

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРА ЧАСТИЦ
ДИСПЕРСНОЙ СИСТЕМЫ ПО ДАННЫМ О ЕЕ ПРОЗРАЧНОСТИ.
АППРОКСИМАЦИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПРОЗРАЧНОСТИ
МОДИФИЦИРОВАННЫМИ ПОЛИНОМАМИ ЛЕЖАНДРА¹

К. С. Шифрин, А. Я. Перельман и В. М. Волгин

Рассматривается новая схема обращения спектральной прозрачности дисперсной системы на плотность распределения ее частиц по размерам. С этой целью спектральная прозрачность аппроксимируется модифицированными полиномами Лежандра, а затем строится последовательность улучшающихся приближений к точному спектру частиц. Преимуществом новой схемы обращения является непосредственная связь искомой плотности распределения с параметрами аппроксимации. Проведены численные эксперименты на моделях распределений типа гамма и указан алгоритм выбора параметров аппроксимации.

1. В приближении Ван де Хюлста [1] спектральная прозрачность $\gamma(1/\lambda)$ для системы частиц, имеющих плотность распределения $N(r)$, определяется формулой

$$\gamma\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \int_0^{\infty} \pi r^2 N(r) Q(\rho) dr, \quad \rho = 4\pi(m-1)\frac{r}{\lambda}, \quad (1)$$

где λ — длина волны, r — радиус частицы, m — коэффициент преломления и

$$Q(\rho) = 2 - 4 \frac{\sin \rho}{\rho} + 4 \frac{1 - \cos \rho}{\rho^2}. \quad (2)$$

В безразмерных переменных (r_0 — масштаб длины)

$$a = \frac{r}{r_0}, \quad y = 4\pi(m-1)\frac{r_0}{\lambda}, \quad f(a) = r_0^4 N(ar_0), \quad g(y) = r_0 \gamma\left(\frac{1}{\lambda}\right) \quad (3)$$

и уравнение (1) принимает вид

$$\int_0^{\infty} \pi a^2 f(a) Q(ya) da = g(y). \quad (4)$$

В [2] найдена формула обращения для интегрального уравнения (4), из которой следует, что решение (4) может быть найдено по формуле

$$f(a) = \frac{1}{(\pi a)^2} \int_0^{\infty} \psi(y) \cos(ay) dy, \quad (5)$$

где

$$\psi(y) = 0.5 y g'(y) + g(y) - g(\infty). \quad (6)$$

Полученные результаты относятся к любым полидисперсным системам. Вместе с тем для широкого класса коллоидных растворов, полимеров, обла-

¹ Статья является продолжением серии работ, начатой в [3-5].

ков и туманов распределение радиусов частиц может быть представлено в виде

$$f(a) = a^\mu e^{-\mu a} \quad (7)$$

или с помощью линейной суперпозиции выражений вида (7). Формула (7) с точностью до постоянного множителя представляет собой гамма-распределение частиц с $r_0 = r_M$, где r_M — мода распределения. Для плотности (7) имеем

$$g(y) = H_\mu \Theta_\mu \left(\frac{y}{\mu} \right), \quad H_\mu = 2\pi \frac{\Gamma(\mu + 3)}{\mu^{\mu+3}}, \quad (8)$$

где функция $\Theta_\mu(x)$ вычисляется по формуле $(\mu = 1, 2, \dots)^2$ [4]

$$\Theta_\mu(x) = 1 + \frac{\alpha_\mu}{(1+x^2)^{\mu+2}} \left\{ \sum_{k=0}^{\mu+1} (1+x^2)^k - \beta_\mu \sum_{k=0}^{\left[\frac{\mu+1}{2}\right]} (-1)^k \binom{\mu+1}{2k} \frac{x^{2k}}{k+1} \right\}. \quad (9)$$

Здесь

$$\alpha_\mu = \frac{2}{(\mu+1)(\mu+2)}, \quad \beta_\mu = \frac{1}{2} \mu^2 + \frac{5}{2} \mu + 3. \quad (10)$$

Из формул (7)–(10) следует, что спектральная прозрачность, соответствующая гамма-распределению частиц, может быть представлена в виде полинома по степеням выражения

$$\left(1 + \frac{y^2}{\mu^2}\right)^{-1} \quad (0 \leq y < \infty). \quad (11)$$

Аналогичный результат получается и для некоторых других типов микроструктуры частиц. Значит, аппроксимацию спектральной прозрачности $g(y)$ естественно осуществлять с помощью системы ортогональных многочленов, зависящих от аргумента (11).

2. Легко проверить [2], что модифицированные полиномы Лежандра

$$\Pi_n^c(y) = P_n \left(\frac{2}{1 + \frac{y^2}{c^2}} - 1 \right), \quad (12)$$

где $P_n(x)$ — обычные полиномы Лежандра, относящиеся к промежутку $[-1, 1]$, ортогональны с весом $y \left(1 + \frac{y^2}{c^2}\right)^{-2}$ на участке $[0, \infty)$, и если

$$h(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \Pi_n^c(y), \quad (13)$$

то

$$a_n = \frac{2(2n+1)}{c^2} \int_0^{\infty} h(y) \Pi_n^c(y) y \left(1 + \frac{y^2}{c^2}\right)^{-2} dy. \quad (14)$$

В силу полноты системы функций (12) формулы (13) и (14) могут быть использованы для представления спектральной прозрачности любой дисперсной системы. Точность аппроксимации

$$g(y) \simeq g_n^c(y) = \sum_{i=0}^n a_i \Pi_i^c(y) \quad (15)$$

будем оценивать с помощью величины

$$\delta_n^g = \max \frac{|g_n^c(y) - g(y)|}{g_{\max}}, \quad g_{\max} = \max_{y \geq 0} g(y). \quad (16)$$

² Используется тождество

$$(1+x^2)^{\mu+2} - 1 = x^2 \sum_{k=0}^{\mu+1} (1+x^2)^k.$$

Плотность распределения $f(a)$, найденную по формулам (5) и (6) с помощью аппроксимации (15) для спектральной прозрачности, обозначим через $f_n^c(a)$. Если обращение осуществляется на модели, то точность приближения $f_n^c(a)$ будем оценивать величиной ($\alpha \geq 0$)

$$\varepsilon_n^c(\alpha) = \max_{a \geq \alpha} \frac{|f_n^c(a) - f(a)|}{f_{\max}}, \quad f_{\max} = \max_{a \geq 0} f(a). \quad (17)$$

Система модифицированных полиномов Лежандра (12) полна при любом значении c . Однако построение приближений (15) при фиксированном c приводит к необходимости использовать большее число n членов этого разложения. При этом резко возрастает влияние вычислительных ошибок в связи с быстрым ростом коэффициентов полиномов (12). Практически удобнее варьировать оба параметра n и c . Оказывается, что для типичных распределений аппроксимацию спектральной прозрачности (15) достаточно производить среди пар значений (n, c) из множества

$$n = 1(1)10, \quad c = 0.5(0.5)5, \quad (18)$$

т. е. для каждой конкретной функции $g(y)$ следует произвести сравнение величин (16) в 100 различных точках.

Пары (n, c), для которых величина (16) принимает наименьшее значение на множестве (18), будем называть оптимальными. Таких пар может оказаться несколько, разумеется, предпочтительная оптимальная пара соответствует наименьшему n . Отметим, что алгоритм поиска оптимальных пар (n, c) легко реализуется на ЭВМ.

3. Использование аппроксимации (15) приводит к естественной экстраполяции спектральной прозрачности в коротковолновую область: формула (15), полученная в результате обработки экспериментальных данных о прозрачности $g(y)$ в основном спектральном промежутке, при этом аналитически продолжается в область $\lambda \rightarrow 0$. Схема обращения прозрачности, предложенная ранее в [5], по существу сводилась к автономному описанию основного спектрального промежутка и коротковолновой области.

Это уменьшало точность коротковолновой асимптотики и точность обращения. В частности, схема обращения табличной информации о прозрачности, указанная в [5], пригодна для определения спектра частиц

$$m(a) = \pi a^2 f(a) \quad (19)$$

только при ограниченных значениях радиуса a , в то время как описываемая здесь схема применима также и для частиц с большими радиусами [см. формулу (27)]. Другим преимуществом новой схемы является возможность автоматизировать вычисления спектра путем установления непосредственной связи между параметрами аппроксимации (15) и спектром частиц (19), восстановленным с помощью формул (5) и (6).

В самом деле, согласно (12), представление (15) можно переписать в виде

$$g_n^c(y) = \sum_{l=0}^n b_l \left(1 + \frac{y^2}{c^2}\right)^{-l}, \quad (20)$$

где коэффициенты b_l легко выражаются через коэффициенты a_l . Пусть $\psi_n^c(y)$ — функция (6), соответствующая $g(y) = g_n^c(y)$. Имеем

$$\psi_n^c(y) = n b_n \left(1 + \frac{y^2}{c^2}\right)^{-n-1} + \sum_{l=2}^n (l-1) (b_{l-1} - b_l) \left(1 + \frac{y^2}{c^2}\right)^{-l}, \quad (21)$$

и в силу (5) и (19) получаем

$$m(a) \simeq m_n^c(a) = -\frac{1}{\pi} \left[n b_n \varphi_{n+1}^c(a) + \sum_{l=2}^n (l-1) (b_{l-1} - b_l) \varphi_l^c(a) \right], \quad (22)$$

где

$$\varphi_l^c(a) = \int_0^{\infty} \cos(ay) \left(1 + \frac{y^2}{c^2}\right)^{-l} dy. \quad (23)$$

Интегралы (23) легко вычисляются. Имеем [6]

$$\varphi_l^c(a) = \frac{\pi c}{2^{2l-1} (l-1)!} q_{l-1}(ac) \exp(-ac), \quad (24)$$

где полиномы

$$q_l(a) = \sum_{k=0}^l \frac{(2l-k)!}{k!(l-k)!} (2a)^k. \quad (25)$$

Из формул (23)–(25) следует, что приближение (15) соответствует спектру частиц вида

$$m_n^c(a) = ct_n(ac) \exp(-ac), \quad (26)$$

где $t_n(x)$ — полином степени n , зависящий от коэффициентов a_n . Из (26) следует, что

$$\lim_{a \rightarrow \infty} m_n^c(a) = 0, \quad (27)$$

т. е. рассматриваемая схема обращения автоматически обеспечивает физически правильное поведение спектра частиц при больших значениях их радиусов. Напомним, что в схеме обращения из [5] спектр частиц при больших радиусах приобретал возрастающие осцилляции, являвшиеся результатом искусственного стыкования данных о прозрачности по основному спектральному промежутку с коротковолновой асимптотикой.

Выпишем формулы, устанавливающие явную зависимость между коэффициентами a_k аппроксимации (15) и приближениями $m_n^c(a)$ при $n = 1, 2, 3$ и 4. Имеем

$$\left. \begin{aligned} m_1^c(a) &= -\frac{c}{2} (ac + 1) \exp(-ac) \pi a_1, \\ m_2^c(a) &= m_1^c(a) - \frac{3}{4} c (a^2 c^2 - ac - 1) \exp(-ac) \pi a_2, \\ m_3^c(a) &= m_2^c(a) - \frac{c}{8} (5a^3 c^3 - 20a^2 c^2 + 9ac + 9) \exp(-ac) \pi a_3, \\ m_4^c(a) &= m_3^c(a) - \frac{5c}{96} (7a^4 c^4 - 40a^3 c^3 + \\ &\quad + 111a^2 c^2 - 27ac - 27) \exp(-ac) \pi a_4. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Формулы (28) представляет собой систему последовательно улучшающихся приближений к точному спектру $m(a)$. Отметим, что при построении нового приближения предыдущее приближение используется без каких-либо изменений.

4. Проиллюстрируем полученные результаты на моделях с микроструктурой вида

$$m_1(a) = \pi a^2 e^{-2a} \quad (29)$$

и

$$m_2(a) = \pi a^3 e^{-6a}. \quad (30)$$

По формуле (4) для распределения (29) находим прозрачность

$$g_1(y) = \frac{\pi}{2} \left[1 + \frac{1}{1 + \frac{y^2}{H}} - \frac{2}{\left(1 + \frac{y^2}{H}\right)^2} \right]. \quad (31)$$

Для гамма-распределения (30) прозрачность удобно определить по формулам (7)–(10). Имеем

$$g_2(y) = \frac{35\pi}{4374} \theta_6 \left(\frac{y}{6}\right), \quad \theta_6 = 1 + \frac{1}{28} \left[\sum_{k=1}^4 \frac{1}{(1+x^2)^k} + \frac{64}{(1+x^2)^5} - \frac{608}{(1+x^2)^6} + \frac{1408}{(1+x^2)^7} - \frac{896}{(1+x^2)^8} \right]. \quad (32)$$

Результаты расчетов приведены на рис. 1 и 2, причем рис. 1 относится к спектру (29), а рис. 2 — к спектру (30). На рис. 1, а и 2, а изображены

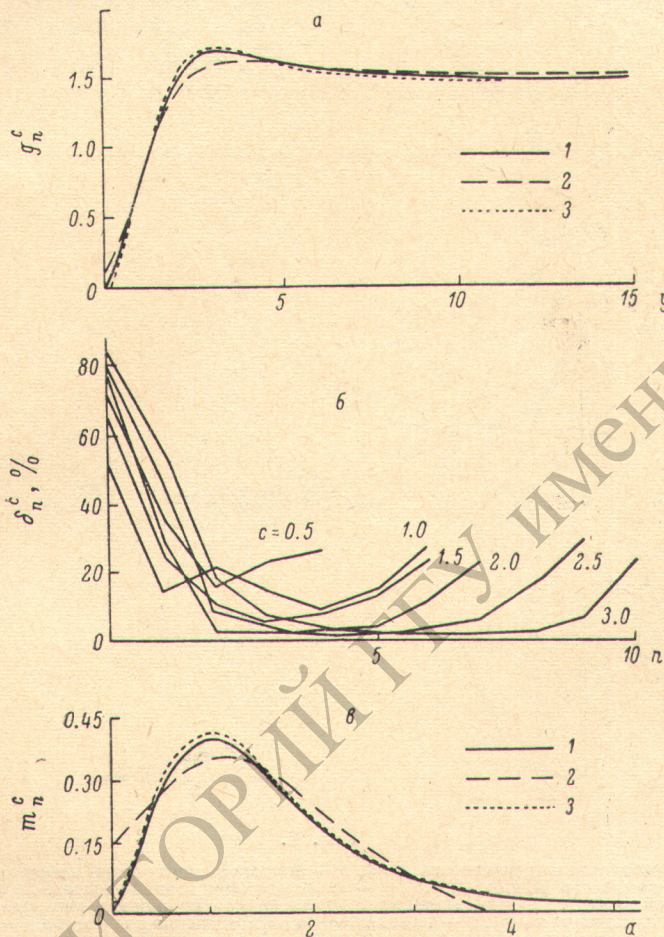


Рис. 1.

а: 1 — точная спектральная прозрачность $g_1(y)$, 2 — аппроксимация точной спектральной прозрачности для оптимальных пар (2, 2), (4, 1), 3 — аппроксимация точной спектральной прозрачности для неоптимальной пары (4, 3); б — ошибка различных аппроксимаций $g_1(y)$ в зависимости от n и c ; в: 1 — точное распределение $m_1(\alpha)$, 2 — приближенное распределение для оптимальных пар (2, 2), (4, 1), 3 — для неоптимальной пары (4, 3).

графики функций (31) и (32). Рис. 1, б и 2, б иллюстрируют выбор оптимальных пар (n, c) для аппроксимации прозрачностей (31) и (32) с помощью представления (15). Так, в случае кривой (31) на множестве (18) имеются три оптимальные пары (2, 2), (3, 2.5) и (4, 3), для которых достигается минимальная ошибка $\delta_n^c \approx 1\%$. Приближения (15) для оптимальных пар (2, 2) и (4, 3) приведены на рис. 1, а; кроме того, там же изображено приближение, соответствующее неоптимальной паре (4, 1). В свою очередь на рис. 2, а даны приближенные прозрачности для оптимальных пар (4; 4, 5), (5; 4, 5) и неоптимальной пары (2; 2.5). На рис. 1, а и 2, в показаны спектры (19), соответствующие распределениям (29) и (30), а также ре-

зультаты обращения спектральной прозрачности (15), вычисленные по формулам (28). Из рис. 1, в и 2, в следует, что для оптимальных пар (n, c) ошибка обращения (17) примерно равна ошибке аппроксимации (16), если не принимать во внимание частицы с малыми радиусами. Так, из рис. 1, в видно, что для оптимальной пары (2, 2) ошибка обращения $\varepsilon_n^c(\alpha) \approx \delta_n^c \approx 1\%$; если $\alpha > 0.3$ ($r > 0.3r_M$). Отметим, что для неоптимальных

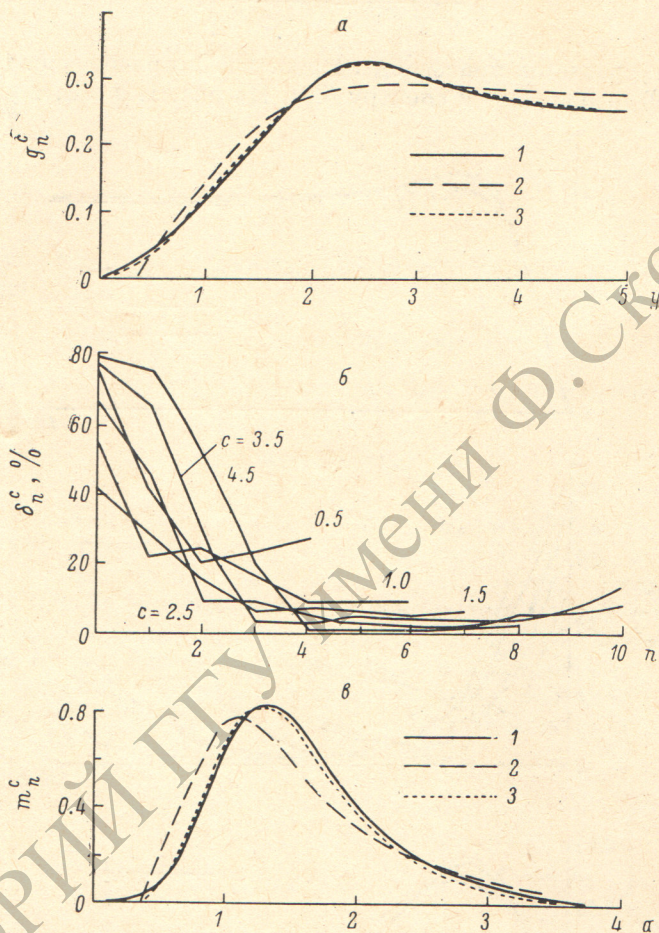


Рис. 2.

а: 1 — точная спектральная прозрачность $g_2(y)$, 2 — аппроксимация точной спектральной прозрачности для оптимальных пар (4, 4.5), (5, 4.5), 3 — аппроксимация точной спектральной прозрачности для неоптимальной пары (2, 2.5). б — ошибка различных аппроксимаций $g_2(y)$ в зависимости от n и c ; в: 1 — точное распределение $m_2(\alpha)$, 2 — приближенное распределение для оптимальных пар (4, 4.5), (5, 4.5), 3 — для неоптимальной пары (2, 2.5).

пар эти ошибки значительно увеличиваются, например, для пары (4, 1) имеем $\delta_n^c \approx 8\%$ и (при $\alpha > 0.3$) $\varepsilon_n^c(\alpha) \approx 9\%$ (рис. 1).

5. Множество (18) пар (n, c) , подлежащих проверке, можно сузить, если имеется некоторая предварительная информация о законе распределения радиусов частиц. В этом случае удастся установить приближенную зависимость между компонентами n и c оптимальных пар. Например, если исследуемая дисперсная система имеет плотность (7) с $a = rr_M^{-1}$, то на основании (15), (19) и (26) можно заключить, что компоненты оптимальной пары в предположении, что неизвестный параметр μ есть натуральное число, равны

$$n = \mu + 2, \quad c = \mu,$$

и им соответствует $\delta_n^c = 0\%$. Значит в этом случае справедливо соотношение $n - c = 2$.

6. В заключение отметим, что новый способ обращения приводит к существенному уменьшению амплитуд ложных осцилляций, возникающих в спектре частиц $m(a)$, определяемом по схеме [5]. Для соответствующего уменьшения осцилляций в условиях схемы [5] требуется существенное расширение основного спектрального интервала, увеличение количества точек, в которых следует производить замеры, а также повышения точности измерений.

Литература

- [1] Г. Ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами. ИЛ, М., 1961.
- [2] А. Я. Перельман, К. С. Шифрин. Изв. АН СССР, ФАО, 14, 45, 1978.
- [3] К. С. Шифрин, А. Я. Перельман. Опт. и спектр., 15, 533, 1963.
- [4] К. С. Шифрин, А. Я. Перельман. Опт. и спектр., 15, 667, 1963.
- [5] К. С. Шифрин, А. Я. Перельман. Опт. и спектр., 15, 803, 1963.
- [6] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений.

Поступило в Редакцию 5 января 1979 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. СКОРИНЫ