

МЕТОДЫ И СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ
ОБРАБОТКА ДАННЫХ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

В.А. Бабенко, С.Т. Лейко

**МЕТОД РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК РАССЕЯНИЯ СВЕТА
ДВУХСЛОЙНОЙ СФЕРОЙ С НЕОДНОРОДНОЙ ОБОЛОЧКОЙ**

Разработан метод расчета характеристик рассеяния света двухслойной сферой с однородным ядром и радиально-неоднородной оболочкой со степенной зависимостью комплексного показателя преломления $m = A\rho^b$, где $\rho = 2\pi r/\lambda$ (r — расстояние от центра частицы, λ — длина волны); A , b — произвольные комплексные постоянные. Метод основан на комбинации теоремы сложения Гегенбауэра и разложения в цепную дробь для функций Бесселя и их логарифмических производных.

При теоретическом исследовании рассеяния света дисперсными объектами нередко сталкиваются с необходимостью учета оптической неоднородности частиц. Традиционно используемая при этом модель слоистой сферы с постоянным показателем преломления в пределах каждого слоя зачастую оказывается неадекватной реальной оптике частиц, что побуждает вводить более сложные модели, самая употребительная из которых — двухслойная сфера с однородным ядром и радиально-неоднородной оболочкой. Такой подход использовался в 60–70 гг. для описания рассеивающих свойств ряда объектов, далеких от атмосферной оптики (см. ссылки в [1, 2]).

В последние годы интерес к этой модели возник вновь в связи с задачами рассеяния на частично растворимых частицах атмосферного аэрозоля, испаряющихся частицах с парогазовым «ореолом», некоторых искусственных аэрозолях. Сфера с неоднородной оболочкой использовалась для описания мелкодисперсной фракции океанской взвеси [3, 4] и моделирования рассеяния на ансамбле частиц случайной формы [5, 6]; особый интерес представляет ее применение к фрактальным кластерам [7]. Широкому внедрению этой модели в практику расчетов светорассеяния препятствуют математические затруднения (как аналитического, так и вычислительного плана).

Целью настоящей статьи является построение устойчивого и надежного алгоритма расчета характеристик рассеяния на указанной разновидности двухслойных частиц с профилем радиальной неоднородности достаточно общего вида.

Уточним постановку задачи. Монохроматическая (длина волны λ) плоская электромагнитная волна падает на частицу, состоящую из сферического ядра радиусом r_1 с постоянным комплексным показателем преломления $m_1 = \hat{n}_1 - i\kappa_1$ и концентрической оболочки внешнего радиуса r_2 , показатель преломления которой $m_2(\rho) = \hat{n}_2(\rho) - i\kappa_2(\rho)$ зависит от относительного расстояния до центра сферы $\rho = 2\pi r/\lambda$. Строгая теория рассеяния на таком объекте была разработана в [8]. Не останавливаясь на подробностях достаточно сложного и громоздкого вывода, приведем окончательные соотношения для характеристик рассеяния. Выражения для амплитудных коэффициентов рассеянного поля можно, в отличие от [8], записать в следующей удобной для расчетов форме ($l = 1, 2, \dots$):

$$\alpha_l = B_l \frac{E_l \gamma_{l1}^{(3)} \gamma_{l2}^{(1)} - \gamma_{l1}^{(1)} \gamma_{l2}^{(3)}}{E_l \gamma_{l3}^{(3)} \gamma_{l2}^{(1)} - \gamma_{l3}^{(1)} \gamma_{l2}^{(3)}}, \quad \beta_l = B_l \frac{C_l \gamma_{l4}^{(3)} \gamma_{l5}^{(1)} - \gamma_{l4}^{(1)} \gamma_{l5}^{(3)}}{C_l \gamma_{l6}^{(3)} \gamma_{l5}^{(1)} - \gamma_{l6}^{(1)} \gamma_{l5}^{(3)}}, \quad (1)$$

где

$$\gamma_{l1}^{(1)} = F_l^{(1)}(\rho_2) - D_l(\rho_2), \quad \gamma_{l2}^{(1)} = F_l^{(1)}(\rho_1) - m_1 D_l(m_1 \rho_1),$$

$$\gamma_{l3}^{(1)} = G_l(\rho_2) - F_l^{(1)}(\rho_2), \quad \gamma_{l4}^{(1)} = m_2^{\frac{1}{2}}(\rho_2) D_l(\rho_2) - R_l^{(1)}(\rho_2),$$

$$\gamma_{l5}^{(1)} = \frac{m_1}{m_2^{\frac{1}{2}}(\rho_1)} R_l^{(1)}(\rho_1) - D_l(m_1 \rho_1), \quad \gamma_{l6}^{(1)} = R_l^{(1)}(\rho_2) - m_2^{\frac{1}{2}}(\rho_2) G_l(\rho_2) \quad (2)$$

(выражения для $\gamma^{(3)}$ получаются из соответствующих выражений для $\gamma^{(1)}$ при замене $F^{(1)}$ и $R^{(1)}$ на $F^{(3)}$ и $R^{(3)}$),

$$B_l = \psi_l(\rho_2)/\zeta_l(\rho_2), C_l = W_l^{(1)}(\rho_1) W_l^{(3)}(\rho_2)/W_l^{(3)}(\rho_1) W_l^{(1)}(\rho_2),$$

$$E_l = V_l^{(1)}(\rho_1) V_l^{(3)}(\rho_2)/V_l^{(3)}(\rho_1) V_l^{(1)}(\rho_2). \quad (3)$$

В (2, 3) приняты следующие обозначения: $\rho_{1,2} = 2\pi r_{1,2}/\lambda$ — параметры дифракции для ядра и оболочки соответственно; $\psi_l(\rho)$ и $\zeta_l(\rho)$ — функции Рикатти-Бесселя и Рикатти-Ханкеля; $D_l(\rho)$ и $G_l(\rho)$ — логарифмические производные функций $\psi_l(\rho)$ и $\zeta_l(\rho)$ соответственно; $W_l(\rho)$ и $V_l(\rho)$ — магнитная и электрическая радиальные функции (определение см. ниже); $R_l(\rho)$ и $F_l(\rho)$ — логарифмические производные функций $W_l(\rho)$ и $V_l(\rho)$ соответственно; верхним индексом (1) обозначаются функции, регулярные в начале координат, а (3) — удовлетворяющие в волновой зоне условию излучения. Если амплитудные коэффициенты α_l, β_l известны, то характеристики рассеяния можно рассчитать по обычным формулам (см., например, [9]).

Радиальные функции $W_l^{(i)}(\rho)$ и $V_l^{(i)}(\rho)$ ($i = 1, 3$) являются решениями линейных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$W_l''(\rho) - [\ln m_2^2(\rho)]' W_l'(\rho) + [m_2^2(\rho) - l(l+1)/\rho^2] W_l(\rho) = 0, \quad (4)$$

$$V_l''(\rho) + [m_2^2(\rho) - l(l+1)/\rho^2] V_l(\rho) = 0, \quad (5)$$

где штрих — производная по ρ . Конкретный вид этих уравнений и, следовательно, их решение зависит от выбора профиля показателя преломления $m_2(\rho)$ в оболочке. Как показано в [2], аналитические решения радиальных уравнений (4, 5) возможны лишь для весьма ограниченного набора профилей $m_2(\rho)$; при этом, как правило, решения выражаются через гипергеометрические функции, крайне неудобные для численного расчета. Единственным реальным профилем, позволяющим избежать появления гипергеометрических функций, является степенная зависимость

$$m_2(\rho) = b_1 \rho^{b_2}, \quad (6)$$

где b_1, b_2 — произвольные комплексные постоянные. Частный случай профиля (6) с действительными b_1 и b_2 рассматривался в [8, 10], а еще более простой случай с $b_2 = -1$ в [3–5, 11]. Профиль (6) содержит 4 свободных параметра и позволяет независимо задать комплексные показатели преломления на границе ядра и оболочки $m_2(\rho_1)$ и на внешней границе частицы $m_2(\rho_2)$. При этом ход профиля $m_2(\rho)$ внутри оболочки оказывается фиксированным.

При подстановке (6) в радиальные уравнения (4,5) получаем дифференциальные уравнения, решениями которых являются цилиндрические функции:

$$V_l^{(1)}(\rho) = V_{\nu_l}^{-}(x(\rho)), \quad V_l^{(3)}(\rho) = V_{\nu_l}^{-}(x(\rho)); \quad (7)$$

$$W_l^{(1)}(\rho) = \rho^{b_2+0,5} J_{\mu_l}(x(\rho)), \quad W_l^{(3)}(\rho) = \rho^{b_2+0,5} H_{\mu_l}^{(2)}(x(\rho)), \quad (8)$$

где J — функция Бесселя; $H^{(2)}$ — функция Ханкеля второго рода (индекс «(2)» далее опускаем). Аргумент x и индексы этих функций равны

$$x(\rho) = \frac{m_2(\rho)}{b_2+1} \rho; \quad \mu_l = \frac{2l+1}{2(b_2+1)}; \quad \nu_l = \frac{\sqrt{l(l+1) + (b_2+0,5)^2}}{b_2+1}. \quad (9)$$

Очевидно, что при однородности оболочки ($b_2 = 0$) функции V_l и W_l с точностью до несущественного постоянного множителя переходят в функции Рикатти-Бесселя и Рикатти-Ханкеля. Если же оболочка неоднородна, то индексы μ_l и ν_l в общем случае комплексны. Как видно из (1–3), в амплитудные коэффициенты цилиндрические функции (7, 8) входят в виде следующих отношений:

$$R_l^{(1)}(\rho) = \frac{2b_2+1}{2\rho} + m_2(\rho) J_{\nu_l}'(x(\rho))/J_{\nu_l}(x(\rho)); \quad (10)$$

$$F_l^{(1)}(\rho) = \frac{1}{2\rho} + m_2(\rho) J_{\mu_l}'(x(\rho))/J_{\mu_l}(x(\rho)), \quad (11)$$

где «штрих» означает производную по аргументу $x(\rho)$; $R_l^{(3)}$ и $F_l^{(3)}$ получаются из (10) и (11) при замене функции Бесселя на функцию Ханкеля;

$$C_l = J_{\nu_l}(x(\rho_1)) H_{\nu_l}(x(\rho_2)) / H_{\nu_l}(x(\rho_1)) J_{\nu_l}(x(\rho_2)) \quad (12)$$

(выражение E_l аналогично (12), если заменить ν_l на μ_l). В частном случае $b_2 = -1$ [3, 5, 11] радиальные функции вырождаются в степенные и $R_l^{(1)} = -F_l^{(3)} = (q_l - 1) / 2\rho$, $F_l^{(1)} = -R_l^{(3)} = (q_l + 1) / 2\rho$, $C_l = E_l = (\rho_1 \rho_2)^{q_l}$, $q_l = 2[(l + 0,5)^2 - b_1^2]^{1/2}$.

Таким образом, для расчета амплитудных коэффициентов необходимо получить три группы функций: 1) функции $\psi_l(\rho_2)$, $\zeta_l(\rho_2)$ и логарифмические производные $D_l(\rho_2)$, $G_l(\rho_2)$, $D_l(m_1 \rho_1)$; 2) логарифмические производные $J'_{\nu_l}(z) / J_{\nu_l}(z)$, $H'_{\nu_l}(z) / H_{\nu_l}(z)$ и отношения $J_{\nu_l}(z) / H_{\nu_l}(z)$ для аргументов $z = x(\rho_1)$ и $z = x(\rho_2)$; 3) аналогичные функции для набора индексов μ_l . Вычисление функций первой группы затруднений не вызывает. Для оценки числа членов L , достаточного для сходимости рядов по амплитудным коэффициентам, можно использовать соотношение [12]:

$$L = \begin{cases} 1,01 (\rho_2 + 4,05 \sqrt[3]{\rho_2} + 2), & \rho_2 \geq 0,02 \\ 2, & \rho_2 < 0,02. \end{cases} \quad (13)$$

первоначально полученное для однородных сфер. Набор логарифмических производных $D_l(\rho_2)$ и $D_l(m_1 \rho_1)$ ($l = L, L-1, \dots, 1$) рассчитывается по рекурсии «вниз», причем стартовые члены рекурсий получаются путем разложения в цепную дробь [13]. Функции $\zeta_l(\rho_2)$ и $G_l(\rho_2)$ рассчитывались по рекурсии «вверх» ($l = 1, 2, \dots, L$), а функции $\psi_l(\rho_2)$ — по рекурсии «вниз» с пересчетом. Подробности методики расчета этих функций можно найти в [12–14].

Гораздо сложнее обстоит дело с функциями второй и третьей групп. Как видно из (9), построение рекуррентной по l схемы здесь невозможно, что вынуждает проводить независимый расчет для каждого $l = 1, 2, \dots, L$. Не упрощает ситуацию и то, что нам необходимы не сами функции, а их отношения. В случае комплексных индексов эти отношения невозможно получить, не проведя прямой расчет хотя бы одной цилиндрической функции. Для этого нужно выбрать регулярную функцию $J_\nu(z)$ (для упрощения записи последующее рассмотрение проводится для произвольного аргумента z и индекса ν). С целью ее вычисления мы несколько модифицировали методику, предложенную в [15] и являющуюся обобщением на комплексные ν метода, описанного в [16]. Введем последовательность вспомогательных функций $F_n(z)$ $n = 0, 1, \dots, N_1^*$; определение N_1^* см. ниже), связанных с функциями $J_{\nu+n}(z)$ нормировочной постоянной A : $A J_{\nu+n}(z) = F_n(z)$ и, следовательно, подчиняющихся той же рекурсии по n , что и функция Бесселя

$$F_{n-1}(z) = \frac{2(\nu + n)}{z} F_n(z) - F_{n+1}(z). \quad (14)$$

Как известно, рекурсия вида (14) устойчива лишь при расчете «вниз», причем начинать рекурсию следует с индекса N_1^* , значительно превосходящего как $|\nu|$, так и $|z|$. Мы использовали следующую оценку для N_1^* :

$$N_1^* = \max \begin{cases} 1,5|z| - |\nu| + 15, \\ 30, \end{cases} \quad (15)$$

с округлением до ближайшего нечетного. Начальные значения $F_{N_1^*-1} = 0$, $F_{N_1^*} = 10^{-35}(1+i)$. При выполнении условия (15) последовательность $F_n(z)$ выходит на правильные значения максимум за 5–6 шагов рекурсии. Поэтому в алгоритме полагаются верно рассчитанными F_n с $n = 0, 1, \dots, 2N_1$, где $2N_1 = N_1^* - 5$.

Из теоремы сложения Гегенбауэра [17]

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\nu + 2n) \Gamma(\nu + n)}{n!} J_{\nu+2n}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu, \quad (16)$$

где Γ — гамма-функция, следует (подробности см. в [16]) выражение для нормировочной постоянной A :

$$A = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k F_{2k}(z), \quad (17)$$

где коэффициенты α_k рассчитываются по мультипликативной рекурсии $\alpha_k = c_k \alpha_{k-1}$, причем $\alpha_0 = (2/z)^\nu \Gamma(1+\nu)$, а $c_k = (\nu+2k)(\nu+k-1)/k(\nu+2k-2)$. Суммирование в (17) идет или до $k = N_1$, или прекращается, если отношение абсолютной величины последующего члена ряда к сумме предыдущих не превышает 10^{-8} . Искомая функция $J_\nu(z)$ равна

$$J_\nu(z) = A^{-1} F_0(z). \quad (18)$$

При практической реализации этого метода возникают затруднения. Ряд (17) сходится довольно медленно, особенно при большом отрицательном значении Rev , поэтому в алгоритме при $\text{Rev} < 0$ предусмотрен расчет не $J_\nu(z)$, а $J_{-\nu}(z)$.

Некоторые неудобства вызывает расчет гамма-функции от комплексного аргумента $\Gamma(1+\nu)$. Стандартные подпрограммы работают в одинарной значности, что приводит или к переполнению или к занулению результата и, в конечном счете, к неверному значению α_0 . Поэтому естественным оказался переход к логарифмической записи $\ln \alpha_0 = \nu \ln(2/z) + \ln \Gamma(1+\nu)$ с последующим восстановлением α_0 . Логарифм гамма-функции можно рассчитать по стандартной подпрограмме.

Больших порядков, появляющихся в процессе расчета по рекурсиям для F_n и c_k , можно в значительной степени избежать, пронормировав F_n на $\text{Re} F_0$, а α_k — на α_0 . После нормировки основное соотношение (18) записывается в виде

$$J_\nu(z) = \tilde{F}_0(z) / \alpha_0 \sum_{k=0}^{N_1} \tilde{\alpha}_k \tilde{F}_{2k}(z). \quad (19)$$

Наибольшие затруднения связаны, однако, с разнонаправленностью рекурсий для F и α при заранее неизвестной области сходимости ряда (17). Если N_1 членов ряда не обеспечивают сходимости по выбранному критерию, то необходимо провести дополнительный расчет \tilde{F}_n ($n = 2N_1, 2N_1+1, \dots, N_1^*$) по рекурсии (14) «вниз» с начальными значениями $\tilde{F}_{N_2^*+1} = 0$, $\tilde{F}_{N_2^*} = 10^{-15}(1+i)$, где $N_2^* = 2N_1+15$. Последовательность \tilde{F}_n и ранее полученную последовательность \tilde{F}_n можно «сшить» при $n = 2N_1$. Если обозначить отношение $f = \tilde{F}_{2N_1} / \tilde{F}_{2N_1}$, то очевидно, что последовательность $\tilde{F}_{2N_1+1} = f \tilde{F}_{2N_1+1}, \dots, \tilde{F}_{2N_2} = f \tilde{F}_{2N_2}$ (где $2N_2 = N_2^* - 5$) нормирована точно так же, как и первоначальная. Следовательно, досчитав по рекурсии значения c_k ($k = N_1+1, \dots, N_2$), можно продолжить суммирование в знаменателе (19). Если сходимость и на этот раз не достигается, процесс требуется повторить.

Основанный на теореме сложения Гегенбауэра метод расчета $J_\nu(z)$ позволяет одновременно получить и значение логарифмической производной

$$D_\nu(z) \equiv \frac{J'_\nu(z)}{J_\nu(z)} = - \frac{\tilde{F}_1(z)}{\tilde{F}_0(z)} + \frac{\nu}{z}. \quad (20)$$

Более того, этот метод допускает расчет и функции Неймана $Y_\nu(z)$. В [16] показано, что

$$Y_\nu(z) = A^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k F_{2k}(z), \quad (21)$$

где $\beta_k = c_k \beta_{k-1} (2\nu+k-1)/(\nu-k)$, $k = 2, 3, \dots$; $\beta_0 = \text{ctg} \nu \pi - \alpha_0^2 / \nu \pi$; $\beta_1 = 2\alpha_0^2(\nu+2) / \pi(\nu-1)$. Знания J_ν , Y_ν и D_ν вполне достаточно для получения (с помощью вронскианов и соотношений для производных) нужных нам отношений. Однако расчеты показали, что этот способ расчета численно стабилен лишь при $|\nu| \gg |z|$. При $|\nu| \ll |z|$ (а это, как правило, и имеет место при суммировании ряда (21)) происходит катастрофическая потеря значности. Если же индекс и аргумент одного порядка, то потеря значности невелика, но зато наблюдается очень слабая сходимость ряда (21). Поэтому мы применили другой подход. Как известно, разложение отношения $J'_\nu(z)/J_\nu(z)$ в цепную дробь при полуцелых ν широко используется в современных алгоритмах расчета по теории Ми [12, 13]. Это разложение весьма стабильно в численном отношении; незначительная модификация позволяет применить его к комплексным индексам и рассчитать $D_{-\nu}(z)$ ($\text{Rev} > 0$). При $\text{Rev} < 0$ этим способом рассчитывается $D_\nu(z)$.

Далее, из известного вронскиана получаем

$$M_\nu(z) \equiv \frac{J_{-\nu}(z)}{J_\nu(z)} = \left[\frac{2 \sin \nu \pi}{\pi z} \cdot \frac{1}{J_{\pm, \nu}^2(z) (D_\nu(z) - D_{-\nu}(z))} \right]^{\pm 1} \quad (22)$$

(верхние знаки для $\text{Re} \nu > 0$, нижние — для $\text{Re} \nu < 0$). Из определения функции Ханкеля следуют выражения для искомых отношений:

$$\frac{H'_\nu(z)}{H_\nu(z)} = D_\nu(z) + \frac{M_\nu(z)}{K_\nu(z)} [D_\nu(z) - D_{-\nu}(z)],$$

$$\frac{J_\nu(z)}{H_\nu(z)} = \frac{i \sin \nu \pi}{K_\nu(z)}, \quad (23)$$

где $K_\nu(z) = e^{i\nu\pi} - M_\nu(z)$.

Разработанный алгоритм был реализован на ЭВМ БЭСМ-6. Контрольные расчеты показали совпадение с приведенными в [10, 11] результатами для вырожденных случаев. Полидисперсный вариант этой программы (логнормальное и гамма-распределения радиуса ядра r_1 ; постоянное отношение внешнего радиуса r_2 к r_1) был использован для исследования характеристик светорассеяния кластерных образований и некоторых разновидностей атмосферного аэрозоля.

1. Kerker M. The scattering of light and other electromagnetic radiation. N. Y.: Academic. 1969. P. 232–249.
2. Пришивалко А.П., Бабенко В.А., Кузьмин В.Н. Рассеяние и поглощение света неоднородными и анизотропными сферическими частицами. Минск: Наука и техника, 1984. 264 с.
3. Шифрин К.С., Перельман А.Я., Кокорин А.М. //Оптика и спектроскопия. 1985. Т. 59. № 3. С. 597–602.
4. Кокорин А.М., Шифрин К.С. //Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1989. Т. 25. № 2. С. 193–201.
5. Шифрин К.С., Перельман А.Я., Кокорин А.М. //Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11. № 13. С. 790–794.
6. Волков Н.Г., Ковач В.Ю. Обобщение теории Ми на случай неоднородных сферически симметричных частиц и частиц случайной формы. М., 1989. 30 с. Деп. в ВИНТИ 14.09.89. № 5881-В89.
7. Кузьмин В.Н., Мороз О.В., Пришивалко А.П. //ДАН СССР. 1988. Т. 302. № 2. С. 332-334.
8. Levine S., Kerker M. //Electromagnetic scattering. Oxford: Pergamon, 1963. P. 37–44.
9. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М: Мир, 1986. 660 с.
10. Kerker M., Kauffman L.H., Farone W.A. //J. Opt. Soc. Amer. 1966. V. 56. № 8. P. 1053–1056.
11. Кокорин А.М. Таблицы оптических характеристик просветленных сфер. Л., 1985. 87 с. Деп. в ВИНТИ 15.06.85. № 5758-85.
12. Wiscombe W.J. //Appl. Opt. 1980. V. 19. № 9. P. 1505–1509.
13. Lentz W.J. //Appl. Opt. 1976. V. 15. № 3. P. 668–671.
14. Пришивалко А.П., Науменко Е.К., Кацева И.Р. //Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. 1975. № 1. С. 71–79.
15. Lewis J.E., Sarkar T.K., O'Kelly P.D //Electron. Letters. 1971. V. 7. № 20. P. 615–616.
16. Goldstein M., Thaler R.M. //Mathem. tables and other aids to computat. 1959. V. 13. № 66. P. 102–108.
17. Справочник по специальным функциям/Под ред. М. Абрамовиц и И. Стиган. М.: Наука, 1979. Гл. 9. 830 с.

Институт физики им. Б.И. Степанова АН БССР,
Минск

Поступила в редакцию
25 мая 1990 г.

V. A. Babenko, S. T. Leiko. The Method of Scattering Function Calculation for a Double-Layer Sphere with the Inhomogeneous Shell.

The method of scattering function calculations is presented for the case of a double-layer sphere with homogeneous core surrounded by a radially inhomogeneous shell with a «power law» behavior of the complex refractive index $m = A\rho^b$ where $\rho = 2\pi r/\lambda$ (r is the distance from the particle center, λ is the wavelength); A , b are the complex parameters. The method is a combination of Gegenbauer addition theorem and continuous fraction expansion for the Bessel functions and their logarithmic derivatives.