

**А.В. Васильев, Л.С. Ивлев**

### **УНИВЕРСАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУХСЛОЙНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ С ОДНОРОДНЫМИ ЯДРОМ И ОБОЛОЧКОЙ**

Предложен алгоритм расчета оптических характеристик двухслойных сферических частиц с однородными ядром и оболочкой, позволяющий проводить вычисления без ограничений на радиус и значения комплексного показателя преломления вещества ядра и оболочки и с точностью, приемлемой для моделирования оптических параметров частиц атмосферного аэрозоля. Алгоритм основан на преобразовании формул для коэффициентов рядов Ми, позволяющем избежать вычислений функций Риккати–Бесселя от комплексного аргумента, что обеспечивает его устойчивость при расчетах на ЭВМ. Получены асимптотические формулы для случая крупных частиц с сильно поглощающей оболочкой. Проведена проверка алгоритма путем сравнения с независимыми расчетами и по системе специальных тестов для случаев очень мелких и очень крупных частиц.

Для моделирования оптических свойств атмосферного аэрозоля, наряду с алгоритмами расчета для однородных сфер, основанных на классической теории Ми, важное значение имеют алгоритмы расчета оптических характеристик двухслойных сфер – частиц типа «шар в оболочке». Такие частицы появляются, например, в результате процессов обводнения аэрозольных частиц во влажном воздухе и, как показывают расчеты, имеют оптические характеристики, существенно отличающиеся от необводненных частиц [1]. Теоретическое решение задачи о рассеянии электромагнитных волн на двухслойных сферах получено достаточно давно (вывод формул см., например, в [2]).

Однако при практической реализации этих решений в виде компьютерных программ возникают существенные вычислительные трудности, причины которых рассматриваются ниже. В конечном счете это приводит к тому, что все известные авторам алгоритмы [2 – 5] имеют ограниченную область применения: их нельзя использовать для частиц большого размера и для частиц с сильно поглощающей оболочкой. Наличие таких ограничений снижает наши возможности моделирования оптических характеристик атмосферного аэрозоля, поэтому в настоящей статье предлагается новый алгоритм, позволяющий снять все ограничения на расчетные параметры в области их возможных значений в задачах численного моделирования оптических характеристик атмосферного аэрозоля.

Модель двухслойной частицы представляет собой две однородные концентрические сферы, в которых внутренняя сфера называется ядром, внешняя – оболочкой. Частица характеризуется следующими параметрами:  $r$  – полный радиус (радиус оболочки),  $g$  – отношение радиусов внутренней и внешней сфер ( $0 < g < 1$ ),  $M_1$  – комплексный показатель преломления вещества ядра,  $M_2$  – комплексный показатель преломления вещества оболочки,  $M$  – показатель преломления внешней среды, который условимся считать вещественным. Причем, следуя [2], будем задавать комплексные показатели преломления в виде двух различных параметров: вещественной и мнимой частей, и формально объединять их знаком «плюс»:  $M_1 = n_1 + ik_1$ ,  $M_2 = n_2 + ik_2$ . Такая нестандартная форма записи комплексных показателей преломления дает некоторые преимущества при практическом программировании.

Отличие случая двухслойных сфер от однородных состоит только в использовании иных формул для вычисления коэффициентов  $a_n$  и  $b_n$  рядов Ми. Структура матрицы рассеяния, формулы для вычисления сечений ослабления и рассеяния, элементов матрицы рассеяния и коэффициентов разложения индикатрисы рассеяния в ряд по полиномам Лежандра остаются без изменений (см. [2, 6]).

Поглощение и рассеяние света шаром в оболочке характеризуются шестью безразмерными параметрами:

$$y = 2\pi M r/\lambda; \quad x = gy; \quad m_1 = M_1/M; \quad m_2 = M_2/M, \quad (1)$$

где  $\lambda$  – длина волны света (величины  $x$  и  $y$  – вещественные; комплексное число – пара параметров).

Запишем исходные формулы [2, с. 609] для вычисления  $a_n$  и  $b_n$  в виде, удобном для практических расчетов, слегка видоизменив обозначения:

$$A_n = \psi_n(m_2 x) \frac{m D_n(m_1 x) - D_n(m_2 x)}{m D_n(m_1 x) \chi_n(m_2 x) - \chi'_n(m_2 x)};$$

$$B_n = \psi_n(m_2 x) \frac{m D_n(m_2 x) - D_n(m_1 x)}{m \chi'_n(m_2 x) - D_n(m_1 x) \chi_n(m_2 x)}; \quad (2)$$

$$c_n = \frac{D_n(m_2 y) - A_n \chi'_n(m_2 y)/\psi_n(m_2 y)}{1 - A_n c_n(m_2 y)/\psi_n(m_2 y)},$$

$$d_n = \frac{D_n(m_2 y) - B_n \chi'_n(m_2 y)/\psi_n(m_2 y)}{1 - B_n c_n(m_2 y)/\psi_n(m_2 y)}; \quad (3)$$

$$a_n = \frac{(c_n/m_2 + n/y) \psi_n(y) - \psi_{n-1}(y)}{(c_n/m_2 + n/y) \xi_n(y) - \xi_{n-1}(y)},$$

$$b_n = \frac{(m_2 d_n + n/y) \psi_n(y) - \psi_{n-1}(y)}{(m_2 d_n + n/y) \xi_n(y) - \xi_{n-1}(y)}; \quad (4)$$

где  $m = m_2/m_1$ ;  $\psi_n(z)$ ,  $\psi'_n(z)$ ,  $\chi_n(z)$ ,  $\chi'_n(z)$ ,  $\xi_n(z)$  – функции Риккати–Бесселя от комплексного аргумента и их производные;  $D_n(z) = \psi'_n(z)/\psi_n(z)$ . Для функций Риккати–Бесселя имеют место рекуррентные соотношения (см. [2]):

$$\psi_{n+1}(z) = \frac{2n+1}{z} \psi_n(z) - \psi_{n-1}(z), \quad \psi_{-1}(z) = \cos z, \quad \psi_0(z) = \sin z;$$

$$\chi_{n+1}(z) = \frac{2n+1}{z} \chi_n(z) - \chi_{n-1}(z), \quad \chi_{-1}(z) = -\sin z, \quad \chi_0(z) = \cos z;$$

$$\xi_n(z) = \psi_n(z) - i \chi_n(z); \quad (5)$$

$$\psi'_n(z) = \psi_{n-1}(z) - \frac{n\psi_n(z)}{z};$$

$$\chi'_n(z) = \chi_{n-1}(z) - \frac{n\chi_n(z)}{z}. \quad (6)$$

Основной вычислительной трудностью является необходимость вычислять функции Риккати–Бесселя от комплексного аргумента – при большой мнимой части  $z$  возникает переполнение порядка или быстрое накопление машинной ошибки вычислений. В случае однородных сфер эти проблемы удается снять, вводя логарифмическую производную – функцию  $D_n(z)$ . Для нее из (5) и (6) выводится соотношение

$$D_n(z) = -\frac{n}{z} + \frac{1}{n/z - D_{n-1}(z)}, \quad D_0(z) = \operatorname{ctg} z. \quad (7)$$

Это соотношение позволяет вычислять  $D_n(z)$  по формуле обратной рекурсии [2, 7]

$$D_{n-1}(z) = \frac{n}{z} - \frac{1}{n/z + D_n(z)}, \quad (8)$$

которая обладает хорошей устойчивостью к накоплению ошибки вычислений.

Вводя согласно [7] вспомогательную функцию

$$\alpha_n(z) = z \frac{\Psi_{n-1}(z)}{\Psi_n(z)}, \quad D_n(z) = \frac{\alpha_n(z) - n}{z}, \quad (9)$$

получаем из (5), (6)

$$\alpha_n(z) = 2n + 1 - \frac{z^2}{\alpha_{n+1}(z)}, \quad (10)$$

откуда вытекает разложение  $\alpha_n(z)$  в непрерывную дробь [7]:

$$\alpha_n(z) = 2n + 1 - \frac{z^2}{2n + 3 - \frac{z^2}{\{2n + 5 - [z^2/(2n + 7 - \dots)]\}}}. \quad (11)$$

Для практического вычисления непрерывной дроби (11) в [7] предложена альтернативная форма ее записи, которая с учетом известного рекуррентного алгоритма расчета непрерывных дробей приводит к следующей схеме:

$$\alpha_n(z) = \lim_{k \rightarrow \infty} (P_k/Q_k);$$

$$P_k = t_k P_{k-1} + P_{k-2}, \quad Q_k = t_k Q_{k-1} + Q_{k-2},$$

$$P_{-1} = 1, \quad Q_{-1} = 0, \quad P_0 = 2n + 1, \quad Q_0 = 1,$$

$$t_k = 2n + 2k + 1 \quad \text{для четных } k, \quad t_k = -(2n + 2k + 1)/z^2 \quad \text{для нечетных } k. \quad (12)$$

Итерации при вычислениях по (12) продолжаются, пока отношение модулей  $\alpha_n(z)$ , полученных для значений  $k-1$  и  $k$ , не будет отличаться от единицы менее чем на заданную малую величину. В наших расчетах эта величина бралась равной  $10^{-9}$ , что обеспечивало практическое совпадение результатов вычислений  $D_n(z)$  по формуле обратной рекурсии (8) и через непрерывную дробь (12).

Использование функций  $D_n(z)$  и  $\alpha_n(z)$  позволяет проводить расчеты для однородных сфер при любых практически возможных значениях радиуса и комплексного показателя преломления. Наш опыт таких расчетов показывает, что наиболее оптимальным является сочетание обратной рекурсии (8) с непосредственным вычислением  $D_n(z)$  по (9), (12) как для начального запуска обратной рекурсии, так и для повторных (реперных) запусков через несколько тысяч итераций обратной рекурсии.

Применим для двухслойных сфер аналогичный прием. Введем помимо функции  $D_n(z)$  также функцию  $C_n(z) = \chi'_n(z)/\chi_n(z)$ . Из (5) и (6) для функции  $C_n(z)$  следуют рекуррентные соотношения, аналогичные соотношениям (7) и (8) для функции  $D_n(z)$ . Но это и создает вычислительные трудности, так как для  $C_n(z)$  нельзя начинать обратную рекурсию с нуля, иначе мы для любых  $n$  получим  $C_n(z) = D_n(z)$ , что неверно.

Заметим, что формула обратной рекурсии (8) позволяет формально рассматривать не только положительные, но и отрицательные значения индекса  $n$ . Тогда из связи начальных значений

$$C_0(z) = -\operatorname{tg} z = -1/\operatorname{ctg} z = -1/D_0(z) = D_{-1}(z),$$

формулы (8) и рекуррентного соотношения, аналогичного (7) для функции  $C_n(z)$ , непосредственно следует

$$C_n(z) = D_{-n-1}(z). \quad (13)$$

Это позволяет в дальнейшем ограничиться рассмотрением только функции  $D_n(z)$  с любыми целыми значениями индекса.

Для вычислений  $D_n(z)$  при отрицательных значениях  $n$  используется формула обратной рекурсии (8). При этом была проверена устойчивость расчетов по (8) путем сравнения резуль-

татов с найденными через непрерывную дробь (12) и получено совпадение практически всех значащих цифр при любых реальных значениях вещественной и мнимой частей  $z$ .

Для перехода от положительных к отрицательным значениям  $n$  при вычислениях  $D_n(z)$  лучше не использовать значения  $D_0(z)$  и  $D_{-1}(z)$  ( $\text{ctg } z$  и  $-\text{tg } z$  соответственно), так как при их расчете для определенных значений  $z$  может произойти переполнение порядка или потеря точности. Для перехода от  $D_1(z)$  к  $D_{-2}(z)$  рекомендуется явная формула

$$D_{-2}(z) = \frac{z^2 - z^4 - zD_1(z) - 1}{z + z^2(1 + z^2 D_1(z))}.$$

Теперь, вводя вспомогательную функцию  $F_n(z_1, z_2) = \frac{\Psi_n(z_1)c_n(z_2)}{y_n(z_2)c_n(z_1)}$ , разделив числитель и знаменатель формул (2) на  $\chi_n(m_2x)$  и учитывая, что  $\chi'_n(z)/\Psi_n(z) = C_n(z)\chi_n(z)/\Psi_n(z)$ , перепишем (2) и (3) в виде

$$\begin{aligned} A_n &= \frac{mD_n(m_1x) - D_n(m_2x)}{mD_n(m_1x) - D_{-n-1}(m_2x)}, \\ B_n &= \frac{D_n(m_1x)/m - D_n(m_2x)}{D_n(m_1x)/m - D_{-n-1}(m_2x)}, \\ c_n &= \frac{D_n(m_2y) - D_{-n-1}(m_2y) A_n F_n(m_2x, m_2y)}{1 - A_n F_n(m_2x, m_2y)}, \\ d_n &= \frac{D_n(m_2y) - D_{-n-1}(m_2y) B_n F_n(m_2x, m_2y)}{1 - B_n F_n(m_2x, m_2y)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Таким образом, используя (4) и (14), удастся избежать вычислений функций Рикатти–Бесселя от комплексного аргумента.

Для  $F_n(z_1, z_2)$  из (5), (6) следует рекуррентное соотношение

$$F_{n+1}(z_1, z_2) = F_n(z_1, z_2) \frac{(D_{-n-1}(z_1) + n/z_1)(D_n(z_2) + n/z_2)}{(D_n(z_1) + n/z_1)(D_{-n-1}(z_2) + n/z_2)}. \quad (15)$$

Для расчета начального значения  $F_1(z_1, z_2)$  из  $D_0(z) = \text{ctg } z$ , формул (5) и (8) с учетом  $z_1 = m_2x$ ,  $z_2 = m_2y$  получаем

$$F_1(z_1, z_2) = g^3 \frac{1 + (z_2 + z_2^3) D_1(z_2)}{1 + (z_1 + z_1^3) D_1(z_1)}.$$

Согласно [2] число суммируемых членов в рядах Ми для двухслойной сферы выбирается как для однородной сферы радиуса  $r$  по эмпирической формуле

$$N = 2 + y + 4y^{1/3}.$$

При малых значениях параметра  $g$ , т.е. когда радиус ядра много меньше радиуса оболочки, при вычислении величин  $A_n$  и  $B_n$ , зависящих только от  $x$ , может происходить накопление машинной ошибки в результате выхода рекурсии за пределы подходящих значений индекса. Поэтому, используя рекомендации [2], введем параметр

$$N_x = p(2 + x + 4x^{1/3}),$$

где  $p$  – некий «усилительный» коэффициент, для которого рекомендуется значение  $p = 2$ , подобранное нами путем отслеживания стремления к нулю выражений  $A_n F_n(m_2x, m_2y)$  и  $B_n F_n(m_2x, m_2y)$ . Тогда, начиная с номеров  $n > N_x$ , будем полагать  $A_n F_n(m_2x, m_2y) = 0$ ,  $B_n F_n(m_2x, m_2y) = 0$  и формулы (4) для  $a_n$  и  $b_n$  совпадут с формулами для однородных частиц. Следовательно, при использовании указанной асимптотики при малых  $g$  неоднородность сферы будет учитываться только в первых  $N_x$  коэффициентах ряда, т.е. как малая поправка к случаю однородной сферы, что согласуется с физическим смыслом рассматриваемых явлений.

Заметим также, что из формул (14) следует, что если  $m_1 = m_2$ , то  $A_n = 0$  и  $B_n = 0$ , т.е. формулы для  $a_n$  и  $b_n$  также переходят в формулы для однородной частицы.

Наиболее сложным с вычислительной точки зрения является случай крупных частиц с сильно поглощающей оболочкой. Рассмотрим его особо.

При больших мнимых частях  $m_2 x$  (и, соответственно,  $m_2 y$ ) из явных выражений для вещественной и мнимой частей тангенса и котангенса комплексного аргумента следует, что начальные значения функций  $D_0(m_2 x)$  и  $D_{-1}(m_2 x)$  отличаются от величины  $-i$  на член порядка  $\exp(-2x \kappa_2)$ , который с ростом  $x$  и  $\kappa_2$  становится исчезающе малой величиной и может стать много меньше машинной погрешности вычислений. Из формулы (7) для разности  $D_n(z) - D_{-n-1}(z)$  следует рекуррентное соотношение

$$D_n(z) - D_{-n-1}(z) = (D_{n-1}(z) - D_{-n}(z)) (D_n(z) + n/z) (D_{-n-1}(z) + n/z),$$

т.е. разность  $D_n(z) - D_{-n-1}(z)$  в рассматриваемом случае остается малой. Поэтому, если величина  $2x\kappa_2$  достаточно велика, например  $x\kappa_2 > R$ , где  $R$  – некоторое значение, о выборе которого ниже будет сказано особо, то без ущерба для точности вычислений можно полагать

$$D_{-n-1}(m_2 x) = D_n(m_2 x) \text{ и } D_{-n-1}(m_2 y) = D_n(m_2 y).$$

Но тогда при вычислении величин  $c_n$  и  $d_n$  возникает неопределенность типа  $0/0$ . Чтобы избавиться от нее, явно учтем в формулах (14) и (15) отличие значений  $D_{-1}(m_2 x)$  от  $D_0(m_2 x)$  и  $D_{-1}(m_2 y)$  от  $D_0(m_2 y)$ , сохраняя только члены первого порядка малости. В результате после соответствующих преобразований получим

$$c_n = D_n(m_2 y) + \frac{V(mD_n(m_1 x) - D_n(m_2 x))}{\frac{T_n(m_2 y)}{T_n(m_2 x)} + (mD_n(m_1 x) - D_n(m_2 x)) (S_n(m_2 x) - VS_n(m_2 y)) T_n(m_2 y)};$$

$$d_n = D_n(m_2 y) + \frac{V(D_n(m_1 x)/m - D_n(m_2 x))}{\frac{T_n(m_2 y)}{T_n(m_2 x)} + (D_n(m_1 x)/m - D_n(m_2 x)) (S_n(m_2 x) - VS_n(m_2 y)) T_n(m_2 y)};$$

$$V = (\cos(2y(1-g)n_2) + i \sin(2y(1-g)n_2)) \exp(-2y(1-g)\kappa_2);$$

$$T_n(z) = \frac{T_{n-1}(z)}{(D_n(z) + n/z)^2}, \quad T_0(z) = 1;$$

$$S_n(z) = S_{n-1}(z) + \frac{1}{T_n(z) (D_n(z) + n/z)}, \quad S_0(z) = i/2. \quad (16)$$

Формулы (16) – асимптотические формулы для крупных частиц с сильно поглощающей оболочкой – имеют простой физический смысл. Дробь в выражениях для  $c_n$  и  $d_n$  определяет влияние ядра частицы. Она пропорциональна величине  $\exp(-2y(1-g)\kappa_2)$ . Следовательно, чем толще оболочка, тем меньше сказывается на оптических свойствах частицы влияние ядра, в частности, если величина  $y(1-g)\kappa_2$  достаточно велика, а именно  $y(1-g)\kappa_2 > R$ , то влиянием ядра можно пренебречь и считать  $c_n = d_n = D_n(m_2 y)$ , в результате чего формулы (4) перейдут в формулы для однородной частицы.

Окончательно можно сформулировать следующую логику предлагаемого алгоритма. Если  $y\kappa_2 > 2R$  и  $y(1-g)\kappa_2 > R$ , то вычисления проводятся как для случая однородной сферы, без учета ядра, с параметрами  $y$  и  $m_2$ , полагая в формулах (4)  $c_n = d_n = D_n(m_2 y)$ . Иначе, если  $x\kappa_2 > R$ , то вычисления проводятся по асимптотическим формулам (16), (4), а если  $y\kappa_2 < R$ , то используются формулы (14), (4).

Значение параметра  $R$  подобрано специально. Оно не должно быть слишком большим, так как будут появляться неверные результаты при  $x\kappa_2 < R$ , но оно и не должно быть слишком малым, иначе мы выйдем из области применимости асимптотических формул. В процессе тестирования алгоритма было подобрано значение  $R = 6$ . При этой величине погрешность перехода к асимптотическим формулам, оцененная по результатам численных расчетов, составляет около 1%, что вполне приемлемо при проведении практических расчетов оптических характеристик ансамблей аэрозольных частиц.

Но, несмотря на все ухищрения, при  $y > 30000$ , при непоглощающем ядре и  $xk_2$  меньших, но близких к  $R$ , все же появляются случаи некорректной работы алгоритма. Это связано с тем, что мнимая часть функций  $D_n(z)$  и  $D_{-n-1}(z)$  в этих случаях близка к 1, а мнимая часть величины  $n/z$  очень мала; при их сложении происходит потеря младших разрядов  $n/z$ . Это в итоге приводит к завышенным значениям мнимых частей коэффициентов  $a_n$  и  $b_n$ , следствием чего является отрицательное значение поглощения. Причем, как было проверено в ходе тестирования, эта ошибка проявляется именно в коэффициентах  $a_n$  и  $b_n$  с малыми номерами (начиная с первого), т.е. является следствием указанной выше особенности, а не накопления ошибки в результате рекурсий.

Для устранения этой особенности поведения алгоритма мы применили некорректный математически, но оправданный с практической точки зрения прием: если при вычислении  $a_n$  и  $b_n$  вклад в сумму ряда для поглощения получается отрицательным, то мнимые части  $a_n$  и  $b_n$  умножаются на коэффициент, меньший единицы, который выбирается так, чтобы вклад члена ряда в поглощении равнялся  $1 - \exp(-2(1-g)ук_2)$  – асимптотическое значение из геометрической оптики. Оправданием такой «подгонки» является то, что она позволяет получать корректные значения параметров рассеяния, причем никак не влияет на значение фактора ослабления, а погрешность факторов рассеяния и поглощения, как показали численные оценки, составляет несколько процентов, что вполне приемлемо при практических вычислениях, особенно учитывая, что при расчетах оптических характеристик аэрозольных частиц в атмосфере выполняется интегрирование по ансамблю, где область  $y > 30000$  обычно либо вообще не входит в интеграл, либо ее вклад очень мал. Кроме того, указанная коррекция даже при  $y > 30000$  необходима далеко не всегда, а только в некоторых случаях частиц с непоглощающим ядром и тонкой поглощающей оболочкой.

В качестве формального теста предлагаемого алгоритма использовалось сравнение результатов расчетов по нему с результатами, приведенными в [8]. Получено хорошее совпадение результатов (для графиков оценка совпадения производилась визуально, для таблиц максимальное расхождение составило не более 2%, за исключением двух длин волн, где оно было порядка 10%). Кроме того, проведено сравнение с результатами вычислений по программе на языке Фортран, имеющейся в [2]. Сравнения проводились при различных значениях параметров, и в области устойчивой работы программы из [2] результаты совпали с точностью до 5 значащих цифр (в том числе и для случаев расхождения с [8]).

Помимо формального тестирования приведенного алгоритма важно установить границы его применимости как в области малых значений параметра  $y$ , так и в области больших  $y$ .

В области малых частиц для тестирования использовалось асимптотическое приближение, полученное полностью аналогично выводу в [2] асимптотических формул для однородной сферы. При этом, как и для однородных сфер, член ряда  $a_1$  имеет порядок  $y^3$ ,  $b_1$  и  $a_2 - y^5$ , а  $b_2 - y^7$ . Следовательно, для тестирования алгоритма при малых  $y$  достаточно провести сравнение только члена  $a_1$  с его асимптотическим значением, которое с точностью до слагаемых порядка  $y^5$  имеет вид

$$a_1 = \frac{2}{3} iy^3 \frac{(1 - m_2^2)(2m_2^2 + m_1^2) + g^3(m_2^2 - m_1^2)(1 + 2m_2^2)}{(2 + m_2^2)(2m_2^2 + m_1^2) - 2g^3(m_2^2 - m_1^2)(2m_2^2 - 1)}. \quad (17)$$

Результаты, полученные по предлагаемому алгоритму, при некоторых значениях параметров начинают отличаться от (17) более чем на 5% при  $y < 7 \cdot 10^{-6}$ , что перекрывает нижний предел возможных значений  $y$  при практических вычислениях (интересно заметить, что для однородных частиц этот предел примерно на порядок меньше, его увеличение «достигается» при значениях  $g$ , очень близких к единице).

В области больших  $y$  для тестирования алгоритма использовалась система тестов, в основу которой положены тесты из [2].

*Тест 1.* При любых значениях параметров факторы ослабления  $Q_e$  и рассеяния  $Q_s$  должны быть положительны и должны выполняться условия  $Q_e > Q_s$ , если  $k_1 \neq 0$  и  $k_2 \neq 0$ , и  $Q_e = Q_s$ , если  $k_1 = k_2 = 0$ .

*Тест 2.* Для углов 0 и 180° элементы  $S_{12}$  и  $S_{34}$  матрицы рассеяния должны обращаться в нуль.

*Тест 3.* Для элементов матрицы рассеяния для всех углов должно выполняться тождество

$$\frac{S_{12}}{S_{11}} + \frac{S_{33}}{S_{11}} + \frac{S_{34}}{S_{11}} = 1.$$

*Тест 4.* Должно выполняться альтернативное соотношение для выражения фактора ослабления через вещественную часть элемента комплексной матрицы рассеяния (см. [2]).

*Тест 5.* Фактор ослабления должен стремиться к 2 при возрастании  $y$ , за исключением случая полых частиц ( $n_1 = 1, \kappa_1 = 0$ ) с тонкой оболочкой (см. тест 9).

*Тест 6.* При больших  $y$  для частиц с достаточно толстой поглощающей оболочкой должно выполняться асимптотическое соотношение, полученное в [2], для фактора обратного рассеяния

$$Q_b = \frac{(n_2 - 1)^2 + \kappa_2^2}{(n_2 + 1)^2 + \kappa_2^2}.$$

*Тест 7.* При любых значениях  $g$  и  $y$ , если  $n_1 = n_2$  и  $\kappa_1 = \kappa_2$ , все оптические характеристики двухслойной частицы должны совпадать с соответствующими характеристиками однородной частицы.

*Тест 8* (из [3]). Пусть частица имеет поглощающее ядро  $\kappa_1 \neq 0$  и непоглощающую оболочку  $\kappa_2 = 0$ . Тогда с ростом оболочки при неизменном радиусе ядра сечение поглощения (произведение  $\pi y^2$  на фактор поглощения) асимптотически стремится к некоторой постоянной величине, зависящей только от радиуса ядра,  $n_1, \kappa_1$  и  $n_2$ .

*Тест 9.* Пусть имеется крупная полая частица ( $n_1 = 1, \kappa_1 = 0$ ) с очень тонкой оболочкой. Тогда, если толщина оболочки много меньше длины волны света, фактор ослабления должен стремиться к нулю; при росте оболочки для толщин, сравнимых с длиной волны света, должны наблюдаться интерференционные явления в тонкой пленке: зависимость фактора ослабления от толщины оболочки должна носить колебательный характер; для толщин оболочки, много больших длины волны света, фактор ослабления должен стремиться к 2.

Результаты работы предлагаемого алгоритма проверялись при различных значениях параметров, вплоть до  $y = 400000$ . Тестирование показало полное согласие со всеми критериями.

Наиболее «сильными» являются тесты 1, 8 и 9. Именно по результатам теста 1 был разработан описанный выше прием коррекции значений  $a_n$  и  $b_n$  при  $y > 30000$ . В тесте 8 при росте оболочки фактор поглощения уменьшается, поэтому сечения поглощения получаются как произведение очень малого числа на очень большое, но все же тест 8 прекрасно выполняется даже при  $y = 400000$ . Кроме того, для этого теста мы получили практически полное совпадение асимптотических значений сечения поглощения со значениями, приведенными в [3]. Тест 6, который считается наиболее «сильным» для однородных частиц, в данном случае не показателен, так как при толстой сильно поглощающей оболочке вычисления ведутся по формулам однородных частиц, для которых выполнение этого теста проверено.

В качестве некоторых иллюстраций работы алгоритма приведем результаты модельных расчетов. Во всех расчетах длина волны света бралась равной 0,35 мкм.

На рис. 1 показана зависимость факторов ослабления, рассеяния и поглощения для крупных водяных частиц с тонкой сажевой оболочкой (модель городского тумана)  $r = 10$  мкм,  $n_1 = 1,33, \kappa_1 = 0, n_2 = 1,74, \kappa_2 = 0,73$  от толщины оболочки (параметра  $1 - g$ ).

На рис. 2 приведена зависимость факторов рассеяния и поглощения очень крупных ледяных частиц с тонкой сажевой оболочкой (модель кометного вещества)  $n_1 = 1,33, \kappa_1 = 0, n_2 = 1,74, \kappa_2 = 0,73$  для трех размеров частиц  $r = 25; 250; 2500$  мкм от толщины оболочки (параметра  $1 - g$ ).

На рис. 3 приведен пример интерференции в тонких пленках: зависимость фактора ослабления полую частицы с оболочкой из остывшего расплава магмы (модель вулканического аэрозоля)  $n_2 = 1,52, \kappa_2 = 0$  для двух радиусов  $r = 5$  и 50 мкм от толщины оболочки.

Таким образом, предлагаемый алгоритм позволяет вычислять оптические характеристики двухслойных сферических аэрозольных частиц с однородными ядром и оболочкой при любых значениях параметров с точностью, достаточной для практических расчетов. Осторожности ради оговоримся, что большое число параметров задачи делает невозможным подробный их перебор при тестировании алгоритма, поэтому отсутствует полная гарантия того, что не существует области значений параметров, где предложенный алгоритм будет давать слишком неточные или ошибочные результаты.

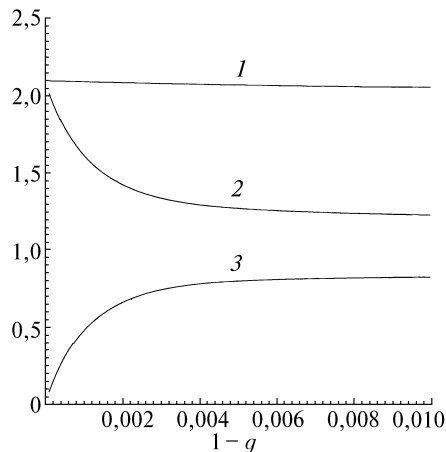


Рис. 1. Зависимость факторов ослабления, рассеяния и поглощения частицы  $r = 10$  мкм,  $n_1 = 1,33$ ,  $\kappa_1 = 0$ ,  $n_2 = 1,74$ ,  $\kappa_2 = 0,73$  от толщины оболочки: 1 – фактор ослабления; 2 – фактор рассеяния; 3 – фактор поглощения

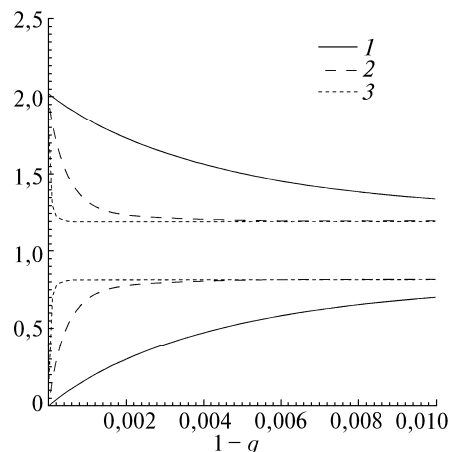


Рис. 2. Зависимость факторов рассеяния (кривые, большие  $I$ ) и поглощения (кривые, меньшие  $I$ ) для частиц с  $n_1 = 1,33$ ,  $\kappa_1 = 0$ ,  $n_2 = 1,74$ ,  $\kappa_2 = 0$  от толщины оболочки: 1 –  $r = 25$  мкм; 2 –  $r = 250$  мкм; 3 –  $r = 2500$  мкм

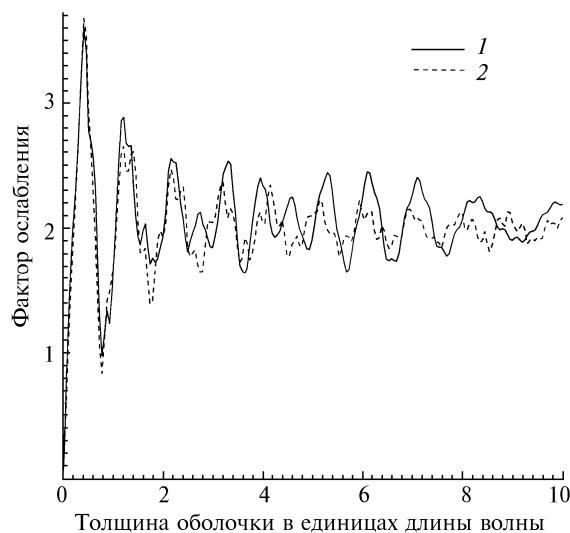


Рис. 3. Зависимость фактора ослабления для полой частицы с  $n_1 = 1$ ,  $\kappa_1 = 0$ ,  $n_2 = 1,52$ ,  $\kappa_2 = 0$  от толщины оболочки: 1 –  $r = 5$  мкм; 2 –  $r = 50$  мкм

Тематика данной работы поддержана РФФИ, грант N 96-05-64612.

1. Пришивалко А. П., Астафьева Л. Г. Поглощение, рассеяние и ослабление света обводненными частицами атмосферного аэрозоля. Минск, 1975. 45 с. (Препринт/Ин-т физики АН БССР).
2. Борен К., Хафман Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами / Пер. с англ. М.: Мир, 1986. 660 с.
3. Пришивалко А. П., Бабенко В. А., Кузьмин В. Н. Рассеяние и поглощение света неоднородными и анизотропными сферическими частицами. Минск: Наука и техника, 1984. 263 с.
4. Креков Г. М., Рахимов Р. Ф. // Физика мезосферы и мезосферных облаков. М.: Наука, 1974. С. 78–83.
5. Ивлев Л. С., Коростина О. М. // Изв. АН. Сер. ФАО. 1994. Т. 30. N 6. С. 802–806.
6. Длугач Ж. М. // Кинематика и физика небесных тел. 1985. Т. 1. N 6. С. 16–23.
7. Белов Н. Н. // Физика и химия атмосферных аэрозолей (Проблемы физики атмосферы. Вып. 20). СПб.: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 1996. С. 167–181.
8. Fenn R. W., Oser H. // Appl. Optics. 1965. V. 4. N 11. P. 1504–1509.

Научно-исследовательский институт физики  
Санкт-Петербургского государственного университета (НИИФ СПбГУ)

Поступила в редакцию  
15 июля 1996 г.



**A. V. Vasilyev, L. S. Ivlev Universal Algorithm for Calculation of the Optical Characteristics of Two-Layer Spherical Particles with Homogeneous Core and Coat.**

Universal algorithm is presented which is intended for calculation of the optical characteristics of two-layer spherical particles with homogeneous core and coat. The algorithm allows calculating without limitation of radius and values of complex refraction indexes of the core and coat, and with sufficient accuracy for simulation of the optical properties of the atmospheric aerosol particles. It is based on conversion of formula for Mie series, which allow to avoid calculation of Bessel functions with complex argument, that is ensure the computer's calculations stability. The asymptotic formula for big particles with strong absorption coat was found. The algorithm was tested by the comparison of the obtained results with independent calculations. It was also subjected to special tests for every small and very big particles.