POLITECNICO DI TORINO

Collegio di Ingegneria Chimica e dei Materiali

Corso di Laurea Magistrale
in Ingegneria Chimica e dei Processi Sostenibili

Tesi di Laurea Magistrale

Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri

Relatori

prof. Luca Marmo
prof. Enrico Danzi

Candidato

Riccardo Rapetti

Dicembre 2020

L'uomo e la sua sicurezza devono costituire la prima preoccupazione di ogni avventura tecnologica.
Non lo dimenticate mai quando siete immersi nei vostri calcoli e nelle vostre equazioni.

Albert Einstein

Indice

1. INTRODUZIONE 1

1.1 Dati storici sulle esplosioni di polvere 1
1.2 Concetti introduttivi sulle esplosioni di polvere 7
1.2.1 L'importanza dell'area superficiale specifica 7
1.2.2 Fattori che influenzano l'accensione e la violenza di una nube di polvere 7
1.2.3 Materiali che possono causare esplosioni di polvere 8
1.2.4 Intervalli di esplosività di una nube di polvere 9
1.2.5 Esplosione primaria e secondaria 12
1.2.6 Concentrazione e turbolenza: i parametri fondamentali nell'esplosività delle polveri 13
1.2.7 Esplosione confinata 13
1.3 Stato dell'arte nelle misure di estinzione 17
1.4 Spettro delle onde elettromagnetiche 22
1.5 Scopo della tesi 22

2. PRINCIPI DI OTTICA DELLO SCATTERING 25

2.1 Introduzione allo scattering 25
2.1.1 Estinzione, scattering e assorbimento 25
2.1.2 Ipotesi semplificative 26
2.2 Grandezze preliminari utili per lo studio dello scattering 28
2.2.1 L'intensità della radiazione 28
2.2.2 Conservazione dell'energia 30
2.2.3 Conservazione della quantità di moto 30
2.2.4 Fattori di efficienza 31
2.2.5 Scattering ed estinzione in una nube di particelle 32
2.3 Propagazione delle onde nel vuoto 33
2.3.1 Rappresentazione matematica di un'onda 33
2.3.2 Formula di Fresnel 33
2.4 Propagazione di un'onda in un mezzo disperdente 36
2.4.1 Rappresentazione matematica di un'onda dispersa da una singola particella 36
2.4.2 Formula fondamentale dell'estinzione per una singola particella 37
2.4.3 Intensità e formula fondamentale dell'estinzione per una nube di particelle 38
2.4.4 Estinzione e dispersione in una nube di particelle 39
2.4.5 Estinzione e dispersione nel caso generale di luce polarizzata 41
2.4.6 Estinzione e dispersione nel caso di particelle sferiche 42

3. TEORIA RIGOROSA DELLO SCATTERING PER SFERE DI DIMENSIONE ARBITRARIA - TEORIA DI MIE 45

3.1 Spiegazione fisica dello scattering 45
3.2 Equazioni di Maxwell 45
3.2.1 Equazioni generali 45
3.2.2 Campi periodici 46
3.2.3 Condizioni al contorno 47
3.2.4 Condizione di pelle - conduttore perfetto 48
3.3 Soluzione di Mie 50
3.3.1 Soluzione del vettore dell'equazione delle onde 50
3.3.2 Soluzione dei coefficienti dalle condizioni al contorno 52
3.4 Funzioni d'ampiezza e Fattori di efficienza 54
3.4.1 Funzioni d'ampiezza 54
3.4.2 Fattori di efficienza 58
3.5 Formule per l'uso pratico 59
3.5.1 Particella singola, estinzione 59
3.5.2 Particella singola, intensità dispersa 59
3.5.3 Mezzo contenente N particelle per unità di volume 60

3.5.4 Particelle sospese in un mezzo con indice di rifrazione diverso da 1 ..... *60*
3.6 Soluzioni asintotiche 61
3.6.1 Scattering di Rayleigh *61*
3.6.2 Ottica geometrica – scattering causato da grandi particelle: il paradosso dell'estinzione *62*

4. ESPERIMENTI DI SCATTERING ED ESTINZIONE 65

4.1 Situazioni ottimali di utilizzo dello scattering 65
4.2 Scattering 66
4.3 Estinzione 67
4.3.1 Legge di Lambert-Beer per la misura della concentrazione *67*
4.3.2 Calcolo della concentrazione di una nube di polvere nota la curva della distribuzione granulometrica *70*
4.3.3 Misure di estinzione *73*
4.4 Misura dell'indice di rifrazione 74
4.5 Informazioni che si possono dedurre dalle misure di scattering ed estinzione 75

5. CALCOLO NUMERICO DELLE GRANDEZZE RELATIVE ALLO SCATTERING 77

5.1 Semplificazione per materiale non assorbente 77
5.2 Calcolo delle Funzioni di Bessel 77
5.2.1 Relazioni di ricorrenza in avanti *77*
5.2.2 Proprietà di convergenza delle funzioni di Bessel *78*
5.3 Stato dell'arte dei codici per risolvere problemi di scattering 79
5.4 Caratteristiche di un buon algoritmo 80
5.5 Calcolo dei coefficienti di Mie con il calcolatore 80
5.5.1 Calcolo di an e bn *80*
5.5.2 Calcolo di An (derivata logaritmica di ψn) *82*
5.5.3 Criterio di Stabilità per An *82*
5.5.4 Numero di termini nelle serie di Mie *84*
5.6 Equazioni implementate nel codice di Matlab 86

6. SIMULAZIONE DELL'ESTINZIONE DI UNA NUBE DI POLVERE 89

6.1 Verifica del codice 89
6.1.1 Calcolo degli errori *89*
6.1.2 Confronto con Matzler *89*
6.1.3 Confronto con Winscombe *99*
6.2 Simulazioni 100
6.2.1 Fattori di efficienza *100*
6.2.2 Fattore di efficienza per il caso in laboratorio *103*
6.2.3 Grandezze impiegate nelle simulazioni delle condizioni di laboratorio *106*
6.2.4 Stima del cammino ottico migliore *107*
6.2.5 Calcolo della concentrazione considerando la distribuzione granulometrica *116*
6.3 Misura della concentrazione nel tubo di Hartmann 121
6.3.1 Tubo di Hartmann *121*
6.3.2 Interpretazione di una curva sperimentale *122*
6.3.4 Confronto con curva di calibrazione sperimentale *130*

7. CONCLUSIONI 135

LISTA DEI SIMBOLI 139

Lettere greche 141

BIBLIOGRAFIA 143

APPENDICE – CODICI MATLAB I

A1 Funzione per il calcolo dei coefficienti di Mie I
A2 Funzione per il calcolo del fattore di efficienza per l'estinzione I
A3 Funzione per il calcolo del fattore di efficienza per lo scattering II
A4 Verifica del codice II

A5 GRAFICI Q_{ABS}, Q_{SCA} E Q_{EXT} V
A6 GRAFICI Q_{EXT} IN FUNZIONE DI X, RHO, LAMBDA E RAGGIO VI
A7 GRAFICI N E C_M IN FUNZIONE DELLA TRASMITTANZA IX
A8 GRAFICO C_M IN FUNZIONE DELLA TRASMITTANZA AL VARIARE DEL CAMMINO OTTICO X
A9 GRAFICO C_M IN FUNZIONE DELLA TRASMITTANZA AL VARIARE DEL FATTORE DI EFFICIENZA PER L'ESTINZIONE Q_{EXT} XI
A10 GRAFICI N E C_M IN FUNZIONE DELLA TRASMITTANZA CON DISTRIBUZIONE GRANULOMETRICA XIII
A11 GRAFICI N E C_M PER LE MISURE DI INTENSITÀ NEL TUBO DI HARTMANN CON DISTRIBUZIONE GRANULOMETRICA XVIII
A12 CONFRONTO CURVA DI TARATURA CON IL MODELLO MATEMATICO XXIV

1. Introduzione

Negli impianti industriali dove sono prodotte, processate o immagazzinate polveri combustibili o sostanze contenenti polvere si potrebbero verificare delle esplosioni. Le esplosioni che coinvolgono nubi di polveri sono molto comuni nei mulini per la farina, magazzini, silo per il grano e nell'industria mineraria del carbone. Un'esplosione di povere può essere generata partendo da una miscela polvere/aria con concentrazioni sopra i limiti inferiori di esplosività (LEL) e sotto i limiti superiori di esplosività (UEL) per diverse cause di innesco (scintilla elettrica, superficie calda, ecc). In modo particolare un'esplosione di povere si verifica se sono soddisfatte cinque condizioni (pentagono dell'esplosione): combustibile, comburente, innesco, confinamento e una buona dispersione della polvere in aria. Incidenti che coinvolgo esplosioni di poveri possono essere anche molto gravi: si ricorda una serie di esplosioni di silo contenenti grano a Westwego vicino a New Orleans nel 1977 che uccise 35 persone [1].

1.1 Dati storici sulle esplosioni di polvere

Lo studio della dinamica dell'esplosione di una nube di polvere è giustificato da una serie di eventi incidentali che si sono verificati nel corso del tempo. Infatti le esplosioni di povere sono state riconosciute come minaccia per l'uomo e per le apparecchiature da centinaia di anni.

Uno dei primi report esaustivi che si conosce in letteratura fu redatto dal Conte Morozzo nel 1795 e contiene una dettagliata analisi dell'esplosione avvenuta in un deposito di farina a Torino nel 1785 [2]. È interessante notare che nel report del 1795 vengono menzionati anche precedenti casi di violente combustioni di nubi di farina. Inoltre, al tempo di Morozzo, l'industria dell'estrazione del carbone non era pienamente consapevole dell'importante ruolo giocato dalla polvere di carbone in una serie di esplosioni di miniere, che erano abbastanza comuni all'epoca. Nel 1845 Faraday e Lyell nel loro report in cui esponevano la dinamica dell'esplosione nella miniera di carbone di Haswell, nei pressi di Durham avvenuta nel Regno Unito il 28 settembre del 1844 sono probabilmente i primi scienziati a capire il ruolo centrale della polvere di carbone in queste esplosioni. In tale report conclusero che l'evento primario fu un'esplosione di una miscela metano/aria innescata da una lampada difettosa, evidenziando però anche il ruolo cruciale della polvere di carbone nello sviluppo della devastante esplosione.

Dopo 200 anni dal report di Morozzo il fenomeno delle esplosioni di polveri è un pericolo industriale molto serio e pienamente accettato. Inoltre, nel frattempo lo sviluppo delle industrie chimiche e metallurgiche ha portato la nascita di nuovi solidi combustibili, finemente divisi che hanno causato esplosioni di polvere importanti in molti impianti.

Il caso storico più grave di esplosioni di polveri è avvenuto in una miniera di carbone nella provincia del Liaoning, in Cina, nel 1942 causando 1594 morti e 246 infortunati.

Per sottolineare la diffusione di questi fenomeni si riportano i dati pubblicati dalla National Fire Protection Associated (NFPA) nei suoi report tra il 1900 e il 1956 sulle esplosioni di polveri avvenute in USA. Il report riporta un totale di 1123 esplosioni e copre un ampio intervallo di polveri in ogni categoria: legno, cibo, mangimi, metalli, polimeri, carbone, carta e prodotti chimici. La tabella 1.1 fornisce un riepilogo generale delle conseguenze delle esplosioni che coinvolgono varie categorie di polveri.

Tabella 1.1 - Esplosioni di polvere negli Stati Uniti, tra il 1900 e il 1956. Sono riportati le morti, gli infortuni e le perdite di beni in un campione di 1123 esplosioni (da Eckhoff [2]).

Tipi di polveri	Esplosioni		Morti			Infortuni			Perdite materiali	
	Numero	(%)	Numero	(%)	Per esplosione	Numero	(%)	Per esplosione	M$	Per esplosione
Legno	162	14.5	38	5.6	0.23	160	9.0	0.99	11.4	0.070
Cibo e mangimi	577	51.4	409	60.5	0.71	1061	60.0	1.84	75.8	0.131
Metalli	80	7.1	108	16.0	1.35	198	11.2	2.48	3.2	0.040
Polimeri	61	5.4	44	6.5	0.72	121	6.8	1.98	3.7	0.061
Carbone	63	5.6	30	4.4	0.48	37	2.1	0.59	1.6	0.025
Carta	9	0.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0	0.5	0.056
Altro	171	15.2	47	7.0	0.27	193	10.9	1.13	4.3	0.025
Totale	1123	100.0	676	100.0	0.60	1770	100.0	1.58	100.5	0.089

La tabella 1.1 permette di evidenziare alcune importanti differenze nei tipi di esplosioni di polveri. Le esplosioni dovute alle polveri metalliche rappresentano il 7.1% del totale ma sono responsabili del 16% di tutte le morti e 11.2% di tutti gli infortuni ma portano a basse perdite di beni. Le esplosioni dovute alle polveri prodotte dalle lavorazioni del cibo e dei mangimi sono le più diffuse e portano di conseguenza al numero maggiori di morti e infortuni. Al contrario le esplosioni causate dal carbone polverizzato causano una minore percentuale di morti, infortuni e perdite materiali rispetto al numero totale di esplosioni.

Per avere un quadro più generale si riportano in tabella 1.2 alcuni dati statistici sulle esplosioni di polvere di grano avvenute dal 1900 fino al 1988.

Tabella 1.2 - Esplosioni di polveri di grano negli Stati Uniti dal 1900 al 1988 (da Eckhoff [2]).

Tipo di perdita	**1900-1956**		**1957-1975**		**1979-1988**	
	Totale	**Per anno**	**Totale**	**Per anno**	**Totale**	**Per anno**
Numero di esplosioni	490	8.6	192	10.1	202	20.2
Morti	381	6.8	68	3.6	54	5.4
Infortuni	991	17.4	346	18.2	267	26.7
Danni stimati (M$)	70	1.3	55	2.9	169	16.9

La tendenza allarmante che si osserva dalla tabella 1.2 è che il numero annuale di esplosioni, nel corso del XX secolo, sembra aumentare piuttosto che diminuire. Il numero annuale di morti e di infortunati risulta molto alto per le ultime due serie di dati (1957-1975 e 1979-1988). Inoltre dal 1957-1975 al 1979-1988 il danno annuo stimato ai beni sembra avere un incremento più grande di quello relativo all'inflazione.

Una raccolta completa di dati statistici relativi alle esplosioni di polvere fino ad anni molto recenti è stata svolta da Yuan *et al.*, nel 2015 [70]. La distribuzione delle esplosioni di polveri in diversi paesi e aree è presentata nella figura 1.1.

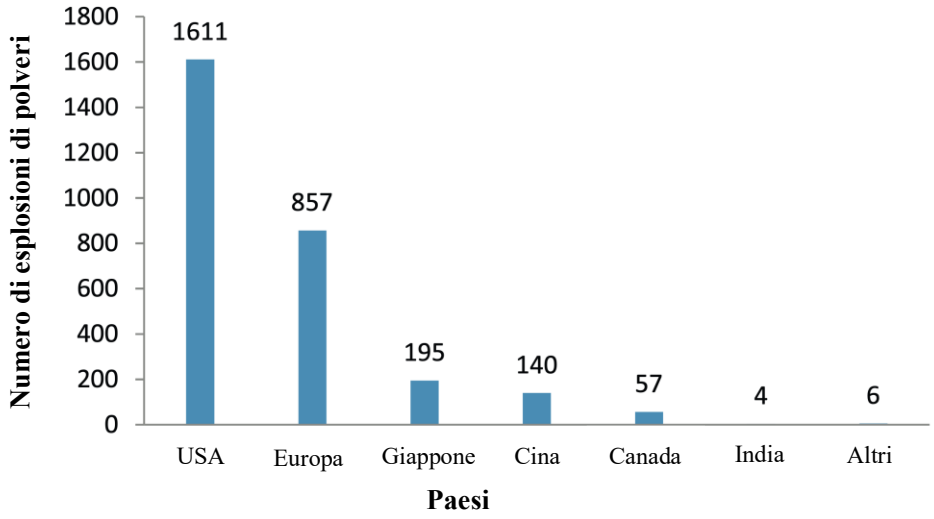

Figura 1.1 - Numero di esplosioni di polvere in diversi paesi dal 1785 al 2012 (da Yuan *et al*. [70] con modifiche).

Le esplosioni di polvere riportate provengono principalmente da: USA, Europa, Giappone e Canada. Il numero di esplosioni di polvere negli USA è 1611, valore molto più grande rispetto alle altre nazioni. Poi segue l'Europa, nella quale il maggior contributo viene fornito dalla Germania (426) e dal Regno Unito (411). Dei report su tali tipi di incidenti sono stati riportati anche in altre nazioni europee che includono: Norvegia, Svezia, Francia, Italia e Spagna.

Una spiegazione della distribuzione degli eventi incidentali riportati in figura 1.1, potrebbe risiedere nei diversi livelli di sviluppo economici dei paesi, a causa alla stretta relazione tra le esplosioni di polveri e le attività produttive.

La distribuzione degli eventi incidentali, di interesse, nel corso degli anni è rappresentata in figura 1.2.

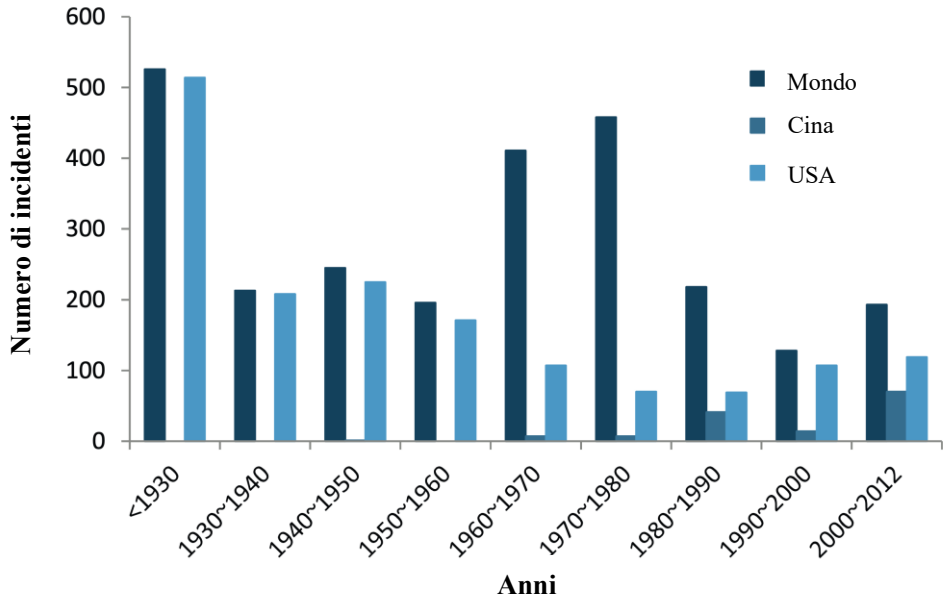

Figura 1.2 - Numero di esplosioni di polvere in diversi periodi di tempo dal 1785 al 2012, per gli USA, la Cina e il mondo (da Yuan *et al*. [70] con modifiche).

A differenza dei dati riportati in tabella 1.2 (riguardanti solo gli USA e fino al 1988), dalla figura 1.2 si osserva che il numero di incidenti avvenuti nel mondo appare essere leggermente in decrescita nel tempo, specialmente negli ultimi vent'anni. In confronto alle 526 esplosioni di polvere riportate prima del 1930, il numero totale si è ridotto a 193 dopo il 2000. Nonostante un picco apparso durante gli anni 1960-1980 (visualizzato anche dalla tabella 1.2), l'andamento è decrescente. Tale comportamento potrebbe dipendere da un miglioramento della gestione della sicurezza sul luogo di lavoro nel mondo. Dalla figura 1.2 si può anche osservare che il numero degli incidenti riportati in Cina è aumentato rapidamente dal 1980, partendo da 7 durante 1970-1980, fino a 41 nel 1980-1990 e alla fine a 70 dal 2000. Questi dati potrebbero essere spiegati dall'aumento dell'attività industriale, dovuta alla riforma economica cinese degli anni 1980.

In figura 1.3 sono raffigurati il numero delle esplosioni di polvere e la produzione industriale dal 2003 al 2012, in Cina. Si può notare che il numero di incidenti è aumentato, durante gli anni 2003-2012, in parallelo all'aumento della produzione industriale.

La forte dipendenza dal carbone, per la produzione di energia, è una delle cause principali delle esplosioni di polvere in Cina. Infatti, la percentuale di carbone come fonte energetica in Cina è maggiore del 70%. Inoltre, la produzione e il consumo di carbone in Cina sono rispettivamente il 47.5% e il 50.2% di quelli mondiali.

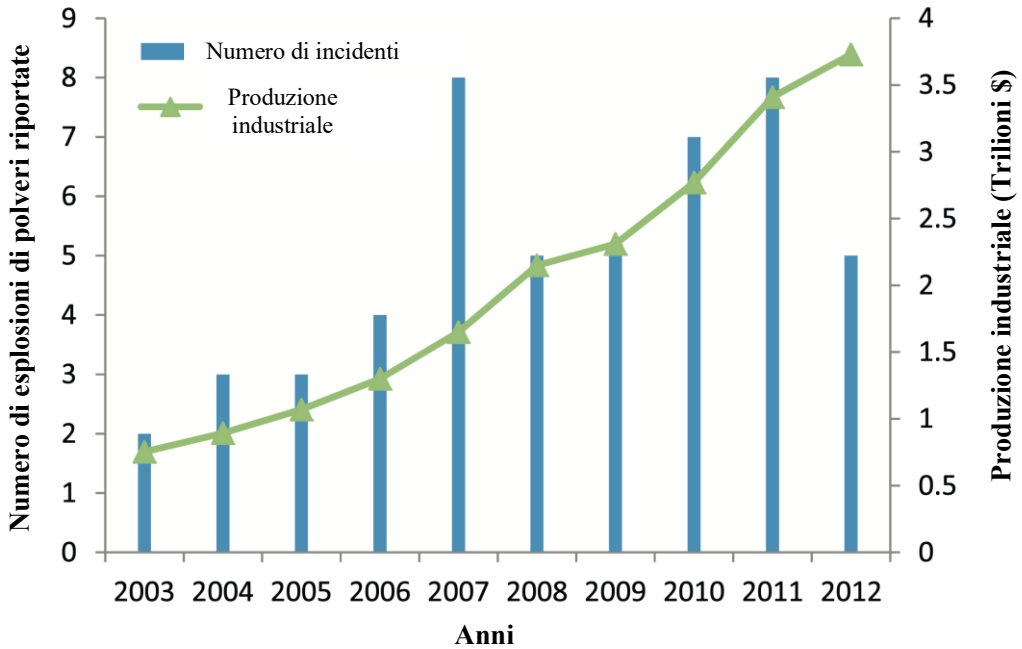

Figura 1.3 - Numero di esplosioni di polvere e produzione industriale in Cina dal 2003 al 2012 (da Yuan *et al.* [70] con modifiche).

Le morti e gli infortuni per incidenti avvenuti in diversi periodi sono rappresentati in figura 1.4. Le morti nel mondo per esplosioni di polvere diminuiscono da 4.6 prima del 1930 a 2.9 tra il 1930 e il 1960. Comunque esse aumentano a 5.0 tra il 1930 e il 1990. Dopo questo periodo, la tendenza verso il basso del numero di vittime riappare e il valore si abbassa fino a 4.4. Il grande numero di morti nei paesi in via di sviluppo, come la Cina, potrebbe essere il contributo principale all'aumento della tendenza dopo il 1960. Il numero di morti in Cina a causa delle esplosioni di polveri è ancora due volte più grande rispetto il livello medio nel mondo. Al

contrario, le morti e gli infortuni per esplosioni di polveri negli Stati Uniti sono più bassi rispetto agli altri paesi nel mondo, specialmente se confrontati con la Cina.

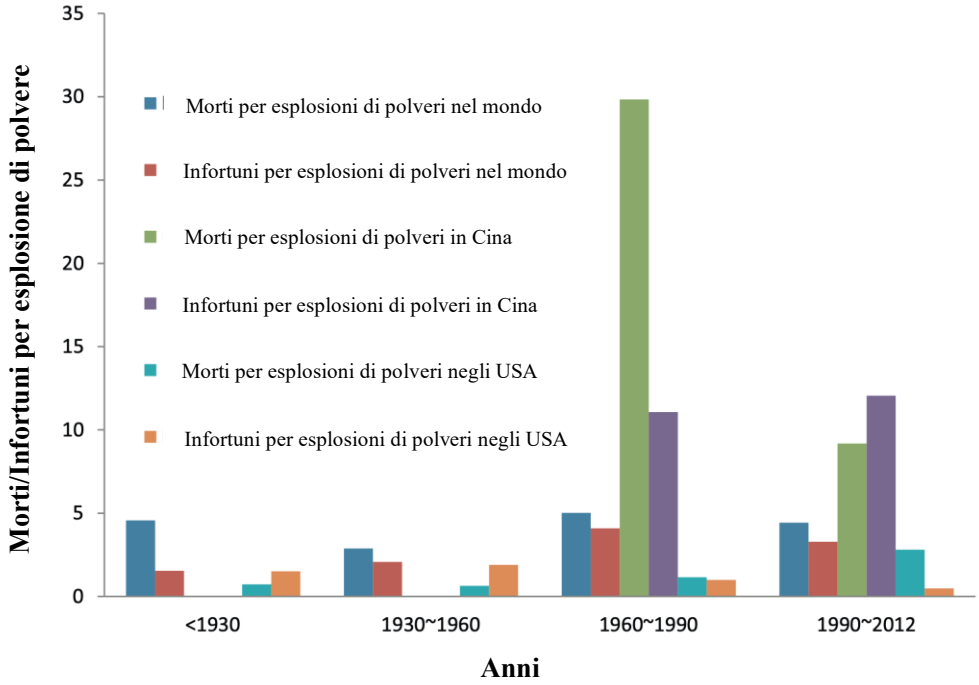

Figura 1.4 - Numero di morti e di infortuni in diversi periodi (da Yuan *et al*. [70] con modifiche).

Le polveri combustibili coinvolte nelle esplosioni di polvere possono essere suddivise in categorie come mostrato in figura 1.5. Si osserva dalla figura 1.5 che il 40% delle esplosioni nel mondo sono causate da prodotti dell'industria alimentare come grano, farina e mangimi. In seconda posizione si trovano le polveri derivanti dalla lavorazione del legno, seguite dalle polveri metalliche e dal carbone.

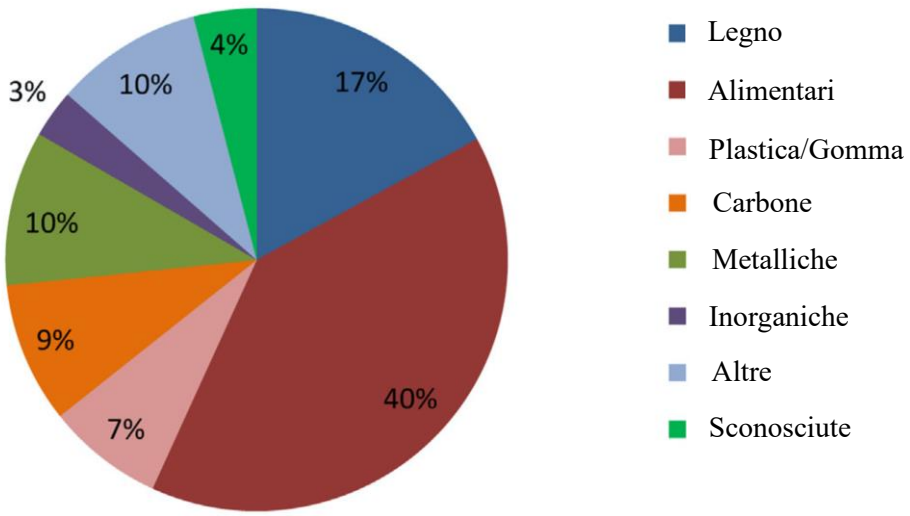

Figura 1.5 – Distribuzione delle polveri combustibile coinvolte nelle esplosioni di polvere nel mondo (da Yuan *et al*. [70] con modifiche).

Il numero di esplosioni di polvere, per ogni tipo di azienda, è mostrato in figura 1.6. Si può osservare che il 26% delle esplosioni di polvere avvengono nelle aziende di prodotti alimentari Altre aziende critiche in cui si verificano esplosioni di polvere sono in ordine: miniere di carbone e lignite, magazzini, aziende di legname, aziende di prodotti chimici, ecc.

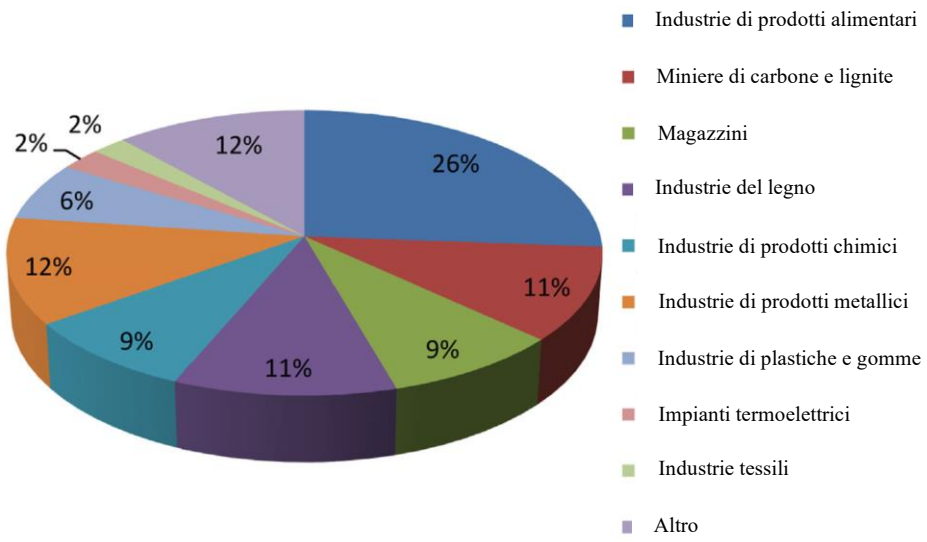

Figura 1.6 – Esplosioni di polvere in vari tipi di industrie (da Yuan *et al*. [70] con modifiche).

In figura 1.7 sono mostrate le apparecchiature che più frequentemente sono coinvolte nelle esplosioni di polveri. Si osserva che le apparecchiature critiche sono i sistemi di raccolta delle polveri e i sistemi di movimentazione.

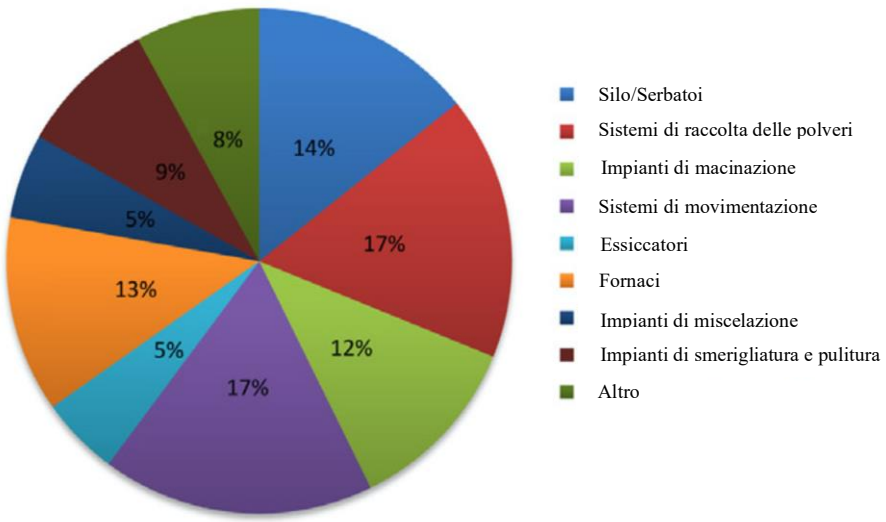

Figura 1.7 – Apparecchiature coinvolte nelle esplosioni di polvere (da Yuan *et al*. [70] con modifiche).

I dati indicano che anche se nel mondo l'andamento globale prevede una diminuzione degli eventi incidentali negli ultimi anni, le esplosioni di polvere rimangono una minaccia persistente

agli operatori e alle apparecchiature industriali. Perciò, lo sforzo nella ricerca per contrastare il pericolo delle esplosioni di polvere deve continuare.

1.2 Concetti introduttivi sulle esplosioni di polvere

1.2.1 L'importanza dell'area superficiale specifica

Ogni materiale solido combustibile si ossida con una violenza e una velocità che aumenta con l'aumento del grado di suddivisione del materiale. La figura 1.8.a mostra come un pezzo di legno una volta che è innescato brucia lentamente, rilasciando la propria energia chimica sotto forma di calore in un periodo di tempo lungo.

a) Combustione lenta b) Combustione veloce c) Esplosione

Figura 1.8 – Rappresentazione di come la velocità di combustione di una data massa di combustibile solido aumenta con l'aumento della sua suddivisione cioè con l'aumento dell'area superficiale specifica (da Eckhoff [2] con modifiche).

Quando invece si taglia il tronco in piccoli pezzi come illustrato in figura 1.8.b la velocità di combustione aumenta, perché l'area superficiale totale di interfaccia tra il legno e l'aria è aumentata. Inoltre l'accensione del legno da parte di un innesco diventa più facile. Se si continua la suddivisione fino a raggiungere dimensioni dell'ordine di $0.1\ mm$ o meno, le particelle si trovano in una condizione in cui l'area superficiale è molto grande, di conseguenza la velocità di combustione aumenta ulteriormente rispetto al caso precedente e l'energia richiesta per l'innesco risulta molto piccola. Una nube di polvere con queste caratteristiche (figura 1.8.c) genera un'esplosione di polvere. In generale una nube di polvere è facile da innescare e brucia più violentemente minore è il diametro delle particelle. Se una tale combustione esplosiva di polvere si verifica all'interno di qualche apparecchiatura di processo o in un ambiente di lavoro, la pressione può crescere molto rapidamente in uno spazio chiuso completamente o parzialmente. Di conseguenza l'impianto o l'edificio possono bruciare, gli operatori potrebbero subire infortuni (anche mortali) e le apparecchiature essere pesantemente danneggiate.

1.2.2 Fattori che influenzano l'accensione e la violenza di una nube di polvere

Nello studio dell'esplosività di una nube di polvere è importante conoscere i fattori che influenzano la sensibilità all'innesco e la violenza dell'esplosione. La dimensione delle particelle e l'area superficiale specifica della polvere sono due fattori centrali (come esposto nella precedente sottosezione 1.2.1). Comunque ci sono altri importanti parametri che giocano un ruolo importante [2]:

1. Composizione chimica della polvere, particolarmente rilevante risulta essere il contenuto d'umidità.
2. Composizione chimica, pressione iniziale e temperatura della fase gas.
3. Distribuzione della dimensione e della forma delle particelle nella polvere, tali fattori determinano l'area superficiale specifica.
4. Grado di dispersione e presenza di agglomerati delle particelle di polvere determinano l'area superficiale specifica effettiva disponibile al processo di combustione della nube di polvere.
5. Distribuzione della concentrazione della polvere nella nube.
6. Distribuzione della turbolenza iniziale nella nube.
7. Possibilità di generazione di esplosioni indotte dalla turbolenza nella parte ancora incombusta della nube.
8. Possibilità di distorsione del fronte di fiamma per altri meccanismi oltre che la turbolenza.
9. Possibilità di un significativo trasferimento di calore per irraggiamento (dipende fortemente dalla temperatura di fiamma che a sua volta dipende dalla composizione chimica delle particelle).

Visto l'ampio spettro di condizioni di concentrazioni di nubi di polvere, il grado di dispersione delle nubi, la turbolenza del sistema, e posizione della potenziale sorgente d'innesco nell'industria, ci si aspetta un corrispondente ampio spettro di possibili sensibilità all'innesco e velocità di combustione nelle diverse nubi di polvere.

La complessa situazione che si può incontrare nell'industria di processo crea una costante sfida nella progettazione di esperimenti adeguati e nell'interpretazione dei risultati sperimentali, per meglio rappresentare le situazioni di reale funzionamento delle apparecchiature industriali.

1.2.3 Materiali che possono causare esplosioni di polvere

Le esplosioni di polvere solitamente nascono dal rapido rilascio di calore causato dalla reazione chimica di combustione, descritta dall'equazione 1.1.

$$combustibile + ossigeno \rightarrow ossido + calore \tag{1.1}$$

In pochi casi le polveri metalliche possono inoltre, reagire esotermicamente con azoto o anidride carbonica, ma la maggior parte delle volte il processo che genera calore in un'esplosione di polvere impiega come comburente l'ossigeno. Questo significa che solo i materiali che non sono già ossidi stabili possono dare origine a un'esplosione di polveri.

I materiali più comuni che possono causare un'esplosione di polvere sono:

- Materiali organici naturali (grano, lino, zucchero, farina, ecc).
- Materiali organici sintetici (plastiche, pigmenti organici, pesticidi, ecc).
- Carbone e torba.
- Metalli (alluminio, magnesio, zinco, ferro, ecc).

Il calore di combustione del materiale è un parametro importante, perché esso determina la quantità di energia che può essere liberata nell'esplosione. Comunque quando si confronta i diversi materiali in termini della loro pericolosità, è solito legare il calore di combustione con la quantità di ossigeno consumata. Questo perché il gas in un dato volume della nube di polvere contiene una quantità di ossigeno limitata, che determina quanto calore può essere rilasciato in una esplosione per unità di volume della nube di polvere stessa. La tabella 1.3 contiene una lista dei calori di combustione per unità di mole di ossigeno consumato, per diverse sostanze.

Tabella 1.3 - Calori di combustioni per varie sostanze per mole di O_2 consumato (da Eckhoff [2])

Sostanza	**Prodotti di ossidazione**	**Energia combustione** (KJ/mole di O_2)
Ca	CaO	1270
Mg	MgO	1240
Al	Al_2O_3	1100
Si	SiO_2	830
Cr	Cr_2O_3	750
Zn	ZnO	700
Fe	Fe_2O_3	530
Cu	CuO	300
Saccarosio	CO_2 e H_2O	470
Amido	CO_2 e H_2O	470
Polietilene	CO_2 e H_2O	390
Carbonio	CO_2	400
Carbone	CO_2 e H_2O	400
Diossido di zolfo	SO_2	300

Il Ca e il Mg sono in cima alla lista, con Al molto vicino ad essi. Anche il Si è abbastanza in alto nella tabella 1.3 con un calore di combustione per mole di ossigeno pari a circa due volte il valore tipico delle sostanze organiche naturali o sintetiche e per il carbone. Tale classifica è in accordo con il fatto che le temperature di fiamma delle polveri metalliche come Al e Si sono molto alte in confronto a quelle che si osservano con la combustione di polveri organiche o del carbone [2].

1.2.4 Intervalli di esplosività di una nube di polvere

La combustione esplosiva di una nube di polvere (rappresentata in figura 1.8.c) può avvenire solo se la concentrazione massica di povere (intesa come la massa di polvere per unità di volume di nube) è all'interno di certi limiti. Questo concetto è analogo alla combustione di una miscela omogenea di combustibile gassoso e aria, per la quale i limiti inferiore e superiore di infiammabilità sono ben definiti. La figura 1.9 mostra l'intervallo di esplosività tipici per materiali organici naturali, come l'amido di mais, in aria a temperatura ambiente e pressioni atmosferica.

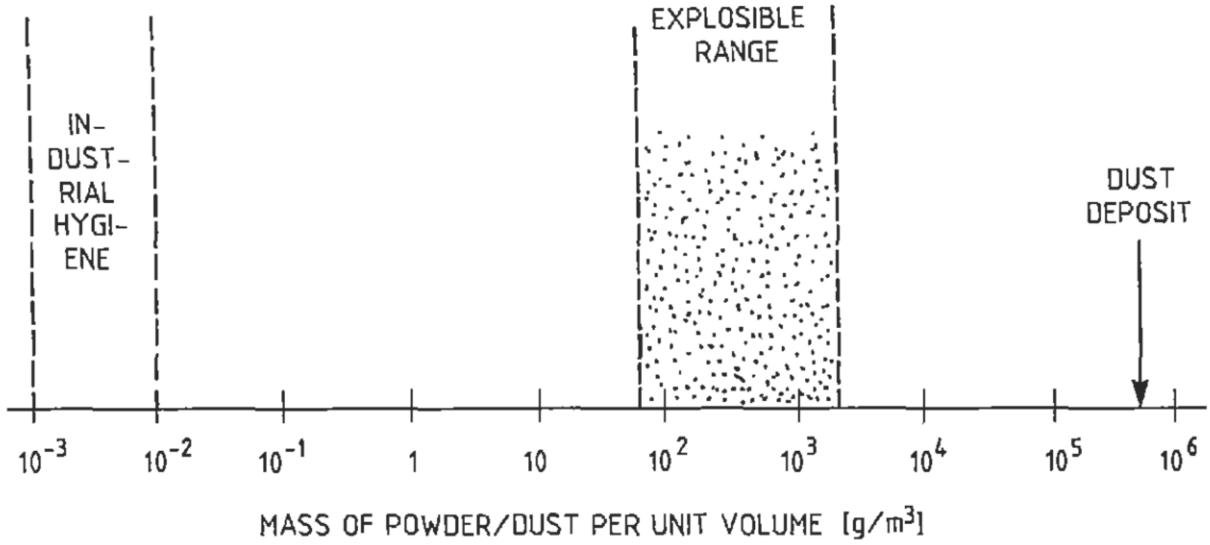

Figura 1.9 – L'intervallo di concentrazioni in cui si verifica l'esplosione di una nube di polvere in aria a temperatura ambiente e pressione atmosferica per una tipica polvere organica naturale (amido di mais), confrontato con l'intervallo tipico della massima concentrazione di polvere permessa nel contesto dell'igiene industriale e la densità di bulk tipica per un deposito di polvere organica naturale (da Eckhoff [2]).

L'intervallo di esplosività è abbastanza stretto e si estende all'incirca per meno di due ordini di grandezza, da $50 - 100\ g/m^3$ nel lato povero fino a $2 - 3\ kg/m^3$nel lato ricco. I limiti di esplosività differiscono piuttosto per i diversi materiali che costituiscono la polvere. Per esempio la polvere di zinco ha come valore minimo di concentrazione per osservare un'esplosione in aria circa $500\, g/m^3$.

Le nuvole di polvere esplosive presentano una densità ottica elevata, anche nei pressi dei limiti di esplosività più bassi. L'intervallo di concentrazione di polvere massima specificato nel contesto dell'igiene industriale in atmosfere presenti in un ambiente di lavoro è da tre a quattro ordini di grandezza inferiori che la concentrazione minima di polvere esplosiva. Questo significa che i livelli sgradevoli di concentrazione di polvere che possono presentarsi qualche volta nei generici ambienti di lavoro o fabbriche e chiamare l'attenzione delle autorità d'igiene, sono di molto al di sotto dei livelli che possono propagare una fiamma in una nube di povere. Quindi la concentrazione minima per cui si può verificare un'esplosione corrisponde a una nube di polvere con alta densità ottica, che è improbabile che si verifichi regolarmente negli ambienti di lavoro o nelle fabbriche.

Un'immagine idealizzata della concentrazione di una nube di polvere all'interno dei limiti di esplosività è illustrata in figura 1.10 e rappresenta delle particelle cubiche disposte in un reticolo cubico.

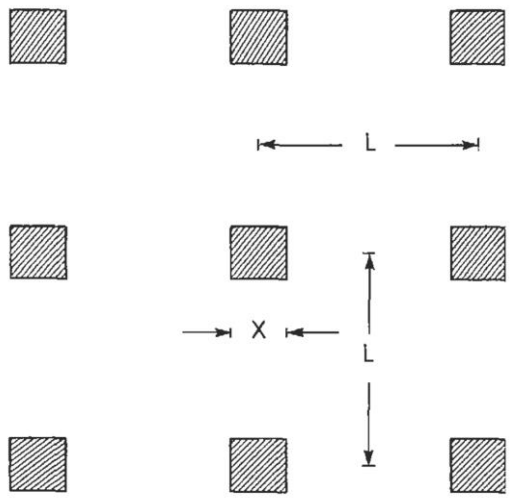

Figura 1.10 - Particelle di polvere di forma cubica con lato di lunghezza x, disposte in un reticolo cubico, con una distanza interparticellare pari a L (da Eckhoff [2]).

In media, si incontra una particella cubica di volume x^3 per un volume cubico di nube pari a L^3. Se la densità della particella è ρ, la concentrazione diventa uguale a:

$$C_M = \rho(x/L)^3 \tag{1.2}$$

Da cui si può ricavare il rapporto tra la distanza interparticellare e la dimensione della particella:

$$L/x = (\rho/C_m)^{1/3} \tag{1.3}$$

Per particelle aventi una densità del solido pari a $\rho = 1000\ Kg/m^3$, l'immagine rappresentata in figura 1.10 ($L/x = 4$) corrisponde a una concentrazione molto alta pari a $16\ Kg/m^3$, che è ben al di sopra della massima concentrazione per l'esplosività delle polveri organiche ($2 - 3\ Kg/m^3$).

Si sottolinea che la distanza interparticellare corrispondente a una data concentrazione di polvere diminuisce proporzionalmente con l'aumento di dimensione delle particelle.

Eckhoff [2] cita una "*regola del pollice*". Se si irraggia con una lampadina a incandescenza di 25 W una nube di polvere dello spessore di $2\ m$, non si osserva nessuna "luce" dalla parte opposta, se la concentrazione di polvere eccede i $40\ g/m^3$. Tale concetto viene illustrato dalla figura 1.11 e può essere interpretata come un semplice esperimento di estinzione di una radiazione elettromagnetica (nello spettro del visibile) causato da una nube di particelle.

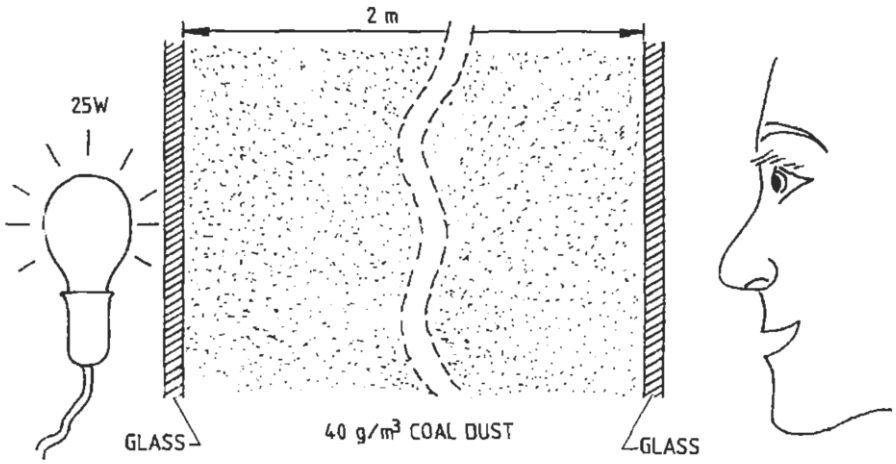

Figura 1.11 - Una nube di polvere di carbone con concentrazione di 40 g/m^3 è così densa che la luminosità di una lampadina a incandescenza da 25 W può essere vista difficilmente attraverso una nube di polvere di spessore 2 m (da Eckhoff [2]).

1.2.5 Esplosione primaria e secondaria

Le nubi di polvere nelle quali si innescano le esplosioni si trovano normalmente all'interno di apparecchiature di processo come mulini, miscelatori, essiccatori, cicloni, filtri, elevatori a tazze, tramogge, silo, canali di aspirazione e condotti per il trasporto pneumatico delle polveri. Queste esplosioni, prodotte da qualche sorgente di innesco sono chiamate *esplosioni primarie*. La dinamica di questo fenomeno rivela un'importante differenza tra un'esplosione primaria di polvere o di gas. Nel caso di gas l'apparecchiatura di processo contiene solitamente solo il combustibile, con assenza di aria e in queste condizioni l'esplosione di un gas all'interno dell'apparecchiatura stessa è impossibile. Perciò molte esplosioni primarie di gas avvengono al di fuori delle apparecchiature di processo a causa di una perdita accidentale di gas che genera un'atmosfera esplosiva, miscelandosi con l'aria (oppure all'interno nel caso in cui sia l'aria a penetrare all'interno dell'unità di processo).

Un obiettivo importante nel controllo delle esplosioni di polvere è limitare le esplosioni primarie nelle apparecchiature di processo. Inoltre è necessario anche evitare le *esplosioni secondarie* dovute al sollevamento (trascinamento) di strati di polveri, posizionati nei pressi delle unità di processo, a causa del fronte di pressione generato dall'esplosione primaria. Molte volte le conseguenze di una esplosione secondaria sono molto più gravi rispetto alla primaria.

In generale, gli strati di polvere che si disperdono facilmente negli impianti di processo rappresentano un pericolo potenziale di esplosione di polvere secondaria, per cui devono essere ridotti il più possibile. La figura1.12 rappresenta come un'esplosione secondaria può avvenire in un ambiente di lavoro se le precauzioni intraprese sono inadeguate.

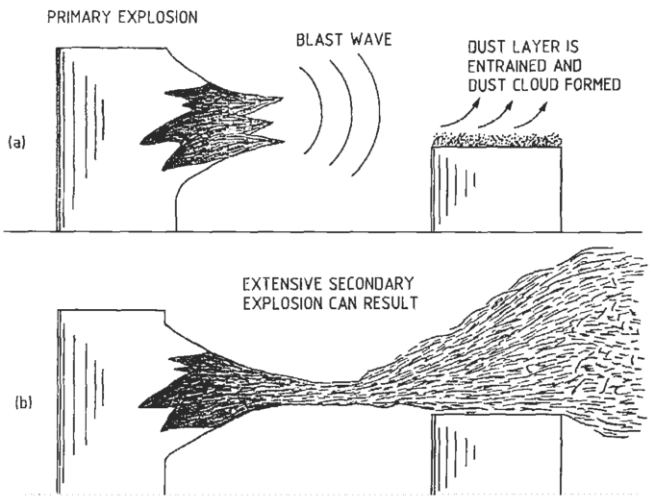

Figura 1.12 - Rappresentazione di come un'onda di pressione causata da un'esplosione primaria: (a) trascina e disperde uno strato di polvere (b) in seguito la nube di polvere sollevata viene innescata dal fronte di fiamma prodotto dall'esplosione primaria (da Eckhoff [2]).

1.2.6 Concentrazione e turbolenza: i parametri fondamentali nell'esplosività delle polveri

Studi sperimentali [7, 8] hanno mostrato, che le nubi di polvere possono all'interno delle apparecchiature di processo possono essere descritte tramite i seguenti parametri, determinabili tramite misure:

- Velocità e intensità della turbolenza locale e temporale
- Concentrazione di polvere locale e temporale

La turbolenza può essere descritta come lo stato di rapido movimento, più o meno casuale delle particelle di una nube di polvere nelle tre dimensioni. Dovrebbero essere considerati due tipi di turbolenza. La turbolenza iniziale è generata dal processo industriale nel quale la nuvola di polvere si è formata per esempio un ciclone, un tubo per il trasporto pneumatico o un mulino. Il secondo tipo di turbolenza è generato dall'esplosione stessa ed è causato dal flusso indotto dall'espansione della nuvola di polvere davanti al fronte di fiamma. Diversi studi hanno mostrato che in aggiunta alla specifica caratterizzazione della polvere e ai parametri termodinamici (esempio pressione e temperatura) la distribuzione di dimensione delle particelle e la concentrazione della miscela polvere/aria così come la sua turbolenza, presentano un effetto importante sulla velocità di fiamma turbolenta e conseguentemente sulla violenza dell'esplosione.

La turbolenza iniziale ha un effetto principalmente sull'aumento di pressione (cioè sul gradiente di pressione in funzione del tempo). Tuttavia ha anche un'influenza sulla pressione massima in un'esplosione di polvere.

1.2.7 Esplosione confinata

Un'esplosione confinata si verifica in uno spazio chiuso come per esempio un serbatoio o un edificio. I due scenari più comuni di esplosioni confinate riguardano i vapori infiammabili e le polveri esplosive. Studi empirici hanno mostrato che la natura dell'esplosione è una funzione di diversi parametri sperimentali (come descritto nella sottosezione 1.2.2) [3]. Questi parametri dipendono dal materiale usato e includono i limiti di esplosività (o infiammabilità), la velocità

di aumento della pressione dopo che la miscela infiammabile è innescata e la pressione massima dopo l'innesco.

Uno degli apparati sperimentali usato per caratterizzare la natura esplosiva della polvere è la sfera di Siwek da 20 L, mostrata in figura1.13.

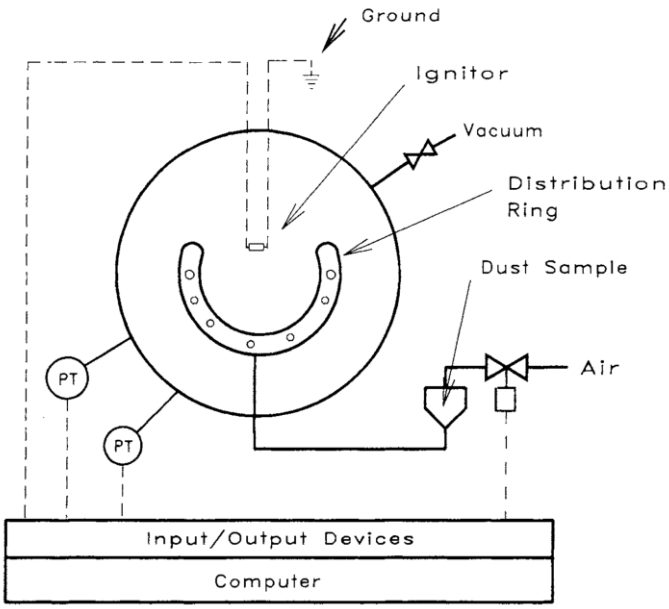

Figura 1.13 - Rappresentazione schematica della sfera di Siwek da 20 L impiegata per la raccolta dei dati sulle esplosioni di polveri (da Crowl e Daniel [1]).

Si nota in figura 1.13 in particolare l'anello di distribuzione che consente la creazione di una miscela appropriata della polvere con l'aria prima dell'innesco.

La procedura sperimentale è la seguente [1]. Il campione di polvere è posto nel portacampione. Il sistema di controllo apre la valvola a solenoide e la polvere è trasportata dall'aria in pressione dal portacampione attraverso un sistema di distribuzione all'interno della sfera. Inizialmente si impiegava un anello perforato, attualmente le normative (come ISO 80079) prescrivono il "*Rebound Nozzle"* [71] (vedere figure 1.14 e 1.15). Dopo un ritardo di qualche millisecondo, in modo da essere sicuri di aver raggiunto una corretta miscelazione e distribuzione della polvere, si avvia l'innesco. Il computer misura la pressione come funzione del tempo. L'aria usata per trasportare la polvere all'interno della sfera, è accuratamente misurata e dosata per garantire la pressione desiderata all'interno della sfera al momento dell'innesco. Un tipico diagramma che raffigura la pressione in funzione del tempo ottenuto nell'apparato sperimentale è mostrato in figura 1.16.

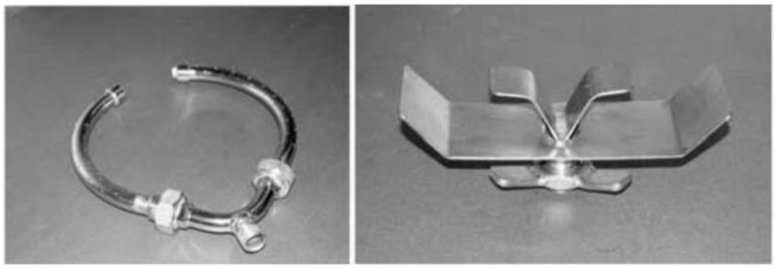

Figura 1.14 – Anello perforato di dispersione (a sinistra) e il "*Rebound Nozzle"* (a destra) (da Dahoe *et al*. [71]).

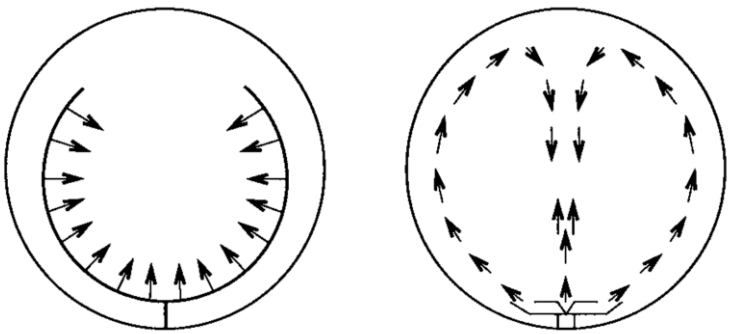

Figura 1.15 – Posizione nella sfera di Siwek e schema del flusso per l'anello perforato di dispersione (a sinistra) e il "*Rebound Nozzle"* (a destra) (da Dahoe *et al*. [71])

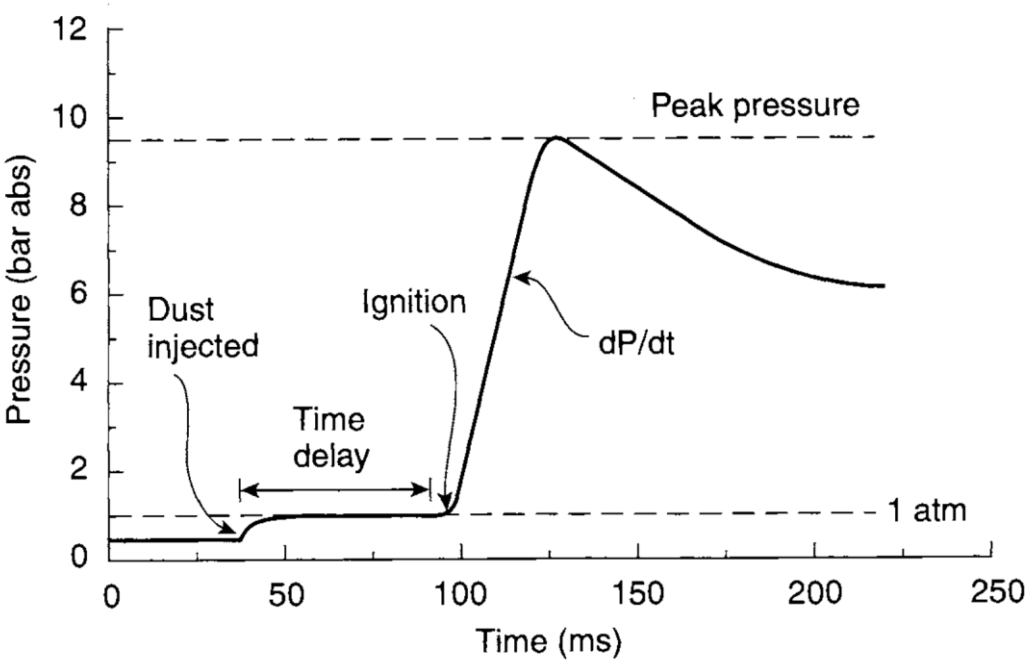

Figura 1.16 - Rappresentazione della pressione in funzione del tempo per una tipica prova di esplosività di polvere in una sfera (da Crowl e Daniel [1]).

I dati sull'esplosione determinati usando l'apparato mostrato in figura 1.6 (sfera di Siwek) sono usati nei seguenti modi:

1. I limiti di esplosività sono usati per determinare le concentrazioni sicure per gli operatori o la quantità di gas inerte richiesto per controllare la concentrazione all'interno delle regioni di non infiammabilità.
2. La massima velocità di aumento della pressione indica la pericolosità di un'esplosione. Tale parametro è usato per progettare i sistemi di sfogo delle esplosioni nei serbatoi prima che l'eccessiva sovrapressione danneggi il serbatoio o per stabilire l'intervallo di tempo utile per iniettare un soppressore dell'esplosione, per fermare il processo di combustione.

Il grafico del logaritmo della massima velocità di aumento della pressione in funzione del logaritmo del volume del serbatoio in cui si è condotto la prova sperimentale, frequentemente produce una linea retta con pendenza -1/3. Tale relazione è espressa dall'equazione 1.4:

$$(dP/dt)_{max}V^{1/3} = cost = K_{St} \tag{1.4}$$

Dove K_{St} è l'indice di deflagrazione per la polvere. Come la gravità dell'esplosione aumenta, l'indice K_{St} aumenta di conseguenza. La legge cubica afferma che il fronte di pressione ci impiega più tempo a propagarsi in un grande serbatoio. Da prove sperimentali si è individuato che il valore di K_{St} è sensibile alle configurazioni e condizioni sperimentali [1]. Le polveri sono classificate in quattro classi St, sulla base del loro valore dell'indice di deflagrazione.

Tabella 1.4 - Classi St per nubi di polveri (da Crowl e Daniel [1]).

K_{st} (bar m/s)	**Classe St**
0	St-0
1-200	St-1
200-300	St-2
>300	St-3

La costante K_{st} non è una proprietà fisica della polvere impiegata perché essa dipende da:

- Concentrazione della polvere
- Miscela all'interno del serbatoio
- Forma del serbatoio
- Energia della sorgente di innesco

Perciò è necessario eseguire esperimenti in condizioni più vicine possibili alle condizioni reali che si intendono studiare.

Studi sperimentali [2] indicano che la massima pressione dell'esplosione solitamente non dipende dal volume, la pressione massima e la velocità massima di aumento della pressione dipendono linearmente dalla pressione iniziale.

Le esplosioni di polveri sono molto più difficili da caratterizzare rispetto quelle gassose. Per un gas le molecole sono piccole e presentano una ben definita dimensione. Le particelle di una nube di polvere presentano diversa dimensione e sono più grandi di vari ordini di grandezza rispetto alle molecole. La forza di gravità perciò influenza il comportamento delle particelle. Per le polveri le deflagrazioni appaiono molto più comuni che le detonazioni. L'onda di pressione causata da una deflagrazione di polvere, comunque è sufficientemente potente per distruggere edifici, uccidere o infortunare persone. Per essere esplosiva una miscela di polvere deve avere le seguenti caratteristiche:

- Le particelle devono essere al di sotto di una certa dimensione minima, solitamente minore di 400 micrometri.
- La concentrazione di particelle deve essere all'interno di certi limiti.
- La nube di polvere deve essere ragionevolmente uniforme.

1.3 Stato dell'arte nelle misure di estinzione

Le misure locali di concentrazione di polveri sono di grande importanza, per la caratterizzazione di una nube di polvere negli studi sull'esplosività.

La concentrazione di polveri viene determinata da molti autori [3, 4, 7, 8, 12, 13, 14, 15] tramite la misura della trasmittanza usando tecniche ottiche. Il principio di misura (mostrato in figura 1.17) si basa sull'attenuazione dell'intensità di un raggio luminoso, che penetra in una nube di particelle solide, a causa dei fenomeni di assorbimento e di dispersione (scattering). Il rapporto tra l'intensità risultante (I) e quella iniziale (I_0) è definita trasmittanza (T). La legge di Lambert-Beer descrive la relazione tra la trasmittanza e la concentrazione massica (C_M) [8]. L'equazione 1.5 riporta una versione empirica della legge di Lambert-Beer, utile se si vuole effettuare misure di concentrazione in modo sperimentale con una curva di taratura, mentre l'equazione 4.2 viene impiegata se il fattore di estinzione ($\gamma = \varepsilon C_M$) si calcola in modo teorico (più avanti, nei capitoli 2 e 3 verrà descritto un metodo che utilizza la teoria di Mie).

$$I = I_0 \cdot e^{-\varepsilon C_M l} \tag{1.5}$$

Dove I_0 è l'intensità iniziale, I è l'intensità risultante del fascio luminoso, ε è il coefficiente di estinzione (una costante specifica che dipende dal tipo di polvere e dallo strumento), l è la distanza percorsa dalla radiazione nella nube di polvere e C_M è la concentrazione massica di polvere.

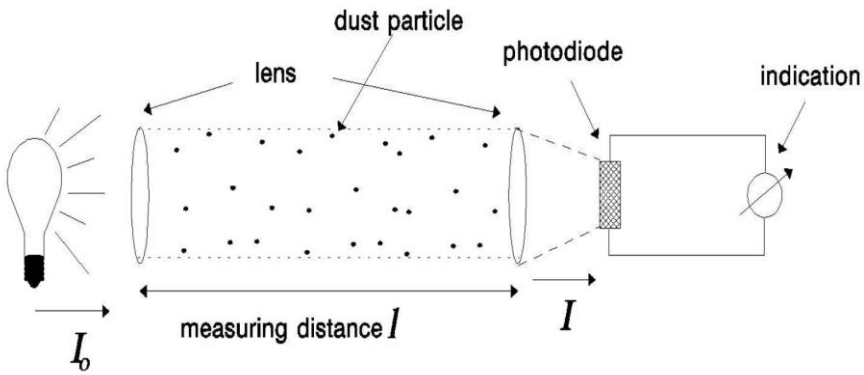

Figura 1.17 – Diagramma schematico del principio di misura della concentrazione di una nube di polvere. L'intensità del fascio luminoso è attenuata a causa dell'assorbimento e dello scattering della luce causato dalla nube di particelle (da Hauert e Vogl [7]).

La figura 1.18 mostra la sezione di una sonda per la misura della concentrazione di polvere usata da Hauert e Vogl [7]. Si possono osservare in particolare il sistema ottico e due piccoli tubicini impiegati per evitare lo sporcamento delle lenti causato dal depositarsi della polvere.

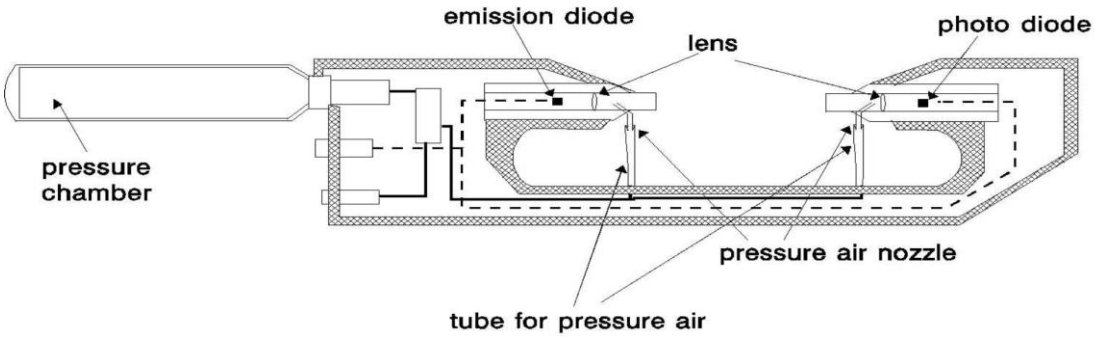

Figura 1.18 -Sezione di una sonda per la misura della concentrazione di polvere. Si evidenziano il diodo emettitore, il fotodiodo ricevitore e i due tubicini per l'immissione dell'aria compressa per pulire le lenti (da Hauert e Vogl [7]).

Per la sorgente luminosa si è impiegato un diodo a luminescenza GaAs con la massima intensità spettrale a 950 nm. Di conseguenza si è usato un fotodiodo con la sensibilità spettrale massima per la medesima lunghezza d'onda anche per il ricevitore. La frequenza di campionamento (frequenza di clock) è scelta in modo che ogni rapido cambiamento o valore di picco momentaneo della concentrazione di polvere fino a circa 3 kHz venga esattamente riprodotto.

Il segnale analogico misurato dal fotodiodo è convertito in un segnale digitale in corrente continua (DC) e mostrato direttamente o immagazzinato in un computer.

La strumentazione completa costituita da un sistema di elaborazioni dei dati e dal sensore è rappresentata in figura 1.19.

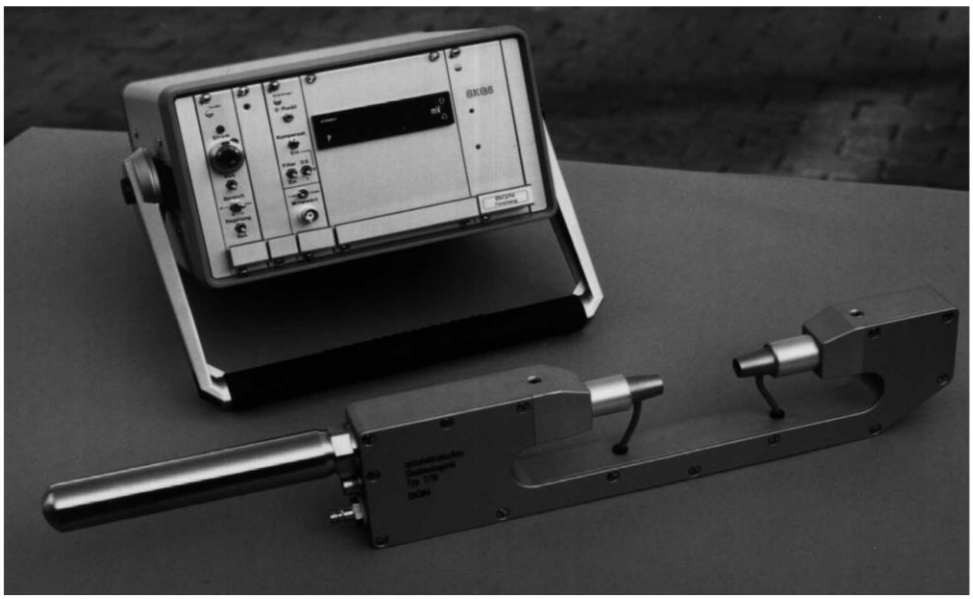

Figura 1.19 – Strumentazione completa per la misura della concentrazione di una nube di polvere. Si osserva il case contenente il sistema per l'elaborazione dei dati raccolti e la sonda per le misure (da Hauert e Vogl [7]).

Il pacco batterie, il circuito elettronico, il sistema di controllo e un display digitale sono installati in un case (contenitore) portatile. Inoltre come già menzionato il sensore e l'emettitore sono equipaggiati con un sistema di pulizia ad aria compressa. Si sottolinea l'importanza di quest'ultimo sistema che risulta fondamentale per minimizzare l'influenzabilità delle misure a causa della formazione di depositi di polvere sui sensori.

Il sistema è calibrato variando regolarmente la quantità di polvere sospesa, in questo modo è possibile calcolare il coefficiente di estinzione (ε) dalla legge di Lambert-Beer (relazione 1.5).

Un esempio di curva di calibrazione per la strumentazione in esame, impiegando come polvere amido di mais e un cammino ottico pari a $l = 10\ cm$ è riportata in figura 1.20. Si osserva che tale grafico non presenta una retta (tipico segni di validità della legge di Lambert-Beer) ma una curva esponenzialmente decrescente in quanto non si è impiegato un grafico con l'asse delle ascisse logaritmico.

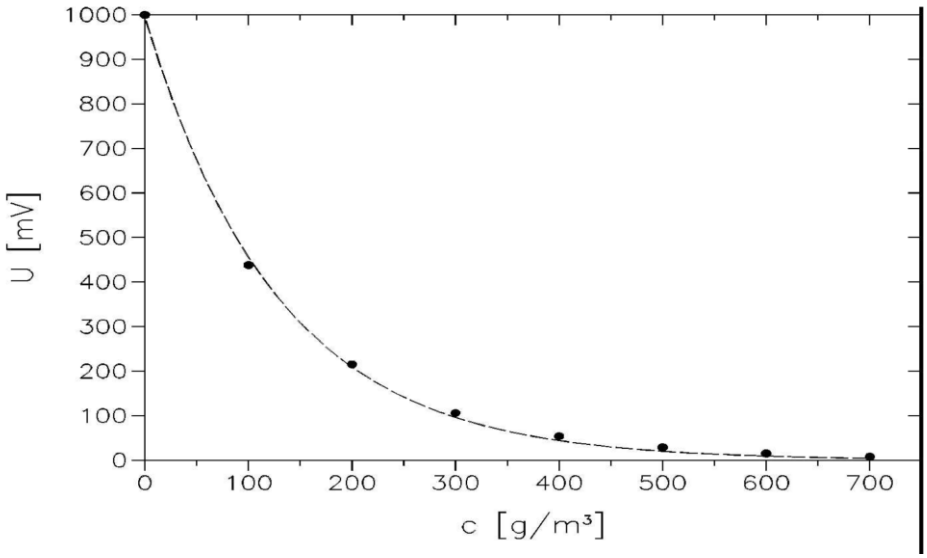

Figura 1.20 - Curva di calibrazione della concentrazione di polvere per amido di mais. La distanza tra i sensori risulta pari a l = 10 cm (da Hauert e Vogl [7]).

Tali tipi di misure devono essere effettuate in condizioni ambientali molto difficili (esempio misura di concentrazione in un letto fluidizzato o nel tubo di Hartmann). Pertanto è necessario calibrare correttamente il sistema e capire i limiti applicativi (per esempio di concentrazione), tenere in conto la distribuzione granulometrica durante la misura e inoltre l'inevitabile sporcamento dei sensori ottici rimane una fonte di errore rilevante. I componenti sensibili del sensore sono protetti contro l'abrasione della polvere, grazie alla loro posizione all'interno di un involucro.

Errori nelle misure si possono verificare se l'intervallo di dimensione della polvere cambia a causa della sedimentazione. Se però le polveri fini con un valore mediano $M < 100\ \mu m$ vengono testate in presenza di un flusso molto turbolento, l'influenza di questo errore è abbastanza piccolo.

Un altro esempio di strumentazione per la misura della concentrazione di una nube di polvere, basata sull'attenuazione della luce è descritta da Eckhoff e Fuhre [3]. L'apparecchiatura, mostrata in figura 1.21, è stata installata in un condotto di estrazione di un elevatore a tazze con diametro 6 in, in un impianto di stoccaggio di grano.

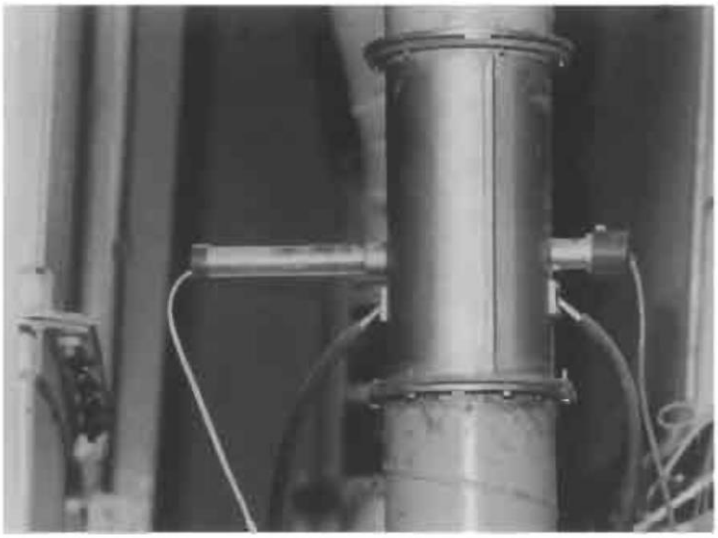

Figura 1.21 - Strumentazione di misura della concentrazione di una nube di polvere per attenuazione della luce, montata in un condotto di estrazione di un elevatore a tazze in un magazzino di grano a Stavanger (da Eckhoff e Fuhre [3]).

La sorgente luminosa è una lampadina convenzionale per autoveicoli funzionante a 4 V. Un fotoresistore e un circuito a ponte vengono usati per misurare l'intensità della luce trasmessa nel lato opposto del diametro del tubo. La sorgente luminosa e il fotoresistore sono protetti dalla polvere da due lenti di vetro. Le lenti sono tenute libere dai depositi di polvere da dei getti continui di aria uscenti da due tubicini (osservabili in figura 1.12 appena al di sotto della lampada e del fotoresistore).

La figura 1.22 mostra la curva di calibrazione per una nube di polvere di grano (con il 10% di umidità) in aria. La linea retta indica che la legge di Lambert-Beer è applicabile al sistema in esame. In figura 1.22 è riportata la densità ottica (D_{10}) in funzione della concentrazione di polvere. La densità ottica (D_{10}) è definita dalla seguente equazione:

$$D_{10} = \frac{intensità\ della\ luce\ incidente}{intensità\ della\ luce\ dopo\ 150\ mm} \tag{1.6}$$

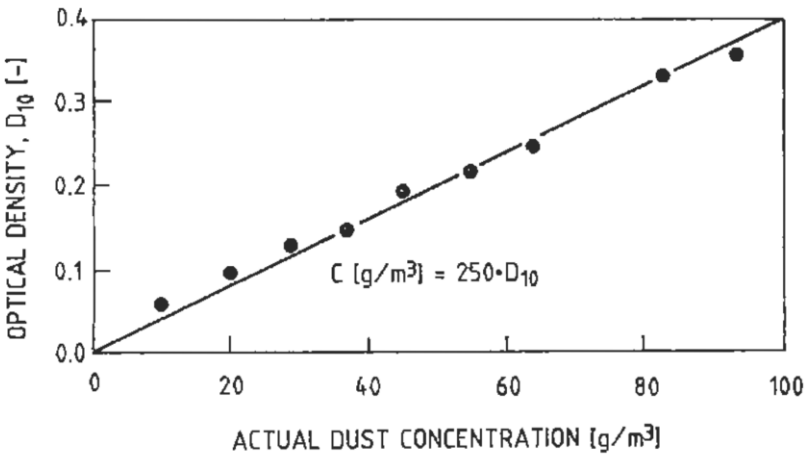

Figura 1.22 - Densità ottica della nube in aria di polvere di grano contenente il 10% di umidità, con un cammino ottico pari a l = 150 mm (da Eckhoff e Fuhre [3]).

In figura 1.23 è illustrata una sonda di misura della concentrazione di una nube di polvere basata sull'attenuazione, sviluppata più recentemente impiegando un LED (Light Emitting Diode) come sorgente di luce e un fotodiodo per determinare la luce trasmessa.

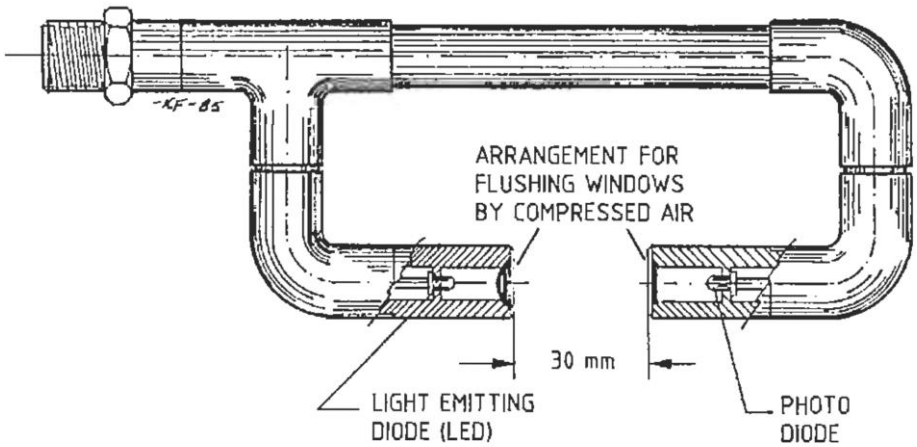

Figura 1.23 - Sonda per la misura della concentrazione di una nube di polvere (da Eckhoff *et al.* [4]).

La sonda rappresentata in figura 1.23 è stata usata con successo da Eckhoff, Fuhre e Pedersen [4] per misurare la distribuzione di concentrazione di amido di mais in un silo di grandi dimensioni (236 m^3). Anche in questo caso si inietta dell'aria compressa sulle lenti di vetro della sonda tramite dei tubicini metallici. Comunque nel caso di esplosioni di polvere nel silo, l'intenso calore generato dall'esplosione richiede che la sonda sia isolata termicamente per prevenire un suo danneggiamento.

Si è scelto un cammino ottico di 30 mm per coprire l'intervallo di esplosività dell'amido di mais in aria. La curva di calibrazione è mostrata in figura 1.24. Se questo tipo di sensori è usato per un monitoraggio continuo della concentrazione sotto i limiti inferiore di esplosività come per esempio intorno a 10 g/m^3, sono richiesti cammini ottici superiore a 30 mm per rendere la strumentazione sufficientemente sensibile. Polveri di diverso materiale, con diversa distribuzione granulometrica o forma possono inoltre richiedere un diverso cammino ottico. In generale è necessario calibrare la sonda che misura l'attenuazione della luce per ogni polvere e intervallo di concentrazione particolare che si desidera monitorare.

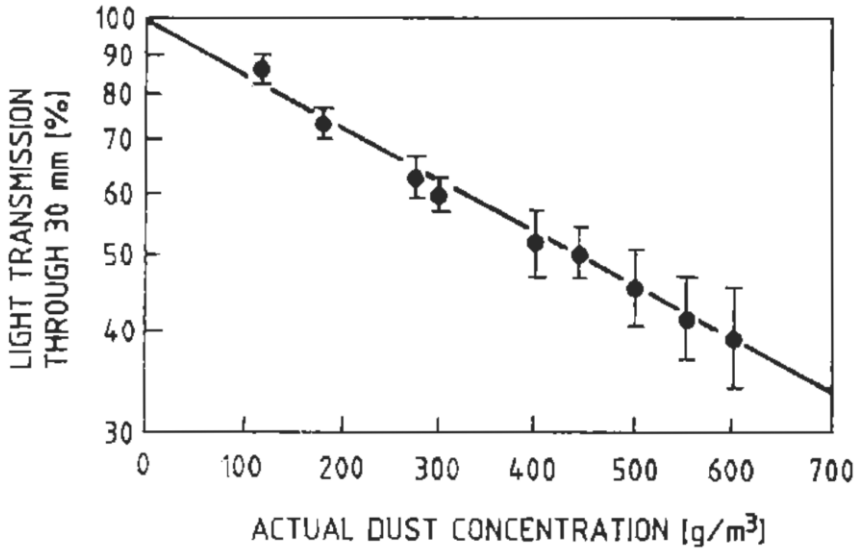

Figura 1.24 – Curva di calibrazione per una sonda di misura della concentrazione di una nube di polvere di amido di mais in aria tramite attenuazione della luce (da Eckhoff *et al.* [4]).

1.4 Spettro delle onde elettromagnetiche

Nello studio dell'interazione fra particelle e i fotoni è importante tenere conto della lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica impiegata. In tabella 1.5 viene rappresentato lo spettro elettromagnetico [43, 65].

Tabella 1.5 - Ordine di grandezza delle lunghezze d'onda, frequenze ed energie delle onde elettromagnetiche ($1\ eV \approx 1.602 \cdot 10^{-19} J$).

Banda	**Lunghezza d'onda** (m)	**Frequenza** (Hz)	**Energia** (eV)
Radio	$3 \cdot 10^6 \geq \lambda \geq 0.3$	$10^2 \leq \nu \leq 10^9$	$\sim 0 \leq E \leq 4 \cdot 10^{-6}$
Microonde	$0.3 \cdot 10^6 \geq \lambda \geq 10^{-3}$	$10^9 \leq \nu \leq 3 \cdot 10^{11}$	$4 \cdot 10^{-6} \leq E \leq 1.2 \cdot 10^{-3}$
Infrarosso	$10^{-3} \geq \lambda \geq 0.78 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{11} \leq \nu \leq 3.8 \cdot 10^{14}$	$1.2 \cdot 10^{-3} \leq E \leq 1.5$
Luce visibile	$0.78 \cdot 10^{-6} \geq \lambda \geq 0.38 \cdot 10^{-6}$	$3.8 \cdot 10^{14} \leq \nu \leq 7.9 \cdot 10^{14}$	$1.5 \leq E \leq 3.3$
Ultravioletto	$0.38 \cdot 10^{-6} \geq \lambda \geq 6 \cdot 10^{-6}$	$7.9 \cdot 10^{14} \leq \nu \leq 5 \cdot 10^{17}$	$3.3 \leq E \leq 2 \cdot 10^3$
Raggi X	$6 \cdot 10^{-6} \geq \lambda \geq 6 \cdot 10^{-12}$	$5 \cdot 10^{17} \leq \nu \leq 5 \cdot 10^{19}$	$2 \cdot 10^3 \leq E \leq 2 \cdot 10^5$
Raggi γ	$\lambda \leq 10^{-10}$	$\nu \geq 5 \cdot 10^{18}$	$E \geq 1.2 \cdot 10^4$

Le radiazioni che interessano nell'ambito delle misure ottiche della concentrazione di nubi di particelle sono il visibile e l'infrarosso (usato in laboratorio).

1.5 Scopo della tesi

In letteratura si incontrano molti lavori di ricerca in cui lo scopo è determinare la concentrazione di una nube di polvere utilizzando misure ottiche [3, 4, 7, 8, 12, 13, 14, 15]. Le procedure standard prevedono la creazione di una curva di taratura misurando la trasmittanza del sistema in nubi a concentrazione note di polvere. L'obiettivo di questa tesi è sviluppare una metodologia che tramite la conoscenza delle proprietà della polvere (raggio medio delle particelle pari ad a e densità del solido ρ) e delle proprietà ottiche riassunte nell'indice di rifrazione m, permette di stimare il coefficiente di estinzione γ, teoricamente tramite la teoria dello scattering. In questo modo l'analisi in caso di nuova polvere diventa più veloce in quanto non è più necessaria

valutare una curva di calibrazione. Inoltre l'analisi condotta in questa tesi permetterà di capire il cammino ottico più adatto per svolgere misure di concentrazione nell'intervallo di esplosività delle polveri organiche (30-2500 g/m^3), con la lunghezza d'onda impiegata nella strumentazione del laboratorio ($\lambda = 0{,}85\mu m$). Il modello sviluppato verrà applicato per stimare la concentrazione massica di polvere nel tubo di Hartmann, nota la distribuzione granulometrica della polvere.

2. Principi di ottica dello scattering

2.1 Introduzione allo scattering

2.1.1 Estinzione, scattering e assorbimento

Le proprietà ottiche di un mezzo sono caratterizzate dall'indice di rifrazione e fintanto che tale parametro risulta uniforme, la luce attraversa il mezzo senza subire deflessione. Ogni volta che ci sono variazioni discrete nell'indice di rifrazione a causa della presenza di particelle o a causa della presenza di variazioni di densità su piccole scale del mezzo in esame, parte della radiazione sarà dispersa in ogni direzione. Lo *scattering* della luce è un fenomeno naturale e ubiquitario. Si può vedere il cielo di colore blu proprio a causa dello scattering dei raggi del sole causato dalle molecole dell'aria (scattering di Rayleigh), se non avvenisse tale fenomeno il cielo apparirebbe di colore nero [40].

Inoltre la luce quasi mai viene osservata direttamente dalla sua sorgente. La maggior parte della luce che noi osserviamo raggiunge i nostri occhi in modo indiretto. Guardando un albero, una casa o un qualsiasi oggetto noi vediamo la luce del sole che viene riflessa diffusamente. Guardando una nuvola o il cielo noi osserviamo la luce del sole che viene diffusa dalle molecole che compongono l'atmosfera. Anche una lampada elettrica non ci invia direttamente i fotoni dal filamento luminoso ma solitamente ci mostra solo la luce che viene scatterata dal bulbo di vetro della lampadina. Perciò tutti coloro che sono impegnati nello studio della luce o della sua applicazione in ambiente industriale incontrano il problema dello scattering delle radiazioni elettromagnetiche.

Lo scattering spesso è accompagnato dall'*assorbimento*. Una foglia di un albero appare verde perché essa diffonde la luce verde maggiormente rispetto alla luce rossa. La luce rossa incidente sulla foglia è assorbita, questo significa che la sua energia è convertita in qualche altra forma (quale forma di energia è irrilevante per i nostri scopi di misura della concentrazione di una nube di polvere) e non è più presente come luce rossa. L'assorbimento è preponderante nei materiali come il carbone e il nerofumo, esso è quasi assente (alle lunghezze d'onde visibili) nelle nuvole.

Sia lo scattering sia l'assorbimento rimuovono energia da una radiazione elettromagnetica che attraversa un mezzo: cioè il raggio viene attenuato. Questa attenuazione è chiamata *estinzione* e si osserva quando noi vediamo direttamente una sorgente luminosa. La luce del sole, per esempio, è più debole al tramonto rispetto a mezzogiorno. Questo indica un'estinzione lungo il percorso dei fotoni nell'atmosfera, la quale è forte per tutti i colori ma è più forte nella luce blu rispetto alla luce rossa. Siccome lo scattering e l'assorbimento sono entrambi responsabili per l'estinzione non possono essere valutati solamente da questa osservazione. Osservando lateralmente l'aria attraverso cui il sole splende, si realizza che in realtà la luce blu è diffusa con più intensità. Misure mostrano che tutta l'intensità luminosa persa dal raggio originale riappare come luce dispersa [39]. Perciò in questo esempio è lo scattering e non l'assorbimento a causare l'estinzione.

Noi definiamo l'estinzione come la somma della radiazione che viene dispersa e di quella che viene assorbita:

$$\textbf{estinzione} = \textbf{scattering} + \textbf{assorbimento} \tag{2.1}$$

2.1.2 Ipotesi semplificative

In questa tesi si tratterà solo alcuni fenomeni particolari di scattering. Una prima semplificazione è assumere che la luce dispersa presenta sempre la stessa frequenza (cioè la stessa lunghezza d'onda – scattering coerente) della luce incidente. Casi come l'effetto Raman o in generale le transizioni quantistiche che coinvolgono lo scattering sono escluse.

Una seconda approssimazione importante è il considerare particelle indipendenti (separate). La distinzione è la seguente: si descriverà lo scattering di particelle ben definite (per esempio come avviene nella nebbia o in una nube di polvere), mentre lo scattering in un mezzo diffuso non viene trattata (per esempio la situazione che si verifica in presenza di una soluzione contenente un polimero).

Si può considerare una distinzione più accurata. Se la luce attraversa un mezzo perfettamente omogeneo, essa non è diffusa. Solo l'inomogeneità causa lo scattering. In realtà ogni mezzo materiale presenta inomogeneità siccome esso è costituito da molecole, ognuna delle quali agisce come un centro di scattering, ma dipende dalla disposizione di queste molecole se la dispersione sarà effettiva. In un cristallo perfetto alla temperatura dello zero assoluto le molecole sono disposte in un modo molto regolare, le onde diffuse da ogni molecola interferiscono in un modo tale che globalmente non causano scattering, ma solo una variazione nella velocità di propagazione.

In un gas o in un fluido, d'altro canto, le fluttuazioni statistiche nella disposizione delle molecole causano uno scattering reale, che qualche volta può essere apprezzato. In questi casi sia se le molecole sono disposte in modo regolare sia se sono disposte in modo irregolare, il risultato finale è un *effetto cooperativo* di tutte le molecole.

La teoria dello scattering poi deve investigare in dettaglio la relazione tra le fasi delle onde disperse dalle molecole vicine. Tale problema nel quale la difficoltà maggiore consiste nella descrizione precisa della *cooperazione* tra le particelle, è chiamato problema dello *scattering dipendente*. Frequentemente, comunque, le inomogeneità sono rappresentate da corpi estranei immersi in un mezzo. Esempi ovvi sono gocce d'acqua o polvere di grano in aria o bolle in acqua. Se tali particelle sono sufficientemente lontane le une dalle altre, è possibile studiare lo scattering di una particella senza fare riferimento alle altre. Questo fenomeno è chiamato *scattering indipendente*.

Può essere interessante sottolineare che le onde diffuse da particele differenti dallo stesso raggio luminoso incidente nella stessa direzione presentano ancora una certa relazione di fase e possono ancora interferire. Il fatto che la lunghezza d'onda rimane la stessa significa che l'onda diffusa deve essere o in fase e amplificarsi l'una con l'altra o fuori fase e distruggersi l'una con l'altra o può verificarsi anche ogni possibilità intermedia.

L'ipotesi dello scattering indipendente significa assumere che non ci sono relazioni sistematiche tra le fasi della radiazione incidente e di quella dispersa. Un leggero spostamento di una particella o un piccolo cambiamento nell'angolo di scattering può variare pesantemente la differenza di fase. L'effetto netto è che per tutti gli scopi pratici le intensità diffuse dalle varie particelle devono essere sommate senza considerare la fase.

Ci si chiede quale distanza tra le particelle è sufficientemente grande per garantire lo scattering indipendente? Una prima condizione (di stima) sufficiente per l'indipendenza è che la distanza mutua tra le particelle sia maggiore di tre volte i raggi delle particelle. Questa potrebbe non essere una regola generale ma per ottenere delle relazioni rigorose sarebbero necessarie delle trattazioni molto complesse. Nella maggior parte dei problemi pratici le particelle sono separate da una distanza più grande di quella menzionata sopra per cui lo scattering può essere considerato indipendente. Per esempio una nebbia molto densa consiste in gocce di $1\ \mu m$ di

diametro e in cui sono presenti circa una goccia ogni mm^3, perciò le distanze sono circa 20 volte maggiori dei raggi delle gocce. La stessa discussione è vera per molte soluzioni colloidali.

Una terza limitazione, di conseguenza è che l'effetto dello scattering multiplo sarà trascurato. Gli esperimenti pratici e le applicazioni molto spesso impiegano una moltitudine di particelle contenute in una nube o in una soluzione. La relazione ovvia per una nube sottile contenente M particelle che disperdono fotoni è che l'intensità diffusa dalla nube è M volte quella diffusa da una singola particella e l'energia rimossa dal raggio originale (radiazione estinta) è inoltre M volte quella rimossa da una singola particella. Questa semplice proporzionalità rispetto al numero di particelle si ottiene solo se la radiazione a cui ogni particella è esposta, è la luce proveniente dal fascio originale.

Infatti, in realtà ogni particella è esposta alla luce diffusa dalle altre particelle, mentre la luce del fascio originale può aver subìto estinzione dalle altre particelle. Se questi effetti sono intensi, si parla di scattering multiplo e non esiste più una semplice relazione di proporzionalità diretta tra il numero di particelle e l'intensità della luce diffusa. Questa situazione può essere illustrata da una nuvola bianca nel cielo. Tale nuvola è come una nebbia densa, le sue gocce possono essere considerate come particelle che disperdono in modo indipendente. Tuttavia l'intensità totale diffusa dalla nube non è proporzionale al numero di gocce contenute all'interno poiché ogni goccia non è illuminata totalmente dalla luce del sole. Infatti delle gocce all'interno della nube possono non ricevere direttamente la luce del sole ma solo luce diffusa la quale è dispersa da altre gocce. La maggior parte della luce che emerge dalla nube è stata diffusa perciò da due o più gocce successivamente.

Lo scattering multiplo non coinvolge un nuovo problema fisico. Per l'ipotesi di indipendenza, ogni goccia può essere pensata essere in uno spazio vuoto, esposta alla luce proveniente da una sorgente lontana. Tale assunzione vale se questa sorgente è il sole o un'altra goccia. Tuttavia il problema di valutare le intensità all'interno e all'esterno della nube è un problema matematico estremamente difficile. Questo problema è stato studiato ampiamente in molti settori ed è solitamente chiamato il problema del trasferimento radiativo. I casi considerati finora si riferiscono a delle classi piuttosto semplici di scattering singolo (scattering isotropico, scattering di Rayleigh) e nel caso di nube (slab infinita o finita con contorni piani, sfere).

Una prova semplice e conclusiva per verificare l'assenza dello scattering multiplo è il raddoppiare la concentrazione delle particelle nel campione in esame. Se l'intensità diffusa è doppia, risulta importante solo lo scattering singolo.

Un altro criterio impiegato può essere l'estinzione. L'intensità di un fascio che passa attraverso il campione è ridotta da una estinzione pari a $e^{-\tau}$ del suo valore originale. Qui τ è la profondità ottica del campione (turbidità). Se $\tau < 0.1$ prevale lo scattering singolo. Per $0.1 < \tau < 0.3$ è necessario introdurre una correzione per tenere in considerazione lo scattering doppio. Per valori ancora più grandi della profondità ottica la complessità dello scattering multiplo diventa un fattore importante da tenere in conto. Quest'ultima condizione può non prevenire la determinazione delle proprietà legate allo scattering di una singola particella, ma certamente rende l'interpretazione del fenomeno meno chiara. Si deve porre molta attenzione nell'utilizzo delle equazioni dello scattering quando la profondità ottica è grande Tale elaborato tratta perciò il seguente tema: lo scattering singolo causato da particelle indipendenti.

Nel caso di interesse in questa tesi (nube di polvere) si ricorda che il limite superiore di infiammabilità (UEL) per polveri organiche è intorno a $2 - 3\ Kg/m^3$, da cui corrisponde una distanza tra le particelle pari ad almeno quattro volte il raggio delle particelle (sottosezione 1.2.4). Per cui si evince che la condizione dello scattering indipendente può essere considerata

valida per le misure di concentrazione di una nube di polvere nell'ambito dell'esplosioni di polveri.

In conclusione, in questa tesi saranno considerate solo condizioni sperimentali nelle quali le particelle sono così lontane le une dalle altre, che ognuna di esse è esposta a un raggio di luce parallelo (cioè luce da una sorgente lontana) ed è presente spazio sufficiente in modo che lo scattering prodotto da ogni particella risulta indisturbato dalla presenza delle altre particelle.

2.2 Grandezze preliminari utili per lo studio dello scattering

In accordo con le limitazioni citate nella precedente sottosezione (2.1.2), si considera una singola particella di forma e dimensione arbitraria, illuminata da una sorgente di luce molto distante. Si vuole investigare le proprietà della luce diffusa a grande distanza dalla particella. Questo implica l'assunzione che le altre particelle della nube siano sufficientemente distanti dalla particella in esame in modo che il fenomeno di scattering dipenda solamente dalla particella considerata (ipotesi di scattering indipendente).

2.2.1 L'intensità della radiazione

La proprietà più importante dell'onda diffusa è la sua intensità (*I*). *L'intensità di un'onda I è il valore medio dell'energia che passa attraverso una sezione ortogonale alla direzione di propagazione per unità di tempo e per unità di area.* Perciò l'intensità è un flusso di energia (unità di misura di J/(m^2 s) o W/m^2) [65]. In ottica tale proprietà è chiamata *irradianza*. L'onda incidente e l'onda diffusa in ogni punto nel campo in esame sono unidirezionali, cioè ognuna confinata in una direzione o in un angolo solido molto piccolo intorno alla direzione di propagazione. Le onde vengono anche assunte essere monocromatiche, cioè assumono una frequenza o un intervallo di frequenze molto piccole.

Si può anche indicare *I* anche come l'*illuminamento* cioè il flusso luminoso per unità d'area (unità di misura lumen/m^2 = lux). Dove lumen = cd sr (cd = candela; sr = steradiante).

Né la luce incidente né la luce diffusa sono completamente caratterizzate solo dalla propria intensità. Le proprietà aggiuntive sono la *polarizzazione* e la *fase*. Le fasi non possono essere misurate direttamente, ma sono importanti nella formulazione corretta dello scattering per la luce polarizzata.

Così successivamente si utilizzeranno le funzioni (complesse) di scattering $S_1(\theta, \varphi)$ e $S_2(\theta, \varphi)$, le quali permettono di descrivere l'ampiezza e la fase dell'onda diffusa. Però nel descrivere le grandezze preliminari utili allo studio dello scattering, tali relazioni possono essere formulate in termini di intensità senza riferirsi alla fase.

L'onda dispersa in ogni punto del sistema considerato è descritta come un'onda sferica, nella quale l'energia fluisce esternamente dalla particella. La direzione di scattering, cioè la direzione della radiazione che viene diffusa dalla particella è caratterizzato dall'angolo θ che esso forma con la direzione di propagazione della luce incidente e dall'angolo azimutale φ (figura 2.1).

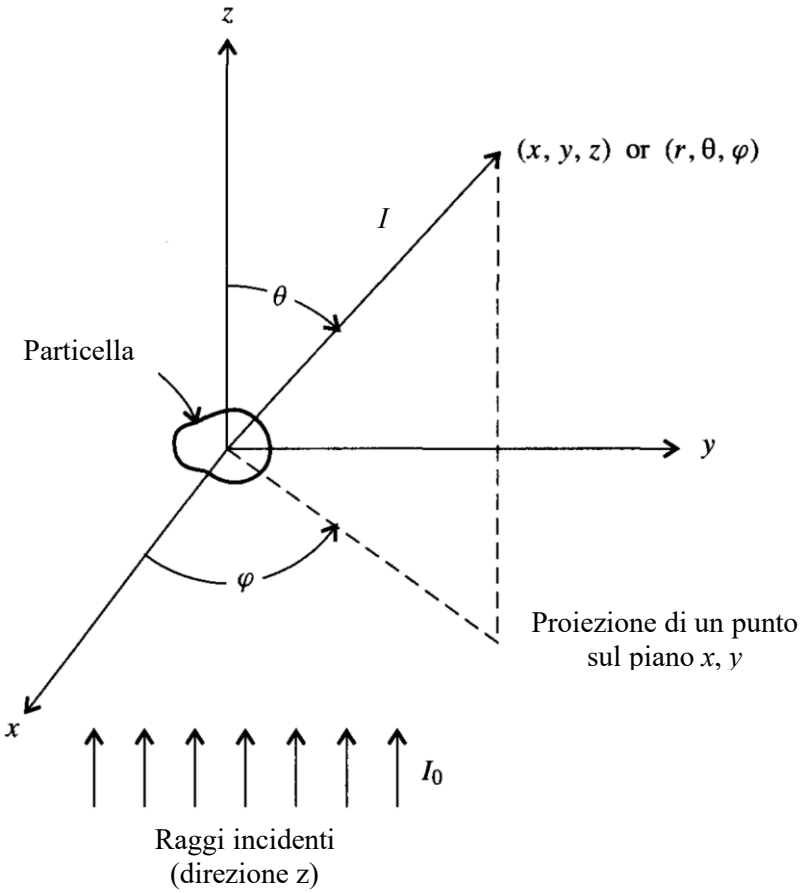

Figura 2.1 – La direzione di scattering ad ogni r è caratterizzata dall'angolo di scattering θ, misurato rispetto alla direzione del raggio incidente e dall'angolo azimutale φ. La radiazione è inviata nella direzione concorde all'esse z (da Friedlander [47] con modifiche).

Si considera I_0 l'intensità della luce incidente, I l'intensità della luce dispersa in un punto a una grande distanza r dalla particella e k è il numero d'onda:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{2.2}$$

Dove λ è la lunghezza d'onda della radiazione nel mezzo circostante. Siccome I deve essere proporzionale a I_0 e a r^{-2}, si può scrivere la seguente equazione [47]:

$$I = \frac{I_0 F(\theta, \varphi)}{k^2 r^2} \tag{2.3}$$

Dove $F(\theta, \varphi)$ è una funzione adimensionale della direzione (θ, φ) ma non di r (F/k^2 è un'area). Essa dipende dall'orientazione della particella rispetto all'onda incidente e anche dallo stato di polarizzazione dell'onda incidente. I valori relativi di I o di F, possono essere rappresentati graficamente su un diagramma polare come funzione di θ, in un piano fissato passante per la direzione della luce incidente. Tale diagramma è chiamato *diagramma di scattering* della particella. Quando $F(\theta, \varphi)$ è diviso da $k^2 C_{sca}$ (dove C_{sca} sarà definito più avanti) si ottiene un'altra funzione della direzione che è chiamata *funzione di fase*. Tale funzione di fase è adimensionale e il suo integrale lungo tutte le direzioni è unitario (funzione normalizzata).

2.2.2 Conservazione dell'energia

L'energia totale diffusa in tutte le direzioni deve essere uguale all'energia dell'onda incidente che cade nell'area di scattering C_{sca}:

$$I_0 C_{sca} = \int I r^2 d\omega \tag{2.4}$$

Sostituendo l'equazione 2.3 nel bilancio di energia relativa allo scattering (equazione 2.4), si può ricavare l'area di scattering (C_{sca}):

$$C_{sca} = \frac{1}{k^2} \int F(\theta, \varphi)\, d\omega \tag{2.5}$$

$$d\omega = \sin\theta\, d\theta d\varphi \tag{2.6}$$

$$C_{sca} = \frac{1}{k^2} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} F(\theta, \varphi) \sin\theta\, d\theta d\varphi \tag{2.7}$$

Dove $d\omega$ è un elemento infinitesimo di angolo solido. L'integrale è calcolato lungo tutte le direzioni (su tutto l'angolo solido, quindi θ varia da 0 a π mentre φ da 0 a 2π). Similmente l'energia assorbita all'interno della particella può essere definita eguagliando l'energia incidente sull'area di assorbimento C_{abs}. L'energia totale rimossa dal fascio di luce originale può essere definita eguagliando l'energia incidente sull'area C_{ext}. Introducendo la legge di conservazione dell'energia:

$$C_{ext} = C_{sca} + C_{abs} \tag{2.8}$$

Le quantità C_{ext}, C_{sca}, C_{abs} sono le *sezioni trasversali* della particella per l'estinzione, per lo scattering, e l'assorbimento, rispettivamente. Tali quantità presentano le unità di misura di un'area. Generalmente, esse sono funzioni dell'orientazione della particella e dello stato di polarizzazione della luce incidente.

Le particelle che non assorbono i fotoni incidenti presentano $C_{ext} = C_{sca}$ (il fenomeno dell'estinzione è completamente causato dallo scattering). In tale condizione questa sezione trasversale sarà denotata con C senza suffisso.

2.2.3 Conservazione della quantità di moto

In accordo con la teoria delle onde elettromagnetiche di Maxwell, la luce possiede una certa quantità di moto così come trasporta dell'energia. La direzione del vettore quantità di moto risulta essere la direzione di propagazione dell'onda (direzione del vettore numero d'onda k). Il modulo del vettore quantità di moto può essere determinato come:

$$p = \frac{E}{c} \tag{2.9}$$

Dove: p è la quantità di moto del fotone, E è l'energia posseduta dal fotone e c è la velocità della luce nel vuoto. L'energia del fotone può essere calcolata dalla seguente equazione:

$$E = h\nu \tag{2.10}$$

Dove: h è la costante di Planck, ν è la frequenza della radiazione elettromagnetica incidente.

Si considera la componente della quantità di moto nella direzione di propagazione dell'onda incidente (la quale sarà chiamata *direzione in avanti*). La quantità di moto rimossa dal fascio originale è proporzionale a C_{ext}. Di questa, la parte C_{abs} non è reintegrata, ma la parte C_{sca} è

parzialmente reintegrata dalla componente della quantità di moto diffusa in avanti. Tale componente in ogni direzione è proporzionale a $I \cos\theta$. La quantità di moto in avanti trasportata dalla radiazione scatterata è perciò proporzionale a:

$$\overline{\cos\theta}\, C_{sca} = \frac{1}{k^2} \int F(\theta, \varphi) \cos\theta \, d\omega \tag{2.11}$$

L'equazione 2.11 definisce la media pesata del $\cos\theta$, nella quale il peso è la funzione di scattering. Da tale equazione (2.11) segue che la parte di quantità di moto che è rimossa dal fascio incidente e che non viene reintegrata dalla componente in avanti della quantità di moto della luce diffusa è proporzionale a:

$$C_{pr} = C_{ext} - \overline{\cos\theta}\, C_{sca} \tag{2.12}$$

Per particelle non assorbenti ($C_{ext} = C_{sca} = C$):

$$C_{pr} = (1 - \overline{\cos\theta})\, C \tag{2.13}$$

Questa quantità di moto è fornita alla particella che disperde i fotoni. Di conseguenza una forza viene esercitata sulla particella nella direzione di propagazione dell'onda incidente. Tale fenomeno è noto con il nome di *pressione di radiazione*. La forza è uguale alla forza che verrebbe esercitata dalla luce incidente sull'area C_{pr} di una parete nera. L'intensità della forza ($Forza$), dovuta alla pressione di radiazione può essere calcolata come:

$$Forza = \frac{I_0 C_{pr}}{c} \tag{2.14}$$

Generalmente, le particelle sono soggette anche a una componente della forza perpendicolare alla direzione di propagazione della luce incidente. Il suo modulo può essere calcolato in modo simile. Però la risultante di tale componente risulta nulla (i diversi contributi si cancellano) in una nube di particelle orientate in modo casuale. Le particelle sono generalmente, inoltre soggette a un momento torcente.

2.2.4 Fattori di efficienza

Si denota con G la sezione trasversale della particella in esame. Nel caso di una sfera di raggio a la sezione trasversale risulta essere:

$$G = \pi a^2 \tag{2.15}$$

Nota, G si possono definire i seguenti parametri adimensionali:

$$Q_{ext} = C_{ext}/G \tag{2.16}$$

$$Q_{sca} = C_{sca}/G \tag{2.17}$$

$$Q_{abs} = C_{abs}/G \tag{2.18}$$

$$Q_{pr} = C_{pr}/G \tag{2.19}$$

Tali grandezze sono chiamate i *fattori di efficienza* rispettivamente per l'estinzione, lo scattering, l'assorbimento e la pressione di radiazione. Per una particella di forma generica questi fattori dipendono dall'orientazione della particella e dallo stato di polarizzazione dell'onda incidente. Nel caso particolare di una sfera essi sono indipendenti da entrambe le proprietà sopramenzionate (grazie alla simmetria di tale geometria). In ogni caso è valida la seguente relazione, che deriva sempre dal principio di conservazione dell'energia:

$$Q_{ext} = Q_{sca} + Q_{abs} \tag{2.20}$$

2.2.5 Scattering ed estinzione in una nube di particelle

Si considera una nube contenente molte particelle che disperdono e che sia dal punto di vista ottico sottile, cosicché l'intensità della radiazione incidente I_0 sia la stessa per ogni particella. Con tale ipotesi è possibile scrivere la seguente equazione per ogni particella:

$$I_i = \frac{1}{k^2 r^2} F_i(\theta, \varphi) I_0 \tag{2.21}$$

Dove l'indice i in questo caso denota la particella i-esima. Non è necessario che le particelle siano simili. Applicando l'operazione di sommatoria all'equazione soprastante (2.21):

$$I = \sum_i I_i = \sum_i \frac{1}{k^2 r^2} F_i(\theta, \varphi) I_0 \tag{2.22}$$

Sommando si ottiene una formula avente la stessa forma dell'equazione 2.3 che, però tiene conto dell'intera nube. Si può inoltre, definire la seguente funzione adimensionale globale (F_O):

$$F_O(\theta, \varphi) = \sum_i F_i(\theta, \varphi) = NVF_i(\theta, \varphi) \tag{2.23}$$

Questa operazione di somma si basa sull'assunzione che gli effetti di fase possano essere trascurati (come descritto nella sottosezione 2.1.2).

L'equazione 2.22 può essere applicata a un elemento di volume V di un mezzo esteso che contiene N particelle identiche per unità di volume, ognuna caratterizzata dalla stessa funzione $F_i(\theta, \varphi)$. Il numero di particelle nell'elemento è perciò NV e l'intensità dispersa alla distanza r è data da:

$$I = \frac{NV}{k^2 r^2} F_i(\theta, \varphi) I_0 \tag{2.24}$$

Se l'area proiettata del volume lungo la direzione r è A, la radiazione risulta contenuta nell'angolo solido A/r^2, così che la luminosità (radianza) media dell'elemento che scattera è

$$B = \frac{NVF(\theta, \varphi) I_0}{k^2 A} \tag{2.25}$$

In termini di unità luminose I_0 è l'illuminamento (già definito in precedenza), B è la luminanza la cui unità di misura è lumen per steradianti per m^2 o candele per m^2.

Un'applicazione molto comune è l'estinzione di una radiazione luminosa causata da una nube di particelle sferiche aventi la stessa composizione chimica ma dimensioni diverse. In questo caso il fattore di efficienza $Q_{ext}(a)$ e la sezione di estinzione trasversale $C_{ext}(a) = \pi a^2 Q_{ext}(a)$ sono funzioni del raggio della particella a. Se $n(a)da$ è il numero di particelle per unità di volume aventi un raggio compreso tra a e $a + da$, vale la seguente relazione:

$$N = \int_0^\infty n(a) da \tag{2.26}$$

L'integrale di $n(a)da$ su tutto l'intervallo di dimensione sarà perciò il numero totale di particelle per unità di volume. Il coefficiente di estinzione del mezzo (γ), che è pari alla sezione trasversale totale per unità di volume è dato da:

$$\gamma = \int_0^\infty \pi a^2 Q(a) n(a) da \tag{2.27}$$

Frequentemente è desiderabile effettuare un cambio di variabili nell'integrale passando da a a $x = 2\pi a/\lambda$.

2.3 Propagazione delle onde nel vuoto

Finora si è trattato solo l'intensità di un'onda. È interessante descrivere un'onda non solo tramite la sua intensità ma anche tramite la sua fase. Si vuole descrivere in questa sezione (2.3) le relazioni di fase di un'onda piana che viaggia nel vuoto. Tale problema è stato trattato e risolto con successo da Fresnel.

2.3.1 Rappresentazione matematica di un'onda

Le *ampiezze complesse* sono degli strumenti indispensabili in fisica/matematica per descrivere i fenomeni ondulatori. Si introducono adesso la loro definizione e delle semplici proprietà. L'ampiezza a e la fase α di un'onda periodica sono combinate in un'ampiezza complessa:

$$A = ae^{i\alpha} = a\cos\alpha + ia\sin\alpha \tag{2.28}$$

Dove i è l'unità immaginaria $(i^2 = -1)$. Un numero complesso può essere rappresentato graficamente come un punto su un piano (dominio complesso), ponendo la parte reale $(a\cos\alpha)$ orizzontalmente lungo l'*asse reale* e la parte immaginaria $(a\sin\alpha)$ verticalmente lungo l'*asse immaginario*. I fattori -1 e i possono essere scritti in una forma esponenziale:

$$-1 = e^{i\pi} \tag{2.29}$$

$$i = e^{i\frac{\pi}{2}} \tag{2.30}$$

La quantità che ha significato fisico è sempre la parte reale dell'espressione 2.28 (cioè si sottintende sempre di considerare $Re(A)$). L'intensità dell'onda è proporzionale al quadrato dell'ampiezza:

$$|A|^2 = A \cdot A^* = (a\cos\alpha + ia\sin\alpha)(a\cos\alpha - ia\sin\alpha) = a^2 \tag{2.31}$$

Le barre verticali denotano il modulo del numero complesso, mentre l'asterisco denota il complesso coniugato:

$$s = a + ib \tag{2.32}$$

$$s^* = a - ib \tag{2.33}$$

2.3.2 Formula di Fresnel

Si considera una sorgente di luce posta a una distanza infinita. Si descrive la radiazione come un'*onda piana* di intensità costante. Si ipotizza che l'onda si propaghi nella direzione concorde con l'asse z. Inoltre, si introducono le seguenti grandezze: t è il tempo, λ è la lunghezza d'onda, $k = 2\pi/\lambda$ è il numero d'onda, c è la velocità della luce nel vuoto, $\omega = kc$ è la frequenza angolare. Il campo dell'onda elettromagnetica che descrive la luce, può essere rappresentato dalla seguente espressione complessa:

$$u = e^{-ikz+i\omega t} \tag{2.34}$$

Dove u può rappresentare ogni componente del campo elettrico $(\boldsymbol{E})$ e magnetico $(\boldsymbol{H})$.

La scelta di porre i o $-i$ nell'espressione 2.34 è arbitraria. La scelta qui presentata di i positivo nel fattore rappresentante il tempo è quella classica, corrisponde con la formulazione classica

dell'indice di rifrazione ($m = m_{Re} - m_{Im} \cdot i$). Tale convenzione segue Van de Hulst [39] e Kerker [40], mentre Bohren [41], abbraccia una convenzione diversa. Questa scelta influenzerà il segno della parte immaginaria dei coefficienti di Mie (sottosezione 6.2.1).

All'inizio del diciannovesimo secolo quando la luce era ancora considerata una vibrazione elastica dell'etere, la grandezza rappresentata in equazione 2.34 era chiamata "perturbazione".

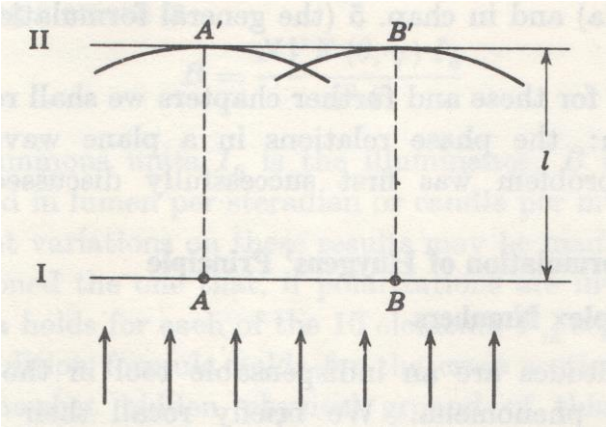

Figura 2.2 - Modello della propagazione rettilinea di Fresnel (da Van de Hulst [39]).

La luce polarizzata è caratterizzata da due ampiezze. Tutti i ragionamenti in questa sottosezione sono validi per queste due ampiezze separatamente. Per semplicità la teoria è presentata con solo un'ampiezza.

I piani con z = costante sono i piani con fase costante e perciò sono chiamati fronti dell'onda. La figura 2.2 mostra due fronti d'onda I e II a una distanza tra di loro pari a l, che si suppone essere molto più grande della lunghezza d'onda:

$$l \gg \lambda \rightarrow kl \gg 1 \tag{2.35}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{2.36}$$

Il disturbo al fronte I può essere considerato come la causa del disturbo al fronte II dopo un tempo di l/c secondi. Grossomodo il disturbo in A' è causato da quello in A, il disturbo in B' è causato da quello in B. Questo corrisponde a una propagazione rettilinea. In realtà questa regola è solo un'approssimazione. Se per esempio tutta la luce a sinistra di A è schermata, non si verifica un bordo ripido dell'ombra in A'. Apparentemente il disturbo in A' è causato per una certa lunghezza dai disturbi in tutti i punti vicini ad A. Huygens visualizzò questa idea assumendo che tutti i punti di I siano centrati su un'onda sferica secondaria e che il fascio di queste onde determinava il nuovo fronte dell'onda II. Huygens poteva spiegare le leggi della riflessione e della rifrazione in questo modo, ma il quesito di quanto grande è la zona circostante ad A che coopera nel determinare il disturbo in A' rimaneva aperto. Perciò non poteva essere derivata una teoria quantitativa [39].

La soluzione di questo problema fu trovata da Fresnel e la correttezza di tale soluzione è stata provata dall'ottima previsione di molti problemi di diffrazione. Più tardi si capì essere un'approssimazione (valida quando $kl \gg 1$) di una formula più rigorosa. Fresnel assume che l'onda secondaria dipendente da tutti i punti di I dovrebbe cooperare in A', tramite un'interferenza costruttiva (o in verità in ogni punto oltre I). Questo significa che i disturbi dovuti a queste onde devono essere aggiunti, ognuno con la propria fase.

Consideriamo dS un elemento infinitesimo di superficie del piano I a una distanza r da A'. Si osserva che un'onda sferica emessa da dS causa il seguente disturbo in A':

$$du_{II} = qdS\frac{e^{-ikr}}{r}u_I \tag{2.37}$$

Dove u_I è il disturbo in ogni punto nel piano I e q è una costante che verrà fissata più tardi alla fine della sottosezione. Impiegando coordinate rettangolari nel piano I, centrato in A, si definisce l'elemento di superficie come:

$$dS = dxdy \tag{2.38}$$

Si è anticipato che solo i punti di I per i quali valgono le seguenti relazioni:

$$x \ll l \; e \; y \ll l \tag{2.39}$$

effettivamente influenzano il disturbo in A'. Inoltre si può scrivere:

$$r = (l^2 + x^2 + y^2)^{1/2} \approx l + \frac{1}{2l}(x^2 + y^2) \tag{2.40}$$

Dove r a denominatore può essere sostituito da l. La rappresentazione analitica del principio di Huygens perciò diventa (integrando l'equazione 2.37):

$$u_{II} = \frac{q}{l}e^{-ikl}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} u_I e^{\frac{-ik(x^2+y^2)}{2l}}dxdy \tag{2.41}$$

Nell'equazione 2.41, considerando le condizioni più generali possibili, u_I deve essere mantenuto all'interno del simbolo di integrare perché nei problemi di diffrazione in generale u_I è funzione di x e y. In casi particolari $u_I$assume dei valori costanti; vale zero se la luce è schermata e 1 se non è schermata.

Fresnel fece l'approssimazione di considerare u_I indipendente da x e da y. Gli integrali da calcolare sono del tipo (sostituendo il numero d'onda con la lunghezza d'onda):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-ikx^2}{2l}} = \left(\frac{2\pi}{k}\right)^{1/2} e^{-i\pi/4} = \sqrt{l\lambda}\cdot e^{-i\pi 4} \tag{2.42}$$

Se i limiti di integrazione non sono ∞ tale integrale è chiamato integrale di Fresnel. La relazione 2.41 si riduce a:

$$u_{II} = \frac{q}{l}e^{-ikl}u_I \cdot (-il\lambda) \tag{2.43}$$

Nella relazione 2.43 il fattore l si può semplificare. Noi sappiamo dalla prima formula di questo paragrafo (equazione 2.34) che il risultato deve essere:

$$u_{II} = e^{-ikl}u_I \tag{2.44}$$

Per cui alla fine si può fissare la costante q:

$$q = \frac{i}{\lambda} \tag{2.45}$$

Il risultato finale si riassume nella seguente maniera: la perturbazione del fronte d'onda causata dal disturbo $u_I$in un'area dS, in un punto alla distanza r, che è in una direzione non troppo lontana dalla direzione di propagazione è:

$$du_{II} = \frac{i}{r\lambda}u_I e^{-ikr}dS \tag{2.46}$$

Tale formula è adeguata per descrivere soluzioni abbastanza accurate della maggior parte dei problemi di diffrazione. La derivazione presentata in questo elaborato ricorda strettamente quella fornita da Fresnel nel 1818.

2.4 Propagazione di un'onda in un mezzo disperdente

Si introducono in questa sezione le relazioni generali che descrivono la fase di un'onda che viene diffusa.

La funzione dell'ampiezza complessa $S(\theta, \varphi)$ descrive l'ampiezza e la fase di un'*onda scalare* dispersa. La funzione dell'ampiezza nella direzione in avanti $(\theta = 0)$ è $S(0)$. Il suo valore è decisivo per descrivere il fenomeno dell'estinzione come sarà mostrato più avanti. Le relazioni che verranno descritte valgono per le *onde di luce* nel caso particolare (ma abbastanza usuale) nel quale $S(0)$ non dipende dalla polarizzazione. La trattazione per la luce polarizzata, la quale coinvolge quattro funzioni di ampiezza verrà accennata più avanti (sottosezione 2.4.5). Nel derivare le equazioni di questa sezione si ipotizza che la distanza mutua tra le particelle sia molto più grande di λ (scattering indipendente).

2.4.1 Rappresentazione matematica di un'onda dispersa da una singola particella

Si considera una particella avente una composizione chimica costante e una forma arbitraria, la quale risulta illuminata da un'onda piana scalare di dimensione infinita inviata dalla direzione delle z negative (direzione concorde all'asse z). L'origine del sistema di riferimento è scelta da qualche parte nella particella. La "perturbazione" della luce incidente può essere scritta come:

$$u_0 = e^{-ikz+i\omega t} \tag{2.47}$$

Il termine storico "perturbazione" è usato qui in modo da enfatizzare l'analogia fra tutti i tipi di onda. Infatti i risultati che si otterranno valgono per ogni tipo di onda scalare (onda sonora, onda di elettroni), ma anche per le onde elettromagnetiche (onde costituite da fotoni) sotto le condizioni che le funzioni $S_1(0)$ e $S_2(0)$ (le quali saranno definite più avanti sottosezione 2.4.5) siano le stesse e le funzioni $S_3(0)$ e $S_4(0)$ siano nulle. Sotto tali condizioni i risultati che si ottengono sono corretti per la luce con uno stato di polarizzazione arbitrario.

L'onda diffusa risulta sferica, l'onda in uscita presenta un'ampiezza inversamente proporzionale alla distanza r. Vale la seguente equazione:

$$u = S(\theta, \varphi)\frac{e^{-ikr+i\omega t}}{ikr} \tag{2.48}$$

In tal modo si definisce la *funzione d'ampiezza* $S(\theta, \varphi)$ della particella che diffonde la radiazione. Il fattore i (unità immaginaria) è aggiunto a denominatore per convenienza nei successivi calcoli e il fattore k è aggiunto per rendere $S(\theta, \varphi)$ un numero adimensionato. Combinando le due precedenti equazioni (2.47 e 2.48) si ottiene:

$$u = S(\theta, \varphi)\frac{e^{-ikr+ikz}}{ikr}u_0 \tag{2.49}$$

La funzione d'ampiezza, in generale, è complessa e può inoltre essere scritta come:

$$S(\theta, \varphi) = s \cdot e^{i\sigma} \tag{2.50}$$

Dove s è un valore positivo e σ è un valore reale, entrambe queste grandezze sono funzioni di θ e φ. La fase σ dipende dalla scelta dell'origine e dalla convenzione dei segni che deve essere

fatta se sono coinvolte delle onde polarizzate. Un valore di σ negativo pari a $-\pi/2$ denota un ritardo di fase dell'onda diffusa. L'ampiezza s è indipendente da questa scelta. L'intensità dell'onda dispersa è proporzionale al quadrato dell'ampiezza. Come conseguenza diretta si può scrivere:

$$I_{sca} = \frac{s^2(\theta, \varphi)}{k^2 r^2} I_0 \tag{2.51}$$

Ogni punto dello spazio è attraversato da due tipi di onde: l'onda incidente e l'onda diffusa. Da un punto di vista matematico il flusso di energia di queste due onde non può essere separato, ma analizzando la luce che cade nell'area O' (vedere figura 2.3), si può distinguere tra le due onde, ognuna che viaggia con la propria direzione e avente la propria intensità.

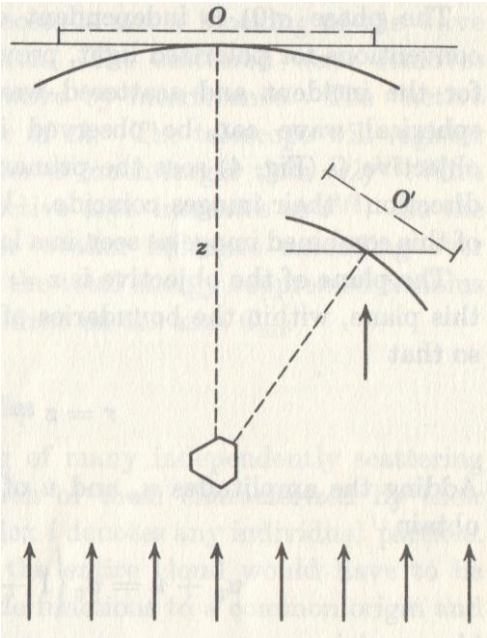

Figura 2.3 - Esperimento concettuale per misurare l'estinzione di una particella (da Van de Hulst [39]).

2.4.2 Formula fondamentale dell'estinzione per una singola particella

Nella direzione in avanti $\theta = 0$, vale per ragioni di continuità la stessa definizione di S. L'onda incidente è un'onda sferica, l'ampiezza e la fase sono caratterizzati dalla seguente funzione dell'ampiezza:

$$S(0) = s(0)e^{i\sigma(0)} \tag{2.52}$$

La fase $\sigma(0)$ è indipendente dalla scelta dell'origine e del segno convenzionale per la luce polarizzata, se si garantisce l'utilizzo della stessa convenzione per l'onda incidente e per l'onda dispersa. Un esperimento fisico per l'osservazione di quest'onda sferica è impossibile, un sensore posto in O (vedere figura 2.3) vede la sorgente primaria e secondaria nella stessa direzione: le loro immagini coincidono. Si dovrebbe calcolare l'intensità totale di queste immagini combinate come viste da un grande telescopio posto a una distanza molto grande. Il piano dell'obiettivo è z = costante. Consideriamo (x, y, z) essere un punto in questo piano, dentro i contorni di O. Per questo punto x e y sono $\ll z$ così che:

$$r = z + \frac{x^2 + y^2}{2z} \tag{2.53}$$

Introducendo le funzioni delle ampiezze u_0 e u delle onde incidenti e scatterate si ottiene:

$$u_0 + u = u_0 \left\{ 1 + \frac{S(0)}{ikz} e^{-ik\left(\frac{x^2+y^2}{2z}\right)} \right\} \tag{2.54}$$

La grande distanza implica che il secondo termine all'interno delle parentesi graffe è molto più piccolo di 1 ($\ll 1$). L'intensità incidente di ogni punto di O si trova prendendo il quadrato del modulo dell'espressione 2.54:

$$|u_0 + u|^2 = 1 + \frac{2}{kz} Re \left\{ \frac{S(0)}{i} e^{-ik\left(\frac{x^2+y^2}{2z}\right)} \right\} \tag{2.55}$$

Integrando quest'intensità lungo l'intero oggetto con area O noi troviamo l'intensità totale dell'immagine combinata:

$$I = O - C \tag{2.56}$$

Dove O è l'integrale del primo termine e C l'integrale del secondo termine. L'interpretazione di questo risultato è la seguente: la luce totale entrante nel sensore è ridotta dalla presenza della particella. L'entità della riduzione è equivalente a quella che si avrebbe se venisse coperta un'area dell'oggetto pari a C. Questo è il fenomeno dell'estinzione già citato precedentemente.

Il doppio integrale lungo dx e dy per il quale C_{ext} è definito contiene due integrali di Fresnel, ognuno fornisce un fattore $(2\pi z/ik)^{1/2}$, se i limiti sono estesi a ∞. Si ottiene la seguente equazione:

$$C_{ext} = \frac{4\pi}{k^2} Re\{S(0)\} \tag{2.57}$$

La relazione 2.57 è la *formula fondamentale dell'estinzione*. La derivazione precedente mostra che in realtà il processo di estinzione non consiste in un blocco dell'onda ma è un fenomeno di interferenza. L'onda diffusa rimuove parte dell'energia dell'onda originale tramite l'interferenza. L'*area attiva* del fenomeno è dell'ordine di $z\lambda$. Un sensore registrerà la completa estinzione solo se il suo diametro è molto più grande di $(z\lambda)^{1/2}$. Con l'aumento di z la dimensione dell'area attiva aumenta come $z^{1/2}$.

2.4.3 Intensità e formula fondamentale dell'estinzione per una nube di particelle

Si considera una nube costituita da molte particelle che disperdono i fotoni in modo indipendente, non necessariamente simili, ognuna di esse caratterizzate dalla sua funzione d'ampiezza $S_i(\theta, \varphi)$. L'indice i denota la particella i-esima. La precisa funzione d'ampiezza per l'intera nube viene derivata riferendo tutte le funzioni delle ampiezze aventi un'origine comune e poi sommandole insieme. La trasformazione a un'origine comune potrebbe coinvolgere grandi spostamenti di fase dipendenti dalla precisa posizione delle particelle. Questi spostamenti presentano una natura casuale e cambiano rapidamente anche durante il processo. Così i fenomeni d'interferenza che dovrebbero produrre la somma delle ampiezze non si osservano in pratica. Conseguentemente, l'intensità e non le ampiezze devono essere sommate. Tale concetto viene formalizzato con la seguente formula:

$$I(\theta, \varphi) = \sum_i I_i(\theta, \varphi) \tag{2.58}$$

Integrando lungo tutte le direzioni si ottiene come conseguenza:

$$C_{sca} = \sum_i C_{i,sca} \tag{2.59}$$

La situazione per $\theta = 0$ è diversa. Una variazione dell'origine non cambia la fase e l'interferenza ha luogo indipendentemente dalla precisa posizione della particella. Ripetendo gli stessi ragionamenti già visti in precedenza per una nube di particelle si ottiene:

$$S(0) = \sum_i S_i(0) \tag{2.60}$$

e come conseguenza

$$C_{ext} = \sum_i C_{i,ext} \tag{2.61}$$

Si è perciò trovato che le sezioni trasversali di scattering e di estinzione, delle singole particelle devono essere sommate per fornire la corrispondente sezione trasversale per l'intera nube. Per analogia la stessa regola vale anche per la sezione trasversale di assorbimento:

$$C_{abs} = \sum_i C_{i,abs} \tag{2.62}$$

2.4.4 Estinzione e dispersione in una nube di particelle

Si considera la situazione sperimentale mostrata in figura 2.4:

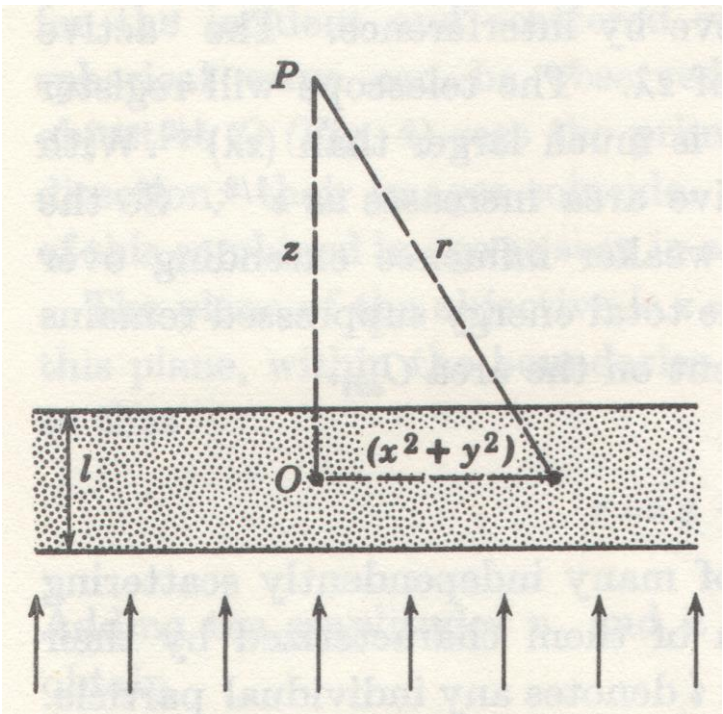

Figura 2.4 - Estinzione e dispersione di una radiazione elettromagnetica che attraversa una slab costituita da molte particelle (da Van de Hulst [39]).

Una slab piana contenente al suo interno molte particelle che disperdono, tutte identiche e identicamente orientate così che presentano tutte la stessa funzione d'ampiezza $S(\theta, \varphi)$. Una sorgente di radiazione elettromagnetica irraggia il sistema lungo direzione dell'asse z, con direzione positiva. La slab presenta un'altezza l e sono presenti N particelle per unità di volume. Il campo elettromagnetico in P è influenzato dallo scattering di tutte le particelle nella slab, ma l'onda che viaggia in avanti in P è coerentemente influenzata solo dalle particelle nel volume "attivo" della slab, il quale coincide con una piccola zona centrale in accordo con l'equazione di Fresnel (relazione 2.46) vista da P. Se $PO = z$ è grande abbastanza, sono coinvolti solo piccoli angoli. L'ampiezza totale in P poi è:

$$u = u_0 \left\{ 1 + S(0) \sum \frac{1}{ikr} e^{-ik\frac{(x^2+y^2)}{2r}} \right\} \tag{2.63}$$

Dove la somma è estesa lungo tutte le particelle nel volume attivo. Se le particelle sono molto numerose il simbolo di sommatoria presente nella relazione 2.63 può essere sostituito dal seguente integrale:

$$\sum \cdot \equiv \int \cdot \, N \, dx \, dy \, dz \tag{2.64}$$

L'equazione 2.63 perciò diventa:

$$u = u_0 \left\{ 1 + S(0) \int \frac{1}{ikr} e^{-ik\frac{(x^2+y^2)}{2r}} \right\} \tag{2.65}$$

Integrando la relazione 2.65 si ottiene:

$$u = u_0 \left\{ 1 - \frac{2\pi}{k^2} NlS(0) \right\} \tag{2.66}$$

Tale risultato può formalmente essere rappresentato introducendo l'indice di rifrazione complesso del mezzo. Se la slab è sostituita da materiale omogeneo con un indice di rifrazione complesso $\tilde{m}$, vicino a 1, l'ampiezza dell'onda è cambiata dopo aver attraversato la slab di un valore proporzionale a:

$$\Delta A = e^{-ikl(\tilde{m}-1)} \approx 1 - ikl(\tilde{m} - 1) \tag{2.67}$$

Dove nell'equazione 2.67 si è scritto l'esponenziale tramite la serie di Taylor troncata al primo ordine. Conseguentemente, l'indice di rifrazione formale del mezzo assume il valore:

$$\tilde{m} = 1 - iS(0) \cdot 2\pi N k^{-3} \tag{2.68}$$

Se si scrivono le parti reale e immaginaria di $\tilde{m}$ tramite la formula:

$$\tilde{m} = m_{Re} - i m_{Im} \tag{2.69}$$

Si trova che tale formula comprende due effetti. La parte reale:

$$m_{Re} = 1 + 2\pi N k^{-3} Im\{S(0)\} \tag{2.70}$$

Determina il ritardo o l'anticipo della fase dell'onda che attraversa il mezzo. Questo è il fenomeno della *dispersione*: la velocità della fase dell'onda nell'attraversare il mezzo è cambiata di c/n. La parte immaginaria:

$$m_{Im} = 2\pi N k^{-3} Re\{S(0)\} \tag{2.71}$$

determina una diminuzione dell'intensità. In generale il *coefficiente di estinzione* in un mezzo con un indice di rifrazione complesso è:

$$\gamma = 2km_{Im} \tag{2.72}$$

Quindi la stessa relazione formale che fornisce il *coefficiente di estinzione totale*:

$$\gamma = 4\pi N k^{-2} Re\{S(0)\} \tag{2.73}$$

Con i precedenti risultati, tale relazione può anche essere scritta come:

$$\gamma = NC_{ext} \tag{2.74}$$

Così per ottenere γ si devono sommare le sezioni trasversali di tutte le particelle presenti nell'unità di volume.

Nello scrivere le relazioni di questa sottosezione (2.4.4) non si è fornito una descrizione accurata di tutte le ipotesi e assunzioni che permettono di arrivare all'equazione 2.74. Una di queste è che $\tilde{m}$ deve essere vicino a 1 (in modo da poter applicare lo sviluppo di Taylor nell'equazione 2.67). Appare ovvio che sotto certe condizioni il punto P può inoltre essere preso all'interno della slab. L'effetto della successione di molte slab sottili è poi identico all'effetto di una slab sottile con indice di rifrazione $\tilde{m}$. Conseguentemente per ogni valore di l l'influenza della slab sull'ampiezza è espressa dal fattore:

$$\Delta A = e^{-ikl(\tilde{m}-1)} \tag{2.75}$$

2.4.5 Estinzione e dispersione nel caso generale di luce polarizzata

Nelle precedenti sottosezioni, gli effetti della polarizzazione sono stati esclusi per semplicità. Le due equazioni più importanti, la *formula fondamentale di estinzione* (equazione 2.57) e la *formula complessa di dispersione* (equazione 2.74*)* così come sono state scritte sono corrette:

1. Per ogni tipo di onda scalare.
2. Per una radiazione elettromagnetica (come la luce) sotto semplici condizioni (descritte all'inizio di questa sezione 2.4).

La formulazione generale che include tutti gli effetti di polarizzazione viene spiegata qui di seguito. Lo scattering in ogni direzione è descritto da quattro funzioni di ampiezza: S_1, S_2, S_3, S_4, tutte funzioni di θ e φ, le quali formano la matrice $\boldsymbol{S}(\theta,\varphi)$, costituita appunto da quattro elementi. La definizione di $S(\theta,\varphi)$ usata in precedenza può essere sostituita dalla definizione più generale:

$$\boldsymbol{S}(\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} S_2(\theta,\varphi) & S_3(\theta,\varphi) \\ S_4(\theta,\varphi) & S_1(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \tag{2.76}$$

Dalla matrice di scattering è possibile determinare la componente parallela e perpendicolare del campo elettrico della radiazione elettromagnetica a seguito dello scattering:

$$\begin{pmatrix} E_l \\ E_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_2 & S_3 \\ S_4 & S_1 \end{pmatrix} \cdot \frac{e^{-ikr+ikz}}{ikr} \begin{pmatrix} E_{lo} \\ E_{r0} \end{pmatrix} \tag{2.77}$$

Dove l e r si riferiscono rispettivamente al campo elettrico parallelo e perpendicolare al piano dello scattering (dove l e r sono le ultime lettere delle parole *parallel* e *perpendicular*).

Ponendo $\theta = 0$, si ottiene i quattro numeri complessi $S_1(0)$, $S_2(0)$, $S_3(0)$, $S_4(0)$, che costituiscono la matrice $\boldsymbol{S}(0)$, avente appunto quattro elementi. Si può perciò facilmente generalizzare e il risultato è che il campo elettrico nel punto P oltre la slab è:

$$\begin{pmatrix} E_l \\ E_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - qS_2(0) & -qS_3(0) \\ -qS_4(0) & 1 - qS_1(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{lo} \\ E_{r0} \end{pmatrix} \tag{2.78}$$

Dove q è pari a:

$$q = 2\pi N l k^{-2} \tag{2.79}$$

L'equazione 78 descrive una combinazione dei seguenti effetti:

1. Diverse velocità di fase della luce polarizzata piana che vibra in diversi piani (rifrazione doppia)
2. Diverse velocità della fase della luce polarizzata circolare in diversi sensi di rotazione (rotazione del piano di polarizzazione)
3. Diversa estinzione della luce polarizzata circolare che vibra in diversi piani (dicroismo lineare)
4. Diversa estinzione della luce polarizzata circolare in diversi sensi di rotazione (dicroismo circolare)

Questi effetti potrebbero essere ulteriormente formalizzati introducendo una matrice di quattro elementi $\widetilde{\boldsymbol{m}}$ invece dello scalare $\widetilde{m}$, ma questa procedura non è necessaria in pratica.

Se molte particelle di diversi tipi o in diverse orientazioni formano una nube o un mezzo, le regole enunciate dalle equazioni 58-62 possono essere applicate. Le proprietà di scattering in una direzione arbitraria sono ottenute tramite somme separate di ogni componente della matrice $\boldsymbol{F}$. L'estinzione e la dispersione in modo simile, si trovano sommando ogni componente della matrice $\boldsymbol{S}(0)$. Queste regole in realtà vengono usate raramente con tale completa generalità. Applicazioni importanti si trovano in mezzi dove le particelle sono orientate casualmente o presentano certe proprietà di simmetria.

2.4.6 Estinzione e dispersione nel caso di particelle sferiche

La formulazione per particelle sferiche è quella usata nella maggior parte delle applicazioni, presenta una forma molto semplice, anche se è ammessa una polarizzazione arbitraria della luce incidente. Particelle sferiche presentano $S_3 = S_4 = 0$. Così si osservano per ogni direzione solo due funzioni di ampiezze complesse. Queste funzioni sono $S_1(\theta)$ e $S_2(\theta)$ ed esse dipendono solo dall'angolo di scattering θ. La matrice delle equazioni per una direzione arbitraria $\theta \neq 0$, ci fornisce adesso le seguenti due relazioni:

$$E_r = S_1(\theta)\frac{e^{-ikr+ikz}}{ikr}E_{r0} \tag{2.80}$$

$$E_l = S_2(\theta)\frac{e^{-ikr+ikz}}{ikr}E_{l0} \tag{2.81}$$

Prendendo i quadrati dei moduli si ottiene per la polarizzazione perpendicolare:

$$I_r = \frac{i_1}{k^2r^2}I_0 \tag{2.82}$$

Per la polarizzazione parallela:

$$I_l = \frac{i_2}{k^2r^2}I_0 \tag{2.83}$$

Per la luce incidente naturale:

$$I = \frac{\frac{1}{2}(i_1 + i_2)}{k^2r^2}I_0 \tag{2.84}$$

Dove i_1 e i_2 sono:

$$i_1 = |S_1(\theta)|^2 \tag{2.85}$$

$$i_2 = |S_2(\theta)|^2 \tag{2.86}$$

Le ultime tre equazioni (2.84, 2.85 e 2.86) sono casi particolari delle relazioni dei parametri di Stokes che collegano la luce incidente con quella diffusa. Le relazioni complete risultano essere:

$$I_l = \frac{i_2}{k^2 r^2} I_{l0} \tag{2.87}$$

$$I_r = \frac{i_2}{k^2 r^2} I_{r0} \tag{2.88}$$

$$U = \frac{\sqrt{i_1 \cdot i_2}}{k^2 r^2} \{U_0 \cos\delta - V_0 \sin\delta\} \tag{2.89}$$

$$V = \frac{\sqrt{i_1 \cdot i_2}}{k^2 r^2} \{U_0 \sin\delta + V_0 \cos\delta\} \tag{2.90}$$

Dove:

$$S_1(\theta) = \sqrt{i_1} \cdot e^{i\sigma_1} \tag{2.91}$$

$$S_2(\theta) = \sqrt{i_2} \cdot e^{i\sigma_2} \tag{2.92}$$

$$\delta = \sigma_1 - \sigma_2 \tag{2.93}$$

Per lo scattering in avanti $(\theta = 0)$ le particelle sferiche forniscono un'altra ulteriore semplificazione, per il fatto che $S_1(0) = S_2(0)$. Noi denotiamo questo valore tramite il termine $S(0)$ senza indice. L'equazione che descrive il campo elettrico si riduce all'equazione scalare:

$$E = \{1 - qS(0)\}E_0 \tag{2.94}$$

La relazione 2.94 tiene conto di ogni componente del campo elettrico (e magnetico) separatamente ed è identica a quella che si scriverebbe per un'onda scalare.

La conclusione è che tutti i risultati precedenti tengono conto, senza restrizioni, di una luce con polarizzazione arbitraria e valgono per particelle sferiche e di materiale omogeneo. Non si presenta doppia rifrazione o dicroismo di qualsiasi tipo. L'effetto del mezzo sull'onda che lo attraversa è descritto solamente da un indice di rifrazione complesso:

$$\tilde{m} = 1 - i2\pi N k^{-3} S(0) \tag{2.95}$$

La sezione trasversale di estinzione per una particella risulta essere:

$$C_{ext} = 4\pi k^{-2} Re\{S(0)\} \tag{2.96}$$

Dividendo per la sezione trasversale πa^2 e introducendo la notazione $x = ka$, si ottiene il fattore di efficienza per l'estinzione:

$$Q_{ext} = \frac{4}{x^2} Re\{S(0)\} \tag{2.97}$$

3. Teoria rigorosa dello scattering per sfere di dimensione arbitraria - Teoria di Mie

Tutti i problemi di ottica teorica possono essere spiegati dalla teoria elettromagnetica di Maxwell, infatti quando è richiesta una soluzione completa e formale, dovrebbero essere trattati partendo appunto dalle equazioni di Maxwell. Molte volte nella risoluzione di un problema si sceglie di intraprendere una strada più corta e più incentrata sull'intuizione fisica rispetto a una deduzione formale risultante da un insieme di equazione, però in questo caso la prima soluzione non è percorribile. Lo scattering della luce prodotto da una sfera omogenea non può essere trattato in un modo generale se non tramite la soluzione formale delle equazioni di Maxwell con le appropriate condizioni al contorno [39].

3.1 Spiegazione fisica dello scattering

Quando una particella è illuminata da un fascio di fotoni, le molecole che la costituiscono vengono polarizzate dal campo elettrico oscillante della radiazione elettromagnetica e vengono irradiati fotoni in tutte le direzioni. Se la luce irradiata (cioè quella dispersa) è della stessa lunghezza d'onda della luce incidente, il fenomeno prende il nome di scattering elastico, siccome nessuna energia è persa dal fascio luminoso. Per particelle di dimensioni arbitrarie, il diagramma di scattering è complicato dal fatto che la radiazione dispersa da diverse parti della stessa particella è soggetta a differenze di fasi e quindi a effetti d'interferenza.

Lo scattering della luce considerato in questo capitolo (3) assume come già accennato che le particelle siano sfere omogenee e che la luce incidente sia un'onda piana monocromatica.

Clebsch elabora gli strumenti matematici per questo problema nel 1861, nel 1890 Lorenz fornisce una soluzione completa per sfere trasparenti, nel 1908 Mie e successivamente nel 1909 Debye pubblicano le soluzioni generali complete. Però per uno strano scherzo del destino il nome Mie viene associato esclusivamente a questo problema. Anche in questa tesi si aderisce a tale convenzione ma con la consapevolezza che si impiega un nome (in parte) improprio [55].

In definitiva si può affermare che la Teoria di Mie fornisce la distribuzione angolare completa dell'intensità della luce scatterata da una particella sferica omogenea come funzione del suo indice di rifrazione (m), dimensione della particella (a) e lunghezza d'onda dei fotoni (λ). Nelle successive sezioni e sottosezioni verranno forniti i passaggi fondamentale che partendo dalle equazioni di Maxwell condurranno al calcolo delle grandezze utili per descrivere lo scattering della luce da parte di una particella.

3.2 Equazioni di Maxwell

3.2.1 Equazioni generali

Si definisce l'angolo di scattering θ come l'angolo tra la direzione di propagazione dell'onda incidente e l'onda dispersa [39, 40, 41, 43].

La prima equazione di Maxwell utile per le derivazioni è:

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = \frac{4\pi \boldsymbol{I}}{c} + \frac{1}{c}\frac{d\boldsymbol{D}}{dt} \tag{3.1}$$

Dove:

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E} \tag{3.2}$$

$$\boldsymbol{I} = \sigma \boldsymbol{H} \tag{3.3}$$

Mentre la seconda equazione di Maxwell impiegata è:

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{d\boldsymbol{H}}{dt} \tag{3.4}$$

Il significato delle grandezze è il seguente: t è il tempo, c è la velocità della luce, $\boldsymbol{H}$ è il vettore campo magnetico, $\boldsymbol{E}$ è il vettore campo elettrico, $\boldsymbol{D}$ è l'induzione elettrica o spostamento dielettrico, $\boldsymbol{I}$ è la densità di corrente, ε è la costante dielettrica, σ è la conduttività e $\nabla \times$ è il rotore del vettore a cui è applicato. La permettività magnetica (μ) viene fissata pari a 1, poiché questo è vero per tutte le applicazioni che si considereranno. Un vantaggio di fissare μ nella formula sarà che le condizioni al contorno per il campo esterno sulla superficie di un conduttore perfetto sono le stesse condizioni al contorno che si ottengono all'interfaccia tra il vuoto e un mezzo arbitrario, se in quest'ultimo si fissa $\varepsilon \to \infty$, $\mu \to 0$.

Se μ non assumesse il valore 1, esso apparirebbe in tutte le formule come secondo parametro accanto all'indice di rifrazione m.

La terza equazione indipendente necessaria esprime la conservazione della carica:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{I} + \frac{d\rho}{dt} = 0 \tag{3.5}$$

Dove ρ è la densità di carica volumica (carica su unità di volume), $\nabla \cdot$ è la divergenza del vettore a cui è applicato.

Si derivano tre equazioni che saranno utili. Prendendo la divergenza ($\nabla \cdot$) di entrambi i membri dell'equazione 3.1, si ottiene:

$$4\pi\, \nabla \cdot \boldsymbol{I} + \frac{d}{dt}\nabla \cdot \boldsymbol{D} = 0 \tag{3.6}$$

Se si combina con l'equazione 3.6 *con la 3.5* si ottiene:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = 4\pi\rho \tag{3.7}$$

se questo è supposto essere corretto a un particolare tempo. Nella stessa maniera la divergenza dell'equazione 3.4 fornisce:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{H} = 0 \tag{3.8}$$

Nelle prossime pagine si troveranno le equazioni che sono state scritte in questa pagina, modificate in una forma diversa, in modo che rispettino le condizioni particolari di interesse nel problema in esame. Per esempio l'equazione 3.2 assume la forma dell'equazione 3.12, 3.20, 3.30.

3.2.2 Campi periodici

Da adesso si considera un fenomeno periodico con una frequenza angolare ω. È vantaggioso scrivere tutte le quantità sotto forma di funzioni complesse del tempo nella seguente forma:

$$A = (\alpha + i\beta)e^{i\omega t} \tag{3.9}$$

Dove è sottointeso che la quantità fisica rappresentata da A sia solamente il valore reale di A ($Re\ (A)$). Il simbolo Re significa prendere la parte reale del numero considerato.

Introducendo tale periodicità, le equazioni di Maxwell assumono una forma più semplice:

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = ikm^2\boldsymbol{E} \tag{3.10}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -ik\boldsymbol{H} \tag{3.11}$$

Dove:

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{3.12}$$

$$m^2 = \varepsilon - \frac{4\pi i\sigma}{\omega} \tag{3.13}$$

Entrambi k e m sono parametri estremamente importanti: k è la *costante di propagazione* o *numero d'onda nel vuoto*. La lunghezza d'onda nel vuoto λ segue dalla relazione 3.12 che:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \tag{3.14}$$

Il parametro m è l'*indice di rifrazione complesso del mezzo* alla frequenza ω. Si dovrebbe notare che m non può generalmente essere determinato solo dai valori statici di ε e σ ma dovrebbe essere determinato dalla misura di tali parametri (ε e σ) al variare della frequenza angolare ω.

Dalla divergenza dell'equazione 3.10, in accordo con l'equazione 3.11, si ottiene:

$$\nabla \cdot (m^2\boldsymbol{E}) = 0 \tag{3.15}$$

In un mezzo omogeneo, dove $m = costante$ la divergenza del capo elettrico ($div\ \boldsymbol{E}$) svanisce, così dall'equazione 3.7 si ottiene che la densità di carica volumica (ρ) è nulla. Un risultato ulteriore per un mezzo omogeneo è che ogni componente di $\boldsymbol{E}$ e $\boldsymbol{H}$ soddisfano l'equazione dell'onda scalare (si trova dalle equazioni 3.10 e 3.11):

$$\Delta\psi = -k^2m^2\psi \tag{3.16}$$

Dove con Δ si indica il laplaciano del vettore a cui è applicato. Il tipo più semplice di soluzione corrisponde a un'onda piana. Un'onda piana che viaggia nella direzione definita dall'asse z, presenta la seguente forma:

$$\psi = e^{ikmz+i\omega t} \tag{3.17}$$

L'equazione 3.17 mostra che km è *la costante di propagazione in un mezzo con indice di rifrazione* m. L'onda è smorzata se m, presenta una parte immaginaria negativa e non è smorzata se m è reale. In quest'ultimo caso λ/m è la lunghezza d'onda della radiazione all'interno del mezzo.

3.2.3 Condizioni al contorno

Si ipotizzano delle condizioni al contorno discontinue tra mezzi omogenei. Si considera che il mezzo 1 presenta i valori $\varepsilon_1, \sigma_1, m_1$ e il mezzo 2 invece presenta i valori $\varepsilon_2, \sigma_2, m_2$. Entrambi m_1 e m_2 sono assunti essere finiti. Le equazioni 3.10 e 3.11, poi possono essere modificate tramite l'introduzione delle condizioni al contorno per le componenti tangenziali:

$$\boldsymbol{n} \times (\boldsymbol{H}_2 - \boldsymbol{H}_1) = 0 \tag{3.18}$$

$$\boldsymbol{n} \times (\boldsymbol{E}_2 - \boldsymbol{E}_1) = 0 \tag{3.19}$$

Dalle equazioni 3.6 e 3.8, si ottengono le condizioni al contorno per la componente normale:

$$\boldsymbol{n} \cdot (m_2^2\boldsymbol{E}_2 - m_1^2\boldsymbol{E}_1) = 0 \tag{3.20}$$

$$\boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{H}_2 - \boldsymbol{H}_1) = 0 \tag{3.21}$$

Come le equazioni 3.6 e 3.8, tali relazioni non sono indipendenti. Esse potrebbero essere derivate dalle equazioni 3.10 e 3.11, le quali sono valide in entrambi i mezzi se combinate con le equazioni 3.18 e 3.19 valide sul contorno.

L'insieme di equazioni può essere reso completo introducendo la densità di carica superficiale δ. La carica superficiale è immessa e portata via tramite la componente normale della densità di corrente in entrambi i mezzi.

Come relazione valida sul bordo si ottiene dall'equazione 3.6, che esprime la conservazione della carica:

$$\boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{I_2} - \boldsymbol{I_1}) + \frac{d\delta}{dt} = 0 \tag{3.22}$$

Combinando l'equazione 3.22 con l'equazione 3.21, questa equazione ci fornisce, una perfetta corrispondenza con l'equazione 3.8:

$$\boldsymbol{n} \cdot (\varepsilon_2 \boldsymbol{E}_2 - \varepsilon_1 \boldsymbol{E}_1) = 4\pi\delta \tag{3.23}$$

Non ci sono correnti superficiali in questo caso. Solo se m_1 o m_2 sono infiniti esistono delle correnti superficiali. Le cariche superficiali sono zero se m_1 e m_2 sono reali, per esempio al contorno tra due dielettrici. Siccome si considerano solo fenomeni periodici, questa fa riferimento a variazioni periodiche della carica; ci potrebbe sempre essere una carica superficiale statica.

3.2.4 Condizione di pelle - conduttore perfetto

Un diverso insieme di condizioni diventano appropriate alla superficie di un mezzo altamente conduttivo, come un conduttore metallico per le frequenze infrarosse e radio. Se il campo elettrico e quello magnetico sono prodotti da sorgenti esterne, questi penetrano solo in una sottile pelle del conduttore.

Si assume da questo punto in avanti che il mezzo 2 è il vuoto e che il mezzo 1 è un metallo con una profondità di pelle piccola se confrontata con la lunghezza d'onda della radiazione nel vuoto. Questo è vero se:

$$\eta = \frac{4\pi\sigma}{\omega} > 1 \tag{3.24}$$

Cioè se η è grande in confronto a 1. Qui e nelle altre formule tutte le costanti del materiale si riferiscono a un metallo. Così le condizioni al contorno da 3.18 fino a 3.23, derivate sono ancora corrette, ma in aggiunta possono essere derivate un altro insieme di equazioni chiamate *condizioni di pelle*. Le distinzioni sono indicate in figura 3.1.

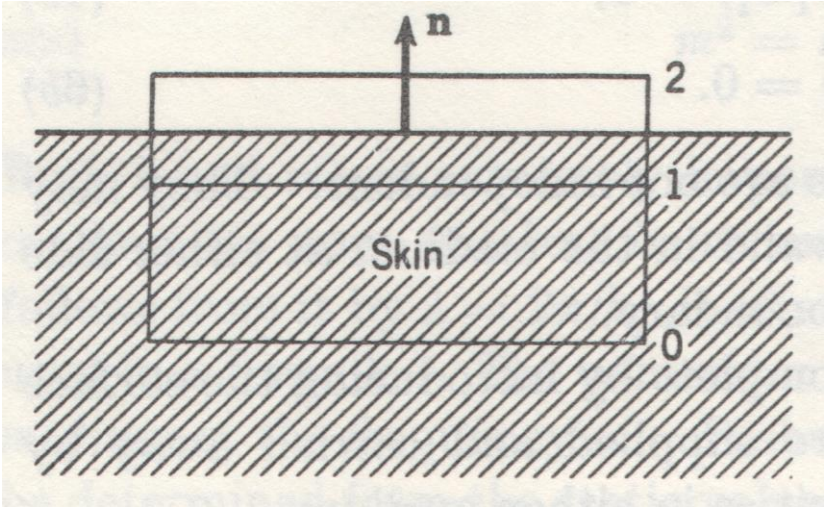

Figura 3.1 - Condizione al contorno di pelle in un buon conduttore (da Van de Hulst [39]).

La derivazione delle condizioni al contorno per la componente tangenziale usa un volume di controllo delimitato dalla linea 2 appena fuori dal mezzo e dalla linea 1 appena all'interno del mezzo. Per la componente normale il volume di controllo è costituito da un parallelepipedo con il fondo posto sulla linea 1 e la parte superiore sulla linea 2. In entrambi i casi i lati verticali possono essere presi con una lunghezza infinitesima. Perciò, le condizioni al contorno da 3.18 a 3.23 sono *esatte* e si riferiscono al campo sulla parte superiore della pelle.

Tuttavia siccome la pelle è sottile, si potrebbe considerare un altro volume di controllo. La parte inferiore di tale sistema può essere posizionato a ogni livello ben al di sotto della superficie, dove i campi sono virtualmente nulli. La parte superiore e la parte inferiore del volume di controllo sono formate dalle linee 2 e 0 della figura 3.1. I lati verticali di questo volume di controllo risultano in quest'ultimo caso piccoli ma non infinitesimi. Così le condizioni di pelle derivate alla fine sono delle approssimazioni.

Consideriamo che l'asse z sia concorde alla direzione della normale $\boldsymbol{n}$, l'asse y sia diretto verso il lato orizzontale del volume di controllo e l'asse x sia perpendicolare ad esso. Dall'integrazione dell'equazione 3.10 sull'area del volume di controllo si ottiene:

$$-H_{2y} = ikm^2 \int E_x dz \tag{3.25}$$

Deve essere mantenuto solo il contributo del lato superiore del volume di controllo. La parte inferiore fornisce un contributo nullo perché è sotto la pelle. I lati verticali forniscono un contributo piccolo. Assumendo che ε fornisca un contributo piccolo a m^2 (vedere equazione 3.26), si può scrivere:

$$m^2 = -\frac{4\pi i\sigma}{\omega} \tag{3.26}$$

Per mezzo della quale l'equazione 3.25 è convertita in:

$$-H_{2y} = \frac{4\pi}{c} \int I_x dz \tag{3.27}$$

Scritto in notazione vettoriale, si ottiene:

$$\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{H}_2 = \frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j} \tag{3.28}$$

Dove:

$$\boldsymbol{j} = \int \boldsymbol{I}_{tang} dz \tag{3.29}$$

La componente tangenziale della corrente nella pelle (del volume considerato) quando integrata lungo la profondità della pelle forma una corrente quasi-superficiale $\boldsymbol{j}$. Questa determina tramite l'equazione 3.28 la componente tangenziale del campo magnetico esterno. Nello stesso tempo la componente normale al volume di controllo esiste, come prima e nasce dalla carica superficiale reale. La nuova equazione per la conservazione della carica si trova combinando l'equazione 3.5 nella pelle e la condizione al contorno 3.22:

$$-\frac{d\delta}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{j} \tag{3.30}$$

Dove $\nabla \cdot \boldsymbol{j}$ è pari:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{j} = \frac{\delta j_x}{\delta x} + \frac{\delta j_y}{\delta y} \tag{3.31}$$

In un modo simile alla derivazione dell'equazione 3.28 si ottiene la seguente relazione approssimata:

$$E_{2y} = ik \int H_x dz \tag{7}$$

Ma il membro a destra è più piccolo di quello presente in 3.28 di un ordine di grandezza $|m|^{-1}$, così che per la maggior parte degli scopi si può trascurarlo e scrivere:

$$\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{E_2} = 0 \tag{3.33}$$

Le equazioni dipendenti sono, osservando di nuovo una corrispondenza con le equazioni da 3.6 a 3.8:

$$i\omega \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{E_2} = -4\pi \nabla \cdot \boldsymbol{j} \tag{3.34}$$

$$\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{E_2} = 4\pi\delta \tag{3.35}$$

$$\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{H_2} = 0 \tag{3.36}$$

Tali equazioni derivano rigorosamente dalle relazioni da 3.28 a 3.33 e dalle equazioni di Maxwell nel vuoto. Qui l'intero insieme di equazioni da 3.28 a 3.36 potrebbe essere usato per ottenere una soluzione consistente delle equazioni di Maxwell nel vuoto (mezzo 2) limitato alla condizione di conduttore.

Conduttore perfetto. Se $\sigma \to \infty$, allora $m \to \infty$ e il metallo diventa un conduttore perfetto. Le equazioni da 3.28 a 3.36 sono rigorosamente corrette e j è la corrente superficiale reale. È importante notare che le condizioni al contorno di un riflettore perfetto sono l'idealizzazione delle *condizioni di pelle* da 3.28 a 3.36 di un conduttore imperfetto e non la diretta conseguenza delle sue condizioni al contorno da 3.28 a 3.36.

3.3 Soluzione di Mie

3.3.1 Soluzione del vettore dell'equazione delle onde

In coordinate sferiche il punto P sarà denotato dalle variabili (r, θ, φ) con il significato usuale dei simboli. Il vettore OP, che è espresso in coordinate rettangolari aventi componenti (x, y, z) è denotato dal vettore $\boldsymbol{r}$:

$$\boldsymbol{r} = (r\cos\varphi\sin\theta\,, r\sin\varphi\sin\theta, r\cos\theta) \tag{3.37}$$

L'equazione dell'onda scalare

$$\Delta\psi + k^2m^2\psi = 0 \tag{3.38}$$

È risolvibile in queste coordinate e presenta soluzioni elementari del seguente tipo:

$$\psi_{ln} = \left.\begin{matrix}\cos l\varphi \\ \sin l\varphi\end{matrix}\right\} P_n^l(\cos\theta) z_n(mkr) \tag{3.39}$$

Dove n e l sono interi:

$$n \geq l \geq 0 \tag{3.40}$$

Il primo fattore può essere un coseno o un seno, il secondo fattore è associato ai polinomi di Legendre, il terzo fattore può essere ogni funzione di Bessel sferica $z_n(\rho)$, definita da:

$$z_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} Z_{n+1/2}(\rho) \tag{3.41}$$

in termini di funzioni di Bessel ordinarie $Z_{n+1/2}(\rho)$. La soluzione generale dell'equazione delle onde scalari è data dalla combinazione lineare di ogni soluzioni elementari (*principio di sovrapposizione*).

In virtù delle equazioni 3.10 e 3.11 i campi vettoriali $\boldsymbol{E}$ e $\boldsymbol{H}$ in un mezzo omogeneo soddisfano l'equazione vettoriale delle onde:

$$\Delta\boldsymbol{A} + k^2m^2\boldsymbol{A} = 0 \tag{3.42}$$

Dove con $\boldsymbol{A}$ si indica il campo elettrico ($\boldsymbol{E}$) o quello magnetico ($\boldsymbol{H}$). La soluzione elementare di questa equazione può essere trovata dal seguente teorema che viene fornito senza essere dimostrato. Se ψ soddisfa l'equazione delle onde scalare, i vettori $\boldsymbol{M_\psi}$ e $\boldsymbol{N_\psi}$ definiti come:

$$\boldsymbol{M_\psi} = \nabla \times (\boldsymbol{r}\psi) \tag{3.43}$$

$$mk\boldsymbol{N_\psi} = \nabla \times \boldsymbol{M_\psi} \tag{3.44}$$

Soddisfano l'equazione delle onde vettoriale e sono inoltre legati tramite la seguente equazione:

$$mk\boldsymbol{M_\psi} = \nabla \times \boldsymbol{N_\psi} \tag{8}$$

L'equazione 3.45 è proprio quella di cui si ha bisogno. Una semplice sostituzione mostra che se u e v sono due soluzioni dell'equazione scalare delle onde e $\boldsymbol{M_u}$, $\boldsymbol{N_u}$, $\boldsymbol{M_v}$, $\boldsymbol{N_v}$ sono i campi vettoriali derivati, le equazioni di Maxwell 3.10 e 3.11 sono soddisfatte da:

$$\begin{cases} \boldsymbol{E} = \boldsymbol{M_v} + i\boldsymbol{N_u} \\ \boldsymbol{H} = m(-\boldsymbol{M_u} + i\boldsymbol{N_v}) \end{cases} \tag{3.46}$$

Le componenti complete di $\boldsymbol{M_\psi}$ e $\boldsymbol{N_\psi}$ sono:

$$\begin{cases} M_r = 0 \\ M_\theta = \dfrac{1}{r\ \sin\theta}\dfrac{\partial(r\psi)}{\partial\varphi} \\ M_\varphi = -\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial(r\psi)}{\partial\theta} \end{cases} \tag{3.47}$$

$$\begin{cases} mkN_r = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + m^2k^2r\psi \\ mkN_\theta = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial^2(r\psi)}{\partial r\partial\theta} \\ mkN_\varphi = \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial^2(r\psi)}{\partial r\partial\theta} \end{cases} \tag{3.48}$$

Le componenti di $\boldsymbol{E}$ e di $\boldsymbol{H}$ possono perciò essere scritte in termini di soluzioni scalari u e v e delle loro derivate prime e seconde, comunque queste formule complete non saranno necessarie.

3.3.2 Soluzione dei coefficienti dalle condizioni al contorno

In questa sottosezione si è arrivati al problema di Mie: lo scattering di un'onda piana per mezzo di una sfera omogenea. Per semplificare la notazione, si assume che il mezzo esterno sia il vuoto ($m_2 = 1$), e che il materiale della sfera presenti un indice di rifrazione m. Noi assumiamo che la radiazione incidente sia linearmente polarizzata. L'origine del sistema di riferimento è presa al centro della sfera, il verso dell'asse z punta nella direzione di propagazione dell'onda incidente e l'asse x è posto nel piano della vibrazione elettrica dell'onda incidente. L'onda incidente (di ampiezza 1) è descritta tramite il campo elettrico e magnetico, come:

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{a_x} e^{-ikz+i\omega t} \tag{3.49}$$

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{a_y} e^{-ikz+i\omega t} \tag{3.50}$$

Dove $\boldsymbol{a_x}$ e $\boldsymbol{a_y}$ sono vettori unitari lungo gli assi x e y.

Può essere dimostrato che gli stessi campi scritti nella forma indicata dal sistema 3.46 scegliendo u e v come le seguenti equazioni possono essere riscritti.

All'esterno, onda incidente:

$$u = e^{i\omega t}\cos\varphi \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos\theta) j_n(kr) \tag{3.51}$$

$$v = e^{i\omega t}\sin\varphi \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos\theta) j_n(kr) \tag{3.52}$$

Dove j_n sono le funzioni sferiche di Bessel, derivate dalle funzioni di Bessel del primo tipo $J_{n+1/2}$.

Questa forma per l'onda incidente, si avvicina alla forma per la soluzione completa. Il campo esterno alla sfera consiste dell'onda incidente più l'onda dispersa. Considerando le condizioni al contorno e le condizioni da soddisfare a una distanza infinita dalla sfera si trova che le seguenti assunzioni sono sufficientemente generali.

All'esterno, onda dispersa:

$$u = e^{i\omega t}\cos\varphi \sum_{n=1}^{\infty} -a_n (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos\theta) h_n^{(2)}(kr) \tag{3.53}$$

$$v = e^{i\omega t} \sin\varphi \sum_{n=1}^{\infty} -b_n(-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos\theta) h_n^{(2)}(kr) \tag{3.54}$$

Queste serie contengono soluzioni elementari con solo $l = 1$, come la serie per l'onda incidente. a_n e b_n sono coefficienti che saranno determinati tra poco. Le funzioni di Bessel sferiche $h_n^{(2)}(kr)$ derivano dalle funzioni di Bessel del secondo tipo $H_{n+1/2}^{(2)}(kr)$ e sono state scelte per il loro comportamento asintotico:

$$h_n^{(2)}(kr) \sim \frac{i^{n+1}}{kr} e^{-ikr} \tag{3.55}$$

Quando si combinano con il fattore $e^{i\omega t}$, rappresentano un'onda sferica in partenza, come è richiesta per l'onda dispersa.

Allo stesso modo, il campo all'interno della sfera può essere rappresentato da:

Onda all'interno:

$$u = e^{i\omega t} \cos\varphi \sum_{n=1}^{\infty} mc_n(-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos\theta) j_n(mkr) \tag{3.56}$$

$$v = e^{i\omega t} \sin\varphi \sum_{n=1}^{\infty} md_n(-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos\theta) j_n(mkr) \tag{3.57}$$

Dove c_n e d_n sono un'altra coppia di coefficienti incogniti, e la scelta di $j_n(mkr)$ è basata sulle seguenti considerazioni: l'indice di rifrazione è m e i campi sono finiti all'origine. Si usano le condizioni al contorno (vedere le equazioni 3.18 e 3.19) in modo da determinare i coefficienti incogniti. A parte per alcuni fattori e le diverse derivate rispetto a θ e φ, le espressioni per descrivere l'onda all'interno e al di fuori della sfera sono le stesse. Le componenti del campo E_θ ed E_φ entrambe contengono le espressioni:

$$v \; e \; \frac{1}{m}\frac{\partial(ru)}{\partial r} \tag{3.58}$$

Le componenti H_θ e H_φ contengono:

$$mu \; e \; \frac{\partial(rv)}{\partial r} \tag{3.59}$$

Queste quattro espressioni devono avere uguali valori in entrambi i lati della superficie al confine, $r = a$, dove a è il raggio della sfera. Le notazioni sono semplificate introducendo un nuovo insieme di funzioni che differiscono dalle funzioni sferiche di Bessel tramite un fattore aggiuntivo z:

$$\psi_n(z) = zj_n(z) = (\pi z/2)^{1/2} J_{n+1/2}(z) = S_n(z) \tag{3.60}$$

$$\chi_n(z) = -zy_n(z) = -(\pi z/2)^{1/2} Y_{n+1/2}(z) = C_n(z) \tag{3.61}$$

$$\zeta_n(z) = zh_n^{(2)}(z) = (\pi z/2)^{1/2} H_{n+1/2}^{(2)}(z) \tag{3.62}$$

Queste sono le funzioni di Riccati-Bessel. Le notazioni S_n e C_n sono attualmente le più comuni. In questo elaborato si usa ψ_n, χ_n e ζ_n, la notazione introdotta da Debye nel 1909. Per mezzo di

$$H_n^{(2)}(z) = J_n(z) - iY_n(z) \tag{3.63}$$

Si ottiene:

$$\zeta_n(z) = \psi_n(z) + i\chi_n(z) \tag{3.64}$$

Gli argomenti di tali funzioni sono:

$$x = ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \tag{3.65}$$

$$y = mka = mx \tag{3.66}$$

Il parametro di dimensione x, il quale è pari al rapporto tra la lunghezza circonferenza della sfera rispetto alla lunghezza d'onda, è uno dei più importanti.

Con tali notazioni le condizioni al contorno, espresse tramite la continuità delle quattro funzioni poste nelle parentesi, assumono la forma:

$$[mu]: \psi_n(x) - a_n\zeta_n(x) = mc_n\psi_n(y) \tag{3.67}$$

$$\left[\frac{1}{m}\frac{\partial(ru)}{\partial r}\right]: \psi_n'(x) - a_n\zeta_n'(x) = c_n\psi_n'(y) \tag{3.68}$$

$$[v]: \psi_n(x) - b_n\zeta_n(x) = d_n\psi_n(y) \tag{3.69}$$

$$\left[\frac{\partial(ru)}{\partial r}\right]: \psi_n'(x) - b_n\zeta_n'(x) = md_n\psi_n'(y) \tag{3.70}$$

Ricavando a_n dalle prime due equazioni e b_n dalle ultime due si ottengono le seguenti soluzioni:

$$a_n = \frac{\psi_n'(y)\psi_n(x) - m\psi_n(y)\psi_n'(x)}{\psi_n'(y)\zeta_n(x) - m\psi_n(y)\zeta_n'(x)} \tag{3.71}$$

$$b_n = \frac{m\psi_n'(y)\,\psi_n(x) - \psi_n(y)\psi_n'(x)}{m\psi_n'(y)\zeta_n(x) - \psi_n(y)\zeta_n'(x)} \tag{3.72}$$

Per c_n e d_n si ottiene frazioni con gli stessi denominatori e

$$\psi_n'(x)\zeta_n(x) - \psi_n(x)\zeta_n'(x) = i \tag{3.73}$$

Un numeratore comune. Quest'ultima equazione (3.73) completa la soluzione del problema. Il campo in ogni punto all'interno e all'esterno della sfera è adesso espresso da funzioni note.

Si evidenzia che i coefficienti di scattering a_n e b_n, appena determinati rappresentano il cuore della teoria di Mie e verranno utilizzati in questa tesi per calcolare il fattore di estinzione (γ) da utilizzare nella legge di Lambert-Beer per interpretare i dati sperimentali di trasmittanza.

3.4 Funzioni d'ampiezza e Fattori di efficienza

3.4.1 Funzioni d'ampiezza

La soluzione di Mie descritta nella precedente sottosezione (3.3.2) ci fornisce i campi (elettrico e magnetico) in ogni punto all'interno e all'esterno della particella. Il problema proposto nella sottosezione 2.4.1 e più in generale nella sottosezione 2.4.6 è stato la descrizione del campo dell'onda dispersa ristretta però a una distanza molto grande dalla sfera. Sostituendo per $h_n^{(2)}(kr)$ l'espressione asintotica, già fornita, si ottiene per l'onda dispersa:

$$u = -\frac{i}{kr}e^{-ikr+i\omega t}\cos\varphi\sum_{n=1}^{\infty}a_n\frac{2n+1}{n(n+1)}P_n^1(\cos\theta) \tag{3.74}$$

$$v = -\frac{i}{kr} e^{-ikr+i\omega t} \sin\varphi \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos\theta) \tag{3.75}$$

Derivando le componenti tangenziali del campo tramite le equazioni da 3.43 a 3.46 si ottengono le seguenti funzioni che dipendono dall'angolo di scattering:

$$\pi_n(\cos\theta) = \frac{1}{\sin\theta} P_n^1(\cos\theta) \tag{3.76}$$

$$\tau_n(\cos\theta) = \frac{d}{d\theta} P_n^1(\cos\theta) \tag{3.77}$$

Le figure 3.2 e 3.3 mostrano i valori delle funzioni 3.76 e 3.77 per $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$.

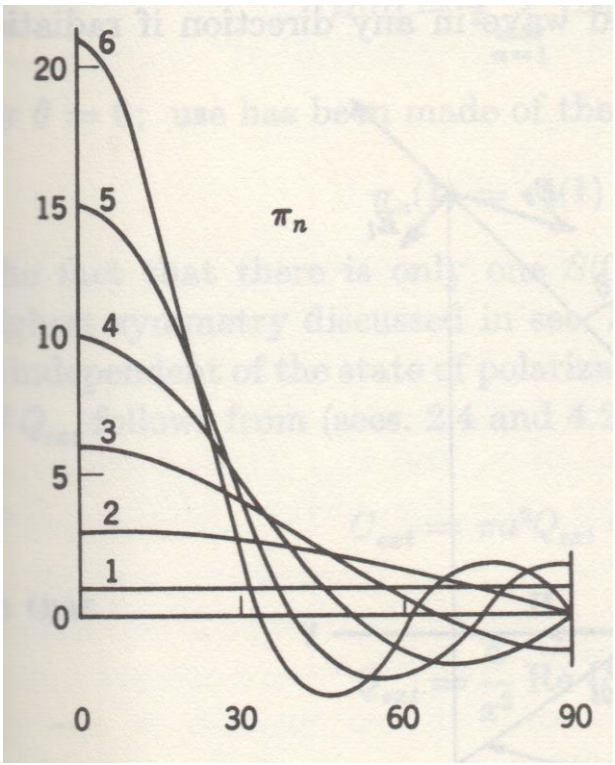

Figura 3.2 - I valori della funzione π_n al variare dell'angolo di scattering θ, per n = 1, 2, 3, 4, 5, 6 (da Van de Hulst [39]).

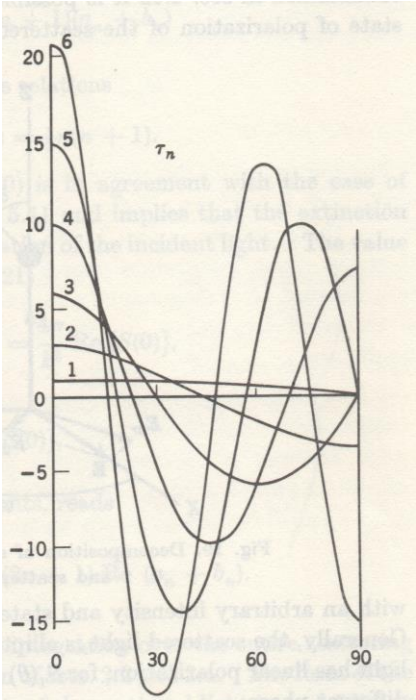

Figura 3.3 - I valori della funzione τ_n al variare dell'angolo di scattering θ, per n = 1, 2, 3, 4, 5, 6 (da Van de Hulst [39]).

Espressioni alternative sono:

$$\pi_n(\cos\theta) = \frac{dP_n^1(\cos\theta)}{d\cos\theta} \tag{3.78}$$

$$\tau_n(\cos\theta) = \cos\theta \cdot \pi_n(\cos\theta) - \sin^2\theta \frac{d\pi_n(\cos\theta)}{d\cos\theta} \tag{3.79}$$

Le componenti risultanti di campo elettrico e magnetico possono essere scritte nella forma:

$$E_\theta = H_\varphi = -\frac{i}{kr} e^{-ikr+i\omega t} \cos\varphi\, S_2(\theta) \tag{3.80}$$

$$-E_\varphi = H_\theta = -\frac{i}{kr} e^{-ikr+i\omega t} \sin\varphi\, S_1(\theta) \tag{3.81}$$

Dove

$$S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \{a_n \pi_n(\cos\theta) + b_n \tau_n(\cos\theta)\} \tag{3.82}$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \{b_n \pi_n(\cos\theta) + a_n \tau_n(\cos\theta)\} \tag{3.83}$$

I campi 3.80 e 3.81 rappresentano un'onda sferica uscente con ampiezza e stato di polarizzazione che dipendono dalla direzione. Le componenti radiali E_r e H_r possono inoltre essere derivate dalla soluzione di Mie ma tendono a zero con una potenza più grande di $1/r$. Rimane da dimostrare che la funzione $S_1(\theta)$ e $S_2(\theta)$ sono *le funzioni d'ampiezza* nel senso definito precedentemente (sottosezioni 2.4.5 e 2.4.6)

Il sistema in esame viene rappresentato in figura 3.4.

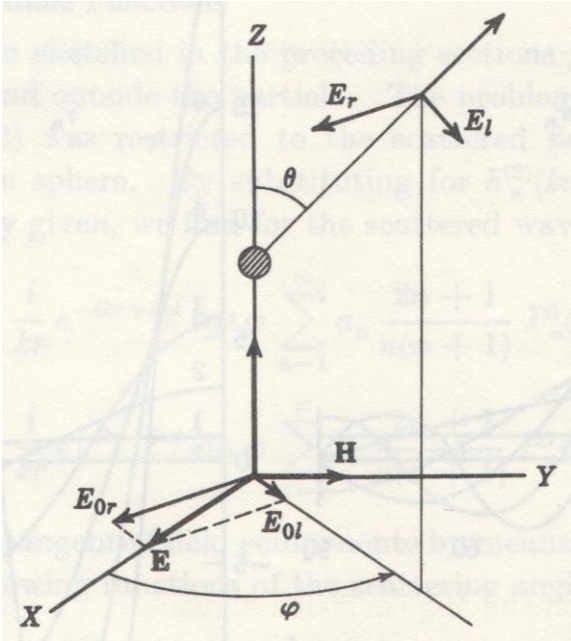

Figura 3.4 - Decomposizione del vettore campo elettrico dell'onda incidente e dell'onda diffusa (da Van de Hulst [39]).

Il piano di riferimento è preso passante per la direzione di propagazione dell'onda incidente e di quella dispersa. Le componenti perpendicolari e parallele del campo elettrico dell'onda incidente sono:

$$E_{0r} = \sin\varphi \tag{3.84}$$

$$E_{0l} = \cos\varphi \tag{3.85}$$

Le componenti invece dell'onda dispersa sono:

$$E_r = -E_\varphi \tag{3.86}$$

$$E_l = E_\theta \tag{3.87}$$

Quindi si può osservare che le funzioni qui denotate come $S_1(\theta)$ e $S_2(\theta)$ concordano in tutti i dettagli con le funzioni d'ampiezza definite sottosezioni 2.4.5 e 2.4.6. Le componenti della matrice $S_3(\theta)$ e $S_4(\theta)$ sono zero. Tramite le formule riassunte nel capitolo precedente (2) è possibile scrivere subito l'intensità e lo stato di polarizzazione dell'onda dispersa in ogni direzione, se la radiazione con un'intensità arbitraria e stato di polarizzazione arbitrario cade sulla sfera.

Generalmente, la luce diffusa è polarizzata ellitticamente, anche se la luce incidente è polarizzata linearmente, $S_1(\theta)$ e $S_2(\theta)$ sono numeri complessi con fase diversa. In generale il problema di Mie coinvolge il calcolo dei seguenti numeri:

$$i_1 = |S_1(\theta)|^2 \tag{3.88}$$

$$i_2 = |S_2(\theta)|^2 \tag{3.89}$$

e della differenza di fase δ (sottosezione 2.4.6) come funzione dell'angolo di scattering θ. Molto spesso solo i_1 e i_2 sono tabulati, in quanto sono sufficienti per lo studio dello scattering della luce non polarizzata. Se è richiesta la funzione di fase, può essere calcolata dopo aver

determinato i_1, i_2 e Q_{ext}. Alternativamente, potrebbero essere scritti come una serie di funzioni di Legendre con coefficienti espressi direttamente in termini di coefficienti di Mie.

3.4.2 Fattori di efficienza

Questi fattori, definiti per particelle generiche possono essere calcolati subito dalle funzioni d'ampiezza. Il fattore d'efficienza per l'estinzione può essere determinato dalla funzione d'ampiezza per $\theta = 0$. Entrambi $S_1(\theta)$ e $S_2(\theta)$ presentano il valore:

$$S(0) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)(a_n + b_n) \tag{3.90}$$

Per $\theta = 0$; si impiega la relazione:

$$\pi_n(1) = \tau_n(1) = \frac{1}{2}n(n+1) \tag{3.91}$$

Il fatto che qui ci sia solo $S(0)$ è in accordo con il caso di massima simmetria e implica che l'estinzione sia indipendente dallo stato di polarizzazione dell'onda incidente. Il valore di Q_{ext} segue dalle relazioni precedenti:

$$C_{ext} = \pi a^2 Q_{ext} = \frac{4\pi}{k^2} Re\{S(0)\} \tag{3.92}$$

Così che:

$$Q_{ext} = \frac{4}{x^2} Re\{S(0)\} \tag{3.93}$$

Il quale scritto in termini dei coefficienti di Mie diventa:

$$Q_{ext} = \frac{2}{x^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)Re(a_n + b_n) \tag{3.94}$$

La sezione trasversale di estinzione deriva dall'integrazione lungo l'intero angolo solido in accordo con la formulazione già descritta precedentemente (sottosezione 2.2.3). La forma della funzione $F(\theta, \varphi)$, che definisce l'intensità della luce dispersa in una direzione arbitraria può essere scritta subito per il caso specifico della luce incidente polarizzata linearmente (vedere figura 3.4). Si ottiene:

$$F(\theta, \varphi) = i_2(\theta)\cos^2\varphi + i_1(\theta)\sin^2\varphi \tag{3.95}$$

Integrando lungo tutte le direzioni con il seguente elemento differenziale:

$$d\omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \tag{3.96}$$

per mezzo delle equazioni 2.5 e 2.15 si ricava:

$$Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{\pi a^2} = \frac{1}{x^2}\int_0^{\pi}\{i_1(\theta) + i_2(\theta)\}\sin\theta\, d\theta \tag{3.97}$$

In modo simile:

$$\overline{\cos\theta} \cdot Q_{sca} = \frac{1}{x^2}\int_0^{\pi}\{i_1(\theta) + i_2(\theta)\}\cos\theta\sin\theta\, d\theta \tag{3.98}$$

Si ottengono le stesse sezioni trasversali totali anche se la luce incidente presenta una polarizzazione arbitraria (ad esempio parzialmente ellittica). Una volta che si sono trovati tali

valori, la sezione trasversale per l'assorbimento e per la pressione di radiazione seguono tramite una sottrazione:

$$Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sca} \tag{3.99}$$

$$Q_{pr} = Q_{ext} - \overline{\cos\theta} \cdot Q_{sca} \tag{3.100}$$

La dimostrazione completa che porta alla formulazione finale del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, tramite l'introduzione dei coefficienti di Mie risulta molto complessa, perciò sono stati omessi alcuni passaggi.

Siccome S_1 e S_2 sono nella forma di serie infinite, i loro quadrati i_1 e i_2 sono nella forma di una serie doppiamente infinita. Comunque al momento dell'integrazione lungo θ la maggior parte dei termini nelle doppie serie forniscono il valore zero a causa delle relazioni di ortogonalità di π_n e di τ_n. Questo comportamento è stato investigato da Debye. I risultati finali sono:

$$Q_{sca} = \frac{2}{x^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)\{|a_n|^2 + |b_n|^2\} \tag{3.101}$$

$$\begin{aligned}\overline{\cos\theta} \cdot Q_{sca} = &\frac{4}{x^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n(n+2)}{n+1}Re(a_n a_{n+1}^* + b_n b_{n+1}^*) \\ &+ \frac{4}{x^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2n+1}{n+1}Re(a_n b_n^*)\end{aligned} \tag{3.102}$$

Si sottolinea che le formule 3.94 e 3.101 saranno impiegate nei prossimi capitoli per calcolare la concentrazione di una nube di polvere.

3.5 Formule per l'uso pratico

Sebbene le precedenti formule siano generali e rigorose, è utile avere equazioni per alcune condizioni molto semplici pronte per l'uso pratico e per le applicazioni dello scattering. Tali relazioni vengono riportate di seguito.

3.5.1 Particella singola, estinzione

Si considera una particella avente raggio a e una radiazione elettromagnetica con lunghezza d'onda λ, il parametro di dimensione $x = 2\pi a/\lambda$. Se la sfera non è nel vuoto ma immersa in un mezzo omogeneo, la lunghezza d'onda nel mezzo esterno, che è λ_{vac}/m_{mezzo} dovrebbe essere usata in questa formula. Le tabelle delle funzioni di Mie solitamente forniscono il fattore d'efficienza $Q_{ext}(x, m)$. Se I_0 è l'intensità della luce incidente (unità di misura W/m^2), la sfera intercetterà una potenza pari a $Q_{ext} \cdot \pi a^2 \cdot I_0$ (W) dal raggio incidente, indipendentemente dallo stato di polarizzazione di quest'ultimo. La parte assorbita e la parte dispersa in tutte le direzioni sono trovate sostituendo Q_{ext} da Q_{abs} e Q_{sca}, rispettivamente.

3.5.2 Particella singola, intensità dispersa

Le tabelle solitamente forniscono i_1 e i_2 come funzione di x, m e θ. Sia r la distanza dal centro della sfera e il numero d'onda sia pari a $k = 2\pi/\lambda$. Se la luce *naturale* di intensità I_0 (W/m^2) è incidente sulla sfera, la luce dispersa in ogni direzione presenta una parziale polarizzazione lineare. La sua intensità (W/m^2) è:

$$I = \frac{I_0(i_1 + i_2)}{2k^2r^2} \tag{3.103}$$

Nell'equazione 3.103 i termini i_1 e i_2 fanno riferimento, rispettivamente all'intensità della luce che vibra perpendicolarmente e parallelamente al piano individuato dalla direzione attraverso cui avviene la propagazione dei raggi incidenti e dispersi. Il grado di polarizzazione è $(i_1 - i_2)/(i_1 + i_2)$.

3.5.3 Mezzo contenente N particelle per unità di volume

Le particelle sono considerate essere sfere identiche nel vuoto. L'intensità dispersa per unità di volume in una data direzione è semplicemente N volte l'intensità descritta dalla relazione 3.103:

$$I = N \cdot \frac{I_0(i_1 + i_2)}{2k^2r^2} \tag{3.104}$$

Essa dipende dallo stato della polarizzazione della radiazione elettromagnetica incidente. L'intensità del raggio che procede nella nube di particelle diminuisce in una distanza l dal fattore $e^{-\gamma l}$, dove il coefficiente di estinzione γ è calcolato da:

$$\gamma = N\pi a^2 Q_{ext} \tag{3.105}$$

indipendentemente dallo stato di polarizzazione della luce incidente. Allo stesso tempo l'onda che si propaga è ritardata. L'indebolimento e il ritardo sono descritti insieme come l'effetto di un indice di rifrazione del mezzo complesso:

$$\tilde{m} = 1 - iS(0) \cdot 2\pi N k^{-3} \tag{3.105}$$

Se le particelle presentano diversi raggi, con $n(a)da$ il numero di particelle per unità di volume comprese tra a e $a + da$, il fattore di efficienza per l'estinzione si complica (relazione 2.27):

$$\gamma = \int_0^\infty Q_{ext} n(a) \pi a^2 da \tag{3.106}$$

Dove Q_{ext} dipende da a, tramite il parametro $x = 2\pi a/\lambda$.

3.5.4 Particelle sospese in un mezzo con indice di rifrazione diverso da 1

In modo da mantenere semplice la notazione, si è assunto nelle precedenti derivazioni che il mezzo di dispersione sia il vuoto ma la generalizzazione è semplice. Si considera che il mezzo esterno presenta l'indice di rifrazione m_2 (reale) e le sfere l'indice di rifrazione m_1 (reale o complesso). m usato in questa trattazione è:

$$m = \frac{m_1}{m_2} \tag{3.107}$$

Il λ usato nella trattazione è:

$$\lambda = \frac{\lambda_{vac}}{m_2} \tag{3.108}$$

E conseguentemente:

$$x = \frac{2\pi a}{\lambda} = \frac{2\pi a m_2}{\lambda_{vac}} \tag{3.109}$$

Tutte le funzioni di x e m rimangono le stesse, eccetto per l'indice di riflessione complesso del mezzo, per il quale si considera adesso $\tilde{m} \cdot m_2$. Una dimostrazione generale di tali relazioni può essere trovata mantenendo m_2 come un parametro separato in tutte le formule precedenti.

3.6 Soluzioni asintotiche

In caso di particelle con dimensioni molto più piccole o più grandi della lunghezza d'onda dei fotoni, la soluzione prodotta dalla teoria di Mie si semplifica. Perciò si può applicare nel primo caso lo scattering di Rayleigh, mentre nel secondo caso la teoria dell'ottica geometrica [47].

3.6.1 Scattering di Rayleigh

La luce descritta come un'onda elettromagnetica è caratterizzata dai vettori campo elettrico ($\boldsymbol{E}$) e campo magnetico ($\boldsymbol{H}$). Per semplicità, si considera il caso di un'onda piana polarizzata linearmente, incidente su una piccola particella sferica. Per particelle molto più piccole della lunghezza d'onda della radiazione incidente, il campo elettrico locale prodotto dall'onda risulta approssimativamente uniforme in ogni istante. Questo campo elettrico applicato induce un dipolo nella particella. Poiché il campo elettrico oscilla, il dipolo indotto oscilla e in accordo con la teoria classica dell'elettromagnetismo, tale dipolo irradia fotoni in tutte le direzioni. Questo fenomeno è chiamato scattering di Rayleigh.

Il momento di dipolo ($\boldsymbol{p}$), indotto sulla particella è proporzionale al vettore campo elettrico ($\boldsymbol{E}$) istantaneo:

$$\boldsymbol{p} = \alpha \boldsymbol{E} \tag{3.110}$$

L'espressione 3.110 introduce la polarizzabilità (α) che presenta l'unità di misura di un volume e che è uno scalare per una particella sferica isotropa. Dall'energia del campo elettrico prodotto dal dipolo oscillante, si può ricavare un'espressione per l'intensità della radiazione dispersa:

$$I = \frac{(1 + \cos^2\theta)k^4\alpha^2}{2r^2} I_0 \tag{3.111}$$

$$I = \frac{8\pi^4 \cdot (1 + \cos^2\theta)\alpha^2}{r^2\lambda^4} I_0 \rightarrow I \sim \frac{1}{\lambda^4} \tag{3.112}$$

Dove $k = 2\pi/\lambda$ è come al solito il numero d'onda. Lo scattering è simmetrico rispetto alla direzione del raggio incidente con la presenza di massimi uguali nelle direzioni in avanti e indietro e un minimo posto in centro.

Poiché l'intensità della luce dispersa è inversamente proporzionale alla quarta potenza della lunghezza d'onda (relazione 3.112), la luce blu (corta lunghezza d'onda) è diffusa preferenzialmente rispetto alla rossa. Tale forte dipendenza porta il cielo ad assumere la colorazione blu (in assenza di particelle costituenti un aerosol disperso in aria) e contribuisce al rosso del tramonto quando viene osservata una trasmissione di luce arricchita dalla colorazione appunto rossa. In atmosfere inquinate, comunque, lo scattering dovuto alle molecole è solitamente piccolo se confrontato con lo scattering di un aerosol. In tale situazione il contributo principale allo scattering deriva da particelle aventi intervalli di dimensioni più grandi rispetto alle molecole, per le quali la teoria di Rayleigh non si può applicare.

Per una particella sferica isotropa, si può dimostrare che la polarizzabilità assume la seguente espressione:

$$\alpha = \frac{3(m^2 - 1)}{4\pi(m^2 + 2)} v \tag{3.113}$$

Dove m è l'indice di rifrazione della particella e $v = \pi {d_p}^3/6$ è il volume. Questo risultato è valido indipendentemente dalla forma fintanto che le particelle siano molto più piccole dalla lunghezza d'onda della luce. Quando si verifica una dispersione senza che avvenga assorbimento di radiazione elettromagnetica, il fattore di efficienza per lo scattering Q_{sca} (che in tale condizione coincide anche con il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}) diventa:

$$Q_{sca} = Q_{ext} = \frac{8}{3} x^4 \left\{\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}\right\}^2 \tag{3.114}$$

Dove $x = \pi d_p/\lambda$ è il solito parametro di dimensione ottico adimensionale. Sia lo scattering sia l'assorbimento possono essere tenuti in conto scrivendo l'indice di rifrazione come la somma di una componente reale e di una immaginaria:

$$m = m_{Re} - m_{Im} i \tag{3.115}$$

Dove ${m_{Re}}^2 - {m_{Im}}^2 = \varepsilon$ e $2 m_{Re} m_{Im} = \lambda\sigma/c$. ε è la costante dielettrica, σ è la conduttività, λ è la lunghezza d'onda nel vuoto e c è la velocità della luce (vedere sezione 4.4). Il termine immaginario causa l'assorbimento di radiazione elettromagnetica, esso risulta nullo per particelle non conduttive ($\sigma = 0$). Sia ε sia σ dipendono da λ e raggiungono il loro valore statico a basse frequenze. Per i metalli nell'intervallo di frequenze dell'ottica sia m_{Re} sia m_{Im} sono dell'ordine dell'unità. Il fattore di efficienza per lo scattering per piccole particelle che assorbono è dato da:

$$Q_{sca} = \frac{8}{3} x^4 Re \left\{\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}\right\}^2 \tag{3.116}$$

Dove Re indica di prendere la parte reale dell'espressione considerata. Il fattore di efficienza per l'assorbimento si calcola invece con la seguente espressione:

$$Q_{abs} = -4 x^4 Im \left\{\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}\right\}^2 \tag{3.117}$$

Dove Im indica di prendere la parte immaginaria. Per particelle molto piccole di materiale assorbente, il coefficiente di estinzione della particella varia solo con la potenza prima di x e l'estinzione totale (γ) per particella si ottiene moltiplicando $Q_{ext} = Q_{sca} + Q_{abs}$ per la sezione trasversale ed è proporzionale al volume della particella.

Per particelle non assorbenti, si può ricavare l'espressione 3.114 come espansione in serie del fattore di efficienza per l'estinzione (che in questo caso come già detto coincide con il fattore di estinzione per lo scattering) calcolato tramite la teoria di Mie:

$$Q_{sca} = Q_{ext} = \frac{8}{3} x^4 \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}\right)^2 \left[1 + \frac{6\,(m^2 - 1)}{5\,(m^2 + 2)} + \cdots\right] \tag{3.118}$$

Quando $m = 1.5$, che corrisponde per esempio a certi liquidi organici e a molti sali metallici, il secondo termine fra parentesi quadre risulta più piccolo di 0.1 per $x < 0.53$. Perciò la teoria di Rayleigh può essere usata con un errore minore del 10% per esempio per la luce verde ($\lambda = 0.5\ \mu m$) quando $d_p < 0.084\ \mu m$ e $m = 1.5$.

3.6.2 Ottica geometrica – scattering causato da grandi particelle: il paradosso dell'estinzione

Per particelle molto più grandi della lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica incidente ($d_p \gg \lambda$ ovvero $x \gg 1$), il fattore di efficienza per lo scattering tende asintoticamente

al valore di 2 (cioè $Q_{sca} \rightarrow 2$). Questo significa che una grande particella rimuove dal fascio luminoso due volte la quantità di luce intercettata dalla sua sezione geometrica trasversale. La spiegazione per questo paradosso verrà descritta in questa sottosezione.

Per la luce interagente con una grande particella, il fascio incidente può essere considerato costituito da un insieme di fasci separati. Questi raggi passano all'interno di un'area definita dalla sezione trasversale geometrica di una sfera, alcuni saranno riflessi dalla superficie della particella e altri rifratti. I raggi rifratti possono emergere, probabilmente dopo aver subito diverse riflessioni interne. Ognuno dei fasci incidenti che non emerge è perso a causa dell'assorbimento all'interno delle particelle. Quindi tutta l'energia sulla superficie della particella è rimossa dal fascio a causa dello scattering o dall'assorbimento, considerando un fattore di efficienza unitario.

C'è, comunque un'altra sorgente di scattering dal fascio incidente. La porzione del fascio non intercettato dalla sfera forma un fronte dell'onda piana per il quale una regione corrispondente all'area della sezione trasversale della sfera è persa. Questo è equivalente all'effetto prodotto da un ostacolo circolare posto in direzione normale al raggio. Il risultato, in accordo ai principi dell'ottica classica, è uno schema di diffrazione all'interno dell'area fantasma a grande distanza dall'ostacolo. La forma della luce all'interno dell'area fantasma è la ragione del perché la diffrazione è qualcosa che assomiglia alla curvatura dei raggi luminosi intorno a un ostacolo.

La distribuzione d'intensità all'interno dello schema di diffrazione dipende dalla forma del perimetro e dalla dimensione relativa della particella rispetto alla lunghezza d'onda della luce. Essa è indipendente dalla composizione, indice di rifrazione o natura riflettente della superficie. La quantità totale di energia che appare nello schema di diffrazione è uguale all'energia del fascio intercettato dalla sezione trasversale geometrica della particella. Perciò il fattore di efficienza totale basato sull'area della sezione trasversale è uguale a 2.

L'uso del fattore 2 per l'efficienza richiede che tutta la luce dispersa sia considerata includendo anche quella relativa a piccoli angoli nella direzione del fascio. In generale, l'osservazione deve essere fatta a grande distanza dalla particella in confronto alla dimensione della particella. Infatti un vaso di fiori sulla finestra blocca solo la luce solare che cade su esso e non due volte quella quantità, che entra nella stanza. Un meteorite della stessa dimensione nello spazio posto tra una stella e un telescopio sulla Terra rimuove due volte la luce della stella che cade su esso. Poiché la distanza di un rilevatore per un aerosol contenente particelle che diffondono è grande in confronto al diametro delle particelle allora $Q_{sca} \rightarrow 2$ per $x \gg 1$.

Questa sezione (3.6) è stata introdotta per completare la panoramica sulla teoria dello scattering. Nei calcoli di questa tesi si impiegherà sempre la teoria di Mie, in quanto è quella più generale, che contiene al suo interno anche i casi particolari (scattering di Rayleigh e ottica geometrica). Inoltre, dalle analisi fatte (che verranno illustrate nella sottosezione 6.2.2) nello studio delle misure di concentrazione di una nube di polvere effettuate con radiazione infrarossa il parametro di dimensione assumerà un valore intorno a $x = 100$, per cui trovandosi nella zona intermedia (anche se verso il confine dell'ottica geometrica) per calcolare in modo corretto i fattori di efficienza si deve ricorrere appunto allo scattering di Mie.

4. Esperimenti di scattering ed estinzione

Si considera un ambiente costituito da piccole particelle che disperdono le radiazioni elettromagnetiche, immerse in un mezzo omogeneo. Tali condizioni sono presenti in un gran numero di situazioni (per esempio nebbia, polvere interstellare, ecc), sono il prodotto desiderato o indesiderato di azioni dell'uomo (fumo industriale, soluzioni colloidali, ecc). In molti di questi esempi lo scattering della luce è il mezzo più semplice e ovvio per effettuare investigazioni sulle caratteristiche delle particelle. Gli esperimenti possono essere interpretati più facilmente se le particelle non sono troppo densamente impaccate e il campione in esame è piccolo a sufficienza per evitare lo scattering multiplo.

4.1 Situazioni ottimali di utilizzo dello scattering

Si descrivono alcune condizioni che possono spingere un ricercatore ad impiegare metodi ottici di analisi di scattering invece di altri strumenti di investigazione.

1. *Le particelle presentano una dimensione dello stesso ordine di grandezza della luce (visibile).* Per particelle molto più piccole o molto più grandi le misure di scattering risultano meno efficienti. Le particelle molto piccole infatti esibiscono lo scattering di Rayleigh e nessuna caratteristica di facile misurazione dipende dalla loro dimensione. Solo il confronto di quantità che sono funzioni lineari del volume delle particelle (per esempio l'indice di rifrazione del mezzo composito) con quantità che sono funzioni quadratiche (per esempio l'intensità della luce scatterata) permettono una determinazione della dimensione. Le particelle con dimensioni elevate di nuovo mostrano piccole differenze nelle loro caratteristiche di scattering. Inoltre esse possono essere esaminate agevolmente con un microscopio. Quest'ultimo è un metodo diretto e molto più potente che è da preferire a studi condotti con lo scattering ogni volta che è possibile.
2. *Le particelle non sono prontamente accessibili.* Queste condizioni si incontrano in tutti i casi in astronomia e nella maggior parte di quelli meteorologici. Tutti i dati osservati sulle polveri interstellari nello spazio o nell'atmosfera di un pianeta sono misurati dallo scattering o dall'estinzione di una radiazione elettromagnetica in una nube di polvere. Questa è la ragione per cui metodi che producono dei risultati accurati delle proprietà di scattering sono molto utilizzati nel settore astronomico. La nebbia e le nuvole nel cielo sono sempre accessibili a misure tramite strumentazioni poste su palloni metereologici ed aerei. Comunque risulta molto più facile eseguire misure ottiche o osservazioni radar da stazioni di terra. Una diversa situazione, dove nasce un problema simile è nello studio dei fumi di combustione di una fornace. Risulta necessario determinare la dimensione e la concentrazione numerica delle particelle di particolato che vengono emessi dalla ciminiera. Quando esse vengono raccolte da una sonda metallica, esse si aggregano e diventano indistinguibili. Un microscopio non può essere introdotto nella corrente dei gas caldi, ma risulta semplice inviare una radiazione luminosa o ultravioletta e misurare l'intensità della luce dispersa o estinta.
3. *Un metodo rapido per misure di routine.* Se si ricercano tali caratteristiche la scelta è spesso un metodo di scattering. Per esempio il colore di una sospensione colloidale nell'industria chimica può essere una verifica sensibile della dimensione delle particelle. Altre verifiche coinvolgono la luce polarizzata o il rapporto dell'intensità della luce diffusa in due diversi angoli, possono essere dei metodi più sensibili e anche più semplici grazie alla moderna strumentazione.

In tutte queste misure, la distribuzione delle lunghezze d'onda e lo stato di polarizzazione della luce incidente possono essere scelti a piacere. Però, l'interpretazione teorica è più semplice se sono usati una lunghezza d'onda definita e uno stato di polarizzazione definito. La via meno complicata è usare esperimenti con luce bianca o naturale. Per luce bianca si intende che è distribuita su un ampio intervallo di lunghezze d'onda nello spettro visibile, mentre per quella naturale si intende che non è polarizzata. Ci possono essere ragioni pratiche per preferire la luce bianca o quella naturale. Solitamente tali radiazioni si ottengono tramite l'inserimento di un filtro colorato, un filtro polaroid o di entrambi in corrispondenza del raggio luminoso. Essi possono essere posti davanti al sistema di illuminazione (sorgente luminosa), in quello di ricezione (sensore) o in entrambi.

4.2 Scattering

Si assume che la luce dispersa da molte particelle costituenti una nube, sia misurata simultaneamente. In figura 4.1 è mostrata una rappresentazione schematica della strumentazione impiegata nelle misure di scattering.

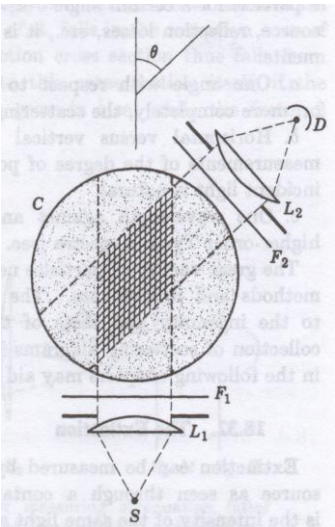

Figura 4.1- Disposizione schematica per misurare la luce dispersa. S è la sorgente luminosa, L1 e L2 sono le lenti con il diaframma, F1 e F2 sono i filtri coloratati e/o polarizzanti, D è il rilevatore (per esempio una fotocellula) e C è la cella contenente il campione da analizzare. L'area tratteggiata a croce rappresenta il volume di scattering (da Van de Hulst [39]).

Nella maggior parte degli apparati sperimentali che si incontrano la luce dispersa è visualizzata in un ultramicroscopio o in un contatore di particelle fotoelettrico. In buona parte della letteratura [39] è convenzione chiamare il piano che contiene le direzioni di propagazione della luce incidente e diffusa (rappresentato in figura 4.1) il piano orizzontale, per descrivere la polarizzazione lineare tramite la posizione verticale o orizzontale, del vettore campo elettrico. La posizione verticale del vettore campo elettrico corrisponde a quella che abbiamo chiamato posizione perpendicolare (indicata dal vettore r).

Se le particelle sono sferiche e se il raggio incidente è verticalmente polarizzato tramite un filtro polarizzatore, la luce dispersa risulta anch'essa polarizzata verticalmente (a meno che avvenga uno scattering multiplo) e la sua intensità è proporzionale a i_1. Così l'aggiunta di un filtro di

polarizzazione verticale nel sistema di ricezione potrebbe non creare nessuna differenza (eccetto per l'assorbimento del filtro stesso) e l'aggiunta di un filtro polarizzato orizzontalmente potrebbe ridurre l'intensità a zero. Nel caso di particelle sferiche, dove si hanno diagrammi di scattering separati per il vettore campo elettrico verticale e per il vettore campo elettrico orizzontale, il primo diagramma di $i_1(\theta)$ solitamente mostra dettagli più bruschi rispetto quello di $i_2(\theta)$ ed entrambi mostrano un maggior numero di dettagli rispetto i diagrammi per la luce non polarizzata.

La misura più semplice dal punto di vista teorico è quella dell'intensità dispersa per un certo angolo (per unità di angolo solido) a una certa lunghezza d'onda e a una certa polarizzazione. La misura dell'intensità luminosa diffusa da un insieme di particelle è difficile da eseguire, a maggior ragione per un intervallo di lunghezze d'onda e per un intervallo di angoli coinvolti, a causa delle aperture o delle fessure nei dispositivi di illuminazione e di ricezione.

Siccome eseguire delle misure assolute della sezione trasversale di scattering (C_{sca}) di una particella per certi angoli θ presenta delle difficoltà nella calibrazione della sorgente di luce, perdite di riflessioni, ecc, risulta più usuale effettuare misure relative, p. es:

- Un angolo rispetto a un altro: misura di dissimmetria o in modo più completo il diagramma di scattering.
- Polarizzazione orizzontale in funzione della polarizzazione a un dato angolo, cioè misure del grado di polarizzazione della luce dispersa se la luce incidente è naturale.
- Una lunghezza d'onda in funzione di un'altra

Siccome esiste una grande varietà di particelle che possono essere analizzate, come conseguenza sono necessari diversi metodi e diversa strumentazione per poter eseguire misure accurate in ogni situazione.

4.3 Estinzione

Vista l'importanza dell'estinzione nelle misure sperimentali analizzate in questa tesi si è deciso di dedicarle una sezione.

4.3.1 Legge di Lambert-Beer per la misura della concentrazione

Il fenomeno dell'estinzione può essere valutato misurando l'intensità I di una sorgente di radiazione mentre passa attraverso un ambiente contenente un insieme di particelle che disperdono i fotoni. La formula che descrive l'estinzione è quella di Lambert-Beer (relazione 4.2).

Per ricavare la legge di Lambert-Beer si può precedere nel seguente modo [46]. Si considera un aerosol (di particelle solide) attraversato da un fascio incidente di fotoni, per il quale l'intensità della radiazione inviata risulta pari a I_0. La rappresentazione schematica del sistema in esame è mostrata in figura 4.2.

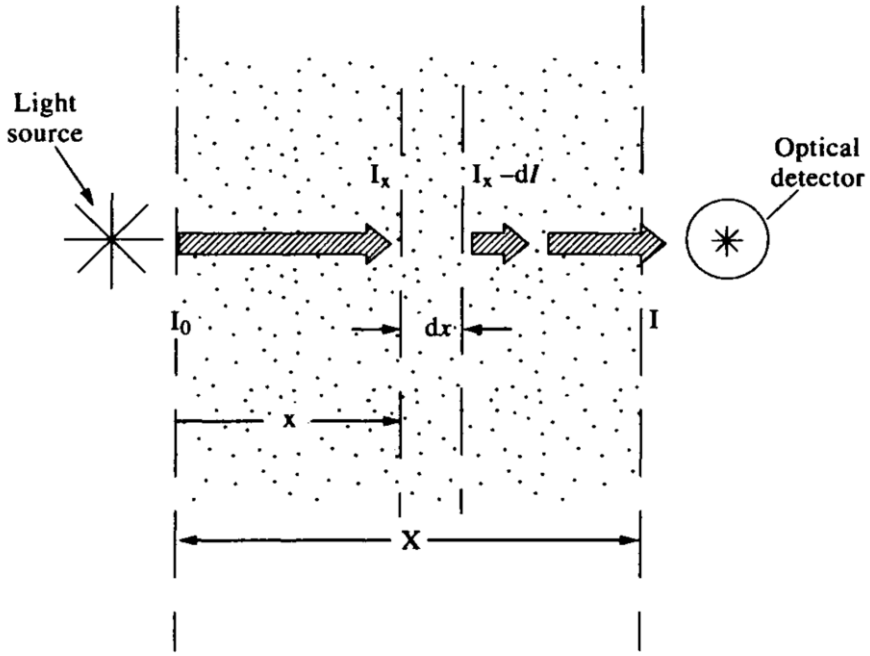

Figura 4.2 - Schema che descrive il fenomeno dell'estinzione di una radiazione elettromagnetica causato da un insieme di particelle in un aerosol (da Vincent [46]).

Come risultato si ottiene una rimozione di energia dal fascio luminoso a causa dell'interazione con le particelle. L'intensità della radiazione all'esterno della nube (ingresso del rilevatore) risulta essere pari a I, dove $I < I_0$. Per un aerosol omogeneo in cui l'energia è rimossa con un tasso costante pari a γ (espressa come la frazione di energia persa per unità di lunghezza di cammino del fascio), come la radiazione passa da x a $x + dx$ (cioè attraverso una lunghezza dx, rispetto al cammino ottico complessivo pari a l) l'intensità varia da I_x a $I_x - dI$. Considerando il volume di controllo compreso tra x e $x + dx$, se la sezione trasversale di tale sistema è S, si può scrivere il seguente bilancio di energia:

$$(I_{x+dx} - I_x)S = -I_x \gamma S dx \tag{4.1}$$

Dove il segno meno indica che l'intensità del fascio trasmesso viene ridotto. Riarrangiando l'equazione 4.1 e integrando la relazione finale sul cammino totale della radiazione (tra o e l), si ottiene appunto la legge di Lambert-Beer (relazione 4.2).

$$I_{x+dx} - I_x = -I_x \gamma dx \rightarrow dI = -I_x \gamma dx \rightarrow \frac{dI}{dx} = -I\gamma \rightarrow \int_{I_0}^{I} \frac{dI}{dx} = -\gamma \int_0^l dx \rightarrow ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\gamma l$$

$$\rightarrow I = I_0 e^{-\gamma l}$$

$$T = \frac{I}{I_0} = e^{-\gamma l} \tag{4.2}$$

Dove I_0 è l'intensità della sorgente luminosa vista attraverso lo stesso ambiente senza la presenza particelle che disperdono i fotoni, $T = I/I_0$ è la trasmittanza dell'aerosol, l è la lunghezza del cammino della radiazione attraverso il mezzo che disperde (nube di particelle), mentre γ è chiamato coefficiente di estinzione o coefficiente di attenuazione e presenta l'unità di misura dell'inverso di una lunghezza (m^{-1}). Il prodotto dei termini all'interno dell'esponenziale $\tau = \gamma l$ è spesso chiamato la turbidità dell'aerosol. Tale termine è direttamente

collegato alla visibilità. La forma esponenziale e generale dell'equazione 4.2 è comune in molte aree della fisica e della chimica, si applica ad ogni sistema che coinvolge la trasmissione di energia sotto forma di una radiazione elettromagnetica che passa attraverso un mezzo che disperde o assorbe. Tale legge è stata attribuita a numerose persone, inclusi Bouger e Lambert entrambi fisici del 1700.

Il coefficiente di estinzione come già descritto (equazione 2.74) può essere messo in relazione con la concentrazione numerica delle particelle (N) e con il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}:

$$\gamma = NC_{ext} = N\pi a^2 Q_{ext} \tag{4.3}$$

Combinando le relazioni 4.2 e 4.3 si perviene alla seguente equazione:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-N\pi a^2 Q_{ext} l} \rightarrow ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -N\pi a^2 Q_{ext} l \tag{4.4}$$

Da cui si può ricavare la concentrazione numerica delle particelle (N) in funzione dell'attenuazione della radiazione elettromagnetica ($T = I/I_0$):

$$N = -\frac{ln(I/I_0)}{\pi a^2 Q_{ext} l} \tag{4.5}$$

$$N = -\frac{ln(T)}{\pi a^2 Q_{ext} l} \tag{4.6}$$

$$T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{I}{I_0} \tag{4.7}$$

Dove il rapporto I/I_0 è chiamato trasmittanza ed è definito dalla lettera T.

Se risulta nota la densità di una singola particella (rapporto tra la massa e il volume) è possibile calcolare anche la concentrazione massica della nube di particelle:

$$\rho = \frac{m_1}{V_1} \rightarrow m_1 = \rho V_1 \tag{4.8}$$

$$m_1 = \rho \frac{4}{3}\pi a^3 \tag{4.9}$$

$$C_M = m_1 N = \frac{4}{3}\pi a^3 \rho N = -\frac{4}{3} a\rho \ \frac{ln(T)}{Q_{ext} l} \tag{4.10}$$

La concentrazione massica si ottiene moltiplicando la massa di una singola particella per la concentrazione numerica come descritto dalla relazione 4.10.

Osservando le equazioni 4.6 e 4.10 si può sottolineare che uno dei problemi associati all'uso dell'estinzione come mezzo di misura della concentrazione di un aerosol è che la misurazione è dipendente dalla dimensione delle particelle. Perciò è necessario determinare come il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} dipende dalla dimensione delle particelle. Infatti C_M è indipendente dalla dimensione delle particelle solo nella condizione in cui Q_{ext} è proporzionale ad a (vedere relazione 4.10).

$T = I/I_0$ e l possono essere misurati in modo abbastanza semplice. Però si deve inoltre conoscere il valore di Q_{ext} e questo risulta meno facile da stimare. Il fattore di efficienza per l'estinzione è una delle proprietà ottiche più importanti di un aerosol e la sua complessità rappresenta una delle più serie limitazioni per quanto riguarda le misure ottiche di concentrazione. Per aerosol ideali dove le particelle hanno tutte la stessa dimensione, forma e

indice di rifrazione noti, è possibile definire un singolo valore di Q_{ext} che può essere calcolato (impiegando lo scattering di Rayleigh, ottica geometrica, teoria di Mie) o determinato sperimentalmente. Si possono escogitare semplici esperimenti per permettere la misura diretta di N o C_M. Sfortunatamente la situazione reale è raramente così lineare. Per aerosol polidispersi, aventi forme non sferiche e frequentemente anche indici di rifrazione non ben definiti è realistico essere in grado di ottenere N e possibilmente C_M solo facendo alcune assunzioni per ricavare una stima (grossolana) di Q_{ext}.

Per approfondire questo fenomeno più nel dettaglio, si deve considerare il problema fisico fondamentale di come la luce interagisce con ogni particella. Il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} può essere definito anche nel seguente modo:

$$Q_{ext} = \frac{flusso\ estinto}{flusso\ geometrico\ incidente} \tag{4.11}$$

La teoria dello scattering di Mie, come precedentemente spiegato, permette di calcolare il fattore di efficienza per estinzione Q_{ext}. Nel caso di particelle sferiche tutte di raggio a, si ottiene:

$$Q_{ext} = \frac{2}{x^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)Re(a_n + b_n) \tag{4.12}$$

$$x = \frac{2\pi a}{\lambda} \tag{4.13}$$

Dove x è una grandezza caratteristica che rappresenta il rapporto tra il perimetro della sezione trasversale della particella e la lunghezza d'onda della radiazione impiegata. Le relazioni scritte in questa sottosezione (4.3.1) costituiscono uno strumento molto potente in quanto una volta calcolato in modo corretto Q_{ext}, misurando I e I_0 per il sistema in esame è possibile calcolare sia la concentrazione numerica sia quella massica senza procedere a una taratura dello strumento.

4.3.2 Calcolo della concentrazione di una nube di polvere nota la curva della distribuzione granulometrica

I sistemi di particelle reali presentano solitamente una certa distribuzione granulometrica, cioè sono polidispersi. In tale situazione il calcolo del coefficiente di estinzione (γ) si complica [28, 29, 69]. In questa sottosezione (4.3.2) verrà utilizzato il diametro $D = 2a$ delle particelle al posto del raggio a, in quanto le distribuzioni granulometriche sono solitamente fornite in funzione appunto del diametro delle particelle.

Se è nota la distribuzione granulometrica delle particelle, il coefficiente di estinzione (γ) può essere valutato con:

$$\gamma = \frac{\pi}{4}\int_0^{\infty} Q_{ext}(D)n(D)D^2 dD \tag{4.14}$$

Dove $n(D)dD$ è il numero di particelle per unità di volume con diametro compresa tra D e $D + dD$ e Q_{ext} è il fattore di efficienza per l'estinzione che dipende da D, tramite il parametro di dimensione $x = 2\pi a/\lambda = \pi D/\lambda$. Q_{ext} può essere calcolato per ogni valore di D applicando la teoria di Mie.

Valgono le seguenti relazioni:

$$n(D) = N \cdot f_n(D) \tag{4.15}$$

$$D = \int_0^\infty n(D)dD \tag{4.16}$$

$$1 = \int_0^\infty f_n(D)dD \tag{4.17}$$

Dove $f_n(D)dD$ è la frazione di particelle con diametro compresa tra D e $D + dD$ e N è la concentrazione numerica totale di particelle nel sistema, espressa in particelle/m^3.

Sostituendo l'equazione 4.15 nell'equazione 4.14, sapendo che N è costante:

$$\gamma = N\frac{\pi}{4}\int_0^\infty Q_{ext}(D)f_n(D)D^2dD = N \cdot R \tag{4.18}$$

Dove con R, si indica l'integrale:

$$R = \frac{\pi}{4}\int_0^\infty Q_{ext}(D)f_n(D)D^2dD \tag{4.19}$$

Considerando la legge di Lambert-Beer:

$$T = \frac{I}{I_0} = e^{-\gamma l} = e^{-NRl} \tag{4.20}$$

Dove T è la trasmittanza e l è il cammino ottico. Dalla relazione 4.20 si ricava la concentrazione numerica del sistema:

$$N = -\frac{\ln T}{Rl} \tag{4.21}$$

La concentrazione massica C_M (g/m^3) vale:

$$C_M = C_V \cdot \rho \tag{4.22}$$

Dove C_V è la concentrazione volumica, mentre ρ è la densità del solido. La concentrazione volumica (C_V) si calcola dalla seguente equazione:

$$C_V = N\frac{\pi}{6}\int_0^\infty f_n(D)D^3dD \tag{4.23}$$

Infatti il terzo momento M_3 è proporzionale al rapporto tra il volume totale delle particelle e il volume della fase gas [47]:

$$\frac{\pi M_3}{6} = \frac{\pi}{6}\int_0^\infty f_n(D)D^3dD = \phi \tag{4.24}$$

Dove ϕ è la frazione di volume della fase dispersa (particelle) nel fluido (per esempio m^3 di particelle per m^3 di fluido). Se la densità delle particelle è indipendente dalla dimensione, allora il terzo momento risulta proporzionale alla concentrazione massica di particelle.

Sostituendo la relazione 4.23 nell'equazione 4.22 si trova la concentrazione massica:

$$C_M = N\rho\frac{\pi}{6}\int_0^\infty f_n(D)D^3dD \tag{4.25}$$

Nota la funzione distributiva numerica delle dimensioni delle particelle si possono calcolare gli integrali 4.19 e 4.25 tramite una formula di quadratura (per esempio trapezi composta o Simpson composta). Il calcolo più oneroso risulta essere quello contenuto nell'equazione 4.19 in quando per ogni nodo della formula di quadratura è necessario valutare un nuovo valore di Q_{ext} tramite l'apposita routine implementata in Matlab (descritta nella sottosezione 5.6).

È possibile ottenere un'equazione che lega direttamente la concentrazione massica con la trasmittanza. Si definisce il seguente fattore di efficienza per l'estinzione medio ($\overline{Q_{ext}}$):

$$\overline{Q_{ext}} = \frac{\int_0^\infty Q_{ext}(D) f_n(D) D^2 dD}{\int_0^\infty f_n(D) D^2 dD} \tag{4.26}$$

Si ricava la concentrazione numerica (N) dall'equazione 4.25:

$$N = \frac{C_M}{\rho \frac{\pi}{6} \int_0^\infty f_n(D) D^3 dD} \tag{4.27}$$

Sostituendo l'equazione 4.26 e l'equazione 4.27 nella relazione 4.20, si ottiene:

$$T = e^{-\gamma l} = e^{-\frac{3}{2}\frac{C_M l}{\rho} \cdot \overline{Q_{ext}} \cdot \frac{\int_0^\infty f_n(D) D^2 dD}{\int_0^\infty f_n(D) D^3 dD}} \tag{4.28}$$

Il rapporto tra gli integrali può essere scritto come:

$$D_{32} = \frac{\int_0^\infty f_n(D) D^3 dD}{\int_0^\infty f_n(D) D^2 dD} \tag{4.29}$$

Dove D_{32} è il diametro medio in volume-superficie. Si perviene alle seguenti equazioni finali:

$$T = e^{-\gamma l} = e^{-\frac{3}{2}\frac{C_M l}{\rho} \cdot \frac{\overline{Q_{ext}}}{D_{32}}} \tag{4.30}$$

$$C_M = -\frac{2}{3} \frac{\rho D_{32}}{l \overline{Q_{ext}}} \ln T \tag{4.31}$$

La relazione 4.31 esprime proprio il legame tra la concentrazione massica C_M e la trasmittanza del sistema. I parametri da conoscere sono: densità del solido ρ, diametro medio in volume-superficie D_{32}, il cammino ottico l e il fattore di efficienza per l'estinzione medio $\overline{Q_{ext}}$.

Una semplice interpretazione di D_{32} si ottiene osservando che il rapporto volume/superficie di un insieme di particelle con stessa dimensione (monodisperse) è $D/6$. Il rapporto volume/superficie di un insieme di particelle polidisperse con concentrazione numerica N e funzione distributiva numerica $f_n(D)$ è dato dalla seguente espressione:

$$\frac{N \frac{\pi}{6} \int_0^\infty f_n(D) D^3 dD}{N \pi \int_0^\infty f_n(D) D^2 dD} = \frac{D_{32}}{6} \tag{4.32}$$

Perciò il diametro medio volume-superficie è quel diametro che è esattamente sei volte il rapporto volume/superficie del sistema polidisperso. In altre parole, se il sistema polidisperso è sostituito da uno monodisperso con lo stesso rapporto volume/superficie, allora il diametro delle particelle che costituiscono il sistema monodisperso è uguale a D_{32}.

Il diametro medio volume/superficie D_{32} è chiamato anche diametro medio superficiale.

Le relazioni per $\overline{Q_{ext}}$ (equazione 4.26) e D_{32} (equazione 4.29) possono anche essere scritte considerando la funzione di distribuzione numerica come discreta:

$$\overline{Q_{ext}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{max}} Q_{ext,i} N_i {D_i}^2 \Delta D_i}{\sum_{i=1}^{N_{max}} N_i {D_i}^2 \Delta D_i} \tag{4.33}$$

$$D_{32} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{max}} N_i {D_i}^3 \Delta D_i}{N_i {D_i}^2 \Delta D_i} \tag{4.34}$$

Dove N_i è il numero di particelle nell'intervallo di dimensione ΔD_i e D_i è il diametro del punto medio dell'intervallo.

4.3.3 Misure di estinzione

La figura 4.3 mostra una rappresentazione schematica della strumentazione che può essere impiegata per eseguire misure di estinzione.

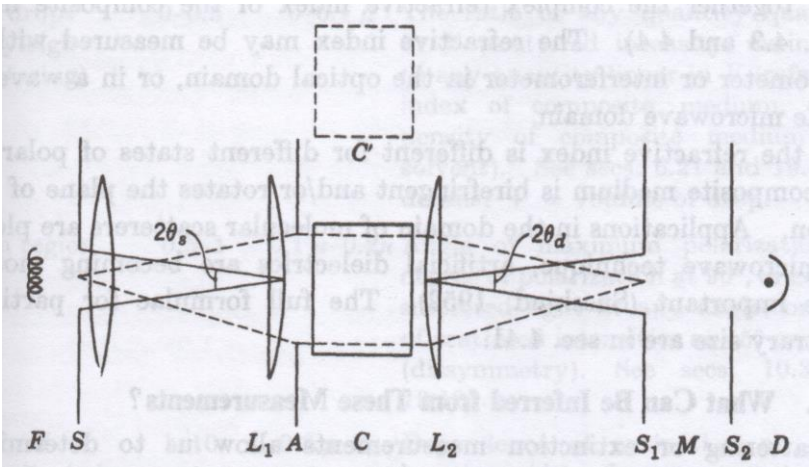

Figura 4.3 - Disposizione schematica per misurare l'attenuazione. F è la sorgente luminosa (filamento di una lampada), S e A sono i diaframmi, L1 e L2 le lenti, C e C' sono le celle per il campione e il riferimento, S1 e S2 sono le fessure per il monocromatore M, D è il rilevatore per esempio una fotocellula o fotodiodo (da Van de Hulst [39]).

Per essere sicuri che solo la luce dalla sorgente sia misurata e non parte della luce dispersa è necessaria porre almeno una lente alla fine del cammino ottico. Tale idea in pratica non può essere pienamente realizzata in quanto sebbene dal punto di vista matematico è possibile definire l'estinzione di una radiazione elettromagnetica da una sorgente puntiforme, ogni strumentazione reale misura la luce attenuata della sorgente più una certa quantità di luce diffusa da piccoli angoli. Nella strumentazione mostrata in figura 4.3 tali angoli sono indicati dalle aperture di fronte alla sorgente (θ_s) e alla fotocellula (θ_d).

Alcuni scienziati [39] hanno trovato conveniente introdurre un coefficiente di assorbimento apparente, che si ottiene introducendo in I (equazione 4.2) l'energia misurata dalla sorgente e dalla luce dispersa da un piccolo cono di ricezione. Questo coefficiente apparente di ricezione dipende dal cono di ricezione dello strumento. Per piccole particelle e particelle comparabili con la lunghezza d'onda la differenza risulta piccolissima. Per grandi particelle, la luce rifratta risulta così fortemente concentrata vicino alla direzione in avanti che una buona parte o anche tutta, cade nel cono di ricezione dello strumento. La sezione trasversale di estinzione apparente

perciò risulta pari a due volte la sezione trasversale geometrica. Il fattore di efficienza per l'estinzione rimane perciò pari a 2. Sono state formulate delle semplici regole per stabilire se il cono di ricezione della strumentazione è dovuto alla diffrazione (come si verifica in molti telescopi astronomici). Il rapporto della sezione trasversale apparente con quella geometrica risulta 2, se l'obiettivo del telescopio è molto più grande rispetto alle particelle (interstellari). Mentre esso si avvicina a 1 solo se le particelle diventano più grandi rispetto all'obiettivo.

Le misure di estinzione possono essere effettuate in un modo relativo, confrontando l'estinzione di due lunghezze d'onda o di due direzioni di polarizzazione.

4.4 Misura dell'indice di rifrazione

L'indice di rifrazione del sistema in esame (m), costituito dal mezzo e dalle particelle disperse è un'ulteriore grandezza non solitamente menzionata nei i problemi di scattering ma che deve essere soggetta ad accurate misure. Teoricamente, questo indice di rifrazione è intimamente legato all'estinzione: entrambi possono essere calcolati con uguale facilità e formano insieme l'indice di rifrazione complesso dell'ambiente globale (mezzo più particelle):

$$m = m_{Re} - i \cdot m_{Im} \tag{4.35}$$

La parte reale (m_{Re}) è legata alla capacità della particella di diffondere una radiazione elettromagnetica, la parte immaginaria (m_{Im}) è legata alla capacità di assorbire una radiazione elettromagnetica.

L'indice di rifrazione può essere misurato con un rifrattometro o un interferometro nel dominio ottico o nel dominio delle microonde. Se l'indice di rifrazione è diverso per differenti stati di polarizzazione il mezzo complessivo risulta birifrangente e/o ruota il piano di polarizzazione.

In questa sezione (4.4) si introducono inoltre, ulteriori concetti sull'indice di rifrazione. La propagazione delle onde elettromagnetiche con frequenza angolare ω in un mezzo omogeneo con conduttività σ, costante dielettrica ε e permettività magnetica unitaria può essere caratterizzato dall'indice di rifrazione complesso:

$$m = \sqrt{\varepsilon - 4\pi i\sigma/\omega} \tag{4.36}$$

Tale equazione deriva estraendo la radice quadrata dalla relazione 3.13. La quantità 4.36 può essere riscritta per ottenere l'equazione 4.35. Si ottiene:

$$m_{Re}{}^2 - m_{Im}{}^2 = \varepsilon \tag{4.37}$$

$$2m_{Re}m_{Im} = 4\pi\sigma/\omega \tag{4.38}$$

Da cui si può esprimere m_{Re} e m_{Im} in termini di ε, σ e ω. I campi elettrico e magnetico di un'onda che viaggiano nella direzione z, sono proporzionali a:

$$v = e^{ik(ct-mz)} = e^{i\omega t - imkz} \tag{4.39}$$

Dove come al solito $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ e λ è la lunghezza d'onda nel vuoto. Così il vettore di Poynting che determina l'intensità dell'onda è proporzionale a:

$$\frac{I}{I_0} = e^{2km_{Im}z} = e^{-\gamma z} \tag{4.40}$$

La quantità $\gamma = 2km_{Im} = 4\pi m_{Im}/\lambda$ è il coefficiente di assorbimento e la sua dimensione è l'inverso di una lunghezza m^{-1}. L'equazione 4.40 risulta analoga alla relazione 4.2 (legge di Lambert-Beer).

Le costanti ε e σ, dipendono fortemente da ω e raggiungono il loro valore statico solo per frequenze molto basse. Devono perciò essere condotte misure a ogni frequenza in modo da ottenere il valore corretto. È necessario eseguire misure di assorbimento in lamine molto sottili o misure dell'intensità e polarizzazione di un'onda riflessa contro una superficie piana. Tali misure devono produrre valori affidabili di m_{Re} e m_{Im} per numerosi materiali per un insieme di lunghezze d'onda. Come atteso misure nella regione dell'infrarosso lontano, mostrano una graduale transizione di ε e σ al valore statico [39].

4.5 Informazioni che si possono dedurre dalle misure di scattering ed estinzione

Le misure di scattering o di estinzione permettono di determinare dimensione, distribuzione dimensionale, forma, orientazione e composizione chimica delle particelle. Purtroppo non tutte le proprietà possono essere dedotte dalle osservazioni sperimentali con la stessa accuratezza.

1. *La concentrazione numerica* (numero di particelle per unità di volume). Se si conosce l'estinzione o lo scattering prodotti da una singola particella, una semplice misura risulta sufficiente per fornire la concentrazione. Il modo più semplice e comunemente impiegato è la misura del coefficiente di estinzione per ottenere la concentrazione numerica (N) per mezzo dell'equazione 4.3, assumendo il valore di C_{ext} (calcolabile come precedentemente indicato). L'intensità dispersa può essere usata in un modo simile (equazione 3.103). Solitamente questo problema è associato con il problema di determinare la dimensione, che è necessaria inizialmente per conoscere il valore della sezione trasversale C_{ext}.
2. *La dimensione* è il parametro più importante e anche quello più facile da determinare. Per particelle sferiche con diametro $2a$, il parametro dimensionale $x = 2\pi a/\lambda$ è il più importante della teoria. Il metodo migliore impiegato per determinare il diametro della particella dipende dal valore assunto da x. Nella regione di Rayleigh un parametro sensibile a una variazione della dimensione è il rapporto della radiazione dispersa con quella assorbita o estinta. La regione di transizione è più stretta per le sfere dielettriche e la diffrazione anomala non si verifica. Di nuovo l'ampiezza del lobo principale o la dipendenza dell'estinzione da λ sono i criteri migliori. Per grandi particelle l'analisi degli anelli di diffrazione rappresenta il criterio migliore per stimare la dimensione. Se le particelle non sono nel vuoto o in aria, si dovrebbe usare la lunghezza d'onda $\lambda = \lambda_0/m_0$, dove λ_0 è la lunghezza d'onda dell'aria e m_0 è l'indice di rifrazione del mezzo nel quale le particelle sono immerse.
3. *La curva di distribuzione delle dimensioni* solitamente è molto difficile da determinare, specialmente quando sono coinvolti altri parametri incogniti come la forma o la composizione delle particelle. Un tentativo per determinare la distribuzione delle dimensioni può essere effettuato, eseguendo misure molto accurate dello scattering e/o dell'estinzione e confrontando i risultati con calcoli effettuati assumendo diverse funzioni distributive di a. In pratica tale metodo è consigliabile avendo fatto almeno alcuni pre-campionamenti delle dimensioni in modo da rimuovere le particelle che sono molto più piccole o grandi della media. Inoltre un intervallo ristretto di lunghezze d'onde è fortemente raccomandato in quanto delle variazioni di λ hanno più o meno lo stesso effetto di una variazione di a sulla funzione distributiva del parametro $x = 2\pi a/\lambda$.
4. *La forma* di una particella che disperde in un mezzo con un'orientazione casuale solitamente è difficile da determinare. Come esempio si può menzionare il problema degli anelli di diffrazione delle gocce d'acqua o degli aghi di ghiaccio orientati casualmente. La differenza nella distribuzione d'intensità e le posizioni del massimo e

del minimo in funzione delle dimensioni è evidente ma piccola. Tuttavia verifiche sensibili possono essere escogitate in una varietà di modi, specialmente con l'uso della luce polarizzata. Sono stati proposti metodi basati sulla verifica della presenza degli elementi S_3 e S_4 della matrice di scattering [39]. Verifiche simili sono disponibili nel dominio delle microonde. Per esempio un'unità radar che emette e riceve una radiazione polarizzata circolarmente può scoprire un bersaglio solo se esso non è sferico. Problemi di condizioni della superficie sulla particella che diffonde (ruvidità o lucidità) possono essere classificati sotto la categoria "forma". Tale indagine è interessante solo con particelle aventi una dimensione decisamente maggiore della lunghezza d'onda della radiazione con cui interagiscono. La distinzione è abbastanza facile come per esempio la differenza tra una particella "bianca" e una "lucida" (completamente riflettente). In modo analogo è chiaro che una sfera solida di vetro liscia produrrà un effetto arcobaleno, mentre una sfera di vetro con asperità (superficie di vetro smerigliato) non presenterà tale effetto.

5. *L'orientazione* di particelle allungate o che presentano altre forme peculiari, possono essere determinate abbastanza facilmente con metodi sia di scattering sia di estinzione. Risulta necessario calcolare le proprietà di scattering in funzione di diverse orientazioni. Un esempio è la determinazione dell'orientazione delle particelle interstellari osservando l'effetto prodotto dalla polarizzazione interstellare.

5. Calcolo numerico delle grandezze relative allo scattering

5.1 Semplificazione per materiale non assorbente

La nube di polvere che si vuole analizzare in laboratorio è costituita da amido di mais, che è un materiale non conduttivo con un indice di rifrazione $m = 1{,}5$ [62, 63].

Per questo caso particolare si dovrà considera delle sfere costituire da materiale non assorbente (dielettrico), questo significa che la conducibilità elettrica σ è nulla e l'indice di rifrazione m del materiale è una costante reale. Un valore reale dell'indice di rifrazione significa appunto che il materiale risulta non assorbente con:

$$Q_{sca} = Q_{ext} \tag{5.1}$$

In tale condizione tutta la radiazione estinta dalle particelle è quella scatterata (la radiazione non viene assorbita dalle particelle) per cui il fattore di efficienza per l'estinzione eguaglia il fattore di efficienza per lo scattering [39].

Il metodo di calcolo numerico sviluppato in questa sezione (5) permette comunque di risolvere un problema di estinzione per un indice di rifrazione complesso (presenza sia di scattering sia di estinzione). Però nella sezione 6 in cui si discuterà della simulazione delle condizioni di laboratorio l'algoritmo sviluppato verrà applicato principalmente a un materiale con indice di rifrazione solo reale (presenza solo di scattering), per cui vale la relazione 5.1.

5.2 Calcolo delle Funzioni di Bessel

5.2.1 Relazioni di ricorrenza in avanti

Per simulare il nostro sistema è necessario calcolare la concentrazione numerica e quella massica di particelle, misurando l'intensità delle radiazioni I_0 (quando non sono presenti particelle lungo il cammino ottico) e I (quando si disperde la nuvola). Note le intensità si calcolano le concentrazioni tramite le equazioni 4.6 e 4.10. In quest'ultime equazioni, è presente il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, che può essere stimato tramite l'equazione 4.12. Di nuovo per calcolare tale relazione è necessario valutare i coefficienti di Mie (a_n e b_n) che a loro volta richiedono il calcolo delle funzioni di Bessel per ogni valore di n. Per ricavare le funzioni di Bessel si possono usare le seguenti formule di ricorrenza [50]:

Per $n = 0$:

$$\psi_0(x) = \sin x \tag{5.2}$$

$$\psi_0'(x) = \cos x \tag{5.3}$$

$$\chi_0(x) = \cos x \tag{5.4}$$

$$\chi_0'(x) = -\sin x \tag{5.5}$$

Per $n = 1$:

$$\psi_1(x) = \frac{\sin x}{x} - \cos x \tag{5.6}$$

$$\psi_1'(x) = \left(1 - \frac{1}{x^2}\right)\sin x + \frac{\cos x}{x} \tag{5.7}$$

$$\chi_1(x) = \frac{\cos x}{x} + \sin x \tag{5.8}$$

$$\chi_1'(x) = \left(1 - \frac{1}{x^2}\right)\cos x - \frac{\sin x}{x} \tag{5.9}$$

In generale per n:

$$\psi_n(x) = \frac{2n-1}{x}\psi_{n-1}(x) - \psi_{n-2}(x) \tag{5.10}$$

$$\psi_n'(x) = -\frac{n}{x}\psi_n(x) + \psi_{n-1}(x) \tag{5.11}$$

$$\chi_n(x) = \frac{2n-1}{x}\chi_{n-1}(x) - \chi_{n-2}(x) \tag{5.12}$$

$$\chi_n'(x) = -\frac{n}{x}\chi_n(x) + \chi_{n-1}(x) \tag{5.13}$$

Una volta calcolati ψ_n, ψ_n', χ_n, χ_n', si può calcolare ζ_n e ζ_n' con le seguenti relazioni:

$$\zeta_n(x) = \psi_n(x) + i\chi_n(x) \tag{5.14}$$

$$\zeta_n'(x) = \psi_n'(x) + i\chi_n'(x) \tag{5.15}$$

Purtroppo, ripetendo l'uso delle formule di ricorrenza si amplificano gli errori di arrotondamento per cui si deve porre estrema attenzione quando si coinvolgono ordini elevati. Si possono escogitare vari stratagemmi per ovviare a tale problematica:

1. Impiegare le formule di ricorrenza finché gli errori di arrotondamento diventano significativi, valutare le funzioni in questo punto impiegando la loro definizioni sotto forma di serie e poi continuare con le formule di ricorrenza fino a quando il problema si ripete nuovamente.
2. Usare le loro definizioni sotto forma di serie per ricavare il valore di tali funzioni per un ordine elevato e poi impiegare una formula di ricorrenza all'indietro (che è sempre stabile a differenza di quella in avanti).
3. Impiegare un calcolatore con un'aritmetica a doppia o ancora meglio a quadrupla precisione per avere un numero sufficiente di cifre significative all'inizio per poi ottenere un'adeguata precisione per ordini elevati.

5.2.2 Proprietà di convergenza delle funzioni di Bessel

Nel prossimo capitolo (6) si dovrà stimare l'errore delle diverse quantità fornite dalla teoria di Mie e in particolar modo del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, tenendo conto solo di un numero finito di termini nella serie (N). Si stabilirà anche un criterio per scegliere il valore di N (nella sottosezione 5.5.4).

Per capire le proprietà di convergenza dei coefficienti di scattering a_n e b_n è necessario conoscere le principali caratteristiche delle funzioni di Bessel sferiche. Si evidenziano tali proprietà [51].

- La successione descritta dall'equazione ψ_n tende al valore nullo, mentre quella descritta da ζ_n tende a divergere a infinito per valori grandi di n:

$$\lim_{n\to\infty} \psi_n(z) = 0 \tag{5.16}$$

$$\lim_{n\to\infty} \zeta_n(z) = \infty \tag{5.17}$$

- Per $z = x$ reale (dove con x si indica come di consueto il parametro dimensionale), $\psi_n(x)$ e $\zeta_n(x)$ presentano due regimi distinti in funzione del valore assunto da n:

a) *Regime oscillante per* $n < x$. $\psi_n(x)$ e $\zeta_n(x)$ continuano a cambiare il loro segno regolarmente, $|\psi_n(x)|$ e $|\zeta_n(x)|$ sono delimitati da lente variazioni in funzione di n.
b) *Regime esponenziale per* $n > x$. $\psi_n(x)$ diventa esponenzialmente decrescente, mentre $|\zeta_n(x)|$ cresce esponenziale.

Da queste considerazioni, osservando le equazioni 3.71 e 3.72 si conclude che tutte le onde parziali con $n < x$ forniscono un contributo alla serie di Mie e la faranno convergere solo dopo che n entra nel regime esponenziale. Questo è il motivo per cui $\psi_n(x)$ e $\psi_n{}'(x)$ al numeratore vanno molto velocemente a zero e invece $\zeta_n(x)$ e $\zeta_n{}'(x)$ al denominatore vanno a infinito. Dall'altra parte $\psi_n(x)$ e $\psi_n{}'(x)$ appaiono entrambi nel numeratore e al denominatore e perciò sembra che non giochino nessun ruolo nella convergenza.

5.3 Stato dell'arte dei codici per risolvere problemi di scattering

Il calcolo dello scattering della luce da parte di particelle è necessario in un numero molto grande di campi. Nella simulazione delle condizioni di laboratorio, si assume che le particelle siano sfere omogenee e che la luce incidente sia un'onda monocromatica piana.

Mentre la maggior parte delle particelle che diffondono la luce non sono sferiche, così che la soluzione di Mie non potrebbe strettamente applicarsi tuttavia sia l'intuizione sia le evidenze sperimentali indicano che con una media lungo le orientazioni e/o dimensioni, particelle leggermente non sferiche disperdono molto bene come equivalenti particelle sferiche. Questo certamente amplifica enormemente l'utilità della soluzione di Mie [40].

In letteratura [60] ci sono alcune ambiziose tabulazioni di varie quantità di Mie, che sono molto utili soprattutto per verificare i programmi. La rapida oscillazione di molte quantità della teoria di Mie è impossibile da rappresentare in una tabella comprensibile e di conseguenza l'interpolazione di questi dati comporta dei rischi. Inoltre ci sono effetti di risonanza (picchi ripidi) all'interno delle grandezze di Mie la cui scala è molto più fine delle oscillazioni. Per cui lo scattering di Mie è un campo che richiede assolutamente un calcolo tramite il calcolatore. Esistono approssimazioni analitiche della soluzione di Mie che però sono molto limitate nel loro intervallo di applicabilità, inoltre quando sono disponibili hanno la sfortunata tendenza di complicare in realtà ulteriormente le soluzioni stesse.

Il numero di tentativi di calcolo dei parametri di scattering (Mie) tramite l'ausilio del calcolatore, prima della metà degli anni '50, risulta estremamente limitato. Da tale periodo in poi il numero di tentativi nell'implementazione della teoria di Mie al calcolatore iniziò a crescere rapidamente, ma fino alla fine degli anni '60 i calcoli venivano condotti senza capire gli errori computazionali, in particolare dovuti al cattivo condizionamento che si verifica in presenza della cancellazione numerica (sottrazione di due numeri macchina quasi uguali e con almeno uno dei due numeri che sia stato arrotondato) [66] e all'instabilità nelle relazioni di ricorrenza necessarie per valutare le funzioni di Bessel [54].

Si può facilmente individuare casi dove l'implementazione lineare delle soluzioni di Mie porta a seri errori computazionali per x piccoli, dell'ordine di 20-30. Il miglioramento dello sviluppo nelle tecnologie informatiche permise alla fine degli anni '60, il calcolo con valori più elevati di x. Contemporaneamente ci furono anche ulteriori sviluppi sul capire la potenziale instabilità nelle relazioni di ricorrenza in avanti necessarie per calcolare le funzioni di Bessel nella teoria di Mie. La risoluzione di tale problema che divenne uno standard fu l'uso di formule di ricorrenza all'indietro, le quali sono sempre stabili. Alla fine degli anni 60' Dave [54] sviluppa

un algoritmo che diventa una pietra miliare in questo campo, che venne poi significativamente migliorato da Wiscombe [55, 56].

5.4 Caratteristiche di un buon algoritmo

Gli obiettivi specifici che guidano la formulazione di un algoritmo per la simulazione di una nube di particelle illuminate da una radiazione elettromagnetica sono [68]:

- Affidabilità su degli intervalli più ampi possibili del parametro di dimensione x e dell'indice di rifrazione m.
- Stabilità dal punto di vista numerico.
- Portabilità su ogni computer.
- Maggiore accuratezza possibile.
- Maggiore velocità possibile (bassa complessità in tempo).
- Minor utilizzo possibile di memoria (bassa complessità in spazio).

5.5 Calcolo dei coefficienti di Mie con il calcolatore

5.5.1 Calcolo di a_n e b_n

Le formule per descrivere lo scattering, secondo la teoria di Mie, sono fornite in diversi libri (Van De Hulst [39], Kerker [40] Bohren e Huffman [41]), sebbene non sempre nella forma più adatta per essere implementate sul calcolatore (come le formule di ricorrenza riportate nella sottosezione 5.2.1), per cui di seguito verranno forniti delle manipolazioni di tali equazioni in modo da essere efficienti per una simulazione. In modo particolare i coefficienti di Mie possono essere riscritti nella seguente maniera, in modo da eliminare esplicitamente le derivate ψ_n'e ζ_n':

$$a_n = \frac{\left\{\frac{A_n(y)}{m} + \frac{n}{x}\right\}\psi_n(x) - \psi_{n-1}(x)}{\left\{\frac{A_n(y)}{m} + \frac{n}{x}\right\}\zeta_n(x) - \zeta_{n-1}(x)} \tag{5.18}$$

$$b_n = \frac{\left\{mA_n(y) + \frac{n}{x}\right\}\psi_n(x) - \psi_{n-1}(x)}{\left\{mA_n(y) + \frac{n}{x}\right\}\zeta_n(x) - \zeta_{n-1}(x)} \tag{5.19}$$

Dove ψ_n, ζ_n sono di nuovo le funzioni di Bessel-Riccati, x e y sono le dimensioni caratteristiche definite dalle equazioni 3.65 e 3.66, mentre A_n è la derivata logaritmica di ψ_n. Si richiamano le definizioni delle funzioni di Bessel:

$$\psi_n(x) = xj_n(x) \tag{5.20}$$

$$\chi_n(x) = -xy_n(x) \tag{5.21}$$

$$\zeta_n(x) = \psi_n(x) + i\chi_n(x) \tag{5.22}$$

Dove j_n, y_n sono le funzioni di Bessel sferiche. Le funzioni di Bessel-Riccati soddisfano le stesse relazioni di ricorrenza valide per le funzioni di Bessel sferiche equazioni 5.10 e 5.12 a cui si aggiunge la seguente:

$$\zeta_n(x) = \frac{2n-1}{x}\zeta_{n-1}(x) - \zeta_{n-2}(x) \tag{5.23}$$

Inoltre, da una semplice modifica delle precedenti equazioni (5.21 e 5.22) per le funzioni di Bessel sferiche, si trova la relazione chiamata del prodotto incrociato:

$$\psi_n(x) = \frac{\psi_{n-1}(x)\chi_n(x) - 1}{\chi_{n-1}(x)} \tag{5.24}$$

I valori iniziali per innescare la relazione di ricorrenza sono analoghi a quelli riportati nelle equazioni 5.2, 5.4, 5.6 e 5.8 e possono essere riscritti come:

$$\psi_0(x) = \sin x \tag{5.25}$$

$$\chi_0(x) = \cos x \tag{5.26}$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{x}\psi_0(x) - \chi_0(x) \tag{5.27}$$

$$\chi_1(x) = \frac{1}{x}\chi_0(x) + \psi_0(x) \tag{5.28}$$

Bisogna prestare attenzione a calcolare accuratamente ψ_n e ζ_n per le seguenti ragioni:

1. La relazione di ricorrenza in avanti per ψ_n è numericamente instabile (equazione 5.10)
2. La convergenza della serie di Mie dipende dalla rapidità con cui ψ_n decade a zero quando $n \geq x$, con il concomitante aumento di χ_n che forzano i coefficienti a_n e b_n a zero (come descritto nella sottosezione 5.2.2).
3. Fenomeni come la risonanza dipendono dai termini della serie di Mie con $n \geq x$ e perciò sono particolarmente sensibili agli errori in ψ_n o χ_n.

Dave [54] nel suo report impiega delle relazioni in avanti per ζ_n e quindi per ψ_ne χ_n (equazioni 5.10, 5.12 e 5.23) utilizzando un IBM con doppia precisione (14 cifre significative) in modo da minimizzare l'instabilità numerica, cioè la crescita dell'ordine di grandezza di ψ_n al procedere della relazione di ricorrenza. In diverse prove si trova che la relazione di ricorrenza in avanti di ψ_n si deteriora molto più catastroficamente per $n > x$ quando si impiega la singola precisione, perciò è necessario impiegare un'aritmetica a doppia precisione (o ancora meglio a quadrupla precisione, come già accennato in 5.2.1) per raggiungere una accuratezza soddisfacente.

Winscobe [55] ha testato tre schemi possibili per il calcolo di ψ_n (mentre χ_n viene sempre calcolata con una relazione di ricorrenza in avanti in quanto sempre stabile):

1. Relazione di ricorrenza in avanti per ψ_n equazione 5.10.
2. Prodotto incrociato relazione 5.24.
3. Relazione di ricorrenza all'indietro.

Gli schemi 1) e 2) sono quasi sempre accurati come la relazione di ricorrenza all'indietro per $n < x$. Solo quando $n > x$ il risultato prodotto da 1) e da 2) si deteriora e il loro errore cresce in modo monotono con l'aumento di n oltre x. Infatti entrambi gli schemi presentano il loro errore più grande per $n = N$ (ultimo termine della serie). Però la relazione di ricorrenza in avanti 1) risulta sempre più accurata rispetto al prodotto incrociato 2), in quanto l'errore di 1) è da 2 a 4 volte più piccolo rispetto a 2). Inoltre siccome la relazione di ricorrenza in avanti presenta un errore accettabile e la relazione di ricorrenza all'indietro richiede un costo computazionale considerabilmente più grande, un maggiore utilizzo di memoria e rischio di errori di overflow allora lo schema ideale per essere implementato risulta 1).

Ci sono anche valori occasionali per $n < x$ per i quali l'accuratezza di entrambi gli schemi 1) e 2) si riduce. Tali condizioni si verificano inevitabilmente quando ψ_{n-1} presenta diversi ordini di grandezza in meno rispetto ai suoi vicini ψ_{n-2} e ψ_n. In tali condizioni comunque la relazione di ricorrenza in avanti è ancora da preferire all'equazione con il prodotto incrociato e presenta ancora un errore accettabile.

5.5.2 Calcolo di A_n (derivata logaritmica di ψ_n)

La derivata logaritmica di ψ_n si definisce nel seguente modo:

$$A_n(y) \equiv \frac{\psi_n'(y)}{\psi_n(y)} \tag{5.29}$$

Il parametro A_n si può valutare a sua volta tramite la seguente relazione di ricorrenza:

$$A_n(y) = -\frac{n}{y} + \frac{1}{\frac{n}{y} - A_{n-1}(y)} \qquad (n = 2, \dots, N) \tag{5.30}$$

Con il seguente valore iniziale:

$$A_1(y) = -\frac{1}{y} + \frac{\sin y}{\frac{1}{y}\sin y - \cos y} \tag{5.31}$$

Non è necessario conoscere il valore di A_0 perché le serie nella teoria di Mie partono da $n = 1$. L'equazione 5.31 risulta abbastanza ben condizionata e si comporta bene per quasi ogni valore di y. Però se y è un numero complesso sia $\sin y$ sia $\cos y$ possono andare incontro al fenomeno di overflow se $Im(y)$ è grande, ma in tale caso si può evitare il problema sostituendo la relazione 5.31 con la 5.32:

$$A_1(y) = -\frac{1}{y} + \frac{1 - e^{-2iy}}{\frac{1}{y}[1 - e^{-2iy}] - i[1 + e^{-2iy}]} \tag{5.32}$$

Si evidenzia comunque un'instabilità nella relazione di ricorrenza in avanti di A_n quando $Im(y)$ risulta elevato. In tal caso di può impiegare la seguente relazione di ricorrenza all'indietro (equazione 5.33):

$$A_{n-1}(y) = \frac{n}{y} + \frac{1}{\frac{n}{y} + A_n(y)} \qquad (n = N^*, \dots, N, \dots, 2) \tag{5.33}$$

la quale risulta stabile. La relazione 5.33 deve essere innescata tramite l'equazione 5.34:

$$A_{N^*}(y) = 0 \tag{5.34}$$

Dove in principio N^* deve essere molto più grande di $|y|$ ($N^* \gg |y|$), ma un valore sufficientemente elevato può essere trovato dalla relazione 5.35:

$$N^* = 1.1|y| + 1 \tag{5.35}$$

Certamente questo modo di procedere causa il calcolo di un numero di valori di A_n maggiore di quelli realmente necessari nella serie di Mie, siccome $N^* > N$ e possibilmente $N^* \gg N$.

Si evidenza che né la relazione di ricorrenza in avanti (equazione 5.30) né quella all'indietro (equazione 5.33) sono sufficientemente accurate in un'aritmetica a singola precisione ma è necessario applicare almeno la doppia precisione.

5.5.3 Criterio di Stabilità per A_n

Dave [54] e i successivi ricercatori [55] erano consapevoli che la formula di ricorrenza in avanti per A_n (equazione 5.30) potesse fallire ma era poco chiaro esattamente quando tale condizione si verificava, eccetto che $Im(m)$ deve essere significativamente grande e $x \gg 1$ (l'ultima

condizione assicura un numero sufficientemente grande di interazioni in modo che l'instabilità si inneschi e poi si sviluppi).

Per determinare la regione precisa del parametro di dimensione x e dell'indice di rifrazione m in cui la relazione di ricorrenza è soddisfatta, Winscobe [55] ha eseguito un confronto esaustivo tra il risultato esatto di Mie e quello ottenuto impiegando la ricorrenza in avanti per A_n. I risultati esatti di Mie sono generati impiegando la relazione di ricorrenza all'indietro per A_n, la che è sempre stabile. Si considera il fallimento della relazione di ricorrenza in avanti ogni volta che i parametri Q_{ext}, Q_{sca}, ecc presentano un errore relativo superiore di 10^{-6}.

Il calcolo è stato strutturato da Winscobe [55] nella forma di una ricerca in avanti per determinare il valore più piccolo m_{Im} per un fissato m_{Re} e x, tale per cui la relazione di ricorrenza all'indietro per A_n (equazione 5.30) fallisce. Infatti studi preliminari [54] mostrano che quando si verifica il fallimento per $m_{Im} = m_{Im}^{crit}$ esso continua per tutti i successivi valori di m_{Im} ($m_{Im} > m_{Im}^{crit}$).

Dalle analisi diventa evidente che per un fissato m_{Re}, come il valore di x aumenta il parametro xm_{Im}^{crit} rapidamente si avvicina (partendo da valori piccoli) a un asintoto. Perciò xm_{Im}^{crit} deve essere una funzione solo di m_{Re} ($f(m_{Re})$):

$$xm_{Im}^{crit} \geq \min_{x}\left(xm_{Im}^{crit}\right) \equiv f(m_{Re}) \tag{5.36}$$

La diseguaglianza nei fatti diventa approssimativamente un'eguaglianza se si considera l'intero campo di variazione del parametro x. I valori limite dei valori di m_{Im} sono riportati nella figura 5.1:

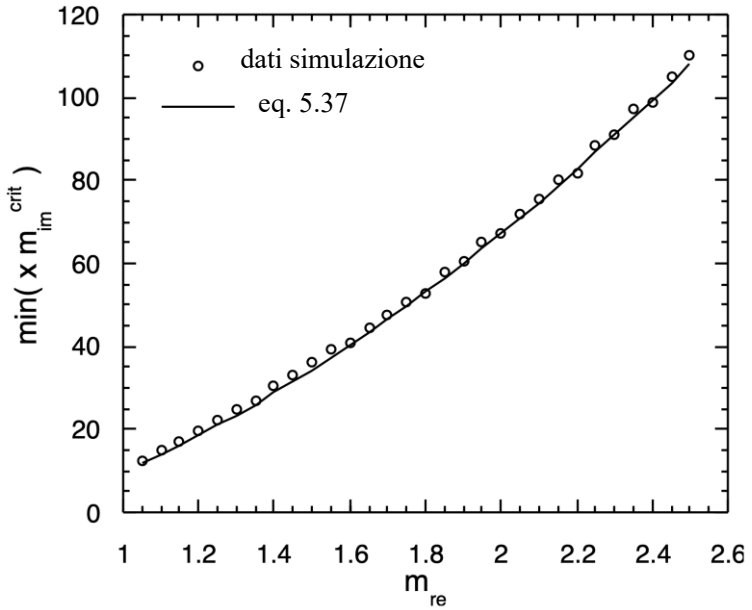

Figura 5.1 - Rappresentazione dei valori critici di m_{Im} in funzione di m_{Re} (da Winscombe [55] con modifiche).

Risulta evidente dalla figura 1 che $f(m_{Re})$ presenta una curvatura verso l'alto, infatti una linea retta non fornisce un'adeguata corrispondenza dei dati. Perciò Winscobe [55] decide di approssimare i dati con una funzione quadratica e successivamente di sottrarre 1 dal termine costante in modo che la funzione venisse posta al di sotto dei punti sperimentali, in questo modo

si è sicuri di ottenere dei valori di m_{Im} che garantiscano la stabilità del metodo. La funzione approssimante i dati è l'equazione 5.37 ed è rappresentata in figura 5.1.

$$f(m_{Re}) = 16.35{m_{Re}}^2 + 8.42m_{Re} - 15.04 \tag{5.37}$$

Dall'equazione 5.36 si deduce che la relazione di ricorrenza in avanti può essere usata per A_n se:

$$xm_{Im} < f(m_{Re}) \tag{5.38}$$

altrimenti si dovrebbe usare la relazione ricorrenza all'indietro. Tale criterio che riguarda l'inizio dell'instabilità numerica, dipende dall'aritmetica del calcolatore usata, sebbene probabilmente non è così sensibile. Inoltre essendo solo una relazione empirica essa potrebbe fallire per valori di m_{Re} che sono molto più grandi di 2.5 (il valore più grande testato), cioè quando si considera valori al di fuori dell'intervallo in cui si è regredito i dati (in quanto si estrapolerebbe fuori dal campo di analisi dei dati). Per esempio tale condizione si verifica per l'acqua quando è investita da una radiazione nel campo delle microonde.

Si sono condotte altre verifiche in questo campo e si è scoperto che la relazione di ricorrenza all'indietro dovrebbe sempre essere usata per $m_{Re} < 1$ o $m_{Re} > 10$ [56].

5.5.4 Numero di termini nelle serie di Mie

Un criterio idoneo per fermare la somma dei termini nella serie di Mie è stato proposto da Dave [54] e consiste nel troncare la sommatoria al primo valore di n per il quale si verifichi la condizione riportata nell'equazione 5.39:

$$|a_n|^2 + |b_n|^2 < 10^{-14} \tag{5.39}$$

Tale criterio permette di ottenere almeno 6 cifre significative nel risultato finale. La relazione 5.39 è stata impiegata per diversi anni ma oggi è stata abbandonata in modo da ottenere dei programmi più veloci. Ci sono altre due ragioni per cui si è deciso di non impiegare più tale criterio.

- Il "numero magico" 10^{-14} non può essere applicato a computer aventi un'aritmetica di macchina diversa dalla doppia precisione. A sostegno di questo si evidenzia il fatto che la relazione di ricorrenza in avanti per ψ_n (equazione 5.10), la quale dovrebbe raggiungere il valore di zero per $n \geq x$, dovendo essere la causa principale della convergenza delle serie di Mie, in realtà diventa rapidamente instabile in vicinanza del punto in cui il criterio 5.39 viene soddisfatto.
- Sebbene si utilizzi un'aritmetica con la stessa precisione il criterio 5.39 sporadicamente fallisce in calcoli medio-lunghi, solitamente per $x > 800$. Un esame più attento di tali casi rileva che il fallimento è causato dal secondo membro dell'equazione 5.39, ma non sotto alcuni bassi livelli (esempio $5 \cdot 10^{-14}$). Ulteriori indagini mostrano che la convergenza viene tuttavia soddisfatta in tali casi e il test 5.39 semplicemente sbaglia nel riconoscerlo.

Per questa ragione nei moderni codici per il calcolo dei coefficienti di Mie il criterio 5.38 viene sostituito da una stima a priori di N, cioè del numero di termini coinvolti nelle serie di Mie. Winscombe [55] determina il valore di N per un ampio intervallo del parametro di dimensione $0.1 \leq x \leq 20000$ e indici di rifrazione $\{1.05 \leq m_{Re} \leq 2.50; 0 \leq m_{Im} \leq 1\}$ usando il criterio 5.38 con a secondo membro sia $5 \cdot 10^{-14}$ sia 10^{-14} in modo da ottenere un intervallo $[N_{min}, N_{max}]$ di valori di N per ogni parametro di dimensione. La figura 5.2 e la figura 5.3

rappresentano i valori di N_{min} e N_{max} per un intervallo di valori da $0 < x < 100000$ e da $0 < x < 25000$.

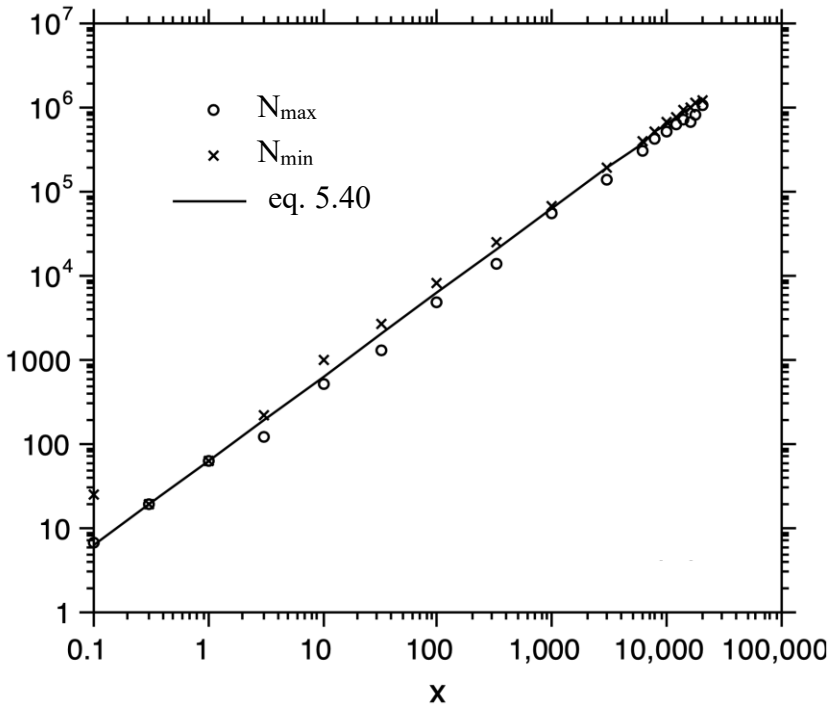

Figura 5.2 - L'intervallo [N_{min}, N_{max}] di numero di termini nella serie di Mie, in funzione del parametro x. L'intervallo è stato determinato variando Re(m) da 1.05 a 2.5 e Im(m) da 0 a 1 in piccoli passi. Si enfatizzano piccoli valori del parametro dimensionale (da Winscombe [55] con modifiche).

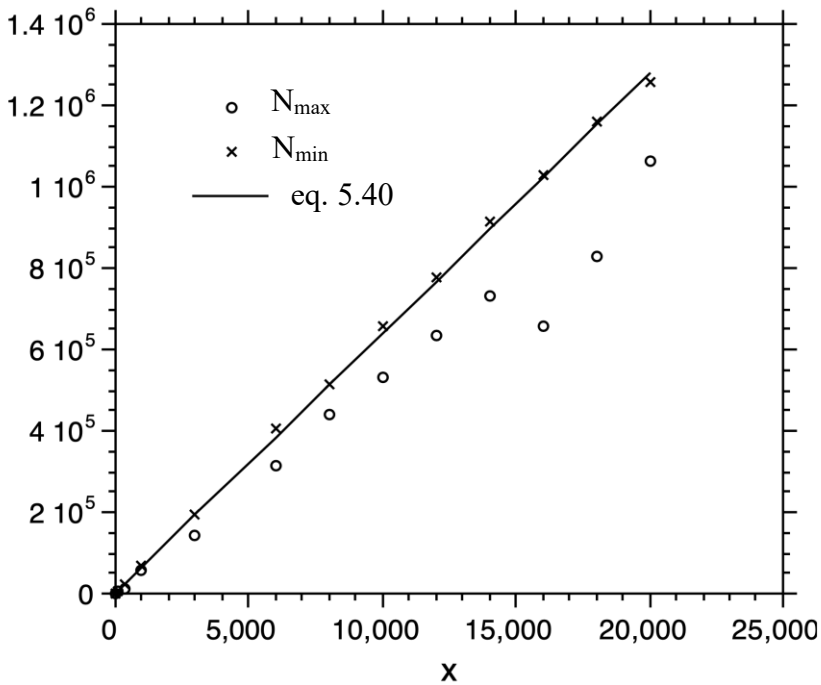

Figura 5.3 - L'intervallo [N_{min}, N_{max}] di numero di termini nella serie di Mie, in funzione del parametro x. L'intervallo è stato determinato variando Re(m) da 1.05 a 2.5 e Im(m) da 0 a 1 in piccoli passi. Si enfatizzano grandi valori del parametro dimensionale (da Winscombe [55] con modifiche).

Risulta immediatamente evidente che N esibisce solo una debole dipendenza dall'indice di rifrazione. Questo conferma quanto si è detto prima su ψ_n e χ_n, che sono funzioni solo di x, essendo il primo controllo di convergenza. Siccome ψ_n decresce rapidamente per $n > x$ (in quanto si entra nel regime esponenziale), risulta chiaro perché $N \sim x$ è una buona approssimazione.

Diversi autori hanno suggerito [52], su base teorica, la seguente forma funzionale per N:

$$N = x + c \cdot x^{1/3} \tag{5.40}$$

Si è trovato che la modifica dell'equazione 5.40, nell'equazione 5.41 descrive particolarmente bene i dati numerici nella stima di N_{max}.

$$N_{max} = \begin{cases} x + 4x^{1/3} + 1 & 0.02 \leq x \leq 8 \\ x + 4.05x^{1/3} + 2 & 8 < x \leq 4200 \\ x + 4x^{1/3} + 2 & 4200 < x \leq 20000 \end{cases} \tag{5.41}$$

La relazione 5.41 fornisce una corrispondenza quasi perfetta a 135 valori di N_{max} che sono stati generati da Winscombe [55].

5.6 Equazioni implementate nel codice di Matlab

Uno degli obiettivi di questa tesi è produrre un programma affidabile, con le formule implementate ben condizionate e con un codice accuratamente testato.

Il codice è scritto in linguaggio Matlab. Forniti in input: la lunghezza della radiazione elettromagnetica utilizzata (λ), il raggio della particella (a), l'indice di rifrazione del mezzo (m), il cammino ottico della radiazione (l), la densità del materiale che costituisce le particelle (ρ), permette di calcolare i coefficienti di scattering di Mie (a_n e b_n), il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), il fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) e il fattore di efficienza per l'assorbimento (Q_{abs}). Vengono rappresentate graficamente la concentrazione numerica (N) e quella massica (C_m) in funzione della trasmittanza (T). Inoltre vengono diagrammati come variano i fattori di efficienza (Q_{ext}, Q_{sca}, Q_{abs}) in funzione del parametro di dimensione (x).

Nell'implementazione del programma si decide di calcolare i coefficienti di Mie nella forma riportata nelle equazioni 3.71 e 3.72. Le funzioni di Bessel invece si scrivono nella seguente forma [50]:

$$\psi_n(z) = x j_n(z) \tag{5.42}$$

$$\zeta_n(z) = z[j_n(z) - i y_n(z)] \tag{5.43}$$

Le derivate $\psi_n{}'(z)$ e $\zeta_n{}'(z)$ possono essere calcolate dalle funzioni $j_n(z)$ e $y_n(z)$:

$$\psi_n{}'(z) = z j_{n-1}(z) - n j_n(z) \tag{5.44}$$

$$\zeta_n{}'(z) = x[j_{n-1}(z) - i y_{n-1}(z)] - n[j_n(z) - i y_n(z)] \tag{5.45}$$

Per ricavare tali equazioni si usano le seguenti formule di ricorrenza.

Per $n = 0$:

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \tag{5.46}$$

$$j_0'(z) = \frac{\cos z}{z} - \frac{\sin z}{z^2} \tag{5.47}$$

$$y_0(z) = -\frac{\cos z}{z} \tag{5.48}$$

$$y_0'(z) = \frac{\cos z}{z^2} + \frac{\sin z}{z} \tag{5.49}$$

Per $n = 1$:

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} \tag{5.50}$$

$$j_1'(z) = \frac{2\cos z}{z^2} + \frac{\sin z}{z} - \frac{2\sin z}{z^3} \tag{5.51}$$

$$y_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \tag{5.52}$$

$$y_1'(z) = \frac{2\cos z}{z^3} - \frac{\cos z}{z} + \frac{2\sin z}{z^2} \tag{5.53}$$

In generale per n valgono le seguenti formule di ricorrenza:

$$j_n(z) = \frac{2n-1}{z} j_{n-1}(z) - j_{n-2}(z) \tag{5.54}$$

$$y_n(z) = \frac{2n-1}{z} y_{n-1}(z) - y_{n-2}(z) \tag{5.55}$$

Dai valori calcolati al passo n-esimo applicando le relazioni 5.42-5.43-5.44-5.45 si perviene ai valori di $\psi_n(z)$, $\psi_n{}'(z)$, $\zeta_n(z)$, $\zeta_n{}'(z)$. In realtà siccome Matlab fornisce delle routine per il calcolo delle funzioni di Bessel $J_{n+0.5}(z)$ e $Y_{n+0.5}(z)$, il problema si semplifica e basta implementare le seguenti formule per $n = 1, \dots, N_{max}$ (combinando le relazioni 3.60-3.61 con le relazioni 5.44-5.45):

$$\psi_n(z) = z\sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+0.5}(z) \tag{5.56}$$

$$\zeta_n(z) = z\left[\sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+0.5}(z) - i\sqrt{\frac{\pi}{2z}} Y_{n+0.5}(z)\right] \tag{5.57}$$

$$\psi_n{}'(z) = z\sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n-0.5}(z) - n\sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n-0.5}(z) \tag{5.58}$$

$$\begin{aligned}\zeta_n{}'(z) = z&\left[\sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n-0.5}(z) - i\sqrt{\frac{\pi}{2z}} Y_{n-0.5}(z)\right] \\ &- n\left[\sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+0.5}(z) - i\sqrt{\frac{\pi}{2z}} Y_{n+0.5}(z)\right]\end{aligned} \tag{5.59}$$

Dove N_{max} viene valutato con il criterio 5.41, Q_{ext} con l'equazione 3.94 = 4.12, Q_{sca} con l'equazione 3.101., $Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sca}$, la concentrazione numerica con l'equazione 4.6 e infine la concentrazione massica con la relazione 4.10.

6. Simulazione dell'estinzione di una nube di polvere

6.1 Verifica del codice

Prima di procedere alla simulazione del sistema in esame (misura della concentrazione di una nube di polvere all'interno del tubo di Hartman) è necessario verificare che i coefficienti e le grandezze calcolate dal programma siano corrette. Pertanto si è deciso di confrontare i coefficienti a_n, b_n, Q_{ext}, Q_{sca}, Q_{abs} valutati dal programma con quelli prodotti da codici scritti da altri autori [53, 54]. In particolare si decide di effettuare il confronto inizialmente con quello scritto in linguaggio Matlab da Matzler [53].

6.1.1 Calcolo degli errori

Si valuta come variano gli errori relativi per il coefficiente a_n, il coefficiente b_n, il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, il fattore di efficienza per lo scattering Q_{sca} e nei casi di particella assorbente anche per il fattore di efficienza per l'assorbimento Q_{abs}. Le grandezze a_n e b_n nel programma sono memorizzate in due vettori contenenti appunto i valori di tali grandezze per ogni indice n, l'errore relativo massimo viene calcolato con [67]:

$$E_{a_n,r} = \frac{\left\|\boldsymbol{a_n} - \boldsymbol{a_{n,esatto}}\right\|_\infty}{\left\|\boldsymbol{a_{n,esatto}}\right\|_\infty} \tag{6.1}$$

$$E_{b_n,r} = \frac{\left\|\boldsymbol{b_n} - \boldsymbol{b_{n,esatto}}\right\|_\infty}{\left\|\boldsymbol{b_{n,esatto}}\right\|_\infty} \tag{6.2}$$

Dove $\boldsymbol{a_n}$ e $\boldsymbol{b_n}$ sono i coefficienti calcolati dal programma scritto per questa tesi, mentre $\boldsymbol{a_{n,esatto}}$ e $\boldsymbol{b_{n,esatto}}$ sono quelli calcolati dal programma sviluppato da Matzler [53] e considerati corretti. Mentre con $\|\boldsymbol{w}\|_\infty$ si definisce la norma infinito del vettore $\boldsymbol{w}$, cioè il massimo dei valori assoluti delle sue componenti:

$$\|\boldsymbol{w}\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} |w_i| \tag{6.3}$$

Dove con $\boldsymbol{w}$ si indica un generico vettore. Mentre nel caso dei fattori di efficienza, essendo grandezze scalari l'errore relativo si ottiene sostituendo la norma con il valore assoluto:

$$E_{Q_k,r} = \frac{\left|Q_k - Q_{k,esatto}\right|}{\left|Q_{k,esatto}\right|} \tag{6.4}$$

Con Q_k si indica un generico fattore di efficienza (Q_{ext}, Q_{sca} o Q_{abs}).

6.1.2 Confronto con Matzler

Si confrontano i valori restituiti dai due programmi per un indice di rifrazione (m) particolare, al variare del parametro caratteristico (x). Si è deciso di iniziare le simulazioni confrontando i risultati che si ottengono per indici di rifrazioni reali per poi procedere con gli indici di rifrazioni complessi. I risultati riportati in questa sottosezione sono stati ottenuti con il programma *verifica_codice* riportato in Appendice.

Si parte dall'indice di rifrazione dell'amido di mais $m = 1.5$ (utilizzato in laboratorio):

Tabella 6.1 - Errori relativi commessi nel calcolo dei coefficienti di Mie (a_n e b_n), del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) e del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 1,5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53]. Questo è il caso rappresentante come polvere l'amido di mais.

x	$E_{a_n,r}$	$E_{b_n,r}$	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$
0,001	1,71E-15	8,25E-09	2,31E-13	3,06E-15	2,31E-13	3,28E-15
0,01	2,70E-16	3,05E-11	2,31E-09	5,38E-16	2,31E-09	8,96E-16
0,1	1,11E-15	7,85E-13	2,31E-05	2,05E-15	2,31E-05	2,20E-15
1	5,43E-16	3,87E-14	2,15E-01	9,03E-16	2,15E-01	7,74E-16
10	4,77E-15	6,40E-15	2,88E+00	1,54E-16	2,88E+00	1,54E-16
100	6,03E-14	2,31E-14	2,09E+00	0,00E+00	2,09E+00	0,00E+00
1000	4,90E-14	1,07E-13	2,01E+00	0,00E+00	2,01E+00	0,00E+00
10000	9,66E-12	3,07E-13	2,00E+00	0,00E+00	2,00E+00	0,00E+00
100000	3,96E-12	2,62E-12	2,00E+00	1,35E-14	2,00E+00	1,35E-14

Per $m = 50$:

Tabella 6.2 - Errori relativi commessi nel calcolo dei coefficienti di Mie (a_n e b_n), del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) e del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 50. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53].

x	$E_{a_n,r}$	$E_{b_n,r}$	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$
0,001	4,66E-16	9,15E-13	2,66E-12	6,07E-16	2,66E-12	7,59E-16
0,01	3,18E-16	6,22E-14	2,66E-08	4,97E-16	2,66E-08	4,97E-16
0,1	3,26E-16	9,30E-16	2,98E-04	1,09E-15	2,98E-04	9,10E-16
1	3,27E-16	1,98E-16	1,92E+00	3,46E-16	1,92E+00	4,62E-16
10	3,36E-15	3,88E-16	2,05E+00	0	2,05E+00	0
100	3,32E-14	2,09E-14	2,03E+00	0	2,03E+00	2,19E-16
1000	8,57E-14	1,01E-14	1,99E+00	0	1,99E+00	0
10000	5,07E-13	4,90E-13	2,00E+00	0	2,00E+00	0
100000	2,36E-11	7,37E-13	2,00E+00	8,66E-15	2,00E+00	8,66E-15

Per $m = 200$:

Tabella 6.3 - Errori relativi commessi nel calcolo dei coefficienti di Mie (a_n e b_n), del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) e del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 200. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53].

x	$E_{a_n,r}$	$E_{b_n,r}$	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$
0,001	3,10E-16	8,61E-14	2,67E-12	6,06E-16	2,67E-12	6,06E-16
0,01	3,18E-16	1,50E-15	2,79E-08	7,11E-16	2,79E-08	7,11E-16
0,1	4,85E-16	7,17E-16	3,43E-04	3,16E-16	3,43E-04	6,32E-16
1	2,95E-16	2,96E-16	1,98E+00	4,47E-16	1,98E+00	5,59E-16
10	3,38E-15	2,62E-16	2,06E+00	0	2,06E+00	0
100	8,18E-15	4,95E-16	2,01E+00	0	2,01E+00	0
1000	8,48E-14	8,71E-15	2,00E+00	1,11E-16	2,00E+00	1,11E-16
10000	2,19E-13	9,04E-15	2,00E+00	0	2,00E+00	0
100000	6,56E-12	3,10E-13	2,00E+00	2,22E-16	2,00E+00	4,44E-16

Per $m = 1.30 - 1.27i$:

Tabella 6.4 - Errori relativi commessi nel calcolo dei coefficienti di Mie (a_n e b_n), del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) e del fattore di efficienza per l'assorbimento (Q_{abs}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 1.30-1,27i. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53].

x	$E_{a_n,r}$	$E_{b_n,r}$	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$	Q_{abs}	$E_{Q_{abs},r}$
0,001	4,75E-16	2,44E-09	2,60E-03	1,67E-16	2,06E-12	5,88E-16	2,60E-03	0,00E+00
0,01	1,83E-16	3,23E-11	2,60E-02	1,33E-16	2,06E-08	0,00E+00	2,60E-02	0,00E+00
0,1	1,03E-15	4,67E-13	2,63E-01	4,22E-16	2,07E-04	1,70E-15	2,63E-01	0,00E+00
1	5,15E-16	1,30E-14	2,75E+00	1,61E-16	8,84E-01	1,26E-16	1,87E+00	5,47E-15
10	1,33E-14	4,24E-15	2,47E+00	0,00E+00	1,47E+00	1,52E-16	1,00E+00	0,00E+00
100	1,21E-15	5,09E-16	2,10E+00	2,11E-16	1,36E+00	1,63E-16	7,39E-01	0,00E+00
200	8,06E-16	1,03E-15	2,06E+00	0,00E+00	1,35E+00	0	7,17E-01	0,00E+00
300	9,86E-16	6,84E-16	2,05E+00	0,00E+00	1,34E+00	0	7,10E-01	0,00E+00
400	8,16E-16	5,95E-16	2,04E+00	0,00E+00	1,33E+00	0	7,06E-01	0,00E+00
500	7,82E-16	7,06E-16	2,03E+00	0,00E+00	1,33E+00	1,67E-16	7,04E-01	0,00E+00

Per $m = 50 - 50i$:

Tabella 6.5 - Errori relativi commessi nel calcolo dei coefficienti di Mie (a_n e b_n), del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) e del fattore di efficienza per l'assorbimento (Q_{abs}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 50-50i. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53].

x	$E_{a_n,r}$	$E_{b_n,r}$	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$	Q_{abs}	$E_{Q_{abs},r}$
0,001	3,32E-16	1,26E-12	3,07E-06	2,26E-13	2,67E-12	4,54E-16	3,07E-06	2,25E-13
0,01	3,73E-16	3,22E-14	6,89E-04	1,73E-15	2,67E-08	7,44E-16	6,89E-04	2,83E-15
0,1	4,60E-16	2,46E-15	4,86E-02	4,28E-15	3,05E-04	1,78E-16	4,83E-02	4,02E-15
1	2,67E-16	2,13E-16	2,14E+00	2,07E-16	2,04E+00	4,35E-16	1,00E-01	0,00E+00
10	3,48E-15	3,62E-16	2,09E+00	2,12E-16	2,04E+00	0	5,85E-02	0,00E+00

Per $m = 200 - 200i$:

Tabella 6.6 - Errori relativi commessi nel calcolo dei coefficienti di Mie (a_n e b_n), del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) e del fattore di efficienza per l'assorbimento (Q_{abs}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 200-200i. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53].

x	$E_{a_n,r}$	$E_{b_n,r}$	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$	Q_{abs}	$E_{Q_{abs},r}$
0,001	3,19E-16	5,22E-14	1,08E-05	6,14E-14	2,67E-12	3,03E-16	1,08E-05	6,48E-14
0,01	3,92E-16	1,27E-14	6,74E-03	5,02E-15	2,78E-08	3,57E-16	6,73E-03	5,92E-15
0,1	3,10E-16	2,27E-16	1,46E-02	1,90E-15	3,25E-04	0	1,43E-02	6,92E-15
1	2,05E-16	3,84E-16	2,06E+00	2,15E-16	2,04E+00	0	2,53E-02	0,00E+00

Per analizzare con spirito critico i dati è necessario introdurre il concetto di precisione di macchina (ϵ_m), in modo da capire il massimo errore commesso dal calcolatore [66].

$$\epsilon_m = \frac{1}{2} N^{1-t} = \frac{1}{2} 2^{1-53} = 1.1102 \cdot 10^{-16} \tag{6.5}$$

Dove $N = 2$ è il sistema di numerazione impiegato dal computer (binario), $t = 53$ è il numero di cifre impiegate dalla mantissa in Matlab (doppia precisione). Si osserva che 53 cifre per la mantissa in base 2 corrispondono a circa 16 cifre per la mantissa in base 10. La precisione di macchina è una costante caratteristica di ogni aritmetica floating-point. Tale grandezza rappresenta il massimo errore che si commette quando si approssima un numero reale (e) con il corrispondente numero macchina ($\bar{e}$). In modo particolare due quantità e_1 ed e_2 si definiscono equivalenti nell'aritmetica del calcolare quando, valutate dal calcolatore stesso, forniscono risultati che differiscono per una tolleranza relativa dell'ordine della precisione di macchina ϵ_m o minore, cioè quando:

$$\frac{|\bar{e_1} - \bar{e_2}|}{|\bar{e_1}|} \approx \epsilon_m \; oppure \; \frac{|\bar{e_1} - \bar{e_2}|}{|\bar{e_2}|} \approx \epsilon_m \tag{6.6}$$

Da tali considerazioni ne consegue che ϵ_m rappresenta la massima precisione relativa di calcolo raggiungibile: non ha senso cercare di determinare approssimazioni con precisione relativa inferiore a ϵ_m. Con tali concetti si può procedere all'analisi dei dati.

Le tabelle 6.1, 6.2 e 6.3 contengono i dati raccolti impiegando un indice di rifrazione reale, cioè simulando delle particelle non assorbenti. In accordo con l'equazione 5.1, la quantità di radiazione che viene estinta è pari a quella dispersa. Infatti, si osserva dalle tabelle che $Q_{ext} = Q_{sca}$, perciò la radiazione assorbita risulta nulla ($Q_{abs} = 0$) e quest'ultima quantità non viene quindi riportata. Visionando gli errori relativi per i coefficienti di estinzione ($E_{Q_{ext},r}$) e di scattering ($E_{Q_{sca},r}$) si evince che risultano molto bassi e quasi sempre dell'ordine di 10^{-16}. Tale quantità presenta come ordine di grandezza quella della precisione di macchina, che è appunto la massima precisione che si può raggiungere dal calcolatore. Solo in sporadiche occasioni si raggiungono dei valori più alti pari a 10^{-15} o al più 10^{-14}, in caso di valori del parametro di dimensione molto piccolo ($x = 0{,}001$) oppure molto grande ($x = 100000$), i quali sono appunto i casi dal punto di vista numerico più complessi da trattare.

Per quanto riguarda invece i coefficienti di Mie (a_n e b_n), si osserva che in questo caso gli errori sono quasi sempre molto bassi ma più grandi di 10^{-16}. In particolare i valori degli errori $E_{a_n,r}$ e $E_{b_n,r}$ crescono all'aumentare del parametro x, ma non superano in nessun caso il valore di 10^{-11}. Inoltre si osserva che sempre per bassi valori di x e in particolare per valori piccoli dell'indice di rifrazione m (tabella 6.1) l'errore nel calcolo del coefficiente b_n risulta maggiore di quello commesso per a_n, mentre per alti valori di x, la situazione si inverte. In particolare si raggiunge un errore massimo dell'ordine di 10^{-11} che pur essendo maggiore della precisione di macchina risulta comunque ancora accettabile.

Le tabelle 6.4, 6.5 e 6.6 contengono i dati raccolti impiegando un indice di rifrazione complesso, cioè si sta simulando questa volta delle particelle che disperdono e assorbono della radiazione elettromagnetica per cui non vale più l'equazione 5.1 ma l'equazione 2.20. In accordo con la relazione 2.20, la quantità di radiazione che viene estinta è pari alla somma di quella dispersa e di quella assorbita. Infatti il programma scritto per questa tesi calcola direttamente Q_{ext} e Q_{sca} tramite le equazioni 3.94 = 4.12 e 3.101 e successivamente Q_{abs} tramite la relazione 6.7:

$$Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sca} \tag{6.7}$$

Naturalmente per questo insieme di tabelle viene riportato anche Q_{abs}.

Osservando gli errori relativi per i coefficienti di estinzione ($E_{Q_{ext},r}$), di scattering ($E_{Q_{sca},r}$) e di assorbimento ($E_{Q_{abs},r}$) si evince, come in precedenza, che risultano molto bassi e quasi sempre dell'ordine di 10^{-16} (ordine di grandezza di ϵ_m). Solo in sporadiche occasioni si raggiugono dei valori più alti pari a 10^{-15}, 10^{-14} o anche di 10^{-13} nel caso di bassi valori del parametro dimensionale (x) e con grandi valori dell'indice di rifrazione m (tabelle 6.5 e 6.6).

Per quanto riguarda invece l'errore relativo riferito al coefficiente a_n ($E_{a_n,r}$) risulta sempre basso e con un ordine di grandezza pari a 10^{-16}. Mentre per b_n l'errore $E_{b_n,r}$ risulta anch'esso basso e dell'ordine di 10^{-16}, per alti valori di x, mentre per bassi valori di x l'errore raggiunge anche un valore massimo di 10^{-9} (per $x = 0{,}001$ e $m = 1.30 - 1.27i$), che come in precedenza, pur essendo maggiore della precisione di macchina risulta comunque ancora accettabile.

Si sottolinea che nel caso di particelle assorbenti radiazione elettromagnetica (come la polvere di un metallo) cioè aventi un indice di riflessione complesso (valori riportati in tabelle 4, 5 e 6),

il calcolo dei parametri di Mie (a_n e b_n) e di conseguenza dei fattori di efficienza (Q_{ext}, Q_{sca} e Q_{abs}) risulta impossibile a causa di problemi numerici che sorgono nei calcoli, i quali restituiscono dei valori pari a NaN (Not a Number), dovuti al tentativo di eseguire operazioni non permesse (senza significato) nell'algoritmo (come 0/0 inf/inf, ecc). Inoltre si può osservare che il valore critico di x tale per cui l'algoritmo diventa instabile diminuisce all'aumentare dei valori assoluti della parte reale e immaginaria dell'indice di riflessione complesso (m). Tale problematica avviene solo in caso di indici di riflessione aventi parte immaginaria. Questo fenomeno viene sottolineato anche da Matzler [53], affermando che nascono problemi per alti valori di m.

Tale situazione si verifica certamente per le sfere metalliche, per esempio se $m = 50 - 50i$, il massimo valore del parametro dimensionale in cui l'algoritmo fornisce un risultato è circa 13 e questo valore diminuisce all'aumentare di m. Tale difficoltà nel calcolo in queste situazioni è spiegata dalla grande differenza del campo elettrico alla superficie della sfera e all'interno all'aumentare dell'indice di rifrazione. Il fenomeno si può osservare in figura 6.1 in cui si rappresenta la repentina variazione del quadrato del modulo del vettore campo elettrico.

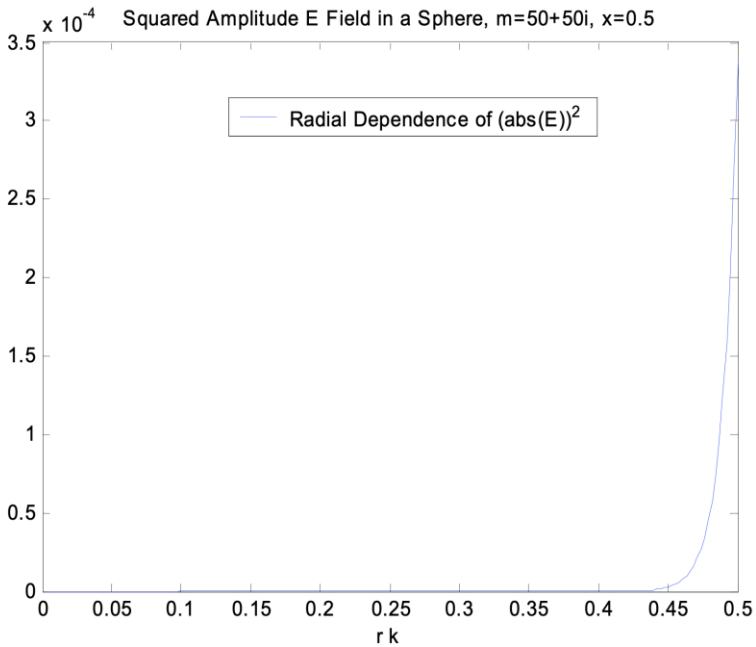

Figura 6.1 - Variazione radiale del rapporto tra i quadrati dei moduli dei vettori campo elettrico interni/esterni per una sfera con indice di rifrazione m=50-50i e parametro di dimensione x=0,5. L'effetto di pelle è chiaramente indicato dalla concentrazione del campo elettrico in vicinanza della superficie della sfera (da Mazler [53]).

Si riportano in figura 6.2 e in figura 6.3 gli errori relativi nel calcolo dei coefficienti di Mie (a_n e b_n) in funzione dell'ordine n, per $x = 100$ e $m = 1.5$ (caso molto simile a quello che si incontra in laboratorio). Si osserva che per il coefficiente a_n (figura 6.2), l'errore risulta basso intorno a $10^{-15}/10^{-16}$ per poi salire solo per un valore di n intermedio a circa $6 \cdot 10^{-14}$, tale valore è infatti il massimo errore relativo che si commette nel calcolo di tale coefficiente ed è quello riportato in tabella 6.1 per $x = 100$.

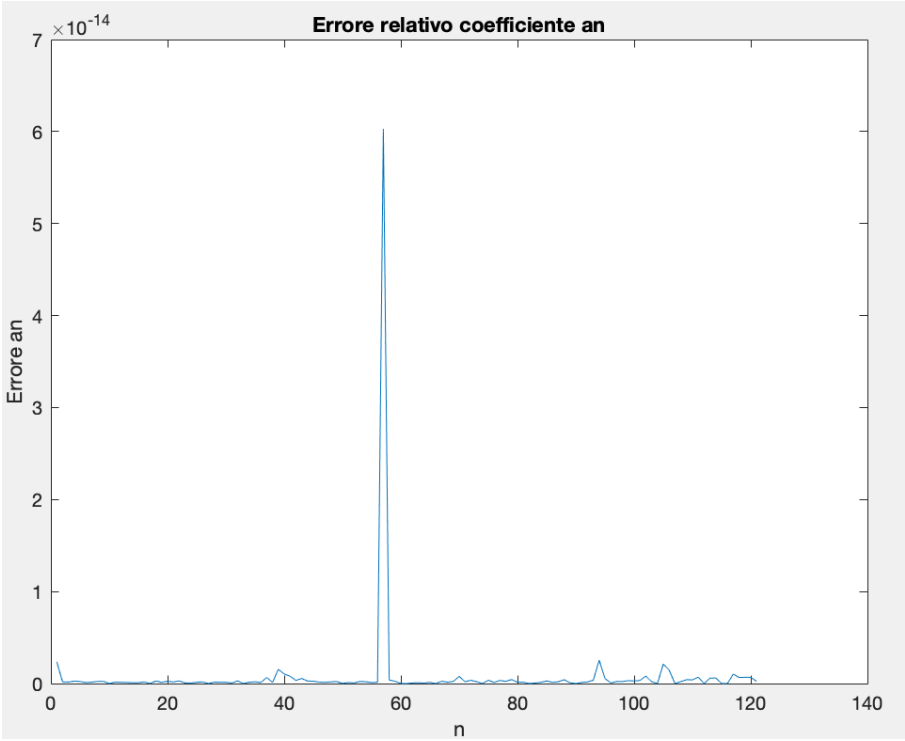

Figura 6.2 - Errori relativi commessi nel calcolo del vettore contenente i coefficienti di Mie a_n, al variare dell'indice n, per il parametro dimensionale x = 100 e per un indice di rifrazione m = 1.5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Mazler [53].

Anche nel caso di b_n(figura 6.3), l'errore risulta basso intorno a $10^{-15}/10^{-16}$ con alcuni picchi dell'ordine di 10^{-14} per valori di n pari a circa 40, 80 e 105. In modo particolare per $n = 105$ si osserva l'errore relativo massimo con cui si calcola tale coefficiente pari a circa $2{,}4 \cdot 10^{-14}$ ed è quello riportato in tabella 6.1 per $x = 100$.

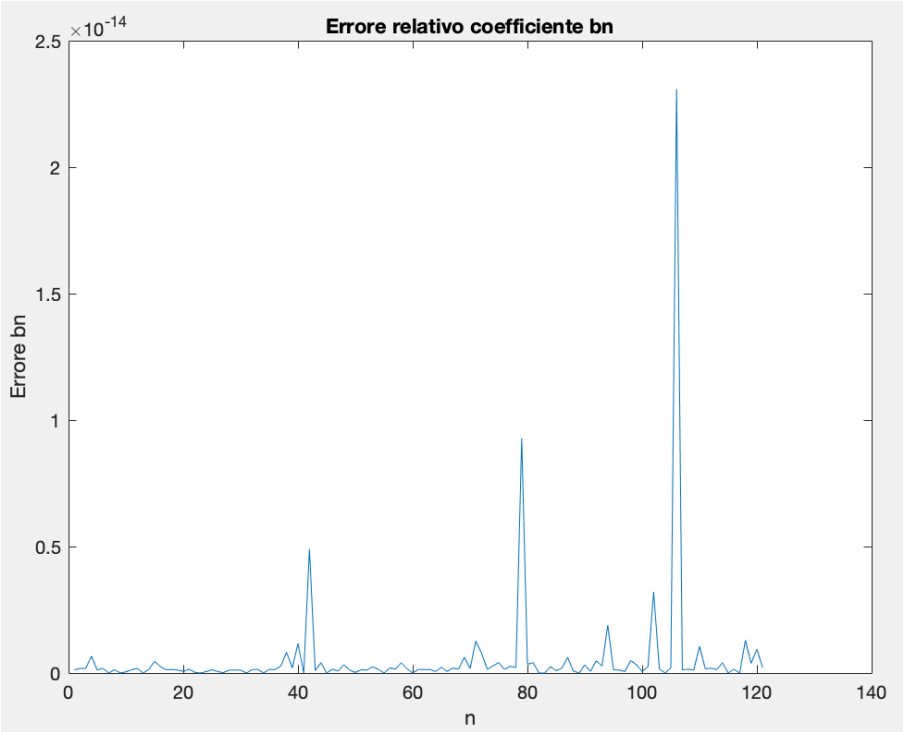

Figura 6.3 - Errori relativi commessi nel calcolo del vettore contenente i coefficienti di Mie b_n, al variare dell'indice n, per il parametro dimensionale x = 100 e per un indice di rifrazione m = 1.5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Mazler [53].

Le figure 6.4, 6.5, 6.6, 6.7 riportano i valori della parte reale e immaginarie dei coefficienti di Mie (a_n e b_n) in funzione di n con un valore del parametro dimensionale pari a $x = 100$ e con un indice di rifrazione pari a $m = 1.5$. La serie di dati blu sono quelli calcolati dal programma *verifica_codice* (scritto per questa tesi), mentre quelli verdi sono quelli forniti dal programma di Matzler [53]. Nel caso dei coefficienti reali (figure 6.4 e 6.5) si osserva una perfetta sovrapposizione dei due risultati (si può vedere solo la linea blu che segue perfettamente quella verde) infatti come esposto in considerazioni precedenti il massimo errore relativo è dell'ordine di 10^{-14}.

Invece per quanto riguarda i grafici che contengono la parte complessa di tali coefficienti (figure 6.6 e 6.7) si osserva che le due serie di dati sono perfettamente speculari, infatti se si considera l'errore relativo prendendo la parte immaginaria della serie di dati di Matzler però cambiata di segno si ottiene di nuovo un errore relativo dell'ordine di 10^{-14}.

L'inversione di segno che si ottiene nella parte complessa è spiegata dalla diversa convenzione con cui Matzler scrive l'equazione 2.34 (rappresentante la perturbazione del campo elettromagnetico) in cui seguendo la convenzione del testo Bohren e Huffman [41], scrive il termine temporale nell'esponenziale con il segno opposto rispetto alla convenzione impiegata in questa tesi, che segue van de Hulst [39] e Kerker [40]. Inoltre si evidenza che con la convenzione usata da Matzler cambia l'espressione anche dell'indice di rifrazione complesso che presenta la parte immaginaria con il segno positivo:

$$m = m_{Re} + m_{Im} \cdot i \tag{6.8}$$

Comunque tale diversità di segno nella parte immaginaria non comporta problemi nel calcolo dei fattori di efficienza (Q_{ext}, Q_{sca} e Q_{abs}), in quanto le formule di tali grandezze considerano sempre o la sola parte reale (equazione 3.94) oppure il modulo dei coefficienti di Mie (equazione 3.101).

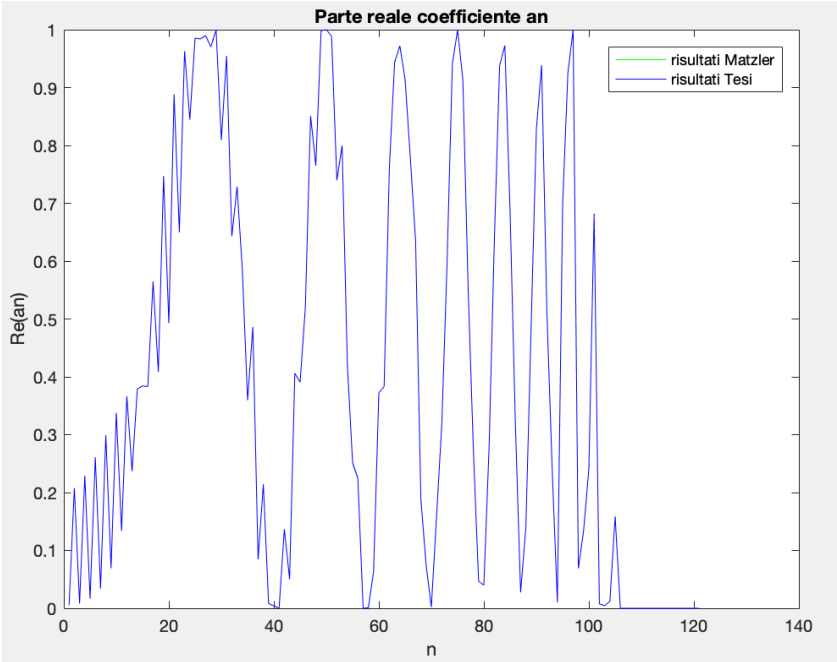

Figura 6.4 – Rappresentazione del vettore contenente la parte reale del coefficiente di Mie a_n, al variare dell'indice n, per il parametro dimensionale x = 100 e per un indice di rifrazione m = 1.5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53]. Si nota una perfetta sovrapposizione tra i risultati prodotti dal programma scritto per questa tesi e quello di Matzler.

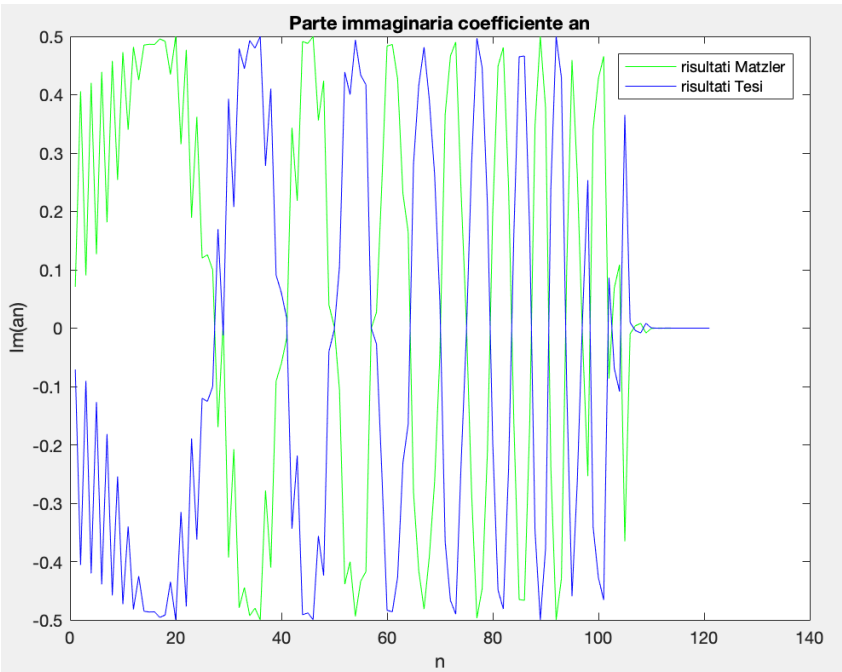

Figura 6.5 - Rappresentazione del vettore contenente la parte immaginaria del coefficiente di Mie a_n, al variare dell'indice n, per il parametro dimensionale x = 100 e per un indice di rifrazione m = 1.5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53]. Si nota che i risultati prodotti dal programma scritto per questa tesi sono esattamente speculari a quelli di Matzler, in accordo con la diversa convenzione nello scrivere l'onda rappresentante la perturbazione del campo elettro-magnetico (eq 2.34).

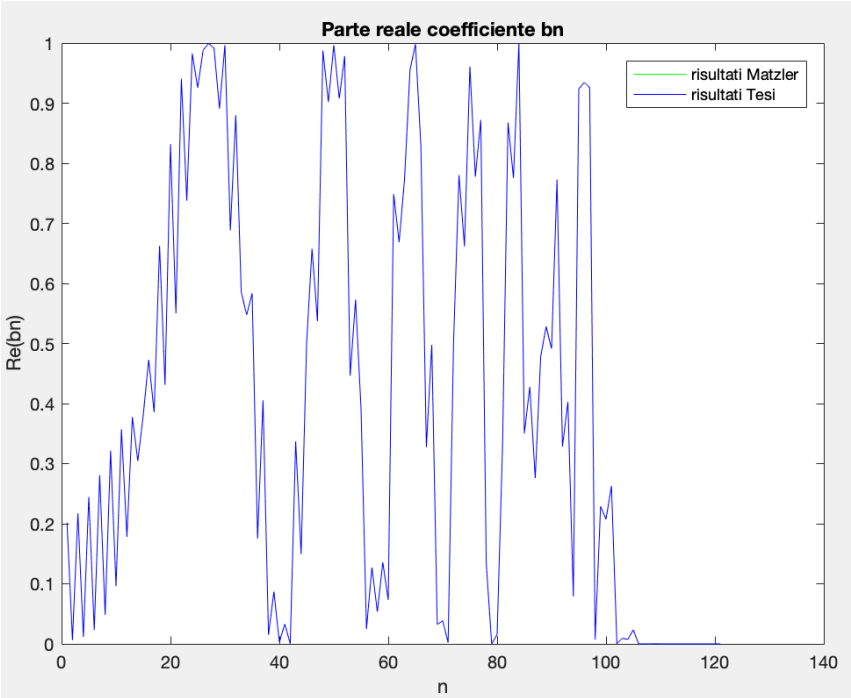

Figura 6.6 - Rappresentazione del vettore contenente la parte reale del coefficiente di Mie b_n, al variare dell'indice n, per il parametro dimensionale x = 100 e per un indice di rifrazione m = 1.5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler [53]. Si nota una perfetta sovrapposizione tra i risultati prodotti dal programma scritto per questa tesi e quello di Matzler.

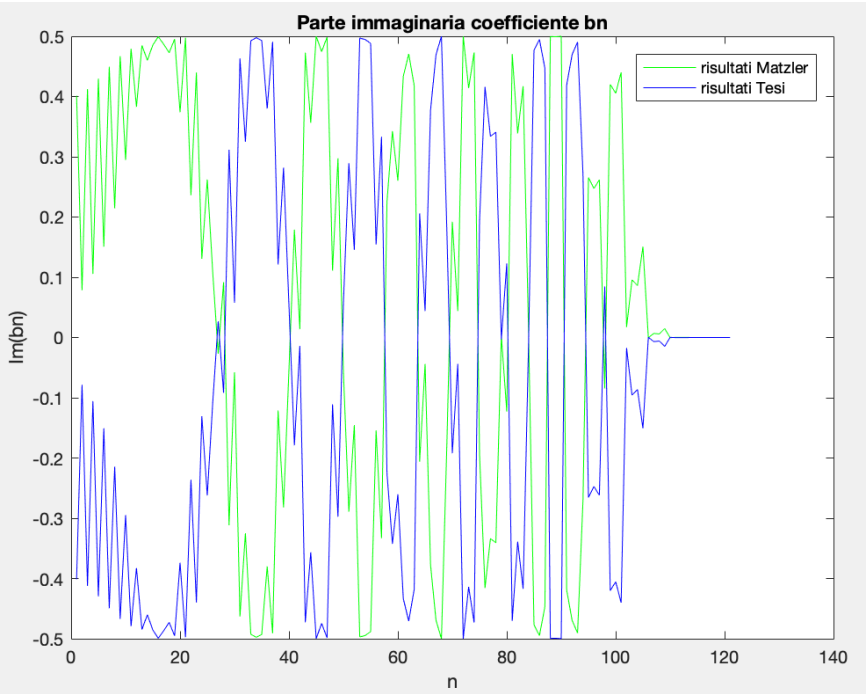

Figura 6.7 - Rappresentazione del vettore contenente la parte immaginaria del coefficiente di Mie b_n, al variare dell'indice n, per il parametro dimensionale x = 100 e per un indice di rifrazione m = 1.5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti dal programma di Matzler (2002). Si nota che i risultati prodotti dal programma scritto per questa tesi sono esattamente speculari a quelli di Matzler, in accordo con la diversa convenzione nello scrivere l'onda rappresentante la perturbazione del campo elettro-magnetico (eq 2.34).

6.1.3 Confronto con Winscombe

Per validare ulteriormente il programma si confrontano i risultati ottenuti con quelli riportati nel report di Winscombe [55]. In questo caso non avendo il programma di Winscombe si sono utilizzati i valori riportati nelle tabelle del suo report, costituiti da 8 cifre significative. I valori contenente gli errori relativi sono riportate nelle tabelle 6.7 e 6.8. Si osserva degli scostamenti relativi dell'ordine di 10^{-7} e 10^{-8}, per cui praticamente tutte le 8 cifre riportate da Winscombe coincidono con quelle ottenute dal programma scritto per questa tesi.

Per $m = 1.5$:

Tabella 6.7 - Errori relativi commessi nel calcolo del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) e del fattore di efficienza per l'assorbimento (Q_{abs}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 1,5. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti da Winscombe [53].

x	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$	Q_{abs}	$E_{Q_{abs},r}$
10	2,88E+00	1,66E-08	2,88E+00	1,66E-08	0	0
100	2,09E+00	3,81E-05	2,09E+00	8,85E-08	0	0
1000	2,01E+00	1,75E-07	2,01E+00	1,75E-07	0	0
5000	2,01E+00	7,51E-08	2,01E+00	7,51E-08	0	0

Per $m = 1.5 - 0.1i$:

Tabella 6.8 - Errori relativi commessi nel calcolo del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), del fattore di efficienza per lo scattering (Q_{sca}) e del fattore di efficienza per l'assorbimento (Q_{abs}) al variare del parametro dimensionale (x) per un indice di rifrazione m = 1,5-0,1i. Come dati di confronto si sono utilizzati i risultati forniti da Winscombe [53].

x	Q_{ext}	$E_{Q_{ext},r}$	Q_{sca}	$E_{Q_{sca},r}$	Q_{abs}	$E_{Q_{abs},r}$
10	2,46E+00	1,92E-07	1,24E+00	1,70E-07	1,22E+00	2,61E-07
100	2,09E+00	7,51E-08	1,13E+00	2,55E-08	9,58E-01	1,34E-07
1000	2,02E+00	2,37E-07	1,11E+00	3,51E-07	9,13E-01	1,45E-07
5000	2,01E+00	5,35E-08	1,10E+00	4,22E-08	9,08E-01	1,69E-07

Si vuole sottolineare (come già spiegato in precedenza nella sottosezione 5.5.3), che anche il programma scritto da Winscombe presenta delle criticità di stabilità nel codice che si verificano in caso di indice di rifrazione con parte immaginaria diversa da zero (vedere figura 5.1).

In sostanza da questa verifica del codice si è osservata una perfetta aderenza dei valori calcolati dal programma scritto per questa tesi (*verifica_codice*) con i valori calcolati da altri autori (Matler e Winscombe). Si evidenziano delle problematiche nel calcolo dei coefficienti di Mie solo nel caso di materiali assorbenti come polveri metalliche (per alti valori degli indici di rifrazione), mentre nel caso di polveri organiche (non conduttrici come l'amido di mais) il programma funziona correttamente. Quindi si può procedere alla successiva fase di simulazione

della variazione della concentrazione massica di polvere in funzione dell'estinzione misurata sperimentalmente.

6.2 Simulazioni

L'obiettivo delle simulazioni che si condurranno è duplice:

1. Studiare come varia la concentrazione massica della nube di polvere in funzione dell'intensità, della lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica impiegata, del diametro delle particelle e della distanza tra i sensori (cammino ottico). Tali conoscenze permetteranno di stabilire la migliore configurazione utilizzabile per eseguire le misure in laboratorio.
2. Scrivere un programma che fornito in input il valore della trasmittanza del sistema calcoli le concentrazioni numeriche e massiche applicando la teoria di Mie. I risultati prodotti in questo modo dovranno poi essere validati da una curva di taratura sperimentale.

6.2.1 Fattori di efficienza

I grafici riportati in questa sottosezione (6.2.1) sono stati disegnati tramite il programma *grafici_Qabs_Qsca_Qext* riportato in appendice.

Si rappresenta come varia il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione del parametro di dimensione x (figura 6.8) e del parametro adimensionale ρ (figura 6.9) per diversi indici di rifrazione. In particolare si sono considerati due materiali non assorbenti radiazione elettromagnetica ($m = 1.3$, $m = 1.5$) e due assorbenti radiazione elettromagnetica ($m = 1.3 - 0.1i$, $m = 1.5 - 0.1i$). In figura 6.8 si osserva che un materiale avente indice di rifrazione solamente reale presenta un fattore di efficienza per l'estinzione maggiormente oscillante, con un insieme di picchi, massimi e minimi locali. Invece in caso di indici di rifrazione immaginari alla soluzione si aggiunge una componente esponenzialmente decrescente che smorza i picchi a bassi valori di x ottenendo una linea maggiormente "liscia". Inoltre si sottolinea che all'aumentare dell'indice di rifrazione il fattore di efficienza per l'estinzione aumenta. Per alti valori del parametro di dimensionale x il fattore Q_{ext} tende al valore asintotico di 2 (le oscillazioni sono completamente smorzate), come anche descritto dalla teoria dell'ottica geometrica.

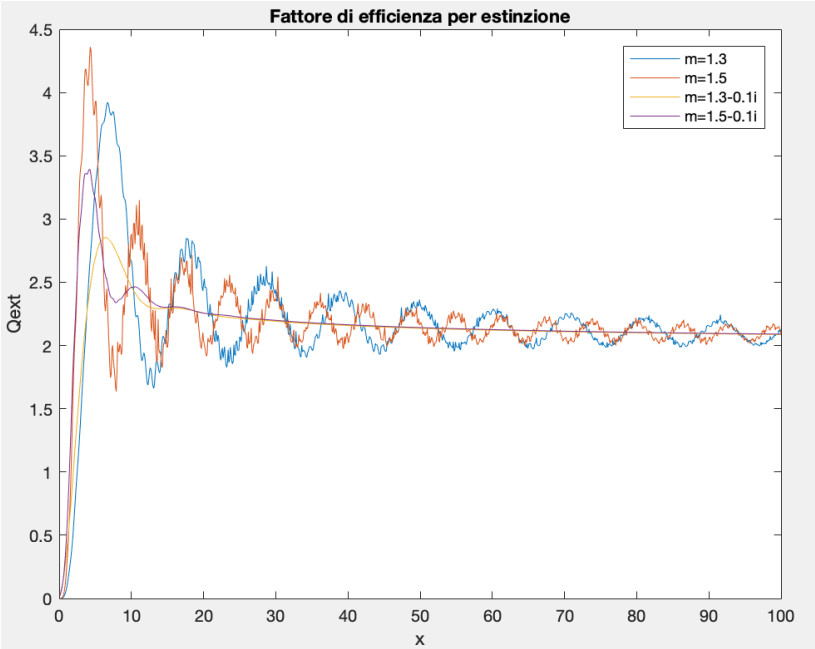

Figura 6.8 – Rappresentazione del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione del parametro di dimensione (x) per materiali aventi diversi indici di rifrazione. La linea blu individua un materiale con m=1.5 (amido di mais), arancione individua un materiale con m=1.3, gialla individua un materiale con m=1.3-0.1i e quella viola con m=1.5-0.1i.

Il parametro adimensionale ρ, introdotto in figura 6.9 risulta funzione del parametro di dimensione x e della parte reale dell'indice di rifrazione m_{Re}, come descritto dalla relazione 6.9:

$$\rho = 2x(m_{Re} - 1) \tag{6.9}$$

Dalla figura 6.9 si possono dedurre le medesime considerazioni già descritte in figura 6.8. Però impiegando il parametro ρ si osserva che le posizioni delle oscillazioni (massimi e minimi) principali risultano indipendenti dall'indice di rifrazione. Il parametro ρ infatti, risulta particolarmente utile per individuare la posizione dei massimi e dei minimi.

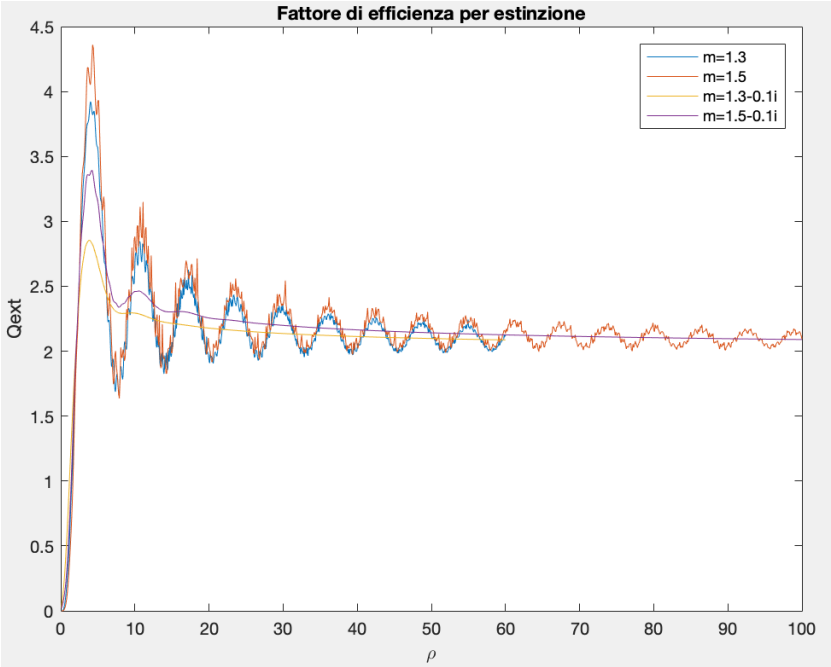

Figura 6.9 - Rappresentazione del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione del parametro adimensionale (ρ) per materiali aventi diversi indici di rifrazione. La linea blu individua un materiale con m=1.5 (amido di mais), arancione individua un materiale con m=1.3, gialla individua un materiale con m=1.3-0.1i e quella viola con m=1.5-0.1i. Si nota che con tale parametro i massimi e i minimi dei picchi si trovano allo stesso ρ.

La figura 6.10 permette di confrontare i diversi contributi al fattore di efficienza per l'estinzione prodotti dal fattore di efficienza per l'assorbimento e dal fattore di efficienza per lo scattering, nel caso naturalmente di un materiale assorbente avente indice di rifrazione pari a $m = 1.5 - 0.1i$. Per bassi valori di x si osserva che il contributo maggiore è prodotto da Q_{sca}, mentre per valori più alti di x (dopo circa $x = 20$) i contributi di Q_{sca} e Q_{abs} al fattore globale Q_{ext} risultano simili.

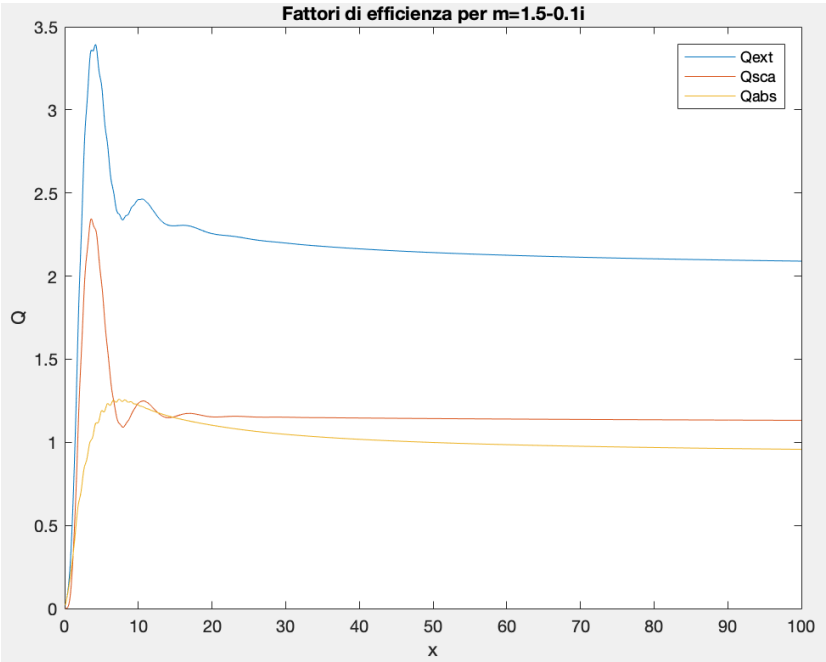

Figura 6.10 - Rappresentazione dei fattori di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), per lo scattering (Q_{sca}) e per l'assorbimento (Q_{abs}) in funzione del parametro di dimensione (x) per un materiale assorbente avente indice di rifrazione pari a m=1.5-0.1i.

6.2.2 Fattore di efficienza per il caso in laboratorio

I grafici riportati in questa sottosezione (6.2.2) sono stati disegnati tramite il programma *punto_funzionamento* riportato in appendice.

Si decide si simulare il comportamento del sensore infrarosso disponibile in laboratorio avente una lunghezza d'onda pari a $\lambda = 0.85\ \mu m$ e considerando come raggio medio della distribuzione granulometrica di polvere quello pari al cinquantesimo percentile in volume pari ad $a \equiv a(0{,}5) = 13.37\ \mu m$. Da tali valori si può calcolare il parametro di dimensione x corrispondente al punto di funzionamento della strumentazione usata:

$$\lambda = 850\ nm = 0{,}85 \mu m$$

$$d(0{,}5) = 26{,}716\ \mu m \rightarrow a(0{,}5) = \frac{d(0{,}5)}{2} = 13{,}368\ \mu m$$

$$x = \frac{2\pi a}{\lambda} = \frac{2 \cdot \pi \cdot 13{,}368}{0{,}85} = 98{,}816$$

La figura 6.11 rappresenta come varia il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione del parametro di dimensione x. La linea verticale blu a $x = 98.82$ indica il punto di funzionamento del sistema studiato in laboratorio.

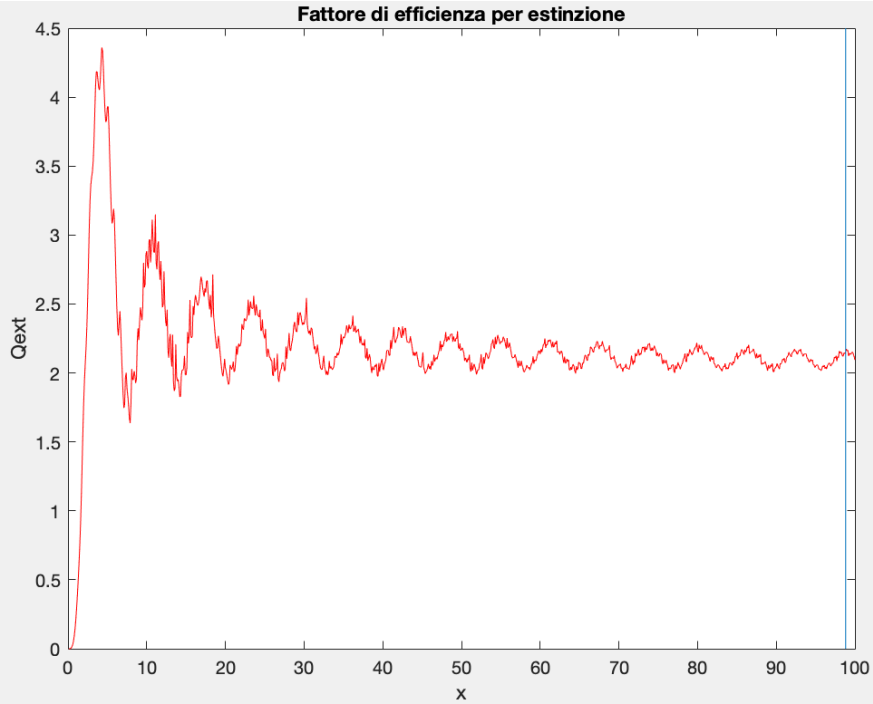

Figura 6.11 - Rappresentazione del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione del parametro di dimensione (x) per l'amido di mais (indice di rifrazione m=1.5). La linea blu a x=98.82 indica il punto di funzionamento del sensore infrarosso ($\lambda = 0.85\ \mu m$) con la particolare polvere usata in laboratorio (raggio medio particelle a=13.37 μm) e corrisponde a Q_{ext}=2.15.

Dalla figura 6.11 si osserva che il fattore di efficienza presenta un'oscillazione principale e sopra a questa un'altra oscillazione secondaria. Q_{ext} per valori molto piccoli di x cresce fino a raggiungere un valore massimo pari a circa 4.3 per poi diminuire in modo oscillante fino al valore asintotico di 2 che si ottiene per valori molto grandi di x. Il punto di funzionamento ($x = 98.82$) corrisponde a un fattore di efficienza per l'estinzione pari a $Q_{ext} = 2.15$ e si verifica nell'estremo destro del grafico in cui il valore di Q_{ext} si è quasi assestato al valore costante di 2 (ottica geometrica). Un vantaggio di lavorare in questa zona del grafico consiste nel fatto che il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} non varia molto con x ed è quasi costante per cui risulta più facile valutarlo con precisione sulla base dei parametri sperimentali in ingresso.

In letteratura sono noti utilizzi del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) nella legge di Lambert-Beer in ambito ambientale, per valutare la concentrazione di polveri inquinanti (minore di 10^{-2}-10^{-3} g/m^3), per esempio all'uscita di una ciminiera. In tali applicazioni la concentrazione di polvere risulta molto bassa per cui per eseguire delle misure accurate è necessario avere il valore di Q_{ext} più alto possibile che si verifica nel nostro caso per x intorno a 4-5-6. Naturalmente siccome x risulta funzione sia del raggio della particella a, che dipende a sua volta dalla distribuzione dimensionale delle polveri, sia dalla lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica impiegata, per raggiungere il punto di funzionamento cercato si potrà agire solo sul secondo parametro.

Nel caso in esame in questa tesi, siccome si vuole misurare la concentrazione di una nube di povere nell'ambito della sicurezza industriale, con concentrazioni elevate (30-2500 g/m^3) si dovrebbe disporre (in modo opposto al caso precedente) di un fattore di efficienza per l'estinzione piccolo a sufficienza per misurare efficacemente la concentrazione. Per tale ragione si potrebbe pensare di lavorare con un Q_{ext} pari a 1 o a un valore più basso. Per esempio se $Q_{ext} = 1$ si dovrebbe impiegare un parametro dimensionale molto basso intorno $x = 2$. Come

però si osserva dal grafico rappresentato in figura 6.11, la curva in tale zona risulta molto ripida perciò variando di poco il parametro x varierebbe di molto il fattore Q_{ext}, con l'inevitabile conseguenza che tale grandezza potrebbe essere valutata in modo poco accurato. Da queste considerazioni si può capire che la scelta attuata in laboratorio con $x \approx 100$ risulta supportata dal fatto che il fattore Q_{ext} si trova in una zona in cui non varia di molto al variare di x, per cui può essere calcolato con precisione.

La figura 6.12 rappresenta come varia il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione della lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica impiegata, per i valori di λ dello spettro infrarosso. La linea blu verticale a $\lambda = 0.85\ \mu m$ indica il punto di funzionamento del sensore usato laboratorio. Dalla figura 6.12 si possono ricavare le medesime considerazioni già descritte per la figura 6.11, mettendo però in risalto la lunghezza d'onda dei fotoni utilizzati. Si evidenzia bene da tale grafico che il punto di funzionamento in questo caso cade all'estremità sinistra del diagramma (in quanto x e λ sono inversamente proporzionali) in una regione dello spettro elettromagnetico molto vicino al visibile (che inizia a circa $0.78\ \mu m$). In tale zona del grafico come già evidenziato il fattore di efficienza risulta quasi costante e pari a $Q_{ext} = 2.15$.

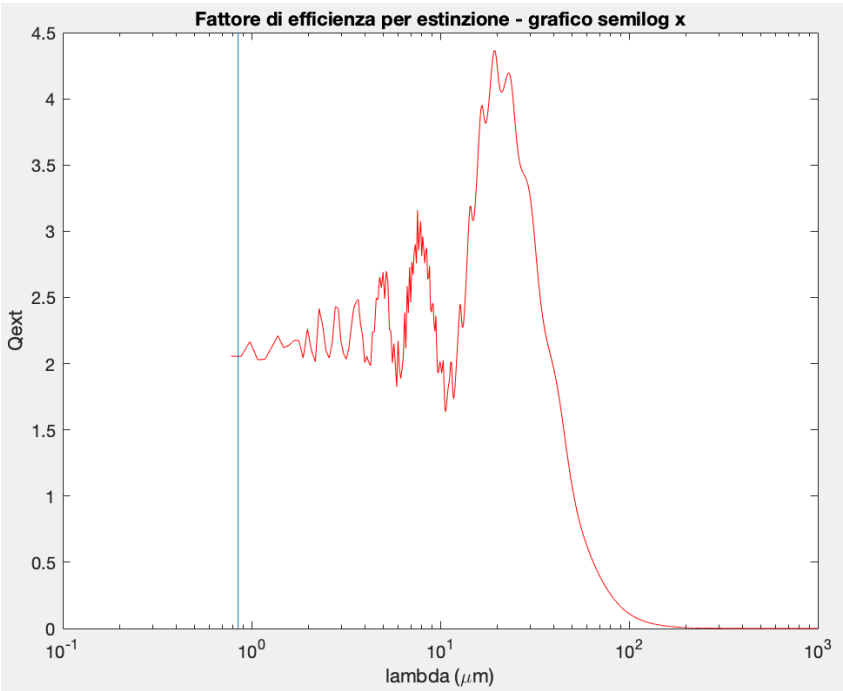

Figura 6.12 - Rappresentazione del fattore di efficienza per l'estinzione (Qext) in funzione della lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica λ impiegata per l'amido di mais (indice di rifrazione m=1.5). La linea blu a λ =0.85 μm indica il punto di funzionamento del sensore infrarosso con la particolare polvere usata in laboratorio (raggio medio particelle a=13.37 μm) e corrisponde a Q_{ext}=2.15.

La figura 6.13 rappresenta come varia il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione del raggio delle particelle a per tutto l'intervallo di dimensioni della distribuzione granulometrica della polvere considerata, utilizzando dei fotoni con una lunghezza d'onda pari a $\lambda = 0.85\ \mu m$. La linea blu ad $a = 13.37\ \mu m$ indica il punto di funzionamento, ipotizzando che tutte le particelle abbiano tale dimensione media. In realtà tale assunzione è una semplificazione come si può osservare appunto dal grafico in figura 6.13. Infatti, come più volte evidenziato il punto di funzionamento nominale si trova in una zona corrispondente a $Q_{ext} = 2.15$. Tale valore risulta quasi costante al valore asintotico di Q_{ext} che si osserva su tale grafico

dopo circa una dimensione pari ad $a = 15\ \mu m$. Sorge però il problema che il valore di $Q_{ext} = 2.15$ assunto come valido per tutta la distribuzione granulometrica non rappresenta in modo corretto le particelle più fini (comprese tra $13.37\ \mu m$ e $0.5\ \mu m$), che presentano un fattore di efficienza per estinzione più alto che raggiunge valori anche superiori a $Q_{ext} = 4$. Da queste considerazioni si ricava che imporre $Q_{ext} = 2.15$ è una semplificazione, però necessaria per rappresentare con un unico valore il comportamento del sistema nei confronti dell'estinzione di una radiazione elettromagnetica all'interno di una nube contenente particelle aventi diverse dimensioni. Per cui i valori ricavati impiegando tale approssimazione dovranno essere successivamente confermati sia dai valori sperimentale, sia impiegando la relazione 4.18, che nota la distribuzione granulometrica $f_n(a)$ e la variazione del fattore di efficienza per l'estinzione in funzione del raggio della particella $Q_{ext}(a)$ (figura 6.12), permette di calcolare il fattore di estinzione γ.

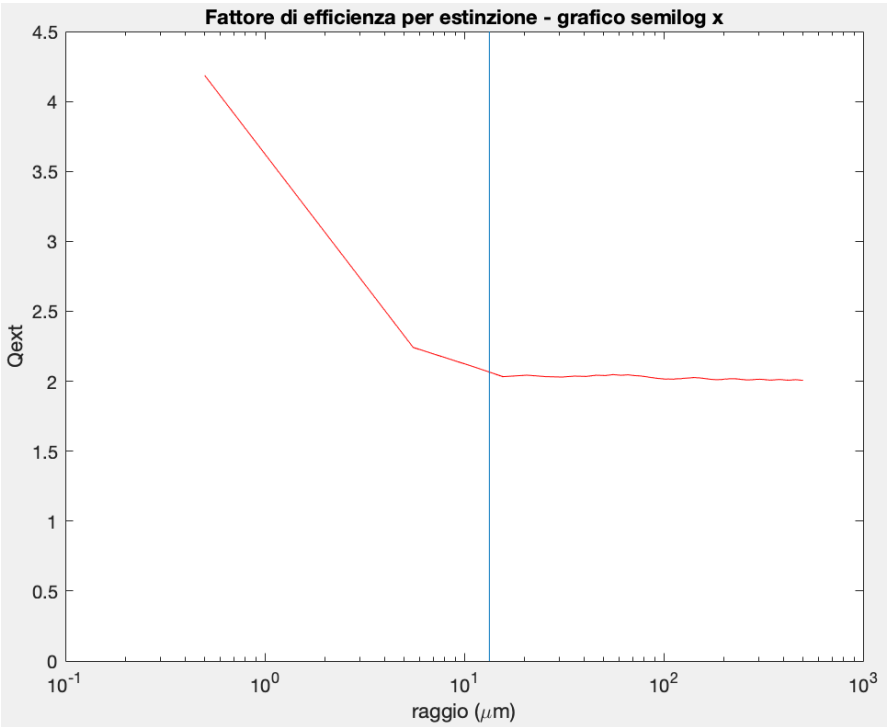

Figura 6.13 – Rappresentazione del fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) in funzione del raggio delle particelle (a) per l'amido di mais (indice di rifrazione m=1.5). La linea blu ad a=13.37 μm indica il punto di funzionamento del sensore infrarosso (λ =0.85 μm) con la particolare polvere usata in laboratorio (considerando come raggio medio quello del 50-esimo percentile) e corrisponde a Q_{ext}=2.15.

Consci del fatto che assumere $Q_{ext} = 2.15$ sia una semplificazione, comunque le successive simulazioni per lo studio della distanza migliore fra i sensori verranno effettuate prendendo tale valore come fattore di efficienza per l'estinzione di tutte le particelle contenute nella nube.

6.2.3 Grandezze impiegate nelle simulazioni delle condizioni di laboratorio

Il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} dipende solamente dal diametro delle particelle, dalla lunghezza d'onda della radiazione e dall'indice di rifrazione del materiale (le prime due informazioni vengono condensate nel parametro di dimensione x). Per valutare invece la

concentrazione della polvere è necessario conoscere anche il cammino ottico, rappresentato dalla distanza tra i sensori come mostrato dalla relazione 4.5.

I dati e i parametri necessari per la simulazione sono indicati nella tabella 6.9:

Tabella 6.9 - Le grandezze con i corrispondenti simboli e valori numerici assunti nella simulazione.

Grandezza	**Simbolo**	**Valore numerico**
Raggio medio particella	a	$13.37\ \mu m$
Lunghezza d'onda fotone	λ	$0.85\ \mu m$
Parametro di dimensione	x	98.82
Indice di rifrazione	m	1.5
Fatt. eff. per l'estinzione	Q_{ext}	2.15
Cammino ottico	l	$1\ mm - 10\ cm$
Trasmittanza	T	$0 - 1$

6.2.4 Stima del cammino ottico migliore

I grafici e le tabelle riportate in questa sottosezione (6.2.4) sono stati ottenuti tramite i programmi: *simulazione_estinzione, simulazione_estinzione*_l e *simulazione_estinzione_Qext* riportati in appendice.

Le figure 6.14 e 6.15 rappresentano come varia la concentrazione massica di una nube di polvere in funzione della trasmittanza misurata dai sensori, impiegando i parametri presenti in tabella 6.9. Per il primo grafico si fissa il cammino ottico a 6 cm, mentre nel secondo grafico si pongono i sensori a una distanza di 6 mm. Tali valori sono particolarmente significativi in quanto il tubo di Hartmann disponibile in laboratorio, presenta un diametro di 6 cm e quindi l = 6 cm significa porre i sensori proprio in corrispondenza del diametro. Invece l = 6 mm rappresenta la distanza presentata dagli elettrodi durante le prove di innesco delle polveri, quindi assumere tale distanza significa misurare proprio la concentrazione locale che si incontra nelle condizioni di interesse nelle prove sperimentali.

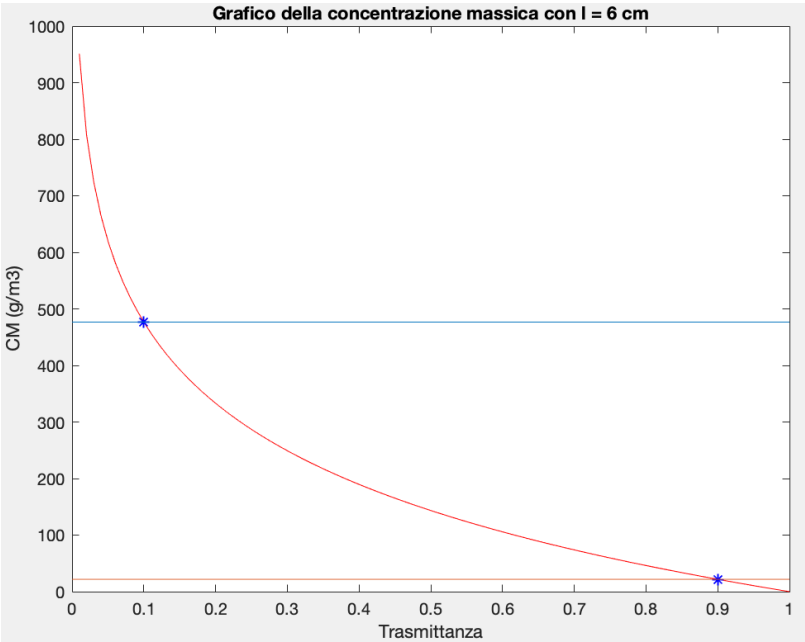

Figura 6.14 – Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$), con un cammino ottico pari a l = 6 cm. Le linee orizzontali rappresentano i limiti di misura del sensore (superiore linea blu e inferiore linea arancione).

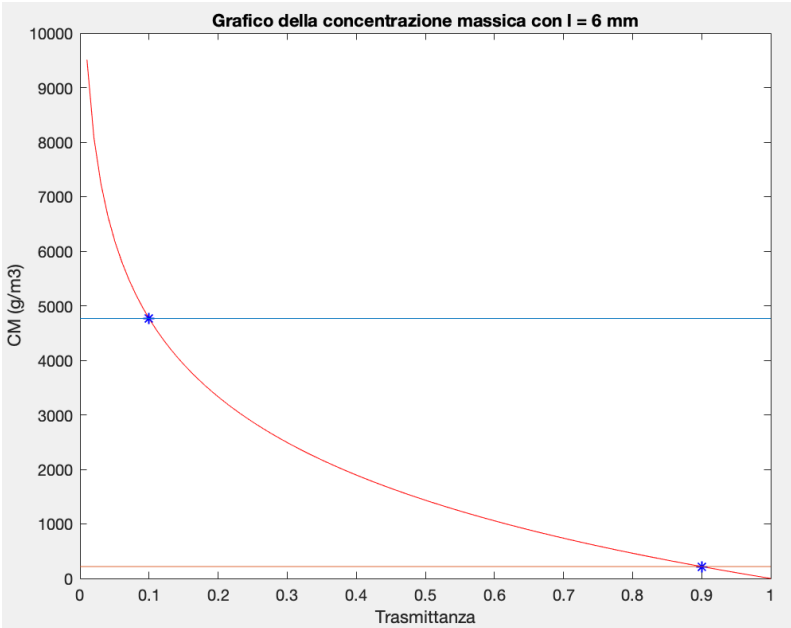

Figura 6.15 - Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$), con un cammino ottico pari a l = 6 mm. Le linee orizzontali rappresentano i limiti di misura del sensore (superiore linea blu e inferiore linea arancione).

Il valore limite più basso di concentrazione si ottiene quando si raggiunge un valore di trasmittanza pari a $T = 0.1$, mentre il valore limite più alto si incontra quando si raggiunge un valore di trasmittanza pari a $T = 0.9$. Tale criterio empirico permette di rimanere in un intervallo della curva in cui la sua derivata non varia troppo in modo da eseguire delle misure precise. Sia dal grafico sia calcolando la derivata rispetto alla trasmittanza, dell'equazione 4.5,

si può osservare che al diminuire di T, la derivata aumenta fino a raggiungere un valore infinito per $T \to 0^+$ (relazione 70).

$$\frac{dC_M}{dT} = -\frac{4}{3}\frac{a\rho}{Q_{ext}l}\frac{1}{T} \tag{6.10}$$

$$\lim_{T\to 0^+}\frac{dC_M}{dT} = \lim_{T\to 0^+}\left(-\frac{4}{3}\frac{a\rho}{Q_{ext}l}\frac{1}{T}\right) = -\infty \tag{6.11}$$

Pertanto si può affermare che rimanendo nella parte iniziale della curva per piccole variazioni della trasmittanza, la concentrazione massica varia di molto, mentre nella parte finale della curva per piccole variazioni della trasmittanza la concentrazione massica varia di poco. Da tali considerazioni si capisce che se si effettuano misure di concentrazione nella parte iniziale della curva piccole incertezze nella misura della trasmittanza si amplificano in grandi errori nel calcolo della concentrazione, per cui risulta più efficace effettuare misure nella parte intermedia della curva.

Le concentrazioni limite per le quali si può impiegare la strumentazione in esame si trovano riassunte in tabella 6.10.

Tabella 6.10 - Concentrazioni limite misurabili nei casi più significativi con l = 6 mm e l = 6 cm.

Cammino ottico	**CM_{min}** (g/m^3)	**CM_{max}** (g/m^3)
l = 6 cm	21,81	476,61
l = 6 mm	218,08	4766,08

Dalla tabella 6.10, in accordo con l'equazione 4.5 si osserva che esiste una relazione di proporzionalità inversa tra la concentrazione massica e il cammino ottico, quindi al diminuire di l sia il limite inferiore sia quello superiore aumentano.

La figura 6.16 rappresenta la variazione della concentrazione massica misurata dal sensore in funzione della trasmittanza, parametrizzata tramite la lunghezza del cammino ottico che varia tra 1 cm e 10 cm. Da tale grafico si può osservare l'intervallo di concentrazione misurabile per ogni cammino ottico.

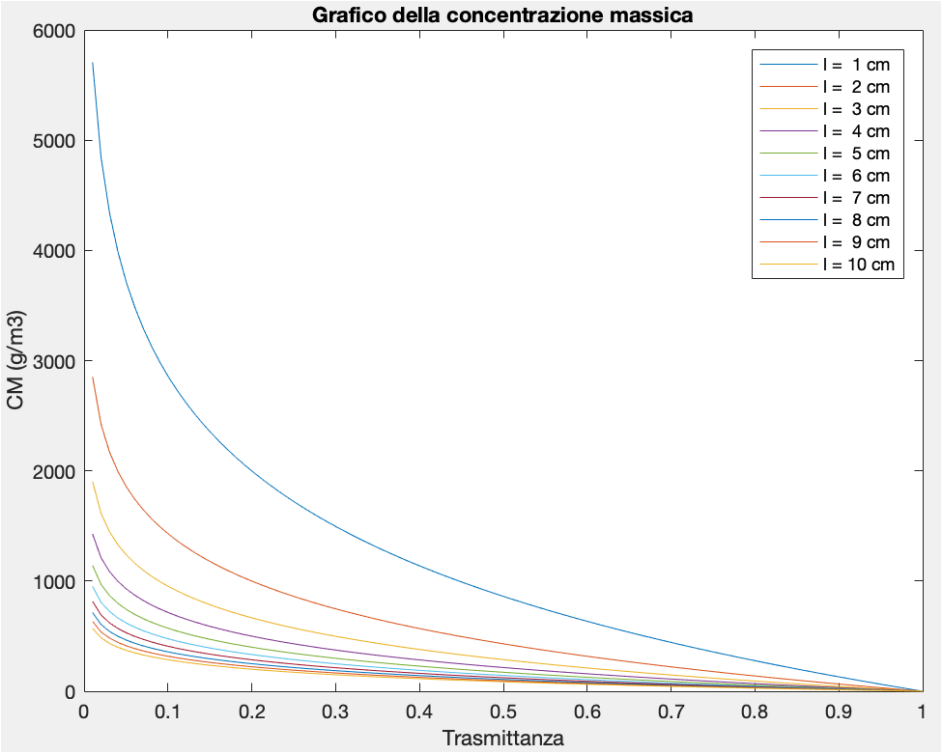

Figura 6.16 - Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$). Le curve sono parametrizzate variando il cammino ottico (l) tra 1 cm a 10 cm.

La tabella 6.11 mostra le concentrazioni limite minima e massima misurabili variando il cammino ottico tra 1 e 10 cm. Si osserva che con la lunghezza inizialmente ipotizzata di $l = 6\ cm$ si può misurare in modo efficace una concentrazione compresa tra i 22 e i 477 g/m^3, perciò non sufficientemente grande per eseguire test di esplosività di polvere. Invece la configurazione con $l = 1\ cm$ permette la misura di un intervallo di concentrazione compreso tra 131 e 2860 g/m^3 in linea con l'intervallo di concentrazione di 30-2500 g/m^3, che è di interesse nell'ambito dell'esplosività di polveri.

Tabella 6.11 - Concentrazioni limite misurabili variando il cammino ottico (l) tra 1 cm e 10 cm, con Q_{ext} = 2.15.

l (cm)	**CM_{min}** (g/m^3)	**CM_{max}** (g/m^3)
1	130,85	2859,65
2	65,43	1429,82
3	43,62	953,22
4	32,71	714,91
5	26,17	571,93
6	21,81	476,61
7	18,69	408,52
8	16,36	357,46
9	14,54	317,74
10	13,09	285,96

La figura 6.17 rappresenta la variazione della concentrazione massica misurata dal sensore in funzione della trasmittanza, parametrizzata tramite la lunghezza del cammino ottico tra 1 e 10 mm. In questo grafico siccome si è diminuito il cammino ottico, si osserva (rispetto alla figura 16) che le curve si estendono per degli intervalli di concentrazione maggiore a parità di valori di trasmittanza.

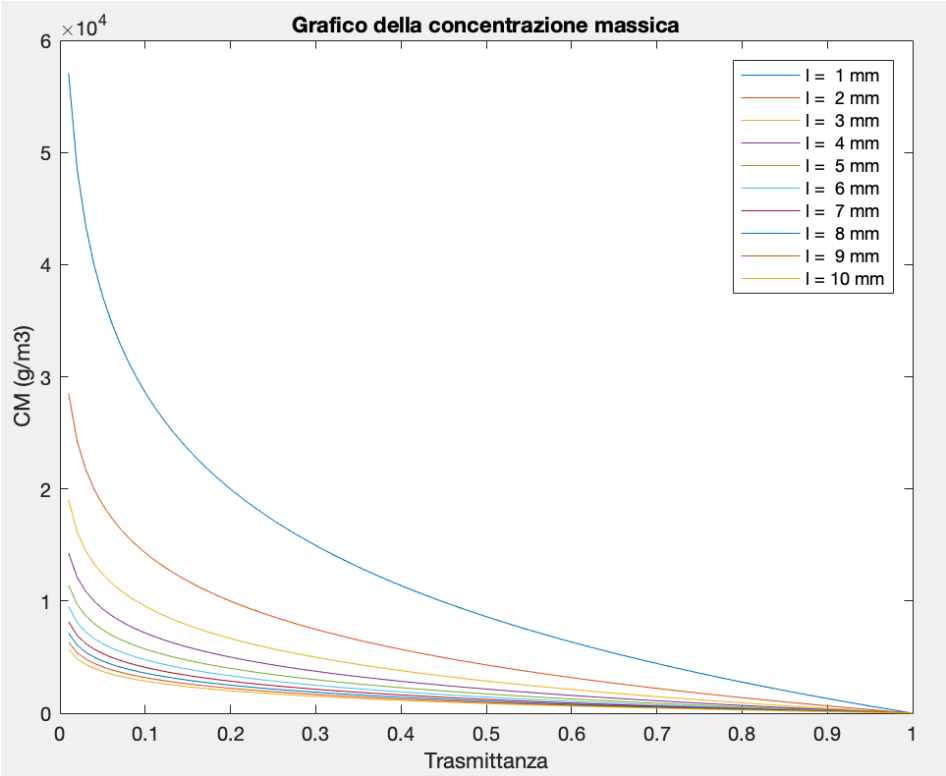

Figura 6.17 - Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$). Le curve sono parametrizzate variando il cammino ottico (l) tra 1 mm a 10 mm.

La tabella 6.12 mostra le concentrazioni limite minima e massima misurabili variando il cammino ottico tra 1 e 10 mm. In questa tabella siccome si è diminuito il cammino ottico di esattamente 10 volte, si osserva (rispetto alla tabella 6.11), che le concentrazioni limite sia inferiore sia superiore sono aumentate di 10 volte. In tali condizioni un intervallo di ottimo (tra 30-2500 g/m^3) non può essere trovato. Però se si considera il caso con $l = 6\ mm$ di interesse in laboratorio si scopre che il range di concentrazione misurabile risulta essere 218-4766 g/m^3, siccome l'intervallo inferiore può essere leggermente rilassato perché la curva in tale zona varia lentamente, perciò l'errore che si commette nella misura risulta basso allora tale configurazione può comunque essere impiegata per misurare un intervallo di concentrazione compreso tra i 30 e i 2500 g/m^3 anche se non si opera nell'intervallo di concentrazione ottimale per tale configurazione.

Tabella 6.12 - Concentrazioni limite misurabili variando il cammino ottico (l) tra 1 mm e 10 mm, con Q_{ext} = 2.15.

l (mm)	**CM_{min}** (g/m^3)	**CM_{max}** (g/m^3)
1	1308,50	28596,48
2	654,25	14298,24
3	436,17	9532,16
4	327,13	7149,12
5	261,70	5719,30
6	218,08	4766,08
7	186,93	4085,21
8	163,56	3574,56
9	145,39	3177,39
10	130,85	2859,65

Nelle simulazioni precedenti si è sempre tenuta costante la lunghezza d'onda della radiazione impiegata nella misura al valore di $\lambda = 0.85\ \mu m$, considerando anche il raggio medio delle particelle pari ad $a = 13.37\ \mu m$, si ottiene un fattore di efficienza per l'estinzione pari a $Q_{ext} = 2.15$. In quest'ultima parte di simulazione si vuole studiare come varierebbe la concentrazione misurata variando il fattore Q_{ext}. Siccome come già descritto precedentemente il raggio delle particelle non può essere modificato, in pratica significherebbe variare la lunghezza d'onda dei fotoni, cioè in ultima analisi impiegare un fotodiodo diverso.

La figura 6.18 rappresenta la variazione della concentrazione massica misurata dal sensore in funzione della trasmittanza, per un cammino ottico pari a $l = 6\ cm$. Ogni curva risulta parametrizzata rispetto al fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, che varia tra 1 e 4.5. Dalla relazione 4.10 si evince una proporzionalità inversa tra la concentrazione massica (C_M) e Q_{ext}. Pertanto si osserva che al diminuire del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} l'intervallo di concentrazione misurabile si espande e si alza leggermente. Da tale grafico perciò si conferma un'osservazione già esposta (sottosezione 6.2.2): se si vuole misurare concentrazioni basse è necessario operare con alti Q_{ext}, mentre se si vuole misurare concentrazioni alte (come nel nostro caso) è necessario operare con bassi Q_{ext}.

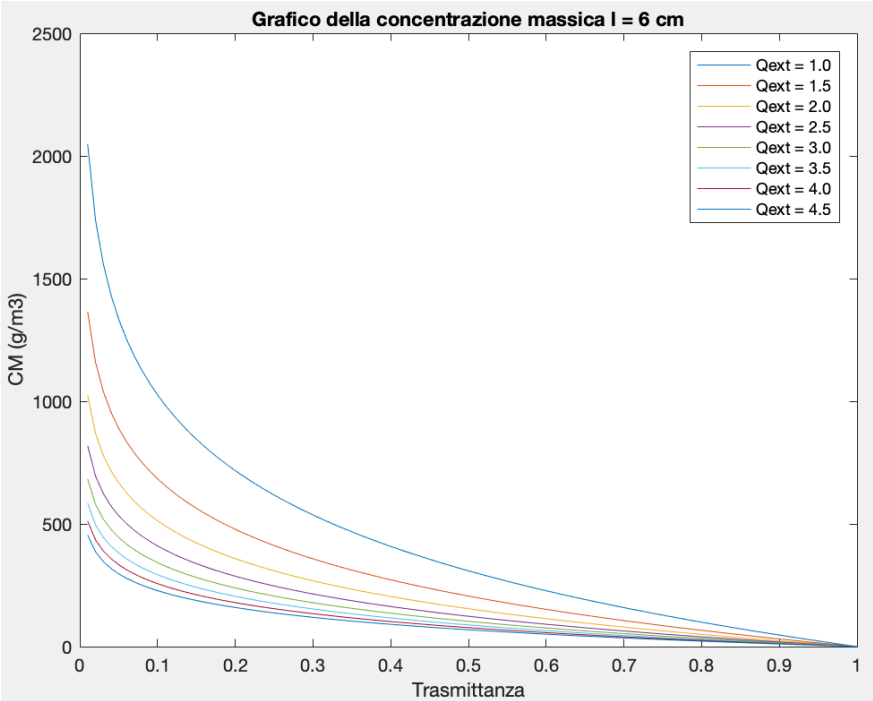

Figura 6.18 - Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$). Le curve sono parametrizzate variando il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) tra 1 cm a 4.5 cm. Il cammino ottico risulta fissato a l = 6 cm.

La tabella 6.13 mostra le concentrazioni limite minima e massima misurabili in funzione del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, in caso di cammino ottico pari a $l = 6\ cm$. Da tale tabella si può ricavare per la configurazione con $l = 6\ cm$ che il fattore Q_{ext} ottimo per il quale si ha l'intervallo di concentrazione cercato (30-2500 g/m^3) sia in vicinanza di $Q_{ext} = 1$. In particolare se si considera lineare la variazione di Q_{ext} per CM_{max} compreso tra 2052 e 2565 g/m^3 si ottiene un $Q_{ext} = 0.41$ da cui tramite la figura 6.12 si perviene a una lunghezza d'onda pari $\lambda = 69.15\ \mu m$.

Tabella 6.13 - Concentrazioni limite misurabili variando il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), fissando il cammino ottico a l = 6 cm.

Q_{ext}	CM_{min} (g/m^3)	CM_{max} (g/m^3)
0,4	117,37	2565,08
0,5	93,88	2052,06
1	46,95	1026,03
1,5	31,30	684,02
2	23,47	513,02
2,5	18,78	410,41
3	15,65	342,01
3,5	13,41	293,15
4	11,74	256,51
4,5	10,43	228,01

La figura 6.19 rappresenta la variazione della concentrazione massica misurata dal sensore in funzione della trasmittanza per un cammino ottico pari a $l = 6\,mm$. Ogni curva risulta parametrizzata rispetto al fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, che varia tra 1 e 4.5. Rispetto al caso precedente (descritto in figura 6.18) siccome si impiega un cammino ottico inferiore l'intervallo di concentrazione misurabile aumenta e anche il limite inferiore aumenta leggermente.

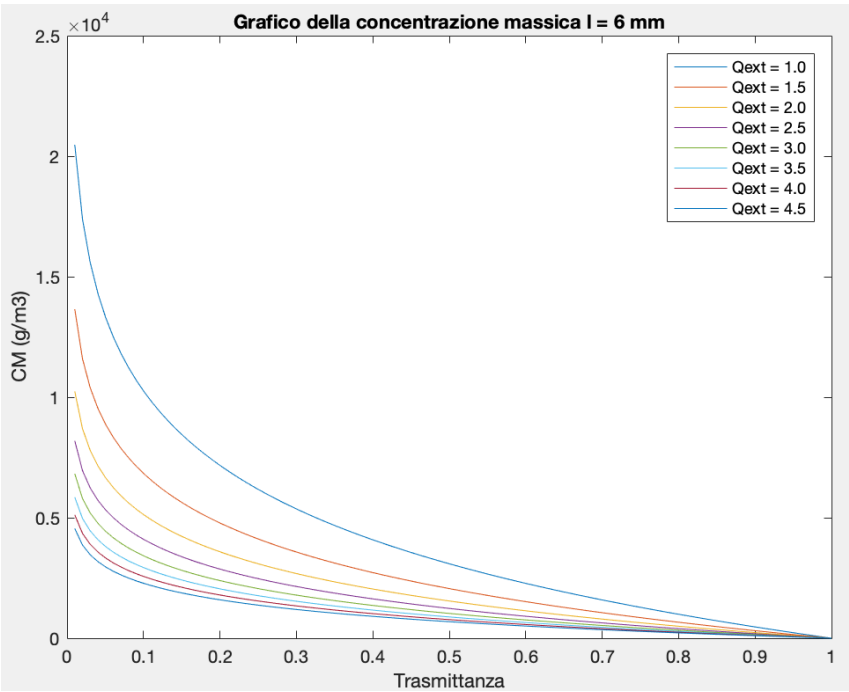

Figura 6.19 - Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$). Le curve sono parametrizzate variando il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) tra 1 cm a 4.5 cm. Il cammino ottico risulta fissato a l = 6 mm.

La tabella 6.14 mostra le concentrazioni limite minima e massima misurabili in funzione del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} in caso di un cammino ottico pari a $l = 6\ cm$. Siccome in questo caso il cammino ottico è diminuito di 10 volte per la relazione 4.10, si osserva che i limiti di concentrazione sia minimi sia massimi aumentano di 10 volte.

Tabella 6.14 - Concentrazioni limite misurabili variando il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), fissando il cammino ottico a l = 6 mm.

Q_{ext}	CM_{min} (g/m^3)	CM_{max} (g/m^3)
1	469,49	10260,32
1,5	312,99	6840,21
2	234,74	5130,16
2,5	187,79	4104,13
3	156,50	3420,11
3,5	134,14	2931,52
4	117,37	2565,08
4,5	104,33	2280,07

Dalla tabella 6.14 si può ricavare per la configurazione con $l = 6\ mm$ che il fattore Q_{ext} ottimo (range di concentrazione tra 30-2500 g/m^3) si ottiene con il un valore vicino a $Q_{ext} = 4$. In particolare se si considera lineare la variazione di Q_{ext} per CM_{max} compreso tra 2565 e 2280 g/m^3 si ottiene un $Q_{ext} = 4.11$. Dalla figura 6.12 si osserva che ci sono due valori di lunghezza d'onda che soddisfano tale condizione: $\lambda = 20.53\ \mu m$ e $\lambda = 18.43\ \mu m$.

6.2.5 Calcolo della concentrazione considerando la distribuzione granulometrica

I programmi scritti finora calcolano la concentrazione stimando il fattore di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}) sulla base del raggio medio, assunto pari a metà del diametro corrispondente al cinquantesimo percentile in volume ($a = 13.37\ \mu m$). Per migliorare il codice si può stimare il fattore di estinzione (γ) tenendo conto della distribuzione granulometrica, come descritto nella sottosezione 4.3.2.

I calcoli e i grafici presenti in questa sottosezione sono stati ottenuti con il programma *conc_distribuzione*.

In figura 6.20 viene riportata la curva distributiva di densità di probabilità in volume dell'amido di mais impiegato in laboratorio. Si osserva la presenza di due massimi relativi: il più piccolo intorno a $2.5\ \mu m$, mentre il più grande intorno ai $20\ \mu m$.

In figura 6.21 viene invece riportata la curva distributiva di densità di probabilità in numero. In questo caso la curva si sposta verso diametri più piccoli e le altezze dei due massimi si invertono. Infatti, il massimo relativo più grande si trova intorno ai $2.5\ \mu m$, mentre quello più piccolo intorno ai $10\ \mu m$.

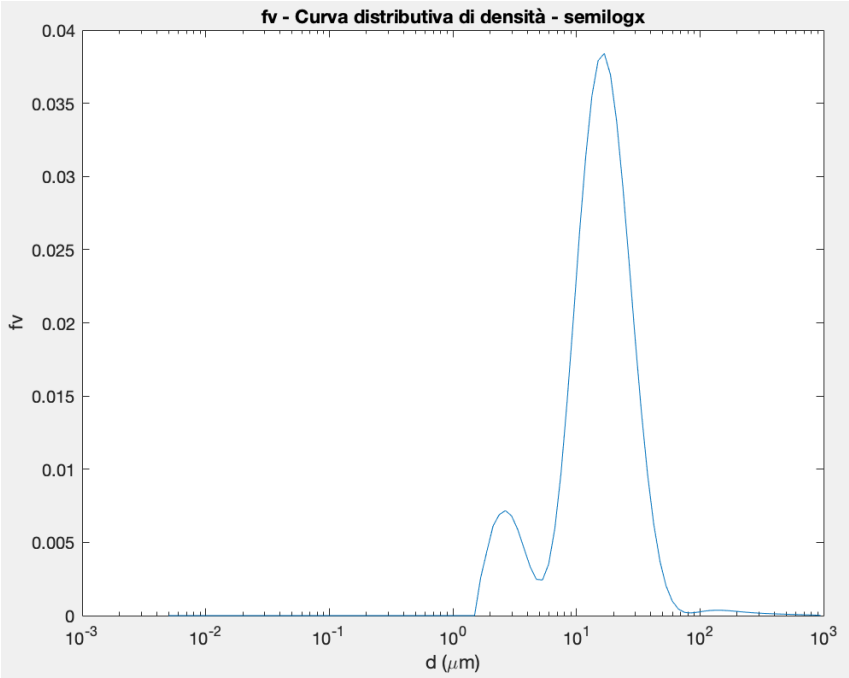

Figura 6.20 - Curva distributiva di densità di probabilità in volume dell'amido di mais impiegato in laboratorio.

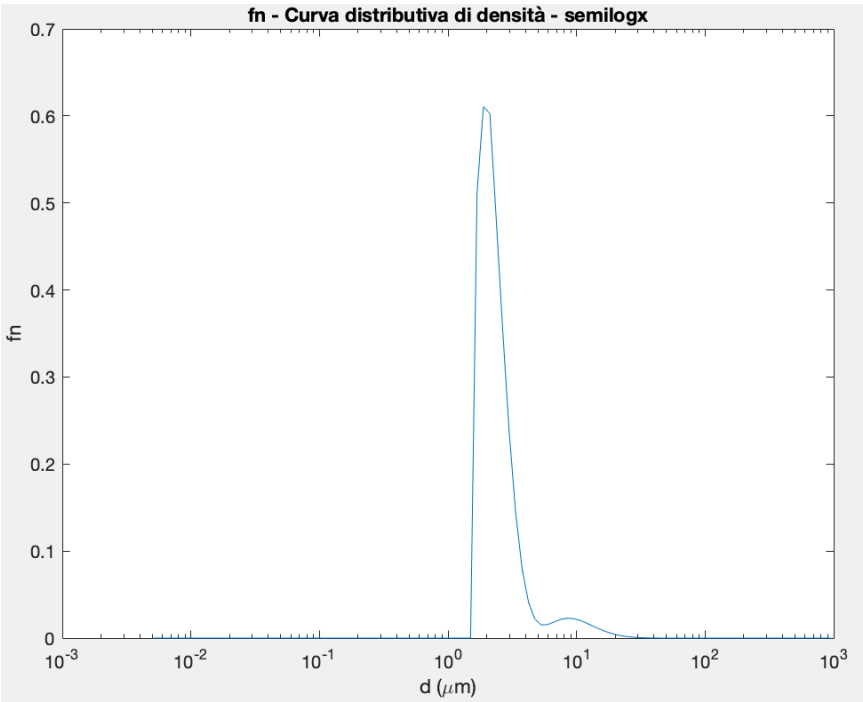

Figura 6.21 - Curva distributiva di densità di probabilità in numero dell'amido di mais impiegato in laboratorio.

Le distribuzioni granulometriche vengono importante da un foglio Excel all'interno del programma Matlab. La distribuzione di densità che viene utilizzata realmente nei calcoli sarà solo quella numerica, in quanto il fattore di estinzione è legato al numero di particelle presenti nel sistema.

La concentrazione numerica viene calcolata tramite l'equazione 4.21, mentre quella massica tramite la relazione 4.25. In tali espressioni sono richiesti: la costante R (equazione 4.19) e il momento di ordine tre M_3 (contenuto nell'equazione 4.25). Queste ultime grandezze si ottengono integrando la distribuzione granulometrica numerica (mostrata in figura 6.21), tramite una formula di quadratura. Nell'algoritmo scritto per questa tesi come formula di quadratura si è deciso di scegliere la formula dei trapezi composta, per una generica funzione integranda $f(x)$, si ottiene:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{2m}\left[f(x_1) + 2\sum_{i=2}^{m} f(x_i) + f(x_{m+1})\right] \tag{6.12}$$

Dove a e b sono gli estremi di integrazione e $m+1$ sono il numero di nodi impiegati nella formula di quadratura.

Le figure 6.22 e 6.23 rappresentano la variazione della concentrazione (numerica e massica) al variare della trasmittanza misurata dal sensore, in un caso assumendo il sistema come monodisperso con diametro pari al diametro medio superficiale, mentre nell'altro considerando il sistema reale (polidisperso) descritto dalla curva distributiva di densità numerica (figura 6.21). Entrambe le curve sono state valutate assumendo un cammino ottico pari a $l = 6\ cm$.

Si osserva che le curve che descrivono la concentrazione massica sono quasi sovrapposte, mentre quelle che descrivono la concentrazione numerica sono piuttosto distanti. Questo significa che il diametro medio superficiale descrive bene il comportamento dell'intera distribuzione dimensionale solo nel caso di concentrazione massica. Tramite l'equazione 4.26 è possibile stimare il fattore di efficienza per l'estinzione medio $\overline{Q_{ext}} = 2.17$, che permette di ottenere esattamente la stessa curva del sistema polidisperso considerando come parametro solamente il diametro medio superficiale, nel caso della concentrazione massica.

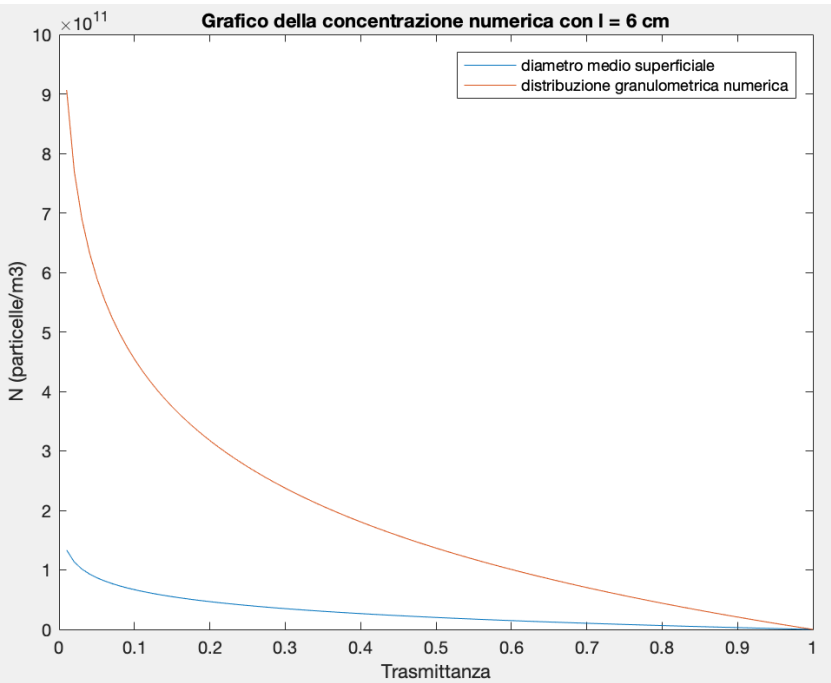

Figura 6.22 - Rappresentazione della variazione della concentrazione numerica (N) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$), con un cammino ottico pari a l = 6 cm. La curva blu è stata calcolata considerando il sistema come monodisperso con diametro delle particelle pari a quello medio superficiale, mentre la curva arancione considerando l'intera distribuzione granulometrica.

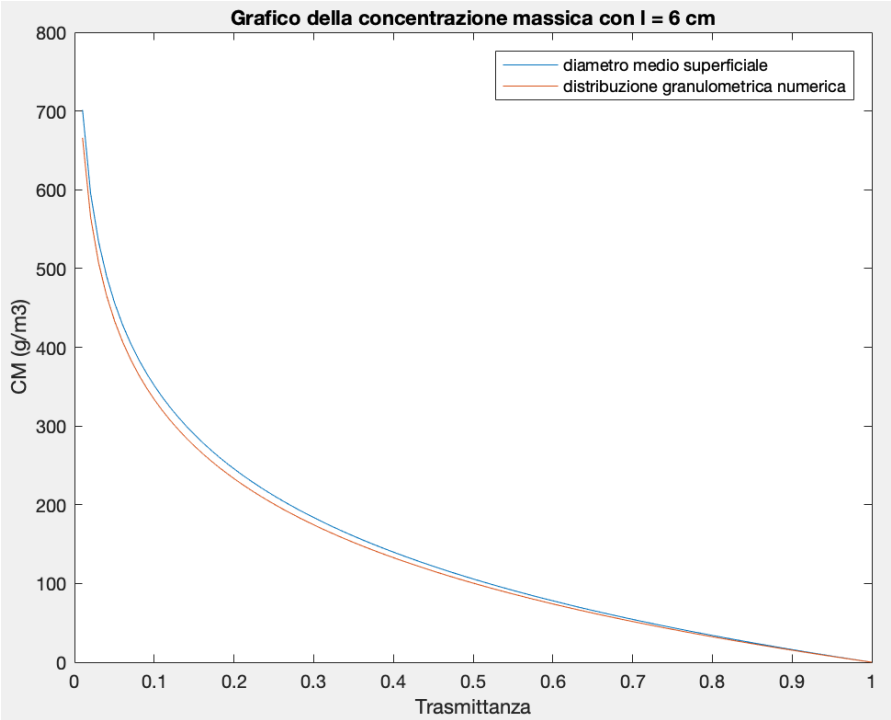

Figura 6.23 - Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$), con un cammino ottico pari a l = 6 cm. La curva blu è stata calcolata considerando il sistema come monodisperso con diametro delle particelle pari a quello medio superficiale, mentre la curva arancione considerando l'intera distribuzione granulometrica.

Le figure 6.24 e 6.25 permettono di confrontare la variazione della concentrazione (numerica e massica) al variare della trasmittanza misurata dal sensore considerando il sistema come monodisperso (avente come diametro medio: quello numerico, quello superficiale o il cinquantesimo percentile in volume) oppure l'intera distribuzione granulometrica (sistema polidisperso). Entrambe le famiglie di curve sono state sempre valutate assumendo un cammino ottico pari a $l = 6\ cm$.

La curva raffigurante la concentrazione massica, impiegando il cinquantesimo percentile è esattamente uguale a quella rappresentata in figura 6.14. Si osserva che le curve valutate utilizzando il diametro medio superficiale e la distribuzione granulometrica sono abbastanza simili rispetto a quella valutata impiegando il cinquantesimo percentile in volume. Mentre risulta rilevante la differenza tra le curve calcolate impiegando il raggio medio numerico e le altre. Questo significa che il diametro medio numerico non è idoneo a rappresentare l'intera distribuzione dal punto di vista della concentrazione massica. D'altro canto il diametro medio superficiale (come descritto nella sottosezione 4.3.2) è quello idoneo nel rappresentare il comportamento dell'intera popolazione di particelle con un sistema monodisperso.

Le discrepanze ottenute con le diverse curve sono spiegate dai differenti valori assunti dai diversi diametri medi impiegati. In particolare, il diametro medio numerico corrisponde a $4.946\ \mu m$, il cinquantesimo percentile in volume corrisponde a un diametro di $26.736\ \mu m$, mentre il diametro medio superficiale corrisponde a $18.852\ \mu m$.

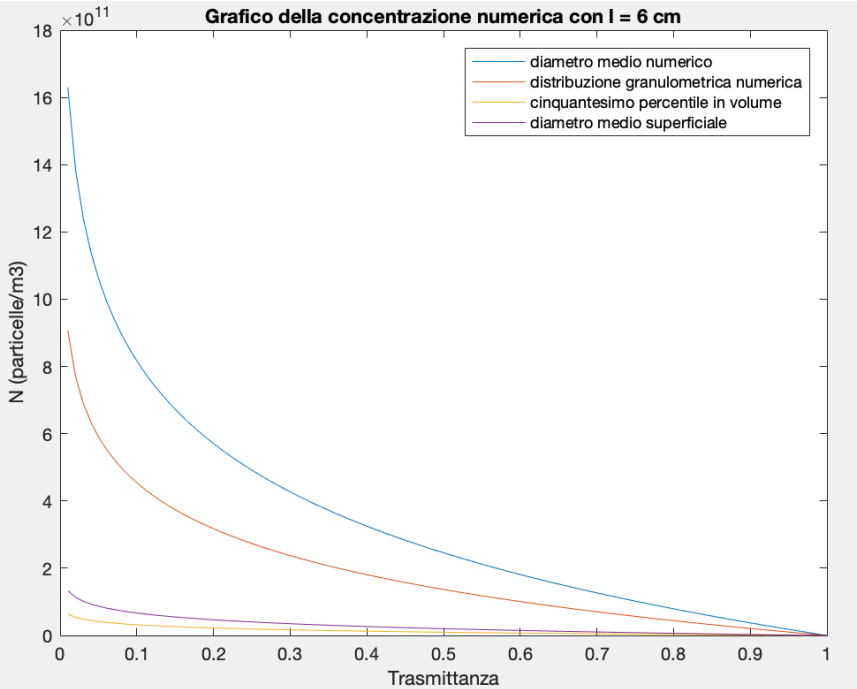

Figura 6.24 - Rappresentazione della variazione della concentrazione numerica (N) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$), con un cammino ottico pari a l = 6 cm. La curva blu è stata calcolata considerando il sistema come monodisperso con diametro delle particelle pari a quello medio numerico, la curva gialla considerando il cinquantesimo percentile in volume, la curva viola il diametro medio superficiale, la curva arancione l'intera distribuzione granulometrica.

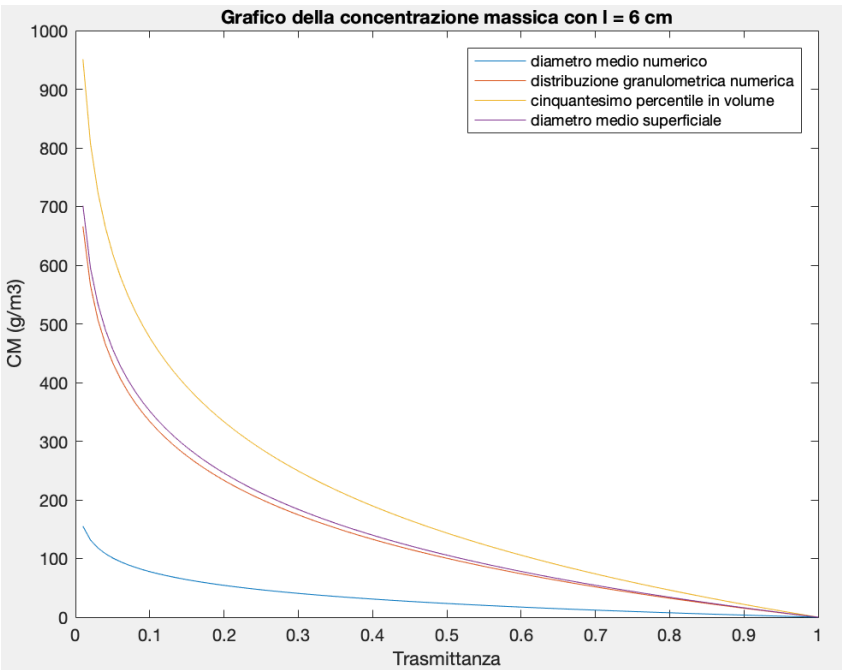

Figura 6.25 - Rappresentazione della variazione della concentrazione massica (CM) misurata dal sensore in funzione della trasmittanza ($T = I/I_0$), con un cammino ottico pari a l = 6 cm. La curva blu è stata calcolata considerando il sistema come monodisperso con diametro delle particelle pari a quello medio numerico, la curva gialla considerando il cinquantesimo percentile in volume, la curva viola il diametro medio superficiale, la curva arancione l'intera distribuzione granulometrica.

La tabella 6.15 mostra le concentrazioni limite misurabili dal sensore calcolate considerando il sistema come polidisperso (con l'intera distribuzione granulometrica) oppure monodisperso (con il diametro medio pari a quello numerico e il cinquantesimo percentile in volume. Il cammino ottico usato risulta pari a $l = 6\ cm$. Per quanto riguarda il cinquantesimo percentile i risultati sono analoghi a quelli contenuti nelle tabelle 6.10 e 6.11. I valori calcolati con la distribuzione granulometrica e con il diametro medio superficiale sono simili: la maggiore discrepanza si riscontra per il valore di CM_{max}, in quanto per bassi valori di trasmittanza la curva tende a raggiungere un valore infinito (vedere relazione 6.11), quindi piccole variazioni dei dati iniziali (in questo caso sul raggio medio) vengono amplificate e portano a risultanti abbastanza diversi. Invece come già osservato dai grafici 6.34 e 6.25, si evidenzia una differenza di circa un ordine di grandezza tra i risultati ottenuti considerando l'intera distribuzione o il raggio medio superficiale, rispetto a quelli ottenuti impiegando il raggio medio numerico.

Tabella 6.15 - Concentrazioni limite misurabili dal sensore considerando l'intera distribuzione oppure il sistema monodisperso con diametro medio pari a: medio superficiale, medio numerico o il cinquantesimo percentile in volume. Il cammino ottico è fissato a l = 6 mm.

	CM_{min} (g/m^3)	**CM_{max}** (g/m^3)
Distribuzione numerica	15,27	333,70
Diametro medio superficiale	16,08	351,41
Diametro medio numerico	3,55	77,66
50-esimo percentile in volume	21,81	476,61

6.3 Misura della concentrazione nel tubo di Hartmann

La teoria di Mie e i programmi scritti in questa tesi hanno l'obiettivo di interpretare i valori sperimentali di intensità luminosa in concentrazione. Pertanto, in quest'ultima sezione si descrive il tubo di Hartmann (l'apparecchiatura in cui si vuole studiare l'evoluzione della dinamica della concentrazione della nube di polvere) e successivamente si valuterà la concentrazione partendo da misure sperimentali di trasmittanza.

6.3.1 Tubo di Hartmann

Il tubo di Hartmann viene usato per misurare l'energia minima d'innesco (MIE) di una nube di polvere. Una rappresentazione schematica dell'apparecchiatura è illustrata in figura 6.26. Esso consiste in un cilindro di vetro, con un volume di 1.2 l, nel quale viene dispersa da un getto di aria in pressione in una nube, una quantità nota di polvere e successivamente viene esposta a una sorgente di innesco (solitamente un arco elettrico) [2, 6].

L'apparecchiatura in dotazione al Centro sperimentale per la sicurezza industriale delle atmosfere esplosive al Politecnico di Torino è un tubo di Hartamnn modificato. La principale modifica rispetto alla versione originale è che la parte superiore del cilindro risulta apribile (all'inizio della prova è chiusa mediante un foglio di carta da filtro che si apre in caso di esplosione), in modo da permettere alla sovrappressione che sospende la polvere di sfogarsi liberamente. La seconda importante modifica prevede la sostituzione degli elettrodi necessari per l'innesco (in quanto lo scopo delle misure è solamente sviluppare un metodo per stimare la concentrazione della nube) con la strumentazione necessaria per eseguire le misure ottiche

(emettitore infrarosso e fotodiodo). Infine, il tubo è realizzato con vetro trasparente, in modo da poter osservare la dinamica della nube di polvere.

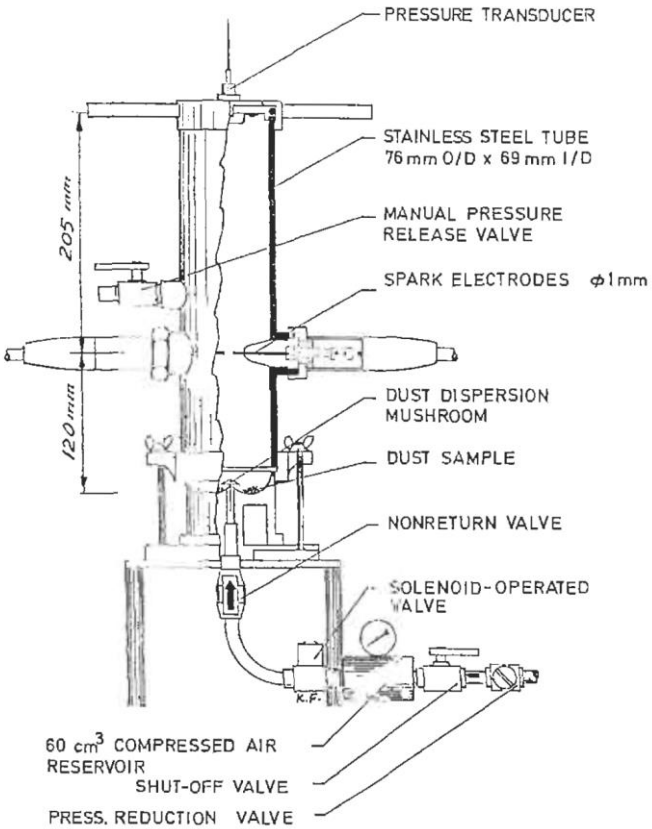

Figura 6.26 – Rappresentazione schematica del tubo di Hartmann da 1.2 l. Permette di valutare la pressione sviluppata nelle esplosioni di polvere a volume costante. La versione modificata, usata in laboratorio risulta aperta superiormente, al posto degli elettrodi è presente il sensore ottico ed infine il corpo dell'apparecchiatura è costruito in vetro trasparente (da Eckhoff [2]).

La polvere che si utilizza per gli esperimenti è amido di mais, la cui curva distributiva di densità di probabilità è descritta dalle figure 6.20 (in volume) e 6.21 (in numero). Tale sostanza presenta un indice di rifrazione di $m = 1.5$ [62, 63] e una densità (della particella) pari a $\rho = 1500\ kg/m^3$ [64].

La procedura operativa è la seguente: si pone una quantità nota di polvere nel portacampione posto in fondo al tubo, si stabilisce la pressione desiderata dello sparo immettendo una quantità opportuna di aria compressa nel serbatoio polmone, si avvia il sistema di acquisizione dei dati dell'intensità e infine si apre la valvola a fungo che permette la dispersione della polvere e la formazione della nube. Il sensore rileva la dinamica della nube di polvere e i dati vengono acquisiti dal calcolatore. I risultati ottenuti vengono salvati su un foglio Excel e successivamente elaborati dal codice Matlab.

6.3.2 Interpretazione di una curva sperimentale

Purtroppo a causa della pandemia dovuta al Covid-19, ho potuto recarmi in laboratorio solo un paio di volte, non sufficienti per avviare una campagna sperimentale di misure. Pertanto in questa sottosezione verrà valutata la concentrazione di una curva sperimentale, fornita dai miei relatori, misurata in precedenza nell'apparecchiatura descritta nella sottosezione 6.3.1.

I calcoli e i grafici presenti in questa sottosezione sono stati ottenuti con il programma *conc_prove*.

Un esempio di curva sperimentale misurata con il metodo descritto nella sottosezione 6.3.1 è rappresentata in figura 6.27, utilizzando una pressione nello sparo di 7 bar, una quantità di polvere pari a 0.5 g e infine un cammino ottico pari a circa $l = 6.5\ cm$. Note la massa ($m = 0.5\ g$) utilizzata per la prova e il volume del tubo ($V = 1.2\ l$) è possibile calcolare la concentrazione massica nominale ($C_{M,nom}$), cioè la concentrazione che si avrebbe se la nube si disperdesse uniformemente su tutto il volume disponibile:

$$C_{M,nom} = \frac{m_{prova}}{V} = 416{,}67\ \ g/m_3 \tag{6.13}$$

In particolare, in figura 6.27 si osserva all'inizio un segnale circa costante con valore medio intorno a $I_0 = 5678\ mV$, questa è la fase in cui si è avviata la registrazione dei valori di intensità ma non si è ancora iniziata la prova, sospendendo la polvere. Una volta avviato lo sparo, la pressione fluidizza la polvere, formando una nube che transita davanti al sensore, con la conseguenza di portare alla rapida discesa il valore di intensità misurato. Nell'ultima fase la polvere sospesa nel tubo, per la forza di gravità, sedimenta e perciò l'intensità aumenta nuovamente fino a raggiungere il valore finale $I_{0,fin} = 5230\ mV$. Si osserva però che $I_0 \neq I_{0,fin}$, cioè il valore di intensità all'inizio della prova in assenza di povere nel tubo di Hartmann è diversa dall'intensità che si rileva alla fine della prova quando tutta la polvere è sedimentata. Tale problematica è spiegata dallo sporcamento dei sensori (vedere sezione 1.3). Infatti, nell'apparecchiatura utilizzata in laboratorio non è presente un sistema di pulizia dell'emettitore e del fotodiodo tramite l'immissione continua di un getto di aria compressa. Per cui durante l'evoluzione della nube, parte della polvere si deposita sui sensori comportando un inevitabile abbassamento dell'intensità misurata.

Le misure condotte nel tubo di Hartmann presentano dei picchi locali dovuti principalmente a due fattori:

- Rumore nei sensori e nell'apparecchiatura elettronica di acquisizioni dei dati.
- Il sistema studiato presenta una certa turbolenza (vedere sottosezione 1.2.6), che è caratterizzata da un moto caotico della polvere su piccole scale temporali.

Tutte le curve sperimentali condotte nel tubo di Hartmann presentano un andamento simile a quella rappresentata in figura 6.27.

In figura 6.28 vengono riportati i valori di trasmittanza ($T = I/I_0$) in funzione del tempo.

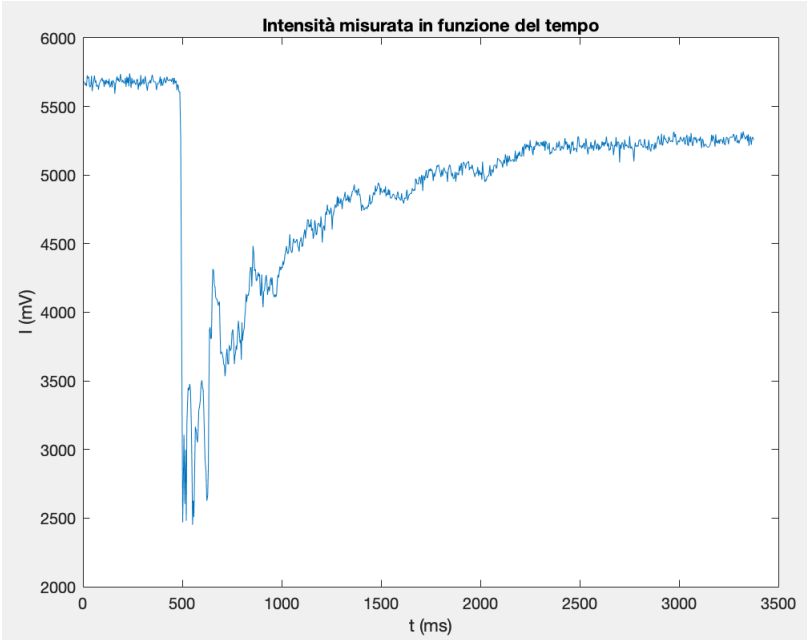

Figura 6.27 – Curva sperimentale misurata nel tubo di Hartmann, utilizzando un sensore IR con $\lambda = 0.85\ \mu m$. Viene riportato l'intensità del segnale misurato dal sensore in mV, in funzione del tempo in ms. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm.

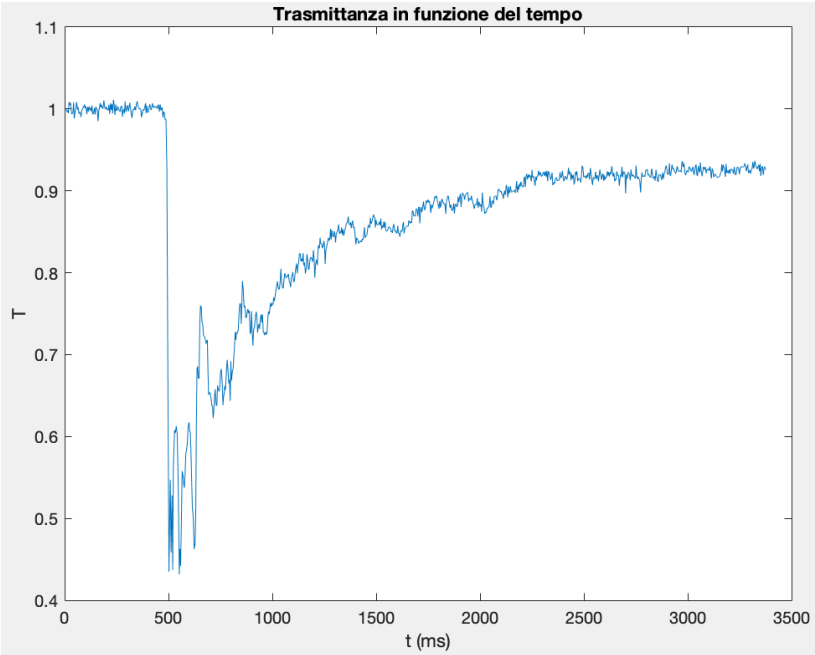

Figura 6.28 - Curva sperimentale misurata nel tubo di Hartmann, utilizzando un sensore IR con $\lambda = 0.85\ \mu m$. Viene riportato la trasmittanza ($T = I/I_0$) misurata dal sensore, in funzione del tempo in ms. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm.

Applicando la teoria di Mie per calcolare il fattore di efficienza per l'estinzione (relazione 4.12) e la legge di Lambert-Beer è possibile stimare la concentrazione numerica di particelle (equazione 4.6) e quella massica (equazione 4.10) nel tubo di Hartmann, dai valori di intensità riportati in figura 6.27.

Si rappresentano i valori della concentrazione numerica (figura 6.29) e di quella massica (figura 6.30), calcolando il fattore di efficienza per l'estinzione assumendo come diametro medio il cinquantesimo percentile in volume.

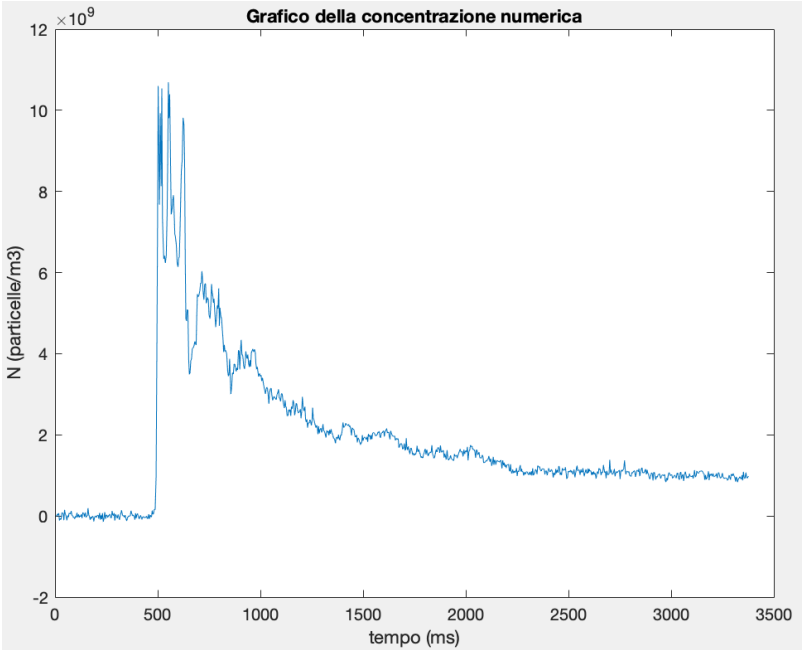

Figura 6.29 - Concentrazione numerica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si è impiegato il cinquantesimo percentile in volume.

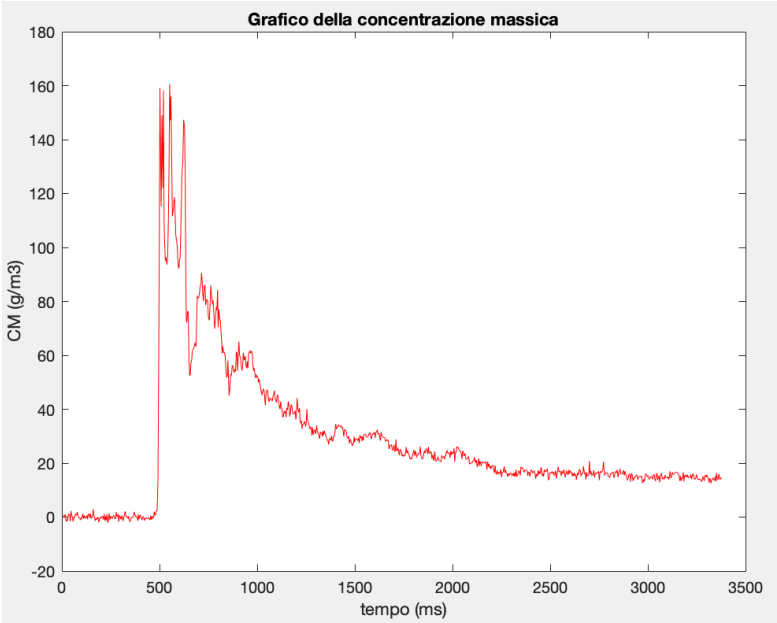

Figura 6.30 - Concentrazione massica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si è impiegato il cinquantesimo percentile in volume.

Si rappresentano i valori della concentrazione numerica (figura 6.31) e di quella massica (figura 6.32), calcolando il fattore di efficienza per l'estinzione assumendo come diametro medio quello numerico.

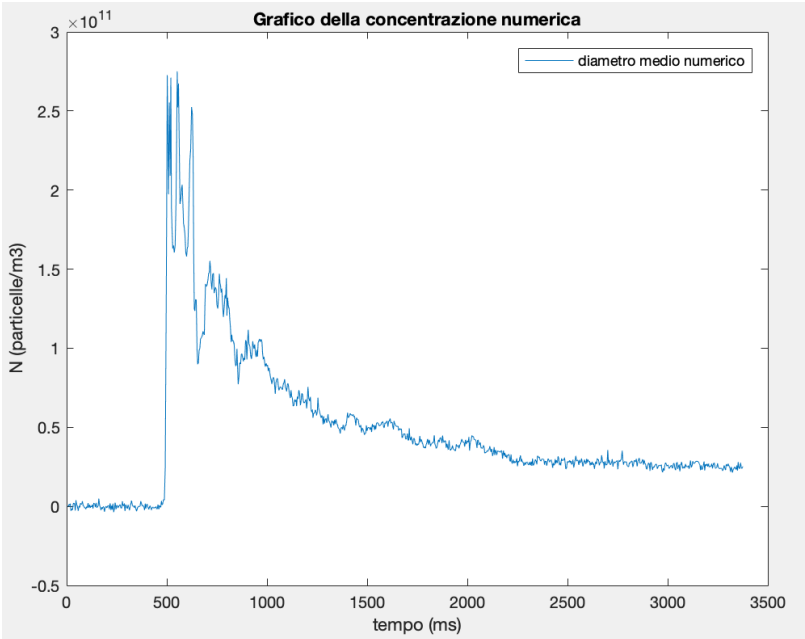

Figura 6.31 - Concentrazione numerica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si è impiegato il diametro medio numerico.

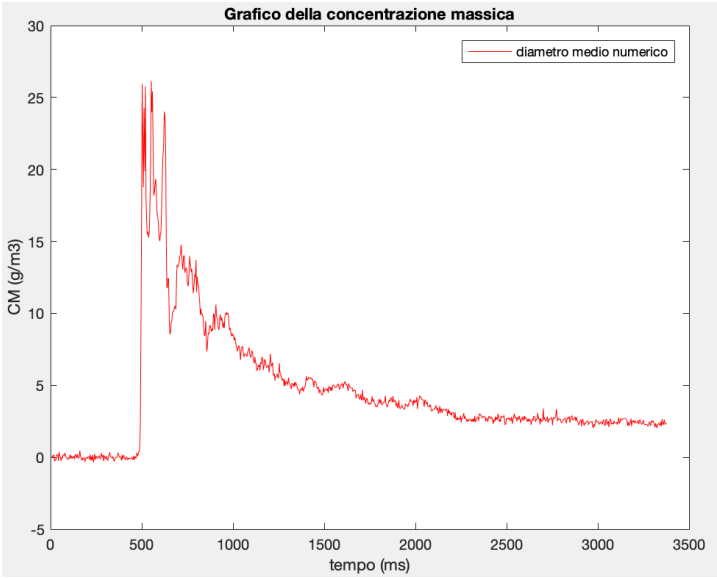

Figura 6.32 - Concentrazione massica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si è impiegato il diametro medio numerico.

Si rappresentano i valori della concentrazione numerica (figura 6.33) e di quella massica (figura 6.34), confrontando le curve ottenute considerando come raggio medio quello superficiale oppure l'intera distribuzione. Nel caso dell'impiego del raggio medio si sono usate le equazioni 4.6 e 4.10, mentre nel caso con la distribuzione granulometrica si sono usate le equazioni 4.27 e 4.31.

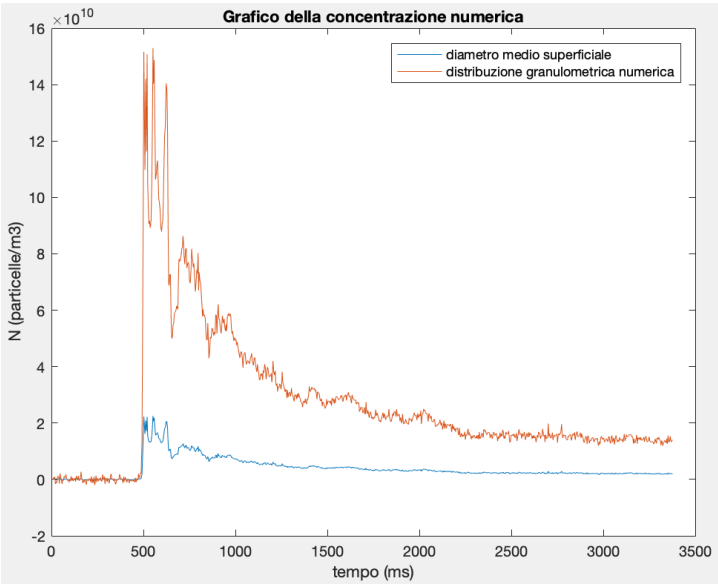

Figura 6.33 - Concentrazione numerica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si sono impiegati: il raggio medio superficiale (curva blu) e l'intera distribuzione granulometrica numerica (curva arancione).

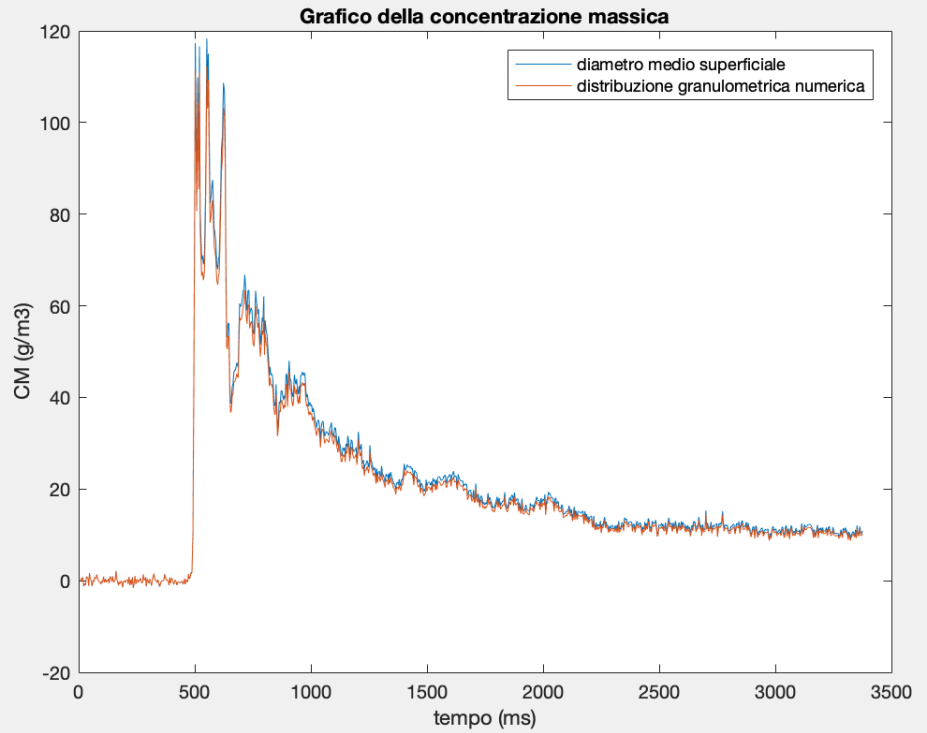

Figura 6.34 - Concentrazione massica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si sono impiegati: il raggio medio superficiale (curva blu) e l'intera distribuzione granulometrica numerica (curva arancione).

Si rappresentano i valori della concentrazione numerica (figura 6.35) e di quella massica (figura 6.36), confrontando le curve ottenute considerando il sistema rappresentato come monodisperso con un raggio medio pari alla media numerica, al cinquantesimo percentile in volume e alla media superficiale oppure il sistema reale (polidisperso) con l'intera distribuzione numerica.

Dai precedenti grafici 6.28-6.34 si può osservare che all'inizio la concentrazione risulta nulla, avviato lo sparo la polvere viene fluidizzata, si raggiunge la concentrazione massima e successivamente le particelle sedimentano gradualmente fino a raggiungere un valore costante. Non si raggiunge un valore di concentrazione nulla alla fine della prova a causa dello sporcamento dei sensori.

Le curve di concentrazione massica interpretate utilizzando il diametro medio superficiale e l'intera distribuzione presentano dei valori di concentrazione molto simili. Mentre queste due curve differiscono di circa un ordine di grandezza rispetto a quella prodotta usando il diametro medio numerico. Tale differenza è imputabile al diverso valore assunto dal raggio medio numerico e dal cinquantesimo percentile in volume come già descritto nella sottosezione 6.2.5.

In letteratura viene riportato che le procedure migliori per interpretare i valori di concentrazione massica dai dati sperimentali prevedono l'utilizzo dell'intera distribuzione oppure del diametro medio superficiale (D_{32}) (vedere sottosezione 4.3.2) [28, 29, 69].

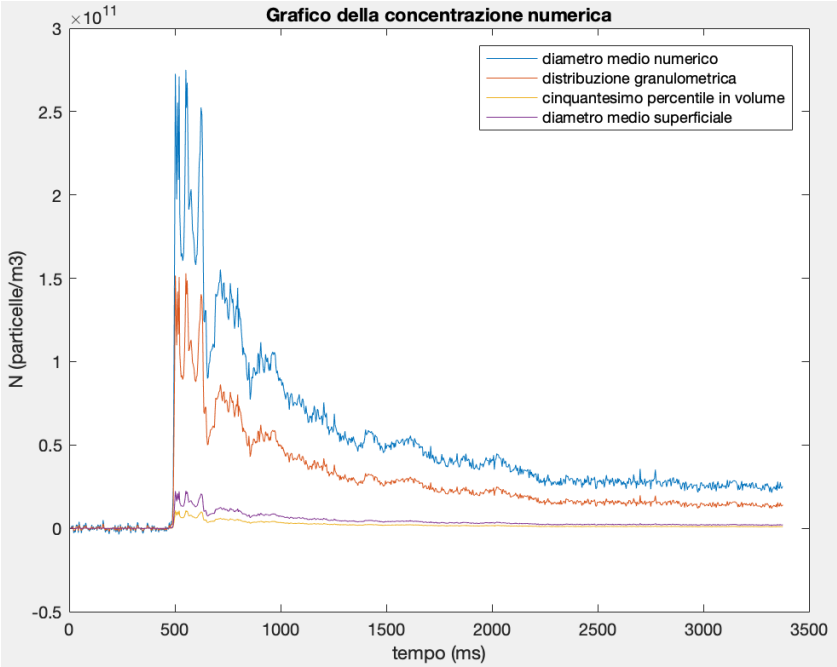

Figura 6.35 - Concentrazione numerica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si sono impiegati: il diametro medio numerico (curva blu), l'intera distribuzione granulometrica numerica (curva arancione), il cinquantesimo percentile in volume (curva gialla) e il diametro medio superficiale (curva viola).

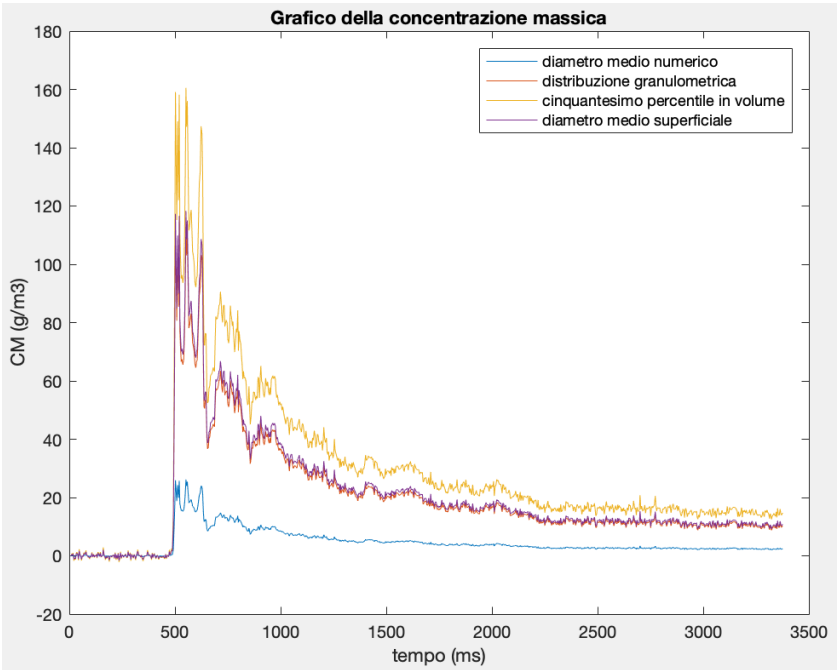

Figura 6.36 - Concentrazione massica di particelle nella nube all'interno del tubo di Hartmann in funzione del tempo. Parametri utilizzati nell'esperimento: pressione dello sparo pari a 7 bar, massa di polvere pari a 0.50 g, cammino ottico pari a circa l = 6.5 cm. Nel calcolo del coefficiente di estinzione si sono impiegati: il diametro medio numerico (curva blu), l'intera distribuzione granulometrica numerica (curva arancione), il cinquantesimo percentile in volume (curva gialla) e il diametro medio superficiale (curva viola).

Per valutare la precisione del modello matematico proposto per interpretare i dati di trasmittanza è necessario eseguire ulteriori prove sperimentali per confrontare i valori numerici forniti dal metodo proposto per questa tesi con quelli ottenuti tramite una curva di calibrazione.

Le equazioni ricavate dalla teoria di Mie sono valide solo nel caso di scattering indipendente, tale condizione si incontra se la distanza tra le particelle è più grande di 3-4 volte il raggio delle particelle (sottosezione 2.1.2). Impiegando il modello descritto nella figura 1.3, si considerano le particelle come dei piccoli cubi, allora dall'equazione 1.3, rapporto lunghezza/raggio per il caso simulato in laboratorio ($\rho = 1500\ kg/m^3$ e $C_{M,nom} = 400\ g/m^3$) vale $L/x = 15{,}33$. Per cui anche nel caso in esame vale la condizione di scattering indipendente.

6.3.4 Confronto con curva di calibrazione sperimentale

Per valutare la correttezza dei risultati prodotti dal modello numerico, sviluppato per questa tesi, è necessario confrontarli con quelli forniti da una curva di taratura. La curva di calibrazione per l'amido di mais e i sensori usati in laboratorio è rappresentata in figura 6.37. Gli esperimenti sono stati condotti misurando l'intensità luminosa estinta da uno strato di polvere (con massa nota e quindi concentrazione massica nota), posto su un vetrino. Poi i risultati delle prove sono stati ricondotti a un cammino ottico pari a $l = 6\ cm$.

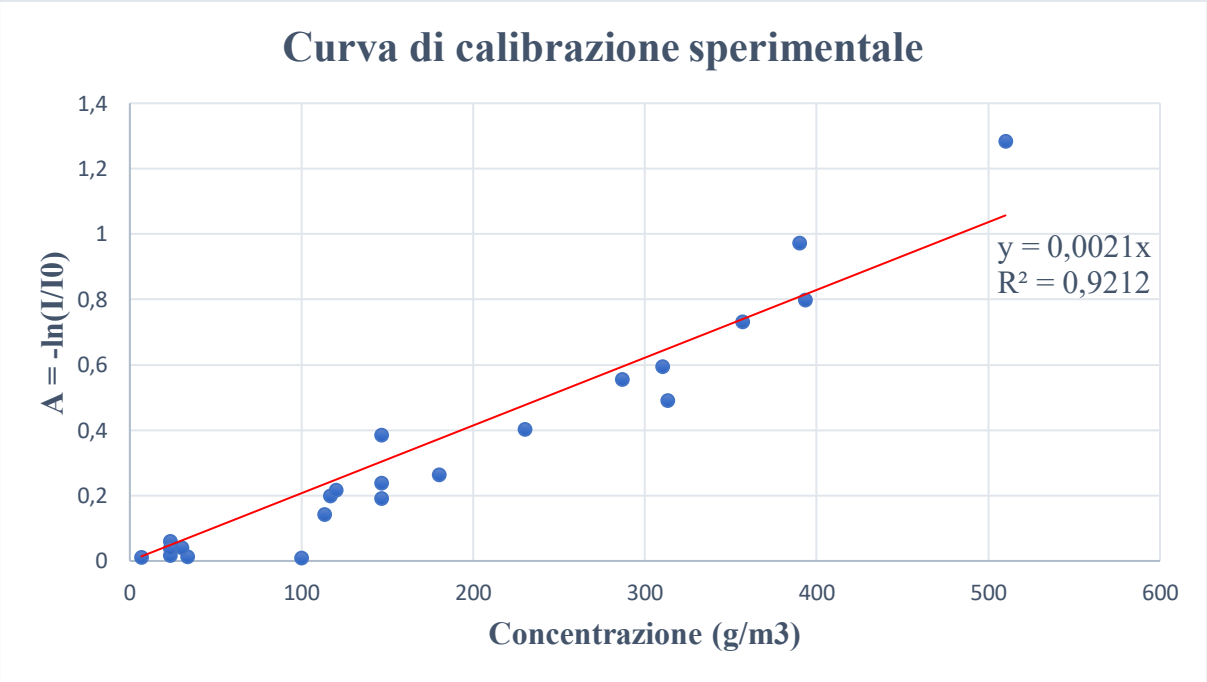

Figura 6.37 – Retta di calibrazione rappresentante l'assorbanza (A) del sistema, misurata sperimentalmente, in funzione della concentrazione massica (C_M) per un cammino ottico equivalente pari a $l = 6\ cm$.

Se si rappresenta l'assorbanza del sistema $A = -\ln(I/I_0)$ in funzione della concentrazione massica C_M, in accordo alla legge di Lambert (equazione 1.5), si ottiene una linea retta. Infatti, prendendo il logaritmo naturale di entrambi i membri della relazione 1.5 si perviene a:

$$A = -\ln(I/I_0) = -\ln(T) = \varepsilon \cdot l \cdot C_M \tag{6.14}$$

Si osserva che i dati sperimentali si distribuiscono abbastanza bene intorno a una linea retta con un buon coefficiente di determinazione pari $R^2 = 0.92$.

Dall'equazione 6.14 essendo noto il cammino ottico (l), si può ricavare il valore dell'assorbività massica (ε) dalla pendenza della retta:

$$\varepsilon \cdot l = 0.0021 \rightarrow \varepsilon = 0.0021/l = 0.035\ m^2/g \qquad (6.15)$$

Nota l'assorbività massica ε, è possibile confrontare i valori di assorbanza (A) e di trasmittanza (T) in funzione della concentrazione massica nel sistema, valutati tramite la curva di taratura sperimentale (equazione 6.14) e tramite il modello sviluppato per questa tesi (equazione 4.25), che tiene conto dell'intera distribuzione granulometrica.

I grafici riportati in questa sottosezione (6.3.4) sono stati ottenuti con il programma Matlab *confronto_curva_taratura*.

La figura 6.38 rappresenta il valore di assorbanza in funzione della concentrazione massica per i dati misurati sperimentalmente e per i valori prodotti dal modello matematico, nel caso di cammino ottico pari a $l = 6.5\ cm$.

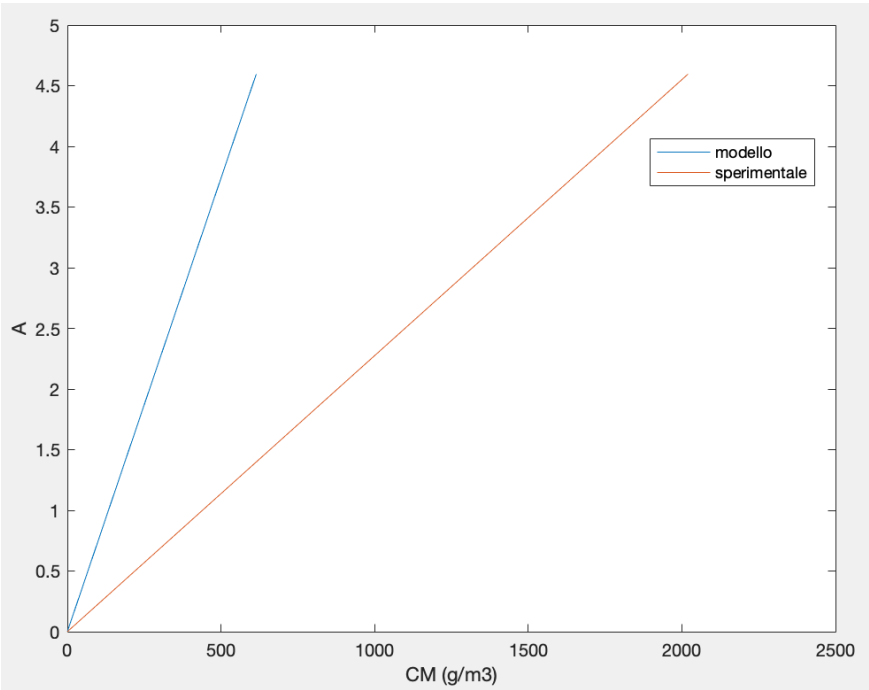

Figura 6.38 – Confronto tra il modello matematico e i valori sperimentai dei valori di assorbanza (A) in funzione della concentrazione massica (C_M) nel caso di cammino ottico pari a $l = 6.5\ cm$.

La figura 6.39 rappresenta il valore della concentrazione massica in funzione della trasmittanza per i dati sperimentali e nel caso del modello matematico.

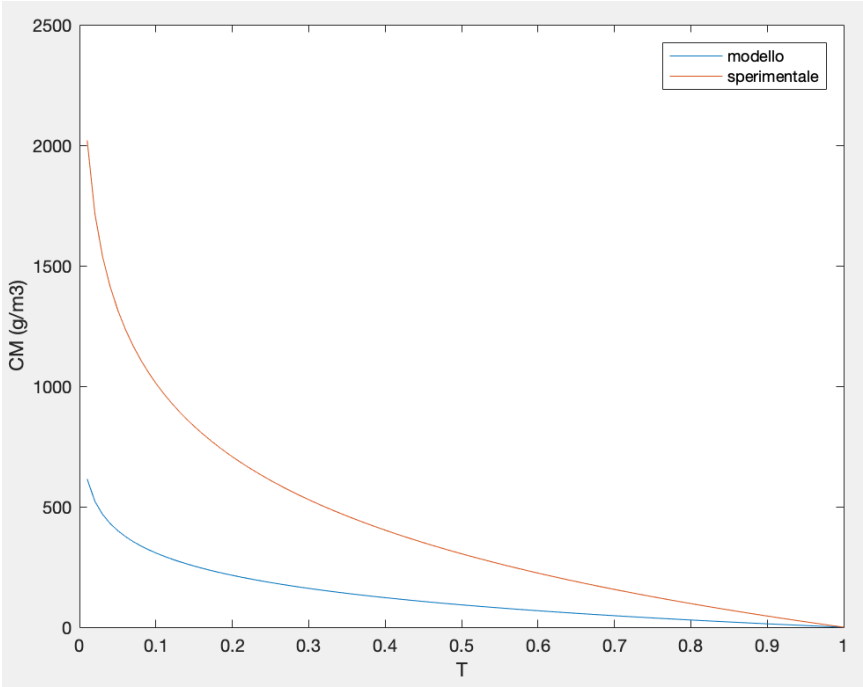

Figura 6.39 - Confronto tra il modello matematico e i valori sperimentai dei valori concentrazione massica (C_M) in funzione della trasmittanza (T) nel caso di cammino ottico pari a $l = 6.5\ cm$.

Con il valore di $\varepsilon = 0.035\ m^2/g$ e tramite l'equazione 6.14, è possibile assegnare un valore di concentrazione massica ai dati della curva sperimentale, misurati nel tubo di Hartmann, rappresentati in figura 6.27. Il confronto tra il modello matematico e i valori ottenuti dalla curva di taratura è rappresentato in figura 6.40.

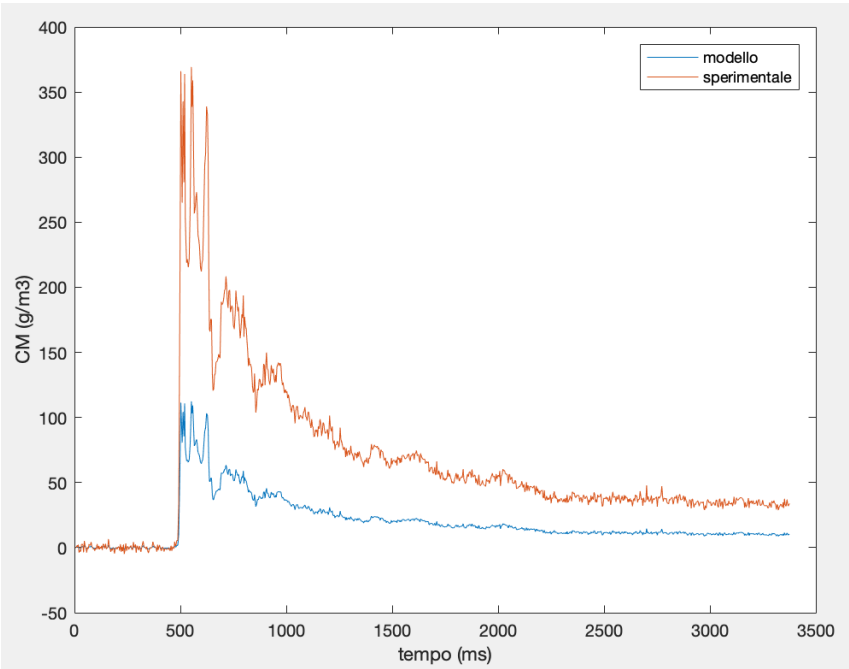

Figura 6.40 - Confronto tra il modello matematico e i valori ottenuti dalla curva di taratura, della concentrazione massica (C_M) in funzione del tempo (ms) all'interno del tubo di Hartmann, nel caso di cammino ottico pari a $l = 6.5\ cm$.

Dalla figura 6.40 si osserva una differenza di circa tre volte tra i valori di concentrazione massica predetti dal modello matematico, che considera l'intera distribuzione granulometrica, e la curva di taratura. Non è chiaro a quale fattore tale discrepanza sia dovuta. La nube di polvere costituita da degli "*eddy"* turbolenti, nei pressi del sensore (e lungo il cammino ottico) presenta delle forti disomogeneità con zone molto diluite e altre molto concentrate in cui lo scattering potrebbe non essere singolo.

7. Conclusioni

La natura iniziale della tesi avrebbe dovuto essere sperimentale: sviluppo di un metodo ottico efficace per la misura della concentrazione di una nube di polvere nel tubo di Hartman, nel Centro sperimentale per la sicurezza industriale delle atmosfere esplosive al Politecnico di Torino. A causa della pandemia Covid-19, non ho potuto recarmi in laboratorio per eseguire la campagna sperimentale programmata, per cui si è deciso di approfondire maggiormente i principi teorici dello scattering, dell'assorbimento e dell'estinzione alla base delle misure di concentrazione. Le formule derivanti dallo scattering sono state poi implementate in codice Matlab, approfondendo in modo particolare il concetto di stabilità nelle formule di ricorrenza necessarie per valutare le funzioni di Bessel.

In questa tesi si è partiti (capitolo 1) sottolineando la grave problematica delle esplosioni di polveri nell'ambito della sicurezza industriale riportando alcuni dati rilevanti di tali incidenti avvenuti in USA, Cina e nel mondo. Successivamente, si sono riportati i fondamenti della dinamica di un'esplosione di polvere focalizzandosi soprattutto sull'importanza dell'area superficiale specifica di una polvere. Infatti, polveri con dimensioni più piccole risultano più facili da innescare e la loro combustione avviene con velocità maggiore con la conseguenza di una maggiore gravità nell'esplosione. Si sono poi riportati (sezione 1.3) alcuni esempi di strumentazioni atte ad effettuare misure ottiche di concentrazione. La maggior parte degli autori impiega come radiazione elettromagnetica il visibile o l'infrarosso. Una problematica comune è lo sporcamento dell'emettitore e della sonda di misura a causa dell'accumulo di polvere durante l'evoluzione della nube. Per ovviare a questo inconveniente è necessario introdurre dei getti di aria compressa in vicinanza delle lenti dei dispositivi ottici per mantenerli puliti.

Il secondo capitolo tratta i fondamenti dello scattering, dell'assorbimento e dell'estinzione. Viene introdotta l'ipotesi di scattering indipendente, cioè si calcola lo scattering di ciascuna particella come se questa fosse da sola. In caso di N particelle, l'intensità luminosa dispersa sarà N volte quella dispersa da una singola particella. Come si è visto, nel campo dimensionale d'interesse questa condizione risulta sempre verificata per concentrazioni di polveri anche di 2/3 kg/m^3, che corrispondono al limite superiore di esplosività di polveri organiche. Quindi le formule sviluppate in questa tesi, possono essere applicate per la misura della concentrazione di polveri nell'ambito della sicurezza industriale. Vengono introdotte le definizioni dei fattori di efficienza per l'estinzione, lo scattering e l'assorbimento. Inoltre vengono esposti i concetti introduttivi utili per descrivere la dispersione di una radiazione elettromagnetica.

Il terzo capitolo rappresenta il cuore di questa tesi, in quanto descrive la teoria di Mie cioè lo scattering di una radiazione a opera di una sfera di dimensioni arbitrarie. Tale teoria permette di descrivere l'interazione tra i fotoni e una particella di polvere. La soluzione di tale problema viene scritta tramite i coefficienti di Mie a_n e b_n, equazioni 3.71 e 3.72, che richiedono il calcolo delle funzioni di Bessel-Riccati. Da questa teoria si evince che i parametri necessari per valutare il fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} sono: l'indice di rifrazione della sfera m, la lunghezza d'onda della radiazione incidente λ e il raggio della particella a. Quest'ultime due grandezze sono condensate nel parametro di dimensione x. Sulla base del valore assunto da x si possono impiegare delle teorie asintotiche alla teoria di Mie: se $x \ll 1$ vale lo scattering di Rayleigh, per $x \gg 1$ vale l'ottica geometrica, mentre per $x \approx 1$ si deve ricorrere alla teoria di Mie (che è la più generale). Si è simulato il comportamento di un amido di mais avente un parametro di dimensione associato al cinquantesimo percentile in volume pari a $x \approx 100$. In tale condizione il sistema si trova in una zona intermedia (anche se abbastanza vicini all'ottica geometrica) per cui si è costretti a ricorrere alla teoria di Mie, che è la più generale.

Il quarto capitolo descrive le misure di scattering ed estinzione. In particolare per le misure di estinzione viene riportata la dimostrazione che porta alla formula di Lambert-Beer, che mette in relazione la concentrazione massica e quella molare con i valori di trasmittanza ricavabili dalle misure sperimentali dell'intensità delle radiazioni inviata (I_0) e di quella che arriva alla sonda I. Le equazioni utilizzate sono 4.6 e 4.10 (in caso di sistema monodisperso), 4.20 e 4.25 (in caso di sistema polidisperso, in cui è nota la distribuzione granulometrica in numero).

Il quinto capitolo descrive in dettaglio la strategia adottata per implementare il calcolo dei coefficienti di Mie, del fattore di efficienza per l'estinzione, del fattore di efficienza per lo scattering e del fattore di efficienza per l'assorbimento. Vengono descritte le strategie numeriche migliori per calcolare le funzioni di Bessel. Si sottolinea la difficoltà numerica nell'applicazione delle formule di ricorrenza in avanti, in quanto instabili e quindi in caso di ordini elevati gli errori di arrotondamento vengono amplificati a tal punto da portare a un risultato finale scadente. Le condizioni necessarie per impiegare le formule di ricorrenza in avanti sono: appunto quello di non procedere verso ordini troppo elevati e impiegare un'aritmetica a doppia o a quadrupla precisione, in modo da rallentare la propagazione delle instabilità numeriche. D'altro canto l'utilizzo di formule di ricorrenze all'indietro oppure della definizione tramite serie delle funzioni di Riccati-Bessel non prevedono problemi di instabilità numerica, però un impiego decisamente superiore di costo computazionale e di spazio di memoria. Vista la potenza dei moderni calcolatori si è deciso seguire la seconda strada impiegando la definizione per serie delle funzioni di Bessel, utilizzando le apposite funzioni *besselj* e *bessely* presenti in Matlab. In questo modo si è scritto un codice accurato e che non presenta problemi di instabilità a causa dell'amplificazioni degli errori nelle formule di ricorrenza. Viene evidenziata una problematica nel calcolo dei coefficienti a_n e b_n, nel caso in cui l'indice di rifrazioni presenti parte immaginaria (materiali assorbenti) molto grande. In tale condizioni il programma fallisce restituendo un errore di overflow. Tale inconveniente viene descritto in letteratura anche dagli altri autori [51, 52, 53, 54, 55, 56]. L'equazione 5.37 indica un criterio per stabilire il valore della parte immaginaria dell'indice di rifrazione (m_{Im}) che porta al fallimento dell'algoritmo implementato, in funzione della parte reale dell'indice di rifrazione (m_{Re}).

Il cuore dei programmi utilizzati per la tesi, consiste nelle funzioni riportate in appendice A1, A2 e A3, che permettono il calcolo dei coefficienti a_n e b_n, del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, e del fattore di efficienza per lo scattering Q_{sca}. Gli altri programmi presenti in appendice impiegano sempre tali funzioni in aggiunta all'implementazione della legge di Lambert-Beer per il calcolo della concentrazione.

I codici scritti per questa tesi risultano affidabili e le formule implementate stabili. Per garantire tali proprietà nella sezione 6.1 si è confrontato i risultati dei coefficienti di Mie (a_n e b_n) con il programma scritto da Maztler [53] e i fattori di efficienza per l'estinzione, lo scattering e l'assorbimento sia con Mazler [53] sia con Winscombe [55]. Dal confronto con il programma di Matler si sono ottenuti degli errori relativi molto bassi, nella maggior parte dei casi dell'ordine della precisione di macchina (10^{-16}), mentre il confronto con Winscombe è risultato nell'eguaglianza di tutte le cifre significative.

Nella sezione 6.2 si è rappresentato il fattore di efficienza in funzione di materiali con diversi indici di rifrazione, osservando come in caso di presenza di una parte immaginaria le curve risultano maggiormente "lisce", grazie alla presenza nella soluzione di una componente esponenzialmente decrescente. Si è studiato come varia il fattore Q_{ext} in funzione del parametro dimensionale x, della lunghezza d'onda λ (tenendo fisso il diametro medio) e della dimensione media delle particelle a (tenendo fissa la lunghezza d'onda della radiazione λ). Si è potuto quindi valutare il punto di funzionamento della strumentazione disponibile in laboratorio ($\lambda =$

$0.85\ \mu m$) con la polvere che si vuole analizzare (cinquantesimo percentile in volume $a = 13.37\ \mu m$), da cui si ricava $Q_{ext} = 2.15$. Per tutte le simulazioni effettuate si è assunto tale valore.

Inoltre, tramite i programmi scritti si è valutato come varia la concentrazione della polvere al variare della trasmittanza, in funzione di diversi parametri: cammino ottico e fattore di efficienza per l'estinzione (che a sua volta dipende dalla dimensione delle particelle e dalla lunghezza d'onda utilizzata). Nella sottosezione 6.2.4 viene riportato un criterio empirico per stabilire i limiti di concentrazione ottimali della strumentazione utilizzata. Si ricorda che l'intervallo di concentrazione dei limiti di infiammabilità nel caso di polveri organiche è intorno a $30 - 2500\ g/m^3$. Si sono analizzati in particolare due casi:

1. Cammino ottico pari a $l = 6\ cm$ (corrisponde ai sensori posti a filo del diametro del tubo di Hartmann). Si è ottenuto un intervallo ottimale per la misura della concentrazione pari a $22 - 477\ g/m^3$, da cui si osserva che con $\lambda = 0.85\ \mu m$ non è possibile eseguire misure in tutto il campo richiesto.
2. Cammino ottico pari a $l = 6\ mm$ (corrisponde alla stessa distanza degli elettrodi che si utilizza nelle prove per stimare l'energia minima di innesco). Si è ottenuto un intervallo ottimale per la misura della concentrazione pari a $218 - 4766\ g/m^3$, da cui si osserva che con $\lambda = 0.85\ \mu m$ è possibile misurare l'intervallo di concentrazione richiesto (come spiegato il limite inferiore può essere leggermente rilassato) anche se non si opera nell'intervallo ottimale per tale configurazione.

Dalle analisi di sensitività variando il cammino ottico, si ottiene che la distanza ottimale tra i sensori per misurare l'intervallo di concentrazione richiesta si ottiene per $l = 1\ cm$, con limiti pari a $131 - 2860\ g/m^3$.

Si può affermare che a parità di cammino ottico bisogna operare con alti fattori di efficienza per l'estinzione se si vuole misurare basse concentrazioni, invece bisogna impiegare bassi fattori di efficienza per l'estinzione in caso di misure di alte concentrazioni. Inoltre, è importante anche la posizione del fattore di efficienza per l'estinzione in funzione del parametro di dimensione: conviene operare in zone dove non varia molto al variare di x. L'ottimo sarebbe il caso limite dell'ottica geometrica che si ottiene per x molto grande. In particolare, il caso incontrato in laboratorio con $x \approx 100$ conduce a $Q_{ext} = 2.15$, in una zona in cui Q_{ext} non varia di molto al variare di x.

Viene eseguito anche uno studio per capire come varia la concentrazione misurata in funzione del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext} (che dipende solo dalla lunghezza d'onda λ, visto che la dimensione delle particelle è fissata), per diversi cammini ottici.

1. Cammino ottico pari a $l = 6\ cm$. Si ottiene $Q_{ext} = 0.41$, di conseguenza $\lambda = 69.15\ \mu m$.
2. Cammino ottico pari a $l = 6\ mm$ Si ottiene $Q_{ext} = 4.11$, di conseguenza $\lambda = 20.53\ \mu m$ o $\lambda = 18.43\ \mu m$.

In definitiva, si può affermare che gli obiettivi iniziali di questa tesi sono stati pienamente raggiunti. Dopo aver descritto i fondamenti della teoria dello scattering di Mie, si è scritto un programma che soddisfa i requisiti esposti nella sezione 5.4. Con tale programma si è analizzato in dettaglio come varia la concentrazione in funzione dei principali parametri: fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}, lunghezza d'onda λ, dimensione delle particelle a e infine, cammino ottico l.

Si è successivamente affinato il programma per leggere la distribuzione granulometrica della polvere, calcolare il diametro medio numerico e quello superficiale della distribuzione e

utilizzare la distribuzione stessa per stimare in modo più corretto la concentrazione numerica e quella massica.

I programmi sono stati poi utilizzati per interpretare alcuni dati sperimentali: dai valori di trasmittanza misurati in laboratorio si è riuscito a stimare i corrispondenti valori di concentrazione. Inoltre, si sono confrontati i valori della concentrazione massica, all'interno del tubo di Hartmann, stimati dal modello con quelli forniti da una curva di taratura sperimentale.

Si è sviluppato quindi, un metodo versatile e totalmente predittivo che stima i fattori di efficienza per l'estinzione (Q_{ext}), per lo scattering (Q_{sca}), per l'assorbimento (Q_{abs}), la concentrazione numerica (N) e la concentrazione massica (C_M) di una nube di polvere, qualunque sia la distribuzione numerica della polvere (proprietà geometriche delle particelle) in esame. Gli altri parametri richiesti dal modello sono l'indice di rifrazione (m), che descrive le proprietà ottiche delle particelle, la lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica impiegata (λ) e la densità del solido (ρ). Il confronto tra i valori di concentrazione massica prodotti dal modello e quelli forniti dalla curva di calibrazione presentano una discrepanza proporzionale a un fattore tre, che non è perfettamente chiaro a quale causa sia dovuta. Come descritto alla fine della sezione 6.3.4, tale differenza potrebbe essere imputabile alla forte disomogeneità della concentrazione di polvere nei pressi del sensore, causato dalla turbolenza del sistema, con zone molto concentrate (dove potrebbe avvenire uno scattering multiplo) con zone molto diluite. I valori di densità e dell'indice di rifrazione sono stati reperiti in letteratura, bisognerebbe condurre delle indagini ad hoc per valutare tali parametri direttamente dalla polvere che si impiega per gli esperimenti. È noto dalla letteratura [29] che durante la prova di dispersione della polvere nel tubo di Hartmann possono verificarsi dei fenomeni di aggregazione e/o di frammentazione. Questi ultimi processi possono influire di molto sulla distribuzione granulometrica reale della polvere e perciò sono il motivo più plausibile per spiegare la discrepanza tra i valori predetti dalla curva di calibrazione e quelli predetti dal modello.

Un naturale sviluppo di questo lavoro potrebbe consistere nel capire i motivi reali delle discrepanze tra la curva di taratura e il modello matematico. Per far ciò bisognerebbe condurre delle ulteriori campagne sperimentali nel tubo di Hartmann (aggiungendo dei getti d'aria compressa in vicinanza dell'emettitore e del fotodiodo per evitare lo sporcamento dovuto al depositarsi della polvere), valutare un'ulteriore curva sperimentale ed eventualmente adattare il modello matematico ai nuovi dati sperimentali.

Inoltre, come si è già sottolineato sia il programma scritto per questa tesi sia quelli presenti in letteratura falliscono nel calcolo dei fattori di efficienza di estinzione per le particelle assorbenti (come i metalli), in caso di indici di rifrazione complessi molto grandi. Si potrebbe approfondire meglio i motivi numerici di tale fallimento e proporre algoritmi alternativi, stabili anche in caso di alti indici di rifrazione. In questo modo il programma funzionerebbe bene, anche in caso di analisi di nubi di particelle metalliche.

Lista dei simboli

$\overline{Q_{ext}}$	fattore di efficienza per l'estinzione medio (-)
A_n	derivata logaritmica di ψ_n
a_n, b_n	coefficienti di Mie o di scattering
$\boldsymbol{a_x}$	versore lungo l'asse x (-)
$\boldsymbol{a_y}$	versore lungo l'asse y (-)
C_{abs}	sezione trasversale per l'assorbimento (m)
C_{ext}	sezione trasversale per l'estinzione (m)
$C_{M,max}$	concentrazione massica massima misurabile (g/m^3)
$C_{M,min}$	concentrazione massica minima misurabile (g/m^3)
$C_{M,nom}$	concentrazione massica minima nominale (g/m^3)
C_M	concentrazione massica (g/m^3)
C_{pr}	sezione trasversale per la pressione di radiazione (m)
C_{sca}	sezione trasversale per lo scattering (m)
C_V	concentrazione volumica (m^3/m^3)
D_{10}	densità ottica (m)
D_{32}	diametro medio superficiale o volume/superficie della particella (m)
$E_{a_n,r}$, $E_{b_n,r}$	errori relativi nel calcolo dei coefficienti di Mie
$E_{Q_{abs},r}$	errore relativo nel calcolo del fattore di efficienza per l'assorbimento
$E_{Q_{ext},r}$	errore relativo nel calcolo del fattore di efficienza per l'estinzione
$E_{Q_{sca},r}$	errore relativo nel calcolo del fattore di efficienza per lo scattering
E_l	componente parallela campo elettrico (V/m)
E_r	componente perpendicolare campo elettrico (V/m)
$\bar{e}$	numero di macchina
F_i	funzione di scattering adimensionale i-esima particella (-)
f_n	funzione di densità di probabilità della dimensione in numero (part/m)
F_o	funzione di scattering adimensionale globale (-)
f_v	funzione di densità di probabilità della dimensione in volume (m^3/m)
$h_n^{(2)}$	funzione di Hankel sferica di seconda specie
$H_{n+1/2}^{(2)}$	funzione di Hankel ordinaria di seconda specie
I_0	intensità iniziale della radiazione (J/(m^{2}s) o lux = lumen/ m^2 o mV)
i_1, i_1	funzioni angolari d'intensità (-)
I_i	intensità della radiazione estinta oppure dispersa dalla i-esima particella (J/(m^{2}s) o W/m^2 o lux = lumen/ m^2 o mV)
I_{sca}	intensità della radiazione dispersa (J/(m^{2}s) o W/m^2 o lux = lumen/ m^2 o mV)
j_n	funzione di Bessel sferica di prima specie
$J_{n+1/2}$	funzione di Bessel ordinaria di prima specie
K_{st}	indice di deflagrazione (bar m/s)
m_1	massa particella (kg)
M_3	momento di ordine tre (m^3)
m_{Im}^{crit}	valore critico della parte immaginaria dell'indice di rifrazione (-)
m_{Im}	parte immaginaria indice di rifrazione (-)
m_{Re}	parte reale indice di rifrazione (-)
$\widetilde{m}$	indice di rifrazione complesso (-)
N_{max}	numero massimo termini serie di Mie
P_n^l	Polinomio di Legendre

Q_{abs}	fattore di efficienza per l'assorbimento (-)
Q_{ext}	fattore di efficienza per l'estinzione (-)
Q_{pr}	fattore di efficienza per la pressione di radiazione (-)
Q_{sca}	fattore di efficienza per lo scattering (-)
y_n	funzione di Bessel sferica di seconda specie
$Y_{n+1/2}$	funzione di Bessel ordinaria di seconda specie
z_n	funzione generica di Bessel sferica
$Z_{n+1/2}$	funzione generica di Bessel ordinaria
a	ampiezza (m)
A	assorbanza (-)
A	funzione d'onda scalare (m)
$\boldsymbol{A}$	funzione d'onda vettoriale (m)
a	raggio particella (m)
$\boldsymbol{B}$	induzione magnetica (T)
B	luminanza (cd/m^2)
c	velocità della luce nel vuoto (m/s)
D	diametro particella (m)
$\boldsymbol{D}$	induzione elettrica o spostamento dielettrico (C/m^2)
E	energia del fotone (J o eV)
$\boldsymbol{E}$	intensità campo elettrico (V/m)
e	numero reale
F	funzione di scattering adimensionale (-)
f	generica funzione
$Forza$	forza della pressione di radiazione (N)
G	sezione trasversale sfera (m^2)
$\boldsymbol{H}$	intensità del campo magnetico (Wb)
$\boldsymbol{I}$	densità di corrente (A/m^2)
I	intensità della radiazione estinta oppure dispersa (J/(m^{2}s) o W/m^2 o lux = lumen/ m^2 o mV)
i	unità immaginaria
Im	parte immaginaria
$\boldsymbol{j}$	corrente di pelle (A/m)
k	numero d'onda angolare o costante di propagazione (rad/m)
l	cammino ottico (m)
l	distanza onde (m)
L	distanza tra le particelle (m)
LEL	lower explosion limit – limite inferiore di esplosività (g/m^3)
m	indice di rifrazione (-)
m	numero intervalli formula di quadratura
MIE	minimum ignition energy – energia minima d'innesco (mJ)
N	concentrazione numerica (part/m^3)
n	distribuzione della dimensione particelle (part/m^2)
$\boldsymbol{n}$	versore normale (-)
$\boldsymbol{p}$	momento di dipolo (C m)
P	pressione (bar)
p	quantità di moto fotone (kg m/s)
q	costante di Fresnel (m^{-1})
R	costante per il calcolo del coefficiente di estinzione (m^2)
r	distanza radiale (m)

$\boldsymbol{r}$	vettore distanza radiale (m)
Re	parte reale
s	ampiezza di scattering (-)
S	elemento di superficie (m^2)
S	funzione d'ampiezza di scattering (-)
$\boldsymbol{S}$	matrice di scattering (-)
t	tempo (ms)
T	trasmittanza
U, V	parametri di Stokes
u, v	ogni componente scalare del campo elettrico (V/m) o magnetico (Wb)
UEL	upper explosion limit – limite superiore di esplosività (g/m^3)
V	volume (m^3)
x	coordinata (m)
x	parametro di dimensione (-);
x	lato particella cubica (m)
x	lunghezza (m)
y	coordinata (m)
y	parametro di dimensione (-)
z	distanza assiale (m)

Lettere greche

ε_m	precisione di macchina (-)
ζ_n	funzione di Riccati-Bessel
λ_{vac}	lunghezza d'onda nel vuoto (m)
π_n	funzione angolare
τ_n	funzione angolare
χ_n	funzione di Riccati-Bessel
ψ_n	funzione di Riccati-Bessel
$\boldsymbol{\nabla}$	nabla $\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$ (-)
α	fase dell'onda (rad)
α	polarizzabilità (C m^2/V)
γ	coefficiente o fattore di estinzione (m^{-1})
δ	densità di carica (C/m^2)
ε	assorbività massica (g/m^2)
ε	costante dielettrica (F/m)
η	parametro di pelle (S s/m)
θ	angolo di scattering (rad)
λ	lunghezza d'onda (m)
μ	permittività magnetica (H/m)
ν	frequenza (Hz o s^{-1})
ρ	densità del solido (kg/m^3)
ρ	densità di carica (C/m^3)
σ	conduttività (S/m)
σ	fase (rad)
τ	turbidità (-)
φ	angolo azimutale (rad)
ϕ	frazione di volume della fase dispersa nella fase gas (m^3/m^3)
ψ	onda piana scalare (-)

ω	angolo solido (sr)
ω	frequenza angolare (rad)

Bibliografia

[1] Crowl, Daniel A., and Louvar, Joseph F., 2011, *Chemical process safety: fundamentals with application*, Parentice Hall, Upper Sandle River, NJ.

[2] Echhoff, R. K., 2003, *Dust esplosions in the process industry*, Boston; MA.Gulf Professional Publishing/Elesevier.

[3] Echhoff, R. K., and K. Fuhre, 1975, *Investigation Related to the Explosibility of Agricultural Dust in Air*, Report No 72001/RKE/KF, Bergen, Norway: Chr. Michelsen Institute.

[4] Echhoff, R. K., and K. Fuhre, and Pedersen, G. H., 1985, *Vented Maize Starch Explosions in a 236 m^3 Experimental Silo,* Report No 843307-2, Bergen, Norway: Chr. Michelsen Institute.

[5] Echhoff, R. K., 2005, Current status and expected future trends in dust explosion research, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 225-237, Elsevier.

[6] Aldis, D. F., Lai, F. S., 1979, *Review of literature related to engineering aspects of grain dust explosions*, Science and Education Administration-Agricultural Research United States Departement of Agriculture.

[7] Hauert, F., and Vogl, A., 1995, *Measurement of Dust Cloud Characteristics in Industrial Plants,* Final Tecnichal Report.

[8] Hauert, F., Vogl, A., and Radant, S.,1996, Dust Cloud Characterization and the Influence on the Pressure-Time-History in Silos, *Process Safety Progress*, Wiley.

[9] Armbruster L., Breuer H., and Neulinger, G., 1984, Photometric Determination of Respirable Dust Concentration without Elutriation of Coarse Particle, *Particle Characterization,* 1:96-101.

[10] Hauert, F., Vogl, A., and Radant, S., 1994, Meaurement of Turbulence and Dust Concentration in Silos and Vessel, *Proceedings of 6th International Colloquium on Dust Explosion*, pages 71-80, Sheyang, China.

[11] Zockoll, C., 1994, Concentration and Ignitability of Dust Clouds during the Discarge of Bulk Material, *Proceedings of 6th International Colloquium on Dust Explosion*, pages 263-277, Sheyang, China.

[12] Klipper, A., Scheid, M., Koperski, J., Wappler, M., and Krause, U., 2013, Influence of dustiness on small-scale vented dusts explosion, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 1433-1441, Elsevier.

[13] Klipper, A., Scheid, M., and Krause, U., 2013, Investigation into the influence of dustiness on dust explosion, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 1616-1626, Elsevier.

[14] Klipper, A., Schmidt, M., Muecke, O., Krause, U., 2014, Dust concentration measurement during filling of a silo and CFD modeling of filing processes regarding exceeding the lower explosion limit, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 122-137, Elsevier.

[15] Klipper, A., 2015, *Investigations into the influence of dustiness of the course of vented dust explosions*, Tecnichal Report, BAM-Dissertationsreihe, Band123, Berlin.

[16] Hamelmann, F., and Schmidt, E., 2003, Methods of estimating the dustiness of industrial powders, *KONA*, 21.

[17] Verein Deutscher Ingenieure, 2008, *Dust fires and dust explosion – Hazards - Assessment – Protective measures – Determination of dustiness of bulk materials*, VDI-Richtlinie 2263 part 9, Beuth Verlag.

[18] Hauert, F., and Radant, S., 2009, *Determination of dustiness of bulk materials,* Proceedings of the 8th International Conference on Measurement and Control of Granular Materials (MCGM 2009), pages 28-31.

[19] Bach, S., and, Eberhard, S., 2008, Determination of Powders – A Comparison of three Measuring Devices, *Annals of Occupational Hygiene,* pages 717-725.

[20] Klemens, R., Oleszczak, P., and Zydak, P., 2012, Experiment and numerical Investigation into the dynamics of dust lifting up from the layer behind the propagating shock wave, *Sock Waves*, 23:263-270, Springer-Verlag.

[21] Boiko, V.M., and Papyrin, A.N., 1987, Dynamics of the formation of a gas suspension behind a shock wave sliding over the surface of a loose material, *Combustion, Explosion and Shock Waves* pages 231-235, Springer.

[22] Cuervo, N., Murillo, C., Dufaud, O., Monnier, N.B., Skali-Lami, S., Rèmy, J., Auzolle, P., and Perrin, L., 2014, Combining CFD simulations and PIV Measurements to Optimize the Conditions for Dust Explosion Tests, *Chemical Engineering Transaction,* AIDC.

[23] Jian, W., Xinguang, L., Shenjun, Z.R., Fuli, W., and Chunli, R., 2009*,* Flame propagation through potato starch/air mixture in pipe of interconnected vessels, *8th International conference on measurement and control of granular materials*.

[24] Wu, W., Liu, L., and Zhang, and Q., 2017, A new 20 L experimental vessel for dust explosion and measurement of local concentration, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 299-309, Elsevier.

[25] Du, B., Huang., W., Liu, L., Zhang, T., Li, H., Ren, Y., and Wang, H., 2015, Visualization and analysis of dispersion process of combustible dust in a transparent Siwek 20-L chamber, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 213-221, Elsevier.

[26] Cai, X.S., and Wang, N.N., 1992, Determination of particle size distribution using the light extinction method, *Advanced Powder Technology*, pages 153-161, Elsevier.

[27] Cashdollar, K.L., 1996, Coal dust Explosivity, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 65-76, Elsevier.

[28] Cashdollar, K.L., Liebman, I., and Conti, R. S., 1981, *Three bureau of mines optical dust concentration probes*, report 8542, United States department of the interior, Bureau of Mines.

[29] Kalejaiye, O., Amyotte, P. R., Pegg, M.J., and Cashdollar, K. L., 2010, Effectiveness of dust dispersion in the 20-l siwek chamber, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries,* pages 46-59, Elsevier.

[30] Ma, L., and Hanson, R. K., 2005, Measurement of aerosol size distribution function by wavelenghth-multiplexed laser extinction, *Applied Physics B Laser and Optics*, pages 567-576, Springer.

[31] Novick, V. J., 1988, Use of series light extinction cells to determine aerosol number concentration, *Aerosol science and technology*, pages 251-262.

[32] Raphael, M., and Rohani, S., 1996, On-line estimation of solids concentrations and mean particle size using a turbidimetry method, *Powder Technology*, pages 167-163, Elsevier.

[33] Su, M., Xu, F., Cai, X., Ren, K., and Shen, J., 2007, Optimization of regularization parameter of inversion in particle sizing using light extinction method, *China Particuol*, pages 295-299.

[34] Li, X., Shi, J., and Radandt, S., 2009, Characteristics of Dust Cloud Formation, *7th International Conference on Measurement & Control of Granular Materials*, Shenyang, China.

[35] Mitchell, R. I., and Engdahl, R. B., 2012, A Survey for Improved Methods for the Measurement of Particulate Concentration in Flowing Gas Streams, *Journal of the Air Pollution Control Association,* Taylor & Francis.

[36] Martin, C. R., Aldis, D. F., and Lee, R. S., 1985, In situ Measurement of Grain Dust Particle Size Distribution and Concentration, *ASAE*.

[37] Gregoire, Y., Proust, C., Leprette, E., and Jamois, D., 2017, Monitoring of a dust explosion in a 10 m3 vessel, *International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS),* Boston, United Stated.

[38] Yu, X., Shi, Y., Wang, T., and Sun, X., 2017, Dust-concentration measurement based on Mie scattering of a laser beam, *Plos One.*

[39] Van de Hulst, H. C., 1957, *Light Scattering by Small Particles*, John Wiley and Sons, New York, NY.

[40] Kerker, M, 1969, *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*, Academic Press, New York, NY.

[41] Bohren, C. F., and Huffman, D. R., 1983, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles***,** John Wiley and Sons, New York, NY.

[42] Barber, P. W., and Hill, S. C., 1990, *Light Scattering by Particles: Computational Methods***,** World Scientific, Singapore.

[43] Boutier, A., 2012, *Laser Metrology in Fluid Mechanics – Granulometry, Temperature and Concentration Measurement*, John Wiley & Sons.

[44] Mishchenko, M. I., 2014, *Electromagnetic Scattering by Particle and Particle Groups: An introduction*, Cambridge University Press.

[45] Willeke, K., and Baron, P., 2001, *Aerosol measurement* (2nd ed.), USA, Wiley-Interscience.

[46] Vincent, J. H., 1995, *Aerosol Science for Industrial Hygienists*, Pergamon.

[47] Friedlander, S. K., 2000, *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Dynamics,* OUP USA.

[48] Elimelech, M., Jia, X., Gregory, J., and Williams, R., 1998, *Particle Deposition and Aggregation: Measurement, Modelling and Simulation,* Butterworth-Heinemann.

[49] Agranovski, I., 2010, *Aerosols – Science and Technology*, Wiley-VCH.

[50] Abramowitz, M. and Stegun, I. A., 1995, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Inc., New York, NY.

[51] Cachorro V. E., and Salcedo L. L., 1991, New Improved for Mie Scattering Calculations, *Journal of Electromagnetic Waves and Applications.*

[52] Shen, J., and Cai, X., 2005, Algorithm of Numerical Calculation on Lorentz Mie Theory, *Progress in Electromagnetics Research Symposium 2005*, Hangzhou, China.

[53] Matzler, C., 2002, *Matlab functions for Mie scattering and absorption – version 2,* Research Report no. 2002-11, Institut fur Angewandte Physik, Bern, Switzerland.

[54] Dave, J. V, 1968, *Subroutines for Computing the Parameters of the Electromagnetic Radiation Scattered by a Sphere,* Report 320-3237 (IBM Scientific Center, Palo Alto, California).

[55] Winscombe, W.J., 1979, *Mie Scattering Calculations: Advances in Technique and Fast, Vector-Speed Computer Codes,* NCAR Technical Note NCAR/TN-140+STR (National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado).

[56] Winscombe, W.J., 1980, Improved mie scattering algorithms, *Applied Optics*.

[57] Math Works, 1992, *MATLAB User's Guide*, Natick, MA.

[58] Liu, W., and Wang, Z., 2014, The Numerical Computation Method of Physical Quantity of Dust Concentration Based on Matlab, Batchelor's Thesis, University of Gavle.

[59] Krascella, N. L., *Theoretical investigation of the absorption and scattering characteristics of small particles*, National Aeronautics and Space Administration (NASA), Contractor Report, CR-21.

[60] McCormick M. P., and Lawrence J. D. Jr., *Tables of Mie scattering functions for particles with refractive index 1.5*, National Aeronautics and Space Administration (NASA), Technical Note, TN D-5110.

[61] Yajnik, M., Witeczez J., and Heller W., 1967, electronic computations of light scattering functions for heterodisperse systems of isotropic spheres, Office of Naval Research, Technical Report No 15A (61A).

[62] Cleland J. E., Evans J. W., and Fetzer W. R., 1944, Refractive Index – Dry Substance Tables for Starch Conversion Products, *Industrial & Engineering Analytical Edition,* pages 161-165.

[63] Corn Refiners Association, Inc, 2018, *Critical data tables: Corn Sweeteners, Starch and Other Corn Carbohydrate Products,* 1701 Pennsylvania Avenue, N.W., Suite 950, Washington, D.C., 20006.

[64] PubChem – densità amido di mais: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Corn-starch#section=Physical-Description. [Online] 8 novembre 2020.

[65] Mazzoldi, P., Nigro M., Voci, 2001, *Fisica – Volume II*, EdiSES.

[66] Monegato, G., 2008, *Metodi e algoritmi per il Calcolo Numerico*, Clut.

[67] Scuderi, L., 2005, *Laboratorio di calcolo numerico*, Clut

[68] Crescenzi, P., Gambosi, G., Grossi, and R., Rossi, G., 2012, *Strutture di dati e algoritmi – Progettazione, analisi e programmazione*, Pearson.

[69] Dobbins, R., A., and Jizmagian, G., S., 1966, Optical Scattering Cross Sections for Polydispersions of Dielectric Spheres, *Journal of the optical society of America*.

[70] Yuan, Z., Khakzad, N., Khan, F., and Amyotte P., 2015, Dust Explosion: A threat to the process industries, *Process Safety and Environmental Protection*, pages 57-71, Elsevier.

[71] Dahoe, A., E., Cant, R., S., and Scarlett, B., 2001, On the Decay of Turbulence in the 20-Liter Explosion Sphere, *Flow, Turbulence and Combustion,* pages 159-184, Kluwer Accademic Publishers.

APPENDICE – Codici Matlab

Questa appendice raccoglie le funzioni e i programmi Matlab scritti per realizzare le simulazioni e i grafici di questa tesi.

A1 Funzione per il calcolo dei coefficienti di Mie

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome funzione: coeff_scattering_d

Funzione che ricevuti in input i parametri di dimensione x e y, l'indice di
rifrazione m e il numero massimo di termini nmax, presenti nelle serie di
Mie restituisce come output i coefficienti di scattering nei vettori an e
bn
%}

function [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax)

sqz = @(z) (pi/(2*z))^(1/2);
psi = @(z,n) z*sqz(z)*besselj(n+0.5,z);
zeta = @(z,n) psi(z,n)-i*z*sqz(z)*bessely(n+0.5,z);
psid = @(z,n) psi(z,n-1)-n*sqz(z)*besselj(n+0.5,z);
zetad = @(z,n) psi(z,n-1)-i*z*sqz(z)*bessely(n-0.5,z)-
n*(sqz(z)*besselj(n+0.5,z)-i*sqz(z)*bessely(n+0.5,z));

for n=1:nmax

    psidy = psid(y,n);
    psix = psi(x,n);
    psiy = psi(y,n);
    psidx = psid(x,n);
    zetax = zeta(x,n);
    zetadx = zetad(x,n);

    an(n)=(psidy*psix-m*psiy*psidx)/(psidy*zetax-m*psiy*zetadx);
    bn(n)=(m*psidy*psix-psiy*psidx)/(m*psidy*zetax-psiy*zetadx);

end
end
```

A2 Funzione per il calcolo del fattore di efficienza per l'estinzione

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome funzione: fatt_eff_estinzione_d

Funzione che ricevuti in input il parametro di dimensione x, i coefficienti
di Mie an e bn e il numero massimo di termini nmax, presenti nella
sommatoria calcola il fattore di efficienza per l'estinzione Qext
%}

function Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax)
```

```
Qext=0;
for n=1:nmax
    Qext = Qext + (2*n+1)*real(an(n)+bn(n));
end
Qext=Qext*2/(x^2);
end
```

A3 Funzione per il calcolo del fattore di efficienza per lo scattering

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome funzione: fatt_eff_scattering_d

Funzione che ricevuti in input il parametro di dimensione x, i coefficienti
di Mie an e bn e il numero massimo di termini nmax, presenti nella
sommatoria calcola il fattore di efficienza per lo scattering Qsca
%}

function Qsca = fatt_eff_scattering_d(x,an,bn,nmax)

Qsca=0;
for n=1:nmax
    Qsca = Qsca + (2*n+1)*((abs(an(n)))^2+(abs(bn(n)))^2);
end
Qsca=Qsca*2/(x^2);
End
```

A4 Verifica del codice

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: verifica_codice

Il programma permette di verificare la correttezza delle subroutine
"coeff_scattering_d", "fatt_eff_estinzione_d" e "fatt_eff_scattering". I
valori ottenuti vengono confrontati con quelli prodotti dal programma di
Matzler (2002). Vengono calcolati gli errori assoluti e relativi per tutti
i coefficienti contenuti nei vattori an e bn (parte reale e immaginaria)
e per i fattori di efficienza Qext, Qsca. Gli errori relativi vengono
anche rappresentati graficamente.

%}
clc
close all
clear all
mRe=1.5; %parte reale dell'indice di rifrazione
mIm=0; %modulo della parte immaginaria dell'indice di rifrazione

x=0.001; %valore x di partenza
kmax=9; %numero valori del parametro x per cui si avvia il confronto
for k=1:kmax
    x %stampa valore di x corrente

    %codice Matzler di confronto
    m=mRe+i*mIm;
    y=m*x;
    nmax=round(2+x+4*x^(1/3));
```

```
n=(1:nmax); nu = (n+0.5);
z=m.*x; m2=m.*m;
sqx= sqrt(0.5*pi./x);
sqz= sqrt(0.5*pi./z);
bx = besselj(nu, x).*sqx;
bz = besselj(nu, z).*sqz;
yx = bessely(nu, x).*sqx;
hx = bx+i*yx;
b1x=[sin(x)/x, bx(1:nmax-1)];
b1z=[sin(z)/z, bz(1:nmax-1)];
y1x=[-cos(x)/x, yx(1:nmax-1)];
h1x= b1x+i*y1x;
ax = x.*b1x-n.*bx;
az = z.*b1z-n.*bz;
ahx= x.*h1x-n.*hx;
ane = (m2.*bz.*ax-bx.*az)./(m2.*bz.*ahx-hx.*az);
bne = (bz.*ax-bx.*az)./(bz.*ahx-hx.*az);
cn = (bx.*ahx-hx.*ax)./(bz.*ahx-hx.*az);
dn = m.*(bx.*ahx-hx.*ax)./(m2.*bz.*ahx-hx.*az);
f=[ane; bne; cn; dn];

n1=nmax-1;
n=(1:nmax);
cn=2*n+1;
c1n=n.*(n+2)./(n+1);
c2n=cn./n./(n+1);
x2=x*x;
anp=(real(f(1,:))); anpp=(imag(f(1,:)));
bnp=(real(f(2,:))); bnpp=(imag(f(2,:)));
g1(1:4,nmax)=[0; 0; 0; 0];
g1(1,1:n1)=anp(2:nmax);
g1(2,1:n1)=anpp(2:nmax);
g1(3,1:n1)=bnp(2:nmax);
g1(4,1:n1)=bnpp(2:nmax);
dn=cn.*(anp+bnp);
q=sum(dn);

qext=2*q/x2
en=cn.*(anp.*anp+anpp.*anpp+bnp.*bnp+bnpp.*bnpp);
q=sum(en);
qsca=2*q/x2;
qabs=qext-qsca;
fn=(f(1,:)-f(2,:)).*cn;
gn=(-1).^n;
f(3,:)=fn.*gn;
q=sum(f(3,:));
qb=q*q'/x2;
asy1=c1n.*(anp.*g1(1,:)+anpp.*g1(2,:)+bnp.*g1(3,:)+bnpp.*g1(4,:));
asy2=c2n.*(anp.*bnp+anpp.*bnpp);
asy=4/x2*sum(asy1+asy2)/qsca;
qratio=qb/qsca;

%Codice svuluppato per questa tesi
m=mRe-i*mIm;
y=m*x;

%calcolo e verifica dei coefficienti di Mie
[an1,bn1] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

Erran = abs(an1-conj(ane));
```

```
    Erran_rel=abs(an1-conj(ane))./abs(conj(ane));
    Err_an_max = norm(Erran,inf)
    Err_an_max_rel = norm(Erran_rel,inf)
    figure(1)
    plot([1:nmax], Erran_rel)
    title('Errore relativo coefficiente an')
    xlabel('n')
    ylabel('Errore an')

    Errbn = abs(bn1-conj(bne));
    Errbn_rel =  abs(bn1-conj(bne))./abs(conj(bne));
    Err_bn_max = norm(Errbn,inf)
    Err_bn_max_rel = norm(Errbn_rel,inf)
    figure(2)
    plot([1:nmax], Errbn_rel)
    title('Errore relativo coefficiente bn')
    xlabel('n')
    ylabel('Errore bn')

    figure(3)
    plot([1:nmax], real(ane), 'g', [1:nmax], real(an1), 'b')
    title('Parte reale coefficiente an')
    xlabel('n')
    ylabel('Re(an)')
    legend('risultati Matzler', 'risultati Tesi')

    figure(4)
    plot([1:nmax], imag(ane), 'g', [1:nmax], imag(an1), 'b')
    title('Parte immaginaria coefficiente an')
    xlabel('n')
    ylabel('Im(an)')
    legend('risultati Matzler', 'risultati Tesi')

    figure(5)
    plot([1:nmax], real(bne), 'g', [1:nmax], real(bn1), 'b')
    title('Parte reale coefficiente bn')
    xlabel('n')
    ylabel('Re(bn)')
    legend('risultati Matzler', 'risultati Tesi')

    figure(6)
    plot([1:nmax], imag(bne), 'g', [1:nmax], imag(bn1), 'b')
    title('Parte immaginaria coefficiente bn')
    xlabel('n')
    ylabel('Im(bn)')
    legend('risultati Matzler', 'risultati Tesi')

    %calcolo e verifica dei fattori di efficienza Qext e Qsca
    Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an1,bn1,nmax)
    Err_Qext=abs(Qext-qext)
    Err_Qext_rel=abs(Qext-qext)/abs(qext)

    Qsca = fatt_eff_scattering_d(x,an1,bn1,nmax)
    Err_Qsca=abs(Qsca-qsca)
    Err_Qsca_rel=abs(Qsca-qsca)/abs(qsca)

    %riempimento tabella dei risultati
    risultati=[x Err_an_max Err_an_max_rel Err_bn_max Err_bn_max_rel Qext
qext Err_Qext Err_Qext_rel Qsca qsca Err_Qsca Err_Qsca_rel]
    risultati_vet(k,:) = risultati;
```

```
    pause
    x=x*10; % calcolo nuovo parametro di dimensione
end
risultati_vet %stampa tabella dei risultati
```

A5 Grafici Q_{abs}, Q_{sca} e Q_{ext}

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: grafici_Qabs_Qsca_Qext

Il programma permette di calcolare e di rappresentare graficamente i
fattori di efficienza Qext, Qsca e Qabs per diversi indici di rifrazione in
funzione dei parametri di dimensione x e rho
%}

clear all
close all
clc

%dati input
lambda=0.85e-6; %lunghezza d'onda radiazione
raggio=13.368e-6; %raggio medio particella
m=[1.3;1.5;1.3-i*0.1;1.5-i*0.1]; % vettore con gli indici di rifrazione
k = 2*pi/lambda;
x=k*raggio;
y=m*x;

%calcolo dei fattori di efficienza per l'estinzione per x e rho
xN=100;
x0=0.1;
N=1000;
h=(xN-x0)/(N-1);
z=linspace(x0,xN,N);
for w=1:4

    for k = 1:N
        x= x0+(k-1)*h;
        y=m(w)*x;
        %calcolo del numero di termini della serie di Mie
        if x>= 0.02 && x<=8
          nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
         elseif x> 8 && x<=4200
          nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
         elseif x> 4200 && x<=20000
          nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
        end
        %calcolo coefficienti di Mie
        [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m(w),nmax);
        %calcolo coefficiente di efficienza per l'estinzione
        Qext(w,k) = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
        %calcolo coefficiente di efficienza per lo scattering
        Qsca(w,k) = fatt_eff_scattering_d(x,an,bn,nmax);
    end
    %calcolco del parametro rho
    rho(w,:) = 2*z*(real(m(w))-1);

end
%calcolo coefficiente di efficienza per l'assorbimento
```

```
Qabs=Qext-Qsca;

%rappresentazione grafici
figure(1)
plot(z,Qext(1,:),z,Qext(2,:),z,Qext(3,:),z,Qext(4,:))
title('Fattore di efficienza per estinzione')
xlabel('x')
ylabel('Qext')
legend('m=1.3', 'm=1.5', 'm=1.3-0.1i', 'm=1.5-0.1i')

figure(2)
plot(rho(1,:),Qext(1,:),rho(2,:),Qext(2,:),rho(3,:),Qext(3,:),rho(4,:),Qext
(4,:))
title('Fattore di efficienza per estinzione')
xlabel('\rho')
ylabel('Qext')
legend('m=1.3', 'm=1.5', 'm=1.3-0.1i', 'm=1.5-0.1i')

figure(3)
plot(z,Qext(4,:),z,Qsca(4,:),z,Qabs(4,:))
title('Fattori di efficienza per m=1.5-0.1i')
xlabel('x')
ylabel('Q')
legend('Qext', 'Qsca', 'Qabs')

figure(4)
plot(rho(4,:),Qext(4,:),rho(4,:),Qsca(4,:),rho(4,:),Qabs(4,:))
title('Fattori di efficienza per m=1.5-0.1i')
xlabel('\rho')
ylabel('Q')
legend('Qext', 'Qsca', 'Qabs')
```

A6 Grafici Q_{ext} in funzione di x, rho, lambda e raggio

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: punto_funzionamento

Il programma permette di calcolare e di rappresentare graficamente il
fattore di efficienza per l'estinzione Qext in funzione: del parametro di
dimensione x, del parametro rho, della lunghezza d'onda della radiazione
impiegata e del raggio medio delle particelle. I grafici riportati
sono lineari, semilogaritmici e bilogaritmica. Nei grafici di interesse
viene rappresentato il punto di funzionamento della strumentazione usata
in laboratorio, tramite una linea verticale blu
%}

clear all
close all
clc

%dati input
lambda=0.85e-6;
raggio=13.368e-6;
m=1.5;
k = 2*pi/lambda;
x=k*raggio;
x_fun=x;
y=m*x;
```

```
%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione Qext in funzione di x e rho
xN=100;
x0=0.1;
N=1000;
h=(xN-x0)/(N-1);
for k = 1:N
    x= x0+(k-1)*h;
    y=m*x;
    if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
    end
    [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);
    Qext(k) = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
end

%rappresentazione grafica Qext in funzione di x e rho
x=linspace(x0,xN,N);
rho = 2*x*(m-1);
figure(1)
plot(x,Qext,'r',[x_fun x_fun], [0 4.5])
title('Fattore di efficienza per estinzione')
xlabel('x')
ylabel('Qext')

figure(2)
plot(rho,Qext,'b',[x_fun x_fun], [0 4.5])
title('Fattore di efficienza per estinzione')
xlabel('rho')
ylabel('Qext')

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione Qext in funzione di lambda
lambda0=1e-3;
lambdaN=0.78e-6;
N_lambda=10000;
h=(lambdaN-lambda0)/(N_lambda-1);
for w = 1:N_lambda
    lambda= lambda0+(w-1)*h;
    k = 2*pi/lambda;
    x=k*raggio;
    y=m*x;
    if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
    end
    [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);
    Qext_lambda(w) = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
end

%rappresentazione grafica Qext in funzione di lambda
lambda=linspace(lambda0,lambdaN,N_lambda);
figure(3)
plot(lambda*(10^6),Qext_lambda,'r')
```

```
title('Fattore di efficienza per estinzione')
xlabel('lambda (\mum)')
ylabel('Qext')

figure(4)
loglog(lambda*(10^6),Qext_lambda,'r')
title('Fattore di efficienza per estinzione - grafico bilogaritmico')
xlabel('lambda (\mum)')
ylabel('Qext')

figure(5)
semilogy(lambda*(10^6),Qext_lambda,'r')
title('Fattore di efficienza per estinzione - grafico semilog y')
xlabel('lambda (\mum)')
ylabel('Qext')

figure(6)
semilogx(lambda*(10^6),Qext_lambda,'r',[0.85 0.85], [0 4.5])
title('Fattore di efficienza per estinzione - grafico semilog x')
xlabel('lambda (\mum)')
ylabel('Qext')

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione Qext in funzione del raggio
lambda=0.85e-6;
k = 2*pi/lambda;
raggio0=0.5e-6;
raggioN=500e-6;
N_raggio=100;
h=(raggioN-raggio0)/(N_raggio-1);
for w = 1:N_raggio
    raggio= raggio0+(w-1)*h;
    x=k*raggio;
    y=m*x;
    if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
    end
    [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);
    Qext_raggio(w) = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
end

%rappresentazione grafica Qext in funzione del raggio
raggio=linspace(raggio0,raggioN,N_raggio);
figure(7)
plot(raggio*(10^6),Qext_raggio,'r')
title('Fattore di efficienza per estinzione')
xlabel('raggio (\mum)')
ylabel('Qext')

figure(8)
loglog(raggio*(10^6),Qext_raggio,'r')
title('Fattore di efficienza per estinzione - grafico bilogaritmico')
xlabel('raggio (\mum)')
ylabel('Qext')

figure(9)
semilogy(raggio*(10^6),Qext_raggio,'r')
```

```
title('Fattore di efficienza per estinzione - grafico semilog y')
xlabel('raggio (\mum)')
ylabel('Qext')

figure(10)
semilogx(raggio*(10^6),Qext_raggio,'r',[13.368 13.368], [0 4.5])
title('Fattore di efficienza per estinzione - grafico semilog x')
xlabel('raggio (\mum)')
ylabel('Qext')
```

A7 Grafici N e C_M in funzione della trasmittanza

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: simulazione_estinzione

Il programma permette di calcolare e di rappresentare graficamente come
variano le concentrazioni numeriche e massiche delle particelle nel sistema
in funzione del valore di trasmittanza rilevato dal sensore. Vengono
rappresentati anche i valori limite di concentrazione misurabili in modo
accurato dalla strumentazione di laboratorio
%}

clear all
close all
clc

lambda=0.85e-6; %lunghezza d'onda radiazione
raggio=13.368e-6; %raggio medio
m=1.5; %indice di rifrazione
k = 2*pi/lambda;
x=k*raggio;
y=m*x;
l=0.006; %cammino ottico
den = 1500; %densità della particella
Tlim1=0.1; %trasmittanza limite inferiore
Tlim2=0.9; %trasmittanza limite superiore


%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di Mie
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);

%calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
z=linspace(0,1);
fN = N(z);
```

```
%Calcolo concentrazione massica
CM = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN*1000;

%Calcolo delle concentrazioni massiche limite
CMlim1=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N(Tlim1)*1000
CMlim2=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N(Tlim2)*1000

%grafici concentrazione numerica e massica
figure(1)
plot(z,fN)
title('Grafico della concentrazione numerica')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('N (particelle/m3)')
figure(2)
plot(z,CM,'r',Tlim1,CMlim1,'b*',Tlim2,CMlim2,'b*', [0 1],[CMlim1 CMlim1],[0
1],[CMlim2 CMlim2])
title('Grafico della concentrazione massica con l = 6 mm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
```

A8 Grafico C_M in funzione della trasmittanza al variare del cammino ottico

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: simulazione_estinzione_l

Il programma permette di calcolare e di rappresentare graficamente come
varia la concentrazione massica delle particelle nel sistema
in funzione del valore di trasmittanza rilevato dal sensore per diversi
valori del cammino ottico. Viene prodotta anche una tabella con i valori
limite di concentrazione misurabili in modo accurato dalla strumentazione
di laboratorio per ogni cammino ottico considerato.
%}

clear all
close all
clc

lambda=0.85e-6; %lunghezza d'onda radiazione
raggio=13.368e-6; %raggio medio
m=1.5; %indice di rifrazione
k = 2*pi/lambda;
x=k*raggio;
y=m*x;
den = 1500; %densit‡ della particella
Tlim1=0.1; %trasmittanza limite inferiore
Tlim2=0.9; %trasmittazna limite superiore

%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di Mie
```

```
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);

for n=1:10

    l=n/1000; %calcolo cammino ottico

    %calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
    N = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
    z=linspace(0,1);
    fN = N(z);

    %calcolo concentrazione massica
    CM = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN*1000;

    %Calcolo delle concentrazioni massiche limite
    CMlim1(n)=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N(Tlim1)*1000;
    CMlim2(n)=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N(Tlim2)*1000;

    txt = sprintf('l = %2.0f mm', l*1000);
    plot(z,CM,'DisplayName',txt)
    hold on

    %tabella dei risultati
    risultati_vet(n,:)=[n, CMlim1(n), CMlim2(n)];
end
hold off
legend show
title('Grafico della concentrazione massica')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
format shortG
disp('l (mm)          CMlim1 (g/m3)    CMlim2 (g/m3)');
disp('---------------------------------------------');
disp(sprintf('%d\t\t %.3f\t %.3f\n', [1:10;CMlim1;CMlim2]));
```

A9 Grafico C_M in funzione della trasmittanza al variare del fattore di efficienza per l'estinzione Q_{ext}

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: simulazione_estinzione_Qext

Il programma permette di calcolare e di rappresentare graficamente come
varia la concentrazione  massica delle particelle nel sistema
in funzione del valore di trasmittanza rilevato dal sensore per diversi
valori del fattore di efficienza per l'estinzione Qext. Viene prodotta
anche una tabella con i valori limite di concentrazione misurabili in modo
accurato dalla strumentazione di laboratorio per ogni fattore di efficienza
Qext considerato.
%}

clear all
close all
clc
```

```
lambda=0.85e-6; %lunghezza d'onda radiazione
raggio=13.368e-6; %raggio medio
m=1.5; %indice di rifrazione
k = 2*pi/lambda;
x=k*raggio;
y=m*x; %y=m*k*raggio
l=0.06; %cammino ottico
den = 1500; %densit‡ della particella
Tlim1=0.1; %trasmittanza limite inferiore
Tlim2=0.9; %trasmittazna limite superiore

%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di Mie
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);

Qext0=1;
QextN=4.5;
N=8;
h=(QextN-Qext0)/(N-1);
for n=1:N

    Qext(n)=Qext0+h*(n-1);

    %calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
    N = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext(n)*l);
    z=linspace(0,1);
    fN = N(z);

    %calcolo concentrazione massica
    CM = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN*1000;

    %Calcolo delle concentrazioni massiche limite
    CMlim1(n)=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N(Tlim1)*1000;
    CMlim2(n)=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N(Tlim2)*1000;

    txt = sprintf('Qext = %.1f', Qext(n));
    plot(z,CM,'DisplayName',txt)
    hold on

    %tabella dei risultati
    risultati_vet(n,:)=[Qext(n), CMlim1(n), CMlim2(n)];
end
hold off
legend show
title('Grafico della concentrazione massica l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
format shortG
```

```
disp('Qext          CMlim1 (g/m3)   CMlim2 (g/m3)');
disp('-------------------------------------------');
disp(sprintf('%.1f\t\t %.3f\t %.3f\n', [Qext;CMlim1;CMlim2]));
```

A10 Grafici N e C_M in funzione della trasmittanza con distribuzione granulometrica

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: conc_distribuzione

Il programma permette di acquisire i dati delle funzioni di
distribuzione di densit‡ in volume e in numero e successivamente di
rappresentarle garficamente. Vengono rappresentate la concentrazione
massica e quella numerica stimando il coefficiente di efficienza per
l'estinzione tenendo conto dell'intera distribuzione gralunometrica. Viene
calcolato il fattore di efficienza per l'estinzione medio. Vengono inoltre
rappresentati su due grafici la variazione della concentrazione massica e
numerica nei seguenti casi: 1) tenendo conto dell'intera distribuzione 2)
calcolando il fattore di efficienza sulla base del diametro medio numerico
3) calcolando il fattore di efficienza sulla base del cinquantesimo
percentile in volume e 4) calcolando il fattore di efficienza sulla base
del diametro medio superficiale. Viene prodotta anche una tabella con i
valori limite di concentrazione misurabili in modo accurato dalla
strumentazione di laboratorio per i quattro casi summenzionati
%}

clear all
close all
clc

%dati input
lambda=0.85e-6;
m=1.5;
k = 2*pi/lambda;
l=0.06;
den = 1500;
Tlim1=0.1;
Tlim2=0.9;

diametri=xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B6:CX6');
raggi = diametri/2;
raggi_a = raggi/(10^6);
fn_percentuali = xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B9:CX9');
fn_frequenze = fn_percentuali/100;
fv_percentuali = xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B4:CX4');
fv_frequenze = fv_percentuali/100;

figure(1)
plot(diametri, fn_frequenze)
title('fn - Curva distributiva di densit‡')
xlabel('d (\mum)')
ylabel('fn')

figure(2)
semilogx(diametri, fn_frequenze)
title('fn - Curva distributiva di densit‡ - semilogx')
xlabel('d (\mum)')
```

```
ylabel('fn')

figure(3)
plot(diametri, fv_frequenze)
title('fv - curva distributiva di densit‡')
xlabel('d (\mum)')
ylabel('fv')

figure(4)
semilogx(diametri, fv_frequenze)
title('fv - Curva distributiva di densit‡ - semilogx')
xlabel('d (\mum)')
ylabel('fv')

for i=1:length(raggi)
    %i
    x=k*raggi_a(i);
    y=m*x;
    %x

    if  x<=8
        nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
        nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
    end

    %calcolo coefficienti di scattering
    [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);
    %calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
    Qext(i) = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);

end

Qext_d23=trapz(diametri,
Qext.*fn_frequenze.*((diametri).^2))/trapz(diametri,
fn_frequenze.*((diametri).^2))

Ad=trapz(diametri,fn_frequenze)
diametro_medio=trapz(diametri,fn_frequenze.*diametri)/(10^6)
a_medio=diametro_medio/2
%D=trapz(raggi, Qext.*fn_frequenze.*pi.*(raggi).^2)/((10^6)^2)
%D=trapz(diametri, Qext.*fn_frequenze.*pi.*((diametri).^2)./8)/((10^6)^2)
D=trapz(diametri, Qext.*fn_frequenze.*((diametri).^2))/((10^6)^2)*pi/4


%calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_d = @(T) -log(T)./(D*l);
z=linspace(0,1);
fN_d = N_d(z);

%calcolo concentrazione massica
%CM_d = (4/3)*pi*((a_medio)^3)*den*fN_d*1000;
CM_d =
fN_d*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*1000/((10^6)^3)
;
CMlim1_d=N_d(Tlim1)*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*
1000/((10^6)^3);
```

```
CMlim2_d=N_d(Tlim2)*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*
1000/((10^6)^3);

%calcolo fattore di efficienza medio con distribuzione granulometrica
Qext_medio=D/(pi*a_medio^2)

%grafici
figure(5)
plot(z,fN_d)
title('Grafico della concentrazione numerica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('distribuzione granulometrica numerica')
figure(6)
plot(z, CM_d)
title('Grafico della concentrazione massica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('distribuzione granulometrica numerica')

%figure(17)
%semilogy(CM_d(10:end),z(10:end)*100)

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%calcoli con raggio medio pari alla media numerica
raggio=a_medio;
x=k*raggio;
x_fun=x;
y=m*x;
%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di scattering
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
Qext_raggio_medio = Qext

%Calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_rm = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
%z=linspace(0,1);
fN_rm = N_rm(z);

%Calcolo concentrazione massica
CM_rm = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN_rm*1000;
CMlim1_rm=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm(Tlim1)*1000;
CMlim2_rm=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm(Tlim2)*1000;

%grafici
figure(7)
plot(z,fN_rm)
title('Grafico della concentrazione numerica con l = 6 cm')
```

```
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio numerico')
figure(8)
plot(z,CM_rm)
title('Grafico della concentrazione massica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio numerico')


%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%calcoli con raggio medio pari al diametro medio superficiale Lsa =m3/m2
diametro_medio32=trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))/(10^6)/trapz(d
iametri,fn_frequenze.*(diametri.^2));
raggio=diametro_medio32/2
x=k*raggio;
x_fun=x;
y=m*x;
%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di scattering
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
Qext_raggio_medio = Qext
%Qext=Qext_d23;

%Calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_rm23 = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
%z=linspace(0,1);
fN_rm23 = N_rm23(z);

%Calcolo concentrazione massica
CM_rm23 = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN_rm23*1000;
CMlim1_rm23=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm23(Tlim1)*1000;
CMlim2_rm23=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm23(Tlim2)*1000;

%grafici
figure(9)
plot(z,fN_rm23)
title('Grafico della concentrazione numerica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio superficiale')
figure(10)
plot(z,CM_rm23)
title('Grafico della concentrazione massica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio superficiale')
```

```
figure(11)
plot(z,fN_rm23,z,fN_d)
title('Grafico della concentrazione numerica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio superficiale','distribuzione granulometrica
numerica')
figure(12)
plot(z,CM_rm23,z,CM_d)
title('Grafico della concentrazione massica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio superficiale','distribuzione granulometrica
numerica')


%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%calcoli con raggio medio pari al cinquantesimo percentile
raggio=13.368e-6;
x=k*raggio;
x_fun=x;
y=m*x;
%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di scattering
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
Qext_cinquantesimo_percentile = Qext

%Calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_p = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
fN_p = N_p(z);

%Calcolo concentrazione numerica
CM_p = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN_p*1000;
CMlim1_p=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_p(Tlim1)*1000;
CMlim2_p=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_p(Tlim2)*1000;

%grafici
figure(13)
plot(z,fN_p)
title('Grafico della concentrazione numerica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('cinquantesimo percentile in volume')
figure(14)
plot(z,CM_p,'r')
title('Grafico della concentrazione massica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('cinquantesimo percentile in volume')
```

```
figure(15)
plot(z,fN_rm,z,fN_d,z,fN_p,z,fN_rm23)
title('Grafico della concentrazione numerica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio numerico', 'distribuzione granulometrica numerica',
'cinquantesimo percentile in volume','diametro medio superficiale')
figure(16)
plot(z,CM_rm,z, CM_d,z,CM_p,z,CM_rm23)
title('Grafico della concentrazione massica con l = 6 cm')
xlabel('Trasmittanza')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio numerico', 'distribuzione granulometrica
numerica','cinquantesimo percentile in volume','diametro medio
superficiale')

CMlim1 = [CMlim1_d CMlim1_rm CMlim1_p CMlim1_rm23];
CMlim2 = [CMlim2_d CMlim2_rm CMlim2_p CMlim2_rm23];
CM = [CMlim1;CMlim2];

%tabella concentrazioni limite
disp('CMlim_d (g/m3) CMlim_rm (g/m3) CMlim_p (g/m3)
CMlim_rm23(g/m3)');
disp('-------------------------------------------------------------------
');
disp(sprintf('%.3f\t\t %.3f\t\t %.3f\t\t %.3f\n',
[CMlim1_d;CMlim1_rm;CMlim1_p;CMlim1_rm23]));
disp(sprintf('%.3f\t\t %.3f\t\t %.3f\t\t\t %.3f\n',
[CMlim2_d;CMlim2_rm;CMlim2_p;CMlim2_rm23]));
```

A11 Grafici N e C_M per le misure di intensità nel tubo di Hartmann con distribuzione granulometrica

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: conc_prove

Il programma permette di acquisire i dati delle funzioni di
distribuzione di densit‡ in volume e in numero e successivamente di
rappresentarle garficamente. Vengono acquisiti i dati contenenti la
variazione dell'intensit‡ in funzione del tempo.
Si rappresenta come variano la concentrazione massica e quella numerica in
funzione del tempo, stimando il coefficiente di efficienza per
l'estinzione tenendo conto dell'intera distribuzione granulometrica. Viene
calcolato il fattore di efficienza per l'estinzione medio.
Vengono inoltre rappresentati su due grafici la variazione della
concentrazione massica e numerica nel tubo di Hartmann nei seguenti casi:
1) tenendo conto dell'intera distribuzione 2) calcolando il fattore di
efficienza sulla base del diametro medio numerico 3) calcolando il fattore
di efficienza sulla base del cinquantesimo percentile in volume e 4)
calcolando il fattore di efficienza sulla base del diametro medio
superficiale. Viene prodotta anche una tabella con i valori limite di
concentrazione misurabili in modo accurato dalla strumentazione di
laboratorio per i quattro casi summenzionati
%}

clear all
close all
```

```
clc

%dati input
lambda=0.85e-6;
m=1.5;
k = 2*pi/lambda;
l=0.065; %%%%%%%%%%
den = 1500;
Tlim1=0.1;
Tlim2=0.9;

diametri=xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B6:CX6');
raggi = diametri/2;
raggi_a = raggi/(10^6);
fn_percentuali = xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B9:CX9');
fn_frequenze = fn_percentuali/100;
fv_percentuali = xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B4:CX4');
fv_frequenze = fv_percentuali/100;

tempi=xlsread('dati_int.xlsx',1,'A3:A952');
int=xlsread('dati_int.xlsx',1,'B3:C952');

figure(1)
plot(diametri, fn_frequenze)
title('fn - Curva distributiva di densit‡')
xlabel('d (\mum)')
ylabel('fn')

figure(2)
semilogx(diametri, fn_frequenze)
title('fn - Curva distributiva di densit‡ - semilogx')
xlabel('d (\mum)')
ylabel('fn')

figure(3)
plot(diametri, fv_frequenze)
title('fv - Curva distributiva di densit‡')
xlabel('d (\mum)')
ylabel('fv')

figure(4)
semilogx(diametri, fv_frequenze)
title('fv - Curva distributiva di densit‡ - semilogx')
xlabel('d (\mum)')
ylabel('fv')

figure(5)
plot(tempi, int)
title('Intensit‡ misurata in funzione del tempo')
xlabel('t (ms)')
ylabel('I (mV)')

I0=sum(int(1:136))/136;
T=int/I0;
figure(6)
plot(tempi, T)
title('Trasmittanza in funzione del tempo')
xlabel('t (ms)')
ylabel('T')
```

```
I0_fin = sum(int(631:end))/length(int(631:end));

for i=1:length(raggi)
    %i
    x=k*raggi_a(i);
    y=m*x;
    %x

    if  x<=8
        nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
        nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
    end

    %calcolo coefficienti di scattering
    [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);
    %calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
    Qext(i) = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);

end

Ad=trapz(diametri,fn_frequenze)
diametro_medio=trapz(diametri,fn_frequenze.*diametri)/(10^6)
a_medio=diametro_medio/2
%D=trapz(raggi, Qext.*fn_frequenze.*pi.*(raggi).^2)/((10^6)^2)
%D=trapz(diametri, Qext.*fn_frequenze.*pi.*((diametri).^2)./8)/((10^6)^2)
D=trapz(diametri, Qext.*fn_frequenze.*((diametri).^2))/((10^6)^2)*pi/4

%calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_d = @(T) -log(T)./(D*l);
fN_d = N_d(T);

%calcolo concentrazione massica
CM_d =
fN_d*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*1000/((10^6)^3)
;
CMlim1_d=N_d(Tlim1)*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*
1000/((10^6)^3);
CMlim2_d=N_d(Tlim2)*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*
1000/((10^6)^3);

%calcolo fattore di efficienza medio con distribuzione granulometrica
Qext_medio=D/(pi*a_medio^2)

%grafici
figure(7)
plot(tempi,fN_d)
title('Grafico della concentrazione numerica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('distribuzione granulometrica numerica')
figure(8)
plot(tempi,CM_d,'r')
title('Grafico della concentrazione massica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('CM (g/m3)')
```

```
legend('distribuzione granulometrica numerica')

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%calcoli con raggio medio pari alla media numerica
raggio=a_medio;
x=k*raggio;
x_fun=x;
y=m*x;
%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di scattering
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
Qext_raggio_medio = Qext

%Calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_rm = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
fN_rm = N_rm(T);

%Calcolo concentrazione numerica
CM_rm = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN_rm*1000;
CMlim1_rm=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm(Tlim1)*1000;
CMlim2_rm=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm(Tlim2)*1000;

%grafici
figure(9)
plot(tempi,fN_rm)
title('Grafico della concentrazione numerica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio numerico')
figure(10)
plot(tempi,CM_rm,'r')
title('Grafico della concentrazione massica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio numerico')

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%calcoli con raggio medio pari alla media numerica
diametro_medio32=trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))/(10^6)/trapz(d
iametri,fn_frequenze.*(diametri.^2));
raggio=diametro_medio32/2
x=k*raggio;
x_fun=x;
y=m*x;
%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
```

```
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di scattering
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
Qext_raggio_medio = Qext

%Calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_rm23 = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
fN_rm23 = N_rm23(T);

%Calcolo concentrazione numerica
CM_rm23 = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN_rm23*1000;
CMlim1_rm23=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm23(Tlim1)*1000;
CMlim2_rm23=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_rm23(Tlim2)*1000;

%grafici
figure(11)
plot(tempi,fN_rm23)
title('Grafico della concentrazione numerica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio superficiale')
figure(12)
plot(tempi,CM_rm23)
title('Grafico della concentrazione massica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio superficiale')

figure(13)
plot(tempi,fN_rm23,tempi,fN_d )
title('Grafico della concentrazione numerica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio superficiale','distribuzione granulometrica
numerica')
figure(14)
plot(tempi,CM_rm23,tempi,CM_d)
title('Grafico della concentrazione massica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio superficiale','distribuzione granulometrica
numerica')

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%calcoli con raggio medio pari al cinquantesimo percentile
raggio=13.368e-6;
x=k*raggio;
x_fun=x;
y=m*x;
%calcolo massimo valore sommatoria
if x>= 0.02 && x<=8
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
         nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
```

```
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
end

%calcolo coefficienti di scattering
[an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);

%calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
Qext = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);
Qext_cinquantesimo_percentile = Qext

%Calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_p = @(T) -log(T)./(pi*(raggio^2)*Qext*l);
fN_p = N_p(T);

%Calcolo concentrazione numerica
CM_p = (4/3)*pi*((raggio)^3)*den*fN_p*1000;
CMlim1_p=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_p(Tlim1)*1000;
CMlim2_p=(4/3)*pi*((raggio)^3)*den*N_p(Tlim2)*1000;

%grafici
figure(15)
plot(tempi,fN_p)
title('Grafico della concentrazione numerica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('cinquantesimo percentile in volume')
figure(16)
plot(tempi,CM_p,'r')
title('Grafico della concentrazione massica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('cinquantesimo percentile in volume')

figure(17)
plot(tempi,fN_rm,tempi,fN_d,tempi,fN_p,tempi,fN_rm23)
title('Grafico della concentrazione numerica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('N (particelle/m3)')
legend('diametro medio numerico', 'distribuzione granulometrica',
'cinquantesimo percentile in volume','diametro medio superficiale')
figure(18)
plot(tempi,CM_rm,tempi, CM_d,tempi,CM_p,tempi, CM_rm23)
title('Grafico della concentrazione massica')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('CM (g/m3)')
legend('diametro medio numerico', 'distribuzione
granulometrica','cinquantesimo percentile in volume','diametro medio
superficiale')

CMlim1 = [CMlim1_d CMlim1_rm CMlim1_p CMlim1_rm23];
CMlim2 = [CMlim2_d CMlim2_rm CMlim2_p CMlim2_rm23];
CM = [CMlim1;CMlim2];

%tabella concentrazioni limite
disp('CMlim_d (g/m3) CMlim_rm (g/m3) CMlim_p (g/m3)
CMlim_rm23(g/m3)');
disp('-----------------------------------------------------------------
');
```

```
disp(sprintf('%.3f\t\t %.3f\t\t %.3f\t\t %.3f\n',
[CMlim1_d;CMlim1_rm;CMlim1_p;CMlim1_rm23]));
disp(sprintf('%.3f\t\t %.3f\t\t %.3f\t\t\t %.3f\n',
[CMlim2_d;CMlim2_rm;CMlim2_p;CMlim2_rm23]));
```

A12 Confronto curva di taratura con il modello matematico

```
%{
Tesi: Metodi ottici di misura della concentrazione di nubi di polveri
Studente: Riccardo Rapetti
Nome programma: confronto_curva_taratura

Il programma permette di acquisire i dati della funzione di distribuzione
di densit‡ in numero e successivamente diVengono acquisiti i dati
contenenti la variazione dell'intensit‡ in funzione del tempo. Fornendo
in input al programma l'emissivit‡ massica valutata tramite una curva di
calibrazione sperimentale, si confronta i risultati ottenuti dal modello
matematico sviluppato (tenendo conto della distribuzione granulometrica)
con i valori prodotti dalla curva di taratura. In modo particolare vengono
rappresentati graficamente: 1) l'assorbanza in funzione della
concentrazione massica, 2) la concentrazione massica in funzione della
trasmittanza e 3) la concentrazione massica (all'interno del tubo di
Hartmann) in funzione del tempo
%}

%dati input
lambda=0.85e-6;
m=1.5;
k = 2*pi/lambda;
l=0.065; %%%%%%%%%%
den = 1500;
%epsilon = 0.21;
epsilon = 0.035;
%epsilon=0.03;

diametri=xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B6:CX6');
raggi = diametri/2;
raggi_a = raggi/(10^6);

fn_percentuali = xlsread('curva_distributiva_amido_mais.xlsx',1,'B9:CX9');
fn_frequenze = fn_percentuali/100;

tempi=xlsread('dati_int.xlsx',1,'A3:A952');
int=xlsread('dati_int.xlsx',1,'B3:C952');

I0=sum(int(1:136))/136;
T=int/I0;

for i=1:length(raggi)
    %i
    x=k*raggi_a(i);
    y=m*x;
    %x

    if  x<=8
        nmax=round(x+4*x^(1/3)+1);
    elseif x> 8 && x<=4200
        nmax=round(x+4.05*x^(1/3)+2);
    elseif x> 4200 && x<=20000
         nmax=round(x+4*x^(1/3)+2);
```

```
    end

    %calcolo coefficienti di scattering
    [an,bn] = coeff_scattering_d(x,y,m,nmax);
    %calcolo fattore di efficienza per l'estinzione
    Qext(i) = fatt_eff_estinzione_d(x,an,bn,nmax);

end

Ad=trapz(diametri,fn_frequenze);
diametro_medio=trapz(diametri,fn_frequenze.*diametri)/(10^6);
a_medio=diametro_medio/2;

D=trapz(diametri, Qext.*fn_frequenze.*((diametri).^2))/((10^6)^2)*pi/4;

%calcolo concentrazione numerica dalla legge di Lambert-Beer
N_d = @(T) -log(T)./(D*l);
z=linspace(0,1);
fN_d = N_d(z);

%calcolo concentrazione massica
CM_d =
fN_d*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*1000/((10^6)^3)
;
CM_sper = @(T) -log(T)./(epsilon*l);
CM_s=CM_sper(z);

figure(1)
plot(CM_d,-log(z),CM_s,-log(z))
legend('modello', 'sperimentale')
xlabel('CM (g/m3)')
ylabel('A')
%grid on

figure(2)
plot(z, CM_d,z,CM_s)
legend('modello', 'sperimentale')
xlabel('T')
ylabel('CM (g/m3)')

%Tubo Hartmann
fN_d = N_d(T);
CM_d =
fN_d*(pi/6)*den*trapz(diametri,fn_frequenze.*(diametri.^3))*1000/((10^6)^3)
;
CM_s=CM_sper(T);

figure(3)
plot(tempi,CM_d, tempi, CM_s)
legend('modello', 'sperimentale')
xlabel('tempo (ms)')
ylabel('CM (g/m3)')
%grid on
```