

# ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИЧЕСКОЙ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ СУСПЕНЗИЙ НАНОЧАСТИЦ И УВЛАЖНЕННЫХ ПОРИСТЫХ СРЕД

Л.Б. Лерман<sup>1</sup>, М.А. Лющенко<sup>1</sup>, Я.С. Криворучко<sup>2</sup>,  
Н.Г. Шкода<sup>1</sup>, С.В. Шостак<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины  
ул. Генерала Наумова 17, 03164 Киев-164

<sup>2</sup>Национальный аграрный университет, ул. Героев Оборона 15, 03041 Киев-41

*Рассмотрены обратные задачи математической физики, связанные с определением распределений включений в матрично-дисперсных системах по размерам, нахождения комплексных диэлектрических проницаемостей слоев многослойных эллипсоидальных включений и свойств слоистого материала по данным экспериментальных исследований. В частности, рассмотрены задачи оптической и диэлектрической спектроскопии, обратная задача теории пористых сред, а также некоторые задачи радиометрии. Для решения указанного класса задач использован общий подход, основанный на минимизации функционала невязок расчетных и экспериментальных данных. Решение задачи нахождения минимума строится методом случайного поиска с применением специальных двоичных последовательностей. Приведен графический и табличный материал, иллюстрирующий возможности разработанного подхода.*

## Введение

Определение внутренней структуры или параметров объекта (вещества) при исследовании рассеяния электромагнитного излучения уже давно является одной из фундаментальных проблем физики. В большинстве случаев мы имеем дело, как с прямой, так и обратной задачами. Пусть состояние системы характеризуется вектором  $z$ , а внешнее влияние на ее состояние задается оператором  $A$ . Тогда прямая задача заключается в нахождении отклика системы  $u$  при действии на вектор состояния оператора  $A$

$$Az = u, \quad (1)$$

а одна из обратных задач – в определении состояния  $z$  при известном отклике системы

$$z = A^{-1}u. \quad (2)$$

то есть нахождении обратного оператора  $A^{-1}$ . При этом отклик  $u = u_{\text{exp}}$  определяется из эксперимента, и поэтому известен лишь приближенно.

Обратные задачи, как правило, являются по своей сути некорректными [1]. Это значит, что их вычислительная схема [2] очень чувствительна к небольшим ошибкам начальных данных. Малое, обычно неконтролируемое изменение начальных данных или ошибок вычислений приводит к значительному изменению в ответе. Наложение дополнительных условий, которые исключают физически абсурдные решения, называется регуляризацией задачи. Существует много разных методов регуляризации. Наиболее известный из них был предложен А.Н. Тихоновым [1, 2], который сводится к корректировке ядер соответствующих систем интегральных уравнений. Следовательно, при

разработке метода решения обратных задач нужно направлять усилия к получению однозначного решения задачи и к построению алгоритма, возможно более общего и как менее чувствительного к погрешностям опыта.

В настоящем сообщении в продолжение работ [4 – 7] рассматриваются некоторые аспекты решения обратных задач математической физики, связанные с определением распределений включений в МДС по размерам, нахождения комплексных диэлектрических проницаемостей слоев многослойных эллипсоидальных включений и свойств слоистого материала по данным экспериментальных исследований. В частности, рассматриваются задачи оптической и диэлектрической спектроскопии, обратная задача теории пористых сред, связанная с определением перколяционной составляющей, а также обратные задачи радиометрии для определения содержания влаги в грунтах. Для решения указанного класса задач используется общий подход, основанный на минимизации функционала невязок расчетных и экспериментальных данных. Решение задачи нахождения минимума строится методом случайного поиска с использованием специальных двоичных последовательностей. Приводится графический и табличный материал, иллюстрирующий возможности разработанного подхода. Достоверность результатов подтверждается сравнением с экспериментальными спектрами.

### **Обратные задачи оптической спектроскопии**

Для частиц с оболочкой обратная задача записывается в виде двумерного интегрального уравнения Фредгольма первого рода. В методе решения, которое излагается ниже, непрерывные плотности распределения заменяются кусочно-постоянными функциями (метод гистограмм [8]), что позволяет получить некоторое функциональное уравнение. Решение полученного уравнения строится минимизацией функционала невязок расчетного и экспериментального спектров в выбранном частотном диапазоне. Этот функционал принимается в виде суммы среднеквадратичных отклонений расчетных значений ослабления света (оптической плотности) и экспериментальных спектров в некоторых точках спектра. Для нахождения минимума используется вариант реализации метода Монте-Карло с использованием специальных двоичных последовательностей (ЛП- $\tau$  последовательности [9]).

Запишем интегральное уравнение обратной задачи для ансамблей сферических частиц в оболочке, используя обобщение решения Ми для сферы на слоистый шар [10]. Будем рассматривать радиус ядра  $x$  и толщину оболочки  $y$  как независимые случайные величины, которые могут принимать значение в конечных промежутках  $0 < x < A$ ,  $0 < y < B$ , где  $A, B$  – максимальные значения радиусов ядра и толщины оболочки. Плотности распределения этих случайных величин обозначим через  $f(x), g(y)$  соответственно. Очевидно, внешний радиус частицы  $z$ , равный сумме  $z = x + y$ , также будет случайной величиной, которая может принимать значение в интервале  $0 < z < A + B$ . В общем случае плотность распределения суммы двух случайных величин  $q(z)$  определяется сверткой функций плотностей вероятностей этих величин [11].

В случае двухслойной сферической частицы экстинкция будет функцией длины волны и двух случайных величин:  $x, y$  (точнее отношений  $x/l, (x+y)/l$ ), то есть  $Q_{\text{ext}} = Q_{\text{ext}}(x, y, l)$ . Система рассеивателей будет состоять из  $N$  ядер разного радиуса. Каждое из ядер покрыто оболочкой, толщина которой может принимать  $M$  возможных значений, потому общее число частиц, которые входят в ансамбль, будет  $NM$ . Произведение  $NM$  – это число частиц в единице объема соответствующей размерности. Суммирование по частицам с учетом выражения для математического ожидания детерминиро-

ванной функции двумерной случайной величины приводит к двумерному интегральному уравнению

$$(NMP / \ln 10) \int_0^B g(y) dy \int_0^A (x+y)^2 Q_{ext}(l, x, y) f(x) dx = \bar{b}_{exp}(l), \quad (3)$$

$\bar{b}_{exp}(l)$  – экспериментальное значение коэффициента поглощения в кювете шириной 1 см.

Для построения решения уравнения (3) воспользуемся методом гистограмм. С этой целью интервалы изменения радиусов ядер и толщин оболочек разобьем на  $n$  и  $m$  интервалов одинаковой длины и заменим непрерывные функции распределения кусочно-постоянными функциями. Значение этих функций на интервалах  $(x_i, x_{i+1}), i=1, \dots, n$ , обозначим через  $f_i, g_j$  (относительные частоты в гистограммах). Тогда для расчетной функции ослабления света на ансамблях двухслойных частиц  $\bar{b}_{cal}(l)$  будем иметь дискретный аналог выражения (4)

$$\bar{b}_{cal}(l) = (NMP / \ln 10) \sum_{i=1}^n f_i \sum_{g=1}^m g_j \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx \int_{y_j}^{y_{j+1}} (x+y)^2 Q_{ext}(l, x, y) dy. \quad (4)$$

Сравнивая расчетные и экспериментальные значения функции поглощения, получаем для нахождения параметров гистограмм функциональное уравнение вида

$$(NMP / \ln 10) \sum_{i=1}^n f_i \sum_{g=1}^m g_j A_{ij}(l) = \bar{b}_{cal}(l), \quad (5)$$

где введено обозначение для двойного интеграла

$$A_{ij}(l) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx \int_{y_j}^{y_{j+1}} (x+y)^2 Q_{ext}(l, x, y) dy. \quad (6)$$

Уравнение (5) содержит  $K = n + m$  неизвестных параметров гистограмм и должно выполняться во всем диапазоне изменения длин волн. Известно, что функциональные уравнения разными методами могут быть возведены к системам алгебраических уравнений. В данной работе в рассмотрение вводится функционал невязок  $\Psi(f, g)$  [1], который определяет среднеквадратичное отклонение расчетных и экспериментальных спектральных зависимостей во всем диапазоне длин волн. Тогда искомые значения параметров в интервале длин волн  $0 < l < L$  должны обеспечивать минимум этого функционала, который в дискретном виде записывается следующим образом

$$\Psi(f, g) = \sum_{k=1}^P w_k \left[ \bar{b}_{exp}(l_k) - (NMP / \ln 10) \sum_{i=1}^n f_i \sum_{g=1}^m g_j A_{ij}(l_k) \right]^2 \rightarrow \min, \quad (7)$$

где  $w_k = w(l_k), k=1, 2, \dots, P$ , а через  $f, g$  обозначены числовые векторы, составленные из относительных частот гистограмм  $f = (f_1, f_2, \dots, f_n), g = (g_1, g_2, \dots, g_m)$ , удовлетворяющие

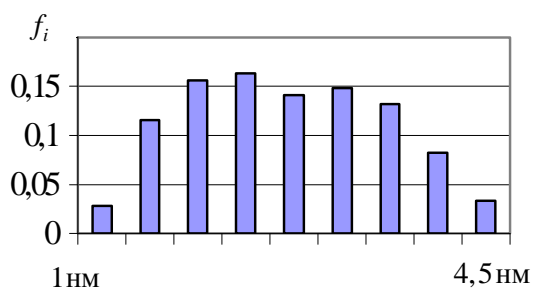
условию нормировки  $\sum_{i=1}^n f_i = 1, \sum_{j=1}^m g_j = 1$ . Для лучшей аппроксимации в (9) и (10) введены

весовые коэффициенты, значения которых позволяют регулировать вклад в общую величину невязки отклонений расчетного и экспериментального значений в отдельных точках или на отдельных участках спектра. Число точек  $P$  в сумме (10) может быть

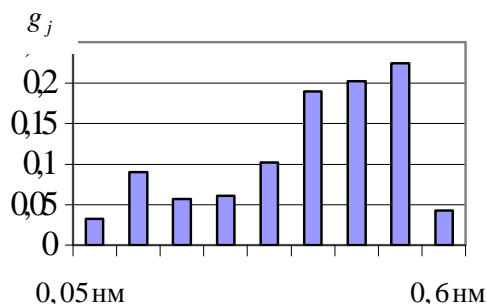
произвольным, однако из общих соображений оно должно быть не меньше, чем число неизвестных параметров.

Следует отметить, что относительные частоты на гистограммах могут принимать значение от 0 до 1, то есть все переменные попадают в  $K$ -мерный куб  $0 \leq f_i \leq 1$ ,  $0 \leq g_j \leq 1$ . Функция  $\Psi(f, g)$  непрерывна в замкнутой области, потому ее минимум всегда существует. Однако,  $\Psi(f, g)$  является функцией многих переменных, число которых достаточно большое. Традиционные методы поиска экстремумов практически трудно реализовать из-за большого числа неизвестных, поэтому был выбран метод случайного поиска с использованием ЛП- $\tau$  последовательностей [9].

Рассмотрим процесс ослабления света в водяных суспензиях наночастиц серебра с использованием экспериментальных данных, приведенных в [4]. Как отмечалось в этой работе значения концентрации частиц известно лишь ориентировочно. Поэтому, этот параметр при расчетах также был включен в число неизвестных при реализации случайного поиска. Зависимость диэлектрической функции серебра принималась на основании экспериментальных данных [12] с учетом размерной поправки, как это было сделано в [4]. Для оксида серебра и воды было принято, что диэлектрические проницаемости действительные и не зависят от частоты, а их значения равны  $\epsilon'_2 = 11$ ,  $\epsilon'_m = 1,77$ . Результаты расчетов приведены на рис. 1 – 4. На рис. 1, 2 показаны рассчитанные гистограммы распределения по размерам радиусов ядер и толщин оболочек.

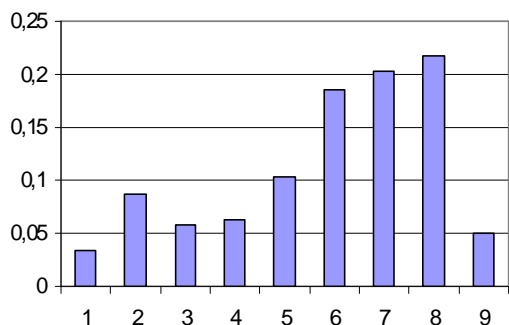


**Рис. 1.** Рассчитанная гистограмма распределения радиусов ядер.

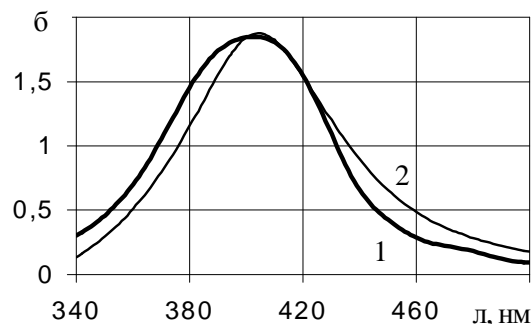


**Рис. 2.** Рассчитанная гистограмма распределения толщин оболочек.

На рис. 3 показана найденная гистограмма распределения внешних радиусов. Результаты сравнения расчетных и экспериментальных спектров приведены на рис. 4. Поиск проводился в интервалах  $1 < x < 4,5$  нм,  $0,05 < y < 0,6$  нм при 1024 пробных точек.



**Рис. 3.** Рассчитанная гистограмма распределения внешних радиусов частиц.



**Рис. 4.** Экспериментальный (1) и расчетный (2) спектры с восстановленными значениями распределений ядра и оболочки по размерам.

Из приведенных результатов следует, что функции распределения ядер и оболочек имеют разный вид. Так, гистограмма для размеров радиусов ядер имеет один максимум, а гистограмма для размеров оболочек – два. Это значит, что плотности распределения для ядер и оболочек частиц описываются существенно разными функциями. Это приводит к тому, что суммарная гистограмма для внешних размеров частиц тоже имеет два максимума, что и было обнаружено при обработке соответствующих имиджей, полученных методами электронной микроскопии для некоторых образцов суспензий [4]). Кроме того, “размытость” гистограммы для ядер свидетельствует о значительной дисперсии, в то время, когда для оболочек частиц она существенно меньше. Для обработанного спектра согласно полученных гистограмм среднее значение радиусов ядер равняется 3,09 нм, а толщина оболочки – 0,46 нм. При этом среднее значение внешнего диаметра составляет 6,8 нм, что соответствует экспериментальным данным.

Из рис. 4 видно, что рассчитанный с учетом найденных гистограмм и экспериментальный спектры хорошо согласовываются между собой, особенно в области максимума ослабления и определения длины волны поверхностного плазмона. Некоторое расхождение для других длин волн практически не существенно, и как при этом ослабление света гораздо меньше максимального. Лучшего согласования, по нашему мнению, можно достичь, скорректировав диэлектрическую функцию серебра и увеличив число интервалов при нахождении гистограмм.

### **Обратные задачи диэлектрической спектроскопии**

В этом подразделе рассматриваются матрично-дисперсные системы (МДС) с многослойными эллипсоидальными включениями. Решение задач основывается на разработанных нами методах расчета эффективной диэлектрической функции для эллипсоидальных частиц с учетом их распределения по размерам [13, 14]; методики вычисления поляризуемости эллипсоидов с произвольным числом слоев [15, 16] и рассмотрения обратной задачи для оценки значений неизвестных параметров с использованием всего набора экспериментальных значений частотной зависимости эффективной диэлектрической функции [5]. Для суспензий клеток *E.coli* на основании экспериментальных данных получены оценки электродинамических параметров слоев.

Итак, рассматривается МДС с эллипсоидальными многослойными включениями, которые в общем случае состоят из  $n$  конфокальных эллипсоидов с разными диэлектрическими проницаемостями слоев. Диэлектрические проницаемости частиц и среды считаем комплексными величинами, которые будем отмечать верхним индексом в виде звездочки.

Обратных задач можно сформулировать несколько, но все они выходят из того, что диэлектрическая функция  $\tilde{\epsilon}^*$  известна из эксперимента. Практически наиболее интересной является задача определения всех, или несколько диэлектрических характеристик слоев частиц при известной частотной зависимости  $\tilde{\epsilon}^*(f)$  диэлектрической проницаемости МДС ( $f$  – линейная частота). Здесь снова возникает вопрос о нахождении функции распределения включений за размерами, и как и в прямой задаче, ее нужно или задавать, или определять экспериментально. Очевидно, что такая задача вообще может быть однозначно решена, если число известных значений диэлектрической функции при разных частотах равняется числу неизвестных параметров (если число точек меньше, то задача становится неопределенной). В этом случае ее можно свести к решению системы нелинейных алгебраических уравнений, как это сделано в [17]. На практике измерения  $\tilde{\epsilon}^*(f)$  проводят в широком частотном диапазоне, и задача становится переопределенной. Найденные за взятыми наугад точками значения параметров

диэлектрической функции не должны, и, вообще говоря, и не будут хорошо описывать экспериментальные данные в других участках частотного диапазона, и потому их нельзя считать надежными. Обычно такие задачи решают с помощью схем метода наименьших квадратов, но в этой задаче приходится рассматривать комплекснозначную функцию комплексных параметров, потому в данном случае стандартные схемы должны быть модифицированы. Один из возможных подходов рассматривается ниже.

Для решения обратной задачи имеем комплекснозначную функцию  $\tilde{e}^* = \tilde{e}^*(f; z_1, z_2, \dots, z_k)$  действительного аргумента  $f$  и комплексных параметров  $z_1, z_2, \dots, z_k$ , некоторые из которых могут быть известными. При этом  $z_s = e_s - iy_s / (2\pi f \epsilon_0)$ ,  $s = 1, 2, \dots, k$ ,  $e_s$  – действительная часть диэлектрической проницаемости,  $y_s$  – проводимость. Известны значения этой функции  $\tilde{e}^*(f)$  при значениях аргумента  $f_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ), где  $n > k$  – число точек измерений, и значениях  $\tilde{e}_s, \tilde{y}_s$ . Нужно найти оценки этих параметров с использованием всего множества числа известных значений.

Введем в рассмотрение действительную целевую функцию (функцию невязок) вида

$$F = w_e \sqrt{\sum_{j=1}^n u_j (\tilde{e}_{cj} - \tilde{e}_{ej})^2} + w_y \sqrt{\sum_{j=1}^n v_j (\tilde{y}_{cj} - \tilde{y}_{ej})^2}, \quad (8)$$

где  $\tilde{e}_{cj}$  и  $\tilde{y}_{cj}$  – рассчитанные значения, которые вычисляются при некотором наборе параметров, которые подлежат определению, а  $\tilde{e}_{ej}$  и  $\tilde{y}_{ej}$  – соответствующие экспериментальные значения действительной части эффективных диэлектрической проницаемости и проводимости, найденные для частот  $f_j$ .

В формулу (11) введены две группы положительных весовых коэффициентов: общие веса  $w_e, w_y$  и частотные веса  $u_j, v_j$ . Первые использованы с целью уравнивания вкладов диэлектрической проницаемости и проводимости в абсолютную величину невязки. Связано это с тем, что в системе СИ абсолютные значения действительной части диэлектрической проницаемости и проводимости для одного и того же материала, как правило, отличаются на два порядка. Варьирование этих весов позволяет уравнивать их вклад в целевую функцию. Частотные веса  $u_j, v_j$  введены для возможности достижения более точной аппроксимации частотной зависимости эмпирической диэлектрической функции в отдельных диапазонах частот.

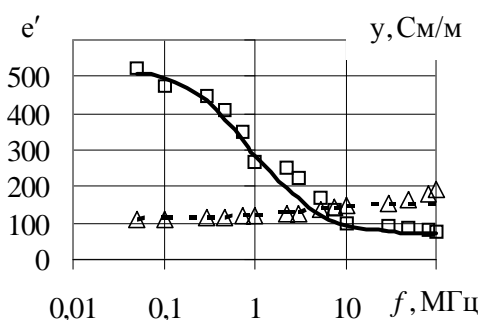
Заметим, что за построением целевая функция  $F$  непрерывна при любых наборах параметров, и нужно найти такие их значения, которые обеспечивают целевой функции минимум. Поскольку возможные значения искомым параметров лежат в ограниченных интервалах, границы которых известны из физических соображений, решение данной экстремальной задачи всегда будет существовать.

Возможности разработанной методики проиллюстрируем на примере определения электродинамических параметров клеток *E.coli*. Для этого используем экспериментальные зависимости эффективных диэлектрической проницаемости и проводимости для суспензий *E.coli*, приведенные в [17]. Измерения были выполнены в СВЧ диапазоне от 0,05 до 100 МГц для двух видов суспензий, которые отличаются концентрацией NaCl. Клетки моделировались эллипсоидом вращения (сфероидом) с двумя конфокальными оболочками (мембрана и стенка), то есть трехслойного эллипсоида. Эмпирическая функция распределения по размерам была принята согласно [17]. Диэлектрическая функция суспензии клеток  $\tilde{e}^*(f)$  будет зависеть от четырех комплексных диэлектрических проницаемостей: среды  $\epsilon_0^*$ , мембраны  $\epsilon_m^*$ , стенки мембраны  $\epsilon_w^*$  и ядра (прото-

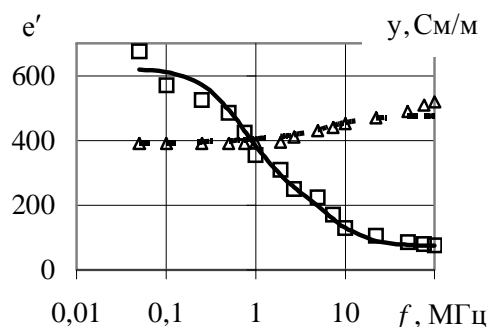
плазмы)  $\epsilon_p^*$ . В работе [17] из восьми действительных параметров (четырёх диэлектрических проницаемостей и четырёх проводимостей) некоторые найдены в процессе непосредственных измерений. В частности из эксперимента известны: диэлектрические проницаемости окружающей клетки среды и стенки, проводимости среды и мембраны. Нами было принято, что все диэлектрические характеристики составляющих клетки неизвестны, то есть поиск проводился в восьмимерном параллелепипеде. Число пробных точек принималось равным 512 и 1024, а для весов приняты значения  $w_e = 1$ ,  $w_y = 1000$ ,  $u_j = v_i = 1$ . Некоторые результаты расчетов, приведены в таблице и на рисунках. В табл. 1 приведены значения найденных диэлектрических параметров слоев. (в скобках – экспериментальные значения, а также значения параметров, найденные в [17]). О достигнутой точности описания экспериментальных результатов диэлектрической спектроскопии позволяют судить спектры, показанные на рис. 5, 6.

**Таблица 1.** Значения электродинамических параметров слоев клетки *E.coli*

Количество NaCl в образце	Расчетные значения параметров клетки и среды							
	$\epsilon_0$	$y_0$ , См/м	$\epsilon_w$	$y_m$ , мкС/м	$\epsilon_m$	$y_w$ , См/м	$\epsilon_p$	$y_p$ , См/м
10 ммоль	74,8 (74)	0,13 (0,12)	56,9 (60)	0,02 (0,05)	10,1 (10,8)	0,67 (0,68)	61,5 (61)	0,18 (0,19)
50 ммоль	72,2 (73)	0,51 (0,50)	58,1 (60,0)	0,04 (0,05)	11,0 (11,1)	0,95 (0,96)	61,9 (65)	0,22 (0,21)



**Рис. 5.** Расчетные (сплошная и пунктирная линии) и экспериментальные (значки) частотные зависимости диэлектрической функции суспензии.



**Рис. 6.** Расчетные (сплошная и пунктирная линии) и экспериментальные (значки) частотные зависимости диэлектрической функции суспензии.

Полученные значения параметров клеток практически не отличаются от тех, которые приведены в [17], а сравнение с экспериментальными данными показывает даже более высокую точность описания экспериментальных спектров во всем диапазоне измерений по сравнению с кривыми, приведенными в [17].

### Обратные задачи пористых сред

Для определения эффективных характеристик пористых сред при известных характеристиках скелета и проводящей жидкости, которая заполняет поры, на наш взгляд наиболее совершенной является модель, предложенная в [18]. Согласно этой модели необходимо знать две функции распределения, которые зависят от локальной пористости  $\alpha$ . Первая функция  $m(\alpha)$  определяет плотность распределения вероятности

размеров пор, а функция  $l(\zeta)$  – плотность распределения длины связанных между собой пор (перколяционная составляющая пористых сред). Функция  $m(\zeta)$  может быть определена экспериментально после обработки фотографий срезов образцов, но для функции  $l(\zeta)$  возможно получить только некоторые теоретические оценки [18]. Решения соответствующего интегрального уравнения прямой задачи в приближении локальной пористости были обстоятельно исследованы в [19 – 21]. С другой стороны, из уравнения прямой задачи, которое описывает зависимость эффективной диэлектрической проницаемости  $\epsilon = \epsilon(\omega)$  пористой среды от частоты, может быть получено интегральное уравнение обратной задачи для нахождения функций распределения при известной частотной зависимости  $\epsilon = \epsilon(\omega)$ . Поскольку функцию  $m(\zeta)$  можно считать известной, то это уравнение в принципе позволяет определить перколяционную функцию  $l(\zeta)$ .

В [18, 19] предлагается решать это уравнение общим методом симметризации ядра с использованием разложений по собственным функциям интегрального оператора [18], но результаты расчетов не приведены. Заметим, что уравнение обратной задачи – это уравнение Фредгольма первого рода. Для его решения ниже используется численно-аналитический метод. Переход от комплексного ядра и комплексной правой части уравнения к двум интегральным уравнениям с действительными ядрами и действительными правыми частями показывает, что решения этих уравнений должны совпадать. Регуляризация задачи и получения устойчивых решений достигается при переходе к одному уравнению, ядро и правая часть которого является линейной комбинацией исходных уравнений. Неизвестная функция  $l(\zeta)$  разыскивается в виде некоторого полинома с неопределенными коэффициентами. Коэффициенты полинома определяются из бесконечной системы линейных алгебраических уравнений, которая строится методом коллокации. Полученные решения сравниваются с развязками прямой задачи.

Эффективную диэлектрическую проницаемость увлажненной пористой среды  $\epsilon = \epsilon(\omega)$  будем определять из уравнения [18]

$$\int_0^1 \frac{\epsilon_C(\omega, \varphi) - \epsilon(\omega)}{\epsilon_C(\omega, \varphi) + 2\epsilon(\omega)} l(\varphi) m(\varphi) d\varphi + \int_0^1 \frac{\epsilon_B(\omega, \varphi) - \epsilon(\omega)}{\epsilon_B(\omega, \varphi) + 2\epsilon(\omega)} [1 - l(\varphi)] m(\varphi) d\varphi = 0, \quad (12)$$

где  $\epsilon_B = \epsilon_B(\omega)$ ,  $\epsilon_C = \epsilon_C(\omega)$  – диэлектрические проницаемости, которые характеризуют скелетную и перколяционную составляющие выбранной ячейки характерного размера и определяются по формулам

$$\epsilon_B = \epsilon_R \frac{2\epsilon_R + \epsilon_W - 2(\epsilon_R + \epsilon_W)\varphi}{2\epsilon_R + \epsilon_W + 2(\epsilon_R - \epsilon_W)\varphi}, \quad (13) \quad \epsilon_C = \epsilon_W \frac{\epsilon_R + (2/3)(\epsilon_R - \epsilon_W)\varphi}{\epsilon_W - (1/3)(\epsilon_W - \epsilon_R)\varphi}. \quad (14)$$

В свою очередь,  $\epsilon_R$ ,  $\epsilon_W$  – диэлектрические проницаемости скелета и включений соответственно. Формула (12) позволяет найти эффективную диэлектрическую проницаемость при известных диэлектрических проницаемостях скелета и заполняющей жидкости и функциях распределения  $m(\varphi)$ ,  $l(\varphi)$ . Для этого нужно при фиксированном значении частоты решить уравнение (12) относительно  $\epsilon = \epsilon(\omega)$ . В этом состоит прямая задача теории пористых сред. Решение этой задачи приведено в [18, 20]

Обратная задача состоит в нахождении функции  $l(\varphi)$  при известной функции  $\epsilon = \epsilon(\omega)$  и распределении  $m(\varphi)$ . Исходя из уравнения (13), запишем уравнение обратной задачи в операторном виде



$$Kл = f, \quad Kл = \int_0^1 K(\varphi, \psi)л(\varphi)d\varphi. \quad (15)$$

Ядро и правую часть представим в виде

$$K(\varphi, \psi) = 3e(\psi) \frac{e_C(\psi, \varphi) - e_B(\psi, \varphi)}{[e_C(\psi, \varphi) + 2e(\psi)] \cdot [e_B(\psi, \varphi) + 2e(\psi)]} M(\varphi), \quad (16)$$

$$f(\psi) = \int_0^1 g(\psi, \varphi)d\varphi, \quad g(\psi, \varphi) = -\frac{e_B(\psi, \varphi) - e(\psi)}{e_B(\psi, \varphi) + 2e(\psi)} M(\varphi) \quad (17)$$

Примем, что плотность  $M(\varphi)$  описывается Бета-распределением

$$M(\varphi) = w \frac{\Gamma(M_1 + N_1)}{\Gamma(M_1)\Gamma(N_1)} (1-\varphi)^{M_1-1} \varphi^{N_1-1} + (1-w) \frac{\Gamma(M_2 + N_2)}{\Gamma(M_2)\Gamma(N_2)} (1-\varphi)^{M_2-1} \varphi^{N_2-1}, \quad (18)$$

где  $\Gamma(x)$  – Гамма-функция,  $w$  – некоторое число ( $0 \leq w \leq 1$ ). Заметим, что  $\int_0^1 M(\varphi)d\varphi = 1$ .

Уравнение (15) – это интегральное уравнение Фредгольма I-го рода с комплексным ядром, комплексной правой частью и неизвестной действительной функцией  $л(\varphi)$ . При этом интервалы значений переменных  $\varphi, \psi$  разные и определяются неравенствами  $0 \leq \varphi \leq 1$ , а  $0 \leq \psi \leq \infty$ . Так как  $K = L + iM$ ,  $f = p + iq$ , то, отделяя действительную и мнимую части в уравнении (15), получим два уравнения с действительными ядрами и действительными правыми частями

$$Lл = p, \quad (19),$$

$$Mл = q, \quad (20)$$

Операторы  $L, M$  действуют по правилу

$$Lл = \int_0^1 Re(K(\varphi, \psi))л(\varphi)d\varphi, \quad Mл = \int_0^1 Im(K(\varphi, \psi))л(\varphi)d\varphi.$$

Следует отметить, что если решения уравнений (19), (20) существуют, то они должны совпадать. Это означает, что имеют место тождества

$$ML^{-1}p = q, \quad LM^{-1}q = p, \quad (21)$$

где через  $L^{-1}$ ,  $M^{-1}$  обозначены соответствующие обратные операторы. При дискретизации задачи это будут некоторые обратные матрицы, и условия (21) могут быть использованы для контроля вычислений.

Рассмотрим случай  $л(\varphi) = л = \text{const}$ . Тогда задача сводится к простому вычислению отношения интегралов при фиксированных значениях частоты  $\psi$  по формуле

$$л = \int_0^1 g(\psi, \varphi)d\varphi / \int_0^1 K(\psi, \varphi)d\varphi. \quad (22)$$

Заметим, что в правой части присутствует отношение комплексных чисел, а в левой вещественное число. Поэтому мнимая часть отношения должна превращаться в

нуль. Кроме того, правая часть уравнения зависит от частоты, а левая – нет. Отсюда следует, что решение  $л = \text{const}$  существует не всегда, но в результате простоты его построения оно может быть использовано на начальных стадиях исследований.

Теперь рассмотрим общий случай. Поскольку уравнения (21) и (22) должны иметь одинаковое решение, то вместо двух уравнений будем рассматривать их линейную комбинацию, то есть уравнение вида

$$\int_0^1 [б \operatorname{Re}(K(\varphi, \psi)) + в \operatorname{Im}(K(\varphi, \psi))] л(\varphi) d\varphi = \int_0^1 [б \operatorname{Re}g(\psi, \varphi) + в \operatorname{Im}g(\psi, \varphi)] d\psi, \quad (23)$$

где б, в – некоторые действительные постоянные.

Решение уравнения (23) будем искать в виде полинома

$$л(\varphi) = л_1 + л_2\varphi + л_3\varphi^2 + \dots + л_n\varphi^{n-1}. \quad (24)$$

Подстановка (24) в (23) приводит к уравнению вида

$$л_1 a_1(\psi) + л_2 a_2(\psi) + л_3 a_3(\psi) + \dots + л_n a_n(\psi) = b(\psi), \quad (25)$$

где  $a_j(\psi) = \int_0^1 [б \operatorname{Re}(K(\varphi, \psi)) + в \operatorname{Im}(K(\varphi, \psi))] \varphi^{j-1} d\varphi$ ,  $b(\psi) = \int_0^1 [б \operatorname{Re}g(\psi, \varphi) + в \operatorname{Im}g(\psi, \varphi)] d\varphi$ .

Уравнение (23) должно удовлетворяться для произвольной частоты из промежутка  $0 \leq \psi \leq \infty$ . Для его решения применим метод коллокации. Будем считать, что уравнение точно удовлетворяется в отдельных точках  $\psi_i, (i=1, 2, \dots, n)$ . Тогда оно сводится к системе линейных алгебраических уравнений, которую удобно записать в матричном виде

$$Aл = b. \quad (26)$$

Вектор неизвестных  $л^* = [л_1, л_2, \dots, л_n]$  состоит из искомых коэффициентов разложений (24), вектор правой части  $b^* = [b_1, b_2, \dots, b_n]$  (звездочка означает транспонирование), а матрица системы  $A = [a_{ij}]$ . При этом  $a_{ij} = a_j(\psi_i)$ ,  $b_i = b(\psi_i)$ . После решения системы (26) коэффициенты в (25) становятся известными, и мы получаем аппроксимацию искомой функции  $л(\varphi)$ . Если принять  $n=1$ , то должно получиться решение, которое дается формулой (22).

Приведенные формулы составляют основу разработанного вычислительного алгоритма. При его реализации для вычисления интегралов применялись простые квадратурные формулы типа прямоугольников или трапеций, а линейная система в обратной задаче решалась методом Гаусса. Приведем некоторые результаты выполненных расчетов. Рассмотрим пористую среду с действительной относительной диэлектрической проницаемостью материала скелета, который заполнен водой с действительной частью проницаемости  $\epsilon_R' = 7$  и проводимостью  $\gamma = 1$  См.

Для оценки достоверности разработанных алгоритмов решения обратной задачи используем решение прямой задачи. Принимаем в зависимости (20)  $w=1$ ,  $m_1 = л_1 = 1$ . Тогда,  $м(\varphi) = \text{const}$ , а сама функция, как и в [18], принимается кусочно-постоянной

$$м(\varphi) = \begin{cases} 4, & 0 \leq \varphi \leq 0,2 \\ 0, & 0,2 \leq \varphi \end{cases}. \quad (27)$$

Случай  $l(\varphi) = \text{const}$  отвечает модели однородно связанных пор [18 – 21]. Другой, более сложный случай дает, так называемая, центрально пористая, модель [18]. Эта модель предусматривает, что перколяционная функция  $l(\varphi)$  описывается зависимостью  $l(\varphi, R) = 1 - [1 - a(\varphi, R)]^5$ , где  $a(\varphi, R)$  – корень некоторого кубического уравнения,  $R$  – параметр, который характеризует форму пор [18].

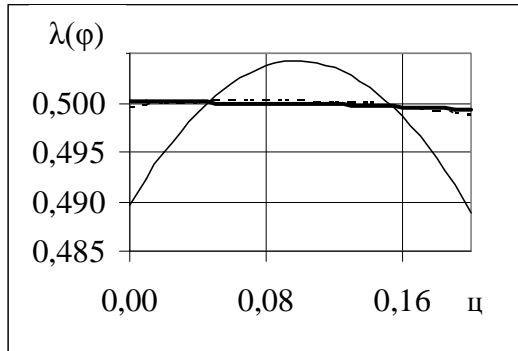
Зависимости действительной части диэлектрической проницаемости и проводимости пористой среды от безразмерной частоты для этих случаев получены ранее в [18 – 21]. При рассмотрении обратной задачи пористых сред используем зависимость  $\epsilon = \epsilon(\omega)$ , полученную для случая  $l = 0,5$ , полученную при решении прямой задачи. Решение задачи по формуле (21) для некоторых частот приведено в табл. 2. При этом частоты нормируются частотой  $\omega_0 = 1/(\epsilon_0 \epsilon_w') = 1,43 \text{ ГГц}$ , где  $\omega_0$  соответствует частоте релаксации волны. Из табл. 2 следует, что решение обратной задачи практически совпадает с начальным значением, заложенным в прямую задачу. Погрешность определения действительной части не превышает 2 %. Мнимая часть должна обращаться в нуль, а получено значение для мнимой части имеет порядок  $10^{-3}$ , что гораздо меньше действительной части, а отклонение от нуля не превышает 0,6 %.

**Таблица 2.** Решение обратной задачи в случае модели однородно связанных пор

$\omega/\omega_0$	Рел	$\text{Im}l \cdot 10^3$
0,0100	0,4944	0,5120
0,0158	0,4943	0,7333
0,0251	0,4941	1,0062
0,0398	0,4938	1,3321
0,0631	0,4935	1,7218
0,1000	0,4930	2,1920
0,1585	0,4924	2,7616
0,2512	0,4916	3,4521
0,3981	0,4905	4,2693
0,6310	0,4889	5,1131
1,0000	0,4867	5,5981

Решим эту же задачу с помощью аппроксимации полиномом. Результаты расчетов зависимости  $l(\varphi)$ , которые получены при разных значениях постоянных  $b, v$  в уравнении (13), приведены на рис. 7. Сплошной тонкой линией обозначена кривая, полученная для значений  $b=1, v=0$ , то есть для решений только действительного уравнения; пунктирной – для  $b=0, v=1$ , то есть для решений только мнимого уравнения; сплошной жирной – для  $b=1, v=-10$ . При этом в полиноме (14) было удержано три члена. Расчеты выполнялись в частотном диапазоне  $0,01\omega_0 \leq \omega \leq \omega_0$ .

Следовательно, в первом случае решение становится неустойчивым; второй вариант, в принципе, является удовлетворительным, но наилучшие результаты дает уравнение, полученное с помощью линейной комбинации действительной и мнимой частей при указанных значениях коэффициентов. Заметим, что результаты могут быть улучшены при применении в аппроксимации неизвестной функции систем ортогональных полиномов Лежандра или Чебышева и более точных квадратурных формул.



**Рис. 7.** Функция перколяции в зависимости от пористости, восстановленная по решению прямой задачи для модели однородно связанных пор

### Определение влажности грунтов по коэффициентам отражения электромагнитных волн

В системе точного земледелия важное значение имеет возможность получения достоверной информации о строении почв, их влажности и глубине проникновения влаги непосредственно в процессе выполнения определенных технологических процессов. Взятие проб почв и проведение лабораторных анализов требует существенных временных затрат, и этот метод не может быть реализован в полевых условиях. Известно, что присутствие воды в почвах изменяет их физико-механические характеристики, и, в частности, диэлектрическую проницаемость. Связано это с тем, что комплексная диэлектрическая проницаемость воды в диапазоне СВЧ сильно отличается от диэлектрической проницаемости почв, и поэтому эффективная диэлектрическая проницаемость увлажненных почв также будет отличаться от соответствующей характеристики сухих грунтов. Это изменение будет существенно влиять на коэффициент отражения электромагнитной волны от поверхности грунта. Поскольку задача измерения коэффициента отражения экспериментально решена [22], это, в принципе, позволяет по изменению коэффициента отражения оценивать количество влаги, присутствующей в почве.

Методы радиометрии почв в диапазоне НВЧ с использованием самолетов и космических спутников применяются уже много лет [22]. Практическое применение этих методов нуждается не только в высокочувствительной измерительной аппаратуре, но и эффективных методиках решения обратных задач, когда по данным измерений в реальном режиме времени, возможно, надежно определить необходимые параметры. Поэтому разработка таких методик остается и до сих пор актуальной задачей.

В упрощенной модели почву целесообразно рассматривать как плоскостроистое полупространство. Наличие неровностей и неоднородностей на поверхностях раздела слоев, как показано в [22] является несущественным, и им на практике можно пренебречь. В [7] изложена методика нахождения коэффициента отражения электромагнитных волн от слоисто-неоднородных сред, то есть решена прямая задача. Ниже рассматриваются неоднородно увлажненные почвы в условиях неглубокого уровня залегания грунтовых вод (1,5 – 3,5 м). Для определения диэлектрических проницаемостей слоев и их толщин предлагается методика численного решения обратной задачи взаимодействия электромагнитных волн со слоистой средой. Это позволяет с использованием соотношений для вычисления эффективной комплексной диэлектрической проницаемости пористых сред и решений указанной выше прямой задачи получить количественную оценку присутствия влаги в почвах.

Как и выше, для решения обратной задачи строится функционал невязок между расчетными и экспериментальными данными, минимум которого находится методом случайного поиска с применением специальных двоичных последовательностей. Экспериментальные зависимости коэффициентов отражения, нужные для определения параметров слоев, в данной работе моделируются с использованием решений прямой

задачи, а отклонение от точного решения (модель погрешности измерений) задается с помощью генератора случайных чисел. Это позволяет сравнить решение обратной задачи с заданными параметрами слоев и получить оценки определения необходимых параметров.

Рассматривается неоднородный слой почвогрунта, расположенного между двумя бесконечными полупространствами: верхнее – это воздух, а нижнее – это или грунтовые воды, или некоторое другое основание. В неоднородном слое почвы комплексная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  является функцией вертикальной координаты  $z$ , то есть  $\epsilon = \epsilon(z)$ . Аналитические решения задач о распространении волн в неоднородных слоях известны лишь для некоторых функций [23], поэтому такую зависимость мы моделируем кусочно-постоянной функцией, и почвогрунты рассматривается, как система плоско параллельных  $n$  слоев с разными комплексными диэлектрическими проницаемостями  $\epsilon_j = \epsilon'_j + i\epsilon''_j$  и толщинами  $d_j$  ( $j=1,2,\dots,n$ ). Заметим, что в практических расчетах удобно задавать действительную часть диэлектрической проницаемости и тангенс диэлектрических потерь  $\text{tg}\delta = \epsilon''/\epsilon'$ , или использовать проводимость  $y$ , которые известны из эксперимента.

Комплексный коэффициент отражения  $R$  будем рассматривать как функцию параметров слоев, которая также зависит от угла падения  $\vartheta$  и длины плоской электромагнитной волны  $\lambda$ , как от параметров, то есть

$$R = F(\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \vartheta; \lambda). \quad (28)$$

Если  $\vartheta \neq 0$ , то коэффициент отражения будет также зависеть от поляризации волны, и фактически будем иметь две зависимости для перпендикулярной и параллельной поляризаций

$$R_{\perp} = F_1(\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \vartheta; \lambda), \quad R_{\parallel} = F_2(\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \vartheta; \lambda). \quad (29)$$

Радиометрия позволяет определить зависимости коэффициентов отражения в диапазоне СВЧ от угла падения и длины волны, то есть получить экспериментальные зависимости

$$R_{\perp}^{ex} = G_1(\vartheta; \lambda), \quad R_{\parallel}^{ex} = G_2(\vartheta; \lambda). \quad (30)$$

Задача заключается в определении параметров  $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n; d_1, d_2, \dots, d_n$  по экспериментальным зависимостям (30), то есть из системы функциональных уравнений

$$F_1(\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \vartheta; \lambda) = G_1(\vartheta; \lambda), \quad F_2(\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \vartheta; \lambda) = G_2(\vartheta; \lambda). \quad (31)$$

Из уравнения (31) следует, что существует две возможности для определения неизвестных параметров слоев. Первая связана с использованием спектральной зависимости, то есть зависимости коэффициента отражения от длины волны (частоты) при фиксированном угле падения, а вторая – с использованием результатов сканирования по углам падения для фиксированной длины волны для одного или обоих типов поляризаций. На практике возможно применение обоих подходов, но второй имеет определенные преимущества, поскольку позволяет использовать при измерениях лишь один генератор электромагнитного излучения. Ниже рассматривается вторая возможность, но, как следует заметить, в разработанной методике возможно применение комбинированного метода, когда используется информация, полученная в определенном интервале углов сканирования и некотором диапазоне длин волн.

После нахождения диэлектрических проницаемостей количество влаги  $c_w$  (объемной концентрации воды в слоях почв) может быть оценено за формулой Бруггемана-Ханаи [3, 13])

$$c_w = (e_c - e_{ef}) / (e_c - e_w) \sqrt[3]{e_w / e_{ef}}, \quad (32)$$

или формулой Брауна

$$\sqrt{e_{ef}} = c_w \sqrt{e_w} + (1 - c_w) \sqrt{e_{ef}}. \quad (33)$$

В формулах (32), (33)  $e_c$  – диэлектрическая проницаемость сухой почвы,  $e_{ef}$  – найдена эффективная диэлектрическая проницаемость слоя увлажненной почвы,  $e_w$  – диэлектрическая проницаемость воды. Возможно применения и других известных формул для вычисления диэлектрической функции двух или три компонентных матричных дисперсных систем [3, 13, 14].

Система (31) содержит  $3n$  неизвестных, поскольку комплексная диэлектрическая проницаемость каждого слоя определяется двумя действительными параметрами, например, действительной частью  $e'$  и  $e''$ . Если выбрать в интервале углов сканирования  $\Theta = [0, \Theta_{max}]$  соответствующее число  $m$  точек  $\Theta_l (l=1, 2, \dots, m)$ , то можно получить систему алгебраических нелинейных уравнений вида

$$F_1(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \Theta_l; \pi) = G_1(\Theta_l; \pi), \quad F_2(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \Theta_l; \pi) = G_2(\Theta_l; \pi), \quad (34)$$

которая, в принципе, позволяет определить искомые параметры. Поскольку коэффициенты отражения – это комплекснозначные функции, то фактически, система содержит вдвое больше уравнений (для модуля и фазы коэффициента отражения).

Систему (34) целесообразно применять при небольшом количестве слоев, когда для коэффициентов отражения можно получить конечные формулы [23]. Тогда для ее решения может быть применен метод Ньютона, и поскольку выражения для частных производных оказываются достаточно громоздкими, то при разработке численных алгоритмов их будет удобно заменить конечными разностями.

Для большого количества слоев при применении импедансного метода коэффициенты отражения вычисляются рекуррентно [23], поэтому получение явных выражений становится практически невозможным. Кроме того, переход от функциональных уравнений (31) к алгебраической системе (34) означает, что уравнения (31) будут строго выполняться лишь в некоторых точках промежутка изменения угла сканирования. Если учесть, что экспериментальные значения коэффициентов отражения будут всегда иметь определенную погрешность, то найденные из системы (34) значения неизвестных параметров слоев могут давать большие расхождения в других точках. Более надежным нам кажется применение метода невязок, который был использован выше при решении обратных задачи оптической и диэлектрической спектроскопии. Согласно ему в рассмотрение вводится обобщенный функционал метода наименьших квадратов вида

$$\begin{aligned} \Pi(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \pi) = \\ \delta \sum_{l=1}^m [F_{1l}(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \pi) - G_{1l}(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \pi)]^2 + \\ + \beta \sum_{j=1}^m [F_{2j}(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \pi) - G_{2j}(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \pi)]^2, \quad (35) \end{aligned}$$

где  $\delta, \beta$  – некоторые весовые коэффициенты.

Заметим, что на практике обычно измеряется коэффициент отражения по мощности, потому в уравнении (35) в дальнейшем будем понимать модули коэффициентов отражения. Функционал (36) – это сумма средне квадратичных отклонений рассчитанных и измеренных значений модулей коэффициентов отражения, и его можно обобщить, добавив соответствующие суммы средне квадратичных отклонений по фазе.

Задача заключается в отыскании таких значений параметров слоев, которые обеспечивают минимуму функционалу, то есть

$$\Psi(e_1, e_2, \dots, e_n; d_1, d_2, \dots, d_n; \mu) \rightarrow \min. \quad (36)$$

В суммах, которые входят в равенство (35) число  $m$  может быть произвольным, и, в отличие от системы (32), не должно равняться числу неизвестных параметров слоев. Для достижения лучшей согласованности с экспериментальными данными число точек в интервале углов сканирования следует принять из условия  $m > 3n$ .

Интервалы изменения неизвестных параметров слоев ограничены, и обычно известны из физических соображений. Тогда можно записать, что

$$e_j^{\min} \leq e'_j \leq e_j^{\max}, e_j^{\min} \leq e''_j \leq e_j^{\max}, \quad d_j^{\min} \leq d_j \leq d_j^{\max}. \quad (37)$$

Это значит, что минимум (10) ищется в  $3n$  – мерном замкнутом параллелепипеде, и этот минимум для непрерывной функции, которой является функционал (36), всегда будет существовать. Как и выше, минимум будем искать методом случайного поиска с применением ЛП- $\tau$  последовательностей.

Изложенные выше формулы составляют основу разработанного вычислительного алгоритма. Для его апробации были смоделированы экспериментальные данные, полученные с помощью решения прямой задачи. Для этого использовалась формула

$$G_j(\vartheta; \mu) = (1 + \text{до}) F_j(\vartheta; \mu), \quad (38)$$

где  $\vartheta$  – равномерно распределена случайная величина в интервале  $(-1,1)$ , которая в расчетах была смоделирована с помощью генератора случайных чисел,  $d$  – амплитуда относительной погрешности.

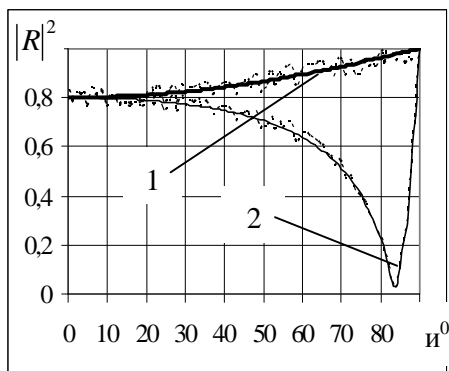
Как тестовую задачу рассмотрим отражение электромагнитной волны от полпространства, за которое примем толщу морской воды (зависимости модуля коэффициента отражения для такой задачи приведены в [23]). Результаты расчетов показаны на рис. 8 для двух поляризаций. Смоделированные экспериментальные данные показаны пунктиром. Для амплитуды погрешности были приняты значение 5 %, для параметров воды  $e_1 = 81$ ,  $\text{tg}d_1 = 0,05$ ; для воздуха  $e_2 = 1$ ,  $\text{tg}d_2 = 0$ . По этим данным были получены восстановленные значения диэлектрических характеристик воды  $e_1 = 77,5$ ,  $\text{tg}d_1 = 0,03$ .

Расчетные зависимости коэффициента отражения от угла сканирования для этих значений параметров показаны на рис. 8 сплошными линиями. При расчетах было использовано 512 пробных точек, значения весовых коэффициентов принимались равными единице, и это позволило достичь погрешности при восстановлении диэлектрической проницаемости меньше 5 %, то есть в пределах погрешности смоделированного эксперимента. Одновременно погрешность восстановления тангенса диэлектрических потерь в данном случае оказалась достаточно большой (до 40 %), но это расхождение, как показывают прямые расчеты, не существенно влияет на коэффициент отражения.

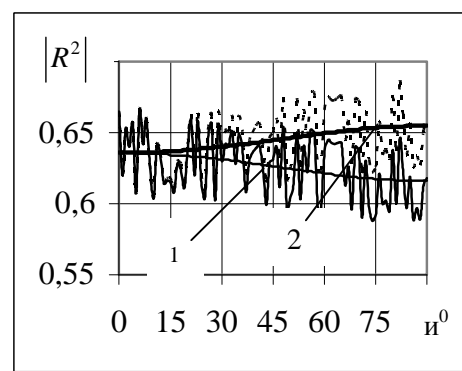
В качестве второго примера рассмотрим слой увлажненной почвы, толщиной 0,3 м, который расположен между воздухом и сухим глиняным полупространством. Значение параметров, принятых при симуляции эксперимента и восстановленные значения тех же параметров приведены в табл. 3. Заданная амплитуда погрешности при расчетах принималась равной 5 %. Результаты симуляции эксперимента и расчетные зависимости коэффициентов отражения при восстановленных параметрах полупространства и слоя почвы для двух типов поляризации волны приведены на рис. 9.

**Таблица 3.** Заданные и восстановленные значения диэлектрических характеристик слоя увлажненной почвы и нижнего полупространства

Слой	Заданные значения		Восстановленные значения	
полупространство	$\epsilon'_3 = 6,0$	$tg\delta_3 = 0,05$	$\epsilon'_3 = 5,5$	$tg\delta_3 = 0,06$
увлажненный грунт	$\epsilon'_2 = 20$	$tg\delta_2 = 0,10$	$\epsilon'_2 = 22,5$	$tg\delta_2 = 0,09$



**Рис. 8.** Коэффициенты отражения от поверхности морской воды; 1 – параллельная поляризация; 2 – перпендикулярная поляризация; расчетные значения при восстановленных параметрах изображены сплошными линиями, а экспериментальные – точками.



**Рис. 9.** Коэффициенты отражения от слоя увлажненной почвы; 1 – параллельная поляризация; 2 – перпендикулярная поляризация; расчетные значения при восстановленных параметрах изображены сплошными линиями, а экспериментальные – точками.

В данном случае погрешность при восстановлении диэлектрических характеристик находится в пределах 10 %. Заметим, что погрешность может быть уменьшена при увеличении числа тестовых точек и сужении промежутков поиска неизвестных значений параметров.

### Выводы

Таким образом, разработана эффективная методика решения обратных задач оптической спектроскопии, которая практически реализована на примере анализа экспериментальных спектров ослабления света в водных суспензиях наночастиц серебра. Получены гистограммы распределения размеров ядер и оболочек двухслойных частиц, а также гистограмма распределения их внешних размеров, которая качественно совпадает с экспериментальной. Найдены средние значения радиусов ядер, толщин оболочек и внешних диаметров частиц. При этом достигнуто достаточно хорошее соответствие рассчитанного и экспериментального спектров. Разработанная методика позволяет установить размеры оболочки, значения которых определить непосредственным измерением очень трудно, если вообще возможно. Следовательно, у исследователей появляется



возможность более полного изучения структуры неоднородных наночастиц с помощью непосредственной обработки экспериментальных спектров без использования дорогостоящих и трудоемких методов электронной микроскопии.

Разработан достаточно эффективный подход к решению сложного интегрального уравнения, описывающего обратную задачу для определения функции плотности распределения перколяционной составляющей в пористых средах. Эта составляющая фактически определяет эффективную диэлектрическую проницаемость пористой среды с проводящими включениями. Особенно такая схема важна при определении влажности и внутренней структуры разнообразных почв в системе точного земледелия с помощью бесконтактных радиолокационных методов зондирования.

Разработана эффективная методика определения параметров слоев почв по данным радиометрии в диапазоне СВЧ с помощью решения обратной задачи. Приведенные тестовые примеры расчетов свидетельствуют, что погрешность нахождения значений диэлектрических параметров находится в пределах погрешности смоделированных экспериментальных зависимостей коэффициентов отражения. Это свидетельствует о больших перспективах применения разработанной методики при использовании методов радиометрии.

Работа выполнена при частичном финансировании договора № 28 в рамках совместного проекта НАН Украины и фонда фундаментальных исследований РАН.

## Литература

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1986. – 288 с.
2. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. – К.: Наук. думка, 1986. – 543 с.
3. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света электромагнитного излучения малыми частицами. Перевод с англ. – М: Мир, 1986. – 664 с.
4. Оптичні властивості малих частинок срібла в колоїдних розчинах / Л.Г. Гречко, Г.М. Єременко, Г.В. Крилова, Л.Б. Лерман, Н.П. Смірнова, Н.Г. Шкода // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2004. – № 4. – С. 450 – 458.
5. Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Шкода Н.Г. Ефективна діелектрична проникність матричних дисперсних систем з багатошаровими включеннями: пряма та обернена задачі // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2004. – № 2. – С. 474 – 482.
6. Обернені задачі оптичної спектроскопії для суспензій наночастинок срібла / Л.Г. Гречко, Л.Б. Лерман, Н.Г. Шкода, С.В. Шостак, Т.В. Скоробагатий // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2006. – № 3. – С. 470 – 478.
7. Визначення вологості пористих середовищ з використанням методів радіометрії (обернені задачі) / Я.С. Криворучко, Л.Б. Лерман, М.О. Лющенко, Р.Я. Якимів // Вісн. Національного технічного університету “Київський політехнічний інститут. Сер. Радіотехніка. Радіоапаратуробудування. – 2007. – № 35. – С. 49 – 53.
8. Зуев В.Е., Наац И.Э. Обратные задачи лазерного зондирования. – Новосибирск: Наука, 1982. – 242 с.
9. Соболев И.М., Статников Р.Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. – М.: Наука, 1981. – 111 с.
10. Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Шкода Н.Г. Розсіювання електромагнітного випромінювання на багатошаровій кулі // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2004. – № 3. – С. 376 – 384.
11. Гмурман В.Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и статистике. – М: Высш. школа, 1979. – 400 с.

12. Jonson P.V., Christy R.W. Optical Constants of the Noble Metals // *Phys. Rev. B.* – 1972. – V. 6, № 12. – P. 4370 – 4379.
13. Венгер Є.Ф., Гончаренко А.В., Дмитрук М.Л. Оптика малих частинок і дисперсних середовищ. – Київ: Наук. думка. – 1999. – 348 с.
14. Эффективные электродинамические параметры гетерогенных систем / Л.Г. Гречко, В.В. Митрич, А.Н. Морозов, В.М. Огенко, В.Ю. Решетняк // Препринт Ин-та теор. физики АН УССР. – Киев, 1990. – № 90. – 31 с.
15. Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Шкода Н.Г. Багатошаровий еліпсоїд в електричному полі // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2004. – № 1. – С. 312 – 319.
16. Поверхневі моди в багатошарових частинках еліпсоїдальної форми / Л.Г. Гречко, Л.Б. Лерман, Л.М. Білокриницька, С.В. Шостак // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2006. – № 4. – С. 416 – 425.
17. Asami K., Hanai T., Koizumi N. Dielectric Analysis of Escherichia Coli Suspension in the Light of the Theory of Interfacial Polarization // *Biophys. J.* – 1980. – V. 31. – P.215 – 228.
18. Hilfer R. Dielectric response of porous medium // *Phys. Rew.* – 1991. – V. 44. – P. 60 – 76.
19. Ефективна діелектрична проникність зволжених дисперсних систем в наближенні локальної пористості / В.В. Бойко, Л.Г. Гречко, Н.Г. Шкода, С.В. Шостак // Механізація сільськогосподарського виробництва. – 2002. – Т. 12. – С. 103 – 113.
20. Діелектрична проникність пористих середовищ Л.Г. Гречко, Л.Б. Лерман, С.В. Шостак, Ю.П. Склярів // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2005. – № 2. – С. 287 – 293.
21. Узагальнений метод ефективного середовища для розрахунку діелектричної проникності неоднорідних середовищ / Л.Г. Гречко, Л.Б. Лерман, О.Я. Покотило, Н.Г. Шкода, С.В. Шостак // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2005. – № 3. – С. 490 – 496.
22. Шутко А.М. СВЧ-радиометрия водной поверхности и грунтов. – М.: Наука, 1986. – 189 с.
23. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. – М.: Наука, 1973. – 343 с.

## **INVERSE TASKS OF OPTICAL AND DIELECTRIC SPECTROSCOPY OF NANOPARTICLE SUSPENSIONS AND DEWY POROUS MEDIA**

**L.B. Lerman, M.A. Lyuschenko, Ya.S. Krivoruchko,  
N.G. Shkoda, S.V. Shostak**

*Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine  
General Naumov Str. 17, 03164 Kyiv-164  
National Agriculture University, Geroiv Oborony Str. 15, 03041 Kyiv-41*

*Inverse tasks have been examined of mathematical physics, related to determination of size distributions of including in the matrix-disperse systems, findings of layer complex permittivities of the multi-layered elliptical inclusions, and properties of laminate solids from experimental data. In particular, the problems of optical and dielectrical spectroscopy, inverse task of theory of porous media, and also some tasks of radiometry, are examined. In order to solve the indicated class of tasks, a general approach, is used based on minimization of the discrepancy functional between calculated and experimental information. The solution of the minimization task is built by the method of random search with use of special binary sequences. Graphic and tabular material is resulted, illustrating possibilities of the approach developed.*