«Оптика атмосферы», **4**, № 3 (1991)

УДК 518.5:518.12:517.564:541.18:535

Н.Н. Белов

РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ЧАСТИЦЕ ПО ТЕОРИИ МИ БЕЗ ОГРАНИЧЕНИЙ НА ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРА ДИФРАКЦИИ И КОМПЛЕКСНОГО ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ВЕЩЕСТВА ЧАСТИЦЫ

Построен алгоритм расчета отношения сферических функций Риккати — Бесселя первого рода для двух значений комплексного аргумента. Это позволило построить систему уравнений расчета по теории Ми оптических полей в объеме сферической частицы, которая снимает все ограничения на размеры частицы и комплексный показатель преломления частицы.

Компоненты оптических полей в объеме сферической частицы описываются рядами Ми, каждый член которых является функционалом от угловых функций и от сферических функций Риккати — Бесселя (ФРБ) первого рода комплексного аргумента и третьего рода действительного аргумента [1], [2]. Процедура суммирования бесконечных рядов Ми, расчеты ФРБ третьего рода и угловых функций не вызывают особых трудностей и не накладывают ограничений на диапазон характеристик частицы и излучения, в котором возможно выполнение расчетов по теории Ми. В то же время расчет ФРБ первого рода комплексного аргумента $z = r+i\mu$, приводит к переполнению машинного числа 10^{75}, если модуль мнимой части комплексного показателя преломления не удовлетворяет условию [3]

$$|\operatorname{Im}(z)| < 30. \tag{1}$$

Максимальные значения аргумента z равны произведению параметра дифракции $\rho = 2\pi a\lambda^{-1}$ на комплексный показатель преломления $m = n - i\varkappa$ вещества частицы. Поэтому условие (1) в случае $\rho \gg 10^2$ может быть удовлетворено лишь при $\varkappa \ll 1$. Это обстоятельство препятствует исследованию оптических полей не только в сгустках плазмы, крупных каплях металлов, но и в каплях воды, если $\rho\varkappa \gtrsim 100$. Для расчета ФРБ первого рода комплексного аргумента широко используется метод встречных рекурсий, который предполагает удержание в оперативной памяти массива значений ФРБ, размеры которого несколько превышают произведение параметра дифракции частицы на модуль комплексного показателя преломления ее вещества. Это накладывает второе ограничение на диапазон значений ρ и m, в котором возможно выполнение расчетов по теории Ми, которое можно записать в виде

$$\rho|m| < N_p, \tag{2}$$

где N_p — максимальная длина массива комплексных чисел, помещающегося в оперативной памяти, используемой ЭВМ. Целью настоящей работы является устранение ограничений (1) и (2) на значения параметра дифракции и комплексного показателя преломления вещества частицы. По известным [1], [2] формулам для рядов Ми, описывающих комплексные компоненты напряженности оптического поля в точке (r, φ, θ) внутри однородной сферической частицы, найдена следующая система уравнений:

$$E_r = \frac{E_0 \sin\theta \cos\varphi}{k_i^2 r^2} \sum_{l=1}^{\infty} l(l+1) D_l Q_l(\theta); \tag{3}$$

$$E_\theta = \frac{E_0 \cos\varphi}{k_i r} \sum_{l=1}^{\infty} \{D_l S_l(\theta) A_l(k_i r) + iE_l Q_l(\theta)\}; \tag{4}$$

$$E_\varphi = \frac{E_0 \sin\varphi}{k_i r} \sum_{l=1}^{\infty} \{D_l Q_l(\theta) A_l(k_i r) + iE_l S_l(\theta)\}; \tag{5}$$

где

$$D_l = i^l \frac{2l+1}{l(l+1)} \frac{mF_l(k_i r, m\rho)}{\xi_l(\rho) A_l(m\rho) - m\xi_l'(\rho)}; \tag{6}$$

$$E_l = i^l \frac{2l+1}{l(l+1)} \frac{mF_l(k_i r, m\rho)}{m\xi_l(\rho) A_l(m\rho) - \xi_l'(\rho)}; \tag{7}$$

$$F_{l+1}(z_1, z_2) = F_l(z_1, z_2)\, z_2 \beta_l(z_1)\, [z_1 \beta_l(z_2)]^{-1}; \tag{8}$$

$$F_0(z_1, z_2) = \begin{cases} 0, & |\mu_1 - \mu_2| \geqslant 140, \\ \dfrac{\sin z_1}{\sin z_2}, & |\mu_1| < 140 \quad |\mu_2| < 140, \\ [\cos(r_1 - r_2) + i \sin(r_1 - r_2)] \exp(\mu_1 - \mu_2), & \\ \quad |\mu_1| \geqslant 140 \quad |\mu_2| \geqslant 140, & \\ \quad |\mu_1 - \mu_2| \leqslant 140, & \end{cases} \tag{9}$$

$$\beta_l(z) = 2l + 1 - \alpha_l(z); \tag{10}$$

$$\alpha_l(z) = z \frac{\varphi_{l-1}(z)}{\varphi_l(z)} = 2l + 1 \frac{z^2}{2l + 3 - [z^2/(2l + 5 - \ldots)]}; \tag{11}$$

$$A_l(z) = -\frac{l}{z} + \left[\frac{l}{z} - A_{l-1}(z)\right]^{-1}, \quad l < \frac{1}{3}|z| + 1, \tag{12}$$

$$A_l(z) = [\alpha_l(z) - l]\, z^{-1}, \quad l \geqslant \frac{1}{3}|z| + 1, \tag{13}$$

$$A_0(z) = \begin{cases} \operatorname{ctg} z, & \text{если } |\mu| < 140, \\ (0,\ i), & \text{если } \mu < -140, \\ (0,\ -i), & \text{если } \mu > 140. \end{cases} \tag{14}$$

Ограничение на модуль мнимой части в (9) и (14) обусловлено, с одной стороны, выходом за пределы изменения машинного числа экспонент вида exp ($\pm\mu$) для четверной точности представления комплексного числа, а с другой — нарушением критерия точности расчета функций Бесселя, записанного в виде суммы ряда. Остальные обозначения см. [4]. Для расчета ФРБ третьего рода использована восходящая рекурсия [4] с четверной точностью представления числа. Расчет угловых функций производится по рекуррентным соотношениям [5]. Функция $F_l(z_1, z_2)$ равна отношению ФРБ первого порядка $\varphi_l(z_1)\varphi_l^{-1}(z_2)$. Выражения (8) и (9) устраняют угрозу переполнения 10^{75} при любых $\varkappa$. Использование для расчета логарифмической производной восходящей рекурсии (12) при малых l, когда нет опасности неустойчивости вычислений, и формулы (13) при больших l, позволяющей определить $A_l(z)$ по значению непрерывной дроби (11), устраняют необходимость удержания в памяти всего массива данных расчетов $A_l(z)$. Таким образом, расчетная схема (3)—(14) позволяет проводить расчеты для любых ρ и m. При этом выполнение расчетов для больших ρ, например, для $\rho \sim 10^6$, лимитируется лишь необходимостью оплатить большое время счета. Соотношения (11)—(14) позволяют проводить расчеты индикатрисы рассеяния излучения, сечений и факторов эффективности излучения для любых ρ и m. Имеется возможность передачи программы расчета оптики аэрозоля без ограничения на размер частицы.

1. Kerker M., Kooke D. //Appl. Opt. 1973. V. 12. № 7. P. 1378—1379.
2. Пришивалко А.П. Оптические и тепловые поля внутри светорассеивающих частиц. Минск: Наука и техника, 1983. 190 с.
3. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир, 1971. С. 164.
4. Шифрин К.С. Рассеяние света в мутной среде. М., Л.: ГИФТЛ, 1951. 272 с.
5. Белов Н.Н. Рекуррентные соотношения для расчета угловых функции в теории Ми //Деп. ВИНИТИ № 2721-В87 от 17.04.87.

Научно-исследовательский физико- химический институт им. Л.Я. Карпова, Москва

Поступила в редакцию 26 июля 1990 г.

N. N. Belov. **Computations of the Optical Field inside a Particle by Mie Theory without Any Limitations on the Diffraction Parameter and Complex Index of Refraction of the Particulate Matter.**

The algorithm for calculating the ratio of the Riocati-Bessel functions of the first kind at two values of the complex argument is constructed. It allowed the construction of the system of equations for computating the optical field inside a spherical particle by Mie theory. This algorithm doesn't impose any limitations on the values of the diffraction parameter and complex index of refraction of the particulate matter.