są również klasyczne sposoby rozwiązania problemu odwrotnego [59–64]. W literaturze można ponadto znaleźć próby rozwiązania danego zagadnienia z wykorzystaniem algorytmów sztucznej inteligencji, między innymi sieci neuronowych [65].

#### 4. WŁAŚCIWOŚCI CZĄSTECZEK SADZY

Termin „sadza” jest wykorzystywany najczęściej jako synonim do absorbującego światło, węglowego aerozolu powstałego w wyniku niepełnego procesu spalania. Należy mieć na uwadze to, że nie jest to precyzyjne określenie, ponieważ w literaturze może to również oznaczać dowolny inny związek powstały podczas tego procesu. Alternatywną nazwą jest „dym” lub bardziej popularne, chociaż niemające swojego odpowiednika w języku polskim, *carbon black*. Wprawdzie istnieją w atmosferze związki węgla charakteryzujące się słabą, silnie zależną od długości fali, absorpcją światła, lecz nie znajdują się one obecnie w centrum zainteresowania naukowców. Roczna emisja sadzy wynosi około 8 Tg i powstaje ona głównie w wyniku spalania paliw kopalnych i biomasy [4, 30]. Przez niektórych badaczy sadza jest uważana za drugi najważniejszy (zaraz po dwutlenku węgla) czynnik mający wpływ na efekt cieplarniany. Niestety do dnia dzisiejszego jej właściwości optyczne nie zostały dokładnie zdefiniowane. Budzi to wiele kontrowersji, pojawiają się nawet pytania czy omawiany związek ma jakikolwiek rzeczywisty wpływ na zjawisko globalnego ocieplenia [2].

Parametry morfologiczne agregatów są zależne od poszczególnych procesów spalania i właściwości środowiskowych. Struktury spotykane w atmosferze (omawiane w niniejszym opracowaniu) mogą się bardzo różnić od tych uzyskanych w laboratoriach. Poniżej przedstawiono listę ich najważniejszych właściwości:

- **Liczba cząsteczek** – Od razu po emisji pojedyncze cząsteczki sadzy łączą się ze sobą, tworząc większe struktury zwane agregatami. Ich wielkość może się znacząco różnić w zależności od procesu spalania i warunków środowiskowych. Adachi ze swoją grupą [30] przeprowadził analizę dwóch grup agregatów.



Pierwsza z nich pobrana została w okolicach Uji (Japonia). Liczba cząsteczek wchodzących w skład pojedynczej struktury, o wieku szacowanym na 1,5 dnia, zawierała się w przedziale od  $N_{p,\min} = 7$  do  $N_{p,\max} = 509$  (mediana wynosiła  $N_{p,\text{med}} = 139$ ). Do drugiej grupy zaliczały się zarówno agregaty zaobserwowane w odległości 10 metrów od czteropasmowej ulicy w Arizonie (USA), jak również te pobrane bezpośrednio z rur wydechowych pojazdów. W tym przypadku liczba cząsteczek przedstawiała się następująco:  $N_p \in (47; 792)$  i  $N_{p,\text{med}} = 203$ . Pomiarzy zostały wykonane na podstawie trójwymiarowych modeli agregatów utworzonych za pomocą metody tomografii elektronowej ET.

- **Promień cząsteczek** – Cząsteczki sadzy charakteryzują się kształtem zbliżonym do sfery, z tego powodu większość modeli matematycznych opisuje je w ten właśnie sposób. Dla agregatów zebranych w okolicach Uji wymiary cząsteczek przedstawiały się następująco:  $r_p \in (14 \text{ nm}; 57 \text{ nm})$ ,  $r_{p,\text{med}} = 26 \text{ nm}$ . Natomiast dla próbek z Arizony wynosiły odpowiednio:  $r_p \in (13 \text{ nm}; 22 \text{ nm})$ ,  $r_{p,\text{med}} = 18.5 \text{ nm}$  [30]. Podobne wielkości zostały zaobserwowane przez Adachiego i Busecka dla agregatów sadzy występujących w Meksyku:  $r_p \in (10 \text{ nm}; 50 \text{ nm})$ ,  $r_{p,\text{med}} = 22 \text{ nm}$  [3]. Można zaobserwować że w przypadku mniejszych struktur,  $r_p$  również jest zredukowane [4]. Cząsteczki nie znajdują się w kontakcie punktowym, chociaż w symulacjach jest to często wykorzystywane uproszczenie. Oltmann, Reimann i Will w swojej pracy określili ich stopień nakładania się jako  $C_{ov} \approx 0,25$  [26]. Ich badania opierały się na agregatach sadzy wygenerowanych w warunkach laboratoryjnych, a wyniki zostały uzyskane na podstawie analizy obrazów TEM. Niestety, jak zostało wcześniej wspomniane, wykorzystana metoda może prowadzić do pewnego przeszacowania omawianej wartości (nie istnieje prosty sposób umożliwiający odtworzenie właściwości trójwymiarowego obiektu na podstawie dwuwymiarowego obrazu), ponadto parametry morfologiczne badanych struktur odbiegały nieznacznie od tych przedstawionych w niniejszym opracowaniu (związków sadzy występujących w atmosferze). Wielkość cząsteczek  $r_p$  nie jest stała w obrębie pojedynczego agregatu. W przypadku potrzeby przeprowadzenia dokładnych symulacji, polidispersja powinna zostać uwzględniona.
- **Promień bezwładności** – Dla agregatów z Uji wynosił on:  $R_g \in (115 \text{ nm}; 1017 \text{ nm})$ ,  $R_{g,\text{med}} = 274 \text{ nm}$ , natomiast dla próbek z Arizony:  $R_g \in (99 \text{ nm}; 560 \text{ nm})$ ,  $R_{g,\text{med}} = 251 \text{ nm}$ . Wartości zostały obliczone z założeniem, że gęstość cząsteczek jest stała [30]. Inne badania, przeprowadzone przez grupę Poppel, wykazały, że średni promień bezwładności powinien być uznany za  $R_{g,\text{avg}} = 450 \text{ nm}$ . Do aproksymacji przytoczonej wartości wykorzystano metodę tomografii elektronowej [31].
- **Wymiar fraktalny** – Powszechnie uznaje się, że wymiar fraktalny świeżych agregatów sadzy wynosi  $D_f = 1,8$  i jest taki sam, jak w przypadku modeli struktur wygenerowanych za pomocą algorytmu DLCA [31, 66]. Nowsze badania, z wykorzystaniem metody tomografii elektronowej, wskazują, że jego rze-

czywista wartość może być nieco większa. Dla agregatów sadzy, zebranych w Uji, zawierała się ona w przedziale:  $D_f \in (1,9; 2,6)$ ,  $D_{f,med} = 2,4$ , natomiast dla tych z Arizony wynosiła odpowiednio:  $D_f \in (2,1; 2,3)$ ,  $D_{f,med} = 2,2$ . W literaturze można spotkać również inne wartości, znacznie mniejsze od tych przytoczonych wcześniej. Przykładem mogą być badania grupy Katrinak, dotyczące morfologii agregatów fraktalnych sadzy zebranych w okolicy Phoenix. Zostały one przeprowadzone z wykorzystaniem obrazów TEM, a najmniejszy zaobserwowany wymiar wynosił  $D_{f,min} = 1,35$  [67]. Należy również pamiętać, że omawiany parametr rośnie wraz z czasem życia agregatu. Spowodowane jest to powstaniem dodatkowych płaszczy i procesem restrukturyzacji.

- **Współczynnik fraktalny** – Podobnie jak w przypadku wymiaru  $D_f$ , w literaturze można spotkać bardzo różne wartości współczynnika fraktalnego, dochodzące nawet do  $k_{f,max} = 3,4$  [19]. Po zastosowaniu metody tomografii elektronicznej otrzymane wyniki przedstawiały się następująco:  $k_f \in (0,25; 1,6)$ ,  $k_{f,med} = 0,67$  dla próbek z Uji i  $k_f \in (0,34; 1,2)$ ,  $k_{f,med} = 0,71$  dla próbek z Arizony [30].
- **Współczynnik załamania światła** – Powszechnie wykorzystywaną wartością jest  $m_p = 1,57 - 0,56i$ , aczkolwiek nigdy nie została ona potwierdzona eksperymentalnie [36]. Jedną z wartości sugerowanych przez Bonda i Bergstroma jest  $m_p = 1,85 + 0,71i$  [2]. Może ona zostać uznana za stałą w przedziale pasma światła widzialnego. Albedo rozpraszania światła dla sadzy zawarte jest w przedziale  $\omega \in (0,2; 0,3)$  i zmienia się w czasie życia agregatu. Wartość MAC została ustalona jako  $MAC = 1,3 \text{ m}^2/\text{g}$  [2].
- **Gęstość** – Wartością sugerowaną przez Bonda i Bergstroma jest  $g \approx 1,8 \text{ g/cm}^3$ . Mniejsze wartości, takie jak  $g = 1 \text{ g/cm}^3$ , nie powinny być stosowane [2].

Na potrzeby niniejszego opracowania wygenerowane zostały agregaty o następujących parametrach:  $N_p = 75$ ,  $D_f = 2,4$ ,  $k_f = 0,67$ ,  $r_p = 26 \text{ nm}$ ,  $R_g \approx 185 \text{ nm}$ . Poldispersja nie została uwzględniona, a wszystkie cząsteczki znajdują się w kontakcie punktowym. Współczynnik załamania światła został określony jako  $m_p = 1,85 + 0,71i$ . Wykorzystany został model agregacji CC zaproponowany przez Filippova [14].

## 5. PORÓWNANIE TEORII ROZPRASZANIA ŚWIATŁA

W niniejszym opracowaniu wykorzystany został program DDScat opierający się na metodzie DDA [51, 50]. Aby określić jego błąd, oraz dobrać optymalną liczbę dipoli przypadających na długość fali, został on porównany z konkurencyjnym programem T-Matrix autorstwa Mackowskiego [46,48]. Jest on uznawany za dokładny, aczkolwiek sposób rozpraszania światła na strukturach wciąż nie jest do końca znany i wykorzystane algorytmy charakteryzują się skończoną precyzją obliczeń. Jego największą wadą jest brak możliwości przeprowadzania symulacji rozpraszania światła na przenikających się sferach. Z tego powodu porównanie mogło zostać przeprowa-

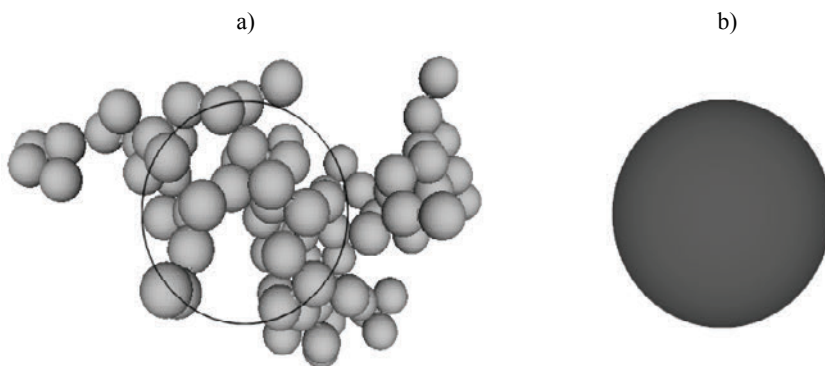
dzone wyłącznie dla dwóch skrajnych przypadków, mianowicie dla agregatu, w którym cząsteczki znajdują się w kontakcie punktowym  $C_{ov} = 0$  oraz dla kuli z objętością identyczną z objętością agregatu  $C_{ov} = 1$ . Drugi przypadek przedstawia całkowite przenikanie (lub spieczenie), w którym środki wszystkich cząsteczek znajdują się w jednym punkcie. Obie struktury przedstawione zostały na rysunku 12. Parametry morfologiczne pierwszej z nich zostały opisane w poprzednim rozdziale, długość padającej fali została określona jako  $\lambda = 550$  nm. Aby otrzymać jak najbardziej podobne wyniki, żadna metoda uśredniania nie została zastosowana.

Podczas obliczania względnego błędu diagramów rozpraszania światła wykorzystane zostały wzory

$$E_{AVG}[\%] = \frac{\sum_{\theta=0}^n |E_{REF}(\theta)|}{n} \quad (51a)$$

$$E_{REF}(\theta) = \frac{X(\theta) - REF(\theta)}{REF(\theta)} 100\% \quad (51b)$$

Dodatkowo podany został RMSE. Symulacje DDA zostały przeprowadzone dla dwóch dokładności. W pierwszej z nich liczba dipoli przypadających na długość padającej fali wynosi  $d\lambda \approx 55$  ( $|m_p|k_d \approx 0,226$ ), natomiast w drugiej  $d\lambda \approx 110$  ( $|m_p|k_d \approx 0,113$ ). Obliczenia wykonane zostały na komputerze klasy PC wyposażonym w 8GB pamięci RAM i procesorze AMD Athlon II X4 640 o taktowaniu 3,00 GHz. Podczas symulacji aktywny był wyłącznie jeden rdzeń.



Rys. 12. Struktury wykorzystane podczas porównywania dokładności programów DDScat i T-Matrix.

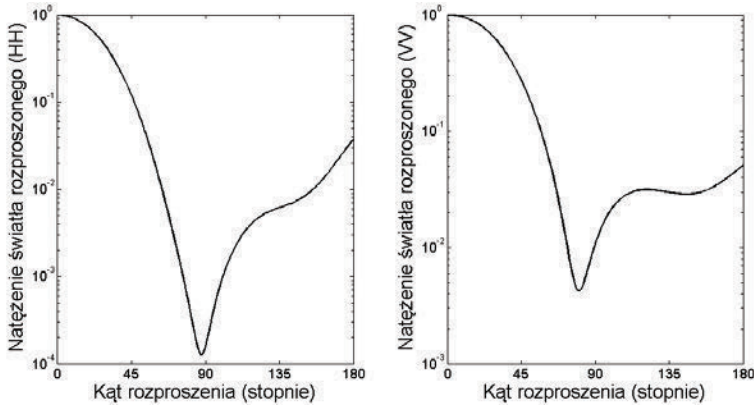
Poziom nakładania się cząsteczek wynosi odpowiednio: a)  $C_{ov} = 0$ , b)  $C_{ov} = 1$

(sfera o jednakowej objętości jak początkowy agregat)

Fig. 12. The structures used for the comparison of the DDScat and the T-Matrix codes. The overlap level is set as follows: a)  $Cov = 0$ , b)  $Cov = 1$  (a sphere with the same volume as the initial aggregate)

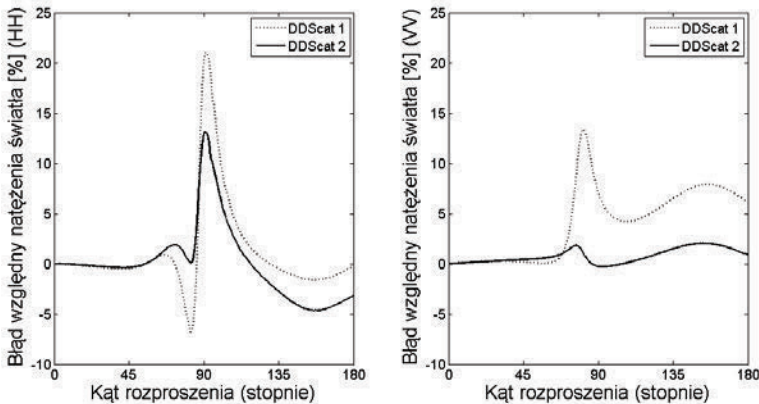
5.1. KONTAKT PUNKTOWY,  $C_{ov} = 0$ 

Ponieważ bez dokładniejszej analizy wyników nie da się dostrzec różnic w dokładności obu programów, na rysunku 13 przedstawione zostały diagramy światła rozproszonego wyłącznie dla algorytmu T-Matrix. Na rysunku 14 widoczne są błędy względne obu polaryzacji, natomiast w tabeli 3 wypisane zostały pozostałe parametry.



Rys. 13. Diagramy światła rozproszonego dla agregatu zbudowanego z cząsteczek będących w kontakcie punktowym. Symulacje zostały przeprowadzone z użyciem programu T-Matrix  
 Fig. 13. Light scattering diagrams for the aggregate composed of particles in point contact. The simulations were performed with the T-Matrix scattering code

The simulations were performed with the T-Matrix scattering code



Rys. 14. Błąd względny diagramów rozproszenia światła otrzymanych za pomocą programu DDScat w porównaniu do programu T-Matrix. Funkcja „DDScat1” oznacza dokładność rzędu  $d\lambda \approx 55$ , natomiast „DDScat2” rzędu  $d\lambda \approx 110$ . Poziom nakładania się cząsteczek wynosi  $C_{ov} = 0$   
 Fig. 14. The relative error of the DDScat program compared to the T-Matrix scattering code.

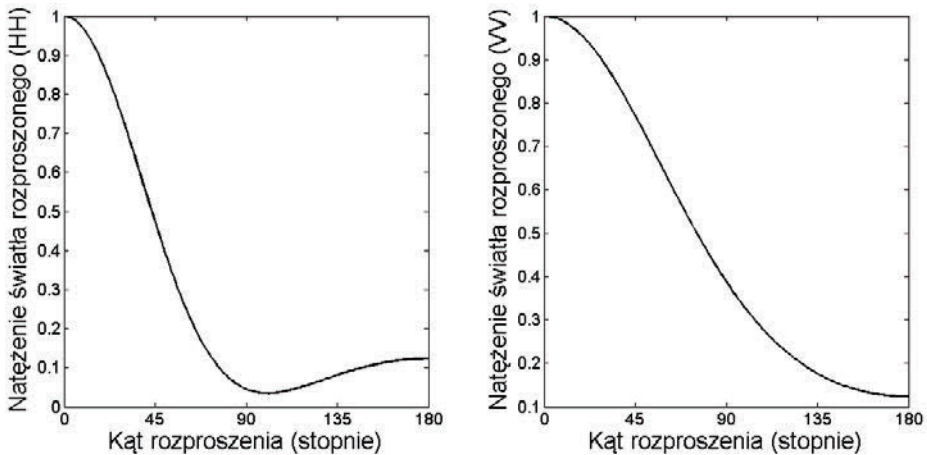
The curve “DDScat1” is related to the precision of  $d\lambda \approx 55$  while the curve “DDScat2” represents the precision of  $d\lambda \approx 110$ . The overlap level is defined as  $C_{ov} = 0$

Tabela 2. Porównanie wyników metod rozpraszania światła dla  $C_{ov} = 0$ .  
 Współczynniki wydajności opisują światło niespolaryzowane  
 Table 2. Comparison of the light scattering results for  $C_{ov} = 0$ .  
 The efficiencies are associated with the unpolarized light only

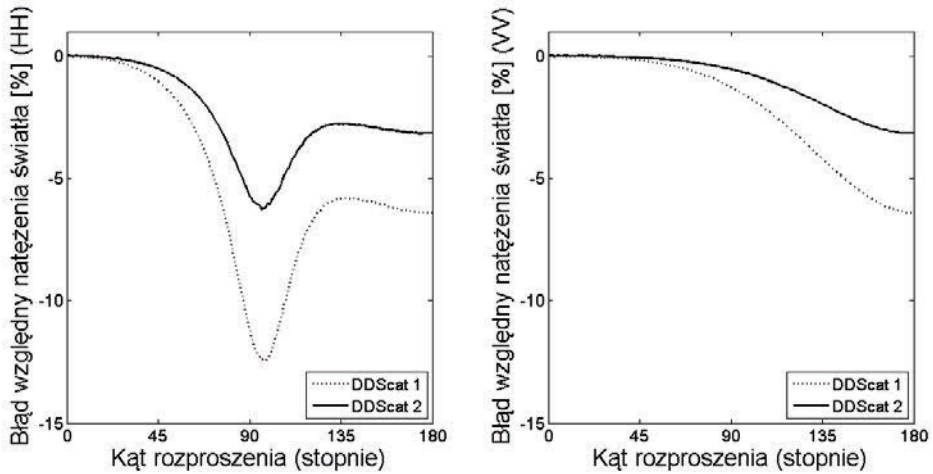
Parametr	T-Matrix	DDScat ( $d\lambda \approx 55$ )	DDScat ( $d\lambda \approx 110$ )
$g$	0,625	0,624	0,629
$Q_{ext}$	2,176	2,284	2,253
$Q_{sca}$	0,572	0,582	0,575
$Q_{abs}$	1,604	1,703	1,678
EHH,AVG [%]	–	2,401	2,414
EVV,AVG [%]	–	4,130	0,919
$RMSE_{HH} \cdot 10^{-3}$	–	0,619	0,526
$RMSE_{VV} \cdot 10^{-3}$	–	1,574	0,828
Liczba dipoli	–	5556	44228
Czas obliczeń [s]	~ 8	~ 72	~ 640

## 5.2. PEŁNE PRZENIKANIE, $C_{ov} = 1$

Z tych samych powodów, co w poprzednim przypadku (brak widocznych różnic), na rysunku 15 przedstawione zostały diagramy światła rozproszonego wyłącznie dla programu T-Matrix, natomiast na rysunku 16 względne błędy programu DDScat. Pozostałe parametry opisane zostały w tabeli 3.



Rys. 15. Diagramy światła rozproszonego dla pojedynczej sfery o równoważnej objętości.  
 Symulacje zostały przeprowadzone z użyciem programu T-Matrix  
 Fig. 15. Light scattering diagrams for the volume-equivalent sphere.  
 The simulations were performed with the T-Matrix scattering code



Rys. 16. Błąd względny diagramów rozproszenia światła otrzymanych za pomocą programu DDScat w porównaniu do programu T-Matrix. Funkcja „DDScat1” oznacza dokładność rzędu  $d\lambda \approx 55$ , natomiast „DDScat2” rzędu  $d\lambda \approx 110$ . Poziom nakładania się cząsteczek wynosi  $C_{ov} = 1$

Fig. 16. The relative error of the DDScat program compared to the T-Matrix scattering code.

The curve “DDScat1” is related to the precision of  $d\lambda \approx 55$  while the curve “DDScat2” represents the precision of  $d\lambda \approx 110$ . The overlap level is defined as  $C_{ov} = 1$

Tabela 3. Porównanie wyników metod rozpraszania światła dla  $C_{ov} = 1$ .

Współczynniki wydajności opisują światło niespolaryzowane

Table 3. Comparison of the light scattering results for  $C_{ov} = 1$ .

The efficiencies are associated with the unpolarized light only

Parametr	T-Matrix	DDScat ( $d\lambda \approx 55$ )	DDScat ( $d\lambda \approx 110$ )
$g$	0,377	0,386	0,382
$Q_{ext}$	2,586	2,608	2,597
$Q_{sca}$	1,017	1,019	1,017
$Q_{abs}$	1,570	1,591	1,579
$E_{HH,AVG}$ [%]	–	4,982	2,227
$E_{VV,AVG}$ [%]	–	2,220	1,046
$RMSE_{HH} \cdot 10^{-3}$	–	5,111	2,258
$RMSE_{VV} \cdot 10^{-3}$	–	5,298	2,473
Liczba dipoli	–	5497	43867
Czas obliczeń [s]	<1	~11	~65

### 5.3. WNIOSKI

Na podstawie wyników można zaobserwować, że błąd programu DDScat jest mniejszy w przypadku zastosowania większej liczby dipoli przypadających na długość

fali. Niestety większa dokładność prowadzi do wyraźnego wydłużenia czasu symulacji, który w przypadku agregatu zbudowanego z cząsteczek znajdujących się w kontakcie punktowym  $C_{ov} = 0$  wzrósł prawie 9-krotnie. Te same obliczenia w odniesieniu do programu T-Matrix trwały około 80 razy dłużej. Zależność ta występuje również podczas badania rozpraszania światła na pojedynczej sferze, aczkolwiek nie jest już tak wyraźna (czas najdokładniejszych symulacji programu DDScat w odniesieniu do T-Matrix wydłużył się ok. 65 razy). W przypadku przeprowadzania pojedynczych symulacji nie stanowi to problemu. Jeżeli jednak analizowana jest cała rodzina agregatów (kilkaset lub nawet kilka tysięcy struktur) może to stanowić poważną barierę. Największa różnica między diagramami światła rozproszonego występuje w okolicy kąta  $\theta = 90^\circ$ . Było to przewidywalne, ponieważ natężenie w tym obszarze jest najmniejsze. Ma to oczywiście bezpośredni wpływ na wartość błędu  $E_{AVG}$ . Procentowa zmiana wartości parametrów  $Q_{ext}$ ,  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$  między dwiema badanymi dokładnościami programu DDScat, nie przekracza w pierwszym przypadku ( $C_{ov} = 0$ ) 1,5%, a w drugim ( $C_{ov} = 1$ ) jest zawsze mniejsza niż 0,8%. Nie są to szczególnie wyraźne zmiany, dlatego symulacje mogą być z powodzeniem przeprowadzane dla mniejszej dokładności. W przypadku gdy sfery umieszczone są w kontakcie punktowym ( $C_{ov} = 0$ ), zalecane jest wykorzystanie programu T-Matrix.

## 6. PROCES SPIEKANIA

Proces spiekania polega na łączeniu ze sobą cząsteczek w temperaturze niższej niż ich temperatura topnienia. Zjawisko wykorzystywane jest między innymi w gałęziach przemysłu, w których kontrola mikrostruktury materiału odgrywa kluczową rolę. Jest to również podstawowy sposób otrzymywania materiałów ceramicznych [68]. Innym przykładem może być technika otrzymywania warstw tlenku tytanu, mającego zastosowanie w ogniwach słonecznych [69, 70], a także produkcji czujników gazowych [71]. Połączenia między spieczonymi cząsteczkami mają wyraźny wpływ na czułość tych urządzeń, są również istotne dla stabilności warstw nanocząsteczek i transportu elektronów [71]. Poszczególne fazy procesu spiekania nie zostały dokładnie zbadane [72], jednak za główny czynnik kierujący danym procesem uważa się minimalizację energii swobodnej przez redukcję powierzchni agregatu. Skutkuje to zmniejszeniem promienia bezwładności struktury (która w końcowej fazie zamienia się w kulę) oraz zmianą wymiaru i współczynnika fraktalnego [71, 73]. Minimalizacja energii nie pozostaje również bez wpływu na temperaturę, co może prowadzić do wystąpienia procesów takich jak topienie czy rekryształizacja [72]. Początkowe fazy spiekania mogą być aproksymowane za pomocą nakładających się sfer [74]. Badania tego typu zostały przeprowadzone między innymi przez grupę A.M. Brasila [16]. Ponadto agregat złożony z nakładających się cząsteczek w dalszym ciągu wykazuje właściwości fraktalne [15].

Proces spiekania może być modelowany za pomocą stopniowego zwiększania współczynnika nakładania się cząsteczek  $C_{sp}$  z jednoczesnym zachowaniem objętości struktury. Inny, alternatywny model spiekania cząsteczek został zaproponowany na Uniwersytecie w Bremie [75], w którym wykorzystane zostały owale Cassiniego wyrażone równaniem

$$[(x-a)^2 + y^2][(x+a)^2 + y^2] = b^4 \quad (52)$$

lub analogicznie do współrzędnych sferycznych

$$r^4 + a^4 - 2a^2r^2 \cos(2\theta) = b^4 \quad (53)$$

Parametry  $a$  i  $b$  kontrolują kształt struktury. W przypadku gdy  $a > b$  otrzymujemy dwa niezależne kształty, kiedy  $a = b$  otrzymujemy figurę podobną do symbolu nieskończoności, w innym razie ( $b > a$ ) wynikiem jest jedna, zamknięta krzywa. Im wartość  $a$  jest mniejsza od  $b$ , tym zakrzywienia w środkowej części są mniej wyraźne. Jeżeli będziemy obracać strukturę dookoła osi  $OX$  (dodając trzeci wymiar), to przez modyfikację parametrów  $a$  i  $b$  będziemy mogli przedstawić wszystkie fazy spiekania dwóch cząsteczek (w celu zachowania objętości należy zmieniać wielkość struktury).

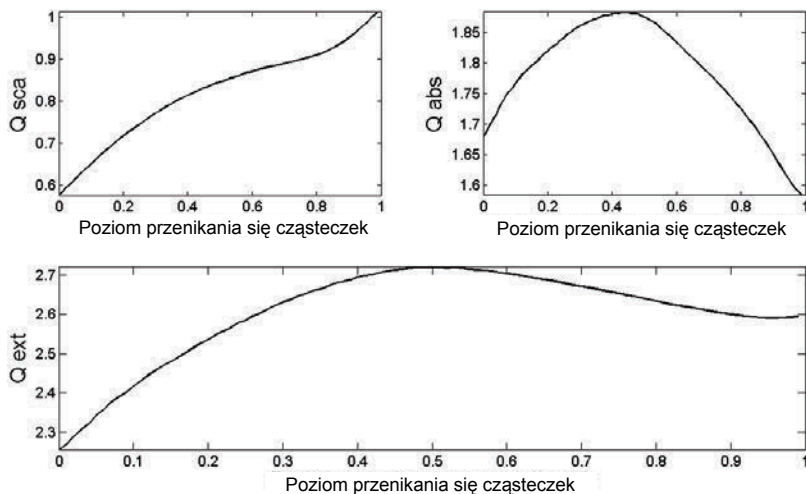
## 7. SYMULACJE

W symulacjach przeprowadzonych na potrzeby niniejszego opracowania wygenerowany został agregat sadzy o parametrach  $N_p = 75$ ,  $D_f = 2.4$ ,  $k_f = 0.67$ ,  $r_p = 26$  nm i  $R_g \approx 185$  nm. Ta sama struktura (rys. 12a), została wykorzystana do porównywania programów modelujących rozpraszanie światła. Współczynnik załamania został określony przez  $m_p = 1.85 + 0.71i$ , a długość padającej fali wynosiła  $\lambda = 550$  nm. Podczas symulacji współczynnik przenikania cząsteczek zmieniał się od  $C_{sp} = 0.00$  do  $C_{sp} = 1.00$  z krokiem  $\Delta C_{sp} = 0.01$ . Ponieważ wykonana została względnie mała liczba symulacji (około 300) zastosowano większą dokładność obliczeń, mianowicie liczba dipoli przypadających na długość fali wynosiła  $d\lambda \approx 110$ , co przekładało się na  $|m_p|k_d \approx 0.113$

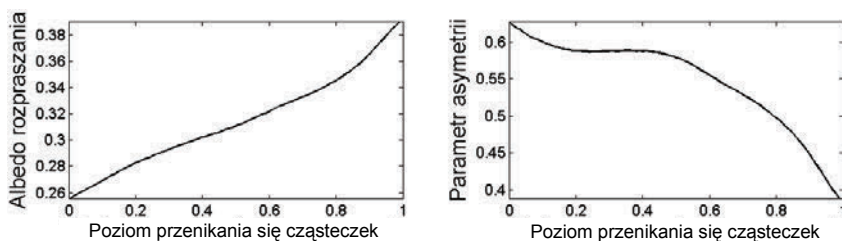
### 7.1. ZACHOWANIE OBJĘTOŚCI

Pierwszym etapem było stopniowe zwiększanie współczynnika nakładania się cząsteczek  $C_{sp}$  wraz z zachowaniem objętości agregatu. Względny błąd objętości na każdym etapie symulacji nie przekroczył wartości 0,1%. Zmiany powierzchni, promienia cząsteczek  $r_p$  i promienia bezwładności  $R_g$  widoczne są na rysunku 19. Wyniki modelowania rozpraszania światła przedstawione zostały na wykresach (rys. 17, 18).





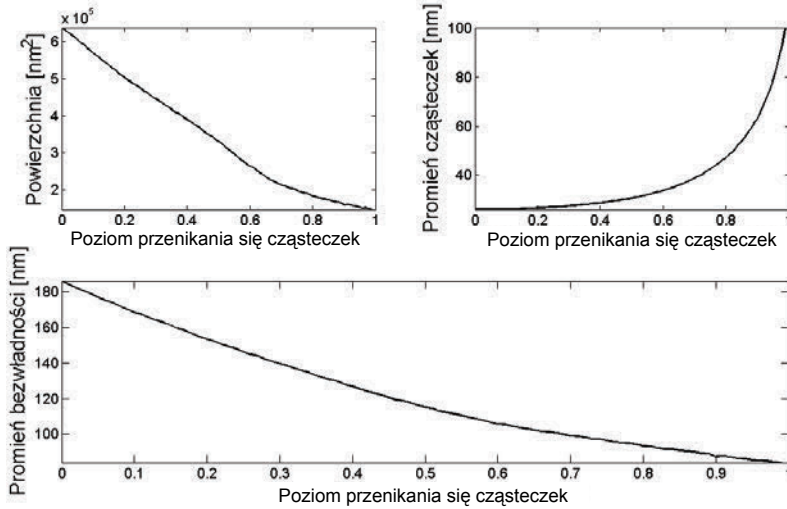
Rys. 17. Zależność współczynników wydajności  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$ ,  $Q_{ext}$  od poziomu przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Objętość struktury jest stała  
 Fig. 17. The dependence of the efficiencies  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$ ,  $Q_{ext}$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The volume of the structure is constant



Rys. 18. Zależność albedo rozpraszania światła  $\omega$  i parametru asymetrii  $g$  od poziomu przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Objętość struktury jest stała  
 Fig. 18. The dependence of the scattering albedo  $\omega$  and the asymmetry parameter  $g$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The volume of the structure is constant

Zarówno współczynnik wydajności rozpraszania  $Q_{sca}$ , jak i albedo rozpraszania  $\omega$  rosną wraz z poziomem przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$  (rys. 17, 18). Odmiennie zachowuje się współczynnik wydajności absorpcji  $Q_{abs}$ , który osiąga swoje maksimum w  $C_{sp} \approx 0,45$ , a następnie zaczyna maleć. Może to dowodzić tezy, że zdolności absorpcyjne agregatów sadzy ulegają ograniczeniu wraz z czasem ich życia. Powodowane jest to procesem restrukturyzacji i nie musi być w pełni zależne od powstawania dodatkowych płaszczy. Współczynnik ekstynkcji  $Q_{ext}$  rośnie do poziomu przenikania się cząsteczek równego  $C_{sp} \approx 0,50$ , po czym stopniowo maleje. Zmiany te jednak nie są tak wyraźne jak w przypadku  $Q_{abs}$ . Kolejnym analizowanym elementem jest współczynnik asymetrii  $g$ , którego wartość zmniejsza się wraz ze wzrostem  $C_{sp}$ . Może być to bezpośrednią przy-

cząną zmiany promienia bezwładności  $R_g$  struktury, przedstawionego na rysunku 19. Wielkość promienia cząsteczek  $r_p$  rośnie wykładniczo aż do wartości  $r_p \approx 109$ . Czas symulacji zmienia się od 649 sekund dla agregatu zbudowanego z cząsteczek w kontakcie punktowym  $C_{sp} = 0$  do 63 sekund dla całkowitego przenikania, czyli  $C_{sp} = 1$ .



Rys. 19. Zależność powierzchni, promienia cząsteczek  $r_p$  i współczynnika bezwładności  $R_g$  od poziomego przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Objętość struktury jest stała

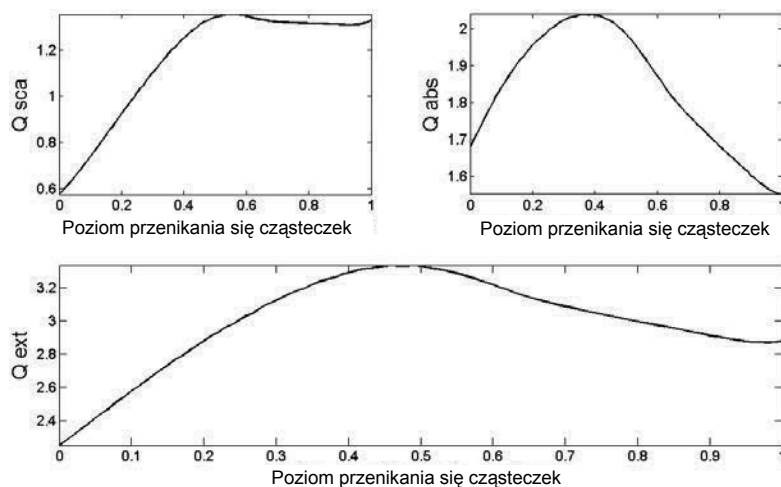
Fig. 19. The dependence of the surface, the particle radius  $r_p$  and the radius of gyration  $R_g$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The volume of the structure is constant

## 7.2. ZACHOWANIE POWIERZCHNI

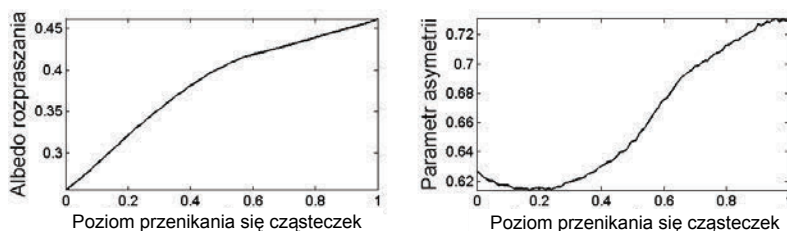
Kolejnym etapem było stopniowe zwiększanie współczynnika przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ , utrzymując stałą powierzchnię struktury. Podobnie jak w poprzednim przypadku, błąd powierzchni w żadnym momencie nie przekroczył wartości 0,1%. Wyniki symulacji zostały przedstawione na wykresach (rys. 20, 21), a zmiany objętości, promienia cząsteczek  $r_p$  i promienia bezwładności  $R_g$  widoczne są na rysunku 22.

Współczynniki wydajności  $Q_{abs}$  i  $Q_{ext}$  zachowują się podobnie jak w przypadku symulacji dla stałej objętości.  $Q_{sca}$  osiąga swoje maksimum na poziomie nakładania się cząsteczek zbliżonym do  $C_{sp} \approx 0,55$ , po czym jego zmiany przestają być tak wyraźne i można założyć, że jest stały (rys. 20). W przeciwieństwie do poprzednich symulacji parametr asymetrii  $g$  wykazuje tendencję wzrostową w obszarze  $C_{sp} \in (0,2; 1,0)$ , co jest zobrazowane na rysunku 21. Spowodowane jest to najprawdopodobniej zmianą objętości struktury, której maksymalny promień zastępczy wynosił  $R_v \approx 225$  nm (w poprzednich symulacjach był on stały i wynosił  $R_v \approx 109$  nm). Liczba dipoli wzrasta

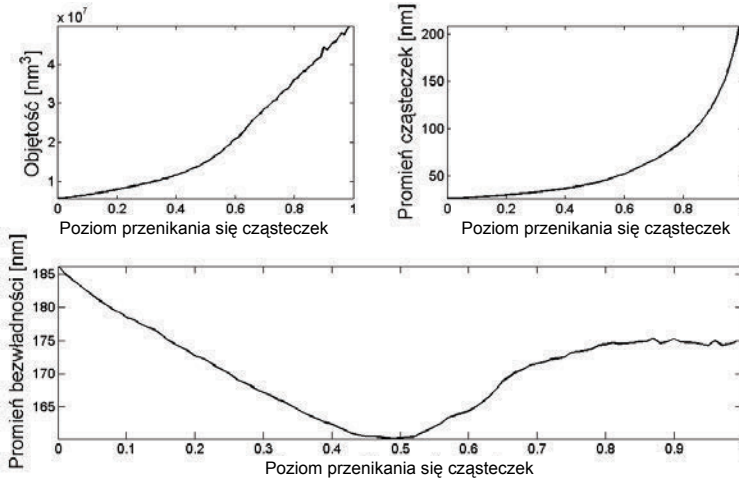
od 44228 do 382691, co ma bezpośredni wpływ na wydłużenie czasu obliczeń, który wynosił średnio 682 sekundy (nie zmniejsza się on wraz ze wzrostem  $C_{sp}$ ). Albedo rozpraszania światła  $\omega$  rośnie wraz ze zmianą  $C_{sp}$ . Interesujący jest wykres zależności promienia bezwładności  $R_g$  od  $C_{sp}$  przedstawiony na rysunku 22. Wynika z niego, że  $R_g$  osiąga wartość minimalną dla  $C_{sp} \approx 0,5$ , a następnie wzrasta aż do  $R_g \approx 174$  nm. Spowodowane jest to najprawdopodobniej wzmocnieniem efektu wielokrotnego przenikania się sfer, co wymusza znaczne zwiększenie promienia cząsteczek  $r_p$ . Wykres  $r_p$  od  $C_{sp}$  jest bardzo podobny do tego otrzymanego w poprzednich symulacjach (rys. 19), aczkolwiek maksymalna wartość  $r_p$  jest niemal dwukrotnie większa, co ma oczywisty wpływ na kształt struktury.



Rys. 20. Zależność współczynników wydajności  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$ ,  $Q_{ext}$  od poziomu przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Powierzchnia struktury jest stała  
 Fig. 20. The dependence of the efficiencies  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$ ,  $Q_{ext}$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The surface of the structure is constant



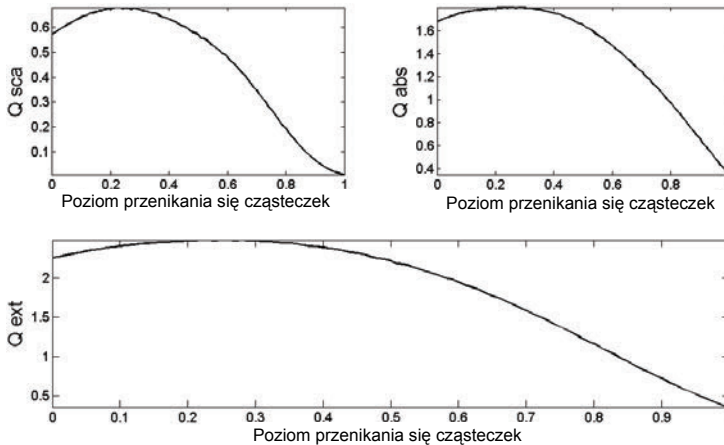
Rys. 21. Zależność albedo rozpraszania światła  $\omega$  i parametru asymetrii  $g$  od poziomu przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Powierzchnia struktury jest stała  
 Fig. 21. The dependence of the scattering albedo  $\omega$  and the asymmetry parameter  $g$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The surface of the structure is constant



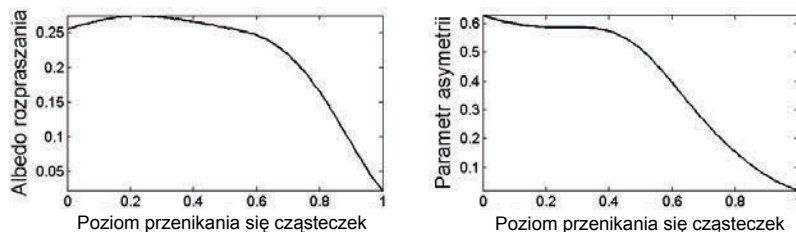
Rys. 22. Zależność objętości, promienia cząsteczek  $r_p$  i współczynnika bezwładności  $R_g$  od poziomego przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Powierzchnia struktury jest stała  
 Fig. 22. The dependence of the volume, the particle radius  $r_p$  and the radius of gyration  $R_g$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The surface of the structure is constant

### 7.3. ZACHOWANIE PROMIENIA CZĄSTECZEK

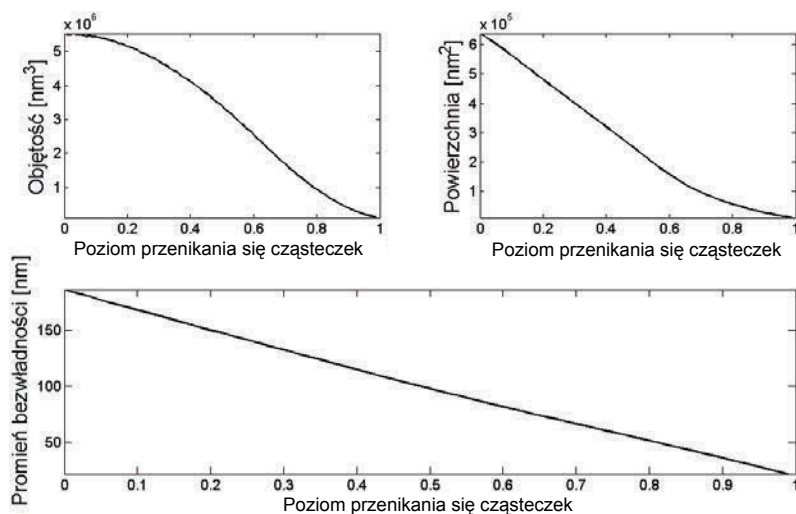
Ostatnim etapem było stopniowe zwiększanie  $C_{sp}$  wraz z zachowaniem stałego promienia cząsteczek  $r_p$ . Wyniki zostały przedstawione na wykresach (rys. 23, 24), a zmiany objętości, powierzchni i promienia bezwładności  $R_g$  widoczne są na rysunku 25.



Rys. 23. Zależność współczynników wydajności  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$ ,  $Q_{ext}$  od poziomego przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Promień cząsteczek  $r_p$  jest stały  
 Fig. 23. The dependence of the efficiencies  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$ ,  $Q_{ext}$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The particle radius  $r_p$  is constant



Rys. 24. Zależność albedo rozpraszania światła  $\omega$  i parametru asymetrii  $g$  od poziomu przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Promień cząsteczek  $r_p$  jest stały  
 Fig. 24. The dependence of the scattering albedo  $\omega$  and the asymmetry parameter  $g$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The particle radius  $r_p$  is constant



Rys. 25. Zależność objętości, powierzchni i współczynnika bezwładności  $R_g$  od poziomu przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$ . Promień cząsteczek  $r_p$  jest stały  
 Fig. 25. The dependence of the volume, the surface and the radius of gyration  $R_g$  on the overlap level  $C_{sp}$ . The particle radius  $r_p$  is constant

Podczas trwania symulacji zarówno objętość struktury, jak również jej powierzchnia ulegają zmniejszeniu. Współczynniki wydajności  $Q_{ext}$ ,  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$  i albedo rozpraszania  $\omega$  osiągają maksimum dla  $C_{sp} \approx 0,25$ , po czym zaczynają maleć (rys. 23, 24). Wartość parametru asymetrii  $g$  zmniejsza się wraz ze wzrostem  $C_{sp}$ . Objętość, powierzchnia i promień bezwładności  $R_g$  również maleją, co nie jest żadną niespodzianką i było przewidziane przed rozpoczęciem symulacji (rys. 25). Czas obliczeń malał od 649 sekund dla agregatu zbudowanego z cząsteczek w kontakcie punktowym do 3 sekund dla pojedynczej sfery o promieniu  $r_p = 26$  nm.

## 8. PODSUMOWANIE

W opracowaniu przedstawiono teorię rozpraszania światła na agregatach fraktalnych oraz omówiono najpopularniejsze algorytmy generacji tych struktur. Porównane zostały ze sobą dwa konkurencyjne programy modelujące rozpraszanie światła, mianowicie DDScat autorstwa Draine i Flatau [51, 50], opierający się na metodzie DDA (ang. *Discrete Dipole Approximation*), umożliwiający symulacje rozpraszania światła na strukturze o dowolnym kształcie, oraz T-Matrix autorstwa Mackowskiego [48, 46], charakteryzujący się szybkością i dokładnością obliczeń, aczkolwiek niepozwalający na przeprowadzenie symulacji rozpraszania światła na agregatach zbudowanych z przenikających się cząsteczek. Porównanie zostało przeprowadzone dla dwóch dokładności programu DDScat, w pierwszym wypadku na długość fali przypadają  $d\lambda \approx 55$  elementów objętościowych (dipoli), a w drugim  $d\lambda \approx 110$ . Wyniki, przedstawione na wykresach (rys. 14, 16), dowodzą, że różnice są niewielkie i w przypadku cząsteczek znajdujących się w kontakcie punktowym programy mogą być stosowane zamiennie. Niestety czas niezbędny do wykonania symulacji za pomocą programu DDScat może być nawet kilkadziesiąt razy dłuższy (tab. 2, 3).

W kolejnej części opracowania wygenerowany został przykładowy agregat sadzy, na którym badano wpływ przenikania się cząsteczek na jego właściwości optyczne. Aby tego dokonać, współczynnik przenikania się cząsteczek  $C_{sp}$  zmieniał się od wartości 0 (wszystkie cząsteczki znajdują się w kontakcie punktowym) do 1 (agregat zamienia się w kulę). W celu zachowania stałej objętości lub powierzchni struktury promień cząsteczek był modyfikowany wykładniczo, co jest przedstawione na rysunku 19. Wyniki rozpraszania światła wykazują, że wydajność absorpcji  $Q_{abs}$  wzrasta aż do poziomu przenikania się cząsteczek równego około  $C_{sp} \approx 0,45$ , a następnie zaczyna maleć, przyjmując ostatecznie wartość mniejszą niż początkowa (rys. 17). Może to dowodzić, że zdolności absorpcyjne agregatów sadzy ulegają ograniczeniu wraz z czasem ich życia. Odmiennie zachowują się albedo  $\omega$  i wydajność rozpraszania  $Q_{sca}$ , których wartość rośnie wraz z wzrostem  $C_{sp}$  (rys. 18). Podobne symulacje zostały przeprowadzone z zachowaniem stałej powierzchni agregatu (rys. 20–22) oraz promienia cząsteczek (rys. 23–25).

## LITERATURA

- [1] Beniwal R., Shivgotra V.K., *An elementary framework for judging the cardiovascular toxicity of carbon soot: Experiences from an occupational health survey of diamond industry workers*, Cardiovascular Toxicology, Vol. 9, 194–200, 2009.
- [2] Bond T.C., Bergstrom R.W., *Light absorption by carbonaceous particles: an investigative review*, Aerosol Science and Technology, Vol. 40, 27–67, 2006.
- [3] Adachi K., Buseck P.R., *Internally mixed soot, sulfates, and organic matter in aerosol particles from Mexico city*, Atmospheric Chemistry and Physics, Vol. 8, 6469–6481, 2008.
- [4] Kahnert M., Devasthale A., *Black carbon fractal morphology and short-wave radiative impact: a modelling study*, Atmospheric Chemistry and Physics, Vol. 11, 11745–11759, 2011.

- [5] Mandelbrot B., *The Fractal Geometry of Nature*, W.H. Freeman and Co., 1982.
- [6] Lin M., Lindsay H., Weitz D., Ball R., Klein R., Meakin P., *Universality of fractal aggregates as probed by light scattering*, Proceedings of the Royal Society of London, Vol. 423, 71–87, 1989.
- [7] Falconer K., *Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications*, John Wiley and Sons, 2003.
- [8] Kamata S., Eason R., Bandou Y., *A new algorithm for n-dimensional hilbert scanning*, IEEE Transaction on Image Processing, Vol. 8, 964–973, 1999.
- [9] Hausdorff F., *Dimension und äußeres maß*, Mathematische Annalen, Vol. 79, 157–179, 1919.
- [10] Penrose R., *Nowy Umysł Cesarza*, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2000.
- [11] Shishikura M., *The hausdorff dimension of the boundary of the Mandelbrot set and Julia sets*, Annals of Mathematics, Vol. 147, 225–267, 1998.
- [12] Bushella G., Yan Y., Woodfield D., Raper J., Amal R., *On techniques for the measurement of the mass fractal dimension of aggregates*, Advances in Colloid and Interface Science, Vol. 95, 1–50, 2002.
- [13] Weitz D.A., Oliviera M., *Fractal structures formed by kinetic aggregation of aqueous gold colloids*, Physical Review Letters, Vol. 52, 1433–1436, 1984.
- [14] Filippov A., Zurita M., Rosner D., *Fractal-like aggregates: Relation between morphology and physical properties*, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 229, 261–273, 2000.
- [15] Oh C., Sorensen C.M., *The effect of overlap between monomers on the determination of fractal cluster morphology*, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 193, 17–25, 1997.
- [16] Brasil A.M., Farias T.L., Carvalho G., Koylu U.O., *Numerical characterization of the morphology of aggregated particles*, Journal of Aerosol Science, Vol. 32, 489–508, 2001.
- [17] Bahadur J., Mazumder S., Sen D., Ramanathan S., *Evolution of a fractal system with conserved order parameter under thermal annealing*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 22, DOI: 10.1088/0953-8984/22/19/195107, 2010.
- [18] Liu C., Panetta L., Yang P., *The influence of water coating on the optical scattering properties of fractal soot aggregates*, Aerosol Science and Technology, Vol. 46, 31–43, 2012.
- [19] Cai J., Lu N., Sorensen C.M., *Analysis of fractal cluster morphology parameters: Structural coefficient and density autocorrelation function cutoff*, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 470–473, 171, 1995.
- [20] Meakin P., *A historical introduction to computer models for fractal aggregates*, Journal of Sol-Gel Science and Technology, Vol. 15, 97–117, 1999.
- [21] Witten T., Sander L., *Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon*, Physical Review Letters, Vol. 47, 1400–1403, 1981.
- [22] Lin M., Lindsay H., Weitz D., Klein R., Ball R., Meakin P., *Universal diffusion-limited colloid aggregation*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 2, 3093–3113, 1990.
- [23] Eden M., *A two-dimensional growth process*, Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Vol. 4, 223–239, 1961.
- [24] Mroczka J., Wozniak M., Onofri F.R.A., *Algorithms and methods for analysis of the optical structure factor of fractal aggregates*, Metrology and Measurements Systems, Vol. 19, 459–470, 2012.
- [25] Skorupski K., Mroczka J., Riefler N., Oltmann H., Will S., Wriedt T., *Impact of morphological parameters onto simulated light scattering patterns*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.12.014>, 2012.
- [26] Oltmann H., Reimann J., Will S., *Single-shot measurement of soot aggregate sizes by wide-angle light scattering (WALS)*, Applied Physics B: Lasers and Optics, Vol. 106, 171–183, 2012.
- [27] Dobbins R., Megaridis C., *Morphology of flame-generated soot as determined by thermophoretic sampling*, Langmuir, Vol. 3, 254–259, 1987.
- [28] Koylu U.O., Xing Y., Rosner D., *Fractal morphology analysis of combustion-generated aggregates using angular light scattering and electron microscope images*, Langmuir, Vol. 11, 4848–4854, 1995.

- [29] Brasil A.M., Farias T.L., Carvalho G., *A recipe for image characterization of fractal-like aggregates*, Journal of Aerosol Science, Vol. 30, 1379–1389, 1999.
- [30] Adachi K., Chung S.H., Friedrich H., Buseck P.R., *Fractal parameters of individual soot particles determined using electron tomography: implications for optical properties*, Journal of geophysical research, Vol. 112, D14202, DOI: 10.1029/2006JD008296, 2007.
- [31] Poppel L.L., Friedrich H., Spinsby J., Chung S.H., Seinfeld J.H., Buseck P.R., *Electron tomography of nanoparticle clusters: Implications for atmospheric lifetimes and radiative forcing of soot*, Geophysical Research Letters, Vol. 32, L24811, DOI: 10.1029/2005GL024461, 2005.
- [32] Boldridge D., *Morphological characterization of fumed silica aggregates*, Aerosol Science and Technology, Vol. 44, 182–186, 2010.
- [33] Hanrahan P., Krueger W., *Reflection from layered surfaces due to subsurface scattering*, Proceedings of the 20th annual conference on Computer graphics and interactive techniques, DOI: 10.1145/166117.166139, 165–174, 1993.
- [34] Friedlander S., *Smoke, Dust, and Haze; Fundamentals of Aerosol Dynamics*, Second Edition, Oxford University Press, 2000.
- [35] Saleh B., Teich M., *Fundamentals of Photonics*, Second Edition, John Wiley and Sons, 2007.
- [36] Smyth K., Shaddix C., *The elusive history of  $m = 1.57 - 0.56i$  for the refractive index of soot*, Combustion and Flame, Vol. 107, 314–320, 1996.
- [37] van de Hulst H.C., *Light Scattering by Small Particles*, Wiley, 1957.
- [38] Mishchenko M., Hovenier J., Travis L., *Light Scattering by Nonspherical Particles: Theory, Measurements and Applications*, Academic Press, 2000.
- [39] Bohren C.F., Huffman D.R., *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley, 1983.
- [40] Hansen J., Travis L., *Light scattering in planetary atmospheres*, Space Science Reviews, Vol. 16, 527–610, 1974.
- [41] Mie G., *Beitrage zur optik truber medien, speziell kolloidaler metallosungen*, Annalen der Physik, Vol. 330, 377–445, 1908.
- [42] Volz S. ed., *Thermal Nanosystems and Nanomaterials*, Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [43] Wriedt T., *Light scattering theories and computer codes*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 110, 833–8433, 2009.
- [44] Waterman P.C., *Symmetry, unitarity and geometry in electromagnetic scattering*, Physical Review D, Vol. 3, 825–839, 1971.
- [45] Peterson B., Strom S., *T-matrix formulation of electromagnetic scattering from multilayered scatterers*, Physical Review D, Vol. 12, 2670–2684, 1974.
- [46] Mishchenko M.I., Travis L.D., Mackowski D.W., *T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: a review*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 55, 535–575, 1996.
- [47] Doicu A., Wriedt T., Eremin Y., eds., *Light Scattering by Systems of Particles; Null-Field Method with Discrete Sources: Theory and Programs*, Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [48] Mackowski D., Mishchenko M., *A multiple sphere t-matrix fortran code for use on parallel computer clusters*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 112, 2182–2192, 2011.
- [49] Purcell E.M., Pennypacker C.R., *Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains*, The Astrophysical Journal, Vol. 186, 707–714, 1973.
- [50] Draine B.T., Flatau P.J., *Discrete-dipole approximation for scattering calculations*, Journal of the Optical Society of America A, Vol. 11, 1491–1499, 1994.
- [51] Draine B.T., Flatau P.J., *User guide for the discrete dipole approximation code *ddscat* 7.2*, Instrumentation and Methods for Astrophysics, 2012.
- [52] Draine B.T., Goodman J., *Beyond clausius-mossotti – wave propagation on a polarizable point lattice and the discrete dipole approximation*, Astrophysical Journal, Vol. 405, 685–697, 1993.



- [53] Flatau P.J., Draine B.T., *Fast near field calculations in the discrete dipole approximation for regular rectilinear grids*, Optics Express, Vol. 20, 1247–1252, 2012.
- [54] Will S., Schraml S., Bader K., Leipertz A., *Performance characteristics of soot primary particle size measurements by time-resolved laser-induced incandescence*, Applied Optics, Vol. 37, 5647–5658, 1998.
- [55] Iuliis S.D., Cignoli F., Zizak G., *Two-color laser-induced incandescence (2C-LII) technique for absolute soot volume fraction measurements in flames*, Applied Optics, Vol. 44, 7–8, 2005.
- [56] Ryser R., Gerber T., Dreier T., *Soot particle sizing during high-pressure diesel spray combustion via time-resolved laser-induced incandescence*, Combustion and Flame, Vol. 156, 120–129, 2009.
- [57] Oltmann H., Reimann J., Will S., *Wide-angle light scattering (WALS) for soot aggregates characterization*, Combustion and Flame, Vol. 157, 516–522, 2010.
- [58] Sorensen C.M., *Light scattering by fractal aggregates: A review*, Aerosol Science and Technology, Vol. 35, 648–687, 2001.
- [59] Szczuczyński D.K., Mroczka J., *Problemy metrologii elektronicznej i fotonicznej 2; Matematyczno-fizyczne uwarunkowania zagadnienia odwrotnego w analizie wielkości cząstek układów dyspersyjnych z wykorzystaniem rozproszenia światła*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2009.
- [60] Mroczka J., Skorupski K., Woźniak M., *Problemy metrologii elektronicznej i fotonicznej 5; Zagadnienie wprost i problem odwrotny w analizie agregatów nanocząsteczek z wykorzystaniem technik rozproszenia światła oraz modelu fraktalnego do opisu fazy rozproszonej*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2012.
- [61] Mroczka J., Szczuczyński D.K., *Inverse problems formulated in terms of first-kind fredholm integral equations in indirect measurements*, Metrology and Measurement Systems, Vol. 16, 333–357, 2009.
- [62] Mroczka J., Szczuczyński D.K., *Improved regularized solution of the inverse problem in turbidimetric measurements*, Applied Optics, Vol. 5, 4591, 2010.
- [63] Mroczka J., Szczuczyński D.K., *Problem odwrotny – jakość rekonstrukcji funkcji rozkładu wielkości cząstek w pomiarach nefelometrycznych i turbidymetrycznych*, PAK, Vol. 9, 246–249, 2007.
- [64] Mroczka J., *Method of moments in light scattering data inversion in the particle size distribution function*, Optics Communications, Vol. 99, 147–151, 1993.
- [65] Guszowski T., Mroczka J., *Rozwiązanie problemu odwrotnego w turbidymetrii z wykorzystaniem sieci neuronowej*, PAK, Vol. 9, 239–241, 2007.
- [66] Sorensen C.M., Feye G.D., *The morphology of macroscopic soot*, Aerosol Science and Technology, Vol. 25, 328–337, 1996.
- [67] Katrinak K.A., Rez P., Perkes P.R., Buseck P.R., *Fractal geometry of carbonaceous aggregates from an urban aerosol*, Environmental Science and Technology, Vol. 27, 539–547, 1993.
- [68] Shimosaka A., Ueda Y., Shirakawa Y., Hidaka J., *Sintering mechanism of two spheres forming a homogeneous solid solubility neck*, KONA, Vol. 21, 219–233, 2003.
- [69] Buesser B., Groehn A.J., Pratsinis S.E., *Sintering rate and mechanism of tio2 nanoparticles by molecular dynamics*, The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 115, 11030–11035, 2011.
- [70] Zhang Q., Rubini P., *Modelling of light extinction by soot particles*, Fire Safety Journal, Vol. 46, 96–103, 2011.
- [71] Eggersdorfer M.L., Kadau D., Herrmann J.H., Pratsinis S.E., *Multiparticle sintering dynamics: From fractal-like aggregates to compact structures*, Langmuir, Vol. 27, 6358–6367, 2011.
- [72] Zhang Y., Li S., Yan W., Tse S.D., *Effect of size-dependent grain structures on the dynamics on nanoparticle coalescence*, Journal of Applied Physics, Vol. 111, 1243215, 2012.
- [73] Eggersdorfer M.L., Kadau D., Herrmann J.H., Pratsinis S.E., *Aggregate morphology evolution by sintering: Number and diameter of primary particles*, Aerosol Science and Technology, Vol. 46, 7–19, 2012.

- [74] Schmidt H.J., Tejwani S., Artelt C., Peukert W., *Monte carlo simulation of aggregate morphology for simultaneous coagulation and sintering*, Journal of Nanoparticle Research, Vol. 6, 613–626, 2004.
- [75] Hellmers J., Riefler N., Wriedt T., Eremin Y.A., *Light scattering simulation for the characterization of sintered silver nanoparticles*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 109, 1363–1373, 2008.

#### IMPACT OF THE OVERLAP PARAMETER ON OPTICAL PROPERTIES OF SOOT AGGREGATES

The following study discuss the phenomenon of light scattering by micro and nanoparticles. Moreover, the basic concepts of the fractal geometry, as well as its use in modelling of real aggregates, are explained. Next, two popular light scattering codes are presented and compared: the DDScat and the T-Matrix program. Light scattering patterns of soot aggregates, characterized by different values of the overlap coefficient, are discussed in the last part of our work.

Zbigniew BIELECKI\*  
Tadeusz STACEWICZ\*\*  
Jacek WOJTAS\*

## **ABSORPCYJNA SPEKTROSKOPIA LASEROWA**

W rozdziale opisano metody detekcji gazów opierające się na zjawisku absorpcji światła. Należą one do najbardziej popularnych metod wykrywania śladowych ilości materii. Spektroskopia absorpcyjna jest efektywną, nieinwazyjną techniką wykrywania i pomiaru koncentracji gazów w miejscu pobrania próbki (*in situ*). Czulość tradycyjnych metod absorpcyjnych jest ograniczona do  $10^{-4}$ - $10^{-5}$  cm<sup>-1</sup>. W rozdziale opisano także techniki poprawy czułości, które zapewniają zwiększenie czułości o około 3–5 rzędów wielkości lub nawet więcej. Szczególną uwagę poświęcono sensorom wykorzystującym spektroskopię strat we wnęcie optycznej (SSWO). Przedstawiono wyniki prac własnych na przykładzie sensorów: ditlenku azotu, tlenku azotu i podtlenku azotu. Ich czulość czujników osiąga poziom pojedynczych ppb. Dzięki temu mogą być stosowane w monitoringu atmosfery, do analizy ludzkiego oddechu, jak również do wykrywania materiałów wybuchowych.

### **1. WPROWADZENIE**

Spektroskopia laserowa dostarcza wiedzy o naturze zjawisk zachodzących na poziomie atomów i cząsteczek oraz o oddziaływaniu promieniowania z materią. Jej rozwój nie byłby możliwy bez nowych technologii laserowych, wysokoczułych układów fotodetekcyjnych oraz komputerowych technik przetwarzania sygnałów. Z kolei wiedza ta umożliwia wykorzystanie spektroskopii w wielu dziedzinach. Przykładem jest wykrywanie materii w ilościach śladowych.

Współczesna spektroskopia laserowa w połączeniu z optoelektroniką daje możliwość konstruowania czułych, stabilnych sensorów. Sensory tego rodzaju mają wielkie zastosowanie, gdyż niezwykle ważnym problemem we współczesnym świecie są zagrożenia terrorystyczne oraz ekologiczne. Aby ograniczyć skalę tych zagrożeń, należy

---

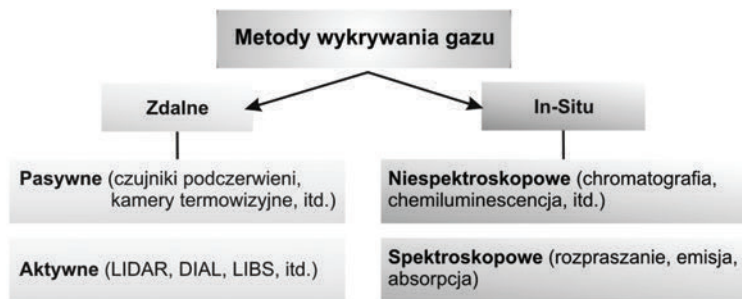
\* Instytut Optoelektroniki, Wojskowa Akademia Techniczna, ul. Gen. S. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa.

\*\* Uniwersytet Warszawski, ul. Hoża 69, 00-681 Warszawa.

sprawnie wykrywać niepożądane związki chemiczne, ślady materiałów wybuchowych i innych niepożądanych substancji. Sensory takie ważne są również w ujęciu medycznym, gdyż umożliwiają wykrywanie markerów chorobowych we wczesnym stadium rozwoju choroby. Parametry sensorów, a w szczególności ich czułość, zależą od rodzaju wykrywanych substancji chemicznych.

Rozdział ten poświęcony jest głównie metodom detekcji tlenków azotu ( $\text{NO}_x$ ). Omawiane są głównie czujniki pracujące z wykorzystaniem technik spektroskopii absorpcyjnej, takich jak CRDS (ang. *Cavity Ring Down Spectroscopy*) czy CEAS (ang. *Cavity Enhanced Absorption Spectroscopy*).

Tlenki azotu należą do gazów powszechnie występujących w atmosferze ziemskiej. Zgodnie z bazą danych HITRAN ich typowe stężenia wynoszą: NO – około 0,3 ppbv,  $\text{NO}_2$  – około 0,023 ppbv, oraz  $\text{N}_2\text{O}$  – około 320 ppbv [2] (stężenia pozostałych tlenków azotu są zanedbywalnie małe). Jednak w rzeczywistości ich lokalne stężenia zależą od obecności źródeł, zarówno antropogenicznych czy naturalnych (tzw. emisja), jak i warunków meteorologicznych, które decydują o transporcie tlenków azotu i ich przetwarzaniu w atmosferze, np. wskutek reakcji fotochemicznych (tzw. imisja). Substancje te ujmowane są ogólnym symbolem  $\text{NO}_x$ . W szczególności ditlenek azotu jest gazem cieplarnianym. Reakcje tlenków azotu z wodą prowadzą do powstawania kwaśnych deszczów. Podtlenek azotu,  $\text{N}_2\text{O}$ , jest używany jako środek znieczulający, zwłaszcza w stomatologii i chirurgii, choć znany jest również jako „gaz rozweselający” [14]. Ponadto wymienione tlenki azotu należą do charakterystycznych związków rozkładu materiałów wybuchowych, co ułatwia wykrywanie tych materiałów przez detekcję  $\text{NO}_x$  [25].



Rys. 1. Metody detekcji gazów  
Fig. 1. Methods of gases detection

Istnieje wiele metod wykrywania tlenków azotu (rys. 1). Można je podzielić na dwie zasadnicze grupy: metody zdalne i miejscowe. Metody zdalne dzielimy na aktywne i pasywne, natomiast metody miejscowe na spektroskopowe i inne. Chromatografia gazowa i spektrometria masowa odgrywają istotną rolę wśród metod niespektroskopowych. Granica wykrywalności  $\text{NO}_x$  z ich wykorzystaniem zawiera się

w przedziale od kilku do kilkunastu ppb [36]. Wśród metod spektroskopowych szczególnie wyróżniają się techniki optoelektroniczne zarówno CRDS, jak i CEAS. Osobną grupę stanowią sensory wykorzystujące zjawisko fotoakustyczne [37], które dla tlenków azotu osiągają czułości około 20 ppb [16].

W metodach pasywnych odbierane jest promieniowanie termiczne emitowane przez dany obiekt. Systemy te są powszechnie stosowane w kamerach termowizyjnych i czujnikach podczerwieni. Takie rozwiązanie nie wymaga stosowania, często bardzo kosztownych, źródeł promieniowania.

Metody aktywne są coraz częściej wykorzystywane do zdalnej detekcji gazów. Należy do nich zaliczyć techniki lidarowe (ang. *Light Detection And Ranging*). Typowy lidar rozproszeniowy zbudowany jest z nadajnika, który wysyła impulsy laserowe, oraz bardzo czułego fotoodbiornika. Impulsy laserowe po rozproszeniu na cząstkach aerozoli atmosferycznych lub w obłokach docierają do fotoodbiornika, w którym są analizowane. System taki jest wykorzystywany do monitorowania opadów, chmur i dymu wydostającego się z kominów, a także do wykrywania gazowych zanieczyszczeń atmosfery [21, 24]. Do poszukiwań zanieczyszczeń gazowych są także stosowane systemy absorpcji różnicowej DIAL (ang. *Differential Absorption Lidar*). W systemach tych są stosowane dwa lasery. Długość fali jednego z nich jest dopasowana do pasma absorpcji mierzonego gazu, natomiast długość fali drugiego lasera ( $\lambda_{\text{off}}$ ) leży poza pasmem absorpcji i pełni rolę wiązki odniesienia. Obydwie wiązki laserowe biegną tą samą drogą. Ponieważ  $\lambda_{\text{on}}$  i  $\lambda_{\text{off}}$  są bliskie sobie, są też podobnie rozpraszane, lecz różnie absorbowane. Porównując amplitudy obu sygnałów, można określić rozkład stężenia poszukiwanego absorbera w atmosferze [8].

W ostatnich latach ważne miejsce zajmuje również atomowa spektroskopia emisyjna (ang. *Atomic Emission Spectroscopy* – AES). Źródłem informacji jest widmo promieniowania wzbudzonych atomów oraz jonów pierwiastków. W wyniku oddziaływania intensywnego impulsowego promieniowania laserowego z badaną substancją wytwarzany jest obłok plazmy zawierający atomy i jony pierwiastków. Promieniowanie emitowane w trakcie wychładzania plazmy poddawane jest następnie analizie widmowej. Metoda ta nazywana jest spektroskopią plazmy wzbudzonej laserowo – LIBS (ang. *Laser-Induced Breakdown Spectroscopy*) [9].

Metoda ta jest stosowana głównie do badania składu pierwiastkowego materiałów czy też analizy złożonych materiałów organicznych. Wysoka czułość wykrywania, rzędu 1–100 ppm oraz możliwość wykonywania szybkich analiz chemicznych w warunkach polowych predestynuje metodę LIBS do zastosowania w zakresie bezpieczeństwa. Szczególnie duże zainteresowanie obserwuje się w dziedzinie wykrywania śladowych ilości materiałów wybuchowych, broni biologicznej i chemicznej oraz innych substancji niebezpiecznych [3, 15].

W przypadku metod niespektroskopowych do analizy gazów powszechnie stosuje się chromatografię gazową (ang. GC – *Gas Chromatography*). W trakcie pomiarów próbki powietrza są wstrzykiwane wraz z gazem nośnym do kolumny chromatograficz-

nej, gdzie następuje fizykochemiczny proces rozdzielania. Składniki badanej próbki ulegają podziałowi między dwie fazy: stacjonarną i ruchomą. Związki chemiczne z mniejszym powinowactwem do fazy stacjonarnej poruszają się wzdłuż kolumny wolniej niż związki z powinowactwem większym i tym samym opuszczają kolumnę jako pierwsze. Do najważniejszych metod wykrywania cząsteczek docierających do końca kolumny można zaliczyć: detekcję płomieniowo-jonizacyjną (ang. FID – *Flame Ionisation Detector*), spektrometrię mas (ang. MS – *Mass Spectrometry*), spektrometrię ruchliwości jonów (ang. IMS – *Ion Mass Spectrometry*). Dla analizatorów GC-S, do analizy ilościowej związków chemicznych wykorzystuje się różnicę stosunku masy i ładunku zjonizowanych atomów lub molekuł. Do głównych zalet detektorów GM-MS należą m.in. duża selektywność i czułość. Poszukując markerów nowotworowych w gazach wydychanych z płuc, osiągnięto czułość na poziomie ppb, a nawet ppt [1, 7].

Analizatorami stosowanymi coraz częściej są również urządzenia GS-IMS. Ich zasada działania polega na separacji jonów. Wykorzystuje się tu różnice ich ruchliwości w trakcie poruszania się w polu elektrycznym w obecności gazu obojętnego. Obecnie dostępne detektory IMS są kompaktowymi i przenośnymi przyrządami o dużej selektywności, umożliwiającymi przeprowadzanie analiz złożonych substancji chemicznych. Zapewniają one m.in. określanie śladowych ilości aldehydów, ketonów i estrów z czułością ppb/ppt.

W dalszej części pracy zajmiemy się metodami spektroskopowymi, które polegają na wykorzystaniu zjawisk zachodzących w czasie oddziaływania promieniowania optycznego z materią. Ze względu na to, że badana materia ma postać lotną, w dalszej części niniejszej pracy będziemy mówili o oddziaływaniu z gazem. Wskutek oddziaływania fotonu z cząsteczką mogą nastąpić różne zjawiska, w tym: absorpcja, emisja i rozproszenie [34]. Ze względu na rodzaj wykorzystywanego zjawiska metody spektroskopowe można podzielić na dwie zasadnicze grupy:

- transmisyjne,
- rozproszeniowe.

W technikach transmisyjnych mierzone jest widmo absorpcyjne przez pomiar natężenia promieniowania po przejściu przez próbkę.

Spadek natężenia wiązki padającego promieniowania świadczy o jego absorpcji przez badaną próbkę.

Techniki rozproszeniowe umożliwiają otrzymanie widma przez analizę promieniowania rozproszonego przez próbkę. W dalszej części pracy zajmiemy się metodami absorpcyjnymi.

## 2. PORÓWNANIE METOD SPEKTROSKOPII ABSORPCYJNEJ

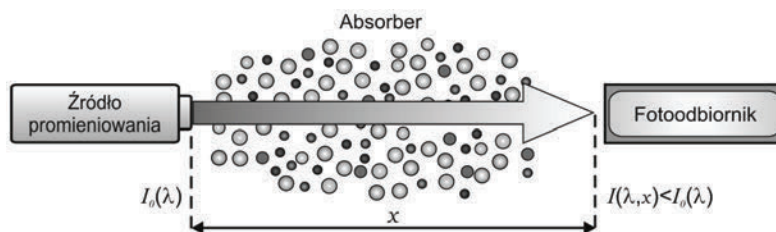
Każda cząsteczka ma charakterystyczny układ poziomów energetycznych – elektronowych, oscylacyjnych i rotacyjnych. W wyniku absorpcji promieniowania elek-

tromagnetycznego cząsteczka przechodzi do jednego ze stanów wzbudzonych, a następnie na różne sposoby wytraca energię wzbudzenia. Przechodząc przez próbkę badanej substancji, promieniowanie podczerwone jest selektywnie pochłaniane na skutek przejść zachodzących pomiędzy poziomami oscylacyjno-rotacyjnymi podstawowego stanu elektronowego molekuly. W zakresie dalekiej podczerwieni, a nawet w zakresie mikrofalowym, zachodzą przejścia promieniste między poziomami rotacyjnymi (skwantowanymi poziomami energii obrotowej) cząsteczki.

W absorpcyjnych metodach detekcji gazów stosuje się źródło promieniowania oraz czuły fotoodbiornik rejestrujący promieniowanie docierające ze źródła przez obszar wypełniony absorberem (rys. 2). Źródłem promieniowania może być lampa, dioda elektroluminescencyjna lub laser emitujący promieniowanie o długości fali dopasowanej do linii absorpcji badanego gazu. Jak wspomniano, w przypadku, gdy pomiędzy źródłem a fotoodbiornikiem pojawi się absorber, natężenie promieniowania docierającego do fotoodbiornika ulega osłabieniu. Na tej podstawie można wnioskować o rodzaju i koncentracji badanego absorbera. Natężenie promieniowania rejestrowanego przed fotoodbiornik umieszczony na końcu drogi światła w absorberze ( $x$ ) można określić za pomocą prawa Lamberta–Beera

$$I(\lambda, x) = I_0(\lambda) \exp[-\alpha(\lambda)x] = I_0(\lambda) \exp[-\sigma(\lambda)Kx] \quad (1)$$

gdzie  $\alpha(\lambda)$  jest współczynnikiem absorpcji,  $I_0(\lambda)$  oznacza natężenie promieniowania emitowanego przez źródło, a  $\sigma(\lambda)$  jest przekrojem czynnym na absorpcję.



Rys. 2. Zasada działania absorpcyjnej metody detekcji gazów  
Fig. 2. Absorption method of gases detection

Należy podkreślić, że wszystkie te wielkości są funkcjami zaleźnymi od długości fali  $\lambda$ .  $K$  oznacza tutaj poszukiwaną koncentrację absorbera.

Zależność przekroju czynnego na absorpcję od długości fali jest charakterystyczna dla danej cząsteczki i dla danego przejścia optycznego można ją wyznaczyć w warunkach laboratoryjnych. Należy przy tym zaznaczyć, że wskutek wielu zjawisk, między innymi takich, jak efekt Dopplera i zjawiska ciśnieniowe, przekrój czynny zależy od temperatury, ciśnienia i rodzaju ośrodka, w którym znajdują się poszukiwane cząsteczki, określenie wartości  $\sigma(\lambda)$  powinno być przeprowadzone w warunkach jak naj-

bardziej zbliżonych do tych, w których w przyszłości będą przeprowadzane pomiary koncentracji<sup>1</sup>.

W doświadczeniu przedstawionym schematycznie na rysunku 2 wyznacza się współczynnik transmisji promieniowania przez absorber

$$T = \frac{I_C}{I_{0C}} = \frac{\int_0^{\infty} I(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} I_0(\lambda) d\lambda} \quad (2)$$

który, na podstawie równania (1) – określony jest wzorem

$$T = \frac{\int_0^{\infty} I_0(\lambda) \exp[-K\sigma(\lambda)x] d\lambda}{\int_0^{\infty} I_0(\lambda) d\lambda} \quad (3)$$

Na ogół wyznaczenie koncentracji absorbera  $K$  wymaga rozwiązania powyższego równania całkowego, znając przekrój czynny  $\sigma(\lambda)$  w funkcji długości fali oraz spektralny rozkład natężenia promieniowania lasera  $I_0(\lambda)$ .

W przypadku uproszczonym, gdy linia lasera określonej długości fali  $\lambda_0$  jest znacznie węższa od widma absorpcji (np. podczas posługiwania się laserem jednomodowym o dobrze ustabilizowanej częstotliwości), można zapisać, że  $I_{0C} \approx I_0(\lambda_0)\Delta\lambda$ , gdzie  $\Delta\lambda$  oznacza szerokość linii. Jeżeli przekrój czynny nie zmienia znacząco swej wartości w zakresie szerokości linii, to równanie (3) upraszcza się do postaci

$$T = \frac{I_C}{I_{0C}} = \exp[-K\sigma(\lambda_0)x] \quad (4)$$

Wówczas można obliczyć koncentrację gazu według wzoru

$$K = \log\left(\frac{I_{0C}}{I_C}\right) \cdot [\sigma(\lambda_0) \cdot x]^{-1} \quad (5)$$

Z równań (1)–(5) wynika, że czułość systemu pomiarowego danej długości  $x$  jest tym większa, im większa jest wartość  $S$ . Możliwe jest wówczas wykrycie gazu o mniejszej koncentracji  $K$ .

---

<sup>1</sup> Przekrój czynny na absorpcję można też wyrazić wzorem:  $\sigma(\lambda) = Sg(\lambda)$ , gdzie  $g(\lambda)$  oznacza unormowaną funkcję kształtu linii absorpcyjnej  $\left(\int_0^{\infty} g(\lambda) d\lambda = 1\right)$ , a  $S$  jest zwane siłą linii (ang. *line strength*).

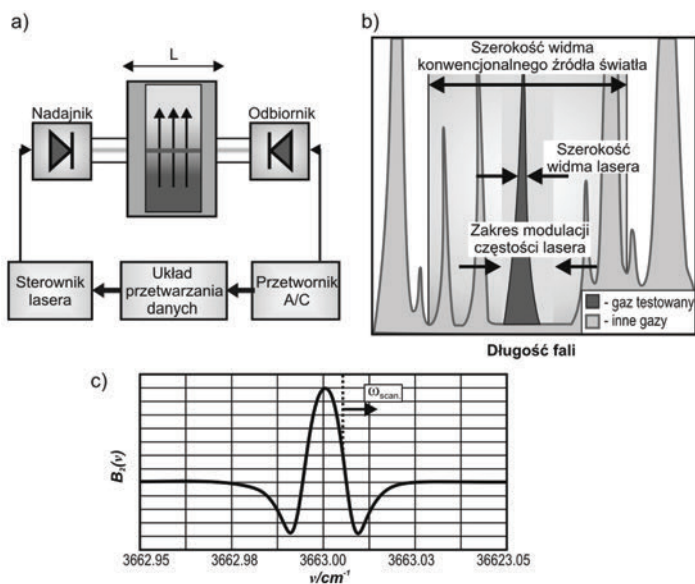
Często w katalogach linii absorpcyjnych podawany jest parametr  $S$ .



Z równania (5) także wynika, że granica detekcji (ang. *Detection Limit*), wyrażona w postaci minimalnej wykrywalnej wartości współczynnika absorpcji, jest określona dokładnością wyznaczenia niewielkich zmian natężenia promieniowania laserowego,  $\Delta I_C/I_{0C}$ , gdzie  $\Delta I_C = I_{0C} - I_C$ . O jej wartości decydują szумы układu pomiarowego, a w szczególności szumu lasera oraz układu fotodetektor–przedwzmacniacz. Dla bardzo małych wartości  $\sigma(\lambda)$  dokładność metody pomiaru różnicowego maleje. Pomimo minimalizacji poszczególnych źródeł szumowych, w prostym układzie detekcyjnym, wartości mierzalnych współczynników absorpcji  $\alpha_{\min}$  sięgają zaledwie rzędu  $10^{-2}$ – $10^{-4}$   $\text{cm}^{-1}$  [41]. Jak wynika z równania (5), poprawę czułości można uzyskać przez wydłużenie optycznej drogi promieniowania w absorberze.

### 3. METODY POPRAWY CZUŁOŚCI SENSORÓW W SPEKTROSKOPII ABSORPCYJNEJ

Rozważania nasze rozpoczniemy od opisu metody TDLAS. Ideę pracy tej metody przedstawiono na rysunku 3a. Jest to klasyczna metoda absorpcyjna, w której zastosowano laser przestrajalny. Częstotliwość środkowa lasera jest dopasowana do centrum linii absorpcyjnej poszukiwanej substancji. W wyniku przestrajania lasera względem



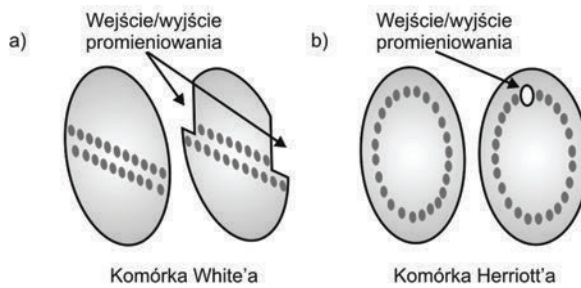
Rys. 3. Układ doświadczalny wykorzystujący metodę TDLAS (a), idea pomiaru (b), sygnał uzyskiwany podczas detekcji homodynowej (c) [39, 47]

Fig. 3. Experimental setup of tunable laser absorption spectroscopy (a), measurement idea (b), and example of results with homodyne detection technique [39, 47] (c)

długości fali promieniowania, przy której występuje maksymalne pochłanianie, otrzymuje się sygnał, którego amplituda zmienia się wraz z długością fali (rys. 3b).

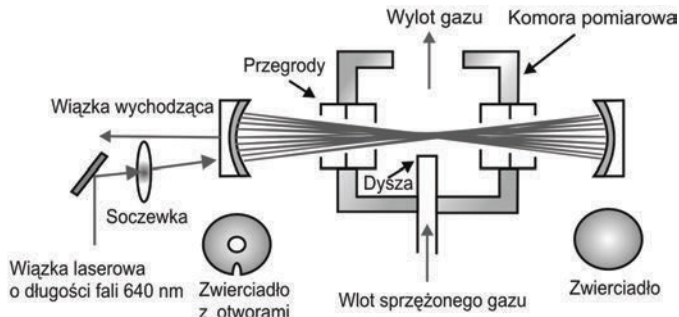
Znając amplitudę sygnału dla maksymalnego pochłaniania oraz poza obszarem pochłaniania można obliczyć koncentrację badanego gazu. Ponieważ pomiar dokonywany jest zazwyczaj z użyciem laserów diodowych, zmianę długości fali lasera uzyskuje się przez zmianę prądu sterowania. Przykładowy sygnał napięciowy otrzymany na wyjściu układu przetwarzania sygnału w tej metodzie przedstawiono na rysunku 3c. W układach przetwarzania sygnału są stosowane metody detekcji fazoczułej – TDLAS-WM/FM (ang. *Wavelength Modulation/Frequency Modulation*). W metodzie tej uzyskuje się granicę detekcji  $\alpha_{\min} \sim 10^{-4} - 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ . Zwiększenie czułości tej metody można uzyskać w układach detekcyjnych wyposażonych w komórki wieloprześciowe. Wówczas granica detekcji może osiągać  $\alpha_{\min} \sim 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$ .

W komórkach tych (Herriot i White) wydłużenie drogi optycznej uzyskują dzięki wielokrotnemu odbiciu światła między zwierciadłami umieszczonymi na jej końcach. Umożliwiają one wydłużenie drogi optycznej około 10–200 razy.



Rys. 4. Komórki wieloprześciowe. Kropkami zaznaczono miejsca przecięcia promieni z płaszczyzną zwierciadeł komórki: White'a (a) i Herriotta (b)

Fig. 4. Mirrors configurations in White (a) and Herriott (b) multipass cells (dots correspond to reflected spots of light beam on the mirrors surfaces)



Rys. 5. Przykład zastosowania komórki wieloprześciowej White'a

Fig. 5. Application of White cell

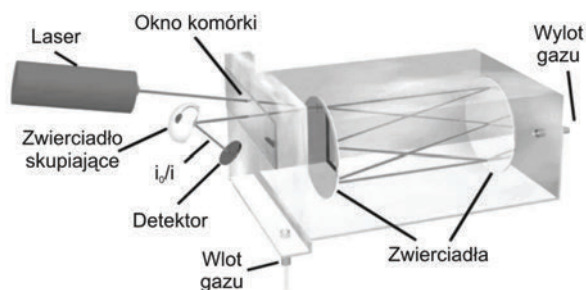
Na rysunku 4 przedstawiono sposób wydłużenia drogi optycznej stosowany w odbiciowych komórkach White'a (a) i Herriota (b).

W komórce White'a znajdują się dwa osobne otwory. Jeden z nich służy do wprowadzania promieniowania, natomiast drugi do wyprowadzania promieniowania na zewnątrz komórki. Umożliwiają one detekcję na poziomie pojedynczych ppm. Przykład zastosowania komórki White'a w systemie detekcyjnym przedstawiono na rysunku 5 [4]. W komórce Herriota promieniowanie wprowadza się do wnętrza komórki i wyprowadza na zewnątrz do detektora przez ten sam otwór.

Ideę pracy komórki Herriota przedstawiono na rysunku 6.

Komórki wykonuje się zazwyczaj ze szkła z metalicznymi zwierciadłami pokrytymi złotem lub srebrem. Zastosowanie ich łączy się z jeszcze jedną zaletą: w przypadku wykrywania substancji o niewielkiej koncentracji, absorpcja promieniowania jest niewielka. Natężenie światła przechodzące przez komórkę i trafiające do fotodetektora ulega nieznacznemu osłabieniu, przez co podczas detekcji zapewniony jest duży stosunek sygnału do szumu [4].

Przykłady zastosowania komórek wieloprześciowych zostaną przedstawione w dalszej części pracy.



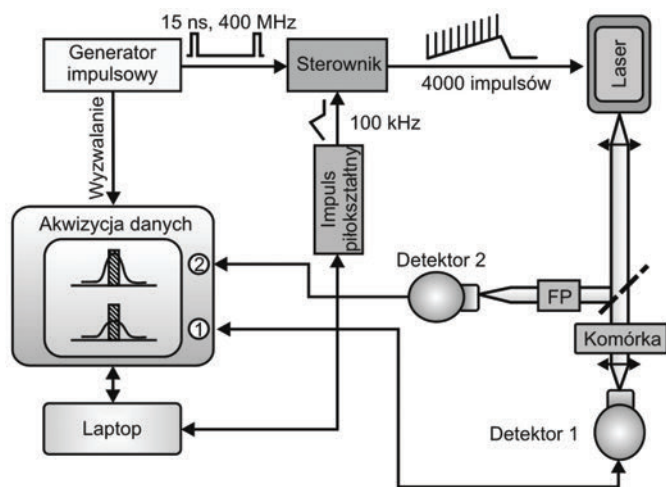
Rys. 6. Przykład zastosowania komórki Herriota

Fig. 6. Application of Herriott cell

Na rysunku 7 przedstawiono schemat blokowy typowego układu do laserowej spektroskopii absorpcyjnej z kwantowym laserem kaskadowym typu DFB (ang. *Quantum Cascade Laser* – QCL). Zastosowano tutaj technikę szybkiego przestrajania długości fali promieniowania laserowego tzw. *Inter Pulse Spectroscopy* (IrPS) [26, 40].

Laser jest sterowany impulsami prądowymi o czasie trwania (5–25 ns) i częstotliwości powtarzania od kilku kHz do kilkuset MHz. Częstotliwość powtarzania jest uzależniona od parametrów zastosowanych układów sterujących oraz układów detekcyjnych. W układach tych przestrajanie długości fali lasera następuje przez powolną zmianę natężenia prądu pilotażowego, zasilającego laser, lub jego temperatury. Zazwyczaj wartość napięcia pilotażowego zasilającego laser utrzymywana jest poniżej wartości progowej, wówczas laser nie generuje promieniowania. Dopiero nałożenie

krótkotrwałych impulsów prądowych na przebieg piłokształtny powoduje laserowanie. W takim układzie możliwe jest osiągnięcie linii laserowej szerokości 290 MHz [40]. Zbyt duża szerokość tej linii spowoduje zmniejszenie rozdzielczości pomiaru widma absorpcji badanego gazu. Ponieważ częstotliwość lasera dryfuje w czasie zasilania, aby poprawić rozdzielczość tego układu, należy ograniczyć czas trwania impulsu promieniowania laserowego do kilku czy kilkudziesięciu nanosekund.



Rys. 7. Schemat blokowy układu typu *Inter Pulse Spectroscopy*  
Fig. 7. Block diagram of *Inter Pulse Spectroscopy* setup

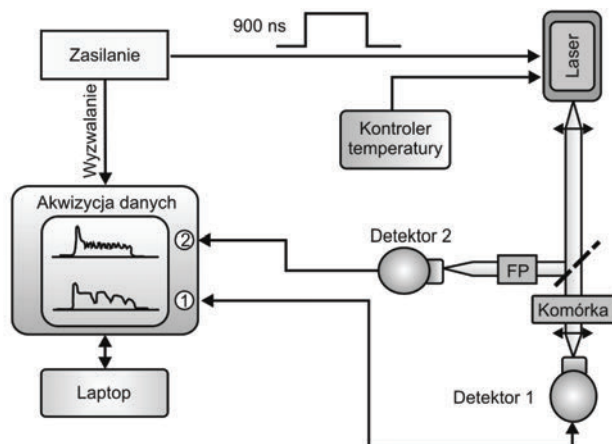
Typowy zakres przesłajania dla tej metody wynosi około  $1\text{--}2\text{ cm}^{-1}$ , a częstotliwość repetycji zawiera się w przedziale od dziesiątek Hz do kHz. Lasery QC mogą być chłodzone za pomocą chłodziarek termoelektrycznych lub kriogenicznie.

Dla układu służącego do wykrywania tlenu azotu w atmosferze – w którym zastosowano laser QC generujący promieniowanie długości fali  $5,26\text{ }\mu\text{m}$ , fotodiode HgCdTe chłodzoną termoelektrycznie oraz komórkę wieloprzejściową o drodze optycznej  $210\text{ m}$  – osiągnięto czułość rzędu pojedynczych ppb [27].

W układach spektroskopowych do przesłajania lasera QC jest stosowana również technika *Intra Pulse Spectroscopy* (IaPS) (rys. 8). W metodzie tej laser jest sterowany impulsami prądowymi o stałej wartości amplitudy oraz o czasie trwania znacznie dłuższym niż w metodzie IrPS. Czas trwania impulsów sterujących może zmieniać się w przedziale od kilkuset ns do kilkuset  $\mu\text{s}$ , dla częstotliwości powtarzania od kilkuset Hz do pojedynczych kHz [17, 22]. Każdy impuls dostarczony do lasera powoduje jego lokalne nagrzewanie. W wyniku nagrzewania struktury lasera następuje przesunięcie długości fali generowanego promieniowania.

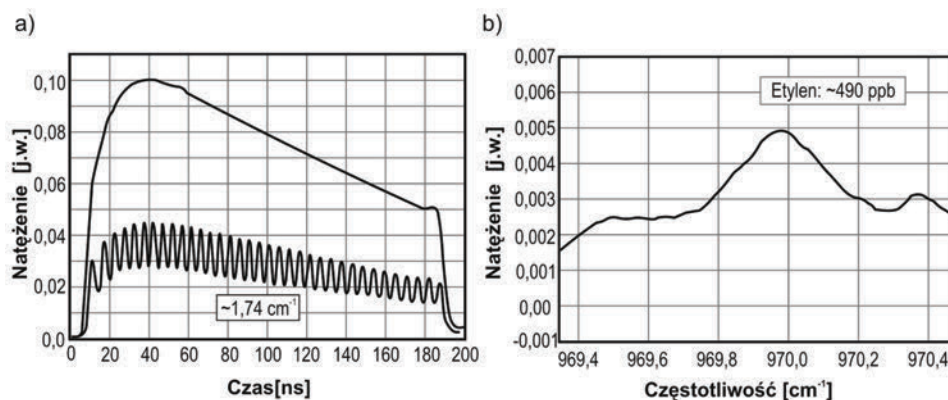
Metoda ta umożliwiała uzyskanie przesłajania w zakresie wynoszącym nawet  $6\text{ cm}^{-1}$ . Tor pomiarowy tego systemu składa się z lasera, elementów optycznych, ko-

mórki wieloprześciowej oraz detektora. Ze względu na to, że amplituda impulsu promieniowania optycznego, generowanego przez laser QC, zmienia się z czasem jego trwania, należało zastosować referencyjny pomiar jego mocy. Tor ten składa się z etalonu FP oraz detektora 2.



Rys. 8. Schemat układu, w którym zastosowano metodę *Intra Pulse Spectroscopy*  
Fig. 8. Block diagram of *Intra Pulse Spectroscopy* setup

Widmo absorpcji badanego gazu otrzymuje się przez próbkowanie sygnału z detektora 1 w czasie trwania impulsu laserowego. Częstotliwość próbkowania wpływa zasadniczo na rozdzielczość widmową tego układu. Na rysunku 9 przedstawiono przykładowy sygnał otrzymany z detektora referencyjnego (rys. 9a) oraz z detektora pomiarowego (rys. 9b) [23].

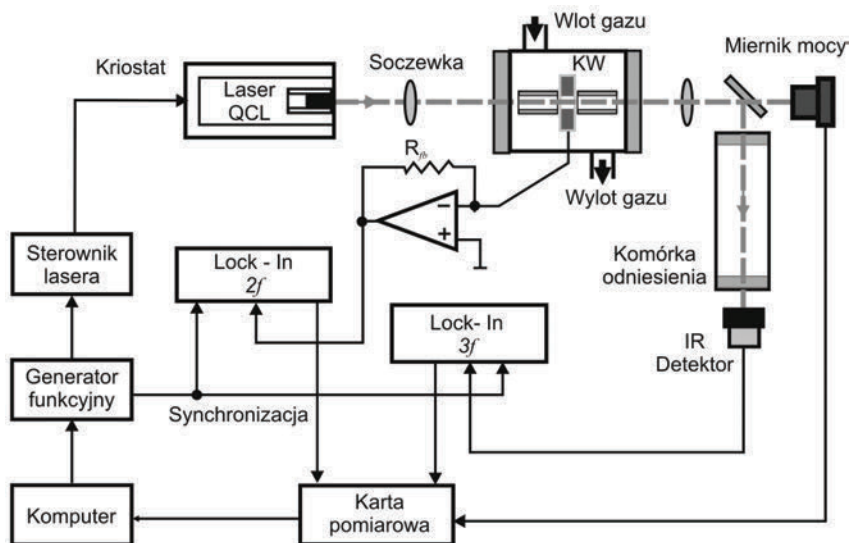


Rys. 9. Sygnały z detektora referencyjnego (a) oraz detektora pomiarowego (b)  
Fig. 9. Signals from reference detector (a) and measuring one (b)

Techniki te znajdują zastosowanie w wielu dziedzinach nauki i techniki. Szeroki zakres przestrajania laserów QC daje możliwość wykrycia pięciu do sześciu gazów z użyciem jednego lasera. Właściwość ta może mieć szczególnie duże znaczenie w systemach monitoringu (np. dla ochrony zdrowia, środowiska i bezpieczeństwa), dla których zastosowanie kilku systemów laserowych jest nieopłacalne.

Wśród metod spektroskopii absorpcyjnej ważne miejsce zajmuje metoda fotoakustyczna. Jej istotą jest akustyczna odpowiedź substancji (gazu lub ciała stałego) na periodyczne pobudzenie światłem zmodulowanym amplitudowo. Wskutek zamiany energii świetlnej na energię cieplną pojawia się periodyczny, lokalny wzrost temperatury, któremu towarzyszą zmiany ciśnienia. Czułość detekcji może być zwiększona dzięki prowadzeniu pomiarów w odpowiednich – dla częstotliwości modulacji światła – rezonatorach akustycznych. Jako detektory wykorzystywane są bardzo czułe mikrofony, mikrokamertony oraz mikroprzepływomierze. Przetworniki zbudowane na bazie kamertonów charakteryzują się bardzo znaczną dobrocią rzędu 10 tys. i więcej [37, 35, 40].

Na rysunku 10 przedstawiono schemat typowego układu z zastosowaniem lasera QC. Podstawową zaletą tego typu źródła światła jest duża selektywność pomiaru. Długość fali lasera należy tak dobrać, aby była ona silnie absorbowana przez wykrywany gaz, z jednoczesną małą absorpcją dla innych substancji, które mogą pojawić się w badanej próbce.



Rys. 10. Schemat blokowy układu do spektroskopii fotoakustycznej [40]

Fig. 10. Setup of photoacoustic spectroscopy

Niekiedy jako źródła światła są stosowane diody LED dobierane w taki sposób, aby emitowały światło w paśmie zawierającym liczne i względnie silne prążki absorp-

cyjne poszukiwanej substancji. W układzie zastosowano kamerton widełkowy (KW) oraz mikrorezonator, który wzmacnia sygnał około 10-krotnie.

W wyniku pobudzenia kamertonu przez falę akustyczną generowany jest prąd, który jest wzmacniany w przedwzmacniaczu transimpedancyjnym. Zważywszy na to, że amplituda sygnału otrzymanego na wyjściu przetwornika akustycznego jest mała, mierzy się ją zatem za pomocą układów detekcji synchronicznej.

Prezentowany czujnik przeznaczony jest do detekcji  $\text{H}_2\text{CO}$ . Objętość komory pomiarowej wynosiła około  $1 \text{ cm}^3$ . Za pomocą płytki światłodzieliącej około 5% promieniowania z wyjścia komory jest kierowane na komórkę referencyjną, długości 5 cm, wypełnioną paraformaldehydem. Sygnał wyjściowy z komórki odniesienia jest podany na detektor podczerwieni i drugi wzmacniacz fazoczuły. Czułość tego układu jest rzędu  $\alpha_{\min} \sim 2 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$ .

Innym sposobem zwiększenia drogi optycznej, w porównaniu do zastosowania komórek wieloprześciowych, jest zastosowanie wnęk optycznych z dielektrycznymi zwierciadłami o bardzo małych stratach. Grupa tych metod znana jest pod nazwą CRDS (ang. *Cavity Ring-Down Spectroscopy*), nazywanych w polskiej literaturze Spektroskopia Strat we Wnęce Optycznej – SSWO. W rezonatorach optycznych o wysokiej dobroci, dzięki wielokrotnym odbiciom między zwierciadłami, możliwe jest osiągnięcie efektywnych dróg optycznych wynoszących nawet kilka kilometrów dla małej objętości. Jednak w tym celu wnęka musi być stabilna [6].

W przypadku wnęki niestabilnej impuls światła po kilku odbiciach opuszcza wnękę i w ten sposób występują duże straty. Warunek stabilności wnęki można opisać następującą nierównością:

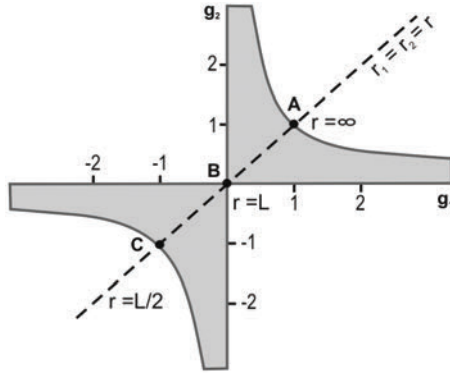
$$0 \leq g_1 \cdot g_2 \leq 1 \quad (6)$$

gdzie parametry  $g_1$  oraz  $g_2$  wynoszą odpowiednio

$$g_1 = \left(1 - \frac{L}{R_1}\right) \quad (7)$$

$$g_2 = \left(1 - \frac{L}{R_2}\right) \quad (8)$$

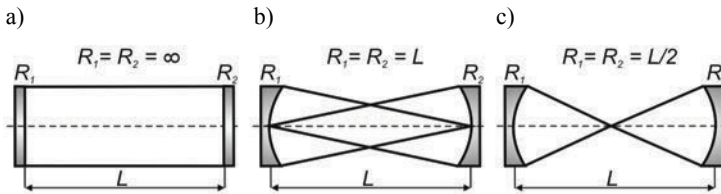
Ilustracja graficzna kryterium stabilności jest przedstawiona na rysunku 11. Wnęka, dla której wartości parametrów  $g$  leżą na zacienionym polu diagramu, jest geometrycznie stabilna, natomiast punkty leżące poza tym polem oznaczają wartości parametrów  $g$  dla wnęki geometrycznie niestabilnej. Prosta przechodząca przez punkty A, B i C reprezentuje wartości parametrów dla wnęki ze zwierciadłami o równych promieniach krzywizn  $R_1 = R_2 = R$ , dla tzw. wnęki symetrycznej.



Rys. 11. Diagram stabilności wnęki  
Fig. 11. Stability diagram for two-mirror cavities

Wartości parametrów  $g$  leżących w punktach A, B i C diagramu odpowiadają następującym sytuacjom:

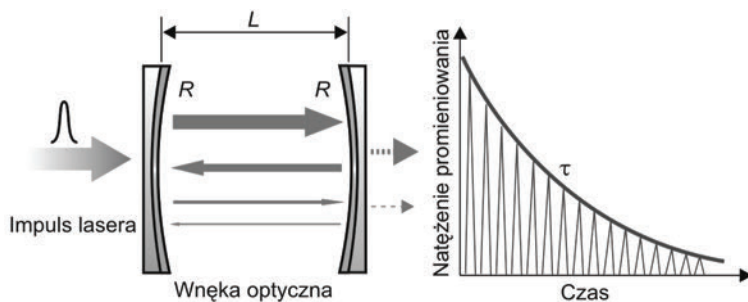
- punkt A odpowiada wnęcie symetrycznej złożonej z dwóch zwierciadeł płaskich ( $R = \infty$ ), tzw. rezonator Fabry–Perot (rys. 12a),
- punkt B odpowiada wnęcie symetrycznej konfokalnej, w której ognisko obu zwierciadeł zbiega się w połowie odległości pomiędzy nimi (rys. 12b),
- punkt C odpowiada wnęcie symetrycznej koncentrycznej, dla której  $R = L/2$  (rys. 12c).



Rys. 12. Ilustracja różnych konfiguracji wnęk z dwoma zwierciadłami  
Fig. 12. Some configurations of two-mirror cavities

Zasada działania metody CRDS jest następująca: impuls promieniowania optycznego wprowadzony do wnęki przez jedno ze zwierciadeł ulega w jej wnętrzu wielokrotnemu odbiciu (rys. 13). Po każdym odbiciu część światła opuszczającego wnękę rezonansową jest rejestrowana przez fotodetektor. Amplitudy kolejnych impulsów opuszczających wnękę są coraz mniejsze. Szybkość zaniku natężenia promieniowania we wnęcie  $\tau$  zależy od współczynnika odbicia zwierciadeł  $R$ , strat dyfrakcyjnych oraz od ekstynkcji, czyli rozpraszania i absorpcji promieniowania zachodzących w gazie wypełniającym wnękę [43].





Rys. 13. Zasada działania metody CRDS  
Fig. 13. Idea of cavity ring-down spectroscopy

Wyznaczając szybkość zaniku promieniowania we wnęce, można określić stężenie gazu. Korzystając z prawa Lamberta–Beera–Burgera, można opisać zmiany natężenia promieniowania we wnęce następującym równaniem różniczkowym:

$$\frac{dI}{dt} = -I \left( \frac{c(1-R)}{L} + \alpha c \right) \quad (9)$$

gdzie  $c$  oznacza prędkość światła, natomiast  $\alpha$  jest współczynnikiem ekstynkcji dla danej długości fali. Rozwiązanie równania (9) przyjmuje postać

$$I(t) = I_0 e^{-\left[ \frac{[(1-R)+\alpha L]c}{L} \right] t} = I_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (10)$$

gdzie  $I_0$  jest natężeniem światła wprowadzanego do układu, natomiast stała  $\tau$  jest czasem zaniku promieniowania we wnęce (ang. *cavity ring down time*). Można ją obliczyć ze wzoru

$$\tau = \frac{L}{c[(1-R) + \alpha L]} \quad (11)$$

Gdy we wnęce nie ma absorbera ( $\alpha = 0$ ), wówczas czas zaniku będzie zależał jedynie od długości wnęki  $L$  oraz współczynnika odbicia zwierciadeł  $R$ . Dla tego przypadku wzór (11) przyjmie postać

$$\tau_0 = \frac{L}{c(1-R)} \quad (12)$$

Po podstawieniu równania (11) do wzoru (12) otrzymamy wyrażenie na współczynnik absorpcji  $\alpha$

$$\alpha = \frac{1}{c} \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_0} \right) \quad (13)$$

Z wyrażenia (13) wynika, że współczynnik absorpcji można określić, znając czas zaniku natężenia sygnału dla wnęki pustej oraz wypełnionej badanym gazem.

Czułość metody określa się jako najmniejszą koncentrację cząsteczek badanego gazu  $K_L$ , przy której widoczna jest absorpcja

$$K_L = \frac{1}{c \cdot \sigma \cdot \tau_0} \cdot X = \frac{(1-R)}{\sigma \cdot L} \cdot X \quad (14)$$

gdzie  $X$  jest dokładnością wyznaczenia czasu zaniku określoną zależnością

$$X = \frac{\tau_0 - \tau}{\tau_0} \quad (15)$$

Granica detekcji w metodzie CRDS jest więc funkcją dwóch zmiennych: czasu zaniku dla wnęki pustej  $\tau_0$  oraz dokładności wyznaczenia czasu zaniku  $X$ . Czas zaniku  $\tau_0$ , zgodnie ze wzorem (12), zależy od długości rezonatora i współczynnika odbicia zwierciadeł. Im dłuższy jest czas zaniku, czyli dłuższa efektywna droga absorpcji, tym większa jest czułość metody CRDS i mogą być mierzone mniejsze stężenia absorbera.

Inny sposób wyznaczenia koncentracji polega na pomiarze przesunięcia fazowego  $\varphi$  między odpowiednimi harmonicznymi (np. pierwszymi) sygnału na wejściu i wyjściu wnęki optycznej [19, 44], np. za pomocą wzmacniacza fazoczułego typu *lock-in*. Przesunięcie to pojawia się dzięki zdolności wnęki do magazynowania promieniowania (energii), podobnie jak w przypadku ładowania kondensatora. W tym celu stosuje się lasery o pracy ciągłej zmodulowane amplitudowo. Wartość  $\text{tg}(\varphi)$  jest związana z czasem zaniku promieniowania we wnęce ( $\tau$ ) zależnością

$$\text{tg}(\varphi) = 4\pi f \tau \quad (16)$$

gdzie  $f$  oznacza częstotliwość modulacji.

Koncentrację badanego gazu można obliczyć, porównując przesunięcie fazowe  $\varphi$  w przypadku, gdy rezonator jest wypełniony badanym gazem oraz przesunięcie fazowe  $\varphi_0$  dla rezonatora bez gazu

$$K = \frac{4\pi f}{c\sigma} \left[ \frac{1}{\text{tg}(\varphi)} - \frac{1}{\text{tg}(\varphi_0)} \right] \quad (17)$$

W technikach z pozaosiowym wprowadzaniem światła do wnęki (CEAS) koncentrację badanego gazu często wyznacza się na podstawie pomiaru amplitudy sygnału z fotodetektora. W układach tych nie jest wymagane stosowanie systemu synchronizacji modów lasera z modami wnęki, co upraszcza układ doświadczalny. Dzięki takiemu podejściu w opisie promieniowania wydostającego się z rezonatora można pominąć zależności fazowe, a wprost sumować natężenia pochodzące od poszczególnych odbić promieniowania od zwierciadła wyjściowego [28, 29]

$$I_{0S} = -I_{in} \left( \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha L}}{2 \ln(R \cdot e^{-\alpha L})} \right) \quad (18)$$

Dla pojedynczego przejścia przez rezonator

$$I_{0P} = I_{in} (1-R)^2 e^{-\alpha L} \quad (19)$$

Porównując wyrażenia (18) i (19), można pokazać, że dla małych współczynników absorpcji  $\alpha$  i dużych współczynników odbicia zwierciadeł ( $R \rightarrow 1$ ) stosunek  $I_{0S}/I_{0P}$  przyjmuje postać

$$\frac{I_{0S}}{I_{0P}} = -\frac{1}{2[\ln(R) - \alpha L]} \rightarrow \frac{1}{2(1-R + \alpha L)} \quad (20)$$

$$K = \frac{\ln(R) \cdot I_{0S} - I_{0P}}{\sigma \cdot L \cdot I_{0S}} \quad (21)$$

Jak wcześniej wspomniano, podejście to nazywane jest w literaturze ICOS. Istotną jego wadą jest konieczność znajomości współczynnika odbicia zwierciadeł, co w praktycznych rozwiązaniach jest trudno zapewnić, gdyż parametr ten dla zwierciadeł wysokoodbiciowych, stosowanych w technikach CRDS, może zmieniać się wskutek starzenia, zabrudzenia zwierciadła lub czasowej kondensacji na jego powierzchni itp. procesów.

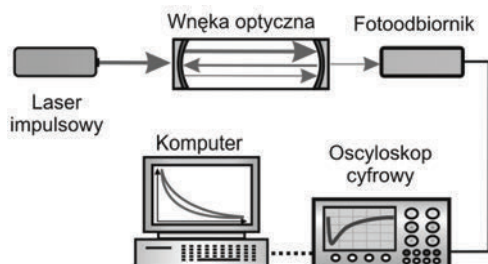
Obecnie istnieje wiele technik, w których wykorzystuje się wnęki optyczne. W polskiej nomenklaturze noszą nazwę spektroskopii strat we wnęcie optycznej. Z dostępnej literatury wynika, że najczęściej są stosowane:

- metoda P-CRDS (ang. *Pulsed*), w której stosuje się lasery impulsowe [29],
- metoda CW-CRDS (ang. *Continuous Wave*) z laserami ciągłego działania [18],
- metoda CEAS (ang. *Cavity Enhanced Absorption Spectroscopy*) polegająca na pozaosiowym wprowadzaniu wiązki promieniowania do wnęki optycznej [11],
- metoda EW-CRDS (ang. *Evanescent Cavity Ring-Down Spectroscopy*), w której wykorzystuje się mechanizm fali zanikającej [31],
- metoda z wnęką światłowodową F-CRDS (ang. *Fibre Cavity Ring-Down Spectroscopy*) [13],
- oraz metoda RSP (ang. *Ring-Down Spectral Photography*), czyli metoda z widmową fotografią zaniku [10].

Największą czułością charakteryzują się metody: P-CRDS, CW-CRDS oraz CEAS. Z tego względu są one często stosowane do detekcji i pomiaru koncentracji gazów. W 1988 r. po raz pierwszy do pomiaru współczynnika absorpcji gazu zastosowano metodę P-CRDS. Typowy schemat układu przedstawiono na rysunku 14.

Metoda ta polega na zastosowaniu impulsowego źródła promieniowania, charakteryzującego się szerokim widmem impulsu. Prowadzi to do wzbudzenia wielu modów

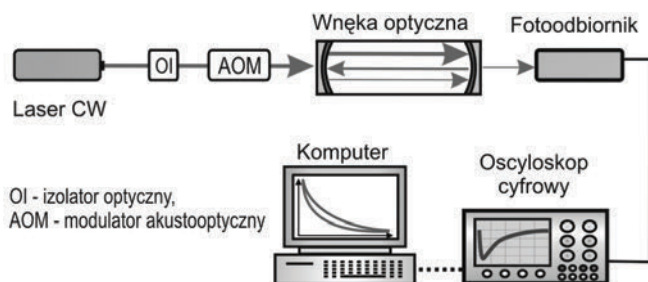
podłużnych wnąki rezonansowej, a zarazem zmniejszenia czułości metody. Wzbudzenie pojedynczego modu wnąki można osiągnąć np. przez zmniejszenie odległości pomiędzy zwierciadłami wnąki, lecz to z kolei powoduje skrócenie efektywnej drogi absorpcji i w konsekwencji zmniejszenie czułości. Czułość metody P-CRDS osiąga zazwyczaj wartości odpowiadające współczynnikom absorpcji rzędu  $\alpha_{\min} \sim 10^{-6} - 10^{-10} \text{ cm}^{-1}$ .



Rys. 14. Schemat układu z zastosowaniem metody P-CRDS

Fig. 14. Diagram of P-CRDS setup

Po raz pierwszy w metodzie CRDS zastosowano laser QC w 2000 r. [30]. Użyto wówczas lasera o pracy ciągłej o mocy 16 mW oraz długości fali 8,5  $\mu\text{m}$ . W układzie dodatkowo stosowano modulator akustooptyczny (rys. 15). Czas zaniku promieniowania wynosił 0,93  $\mu\text{s}$ .



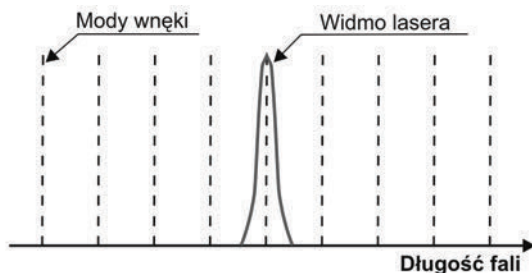
Rys. 15. Schemat układu CW-CRDS

Fig. 15. Diagram of CW-CRDS setup

Opisany czujnik stosowany był do pomiaru koncentracji  $\text{NH}_3$ . Uzyskano czułość na poziomie pojedynczych ppb, co odpowiadało współczynnikowi absorpcji na poziomie  $10^{-9} \text{ cm}^{-1}$ .

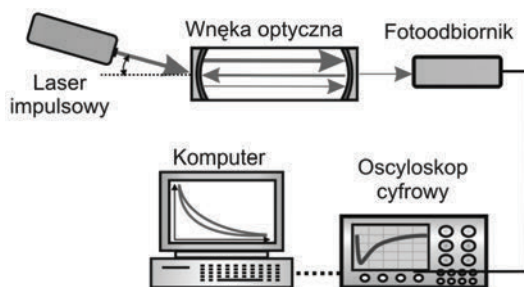
Technikę tę stosowano także do wykrywania tlenu azotu. Używano wówczas lasera QC długości fali 5,2  $\mu\text{m}$  przestrajanego techniką IrPS. Opracowany czujnik charakteryzował się czułością na poziomie kilku ppb ( $\alpha_{\min} \sim 2,2 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$ ). Uzyskano przy tym niepewność pomiaru koncentracji wynoszącą 0,7 ppb [22].

W tradycyjnej metodzie CRDS występuje jednak bardzo duża wrażliwość wnęki na niestabilności mechaniczne. Wydajne magazynowanie światła w rezonatorze następuje tylko wtedy, gdy częstotliwość lasera jest dopasowana do modu wnęki (rys. 16). Natomiast drobne fluktuacje częstotliwości własnych wnęki, spowodowane np. zmianą jej długości w skutek drgań mechanicznych, powodują, że zjawisko rezonansu optycznego staje się niemożliwe. Doprowadza to do dużych niestabilności sygnału wyjściowego.



Rys. 16. Sprzężenie struktury modowej wnęki z modem lasera w metodzie CW-CRDS  
Fig. 16. Coupling of a laser radiation with the cavity modes in the CW-CRDS

W roku 1998 R. Engeln zaproponował nową metodę CEAS. Polega ona na wprowadzeniu wiązki promieniowania pod niezerowym kątem w stosunku do osi optycznej wnęki (ang. *off axis*). Promieniowanie odbija się wewnątrz wnęki optycznej, podobnie jak wewnątrz komórki wieloprześciowej (rys. 17).



Rys. 17. Zasada działania metody CEAS  
Fig. 17. Idea of CEAS setup

Dzięki temu otrzymuje się zysk w postaci gęstej struktury modów. Struktura ta jest  $l$  razy gęstsza niż w metodzie CRDS. Liczba  $l$  odpowiada liczbie przejść impulsu promieniowania przez rezonator, po której wiązka powróci do punktu wejścia. Niekiedy na zwierciadle wyjściowym stosuje się elementy piezoelektryczne, w celu uniemożliwienia ustalenia się stałej struktury modowej wewnątrz wnęki. Słaba struk-

tura modowa wnęki rezonansowej powoduje, że cały układ ma małą wrażliwość na niestabilność częstości własnych wnęki oraz lasera.

Dodatkową zaletą pozaosiowego wprowadzenia promieniowania do wnęki optycznej jest eliminacja sprzężenia zwrotnego z laserem. Ponadto dzięki temu, że szerokie widmo lasera obejmuje kilka modów wnęki, stała część mocy jest magazynowana we wnęcie i układ charakteryzuje się małą wrażliwością na fluktuacje częstości własnych wnęki. Wadą metody CEAS jest jej gorsza czułość w porównaniu z wcześniej omówionymi metodami. Zazwyczaj osiągnano czułości odpowiadające rzędu  $\alpha_{\min} \sim 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$ .

#### 4. OPTOELEKTRONICZNE CZUJNIKI TLENKÓW AZOTU – WYNIKI PRAC WŁASNYCH

Tlenki azotu stanowią, obok dwutlenku siarki, główne gazowe zanieczyszczenie powietrza atmosferycznego zarówno w Polsce, jak i w Europie. Zakwaszają one silnie opady atmosferyczne, są główną przyczyną smogu fotochemicznego i tworzenia się silnie toksycznych zanieczyszczeń wtórnych (ozon, węglowodory aromatyczne). Gwałtownie przyspieszają korozję budowli kamiennych i konstrukcji metalowych. Zagrożają także zdrowiu ludzkiemu, działając drażniąco na układ oddechowy i osłabiając ogólną odporność organizmu na choroby zakaźne.

##### 4.1. OPTOELEKTRONICZNY SENSOR DITLENKU AZOTU

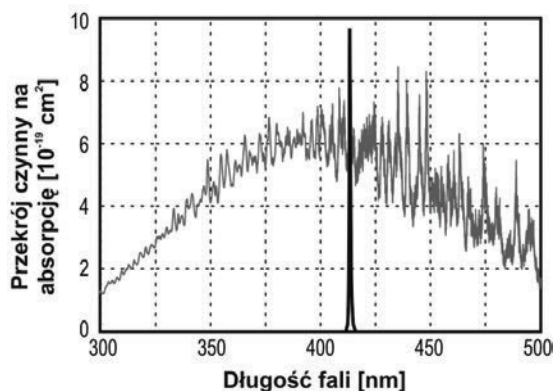
Metoda CEAS ułatwia pomiar absorpcji światła laserowego spowodowany obecnością śladowych ilości wykrywanych substancji w atmosferze. Jednak aby skutecznie zastosować ją w detekcji substancji, niezwykle ważna jest znajomość charakterystycznych widm absorpcji wykrywanych gazów oraz odpowiedni dobór źródeł promieniowania sondującego.

Dane do analiz zaczerpnięto z bazy danych udostępnionej na stronach internetowych *United States Environmental Protection Agency* – EPA. Dane źródłowe charakteryzują widma absorpcji poszczególnych substancji przez podanie wartości absorbancji w funkcji długości fali. W celu łatwego porównywania wartości bezwzględnych poszczególnych widm absorpcyjnych, dokonano przeliczenia absorbancji na przekrój reagujący na absorpcję.

Na rysunku 18. przedstawiono przekrój reagujący na absorpcję dla ditlenku azotu wraz z widmem emisji dopasowanego lasera polskiej firmy TopGaN.

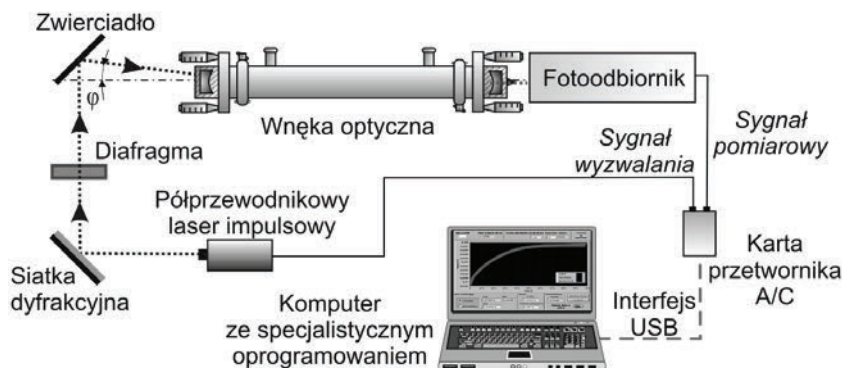
Jak wynika z rysunku (rys. 18), dla ditlenku azotu największy przekrój czynny na absorpcję jest zawarty w zakresie długości fal 400–450 nm. W tym obszarze widma nie występują pasma absorpcyjne pochodzące od innych gazów czy par powszechnie

występujących w atmosferze. Z bardzo dużym prawdopodobieństwem zatem można założyć, że rejestrowana absorpcja światła fioletowego jest spowodowana obecnością ditlenku azotu.



Rys. 18. Przekrój czynny na absorpcję dla ditlenku azotu wraz z widmem emisji lasera fioletowego  
 Fig. 18. Spectrum of  $\text{NO}_2$  absorption cross-section and UV laser radiation

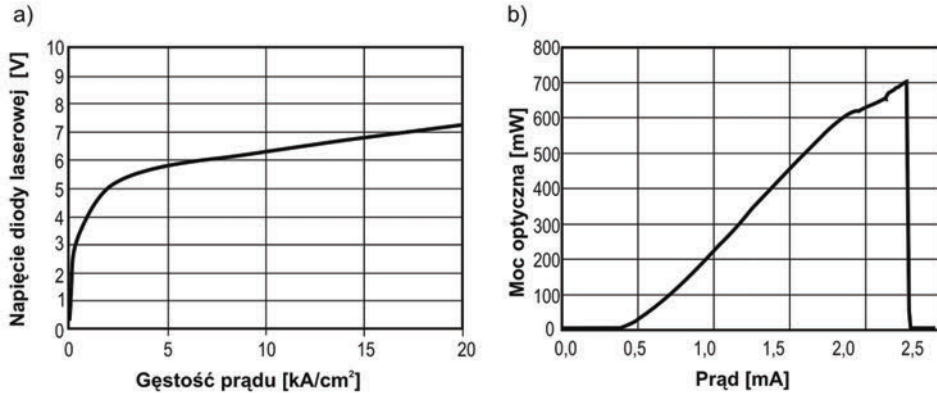
Na rysunku 19 przedstawiono schemat blokowy opracowanego czujnika ditlenku azotu [5]. Czujnik ten składa się z lasera impulsowego, układu wprowadzania wiązki, wężki optycznej, fotopowielacza, układu przetwarzania sygnału oraz komputera z oprogramowaniem. Zastosowany laser jest przyrządem z warstwą aktywną z wielostudni kwantowej InGaN/GaN z izolacją tlenkową. Lasery te charakteryzują się gęstością prądu progowego  $4\text{--}8 \text{ kA/cm}^2$ . Sprawności różniczkowe tych laserów są rzędu  $0,3\text{--}1 \text{ W/A}$  [32].



Rys. 19. Schemat blokowy czujnika ditlenku azotu  
 Fig. 19. Block diagram of  $\text{NO}_2$  sensor

#### 4.2. CHARAKTERYSTYKA ŹRÓDŁA PROMIENIOWANIA

Na rysunku 20a przedstawiono charakterystykę prądowo-napięciową zastosowanej diody laserowej, natomiast na rysunku 20b zależność mocy optycznej od prądu zasilania.



Rys. 20. Charakterystyka prądowo-napięciowa zastosowanej diody laserowej (a) oraz zależność mocy optycznej od prądu zasilania diody laserowej (b)

Fig. 20. Voltage-current density (a) and optical power-current (b) characteristics of the applied laser diode

Dla gęstości prądu  $4,5 \text{ kA/cm}^2$  (typowa gęstość prądu pracy) napięcie na diodzie wynosi około 6 V. Szczytowa moc tych laserów nie powinna przekraczać 600 mW, gdyż przy około 700 mW degradacji ulegają ich zwierciadła. Biorąc pod uwagę, że szerokość ich paska wynosi  $10 \text{ }\mu\text{m}$ , oznacza to natężenie na zwierciadłach około  $20 \text{ MW/cm}^2$ . Jest to wielkość nieco mniejsza od typowo podawanej w literaturze światowej, wynoszącej typowo  $40\text{--}50 \text{ MW/cm}^2$ .

Moc i długość fali emitowanego promieniowania są niezwykle ważnymi parametrami diody laserowej, mającymi wpływ na czułość sensora  $\text{NO}_2$ . Długość fali jest istotna zarówno ze względu na konieczność dopasowania do charakterystyk odbiciowych zwierciadeł, jak również dokładnego dostrojenia się do maksimum przekroju czynnego na absorpcję ditlenku azotu. Natomiast moc promieniowania ma istotny wpływ na stosunek mocy sygnału do mocy szumu czujnika. Dlatego też, przeprowadzono pomiary tych parametrów.

Pomiary charakterystyk widmowych lasera VLMB1, mocy promieniowania oraz parametrów czasowych impulsu laserowego przeprowadzono w Instytucie Optoelektroniki WAT. Do badań widma promieniowania laserowego zastosowano monochromator M300 firmy Edinburgh Inst. Umożliwia on pomiary widmowe w zakresie  $200\text{--}1700 \text{ nm}$  z rozdzielczością  $0,05 \text{ nm}$ . Promieniowanie lasera rejestrowano za pomocą fotopowielacza R955 firmy Hamamatsu.

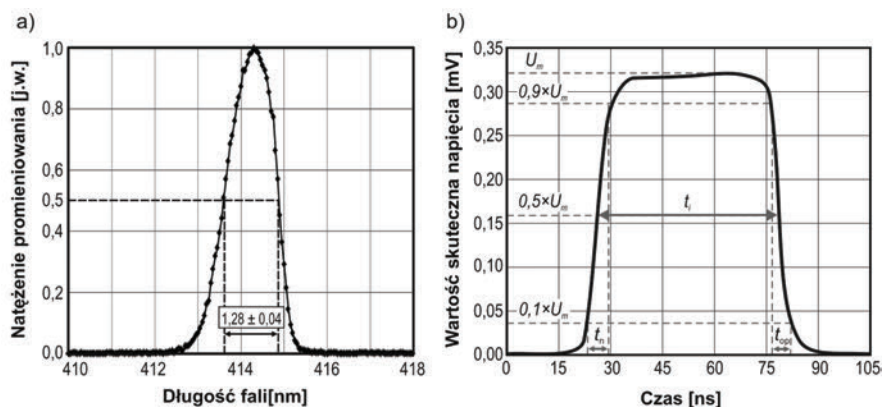


Na rysunku 21 przedstawiono charakterystykę widmową promieniowania lasera. Generował on impulsy długości fali wynoszącej  $414,35 \pm 0,03$  nm i szerokości półkowej  $1,28-0,04$  nm.

Do pomiaru mocy promieniowania laserowego zastosowano miernik mocy optycznej LOT-ORIEL 70310 oraz kalibrowany termostos typu 71958 firmy Spectra-Physics. Laser pracował z częstotliwością 10 kHz. Wykonano uśrednienie 32 próbek sygnału. Zmierzona w ten sposób moc średnia promieniowania lasera impulsowego wyniosła około  $241 \pm 1$   $\mu$ W.

Czas trwania impulsu promieniowania lasera oraz czas jego narastania i opadania zmierzono cyfrowym oscyloskopem TDS3052. W układzie detekcyjnym zastosowano moduł fotopowielacza z wbudowanym zasilaczem firmy Hamamatsu typu H5783-03.

Kształt impulsu promieniowania laserowego przedstawiono na rysunku 23b. Półkowy czas trwania impulsu laserowego  $t_i$  wynosił  $54,36 \pm 0,01$  ns, natomiast czas narastania  $t_n$  oraz czas opadania  $t_{op}$  wynosiły odpowiednio:  $6,36 \pm 0,01$  ns i  $4,91 \pm 0,01$  ns. Amplituda sygnału  $U_m$  była równa  $316 \pm 1$  mV.



Rys. 21. Charakterystyka widmowa lasera firmy TopGaN (a), kształt impulsu promieniowania laserowego (b)

Fig. 21. Spectrum of the TopGaN firm laser (a) and shape of its light pulse (b)

### 4.3. OPIS UKŁADU OPTYCZNEGO CZUJNIKA

Układ optyczny sensora składa się z odbiciowej siatki dyfrakcyjnej, płytki światłodzielnącej, diafragmy, dwóch zwierciadeł i wnęki optycznej (rys. 19).

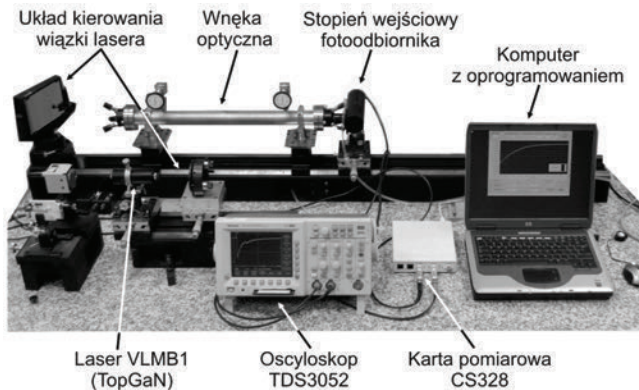
Siatka dyfrakcyjna (1000 linii/mm), współpracując z diafragmą (średnica otworu – ok. 1 mm), kształtuje wiązkę oraz redukuje niepożądaną szerokopasmową fluorescencję diody, która przenikając przez zwierciadła rezonatora mogłaby wprowadzać zakłócenie pomiaru. W celu eliminacji niekorzystnych sprzężeń optycznych pomiędzy wnęką i laserem zastosowano pozaosiowe wprowadzenie promieniowania.

Najważniejszym elementem każdej wnęki optycznej, stosowanej w metodzie CEAS, są zwierciadła, które powinny charakteryzować się jak największym współczynnikiem odbicia. Z reguły montowane są one w specjalnych uchwytach zapewniających z jednej strony sztywność wnęki, natomiast z drugiej możliwość regulacji nachylenia. Takie rozwiązanie umożliwia precyzyjne ustawienie lasera względem wnęki. W opracowanym sensorze zastosowano wielowarstwowe zwierciadła dielektryczne (Los Gatos Research Inc.) o odpowiednio dużych wartościach współczynników odbicia. Badania charakterystyk transmisyjnych tych zwierciadeł przeprowadzono na specjalistycznym stanowisku pomiarowym, które wyposażone było w spektrofotometr firmy Perkin–Elmer typu Lambda-900, pracujący w zakresie fali długości od 185 nm do 3,3  $\mu\text{m}$  i precyzji 0,08 nm zakresie 190–900 nm. Dla fali długości 414 nm wartość współczynnika transmisji wynosiła  $T_R = 2,64 \times 10^{-3}\%$ . Ponadto w zakresie 414–415 nm współczynnik transmisji zwierciadeł przyjmuje wartość minimalną, a tym samym współczynnik odbicia wartość maksymalną. Promieniowanie laserowe zatem długości fali  $414,35 \pm 0,03$  nm jest bardzo dobrze dopasowane do charakterystyk transmisyjnych zwierciadeł. Dzięki temu czas zaniku sygnału we wnęce optycznej niewypełnionej absorberem osiągał duże wartości.

Pomiar efektywnego współczynnika odbicia zwierciadeł  $R_{\text{ef}}$  wykonano za pomocą modelu laboratoryjnego sensora (rys. 22), wyznaczając czas zaniku sygnału we wnęce niewypełnionej absorberem –  $\tau_0$ . Przeprowadzono serię pomiarów. Wartość średnia czasu zaniku sygnału  $\tau_0$  wyniosła  $25,3 \pm 0,3$   $\mu\text{s}$ . Na podstawie przeprowadzonych pomiarów czasu zaniku sygnału we wnęce niewypełnionej absorberem wyznaczono efektywny współczynnik odbicia zwierciadeł

$$R_{\text{ef}} = 1 - \frac{L}{c \cdot \tau_0} . \quad (22)$$

Jego wartość wyniosła  $99,9921 \pm 0,0001\%$ .



Rys. 22. Model laboratoryjny sensora  $\text{NO}_2$   
Fig. 22. Laboratory model of  $\text{NO}_2$  sensor

Różnica między tą wartością a współczynnikiem zmierzonym za pomocą spektrofotometru ( $RR = 1 - TR = 99,99736\%$ ) spowodowana jest tym, że efektywny współczynnik odbicia zwierciadeł uwzględnia wszystkie straty w rezonatorze, w tym i straty dyfrakcyjne, a także chropowatości zwierciadeł itp.

Długość rezonatora zastosowanego w modelu sensora wynosiła 60 cm, swobodnej dyspersji zakres (ang. *Free Spectral Range*) wynosił zatem  $\Delta\nu_{\text{FSR}} = 250$  MHz. Zakładając, że propagacja promieniowania zachodzi we wnęce wypełnionej powietrzem,  $\Delta\nu_{\text{FSR}}$  obliczono z zależności

$$\Delta\nu_{\text{FSR}} = \frac{c}{2 \cdot n \cdot L} \quad (23)$$

gdzie:  $c$  – prędkość światła,  $n$  – współczynnik załamania światła w danym ośrodku, natomiast  $L$  – długość wnęki optycznej.

Efektywną liczbę obiegów promieniowania we wnęce, przy której następuje spadek energii do poziomu  $1/e$ , określa smukłość  $F$  (ang. *Finesse*). Parametr ten wyznaczono ze wzoru

$$F = \pi \frac{\sqrt{R}}{1 - R} \quad (24)$$

gdzie  $R$  oznacza współczynnik odbicia zwierciadeł.

Smukłość opracowanej wnęki wynosi  $1,3 \times 10^5$ . Z parametrem  $F$  związana jest dobroć wnęki  $Q$ , którą można wyznaczyć ze wzoru

$$Q = \frac{2 \cdot n \cdot L \cdot F}{\lambda} \quad (25)$$

Obliczona ze wzoru (25) dobroć analizowanej wnęki optycznej wynosi  $3,8 \times 10^{11}$ .

Czas życia fotonu  $\tau_f$  określono z zależności

$$\tau_f = \frac{2 \cdot n \cdot L \cdot F}{c} \quad (26)$$

Dla analizowanej wnęki optycznej  $\tau_f$  wynosi  $5,2 \times 10^{-4}$  s.

Funkcję transmisji wnęki opisuje zależność Airy (wzór 27). Jest ona zależna od współczynnika odbicia zwierciadeł  $R$  oraz od przesunięcia fazy promieniowania we-wnątrz rezonatora, przypadającej na jedno przejście  $\phi$  (wzór 28).

$$T(R, \phi) = \frac{(1 - R)^2}{(1 - R)^2 + 4 \cdot R \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)} \quad (27)$$

$$\phi = \frac{4 \cdot \pi \cdot n \cdot L}{\lambda} \quad (28)$$

Z funkcją transmisji wnęki optycznej związany jest stosunek mocy sygnału do mocy szumu,  $S_w/N_w$ . W metodach spektroskopii strat we wnęcie optycznej można go zdefiniować jako iloraz mocy promieniowania dopasowanego do funkcji transmisji wnęki optycznej i pasma absorpcji badanego gazu do mocy promieniowania niepożądanego, transmitowanego przez wnękę w wyniku niezerowych współczynników transmisji zastosowanych zwierciadeł

$$\frac{S_w(\lambda)}{N_w(\lambda)} = \frac{[T(R(\lambda), \phi)]^2}{[1 - R(\lambda)]^2} \quad (29)$$

Dla fali długości  $\lambda = 414$  nm oraz dla  $\phi = 0$ ,  $S_w(\lambda)/N_w(\lambda)$  przyjmuje wartość maksymalną i wynosi  $1,7 \times 10^9$ .

W tabeli 1 zestawiono parametry opracowanej wnęki optycznej czujnika NO<sub>2</sub>. W górnym wierszu podano wyniki analityczne, natomiast w dolnym wyniki badań eksperymentalnych.

Tabela 1. Parametry wnęki optycznej  
Table 1. Parameters of the optical cavity

	$L$ [m]	$g_1 \times g_2$	$\Delta\nu_{\text{FSR}}$ [MHz]	$F$	$Q$	$\tau_f$ [s]	$S_w/N_w$
Obliczone	0,6	0,16	250	$1,3 \times 10^5$	$3,8 \times 10^{11}$	$5,2 \times 10^{-4}$	$1,7 \times 10^9$
Zmierzone	0,6	0,16	250	$3,98 \times 10^4$	$1,15 \times 10^{11}$	$1,59 \times 10^{-4}$	$1,6 \times 10^8$

#### 4.4. BUDOWA FOTOODBIORNIKA

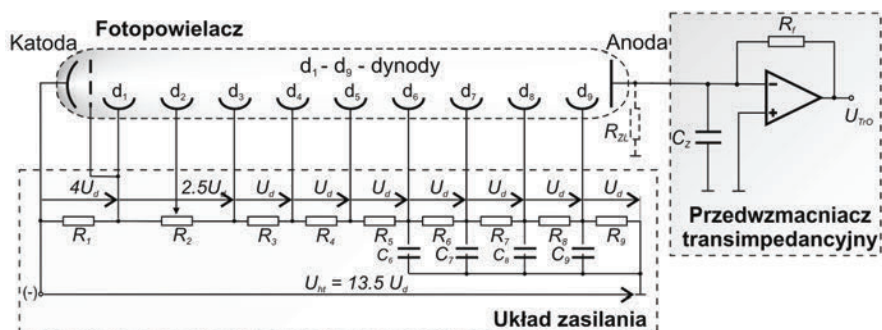
Promieniowanie optyczne przechodzące przez tylne zwierciadło wnęki pomiarowej jest kierowane do stopnia wejściowego fotoodbiornika, który składa się z fotopowielacza, układu zasilania z przetwornicą wysokiego napięcia oraz z przedwzmacniacza transimpedancyjnego.

W stopniu wejściowym fotoodbiornika zastosowano fotopowielacz R7518 firmy Hamamatsu. Wartości rezystancji dzielnika zasilającego dynody zostały tak dobrane, aby zapewnić odpowiedni podział napięcia zasilania. W układzie zasilającym zastosowano kondensatory odsprężające, które poprawiają dynamikę układu. W celu minimalizacji wpływu zakłóceń zewnętrznych fotopowielacz wraz z układem zasilania został umieszczony we wspólnej ekranowanej obudowie i dodatkowo zabezpieczony osłoną magnetyczną wykonaną z permaloju. Układ ten zapewnia lepsze zabezpieczenie przed zakłóceniami oraz osiągnięcie większych wartości wzmocnienia niż w innych konfiguracjach układu zasilania dynod.

Schemat układu zasilania fotopowielacza wraz z przedwzmacniaczem przedstawiono na rysunku 23.

Uzyskanie dużej czułości stopnia wejściowego fotoodbiornika wymagało rozpatrzenia jego schematu szumowego oraz minimalizacji wszystkich możliwych źródeł

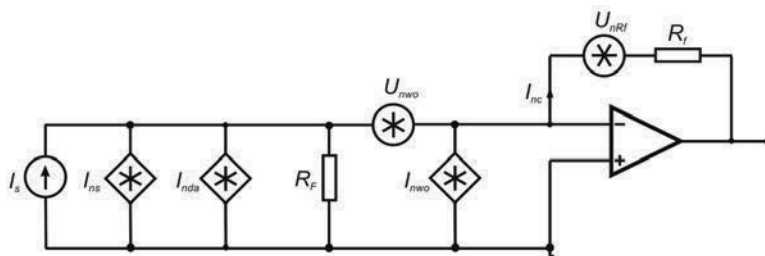
szumowych. Na rysunku 24 przedstawiono schemat zastępczy tego stopnia. Źródło prądowe  $I_s$  reprezentuje prąd pochodzący od sygnału użytecznego (prąd anody),  $R_F$  rezystancję fotopowielacza (zwykle  $10^9 \Omega$ ), natomiast  $C_F$  jest pojemnością rozproszoną fotopowielacza (ok. 6 pF).



Rys. 23. Schemat układu zasilania fotopowielacza wraz z przedwzmacniaczem

Fig. 23. Schemes of both PMT power supply and transimpedance preamplifier

Źródła szumu fotopowielacza przedstawiono w postaci źródła prądowego  $I_{ns}$  reprezentującego szum śrutowy pochodzący od prądu sygnału użytecznego, źródła prądowego  $I_{nda}$  przedstawiającego szum śrutowy prądu ciemnego anody, szumu napięciowego  $U_{nwo}$  i prądowego  $I_{nwo}$  przedwzmacniacza oraz szumu termicznego rezystancji sprzężenia zwrotnego  $I_{nRf}$ .



Rys. 24. Schemat zastępczy fotopowielacza wraz z przedwzmacniaczem

Fig. 24. Equivalent scheme of the PMT and preamplifier

Biorąc pod uwagę wymienione źródła szumu,  $S/N$  stopnia wejściowego fotodiodni wynosi [46]

$$\frac{S_{swo}}{N_{swo}} = \frac{(P_s \cdot S_{kF} \cdot G_F)^2 \cdot R_f^2}{\left[ 2q(G_F S_{kF} P_s + I_{nda}) \frac{\delta}{\delta - 1} + \left( U_{nwo} \frac{R_F + R_f}{R_F \cdot R_f} \right)^2 + I_{nwo}^2 + I_{nRf}^2 \right] R_f^2 \Delta f_{ns}} \quad (30)$$

gdzie:  $q$  – ładunek elektronu,  $G_F$  – wzmacnienie fotopowielacza,  $S_{kf}$  – czułość fotokatody,  $P_s$  – moc sygnału,  $\delta$  – wzmacnienie danego stopnia fotopowielacza,  $U_{nwo}$  – szum napięciowy wzmacniacza operacyjnego,  $R_f$  – rezystancja sprzężenia zwrotnego,  $\Delta f_n$  – pasmo szumowe układu.

Kolejnym, niezwykle ważnym, parametrem stopnia wejściowego fotoodbiornika jest jego szybkość odpowiedzi, z którą skorelowane jest pasmo szumowe. Można je wyznaczyć ze wzoru

$$\Delta f_n = \frac{\pi}{2} \Delta f_{3dB} \approx \frac{1}{4R_L(C_L + C_F)} \quad (31)$$

gdzie:  $\Delta f_{3dB}$  jest trzydecybelowym pasmem częstotliwościowym [10],  $R_L$  – rezystancją obciążenia,  $C_L$  – pojemnością wejściową przedwzmacniacza,  $C_F$  – pojemnością fotopowielacza.

Podczas doboru transimpedancji przedwzmacniacza wzięto także pod uwagę jej wpływ na kształt sygnału występującego na wyjściu układu. W przypadku pojawienia się jednego fotonu na katodzie fotopowielacza sygnał napięciowy na wyjściu przetwornika I–V można opisać zależnością

$$U_{TrO} = \frac{q \cdot G_F \cdot R_f}{R_f \cdot C'_Z - t_i} \cdot \left[ \exp\left(\frac{-t}{R_f \cdot C'_Z}\right) - \exp\left(\frac{-t}{t_i}\right) \right] \quad (32)$$

gdzie  $C'_Z$  jest pojemnością zastępczą fotopowielacza oraz obwodu wejściowego przedwzmacniacza widzianą od strony rezystancji w torze sprzężenia zwrotnego  $R_f$ , natomiast  $t_i$  jest czasem trwania impulsu z fotopowielacza.

Z twierdzenia Millera wynika, że wartość pojemności  $C'_Z$  jest  $(G_{OL} + 1)$  razy mniejsza niż  $C_Z$ . Jednak w poprawnie zaprojektowanym i wykonanym układzie wartość  $C'_Z$  z reguły nie jest mniejsza niż 0,1 pF.

Żeby uzyskać kompromis pomiędzy niskim poziomem szumu zastępczego układu fotodetektor–przedwzmacniacza a dużą szybkością odpowiedzi przedwzmacniacza, zdecydowano się zastosować wzmacniacz operacyjny firmy Analog Devices typu AD8038 oraz rezystancję  $R_f = 100 \Omega$ . Wzmacniacz ten charakteryzuje się szerokim pasmem częstotliwościowym oraz małymi szumami. Podstawowe parametry wzmacniacza operacyjnego przedstawiono w tabeli 2.

W celu doboru odpowiedniego wzmacnienia oraz pasma częstotliwościowego przedwzmacniacza wykonano badania odpowiedzi stopnia wejściowego fotoodbiornika na impuls promieniowania laserowego. Jako źródło promieniowania zastosowano diodę laserową HL6501MG firmy Hitachi. Rejestrowano sygnały napięciowe na wyjściu przedwzmacniacza transimpedancyjnego dla różnych wartości rezystancji sprzężenia zwrotnego  $R_f$ . Wzrost amplitudy sygnału obserwowano dla większych wartości  $R_f$ , jednakże wzrastała również stała czasowa

odpowiedzi stopnia wejściowego fotoodbiornika. Zdecydowano się zatem na wybór rezystancji  $R_f = 100 \Omega$ .

W tabeli 2 zestawiono wyniki pomiarów czasu trwania, czasu narastania oraz czasu opadania impulsu na wyjściu stopnia wejściowego fotoodbiornika.

Przedwzmacniacz z  $R_f = 100 \Omega$  zapewnia wystarczające parametry częstotliwościowe oraz wzmacnienie, które wyniosło 3,8. W przypadku gdyby wartość wzmacnienia była zbyt mała, wówczas w kolejnym stopniu fotoodbiornika można zastosować wzmacniacz napięciowy.

Tabela 2. Zestawienie wyników pomiarów parametrów czasowych sygnału napięciowego na wyjściu stopnia wejściowego fotoodbiornika

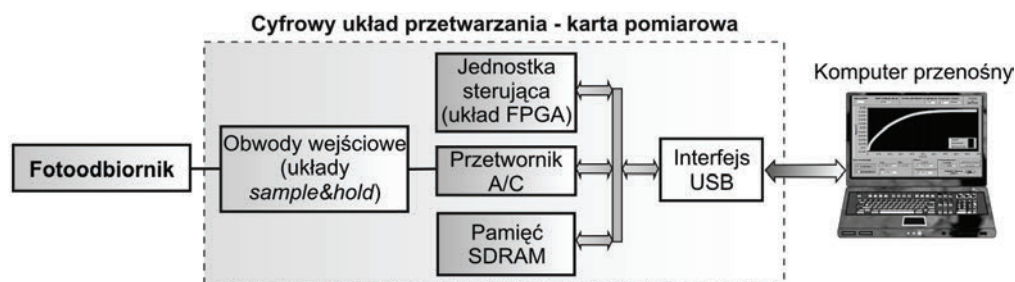
Table 2. Time parameters of the output voltage signal from the first stage photoreceiver

Wartość rezystancji $R_f [\Omega]$	Czas trwania impulsu [ns]	Czas narastania impulsu [ns]	Czas opadania impulsu [ns]
100	60,8±0,1	6,4±0,1	9,2±0,1

Dla  $R_f = 100 \Omega$  stosunek mocy sygnału do mocy szumu układu fotopowielacz-przedwzmacniacz, obliczony ze wzoru 30, wyniósł  $S_{pw}/N_{pw} = 115$ .

#### 4.4. CYFROWY UKŁAD PRZETWARZANIA SYGNAŁU

Sygnał z przedwzmacniacza podawany jest do obwodów wejściowych karty pomiarowej, w której następuje przetwarzanie sygnału analogowego na próbki cyfrowe (rys. 25). Zastosowano dwukanałową 12-bitową kartę pomiarową typu CS328-12 firmy CleverScope o szybkości próbkowania 100 MS/s. Jej analogowe pasmo częstotliwościowe wynosi 120 MHz. Oprócz przetwornika A/C (LTC2282 firmy Linear Technology) głównymi jej elementami są: programowalny układ FPGA Cyclone II typu EP2C20F484C8 firmy Altera, pamięć SDRAM oraz obwody wejściowe do



Rys. 25. Schemat blokowy cyfrowego układu przetwarzania opracowanego sensora  
Fig. 25. Block diagram of signal processing unit of the designed sensor

kondycjonowania sygnału. Ponadto karta wyposażona jest w mikrokontroler USB CY7C68013A firmy Cypress. Dane pomiarowe z karty przesyłane są do komputera za pomocą interfejsu USB 2.0. Interfejs ten zapewnia szeregową transmisję danych z prędkością dochodzącą nawet do 480 Mb/s (tj. ok. 60 MB/s w trybie „High”).

Po przeprowadzeniu operacji przetwarzania A/C dane cyfrowe podlegają dalszej obróbce, która obejmuje:

- uśrednianie liniowe,
- aproksymację,
- obliczenie koncentracji badanego gazu.

W procesie pomiarowym fotodetektor wytwarza cyklicznie sygnały analogowe  $y_i^A(t)$  ( $i$  oznacza indeks sygnału). Wskutek próbkowania za pomocą przetwornika A/C każdy analogowy sygnał ulega digitalizacji, w rezultacie której jest reprezentowany w pamięci karty przez wektor liczb 12-bitowych  $y_i(t) = [y_i(t_1), y_i(t_2), y_i(t_3), \dots, y_i(t_j), \dots, y_i(t_{N_p})]$ , gdzie  $j$  oznacza indeks próbki, a  $N_p$  – liczbę próbek. W cyfrowym przetwarzaniu uśrednianie polega na sumowaniu dla wielu sygnałów ciągu próbek w odpowiadających tym samym czasie

$$y_{sr}(t_j) = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} y_i(t_j) \quad (33)$$

gdzie  $N_s$  oznacza liczbę sygnałów podlegających uśrednieniu. Podstawowym wymaganiem dla prawidłowego uśredniania liniowego jest synchronizacja czasowa podczas próbkowania sygnału. Pobierając kolejne zbiory próbek sygnału wejściowego zakłóconego szumem addytywnym, konieczne jest, aby faza tego sygnału była jednakowa w każdym zbiorze. Jeśli próbki szumu nie są skorelowane wzajemnie oraz nie są skorelowane z szybkością próbkowania, to wartość skuteczna szumu podczas kolejnych uśrednień będzie dążyć do zera. Synchronizację tę zapewniają impulsy lasera doprowadzone do wejścia wyzwalania karty z fotodiody. Uśrednianie liniowe redukuje wariancję szumu, zachowując jednocześnie wartości chwilowe sygnału. Dzięki temu możliwa jest poprawa stosunku mocy sygnału do mocy szumów o czynnik równy pierwiastkowi z liczby uśrednianych sygnałów (wzór (34)).

$$\frac{S_K}{N_K} = \frac{S_C}{N_C} \sqrt{N_s} \quad (34)$$

gdzie  $S_K, N_K$  – odpowiednio moc sygnału i moc szumu po operacji uśredniania liniowego,  $S_C, N_C$  – odpowiednio moc sygnału i moc szumu przed operacją uśredniania liniowego.

W celu wyznaczenia czasu zaniku sygnału  $\tau$  oprogramowanie wykonuje aproksymację punktową uśrednionych danych nieliniową metodą najmniejszych kwadratów



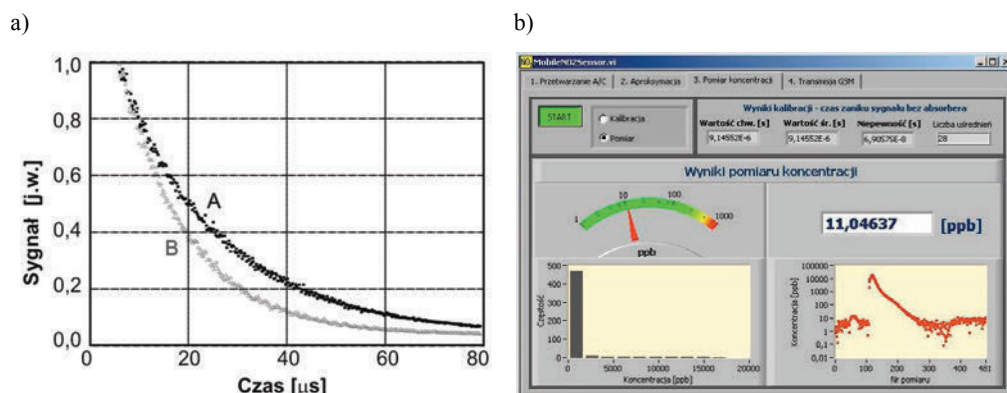
według algorytmu Levenberga–Marquardta. W kroku tym zakłada się, że zanik natężenia promieniowania wydostającego się z wnęki i rejestrowanego przez fotodetektor jest opisywany funkcją wielowykładniczą:

$$f(t, p) = \sum_{k=1}^{N_f} A_k \cdot \exp(-t / \tau_k) + B \quad (35)$$

gdzie  $N_f$  oznacza liczbę modów. Aproksymacja tej funkcji do uśrednionego sygnału  $y_{sr}(t_j)$  ( $j = 1 - N_p$ ) umożliwia wyznaczenie występujących w niej następujących parametrów:  $A_k$  - amplitudy i  $\tau_k$  - czasy zaniku poszczególnych składowych wykładniczych oraz  $B$  - składową stałą, tzw. offset. Dokonuje się tego metodą najmniejszych kwadratów, która polega na minimalizacji funkcji

$$\chi^2(p) = \sum_{j=1}^{N_p} [y_{sr}(t_j) - f(t_j, p)]^2 \quad (36)$$

Procedura ta ułatwia wyznaczenie parametru najbardziej istotnego dla pomiaru koncentracji absorbera: czas zaniku promieniowania we wnęcie optycznej. Jego wartość jest równa czasowi zaniku głównej składowej  $f(t, p)$ :  $\tau = \tau_1$ . W kolejnym kroku oprogramowanie dokonuje wyznaczenia koncentracji badanego gazu, które przebiega dwuetapowo. Na początku wykonywany jest pomiar czasu zaniku sygnału  $\tau_0$  we wnęcie optycznej bez badanego gazu (bez absorbera; rys. 27a – A), a następnie pomiar czasu zaniku sygnału  $\tau$  we wnęcie wypełnionej badanym gazem (z absorberem; rys. 26a – B).



Rys. 26. Przykładowe sygnały na wyjściu wnęki optycznej bez absorbera A (czas zaniku  $\tau_0$ ) oraz na wyjściu wnęki wypełnionej absorberem B (czas zaniku  $\tau$ ) (a) oraz widok okna aplikacji sensora w trybie pomiaru koncentracji  $\text{NO}_2$  (b)

Fig. 26. Examples of signals at the output of the optical cavity without absorber A (decay time of  $\tau_0$ ) and filled with the absorber B (decay time of  $\tau$ ) (a), user panel of sensor software for  $\text{NO}_2$  concentration determination

Koncentrację gazu wyznacza się ze wzoru

$$K = \frac{1}{c\sigma} \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_0} \right) \quad (37)$$

Zarówno proces przetwarzania analogowo-cyfrowego, jak i uśrednianie liniowe przeprowadzany jest w karcie pomiarowej. W zależności od przypadku liczba uśrednień  $N_s$  wynosi od kilku do nawet kilkudziesięciu tysięcy razy. Do komputera przesyłane są dane po procesie uśredniania liniowego. Takie rozwiązanie było możliwe dzięki temu, że karta ma wystarczającą ilość pamięci do przeprowadzania operacji sumowania oraz dzielenia. Uśrednione próbki sygnału podlegają aproksymacji w komputerze, a na podstawie wyników tej operacji wyznaczana jest koncentracja badanego gazu. Dzięki temu, że próbki danych nie są przesyłane do komputera, po każdym pomiarze znacznie zwiększyła się szybkość pojedynczego pomiaru koncentracji absorbera. Wyniki obliczeń prezentowane są w oknie oprogramowania w formie graficznego wskaźnika oraz w postaci liczbowej (rys. 26b).

#### 4.6. PARAMETRY PRZENOŚNEGO CZUJNIKA DITLENKU AZOTU

Główne elementy sensora, tzn. moduł laserowy, moduł wnęki czujnika, fotopowielacz, przedwzmacniacz sygnału oraz pompa zostały zamontowane w metalowej obudowie. Dodatkowo wykonane zostały komory na dwa akumulatory oraz kartę pomiarową. Zarówno obudowa czujnika, komora karty A/C, jak i komora na akumulatory zostały przymocowane do dna walizki transportowej (rys. 27). Teflonowa rurka służy do wprowadzenia badanego gazu do optycznej wnęki rezonansowej [5].

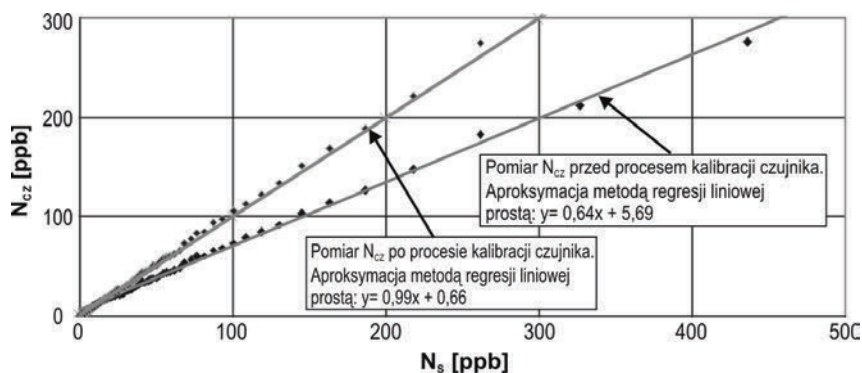


Rys. 27. Fotografia wnętrza sensora NO<sub>2</sub>  
Fig. 27. Photography of NO<sub>2</sub> sensor

Aby zapewnić poprawną pracę czujnika, konieczne jest przeprowadzenie jego kalibracji. Do tego celu zastosowano generator gazów firmy Kin-Tek. Generator ten ma konstrukcję modułową, umożliwiającą przygotowanie mieszanin gazowych o precyzyjnie określonym stężeniu składników. Podstawową zasadą wykorzystywaną w tym systemie jest dynamiczne mieszanie przepływających strumieni gazów. Metoda ta polega na rozcieńczeniu gazu źródłowego przez zmieszanie go ze strumieniem gazu nośnego. Końcowe stężenie mieszaniny uzależnione jest od proporcji strumieni obu gazów. Modułowa budowa generatora umożliwia wykorzystanie różnych technik mieszania do wytwarzania wieloskładnikowych mieszanin gazowych.

W systemie tym można uzyskać mieszaninę gazów o precyzyjnie określonym stężeniu składników, tzn. od poziomu ppt (ang. *part per trillion*) do stężenia początkowego 1:1. Generator umożliwia tworzenie zarówno suchych, jak i zwilżonych (zawierających parę wodną) mieszanin, dostarczanych do odbiornika pod ciśnieniem o regulowanej wartości: od ciśnienia atmosferycznego do ponad 275 kPa. Zależność między stężeniem zmierzonym a wzorcowym przed kalibracją oraz po kalibracji czujnika  $\text{NO}_2$  przedstawiono na rysunku 28.

Wyniki pomiarów aproksymowano metodą najmniejszych kwadratów (regresja liniowa).

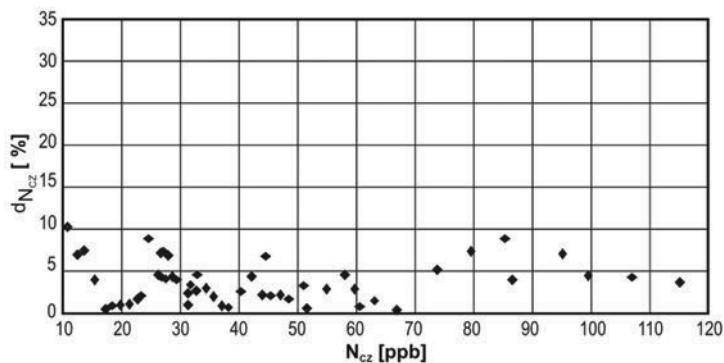


Rys. 28. Wykres zależności zmierzonego stężenia  $\text{NO}_2$  ( $N_{cz}$ ) od stężenia wzorcowego ( $N_s$ ) przed oraz po kalibracji czujnika  $\text{NO}_2$

Fig. 28. Measured concentration of  $\text{NO}_2$  ( $N_{cz}$ ) versus reference concentration of samples ( $N_s$ ) before and after calibration procedure of  $\text{NO}_2$  sensor

Zależność względnego procentowego błędu pomiaru wartości stężenia  $\text{NO}_2$  od wartości mierzonego stężenia po kalibracji badanego czujnika przedstawiono na rysunku 29.

Z charakterystyki wynika, iż wartość maksymalnego błędu względnego pomiaru stężenia mieszaniny, w przedziale 10–120 ppb po kalibracji czujnika gazu, nie przekracza 10%. Na tej podstawie wyznaczono całkowity względny błąd metody uwzględniający niepewności wyznaczenia stężenia wytworzonej mieszaniny przez generator oraz pomiaru stężenia, który wynosił 16,4%.

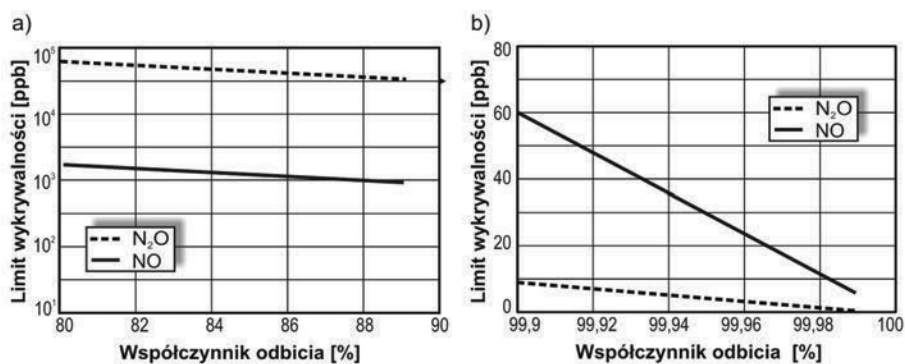


Rys. 29. Wartość błędu względnego procentowego pomiaru wartości stężenia gazu w zależności od wartości zmierzonego stężenia po kalibracji czujnika  $\text{NO}_2$

Fig. 29. Dependence of relative error of concentration determination on measured concentration level after calibration procedure of  $\text{NO}_2$  sensor

#### 4.7. OPTOELEKTRONICZNE SENSORY TLENKU I PODTLENKU AZOTU

Obserwacja cząsteczek  $\text{NO}$  i  $\text{N}_2\text{O}$  może być wykonywana na leżących w ultrafiolecie pasmach absorpcyjnych odpowiadających przejściom między stanami elektronowymi oraz na pasmach podczerwonych odpowiadających kwantowym przejściom między stanami oscylacyjno-rotacyjnymi podstawowego stanu elektronowego. Jednak w zakresie ultrafioletowym nie ma dostępnych ani odpowiednich źródeł laserowych, ani zwierciadeł charakteryzujących się dużym współczynnikiem odbicia (max. 99%). Dlatego też aby uzyskać duże czułości sensora  $\text{NO}$  i  $\text{N}_2\text{O}$ , konieczne jest wykorzystanie pasma podczerwonego (rys. 30) [38, 46].

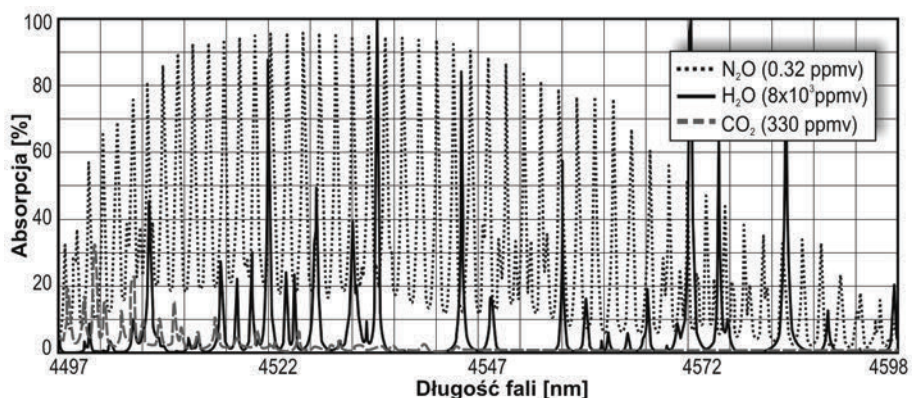


Rys. 30. Wykrywalna koncentracja graniczna w funkcji współczynnika odbicia zwierciadeł w zakresie UV (a) oraz w podczerwieni (b)

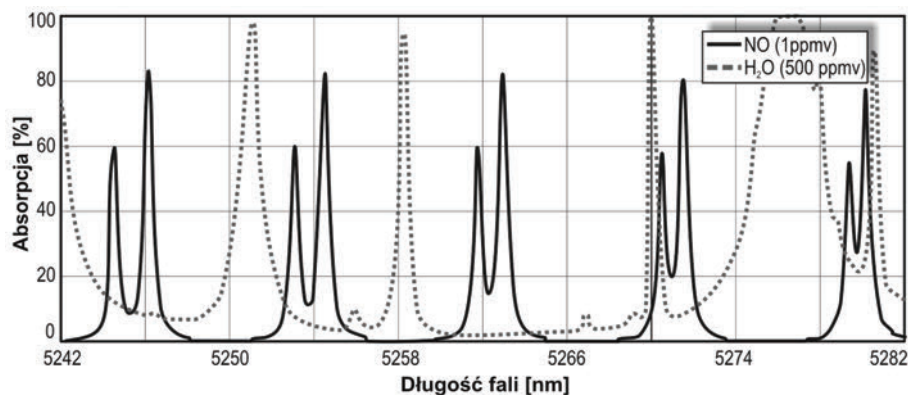
Fig. 30. Detection limits versus reflectivity of cavity mirrors in ultraviolet (a) and infrared (b) spectral ranges

Analizę widm absorpcyjnych podtlenku ( $N_2O$ ) i tlenku (NO) azotu, w zakresie średniej podczerwieni, przeprowadzono w programie Hitran-PC 4.0.

Z przeprowadzonych analiz wynika, że duże wartości współczynników absorpcji  $N_2O$  występują w zakresie 4,49–4,59  $\mu m$  (rys. 31). Jednak w tym przedziale długości fal występują także niekorzystne interferencje z widmami absorpcyjnymi dwutlenku węgla ( $CO_2$ ) oraz wody ( $H_2O$ ). Występują one w atmosferze w dużym stężeniu. W temperaturze 300 K i ciśnieniu 1atm., typowe stężenie  $CO_2$  wynosi 330 ppmv<sup>2</sup>,  $H_2O$  – 773 ppmv, gdy tymczasem stężenie  $N_2O$  – tylko 0,32 ppmv.



Rys. 31. Widmo absorpcyjne  $N_2O$  oraz innych gazów w zakresie 4,45–4,65  $\mu m$   
 Fig. 31. Absorption spectra of  $N_2O$  and other gases in the wavelength range 4.45–4.65  $\mu m$



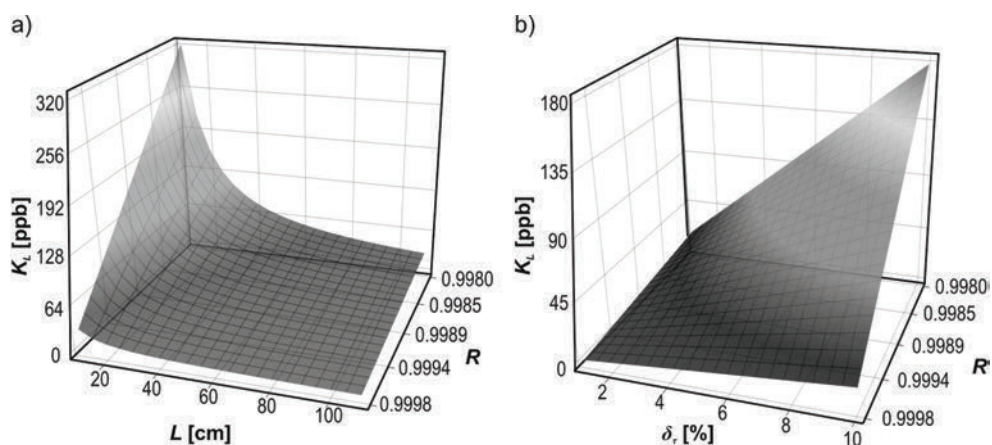
Rys. 32. Wyselekcjonowany zakres widma absorpcji NO  
 Fig. 32. Selected range of NO absorption spectrum

<sup>2</sup> Cząstek na milion w odniesieniu do danej objętości (ang. *parts per million by volume*).

Aby uniknąć niekorzystnego wpływu  $\text{CO}_2$  i biorąc pod uwagę dostępność laserów QC o odpowiednich długościach fal, rozpatrzono zakres spektralny 4,50–4,57  $\mu\text{m}$ . W tym regionie występuje tylko kilka linii absorpcyjnych wody. Dokładna analiza wykazała, że przekrój czynny na absorpcję dla  $\text{N}_2\text{O}$  przyjmuje największe wartości w przedziale 4,523–4,531  $\mu\text{m}$ . Przez dokładne dostrojenie zatem długości fali lasera możliwe jest osiągnięcie dla podtlenku azotu przekroju czynnego na absorpcję o wartości  $\sim 4 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ . Niestety w zakresie długości fal, w którym występują maksymalne wartości współczynnika absorpcji tlenku azotu ( $\text{NO}$ ), występują także znaczne interferencje z widmem absorpcyjnym wody.

Na rysunku 32 zestawiono widma absorpcyjne  $\text{NO}$  i  $\text{H}_2\text{O}$ . Najkorzystniejsze są długości fali z przedziału 5,262  $\mu\text{m}$  oraz 5,263  $\mu\text{m}$ . Zgodnie ze wspomnianym standardem, stężenie  $\text{NO}$  w atmosferze wynosi jedynie 0,3 ppbv (przy: 300 K, 1 atm.). Dlatego też, tlenek azotu może być bardzo dobrym markerem obecności materiałów wybuchowych.

Korzystając ze wzoru 14 wykonano obliczenia teoretycznych czułości sensorów tlenku i podtlenku azotu (rys. 33–34). Wynika z nich, że czułość w obu przypadkach może osiągnąć wartości na poziomie ppb [45].



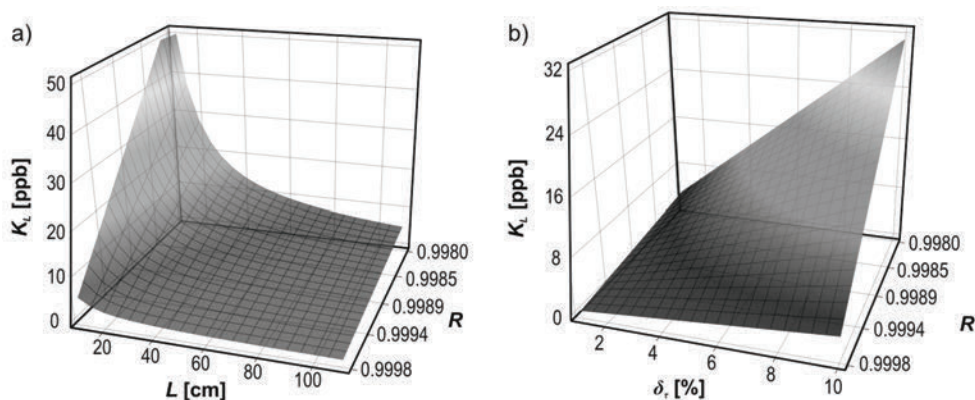
Rys. 33. Zależność koncentracji granicznej  $K_L$  czujnika tlenku azotu od długości wnęki optycznej  $L$  oraz współczynnika odbicia zwierciadeł  $R$  (a) oraz od niepewności pomiaru czasu zaniku promieniowania  $\delta_t$  i współczynnika odbicia zwierciadeł  $R$  (b).

W obliczeniach przyjęto:  $L = 0,5 \text{ m}$ ,  $\delta_t = 2,5\%$  i  $\sigma = 0,7 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$

Fig. 33. Dependence of the concentration limit  $K_L$  on both cavity length  $L$  and the mirrors reflectivity  $R$  (a), and on both the measurement uncertainty of the decay time  $\delta_t$  and the reflectivity of mirrors (b) (at  $L = 0,5 \text{ m}$ ,  $\delta_t = 2,5\%$  i  $\sigma = 0,7 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$ )

Wykonane obliczenia potwierdzają duży wpływ na czułość sensorów parametrów, takich jak: współczynnik odbicia zwierciadeł, odległość między nimi, niepewność pomiaru koncentracji oraz przekrój czynny na absorpcję. Na przykład uzyskanie czu-

łości sensora tlenku azotu, wynoszącej około 60 ppb, będzie możliwe, jeśli zastosuje się wnękę optyczną zbudowaną ze zwierciadeł o współczynnikach odbicia 99,8%, odległość między nimi będzie wynosiła 0,5 m, zapewniona będzie niepewność pomiaru czasu równa 2,5% oraz takie dostrojenie długości fali promieniowania lasera, przy której wartość przekroju czynnego na absorpcję jest maksymalna.



Rys. 34. Zależność koncentracji granicznej  $K_L$  czujnika podtlenku azotu od długości wnęki optycznej  $L$  oraz współczynnika odbicia zwierciadeł  $R$  (a), od niepewności pomiaru czasu zaniku promieniowania  $\delta\tau$  oraz współczynnika odbicia zwierciadeł  $R$  (b).

W obliczeniach przyjęto:  $L = 0,5$  m,  $\delta\tau = 2,5\%$  i  $\sigma = 4 \cdot 10^{-18}$  cm<sup>2</sup>

Fig. 34. Concentration limit  $K_L$  of  $N_2O$  sensor vs. its cavity length  $L$  with the mirrors reflectivity  $R$  (a), and vs. both mirror reflectivity and uncertainty of the decay time determination  $\delta\tau$  (b) (at  $L = 0.5$  m,  $\delta\tau = 2.5\%$  i  $\sigma = 4 \cdot 10^{-18}$  cm<sup>2</sup>)

W czujniku podtlenku azotu istnieje możliwość uzyskania większej czułości, ze względu na większe wartości przekroju czynnego na absorpcję. Przyjmując te same wartości parametrów, co poprzednio teoretyczna czułość czujnika,  $N_2O$  osiąga wartość około 10 ppb.

#### 4.8. WYBÓR ŹRÓDŁA PROMIENIOWANIA

W spektroskopii strat we wnękę w zależności od rodzaju wykrywanego gazu stosuje się lasery o długości fali z zakresu nadfioletu widzialnego oraz podczerwieni. Często są to lasery na ciele stałym, np. Nd:YAG lub Ti:szafir. Charakteryzują się one bardzo dobrymi parametrami optycznymi wiązki oraz dużymi mocami. Do głównych wad należy zaliczyć: skomplikowane układy zasilania, konieczność wydajnego chłodzenia (z reguły cieżką), znaczne gabaryty oraz wysoką cenę. Stosowane są także układy z laserami barwnikowymi. W systemach tych rolę pompy spełniają najczęściej lasery na ciele stałym. Ich główną zaletą jest możliwość przestrajania w szerokim zakresie długości fal, w zależności od rodzaju zastosowanego barwnika.

W spektroskopii strat we wnęce optycznej stosuje się także lasery półprzewodnikowe. Charakteryzują się one małymi wymiarami, prostymi układami zasilania oraz niską ceną. Obecnie na rynku obserwuje się ciągły postęp w dziedzinie laserów półprzewodnikowych. Skutkuje to między innymi coraz większymi mocami promieniowania. Ponadto dostępne są takie, których długość fali odpowiada maksymalnym wartościom przekroju czynnego na absorpcję ditlenku azotu. Widmo promieniowania tych laserów jest szersze niż laserów na ciele stałym, co jest niekorzystne w metodzie CRDS. Jednak w przypadku zastosowania ich w metodzie CEAS stanowi dodatkowy atut.

W wybranych zakresach długości fal (odpowiadających pasmom maksymalnej absorpcji NO i N<sub>2</sub>O) istnieje możliwość zastosowania w roli źródeł promieniowania kwantowych laserów kaskadowych. Ich stosowanie w spektroskopii rozpoczęło się w latach 90. XX wieku. Umożliwiły one badanie widma z zakresu średniej podczerwieni (3–25 μm). Ważną właściwością tych laserów jest możliwość osiągnięcia wysokiego stopnia spójności emitowanego promieniowania z zastosowaniem układu z rozłożonym sprzężeniem zwrotnym – DFB (ang. *Distributed Feedback*). Układy te mogą być stosowane w tzw. spektroskopii wysokiej rozdzielczości do wykrywania gazów o ściśle zdefiniowanych liniach absorpcyjnych. Osobną grupę stanowią wielomodowe lasery pracujące w układzie z rezonatorem Fabry–Perot. Widmo ich promieniowania składa się z kilku linii emisyjnych. Z tego też względu mogą one być użyte w wykrywaniu substancji, gdzie linie absorpcyjne są znacznie szersze niż w gazach, np. spektroskopii materiałów płynnych czy cieczy. Oprócz różnic w strukturze modowej laserów kaskadowych wyróżnia się również różnice dotyczące możliwości pracy w trybie ciągłym lub impulsowym. W przypadku laserów przeznaczonych do pracy ciągłej uzyskuje się znacznie węższe linie emisyjne, jednak odbywa się to kosztem pewnego zmniejszenia wydajności energetycznej.

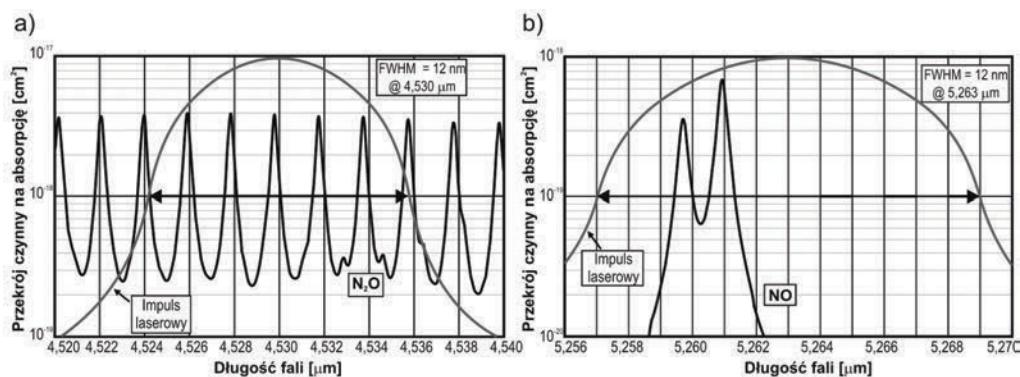
Kryterium wyboru lasera obejmowało: dobór długości fali dopasowanej do pasma absorpcji NO oraz jej stabilność, maksymalną moc promieniowania dla wybranej długości fali i temperaturę, dla której jest uzyskiwana. We wstępnych badaniach zastosowano system laserowy PG711/DFG firmy Ekspla [33]. Parametry impulsu generowanego promieniowania na wyjściu systemu PG711/DFG zestawiono w tabeli 3.

Tabela 3. Zestawienie danych technicznych zastosowanego źródła  
Table 3. Technical specification of applied sources

Parametr	dla $\lambda = 5250$ nm	dla $\lambda = 4500$ nm
Rozdzielczość przestrajania [nm]	0,1	
FWHM [1/cm]	<6	
Czas trwania impulsu [ps]	~25	
Energia impulsu [μJ]	7,3	8,9
Częstotliwość repetycji [Hz]	1000	
Profil wiązki	zbliżony do gaussowskiego	



Aby wyznaczyć koncentrację podtlenku azotu w badanej próbce, należy znać jego przekrój czynny na absorpcję, który jest zależny od długości fal. Ponadto w obliczeniach należy uwzględnić fakt, że widmo emitowanego przez laser promieniowania obejmuje kilka linii absorpcji podtlenku azotu (rys. 35a).



Rys. 35. Widmo absorpcji  $N_2O$  (a) oraz widmo absorpcji  $NO$  z naniesionymi impulsami laserowymi (b)  
Fig. 35. Spectra of the laser radiation and absorption lines of  $N_2O$  (a) and  $NO$  (b) gases

Na rysunku 35b przedstawiono charakterystykę współczynnika absorpcji tlenku azotu w funkcji długości fali wraz z naniesionym impulsem laserowym dla długości fali wynoszącej  $5,263 \mu\text{m}$ . Z przeprowadzonych badań wynika, że podczas wyznaczania koncentracji bardzo ważnym parametrem jest efektywny przekrój czynny na absorpcję dla danego zakresu długości fal oraz szerokość widma promieniowania. W przypadku zastosowanego źródła FWHM wynosi dla badanego zakresu około  $12 \text{ nm}$ . Badania potwierdzają możliwość zastosowania spektroskopii strat we wnęcie optycznej do wykrywania tlenku i podtlenku azotu. Wynika to z tego, iż dla analizowanego zakresu długości fal obserwowany jest znaczny spadek czasu zaniku w sytuacji, gdy we wnęcie optycznej pojawiają się wspomniane gazy. Jednakże istotnym elementem mającym wpływ na czułość pomiaru jest charakterystyka źródła promieniowania. Jest to związane z wartością efektywnego (średniego) przekroju czynnego na absorpcję. Zależy on istotnie od szerokości charakterystyki widmowej zastosowanego lasera i jej dopasowania do linii absorpcji badanego gazu. Poprawę wyników można uzyskać przez zastosowanie jednomodowych laserów (o jak najmniejszym FWHM) generujących promieniowanie o długościach fali dopasowanych do maksymalnych wartości przekrojów czynnych na absorpcję  $NO$  i  $N_2O$ .

Szerokości linii emisyjnych kwantowych laserów kaskadowych są znacznie węższe niż w przypadku generatorów parametrycznych. Stabilizacja częstotliwości QCL przyczynia się do dalszego zawężenia widma emisyjnego i ułatwia badania spektroskopowe.

Do zapewnienia stabilnej pracy laserów niezbędna była kontrola i stabilizacja ich temperatury, napięcia i prądu zasilania. Zważywszy na to, że lasery te pracowały

w trybie impulsowym, przez modulację prądu zasilania, niezbędne było zastosowanie generatora o dużej stabilności częstotliwości repetycji i czasu trwania impulsów. Od tych parametrów zależy tzw. cykl pracy lasera (DC – ang. *Duty Cycle*). Parametr ten ma także istotny wpływ na stabilność długości fali promieniowania emitowanego przez laser typu QC. Optymalne warunki pracy laserów QC przedstawiono w tabeli 4.

Tabela 4. Optymalne warunki pracy laserów do czujnika N<sub>2</sub>O oraz NO  
Table 4. Parameters of selected QC lasers for N<sub>2</sub>O and NO sensors

Lp.	Parametr	Laser do czujnika N <sub>2</sub> O	Laser do czujnika NO
1	Długość fali	4,52973 μm	5,26270 μm
2	Moc	13 mW	13 mW
3	Napięcie zasilania	10,160 V	10,452 V
4	Prąd średni	0,116 A	0,095 A
5	Temperatura lasera	-13 °C	2,8 °C
6	Czas trwania impulsu	15 ns	15 ns
7	Częstotliwość repetycji	1 kHz	1 kHz
8	Współczynnik wypełnienia	40%	40%
9	Średnica wiązki	3 mm	3 mm
10	Rozbieżność	<3 mrad	<3 mrad

Do przetwarzania sygnału optycznego na sygnał elektryczny zastosowano dwa niskoszumowe, wysokoczułe moduły detekcyjne. Zostały one opracowane w firmie Vigo System S.A. Są one przeznaczone do wykrywania promieniowania podczerwonego o bardzo małym natężeniu, jakie pojawia się na wyjściu optycznej wnęki sensora. Moduł taki składa się z detektora, układu zasilania, układu chłodzenia oraz niskoszumowego przedwzmacniacza sygnału.

#### 4.9. CHARAKTERYSTYKA MODUŁÓW DETEKCYJNYCH DO SPEKTROSKPII STRAT WE WNĘCE OPTYCZNEJ W ZAKRESIE PODCZERWIENI

Podstawą konstrukcji detektorów są złożone heterostrukтуры HgCdTe wytwarzane metodą MOCVD. Fotodiody zintegrowano z immersyjnymi układami optycznymi. Układ ten umożliwia redukcję rozmiarów detektora, zmniejszając jednocześnie jego pojemność oraz zwiększając szybkość odpowiedzi.

Do najważniejszych wymagań stawianym detektorom, stosowanym w sensorach pracujących w układach CEAS, należy zaliczyć:

- znaczną wykrywalność. Jest ona niezbędna dla osiągnięcia dużej czułości sensora, o ekstremalnie małych mocach promieniowania laserowego, jakie pojawia się na wyjściu wnęki. W praktyce oznacza to konieczność osiągnięcia wykry-

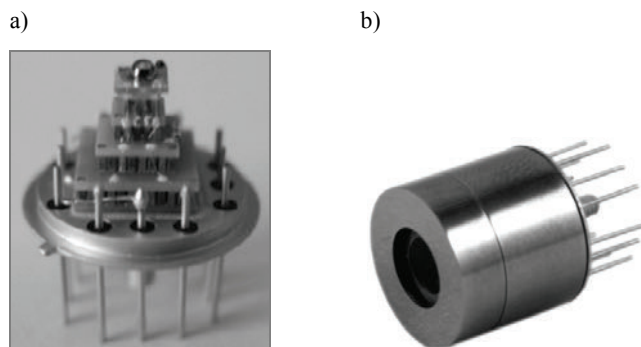
walności bliskiej fundamentalnych granic określonych przez szum kwantowy promieniowania tła,

- dużą szybkość działania; wynika ona z konieczności detekcji impulsów promieniowania laserowego o subnanosekundowych stałych czasowych.

Dzięki zastosowaniu nowoczesnych technologii epitaksji i udoskonalonej architektury przyrządów uzyskano radykalny wzrost czułości i szybkości działania. Zmniejszenie szumów, a zarazem wzrost wykrywalności, uzyskano umieszczając fotodiody na czterostopniowych chłodziarkach termoelektrycznych. Do wzmocnienia sygnału zastosowano, dopasowane do fotodiod, niskoszumowe, szerokopasmowe wzmacniacze transimpedancyjne.

Przez zastosowanie w fotodiodach HgCdTe mikrosoczewek immersyjnych optyczne pole powierzchni jest  $n^2$  razy zwiększone w stosunku do rzeczywistego pola powierzchni, gdzie  $n$  jest współczynnikiem załamania materiału soczewki. Pozwoliło to na radykalne zmniejszenie termicznej generacji–rekombinacji nośników, czyli ich mocy szumów, która maleje liniowo wraz ze zmniejszaniem objętości absorbera. Jeszcze większy zysk ( $n^4$ ) uzyskuje się dla soczewki hiperhemisferycznej. Dla soczewki wykonanej z arsenku galu ( $n = 3,4$ ) optyczne pole powierzchni zostaje powiększone o około 10 razy dla soczewek hemisferycznych i o około 2 rzędy wielkości dla hiperhemisferycznych. Okazało się, że konstrukcja ta jest najlepszą, jak dotąd realizacją koncepcji fotodetektora pracującego bez chłodzenia kriogenicznego [12, 42].

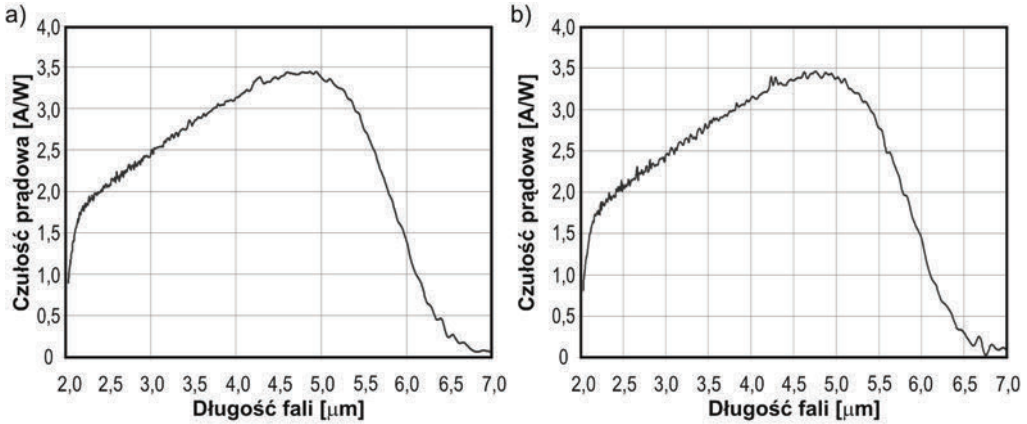
Na rysunku 36 przedstawiono zdjęcie fotodiody zintegrowanej z mikrosoczewką immersyjną, umieszczonej na czterostopniowej chłodziarce termoelektrycznej, przed (a) i po (b) umieszczeniu w hermetycznej obudowie. Taka konstrukcja zapewnia najlepsze parametry detektora.



Rys. 36. Fotodioda HgCdTe zintegrowana z mikrosoczewką GaAs, zamontowana na zimnym palcu czterostopniowej chłodziarki TEC, przed (a) i po zamknięciu (b) w hermetyzowanej obudowie

Fig. 36. Photography of MCT photodiode integrated with GaAs microlens, mounted on four-stage thermoelectric cooler (a) and its housing (b)

Na rysunku 37 przedstawiono przykładowe charakterystyki widmowe czułości prądowej zastosowanych fotodiod. Detektory te charakteryzują się dużą czułością dla promieniowania laserowego o długości fali odpowiadającej pasmom absorpcji badanych tlenków azotu, tj. NO i N<sub>2</sub>O.



Rys. 37. Przykładowe charakterystyki widmowe czułości prądowej fotodiody, gdy brak zasilania (a) i gdy jest zasilanie napięciem wstecznym o wartości  $-200$  mV, w 190 K (4TE) (b)

Fig. 37. Spectral responsivity of the photodiode without biasing (a), and with reverse biasvoltage of 200 mV (at 190 K) (4TE) (b)

Wykrywalność detektora ( $D^*$ ), gdy brak zasilania, była określona na podstawie pomiarów czułości prądowej i rezystancji  $R_0$ . Zgodnie z zależnością

$$D^* = \frac{R_i \sqrt{A}}{\sqrt{4kT / R_0}} \quad (39)$$

gdzie:  $k$  – stała Boltzmanna,  $T$  – temperatura pracy,  $R_i$  – czułość prądowa,  $R_0$  – rezystancja (bez zasilania).

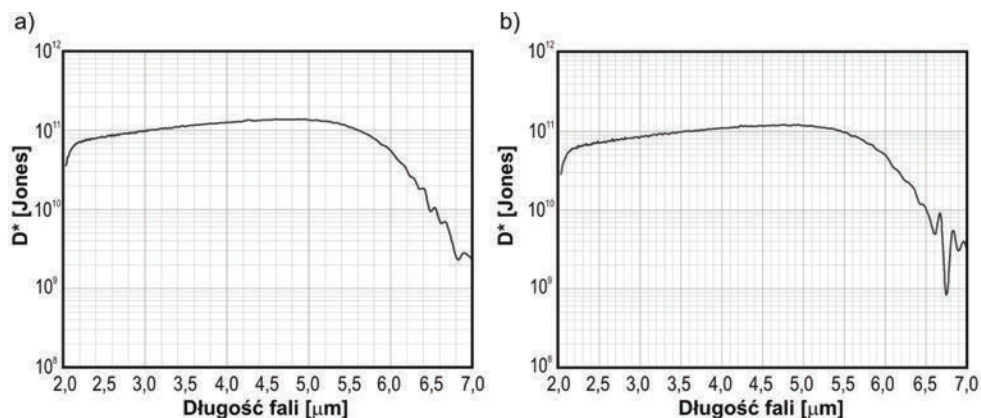
Dla fotodiod zasilanych, wykrywalności były określane na podstawie pomiarów ich czułości prądowej i prądu ciemnego. Zważywszy na to, że w roboczym paśmie częstotliwości przyrządu dominuje szum śrutowy, wartość zatem skuteczną prądu szumu oszacowano ze wzoru

$$I_n = (2 \cdot g \cdot q \cdot I \cdot B)^{1/2} \quad (40)$$

gdzie:  $g$  – wzmacnienie elektryczne fotodiody,  $q$  – ładunek elementarny,  $I$  – prąd ciemny fotodiody,  $B$  – robocze pasmo częstotliwości.

Na rysunku 38 przedstawiono przykładowe widmowe charakterystyki wykrywalności fotodiody. Gwałtowne odcięcie charakterystyki widmowej w obszarze krótkofalowym wynika z absorpcji krótkofalowego promieniowania w warstwie N<sup>+</sup>. Zasila-

nie wsteczne minimalnie zmniejsza wykrywalność. Ma ono jednak istotny wpływ na wartość stałej czasowej sygnału i pojemności fotodiody.



Rys. 38. Charakterystyki widmowe wykrywalności fotodiody, gdy brak zasilania (a) i z zasilaniem napięciem wstecznym o wartości 200 mV, w 190 K (4TE)

Fig. 38. Spectral characteristics of photodiode detectivity without biasing (a) and with reverse bias voltage of 200 mV (at 190 K) (4TE)

Kolejnym parametrem istotnym z perspektywy szybkości odpowiedzi detektora jest jego stała czasowa. Dokonano zatem pomiarów zależności stałej czasowej sygnału fotodiody w funkcji napięcia wstecznego, dla różnej temperatury pracy.

Szybkość odpowiedzi detektorów zmierzono na stanowisku, w skład którego wchodził generator parametryczny model PG711/DFG-16, z pikosekundowym laserem model PL2210A-1K, oraz oscyloskop o paśmie przenoszenia 8 GHz. W trakcie pomiarów wykorzystywany był także przedwzmacniacz transimpedancyjny o paśmie 300 MHz. Na podstawie zmierzonego czasu opadania impulsu ( $t_0$ ) wyznaczono stałą czasową impulsu  $\tau_m$  z zależności

$$\tau_m = t_0 / 2,2 \quad (41)$$

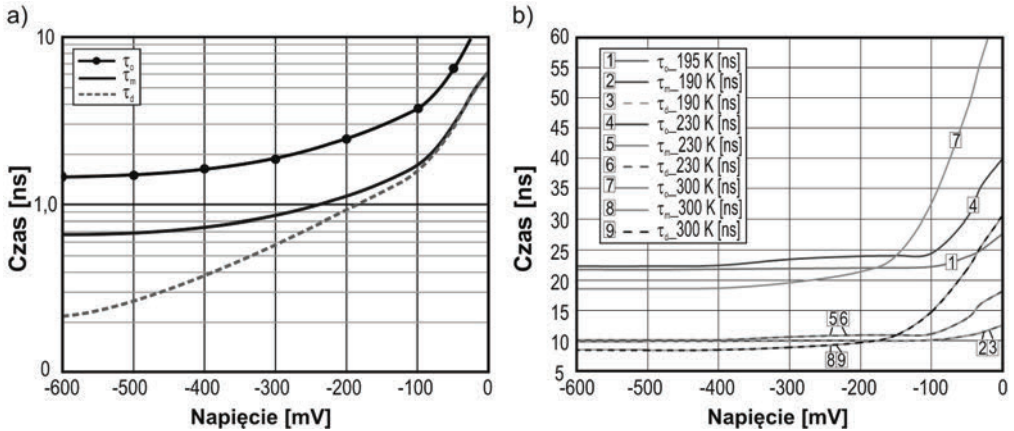
Stałą czasową odpowiedzi fotodiody  $\tau_d$  wyznaczono z zależności

$$\tau_d = (\tau_m^2 - \tau_{\text{amp}}^2 - \tau_{\text{osc}}^2)^{1/2} \quad (42)$$

gdzie:  $\tau_{\text{amp}}$  – stała czasowa przedwzmacniacza transimpedancyjnego,  $\tau_{\text{osc}}$  – stała czasowa oscyloskopu. Można pominąć wpływ stałej czasowej impulsu optycznego uzyskiwanego z generatora parametrycznego, ponieważ jego czas trwania  $\approx 20$  ps jest dużo mniejszy od badanych stałych czasowych.

Na rysunku 39 przedstawiono charakterystyki zależności stałej czasowej odpowiedzi fotodiod ( $\tau_d$ ), czasu opadania impulsu ( $t_0$ ) oraz  $\tau_m$  od wartości napięcia polaryzacji

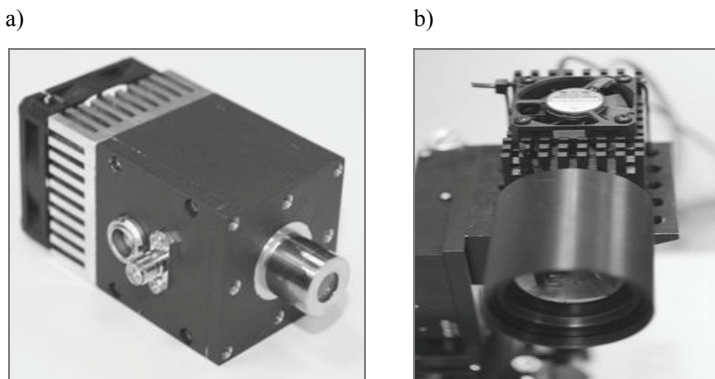
wstecznej fotodiod, dla trzech wartości temperatur. Wartość napięcia regulowano w zakresie od 0 do wartości  $-800$  mV. Niezasilane fotodiody charakteryzują się stosunkowo długimi stałymi czasowymi. Wraz ze wzrostem napięcia zasilania fotodiody w kierunku wstecznym, do około  $-150$  mV, następuje gwałtowne zmniejszenie stałej czasowej. Po dalszym wzroście napięcia polaryzacji wstecznej spadek wartości stałej czasowej odpowiedzi detektora jest nieznaczny.



Rys. 39. Zależność stałej czasowej odpowiedzi fotodiody ( $\tau_d$ ), czasu opadania impulsu ( $t_0$ ) oraz  $\tau_m$  od wartości napięcia polaryzacji wstecznej fotodiody (a) oraz zależność stałej czasowej odpowiedzi fotodiody ( $\tau_d$ ), czasu opadania impulsu ( $t_0$ ) oraz  $\tau_m$ .

od wartości napięcia polaryzacji wstecznej fotodiody, dla trzech wartości temperatur (b)

Fig. 39. Dependences of decay time  $\tau_d$ , fall time  $t_0$  and  $\tau_m$  of photodiode signal on reverse bias voltage (a) and bias voltage at three values of temperatures (b)



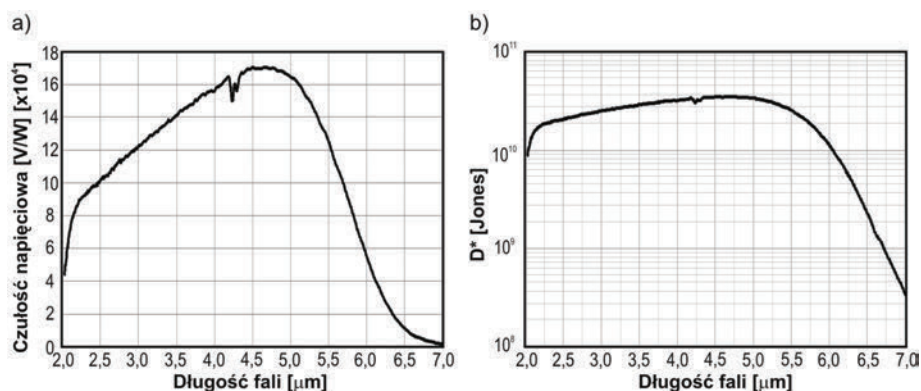
Rys. 40. Zintegrowany szerokopasmowy moduł detekcyjny serii MIPAC-F-50 z kontrolerem chłodziarki (a) oraz zintegrowany szerokopasmowy moduł detekcyjny z obiektywem (b)

Fig. 40. Integrated broadband detection modules MIPAC-F-50 series with TEC controller (a), and with objective lens (b)

Na rysunku 40 przedstawiono różne konstrukcje modułu detekcyjnego. We wspólnej obudowie każdego z modułów znajduje się detektor umieszczony na czterostopniowej chłodziarce termoelektrycznej z czujnikiem temperatury, szerokopasmowy przedwzmacniacz, miniaturowy wentylator rozpraszający ciepło wydzielane przez chłodziarkę oraz rurki odprowadzające ciepło z chłodziarki do wentylatora.

W stopniu wejściowym pierwszego przedwzmacniacza zastosowano układ scalony OPA847 firmy Burn Brown, który charakteryzuje się małym wejściowym napięciem szumu ( $0,85 \text{ nV/Hz}^{1/2}$ , dla  $f > 1 \text{ MHz}$ ), oraz pasmem przenoszenia  $60 \text{ MHz}$  (dla  $G = 20$ , dla  $R_L = 100 \Omega$ ). Przedwzmacniacz ten zapewnia zasilanie fotodiody napięciem wstecznym w zakresie  $0\text{--}800 \text{ mV}$ . Możliwy jest zatem dobór punktu pracy układu fotodiody przedwzmacniacza, dla którego uzyskuje się możliwie największą wartość stosunku mocy sygnału do mocy szumu w szerokim zakresie częstotliwości. Zasilanie wsteczne powoduje powstanie szumów niskoczęstotliwościowych typu  $1/f$ . Nie wnoszą one jednak istotnego wkładu do całkowitego szumu wzmacniacza szerokopasmowego, gdyż szerokość pasma, w którym szum  $1/f$  dominuje, jest znacznie mniejsza niż szerokość pasma modułu detekcyjnego. Pasma przenoszenia przedwzmacniacza ograniczono do  $50 \text{ MHz}$ .

W stopniu wejściowym drugiego przedwzmacniacza zastosowano tranzystory bipolarne typu BFP520. Tranzystory te charakteryzują się dużą częstotliwością graniczną ( $f_T = 45 \text{ GHz}$ ) oraz małym współczynnikiem szumów  $N_F = 0,95 \text{ dB}$  (dla  $I_c = 2 \text{ mA}$ ,  $V_{CE} = 2 \text{ V}$ ,  $f = 1,8 \text{ GHz}$ ) [20]. Przedwzmacniacz ten również zapewnia zasilanie fotodiody napięciem wstecznym w zakresie  $0\text{--}800 \text{ mV}$ . Pasma przenoszenia i szumy przedwzmacniacza zostały przebadane na analizatorze impedancji Agilent 4396B.



Rys. 41. Charakterystyki widmowe czułości napięciowej (a) i wykrywalności znormalizowanej  $D^*$  (b), pierwszego modułu detekcyjnego

Fig. 41. Spectral characteristics of responsivity (a) and detectivity (b) for the first detection module

Na rysunku 42 przedstawiono przykładowe charakterystyki widmowe czułości napięciowej i wykrywalności znormalizowanej jednego z opracowanych modułów detekcyjnych. Wykrywalność została określona na podstawie pomiarów czułości napię-

ciowej i wartości skutecznej napięcia szumu w paśmie przenoszenia modułu MIPAC-F-50, zgodnie z zależnością

$$D^* = \frac{R_V (A \Delta f)^{1/2}}{V_n} \quad (43)$$

gdzie:  $R_V$  – czułość napięciowa,  $A$  – pole powierzchni optycznej detektora,  $\Delta f$  – pasmo szumowe,  $V_n$  – zmierzona wartość skuteczna napięcia szumu.

W celu uzyskania sprzężenia optycznego wyjścia wnęki sensora z modułem detekcyjnym, należało zaprojektować odpowiedni układ optyczny (rys. 41b). W tym celu zastosowano oprogramowanie ZEMAX-EE firmy Zemax Development Corporation.

W symulacjach założono, że promieniowanie wychodzące przez aperturę zwierciadła jest skolimowane, a wiązka jest jednorodna. Aby uzyskać żądaną szybkość odpowiedzi modułu detekcyjnego, zastosowano detektor podczerwieni o wymiarach  $50 \times 50 \mu\text{m}^2$ . Detektor ten wyposażono w immersyjną soczewkę hiperhemisferyczną, która powiększa obszar, z którego zbierane jest promieniowanie do wymiaru optycznego równego  $0,5 \times 0,5 \text{ mm}^2$ . Soczewka immersyjna została wykonana z arsenku galu i połączona monolitycznie z elementem fotoczułym HgCdTe. Żeby struktura fotoczuła była umieszczona w punkcie o maksymalnej koncentracji promieniowania, zastosowano soczewkę średnicy 0 mm i wysokości 0,67 mm. W celu efektywnego zbierania promieniowania wychodzącego z wnęki sensora, niezbędne było zastosowanie zewnętrznej soczewki wykonanej z germanu o dodatnim menisku aplanatycznym i liczbie otworu  $F/\# = 1,4$ .

#### 4.10. WNĘKA OPTYCZNA

Wnęka optyczna składa się z odpowiedniej długości rury wyposażonej w specjalne kołnierze do mocowania zwierciadeł, zaworów z króćcami do podłączenia wlotu i wylotu gazu, uchwytów na zwierciadła wyposażonych w trzy śruby mikrometryczne do odpowiedniego pozycjonowania zwierciadeł oraz uchwyty do montażu wnęki do ławy optycznej. We wnękach zastosowano zwierciadła, których parametry przedstawiono w tabeli 5.

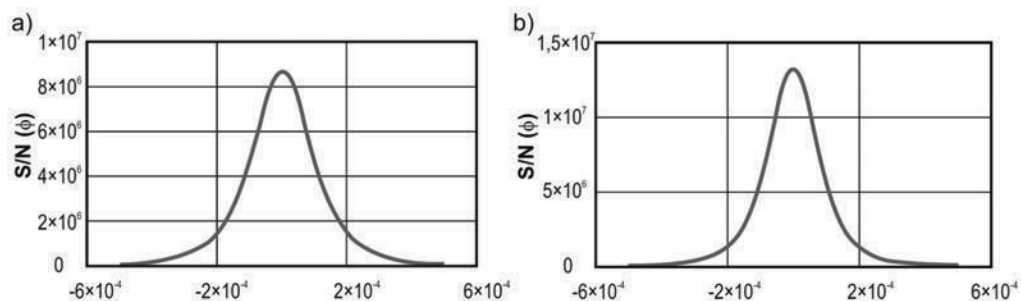
Tabela 5. Parametry zwierciadeł firmy Los Gatos Inc. (USA)

Table 5. Specification of mirrors (produced by Los-Gatos Inc. company)

Centralna długość fali	Współczynnik odbicia	Zakres pracy zwierciadeł	Średnica zwierciadła	Promień krzywizny
4500 nm	99,98%	4280–4740 nm	1"	1 m
4860 nm	99,98%	4685–5290 nm	1"	1 m

Opracowane wnęki optyczne spełniają warunek stabilności, charakteryzują się dużą dobrocią (rzędu  $10^9$ ), dużym stosunkiem mocy sygnału do mocy szumów (ponad  $0,8 \times 10^7$ ; rys. 42) oraz długim czasem życia fotonu, ponad 30 μs.





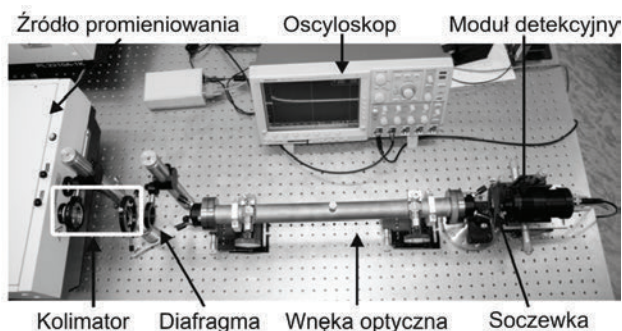
Rys. 42. Zależności wartości  $S/N$  od fazy sygnału dla wnęki optycznej w torze NO (a) i w torze  $N_2O$  (b)  
 Fig. 42. Dependence of the  $S/N$  ratio on phase signal for optical cavities of the NO (a) and  $N_2O$  (b) detection channel

Wyniki analizy parametrów wnęk optycznych jako interferometrów Fabry–Perota zamieszczono w tabeli 6.

Badania wnęk optycznych sensorów polegały na pomiarze czasów zaniku promieniowania optycznego we wnęcie wypełnionej gazem obojętnym  $N_2$  ( $\tau_0$ ) dla długości fal z zakresu 4,519–4,530  $\mu m$  (wyselekcjonowane widmo absorpcyjne  $N_2O$ ) i 5,22–5,29  $\mu m$  (wyselekcjonowane widmo absorpcyjne NO).

Tabela 6. Zestawienie parametrów wnęk optycznych  
 Table 6. Parameters of applied optical cavities

Kanał	$L$ [m]	$g_1 \times g_2$	$\Delta\nu_{FSR}$	$F$	$Q$	$\tau_f$ [s]	$S_w/N_w$
NO (5262.7 nm)	0,5	0,25	300 MHz	$9,24 \times 10^3$	$1,76 \times 10^9$	$3,08 \times 10^{-5}$	$8,65 \times 10^6$
$N_2O$ (4529.7 nm)	0,5	0,25	300 MHz	$1,14 \times 10^4$	$2,52 \times 10^9$	$3,81 \times 10^{-5}$	$1,32 \times 10^7$

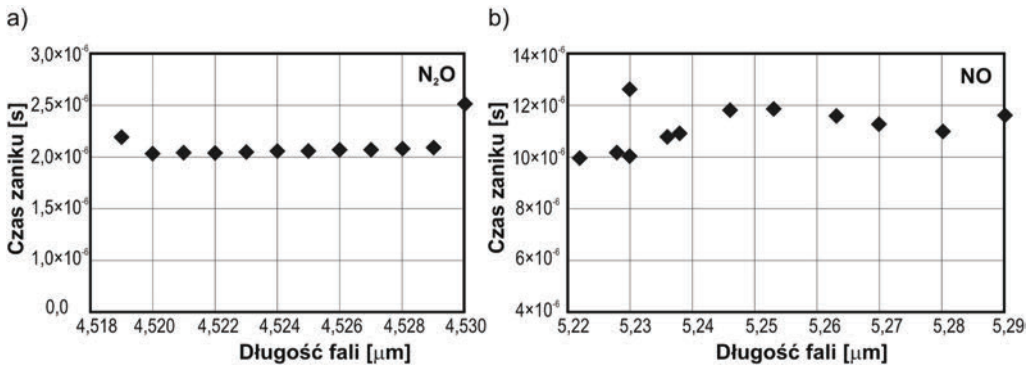


Rys. 43. Fotografia zoptymalizowanego stanowiska pomiarowego  
 Fig. 43. Photography of the optimized measurement setup

Pomiary przeprowadzono na stanowisku, którego fotografię przedstawiono na rysunku 43.

Wyniki przedstawiono na rysunku 44. Średni czas zaniku promieniowania we wnęce niewypełnionej absorberem ( $\tau_{0sr}$ ) w zakresie widma absorpcyjnego podtlenku azotu był równy  $2,05 \mu s$ , natomiast w zakresie widma absorpcyjnego tlenku azotu  $11,07 \mu s$ .

Po wprowadzeniu do wnęki  $N_2O$  i  $NO$  o koncentracji 10 ppm zaobserwowano odpowiednio 10-krotne i 3-krotne skrócenie czasu zaniku promieniowania.



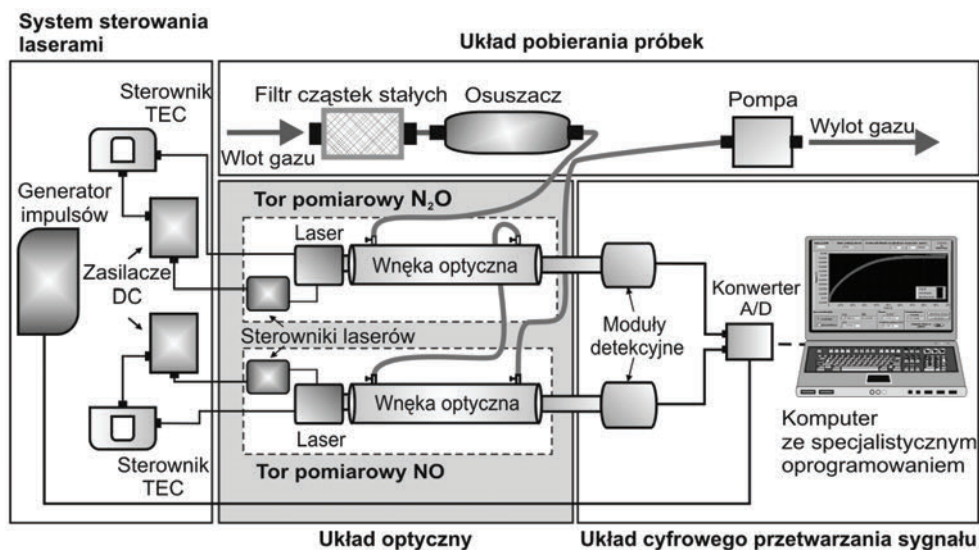
Rys. 44. Czasy zaniku promieniowania w zakresie  $4,519\text{--}4,530 \mu m$  oraz  $5,22\text{--}5,29 \mu m$   
 Fig. 44. Decay times of the optical signal in the wavelength ranges  $4,519\text{--}4,530 \mu m$  and  $5,22\text{--}5,29 \mu m$

#### 4.11. STANOWISKO LABORATORYJNE DO SPEKTROSKOPII STRAT WE WNĘCE OPTYCZNEJ W ZAKRESIE PODCZERWIENI

Na rysunku 45 przedstawiono schemat blokowy czujnika  $NO$  i  $N_2O$ . W budowie dwukanałowego czujnika można wyróżnić następujące układy: kontroli i sterowania pracą laserów, optyczny, pobierania próbek i cyfrowego przetwarzania sygnałów. Głównym zadaniem układu kontroli i sterowania pracą laserów jest stabilizacja parametrów pracy dwóch jednomodowych kwantowych laserów kaskadowych. Długość fali emitowanego przez nie promieniowania może być przestrajana przez zmianę natężenia prądu zasilania lub przez zmianę temperatury pracy lasera. Z tego względu wymagana jest bardzo dobra dokładność regulacji parametrów takich, jak napięcie zasilania, prąd oraz temperatura pracy. Do precyzyjnej stabilizacji napięcia i prądu zasilania zastosowano zasilacze typu E3634 firmy Agilent. Dodatkowo w celu stabilnej i powtarzalnej impulsowej pracy laserów zastosowano cyfrowy generator impulsowy (DG645 firmy Stanford Research Systems, Inc.) połączony ze sterownikami laserów (LDD400 firmy Alpes Lasers).

Struktury laserowe były zintegrowane z chłodziarkami termoelektrycznymi oraz układami optycznymi i umieszczone w obudowach typu XHHL. Aby uzyskać dobrą

sprawność regulacji temperatury laserów, zastosowano dodatkowe chłodzenie ich obudów.



Rys. 45. Schemat blokowy stanowiska laboratoryjnego z dwukanałowym czujnikiem  
Fig. 45. Block diagram of lab setup with two-channel sensor

W celu zapewnienia dużej czułości sensora długości fal emitowanego promieniowania laserów zostały dopasowane do wartości maksymalnych przekroju czynnego na absorpcję analizowanych tlenków azotu:  $5,2629 \mu\text{m}$  (dla  $NO$ ) i  $4,5258 \mu\text{m}$  (dla  $N_2O$ ). W każdym z torów promieniowanie lasera wprowadzane jest do wnąki pod niewielkim kątem w stosunku do jej osi optycznej. Ze względu na moc laserów QC, do osiągnięcia korzystnego stosunku mocy sygnału do mocy szumu na wyjściu wnąki optycznej, było konieczne zastosowanie we wnąkach optycznych zwierciadeł o mniejszym współczynniku odbicia. Wnąki optyczne zostały wyposażone w zwierciadła firmy VIGO SL.

Do detekcji promieniowania optycznego użyto dwa opisane w poprzednim podrozdziale moduły detekcyjne firmy VIGO System S.A. Analogowy sygnał z modułów detekcyjnych był próbkowany w przetworniku analogowo-cyfrowym (A/C). Próbkę cyfrową następnie transmitowano za pośrednictwem interfejsu USB do komputera. Zainstalowana w komputerze specjalna aplikacja dokonywała analizy danych oraz wyznaczenia koncentracji badanego gazu. Zastosowano algorytm działania układu podobny jak w przypadku sensora  $NO_2$ .

Na podstawie pomiarów czasu zaniku promieniowania we wnące niewypełnionej absorberem wyznaczono efektywny współczynnik odbicia zastosowanych zwierciadeł ze wzoru

$$R_{\text{ef}} = 1 - \frac{L}{c \cdot \tau_0} \quad (44)$$

Przeprowadzono serię pomiarów i oszacowano ich niepewność. Wartość średnia czasu zaniku sygnału  $\tau_0$  wyniosła  $0,348 \pm 0,005 \mu\text{s}$  w torze do pomiaru NO oraz  $0,234 \pm 0,008 \mu\text{s}$  w torze do pomiaru  $\text{N}_2\text{O}$ . Obliczony ze wzoru 44 średni współczynnik odbicia zwierciadeł  $R_{\text{ef}}$  wyniósł odpowiednio  $99,52 \pm 0,01\%$  dla  $5,26 \mu\text{m}$  oraz  $99,29 \pm 0,05\%$  dla  $4,53 \mu\text{m}$ . Na podstawie wyznaczonych współczynników odbicia obliczono parametry wnęk optycznych, które zestawiono w tabeli 7.

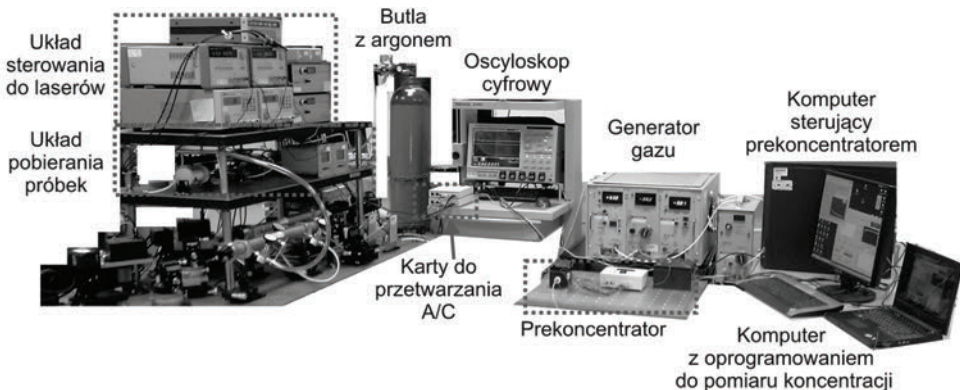
Osiągnięto następujące czułości i niepewności pomiaru koncentracji:  $74 \pm 2 \text{ ppb}$  dla kanału NO oraz  $47 \pm 3 \text{ ppb}$  dla kanału  $\text{N}_2\text{O}$ .

Tabela 7. Zestawienie parametrów wnęk optycznych ze zwierciadłami VIGO SL  
Table 7. Parameters of the optical cavities with VIGO SL mirrors

Kanał	$L$ [m]	$g_1 \times g_2$	$\Delta\nu_{\text{FSR}}$	$F$	$Q$	$\tau_f$ [s]	$S_w/N_w$
NO	0,5	0,25	300 MHz	655	$1,25 \times 10^8$	$2,19 \times 10^{-6}$	$4,37 \times 10^4$
$\text{N}_2\text{O}$	0,5	0,25	300 MHz	455	$10^8$	$1,52 \times 10^{-6}$	$2,11 \times 10^4$

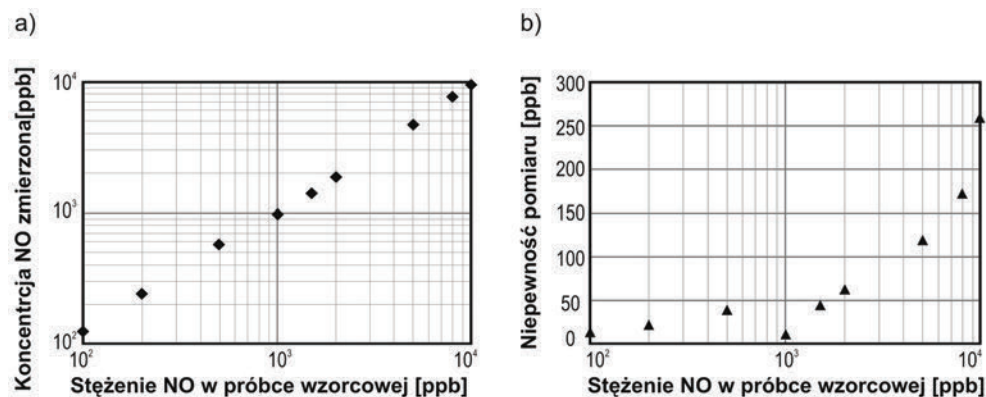
Aby zapewnić poprawną pracę obu kanałów opracowanego czujnika, konieczne było przeprowadzenie pomiarów koncentracji wzorcowych próbek gazu. Podobnie jak w przypadku sensora  $\text{NO}_2$ , wykorzystano tutaj system do generacji gazów typu 491M firmy Kin-Tek.

Fotografię stanowiska pomiarowego przedstawiono na rysunku 46. W jego skład wchodzi: opisany czujnik NO i  $\text{N}_2\text{O}$ , prekoncentrator (z komputerem sterującym), generator gazu, butla z argonem (gaz obojętny) oraz oscyloskop cyfrowy, który służył do obserwacji przebiegów napięć na wyjściu modułów detekcyjnych.



Rys. 46. Fotografia stanowiska pomiarowego  
Fig. 46. Photography of measurement setup

Na rysunku 47 przedstawiono wyniki pomiarów próbek gazu o zadanych koncentracjach NO lub N<sub>2</sub>O (dalej nazywanych wzorcowymi lub referencyjnymi) uzyskiwanych za pomocą generatora gazu. Wartości tych koncentracji zmieniano w zakresie od 100 ppb (wartość bliska granicy detekcji opracowanego czujnika) do 10 ppm (maksymalna możliwa do uzyskania koncentracja w danym układzie).

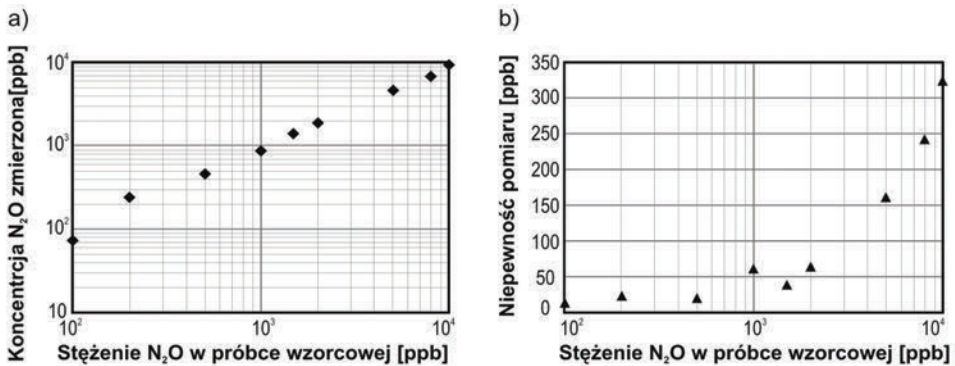


Rys. 47. Wyniki pomiaru koncentracji tlenu azotu (a),  
niepewność pomiaru koncentracji tlenu azotu (b)

Fig. 47. Measurements outcomes of NO concentration(a) and their uncertainties (b)

Na rysunku 47a przedstawiono wyniki pomiaru koncentracji tlenu azotu we wzorcowych próbkach gazu po przeprowadzeniu procesu kalibracji. Niepewność względna pomiaru koncentracji w tym kanale nie przekroczyła 12%. Wraz ze wzrostem koncentracji NO w próbkach wzorcowych obserwowano wzrost różnicy pomiędzy wartościami mierzonymi oraz referencyjnymi, co przełożyło się na wzrost niepewności pomiaru koncentracji (rys. 47b). Było to spowodowane tym, że dla większych koncentracji przepływ gazu przez czujnik był mniejszy. Wynikało to z zasady działania zastosowanego generatora gazu. Większy przepływ występował dla mniejszych koncentracji, ponieważ wymagały one większej ilości gazu obojętnego do rozcieńczenia. Z przeprowadzonych badań wynika, że przepływ ma istotny wpływ na wymagany czas pomiaru koncentracji tlenu azotu. Na przykład dla przepływu, wynoszącego 0,25 l/min, czas oczekiwania na poprawny wynik pomiaru wynosił ponad 4 minuty, podczas gdy dla przepływu wynoszącego 2 l/min, czas ten wyniósł 30 s. Można zatem stwierdzić, że czas pomiaru uwarunkowany jest objętością próbki gazu, która powinna wynosić minimum 1 l.

W podobny sposób przebiegały badania drugiego kanału opracowanego czujnika, przeznaczonego do pomiaru koncentracji podtlenku azotu. Wyniki pomiarów koncentracji tlenu azotu we wzorcowych próbkach gazu, po przeprowadzeniu procesu kalibracji, przedstawiono na rysunku 48. W tym przypadku niepewność względna pomiaru koncentracji podtlenku azotu nie przekroczyła 13%.



Rys. 48. Wyniki pomiaru koncentracji podtlenku azotu (a),  
niepewność pomiaru koncentracji podtlenku azotu (b)  
Fig. 48. Results of  $N_2O$  concentration measurements (a) and their uncertainty (b)

Do czujnika dostarczano próbkę gazu o koncentracji tlenu azotu wynoszącej 10 ppm. Podczas przepływu (0,25 l/min) czas oczekiwania na poprawny wynik pomiaru wynosił około 90 s, natomiast gdy wynosi 1 l/min, czas ten wynosi 25 s. W tym przypadku minimalna objętość gazu wyniosła 0,4 litra.

## 5. PODSUMOWANIE

Współczesna spektroskopia laserowa w połączeniu z optoelektroniką umożliwia opracowanie wysokoczułych sensorów służących do poznania zjawisk zachodzących na poziomie atomów i cząsteczek. Jej rozwój jest możliwy dzięki nowym technologiom laserowym, wysokoczułym układom detekcyjnym oraz zaawansowanym technikom przetwarzania sygnałów.

Sensory tego rodzaju znajdują zastosowanie w walce z zagrożeniami terrorystycznymi i ekologicznymi. Umożliwiają one sprawne wykrywanie niebezpiecznych (np. toksycznych) związków chemicznych, śladów materiałów wybuchowych i innych niepożądanych substancji. Sensory takie ważne są również w ujęciu medycznym, gdyż umożliwiają wykrywanie markerów chorobowych we wczesnym stadium rozwoju choroby. Parametry sensorów, a w szczególności ich czułość, zależą od rodzaju wykrywanych substancji chemicznych.

W rozdziale tym opisano głównie metody detekcji tlenków azotu ( $NO_x$ ). Ich lokalne stężenia zależą od obecności źródeł zarówno antropogenicznych czy naturalnych (tzw. emisja), jak i warunków meteorologicznych, które decydują o transporcie tlenków azotu i ich przetwarzaniu w atmosferze. Reakcje tlenków azotu z wodą prowadzą do powstawania kwaśnych deszczów, a także należą do charakterystycznych związków

ków rozkładu materiałów wybuchowych. Istnieje wiele metod wykrywania tlenków azotu, które generalnie można podzielić na dwie zasadnicze grupy: metody zdalne i miejscowe. Rozdział poświęcony jest głównie czujnikom wykorzystującym różne techniki spektroskopii absorpcyjnej. Opisano metody poprawy czułości tego rodzaju czujników oraz przedstawiono opis prac własnych.

## LITERATURA

- [1] Amann A., Ligor M., Ligor T., Bajtarevic A., Ager C., Pienz M., Denz H., Fiegl M., Hilbe W., Weiss W., Lukas P., Jamnig H., Hackl M., Haidenberger A., Sponring A., Filipiak W., Miekisch W., Schubert J., Troppmair J., Buszewski B., *Analysis of exhaled breath for screening of lung cancer patients*, MEMO, Magazine of European Medical Oncology, 3, 106–112, 2010.
- [2] Based on US Standard Atmosphere 1976 from HITRAN database.
- [3] Bielecki Z., Janucki J., Kawalec A., Mikołajczyk J., Pałka N., Pasternak M., Pustelny T., Stacewicz T., Wojtas J., *Sensors and systems for detection of explosive devices – an overview*, Metrol. Meas. Syst., Vol. XIX, No. 1, 3–28, 2012.
- [4] Bielecki Z., Wojtas J., Mikołajczyk J., Ładny J., *Zastosowanie technik spektroskopowych w medycynie, ochronie środowiska i bezpieczeństwie państwa*, [w:] *Metrologia w medycynie, wybrane zagadnienia*, A. Michalski (red.), Wydawnictwo WAT, 35–57, 2011.
- [5] Bielecki Z., Stacewicz T., Wojtas J., Nowakowski M., *Sposób i urządzenie do pomiaru koncentracji gazu*, Zgłoszenie patentowe nr P.394439 z dnia 05.04.2011.
- [6] Busch K.W., Busch M.A., *Cavity-Ringdown Spectroscopy*, ACS Symposium series, American Chemical Society, Washington, DC, 1999.
- [7] Buszewski B., Ulanowska A., Ligor T., Denderz N., Amann A., *Analysis of exhaled breath from smokers, passive smokers and non-smokers by solid-phase micro-extraction gas chromatography/mass spectrometry*, Biomed. Chromatogr., 23, 551–556, 2009.
- [8] Chudzynski S., Czyzewski A., Skubiszak W., Stacewicz T., Stelmaszczyk K., Szymanski A., Ernst K., *Practical solutions for calibration of DIAL system*, Optica Applicata, 29, 477–485, 1999.
- [9] Cremers D.A., Radziemski L.J., *Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy*, John Wiley & Sons, 2006.
- [10] Czyzewski A., Chudzynski S., Ernst K., Karasiński G., Kilianek Ł., Pietruczuk A., Skubiszak W., Stacewicz T., Stelmaszczyk K., Koch B., Rairoux P., *Cavity Ring-Down Spectrography*, Optics Commun., 191, 271–275, 2001.
- [11] Engeln R., Berden G., Peeters R., Meijer G., *Cavity enhanced absorption and cavity enhanced magnetic rotation spectroscopy*, Review of Scientific Instruments, Vol. 69, No. 11, 3763–3769, November 1998.
- [12] Gawron W., Bielecki Z., Wojtas J., Stanaszek D., Łach J., Fimiaryz M., *Infrared detection module for optoelectronic sensors*, Proc. SPIE 8353, 83532U, 2012.
- [13] Gibson B.A., Vallance C., *Fiber-loop Cavity Ring-down Spectroscopy*, Boomerang Transactions, 1 (1), 26–31, 2006.
- [14] Godish T., *Air Quality*, Lewis Publishers, 2004.
- [15] Gottfried J.L., De Lucia Jr. F.C., Munson C.A., Miziolek A.W., *Laser-induced breakdown spectroscopy for detection of explosives residues: a review of recent advances, challenges, and future prospects*, Anal. Bioanal. Chem., 395, 283–300, 2009.
- [16] Grossel A., Ze'ninari V., Joly L., Parvitte B., Durry G., Courtois D., *Photoacoustic detection of nitric oxide with a Helmholtz resonant quantum cascade laser sensor*, Infrared Physics & Technology, 51, 95–101, 2007.

- [17] Grouiez B., Parvitte B., Joly L., Courtois D., Zeninari V., *Comparison of a quantum cascade laser used in both cw and pulsed modes*, Application to the study of SO<sub>2</sub> lines around 9  $\mu\text{m}$ , Appl. Phys. B 90, 177–186, 2008.
- [18] He Y., Orr B.J., *Ringdown and cavity-enhanced absorption spectroscopy using a continuous-wave tunable diode laser and a rapidly swept optical cavity*, Chemical Physics Letters, 319, 131–137, 2000.
- [19] Herbelin J.M., McKay, J.A., Kwok M.A., Ueunten R.H., Urevig D.S., Spencer D.J., Benard D.J., *Sensitive measurement of photon lifetime and true reflectances in optical cavity by a phase-shift method*, Applied Optics, Vol. 19, Issue 1, 144–147, 1980.
- [20] Infineon Technologies, www.infineon.com
- [21] Karasinski G., Kardas A.E., Markowicz K., Malinowski S.P., Stacewicz T., Stelmaszczyk K., Chudzynski S., Skubiszak W., Posyniak M., Jagodnicka A.K., Hochhertz C., Woeste L., *LIDAR investigation of properties of atmospheric aerosol*, The European Physical Journal Special Topics, 144, 129–138, 2007.
- [22] Kosterev A.A., Malinovsky A.A., Tittel F.K., Gmachl C., Capasso F., Sivco D.L., Baillargeon J.N., Hutchinson A.L., Cho A.Y., *Cavity ringdown spectroscopic detection of nitric oxide with a continuous-wave quantum-cascade laser*, Appl. Opt., 40, 5522–5529, 2001.
- [23] Manne J., Jäger W., Tulip J., *Sensitive detection of ammonia and ethylene with a pulsed quantum cascade laser using intra and interpulse spectroscopic techniques*, Appl. Phys., B, 94, 337–344, 2009.
- [24] Mierczyk Z., Zygmunt M., Gawlikowski A., Gietka A., Kaszczuk M., Knysak P., Młodzianko A., Muzal M., Piotrowski W., Wojtanowski J., *Two-wavelength backscattering lidar for stand off detection of aerosols*, Lidar Technologies, Techniques, and Measurements for Atmospheric Remote Sensing IV. Singh, Upendra N. (ed.), Pappalardo, Gelsomina, Proceedings of the SPIE, Vol. 7111, 71110R-71110R-9, 2008.
- [25] Moore D.S., *Recent Advances in Trace Explosives Detection Instrumentation*, Sens. Imaging, 8, 9–38, 2007.
- [26] Namjou K., Cai S., Whittaker E.A., Faist J., Gmachl C., Capasso F., Sivco D.L., Cho A.Y., *Sensitive absorption spectroscopy with a room-temperature distributed-feedback quantum-cascade laser*, Optics Letters, V 23, 3, 219–221, 1998.
- [27] Nelson D.D., Shorter J.H., McManus J.B., Zahniser M.S., *Sub-part-per-billion detection of nitric oxide in air using a thermoelectrically cooled mid-infrared quantum cascade laser spectrometer*, Appl. Phys., B 75, 343–350, 2002.
- [28] O’Keefe A., *Integrated cavity output analysis of ultra-weak absorption*, Chemical Physics Letters, 293 (5–6), 331–336, 1998.
- [29] O’Keefe A., Deacon D.A.G., *Cavity ring-down optical spectrometer for absorption measurements using pulsed laser sources*, Review of Scientific Instruments, No. 59, 2544–2554, 1988.
- [30] Paldus B.A., Harb C.C., Spence T.G., Zare R.N., Gmachl C., Capasso F., Sivco D.L., Baillargeon J.N., Hutchinson A.L., Cho A.Y., *Cavity ringdown spectroscopy using mid-infrared quantum-cascade lasers*, Opt. Lett., 25, 666, 2000.
- [31] Pipino A.C.R., *Ultrasensitive surface spectroscopy with a miniature optical resonator*, Physical Review Letters, Vol. 83, No. 15, 1999.
- [32] Perlin P., Holc K., Sarzyński M., Scheibenzuber W., Marona Ł., Czernecki R., Leszczyński M., Bockowski M., Grzegory I., Porowski S., Cywiński G., Firek P., Szmidi J., Schwarz U., Suski T., *Application of a composite plasmonic substrate for the suppression of an electromagnetic mode leakage in InGaN laser diodes*, Appl. Phys. Lett., 95, 261108, 2009.
- [33] Rutecka B., Wojtas J., Bielecki Z., Mikołajczyk J., Nowakowski M., *Application of an optical parametric generator to cavity enhanced experiment*, Proc. of SPIE, Vol. 7745, 77450I-1–77450I-8, 2010.
- [34] Saleh B.E.A., Teich M.C., *Fundamentals of Photonics*, John Wiley & Sons, 2nd Edition, 2007.



- [35] Schmid T., *Photoacoustic spectroscopy for proces analysis*, Anal. Bioanal. Chem., 384, 1071–1086, 2006.
- [36] Shimadzu Scientific Instruments, GC Analysis of Greenhouse Gasses, Available from: [http://www.mandel.ca/application\\_notes/SSI\\_GC\\_Green\\_Gasses\\_Lo.pdf](http://www.mandel.ca/application_notes/SSI_GC_Green_Gasses_Lo.pdf)
- [37] Starecki T., *Wybrane aspekty optymalizacji przyrządów fotoakustycznych*, Wyd. BTC, Legionowo 2009.
- [38] Stacewicz T., Wojtas J., Bielecki Z., Nowakowski M., Mikołajczyk J., Mędrzycki R., Rutecka B., *Cavity Ring Down Spectroscopy: detection of trace amounts of matter*, Opto-Electron. Rev., No. 20, 34–41, 2012.
- [39] Teledyne Analytical Instruments, Operating instructions for model 3500 series, <http://www.teledyne-ai.com/manuals/Model%203500%20Manual%20Rev1-TomC.pdf>
- [40] Tittel F.K., Bakhirkin Y., Kosterev A.A., Wsocki G., *Recent Advances in Trace Gas Detection Using Quantum and Interband Cascade Lasers*, Review of Laser Engineering, Vol. 34, No. 4, 275–282, 2006.
- [41] Wang C., Sahay P., *Breath analysis using laser spectroscopic techniques: breath biomarkers, special fingerprints, and detection limit*, Sensors, 9, 8230–8262, 2009.
- [42] VIGO System S.A., [http://www.vigo.com.pl/index.php/en/main\\_menu/strona\\_glowna](http://www.vigo.com.pl/index.php/en/main_menu/strona_glowna)
- [43] Wojtas J., Czyżewski A., Stacewicz T., Bielecki Z., Mikołajczyk J., *Cavity enhanced absorption spectroscopy for NO<sub>2</sub> detection*, Proc. SPIE, Vol. 5954, 174–178, 2005.
- [44] Wojtas J., Czyżewski A., Stacewicz T., Bielecki Z., *Sensitive detection of NO<sub>2</sub> with Cavity Enhanced Spectroscopy*, Optica Applicata, Vol. 36, No. 4, 461–467, 2006.
- [45] Wojtas J., Mędrzycki R., Rutecka B., Mikołajczyk J., Nowakowski M., Szabra D., Gutowska M., Stacewicz T., Bielecki Z., *NO and N<sub>2</sub>O detection employing cavity enhanced technique*, Proc. SPIE, 8374, 837414, 2012.
- [46] Wojtas J., *Detection of optical radiation in NO<sub>x</sub> optoelectronic sensors employing cavity enhanced absorption spectroscopy, chapter in Optoelectronics – Devices and Applications*, Intech. Publishers, Vienna, Austria, 147–172, 2011.
- [47] Wojtas J., Bielecki Z., Stacewicz T., Mikołajczyk J., Nowakowski M., *Ultrasensitive laser spectroscopy for breath analysis*, Invited Paper in Opto-Electron. Rev., 20, No. 1, 77–90, 2012.

## LASER ABSORPTION SPECTROSCOPY

In the chapter some gas detection methods that base on light absorption are described. They belong to the most popular methods of matter investigation. Absorption spectroscopy is a simple, non-invasive, in situ technique for obtaining information about different species. However, the sensitivity of traditional spectroscopic methods is limited to the range of  $10^{-4}$ – $10^{-5}$  cm<sup>-1</sup>. Thus the sensitivity improvement techniques, which provide to increase the sensitivity of about 3–5 orders of magnitude or even higher were shown as well. Applications of Cavity Enhanced Absorption Spectroscopy (CEAS) for trace mater detection were focused on. There nitrogen dioxide, nitric oxide and nitrous oxide sensors were described in detail. The sensors sensitivity reaches level of single ppb and they can be applied in monitoring of atmospheric purity, human breath analysis, as well as for detection of explosives.



*pomiary wielkości fizycznych, pomiary pośrednie,  
zagadnienie wprost, problem odwrotny, dyfrakcja światła,  
analiza i synteza periodycznych struktur światłowodowych,  
światłowodowe siatki Bragga, wykrywanie defektów materiałowych*

Piotr KISAŁA\*

## **METROLOGICZNE UWARUNKOWANIA POMIARÓW POŚREDNICH WIELKOŚCI FIZYCZNYCH WYKORZYSTUJĄCYCH METODY ANALIZY I SYNTEZY ŚWIATŁOWODOWYCH SIATEK DYFRAKCYJNYCH**

Niniejszy rozdział dotyczy zagadnień pośrednich pomiarów wielkości fizycznych oraz metody wykrywania defektów materiałowych z wykorzystaniem światłowodowych struktur periodycznych oraz metod modelowania dyfrakcji światła. Przedstawiono metody analizy i syntezy światłowodowych siatek Bragga oparte na opracowanych algorytmach iteracyjnych, wykorzystując programowanie obiektowe. Przeanalizowano uwarunkowania metrologiczne metod wykonanych z wykorzystaniem pomiarów pośrednich. W pierwszej części rozdziału zaprezentowano zasadę działania i podstawy teoretyczne struktur światłowodowych o periodycznych zmianach współczynnika załamania światła. W dalszej części opracowania omówiono metodologię pomiarów pośrednich wykorzystujących światłowodowe struktury periodyczne. W tej części zdefiniowano również macierzowe równania przetwarzania proponowanych układów czujników optoelektronicznych. Ostatnia część zawiera wyniki symulacji i obliczeń numerycznych charakterystyk spektralnych czujników pracujących w zaprojektowanych układach pomiarowych. Sformułowano problem odwrotny wyznaczenia wielkości fizycznych za pomocą pomiaru wybranych parametrów czujników ze światłowodowymi siatkami dyfrakcyjnymi.

### **1. WSTĘP**

Współczesne czasy stwarzają stale rosnące wymagania odnośnie do systemów pomiarowych. Sprostanie im staje się możliwe dzięki rozwojowi nowych metod pomiarowych, wykorzystujących m.in. metody modelowania i techniki programowania. Dynamiczny rozwój optoelektroniki i fotoniki przyczynił się do powstania nowych przetworników pomiarowych i koncepcji metod pomiarowych wielu wielkości fizycz-

---

\* Instytut Elektroniki i Technik Informatycznych, Zakład Optoelektroniki i Sieci Teleinformatycznych, Politechnika Lubelska, ul. Nadbystrzycka 38A, 20-618 Lublin.

nych. Ważnym elementem tego rozwoju są prace łączące modelowanie matematyczne z nowoczesnymi narzędziami modelowania komputerowego. Powstające układy pomiarowe wymagają opracowania modeli nowych przetworników pomiarowych.

Popyt na coraz to dokładniejsze, czulsze i szybsze oraz odporne na zakłócenia przez czynniki zewnętrzne układy i systemy pomiarowe wpływa m.in. na rozwój optoelektroniki – w tym badań poświęconych tematyce projektowania odpowiednich elementów, układów i metod procesu poznawczego z wykorzystaniem czujników optoelektronicznych. Czujniki optoelektroniczne stanowią przedmiot badań i rozwoju m.in.: pomiaru przyspieszenia [1], kąta obrotu [2], pola elektrycznego i magnetycznego [3], ciśnienia [4], temperatury [5], fali akustycznej [6], wibracji [7], wydłużenia [8], wilgotności [9], lepkości [10], składu substancji [11], jak również sensorowych systemów monitoringu środowiska [12].

W fotonice przełomowe znaczenie miało odkrycie efektu fotoczułości włókien ze szkła kwarcowego domieszkowanych dwutlenkiem germanu. Domieszka ta tworzy w szkłe kwarcowym dodatkową sieć wiązań chemicznych. Naświetlanie domieszkowanego włókna światłem UV powoduje zerwanie wiązań między jonami domieszki i zmianę współczynnika załamania światła w szkłe. Zastosowanie światła laserowego długości fali 248 nm do oświetlenia fotoczułego włókna światłowodowego umożliwiło wytworzenie w światłowodzie okresowych zmian współczynnika załamania światła [13]. Takie periodyczne struktury światłowodowe mają właściwości zmiany rozkładu widmowego propagującego przez nie światła. Wpływ światłowodu na propagującą falę elektromagnetyczną zależy od budowy i właściwości struktury periodycznej. Znaczenie ma w tym przypadku zarówno wartość okresu jej zmian, jak również charakter jego zmienności. Niniejsze opracowanie obejmuje zagadnienia propagacji światła w większości stosowanych obecnie struktur światłowodowych z modulowanym współczynnikiem załamania światła.

W niniejszym opracowaniu przeanalizowano światłowodowe siatki Bragga (zarówno równomierne, jak i chirpowe), struktury periodyczne długookresowe oraz światłowodowe siatki dyfrakcyjne o skośnej płaszczyźnie modulacji współczynnika załamania światła. Omówiono również metody modelowania matematycznego takich struktur i przedstawiono wyniki obliczeń numerycznych modeli przykładowych czujników światłowodowych.

## 2. DYFRAKCJA ŚWIATŁA W PERIODYCZNYCH STRUKTURACH ŚWIATŁOWODOWYCH

### 2.1. SIATKI BRAGGA

Zjawisko dyfrakcji światła polega na jego ugięciu kierunku jego rozchodzenia, gdy natrafia na przeszkody wielkości rzędu długości fali światła. Następuje wówczas wy-

raźne odchylenie od prostoliniowości rozchodzenia się światła. Przeszkody, o których mowa, mogą występować jako szczeliny, płaszczyzny lub niejednorodności materiału, np. zmiany współczynnika załamania światła w szkłe kwarcowym. W przypadku gdy dyfrakcja następuje w układzie wielu szczelin, rozmieszczonych w równych odstępach, tworzy się układ tzw. siatki dyfrakcyjnej [14]. Gdy na taką siatkę skierowane zostanie światło chromatyczne, zaobserwować można obraz dyfrakcyjny. Powstaną prążki dyfrakcyjne odpowiadające kątom ugięcia, dla których odpowiadające sobie promienie pochodzące z sąsiednich szczelin, zostaną wzmacnione. Jeżeli różnica dróg poszczególnych promieni jest równa całkowitej wielokrotności długości fali, nastąpi ich wzmacnienie.

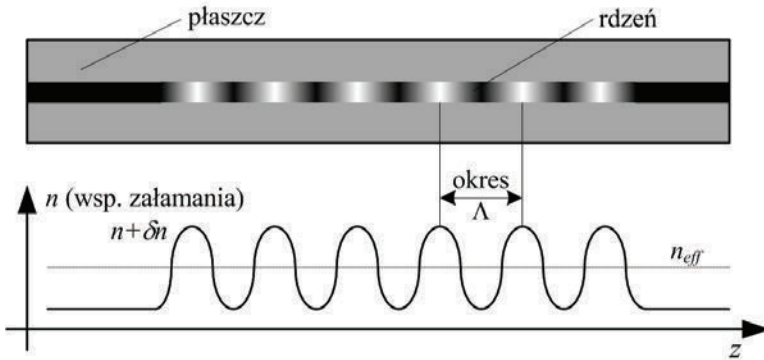
Analogiczna zasada zachodzi w światłowodowych siatkach dyfrakcyjnych. W niniejszym opracowaniu omówiono trzy typy takich siatek. Są to światłowodowe siatki Bragga – FBG (ang. *Fiber Bragg Gratings*), długookresowe światłowodowe siatki dyfrakcyjne – LPG, (ang. *Long Period Gratings*) oraz siatki dyfrakcyjne o ukośnych płaszczyznach zmian współczynnika załamania światła, tzw. skośne siatki dyfrakcyjne – TFBG (ang. *Tilted Fiber Bragg Gratings*). Ujęcie teorii ugięcia promieni X (promieni Röntgena) zawdzięczamy W.H. Braggowi [15]. Zamiast rozpatrywać wiązkę przechodzącą przez kryształ, bierze on pod uwagę wiązkę ulegającą odbiciu na jednej z płaszczyzn siatkowych. Nie chodzi tu jednak o odbicie zwykle, lecz właściwie o ugięcie fal padających na płaszczyznę siatkową pod tym samym kątem, pod którym padły, przy czym ugięcie to jest selektywne. Oznacza to, że odbiciu ulegają tylko pewne określone długości fali. W falach świetlnych możemy zaobserwować zjawisko selektywnego odbicia podczas oglądania brył niektórych minerałów, wewnętrznej powierzchni muszli, piór pawich czy współczesnych nośników zapisu danych – płyt CD. Powierzchnie takie mienia się różnymi barwami, zależnie od kierunku, w którym na nie patrzymy. W tym przypadku mamy do czynienia z rozłożeniem w równych odstępach (porównywalnych z długością fali światła) płaszczyzn rozpraszających światło.

Podobna zasada działania kieruje ugięciem światła na światłowodowych siatkach dyfrakcyjnych. W światłowodowych siatkach Bragga odpowiednikiem płaszczyzn krystalicznych są niejednorodności w rdzeniu włókna światłowodowego przejawiające się w postaci zmian współczynnika załamania światła. Selektywne odbicie światła następuje w takiej siatce wskutek jego dyfrakcji na poszczególnych niejednorodnościach współczynnika refrakcji. Aby przeanalizować propagację światła we włóknie światłowodowym z siatką dyfrakcyjną, konieczne jest rozwiązanie równań Maxwella oraz zastosowanie teorii modów sprzężonych [16]. Dwa mody o pokrywających się polach mogą wymieniać pomiędzy sobą energię. Warunkiem jest w tym przypadku równość stałych propagacji lub obecność periodycznego zaburzenia. Takim zaburzeniem jest wytworzona zmiana – modulacja – współczynnika załamania w rdzeniu światłowodu. Fala padająca na granicę występującą między obszarami o różnych współczynnikach załamania ulega częściowemu rozproszeniu. Po spełnieniu pewnych

warunków, konstruktywne odbicie światła występuje tylko w przypadku sygnałów będących w fazie i pochodzących od kolejnych zaburzeń współczynnika. Zjawisko odbicia Bragga w siatce światłowodowej zachodzi tylko dla określonej długości fali światła, którą oznacza się najczęściej jako  $\lambda_B$ , a wyraża się następującą zależnością:

$$\lambda_B = 2n_{\text{eff}}\Lambda \quad (1)$$

gdzie  $\Lambda$  jest odległością pomiędzy poszczególnymi zaburzeniami współczynnika załamania światła i jest określana jako okres siatki dyfrakcyjnej,  $n_{\text{eff}}$  jest efektywnym współczynnikiem załamania światła w siatce. Typowe wartości okresu światłowodowych siatek dyfrakcyjnych Bragga są rzędu 530 nm, efektywny współczynnika załamania światła wynosi  $n_{\text{eff}} \approx 1,45$ . Podane wartości okresu siatki i efektywnego współczynnika załamania wytwarzają siatki długości fali Bragga mieszczące się w pierwszym, drugim i trzecim oknie transmisyjnym. Na rysunku 1 przedstawiona została struktura światłowodowej dyfrakcyjnej siatki Bragga oraz modulacja współczynnika załamania światła.



Rys. 1. Dyfrakcyjna światłowodowa siatka Bragga (góra)  
oraz modulacja współczynnika załamania światła (dół)

Fig. 1. Diffraction fiber Bragg grating (top) and modulation of light refraction index (bottom)

Na rysunku zaznaczono również wielkość charakteryzującą zakres zmian współczynnika załamania światła, którą oznaczoną jako  $\delta n$  oraz oś  $z$ , wzdłuż której zapisana jest siatka.

Dla siatki przedstawionej na rysunku 1 można zdefiniować składową poprzeczną pola elektrycznego. Do tego celu wykorzystuje się teorię modów sprzężonych. Pole elektryczne będzie superpozycją modów propagujących poza siatką. Kolejne rzędy modów oznaczono indeksem  $m$ , co ułatwia zapisanie zależności pola elektrycznego od współrzędnych przestrzennych i czasu w postaci:

$$E^T(x, y, z, t) = \sum_m [A_m(z) \exp(i\beta_m z) + B_m(z) \exp(-i\beta_m z)] e_m^T(x, y) \exp(-i\omega t) \quad (2)$$

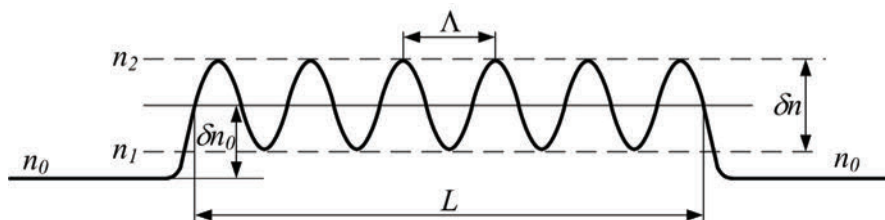
gdzie współczynniki  $A_m(z)$  oraz  $B_m(z)$  oznaczają amplitudy  $m$ -tego modu poruszającego się w kierunku dodatnim (od lewej do prawej strony włókna)  $+z$  oraz ujemnym  $-z$  (od prawej do lewej strony włókna światłowodowego),  $\beta_m$  jest stałą propagacji  $m$ -tego modu, wyrażającą się zależnością

$$\beta = (2\pi / \lambda)n_{\text{eff}} \quad (3)$$

Pole modu poprzecznego oznaczono jako  $e_m^T(x, y)$ . Odpowiada ono modom na granicy rdzenia i modom radiacyjnym oraz płaszczowym. Współczynnik załamania światła w siatce jest wielkością zależną od pozycji wzdłuż osi  $z$ , można zatem zapisać

$$n(x, y, z) = n(z) = n_0 + \delta n_0 + \delta n(z) \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}z + \varphi(z)\right) \quad (4)$$

gdzie  $n_0$  jest współczynnikiem załamania rdzenia włókna bez siatki,  $\delta n_0$  oznacza wartość średnią modulacji współczynnika załamania światła,  $\delta n(z)$  jest amplitudą modulacji współczynnika załamania,  $\varphi(z)$  jest fazą współczynnika załamania światła. Wielkości zawarte w  $z$  zależności (4) przedstawiono na rysunku 2.



Rys. 2. Wielkości charakterystyczne modulacji współczynnika załamania światła w światłowodowej siatce dyfrakcyjnej

Fig. 2. Characteristic values of the refractive index modulation in fiber diffraction grating

Na rysunku 2 przedstawiono również minimalną ( $n_1$ ) i maksymalną ( $n_2$ ) wartość współczynnika załamania światła w siatce. Dla odcinka światłowodu bez siatki dyfrakcyjnej mody są ortogonalne względem siebie i nie występują mechanizmy powodujące wymianę energii pomiędzy modami. Pojawienie się periodycznych perturbacji dielektrycznych w postaci siatki dyfrakcyjnej powoduje sprzężenie modów. Amplitudy  $m$ -tego modu w światłowodowej siatce dyfrakcyjnej można wyrazić w zależności od pozycji wzdłuż osi  $z$  za pomocą równań (5) i (6)

$$\begin{aligned} \frac{dA_m}{dz} = & i \sum_q A_q (C_{qm}^T + C_{qm}^L) \exp[i(\beta_q - \beta_m)z] + \\ & + i \sum_q B_q (C_{qm}^T - C_{qm}^L) \exp[-i(\beta_q + \beta_m)z] \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{dB_m}{dz} = & -i \sum_q A_q (C_{qm}^T - C_{qm}^L) \exp[i(\beta_q + \beta_m)z] - \\ & -i \sum_q B_q (C_{qm}^T + C_{qm}^L) \exp[-i(\beta_q - \beta_m)z] \end{aligned} \quad (6)$$

W równaniach (5) i (6) wielkość  $C_{qm}^T(z)$  oznacza współczynnik sprzężenia poprzecznego pomiędzy modami  $m$ -tym i  $q$ -tym, przy czym jest on opisany równaniem (7)

$$C_{qm}^T(z) = \frac{\omega}{4} \iint_{\infty} \Delta \varepsilon(x, y, z) e_q^T(x, y) \cdot e_m^{T*}(x, y) dx dy \quad (7)$$

W równaniu (7) wielkość  $\Delta \varepsilon(x, y, z)$  oznacza zmiany przenikalności elektrycznej, które z kolei wyrażają się równaniem (8):

$$\Delta \varepsilon(x, y, z) = 2n \delta n \quad (8)$$

Współczynnik sprzężenia podłużnego  $C_{qm}^L(z)$  zdefiniowany jest w sposób podobny do podanego współczynnika sprzężenia poprzecznego  $C_{qm}^T(z)$ , jednakże dla modów włóknowych  $C_{qm}^L(z)$  jest zazwyczaj zaniedbywane, gdyż zachodzi następująca nierówność:  $C_{qm}^L(z) \ll C_{qm}^T(z)$ . W większości rozpatrywanych włókien światłowodowych zmiany współczynnika załamania światła  $\delta n(x, y, z)$ , wywołane światłem UV, są w przybliżeniu jednolite w kierunku poprzecznym do rdzenia światłowodu. Straty te są zaniedbywane poza rdzeniem włókna. Zmiany współczynnika załamania w rdzeniu można opisać za pomocą równania analogicznego do zależności (4) przez zastąpienie wielkości  $\overline{\delta n}_{\text{eff}}(z)$  przez  $\overline{\delta n}_{\text{rdzenia}}(z)$ . W ten sposób można zdefiniować dwie nowe wielkości, współczynnik sprzężenia wewnętrznego  $\varsigma_{qm}(z)$  – równanie (9) oraz współczynnik sprzężenia poprzecznego  $\kappa_{qm}(z)$  – równanie (10). Równania (9) i (10) zapiszemy w następującej postaci:

$$\varsigma_{qm}(z) = \omega \frac{n_{co}}{2} \overline{\delta n}_{\text{rdzenia}}(z) \iint_{\text{rdzeń}} e_q^T(x, y) \cdot e_m^{T*}(x, y) dx dy \quad (9)$$

$$\kappa_{qm}(z) = \frac{S}{2} \varsigma_{qm}(z) \quad (10)$$

gdzie  $\varsigma_{qm}(z)$  jest składową stałą współczynnika sprzężenia, natomiast  $\kappa_{qm}(z)$  jest jego składową zmienną. Całkowity współczynnik sprzężenia może być zapisany jako

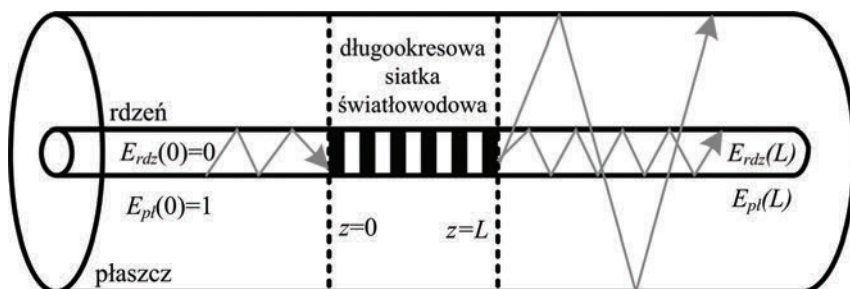


$$C_{qm}^T(z) = \zeta_{qm}(z) + 2\kappa_{qm}(z) \cos\left[\frac{2\pi}{\Lambda}z + \varphi(z)\right] \quad (11)$$

Zależności od (5) do (11) są równaniami modów sprzężonych. Stanowią one podstawę do wyznaczenia charakterystyk widmowych światłowodowych siatek dyfrakcyjnych.

## 2.2. ŚWIATŁOWODOWE SIATKI DŁUGOOKRESOWE

Wśród dyfrakcyjnych siatek światłowodowych na szczególną uwagę zasługują siatki długookresowe LPG [17]. W siatkach tych mody rdzeniowe ulegają sprzężeniu do modów płaszczowych, zgodnie ze schematem przedstawionym na rysunku 3. Mody płaszczowe z kolei ulegają mocnemu tłumieniu podczas propagacji w płaszczu światłowodu. Tłumienie to jest dodatkowo zwiększane wskutek powstających zgięć włókna.



Rys. 3. Mechanizm sprzężenia modów w siatce LPG  
Fig. 3. The mechanism of mode coupling in the LPG

W widmie transmisyjnym takiej siatki powstaje wiele pasm zaporowych [18], co jest spowodowane dużą stratnością granicy pomiędzy płaszczem a materiałem otaczającym płaszcz włókna. To zjawisko dodatkowo wytłumia mody płaszczowe.

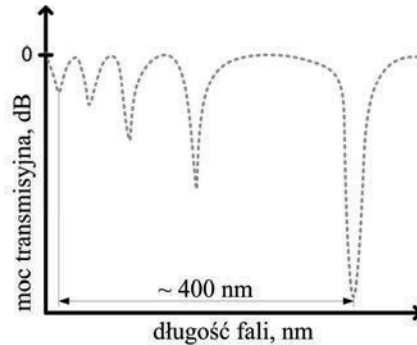
Podobnie jak w przypadku zwykłej siatki Bragga, długość fali, dla której zachodzi rezonans w przypadku siatki LPG musi spełniać warunek dopasowania fazy [169], który zapisuje się w postaci równania (12)

$$\lambda_{\text{rez}} = (n_{co,\text{eff}}^{01} - n_{cl,\text{eff}}^m)\Lambda \quad (12)$$

gdzie  $n_{co,\text{eff}}^{01}$  oraz  $n_{cl,\text{eff}}^m$  są efektywnymi współczynnikami załamania światła odpowiednio głównego modu rdzenia oraz  $m$ -tego modu płaszczu,  $\Lambda$  jest okresem siatki.

Kształt spektralnej charakterystyki transmisji LPG przedstawia rysunek 4. Charakterystyka ta wykazuje wiele zaporowych minimów w zakresie długości fali rów-

nym 400 nm. Na rysunku 4 zaobserwować można kilka modów LP0 m, do których sprzęgany jest podstawowy mod rdzeniowy.



Rys. 4. Widmo transmisyjne siatki LPG w zakresie długości fal rzędu 400 nm

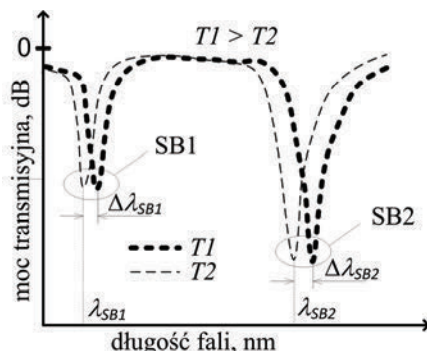
Fig. 4. Transmission spectrum of FBG in the wavelength range of 400 nm

Synteza długookresowej siatki dyfrakcyjnej polega na wyznaczeniu jej charakterystyki widmowej. Obecnie rozwijane są metody syntezy siatek długookresowych, które ułatwiają modelowanie zarówno ich charakterystyk transmisyjnych, jak i odbiciowych [19]. Modulacja właściwości sprzęgania modu rdzeniowego do modów płaszczowych zmienia odpowiedź widmową LPG, co jest kluczowym efektem wykorzystywanym w czujnikach LPG do pomiaru odkształcenia [20], temperatury [21, 22], wydłużenia [23], zgięcia [24], ciśnienia [25, 26], obciążenia mechanicznego [27, 28], koncentracji substancji [29] oraz współczynnika załamania światła [30–33].

Zmiana pasma zaporowego LPG jest spowodowana zmianą wielkości mierzonej. Czułość temperaturowa LPG jest większa niż w przypadku siatki Bragga opisanej w poprzednim rozdziale. Wartość współczynnika czułości temperaturowej zależy od typu światłowodu, na którym zapisana jest siatka LPG, oraz od struktury samej siatki. W przypadku pomiarów wielkości fizycznych przesunięcie długości fali modów płaszczowych LPG może odbywać się w kierunku krótszych lub dłuższych fal [34, 35], w zależności od właściwości dyspersyjnych światłowodu, na którym zapisana jest LPG. W wielu pracach wykorzystuje się dużą wartość czułości temperaturowej LPG [36]. Zjawisko czułości skrośnej LPG na temperaturę ma znaczący wpływ na pomiary innych wielkości fizycznych podczas ich wykorzystania.

W celu wyznaczenia wielkości fizycznych dokonuje się pomiaru sygnału pojedynczych FBG lub układu FBG + LPG [37–40]. Znane jest również wykorzystywanie informacji widmowej pary siatek LPG zaporowych (LPGP – ang. *Long Period Grating Pair*) [41]. Charakteryzując siatki długookresowe, wyróżnić można kilka minimumów lokalnych. Są one zdeterminowane pasmami zaporowymi siatki (SB – ang. *Stop Bands*) [42]. Siatki LPG charakteryzują się występowaniem kilku takich pasm zaporowych [43], co jest szczególnie przydatną cechą w wykorzystaniu ich do pomiarów

wielu wielkości z zastosowaniem tego samego czujnika [21, 44]. Na rysunku 5 przedstawione zostały charakterystyki widmowe siatki LPG w przypadku zmiany temperatury. Na rysunku zaznaczono również pasma zaporowe siatki.



Rys. 5. Przesunięcie pasm zaporowych siatki długookresowej przy zmianie temperatury  
Fig. 5. The stop bands shift caused by the temperature change

Czułość przesunięcia długości fali  $\Delta\lambda_{SB1}$  na jednostkę zmiany temperatury oznaczono jako  $K_{\Delta T}^{SB1}$ , natomiast przesunięcie tego samego pasma zaporowego na jednostkę zmiany odkształcenia jako  $K_{\Delta\varepsilon}^{SB1}$ . Przez  $K_{\Delta T}^{SB2}$  i  $K_{\Delta\varepsilon}^{SB2}$  oznaczono natomiast czułość zmiany długości fali  $\Delta\lambda_{SB2}$  na jednostkę temperatury i odkształcenia. Zgodnie z tą notacją macierzowe równanie przetwarzania czujnika LPG do pomiaru odkształcenia i temperatury można zapisać w następującej postaci

$$\begin{bmatrix} K_{\Delta T}^{SB1} & K_{\Delta\varepsilon}^{SB1} \\ K_{\Delta T}^{SB2} & K_{\Delta\varepsilon}^{SB2} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Delta T \\ \Delta\varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta\lambda_{SB1} \\ \Delta\lambda_{SB2} \end{bmatrix} \quad (13)$$

gdzie  $\Delta T$  oznacza zmianę temperatury, natomiast  $\Delta\varepsilon$  oznacza zmianę mierzonego odkształcenia. Wykorzystując równanie (13) wyznacza się wielkości mierzone na podstawie zmierzonych przesunięć długości fal pasm zaporowych  $\Delta\lambda_{SB1}$  oraz  $\Delta\lambda_{SB2}$ .

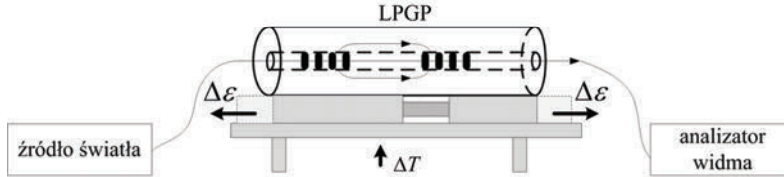
W prowadzonych obecnie badaniach czujników odkształcenia i temperatury wykorzystuje się charakterystyczne pasma zaporowe siatek LPG oraz LPGP. Wielkości mierzone można określić po zastosowaniu ogólnej macierzy przetwarzania, którą dla układu LPGP można zapisać w postaci równania macierzowego (14)

$$\begin{bmatrix} \Delta T \\ \Delta\varepsilon \end{bmatrix} = \frac{1}{D} \begin{bmatrix} K_{\varepsilon}^i & -K_{\varepsilon}^i \\ -K_T^i & K_T^i \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Delta\lambda^i \\ \Delta\lambda^i \end{bmatrix} \quad (14)$$

gdzie  $i$  jest indeksem oznaczającym numer kolejny pasma zabronionego,  $K_{\varepsilon}^i$  oznacza czułość długości fali rezonansowej  $\lambda^i$   $i$ -tego pasma zabronionego na odkształcenie,

natomiast współczynniki  $K_7^i$  oznaczają czułość długości fali rezonansowej  $\lambda^i$   $i$ -tego pasma zabronionego na temperaturę. W rzeczywistości w macierzy czułości wykorzystywane są skrajne pasma zaporowe (najczęściej pasmo pierwsze i czwarte).

Na rysunku 6 przedstawiono układ pomiarowy stosowany do wyznaczania odkształcenia i temperatury z wykorzystaniem LPGP.



Rys. 6. Układ pomiarowy odkształcenia i temperatury wykorzystujący parę światłowodowych siatek długookresowych

Fig. 6. The strain and temperature measurement system using pair of fiber long period gratings

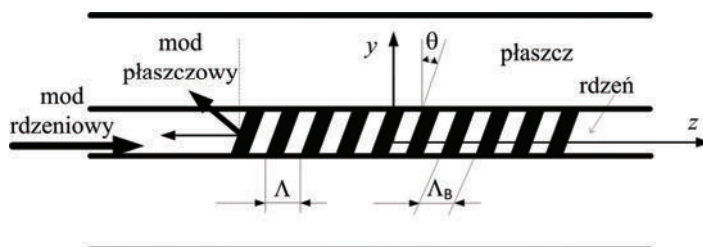
Światło z szerokopasmowego źródła światła kierowane jest do pary LPGP, której widmo transmisyjne jest rejestrowane na analizatorze widma optycznego. W pierwszej fazie dokonuje się kalibracji czujnika. Polega ona na zadaniu znanej wartości odkształcenia przy stałej temperaturze oraz podgrzaniu czujnika do zadanych wartości temperatury przy stałym i znanym jego odkształceniu. Zmierzone charakterystyki przesunięcia pasm zaporowych w funkcji odkształcenia i temperatury są następnie wykorzystywane do określenia odpowiednich czułości (wrażliwości przesunięcia konkretnych pasm zaporowych na obydwie wielkości mierzone). Wyznaczone wartości czułości temperaturowych i odkształceniowych są wykorzystywane podczas pomiarów pośrednich rozważanych wielkości. Na podstawie zmierzonych wartości przesunięć pasm zaporowych, wyznaczonych czułości oraz równania macierzowego (14), dokonuje się jednocześnie określenia wartości (lub zmian wartości) temperatury i odkształcenia.

### 2.3. STRUKTURY PERIODYCZNE O SKOŚNYCH PŁASZCZYZNACH MODULACJI WSPÓŁCZYNNIKA ZAŁAMANIA ŚWIATŁA

Kolejną grupą periodycznych struktur światłowodowych, zapisanych w rdzeniu włókna są siatki dyfrakcyjne o ukośnej płaszczyźnie zmian współczynnika załamania światła [45]. Budowę i zasadę działania takiej siatki przedstawiono na rysunku 7.

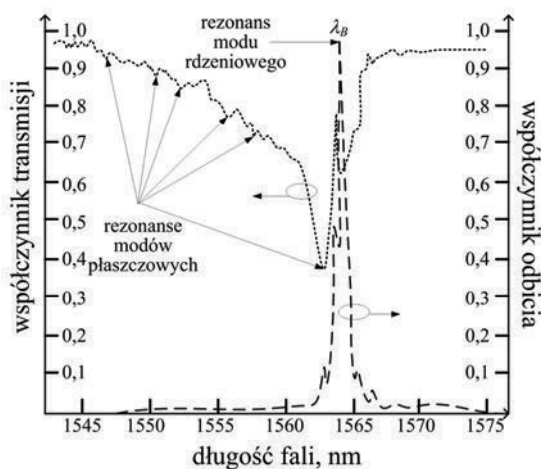
W siatce ukośnej płaszczyzna prążków modulacji współczynnika załamania jest skrócona w stosunku do osi światłowodu. Powoduje to zwiększenie sprzężenia pomiędzy modem propagującym w rdzeniu w kierunku dodatnim a propagującymi modami płaszczyzowymi w kierunku przeciwnym. Dodatkowo mody płaszczyzowe są mocno tłumione, ich istnienie nie jest zatem widoczne w charakterystyce spektralnej odbicia

siatki. Mody te są obserwowalne w widmie transmisyjnym siatki jako rezonanse występujące na charakterystyce spektralnej transmisji, co widać na rysunku 8.



Rys. 7. Siatka dyfrakcyjna o pochylonych płaszczyznach modulacji współczynnika załamania światła, zapisana w rdzeniu światłowodu

Fig. 7. Diffraction grating with tilted refractive index modulation inscribed in optical fiber core



Rys. 8. Widmo transmisyjne i odbiciowe ukośnej siatki światłowodowej

Fig. 8. Transmission and reflection spectra of tilted fiber grating

W przypadku, gdy siatka ukośna pracuje w charakterze czujnika, wykorzystuje się zmianę pozycji lub szerokości zarówno rezonansu modu rdzeniowego, jak i rezonansów modów płaszczowych. W TFBG istnieją dwa rodzaje sprzężenia modowego. Pierwszy odpowiada standardowemu (tak jak w przypadku jednorodnej siatki Bragga) sprzężeniu modu rdzeniowego propagującego w kierunku dodatnim (od źródła światła do drugiego końca włókna) do modu rdzeniowego propagującego w kierunku przeciwnym. Drugi typ rezonansu odpowiada sprzężeniu modu rdzeniowego, propagującego w kierunku dodatnim do modów płaszczowych, propagujących w kierunku ujemnym. Siatki ukośne są wykorzystywane do pomiarów współczynnika załamania [46], ugięcia [47], siły [48], zgięcia [49], temperatury [50] czy poziomu cieczy [51].

Długość fali Bragga sprzężenia pierwszego rodzaju (rdzeń-rdzeń) opisana jest równaniem (15)

$$\lambda_B = 2n_{\text{eff}}^r \frac{\Lambda_B}{\cos \theta} \quad (15)$$

gdzie  $n_{\text{eff}}^r$  jest efektywnym współczynnikiem załamania rdzenia,  $\Lambda_B$  jest rzeczywistym okresem siatki,  $\theta$  jest kątem nachylenia płaszczyzny okresu. Podane wielkości zaznaczono na rysunku 7. W przypadku sprzężenia drugiego rodzaju (rdzeń-płaszcz), rezonansowe długości fali modów płaszczowych, odpowiadające propagującym w przeciwną stronę sprzężeniom pomiędzy modem rdzenia i modami płaszczowymi, opisywane są równaniem (16)

$$\lambda_p^i = (n_{\text{eff}}^{p,i} + n_{\text{eff}}^r) \frac{\Lambda_B}{\cos \theta} \quad (16)$$

gdzie  $n_{\text{eff}}^{p,i}$  jest efektywnym współczynnikiem załamania światła  $i$ -tego modu płaszczowego, przy czym  $i = 1, \dots, n$ , gdzie  $n$  jest całkowitą liczbą modów płaszczowych.

Siatki ukośne mają długość od 5 do 10 mm, przy kącie nachylenia rzędu  $1,5^\circ$ . Są one wytwarzane z wykorzystaniem ukośnej maski fazowej, na światłowodzie domieszkowanym borem i germanem o długości fal odcięcia 1213 nm. Równanie macierzowe przetwarzania dla czujnika z TFBG można zapisać w postaci

$$\begin{bmatrix} \Delta\lambda_B \\ \Delta\lambda_p^i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_\varepsilon^r & K_T^r \\ K_\varepsilon^{p,i} & K_T^{p,i} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varepsilon \\ T \end{bmatrix} \quad (17)$$

gdzie  $\Delta\lambda_B$  oraz  $\Delta\lambda_p^i$  są przesunięciami długości fali, odpowiednio: sprzężenia typu rdzeń-rdzeń oraz sprzężenia modowego typu rdzeń-płaszcz.  $K_\varepsilon^r$  i  $K_T^r$  są współczynnikami czułości przesunięcia długości fali Bragga (odpowiadającego rezonansowi modów rdzeniowych) na odkształcenie i temperaturę, natomiast  $K_\varepsilon^{p,i}$  oraz  $K_T^{p,i}$  oznaczają odpowiednio czułości na odkształcenie i temperaturę długości fali rezonansu rdzeń-płaszcz  $i$ -tego modu. Spotykane w literaturze wartości współczynników czułości wynoszą odpowiednio:  $K_\varepsilon^r = 0,82 \text{ pm}/\mu\varepsilon$ ,  $K_T^r = 4,22 \text{ pm}/^\circ\text{C}$ ,  $K_\varepsilon^{p,i} = 0,83 \text{ pm}/\mu\varepsilon$ , oraz  $K_T^{p,i} = 6,02 \text{ pm}/^\circ\text{C}$  [52]. W niniejszej części podano przykładowe równania przetwarzania dla trzech opisanych struktur periodycznych w postaci siatek Bragga, siatek długookresowych i ukośnych. Kolejny rozdział zawiera analizę uwarunkowań macierzowych i opis metodologii pomiarów pośrednich wykorzystujących światłowodowe struktury periodyczne.

### 3. METODOLOGIA POMIARÓW POŚREDNICH WYKORZYSTUJĄCYCH ŚWIATŁOWODOWE STRUKTURY PERIODYCZNE

#### 3.1. MACIERZOWE RÓWNANIA PRZETWARZANIA UKŁADÓW CZUJNIKÓW OPTOELEKTRONICZNYCH

Równania macierzowe czujników wykorzystujących struktury periodyczne określają zależności opisujące sposób przetwarzania wielkości mierzonych na wartości parametrów siatek, a na ich podstawie można dokonać wyznaczenia tej wielkości. W niniejszej części zawarta została analiza budowy i konstrukcji równań macierzowych z podaniem ich postaci dla wybranych układów czujników do pomiaru dwóch wielkości fizycznych jednocześnie. Dwa różne parametry struktury periodycznej oznaczono przez  $p_1$  oraz  $p_2$ , przy czym dobiera się takie parametry, które ulegają zmianie wskutek zmiany wielkości mierzonych. Macierzowe równanie przetwarzania czujnika przyjmuje wówczas następującą postać:

$$\begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{m_1}^{p_1} & K_{m_2}^{p_1} \\ K_{m_1}^{p_2} & K_{m_2}^{p_2} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix} \quad (18)$$

gdzie  $K_{m_1}^{p_1}$  jest czułością parametru  $p_1$  na wielkość mierzoną  $m_1$ ,  $K_{m_1}^{p_2}$  jest czułością parametru  $p_2$  na wielkość mierzoną  $m_1$ ,  $K_{m_2}^{p_1}$  to czułość parametru  $p_1$  na wielkość mierzoną  $m_2$ , natomiast  $K_{m_2}^{p_2}$  oznacza czułość parametru  $p_2$  na wielkość mierzoną  $m_2$ . Analizując równanie (18), można zauważyć, że równoczesny pomiar wielkości mierzonych  $m_1$  i  $m_2$  możliwy jest do realizacji wówczas, gdy dla danego układu pomiarowego wyznaczymy dwa różne parametry siatki lub układu kilku siatek, które wykazują różną czułość na rozważane wielkości oraz spełniona będzie nierówność  $p_1 \neq p_2$ . Na podstawie analizy równania (18) można również wnioskować, że znając lub wyznaczając, np. eksperymentalnie, czułości poszczególnych parametrów  $p_1$  oraz  $p_2$  na odkształcenia, odpowiednio  $K_{m_1}^{p_1}$ ,  $K_{m_2}^{p_1}$  oraz  $K_{m_1}^{p_2}$ ,  $K_{m_2}^{p_2}$ , można wyznaczyć jednocześnie obydwie wielkości mierzone.

Wyznaczając dopełnienia algebraiczne wszystkich czułości  $K_{T1}$ ,  $K_{e1}$ ,  $K_{T2}$  oraz  $K_{e2}$  z równania (18) istnieje możliwość budowy macierzy dopełnień, którą wyrazić można równaniem (19) w postaci

$$\begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\mathbf{D}} \begin{bmatrix} K_{m_2}^{p_2} & K_{m_2}^{p_1} \\ -K_{m_1}^{p_2} & K_{m_1}^{p_1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} \quad (19)$$

gdzie  $\mathbf{D}$  jest wyznacznikiem macierzy z równania (18) i jest równy

$$\mathbf{D} = K_{m_1}^{p_1} K_{m_2}^{p_2} - K_{m_1}^{p_2} K_{m_2}^{p_1} \quad (20)$$

Warunek różnych stosunków czułości parametrów  $p_1$  i  $p_2$  na wielkość mierzoną  $m_1$  i  $m_2$  daje możliwość równoczesnego wyznaczenia  $m_1$  i  $m_2$  przez pomiar wartości parametrów struktury. Pomiar konkretnych parametrów czujników z siatkami dyfrakcyjnymi zapisanymi na włóknie światłowodowym jest tematem kolejnej części niniejszego opracowania.

### 3.2. POMIAR WYBRANYCH PARAMETRÓW CZUJNIKÓW ZE ŚWIATŁOWODOWYMI SIATKAMI DYFRAKCYJNYMI

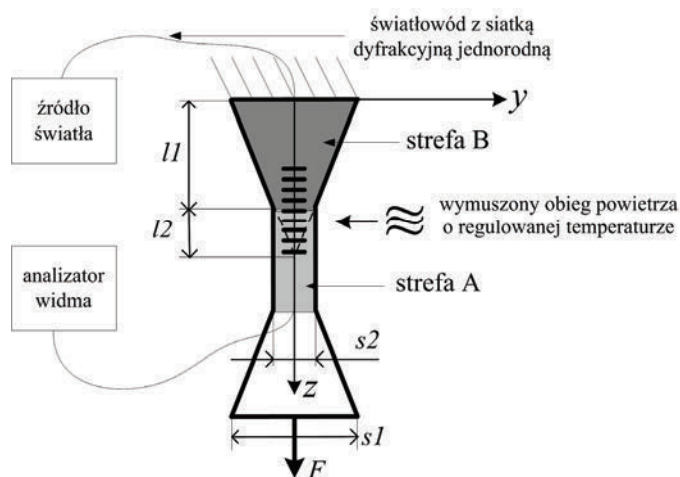
Równoczesnych pomiarów dwóch wielkości fizycznych dokonuje się zwykle z udziałem dwóch siatek dyfrakcyjnych [54], najczęściej wytworzone z wykorzystaniem jednej maski fazowej [55] lub siatki Bragga połączonej z innym elementem optoelektronicznym, którego charakterystyka widmowa jest modulowana obydwoma wielkościami mierzonymi [56]. W niniejszej części opracowania przedstawiona została metoda wyznaczania odkształcenia i temperatury przez pomiar wybranych parametrów czujników ze światłowodowymi siatkami dyfrakcyjnymi. Wykorzystano do tego celu głowicę pomiarową czujnika, składającą się z pojedynczej siatki dyfrakcyjnej umieszczonej na próbce metalowej. Kształt próbki i miejsce naklejenia FBG zostały tak zaprojektowane, by w tej samej siatce uzyskać różne czułości – na odkształcenie i temperaturę. Istotne jest zatem uzyskanie takiej samej czułości temperaturowej i różnej czułości na odkształcenie czujnika oraz sprawdzenie zaproponowanego układu czujnika przez jego kalibrację, a następnie weryfikację wyników uzyskanych podczas badań laboratoryjnych. Próbka, na którą naklejona została siatka dyfrakcyjna, została tak zaprojektowana, by uzyskać odpowiedni gradient odkształcenia wzdłuż osi  $z$ , powodujący zmianę szerokości pasma widma odbitego od siatki – jak zaprezentowano na schemacie (rys. 9).

Wartości poszczególnych wielkości charakterystycznych, zaznaczonych na rysunku, są następujące: odległości  $l_1$ ,  $l_2$  – odpowiednio 10 mm i 4 mm, szerokości w strefach próbki  $s_1$  i  $s_2$  – odpowiednio 25 mm i 6 mm, grubość próbki  $g = 1$  mm. Siatka umieszczona została w taki sposób, aby jej połowa znajdowała się w strefie B o zmiennej wartości odkształcenia osiowego wskutek zmian przekroju poprzecznego próbki. Strefa B oznaczona została kolorem ciemniejszym szarym na rysunku 9. Druga połowa siatki znajdowała się w strefie A o stałej szerokości próbki i stałej wartości odkształcenia wynikającego z przyłożonej siły rozciągającej próbkę  $F$ . Strefa B oznaczona jest na rysunku 9 kolorem jasnym szarym. Próbka wykonana została ze stali o znanym współczynniku Younga  $E = 20,53 \cdot 10^{10}$  N/m<sup>2</sup> i współczynniku rozszerzalności temperaturowej  $\alpha_p = 12 \cdot 10^{-6}$  K<sup>-1</sup>. Światło z diody SLED (ang. *Superluminescent Light Emitting Diode*), przez sprzęgacz 3 dB, kierowane jest na siatkę Bragga, której widmo odbiciowe zostaje rejestrowane na analizatorze widma optycznego o rozdziel-



czości 0,01 nm. Próbka wraz z siatką, obciążone siłą rozciągającą  $F$ , ulegają odkształceniom (wzdłuż osi  $z$ ). Odkształcenie wolnego końca próbki (kształt zaznaczony linią przerywaną) powoduje powstanie rezonansowych długości fali FBG. Są to dwa widma zachodzące na siebie wskutek zmiennego kształtu wspornika. Obydwa widma odbiciowe mają taką samą czułość temperaturową, gdyż współczynnik rozszerzalności termicznej oraz stała elastoptyczna determinujące ten współczynnik są takie same dla obydwu części tej samej siatki: części w strefie A i części w strefie B. Współczynnik względnej czułości na temperaturę jest określany zależnością (21)

$$k_T = (\alpha_\Lambda + \alpha_n)K^{-1} = \left[ \left( \frac{1}{\Lambda} \frac{\partial \Lambda}{\partial T} \right) + \left( \frac{1}{n_{\text{eff}}} \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial T} \right) \right] K^{-1} \quad (21)$$



Rys. 9. Układ eksperymentalny do pomiaru odkształcenia i temperatury czujnikiem z jednorodną światłowodową siatką dyfrakcyjną

Fig. 9. Experimental system for measuring strain and temperature by means of a sensor with one uniform diffraction grating

Parametr  $\alpha_\Lambda$  jest współczynnikiem rozszerzalności temperaturowej światłowodu (dla szkła kwarcowego jego wartość wynosi  $0,55 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ),  $\alpha_n$  jest współczynnikiem termooptycznym ( $\alpha_n = 8,6 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ). Czułość długości fali na odkształcenie definiowana jest z kolei następującą zależnością

$$K_\varepsilon = \frac{\Delta \lambda_B}{\Delta \varepsilon} = k_\varepsilon \cdot \lambda_B \quad (22)$$

w której  $k_\varepsilon$  oznacza współczynnik względnej czułości na odkształcenie i jest równy:

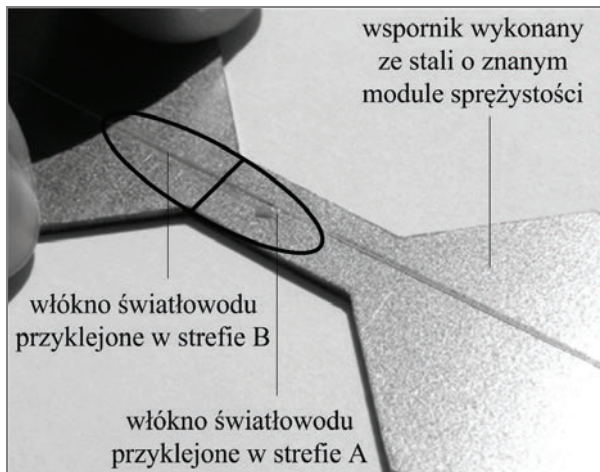
$$k_\varepsilon = 1 - p_e \quad (23)$$

gdzie  $p_e$  jest współczynnikiem elastoptycznym opisującym zmianę współczynnika załamania światła włókna pod wpływem odkształcenia ( $p_e \approx 0,22$ ).

Zmiana długości fali Bragga, powodowana odkształceniem dla każdej strefy oraz każdej części siatki, jest proporcjonalna do osiowego odkształcenia siatki. W zaproponowanym układzie istnieje możliwość śledzenia zjawisk zmiany parametrów siatki dyfrakcyjnej jednocześnie w obu strefach. Oznaczono w tym celu długość fali Bragga części siatki w strefie A jako  $\lambda_B^A$  oraz analogicznie długość fali Bragga części siatki w strefie B przez  $\lambda_B^B$ . W celu przeprowadzenia równoczesnego pomiaru zmian odkształcenia  $\Delta\varepsilon$  oraz temperatury  $\Delta T$  wykorzystano zmiany długości fali Bragga części siatki znajdującej się w strefie A, oznaczonej jako  $\Delta\lambda_B^A$  oraz zmiany szerokości pasma widma odbiciowego całej siatki oznaczonej dalej jako  $\Delta\lambda_{\text{chirp}}$ . Cały układ umieszczony został w komorze termicznej o kontrolowanej temperaturze. Dla takiego przypadku macierzową zależność parametrów siatki od zmian temperatury i odkształcenia należy zapisać w następującej postaci

$$\begin{bmatrix} \Delta\lambda_B^A \\ \Delta\lambda_{\text{chirp}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{T\lambda A} & K_{\varepsilon\lambda A} \\ K_{T\lambda\text{chirp}} & K_{\varepsilon\lambda\text{chirp}} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Delta\varepsilon \\ \Delta T \end{bmatrix} \quad (24)$$

gdzie  $K_{T\lambda A}$  i  $K_{\varepsilon\lambda A}$  są czułościami przesunięcia długości fali Bragga  $\Delta\lambda_B^A$  części siatki umieszczonej w strefie A odpowiednio na temperaturę i odkształcenie, natomiast  $K_{T\lambda\text{chirp}}$  oraz  $K_{\varepsilon\lambda\text{chirp}}$  określają czułości szerokości charakterystyki widmowej odbiciowej siatki Bragga  $\Delta\lambda_{\text{chirp}}$  odpowiednio na temperaturę oraz odkształcenie.



Rys. 10. Głowica czujnika ze światłowodową siatką dyfrakcyjną (jednorodną siatką Bragga)

Fig. 10. The sensor head with diffraction fiber grating (uniform Bragg grating)

Zmiana temperatury i odkształcenia spowoduje zmianę długości fali Bragga części siatki znajdującej się również w strefie B, co wyraża się zależnością (25)

$$\Delta\lambda_B^A = K_{T\lambda A}\Delta T + K_{\varepsilon\lambda A}\Delta\varepsilon \quad (25)$$

gdzie  $K_{T\lambda A}$  i  $K_{\varepsilon\lambda A}$  są czułościami długości fali Bragga siatki w sekcji A odpowiednio na temperaturę i odkształcenie. Kształt głowicy wspornika przedstawiono na rysunku 10.

Jako drugi parametr siatki dyfrakcyjnej do wyznaczenia odkształcenia i temperatury w układzie z rysunku 9 wykorzystano szerokość widmową charakterystyki, oznaczoną w dalszej części jako  $\Delta\lambda_{\text{chirp}}$ . Szerokość pasma rezonansowego zależy od wartości okresu siatki w sposób dający się opisać równaniem:

$$\Delta\lambda_{\text{chirp}} = 2n_{\text{eff}}(\Lambda^A - \Lambda_{\text{min}}^B) \quad (26)$$

Jak widać,  $\Delta\lambda_{\text{chirp}}$  jest proporcjonalna do różnicy okresu siatki. Parametry  $\Lambda^A$  i  $\Lambda_{\text{min}}^B$  oznaczają największy i najmniejszy okres siatki, która dozna chirpu po rozciągnięciu w strefie B. Założono, że po przyłożeniu siły rozciągającej do układu największy będzie okres części siatki znajdującej się w strefie A próbki. Możliwe jest wyznaczenie zależności szerokości widmowej siatki od przyłożonej do głowicy siły rozciągającej powodującego wydłużenie siatki. Pole przekroju poprzecznego rozciąganej próbki można określić jako funkcję pozycji wzdłuż osi z następującym równaniem (27):

$$A^B(z) = gs^B(z) \quad (27)$$

gdzie  $g$  jest grubością próbki,  $s^B(z)$  szerokością w strefie B, zależną od pozycji rozpatrywania próbki wzdłuż osi  $z$ . Szerokość próbki w strefie B to funkcja pozycji wzdłuż osi  $z$  zależna od szerokości maksymalnej  $s_1$  (początkowej) próbki. Ponieważ pole w strefie B ma kształt trapezu, otrzymamy następujący wzór określający wielkość  $s^B(z)$

$$s^B(z) = s_1 \left( 1 - \frac{z}{z_0} \right) \quad (28)$$

przy czym  $z_0$  jest punktem, w którym szerokość próbki ze strefy B przyjęłaby wartość zero. Punkt ten jest oddalony o odległość  $l_1 + l_2$  od nieruchomego końca próbki. Uwzględniając prawo Hooke'a, odkształcenie wzdłuż osi  $z$  w sekcji B, spowodowane siłą  $F$ , jest zatem dane równaniem

$$\varepsilon^B(z) = \frac{F}{A(z)E} = \frac{F}{E \cdot s_1 [1 - (z/z_0)]} \quad (29)$$

gdzie  $E$  jest modułem Younga.

Nierównomierne odkształcanie próbki powoduje w strefie B powstanie chirpu w siatce. Okresy siatki są zatem funkcją pozycji  $z$ . Zależność okresu siatki od pozycji wzdłuż osi  $z$  można w strefie B wyrazić zależnością (30)

$$\Lambda^B(z) = \Lambda_0(1 + \varepsilon^B(z)) \quad (30)$$

gdzie  $\Lambda_0$  jest okresem siatki nieodkształconej,  $\varepsilon^B(z)$  jest odkształceniem siatki dla danego punktu wzdłuż osi  $z$  w strefie B. Powstały chirp okresu siatki wyraża się w funkcji maksymalnego  $\varepsilon_{\max}$  i minimalnego  $\varepsilon_{\min}$  odkształcenia siatki z wykorzystaniem równania (31)

$$\Delta\Lambda_{\text{chirp}} = \Lambda_0(\varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min}) \quad (31)$$

Podstawiając równanie (31) do równania (26), otrzymuje się zależność, która określa szerokość widmową związaną z okresem siatki rozciągniętej w postaci

$$\Delta\lambda_{\text{chirp}} = 2n_{\text{eff}}\Delta\Lambda_{\text{chirp}} \quad (32)$$

Na podstawie równania (32) można stwierdzić, że szerokość widmowa siatki zmienia się liniowo wraz z przyłożoną siłą, co zapiszemy zgodnie z wyrażeniem

$$\Delta\lambda_{\text{chirp}} = 2n_{\text{eff}}\Lambda_0[F(1/(1 - (z/z_0)) - 1)/(E \cdot s_1)] \quad (33)$$

Zgodnie z równaniem (33), w zależności od przyłożonej siły powodującej odkształcenie siatki, nie występuje zależność  $\Delta\lambda_{\text{chirp}}$  od temperatury. Uwzględniając fakt, że czułość temperaturowa wielkości  $\Delta\lambda_{\text{chirp}}$  jest równa zero oraz zapisując jej zależność od odkształcenia jako

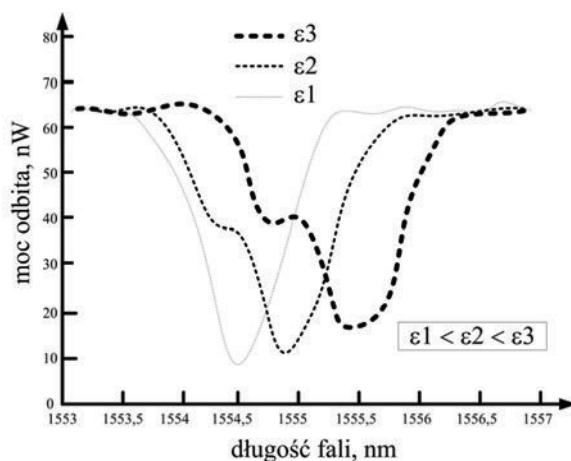
$$\Delta\lambda_{\text{chirp}} = K_{\varepsilon\lambda\text{chirp}}\Delta\varepsilon \quad (34)$$

oraz dodając równanie (25), otrzymano zredukowane równanie macierzowe czujnika w postaci

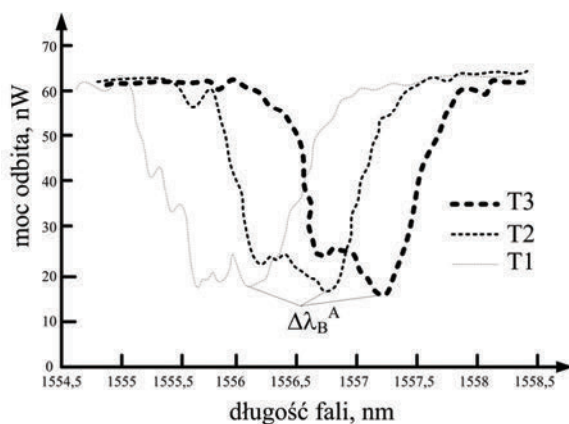
$$\begin{bmatrix} \Delta T \\ \Delta\varepsilon \end{bmatrix} = \frac{1}{K_{T\lambda A}K_{\varepsilon\lambda\text{chirp}}} \begin{bmatrix} K_{\varepsilon\lambda\text{chirp}} & -K_{\varepsilon\lambda A} \\ 0 & K_{T\lambda A} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Delta\lambda_B^A \\ \Delta\lambda_{\text{chirp}} \end{bmatrix} \quad (35)$$

Eksperymentalne potwierdzenie podanej analizy wymagało budowy układu pomiarowego ze standardową (niestożkową) światłowodową siatką dyfrakcyjną. W układzie tym uzyskano niejednorodne odkształcenie umożliwiające uzyskanie informacji o wielkościach odzwierciedlonych nie tylko w długości fali Bragga, ale także w szerokości widma odbiciowego siatki. Na podstawie równania (35) można stwierdzić, że zmianę odkształcenia i temperatury można określić na podstawie przesunięcia długości fali Bragga i szerokości widma pojedynczej siatki jednorodnej. Potwierdza to możliwość równoczesnego pomiaru odkształcenia i temperatury z wykorzystaniem pojedynczej FBG.

Zastosowana w doświadczeniu siatka miała długość równą 15 mm i wytworzona została w Welltech Instrument Co., Ltd. przez ekspozycję światła z lasera UV, długości fali równej 244 nm na maskę fazową. Siatka była apodyzowana i zapisana na wodrovanym włóknie jednomodowym SMF-28. Centralna długość fali wynosiła 1554,5 nm, a współczynnik odbicia był równy 90%. Na rysunku 11 przedstawiono wyniki pomiarów widma odbiciowego siatki dla zmieniającej się wartości odkształcenia.



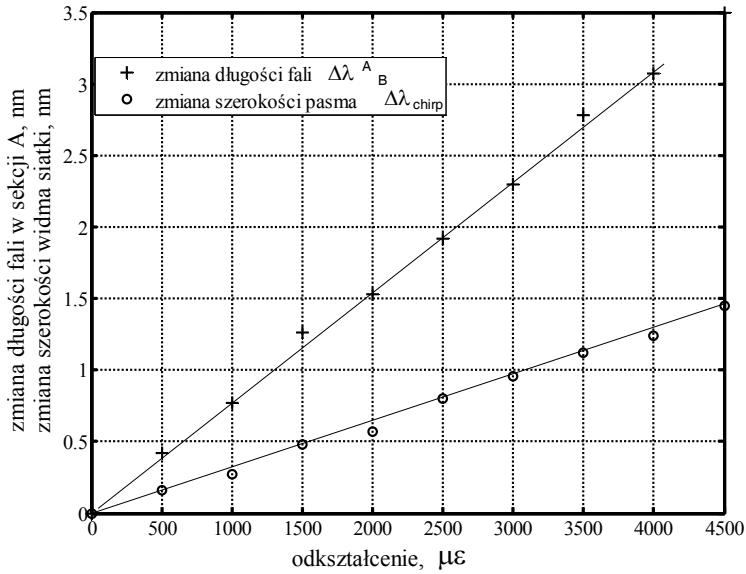
Rys. 11. Charakterystyka odbiciowa proponowanego czujnika dla różnych wartości odkształcenia o stałej wartości temperatury  
Fig. 11. Reflectance characteristics of the proposed sensor with variable strain and constant temperature



Rys. 12. Charakterystyki odbiciowe proponowanego czujnika dla różnych wartości temperatury o stałej wartości odkształcenia,  $T_1 < T_2 < T_3$   
Fig. 12. Reflectance characteristics of the proposed sensor for continuous elongation and variable temperature,  $T_1 < T_2 < T_3$

Można zauważyć, że szerokość pasma zaporowego zwiększa się wraz ze wzrostem odkształcenia. Szerokość charakterystyki odbiciowej w przypadku braku obciążenia wynosiła 0,9 nm. Na rysunku 12 zamieszczono charakterystyki spektralne siatki dla zmiennej wartości temperatury i stałej wartości odkształcenia.

Zmiana temperatury powoduje przesunięcie całej charakterystyki widmowej siatki. Szerokość pasma pozostaje niezmienną, przesuwa się jedynie całe widmo odbiciowe czujnika. Na rysunku 13 przedstawiono odpowiedź układu czujnika na odkształcenie w stałej temperaturze.



Rys. 13. Wyniki pomiarów odpowiedzi czujnika na odkształcenie otrzymane w stałej temperaturze równej 25 °C

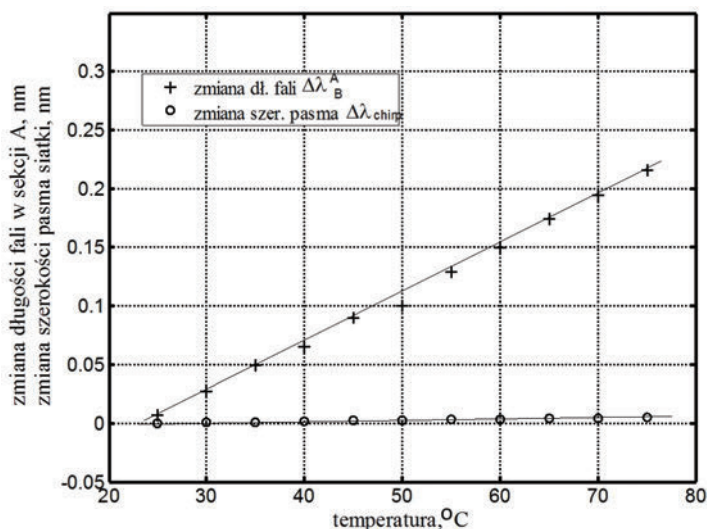
Fig. 13. Results of measurements of the sensor response to strain, obtained at a constant temperature of 25 °C

Na rysunku 13 widać liniową zależność szerokości pasma  $\Delta\lambda_{chirp}$  od wywołanego odkształcenia, co potwierdza zależności teoretyczne, a w szczególności wyrażenia określone równaniami (33) i (34). Przesunięcie długości fali Bragga siatki w strefie A, oznaczone na rysunku 13 jako  $\Delta\lambda_B^A$ , jest również zależne liniowo od odkształcenia. W celu wyznaczenia błędu nieliniowości na rysunku 13 umieszczono również proste regresji liniowej zaznaczone jako linie ciągłe. Nieliniowość charakterystyk przetwarzania wyznaczono jako błąd nieliniowości, liczony zgodnie z zależnością (36):

$$\delta_{nl} = \Delta\{\max[\Delta\lambda_{chirp}]\} / (\max\{\Delta\lambda_{chirp}\} - \min\{\Delta\lambda_{chirp}\}) \quad (36)$$

gdzie  $\Delta\{\max[\Delta\lambda_{\text{chirp}}]\}$  jest maksymalną wartością bezwzględnej różnicy pomiędzy wartościami znajdującymi się na prostej regresji liniowej a wartościami uzyskanymi z pomiarów. Wielkości  $\max\{\Delta\lambda_{\text{chirp}}\}$  i  $\min\{\Delta\lambda_{\text{chirp}}\}$  oznaczają maksymalną i minimalną wartość różnicy pomiędzy szerokością widmową charakterystyki odbiciowej czujnika uzyskaną z pomiarów a odpowiednią wartością z prostej regresji. Wartości błędów nieliniowości otrzymane zgodnie z zależnością (36) wyniosły  $\delta_{nl} = 2,70\%$  dla szerokości widmowej  $\Delta\lambda_{\text{chirp}}$  oraz  $\delta_{nl} = 2,38\%$  dla przesunięcia długości fali Bragga sekcji A oznaczonego, zgodnie z równaniem (35) jako  $\Delta\lambda_B^A$ . Błędy korelacji liniowej wyniosły 0,971 dla pomiarów szerokości widma odbiciowego i 0,965 dla pomiarów przesunięcia długości fali Bragga sekcji A. Czułość czujnika na odkształcenie wyniosły  $K_{\varepsilon\lambda A} = 0,77 \cdot 10^{-6} \text{ m}/\varepsilon$  oraz  $K_{\varepsilon\lambda\text{chirp}} = 0,31 \cdot 10^{-6} \text{ m}/\varepsilon$ .

Na rysunku 14 przedstawiono odpowiedź temperaturową czujnika.



Rys. 14. Wyniki pomiarów odpowiedzi czujnika na temperaturę, otrzymane przy stałej wartości odkształcenia równej  $1000 \mu\varepsilon$

Fig. 14. The results of measurements of the sensor response to temperature, obtained at a constant strain of  $1000 \mu\varepsilon$

Analizując wyniki pomiarów na rysunku 14, można zauważyć, że wraz ze wzrostem temperatury długość fali pików rezonansowych wzrasta liniowo, podczas gdy szerokość połowkowa widma odbiciowego zmienia się nieznacznie w granicach  $\sim 0,1 \text{ nm}$  wraz ze wzrostem temperatury o  $1 \text{ }^\circ\text{C}$ . Zgodnie z analizą matematyczną, charakterystyki spektralne czujnika powinny nie wykazywać czułości na zmiany temperatury. Pojawienie się małej wartości czułości szerokości widmowej na temperaturę mogło być spowodowane

błędami klejenia włókna światłowodowego z siatką dyfrakcyjną do metalowego wspornika. Wskutek takich błędów powstaje różnica pomiędzy wartością odkształcenia siatki w sekcji A i B wspornika; skutkuje to poszerzeniem charakterystyki odbiciowej.

Podczas pomiarów temperaturowych błędy nieliniowości wyniosły 1,50% oraz 0,01%, natomiast czułości temperaturowe  $K_{T\lambda A} = 4,130 \cdot 10^{-12}$  m/K oraz  $K_{T\lambda \text{chirp}} = 0,097 \cdot 10^{-12}$  m/K, odpowiednio dla przesunięcia długości fali oraz poszerzenia widma odbiciowego. Uwzględniając wartości czułości wyznaczone na podstawie pomiarów eksperymentalnych, możliwe jest zapisanie nowego równania macierzowego (24) zawierającego aktualne wartości wyznaczonych parametrów, które teraz przyjmie postać

$$\begin{bmatrix} \Delta\lambda_B^A \\ \Delta\lambda_{\text{chirp}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{T\lambda A} = 4,130 \times 10^{-12} \text{ m/K} & K_{\varepsilon\lambda A} = 0,770 \times 10^{-6} \text{ m/\varepsilon} \\ K_{T\lambda \text{chirp}} = 0,097 \times 10^{-12} \text{ m/K} & K_{\varepsilon\lambda \text{chirp}} = 0,310 \times 10^{-6} \text{ m/\varepsilon} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Delta\varepsilon \\ \Delta T \end{bmatrix} \quad (37)$$

Przez odwrócenie macierzy, możliwe jest wyznaczenie odkształcenia i temperatury przy już znanych wartościach przesunięcia długości fali Bragga siatki w strefie A oraz szerokości widmowej całej siatki. Wyznacznik macierzy z równania (37) można zdefiniować za pomocą równania

$$\mathbf{D} = K_{T\lambda A} K_{\varepsilon\lambda \text{chirp}} - K_{\varepsilon\lambda A} K_{T\lambda \text{chirp}} \quad (38)$$

Wyznacznik ten nie przyjmuje wartości zerowej. Dobrze uwarunkowanie macierzy z równania (37) umożliwia aktualizację równania przetwarzania (35) do postaci

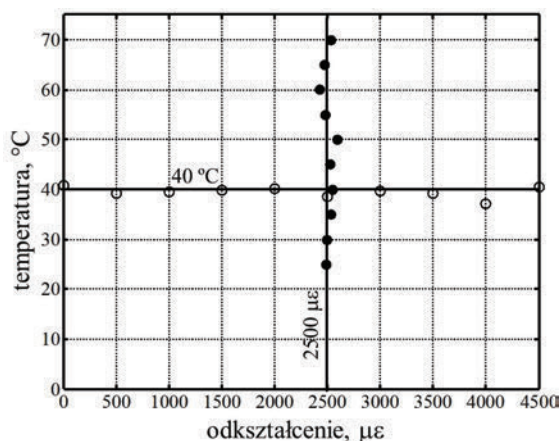
$$\begin{bmatrix} \Delta T \\ \Delta\varepsilon \end{bmatrix} = \frac{1}{1,21} \begin{bmatrix} 0,311 \times 10^6 \text{ m/\varepsilon} & -0,767 \times 10^{-6} \text{ m/\varepsilon} \\ -0,097 \times 10^{-12} \text{ m/K} & 4,129 \times 10^{-12} \text{ m/K} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Delta\lambda_B^A \\ \Delta\lambda_{\text{chirp}} \end{bmatrix} \quad (39)$$

Pomiary przesunięcia długości fali oraz szerokości spektralnej ułatwiły dokonanie oceny właściwości czujnika, który został poddany wymuszeniom o wartościach z zakresu 0  $\mu\varepsilon$  do 4500  $\mu\varepsilon$  przy stałej temperaturze równej 40 °C. Następnie układ umieszczony był w komorze termicznej, w zakresie temperatury 23,5–75 °C i przy stałym, niewielkim odkształceniu o wartości 2500  $\mu\varepsilon$ . Do wyznaczenia wartości zmian odkształcenia oraz temperatury wykorzystano równanie (39), a wyniki tych pomiarów i obliczeń zestawione zostały na rysunku 15.

Linie proste na rysunku 15 reprezentują zadane wartości odkształcenia i temperatury, które wynosiły odpowiednio 2500  $\mu\varepsilon$  oraz 40 °C. Analizując rysunek 15, należy zauważyć, że wyniki pomiarów pośrednich dwóch wartości mierzonych korespondują z wartościami uzyskanymi z eksperymentu. Maksymalne różnice pomiędzy wartościami otrzymanymi z pomiarów bezpośrednich i wartościami zadanymi wyniosły 110  $\mu\varepsilon$  dla odkształcenia oraz 3,8 °C w przypadku temperatury. Błędy nieliniowości charakterystyk przetwarzania wyniosły 2,7% dla pomiarów odkształcenia i 1,5% dla pomiarów temperatury. Współczynniki czułości na odkształcenie i temperaturę wyniosły odpowiednio  $0,77 \times 10^{-6}$  m/ $\varepsilon$  and  $4,13 \times 10^{-12}$  m/K. Wadą przedstawionej me-



tody pomiarowej jest konieczność pomiaru szerokości widmowej, co wymaga zastosowania odpowiedniego układu rejestrującego spektrum odbiciowe światłowodu z siatką dyfrakcyjną. Możliwość jednoczesnego pomiaru dwóch wielkości fizycznych z wykorzystaniem pojedynczej FBG stanowi zaletę metody. Czujnik taki jest tańszy, a jego budowa i implementacja mniej skomplikowana w porównaniu z czujnikami optoelektronicznymi wykorzystującymi kilka siatek, których szerokość widma zmienia się wraz ze zmianą wielkości mierzonej. Ułatwia to również redukcję liczby elementów, z których zbudowany jest czujnik. Poprawę uwarunkowania wyznacznika macierzy przetwarzania i dokładności pomiarów można osiągnąć dzięki wykorzystaniu klejów o większym niż użyty w doświadczeniu ( $E = 2,5$  GPa) module Younga, np. stosując spoiwo Sikadur-30 o module Younga  $E = 12,8$  GPa.



Rys. 15. Porównanie wyników równoczesnych pomiarów odkształcenia i temperatury z wartościami zadanymi

Fig. 15. Comparison of the results of parallel measurements of strain and temperature with the set values

#### 4. MODELOWANIE CHARAKTERYSTYK SPEKTRALNYCH CZUJNIKÓW Z SIATKAMI DYFRAKCYJNYMI

W przypadku pojedynczej jednorodnej siatki dyfrakcyjnej modulacja współczynnika załamania jest w przybliżeniu jednorodna w całej siatce znajdującej się w rdzeniu włókna. Brak jest również modów propagujących poza rdzeniem. Wobec tego można zaniedbać mody płaszczowe. Rozkład pola elektrycznego wzdłuż rdzenia włókna można zatem zapisać, wykorzystując równanie (2). Równania (5) i (6) wykorzystane zostały do budowy modelu czujnika z siatką Bragga w celu otrzymania charakterystyk widmowych. Parametry te są również fundamentalne podczas obliczania charaktery-

styk zaproponowanego układu. Założono również, że współczynnik załamania światła w siatce jest wielkością zależną od pozycji wzdłuż osi  $z$ , można go zatem zapisać, wykorzystując równanie (4).

Do rozwiązania równań modów sprzężonych założono, że współczynnik samo-sprzężenia siatki  $\sigma$  jest równy

$$\sigma = \delta + \frac{2\pi}{\lambda} \overline{\delta n_{\text{eff}}} - \frac{1}{2} \frac{d\phi}{dz} \quad (40)$$

gdzie  $\delta$  jest parametrem określającym wielkość rozstrojenia,  $\overline{\delta n_{\text{eff}}}$  jest składową stałą współczynnika załamania światła, uśrednianą w zakresie każdego okresu siatki. Parametr  $d\phi/dz$  określa chirp siatki, związany z wywołaną zmianą jej okresów. Parametr rozstrojenia siatki określono na podstawie zależności (41)

$$\delta = \beta - \frac{\pi}{\lambda} = \beta - \beta_B = 2\pi n_{\text{eff}} \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_B} \right) \quad (41)$$

gdzie  $\beta$  oznacza stałą propagacji. Do obliczeń przyjęto również, że współczynnik sprzężenia  $\kappa(z)$  wyraża się jako

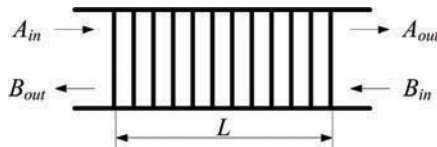
$$\kappa = \frac{\pi}{\lambda} \delta n(z) g(z) \nu \quad (42)$$

gdzie  $g(z)$  jest funkcją apodyzacji siatki, parametr  $\nu$  określa widoczność wstęg bocznych w widmie siatki.

Odpowiedź siatki w postaci opóźnienia grupowego wyznaczono, wykorzystując metodę macierzy przejścia o wymiarach  $2 \times 2$ . Siatka została podzielona na dziesięć sekcji, z których każda reprezentowana była za pomocą oddzielnej macierzy przejścia. Proces propagacji światła przez całą siatkę opisano równaniem

$$\begin{bmatrix} A_{\text{in}} \\ B_{\text{out}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & r^* \\ t & t^* \\ r & 1 \\ t & t^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{\text{out}} \\ B_{\text{in}} \end{bmatrix} \quad (43)$$

gdzie  $r = |r| \exp(i\phi_r)$  oraz  $t = |t| \exp(i\phi_t)$  odpowiadają współczynnikom odbicia i transmisji,  $\phi_r$  i  $\phi_t$  to fazy współczynników odbicia i transmisji FBG. Oznaczenia z równania (43) przedstawiono na rysunku 16.



Rys. 16. Oznaczenia sygnałów w modelu czujnika ze światłowodową siatką dyfrakcyjną  
Fig. 16. Notation of fiber grating sensor signals

Cała macierz przejścia z uwzględnieniem macierzy poszczególnych sekcji wygląda zatem następująco:

$$\begin{bmatrix} A_{\text{in}}^i \\ B_{\text{out}}^i \end{bmatrix} = \mathbf{T}^i \times \begin{bmatrix} A_{\text{out}}^{i-1} \\ B_{\text{in}}^{i-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{11}^i & \mathbf{T}_{12}^i \\ \mathbf{T}_{21}^i & \mathbf{T}_{22}^i \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A_{\text{out}}^{i-1} \\ B_{\text{in}}^{i-1} \end{bmatrix} \quad (44)$$

gdzie indeks  $i$  oznacza numer sekcji siatki, natomiast poszczególne macierze wyrażono jako

$$\mathbf{T}_{11}^i = \cosh(\gamma z^i) - i(\sigma / \gamma) \sinh(\gamma z^i) \quad (45)$$

$$\mathbf{T}_{21}^i = i(\kappa / \gamma) \sinh(\gamma z^i) \quad (46)$$

$$\mathbf{T}_{22}^i = \mathbf{T}_{11}^{*i} \quad (47)$$

$$\mathbf{T}_{12}^i = \mathbf{T}_{21}^{*i} \quad (48)$$

natomiast

$$\begin{cases} \gamma = \sqrt{\kappa^2 - \sigma^2} & \kappa^2 > \sigma^2 \\ \gamma = i\sqrt{\sigma^2 - \kappa^2} & \kappa^2 < \sigma^2 \end{cases} \quad (49)$$

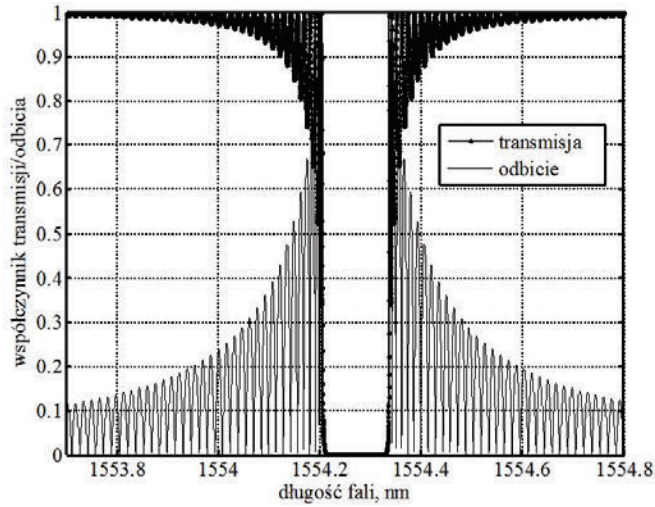
Uwzględniając warunki brzegowe

$$\begin{aligned} A_{\text{in}} &= 0 \\ B_{\text{in}} &= 0 \end{aligned} \quad (50)$$

na podstawie równania (50) wyznaczono odpowiedzi siatki w postaci widma transmisyjnego  $A_{\text{out}}$  oraz odbiciowego  $B_{\text{out}}$

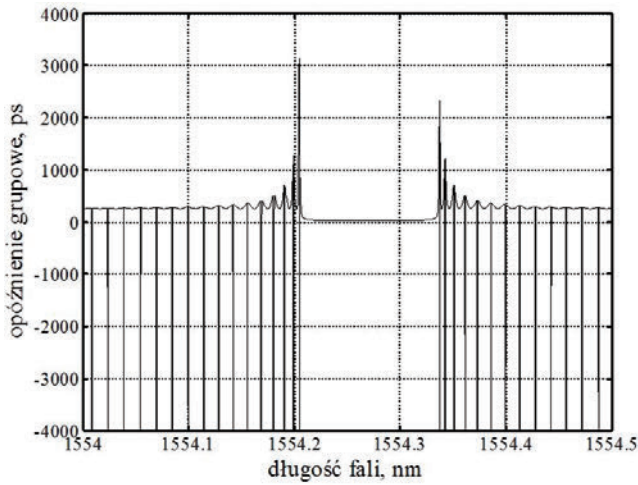
$$\begin{bmatrix} A_{\text{in}} \\ B_{\text{out}} \end{bmatrix} = \mathbf{T}_N \cdot \mathbf{T}_{N-1} \cdot \dots \cdot \mathbf{T}_i \cdot \dots \cdot \mathbf{T}_1 \times \begin{bmatrix} A_{\text{out}} \\ B_{\text{in}} \end{bmatrix} \quad (51)$$

Obliczenia dokonane były po założeniu rzeczywistych wartości parametrów użytej siatki jednorodnej, wykorzystanej w charakterze czujnika wielkości fizycznych. Modelowanie charakterystyk widmowych przedstawionych w niniejszym rozdziale wykonano, zakładając długości siatki równej  $L = 5$  mm, efektywny współczynnik załamania światła równy  $n_{\text{eff}} = 1,447$  i długości fali Bragga równej  $\lambda_B = 1554,25$  nm. Na rysunku 17 przedstawiono widmo transmisyjne i odbiciowe siatki, natomiast wykres opóźnienia grupowego znajduje się na rysunku 18.



Rys. 17. Zamodelowane charakterystyki widmowe transmisyjne i odbiciowe siatki nieapodyzowanej, jednorodnej

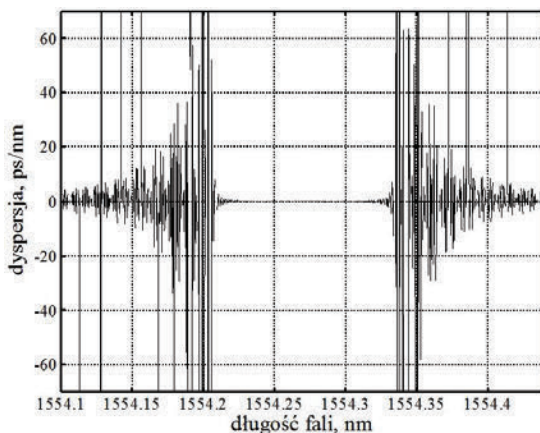
Fig. 17. Model spectral characteristics of transmission and reflection in the case of a non-apodized, uniform grating



Rys. 18. Opóźnienie grupowe w przypadku braku apodyzacji i chirpu siatki, wykresy uzyskane zostały z wykorzystaniem modelu siatki

Fig. 18. Group delay where there is no apodization or grating chirp, the spectra were obtained using the grating model

Na rysunku 19 przedstawiono charakterystykę dyspersji przy braku apodyzacji oraz siły powodującej generację niejednorodnego okresu na długości siatki.



Rys. 19. Dyspersja w pobliżu długości fali Bragga siatki kompensatora przy braku apodyzacji i chirpu siatki

Fig. 19. Group delay where there is no apodization or grating chirp, the spectra were obtained using the grating model

Jak widać z rysunku 19, fale o długości zbliżonej do długości fali Bragga siatki (1554,21–1254,32 nm) nie doznają dyspersji, podczas gdy jej wartość dla długości fal spoza widma transmisji siatki przyjmuje wartości  $d > 60$  ps/nm (jako  $d$  oznaczono wartość dyspersji w czujniku). Możliwość modelowania charakterystyk widmowych, opóźnienia grupowego  $\tau$  oraz dyspersji  $d$  umożliwia stworzenie opisu czujnika w dziedzinie częstotliwościowej i wykorzystanie zbudowanego modelu do rozwiązania zadania odwrotnego.

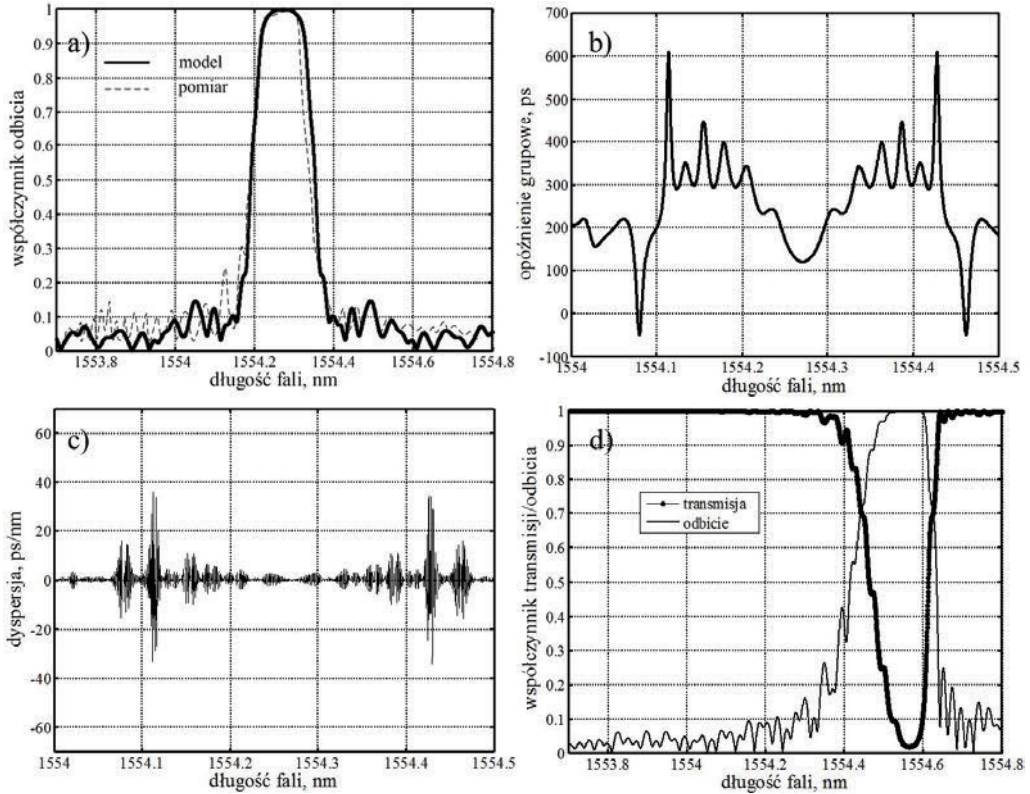
W praktyce najczęściej wykorzystuje się siatki apodyzowane, ze względu na to, że mają one znacznie zredukowane niepożądane wstęgi boczne na charakterystykach spektralnych. Dodatkowo w rzeczywistych układach pomiarowych siatki doznają nierównomiernego odkształcenia liniowego, spowodowanego ich nierównomiernym rozciąganiem podczas pracy jako element czujnika. Zasadne wydaje się zatem sprawdzenie możliwości modelowania charakterystyk spektralnych czujnika dla warunków zmiennego i nierównomiernego odkształcenia liniowego oraz po zastosowaniu różnych funkcji apodyzacji. Wykresy widma transmisyjnego oraz opóźnienia grupowego i dyspersji w przypadku zastosowania apodyzacji siatki przedstawiono na rysunku 20.

Na rysunku 20a przedstawiono zamodelowane i zmierzone charakterystyki odbiciowe siatki w przypadku zastosowania apodyzacji funkcją Gaussa, opisaną zależnością (52)

$$g(z) = \exp\{-a[(z - L/2)/L]^2\} \quad (52)$$

przy czym  $a = 10$ . W wyrażeniu (52)  $L$  jest długością siatki,  $z \in [0, L]$ ,  $a$  jest parametrem Gaussa. Na rysunkach 20b i 20c przedstawiono wykresy opóźnienia grupowego

i dyspersji w pobliżu długości fali Bragga modelowanej siatki. Znormalizowane charakterystyki transmisyjne i odbiciowe siatki, przedstawione na rysunku 20d, wykonane zostały przy maksymalnym odkształceniu siatki równym  $1,95 \cdot 10^{-5} \varepsilon$ , przy czym założono, że rozkład wydłużenia odpowiada układowi czujnika przedstawionego na rysunku 9.



Rys. 20. Zamodelowane charakterystyki siatki uzyskane w przypadku apodyzacji funkcją Gaussa:

a), b), c) brak chirpu siatki oraz  $a = 10$ , d) maksymalna wartość odkształcenia siatki:  $1,95 \cdot 10^{-5} \varepsilon$  oraz  $a = 5$

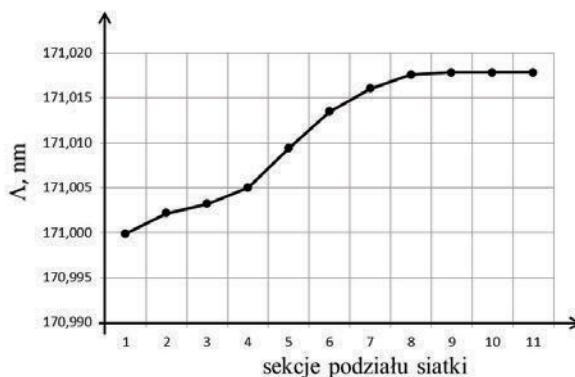
Fig. 20. Modeled grating characteristics when the Gaussian apodization function is applied:

a), b), c) no grating chirp and  $a = 10$ , d) the maximum value of the grating deformation =  $1.95 \cdot 10^{-5} \varepsilon$  and  $a = 5$

Założono, że okres siatki opisany jest wielomianem 3 stopnia:

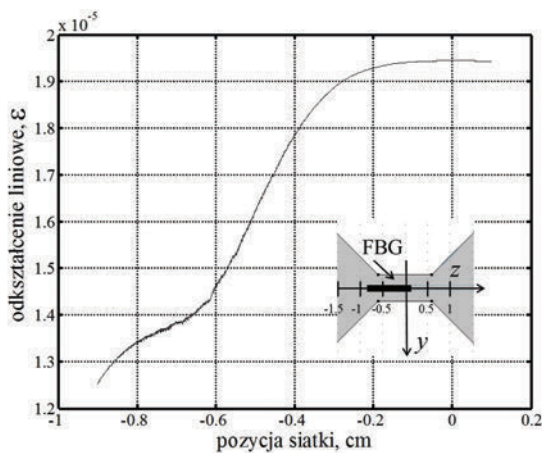
$$\Lambda = \Lambda_0(b_1 \cdot z^3 + b_2 \cdot z^2 + b_3 \cdot z + b_4) \quad (53)$$

Na rysunku 21 przedstawiono rozkład zmian okresu na długości siatki.



Rys. 21. Zmiana długości okresu siatki wykorzystywanej w czujniku  
 Fig. 21. Change in the period length of the grating used in the sensor

Dla układu czujnika przedstawionego na rysunku 9 do obliczenia wartości odkształcenia wykorzystano metodę elementów skończonych. Na rysunku 22 przedstawiono rozkład wartości odkształcenia siatki czujnika. We wstawce do rysunku zaznaczono umiejscowienie siatki na wsporniku metalowym.



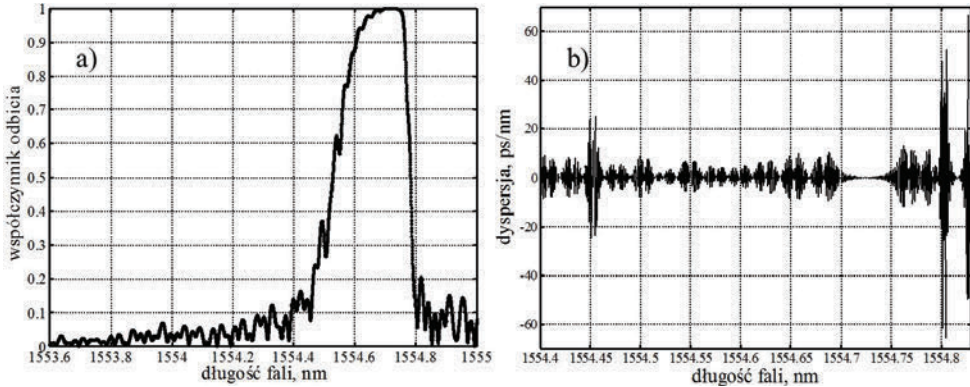
Rys. 22. Rozkład wartości odkształcenia na długości siatki. -0,9 – początek siatki, +0,1 – koniec siatki  
 Fig. 22. Distribution of deformation values along the grating.  
 -0.9 – beginning of grating, +0.1 – end of grating

Jak widać, charakter krzywej odkształcenia odpowiada wielomianowi opisaneemu równaniem (53). W przypadku przedstawionym na rysunku 22 krzywa odkształcenia opisana jest równaniem

$$\varepsilon = c_1 \cdot z^3 + c_2 \cdot z^2 + c_3 \cdot z + b_4 \quad (54)$$

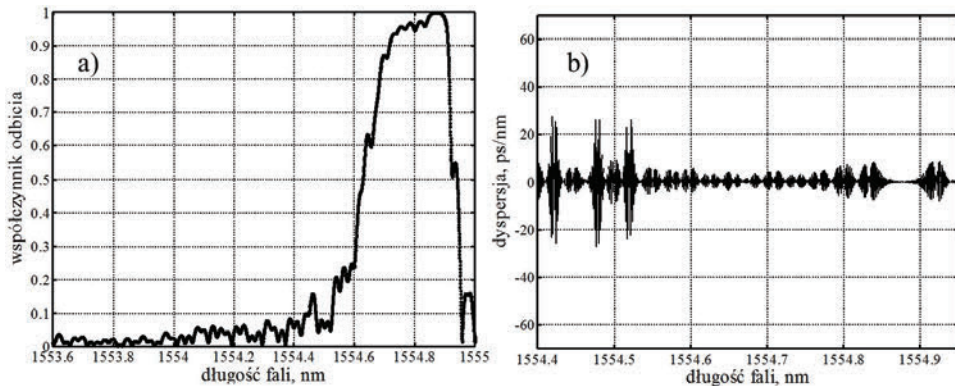
gdzie wartości poszczególnych stałych wynoszą  $c_1 = 0,002$ ,  $c_2 = 0,029$ ,  $c_3 = -0,023$ ,  $c_4 = 1.252$ .

Na rysunkach 23 i 24 przedstawione zostały charakterystyki spektralne czujnika oraz wykresy dyspersji w siatce w rejonie długości fali Bragga. Wykresy z rysunku 23 wykonano dla maksymalnej wartości odkształcenia siatki równej  $2,92 \cdot 10^{-5} \epsilon$ . Na rysunku 24 przedstawiono zamodelowane charakterystyki czujnika przy maksymalnej wartości odkształcenia równej  $3,90 \cdot 10^{-5} \epsilon$ .



Rys. 23. Charakterystyki uzyskane z modelu dla przypadku niejednorodnego wydłużenia siatki. Maksymalna wartość odkształcenia siatki  $2,92 \cdot 10^{-5} \epsilon$ . Siatka apodyzowana zgodnie z funkcją Gaussa ( $a = 5$ )

Fig. 23. Characteristics obtained from model. The maximum value of the grating's deformation  $2.92 \cdot 10^{-5} \epsilon$ . The grating is apodized according to the Gaussian function ( $a = 5$ )



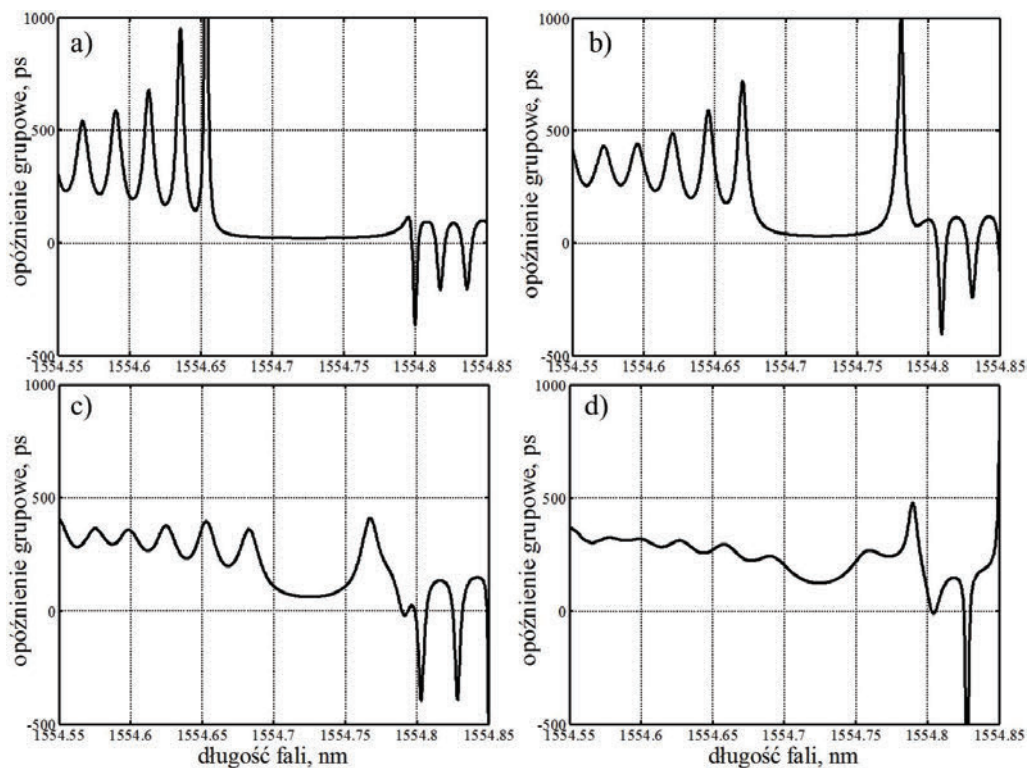
Rys. 24. Charakterystyki uzyskane z modelu dla przypadku niejednorodnego wydłużenia siatki. Maksymalna wartość odkształcenia siatki  $3,9 \cdot 10^{-5} \epsilon$ .

Siatka apodyzowana zgodnie z funkcją Gaussa ( $a = 5$ )

Fig. 24. Characteristics obtained from model. The maximum value of the grating's deformation  $3.9 \cdot 10^{-5} \epsilon$ . The grating is apodized according to the Gaussian function ( $a = 5$ )



Modelowanie charakterystyk widmowych czujnika dla różnych przypadków apodyzacji siatki oraz jej wydłużenia nieliniowego daje również możliwość wyznaczenia opóźnienia grupowego. Na rysunku 25 zestawiono charakterystyki opóźnienia grupowego, jakie wprowadza siatka dla fal z zakresu zbliżonego do długości fali rezonansowej siatki.



Rys. 25. Wykresy opóźnienia grupowego w pobliżu długości fali Bragga kompensatora dyspersji: (a) brak apodyzacji, (b) apodyzacja funkcją Gaussa  $a = 2$ , (c) apodyzacja funkcją Gaussa  $a = 5$ , (d) apodyzacja funkcją Gaussa  $a = 10$

Fig. 25. Graphs of group delay in the vicinity of the dispersion compensator's Bragg wavelength, (a) no apodization, (b) Gauss apodization,  $a = 2$ , (c) Gauss apodization,  $a = 5$ , (d) Gauss apodization,  $a = 10$

Na poprzednich rysunkach przedstawiono zależność opóźnienia grupowego i dyspersji dla różnych wartości maksymalnej wartości niejednorodnego odkształcenia, jakiemu poddawany był modelowany układ siatki Bragga i wspornika. Przeanalizowano zależność charakterystyk dyspersyjnych w zależności od profilu apodyzacji siatki Bragga. Zestawiono charakterystyki widmowe transmisyjne i odbiciowe układu, aby wykazać zmiany szerokości widma i jego przesunięcia, co również wpływa na

właściwości dyspersyjne układu. Jak widać, wzrost amplitudy odkształcenia powoduje poszerzenie odbiciowych i transmisyjnych charakterystyk widmowych czujnika. Na podstawie charakterystyk umieszczonych na rysunkach 23, 24 i 25 widać wyraźne zmniejszenie wartości dyspersji w zakresie długości fal Bragga. Zakresy, dla których występuje najmniejsza wartość dyspersji, pokrywają się długościami fal spełniających warunek Bragga. Wyniki zestawione na rysunku 25 wykazały, że możliwe jest sterowanie pochyleniem krzywej opóźnienia grupowego przez samą regulację parametru  $a$  rozkładu Gaussa danego zależnością (52). Jak widać, w miarę wzrostu parametru od wartości

0 do 10 pasmo redukuje się, a nachylenie krzywej opóźnienia grupowego zmniejsza się, powodując osłabienie efektu zmian dyspersji. Dynamika zmian opóźnienia grupowego dla siatki nieapodyzowanej wynosi  $\sim 500$  ps, natomiast w przypadku apodyzacji Gaussowskiej z parametrem  $a = 10$  zmniejsza się ona do zakresu  $\sim 300$  ps. Charakterystyki z rysunku 25 wykazują również, że w miarę wzrostu parametru  $a$  funkcji apodyzacji siatki następuje wygładzenie charakterystyki opóźnienia grupowego.

W niniejszym rozdziale przedstawiono możliwości modelowania charakterystyk widmowych oraz opóźnienia grupowego i dyspersji światłowodowych siatek dyfrakcyjnych zarówno jednorodnych, jak i siatek o nierównomiernie rozłożonych okresach (siatek niejednorodnych). W tej części opisano sposób konstrukcji modelu czujnika, uwzględniającego możliwość zmiany wielu parametrów siatek dyfrakcyjnych wchodzących w jego skład. Opisany model został w dalszej części niniejszego opracowania wykorzystany do rozwiązania zadania odwrotnego, postawionego dla pomiarów pośrednich z wykorzystaniem czujników z dyfrakcyjnymi światłowodowymi strukturami periodycznymi.

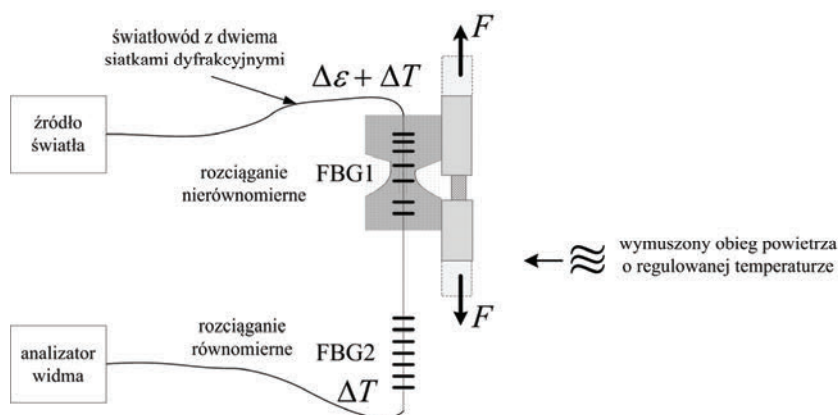
## 5. PROBLEM ODWROTNY PRZY POMIARACH WYKORZYSTUJĄCYCH CZUJNIKI ZE ŚWIATŁOWODOWYMI SIATKAMI DYFRAKCYJNYMI

### 5.1. WYZNACZANIE NIEJEDNORODNEGO ODKSZTAŁCENIA LINIOWEGO I TEMPERATURY Z WYKORZYSTANIEM CZUJNIKA Z SIATKAMI DYFRAKCYJNYMI I METODY GRADIENTÓW SPRZĘŻONYCH

Dla pomiaru niejednorodnego odkształcenia liniowego oraz temperatury zdefiniowany i rozwiązywany był problem odwrotny rekonstrukcji wielkości mierzonej [57]. Problem odwrotny wykorzystano w celu estymacji parametrów modelu czujnika maksymalnej wartości wydłużenia i temperatury. Zadanie sprowadzi się zatem do wyznaczenia wartości odkształcenia maksymalnego  $\varepsilon_{\max}(z)$  wzdłuż osi siatki (oś  $z$ ) oraz temperatury  $T$  na podstawie zmierzonego widma. W celu rozwiązania tego zadania wykorzystano model matematyczny czujnika opartego na siatkach Bragga, opisany

w poprzedniej części niniejszego opracowania. Model zawiera relacje matematyczne umożliwiające skorelowanie mierzonego bezpośrednio widma transmisyjnego z szukanymi wielkościami. Model matematyczny pomiaru widma transmisyjnego sformułowano w ogólnej postaci równania całkowego Fredholma pierwszego rodzaju [58]. Problem odwrotny pośrednich pomiarów temperatury i rozkładu odkształcenia liniowego czujnikami z siatkami Bragga polegał na określeniu parametrów siatki, w postaci maksymalnego odkształcenia i temperatury, na podstawie charakterystyki widma transmitowanego przez czujnik. W tym celu konieczne jest zastosowanie metod iteracyjnych oraz dyskretyzacja problemu odwrotnego. Należy zauważyć, że wyznaczenie maksymalnego odkształcenia liniowego o niejednorodnym rozkładzie z jednoczesnym określeniem temperatury, za pomocą czujnika ze światłowodowymi siatkami Bragga, należy to kategorii pomiarów pośrednich. Wartość maksymalnego odkształcenia oraz temperaturę wyznaczmy bowiem przez pomiar widma układu dwóch siatek czujnika. Określenie wartości maksymalnej niejednorodnego odkształcenia liniowego oraz temperatury jest zatem przykładem wnioskowania o przyczynach na podstawie skutków, przyczyną bowiem zmiany widma układu tak zbudowanego czujnika jest wywołany w siatce rozkład odkształcenia liniowego oraz zmiana temperatury. Ta deformacja widma czujnika jest skutkiem zmiany odkształcenia liniowego i temperatury siatek Bragga.

Zaproponowana metoda pomiaru maksymalnego odkształcenia liniowego i temperatury opiera się na wykorzystaniu dwóch siatek Bragga, przy czym jedna z nich poddana jest niejednorodnemu odkształceniu oraz zmiennej temperaturze, druga zaś poddana jest tylko zmianom temperatury. Schemat zaproponowanego układu do pomiaru rozkładu odkształcenia liniowego nieczułego na zmiany temperatury zaprezentowano na rysunku 26.



Rys. 26. Schemat układu czujnika ze światłowodowymi siatkami Bragga do pomiaru rozkładu odkształcenia liniowego i temperatury

Fig. 26. Schematic diagram of the sensor with fiber Bragg gratings for temperature-insensitive measurement of the linear strain distribution

Na rysunku 26 przedstawiono układ pracujący w trybie transmisyjnym. Podczas wykorzystania sprzęgacza światłowodowego istnieje możliwość pracy w trybie odbiciowym. Jedna z siatek czujnika (FBG1) doznaje zmiennego odkształcenia wywołanego nierównomiernym jej rozciąganiem, przy czym wydłużenie to jest niejednorodne, a zmienia się jedynie jego amplituda. Przy znanym kształcie krzywej odkształcenia wyznaczyć można jedynie jego maksymalną wartość. Dodatkowo obydwie siatki są poddawane oddziaływaniu zmieniającej się temperatury panującej w zastosowanej do potrzeb eksperymentu komorze termicznej. Analizator widma rejestruje sumaryczne widmo sygnału skierowanego z szerokopasmowego źródła światła po jego przejściu przez układ dwóch siatek FBG1 i FBG2. Charakterystyki widmowe z analizatora widma były poddawane transformacji falkowej w celu eliminacji składowych wysokoczęstotliwościowych. Zsumowane widmo obydwu siatek stanowi informację służącą określeniu odkształcenia maksymalnego na długości siatki FBG1 oraz temperatury obydwu siatek z wykorzystaniem zaproponowanego układu.

W przypadku omawianego czujnika maksymalnej wartości niejednorodnego odkształcenia oraz temperatury równanie macierzowe przetwarzania zapisano w postaci

$$\begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{11} & \mathbf{K}_{12} \\ \mathbf{K}_{21} & \mathbf{K}_{22} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} T \\ \varepsilon_{\max} \end{bmatrix} \quad (55)$$

gdzie współczynniki  $K$  oznaczają czułości parametrów  $P$  na temperaturę  $T$  oraz odkształcenie maksymalne o rozkładzie niejednorodnym  $\varepsilon_{\max}$ , przy czym macierz współczynników  $\mathbf{K}$  oznaczono jako

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{11} & \mathbf{K}_{12} \\ \mathbf{K}_{21} & \mathbf{K}_{22} \end{bmatrix} = f(\varepsilon_{\max}, T) \quad (56)$$

Założono, że parametr  $P_1$  oznacza szerokość połówkową widma czujnika (FBG1 + FBG2), natomiast parametr  $P_2$  odzwierciedla przesunięcie długości fali Bragga widma sumarycznego obydwu siatek. Ponadto przyjęto, że obydwa parametry zależą od maksymalnej wartości niejednorodnego odkształcenia czujnika oraz temperatury, co można zapisać w postaci równań (57) i (58)

$$P_1 = f_1[\varepsilon_{\max}, T] \quad (57)$$

$$P_2 = f_2[\varepsilon_{\max}, T] \quad (58)$$

W tym przypadku poszukiwane są wartości temperatury i odkształcenia maksymalnego przy braku znajomości wartości macierzy  $A$ . Wektor wielkości poszukiwanych oznaczono jako  $\mathbf{x}$ . Wektor zawiera wartość odkształcenia liniowego i temperatury  $\mathbf{x} = [\varepsilon_{\max}, T]$ . Oznaczono również wektor wielkości mierzonych, jako  $\mathbf{b} = [P_1, P_2] = [\text{FWHM}^{\text{FBG1+FBG2}}, \Delta\lambda_{\text{rez}}^{\text{FBG1+FBG2}}]$ , gdzie  $\text{FWHM}^{\text{FBG1+FBG2}}$  jest szerokością połówkową

widma układu FBG1+FBG2,  $\Delta\lambda_{\text{rez}}^{\text{FBG1+FBG2}}$  oznacza przesunięcie długości fali rezonansowej układu FBG1+FBG2. Równanie (55) zapiszemy w postaci macierzowej jako

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (59)$$

gdzie macierz  $\mathbf{A}$  jest symetryczna, ma rozmiary  $2 \times 2$  dla wszystkich wektorów  $\mathbf{x} \in R^2$  i jest rzeczywista. Zgodnie z metodą gradientów sprzężonych, zakładamy istnienie zbioru  $\{p_k\}$  wzajemnie sprzężonych kierunków. Wtedy  $p_k$  tworzy zbiór  $R^2$ . Oznaczając rozwiązanie układu (59) jako  $\mathbf{x}^{\text{wyzn}}$  możemy rozszerzyć to rozwiązanie w następujący szereg [59]

$$\mathbf{x}^{\text{wyzn}} = \alpha_1 p_1 + \dots + \alpha_n p_n \quad (60)$$

przy czym poszczególne współczynniki zapiszemy zależnościami (61), (62) i (63) w postaci

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^{\text{wyzn}} = \alpha_1 \mathbf{A}p_1 + \dots + \alpha_n \mathbf{A}p_n = \mathbf{b} \quad (61)$$

$$p_k^T \mathbf{A}\mathbf{x}^{\text{wyzn}} = p_k^T \alpha_1 \mathbf{A}p_1 + \dots + p_k^T \alpha_k \mathbf{A}p_k + \dots + p_k^T \alpha_n \mathbf{A}p_n = \alpha_k p_k^T \mathbf{A}p_k = p_k^T \mathbf{b} \quad (62)$$

$$\alpha_k = \frac{p_k^T \mathbf{b}}{p_k^T \mathbf{A}p_k} = \frac{\langle p_k, \mathbf{b} \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle_{\mathbf{A}}} = \frac{\langle p_k, \mathbf{b} \rangle}{\|p_k\|_{\mathbf{A}}^2} \quad (63)$$

Zgodnie z metodą gradientów sprzężonych po obliczeniu sekwencji  $n$  sprzężonych kierunków zachodzi możliwość wyznaczenia współczynników  $\alpha_k$ , co z kolei umożliwia rozwiązanie równania (59). Załóżmy, że wektor rozwiązania ma wartość początkową równą  $\mathbf{x}_0$ . Zakładając nieliniowość obiektu, funkcję celu zapiszemy w postaci

$$f(x) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 \quad (64)$$

Minimum otrzymamy, gdy gradient funkcji będzie równy zeru, co zapiszemy w postaci równania (65)

$$\nabla_x f = 2\mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) = 0 \quad (65)$$

W rozważanym przypadku  $f$  jest funkcją maksymalnego odkształcenia liniowego i temperatury, a jej gradient  $\nabla_x f$  oznacza kierunek maksymalnego wzrostu, największy spadek funkcji  $f$  zatem oznaczmy jako

$$\Delta x_0 = -\nabla_x f(x_0) \quad (66)$$

Zastosowano algorytm wyszukania minimum funkcji  $f$  za pomocą regulowanej długości kroku oznaczonego jako  $\alpha$ , polegający na wykorzystaniu poszukiwania liniowego w tym kierunku [60]. Dla danego wektora kierunkowego  $\Delta x$  jednym ze sposobów wyboru  $\alpha$  jest zminimalizowanie funkcji  $f$  wzdłuż linii  $x_n - \alpha_n \Delta x$ , co zapiszemy jako

$$\alpha_0 : \min_{\alpha} f(x + \alpha \Delta x) \quad (67)$$

$$x_1 = x_0 + \alpha \Delta x_0 \quad (68)$$

Wektor rozwiązań w iteracji pierwszej będzie zatem zależny od wektora rozwiązań w iteracji zerowej. Po pierwszej iteracji z kierunkiem  $\Delta x_0$  wykonywane są kolejne, zgodnie z następnym sprzężonym kierunkiem  $\Delta x_n$ , przy czym  $\Delta x_0 = \Delta x_0$ . Obliczenie  $n$ -tego kierunku odbywa się zgodnie z uwzględnieniem, że  $\Delta x_n = -\nabla_x f(x_n)$ . Parametr aproksymacji  $\beta_n$  w każdym kroku obliczany był zgodnie z metodą Polak–Ribière [61]

$$\beta_n = \frac{\Delta x_n^T (\Delta x_n - \Delta x_{n-1})}{\Delta x_{n-1}^T \Delta x_{n-1}} \quad (69)$$

Podane obliczenia uaktualniają kierunek sprzężony, co możemy zapisać, wykorzystując równanie

$$\Delta x_n = \Delta x_n + \beta_n \Delta x_{n-1} \quad (70)$$

Następnie zastosowano metodę przeszukiwania liniowego [62] w celu optymalizacji  $\alpha_n$ ,  $\min_{\alpha_n} f(x_n + \alpha_n \Delta x_n)$ , co w efekcie prowadzi do aktualizacji lub finalnego wyznaczenia wartości wektora maksymalnego odkształcenia i temperatury poprzez rozwiązanie równania (70) w postaci

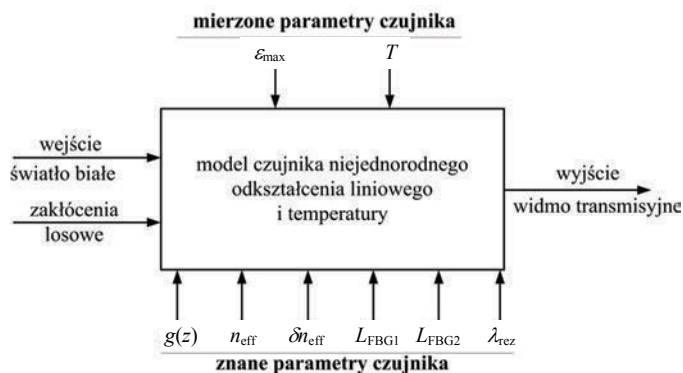
$$x_{n+1} = x_n + \alpha_n \Delta x_n. \quad (71)$$

W celu wyznaczenia wartości macierzy  $\mathbf{A}$  zbudowano model czujnika z siatkami Bragga, który wyznacza widmo transmisyjne na podstawie wartości maksymalnego odkształcenia liniowego oraz temperaturę, zgodnie z metodą rozwiązania problemu odwrotnego opisaną w kolejnej części niniejszego rozdziału.

## 5.2 PROBLEM PROSTY PODCZAS WYZNACZANIA ODKSZTAŁCENIA LINIOWEGO I TEMPERATURY METODĄ WYKORZYSTUJĄCĄ CZUJNIK Z SIATKAMI DYFRAKCYJNYMI

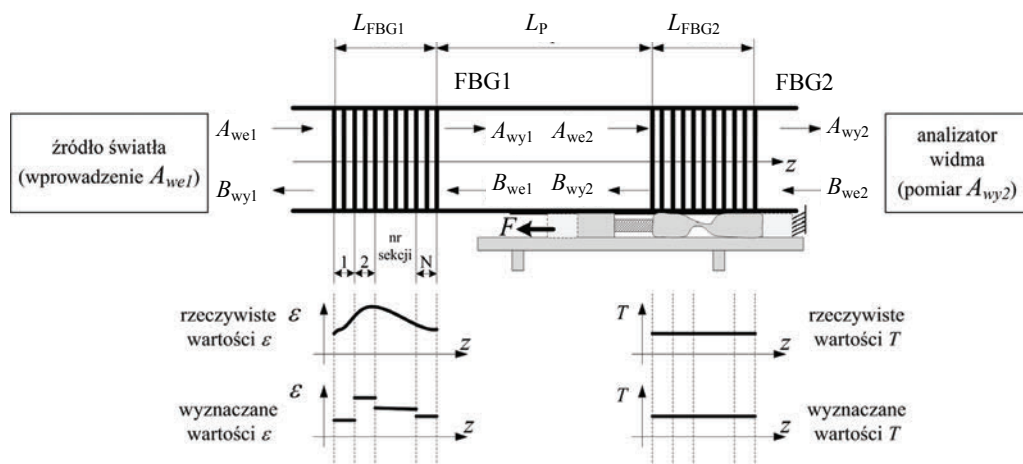
Na rysunku 27 przedstawiono schemat blokowy czujnika ze światłowodowymi siatkami dyfrakcyjnymi. Zaznaczono na nim mierzone parametry siatek dyfrakcyjnych oraz wyznaczane wielkości. Model opiera się na przetwarzaniu światła białego będącego sygnałem wejściowym, przy znanych parametrach czujnika, m.in. takich jak chirp siatek, funkcja apodyzacji, rezonansowa długość fali czujnika, szerokość połówkowa charakterystyki transmisyjnej czujnika w temperaturze otoczenia przy braku odkształcenia, długości siatek czujnika, amplituda modulacji współczynnika załamania siatki, efektywny współczynnik załamania światła i inne. Maksymalna wartość

odkształcenia liniowego oraz temperatura zaznaczone są jako wielkości wyznaczone. Przyjęto ponadto, że widmo transmisyjne czujnika to wartości mocy transmitowanej przez czujnik dla dyskretnej liczby długości fali:  $P(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$ , przy czym  $N = 500$ .



Rys. 27. Schemat blokowy modelu czujnika z zaznaczonymi parametrami *a priori* i mierzonymi  
Fig. 27. Block diagram of the sensor with the measured and *a priori* parameters indicated

Na rysunku 27 symbol  $g(z)$  oznacza funkcję apodyzacji siatek czujnika,  $n_{\text{eff}}$  jest efektywnym współczynnikiem załamania światła włókna, na którym zapisane są siatki,  $\delta n_{\text{eff}}$  oznacza amplitudę modulacji współczynnika załamania światła w rejonie siatek FBG1 i FBG2,  $L_{\text{FBG1}}$  i  $L_{\text{FBG2}}$  oznaczają długości siatek,  $\lambda_{\text{rez}}$  jest rezonansową długością fali czujnika.



Rys. 28. Dwie FBG tworzące czujnik do równoległego pomiaru rozkładu naprężenia i temperatury  
Fig. 28. Two FBGs comprising a sensor for simultaneous measurement of the strain distribution and temperature

Do budowy modelu czujnika zastosowano metodę przedstawioną na rysunku 28. Wykorzystano matematyczny opis propagacji światła przez czujnik z wykorzystaniem macierzy przejścia. W tym celu założono, że całą strukturę siatki dyfrakcyjnej można opisać równaniem (51). Metodę macierzy przejścia należy jednak zmodyfikować, dostosowując ją do układu siatek, z których jedna poddawana jest równomiernemu rozciąganiu wskutek temperatury, natomiast na drugą siatkę działa temperatura i siła powodująca jej nierównomierne odkształcenie liniowe. Sposób konstrukcji macierzy przejścia całego układu oraz miejsce występowania zmiennego wydłużenia liniowego czujnika przedstawiono na rysunku 28.

Założono, że parametry  $A_{we,wy}$  oraz  $B_{we,wy}$  z rysunku 28 są amplitudami modów propagujących odpowiednio w kierunku dodatnim (od wejścia układu do wyjścia czujnika) i ujemnym (od wyjścia do wejścia czujnika). W przypadku pojedynczej siatki macierz przejścia jednorodnej FBG można otrzymać, wychodząc od równań modów sprzężonych (63) i metody macierzy przejścia, co można przedstawić za pomocą równania (72)

$$\begin{bmatrix} A_{we} \\ B_{wy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & r^* \\ t & t^* \\ r & 1 \\ t & t^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{wy} \\ B_{we} \end{bmatrix} \quad (72)$$

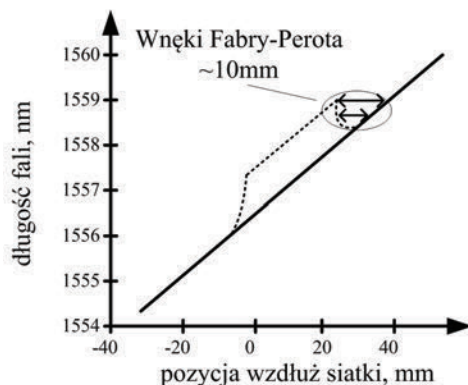
gdzie  $r = |r| \exp(i\phi_r)$  oraz  $t = |t| \exp(i\phi_t)$  odpowiadają współczynnikom odpowiednio: odbicia i transmisji,  $\phi_r$  i  $\phi_t$  to fazy współczynników odbicia i transmisji FBG. Stosując metodę macierzy przejścia, dokonano pewne założenia upraszczające, umożliwiające wyznaczenie widma transmisyjnego i odbiciowego siatki Bragga. Zgodnie z rysunkiem 28 transmisja czujnika oznaczona została jako  $A_{wy2}$ , jego odbicie zaś jako  $B_{wy1}$ . Zakładamy, że jedyna moc optyczna wprowadzana jest do siatki z jednego jej końca, w kierunku dodatnim, na rysunku oznaczona jako  $A_{we1}$ , sygnał zatem  $B_{we2} = 0$ . Założono również, że cały sygnał wyjściowy siatki FBG1 jest równy sygnałowi wejściowemu siatki FBG2, czyli  $A_{wy1} = A_{we2}$ . Założono brak strat odbitego sygnału optycznego pomiędzy siatkami FBG2 i FBG1 ( $B_{wy2} = B_{we1}$ ).

W modelu teoretycznym zaniedbano odbicia rezonansowe pomiędzy siatkami. Widma tych odbić są zależne od odległości między siatkami. Ponieważ czujnik zawiera dwie siatki Bragga, to mogłyby pojawić się wnęki rezonansowe Fabry–Perot [64], szczególnie przy mniejszych odległościach pomiędzy siatkami [65], co przedstawiono na rysunku 29.

Jak widać z rysunku 29, długość wnęki rezonansowej jest rzędu kilku milimetrów. Właściwości wnęki F-P znacząco zależą od widm odbiciowych dwóch siatek oraz odległości pomiędzy nimi. Wielkość wnęki rezonansowej pomiędzy dwiema siatkami chirpowymi o przykładowych parametrach: długości siatek  $L_{FBG1} = L_{FBG2} = 4$  mm, okres nominalny  $\Lambda_0 = 532$  nm, chirp maski fazowej siatki  $C = 0,14$  nm/mm, efektyw-



ny współczynnik załamania światła  $n_{\text{eff}} = 1,4568$ , głębokość modulacji współczynnika załamania światła  $\Delta n_{\text{eff}} = 5 \cdot 10^{-4}$  wynosi  $L_{F-P} = 1$  mm. Aby zapobiec temu zjawisku, odległość przerwy pomiędzy siatkami, oznaczona na rysunku 28 jako  $L_p$ , dobrana została na wartość równą  $L_p = 3$  m.



Rys. 29. Powstające w siatce wnęki Fabry-Perota wywołane wskutek niejednorodnego wydłużenia  
Fig. 29. Fabry-Perot Cavities in the grating under uniform strain distribution

Cały układ optyczny od pierwszej FBG do drugiej FBG z rysunku 28 można przedstawić, stosując równanie macierzowe (73)

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} A_{\text{we}1} \\ B_{\text{wy}1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{111} & \mathbf{T}_{121} \\ \mathbf{T}_{211} & \mathbf{T}_{221} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A_{\text{wy}1} \\ B_{\text{we}1} \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{111} & \mathbf{T}_{121} \\ \mathbf{T}_{211} & \mathbf{T}_{221} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{112} & \mathbf{T}_{122} \\ \mathbf{T}_{212} & \mathbf{T}_{222} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A_{\text{wy}2} \\ B_{\text{we}2} \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} \frac{1}{t} & \frac{r^*}{t^*} \\ \frac{r}{t} & \frac{1}{t^*} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \frac{1}{t} & \frac{r^*}{t^*} \\ \frac{r}{t} & \frac{1}{t^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{\text{wy}2} \\ B_{\text{we}2} \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{73}$$

przy czym macierz ze współczynnikami  $\mathbf{T}_{111}$ ,  $\mathbf{T}_{121}$ ,  $\mathbf{T}_{211}$ ,  $\mathbf{T}_{221}$ , określająca transfer światła przez siatkę FBG1, można wyrazić ogólnym równaniem (74) w postaci

$$\begin{bmatrix} \mathbf{T}_{111} & \mathbf{T}_{121} \\ \mathbf{T}_{211} & \mathbf{T}_{221} \end{bmatrix} = [\mathbf{T}^N] \dots [\mathbf{T}^3][\mathbf{T}^2][\mathbf{T}^1] \tag{74}$$

przy podziale pierwszej siatki (FBG1) na  $N$  części, macierz  $[\mathbf{T}^k]$  oznacza  $k$ -tą część siatki oraz  $k = 1, 2, \dots, N$ . Każda z macierzy  $[\mathbf{T}^k]$  jest funkcją położenia wzdłuż osi siatki (pozycja wzdłuż osi  $z$ , zgodnie z rysunkiem 28), co uzależnia funkcję przejścia

światła przez siatkę FBG1 od pozycji wzdłuż osi  $z$ . Każdą z macierzy  $[\mathbf{T}^k]$  wyrazić można w sposób następujący

$$[\mathbf{T}^k] = \begin{bmatrix} \cosh(\gamma l_{\text{FBG1}}^k) - \frac{i\sigma \sinh(\gamma l_{\text{FBG1}}^k)}{\gamma} & -\frac{i\kappa_{ac} \sinh(\gamma l_{\text{FBG1}}^k)}{\gamma} \\ \frac{i\kappa_{ac} \sinh(\gamma l_{\text{FBG1}}^k)}{\gamma} & \cosh(\gamma l_{\text{FBG1}}^k) + \frac{i\sigma \sinh(\gamma l_{\text{FBG1}}^k)}{\gamma} \end{bmatrix} \quad (75)$$

w której  $l_{\text{FBG1}}^k$  oznacza taki zakres długości siatki, który odpowiada  $k$ -tej sekcji podziału siatki, przy czym każda z sekcji jest reprezentowana przez inną macierz  $[\mathbf{T}^k]$ . W konstrukcji modelu założono długość siatki równą 15 cm oraz długość fali Bragga siatki równą 1555,1 nm. Zakresy długości siatki FBG1 wraz z odpowiadającymi im numerami sekcji jej podziału dobrano zgodnie z tabelą 1.

Tabela 1. Wartości zakresów długości odpowiadające poszczególnym sekcjom podziału siatki  
Table 1. Position range corresponding to each section of the grating

Sekcja	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5$
Zakresy Długości siatki w każdej sekcji	$l_{\text{FBG1}}^1 = 0-0,003 \text{ m}$	$l_{\text{FBG1}}^2 = 0,003-0,006 \text{ m}$	$l_{\text{FBG1}}^3 = 0,006-0,009 \text{ m}$	$l_{\text{FBG1}}^4 = 0,009-0,012 \text{ m}$	$l_{\text{FBG1}}^5 l_{\text{FBG1}}^5 = 0,012-0,015 \text{ m}$

Wartość  $N$  w równaniu (74) wynosi 5. Współczynnik sprzężenia  $\sigma$  z równania (75) również jest funkcją pozycji wzdłuż osi siatki i może być wyrażony jako

$$\sigma = \delta + \bar{\sigma} - \frac{1}{2} \frac{d\phi}{dz} \quad (76)$$

przy czym  $\delta$  jest parametrem rozstrojenia zależnym od długości fali  $\lambda$ , zdefiniowanym w postaci zależności

$$\delta = 2\pi n_{\text{eff}} (1/\lambda - 1/\lambda_B) \quad (77)$$

Wielkość  $\kappa_{ac}$  z równania (75) oznacza składową zmienną współczynnika sprzężenia, który również jest zależny od pozycji na osi  $z$ , przy czym jest on opisany równaniem 42.

Wielkość  $\gamma$  jest zależna od wzajemnej relacji wielkości  $\kappa_{ac}$  i  $\sigma$  w sposób następujący:

$$\begin{cases} \gamma = \sqrt{\kappa_{ac}^2 - \sigma^2} & \kappa_{ac}^2 > \sigma^2 \\ \gamma = i\sqrt{\sigma^2 - \kappa_{ac}^2} & \kappa_{ac}^2 < \sigma^2 \end{cases} \quad (78)$$

Siatkę FBG2 można przedstawić za pomocą jednej macierzy przejścia, reprezentującej całą długość FBG2, ponieważ zakładamy, że temperatura wzdłuż całej siatki jest taka sama. Nie ma zatem potrzeby uzależniania funkcji przejścia światła przez siatkę od pozycji wzdłuż osi  $z$ . To założenie znacznie upraszcza model matematyczny. Całą macierz przejścia zapiszemy w tym przypadku w postaci zależności

$$\begin{bmatrix} \mathbf{T}_{112} & \mathbf{T}_{122} \\ \mathbf{T}_{212} & \mathbf{T}_{222} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cosh(\gamma L_{\text{FBG2}}) - \frac{i\sigma \sinh(\gamma L_{\text{FBG2}})}{\gamma} & -\frac{i\kappa_{ac} \sinh(\gamma L_{\text{FBG2}})}{\gamma} \\ \frac{i\kappa_{ac} \sinh(\gamma L_{\text{FBG2}})}{\gamma} & \cosh(\gamma L_{\text{FBG2}}) + \frac{i\sigma \sinh(\gamma L_{\text{FBG2}})}{\gamma} \end{bmatrix} \quad (79)$$

gdzie  $L_{\text{FBG2}}$  oznacza całkowitą długość siatki FBG2. Wyznaczenie wartości wszystkich macierzy  $[\mathbf{T}^N]$  z równania (74), z uwzględnieniem równania (75) umożliwi wyznaczenie macierzy siatki FBG1 ze współczynnikami  $\mathbf{T}_{111}$ ,  $\mathbf{T}_{121}$ ,  $\mathbf{T}_{211}$ ,  $\mathbf{T}_{221}$ , natomiast równanie (79) umożliwi wyznaczenie macierzy opisującej siatkę FBG2 ze współczynnikami  $\mathbf{T}_{112}$ ,  $\mathbf{T}_{122}$ ,  $\mathbf{T}_{212}$ ,  $\mathbf{T}_{222}$ , co ułatwia zapisanie kompleksowej macierzy przejścia czujnika w postaci

$$[\mathbf{T}_C] = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{11C} & \mathbf{T}_{12C} \\ \mathbf{T}_{21C} & \mathbf{T}_{22C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{111} & \mathbf{T}_{121} \\ \mathbf{T}_{211} & \mathbf{T}_{221} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{112} & \mathbf{T}_{122} \\ \mathbf{T}_{212} & \mathbf{T}_{222} \end{bmatrix} \quad (80)$$

Uwzględniając przedstawione założenia upraszczające metody macierzy przejścia, cały czujnik opiszemy równaniem:

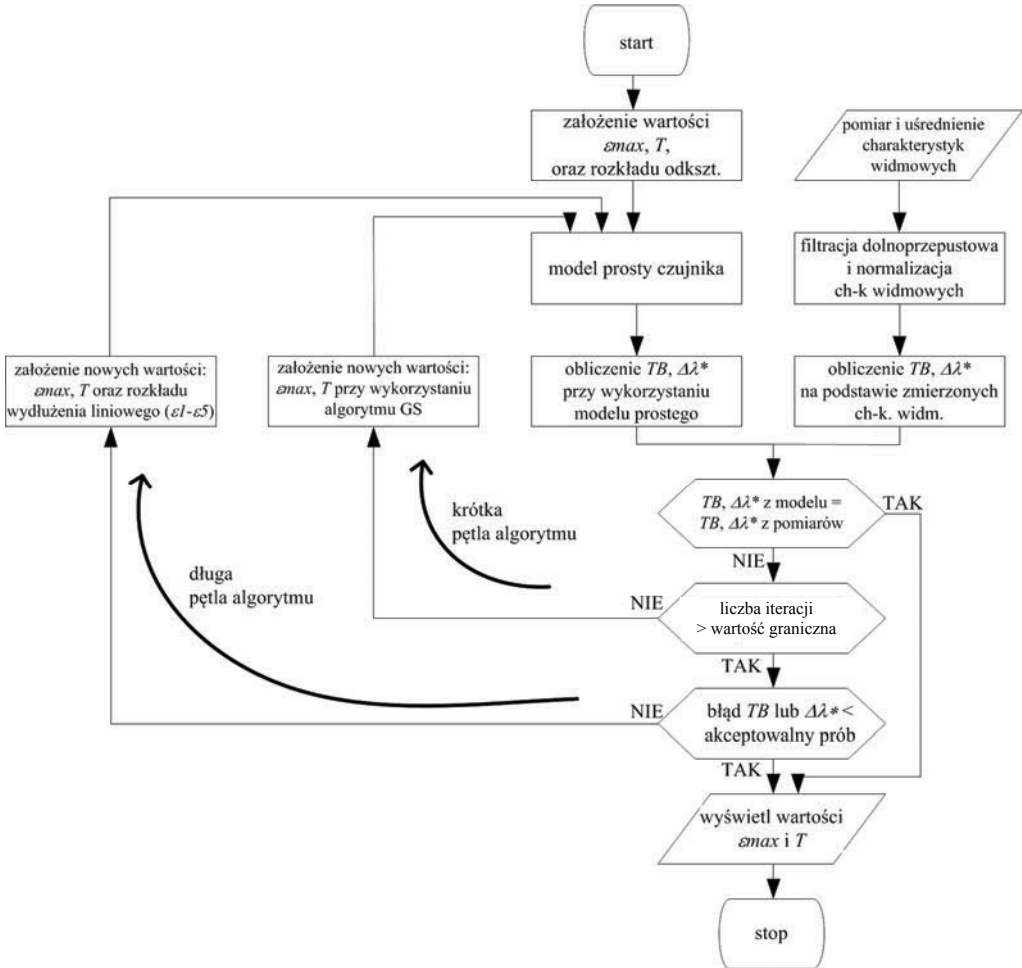
$$\begin{bmatrix} 1 \\ B_{\text{wy1}} \end{bmatrix} = [\mathbf{T}_C] \times \begin{bmatrix} A_{\text{wy2}} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (81)$$

z którego wyznaczany jest, zależny od długości fali, sygnał odbity od czujnika  $B_{\text{wy1}}$  (widmo odbiciowe) oraz sygnał transmitowany przez czujnik (widmo transmisyjne)  $A_{\text{wy2}}$ .

### 5.3. ROZWIĄZYWANIE PROBLEMU ODWROTNEGO WYZNACZANIA ODKSZTAŁCENIA LINIOWEGO I TEMPERATURY METODĄ WYKORZYSTUJĄCĄ CZUJNIK Z SIATKAMI DYFRAKCYJNYMI

Na podstawie danych pomiarowych widm transmisyjnych czujnika rzeczywistego dokonano walidacji wstępnej modelu czujnika, porównując dane uzyskane z modelu (dane symulacyjne) z danymi pomiarowymi. Założenie wartości początkowych naprężenia maksymalnego oraz temperatury (wektor  $\mathbf{x}_0$ ) umożliwiło wykorzystanie modelu do wygenerowania widma, które następnie zostało porównane z widmem pomiarowym. Zgodnie z algorytmem gradientów sprzężonych dobrane zostały nowe wartości parametrów modelu zapewniające zmniejszenie wartości funkcji celu (64). Krok ten

powtarzany był do momentu uzyskania kryterium polegającego na minimalizacji funkcji celu. Schemat algorytmu do rozwiązania zadania odwrotnego przedstawiono na rysunku 30.



Rys. 30. Procedura wyznaczania maksymalnego naprężenia i temperatury z wykorzystaniem zaproponowanego czujnika optoelektronicznego i metody gradientów sprzężonych (GS)  
 Fig. 30. Procedure to determine the maximum strain and temperature using the FBG sensor and the conjugate gradient (CG) method

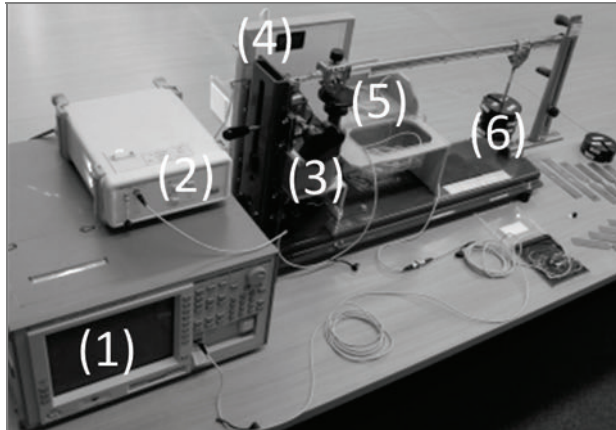
Mamy wstępną informację *a priori* dotyczącą rozkładu mierzonego naprężenia. Podczas wykorzystania algorytmu gradientów sprzężonych wyznaczone są tylko dwie wielkości. Są to temperatura i maksymalna wartość naprężenia. Opisana metoda umożliwia określenie tych wielkości przez iteracyjne porównywanie widm zamode-

lowanego i zmierzonego. Jest to dokonywane w tzw. krótkiej (czasowo) pętli algorytmu, zaznaczonej na rysunku 30. Porównywanie dotyczy zaledwie dwóch parametrów widma czujnika złożonego z FBG1 i FBG2. Te parametry to szerokość całkowita ( $TB$ ) oraz przesunięcie długości fali Bragga siatki FBG2 ( $\Delta\lambda_{B2}$ ). Jeżeli jednak w wyniku kolejnej iteracji zminimalizowana zostanie różnica pomiędzy parametrami  $TB$  i  $\Delta\lambda_{B2}$  ale wartość błędu nie osiągnie wartości mniejszej niż założony próg błędu (1%), wtedy zgodnie z algorytmem przedstawionym na rysunku 30 następuje korekcja profilu naprężenia (długa pętla algorytmu – pętla czasochłonna) przez dobór nowych wartości naprężenia w każdej z 5 sekcji siatki ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_5$ ) oraz temperatury  $T$ . Sytuacja niezgodności założonego i rzeczywistego profilu naprężenia może pojawić się w wyniku niedokładności zamocowania siatki. Im mniejszy jest błąd niedokładności zamocowania siatki, tym większa jest liczba kroków iteracyjnych wykonywanych w długiej pętli. Wpływa to na czas wykonania całej procedury, ale ważne jest to, że podział siatki na 5 sekcji oraz zastosowanie podejścia zgodnie z rysunkiem 5 ułatwia korekcję profilu naprężenia, co nie byłoby możliwe, gdy zastosujemy np. tensometr czy inny czujnik służący do wyznaczenia średniej wartości naprężenia. Poza tym zastosowanie czujnika w postaci siatki Bragga umożliwi wykonanie pomiarów nieczułych na interferencje elektromagnetyczne oraz pomiarów niezależnych od fluktuacji wartości mocy źródła światła. Informacja o mierzonych wielkościach zawarta jest bowiem w długości fali i szerokości widm. Im większy błąd zamocowania siatki, tym dłuższy czas wyznaczenia  $\sigma_{\max}$  i  $T$ , ale wyznaczenie takie nadal jest możliwe. Jest to zaleta proponowanej metody.

#### 5.4. WYNIKI WYZNACZENIA ODKSZTAŁCENIA LINIOWEGO I TEMPERATURY METODĄ POŚREDNIĄ PRZEZ POMIAR PARAMETRÓW UKŁADU ZE ŚWIATŁOWODOWYMI SIATKAMI DYFRAKCYJNYMI

Równoległe pomiary maksymalnej wartości niejednorodnego naprężenia oraz temperatury przeprowadzono na stanowisku pomiarowym przedstawionym na rysunku 31.

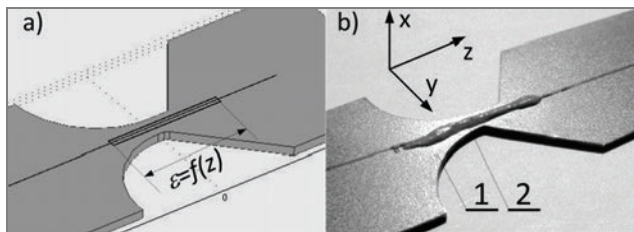
W badaniach eksperymentalnych wykorzystano dwie siatki Bragga o długościach fali Bragga równych 1551,5 nm. Siatki były zapisane na wodorowanym światłowodzie jednomodowym, metodą maski fazowej, apodyzowane zgodnie z profilem Gaussa. Obydwie siatki miały długość  $L = 15$  mm, przy czym jedna z siatek FBG1 klejona do próbki metalowej – umożliwiającej wywołanie niejednorodnego naprężenia na jej długości, a druga (FBG2) – zawieszona swobodnie (nieklejona). Eksperymentalnie obydwie siatki połączone w układzie szeregowym umieszczone zostały w komorze termicznej o regulowanej temperaturze powietrza opływającego czujnik. Część czujnika reagująca na niejednorodne naprężenie została przedstawiona na rysunku 32.



Rys. 31. Stanowisko pomiarowe do badań eksperymentalnych metody pomiaru maksymalnej wartości niejednorodnego naprężenia i temperatury. Oznaczenia na rysunku:

1 – analizator widma, 2 – źródło światła białego, 3 – komora termiczna,  
4 – odczyt temperatury wewnątrz komory, 5 – wyjście z komory termicznej światłowodu z naniesionymi siatkami Bragga, 6 – ciężar powodujący wydłużenie próbki umieszczonej w komorze

Fig. 31. Laboratory setup for the measurement of the maximum values of the non-uniform strain and temperature. Labels: 1 – optical spectrum analyzer, 2 – white light source, 3 – thermal chamber, 4 – reading temperature point inside the chamber, 5 – thermal chamber output containing the fiber with fiber Bragg gratings, 6 – weight causing sensor elongation

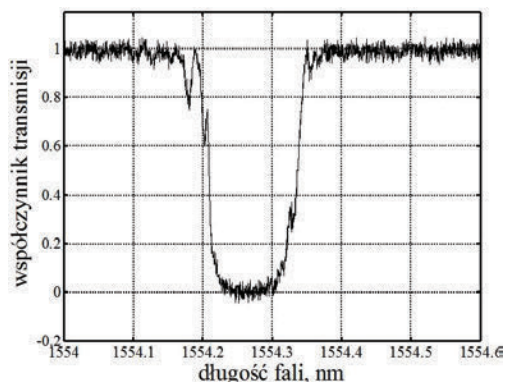


Rys. 32. Kształt głowicy pomiarowej czujnika. Oznaczenia: 1 – naprężony element metalowy, 2 – zakres długości, na którym zamocowana była siatka FBG1 czujnika

Fig. 32. The shape of the sensor measuring head. Symbols: 1 – tensioned metal element, 2 – length range over which the FBG1 grating was mounted

Metoda pomiaru, stanowisko, przygotowana próbka oraz sposób postępowania podczas pomiarów zostały zorganizowane w taki sposób, aby możliwe było sprawdzenie wielkości niejednorodnej. W tym celu FBG1 została naklejona (spoiwo sika-dur-30) na próbkę o specjalnym kształcie, gwarantującym określoną zmienność przekroju poprzecznego w osi  $z$ . Reakcja kleju była obliczana metodą elementów skończonych dla zakresu temperatury 20–90 °C. Zmiana temperatury w tym zakresie powoduje znaną zmianę modułu Younga kleju, którą można uwzględnić w oblicze-

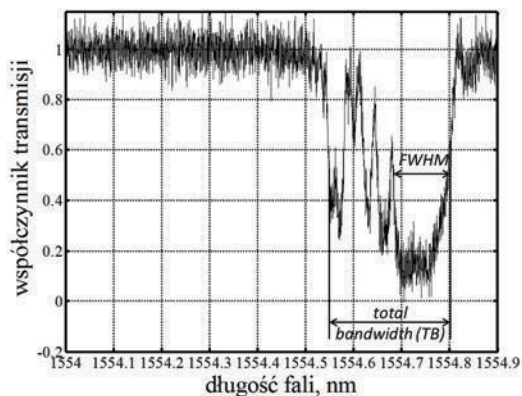
niach numerycznych. W obliczeniach wykorzystano m.in. pracę [66]. Widmo pierwszej siatki (FBG1 – poddawanej zarówno zmiennej temperaturze, jak i obciążeniu) przy braku zmian temperatury i przyłożonej siły przedstawiono na rysunku 33.



Rys. 33. Znormalizowana moc FBG1 dla temperatury  $T = 23,5\text{ °C}$  oraz siły przyłożonej  $F = 0\text{ N}$  (pomiar przy braku obciążenia wspornika i zmian temperatury)

Fig. 33. Normalized power of FBG1 at temperature  $T = 23.5\text{ °C}$  and applied force:  $F = 0\text{ N}$  (measurement in the absence of temperature changes – control in the thermal chamber)

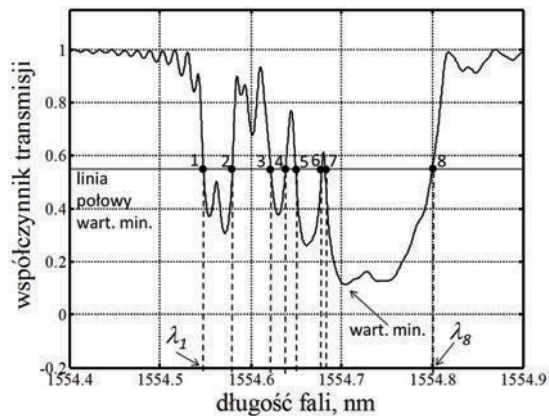
Na rysunku 34 zamieszczono zmierzone widmo FBG1 w sytuacji obciążenia wspornika siłą  $F = 15\text{ N}$ . Można więc zauważyć, że istnieje problem podczas wyznaczania szerokości połówkowej dla charakterystyki widmowej filtra FBG1 w sytuacji pojawiającego się naprężenia niejednorodnego.



Rys. 34. Znormalizowana moc FBG1 dla temperatury  $T = 23,5\text{ °C}$  oraz siły przyłożonej  $F = 15\text{ N}$  (pomiar przy braku zmian temperatury – kontrola w komorze termicznej).

Fig. 34. Normalized power of FBG1 at temperature  $T = 23.5\text{ °C}$  and applied force:  $F = 15\text{ N}$  (measurement in the absence of temperature changes – control in the thermal chamber)

Na rysunku 34 zaznaczono sposób wyznaczenia wartości szerokości połówkowej (FWHM) oraz szerokość połówkową, która wyznaczana była w rzeczywistości – oznaczoną na rysunku 34 jako *Total Bandwidth (TB)* – oznaczenie autora. Generacja chirpu w siatce powodowała powstanie silnych szumów pomiarowych. Na rysunku 34 widzimy już sytuację po redukcji szumów (1000-krotna integracja na analizatorze widma). Dodatkowo do algorytmu gradientów sprzężonych wprowadzana była informacja w postaci wektora widma transmisyjnego już po usunięciu składowych wysokoczęstotliwościowych. Takie usunięcie składowych z sygnału siatki Bragga stanowi odrębny problem. Z jednej strony zależy nam na usunięciu szumu z charakterystyki widmowej siatek, natomiast z drugiej strony zastosowanie nieodpowiedniego filtra dolnoprzepustowego pozbawi pomiar istotnych informacji o rozkładzie wielkości mierzonej wzdłuż siatki. Na potrzeby niniejszej pracy zastosowano falkę *daubechies*, przy czym ze względu na brak wyraźnego wpływu rodzaju falki na właściwości filtracji optymalizowany był jedynie dobór rzędu falki i poziom dekompozycji. Charakterystyka widmowa FBG1 po zastosowaniu filtracji dolnoprzepustowej została przedstawiona na rysunku 35. Na rysunku tym zaznaczono również sposób wyznaczenia szerokości pasma (*TB*) transmisji FBG.



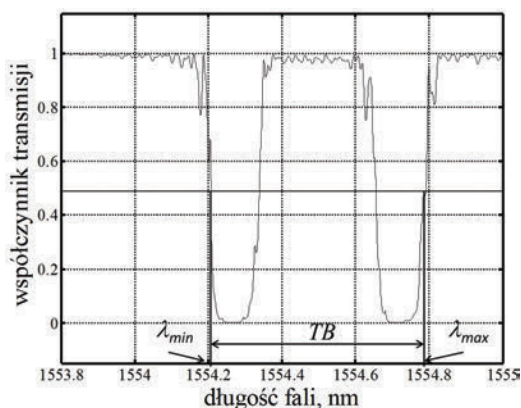
Rys. 35. Znormalizowana moc FBG1 dla temperatury  $T = 23,5^\circ\text{C}$  oraz siły przyłożonej  $F = 15\text{ N}$  po usunięciu składników wysokoczęstotliwościowych

Fig. 35. Normalized power of FBG1 at temperature  $T = 23.5^\circ\text{C}$  and applied force  $F = 15\text{ N}$  after the removal of high-frequency components

Na rysunku 35 zaznaczono długości fali, dla których wartość współczynnika transmisji jest równa połowie minimalnej wielkości dla całego widma. Dalej zaprezentowano, w jaki sposób parametr ten wyznaczany był numerycznie. Szerokość widma siatki (oznaczana zgodnie z zaproponowanym skrótem jako *TB*) rozumiana była jako różnica pomiędzy maksymalną długością fali całego widma (zgodnie z rysunkiem 35:  $\lambda_{\text{max}} = \lambda_8$ ) a minimalną długością fali całego widma (zgodnie z rysun-

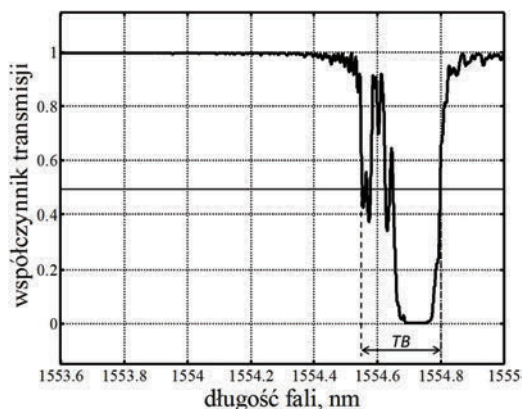


kiem 35:  $\lambda_{\min} = \lambda_1$ ), czyli  $TB = \lambda_{\max} - \lambda_{\min}$ . Przy czym wartości te odpowiadały połowie minimalnej mocy transmisyjnej występującej w całej charakterystyce. Jak widać, dla przykładowego widma z rysunku 35 współczynnik odbicia osiągał swoją wartość połowiczną dla ośmiu długości fali. Jednakże tylko minimalna i maksymalna wartość długości fali determinuje wartość  $TB$ . Na rysunku 36 przedstawiono widmo układu dwóch siatek po przyłożeniu do czujnika siły równej  $F = 15$  N.



Rys. 36. Znormalizowana moc FBG1 i FBG2 dla temperatury  $T = 23,5$  °C oraz siły przyłożonej  $F = 0$  N (pomiar przy braku obciążenia wspornika i zmian temperatury)

Fig. 36. Normalized power of FBG1 and FBG2 for  $F = 0$  N,  $T = 23.5$  °C



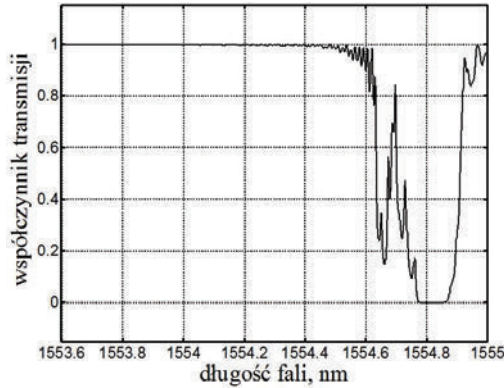
Rys. 37. Znormalizowana moc FBG1 i FBG2 dla temperatury  $T = 23,5$  °C oraz siły przyłożonej  $F = 15$  N (pomiar przy braku zmian temperatury)

Fig. 37. Normalized power of FBG1 and FBG2 for  $F = 15$  N,  $T = 23.5$  °C (measurement with constant temperature)

Po przyłożeniu siły do wspornika czujnika przesunięcie i deformacja widma siatki FBG1 powodowała zmniejszanie się  $TB$ , a nawet nakładanie się widm, co widać na

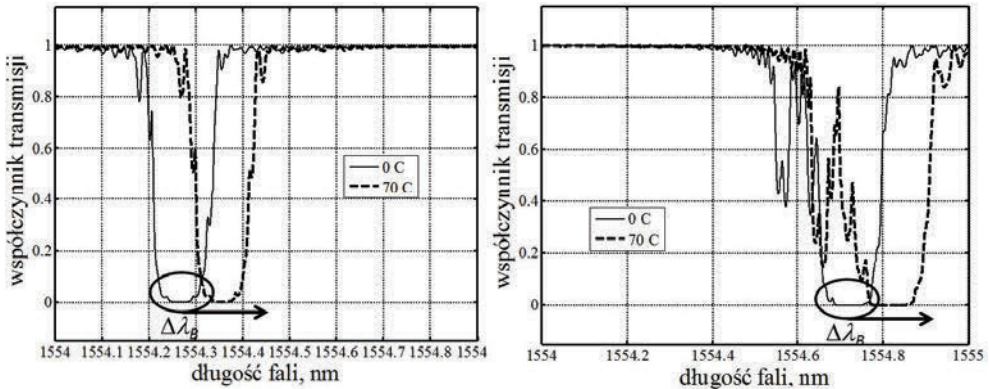
rysunku 37. Na rysunku tym przedstawiono widmo FBG1 i FBG2 po przyłożeniu siły  $F = 15$  N.

Na rysunku 38 przedstawiono widmo zmierzone zarówno dla obciążenia  $F = 15$  N, jak i w temperaturze  $T = 70$  °C. Parametr  $TB$  nie ulega zmianie, ponieważ przesunięciu ulegają widma obydwu siatek. Wartości przesunięcia obydwu widm są takie same gdyż siatki zapisane są na takim samym włóknie.



Rys. 38. Znormalizowana moc FBG1 i FBG2 dla temperatury  $T = 70$  °C oraz siły przyłożonej  $F = 15$  N  
Fig. 38. Normalized power of FBG1 and FBG2 for  $F = 15$  N,  $T = 70$  °C

Zmiany temperatury powodują przesunięcie charakterystyki widmowej zarówno każdej z siatek, jak i widma całego czujnika. Na rysunku 39 na jednym wykresie przedstawiono widma siatki FBG1 oraz dwóch siatek dla temperatury  $T = 0$  °C i  $T = 70$  °C.



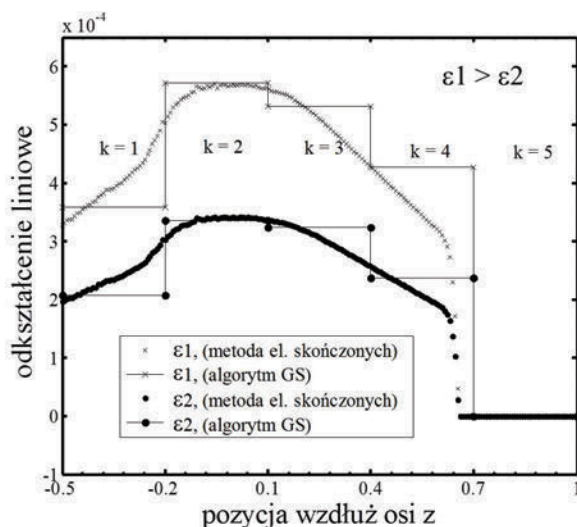
Rys. 39. Znormalizowana moc dla temperatury  $T = 0$  i  $70$  °C oraz siły przyłożonej  $F = 0$  i  $15$  N:

a) przesunięcie widma FBG1, b) przesunięcie widma FBG1 i FBG2

Fig. 39. Normalized power for temperature  $T = 0$  °C and  $70$  °C and the applied force  $F = 0$  and  $15$  N:

a) the shift of FBG1 spectrum, b) the shift of FBG1 and FBG2 spectrum

W przypadku układu dwóch siatek Bragga nie możemy mówić o długości fali Bragga. W rzeczywistości wartością wejściową do algorytmu gradientów sprzężonych była maksymalna długość fali, dla której występowała minimalna wartość współczynnika transmisji. Wartości widma to dyskretne wartości z analizatora widma, istniała zatem sytuacja, w której jednemu poziomowi mocy odpowiadało kilka długości fali (prawie długości fali Bragga). Zakres maksymalnego mierzonego naprężenia wyznaczał moment pokrycia długości fali Bragga obydwu siatek. Na rysunku 40 przedstawiono wartości niejednorodnego naprężenia oraz temperatury wyznaczone z wykorzystaniem metody elementów skończonych oraz zbudowanego do badań czujnika i algorytmu przedstawionego na rysunku 30.



Rys. 40. Charakterystyki wydłużenia liniowego obliczone z wykorzystaniem metody elementów skończonych (linie złożone z punktów) oraz algorytmu z rysunku 30 dla różnych wartości siły oddziałującej na czujnik

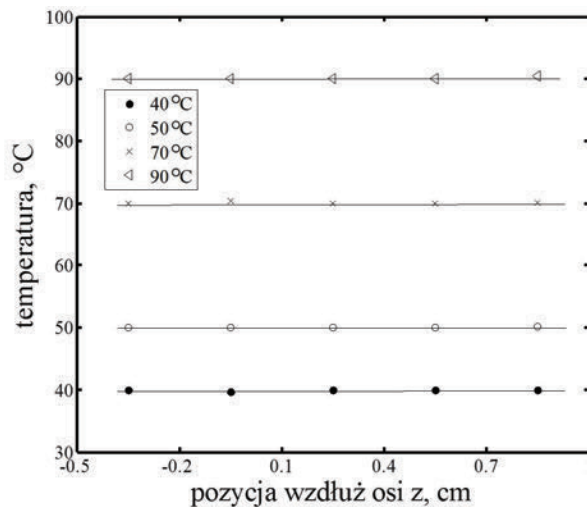
Fig. 40. Strain calculated using the finite element method (lines with points) and using the algorithm shown in Fig. 30 (points) for different forces applied to the sensor

Zarówno obliczenia uzyskane z metody elementów skończonych, jak i z metody gradientów sprzężonych wskazują jednoznacznie, że maksymalna wartość wydłużenia liniowego występuje w drugiej sekcji siatki ( $k = 2$ ). Pomiary i obliczenia wykonane zostały dla dwóch wartości sił rozciągających czujnik, powodujących powstanie naprężenia w siatce. Wykres oznaczony jako  $\epsilon_1$  odpowiada sile 15 N, natomiast charakterystyka  $\epsilon_2$  odpowiada sile 9 N. Jak widać, zmiana siły nie powoduje zmiany obszaru, w którym występuje maksymalna wartość odkształcenia liniowego, a przedstawiony układ czujnika umożliwia wyznaczenie maksymalnej wartości wydłużenia z liniową rozdzielczością pomiaru naprężenia wynoszącą 0,003 m. Maksy-

malna wartość błędu bezwzględnego wyznaczenia wartości maksymalnej naprężenia niejednorodnego wyniosła  $RMSD = 0,351\%$ . Błąd liczony był jako wartość średniokwadratowa i określał różnicę pomiędzy wartościami teoretycznymi odkształcenia liniowego  $\varepsilon_t$  a wartościami otrzymanymi z wykorzystaniem algorytmu gradientów sprzężonych  $\varepsilon_{GS}$ . Błąd RMSD wyznaczono, zakładając podział siatki na 5 sekcji oraz wykorzystując równanie

$$RMSD = \left( \frac{1}{5} \cdot \sum_{k=1}^5 \varepsilon_t^k - \varepsilon_{GS}^k \right)^{1/2} \quad (82)$$

Na rysunku 41 przedstawiono na wspólnym wykresie wartości temperatury zmierzonych układem bezpośrednio podczas eksperymentalnych prób laboratoryjnych (punkty) oraz wyznaczonej z wykorzystaniem zaproponowanej metody na podstawie pomiaru widma czujnika (linie).



Rys. 41. Charakterystyki wydłużenia liniowego obliczone z wykorzystaniem metody elementów skończonych (linie złożone z punktów) oraz algorytmu z rysunku 30 dla różnych wartości siły oddziałującej na czujnik  
 Fig. 41. Strain calculated using the finite element method (lines with points) and using the algorithm shown in Fig. 30 (points) for different forces applied to the sensor

Zastosowanie procedury przedstawionej na rysunku 30, wykorzystującej metodę gradientów sprzężonych oraz model czujnika, umożliwia wyznaczenie maksymalnej wartości niejednorodnego wydłużenia liniowego (rys. 40) oraz temperatury, w której dokonywany jest pomiar (rys. 41).

### 5.5. WYKRYWANIE DEFEKTÓW METODĄ POŚREDNIEGO POMIARU SYGNAŁÓW ZE ŚWIATŁOWODOWYCH SIATEK BRAGGA

Wykrywanie defektów w materiale możliwe jest m.in. przez pomiar wydłużeń względnych tego materiału, np. poddanego sile rozciągającej. Pojawiające się różnice naprężenia liniowego na długości pomiarowej można wykorzystać jako informację dotyczącą deformacji i defektów w materiale. Określenie rozkładu niejednorodnego wydłużenia względnego materiału jest przykładem wnioskowania o przyczynach na podstawie skutków. Problem odwrotny pojawia się zatem wskutek konieczności ilościowego wyznaczenia rozkładu wydłużenia względnego i temperatury (przyczyn) o znanej postaci widma transmisyjnego układu (skutku), uzyskanej przez budowę modelu czujnika opisanego wcześniej w niniejszym opracowaniu.

W tej części problem odwrotny wykorzystano w celu estymacji parametrów modelu czujnika rozkładu wydłużenia względnego. Opisana metoda nie uwzględnia zmian temperatury, czyli nie jest odporna na jej zmiany. Praktycznie zasadna wydaje się zatem implementacja mechanizmu umożliwiającego uniezależnienie się od zmian temperatury, np. zastosowanie drugiej siatki Bragga [67].

W większości prac siatka mocowana jest z użyciem kleju epoksydowego [68]. Poza tym czujniki FBG są również mocowane najczęściej w różnych skomplikowanych materiałach kompozytowych [69]. Na potrzeby niniejszego opracowania siatki klejone były na powierzchniach metalowych próbek z użyciem kleju o dużej wartości modułu Younga, co zwiększa współczynnik transmisji wydłużenia z badanej próbki do elementu FBG. Takie rozwiązanie ułatwia montowanie czujników w potencjalnych układach pomiarowych.

Zaproponowana metoda opiera się na pomiarach pośrednich – wydłużeń względnych optoelektronicznym czujnikiem z przetwornikiem w postaci jednorodnej siatki Bragga. Problem sprowadzony został do wyznaczenia funkcji rozkładu wydłużenia względnego  $\varepsilon(z)$  wzdłuż osi  $z$  siatki, na podstawie jej zmierzonego widma odbiciowego.

Do rozwiązania zagadnienia został zbudowany model matematyczny czujnika, oparty na jednorodnej siatce Bragga, zawierający relacje matematyczne umożliwiające skorelowanie mierzonego bezpośrednio widma odbiciowego z szukanym rozkładem wydłużenia względnego  $\varepsilon(z)$ .

Z równań amplitud modów sprzężonych wyrażonych zależnościami (5) i (6) otrzymuje się równania pól modów propagujących w kierunku dodatnim  $R(z)$  i ujemnym  $S(z)$

$$\frac{dR(z; \delta)}{dz} = +i\delta(z)R(z) + q(z)S(z) \quad (83)$$

$$\frac{dS(z; \delta)}{dz} = -i\delta(z)S(z) + q^*(z)R(z) \quad (84)$$

gdzie  $\delta$  jest zdefiniowanym wcześniej parametrem rozstrojenia, zdefiniowanym równaniem (77), wielkość  $q$  definiowana jest następującą zależnością

$$q = i\kappa \quad (85)$$

Zwróćmy uwagę, że każda para rozwiązań  $\{R(z), S(z)\}$  równań modów sprzężonych musi spełniać równania (83) oraz (84) przy dwóch warunkach brzegowych (86) i (87)

$$R(0; \delta) = 1 \quad (86)$$

$$S(L, \delta) = 0 \quad (87)$$

dla których odbicie czujnika jest równe  $P_R(\delta) = S(0; \delta)$ , natomiast transmisja czujnika  $P_T(\delta) = R(L; \delta)$ . Aby wyznaczyć widmo odbiciowe siatki (wyjście modelu), dokonano dyskretyzacji modelu na wiele skończonych reflektorów Bragga. W przeciwieństwie do metody macierzy przejścia [70] w niniejszej metodzie dokonano dyskretyzacji całej siatki na ciąg połączonych ze sobą szeregowo reflektorów Bragga. W związku z tym równanie opisujące sygnał na końcach siatki możemy zapisać w postaci

$$\begin{bmatrix} R(L) \\ S(L) \end{bmatrix} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} R(0) \\ S(0) \end{bmatrix} \quad (88)$$

gdzie  $T$  jest macierzą opisującą funkcję przejścia siatki, możemy teraz zapisać w postaci

$$\begin{bmatrix} R(L) \\ S(L) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{(i\delta\Delta z)} & 0 \\ 0 & e^{-(i\delta\Delta z)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -r_k^* \\ r_k & 1 \end{bmatrix} (1 - |r_k|^2)^{-\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} R(0) \\ S(0) \end{bmatrix} \quad (89)$$

Element  $\begin{bmatrix} e^{(i\delta\Delta z)} & 0 \\ 0 & e^{-(i\delta\Delta z)} \end{bmatrix}$  oznacza macierz propagacji czujnika, natomiast macierz

jednego dyskretnego reflektora Bragga wyraża czynnik  $\begin{bmatrix} 1 & -r_k^* \\ r_k & 1 \end{bmatrix}$ ,  $\Delta z$  oznacza długość jednego dyskretnego reflektora Bragga. Odbicie takiego jednego reflektora dane jest zależnością

$$r_k = -\tanh(|q_k| \Delta z) q_k^* / |q_k| \quad (90)$$

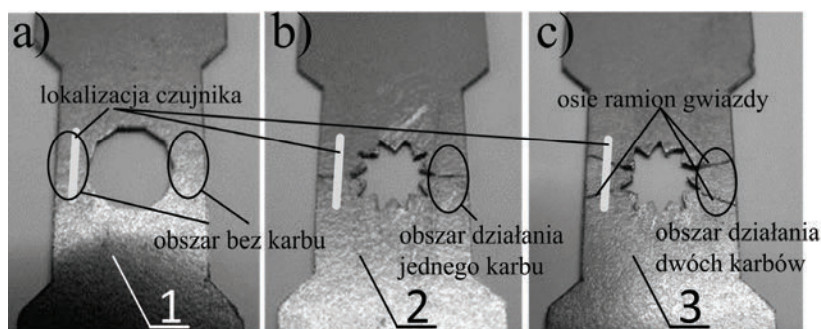
Odbicie całego czujnika wyrazimy zatem jako

$$P_R(z; \delta) = [\rho_k + P_R(z + \Delta z; \delta) e^{2i\delta\Delta z}] / [1 + \rho_k^* P_R(z + \Delta z; \delta) e^{2i\delta\Delta z}] \quad (91)$$

Odbicie całej siatki otrzymano po założeniu, że  $P_R(L; \delta) = 0$  z uwzględnieniem równania (91), aż do  $z = 0$ , uzyskując widmo  $P_R(\delta) = P_R(0; \delta)$ . Dla każdego dyskretnego

nego odcinka wyliczane jest odbicie  $P_R(z; \delta)$  wynikające z propagacji sygnału przez poszczególne reflektory Bragga, składające się na cały czujnik.

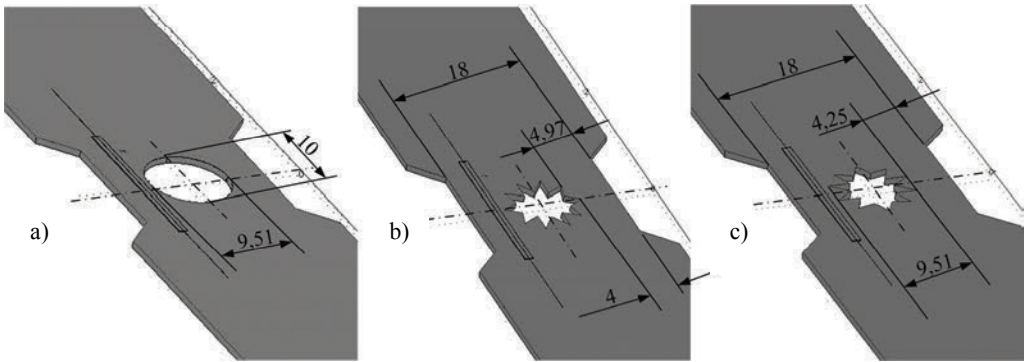
W ramach eksperymentu laboratoryjnego wykonano badania na specjalnie wykonanych próbkach ze stali o module Younga  $E = 204,5$  GPa, ze specjalnie przygotowanymi defektami, wytworzonych techniką laserową. Ułatwiło to uzyskanie odpowiedniej precyzji żadanego kształtu defektu, wytworzonego w próbce do badań. W badaniach eksperymentalnych wykorzystano siatkę Bragga o długościach fali Bragga równej 1551,5 nm zapisaną na wodorowanym światłowodzie jednomodowym metodą maski fazowej umożliwiającą jej apodyzację, zgodnie z profilem w kształcie funkcji Gaussa. Siatka długości  $L = 15$  mm została naklejona na próbki metalowe z wykorzystaniem kleju Sikadur-30. Wykorzystane do badań próbki oraz kształty „defektów-wad” przedstawiono na rysunku 42.



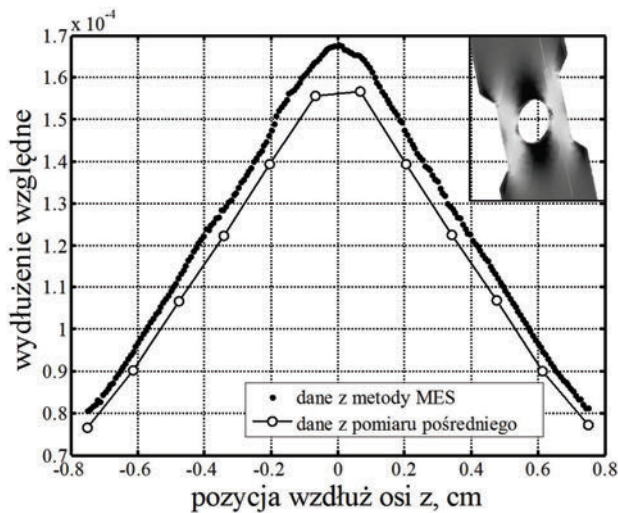
Rys. 42. Sposób wykonania defektów w badanym materiale z wykorzystaniem lasera rezonatorowego CO<sub>2</sub>. 1, 2, 3 – numery próbek z wywołanymi defektami  
 Fig. 42. Method of preparing defects in the tested material using the CO<sub>2</sub> resonator laser.  
 1, 2, 3 – numbers of specimens with defects

Pierwsza z badanych próbek (numer 1) miała kształt regularny (kołowy). Próbki 2 i 3 zostały wykonane z tą samą wadą nieregularną (w postaci gwiazdki) – jednak zorientowane tak, aby uzyskać działanie karbu pojedynczego i podwójnego. Próbka z ramionami gwiazdki ustawionymi prostopadłe do światłowodu (próbka 2) – karb pojedynczy i próbka z ramionami gwiazdki obróconymi o wartość podziałki ramion – karb podwójny (próbka 3). Wymiary próbek oraz defektów przedstawiono na rysunku 43.

W przypadku defektu o kształcie nieregularnym w postaci gwiazdki z ramieniem prostopadłym do osi światłowodu prowokuje się oddziaływanie jednego karbu, natomiast dla przypadku z ramieniem obróconym – karb nie jest pojedynczy, lecz zwielokrotniony. Wyniki wyznaczenia rozkładu wydłużenia względnego liniowego przedstawiono na rysunkach 44–46.



Rys. 43. Wymiary badanych defektów materiałowych  
 Fig. 43. Dimensions of the material defects tested



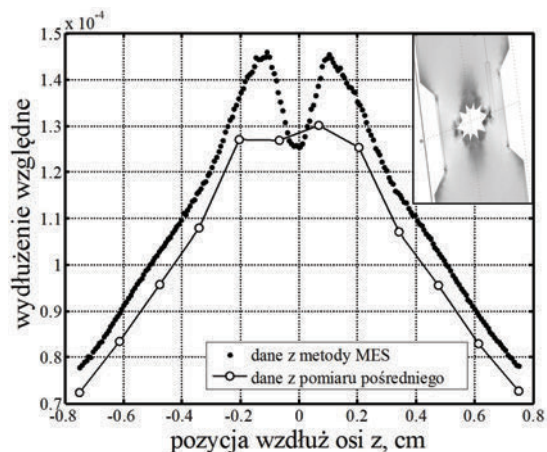
Rys. 44. Wartości wydłużenia względnego obliczone metodą elementów skończonych (MES) oraz uzyskane z wykorzystaniem zaproponowanej metody pomiaru pośredniego.  
 Wyniki uzyskane dla próbki 1 z rysunku 42

Fig. 44. Values of relative expansion calculated with the finite elements method (FEM) and those obtained with the proposed method of intermediate measurement.  
 Results obtained for sample 1 in Figure 42

Analizując charakterystyki względnego wydłużenia liniowego (rys. 44–46), obliczone podczas symulacji metodą elementów skończonych z charakterystykami uzyskanymi z wykorzystaniem zaproponowanej metody, zauważyć można pewne prawidłowości. We wszystkich badanych próbkach występuje reakcja zależna od rodzaju defektu. Bardzo ważnym elementem jest możliwość wyznaczenia maksymalnego wydłużenia w badanym materiale, czyli lokalizacja miejsca, w którym występują



największe wartości naprężenia. W przypadku badanych próbek materiału różnice w lokalizacji maksymalnego wydłużenia wyniosły około 0,6 mm.

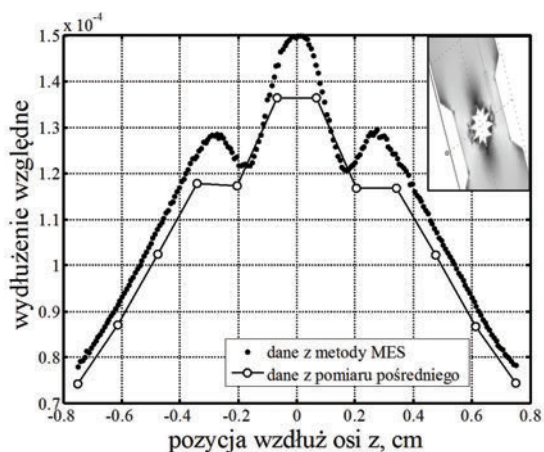


Rys. 45. Wartości wydłużenia względnego obliczone metodą elementów skończonych (MES) oraz uzyskane z wykorzystaniem zaproponowanej metody pomiaru pośredniego.

Wyniki uzyskane dla próbki 2 z rysunku 42

Fig. 45. Values of relative expansion calculated with the finite elements method (FEM) and those obtained with the proposed method of intermediate measurement.

Results obtained for sample 2 in Figure 42



Rys. 46. Wartości wydłużenia względnego obliczone metodą elementów skończonych (MES) oraz uzyskane przy wykorzystaniu zaproponowanej metody pomiaru pośredniego.

Wyniki uzyskane dla próbki 3 z rysunku 42

Fig. 46. Values of relative expansion calculated with the finite elements method (FEM) and those obtained with the proposed method of intermediate measurement.

Results obtained for sample 3 in Figure 42

W przypadku wyników dla próbek przedstawionych na rysunkach 44–46 wartości zmierzonego maksymalnego wydłużenia względnego występują dla tych samych pozycji wzdłuż osi  $z$ , jak w przypadku wartości wyznaczonych metodą MES. Jak widać z rysunków 44–46, wartości wydłużenia wyznaczane były w 12 punktach, co przy długości pomiarowej równej 15 mm daje rozdzielczość liniową pomiaru wydłużenia równą 1,25 mm. Przeprowadzone badania eksperymentalne potwierdziły występowanie defektów, które były rozstawione w odległości 3,14 mm (zarówno dla karbu pojedynczego i wielokrotnego). Charakterystyki widmowe, na podstawie których wyznaczone były przebiegi z rysunków 44–46, wykazują również dużą wrażliwość na charakter deformacji, co pozwala przypuszczać, że defekty o mniejszych rozmiarach fizycznych również mogłyby zostać wykryte niniejszą metodą.

## 6. PODSUMOWANIE

Istnieje wiele obszarów zastosowań światłowodowych siatek dyfrakcyjnych. W niniejszym opracowaniu poruszono problem uwarunkowań metrologicznych związanych z ich wykorzystaniem w wybranych układach pomiarowych. Przedstawiono metody analizy i syntezy światłowodowych siatek Bragga oparte na algorytmach iteracyjnych i wykorzystujące programowanie obiektowe. Przeanalizowano uwarunkowania metrologiczne metody i wykonanych z jej użyciem pomiarów pośrednich. Zaprezentowano metodę pomiaru maksymalnej wartości wydłużenia liniowego metodą optoelektroniczną, nieczułą na temperaturę. Metoda pomiaru, stanowisko, próbka oraz sposób uzyskania pomiarów zostały zorganizowane w taki sposób, aby możliwe było sprawdzenie wielkości niejednorodnej. W tym celu siatka dyfrakcyjna została naklejona na próbkę o specjalnym kształcie tworzącym określoną zmienność przekroju poprzecznego wzdłuż osi światłowodu. Eksperyment dostarczył informacji potrzebnych do wyznaczenia maksymalnej wartości naprężenia.

Przedstawione w niniejszym opracowaniu wyniki pomiarów potwierdzają, że przy odpowiednim zaprojektowaniu układu czujnika światłowodowego z dwiema światłowodowymi siatkami dyfrakcyjnymi istnieje możliwość wyznaczenia maksymalnej wartości wydłużenia liniowego niejednorodnego na długości pomiarowej. Niezbędne jest jednak przyjęcie pewnych założeń upraszczających. W niniejszej metodzie założono, że charakter rozkładu wydłużenia liniowego jest znany, zmienia się jedynie jego amplituda. Przyjęto również, że brak jest strat pomiędzy siatkami czujnika, co determinuje użycie czujnika z dwiema siatkami Bragga, zapisanymi na jednym włóknie. Jest to w rzeczywistości niemożliwe ze względu na zastosowane wszelkiego rodzaju połączenia pomiędzy siatkami, które generują straty światła pomiędzy siatkami czujnika.

Przedstawiono również sposób wykrywania błędów i defektów w materiałach o znanym współczynniku Younga. Przeprowadzone próby potwierdziły zdolność

rozdzielczości pomiaru defektów z wykorzystaniem zaproponowanego czujnika wyniosła 1,25 mm. Przedstawiona metoda detekcji defektów wykazuje zatem cechy, które mogą być przydatne w procesie pomiarowym. Raz zainstalowany układ pomiarowy do wielkości nieelektrycznych (np. wartości maksymalnej naprężenia i temperatury, defektów itp.) zabezpieczony przed uszkodzeniem mógłby być dowolnie ponownie aktywowany przez podłączanie elementów mobilnych układu pomiarowego.

## LITERATURA

- [1] Xiao G., Long X., Zhang B., Jin S., *A novel active optical approach for acceleration measurement based on a Y-shaped cavity dual-frequency laser*, Optics & Laser Technology, Vol. 44, 344–348, 2012.
- [2] Cavallo A., De Maria G., Natale C., Pirozzi S., *Optoelectronic joint angular sensor for robotic fingers*, Sensors and Actuators A, Vol. 152, 203–210, 2009.
- [3] Davino D., Visone C., Ambrosino C., Campopiano S., Cusano A., Cutolo A., *Compensation of hysteresis in magnetic field sensors employing Fiber Bragg Grating and magneto-elastic materials*, Sensors and Actuators A, Vol. 147, 127–136, 2008.
- [4] Lei K.F., Lee K.-F., Lee M.-Y., *Development of a Flexible PDMS Capacitive Pressure Sensor for Plantar Pressure Measurement*, Microelectronic Engineering, Vol. 99, 1–5, 2012.
- [5] Wen X., Zhang D., Qian Y., Li J., Fei N., *Improving the peak wavelength detection accuracy of Sn-doped, H<sub>2</sub>-loaded FBG high temperature sensors by wavelet filter and Gaussian curve fitting*, Sensors and Actuators A, Vol. 174, 91–95, 2012.
- [6] Furstenu N., Schmidt M., Horack H., Goetze W., Schmidt W., *Extrinsic Fabry–Perot interferometer vibration and acoustic sensor systems for airport ground traffic monitoring*, IEE Proc. Optoelectron, Vol. 144, 134–144, 1997.
- [7] Bin M., Jian X., *Experimental Research of Coupling Fiber–optic Sensor for Vibration Measurement*, IEEE, 1–4, 2010.
- [8] Yuan L., Zhou L., Jin W., *Fiber Optic Differential Interferometer*, IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, Vol. 49, 779–782, 2000.
- [9] Consales M., Buosciolo A., Cutolo A., Breglio G., Irace A., Buontempo S., Petagna P., Giordano M., Cusano A., *Fiber optic humidity sensors for high-energy physics applications at CERN*, Sensors and Actuators B, Vol. 159, 66–74, 2011.
- [10] Wang W.-C., Yee S.S., Reinhall P.G., *Optical viscosity sensor using forward light scattering*, Sensors and Actuators B, 24–25, 753–755, 1995.
- [11] Wójcik W., Ciężczyk S., Kisała P., *Wykorzystanie informacji o drugiej pochodnej widma w iteracyjnych algorytmach rekonstrukcji widm w spektroskopii*, Przegląd Elektrotechniczny, nr 10, 143–146, 2010.
- [12] Hotra Z., Mykytyuk Z., Sushynskyy O., Hotra O., Kisała P., *Systemy sensorowe z optycznym kanałem przesyłu informacji*, Przegląd Elektrotechniczny, vol. 10, 21–23, 2010.
- [13] Livanos A., Katzir A., Yariv A., *Fabrication of grating structures with variable period*, Optics Communications, Vol. 20, 179–182, 1977.

- [14] Stanley V.W., Hall R.G.N., *The production and performance of metrological diffraction gratings*, Production Engineer, Vol. 40, 38–44, 1961.
- [15] Bragg W.L., *The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by a Crystal*, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, Vol. 17, 43–57, 1913.
- [16] Yariv A., *Coupled-Mode Theory for Guided-Wave Optics*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. QE-9, No. 9, 919–933, 1973.
- [17] Vengsarkar A.M., Lemaire P.J., Judkins J.B., Bhatia V., Erdogan T., Sipe J.E., *Long-Period Fiber Gratings as Band-Rejection Filters*, Journal of Lightwave Technology, Vol. 14, 58–65, 1996.
- [18] Stegall D.B., Erdogan T., *Leaky Cladding Mode Propagation in Long-Period Fiber Grating Devices*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 11, No. 3, 343–345, 1999.
- [19] Lee C.-L., Lee R.-K., Kao Y.-M., *Synthesis of long-period fiber gratings with a Lagrange multiplier optimization method*, Optics Communications, Vol. 281, 61–74, 2008.
- [20] Hongbo Z., Liang D., Zeng J., *Dynamic strain measurement using two wavelength-matched fiber Bragg grating sensors interrogated by cascaded long-period fiber grating*, Optics and Lasers in Engineering, Vol. 50, 199–203, 2012.
- [21] Bhatia V., Burford M.K., Murphy K.A., Vengsarkar A.M., *Long-period fiber grating sensors*, OFC '96, Technical Digest, 265–266, 1996.
- [22] Prabhugoud M., Peters K., Pearson J., Zikry M.A., *Independent measurement of strain and sensor failure features in Bragg grating sensors through multiple mode coupling*, Sensors and Actuators A, Vol. 135, 433–442, 2007.
- [23] Baptista J.M., Santos S.F., Rego G., Frazao O., Santos J.L., *Micro-displacement or bending measurement using a long-period fibre grating in a self-referenced fibre optic intensity sensor*, Optics Communications, Vol. 260, 8–11, 2006.
- [24] Chen S., Tong Z., Zhao Q., Liu Z., Dong X., *A smart bending sensor with a novel temperature- and strain-insensitive long-period grating*, Sensors and Actuators A, Vol. 116, 103–106, 2004.
- [25] Carvalho J.P., Anuskiewicz A., Statkiewicz-Barabach G., Baptista J.M., Frazão O., Mergo P., Santos J.L., Urbaniaczyk W., *Long period gratings and rocking filters written with a CO<sub>2</sub> laser in highly-birefringent boron-doped photonic crystal fibers for sensing applications*, Optics Communications, Vol. 285, 264–268, 2012.
- [26] Ni N., Chan C.C., Wong W.C., Shao L.Y., Dong X.Y., Shum P., *Cavity ring-down long period grating pressure sensor*, Sensors and Actuators A, Vol. 158, 207–211, 2010.
- [27] Zhang L., Liu Y., Everall L., Williams J.A.R., Bennion I., *Design and Realization of Long-Period Grating Devices in Conventional and High Birefringence Fibers and Their Novel Applications as Fiber-Optic Load Sensors*, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, Vol. 5, No. 5, 1373–1378, 1999.
- [28] Zhu T., Rao Y.J., Wang J.L., Liu M., *Transverse-load characteristics of twisted long-period fibre gratings written by high-frequency CO<sub>2</sub> laser pulses*, Electronics Letters, Vol. 42, No. 8, 1–2, 2006.
- [29] Falciai R., Mignani A.G., Vannini A., *Long period gratings as solution concentration sensors*, Sensors and Actuators B, Vol. 74, 74–77, 2001.
- [30] Barnes J.A., Brown R.S., Cheung A.H., Dreher M.A., Mackey G., Look H.-P., *Chemical sensing using a polymer coated long-period fiber grating interrogated by ring-down spectroscopy*, Sensors and Actuators B, Vol. 148, 221–226, 2010.
- [31] Hochreiner H., Cada M., Wentzell P.D., *Modeling the Response of a Long-Period Fiber Grating to Ambient Refractive Index Change in Chemical Sensing Applications*, Journal of Lightwave Technology, Vol. 26, No. 13, 1986–1992, 2008.
- [32] Nidhi, Kalerb R.S., Tiwaria U., Mishra V., Singha N., Kapura P., *Investigation of Long Period Grating as refractive index sensor*, Optik, Vol. 123, 1071–1073, 2012.

- [33] Yang M., Wang D.N., Liao C.R., *Fiber Bragg Grating With Micro-Holes for Simultaneous and Independent Refractive Index and Temperature Sensing*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 23, No. 20, 1511–1513, 2011.
- [34] MacDougall T.W., Pilevar S., Haggans C.W., Jackson M.A., *Generalized Expression for the Growth of Long Period Gratings*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 10, 1449–1451, 1998.
- [35] Shu X., Allsop T., Gwandu B., Zhang L., Bennion I., *High-Temperature Sensitivity of Long-Period Gratings in B-Ge Codoped Fiber*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 13, No. 8, 818–820, 2001.
- [36] Venugopalan T., Yeo T.L., Sun T., Grattan K.T.V., *High sensitivity long-period grating-based temperature monitoring using a wide wavelength range to 2.2  $\mu\text{m}$* , Optics Communications, Vol. 268, 42–45, 2006.
- [37] Enriquez D.A.C., da Cruz A.R., Maria Therez M., Giraldo R., *Hybrid FBG-LPG sensor for surrounding refractive index and temperature simultaneous discrimination*, Optics & Laser Technology, Vol. 44, 981–986, 2012.
- [38] Patrick H.J., Williams G.M., Kersey A.D., Pedrazzani J.R., Vengsarkar A.M., *Hybrid Fiber Bragg Grating Long Period Fiber Grating Sensor for Strain/Temperature Discrimination*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 8, No. 9, 1223–1225, 1996.
- [39] Zhan Y., Luo J., Wu H., Yu M., *An all-fiber high resolution fiber grating concentration sensor*, Optik, Vol. 123, 637–640, 2012.
- [40] Zhao C.-L., Demokan M.S., Jin W., Xiao L., *A cheap and practical FBG temperature sensor utilizing a long-period grating in a photonic crystal fiber*, Optics Communications, Vol. 276, 242–245, 2007.
- [41] Ding J.-F., Zhang A.P., Shao L.-Y., Yan J.-H., He S., *Fiber-Taper Seeded Long-Period Grating Pair as a Highly Sensitive Refractive-Index Sensor*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 17, No. 6, 1247–1249, 2005.
- [42] Abi Kaed Bey S.K., Lam C.C.C., Sun T., Grattan K.T.V., *Chloride ion optical sensing using a long period grating pair*, Sensors and Actuators A, Vol. 141 390–395, 2008.
- [43] Zhan C., Zhu Y., Yin S., Ruffin P., *Multi-parameter harsh environment sensing using asymmetric Bragg gratings inscribed by IR femtosecond irradiation*, Optical Fiber Technology, Vol. 13, 98–107, 2007.
- [44] Zhao Q., Qu Y., Wang Y., Li F., *A Novel Temperature Sensor Based on a Long Period Fiber Grating With a Unique Double-cladding Layer Structure*, International Conference on Electronics and Optoelectronics ICEOE, 281–283, 2011.
- [45] Erdogan T., Sipe J.E., *Tilted fiber phase gratings*, Journal of the Optical Society of America A, Vol. 13, issue 2, 296–313, 1996.
- [46] Caucheteur C., Mège P., *Demodulation Technique for Weakly Tilted Fiber Bragg Grating Refractometer*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 17, No. 12, 2703–2705, 2005.
- [47] Jin Y.X., Chan C.C., Dong X.Y., Zhang Y.F., *Temperature-independent bending sensor with tilted fiber Bragg grating interacting with multimode fiber*, Optics Communications, Vol. 282, 3905–3907, 2009.
- [48] Shao L.-Y., Albert J., *Lateral force sensor based on a core-offset tilted fiber Bragg grating*, Optics Communications, Vol. 284, 1855–1858, 2011.
- [49] Shao L.-Y., Laronche A., Smietana M., Mikulic P., Bock W.J., Albert J., *Highly sensitive bend sensor with hybrid long-period and tilted fiber Bragg grating*, Optics Communications, Vol. 283, 2690–2694, 2010.
- [50] Miao Y.-P., Liu B., Zhang K., Zhao Q.-D., *Linear edge and temperature characteristic of tilted fiber Bragg gratings cladding-mode envelope*, Optical Fiber Technology, Vol. 17, 286–290, 2011.

- [51] Jiang Q, Hu D., Yang M., *Simultaneous measurement of liquid level and surrounding refractive index using tilted fiber Bragg grating*, Sensors and Actuators A, Vol. 170, 62–65, 2011.
- [52] Chehura E., James S.W., Tatum R.P., *Temperature and strain discrimination using a single tilted fibre Bragg grating*, Optics Communications, Vol. 275, 344–347, 2007.
- [53] Dong X., Liu Y., Liu Z., Dong X., *Simultaneous displacement and temperature measurement with cantilever-based fiber Bragg grating sensor*, Optics Communications, Vol. 192, 213–217, 2001.
- [54] Wang D., Cao M., Li C., Li D., Chen Y., Xu X., Xu J., Li Y., Wan Z., Wang B., *Fiber Bragg Grating Liquid Level Sensor with Double Pressure and Temperature Sensitivities*, Procedia Engineering, Vol. 15, 704–709, 2011.
- [55] Frazão O., Romero R., Araujo F.M., Ferreira L.A., Santos J.L., *Strain-temperature discrimination using a step spectrum profile fibre Bragg grating arrangement*, Sensors and Actuators A, Vol. 120, 490–493, 2005.
- [56] Li L., Tong X.L., Zhou C.M., Wen H.Q., Lv D.J., Ling K., Wen C.S., *Integration of miniature Fabry–Perot fiber optic sensor with FBG for the measurement of temperature and strain*, Optics Communications, Vol. 284, 1612–1615, 2011.
- [57] Mroczka J., Szczuczyński D., *Improved regularized solution of the inverse problem in turbidimetric measurements*, Applied Optics, Vol. 49, 4591–4603, 2010.
- [58] Mroczka J., Szczuczyński D., *Inverse problems formulated in terms of first-kind Fredholm integral equations in indirect measurements*, Metrology and Measurement Systems, Vol. 16, 333–357, 2009.
- [59] Shi Z.J., Shen J., *Convergence of PRP method with new nonmonotone line search*, Applied Mathematics and Computation, Vol. 181, 423–431, 2006.
- [60] Armijo L., *Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives*, Pacific Journal of Mathematics, Vol. 16, 1–3, 1966.
- [61] Shi Z.J., Shen J., *Convergence of the Polak–Ribiere–Polyak conjugate gradient method*, Nonlinear Analysis, Vol. 66, 1428–1441, 2007.
- [62] Qu A., Li D., Min L., *The convergence rate of a restart MFR conjugate gradient method with inexact line search*, Applied Mathematics and Computation, Vol. 218, 11380–11390, 2012.
- [63] Kogelnik H., *Filter Response of Nonuniform Almost-Periodic Structures*, The Bell Systems Technical Journal, Vol. 55, 109–125, 1976.
- [64] Won P.C., Lai Y., Zhang W., Leng J.S., Williams J.A.R., *Distributed temperature measurement using a Fabry–Perot effect based chirped fiber Bragg grating*, Optics Communications, Vol. 265, 494–499, 2006.
- [65] Xiaowei D., Wenkai L., Dongyu W., Menglong W., *Study on Fabry–Perot cavity consisting of two chirped fiber Bragg gratings*, Optical Fiber Technology, Vol. 18, 209–214, 2012.
- [66] Klamer E.L., Hordijk D.A. Hermes M.C.J., *The influence of temperature on RC beams strengthened with externally bonded CFRP reinforcement*, HERON, Vol. 53, 157–186, 2008.
- [67] Kisała P., *Optoelectronic sensor for simultaneous and independent temperature and elongation measurement using Bragg gratings*, Przegląd Elektrotechniczny, t. 11a, 343–346, 2012.
- [68] Botsis J., Humbert L., Colpo F., Giaccari P., *Embedded fiber Bragg grating sensor for internal strain measurements in polymeric materials*, Optics and Lasers in Engineering, Vol. 43, 491–510, 2005.
- [69] Kuang K.S.C., Kenny R., Whelan M.P., Cantwell W.J., Chalker P.R., *Embedded fibre Bragg grating sensors in advanced composite materials*, Composites Science and Technology, Vol. 61, 1379–1387, 2001.
- [70] Chen Y., Li J., Yang Y., Chen M., Li J., Luo H., *Numerical modeling and design of mid-infrared FBG with high reflectivity*, Optik – International Journal for Light and Electron Optics, In Press, 2013.

## INDIRECT MEASUREMENTS OF PHYSICAL QUANTITIES USING ANALYSIS AND SYNTHESIS METHODS OF DIFFRACTION FIBER GRATINGS

This study presents an analysis of problems related to indirect measurements of physical quantities. It also presents a method for detecting material defects through the use of periodic optical fiber structures and light diffraction modeling. The methods of analysis and synthesis of fiber Bragg gratings, based on iterative algorithms and using object-oriented programming, are demonstrated. We analyze the metrological aspects of the method and the features of the indirect measurements that were performed using this method. In the first part of this study, an overview of and the theoretical basis for waveguide structures with periodic changes of the refractive index are presented. In the next part, we discuss the methodology of indirect measurements using optical periodic structures. This section of the study defines the matrix processing equation of proposed optoelectronic sensor systems.

The next section details the results of the numerical simulations and the calculations of the spectral characteristics of sensors used in the proposed measurement systems. This section also presents a method of detecting errors and defects in materials with a known Young modulus. The FBG (fiber Bragg grating) sensor used in the model was tested under laboratory conditions when diagnosing various defects in the samples prepared for testing. Our measurements were used to show the extent of the optoelectronic sensor's ability to detect abnormalities and defects. The linear resolution of measurements of the expansion with the proposed method was approximately 1 mm. The study confirmed the presence of defects, which were spaced at a distance of  $\sim 3$  mm. In the samples of the material studied, the differences in the location of the maximum elongation were approximately 0.6 mm.

Finally, the inverse problem of the recovery of the physical quantities is formulated. The inverse analysis is based on the measurement of selected parameters of fiber grating based-sensors. In this section, we present an optoelectronic method for measuring the maximum value of the non-uniformly distributed strain at varying temperatures. The use of a conjugate gradient algorithm and sensor model allows us to determine the maximum non-uniform strain value and the temperature at which the measurement is made. The maximum value of the non-uniform strain determination error was  $\sim 0.25\%$ . The presented sensor system allows the determination of the maximum strain value with a linear resolution of the measurement rate of 3 mm. To experimentally verify the possibility of using uniform Bragg gratings for the simultaneous measurement of two quantities, a specially designed measurement system was proposed. The possibility of determining the maximum value of a non-uniform distribution of strain and temperature by measuring the spectrum with a two-grating sensor was demonstrated.





Piotr M. SZCZYPIŃSKI\*  
Andrzej MATERKA\*

## **GEOMETRYCZNE MODELE DEFORMOWALNE DO ANALIZY I ROZPOZNAWANIA OBRAZÓW**

Opracowanie stanowi przegląd oryginalnych rozwiązań z dziedziny metod numerycznych, wykorzystujących modele deformowalne do analizy obrazów cyfrowych. Przedstawiono w nim model radialny aktywnego konturu oraz deformowalnej powierzchni do segmentacji obrazów dwu- i trójwymiarowych. Opisano działanie modeli siatkowych oraz ich zastosowania w śledzeniu ruchu, dopasowaniu obrazów i rozpoznawaniu obiektów. Ponadto, szczegółowo opisano uniwersalną metodę kompensowania deformacji w modelach parametrycznych o dowolnej topologii. Końcowa część pracy poświęcona jest przykładom zastosowań modeli deformowalnych w analizie filmów endoskopowych oraz obrazów rentgenowskich ziaren zbóż.

### **1. WPROWADZENIE**

Niniejsza praca stanowi przegląd opracowań oryginalnych modeli deformowalnych – metod analizy i rozpoznawania obrazów cyfrowych. Modele deformowalne umożliwiają rozwiązanie istotnych problemów dotyczących segmentacji obrazów w dwóch i trzech wymiarach, identyfikacji obiektów i śledzenia ich ruchu, a także dopasowania obrazów, których rozwiązanie innymi metodami jest wyjątkowo trudne.

Tradycyjne techniki przetwarzania obrazów wymagają na ogół, aby wyniki jednej procedury stanowiły dane wejściowe następnej. Stosunkowo proste techniki i algorytmy łączone są kolejno, tworząc bardziej skomplikowane systemy przetwarzania i analizy obrazów. Na przykład problem segmentacji obrazu rozwiązuje się zazwyczaj, dzieląc go na mniejsze zagadnienia rozwiązywane kolejno. Pierwsze z nich może polegać na progowaniu jasności, drugie na korekcji kształtu wyodrębnionych obszarów metodami morfologicznymi, a trzecie na identyfikacji obszarów stanowiących cel

---

\* Politechnika Łódzka, Instytut Elektroniki, ul. Wólczańska 211/215, 90-924 Łódź.

segmentacji [1]. Należy jednak zwrócić uwagę, że w każdym z tych zagadnień część informacji zawartej w obrazie jest tracona i nie jest dostępna w kolejnym etapie.

Analiza obrazów obejmuje często zagadnienia i problemy, których rozwiązanie wymaga zastosowania równoległe kilku algorytmów w taki sposób, aby wpływały one na siebie wzajemnie, a efekt końcowy uwzględniał – w pewnych proporcjach – wyniki uzyskane przez każdy z nich. Podejście to można porównać do sposobu uzyskiwania rozwiązań w wyniku dyskusji prowadzonych w zespołach ludzkich, w których poszczególne uczestnicy przedstawiają własne opinie, próbują się wzajemnie przekonywać do swoich racji, wpływając na siebie wzajemnie, co w efekcie ma prowadzić do osiągnięcia rozwiązań kompromisowych. Pozytywnym efektem takiego podejścia jest wzajemne korygowanie błędnych opinii lub, w przypadku metod numerycznych, błędnych wyników działania.

Modele deformowalne stanowią jedno z możliwych podejść do łączenia odrębnych metod, które funkcjonując łącznie uzupełniają się i korygują efekty swoich działań. Cechą wspólną i wyróżnikiem modeli deformowalnych jest między innymi umożliwienie połączenia wybranego algorytmu przetwarzania obrazu oraz metody narzucającej ograniczenia wynikające ze wstępnej wiedzy o zależnościach przestrzennych występujących w analizowanym obrazie. Podejście takie prowadzi do powstania jakościowo nowych rozwiązań o zwiększonej odporności na zakłócenia i umożliwia uwzględnienie różnorodnej wiedzy *a priori* dotyczącej przedmiotu analizy.

Ideę i sposób działania modeli deformowalnych najprościej można przedstawić na przykładzie aktywnego konturu [2]. Model ten jest przykładem połączenia algorytmu obliczania gradientu jasności obrazu z wiedzą o tym, że kontur jest ciągłą i gładką krzywą. W matematycznym opisie aktywny kontur jest krzywą daną funkcją parametryczną  $\mathbf{v}(s) = [x(s), y(s)]^T$ , gdzie  $\mathbf{v}$  jest wektorem współrzędnych punktów krzywej, a  $s \in \langle 0, 1 \rangle$  jest parametrem. Aktywnemu konturowi przypisuje się pewien funkcjonal nazywany energią wewnętrzną (1). Ta energia jest całką lokalnych gęstości energii liczoną wzdłuż konturu. Gęstość energii w każdym punkcie konturu jest sumą dwóch składników. Pierwszy,  $E_e$  (tzw. energia zewnętrzna), reprezentuje udział algorytmu, który analizuje obraz lokalnie, nie uwzględniając zależności przestrzennych o rozległym charakterze. Drugi natomiast,  $E_i$  (tzw. energia wewnętrzna, energia naprężeń), reprezentuje narzucone ograniczenia dotyczące zależności przestrzennych w obrazie wynikające z wiedzy początkowej.

$$E \int_0^1 (E_e(s) + (E_i(s)) ds \quad (1)$$

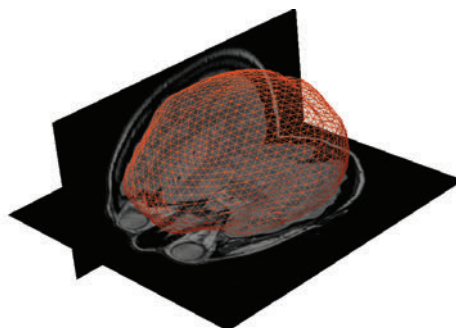
$$E_e(s) = -\xi \nabla I(x(s), y(s)) \quad (2)$$

$$E_i(s) = \tau \left| \frac{d\mathbf{v}}{ds} \right|^2 + \rho \left| \frac{d^2\mathbf{v}}{ds^2} \right|^2 \quad (3)$$

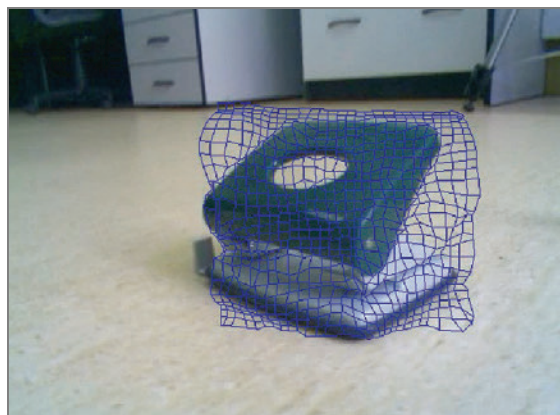
W klasycznym modelu aktywnego konturu [2] energia  $E_e$  (2) jest proporcjonalna do wartości bezwzględnej gradientu jasności obrazu w punkcie  $\mathbf{v}(s)$  ze znakiem minus. Energia  $E_i$  (3) jest obliczana z wykorzystaniem równania energii potencjalnej struny. Współczynniki  $\rho$ ,  $\tau$  i  $\xi$  są parametrami, a  $I(\cdot)$  jest funkcją jasności obrazu. Parametr  $\rho$  określa odporność modelu na zginanie (sprężystość), parametr  $\tau$  – odporność na rozciąganie (rozciągliwość), natomiast  $\xi$  – siłę, z jaką oddziałuje obraz. Poszukiwanie rozwiązania, w tym przypadku konturu w obrazie, polega na minimalizacji wartości funkcjonału (1) przez modyfikowanie współrzędnych punktów krzywej danych wektorem  $\mathbf{v}$ .



(a)



(b)



(c)

Rys. 1. Reprezentacje dyskretnych modeli deformowalnych:  
 (a) krzywej, (b) zamkniętej powierzchni trójwymiarowej, (c) wzorca

Fig. 1. Representations of discrete deformable models:  
 (a) an active contour, (b) a closed three-dimensional surface, (c) a deformable grid

W praktyce problem rozwiązywany jest numerycznie, co wymaga dyskretyzacji parametru  $s$ . Krzywa ciągła staje się linią łamaną, a całka równania (1) zostaje zmieniona w sumę energii cząstkowych w punktach załamań (węzłach modelu). Funkcjonał staje się funkcją wielu zmiennych, gdzie zmiennymi są współrzędne poszczególnych punktów załamań krzywej.

Modele deformowalne, w zależności od zastosowania, różnią się od siebie pod wieloma względami. Pierwszym z nich jest ich topologia (rys. 1). W przypadku aktywnego konturu służy on do segmentacji obrazu i umożliwia wyodrębnienie pewnego obszaru zainteresowania. W przypadku segmentacji obrazów trójwymiarowych, np. tomografii komputerowej, do segmentacji stosuje się model deformowalnej powierzchni zamkniętej. Do śledzenia ruchu [3] w obrazach wideo oraz do dopasowania [4] obrazów medycznych stosuje się model deformowalnego wzorca. W formie dyskretnej jest on grafem planarnym, którego węzły mogą zmieniać położenie i który stanowi medium pośredniczące umożliwiające dopasowanie do siebie w sposób elastyczny zawartości dwóch nieznacznie różniących się obrazów dwuwymiarowych [5]. Podobny model o strukturze przestrzennej przypominającej sieć kryształu można stosować do dopasowania trójwymiarowych obrazów tomograficznych [6].

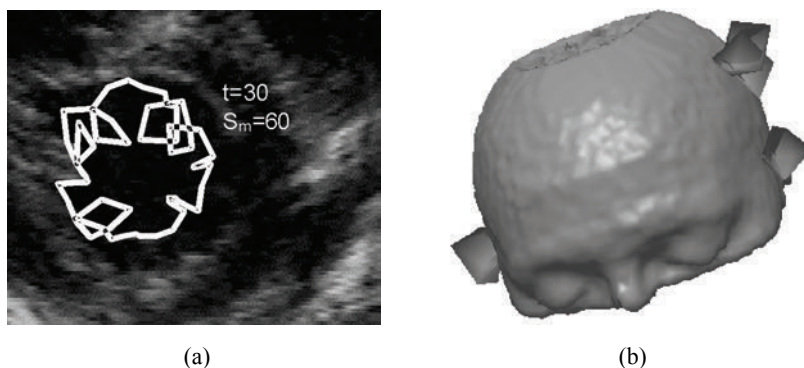
Modele deformowalne można również klasyfikować ze względu na sposób obliczania wpływu obrazu (kontury poszukujące brzegu obszaru [2] lub bazujące na cechach jego wnętrza [7]) na sposób modelowania ograniczeń wynikających z zależności przestrzennych [3], [8], metodę minimalizacji funkcjonału energetycznego (model dynamiczny [9]) oraz przeprowadzenia dyskretyzacji parametru lub jej braku (modele parametryczne lub poziomicowe [10]). Wydaje się, że tak duża różnorodność modeli deformowalnych jest zaletą umożliwiającą dobór odpowiedniego modelu do konkretnego zastosowania, z drugiej jednak strony należy zauważyć, że nie istnieje jeden uniwersalny model odpowiedni do rozwiązywania dowolnego problemu, a dobór właściwego rozwiązania jest zazwyczaj pracochłonny i wymaga przeprowadzenia wielu eksperymentów. Należy też zwrócić uwagę na to, że rozwiązania prezentowane w dostępnej literaturze są niedoskonałe pod wieloma względami, ukierunkowane na rozwiązanie wąskiego zakresu problemów, niekoniecznie w sposób optymalny [11], [12]. Ponadto okazuje się, że w specyficznych zastosowaniach należy sięgać po rozwiązania wymagające opracowania nietypowych topologii [3], [13], zastosowania specyficznych metod obliczania wpływu obrazu [14] lub nietypowego modelowania naprężeń [3], [8].

W kolejnych podrozdziałach przedstawiono przegląd oryginalnych opracowań, będący wkładem w rozwój metod analizy obrazów wykorzystujących modele deformowalne. Umożliwiają one rozwiązanie problemów, których rozwiązanie za pomocą znanych modeli nie było możliwe. Wśród nich są: aktywny kontur radialny do szybkiej segmentacji obrazów dwu- i trójwymiarowych, algorytmy obliczania naprężeń za pomocą szablonów geometrycznych oraz siatki odniesienia, a także metoda dopasowania dwuetapowego, umożliwiająca dopasowanie do siebie detali obrazów w stosunkowo krótkim czasie.

## 2. MODEL RADIALNY

Klasyczny aktywny kontur [2] zmienia kształt pod wpływem wartości bezwzględnej gradientu jasności obrazu. Węzły modelu przemieszczają się w stronę tych miejsc obrazu, w których wartości te są duże. Problem pojawia się w przypadku obrazów z zakłóceniami lub w przypadku, w którym nie występują gwałtowne zmiany jasności na granicy rozdzielanych obszarów. Węzły modelu „przyciągane” są wówczas do miejsc, w których występują duże gradienty jasności wynikające z zakłóceń lub w wyniku minimalizacji składowej danej równaniem (3) model przyjmuje kształt okręgu niepokrywający się z rzeczywistą, poszukiwaną krawędzią obszaru.

Rozwiązaniem problemu okazał się model konturu analizujący właściwości obszarów [7], [15]. Działanie tego modelu polega na analizie lokalnych cech obrazu. Jeśli wskazują one, że węzeł znajduje się wewnątrz wydzielanego obszaru, to jest on „wypychany” na zewnątrz. W przeciwnym przypadku węzeł „wciągany” jest do wewnątrz. W najprostszym przypadku, jeśli rozgraniczane obszary różnią się jasnością, analizowaną cechą jest właśnie lokalna jasność obrazu.



Rys. 2. Przykłady nieprawidłowo zmienionego porządku węzłów (zapętlenia):

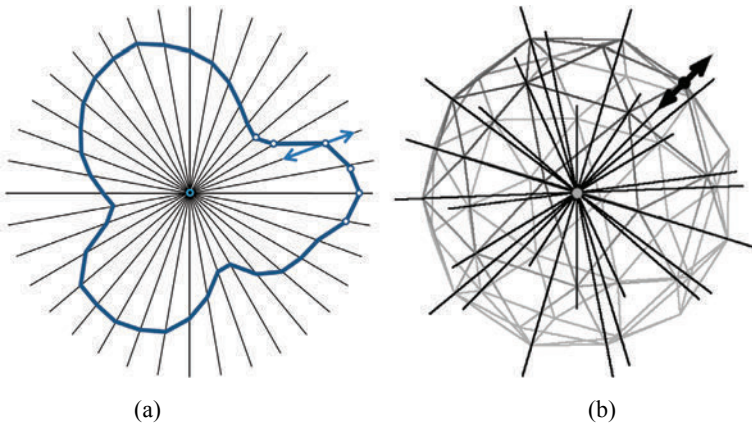
(a) w aktywnym konturze balonowym, (b) w deformowalnej powierzchni

Fig 2. Examples of incorrectly altered order of nodes (loops) in:

(a) a balloon active contour, (b) a deformable surface

W modelu opierającym się na właściwościach obszarów konieczne jest, dla każdego węzła, określenie kierunku i zwrotu wektora wskazującego wewnątrz lub zewnątrz. W modelu balonowym [16] są one określone za pomocą przybliżonego wektora normalnego do krzywej konturu w danym węźle. Jest to jednak rozwiązanie niedoskonałe niezapobiegające zjawisku zapętlenia się konturu (rys. 2). Ponadto minimalizacja energii wewnętrznej modelu balonowego wykorzystuje procedury krokowe i jest czasochłonna – wymaga przeprowadzenia złożonych obliczeń wektorowych dla każdego węzła w każdej iteracji.

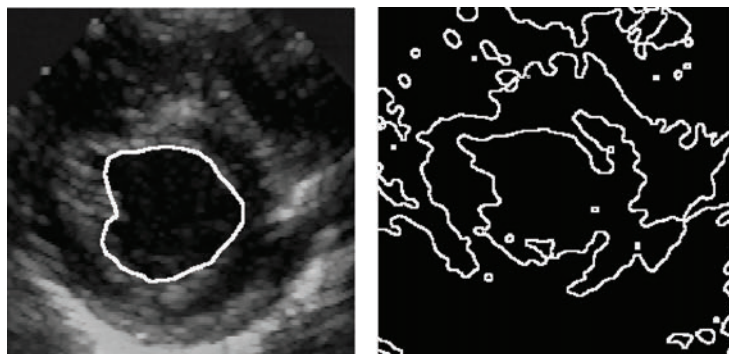
Aby rozwiązać problem zapętlania się konturu i jednocześnie skrócić czas konieczny do przeprowadzenia minimalizacji funkcjonału energii wewnętrznej, zaproponowano aktywny kontur radialny (rys. 3) nazywany również modelem z punktem środkowym [7], [17]. Zaproponowane rozwiązanie polega na wprowadzeniu ograniczenia ruchu węzłów aktywnego konturu. W modelu klasycznym położenie węzła w obrazie dwuwymiarowym określone jest dwiema współrzędnymi, np. w pionie i w poziomie. W procesie minimalizacji energii obie te współrzędne ulegają zmianie, w modelu radialnym ruch węzłów jest ograniczony do jednego kierunku. Poszczególne węzły poruszają się wyłącznie po półprostych mających swój początek w tzw. punkcie środkowym. Punkt ten wybierany jest arbitralnie w taki sposób, aby znajdował się możliwie blisko środka ciężkości wydzielanego obszaru. Półproste, po których mogą przemieszczać się węzły, rozłożone są promieniście w równych odstępach kątowych. Jest ich tyle, ile węzłów i każdy węzeł jest jednoznacznie przyporządkowany do jednej takiej półprostej. Położenie każdego punktu węzłowego w modelu radialnym określone jest przez współrzędną  $r_s$  oznaczającą odległość węzła  $s$  od punktu środkowego.



Rys. 3. Model radialny w przestrzeni: (a) dwuwymiarowej, (b) trójwymiarowej  
Fig. 3. The radial model in: (a) two-dimensional, (b) three-dimensional space

Współrzędne węzłów w układzie kartezjańskim można obliczyć na podstawie równania (4), w którym  $S_m$  oznacza liczbę wszystkich węzłów modelu, natomiast  $x_o$ ,  $y_o$  są współrzędnymi punktu środkowego.

$$\begin{bmatrix} x_s \\ y_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_o + r_s \cos\left(\frac{2\pi s}{S_m}\right) \\ y_o + r_s \sin\left(\frac{2\pi s}{S_m}\right) \end{bmatrix} \quad (4)$$



Rys. 4. Wyznaczanie ścianki lewej komory serca w obrazie ultrasonograficznym:

- (a) prawidłowe za pomocą modelu radialnego,
  - (b) błędne, z wykorzystaniem filtracji medianowej obrazu, progowania jasności i obliczenia wartości bezwzględnej gradientu
- Fig. 4. Determination of the left ventricle in an ultrasound image:
- (a) correct by the radial model, (b) incorrect by means of median filtering, grey-level thresholding and computation of absolute image gradient

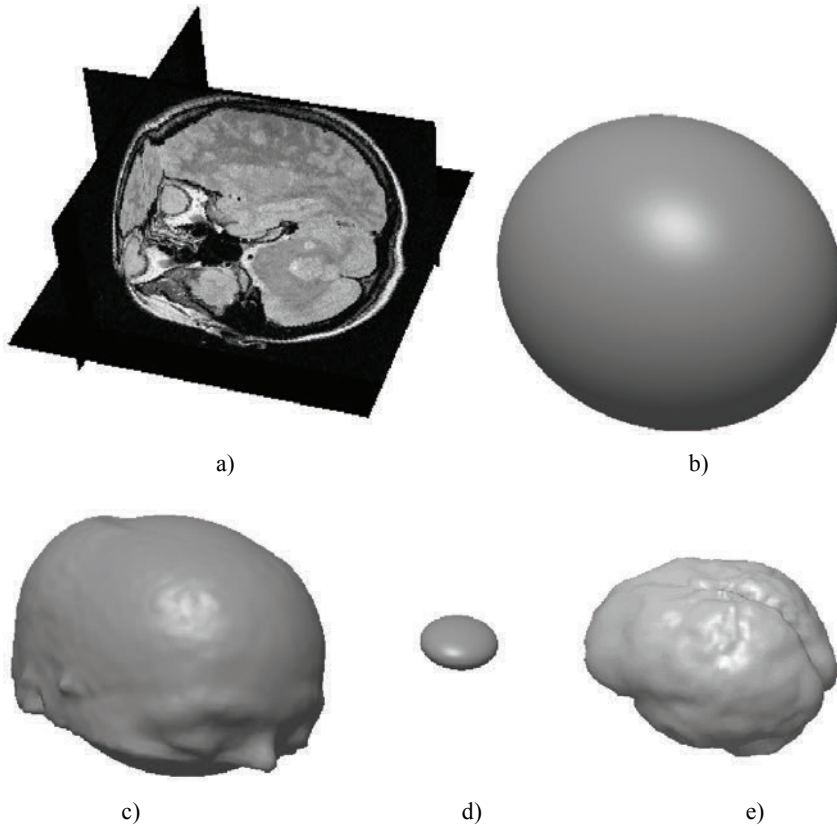
W modelu radialnym kierunek wewnątrz–zewnątrze określony jest dla danego węzła kierunkiem półprostej, po której węzeł ten może się przesuwać. Przesunięcie węzła na zewnątrz powodowane jest przez zwiększenie wartości współrzędnej  $r_s$ , natomiast przesunięcie do wewnątrz zmniejszeniem tej wartości.

W modelu radialnym nie ma też konieczności definiowania i obliczania wartości energii wewnętrznej modelu. Proces dopasowania kształtu konturu przebiega na podstawie prostego algorytmu powodującego przesuwanie węzłów na zewnątrz lub do wewnątrz na podstawie lokalnej jasności obrazu we współrzędnych  $x_s$ ,  $y_s$  węzła. Wygładzanie konturu, równoważne modelowaniu naprężeń, dokonywane jest za pomocą prostej filtracji dolnoprzepustowej współrzędnych  $r_s$  oraz symetrycznego filtru o skończonej odpowiedzi impulsowej. Równoważność zastosowania takiego filtru w stosunku do metody obliczania naprężeń w modelu aktywnego konturu wykazano w [7].

Model radialny zastosowano z powodzeniem między innymi do segmentacji obrazów ultrasonograficznych (rys. 4). Celem analizy było oznaczenie powierzchni przekrojów lewej komory serca i oszacowanie jej objętości w skurczu i rozkurczu. Zastosowanie modelu radialnego aktywnego konturu umożliwiło rozwiązanie tego problemu. Należy przy tym zwrócić uwagę, że segmentacja obrazów ultrasonograficznych jest trudna ze względu na silne zakłócenia widoczne w obrazie.

Opracowano również model radialny deformowalnej powierzchni trójwymiarowej [17], w tym przypadku ruch węzłów modelu jest również ograniczony do półprostych o początkach w określonym punkcie wnętrza. W przypadku trzech wymiarów uzyskano znaczące ograniczenie czasu analizy, redukując złożone obliczeniowo zagadnienie trójwymiarowe do problemu jednowymiarowego. Model radialny powierzchni zaim-

plementowano w programie komputerowym MaZda [18], [19], w którym służy do wyodrębniania obiektów trójwymiarowych w obrazach tomograficznych. Przykłady ewolucji modelu od prostej bryły elipsoidalnej do kształtu odzwierciedlającego granice mózgu lub rysy twarzy przedstawiono na rysunku 5.



Rys. 5. Dopasowanie modelu radialnego w przestrzeni trójwymiarowej: (a) obraz analizowany, (b, d) wstępny kształt modelu, (c, e) model dopasowany do analizowanych obiektów  
 Fig. 5. Radial model fitting in a three-dimensional space: (a) the analyzed image, (b, d) the initial shape of the model, (c, e) the model fitted to the respective objects

### 3. OBLICZANIE NAPRĘŻEŃ ZA POMOCĄ SZABLONÓW GEOMETRYCZNYCH

Deformowalny wzorec [8] umożliwia powiązanie elementów jednego obrazu z odpowiadającymi im elementami znajdującymi się w innym obrazie. Właściwe rozwiązanie tego problemu wymaga znalezienia sensownej transformacji przestrzennej



jednego obrazu; takiej, żeby umiejscowienie elementów w jego przekształconej wersji było takie samo jak umiejscowienie odpowiadających im elementów w drugim obrazie. Omawiany model umożliwia znalezienie takiej transformacji. Dzięki niemu możliwe jest dopasowanie do siebie obrazów w zastosowaniach medycznych, śledzenie ruchu przez porównywanie kolejnych obrazów filmu lub rozpoznawanie treści obrazu analizowanego przez porównywanie jej z obrazem wzorcowym.

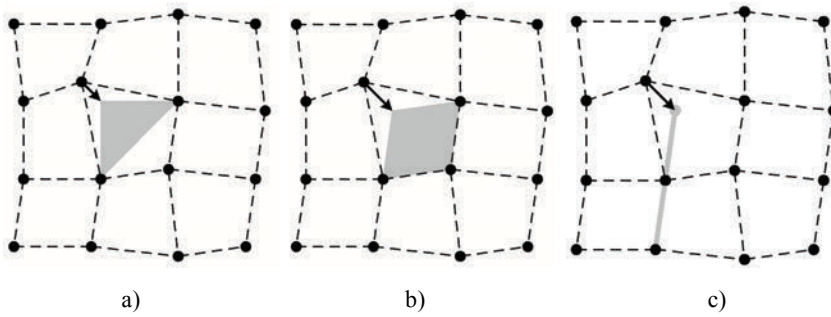
Deformowalny wzorec dyskretny tworzą połączone ze sobą węzły tworzące siatkę – graf planarny. Do każdego węzła przypisana jest pewna lokalna cecha lub wektor cech obrazu wzorcowego, przy czym w modelu zachowany jest układ przestrzenny rozkładu tych cech występujący w obrazie wzorcowym. Dopasowanie polega na umieszczeniu modelu w przestrzeni nowego obrazu, a następnie na takiej zmianie współrzędnych poszczególnych węzłów, aby znalazły się one tam, gdzie lokalne cechy nowego obrazu będą jak najbardziej zbliżone do cech przypisanych.

$$E = \iint_j \int_i (E_e(i, j) + E_i(i, j)) di dj \quad (5)$$

$$E_i = \tau \left[ \left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial i} \right|^2 + \left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial j} \right|^2 \right] + \rho \left[ \left| \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial i^2} \right|^2 + 2 \left| \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial i \partial j} \right|^2 + \left| \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial j^2} \right|^2 \right] \quad (6)$$

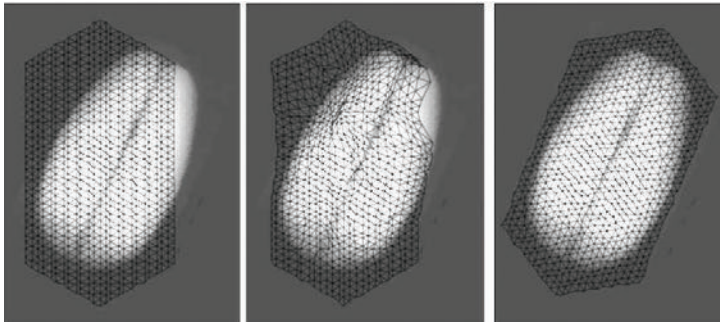
Podstawową właściwością deformowalnego wzorca jest zachowanie w czasie analizy wzajemnych relacji przestrzennych pomiędzy węzłami – inaczej mówiąc, przeciwstawianie się nadmiernej deformacji siatki modelu. Efekt ten można uzyskać, stosując równanie (5) i modelując tzw. naprężenia za pomocą równania membrany (6). Równania te są podobne do równań (1) i (3) stosowanych w aktywnym konturze, przy czym zamiast jednego parametru  $s$  krzywej, tutaj występują dwa parametry  $i, j$  identyfikujące punkty leżące na powierzchni. O ile jednak zastosowanie równania (3) w zamkniętej krzywej nie nastęrczało większych trudności, o tyle zastosowanie równania membrany w modelu deformowalnego wzorca jest problematyczne. Nie jest np. możliwe obliczenie pochodnych na brzegach modelu lub, w wersji dyskretniej, odpowiednich ilorazów różnicowych dla węzłów brzegowych.

Aby uniknąć problemów z obliczaniem wartości ilorazów różnicowych w węzłach brzegowych, zaproponowano alternatywną metodę obliczania naprężeń [8]. Wykorzystuje się w niej wybraną klasę figur geometrycznych – takich, w których w siatce niezdeformowanej wierzchołki tych figur pokrywają się z węzłami. Według tej metody, analizuje się położenie danego węzła w taki sposób, że na jego  $k - 1$  sąsiednich węzłach opiera się figurę o  $k$  wierzchołkach. Należy to zrobić w taki sposób, żeby  $k$ -ty wierzchołek figury wskazywał przybliżone położenie analizowanego węzła. W przypadku siatki niezdeformowanej, wierzchołek figury wyznacza położenie węzła. Gdy deformacja występuje, wówczas położenie wierzchołka i węzła jest różne. Odległość między nimi jest wówczas miarą lokalnej deformacji.



Rys. 6. Przykłady szablonów geometrycznych w siatce prostokątnej:  
 (a) prostokątny trójkąt równoramienny, (b) równoległobok oraz (c) odcinek prostej  
 Fig. 6. Examples of geometric templates in a rectangular grid: (a) the isosceles right triangle,  
 (b) the parallelogram, and (c) the straight-line segment

W przypadku siatki prostokątnej o kwadratowych oczkach zaproponowano wykorzystanie trzech rodzajów figur – szablonów geometrycznych: prostokątnego trójkąta równoramiennego, równoległoboku oraz trójkąta równoramiennego o zerowej powierzchni. Na rysunku 6 pokazano sposób wykorzystania figur do obliczania miary deformacji związanej w węzłem oznaczonym literą  $a$ . Figura opierana jest na węzłach oznaczonych literami  $b$ ,  $c$  i  $d$ . Jej wierzchołek  $a'$  w siatce niezniekształconej powinien pokrywać się z położeniem węzła  $a$ . Jednak ponieważ w przykładowej siatce występuje deformacja, to ich położenia różnią się, co oznaczono strzałką.



Rys. 7. Zastosowanie deformowalnego wzorca do analizy obrazu rentgenowskiego ziarniaka.

Obrazy od lewej do prawej ilustrują kolejne etapy ewolucyjnego dopasowania wzorca do treści rentgenogramu

Fig. 7. The deformable grid application to the analysis of X-ray caryopsis image.  
 The images from the left to the right illustrate the successive stages of the model fitting the radiograph content

Należy zwrócić uwagę, że dla każdego z węzłów leżących wewnątrz siatki można skonstruować cztery równoległoboki, cztery trójkąty prostokątne i cztery równora-

mienne o zerowej powierzchni. W przypadku węzłów brzegowych takich figur można skonstruować odpowiednio mniej. Deformację wynikową dla danego węzła oblicza się jako ważoną sumę wektorów, każdy o początku w węźle i końcu w odpowiednim wierzchołku figury. W pracy [20] wykazano, że dobierając odpowiednio wagi sumowania dla wektorów wyznaczonych za pomocą różnych figur (szablonów geometrycznych) otrzymuje się równania modelujące naprężenia równoważne równaniu (6). Przy czym w metodzie szablonów geometrycznych możliwe jest obliczenie naprężeń w węzłach brzegowych. Wymaga to zastosowania odpowiednio mniejszej liczby szablonów – takich, które daje się utworzyć na sąsiednich węzłach.

W pracy [20] opisano również analogiczną metodę obliczania naprężeń w siatce trójkątnej – wewnętrzne węzły takiej siatki połączone są z sześcioma sąsiadami, a oczka siatki niezdeformowanej mają kształt trójkątów równobocznych. W przypadku takiej siatki jako szablon stosuje się trójkąt równoboczny, trójkąt równoramienny o zerowej powierzchni oraz równoległobok.

Deformowalny wzorec z opisaną tu metodą obliczania naprężeń zastosowano do śledzenia ruchu obiektów oraz do rozpoznawania rodzaju, rzutu i orientacji ziaren zbóż w obrazach rentgenowskich. Pierwsze z zastosowań wykazało przydatność metody do śledzenia ruchu obiektów, których kształt zmienia się w czasie. w drugim przypadku proponowaną metodę wykorzystano w systemie analizy jakości zbóż pszenicy do rozpoznawania rzutu, wielkości i orientacji ziarniaka oraz oznaczaniu położenia zarodka [1]. Przykładowe obrazy ziarniaków z oznaczeniami będącymi wynikiem analizy za pomocą deformowalnego wzorca przedstawiono na rysunku 7.

#### 4. OBLICZANIE NAPRĘŻEŃ ZA POMOCĄ TRANSFORMACJI SĄSIEDZTWA WĘZŁA

Dotychczas przedstawione metody modelowania naprężeń mają kilka istotnych wad. Pierwsza z nich to brak jednego uniwersalnego algorytmu obliczenia takich naprężeń w różnych modelach. Konieczne jest stosowanie innych równań lub algorytmów w przypadku aktywnego konturu, a innych w przypadku sieci deformowalnego wzorca. Zaproponowana w poprzednim rozdziale metoda szablonów geometrycznych wymaga stosowania różnych szablonów, w zależności czy jest to siatka o oczkach kwadratowych, czy trójkątnych. Ponadto w praktyce, aby zastosować tę metodę, wszystkie oczka siatki w niezdeformowanej postaci muszą być identyczne, w przeciwnym razie konieczne byłoby dobieranie odmiennych szablonów oddzielnie dla każdego oczka siatki.

Kolejną przeszkodą jest brak możliwości dobierania charakteru modelowanych naprężeń za pomocą parametrów  $\rho$  i  $\tau$  występujących w równaniach (3) oraz (6). Interpretacja ich wpływu na właściwości modelu nie jest jednoznaczna [11], [12], a możliwości regulacji, jakie te parametry dają, nie odpowiada potrzebom. Na przy-

kład w przypadku dopasowania trójwymiarowych obrazów medycznych wymagane jest, aby transformacja jednego z obrazów nie zmieniała lokalnej objętości. Wynika to z charakteru deformacji organów wewnętrznych będącej np. wynikiem procesu oddechowego, kiedy to zmiana kształtu niektórych organów nie powoduje znaczącej zmiany w ich objętości. Podobny problem występuje również w metodzie szablonów geometrycznych. Konsekwencją jest to, że ani w przypadku modelowania deformacji równaniem (6), ani w przypadku szablonów geometrycznych zapewnienie odpowiedniego charakteru deformacji (np. niezmienności objętości) nie jest możliwe.

W związku z podanymi niedoskonałościami istniejących algorytmów opracowano [3] nowy sposób wprowadzenia ograniczeń deformacji wynikających z wiedzy o zależnościach przestrzennych występujących w analizowanym obrazie. Polega on na porównaniu wzajemnego położenia węzłów w siatce modelu deformowalnego z położeniami odpowiadających im węzłów w jej niezdeformowanym odpowiedniku – siatce odniesienia. Podczas takiego porównywania należy przyjąć, że translacja węzłów, obrót siatki, jej równomierne rozciągnięcie lub zmiana wielkości w wielu przypadkach nie powinny być traktowane jako deformacja. Co za tym idzie, za punkt wyjścia podczas projektowania algorytmu przyjęto, że wszelkie układy węzłów modelu deformowalnego, dające się przedstawić za pomocą transformacji afinicznej odpowiadających im węzłów siatki odniesienia, nie są traktowane jako deformacja – nie powodują zwiększenia wartości energii wewnętrznej modelu. Natomiast wszelkie odstępstwa od tego co można uzyskać za pomocą transformacji afinicznej węzłów siatki odniesienia jest deformacją.

Model deformowalny, zdefiniowany jako zbiór węzłów, ma skończoną liczbę elementów. Dla uproszczenia zapisu przyjęto, że węzły identyfikowane są za pomocą pojedynczego indeksu  $s$ , niezależnie od topologii modelu czy wymiarowości przestrzeni, w której ten model jest zdefiniowany. Współrzędne węzłów w modelu odniesienia, które pozostają niezmiennie, oznaczane są symbolem  $\hat{\mathbf{v}}_s$ , w odróżnieniu od współrzędnych w modelu deformowalnym, opisanych symbolem  $\mathbf{v}_s$ . W czasie analizowania obrazu poszczególne węzły przesuwają się – w ogólnym przypadku ich współrzędne  $\mathbf{v}_s^{(i)}$  zmieniają się w kolejnych krokach ( $i$ ) dopasowania.

Dla każdego węzła  $s$  definiuje się jego sąsiedztwo  $H_s$ , którym jest pewien podzbiór innych węzłów modelu, leżących w jego pobliżu, obejmujący również ten węzeł. Sąsiedztwo każdego z nich może być określone w sposób arbitralny. Istotne jest natomiast, żeby w skład każdego sąsiedztwa wchodziły przynajmniej trzy punkty węzłowe o współrzędnych niezależnych liniowo w przestrzeni dwuwymiarowej lub cztery takie punkty w przestrzeni trójwymiarowej. Wynika to stąd, że mniejsza liczba węzłów nie umożliwi obliczenia parametrów transformacji afinicznej w sposób jednoznaczny.

Położenie węzłów wchodzących w skład sąsiedztwa  $H_s$  można, z pewnym błędem, przedstawić jako transformatę afiniczną współrzędnych tych węzłów w modelu odniesienia. Innymi słowy, dla każdego sąsiedztwa można określić stopień jego przesunię-

cia, obrotu, rozciągnięcia i przeskalowania w stosunku do odpowiadającego mu sąsiedztwa w modelu odniesienia. Transformacja afiniczna jest określona za pomocą macierzy transformacji  $\mathbf{J}_s$  oraz wektora przesunięcia  $\mathbf{T}_s$ . Równanie wiążące współrzędne punktu węzłowego  $k$  należącego do sąsiedztwa  $H_s$  modelu deformowalnego z odpowiadającym mu punktem modelu odniesienia ma więc postać (7), przy czym występuje tu pewien błąd  $e_k$  obliczonych w ten sposób współrzędnych węzła  $k$ .

$$\mathbf{v}_k = \mathbf{J}_s \hat{\mathbf{v}}_k + \mathbf{T}_s + e_k; \quad i \in H_s \quad (7)$$

Macierz transformacji i wektor przesunięcia obliczane są tak, aby uzyskać minimalną wartość średniokwadratową (8) tego błędu dla wszystkich węzłów należących do analizowanego sąsiedztwa  $H_s$

$$\varepsilon_s = \sum_{k \in N_s} |e_k|^2 = \sum_{k \in H_s} \left| \mathbf{v}_k - (\mathbf{J}_s \hat{\mathbf{v}}_k + \mathbf{T}_s) \right|^2 \quad (8)$$

Wielkość  $\varepsilon_s$  jest funkcją elementów macierzy  $\mathbf{J}_s$  oraz wektora  $\mathbf{T}_s$ . Funkcja ta ma jedno minimum występujące w przypadku, w którym jej pochodne względem każdego z argumentów są równe zero. Tak więc, aby znaleźć macierz  $\mathbf{J}_s$  oraz wektor  $\mathbf{T}_s$  minimalizujące funkcje błędu  $\varepsilon_s$ , należy rozwiązać układ równań składających się z pochodnych tej funkcji odpowiednio względem poszczególnych elementów macierzy  $\mathbf{J}_s$  i wektora  $\mathbf{T}_s$ , przyrównanych do zera. W [21], [22] podano rozwiązanie tego zagadnienia.

Jeśli w danym sąsiedztwie  $H_s$  nie występuje deformacja, to wielkości  $e_k$  są równe zero; w szczególności dotyczy to też błędu  $e_k$  obliczanego dla węzła  $s$  przy  $k = s$ . Jeśli natomiast występuje lokalna deformacja w węźle  $s$ , wówczas wielkość  $e_k$  jest różna od zera i jest tym większy, im większy jest stopień tej deformacji, dlatego w proponowanej metodzie przyjęto, że to właśnie wielkość  $e_k$  dla  $k = s$  jest miarą deformacji modelu w węźle  $s$ .

W proponowanej metodzie energię cząstkową naprężeń w węźle  $s$  definiuje się równaniem (9). Jest ona proporcjonalna do kwadratu odległości pomiędzy rzeczywistym położeniem  $\mathbf{v}_s$  węzła a transformatą afiniczną jego położenia w modelu odniesienia. Transformacja afiniczna jest obliczona dla sąsiedztwa tego węzła, natomiast  $\rho$  jest parametrem i określa udział energii naprężeń w całkowitej energii modelu deformowalnego.

$$E_i(s) = \rho \left| \mathbf{v}_s - (\mathbf{J}_s^* \hat{\mathbf{v}}_s + \mathbf{T}_s^*) \right|^2 \quad (9)$$

Występujące w równaniu macierz  $\mathbf{J}^*$  i wektor  $\mathbf{T}^*$  są wynikiem modyfikacji macierzy  $\mathbf{J}$  i wektora  $\mathbf{T}$ , której celem jest wprowadzenie dodatkowych ograniczeń deformacji, np. wspomnianego ograniczenia związanego z niezmiennością pola powierzchni lub objętości. Upraszczając, modyfikacja ta zostanie przedstawiona dla przypadku dwuwymiarowego, przy czym w przypadku trójwymiarowego jest ona analogiczna.

Macierz  $\mathbf{J}$  można poddać dekompozycjom, rozkładowi biegunowemu [23], którego wynikiem jest iloczyn macierzy  $\mathbf{U}$  (ortonormalnej) i  $\mathbf{B}$  (symetrycznej), następnie macierz  $\mathbf{S}$  ulega rozkładowi własnemu [24] na iloczyn macierzy  $\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{Q}$ , gdzie  $\mathbf{Q}$  jest macierzą ortonormalną, a  $\mathbf{D}$  dodatnio określoną diagonalną macierzą wartości własnych. Ponadto w wyniku wyłączenia pierwiastka wyznacznika macierzy  $\mathbf{D}$  otrzymuje się równanie (10).

$$\mathbf{J} = \mathbf{U}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{Q} = \sqrt{\det \mathbf{D}} \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \quad (10)$$

Parametry  $\lambda$  są wartościami własnymi macierzy  $\mathbf{D}$ , ich iloczyn jest równy jedności, a proporcje między nimi określają stopień rozciągnięcia kierunkowego. Kierunek, w którym model jest rozciągnięty, dany jest kątem  $\beta$ . Kąt  $\alpha$  jest kątem obrotu modelu deformowalnego w stosunku do modelu odniesienia. Pierwiastek wyznacznika macierzy  $\mathbf{D}$  określa powiększenie względem siatki odniesienia.

W równaniu (9), służącym do obliczenia energii naprężeń, występuje macierz  $\mathbf{J}^*$  oraz wektor  $\mathbf{T}^*$  dane równaniami (11) i (12).

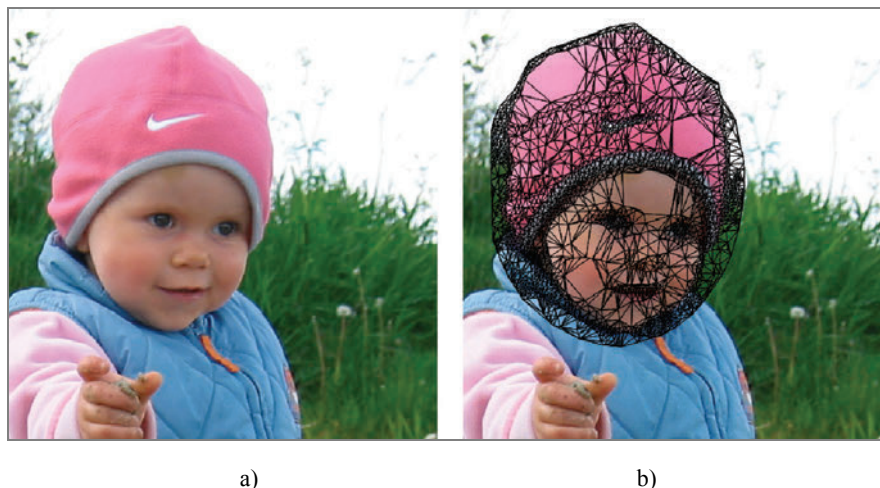
$$\mathbf{J}^* = A^* \begin{bmatrix} \cos \alpha^* & \sin \alpha^* \\ -\sin \alpha^* & \cos \alpha^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta^* & -\sin \beta^* \\ \sin \beta^* & \cos \beta^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^* & 0 \\ 0 & \lambda_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta^* & \sin \beta^* \\ -\sin \beta^* & \cos \beta^* \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$\mathbf{T}^* = \rho_T \mathbf{T} \quad (12)$$

$$A^* = (\sqrt{\det \mathbf{D}})^{\rho_A}; \quad \alpha^* = \rho_R \alpha; \quad \lambda_1^* = \lambda_1^{\rho_s}; \quad \lambda_2^* = \lambda_2^{\rho_s} \quad (13)$$

Odpowiednie elementy macierzy występujących w równaniu (10) oraz wektora  $\mathbf{T}$  są modyfikowane za pomocą parametrów  $\rho_A, \rho_R, \rho_s$  (13) i  $\rho_T$  (12). Parametry te dobiera się w zakresie od zera do jedności, a ich wartości określają udział danego komponentu lub współczynnika w wynikowej transformacji. Parametr  $\rho_A$  jest odpowiedzialny za skalowanie,  $\rho_R$  za obrót,  $\rho_s$  za rozciągnięcie, natomiast  $\rho_T$  za przemieszczenie. Aby wprowadzić na przykład ograniczenie deformacji, związane z niezmiennością pola powierzchni (lub objętości w trzech wymiarach), należy użyć parametru  $\rho_A$  równego zeru.

Metodę obliczania naprężeń za pomocą transformacji sąsiedztwa węzła zastosowano po raz pierwszy w algorytmie deformowalnych pierścieni [3], [22] do analizy ruchu własnego kapsułki endoskopu bezprzewodowego. Metoda może być również z powodzeniem wykorzystywana w modelu deformowalnego wzorca, w siatkach o arbitralnym rozkładzie i w połączeniach węzłów (rys. 8), a także w aktywnych konturach i powierzchniach deformowalnych. Zestaw parametrów umożliwia intuicyjne dostosowanie ograniczeń związanych z deformacją modelu do konkretnego zastosowania, w tym pozwala ograniczyć podatność na przesunięcie, obrót, rozciągnięcie oraz zmianę pola powierzchni lub objętości.



Rys. 8. Siatka wzorca o dobranym rozkładzie węzłów, w której naprężenia modelowane są za pomocą metody transformacji sąsiedztwa: (a) obraz oryginalny, (b) siatka o węzłach umieszczonych w punktach charakterystycznych

Fig. 8. A deformable grid of specifically chosen nodes arrangement, wherein the tensions are modeled by the neighborhood transformation method: (a) original image, (b) a mesh with nodes located at the image keypoints

Zastosowanie metody transformacji sąsiedztwa węzła w przypadku aktywnego konturu umożliwia arbitralne definiowanie oczekiwanego kształtu konturu.

Rozwiązania stosowane do tej pory powodują, że model konturu ma tendencję do przyjmowania kształtu okręgu, co w wielu przypadkach jest niewłaściwe. Nowa metoda umożliwia w sposób naturalny uwzględnienie w modelu pewnej wiedzy *a priori*, np. w obrazach medycznych wynikających ze znajomości anatomii analizowanego organu.

## 5. PODZIAŁ DOPASOWANIA NA ETAPY

Jednym z kluczowych zagadnień w przetwarzaniu obrazów biomedycznych jest dopasowanie do siebie treści dwóch obrazów. Obrazy takie zazwyczaj pokazują to samo miejsce, które zostało albo zobrazowane w różnym czasie, albo za pomocą różnych technik. W zależności od potrzeb stosowane są dwa opcjonalne podejścia – dopasowanie sztywne (ang. *rigid*) lub elastyczne (ang. *non-rigid*) [4]. W pierwszym przypadku dopasowanie polega jedynie na przesunięciu i obróceniu jednego z obrazów w taki sposób, aby treści obu obrazów pokrywały się przy minimalnym błędzie. W drugim przypadku jeden z obrazów jest ponadto geometrycznie zniekształcany w celu dopasowania ich detali. Pierwsze podejście pozwala uzyskać jedynie zgrubne

wyniki w krótkim czasie, podczas gdy drugie generuje dokładniejsze wyniki, ale wymaga znacznie dłuższego czasu.

W przypadku modeli deformowalnych można, za pomocą doboru parametrów, uzyskać efekty analogiczne zarówno do dopasowania sztywnego, jak i elastycznego. Podobnie jak w przypadku innych metod, użycie sztywnej siatki daje zgrubne wyniki dopasowania, ale nie wymaga długiego czasu, natomiast użycie siatki elastycznej, podatnej na deformacje, prowadzi do dokładniejszego dopasowania, ale jest długotrwałe. Okazuje się jednak, że możliwe jest uzyskanie dokładnego dopasowania w stosunkowo krótkim czasie. Rozwiązaniem jest podział procesu minimalizacji energii modelu na etapy. W pierwszym z nich wykorzystuje się siatkę sztywną, uzyskując zgrubne dopasowanie, a następnie zmienia się parametry modelu, zwiększając jego elastyczność, i kontynuuje się proces optymalizacji, uzyskując dopasowanie szczegółów obrazu. Drugi etap optymalizacji rozpoczyna się od punktu startowego, który jest stosunkowo bliski rozwiązaniu końcowemu. Dzięki temu część optymalizacji, w której wykorzystywana jest elastyczna wersja modelu, zajmuje niewiele czasu.

Metodę podziału dopasowania na etapy zaproponowano w odniesieniu do deformowalnego wzorca, w którym naprężenia obliczano za pomocą szablonów geometrycznych [8]. W pracy [3] opisano zastosowanie takiego podziału w stosunku do modelu, w którym naprężenia obliczane są za pomocą transformacji sąsiedztwa węzła. W obu przypadkach uzyskano kilkunastokrotne przyspieszenie dopasowania modelu do analizowanego obrazu.

W metodzie transformacji sąsiedztwa możliwe jest regulowanie zasięgu oddziaływań naprężeń przez dobór wielkości sąsiedztwa. Wielkość jego ma istotny wpływ na sposób, w jaki model przeciwstawia się niepożądanym zniekształceniom. Wybór małego sąsiedztwa powoduje, że korygowane są lokalne zniekształcenia, natomiast zmiany kształtu o globalnym charakterze są możliwe. W dużym sąsiedztwie zasięg modelowanych naprężeń staje się większy. W ekstremalnym przypadku sąsiedztwem każdego węzła mogą być wszystkie pozostałe węzły modelu – odpowiada to sztywnemu dopasowaniu obrazów.

W metodzie modelowania naprężeń z wykorzystaniem transformacji sąsiedztwa obliczane są macierze  $\mathbf{J}_s$  i wektory  $\mathbf{T}_s$  dla sąsiedztwa każdego punktu węzłowego  $s$  należącego do modelu. Do ich obliczenia konieczne jest wykonanie pewnej liczby sumowań i mnożeń proporcjonalnej do iloczynu liczby wszystkich punktów węzłowych oraz średniej liczby węzłów w ich sąsiedztwach. Koszt obliczeniowy algorytmu zwiększa się więc wraz ze wzrostem wielkości sąsiedztwa. Jeśli jednak sąsiedztwo każdego węzła obejmuje wszystkie pozostałe węzły modelu, wówczas nie jest już konieczne obliczanie parametrów transformacji dla każdego indywidualnie. Wystarczy obliczyć parametry transformacji jednokrotnie w pojedynczym kroku procesu dopasowania; w takim przypadku nakład obliczeniowy znacznie się zmniejsza.

W algorytmie z podziałem dopasowania na etapy korzysta się z tej właściwości. W pierwszym etapie model dopasowywany jest z sąsiedztwem obejmującym wszyst-

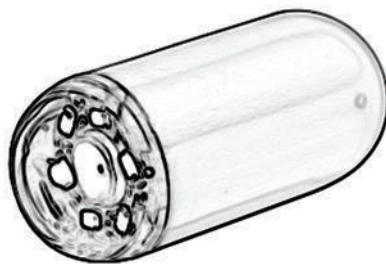


kie węzły, jako całość przesuwa się on, zmienia swe położenie, orientację i ewentualnie wielkość. Po tym etapie uzyskuje się przybliżone dopasowanie modelu do analizowanego obrazu. w drugim etapie przyjmuje się odpowiednio małe sąsiedztwo, czego efektem jest lokalna deformacja i dopasowanie modelu do szczegółów obrazu.

Zaobserwowano jeszcze jedną pozytywną właściwość podziału dopasowania na etapy. W przypadku zastosowania elastycznego modelu, bez wstępnego dopasowania jego sztywnej wersji, występowały przypadki błędnego dopasowania. Było to efektem występowania zbyt wielu lokalnych minimów funkcji celu (energii modelu). Jedno z takich właśnie minimów było znajdowane w procesie minimalizacji. W przypadku siatki sztywnej takie lokalne minima występują w mniejszej liczbie, co zwiększa szanse uzyskania oczekiwanego rozwiązania.

## 6. ZASTOSOWANIE W ANALIZIE OBRAZÓW ENDOSKOPOWYCH

Modele deformowalne są narzędziami, które służą rozwiązaniu konkretnych problemów z dziedziny przetwarzania i analizy obrazów. Należy jednak zauważyć, że różnorodność technik obrazowania oraz pojawiające się specyficzne potrzeby wymagają opracowania szczególnych rozwiązań. Dotyczy to w szczególności modeli deformowalnych, których topologię, metodę obliczania wpływu obrazu oraz sposób modelowania naprężeń można i należy dobrać w zależności od potrzeb. Należy zauważyć, że modele deformowalne znalazły powszechne zastosowanie między innymi we wspomaganie obrazowej diagnostyki medycznej, gdzie występuje szczególnie duża różnorodność sposobów obrazowania. Przykładem modelu zaprojektowanego w celu rozwiązania konkretnego zagadnienia są deformowalne pierścienie [3], [22], których zadaniem jest wspomaganie diagnostyki medycznej przewodu pokarmowego na podstawie danych uzyskiwanych z endoskopu bezprzewodowego.



Rys. 9. Kapsułka endoskopu bezprzewodowego  
Fig. 9. The wireless endoscope capsule

Bezprzewodowa endoscopia kapsułkowa (ang. *Wireless Capsule Endoscopy* –WCE) [25]–[27], znana również jako endoscopia kapsułkowa lub endoscopia bezprzewodowa, jest stosunkowo mało inwazyjną techniką obrazowania wizyjnego jelita cienkiego.

Umożliwia ona uzyskanie obrazów wizyjnych całego układu pokarmowego, w tym również jelita cienkiego. Jej niewątpliwą zaletą jest niewielka uciążliwość dla pacjenta, gdyż wymaga połknięcia niewielkiej kapsułki (średnicy ok. 11 mm i długości 26 mm) z wbudowaną kamerą, co jest znacznie mniej uciążliwe niż poddanie się badaniu enteroskopowemu.

System endoskopii bezprzewodowej obejmuje kapsułkę z wbudowaną kamerą (rys. 9), diodowym źródłem światła białego, nadajnikiem sygnału wizyjnego oraz źródłem zasilania. Ponadto w jego skład wchodzi odbiornik–rejestrator, system anten odbiorczych montowanych na ciele pacjenta oraz komputer z oprogramowaniem do analizy otrzymanego filmu. Kapsułka uruchamia się automatycznie w chwili wyjęcia jej z opakowania. Po połknięciu przemieszcza się ona w przewodzie pokarmowym w sposób naturalny, podobnie jak pokarm, wykorzystując naturalne ruchy układu trawiennego. W dostępnych na rynku urządzeniach nie stosuje się mechanizmów napędowych, czy też jakiegokolwiek sterowania przemieszczaniem lub orientacją endoskopu.

Podczas analizowania filmu uzyskanego za pomocą kapsułki lekarz używa komputera ze specjalistycznym oprogramowaniem, które umożliwia odtwarzanie zarejestrowanego filmu z różnymi prędkościami, zatrzymywanie go oraz cofanie; oznaczanie charakterystycznych miejsc przewodu pokarmowego; a także wskazywanie obrazów z odnalezionymi zmianami chorobowymi. Tak prowadzona analiza jest zadaniem żmudnym i zajmującym zazwyczaj kilka godzin. Co gorsze, dopiero po obejrzeniu całości nagrania gastroenterolog może w pełni ocenić jego jakość i stopień przydatności do celów diagnostycznych. Brakuje automatycznych narzędzi do automatycznego wykrywania obrazów ze zmianami chorobowymi, a ilościowa analiza rozległych zmian, której wyniki stanowią kluczowy czynnik decydujący o sposobie leczenia, także nie jest wspomagana automatycznie. Ponadto niewystarczające są też informacje dotyczące lokalizacji kapsułki w ciele pacjenta.

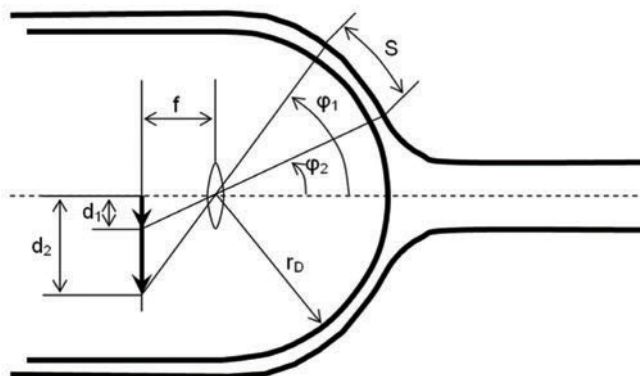
Jeśli założyć wykorzystanie endoskopu kapsułkowego o typowej budowie bez wprowadzania w nim zmian konstrukcyjnych, to powyższe problemy można rozwiązać jedynie za pomocą dedykowanych metod numerycznych przetwarzania i analizy obrazów. Jednym z takich rozwiązań są właśnie deformowalne pierścienie – oryginalny model deformowalny, który analizuje i opisuje ruch kapsułki względem ścian przewodu pokarmowego oraz tworzy pojedynczy obraz, będący reprezentacją (mapą) powierzchni wewnętrznej całego przewodu pokarmowego.

Rozwiązanie problemu ruchu własnego kamery polega na odnalezieniu w dwóch kolejnych obrazach filmu tych samych charakterystycznych punktów sceny. W klasycznym podejściu zakłada się, że kamera porusza się w przestrzeni trójwymiarowej w nieruchomym środowisku. Jeśli znane są właściwości układu optycznego, przesunięcia charakterystycznych punktów sceny w czasie oraz ich odległości od kamery, to można sformułować równania, w których niewiadomymi są trójwymiarowy wektor przesunięcia i trzy kąty obrotu kamery – sześć stopni swobody ruchu kamery. Roz-

wiązanie tych równań prowadzi do opisu ruchu kamery względem sceny w sposób ilościowy.

W przypadku endoskopu bezprzewodowego problem estymacji ruchu własnego jest jednak bardziej złożony, ponieważ środowisko, w którym porusza się kamera, nie jest nieruchome. W wyniku skurczy jelit powierzchnia przewodu pokarmowego porusza się i zmienia swój kształt. Nie są też znane odległości pomiędzy punktami sceny i nie jest możliwe zmierzenie odległości pomiędzy punktem sceny a kamerą. Ponadto kolejne obrazy filmu, w wyniku występowania intensywnych skurczów mieszających pokarm, mogą przedstawiać zupełnie inne fragmenty przewodu pokarmowego, w których będzie więcej tych samych punktów charakterystycznych.

Rozwiązanie zagadnienia analizy ruchu kapsułki endoskopowej wymaga więc sformułowania dodatkowych założeń upraszczających. W zaproponowanym modelu ruchu zakłada się, że kapsułka utrzymuje określoną orientację względem otaczającego ją środowiska, z czego wynikają ograniczenia dotyczące stopni swobody jej ruchu. Ponadto zakłada się, że przewód pokarmowy, w którym porusza się endoskop bezprzewodowy, charakteryzuje się określonym kształtem, rozmiarami oraz właściwościami mechanicznymi.



Rys. 10. Uproszczony model rzutowania obrazu w endoskopie bezprzewodowym z założeniem określonej średnicy i kształtu przewodu pokarmowego

Fig. 10. Simplified image projection model in wireless endoscope assuming particular diameter and shape of the gastrointestinal tract

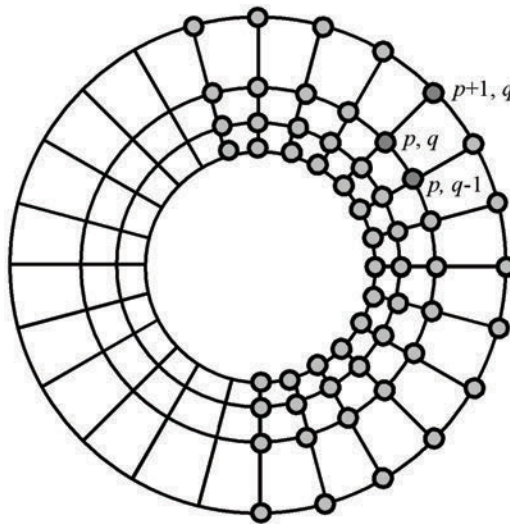
Ze względu na wydłużony kształt kapsułki i stosunkowo małe światło jelita cienkiego, które zaciska się wokół niej, przez większość czasu jej orientacja jest zgodna z kierunkiem przebiegu jelita (rys. 10). Skurcze perystaltyczne powodują przepychanie kapsułki w kierunku zgodnym z przebiegiem przewodu pokarmowego, przy czym, biorąc pod uwagę konstrukcję endoskopu, również oś kamery jest z nim zgodna. W rzeczywistości, w wyniku pofałdowania powierzchni przewodu pokarmowego i ruchów mieszających, endoskop może się ustawić skośnie lub poprzecznie do kie-

runku ruchu, przyjmuje się jednak, że taka orientacja jest krótkotrwała i występuje stosunkowo rzadko.

Powiązanie prędkości przemieszczania się endoskopu z ruchem w obrazie – przyjmując, że ściany przewodu pokarmowego ściśle przylegają do obudowy kapsułki – dane jest równaniem (14). Przyjęto, że średnica przewodu jest równa średnicy ( $2r_D$ ) kapsułki endoskopu. Odległość  $S$  kapsułki od punktu na powierzchni przewodu pokarmowego jest w tym przypadku odwrotnie proporcjonalna do odległości  $d$  obrazu tego punktu od środka powierzchni przetwornika, przy czym  $f$  jest ogniskową obiektywu kamery.

$$V_P = \frac{r_D f}{\Delta t} \left( \frac{1}{d_t} - \frac{1}{d_{t-\Delta t}} \right) \quad (14)$$

Wielkość  $d_t$  jest odległością obrazu punktu przewodu pokarmowego mierzoną od środka powierzchni przetwornika w chwili  $t$ . Wielkość  $d_{t-\Delta t}$  jest odległością obrazu tego samego punktu mierzoną w czasie  $t - \Delta t$ , a  $\Delta t$  jest czasem pomiędzy uzyskaniem dwóch kolejnych obrazów filmu.



Rys. 11. Budowa modelu złożonego z deformowalnych pierścieni

Fig. 11. Outline of the model made of deformable rings

Do obliczania charakterystyki ruchu kapsułki z wykorzystaniem zaproponowanego modelu ruchu i równania (14) zaproponowano dedykowany model deformowalny. Węzły modelu określone są w nim parą indeksów  $p = 1, 2, \dots, P$  oraz  $q = 1, 2, \dots, Q$ . Wraz z połączeniami tworzą one graf planarny o kształcie koncentrycznych pierścieni (rys. 11), umieszczony w dwuwymiarowej przestrzeni analizowanego obrazu. Współrzędne

węzłów po zainicjowaniu dane są równaniem (15), przy czym parametr  $r$  występujący w tym równaniu jest promieniem wewnętrznego pierścienia, natomiast parametr  $w$  jest stosunkiem promieni dwóch sąsiednich pierścieni, większego do mniejszego.

$$\hat{\mathbf{v}}_{pq} = [\hat{x}_{pq} \hat{y}_{pq}]^T = rw^{p-1} \left[ \cos\left(\frac{2\pi q}{Q}\right) \sin\left(\frac{2\pi q}{Q}\right) \right]^T \quad (15)$$

Przyjęto, że początek układu współrzędnych znajduje się w środku analizowanego obrazu, a parametry  $r$  i  $w$  są tak dobrane, aby zmieścić model wewnątrz pola widzenia kamery endoskopu z zachowaniem pewnego marginesu dookoła. Potrzeba zapewnienia tego marginesu wynika stąd, że w czasie procesu dopasowania punkty węzłowe mogą zmieniać swoje położenie, siatka może ulegać deformacjom, w tym może się powiększać.

Podstawową zasadę działania modelu można opisać w następujący sposób: dla każdego węzła zapamiętywane są lokalne charakterystyki obrazu występujące w jego aktualnym położeniu. Po zmianie obrazu na kolejny, węzły poszukują takich miejsc, których charakterystyki są najbardziej zbliżone do zapamiętanych. W wyniku tych poszukiwań węzły przesuwały się w stronę tych miejsc, przy czym ich ruch jest do pewnego stopnia ograniczony przez naprężenia – narzucone ograniczenia dotyczące zmiany kształtu siatki. Wraz z zakończeniem ruchu węzłów zapamiętywane są lokalne charakterystyki aktualnego obrazu i procedura zostaje powtórzona dla kolejnych obrazów sekwencji wideo.

Ruch punktów węzłowych jest wynikiem minimalizacji energii danej równaniem (16). Składnikami energii cząstkowych są energie wpływu obrazu na położenie węzła  $M_{pq}$  oraz energie naprężeń (korekcji kształtu)  $E_{pq}$ . Energia  $MDR$  jest funkcją współrzędnych wszystkich punktów węzłowych modelu. Model znajduje się w przestrzeni dwuwymiarowej, więc liczba zmiennych tej funkcji jest dwukrotnie większa od liczby wszystkich punktów węzłowych i jest równa  $2PQ$ .

$$E_{MDR} = \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q (M_{pq} + E_{pq}) \quad (16)$$

Dopasowanie modelu polega na takiej zmianie współrzędnych  $x$  i  $y$  wszystkich węzłów  $pq$ , aby zminimalizować wartość funkcji celu  $E_{MDR}$ . Do optymalizacji tej funkcji zastosowano minimalizację gradientową (17). W metodzie tej, dla określonego wektora zmiennych  $\mathbf{X}^{(i)}$  (wektor zawiera współrzędne wszystkich węzłów), obliczany jest gradient funkcji. Indeks ( $i$ ) oznacza numer kolejnego przybliżenia (iteracji) procedury optymalizacji. Następnie od wektora  $\mathbf{X}^{(i)}$  odejmowana jest wartość proporcjonalna do obliczonego wektora gradientu (18). Dla wynikowego wektora  $\mathbf{X}^{(i+1)}$  ponownie obliczany jest gradient minimalizowanej funkcji. Procedura ta jest powtarzana wielokrotnie, aż do uzyskania odpowiednio małej wartości bezwzględnej wektora gradientu lub do wykonania założonej liczby powtórzeń.

$$\mathbf{X}^{(i+1)} = \mathbf{X}^{(i)} - \nabla E_{MDR}(\mathbf{X}^{(i)}) \quad (17)$$

$$\nabla E_{MDR} = \nabla \left( \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q (M_{pq} + E_{pq}) \right) = \left( \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q (\nabla M_{pq} + E_{pq}) \right) \quad (18)$$

W celu skrócenia czasu koniecznego do przeprowadzenia podanej minimalizacji przyjęto uproszczenie dotyczące przybliżonego wyznaczania gradientu funkcji. Można zauważyć, że gradient wielkości  $M_{pq}$  zależy wyłącznie od położenia węzła  $pq$  i nie zależy od położenia pozostałych węzłów. Wpływ obrazu na węzły może być więc obliczony indywidualnie dla każdego węzła. Wartość gradientu  $E_{pq}$  zależy natomiast nie tylko od współrzędnych punktu węzłowego  $p, q$ , ale również od współrzędnych innych węzłów, z którymi węzeł  $pq$  pozostaje w interakcji. Można jednak przyjąć, że istotny wpływ na wektor gradientu energii  $E_{pq}$  mają wyłącznie współrzędne węzła  $pq$ , a współrzędne węzłów pozostających z nim w interakcji mają wpływ możliwy do pominięcia. Przy takim uproszczeniu równanie gradientu funkcji energii można zapisać w postaci (19). Symbolami  $x_{pq}^o$  oraz  $y_{pq}^o$  oznaczono wersory w kierunkach wyznaczonych przez osie odpowiednich współrzędnych.

$$\nabla E_{MDR} \approx \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q \left( x_{pq}^o \frac{\partial M_{pq}}{\partial x_{pq}} + y_{pq}^o \frac{\partial M_{pq}}{\partial y_{pq}} + x_{pq}^o \frac{\partial E_{pq}}{\partial x_{pq}} + y_{pq}^o \frac{\partial E_{pq}}{\partial y_{pq}} \right) \quad (19)$$

Ta uproszczona formuła – w której zmienne będące współrzędnymi węzła  $p, q$  modyfikowane są wyłącznie na podstawie cząstkowych pochodnych wielkości  $M_{pq}$  i  $E_{pq}$ , zależnych – jak się uznaje – wyłącznie od współrzędnych węzła  $pq$  – umożliwiła wielokrotne skrócenie czasu potrzebnego do obliczenia gradientu funkcji  $E_{MDR}$ . Podczas prowadzonych eksperymentów nie stwierdzono, aby uproszczenie to miało istotny wpływ na zbieżność procesu optymalizacji.

Do obliczania składowej  $E_{pq}$  związanej z modelowaniem naprężeń zastosowano opisaną wcześniej metodę transformacji sąsiedztwa, przy czym współrzędne węzłów w siatce odniesienia dane są równaniem (15). Ograniczono przy tym swobodę modelu do przesuwania się poza obszar obrazu, ustalając parametr  $\rho_T$  na mniejszy od jedności. Ponadto ograniczono możliwość kierunkowego rozciągania modelu przez ustalenie wartości parametru  $\rho_S$  również poniżej jedności. Rozważania dotyczące doboru wartości parametrów metody transformacji sąsiedztwa w zastosowaniu do deformowalnych pierścieni zamieszczono w publikacji [22].

Składowa wpływu obrazu  $M_{pq}$  jest natomiast obliczana za pomocą równania (20) jako średnia różnic bezwzględnych (ang. *mean absolute difference* – MAD) rozkładów jasności w otoczeniu węzła w aktualnie oraz w poprzednio analizowanym obrazie po zakończeniu procesu dopasowania.

$$\text{MAD}(x, y) = \frac{1}{N^2} \sum_{m=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \sum_{n=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} |I_t(x+m, y+n) - I_{t-\Delta t}(x_{t-\Delta t}+m, y_{t-\Delta t}+n)| \quad (20)$$

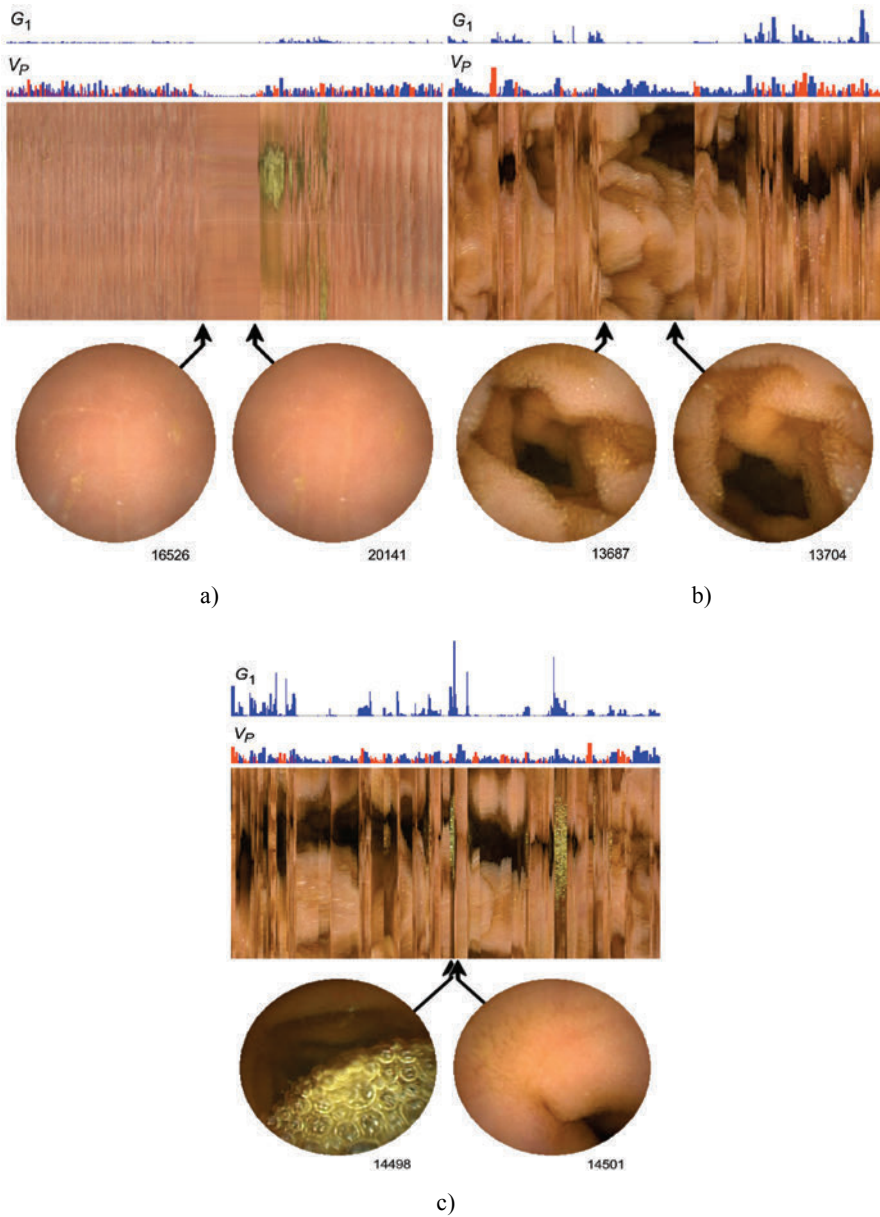
Miara MAD stosowana do kompensacji liczona jest pomiędzy dwoma blokami  $N \times N$  pikseli. Pierwszy z bloków jest konstruowany na podstawie poprzedniego obrazu uzyskanego w czasie  $t-\Delta t$  we współrzędnych  $[x_{t-\Delta t}, y_{t-\Delta t}]^T$ , drugi zaś powstaje z użyciem obrazu uzyskanego w czasie  $t$  we współrzędnych  $[x_t, y_t]^T$ . Parametr  $N$  w przypadku omawianego modelu deformowalnego jest liczbą naturalną nieparzystą, a funkcja  $I(\cdot)$  reprezentuje jasność obrazu we współrzędnych  $x, y$ . Dla porównania w publikacji [14] przeprowadzono dyskusję dotyczącą zastosowania innych miar definiujących składową  $M_{pq}$ .

W wyniku analizy filmu za pomocą deformowalnych pierścieni obliczanych jest kilka różnych deskryptorów ruchu. Są to między innymi: estymata prędkości  $V_p$  (14), miara globalnej deformacji modelu  $G_1$ , obliczana jako średnia składowej energii  $E_{pq}$ , miara różnicy dwóch kolejnych obrazów filmu, obliczana jako średnia składowej energii  $M_{pq}$ , oraz prędkość kątowa  $\omega$  obrotu kapsułki wokół jej osi podłużnej. W wyniku analizy dyskryminacyjnej wykazano, że wartości tych deskryptorów umożliwiają rozróżnianie faz pracy jelit, w tym fazy spoczynku oraz intensywności skurczów jelit. Przykładowo znaczne wartości estymaty prędkości świadczą o występowaniu skurczów przepychających pokarm, natomiast znaczne wartości deformacji oznaczają występowanie skurczów mieszających. Zależność tę wykorzystano do automatycznego sterowania szybkością odtwarzania filmu podczas jego oglądania przez lekarza.

Lekarz dokonujący oceny diagnostycznej materiału stara się przeglądać fragmenty uzyskane w fazie odpoczynku jelita w przyspieszonym tempie, te uzyskane podczas skurczy perystaltycznych zazwyczaj ogląda z mniejszą szybkością odtwarzania, natomiast uzyskane podczas skurczy mieszających ogląda uważnie „klatka po klatce”. W przypadku, w którym po fazie bezruchu następują skurcze mieszające lekarz nie jest w stanie wystarczająco szybko zareagować i musi zatrzymać odtwarzanie, aby przewinąć film wstecz, do chwili, w której następuje gwałtowna zmiana widoku z kamery. Należy przyznać, że ten sposób pracy z materiałem diagnostycznym wymaga ciągłego skupienia uwagi, co w konsekwencji jest bardzo męczące. Automatyczny dobór prędkości odtwarzania filmu jest więc istotnym elementem wspomaganego procesu diagnostycznego.

Kolejnym sposobem, w jaki opisany model deformowalny wspomaga diagnostykę przewodu pokarmowego, jest utworzenie pojedynczego obrazu przedstawiającego jego powierzchnię wewnętrzną.

W czasie analizowania filmu z endoskopu kapsułkowego model deformowalny może się kurczyć lub rosnać. Jeśli zwrot wektora prędkości kapsułki jest zgodny z wektorem skierowania kamery, to wówczas fragmenty obrazu przesuwają się od wewnątrz na zewnątrz, a model podążający za tymi fragmentami rośnie. W przypadku, w którym wektor prędkości ma zwrot przeciwny do zwrotu kamery, sytuacja jest



Rys. 12. Przykładowe mapy przewodu pokarmowego, odpowiadające im obrazy oraz wykresy deskryptorów ruchu: (a) bezruch, (b) skurcze perystaltyczne, (c) skurcze mieszające.

Liczby są numerami klatek filmu

Fig. 12. Sample maps of the gastrointestinal tract, the corresponding images, and plots of motion descriptors for: (a) motionlessness, (b) peristaltic contractions and (c) mixing contractions. The numbers denote video frame indices



odwrotna i model się kurczy. Jeśli model powiększy się o odległość między sąsiednimi pierścieniami, to zewnętrzny pierścień modelu jest usuwany i zamiast niego dodawany jest odpowiedniej wielkości pierścień wewnętrzny. Gdy model zmniejszy się o odległość między sąsiednimi pierścieniami, wówczas wewnętrzny pierścień jest usuwany i zamiast niego dodawany jest odpowiedniej wielkości pierścień zewnętrzny.

W obydwu przypadkach, po usunięciu lub dodaniu pierścienia, zapamiętywane są składowe koloru obrazu odczytane we współrzędnych kolejnych węzłów  $q$  zewnętrznego pierścienia. Wektory te zostają ułożone w szereg, tworząc pojedynczą linię obrazu cyfrowego. Poszczególne linie, uzyskane podczas kolejnych zdarzeń usuwania i dodawania pierścieni, składane są kolejno razem, tworząc mapę – obraz będący reprezentacją wewnętrznej powierzchni przewodu pokarmowego. Przykład fragmentu takiej mapy przedstawiono na rysunku 12.

Przydatność map została poddana ocenie diagnostów gastroenterologów [28], [29]. Stwierdzili oni, że mapy umożliwiają szybkie rozpoznanie obszarów krwawień, rozległych owrzodzeń oraz fragmentów, w których powierzchnia jelita jest przesłonięta treścią pokarmową. W czasie interpretacji filmu, dzięki zaproponowanej mapie, można więc pominąć fragmenty nieużyteczne z perspektywy diagnostyki medycznej i skupić uwagę na istotnych. Ponadto wykres estymaty prędkości  $V_P$  przydatny jest podczas lokalizacji miejsc, w których kapsułka się zatrzymała – może to wskazywać na przewężenia lub dysfunkcje przewodu pokarmowego. Przeprowadzone testy i porównania [22] wykazują również, że korzystanie z mapy przyspiesza wyszukiwanie zmian chorobowych lub zmniejsza liczbę zmian przeoczonych przez lekarza podczas interpretacji filmu standardowymi metodami.

## 7. ZASTOSOWANIE W ANALIZIE OBRAZÓW ZIAREN ZBÓŻ

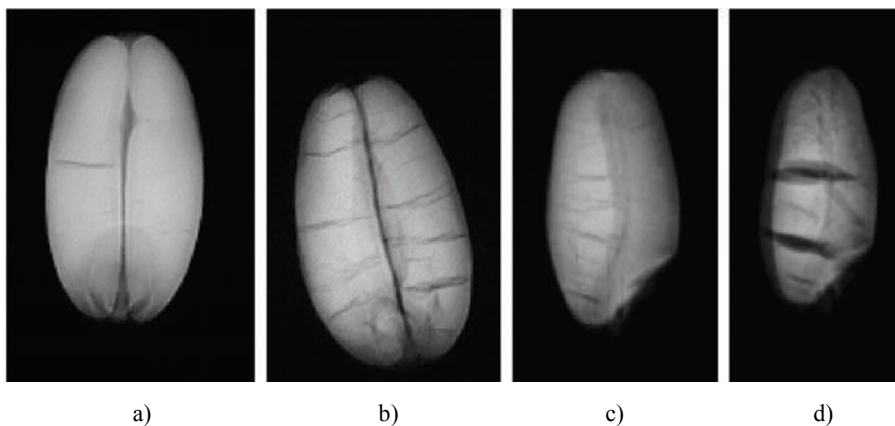
Innym przedmiotem analiz, które mogą być wykonywane z zastosowaniem modeli deformowalnych, jest żywność. Przykładem może być analiza ziaren zbóż, określanie odmiany zboża oraz szeroko rozumianej jakości, w tym przydatności do zasiewu lub celów konsumpcyjnych.

Przykładem obrazów, które można poddać analizie za pomocą różnych modeli deformowalnych, są rentgenowskie obrazy ziarniaków pszenicy. Obrazy na rysunku 13 przedstawiają ziarniaki w dwóch rzutach: na wprost oraz bocznym. W rzucie na wprost obraz pojedynczego ziarniaka jest w przybliżeniu symetryczny. Dwie połówki rozdzielone są bruzdką stanowiącą przybliżoną oś symetrii. Poszczególne połówki obrazu są jasne, podczas gdy bruzdka jest stosunkowo ciemna, tak że jej jasność jest zbliżona do jasności tła. Ziarniak nie jest natomiast symetryczny względem linii prostopadłej do bruzdki. W większości przypadków jest on nieznacznie szerszy po jednej stronie. Na krańcu szerszej części, w osi symetrii, znajduje się zarodek – stanowiąc

nieznacznie ciemniejszą eliptyczną plamkę, jest on rozróżnialny jedynie w przypadku nielicznych wizerunków ziarniaków.

W procesie suszenia, wewnątrz ziaren tworzą się pęknięcia widoczne na obrazie w postaci ciemnych linii skierowanych poprzecznie do bruzdki. Pęknięcia te nie mają wpływu na wartość odżywczą i smakową, jednak w przypadku, w którym ziarno przeznaczone jest do zasiewu, wielkość i położenie pęknięć ma kluczowe znaczenie [1], [30]. Im szersze jest pęknięcie i im bliżej znajduje się zarodka, tym mniejsza jest szansa na prawidłowy wzrost. Pęknięcie takie utrudnia zarodkowi korzystanie ze wszystkich składników odżywczych zawartych w ziarniaku, a tym samym zmniejsza szansę na prawidłowy rozwój siewki.

Analiza obrazów ziaren pszenicy, której celem jest ocena przydatności ziarniaka do zasiewu, polega więc na wyodrębnieniu z obrazu fragmentu reprezentującego ziarno, oznaczeniu jego położenia, orientacji, rozpoznaniu rzutu i rodzaju ziarna, a także określeniu stopnia jego deformacji i uszkodzenia. Istotne jest też przede wszystkim określenie miejsca, w którym znajduje się zarodek. Jak wspomniano, to uszkodzenia w pobliżu zarodka mają bowiem większe znaczenie.



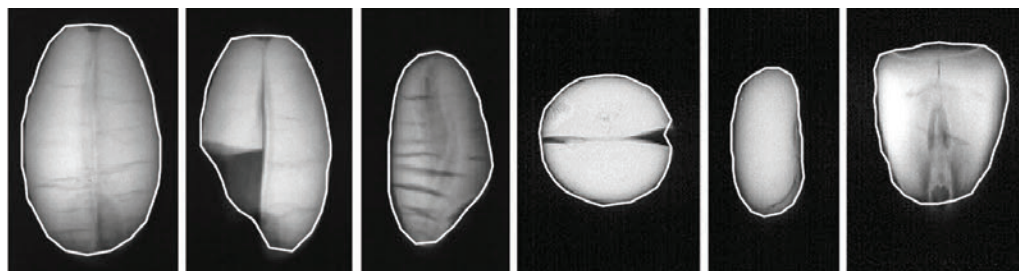
Rys. 13. Przykładowe obrazy rentgenowskie ziarniaków pszenicy: (a, b) w rzucie na wprost, (c, d) w rzucie bocznym. Pokazano ziarniaki o stosunkowo małej (a, c) i dużej (b, d) liczbie wewnętrznych pęknięć

Fig. 13. Example X-ray images of wheat kernels: (a, b) frontal and (c, d) side views. Examples demonstrate a relatively small (a, c) and severe (b, d) internal cracks

W programie analizującym obrazy ziarniaków, wśród innych metod przetwarzania obrazów, zastosowano dwa różne modele deformowalne. Jednym z nich jest aktywny kontur radialny, który służy do wyznaczenia obszaru obrazu obejmującego pojedynczy ziarniak obrazu. Kontur inicjowany jest w kształcie okręgu o środku w przybliżonym środku ziarniaka i niewielkim promieniu, przy czym środek ziarniaka jest wskazywany przez użytkownika lub za pomocą innych metod analizy obrazów. Wpływ

obrazu na pojedynczy węzeł modelu zależy od jasności obrazu we współrzędnych węzła. Zwrot wektora oddziaływania jest do środka ziarniaka w przypadku, gdy jasność jest mniejsza od pewnego przyjętego progu lub na zewnątrz w przypadku przeciwnym. Wartość bezwzględna oddziaływania zależy od różnicy pomiędzy jasnością obrazu we współrzędnych węzła a wspomnianym progiem.

Ponieważ współrzędne węzła dane są liczbami zmiennoprzecinkowymi, wymaga to więc przeprowadzenia interpolacji jasności analizowanego obrazu dyskretnego. Zaletą stosowania współrzędnych zmiennoprzecinkowych jest natomiast to, że uzyskiwany wynik, kształt konturu, ma charakter subpikselowy (dokładność większą niż odległość między sąsiednimi elementami obrazu rastrowego). W pracy [20] porównano różne metody segmentacji obrazów, w tym ziarniaków pszenicy. Wykazano, że algorytm wykorzystujący aktywny kontur radialny jest bardziej odporny na zakłócenia szumowe obrazu niż inne algorytmy, takie jak np. morfologiczne zamknięcie i otwarcie poprzedzone progowaniem jasności.



Rys. 14. Wynik dopasowania aktywnego konturu (biała linia) do różnych ziaren w obrazowaniu rentgenowskim

Fig. 14. Result of fitting the active contour (white line) to assorted kernels in X-ray radiographs

Do oznaczenia orientacji ziarniaka wykorzystano deformowalny wzorec, w którym do obliczania naprężeń i deformacji siatki wykorzystano metodę szablonów geometrycznych. Jednym z problemów związanych z analizą jakości ziaren jest automatyczne rozpoznawanie ziaren pszenicy uwidocznionych w rzucie na wprost oraz w rzucie bocznym. W obu przypadkach możliwe jest określenie położenia zarodka, jednak tylko w przypadku rzutu na wprost możliwa jest np. ocena stopnia asymetrii ziarniaka – również przydatna do oceny jakości. Rozpoznawania takich obiektów dokonano za pomocą deformowalnego wzorca: wymagało przygotowania wyidealizowanych, wzorcowych obrazów ziarniaków w rzucie bocznym i na wprost.

Na potrzeby analizy utworzono również dwa różne wzorce deformowalne. W węzłach jednego z nich zapisane zostały lokalne wartości jasności wzorcowego obrazu ziarniaka w rzucie na wprost, w węzłach drugiego jasności wzorcowego obrazu ziarniaka w rzucie bocznym. Analiza polegała na nałożeniu i dopasowaniu wzorców deformowalnych do analizowanych obrazów ziarniaków, przy czym wzorec ziarniaka

w rzucie na wprost nakładany i dopasowywany był dwukrotnie, za drugim razem obrócony o kąt 180 stopni. Wzorec ziarniaka w rzucie bocznym nakładany i dopasowywany był czterokrotnie, zmianie ulegał zarówno kąt obrotu wzorca, jak i jego lustrzane odbicie. We wszystkich sześciu przypadkach obliczano średnią wartość energii naprężeń  $E_i$  oraz energii wpływu obrazu  $E_e$  równania (5). Wybór przypadku o najmniejszych wartościach średnich energii umożliwia zarówno określenie rzutu, jak również orientacji (kąta obrotu) ziarniaka. To drugie umożliwia przybliżone określenie umiejscowienia zarodka.

## 8. PODSUMOWANIE

Przedstawione oryginalne opracowania dotyczące modeli deformowalnych są wynikiem prac prowadzonych w ciągu ostatnich kilkunastu lat. Umożliwiają one rozwiązanie wielu nietrywialnych problemów z dziedziny analizy obrazów, których rozwiązanie innymi metodami nastęrcza wiele trudności. Modele deformowalne pozwoliły na zautomatyzowanie procedur, które do tej pory wymagały udziału człowieka. Wykazano [22], że szczególnie w przypadku zastosowań medycznych zastosowanie modeli deformowalnych zwiększa liczbę wykrytych zmian chorobowych oraz wiarygodność i powtarzalność wyników diagnozowania.

Wszystkie przedstawione algorytmy zostały zaimplementowane w postaci programów komputerowych: Ziarna [1], Siatki [20], MaZda [18], WCE Player [3], [31]. Programy te zostały udostępnione w internecie: są cytowane w literaturze naukowej, a ich działanie zostało sprawdzone w praktyce w różnych ośrodkach badawczych w Polsce i na świecie.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] Strumiłło P., Niewczas J., Szczypiński P., Makowski P., Woźniak W., *Computer System for Analysis of X-Ray Images of Wheat Grains*, Int. Agrophysics, Vol. 13, No. 1, 133–140, 1999.
- [2] Kass M., Witkin A., Terzopoulos D., *Snakes: Active contour models*, International Journal of Computer Vision, Vol. 1, No. 4, 321–331, 1988.
- [3] Szczypiński P.M., Sriram R.D., Sriram P.V.J., Reddy D.N., *A model of deformable rings for interpretation of wireless capsule endoscopic videos*, Medical Image Analysis, Vol. 13, No. 2, 312–324, 2009.
- [4] Maintz J.B.A., Viergever M.A., *A survey of medical image registration*, Medical Image Analysis, Vol. 2, No. 1, 1–36, 1998.
- [5] Haber E., Heldmann S., Modersitzki J., *A computational framework for image-based constrained registration*, Linear Algebra and its Applications, Vol. 431, No. 3, 459–470, 2009.
- [6] Darkner S., Vester-Christensen M., Paulsen R.R., Larsen R., *Non-rigid registration of 2D manifolds in 3D Euclidian space*, 69142R-69142R-8, 2008.
- [7] Strumiłło P., Szczypiński P., *Application of an Active Contour Model for Extraction of Fuzzy and Broken Image Edges*, Machine Graphics & Vision, Vol. 5, No. 4, 576–594, 1996.

- [8] Szczypiński P., Materka A., *Variable-Flexibility Elastic Model for Digital Image Analysis*, [in:] XXI KKTOiUE, Kiekrz 1998.
- [9] Lobregt S., Viergever M.A., *A discrete dynamic contour model*, IEEE Transactions on Medical Imaging, Vol. 14, 12–24, 1995.
- [10] Sethian J.A., *Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*, Cambridge Univ. Press, 1999.
- [11] Chenyang Xu, Yezzi A., Prince J.L., *On the relationship between parametric and geometric active contours*, Presented at the Conference on Signals, Systems and Computers, Vol. 1, 483–489, 2000.
- [12] Chenyang Xu, Yezzi A., Prince J.L., *A summary of geometric level-set analogues for a general class of parametric active contour and surface models*, 104–111.
- [13] Gunn S.R., Nixon M.S., *A model based dual active contour*, Proc. British Machine Vision Conference, 305–314, 1994.
- [14] Szczypiński P.M., *Selecting a motion estimation method for a Model of Deformable Rings*, [in:] ICSES '06, International Conference on Signals and Electronic Systems, Proceedings, 297–300, 2006.
- [15] Ronfard R., *Region-based strategies for active contour models*, International Journal of Computer Vision, Vol. 13, No. 2, 229–251, 1994.
- [16] Cohen L.D., *On active contour models and balloons*, CVGIP: Image Understanding, Vol. 53, No. 2, 211–218, 1991.
- [17] Szczypiński P., *Center-Point Model of Deformable Surface*, Computer Vision and Graphics, Vol. 32, K. Wojciechowski, B. Smolka, H. Palus, R.S. Kozera, W. Skarbek, L. Noakes (eds.), Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 2006, 343–348.
- [18] Szczypiński P.M., Strzelecki M., Materka A., Klepaczko A., *MaZda – a software package for image texture analysis*, Computer Methods and Programs in Biomedicine, Vol. 94, No. 1, 66–76, 2009.
- [19] Szczypiński P.M., Strzelecki M., Materka A., *Mazda – a software for texture analysis*, International Symposium on Information Technology Convergence, 2007, ISITC 2007, 245–249, 2007.
- [20] Szczypiński P., *Modele deformowalne do ilościowej analizy i rozpoznawania obiektów w obrazach cyfrowych*, Rozprawa doktorska, Wydział Elektrotechniki i Elektroniki Politechniki Łódzkiej, Łódź 2000.
- [21] Szczypiński P., Sriram P.V.J., Sriram R.D., Reddy D.N., *Przetwarzanie i wspomaganie interpretacji danych z endoskopu bezprzewodowego za pomocą modelu deformowalnych pierścieni*, Zeszyty Naukowe – Elektronika, Vol. 10, 129–147, 2005.
- [22] Szczypiński P., *Komputerowa analiza obrazów z endoskopu bezprzewodowego dla diagnostyki medycznej*, Vol. 1119, Politechnika Łódzka, Łódź 2012.
- [23] Higham N.J., *Computing the Polar Decomposition – with Applications*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, Vol. 7, No. 4, 1160–1174, 1986.
- [24] Golub G.H., Van Loan C.F., *Matrix computations*, Johns Hopkins University Press, Baltimore 1996.
- [25] Iddan G., Meron G., Glukhovskiy A., Swain P., *Wireless capsule endoscopy*, Nature, Vol. 405, No. 6785, 417, 2000.
- [26] Adler D.G., Goustout C.J., *Wireless capsule endoscopy*, Hosp. Physician, Vol. 39, No. 5, 14–22, 2003.
- [27] Bednarczuk A., Rydzewska G., *Endoskopia kapsułkowa – nadal nowość czy już standard w diagnostyce gastroenterologicznej?*, Polski Merkuriusz Lekarski, Vol. XXVI, No. 155, 506–511, 2009.
- [28] Szczypiński P.M., Sriram R.D., Sriram P.V.J., Reddy D.N., *A model of deformable rings for interpretation of wireless capsule endoscopic videos*, Medical Image Analysis, Vol. 13, No. 2, 312–324, 2009.
- [29] Szczypiński P.M., *Computer Program for Aiding in Wireless Endoscopic Video Interpretation*, Computers in Medical Activity, Vol. 65, E. Kącki, M. Rudnicki, J. Stempczyńska (eds.), Springer, Berlin, Heidelberg, 53–61, 2009.

- [30] Niewczas J., *Ocena uszkodzeń mechanicznych ziarna pszenicy wykrywanych techniką rentgenograficzną*, Acta Agrophysica, Instytut Agrofizyki im. B. Dobrzańskiego w Lublinie, Vol. 2, 1994.
- [31] Szczypiński P., Klepaczek A., *Automated Recognition of Abnormal Structures in WCE Images Based on Texture Most Discriminative Descriptors*, [in:] *Image Processing and Communications Challenges 2*, Vol. 84, R.S. Choraś (ed.), Springer, Berlin, Heidelberg, 263–270, 2010.

## ZAŁĄCZNIK

W załączniku zamieszczono wyprowadzenia równań wykorzystywanych w metodzie transformacji sąsiedztwa, służącej do modelowania naprężeń w modelach deformowalnych. Przedstawiono kilka nierównoważnych rozwiązań, z których każde może być stosowane w zależności od tego, jakiego rodzaju deformacje i naprężenia mają podlegać modelowaniu. W przypadku transformacji skalowania, rozciągania, obrotu i przesunięcia wszystkie wymienione elementy transformacji są uznawane za dopuszczalne i nie są uznawane za deformację – nie stanowią źródła modelowania naprężenia. W przypadku transformacji skalowania, obrotu i przesunięcia rozciągnięcie kierunkowe jest uznawane za deformację i ma wpływ na wartość obliczanej składowej energetycznej związanej z modelowaniem naprężeń. W przypadku transformacji obrotu i przesunięcia zarówno skalowanie, jak i rozciąganie jest traktowane jako deformacja. Najbardziej ogólną postacią jest ta wykorzystująca dekompozycję macierzy transformacji. W tym przypadku każdy z elementów transformacji można swobodnie modyfikować za pomocą parametrów.

## SYMBOLE

- $\hat{\mathbf{v}}_s$  – wektor współrzędnych punktu węzłowego w modelu odniesienia, stały,  
 $\mathbf{v}_s$  – wektor współrzędnych punktu węzłowego w modelu deformowalnym,  
 $x, y$  – współrzędne, elementy wektora  $\mathbf{v}$ ,  
 $N_s$  –  $n$ -sąsiedztwo punktu węzłowego  $s$ ,  
 $\mathbf{J}_s$  – macierz transformacji  $n$ -sąsiedztwa punktu węzłowego  $s$ ,  
 $\mathbf{T}_s$  – wektor translacji  $n$ -sąsiedztwa punktu węzłowego  $s$ ,  
 $\varepsilon_s$  – błąd średniokwadratowy odległości między rzeczywistym położeniem węzłów a położeniem obliczonym na podstawie transformacji,  
 $\Sigma$  – symbol sumowania po wszystkich punktach węzłowych sąsiedztwa  $N_s$ .

## TRANSFORMACJA SKALOWANIA, ROZCIĄGANIA, OBROTU I PRZESUNIĘCIA

W transformacji afinicznej składającej się ze skalowania, rozciągania i obrotu macierz  $\mathbf{J}_s$  oraz wektor  $\mathbf{T}_s$  mają następującą postać

$$J_s = \begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} \\ j_{21} & j_{22} \end{bmatrix}; \quad T_s = \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix}$$

Dla tego przypadku błąd  $\varepsilon_s$  można zapisać w następującej postaci:

$$\varepsilon_s = \sum ((x - t_1 + j_{11}\hat{x} + j_{12}\hat{y})^2 + (y - t_2 + j_{21}\hat{x} + j_{22}\hat{y})^2)$$

a po przekształceniu

$$\begin{aligned} \varepsilon_s = & \sum (x^2 - 2xt_1 + t_1^2 + y^2 - 2yt_2 + t_2^2 + (j_{11}\hat{x})^2 + (j_{21}\hat{x})^2 + (j_{21}\hat{y})^2 + (j_{22}\hat{y})^2) \\ & + 2\sum (j_{11}j_{12}\hat{x}\hat{y} + j_{21}j_{22}\hat{x}\hat{y} - j_{11}(x - t_1)\hat{x} - j_{21}(y - t_2)\hat{x} - j_{12}(x - t_1)\hat{y} - j_{22}(y - t_2)\hat{y}) \end{aligned}$$

Pochodne błędu  $\varepsilon_s$  po zmiennych  $t_1, t_2, j_{11}, j_{12}, j_{21}$  oraz  $j_{22}$  mają postać:

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial j_{11}} = 2\sum (j_{11}\hat{x}^2 + j_{12}\hat{x}\hat{y} - \hat{x}(x - t_1)) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial j_{12}} = 2\sum (j_{12}\hat{y}^2 + j_{11}\hat{x}\hat{y} - \hat{y}(x - t_1)) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial j_{21}} = 2\sum (j_{21}\hat{x}^2 + j_{22}\hat{x}\hat{y} - \hat{x}(x - t_2)) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial j_{22}} = 2\sum (j_{22}\hat{y}^2 + j_{21}\hat{x}\hat{y} - \hat{y}(x - t_2)) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t_1} = 2\sum (t_1 - x + j_{11}\hat{x} + j_{12}\hat{y}) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t_2} = 2\sum (t_2 - y + j_{21}\hat{x} + j_{22}\hat{y}) = 0$$

Otrzymujemy układ równań, który można przedstawić w postaci macierzowej

$$\begin{bmatrix} \sum \hat{x}^2 & \sum \hat{x}\hat{y} & \sum \hat{x} \\ \sum \hat{x}\hat{y} & \sum \hat{y}^2 & \sum \hat{y} \\ \sum \hat{x} & \sum \hat{y} & \sum 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{11} \\ j_{12} \\ t_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \hat{x}x \\ \sum \hat{y}x \\ \sum x \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \sum \hat{x}^2 & \sum \hat{x}\hat{y} & \sum \hat{x} \\ \sum \hat{x}\hat{y} & \sum \hat{y}^2 & \sum \hat{y} \\ \sum \hat{x} & \sum \hat{y} & \sum 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{12} \\ j_{21} \\ t_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \hat{x}y \\ \sum \hat{y}y \\ \sum y \end{bmatrix}$$

Rozwiązaniem tego układu równań są

$$\begin{bmatrix} j_{11} \\ j_{12} \\ t_1 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \sum \hat{x}x \\ \sum \hat{y}x \\ \sum x \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} j_{21} \\ j_{22} \\ t_2 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \sum \hat{x}y \\ \sum \hat{y}y \\ \sum y \end{bmatrix}$$

gdzie macierz  $\mathbf{M}$  dana jest równaniem

$$\mathbf{M} = \frac{\begin{bmatrix} \sum \hat{y}^2 \sum 1 - (\sum \hat{y})^2 & \sum \hat{y} \sum \hat{x} - \sum \hat{x} \hat{y} \sum 1 & \sum \hat{x} \hat{y} \sum \hat{y} - \sum \hat{y}^2 \sum \hat{x} \\ \sum \hat{y} \sum \hat{x} - \sum \hat{x} \hat{y} \sum 1 & \sum \hat{x}^2 \sum 1 - (\sum \hat{x})^2 & \sum \hat{x} \hat{y} \sum \hat{x} - \sum \hat{x}^2 \sum \hat{y} \\ \sum \hat{x} \hat{y} \sum \hat{y} - \sum \hat{y}^2 \sum \hat{x} & \sum \hat{x} \hat{y} \sum \hat{x} - \sum \hat{x}^2 \sum \hat{y} & \sum \hat{x}^2 \sum \hat{y}^2 - (\sum \hat{x} \hat{y})^2 \end{bmatrix}}{\sum \hat{x}^2 \sum \hat{y}^2 \sum 1 - (\sum \hat{y})^2 \sum \hat{x}^2 - (\sum \hat{x} \hat{y})^2 \sum 1 - (\sum \hat{x})^2 \sum \hat{y}^2 + 2 \sum \hat{y} \sum \hat{x} \sum \hat{x} \hat{y}}$$

#### TRANSFORMACJA SKALOWANIA, OBROTU I PRZESUNIĘCIA

W transformacji składającej się ze skalowania, obrotu i przesunięcia, w której przestrzeń transformowana nie jest rozciągana kierunkowo, macierz  $\mathbf{J}_s$  oraz wektor  $\mathbf{T}_s$  mają następującą postać:

$$\mathbf{J}_s = \begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} \\ -j_{12} & j_{11} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{T}_s = \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix}$$

Dla tego przypadku błąd  $\varepsilon_s$  można zapisać w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \varepsilon_s = & \sum (x^2 - 2xt_1 + t_1^2 + y^2 - 2yt_2 + t_2^2 + (j_{11}\hat{x})^2 + (j_{12}\hat{x})^2 + (j_{12}\hat{y})^2 + (j_{11}\hat{y})^2) \\ & + 2 \sum (j_{11}j_{12}\hat{x}\hat{y} + j_{12}j_{11}\hat{x}\hat{y} - j_{11}(x-t_1)\hat{x} + j_{12}(y-t_2)\hat{x} - j_{12}(x-t_1)\hat{y} - j_{11}(y-t_2)\hat{y}) \end{aligned}$$

Pochodne błędu  $\varepsilon_s$  po zmiennych  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $j_{11}$  oraz  $j_{12}$  mają następującą postać:

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial j_{11}} = 2 \sum (j_{11}(\hat{x}^2 + \hat{y}) - \hat{x}(x-t_1) - \hat{y}(y-t_2)) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial j_{12}} = 2 \sum (j_{12}(\hat{x}^2 + \hat{y}) - \hat{y}(x-t_1) + \hat{x}(y-t_2)) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t_1} = 2 \sum (t_1 - x + j_{11}\hat{x} + j_{12}\hat{y}) = 0$$



$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t_2} = 2 \sum (t_2 - y - j_{12} \hat{x} + j_{11} \hat{y}) = 0$$

Otrzymujemy układ równań, który można przedstawić w postaci

$$j_{11} (\sum \hat{x}^2 + \sum \hat{y}^2) + t_1 \sum \hat{x} + t_2 \sum \hat{y} - \sum \hat{x}x - \sum \hat{y}y = 0$$

$$j_{12} (\sum \hat{x}^2 + \sum \hat{y}^2) + t_1 \sum \hat{y} - t_2 \sum \hat{x} + \sum \hat{x}y - \sum \hat{y}x = 0$$

$$j_{11} \sum \hat{x} + j_{12} \sum \hat{y} + t_1 \sum 1 - \sum x = 0$$

$$j_{11} \sum \hat{y} - j_{12} \sum \hat{x} + t_2 \sum 1 - \sum y = 0$$

lub w postaci macierzowej

$$\begin{bmatrix} (\sum \hat{x}^2 + \sum \hat{y}^2) & 0 & \sum \hat{x} & \sum \hat{y} \\ 0 & (\sum \hat{x}^2 + \sum \hat{y}^2) & \sum \hat{y} & -\sum \hat{x} \\ \sum \hat{x} & \sum \hat{y} & \sum 1 & 0 \\ \sum \hat{y} & -\sum \hat{x} & 0 & \sum 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{11} \\ j_{12} \\ t_1 \\ t_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \hat{x}x \\ \sum \hat{y}x \\ \sum x \\ \sum y \end{bmatrix}$$

Rozwiązaniem układu równań jest

$$\begin{bmatrix} j_{11} \\ j_{12} \\ t_1 \\ t_2 \end{bmatrix} = \frac{\begin{bmatrix} \sum 1 & 0 & -\sum \hat{x} & -\sum \hat{y} \\ 0 & \sum 1 & -\sum \hat{y} & \sum \hat{x} \\ -\sum \hat{x} & -\sum \hat{y} & (\sum \hat{x}^2 + \sum \hat{y}^2) & 0 \\ -\sum \hat{y} & \sum \hat{x} & 0 & (\sum \hat{x}^2 + \sum \hat{y}^2) \end{bmatrix}}{(\sum \hat{x}^2 + \sum \hat{y}^2) \sum 1 - (\sum \hat{x})^2 - (\sum \hat{y})^2} \begin{bmatrix} \sum \hat{x}x + \sum \hat{y}y \\ \sum \hat{y}x - \sum \hat{x}y \\ \sum x \\ \sum y \end{bmatrix}$$

#### TRANSFORMACJA OBROTU I PRZESUNIĘCIA

W transformacji składającej się z obrotu i przesunięcia, w której przestrzeń transformowana nie jest skalowana oraz rozciągana kierunkowo, macierz  $\mathbf{J}_s$  oraz wektor  $\mathbf{T}_s$  mają następującą postać

$$\mathbf{J}_s = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}; \quad \mathbf{T}_s = \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix}$$

Jeśli dla przestrzeni dwuwymiarowej  $\mathbf{v}_i = [x, y]^T$  oraz  $\hat{\mathbf{v}}_i = [\hat{x}, \hat{y}]^T$ , to błąd  $\varepsilon_s$  można zapisać w następującej postaci:

$$\varepsilon_s = \sum ((x - t_1 + \hat{x} \cos \alpha + \hat{y} \sin \alpha)^2 + (y - t_2 - \hat{x} \sin \alpha + \hat{y} \cos \alpha)^2)$$

Sumowanie jest tu wykonywane dla wszystkich węzłów należących do sąsiedztwa węzła  $s$ . Po przekształceniu otrzymuje się:

$$\begin{aligned} \varepsilon_s &= \sum (x^2 - 2xt_1 + t_1^2 + y^2 - 2yt_2 + t_2^2 + (\hat{x}) + (\hat{y})) \\ &+ 2 \sum (-(x - t_1)\hat{x} \cos \alpha + (y - t_2)\hat{x} \sin \alpha - (x - t_1)\hat{y} \sin \alpha - (y - t_2)\hat{y} \cos \alpha) \end{aligned}$$

Pochodne błędu  $\varepsilon_s$  po zmiennych  $t_1$ ,  $t_2$  oraz  $\alpha$  mają następującą postać:

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t_1} = 2 \sum (t_1 - x + \hat{x} \cos \alpha + \hat{y} \sin \alpha) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t_2} = 2 \sum (t_2 - y - \hat{x} \sin \alpha + \hat{y} \cos \alpha) = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial \alpha} = 2 \sum ((\hat{y}(x - t_1) - \hat{x}(y - t_2)) \cos \alpha + (\hat{x}(x - t_1) + \hat{y}(y - t_2)) \sin \alpha) = 0$$

a po przekształceniu:

$$\begin{aligned} &\cos \alpha \sum (\hat{y}x - \hat{x}y) - t_1 \cos \alpha \sum \hat{y} + t_2 \cos \alpha \sum \hat{x} \\ &+ \sin \alpha \sum (\hat{x}x + \hat{y}y) - t_1 \sin \alpha \sum \hat{x} - t_2 \sin \alpha \sum \hat{y} = 0 \\ &\cos \alpha \sum \hat{x} + \sin \alpha \sum \hat{y} + t_1 \sum 1 - \sum x = 0 \\ &\cos \alpha \sum \hat{y} - \sin \alpha \sum \hat{x} + t_2 \sum 1 - \sum y = 0 \end{aligned}$$

Po wyznaczeniu niewiadomych  $t_1$  i  $t_2$  z drugiego i trzeciego równania układu otrzymujemy

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{\sum x - \cos \alpha \sum \hat{x} - \sin \alpha \sum \hat{y}}{\sum 1} \\ t_2 &= \frac{\sum y + \cos \alpha \sum \hat{x} - \sin \alpha \sum \hat{y}}{\sum 1} \end{aligned}$$

a po podstawieniu tych rozwiązań do równania pierwszego, otrzymuje się

$$\begin{aligned} &\sum 1 (\cos \alpha \sum (\hat{y}x - \hat{x}y) + \sin \alpha \sum (\hat{x}x + \hat{y}y)) \\ &- (\cos \alpha \sum \hat{y} + \sin \alpha \sum \hat{x}) (\sum x - \cos \alpha \sum \hat{x} - \sin \alpha \sum \hat{y}) \\ &+ (\cos \alpha \sum \hat{x} - \sin \alpha \sum \hat{y}) (\sum y + \cos \alpha \sum \hat{x} - \sin \alpha \sum \hat{y}) = 0 \end{aligned}$$

Po dalszych przekształceniach uzyskuje się równanie w postaci

$$\begin{aligned} & \cos \alpha \left( \sum (\hat{y}x - \hat{x}y) \sum 1 - \sum \hat{y} \sum x + \sum \hat{x} \sum y \right) \\ & + \sin \alpha \left( \sum (\hat{x}x + \hat{y}y) \sum 1 - \sum \hat{x} \sum x + \sum \hat{y} \sum y \right) \\ & + 2 \sum \hat{x} \sum \hat{y} (\sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha) = 0 \end{aligned}$$

Korzystając z tożsamości tzw. jedynki trygonometrycznej otrzymujemy

$$\sin \alpha = \frac{2 \sum \hat{x} \sum \hat{y} + \cos \alpha \left( \sum (\hat{y}x - \hat{x}y) \sum 1 - \sum \hat{y} \sum x + \sum \hat{x} \sum y \right)}{\left( \sum \hat{x} \sum x - \sum \hat{y} \sum y - \sum (\hat{x}x + \hat{y}y) \sum 1 \right)}$$

a po dalszych przekształceniach równanie kwadratowe z niewiadomą  $\cos \alpha$

$$1 - \cos^2 \alpha = \left( \frac{2 \sum \hat{x} \sum \hat{y} + \cos \alpha \left( \sum (\hat{y}x - \hat{x}y) \sum 1 - \sum \hat{y} \sum x + \sum \hat{x} \sum y \right)}{\left( \sum \hat{x} \sum x - \sum \hat{y} \sum y - \sum (\hat{x}x + \hat{y}y) \sum 1 \right)} \right)^2$$

Rozwiązując to równanie, a następnie wyznaczając niewiadome  $\sin \alpha$ ,  $t_1$  i  $t_2$ , otrzymuje się dwa rozwiązania

$$\sin \alpha = -\frac{(RQ - P\sqrt{P^2 + Q^2 - R^2})}{P^2 + Q^2}; \quad \cos \alpha = -\frac{(RP + Q\sqrt{P^2 + Q^2 - R^2})}{P^2 + Q^2}$$

oraz

$$\sin \alpha = -\frac{(RQ + P\sqrt{P^2 + Q^2 - R^2})}{P^2 + Q^2}; \quad \cos \alpha = -\frac{(RP - Q\sqrt{P^2 + Q^2 - R^2})}{P^2 + Q^2}$$

gdzie

$$P = \sum (\hat{y}x - \hat{x}y) \sum 1 - \sum \hat{y} \sum x + \sum \hat{x} \sum y$$

$$Q = \sum (\hat{x}x + \hat{y}y) \sum 1 - \sum \hat{x} \sum x + \sum \hat{y} \sum y$$

$$R = 2 \sum \hat{x} \sum \hat{y}$$

Wyboru rozwiązania dokonuje się po sprawdzeniu, dla którego z rozwiązań wartość błędu  $\varepsilon$ , jest mniejsza.

#### DEKOMPOZYCJA MACIERZY TRANSFORMACJI

Przyjmijmy, że obliczona została macierz  $\mathbf{J}$ , dla wariantu transformacji skalowania, rozciągania, obrotu i przesunięcia. Dla uproszczenia zapisu w dalszej części indeks  $s$  zostanie pominięty.

Macierz  $\mathbf{J}$  można przedstawić jako iloczyn dwóch macierzy  $\mathbf{U}$  i  $\mathbf{S}$ .

$$\mathbf{J} = \mathbf{U}\mathbf{S}$$

Macierz  $\mathbf{U}$  jest macierzą ortonormalną (ang. *unitary matrix*), natomiast macierz  $\mathbf{S}$  jest macierzą symetryczną. Rozkład macierzy  $\mathbf{J}$  na macierze  $\mathbf{U}$  i  $\mathbf{S}$  nazywa się rozkładem biegunowym (ang. *polar decomposition*).

Własnością macierzy  $\mathbf{U}$  jest, że

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T$$

Jeśli rozpatruje się przypadek przestrzeni dwuwymiarowej, wówczas macierz  $\mathbf{U}$  można zapisać w postaci

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}$$

gdzie  $\alpha$  jest kątem obrotu w transformacji.

Stąd wynika, że

$$\mathbf{S} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{J} = \mathbf{Y}^T\mathbf{J} = \begin{bmatrix} j_{11} \cos \alpha + j_{21} \sin \alpha & j_{12} \cos \alpha + j_{22} \sin \alpha \\ j_{21} \cos \alpha - j_{11} \sin \alpha & j_{22} \cos \alpha - j_{12} \sin \alpha \end{bmatrix}$$

Ponieważ macierz  $\mathbf{S}$  jest symetryczna, to

$$j_{12} \cos \alpha + j_{22} \sin \alpha = j_{21} \cos \alpha - j_{11} \sin \alpha$$

a po przekształceniu

$$(j_{21} - j_{12}) \cos \alpha = (j_{11} + j_{22}) \sin \alpha$$

Umożliwia to obliczenie kąta  $\alpha$  jako nachylenia wektora  $[j_{21} - j_{12} \quad j_{11} + j_{22}]^T$

$$\alpha = \angle \begin{bmatrix} j_{21} - j_{12} \\ j_{11} + j_{22} \end{bmatrix}^T$$

przy czym kąt  $\alpha$  podawany jest w zakresie od  $-\pi$  do  $+\pi$ .

Macierz  $\mathbf{S}$  jest obliczana za pomocą równania

$$\mathbf{S} = \mathbf{U}^T\mathbf{J}$$

Macierz symetryczną  $\mathbf{S}$  można z kolei przedstawić w postaci:

$$\mathbf{S} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{Q}$$

gdzie macierz  $\mathbf{D}$  jest macierzą diagonalną, natomiast macierz  $\mathbf{Q}$  jest macierzą ortonormalną. Macierz ortonormalną  $\mathbf{Q}$  można przedstawić w postaci

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix}$$

Do rozkładu macierzy  $\mathbf{S}$  na macierze  $\mathbf{Q}$  oraz  $\mathbf{D}$  stosuje się rozkład własny macierzy (ang. *eigen decomposition*). Wiersze macierzy  $\mathbf{Q}$  złożone są ze znormalizowanych wektorów własnych macierzy  $\mathbf{S}$ , natomiast wartości własne macierzy  $\mathbf{S}$  stanowią elementy diagonali macierzy  $\mathbf{D}$ . Wartości własne macierzy  $\mathbf{S}$  dla przypadku przestrzeni dwuwymiarowej można obliczyć jako:

$$\lambda_{s1} = \text{trace}\mathbf{S} + \sqrt{(\text{trace}\mathbf{S})^2 - 4 \det \mathbf{S}}$$

$$\lambda_{s2} = \text{trace}\mathbf{S} - \sqrt{(\text{trace}\mathbf{S})^2 - 4 \det \mathbf{S}}$$

gdzie  $\text{trace}\mathbf{S} = s_{11} + s_{22}$  oznacza ślad macierzy  $\mathbf{S}$  a  $\det \mathbf{S}$  oznacza jej wyznacznik. Macierz  $\mathbf{D}$  ma postać

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_{s1} & 0 \\ 0 & \lambda_{s2} \end{bmatrix} = \sqrt{|\det \mathbf{D}|} \begin{bmatrix} \frac{\lambda_{s1}}{\sqrt{|\det \mathbf{D}|}} & 0 \\ 0 & \frac{\lambda_{s2}}{\sqrt{|\det \mathbf{D}|}} \end{bmatrix} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

Aby wyznaczyć kąt  $\beta$  oraz macierz  $\mathbf{Q}$  można zauważyć, że

$$\mathbf{Q}\mathbf{S} = \mathbf{D}\mathbf{Q}$$

co można zapisać jako

$$\begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix}$$

Oznacza to, między innymi, że

$$s_{11} \cos \beta - s_{21} \sin \beta = \lambda_1 \cos \beta$$

co umożliwi obliczenie kąta  $\beta$  jako

$$\beta = \angle [j_{11} - \lambda_1 \quad j_{21}]^T$$

Finalizuje to rozkład macierzy  $\mathbf{J}$  do postaci

$$\mathbf{J} = \mathbf{a} \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix}$$

W modelowaniu naprężeń wykorzystuje się macierz  $\mathbf{J}^*$  oraz wektor  $\mathbf{T}^*$  dane równaniami

$$\mathbf{J}^* = \mathbf{A}^* \begin{bmatrix} \cos \alpha^* & \sin \alpha^* \\ -\sin \alpha^* & \cos \alpha^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta^* & -\sin \beta^* \\ \sin \beta^* & \cos \beta^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^* & 0 \\ 0 & \lambda_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta^* & \sin \beta^* \\ -\sin \beta^* & \cos \beta^* \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{T}^* = \rho_T \mathbf{T}$$

przy czym

$$\mathbf{A}^* = (\sqrt{\det \mathbf{D}})^{\rho_A}; \quad \alpha^* = \rho_R \alpha; \quad \lambda_1^* = \lambda_1^{\rho_s}; \quad \lambda_2^* = \lambda_2^{\rho_s}$$

Odpowiednie elementy macierzy oraz wektora są modyfikowane za pomocą parametrów  $\rho_A$ ,  $\rho_R$ ,  $\rho_s$  i  $\rho_T$ . Parametry te dobiera się w zakresie od zera do jedności, a ich wartości określają udział danego komponentu lub współczynnika w wynikowej transformacji. Wartości parametrów równe jedności oznaczają, że odpowiadająca im składowa transformacji nie jest wykorzystywana do modelowania naprężeń. Im parametr ma mniejszą wartość, tym w większym stopniu odpowiednia składowa wpływa na wielkość modelowanego naprężenia.

#### GEOMETRIC DEFORMABLE MODELS FOR IMAGE ANALYSIS AND RECOGNITION

The paper provides an overview of the original numerical methods utilizing deformable models for the digital images analysis. It presents a radial active contour model and a deformable surface for segmentation of two- and three-dimensional images. Describes the principals of deformable grid models and their applications in motion tracking, image registration and object recognition. Moreover, a versatile algorithm for deformation compensation in parametric deformable models of arbitrary topology is described in details. The final part of the paper presents application examples of deformable models in endoscopic video and X-ray images of cereal kernels analysis.





**Wydawnictwa Politechniki Wrocławskiej**  
są do nabycia w księgarni  
plac Grunwaldzki 13, 50-377 Wrocław  
budynek D-1 PWr., tel. 71 320 29 35  
Prowadzimy sprzedaż wysyłkową  
zamawianie.ksiazek@pwr.wroc.pl

**ISBN 978-83-7493-784-9**