

多层球电磁散射的一种新算法

吴振森 王一平

(西安电子科技大学物理系,西安 710071)

摘要 本文提出了多层吸收介质球电磁散射的散射系数 a_n 和 b_n 的递推公式及其适用于计算机数值计算的形式。它对各种介质的复折射率和粒子尺寸参数均能获得稳定和收敛的数值结果。

关键词 电磁散射;米氏理论;数值迭代

一、前言

根据均匀球米氏 (Mie) 电磁散射理论^[1],对双层介质球的电磁散射问题已有深入的研究^[2-9]。在数值计算中,球贝塞尔函数的幅度随宗量增大而指数地增大,以及 Ricatti-Bessel 函数的向上递推算法存在着较大误差等问题也已得到了合理的解决,并提出了计算散射系数的各种表达形式和算法^[2-9]。Kerker 将上述问题推广到多层球电磁散射,获得了计算多层球散射系数的矩阵公式^[3,9]。但随着分层数增多,散射系数的矩阵形式和数值计算显得甚为复杂,同时又有数值上的累积误差或病态发生。本文给出适合任意多层吸收介质球电磁散射的散射系数 a_n 和 b_n 的递推公式。公式形式简单,仅包含三个 Ricatti-Bessel 函数的对数导数 $\phi'_n(x)/\phi_n(x)$, $\chi'_n(x)/\chi_n(x)$ 和 $\xi'_n(x)/\xi_n(x)$, 以及函数比值 $\phi_n(x)/\chi_n(x)$ 。在不超出微型计算机内存时,对于各种介质的复折射率和粒子尺寸参数,均能获得稳定和收敛的数值结果。

二、多层球的散射系数

多层球的电磁散射如图 1 所示。背景介质的折射率为 m_g , 每层介质区域相对背景介质的复折射率和半径分别为 m_j 和 r_j ($j = 1, 2, \dots, t$)。为了简化起见,各区域的磁导率均取自由空间的磁导率 μ_0 。当入射平面波波长为 λ 时,各区域对应的尺寸参数 $x_j = 2\pi r_j/\lambda$ 。

设平面电磁波 $E_i = E_0 \exp(ikz)$ 沿 z 方向入射。与均匀介质球的电磁散射类似,入射波场、散射波场以及多层球内各区域的波场均可以按矢量球谐函数展开^[1,5]。根据辐射

1991.12.11 收到,1992.03.23 定稿。

吴振森 男,1946 年出生,副教授,从事专业为无线电物理。目前主要从事非均匀和随机介质中电磁波、光波的传输和散射,目标激光散射和分形电磁散射的研究。

王一平 男,1925 年出生,教授,现从事专业为无线电物理。

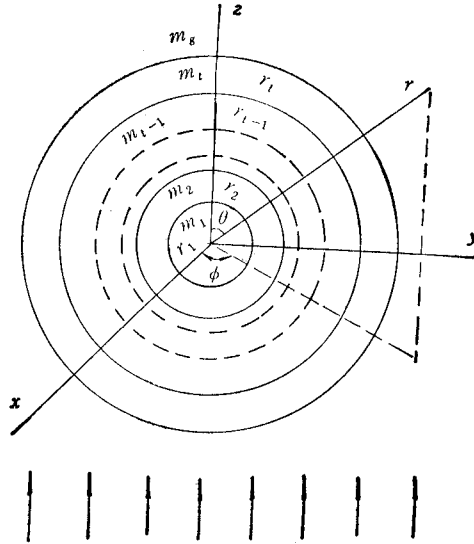


图1 多层球对平面波的散射

条件, 球贝塞尔函数的渐近行为和各区域的边界条件, 可以获得关于散射场展开式系数 a_n 和 b_n , 各区域波场展开式系数 $c_n^{(j)}$, $d_n^{(j)}$, $f_n^{(j)}$, $g_n^{(j)}$, ($j = 1, 2, \dots, l$) 满足的两个方程组. 每个方程组包含 $2l$ 个方程, 其中 $f_n^{(1)} = g_n^{(1)} = 0$. Kerker 据此给出散射系数 a_n 和 b_n 的矩阵形式^[3].

在上述方程中令 $A_n^{(j)} = g_n^{(j)}/d_n^{(j)}$, $B_n^{(j)} = f_n^{(j)}/c_n^{(j)}$. 显然 $A_n^{(1)} = B_n^{(1)} = 0$. 我们获得系数 $A_n^{(j)}$, $B_n^{(j)}$ 的迭代解形式. 系数 $A_n^{(j)}$ 和散射系数 a_n 可表示为

$$A_n^{(2)} = \frac{m_2 \phi_n(m_2 x_1) \phi_n'(m_1 x_1) - m_1 \phi_n'(m_2 x_1) \phi_n(m_1 x_1)}{m_2 \chi_n(m_2 x_1) \phi_n(m_1 x_1) - m_1 \chi_n'(m_2 x_1) \phi_n(m_1 x_1)} \quad (1)$$

$$A_n^{(j)} = \frac{m_j \phi_n(m_j x_{j-1}) H_n^a(m_{j-1} x_{j-1}) - m_{j-1} \phi_n'(m_j x_{j-1})}{m_j \chi_n(m_j x_{j-1}) H_n^a(m_{j-1} x_{j-1}) - m_{j-1} \chi_n'(m_j x_{j-1})} \quad (2)$$

$$H_n^a(m_j x_j) = \frac{\phi_n'(m_j x_j) - A_n^{(j)} \chi_n'(m_j x_j)}{\phi_n(m_j x_j) - A_n^{(j)} \chi_n(m_j x_j)} \quad (3)$$

$$a_n = \frac{\phi_n(x_l) H_n^a(m_l x_l) - m_l \phi_n'(x_l)}{\xi_n(x_l) H_n^a(m_l x_l) - m_l \xi_n'(x_l)} \quad (4)$$

系数 $B_n^{(j)}$ 和 b_n 的表达形式类似于(2)和(4)式. 只需将(2)式中相对复折射率 m_j 和 m_{j-1} 的位置互换, 以及(3)式中用 $B_n^{(j)}$ 代替 $A_n^{(j)}$, 可以获得 $B_n^{(j)}$ 和 $H_n^b(m_j x_j)$ 的表达式. 于是另一散射系数 b_n 表达式为

$$b_n = \frac{m_l \phi_n(x_l) H_n^b(m_l x_l) - \phi_n'(x_l)}{m_l \xi_n(x_l) H_n^b(m_l x_l) - \xi_n'(x_l)} \quad (5)$$

上述各式中 Ricatti-Bessel 函数 $\phi_n(x) = x j_n(x)$, $\chi_n(x) = -x y_n(x)$ 和 $\xi_n(x) = x h_n^{(1)}(x) = \phi_n(x) - i \chi_n(x)$. $j_n(x)$ 和 $y_n(x)$ 分别称为 n 阶球贝塞尔函数和球诺伊曼函数, $h_n^{(1)}(x)$ 为第一类球汉克尔函数.

三、计算方法

由于 Ricatti-Bessel 函数中球贝塞尔函数的幅度随宗量指数地增加, 很容易造成计算机溢出。而且随粒子尺寸参数增大, 散射场中高阶项极易产生较大的计算误差和计算机数值计算的累积误差。但是, Ricatti-Bessel 函数的比值和它们的对数导数, 对于大的粒子尺寸参数或很小的球核半径均是有限的。为了获得散射系数 a_n 和 b_n 的稳定和收敛的数值结果。需要将(1)–(5)式改为下述形式:

$$A_n^{(1)} = 0, \quad H_n^a(m_j x_j) = D_n^{(1)}(m_j x_j)$$

$$A_n^{(j)} = \frac{\phi_n(m_j x_{j-1})}{\chi_n(m_j x_{j-1})} \times \frac{m_j H_n^a(m_{j-1} x_{j-1}) - m_{j-1} D_n^{(1)}(m_j x_{j-1})}{m_j H_n^a(m_{j-1} x_{j-1}) - m_{j-1} D_n^{(2)}(m_j x_{j-1})} \quad (6)$$

$$H_n^a(m_j x_j) = \frac{[\phi_n(m_j x_j)/\chi_n(m_j x_j)] D_n^{(1)}(m_j x_j) - A_n^{(j)} D_n^{(2)}(m_j x_j)}{\phi_n(m_j x_j)/\chi_n(m_j x_j) - A_n^{(j)}} \quad (7)$$

$$a_n = \frac{\phi_n(x_t)}{\xi_n(x_t)} \cdot \frac{H_n^a(m_t x_t) - m_t D_n^{(1)}(x_t)}{H_n^a(m_t x_t) - m_t D_n^{(3)}(x_t)} \quad (8)$$

$$B_n^{(1)} = 0, \quad H_n^b(m_j x_j) = D_n^{(1)}(m_j x_j)$$

$$B_n^{(j)} = \frac{\phi_n(m_j x_{j-1})}{\chi_n(m_j x_{j-1})} \times \frac{m_{j-1} H_n^b(m_{j-1} x_{j-1}) - m_j D_n^{(1)}(m_j x_{j-1})}{m_{j-1} H_n^b(m_{j-1} x_{j-1}) - m_j D_n^{(2)}(m_j x_{j-1})} \quad (9)$$

$$H_n^b(m_j x_j) = \frac{[\phi_n(m_j x_j)/\chi_n(m_j x_j)] D_n^{(1)}(m_j x_j) - B_n^{(j)} D_n^{(2)}(m_j x_j)}{\phi_n(m_j x_j)/\chi_n(m_j x_j) - B_n^{(j)}} \quad (10)$$

$$b_n = \frac{\phi_n(x_t)}{\xi_n(x_t)} \cdot \frac{m_t H_n^b(m_t x_t) - D_n^{(1)}(x_t)}{m_t H_n^b(m_t x_t) - D_n^{(3)}(x_t)} \quad (11)$$

其中 $D_n^{(1)}(z) = \phi_n'(z)/\phi_n(z)$, $D_n^{(2)}(z) = \chi_n'(z)/\chi_n(z)$ 和 $D_n^{(3)}(z) = \xi_n'(z)/\xi_n(z)$ 为 Ricatti-Bessel 函数的对数导数。利用上述递推公式, 散射波场展开式的散射系数 a_n 和 b_n 的数值计算中仅涉及这三个对数导数和 $\phi_n(z)$ 与 $\chi_n(z)$ 的比值。

在利用上述公式以前, 必须仔细检查 Ricatti-Bessel 函数的对数导数和比值在迭代计算中的收敛性和稳定性。正如 Dave 以及 Kattawar 和 Plass 所述^[6,7], $D_n^{(1)}(z)$ 需用向下迭代法计算。当求和项数 $n \gg N_{\text{stop}}$ 时, 选择最大项数 $N_{\text{max}} = N_{\text{stop}} + 15$ 。使 $n = N_{\text{max}} + 1$ 时, $D_n^{(1)}(z) = 0$, 散射波场的矢量球谐函数的级数展开式被截断^[8]。随着项数 n 减小, 计算误差迅速减小, 数值结果是稳定的。它与均匀单一介质球电磁散射情况完全相同^[7,10]。我们选择项数 $N_{\text{stop}} = \max(|m_j x_j|, x_t + 4x_t^{1/3} + 2)$, ($j = 1, 2, \dots, t-1$)。 $D_n^{(1)}(z)$ 由向下迭代公式给出

$$D_{n-1}^{(1)}(z) = n/z + [D_n^{(1)}(z) + n/z]^{-1} \quad (12)$$

$D_n^{(3)}(z)$ 能用向上迭代公式计算, 其数值误差迅速减小^[4,7]。 $\phi_n(z)/\xi_n(z)$ 也能用向上迭代公式获得。根据计算表明, 当 $n \gg |z|$, 其实部和虚部均迅速趋于零。从下式

$$D_n^{(2)}(z) = \frac{\phi_n(z)/\xi_n(z) \cdot D_n^{(1)}(z) - D_n^{(1)}(z)}{\phi_n(z)/\xi_n(z) - 1} \quad (13)$$

当 $n > N_{\text{stop}}$, $D_n^{(2)}(z) = D_n^{(3)}(z) \approx -n/z \approx -D_n^{(1)}(z)$, 所以 $D_n^{(2)}(z)$ 和 $D_n^{(3)}(z)$ 均能

用向上迭代公式计算。即

$$D_n^{(l)}(z) = [n/z - D_{n-1}^{(l)}(z)]^{-1} - n/z, \quad l = 2, 3 \quad (14)$$

它们的初值为

$$D_0^{(2)}(z) = -\sin z / \cos z \quad (15)$$

$$D_0^{(3)}(z) = i \quad (16)$$

我们也导出了比值 $\phi_n(z)/\chi_n(z)$ 和 $\phi_n(z)/\xi_n(z)$ 的递推关系式

$$\frac{\phi_n(z)}{\chi_n(z)} = \frac{\phi_{n-1}(z)}{\chi_{n-1}(z)} \cdot \frac{[D_n^{(2)}(z) + n/z]}{[D_n^{(1)}(z) + n/z]} \quad (17)$$

$$\phi_0(z)/\chi_0(z) = \sin z / \cos z \quad (18)$$

$$\frac{\phi_n(z)}{\xi_n(z)} = \frac{\phi_{n-1}(z)}{\xi_{n-1}(z)} \cdot \frac{[D_n^{(3)}(z) + n/z]}{[D_n^{(1)}(z) + n/z]} \quad (19)$$

$$\phi_0(z)/\xi_0(z) = \sin z / (\sin z - i \cos z) \quad (20)$$

如果在(17)或(19)式中引入误差,其误差可表示为

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} \cdot \left[\frac{D_n^{(l)}(z) + n/z}{D_n^{(1)}(z) + n/z} \right], \quad l = 2, 3 \quad (21)$$

由于上式括号中项的模小于 1, 所以随着 n 的增加, 其误差不会增加。它们的收敛速度主要取决于宗量 z 的大小。

值得注意的是, 在向上迭代数值计算时, 对于复宗量 $z = x + iy$, 不能直接利用(15)式。因为当 $|z|$ 较大时, Ricatti-Bessel 函数是无界的, 会导致很大的计算误差和计算机溢出。我们重写(15)式

$$D_0^{(2)}(z) = i \frac{1 - (\cos 2x + i \sin 2x) \exp(-2y)}{1 + (\cos 2x + i \sin 2x) \exp(-2y)} \quad (22)$$

由于 $y > 0$, 上式中无论 $|z|$ 如何增大, 也不会出现计算困难。函数 $\phi_0(z)/\chi_0(z)$ 和 $\phi_0(z)/\xi_0(z)$ 可作类似处理。

四、数值计算和讨论

类似于单一均匀介质球, 根据散射系数 a_n 和 b_n , 我们获得多层球的衰减系数 $Q_e = \sigma_e/\pi r^2$, 散射系数 $Q_s = \sigma_s/\pi r^2$ 和吸收系数 $Q_a = Q_e - Q_s$ 。其中衰减截面 σ_e 和散射截面 σ_s 分别为

$$\sigma_e = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (23)$$

$$\sigma_s = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n) \quad (24)$$

图 2 给出双层介质球的衰减系数 Q_e , 散射系数 Q_s 和吸收系数 Q_a 随粒子总尺寸参数 kb 的变化曲线。其中球核半径 a 与球壳半径 b 之比 $a/b=0.833$, 球核折射率 $m_1 = (1.59, 0.66)$, 球壳折射率 $m_2 = 1.33$ 。图中实点是直接用 Kerker 矩阵公式计算的结果, 两者完全吻合。

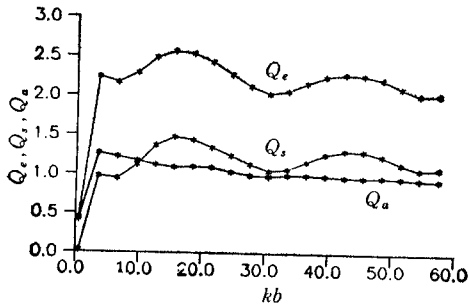


图2 双层球的衰减系数, 散射系数和吸收系数

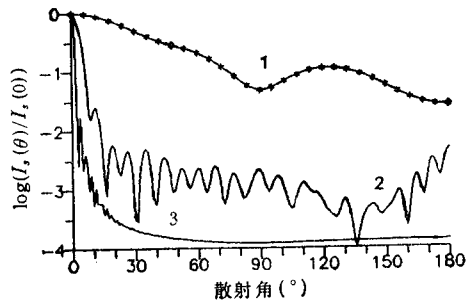


图3 归一化平均散射强度

- 1: $\lambda = 1.06\mu\text{m}$, $r_1 = 0.2\mu\text{m}$, $m_1 = (1.51, 0.003)$
 $r_2 = 0.5\mu\text{m}$, $m_2 = (2.43, 10.7)$
- 2: $\lambda = 10.6\mu\text{m}$, $r_1 = 20\mu\text{m}$, $m_1 = (85.1, 35.25)$
 $r_2 = 40\mu\text{m}$, $m_2 = (1.51, 0.003)$
- 3: $\lambda = 1.06\mu\text{m}$, $r_1 = 10\mu\text{m}$, $m_1 = (1.51, 0.003)$
 $r_2 = 12.0\mu\text{m}$, $m_2 = (2.43, 10.7)$
 $r_3 = 12.5\mu\text{m}$, $m_3 = (1.73, 0.0)$

当入射波为非极化平面波时, 多层同心介质球的散射场的斯托克斯参量^[5]

$$I_i = S_{11}I_i, \quad Q = S_{12}I_i, \quad U = V = 0$$

I_i 为入射波强度, S_{11} 和 S_{12} 与散射幅度函数 S_1 和 S_2 之间关系为

$$S_{11} + S_{12} = |S_2|^2, \quad S_{11} - S_{12} = |S_1|^2$$

$$S_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n x_n + b_n \tau_n) \tag{25}$$

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n x_n) \tag{26}$$

式中

$$x_n(\cos\theta) = \frac{P_n(\cos\theta)}{\sin\theta}, \quad \tau = \frac{dP_n(\cos\theta)}{d\theta}$$

分别为勒让德多项式和它的导数。我们还能获得极化度

$$P = -\frac{S_{12}}{S_{11}} = \frac{|S_1|^2 - |S_2|^2}{|S_1|^2 + |S_2|^2} \tag{27}$$

图3表示含有金属铝球层的双层球和三层球的归一化平均散射强度 $I_s(\theta)/I_s(0)$ 随散射角 θ 的变化。 $I_s(0)$ 为前向散射强度。 曲线1对应于粒子尺寸参数较小的情况, Kerker 方法和本文方法获得完全一致的结果。 曲线2对应双层球。 在波长 $\lambda = 10.6\mu\text{m}$ 时, 合金铝的折射率 $m_1 = (85.1, 35.25)$ 。 当半径 $r_1 = 20.0\mu\text{m}$ 时, $|z| = |m_1 k r_1| = 1092$ 。 尽管散射系数 a_n 和 b_n 的 Kerker 公式中仅为 4×4 矩阵, 但涉及数组较多和下标变量较大, 将会超出微型计算机的内存或使 Riccati-Bessel 函数溢出。 曲线3对应于三层吸收介质球的平均散射强度随散射角的变化。 它也存在类似问题。 这表明随粒子尺寸参数增大或分层数增多, 用 Kerker 公式计算散射系数 a_n 和 b_n 将越来越困难。

考虑非均匀介质球, 折射率连续变化满足柯西分布^[3]

$$m = c/(1 + fr^2/b^2) \tag{28}$$

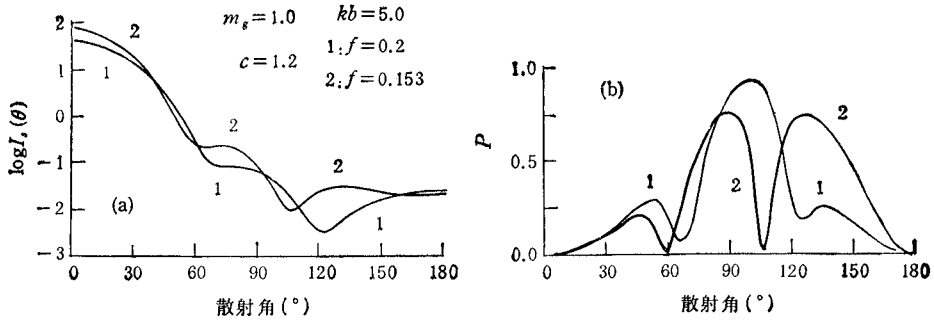


图4 非均匀介质球平均散射强度(a)和极化度(b)的角分布。

c 和 f 是常数。取介质球半径 b 对应的尺寸参数 $kb = 5$, 并把介质球离散化, 分为 50 层。它的平均散射强度 $I_s(\theta)$ 和极化度 P (见(27)式)如图 4 所示。尽管介质球折射率变化不大, 如果直接用 Kerker 矩阵公式, 就会涉及到 100×100 矩阵的行列式计算。这对于微型计算机简直是不可思议的。文献[3]中曲线是采用体积平均等效折射率为 \bar{m} 的均匀球获得。

通过大量的数值检验分析并与 Kerker 算法比较表明: Kerker 公式包含三个 Riccati-Bessel 函数和它的导数。对于大尺寸参数的吸收介质球, 这些函数是无界的, 其幅度很容易造成计算机的溢出。这种现象在均匀介质球的散射系数计算中也发生^[5-8]。在我们的递推公式中仅用 Riccati-Bessel 函数的对数导数和比值函数。它们的数值计算是稳定的, 随着项数 n 的增加, 它们迅速收敛, 并且函数误差独立于 n 并不会增加。其次, Kerker 公式需要较多的数组变量和工作单元, 当分层数较多时更为明显, 极易超出微型计算机的内存。在我们的计算程序中首先用下迭代法计算出 $D_n^{(j)}(\mathbf{x})$, 于是 a_n 和 b_n 的递推计算时所需数值和工作单元较少, 故能计算多层介质球的散射系数。第三, 在多层球情况, 当分层数 l 和总尺寸参数 x_l 较大时, Kerker 公式中各矩阵元的数量级相差很大。更确切地说, 多层介质球中内层区域对应的矩阵列元素, 其值很小, 接近于零。这使得矩阵计算中有显著的舍入误差和累积误差, 造成矩阵为病态。我们的计算程序避免了上述数值不稳定性和病态, 而且所占计算机内存较少。最后, 我们的递推公式(6)~(11)式与均匀球米氏理论散射系数的公式形式类似, 它们很容易退化为双层球和单层球的表达形式。

参 考 文 献

- [1] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*. McGraw-Hill, New York, (1941), Sec. 7. 7.
- [2] A. L. Aden, M. Kerker, *J. App. Phys.*, 22(1951)10, 1242—1246.
- [3] M. Kerker, *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*, Academic, San Diego, Calif., (1969), Chap. 5.
- [4] O. B. Toon, T. P. Ackerman, *Appl. Opt.*, 20(1981)20, 3657—3660.
- [5] C. F. Bohren, D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particle*, Wiley-Interscience, New York, (1983), Chap. 4 and Chap. 8.
- [6] J. V. Dave, Subroutine for Computing the Parameters of Electromagnetic Radiation Scattered by a Sphere, Rep. 320—327, IBM, Sci. Cent., Palo Alto, Calif. (1968).
- [7] G. W. Kattawar, G. N. Plass, *Appl. Opt.* 6(1967)8, 1377—1382.
- [8] W. J. Wiscombe, *Appl. Opt.* 19(1980)9, 1505—1509.
- [9] R. Bhandari, *Appl. Opt.* 24(1985)13, 1960—1967.

A NEW ALGORITHM FOR ELECTROMAGNETIC SCATTERING OF MULTILAYERED SPHERE

Wu Zhensen Wang Yiping
(*Xidian University, Xi'an 710071*)

Abstract More stable and accurate recursive formulas and a computing procedure to calculate scattering coefficients for a multilayered sphere are proposed. The procedure involves three logarithmic derivatives of Ricatti-Bessel functions $\phi'_n(z)/\phi_n(z)$, $\chi'_n(z)/\chi_n(z)$, $\xi'_n(z)/\xi_n(z)$, as well as the ratio $\phi_n(z)/x_n(z)$. The asymptotic behavior, stability, and accuracy of the procedure and scattering coefficients a_n and b_n are discussed for various complex refractive indices. This procedure can be applied to large and small inhomogeneous spherical particles.

Key words Electromagnetic scattering; Mie theory; Numerical recursion