03

О сфероидальной модели рассеяния света несферическими частицами

© В.Г. Фарафонов¹, В.Б. Ильин^{1,2,3}, М.С. Прокопьева², А.Р. Тулегенов¹, В.И. Устимов¹

¹ Государственный университет аэрокосмического приборостроения,

190000 Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет,

199034 Санкт-Петербург, Россия

³ Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория РАН,

196140 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: far@aanet.ru

Поступило в редакцию 30.11.2018 г. В окончательной редакции 30.11.2018 г. Принята к печати 11.12.2018 г.

Построена сфероидальная модель для решения проблемы рассеяния света несферическими частицами. Полуоси модельного сфероида определяются исходя из равенства объемов, а также равенства отношений продольных и поперечных размеров исходной частицы и модели, что обеспечивает близость их оптических свойств. Данный подход был применен к вытянутым и сплюснутым параллелепипедам, цилиндрам и конусам с отношениями большего размера к меньшему, равными 2 и 10. Направление распространения падающей плоской волны TE- или TM-типа было либо параллельным, либо перпендикулярным к оси симметрии частиц и модельного сфероида. Размер частиц определялся безразмерным параметром $x_v = 2\pi r_v/\lambda$, который зависит от объема частицы, так как r_v представляет собой радиус эквиобъемного шара. При расчетах данный параметр менялся от малых величин до достаточно больших $x_v = 10$. Область применимости модели определялась сравнением результатов численных расчетов по строгим методам разделения переменных для сфероидов и дискретных диполей для других несферических частиц. Показано, что область применимости модели для параллелепипедов, цилиндров и конусов достаточно широка для разных параметров задачи, в частности, если параметр $x_v \leq 6$, то относительная погрешность модели не превышает 10–15%. В значительной степени это связано с тем фактом, что первый максимум зависимости факторов рассеяния

DOI: 10.21883/OS.2019.04.47514.345-18

Введение

Рассеяние света несферическими частицами являются важной частью фундаментальных и прикладных проблем в оптике атмосферы, медицине, астрофизике, биофизике и других областях науки и техники [1–3]. Методы решения подобных задач сегодня интенсивно развиваются различными научными группами [4–7]. Несмотря на достигнутый прогресс в разработке методов, многочисленные приложения, особенно связанные с решением обратных задач при зондировании дисперсных сред, требуют применения простых, но физически обоснованных моделей натуральных и антропогенных рассеивателей для ускорения расчетов оптических свойств последних.

Наиболее привлекательной моделью несферической частицы является сфероид (эллипсоид вращения). В рамках этой модели можно рассматривать как вытянутые, так и сплюснутые частицы с произвольной степенью асферичности. Для сфероидальных частиц разработаны как точные, так и приближенные методы. Из первых наиболее известными являются метод разделения переменных (separation of variables method, SVM), метод расширенных граничных условий (extended boundary condition method, EBCM) и метод дискретных диполей

(discrete dipole approximation, DDA) (см. описание всех трех методов, например, в соответствующих главах [2]). Первый из них является наиболее эффективным, так как наиболее полно учитывает геометрию задачи за счет использования сфероидального базиса, т.е. представления полей в виде рядов по векторным сфероидальным волновым гармоникам. К недостатком данного метода можно отнести трудности, связанные с численными расчетами сфероидальных функций в широком диапазоне изменения параметров. Второй метод основывается на разложении полей по векторным сферическим гармоникам, что естественно затрудняет его применение к сфероидам с большим отношением полуосей. Последний подход может быть использован для решения задачи рассеяния света частицами произвольной формы, однако такая универсальность соответственно требует больших (иногда невозможных) затрат оперативной памяти и процессорного времени.

Сфероидальная модель неоднократно применялась для моделирования оптических свойств различных полидисперсных сред, в частности частиц над пустыней [8], минеральной пыли [9], частиц в перистых облаках [10], ледяных гидрометеоров [11] и т. п. Широкое распространение модели в основном объясняется тем, что она является простой и достаточно гибкой (см., например, обсуждение в [12]). Основания для применения сфероидальной модели обсуждались в частном случае рассеяния света частицами, малыми по сравнению с длиной волны падающего излучения (например, [13,14]). При этом был сделан вывод о том, что умеренные отклонения (даже нарушающие гладкость) формы частиц от сферической играют меньшую роль, чем изменения отношения наибольшей протяженности к наименьшей. Этот вывод был недавно подтвержден с использованием иного подхода к расчету поляризуемости и для других форм малых рассеивателей в работах [15,16].

В настоящей работе рассматривается применимость сфероидальной модели для определения оптических свойств нескольких видов несфероидальных частиц (параллелепипедов, цилиндров и конусов), размер которых больше или сравним с длиной волны падающего излучения. В разд. 1 и 2 кратко описываются точные методы, использованные нами для моделирования рассеяния света сфероидальными и несфероидальными частицами. В разд. 3 приведены и обсуждаются результаты численных расчетов сечения рассеяния для частиц разной формы и точность апроксимации этих сечений при использовании сфероидальной модели.

1. Метод разделения переменных

Метод разделения переменных был впервые применен для решения задачи рассеяния света сфероидальными частицами Асано и Ямамото [17]. Позднее более эффективная схема подобного подхода была реализована Фарафоновым и Вощинниковым [18,19].

Сфероид получается путем вращения эллипса вокруг одной из своих осей. Форма сфероида определяется отношением a/b, где a и b — большая и малая полуоси. Для определения размера частицы можно использовать безразмерный параметр

$$x_v = \frac{2\pi r_v}{\lambda} = kr_v, \qquad (1)$$

где λ — длина волны излучения, $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число, r_v — радиус сферы, объем которой равен объему сфероида. Для вытянутой сфероидальной частицы имеем

$$r_v^3 = ab^2. (2)$$

Аналогично линейный дифракционный параметр записывается в виде

$$x_a = \frac{2\pi a}{\lambda} = ka. \tag{3}$$

Для сплюснутых сфероидов в приведенных выше формулах полуоси *a* и *b* следует поменять местами.

Оптические свойства вытянутых сфероидов будем описывать с помощью факторов

$$Q = \frac{C}{\pi r_v^2},\tag{4}$$

где *С* — сечения ослабления или рассеяния.

Сфероидальная система координат (ξ, η, φ) связана с декартовой системой координат (x, y, z) следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} x &= \frac{d}{2} \, (\xi^2 \mp 1)^{1/2} (1 - \eta^2)^{1/2} \cos \varphi, \\ y &= \frac{d}{2} \, (\xi^2 \mp 1)^{1/2} (1 - \eta^2)^{1/2} \sin \varphi, \\ z &= \frac{d}{2} \, \xi \eta, \end{aligned} \tag{5}$$

где для вытянутой системы координат $\xi \in [1, \infty)$, $\eta \in [-1, 1], \ \varphi \in [0, 2\pi)$ (верхний знак), для сплюснутой системы координат $\xi \in [0, \infty), \eta \in [-1, 1], \varphi \in [0, 2\pi)$ (нижний знак), d — фокусное расстояние сфероида.

Для вытянутых сфероидальных частиц факторы ослабления записываются в виде [19]

$$Q_{\text{ext}} = \frac{4}{x_v^2} \operatorname{Re} \left\{ -\sum_{l=1}^{\infty} i^{-l} a_l^{(1)} S_{1l}(c, \cos \alpha) + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{m=l}^{\infty} i^{-(l-1)} \left(k a_{ml}^{(1)} S_{ml}(c, \cos \alpha) + i b_{ml}^{(1)} S'_{ml}(c, \cos \alpha) \right) \sin \alpha \right\},$$
(6)

где c = kd/2, $S_{ml}(c, \eta)$ — вытянутые угловые сфероидальные функции с коэффициентами нормализации $N_{ml}(c)$, ξ_0 — значение радиальной координаты, соответствующей поверхности сфероида, штрих означает дифференцирование, α — угол между осью вращения сфероида и направлением падающего излучения. Коэффициенты разложения рассеянного поля по сфероидальному базису $a_{ml}^{(1)}$ и $b_{ml}^{(1)}$ определяются из бесконечных систем линейных алгебраических уравнений (см. подробнее [19]).

Аналогично для факторов рассеяния имеем

$$Q_{\text{sca}} = \frac{1}{x_v^2} \bigg\{ 2 \sum_{l=1}^{\infty} |a_l^{(1)}|^2 N_{1l}^2(c) \\ + \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} i^{n-l} \bigg[k^2 a_{ml}^{(1)} a_{mn}^{(1)*} \omega_{ln}^{(m)}(c,c) \\ + ik \bigg(b_{ml}^{(1)} a_{mn}^{(1)*} \kappa_{ln}^m(c,c) - a_{ml}^{(1)} b_{mn}^{(1)*} \kappa_{nl}^m(c,c) \bigg) \\ + b_{ml}^{(1)} b_{mn}^{(1)*} \tau_{ln}^{(m)}(c,c) \bigg] N_{ml}(c) N_{mn}(c) \bigg\},$$
(7)

где $\omega_{ln}^{(m)}$ и $\tau_{ln}^{(m)}$ — интегралы от угловых сфероидальных функций, а звездочкой отмечены сопряженные значения.

2. Метод дискретных диполей

Метод DDA был разработан Парселем и Пеннипакером [20] как способ расчета рассеяния и поглощения света частицами произвольной формы с размерами, сравнимыми или меньшими длины волны. Подход заключается в предствлении твердой частицы набором точечных диполей, расстояние между которыми мало по сравнению с длиной волны. Каждый диполь обладает поляризуемостью в отклике к падающей плоской волне и электрическим полям, образуемым остальными диполями частицы. Диполи обычно размещаются на простой кубической решетке [21].

Итак, частица заменяется набором из N диполей с координатами \mathbf{r}_i и поляризуемостями α_i . Рассеяние и поглощение диполями может быть рассчитано с высокой точностью. Поляризуемость в точке \mathbf{r}_i вычисляется следующим образом:

$$\mathbf{P}_i = \alpha_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i),\tag{8}$$

где \mathbf{r}_i — положение диполя с поляризуемостью α_i . Поле в правой части $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$ представляет собой сумму падающей волны

$$\mathbf{E}_{\text{inc},i} = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k}\,\mathbf{r}_i - i\,\omega t) \tag{9}$$

и волн, создаваемых другими диполями,

$$\mathbf{E}_{\text{self},i} = -\sum_{j \neq i} A_{ij} \mathbf{P}_j.$$
(10)

В результате уравнение (8) может быть записано следующим образом:

$$(\alpha_i)^{-1}\mathbf{P}_i + \sum_{j \neq i} A_{ij}\mathbf{P}_j = \mathbf{E}_{\text{inc},i}.$$
 (11)

Определение $A_{ii} = (\alpha_i)^{-1}$ упрощает решение проблемы рассеяния и нахождение поляризуемости \mathbf{P}_i , которая удовлетворяет системе 3N комплексных линейных уравнений:

$$\sum_{k=1}^{N} A_{ij} \mathbf{P}_i = \mathbf{E}_{\text{inc},i}.$$
 (12)

После решения системы (12) сечения экстинкции C_{ext} и поглощения C_{abs} рассчитываются по формулам [22]

$$C_{\text{ext}} = \frac{4\pi k}{|\mathbf{E}_0|^2} \sum_{i=1}^{N} \text{Im}(\mathbf{E}_{\text{inc},i}^* \, \mathbf{P}_i), \qquad (13)$$

$$C_{\rm abs} = \frac{4\pi k}{|\mathbf{E}_0|^2} \sum_{i=1}^{N} \left\{ \mathrm{Im} \left[\mathbf{P}_i \cdot (\alpha_i^{-1})^* \mathbf{P}_i^* \right] - \frac{2}{3} k^3 |\mathbf{P}_i|^2 \right\}.$$
(14)

Наконец, сечение рассеяния определяется из закона сохранения энергии: $C_{\rm sca} = C_{\rm ext} - C_{\rm abs}$.

3. Результаты численных расчетов и обсуждение

В общем случае при построении эллипсоидальной модели мы заменяем исходную частицу неким "эффективным" эллипсоидом. При этом полуоси $a_{\rm ef}$, $b_{\rm ef}$ и $c_{\rm ef}$

"эффективного" эллипсоида вычисляются из двух соображений. Во-первых, объемы модельного эллипсоида и несферической частицы должны совпадать:

$$V_{\rm ef} = V_{\rm part}.\tag{15}$$

Во-вторых, для учета формы частицы отношения ее поперечных и продольных размеров должны быть равны отношениям соответствующих полуосей модели:

$$\frac{a_{\rm ef}}{c_{\rm ef}} = \frac{a_{\rm part}}{c_{\rm part}}, \qquad \frac{b_{\rm ef}}{c_{\rm ef}} = \frac{b_{\rm part}}{c_{\rm part}}.$$
 (16)

В случае осесимметричной частицы "эффективный" эллипсоид превращается в вытянутый или сплюснутый "эффективный" сфероид, что дает соотношения

$$V_{\rm ef} = V_{\rm part}, \qquad \frac{a_{\rm ef}}{b_{\rm ef}} = \frac{a_{\rm part}}{b_{\rm part}}.$$
 (17)

В данной работе мы применяем сфероидальную модель к прямоугольным параллепипедам, стороны основания которых равны, круговым цилиндрам конечной длины и прямым круговым конусам. При определении полуосей $a_{\rm ef}$, $b_{\rm ef}$ и $c_{\rm ef}$ модельного эллипсоида в случае параллелепипеда со сторонами a, b, c из формул (15), (16) нетрудно получить следующий результат:

$$a_{\rm ef} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi}} a, \quad b_{\rm ef} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi}} b, \quad c_{\rm ef} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi}} c, \quad (18)$$

поскольку здесь имеет место подобное изменение размеров. Для конечных цилиндров длины *L* и диаметра *D* вычисление полуосей "эффективного" сфероида осуществляется по формулам

$$a_{\rm ef} = \sqrt[3]{\frac{3}{16}} D, \qquad b_{\rm ef} = \sqrt[3]{\frac{3}{16}} L.$$
 (19)

По сравнению с цилиндром конус высотой H и радиусом R не имеет симметрии относительно плоскости, параллельной xy, если его ось симметрии совпадает с осью z. "Эффективный" сфероид строится аналогично случаю цилиндра:

$$a_{\rm ef} = \sqrt[3]{\frac{1}{2}}R, \qquad b_{\rm ef} = \sqrt[3]{\frac{1}{16}}H.$$
 (20)

Если H = 2R, то "эффективный" сфероид становится шаром. Заметим, что в приведенных выше формулах рассматриваются вытянутые осесимметричные частицы, в противном случае a_{ef} и b_{ef} нужно поменять местами.

Численные расчеты оптических свойств сфероидов проводились нами с использованием метода SVM со сфероидальным базисом [19], а для частиц, имеющих несфероидальную форму — с примененим метода DDA. Современная версия этого метода [23] позволяет моделировать рассеяние света частицами произвольной формы, а также имеет упрощенную процедуру задания многих видов частиц. Мы рассматривали вытянутые и сплюснутые параллелепипеды, цилиндры и конусы с отношениями большего линейного размера к меньшему a/b = 2 или 10. Направление распространения падающей плоской волны ТЕ- или ТМ-типов было либо параллельным, либо перпендикулярным оси вращения модельного сфероида. Размер частиц определялся безразмерным параметром $x_v = 2\pi r_v/\lambda$, который зависит от объема частицы, так как r_v представляет собой радиус эквиобъемного шара. При расчетах данный параметр менялся от малых величин до достаточно



Рис. 1. Верхняя панель: погрешность факторов Q_{sca} , полученных с использованием сфероидальной модели для разных частиц при m = 1.3 и $\alpha = 0$, в зависимости от x_v ; параллелепипеды с a/b = 2 (сплошная кривая I) и 0.5 (штриховая кривая 4); цилиндры с L/D = 2 (сплошная кривая 2) и 0.5 (штриховая кривая 5); конусы с H/D = 2 (сплошная кривая 3) и 0.5 (штриховая кривая 6). Нижняя панель: зависимость факторов Q_{sca} от x_v , добавлены кривые для сфероидов с a/b = 2 (сплошная кривая 7) и 0.5 (штриховая кривая 7) и 0.5 (штриховая кривая 8).



Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для отношений a/b, H/D и L/D, равных 10 (сплошные кривые) и 0.1 (штриховые кривые).

больших: $x_v \leq 10$. Расчеты проводились для непоглощающих частиц с показателем преломления m = 1.3, и поэтому рассматривались только факторы рассеяния Q_{sca} . Заметим, что линейный размер частиц определялся соответствующим безразмерным параметром $x_a = 2\pi a/\lambda$. Объемный дифракционный параметр x_v и соответствующий линейный параметр x_a связаны соотношениями $x_a/x_v = (a_{ef}/b_{ef})^{1/3}$ для сплюснутых частиц и $x_a/x_v = (a_{ef}/b_{ef})^{2/3}$ для вытянутых. Рассматриваемые частицы могут иметь достаточно большие продольные размеры по сравнению с длиной волны падающего излучения. Например, для сплюснутых частиц с отношением $a_{ef}/b_{ef} = 10$ и объемным параметром $x_v = 10$ получим линейный параметр $x_a \approx 21.5$, а для аналогичных вытянутых частиц уже $x_a \approx 46.5$. Очевидно, что в рамках нашей модели разные несферические частицы, имеющие одинаковый объем (15) и отношение поперечных и продольного размеров (16), соответствуют одному "эффективному" сфероиду. В силу этого для них следует ожидать примерно одинаковых факторов эффективности рассеяния $Q_{\rm sca}^{\rm DDA}$, которые должны слабо отличаться от соответствующих факторов $Q_{\rm sca}^{\rm SVM}$ для модельных сфероидов. Относительная погрешность результатов, полученных нами для сфероидальных моделей, вычислялась следующим образом:

$$\delta = |Q_{\rm sca}^{\rm DDA}/Q_{\rm sca}^{\rm SVM} - 1|, \qquad (21)$$

где индекс DDA обозначает факторы несфероидальных частиц, а индекс SVM – факторы, полученные для "эффективного" сфероида.

Результаты расчетов для рассмотренных несфероидальных частиц приведены на рис. 1-6. На каждом



Рис. 3. То же, что и на рис. 1, но для угла падения $\alpha = 90^{\circ}$ и ТЕ-моды.



Рис. 4. То же, что и на рис. 1, но для угла падения $\alpha = 90^{\circ}$ и ТМ-моды.

рисунке представлены графики сечений рассеяния сфероидов $Q_{\rm sca}^{\rm SVM}$ и частиц иных видов (параллелепипедов, круговых цилиндров и конусов) $Q_{\rm sca}^{\rm DDA}$, а также относительные погрешности сфероидальной модели δ в зависимости от дифракционного параметра x_v . Отличие рисунков друг от друга заключается в ориентации и поляризации падающего излучения. Первые два рисунка соответствуют падению плоской волны параллельно оси z, четыре последних – перпендикулярному падению плоской волны ТЕ- или ТМ-типов.

Обзор полученных результатов показывает, что область применимости модели для параллелепипедов, цилиндров и конусов достаточно широкая для разных параметров задачи. Так, если объемный параметр $x_v \leq 6$, то относительная погрешность модели δ не превышает 10–15%. При более тщательном анализе видно, что, как

и ожидалось, первый максимум зависимости факторов рассеяния Q_{sca} от параметра x_v примерно одинаков для рассмотренных частиц, включая модельный сфероид. Очевидно, что область применимости модели связана с этим фактом, и граница области применимости расположена после максимума.

Таким образом, на основании выполненного анализа сфероидальной модели можно сделать выводы: вопервых, о ее применимости для несферических рассеивателей достаточно большого размера $x_v \le 6-8$, и, во-вторых, для частиц, форма которых существенно отличается от сфероидальной (присутствием ребер, вершины и т. п.). При этом модель дает оценку фактора эффективности рассеяния с погрешностью не больше 10-15%. Отчасти эта погрешность связана с "рябью" на кривых $Q_{sca}(x_v)$, имеющей место при вещественной части показателя преломления $n \le 1.3$ и мнимой части



Рис. 5. То же, что и на рис. 2, но для угла падения $\alpha = 90^{\circ}$ и ТЕ-моды.



Рис. 6. То же, что и на рис. 2, но для угла падения $\alpha = 90^{\circ}$ и ТМ-моды.

k = 0. Поэтому для диэлектрических частиц с большим n или k точность модели должна быть несколько лучше.

Заметим, что в работах [15,16] эллипсоидальная модель применялась к малым несфероидальным частицам с использованием приближения Релея и квазистатической аппроксимации. Как оказалось, некоторые трудности с конусами в этих работах были связаны с ошибками применения метода DDA. Исправление этих ошибок показало, что и для конусов предложенная модель вполне пригодна.

Работа была поддержана в 2018-2019 гг. грантом ГУАП и грантами РФФИ 16-02-00194 и 18-52-52006. Авторы благодарны М. Юркину за возможность использовать программу ADDA.

Список литературы

- [1] Борен К., Хаффмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986. 660 с.
- [2] Mishchenko M.I., Hovenier J.W., Travis L.D. Light Scattering by Nonspherical Particles. San Diego: Academic Press, 2000. 690 p.
- [3] Mishchenko M.I. Electromagnetic Scattering by Particles and Particle Groups. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2014. 435 p.
- [4] *Rother T., Kahnert M.* Electromagnetic Wave Scattering on Nonspherical Particles. Berlin: Springer, 2014. 360 p.
- [5] *Stegmann P.G.* Light Scattering by Non-Spherical Particles. Darmstadt: Techn. Univ. Darmstadt, 2016. 172 p.
- [6] Mishchenko M.I., Zakharova T.N., Khlebtsov N.G., Videen G., Wriedt T. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 2017. V. 202. P. 240.
- [7] Yurkin M.A., Mishchenko M.I. // Phys. Rev. A. 2018. V. 97.
 P. 043824.
- [8] Dubovik O., Sinyuk A., Lapyonok T., Holben B.N., Mishchenko M. et al. // J. Geophys. Res. Atmosph. 2006. V. 111. P. D11208.
- [9] Merikallio S., Lindqvist H., Nousiainen T., Kahnert M. // Atmosph. Chem. Phys. 2011. V. 11. P. 5347.
- [10] Liu L., Mishchenko M.I. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 2006. V. 101. P. 488.
- [11] Matrosov S.Y. // J. Atmosph. Ocean Techn. 2015. V. 32. P. 865.
- [12] Nousiainen T., Kahnert M., Lindqvista H. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 2011. V. 112. P. 2213.
- [13] Min M., Hovenier J.W., de Koter A. // Astron. Astrophys. 2003. V. 404. P. 35.
- [14] Sihvola A. // J. Nanomater. 2007. V. 2007. P. 45090.
- [15] Фарафонов В.Г., Ильин В.Б., Устимов В.И., Тулегенов А.Р. // Опт. и спектр. 2017. Т. 122. № 3. С. 506.
- [16] Фарафонов В.Г., Устимов В.И., Прокопьева М.С., Тулегенов А.Р., Ильин В.Б. // Опт. и спектр. 2018. Т. 125. № 6. С. 800.
- [17] Asano S., Yamamoto G. // Appl. Opt. 1975. V. 14, P. 29.
- [18] Фарафонов В.Г. // Дифференц. уравн. 1983. Т. 19. С. 1765.
- [19] Voshchinnikov N.V., Farafonov V.G. // Astrophys. Space Sci. 1993. V. 204. P. 19.
- [20] Purcell E.M., Pennypacker C.R. // Astrophys. J. 1973. V. 186.
 P. 705.
- [21] Draine B.T. // Astrophys. J. 1988. V. 333. P. 848.
- [22] Draine B.T., Flatau P. // J. Opt. Soc. Am. A. 1994. V. 11. P. 1491.
- [23] Yurkin M.A., Hoekstra A.G. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 2011. V. 112. P. 2234.