

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ» (НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, НГУ)

Факультет **ФИЗИЧЕСКИЙ**

Кафедра Квантовой оптики

Направление подготовки **03.06.01 ФИЗИКА И АСТРОНОМИЯ**

Образовательная программа: **01.04.05 ОПТИКА**

**НАУЧНЫЙ ДОКЛАД
ОБ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТАХ ПОДГОТОВЛЕННОЙ НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОН-
НОЙ РАБОТЫ (ДИССЕРТАЦИИ) АСПИРАНТА**

Инжеваткин Константин Георгиевич

(Фамилия, Имя, Отчество автора)

Тема работы **РАЗВИТИЕ МЕТОДА ДИСКРЕТНЫХ ДИПОЛЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ
СВЕТОРАССЕЯНИЯ ОПТИЧЕСКИ МЯГКИМИ ЧАСТИЦАМИ**

«К защите допущен»

Заведующий кафедрой:

Академик РАН, д.ф.-м.н., проф.,

Шалагин А.М./.....

(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....20...г.

Научный руководитель

к.ф.-м.н.,

Ст. преподаватель ФФ НГУ

Юркин М.А./.....

(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....20...г.

Дата защиты: «.....».....20...г.

Новосибирск, 2023

Оглавление

Введение.....	3
1. Приближение электрического поля внутри частицы	7
1.1 Система линейных уравнений в МДД	7
1.2 Методы приближения электрического поля	8
1.3 Приближение ВКБ с преломлением.....	10
1.3.1 Основная формулировка.....	10
1.3.2 Области с разным числом решений.....	12
1.3.3 Различные версии ВКБп	16
1.4 Результаты и обсуждения.....	18
1.4.1 Наблюдения в отдельных точках	18
1.4.2 Оценка ошибки из-за отражений от границы.....	22
1.4.3 Численные исследования различных вариантов ВКБп	23
1.4.4 Сходимость итерационного алгоритма в МДД.....	30
1.5 Выводы по первой главе.....	36
2. Оптимизация расчётов в МДД для нескольких m	38
2.1 Предварительные детали.....	38
2.2 Обобщение метода для матрицы из МДД	39
2.2.1 Обобщённое разложение Холецкого	41
2.2.2 Изменение формул при смещениях	43
2.2.3 Критерий останова	43
2.3 Тестирование	44
2.4 Выводы по второй главе.....	46
3. Блочные методы	47
3.1 Предварительные детали.....	47
3.2 Тестирование	49
3.3 Выводы по третьей главе	51
4. Заключение.....	51
Список сокращений	54
Список литературы	55

Введение

Рассеяние и поглощение света повсеместно присутствуют в нашей жизни и широко используются во многих научных и технологических приложениях [1,2]. Задачи светорассеяния обычно делятся на два вида: прямые и обратные. *Прямая задача* связана с моделированием измеряемых оптических свойств, когда и рассеиватель, и падающее излучение полностью заданы. *Обратная задача* – получение характеристик частиц по измеренной картине светорассеяния. Обратная задача более сложная и интереснее для практических применений, но её решение подразумевает многократное решение прямой задачи [3].

Одним из широко используемых методов для решения прямой задачи светорассеяния является метод дискретных диполей (МДД). Он позволяет моделировать рассеяние и поглощение света частицами различной формы и внутренней структуры [4,5]. Главная идея метода заключается в замене рассеивателя набором диполей (обычно это маленькие кубики равного объёма), а затем решается система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для поиска векторов электрического поля (или векторов поляризации) внутри рассеивателя. Поскольку число диполей обычно велико, то решение СЛАУ прямыми методами занимает много времени, и поэтому используют итерационные подходы, которые находят решения с помощью последовательных приближений. МДД используется в разных областях науки, от биологии и наночастиц до атмосферных аэрозолей и межзвёздной пыли. Важной областью применения являются оптически мягкие частицы, для которых показатель преломления рассеивателя близок к внешней среде $|m - 1| \ll 1$, m – относительный показатель преломления. Такие частицы можно обнаружить в биомедицине (бактерии [6,7], клетки крови [8–11], ткани [12]), оптике океанов [12,13], и мягком рентгеновском рассеянии на наночастицах [14]. С одной стороны, МДД высокоэффективный для таких частиц по сравнению с другими методами [15–18]. С другой стороны, он всё ещё требует много времени в случае больших частиц и огромных баз данных [8,19–21].

Время расчётов МДД увеличивается одновременно и с дифракционным параметром x , и с m из-за увеличения числа диполей и замедления сходимости итерационного метода [22], здесь $x = kR$, k – волновое число, R – эффективный радиус частицы. Хотя существуют современные формулировки МДД для решения этой проблемы [23,24], они незначительно помогают для случая оптически мягких частиц, отчасти потому, что сходимость итерационного решателя относительно быстрая [25]. Очевидная идея для ускорения итерационного алгоритма – умный выбор начального электрического поля (или поляризации диполей) внутри частицы. Эта идея была использована для многократных запусков МДД, на основе интерполяции внутреннего поля, начиная с результатов моделирования для частиц с похожими параметрами [26,27]. Однако, ускорение значительно только для плотного набора параметров, что редко встречается на практике.

В качестве альтернативы, начальная оценка эклектического поля может быть получена из некоторого простого для вычислений приближения, которое мы исследуем в первой главе данной работы. В общем, существуют много приближений для оптически мягких частиц [12]. Однако, они преимущественно используются для моделирования параметров рассеяния вдали от частицы, в то время как внутреннее поле является промежуточной величиной – в некоторых случаях оно даже не доступно явно. Подходящими методами являются приближения Рэлея-Ганса-Дебая (РГД) [28] и Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ) [28,29], а также более сложное приближение Рытова [30] и методы трассировки лучей [31,32]. Чем точнее приближение, тем быстрее можно ожидать сходимость итерационного решателя. Хотя область применимости ВКБ обычно упоминается как $|m - 1| \ll 1$ (предполагая, что она не зависит от x) [28,29,33], это связано с отсутствием работ с большими частицами. Малую точность ВКБ при больших размерах частиц можно наблюдать в моделировании [29], аналогичный вывод получил Х. К. ван де Хюлст для метода аномальной дифракции (АД) [34], где он также упоминал о необходимости учёта преломления. Таким образом, наша главная цель в первой главе – улучшить ВКБ

так, чтобы точность метода зависела в основном от m (равномерно по всем размерам). Данный улучшенный метод, который мы назвали ВКБп, имеет широкий диапазон потенциальных применений. Другая цель первой главы – применить метод в качестве начальной оценки электрического поля в МДД, т.е. ускорить метод без уменьшения конечной точности.

Другой подход к ускорению вычислений МДД является Метод сопряжённых градиентов со сдвигами. Он предназначен для набора СЛАУ, имеющих специальную структуру: $(\mathbf{A} + \sigma_i \mathbf{I})\mathbf{x}_i = \mathbf{b}$, где $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $\sigma_i \in \mathbb{C}$ – сдвиг для i -й системы и $i \in \{1, 2, \dots, s\}$, \mathbf{I} – единичная матрица. Оказывается, что решения \mathbf{x}_i для различных сдвигов можно получить в рамках одного итерационного решения (за время сравнимое с решением одной СЛАУ). В рамках МДД, это может значительно ускорить вычисления для множества задач, когда форма частиц постоянная, а меняется только m .

Третьим видом оптимизации, который мы рассматриваем в данной работе является Блочный метод сопряжённых градиентов. Данный подход применим к систем вида $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$, где $\mathbf{X}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times s}$, где s – число блоков. Метод позволяет разным системам (для разных векторов в правой части) обмениваться информацией в процессе итерационного решения и, тем самым, ускоряет вычисления всех. Однако, ожидаемое ускорение меньше, чем для предыдущего метода со сдвигами. Тем не менее, данный метод может значительно ускорить вычисления в задачах, где требуется усреднение величин рассеяния (сечения поглощения, экстинкции) по ориентациям частицы, или используется возбуждение точечным источником или быстрым электроном с переменным положением.

Первая глава организована следующим образом. Исходя из предварительных деталей (раздел 1), мы описываем ВКБп (раздел 1.3). Мы проводим обширный теоретический анализ для случая шаров (раздел 1.3.2), что приводит нас к определению различных версий ВКБп (раздел 1.3.3). Далее, мы численно проверяем как точно приближения описывают электрическое поле внутри шара (разделы 1.4.1–1.4.3). В самом конце, мы систематически тестируем

ВКБп и другие приближения для инициализации итерационного алгоритма в МДД (раздел 1.4.4). Далее мы делаем выводы по первой главе (раздел 1.5).

Во второй главе мы, исходя из предварительных деталей (раздел 2.1), обобщаем метод сопряжённых градиентов для работы с матрицей из МДД (раздел 2.2). Далее проводим тестирование метода (раздел 2.3) и делаем выводы (раздел 2.4).

Третья глава посвящена блочным методам. После общего описания данных методов, мы реализуем некоторые из них в МДД (раздел 3.1). Далее тестируем их (раздел 3.2) и в конце делаем выводы (раздел 3.3).

1. Приближение электрического поля внутри ча- стицы

Данная глава была написана на основе опубликованной работы [35].

1.1 Система линейных уравнений в МДД

В данной главе мы рассматриваем монохроматические электромагнитные волны с временной зависимостью $\exp(-i\omega t)$ в однородной немагнитной изотропной среде. Кроме этого, мы всегда предполагаем, что линейно поляризованная волна $[\mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$ падает на рассеиватель, где \mathbf{k} волновой вектор, \mathbf{r} – радиус вектор.

Узким местом МДД является решение большой системы линейных уравнений. Система может быть записана в следующем виде [36,5]:

$$\mathbf{E}_i^{\text{inc}} = \bar{\alpha}_i^{-1} \mathbf{P}_i - \sum_{j \neq i} \bar{\mathbf{G}}_{ij} \mathbf{P}_j, \quad (1)$$

где $\mathbf{E}_i^{\text{inc}}$ – падающее электрическое поле в центре i -го диполя с радиус вектором \mathbf{r}_i , \mathbf{P}_i – поляризация диполя, $\bar{\alpha}_i$ – тензор поляризуемости и $\bar{\mathbf{G}}_{ij}$ – тензор Грина в свободном пространстве, действующий между \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j . Ур. (1) имеет простой физический смысл – падающее электрическое поле в точке \mathbf{r}_i ($\mathbf{E}_i^{\text{inc}}$) образуется за счёт поля i -го диполя в этой точке и поля от остальных диполей. Вектор поляризации можно записать следующим образом:

$$\mathbf{P}_i = V_d \chi_i \mathbf{E}_i, \quad (2)$$

где \mathbf{E}_i – общее поле в \mathbf{r}_i , V_d – объём диполя и χ_i – восприимчивость среды. χ_i и $\bar{\alpha}_i$ определяются показателем преломления в \mathbf{r}_i .

Программный пакет ADDA [25], который в этой работе используется для численных тестов, решает эквивалентную форму СЛАУ [37]:

$$\sum_j \bar{\mathbf{A}}_{ij} \mathbf{x}_j = \mathbf{b}_i \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\beta}_i \mathbf{E}_i^{\text{inc}}, \quad \text{где} \quad (3)$$
$$\bar{\alpha}_i = \bar{\beta}_i^T \bar{\beta}_i, \quad \mathbf{x}_i \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\beta}_i^{-T} \mathbf{P}_i, \quad \bar{\mathbf{A}}_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\mathbf{I}} \delta_{ij} - \bar{\beta}_i \bar{\mathbf{G}}_{ij} \bar{\beta}_j^T.$$

На первый взгляд кажется, что эта форма более сложная, однако в итоге мы получаем матрицу $\bar{\mathbf{A}}_{ij}$, которая является комплексно-симметричной и Якоби-предобусловленной (имеет единичную диагональ). Оба метода, прямой и итерационный могут быть использованы для решения СЛАУ, но, поскольку прямой метод намного медленнее в большинстве случаев, только итерационные методы используются в высокопроизводительных пакетах на основе МДД [5]. По этой причине в работе мы используем итерационные методы.

1.2 Методы приближения электрического поля

Поскольку \mathbf{E}_i является неизвестным параметром СЛАУ (3), мы хотим приблизить его наиболее точно и затем использовать как начальную оценку итерационного метода. Самым простым приближением внутреннего поля является предположение, что оно не меняется внутри частицы и равно падающему [$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r})$]. Этот метод называется приближением Рэлея-Ганса-Дебая (РГД) [28] или борновским приближением [30]. Его достоверность основана на предположении, что частица оптически мягкая, и фазовый сдвиг ρ незначителен, т.е.

$$p \stackrel{\text{def}}{=} |m - 1| \ll 1, \quad \rho \stackrel{\text{def}}{=} 2xp \ll 1, \quad (4)$$

здесь мы ввели параметр оптической мягкости p .

Более точным приближением является метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ) [28,29]. Главная идея метода – направление распространения и амплитуда падающей волны не меняются внутри частицы, но волна подвергается дополнительной фазовой задержке, пропорциональной $(m - 1)$. Для простоты, мы предполагаем, что частица однородная (т.е. m не зависит от \mathbf{r}), хотя приближение ВКБ отлично работает и с неоднородными частицами. Оценки по порядку величины далее в этой главе применимы и к неоднородным частицам, если m заменить на средний показатель преломления. Явное выражение для электрического поля:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 + imk|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|], \quad (5)$$

где \mathbf{r}_1 – точка входа луча на поверхности частицы, такая что $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ направлен вдоль \mathbf{k} .

Для метода ВКБ требуется $p \ll 1$, но p может быть любым, однако, применимость для $x \gg 1$ неизвестна (далее обсуждается в разделе 1.3.3). С одной стороны, приведённые выше аргументы относительно распространения волн напрямую применимы только для крупных частиц, когда волновой фронт внутри частицы можно считать плоским на масштабе длины волны. С другой стороны, в случае умеренного и малого значения x ($x \lesssim 1$) внутреннее поле ВКБ асимптотически эквивалентно РГД, которое справедливо при условии (4). Аналогично, метод аномальной дифракции (АД) и дифракция Фраунгофера являются следствиями ВКБ [38]. В частности, результаты для АД можно получить если умножить электрическое поле ВКБ на $2/(m + 1)$, что является коэффициентом прохождения для плоской волны падающей вдоль нормали к поверхности частицы. То же самое было предложено для уточнения ВКБ [29,33], но этим коэффициентом можно пренебречь при $p \ll 1$. Приближение эйконала, также известное как приближение высоких энергий, получается, если в Ур (5) член $(m - 1)$ заменить на $(m^2 - 1)/2$ [28]. Таким образом, можно рассматривать ВКБ как простой представитель целого класса приближений, которые эквивалентны по внутреннему полю для оптически мягких частиц.

В общем, существуют и более сложные приближения, включающие приближение Рытова [30] и метод трассировки лучей [31,32]. Они распространяют луч или его фазу вдоль направления падения с учётом явлений дифракции и являются точными при $x \gg 1$ (в дополнение к $p \ll 1$). Однако, для этих методов требуется решение вспомогательных уравнений, и это не простая задача для частиц произвольной формы. Поэтому мы не рассматриваем эти приближения далее в этой работе.

В дополнение к приближению ВКБ мы предлагаем его расширение, которое учитывает преломление на границе частицы (далее обозначаем как ВКБп).

Детали описываются в следующем разделе, но главная мотивация предлагаемого улучшения состоит в том, что даже малый угол преломления [$\mathcal{O}(p)$] может приводить к значительным боковым смещениям (и фазовым сдвигам) на размере частицы, если ρ является большим. Именно в этой области мы ожидаем, что новое приближение окажется наиболее полезным. Условие $\rho \geq 1$ вместе с $p \ll 1$ подразумевает, что частица очень большая ($x \gg 1$) – поэтому, ГО также применима. Однако вычисление внутреннего поля в рамках ГО значительно сложнее, чем для ВКБп. Тем не менее, ВКБп можно рассматривать и как оптически-мягкий предел ГО, когда пренебрегают внутренними отражениями.

1.3 Приближение ВКБ с преломлением

1.3.1 Основная формулировка

Здесь мы детально подробно разберём простой случай – однородный шар. Луч распространяется вдоль оси z , падает на поверхность шара и преломляется по закону Снеллиуса $n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_t$, где n_1, n_2 – показатели преломления среды и шара соответственно, θ_i – угол падения, θ_t – угол прохождения. Луч остаётся внутри меридианной плоскости [39], которая определяется точкой падения на поверхность шара и осью z . Без потери общности будем считать, что это yz -плоскость. Посмотрите Рис. 1, здесь A – точка падения, B – произвольная точка внутри шара, Δ – угол преломления. На данном этапе поляризация нам не важна. Центр системы координат выбран внутри шара, и все координаты нормированы на радиус R . Другими словами, мы предполагаем, что $R = 1$, в то время как его фактическое значение важно только относительно k , выраженного значением x .

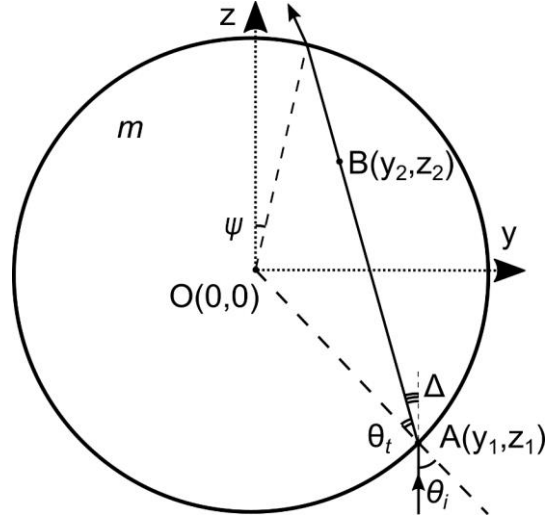


Рис. 1. Распространение лучей внутри меридианной плоскости.

Поскольку новое приближение тоже основано на Ур (5), нам нужно найти длину пути луча, проходящего через точку В внутри частицы. С одной стороны, используя закон Снеллиуса, получаем

$$\begin{aligned} \tan \Delta &= \tan(\theta_i - \theta_t) = \frac{\tan \theta_i - \tan \theta_t}{1 + \tan \theta_i \tan \theta_t} \\ &= \frac{\sin \theta_i (\sqrt{m^2 - \sin^2 \theta_i} - \cos \theta_i)}{\sin^2 \theta_i + \cos \theta_i \sqrt{m^2 - \sin^2 \theta_i}}. \end{aligned} \quad (6)$$

С другой стороны, геометрические соображения для шара ($y_1 = \sin \theta_i$, $z_1 = -\cos \theta_i$) дают:

$$\tan \Delta = \frac{\sin \theta_i - y_2}{z_2 + \cos \theta_i}. \quad (7)$$

Здесь мы предполагали, что точка В находится в правой половине сечения шара (также как на рисунке Рис. 1), т.е. $y_2 \geq 0$ и $0 \leq \theta_i \leq \pi/2$. Приравнивая выражения (6) и (7), мы получим уравнение для неизвестного угла θ_i (определяющее точку падения А):

$$\frac{\sin \theta_i - y_2}{z_2 + \cos \theta_i} = \frac{\sin \theta_i (\sqrt{m^2 - \sin^2 \theta_i} - \cos \theta_i)}{\sin^2 \theta_i + \cos \theta_i \sqrt{m^2 - \sin^2 \theta_i}}. \quad (8)$$

Для обобщения данных рассуждений на произвольную частицу требуется только изменить Ур. (7). Для неоднородной частицы это потребует нескольких

уравнений, следовательно, более практичным подходом может быть распространение части или всего волнового фронта, как это делается для выпуклых многогранников в ГО, см., например, [40,41].

Чтобы решить Ур. (8), мы разработали итерационный алгоритм, основанный на методе простой итерации (см. [35] Приложение А). Он надежно работает для любой точки В внутри шара, что может привести к нулю, одному или двум решениям — см. примеры на Рис. 2.

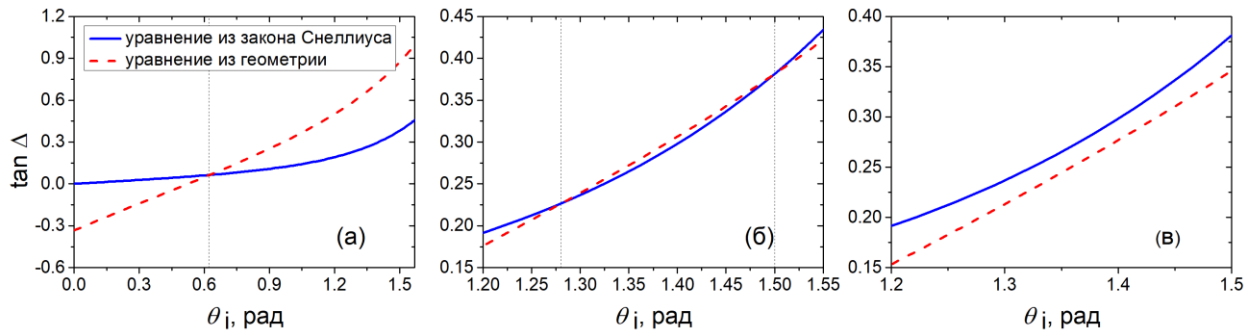


Рис. 2. Тангенс угла преломления по отношению к углу падения для различных точек В внутри шара с $m = 1.1$: (а) $y_2 = 0.5, z_2 = 0.5$, (б) $y_2 = 0.78, z_2 = 0.5$, и (в) $y_2 = 0.8, z_2 = 0.5$. Эти примеры показывают разное число решений Ур. (8), которые изображены вертикальными пунктирными линиями.

1.3.2 Области с разным числом решений

Чтобы лучше понять обнаруженные области, давайте рассмотрим декартов и касательный лучи [42,43]. В рамках ГО декартов луч уходит дальше всего в область тени внутри шара. Будучи аттрактором других рассеянных лучей, он является основной причиной образования радуги; вот почему он также известен как луч радуги. Он определяется следующим образом:

$$y = \sin \psi_c + k_1(\cos \psi_c - z) = \sin \theta_c - k_1(z + \cos \theta_c), \quad (9)$$

$$k_1 \stackrel{\text{def}}{=} \tan\left(\frac{\theta_c - \psi_c}{2}\right), \quad \psi_c \stackrel{\text{def}}{=} 2 \arcsin\left(\frac{\sin \theta_c}{m}\right) - \theta_c, \quad (10)$$

$$\theta_c \stackrel{\text{def}}{=} \arcsin \sqrt{\frac{4 - m^2}{3}},$$

где ψ_c – критический (наибольший) угол (если смотреть из центра шара) для точки, где луч светит на заднюю поверхность шара (Рис. 1, точка В на Рис. 3),

в то время как θ_c соответствует углу падения. Касательный луч пересекает шар при $\theta_i = \pi/2$:

$$y = 1 - k_2 z, \quad (11)$$

$$k_2 \stackrel{\text{def}}{=} \cot \theta_g = \sqrt{m^2 - 1}, \quad \theta_g \stackrel{\text{def}}{=} \arcsin \frac{1}{m}, \quad (12)$$

где θ_g – угол прохождения касательного луча. Эти лучи показаны на Рис. 3 для специального случая $m = \sqrt{2}$ – значение, при котором касательный луч пересекает точку $(y, z) = (0, 1)$. В последующем анализе мы в основном считаем, что $m \leq \sqrt{2}$ для того чтобы иметь одинаковое описание характерных областей внутри шара.

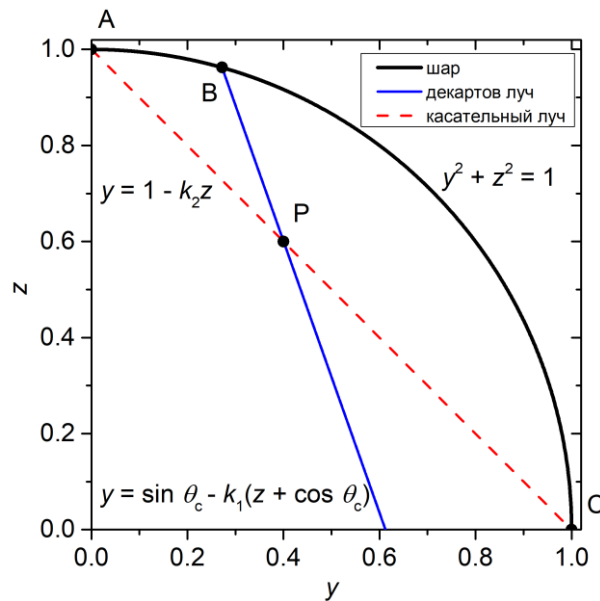


Рис. 3. Декартов и касательный лучи для шара с $m = \sqrt{2}$. Эти лучи разделяют области с различным числом решений в Ур. (8). При уменьшении m обе точки А и В смещаются вправо.

Когда θ_i увеличивается от 0 до $\pi/2$, соответствующая точка на задней поверхности двигается сначала от центральной оси к точке В ($\theta_i = \theta_c$), а затем – обратно к точке А. Поэтому разумно предположить, что ни один из лучей не пересекает область, образованную отрезками ВР, РС и дугой ВС. При этом два луча пересекают область, ограниченную отрезками АР, ВР и дугой АВ. Для того, чтобы протестировать это эмпирическое представление, мы провели рас-

чёт количества решений с помощью алгоритма, описанного выше, и поместили результаты на Рис. 4 для трёх различных m . Хотя в целом декартов и касательный луч точно описывают границы областей с разным числом решений, вблизи их пересечения возникает некоторая ошибка – часть области двойного решения приходится правее декартового луча. Хотя эта ошибка увеличивается с увеличением m , для оптически мягких частиц ею можно пренебречь.

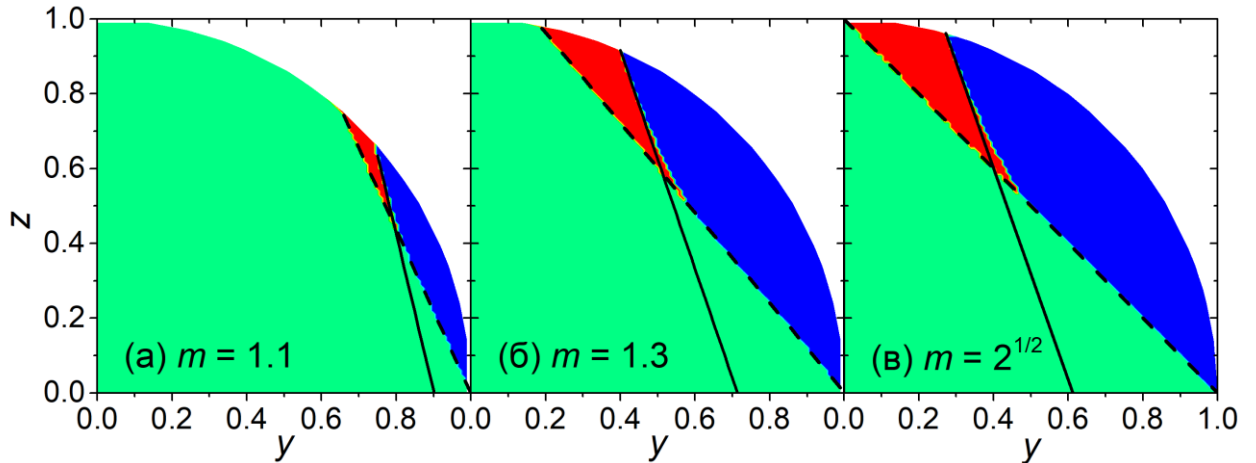


Рис. 4. Число решений Ур. (8) в зависимости от точки внутри шара для трёх различных m . Зелёный, красный и голубой цвет соответствуют одному, двум и нулю решений, прямая и пунктирная линия – декартовому и касательному лучу.

Непосредственным следствием такого неточного описания является быстрая оценка объёмов V_0 и V_2 областей внутри шара, соответствующих нулю и двум решениям Ур. (8). Эти оценки важны для дальнейшего анализа, т.к. количество решений влияет на расчёт внутреннего поля в приближении ВКБ. Единственная сложность связана с тем, что нам нужно рассматривать 3D осесимметричные (относительно оси z) объёмы, а не 2D области на Рис. 3. Используя стандартную вычислительную геометрию, мы получаем (для $m \leq \sqrt{2}$):

$$\begin{aligned}
 V_2 = & \pi \int_{z_P}^{z_B} dz [y_B + k_1(z_B - z)]^2 + \pi \int_B^A dz (1 - z^2) \\
 & - \pi \int_P^A dz (1 - k_2 z)^2 \stackrel{\text{def}}{=} I_{PB} + I_{BA} - I_{PA},
 \end{aligned} \tag{13}$$

где:

$$I_{PB} = \frac{\pi}{3k_1}(y_P^3 - y_B^3), \quad I_{BA} = \frac{\pi}{3}[z_A(3 - z_A^2) - z_B(3 - z_B^2)], \quad (14)$$

$$I_{PA} = \frac{\pi}{3k_2}(y_P^3 - y_A^3),$$

$$y_B = \sin \psi_c, \quad z_B = \cos \psi_c, \quad y_A = \frac{2}{m^2} - 1, \quad (15)$$

$$z_A = \frac{2}{m^2} \sqrt{m^2 - 1}, \quad y_P = \frac{k_2(y_B + k_1 z_B) - k_1}{k_2 - k_1}.$$

Сумма $V_0 + V_2$ определяется исключительно касательным лучом и задаётся выражением:

$$V_0 + V_2 = \pi \int_0^{z_A} dz [1 - z^2 - (1 - k_2 z)^2] = \frac{4\pi (m^2 - 1)^{3/2}}{3 m^4}, \quad (16)$$

которое является точным в отличие от Ур. (13) и примерно на 15% меньше по сравнению с численными результатами, посчитанными по Рис. 4 (данные не показаны). Мы строим V_0, V_2 как функцию параметра p на Рис. 5 (для вещественного m).

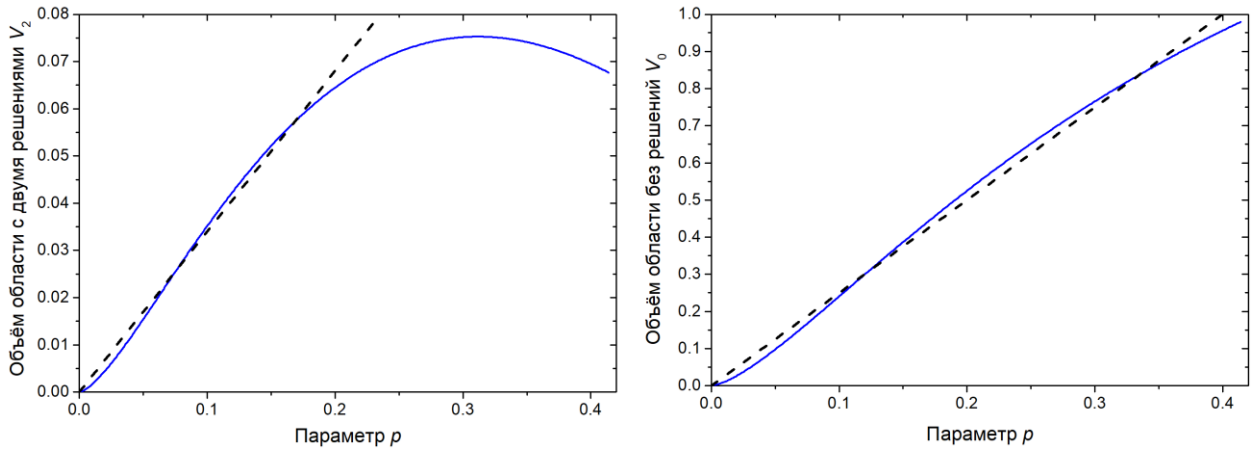


Рис. 5. Объём областей с двумя решениями и без них внутри единичного шара от p . Объёмы рассчитаны по Ур. (13)–(16). Они соответствуют красной и синей области на Рис. 4. Пунктирные линии показывают линейные приближения, заданные Ур. (18).

Первый вывод заключается в том, что V_0 превосходит V_2 примерно в 10 раз. Поэтому вышеупомянутая неточность в расчёте V_2 не сильно влияет на V_0 поскольку $V_0 + V_2$ остаётся точным. В пределе $p \rightarrow 0$ оба объёма ведут себя как $p^{3/2}$, в частности:

$$V_0 \cong 10.1p^{3/2}, \quad V_2 \cong 1.71p^{3/2}, \quad (17)$$

где коэффициент для их суммы следует из Ур. (16), в то время как для отдельных коэффициентов требуются громоздкие оценки, начиная с Ур. (13). Однако в промежуточном диапазоне p кривые на Рис. 5 заметно близки к линейным

$$V_0 \approx 2.5p, \quad V_2 \approx 0.34p. \quad (18)$$

Точность этого приближения для V_2 ухудшается при $p \geq 0.2$, отчасти из-за неточности Ур. (13), но Ур. (18) по-прежнему можно использовать как оценку сверху для всего приведённого диапазона p .

Далее мы будем пользоваться обозначениями R_0, R_1, R_2 . Данные обозначения соответствуют областям внутри шара без решений, с одним и двумя решениями Ур. (8) (см. Список сокращений).

1.3.3 Различные версии ВКБп

Далее давайте обсудим различные версии ВКБп, зависящие от координат точки внутри шара. После, мы протестируем данные версии. Простой рецепт – когда имеем одно решение Ур. (8), то мы находим точку входа луча и применяем Ур. (5) с одной лишь разницей что $\mathbf{r} - \mathbf{r}_1$ теперь не параллелен \mathbf{k} . Дополнительно можно учесть трансформацию амплитуды волны \mathbf{E}_0 за счет поворота поляризации (при наличии составляющей внутри меридианной плоскости), изменение её нормы за счёт коэффициентов Френеля и за счёт кривизны поверхности шара. Последнее основано на геометрическом описании фокусировки волнового фронта, что приводит к простым, хотя и громоздким выражениям [44–48].

Для точки в R_0 естественно предположить, что $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$. Тем не менее, мы также попробуем стандартный подход ВКБ, т.к. Ур. (5) с распространением волны вдоль \mathbf{k} можно однозначно использовать для любой точки внутри шара. R_2 является наиболее сложной в расчётах. Самый простой вариант для неё аналогичен стандартному ВКБп, при этом мы отбрасываем одно из решений (оставляя только решение с меньшим θ_i). Другой вариант – рассмотреть оба решения и сложить рассчитанные электрические поля. Этот подход

успешно используется в ГО (например, [49]), но известно, что вблизи каустик он не работает из-за бесконечной плотности лучей [50]. Именно такой каустикой является декартов луч, и во многих практических задачах (малых p и умеренно больших ρ) все точки с двумя решениями находятся от него на расстоянии не более нескольких длин волн. При этом амплитуда поля вблизи каустики значительно выше, чем в остальной части шара. К счастью, область V_2 является наименьшей, поэтому мы ожидаем, что даже совершенно неправильное описание $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ в этой области не нарушило бы всего приближения ВКБп.

Для завершения теоретического обсуждения оценим порядки ошибок различных приближений. Далее мы рассмотрим общий случай, когда расчётная точка находится вдали от границы частицы, что соответствует R1. При достаточно малых p это выполняется для большинства точек внутри частицы произвольной формы. По сравнению с падающим полем формула ВКБ вводит дополнительный фазовый сдвиг $\mathcal{O}(xp)$. Следовательно, использование падающего поля приводит к ошибкам $\mathcal{O}(xp)$ во внутренних полях. Точно так же ВКБп укорачивает путь луча внутри частицы на $\mathcal{O}(xp)$, следовательно, вводит поправки $\mathcal{O}(xp^2)$ по сравнению с ВКБ.

Хотя можно предположить, что оставшаяся ошибка ВКБп равна $\mathcal{O}(xp^3)$, это завышенная оценка. Вместо этого начнем с ГО (правильного в пределе $x \rightarrow \infty$) и возьмем предел $p \rightarrow 0$. Тогда мы избавимся от всех внутренних отражений внутри частицы и сделаем коэффициенты прохождения близкими к единице. В то время как этот аргумент не работает для касательных падающих лучей (и расчётной точки вблизи границы), это существенно повлияет на рассеяние всей частицы только в случае так называемых «whispering-gallery modes», которые имеют место только для шаров с определенной комбинация x и m [51,52]. Следовательно, в подавляющем большинстве случаев погрешности ВКБп не возрастают с ростом x и имеет суммарную погрешность $\mathcal{O}(p)$. Другими словами, ВКБп представляет собой действительно малоконтрастное приближение, равномерное во всем диапазоне значений x . Напротив, ошибка

ВКБ составляет $\mathcal{O}(xp^2) + \mathcal{O}(p)$, но второй член пренебрежимо мал для больших частиц, рассматриваемых в этой работе. Описанные порядки ошибок будут проверены численно в следующем разделе.

1.4 Результаты и обсуждения

1.4.1 Наблюдения в отдельных точках

Сначала рассмотрим случай, когда падающая волна имеет линейную поляризацию вдоль оси x , т.е. перпендикулярно меридианной плоскости. Чтобы понять, насколько точно приближения описывают электрическое поле внутри шара, сравним его с точным решением (теория Лоренца-Ми [1], реализованная в пакете `Bhfield` [53]; мы использовали стандартную версию с двойной точностью) в трёх различных точках A , B , C с координатами $(x, y, z) = (0; R/2; 0, \pm R/2)$, где R – радиус шара, как показано на Рис. 6. Все эти точки находятся в $R1$. Другими словами, мы вычисляем норму разности между векторами электрического поля приближений и точным решением:

$$\delta \stackrel{\text{def}}{=} |\Delta \mathbf{E}(\mathbf{r}) / \mathbf{E}_0|, \quad (19)$$

что далее обозначается как ошибка в отдельной точке. Для этого теста мы использовали шары с $x = 50, 100, 250$ и p от 0.01 до 0.2. Типичный пример зависимости δ от p (для точки B и $x = 100$) показан на Рис. 7. Графики для других точек и размеров аналогичны (данные не показаны).

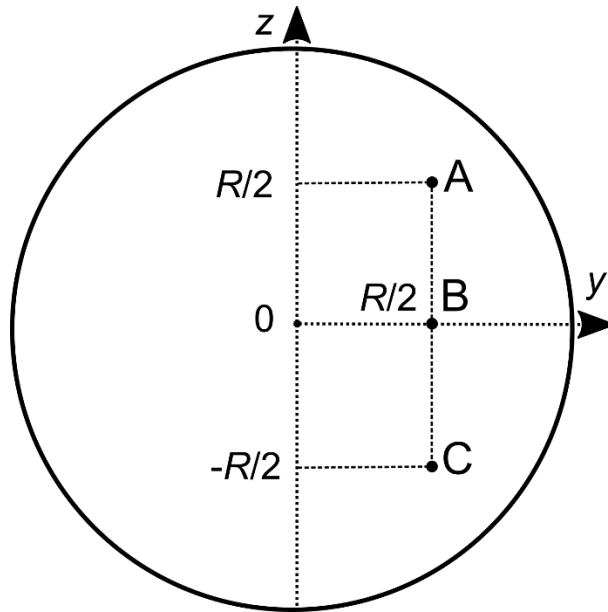


Рис. 6. Три контрольные точки (A, B, C) в меридианном сечении шара.

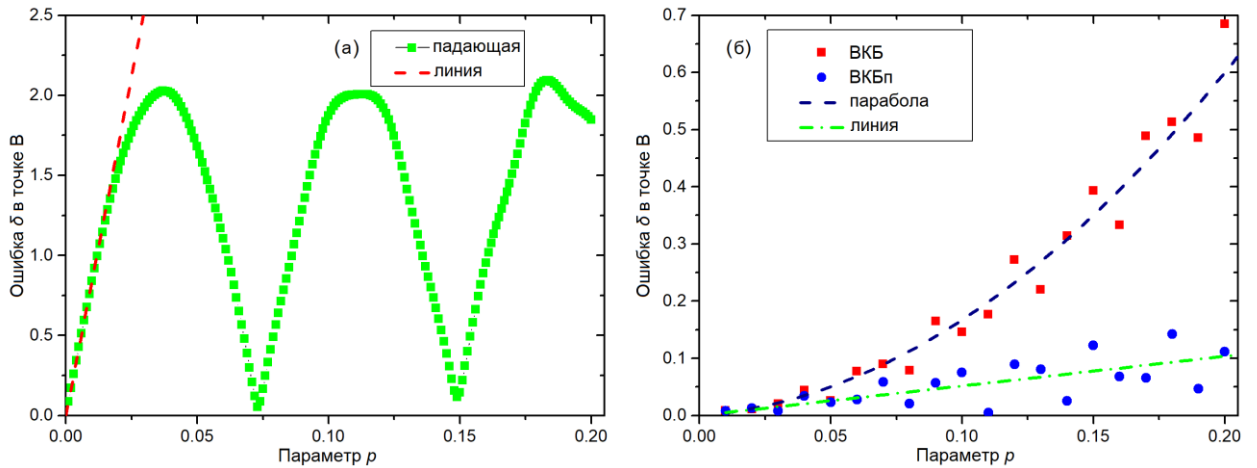


Рис. 7. Ошибка δ в точке B (в шаре с $\chi = 100$) в зависимости от параметра p при использовании (а) падающей невозмущённой волны или (б) ВКБ и ВКБп для приближения внутреннего поля. Каждая кривая подгоняется линейной или квадратичной функцией, проходящей через начало координат. На графике (а) линейная подгонка выполняется по первым 10 точкам до $p = 0.01$, а на (б) подгонка с весами выполняется по всему диапазону p .

Как и ожидалось, ошибка δ является наибольшей при использовании падающей невозмущённой волны и колеблется с p из-за наличия естественной верхней границы (поскольку и падающее поле, и точное решение имеют одинаковую норму). Для количественной оценки этой зависимости мы подгоняем первые 10 точек ($0 \leq p \leq 0.01$) прямой линией ($\delta_{\text{пад}} \approx a_{\text{пад}}p$). Напротив, ли-

нейный тренд для ВКБп присутствует во всем диапазоне p , но амплитуда колебаний вокруг этого тренда увеличивается примерно линейно с p . Таким образом, мы выполнили линейную подгонку ошибок ВКБп ($\delta_{\text{ВКБп}} \approx a_{\text{ВКБп}} p$), разделив остатки на p (веса $1/p^2$ в подгонке методом наименьших квадратов). Тренд для ВКБ явно нелинейный, поэтому мы подогнали его квадратичной функцией ($\delta_{\text{ВКБ}} \approx a_{\text{ВКБ}} p + b_{\text{ВКБ}} p^2$), но использовали те же веса для остатков. В обоих случаях ВКБ и ВКБп мы пробовали подбирать полиномы более высоких степеней, но соответствующие коэффициенты подгонки не определялись надежно (данные не показаны). Кроме того, такие же тренды сохраняются как для ВКБ, так и для ВКБп, по крайней мере, при $p \leq 0.3$, за исключением некоторых случаев с $x = 250$ (данные не показаны).

Полученные коэффициенты для трёх значений x и трёх точек А, В, С показаны на Рис. 8 вместе со стандартными отклонениями (здесь и далее планки погрешностей соответствуют одному стандартному отклонению). Можно видеть, что $a_{\text{пад.}}$ примерно пропорционален x и намного больше чем $a_{\text{ВКБ}}$ и $a_{\text{ВКБп}}$. Последние два коэффициента не зависят от x и согласуются друг с другом в пределах погрешности. Квадратичный коэффициент для ВКБ примерно пропорционален x и является доминирующим членом для $\rho \gtrsim 10$, см. определение (4). В заключение, наши численные результаты (и выполненные регрессии) полностью подтверждают теоретические оценки для порядков ошибок различных приближений внутреннего поля (раздел 1.3.3). Самое главное, что ошибки ВКБп не увеличиваются с ростом x , хотя период колебаний вокруг линейного тренда меняется.

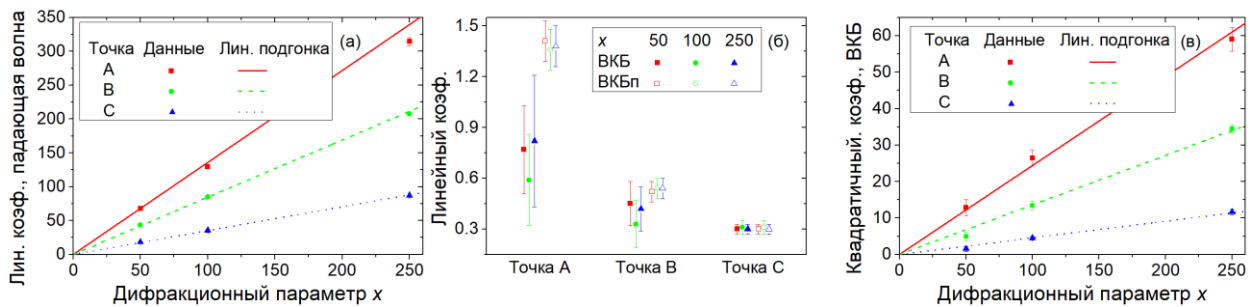


Рис. 8. Графики коэффициентов подгонки при использовании различных приближений электрического поля для трёх значений x и трёх точек А, В, С

внутри шара. (а) линейный коэффициент для падающей волны, (б) линейные коэффициенты для ВКБ и ВКБп, (в) квадратичный коэффициент для ВКБ. Данные (а) и (в) соответствуют линейной функции, проходящей через начало координат с учётом различных погрешностей.

Чтобы лучше понять происхождение этих колебаний, давайте рассмотрим поведение компонент поля в зависимости от p как для строгой теории, так и для приближений. Пример показан на Рис. 9 для того же случая, что и на Рис. 7. Хотя согласие между приближениями и точной теорией, естественно, ухудшается с ростом p , оно существенно различное для двух приближений. Основным источником ошибки ВКБ является несовпадение частоты колебаний, что приводит к увеличению ошибки с каждым периодом. С ростом x период колебаний уменьшается, следовательно, ошибка ВКБ при фиксированном p увеличивается. Напротив, ВКБп правильно воспроизводит колебания (положения минимумов и максимумов), но имеет некоторые ошибки в воспроизведении их амплитуды. Эти ошибки зависят только от p и обсуждаются в следующих разделах. Обратите внимание, что здесь используется простейший ВКБп, учитывающий только преломление и вращение вектора электрического поля из-за кривизны поверхности (другие варианты будут рассмотрены далее).

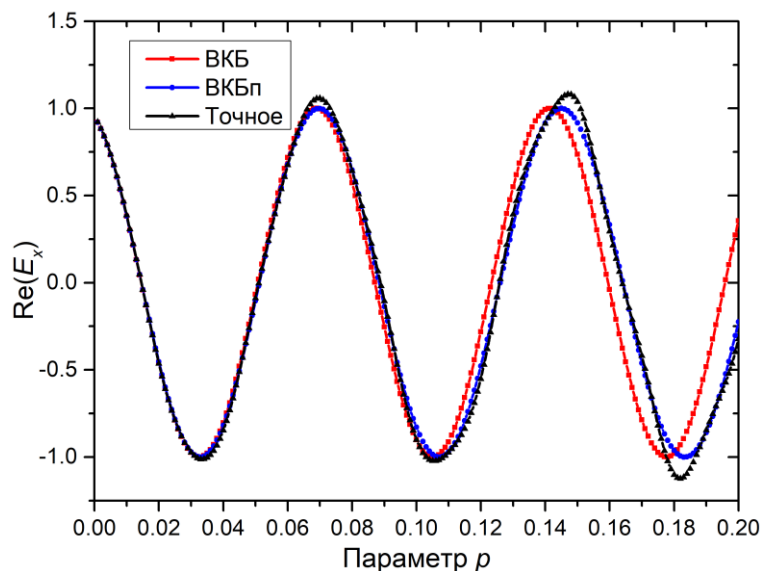


Рис. 9. Вещественная часть главной компоненты (вдоль оси x) электрического поля в точке В (в шаре с $x = 100$) в зависимости от параметра p . Поле вычисляется с помощью точной теории и приближений ВКБ, ВКБп.

1.4.2 Оценка ошибки из-за отражений от границы

В ГО, когда луч светит на поверхность частицы, часть энергии отражается. Мы обозначим интенсивность падающего луча как I_0 , тогда интенсивность отражённого света $I_0 R_1$ (на первой межфазной границе шар-среда), где $R_1 = |r_1|^2$ показывает отражательную способность [1]. Аналогично, интенсивность луча отражённого внутри шара на второй границе – $I_0(1 - R_1)R_2$, где $R_2 = |r_2|^2$ отражательная способность в этом случае.

Общая мощность падающего излучения на шар $W_{\text{пад}} = \pi R^2 I_0$, а отражённая на первой границе:

$$W_{r1} = \pi R^2 I_0 \int_0^{\pi/2} d\theta_i R_1(\theta_i) \sin(2\theta_i). \quad (20)$$

Полная мощность, отраженная один раз внутри шара, выражается аналогично:

$$W_{r2} = \pi R^2 I_0 \int_0^{\pi/2} d\theta_i [1 - R_1(\theta_i)] R_2(\theta_t) \sin(2\theta_i), \quad (21)$$

где $\theta_t = \arcsin(\sin \theta_i / m)$ – угол прохождения на первой границе, который для шара совпадает с углом падения на вторую границу (из шара во внешнюю среду), см. Рис. 1. Мы оценили соответствующие интегралы для двух видов поляризации и нарисовали их как функции от p на Рис. 10.

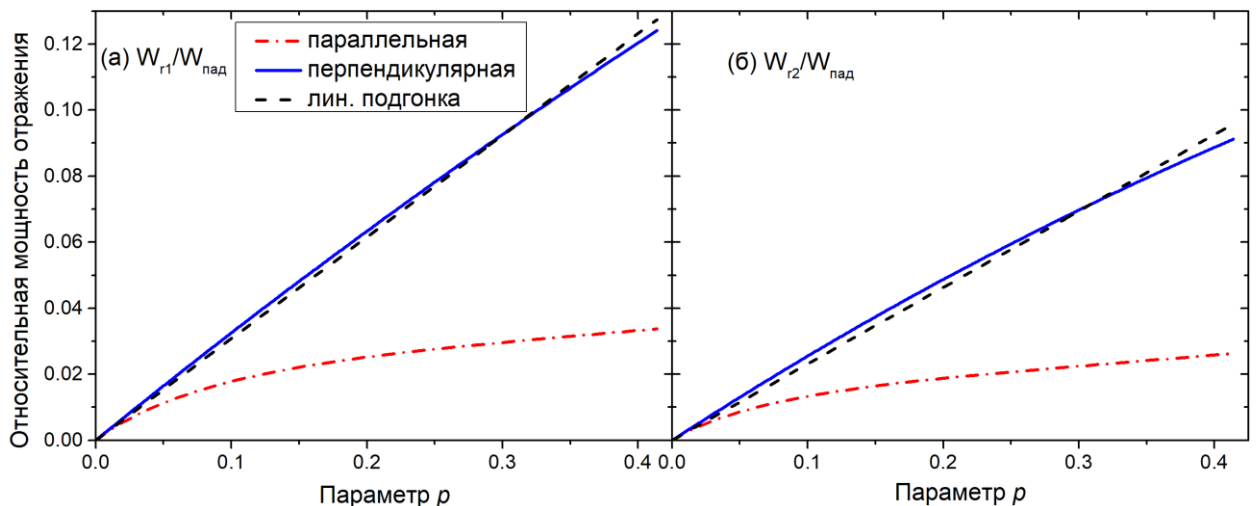


Рис. 10. Зависимость полной относительной мощности отражения от параметра p . Лучи отражаются на первой (а) и второй (б) границе в рамках ГО. Рассматриваются две падающие поляризации (параллельная и перпендикулярная меридианной плоскости). Данные для перпендикулярной поляризации подгоняются прямой линией, проходящей через начало координат.

Естественно, доля отраженной энергии увеличивается с ростом p и больше для перпендикулярной поляризации. Удивительно, но последние данные хорошо описываются линейной подгонкой, которая также показана на Рис. 10. Её функциональная форма имеет вид:

$$\frac{W_{r1}}{W_{\text{пад}}} \approx 0.31p, \quad \frac{W_{r2}}{W_{\text{пад}}} \approx 0.23p.$$

Первый вывод состоит в том, что отражённая мощность (и соответствующая ошибка, если отражения не учитываются) несущественны ($\leq 6\%$ при $p \leq 0.2$). Во-вторых, ошибки из-за пренебрежения двумя отражениями имеют противоположные знаки (при расчёте полной мощности внутри шара) и одинаковую величину. Следовательно, будет точнее пренебречь обоими отражениями, чем учитывать только первое – мы проверим это численно в следующем разделе. Учёт второго отражения приведёт нас к сложности метода, аналогичной трассировке лучей, что выходит за рамки данной работы.

1.4.3 Численные исследования различных вариантов ВКБп

Далее мы рассматриваем среднеквадратичную ошибку по объёму шара (или его части), определённую выражением:

$$\bar{\delta} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{\sum_i \delta_i^2}{N}}, \quad (22)$$

где δ_i – ошибка в отдельной точке, заданная по формуле (19), N – число точек в шаре или его части; зависит от расчётной сетки. Для расчёта по теории Лоренца-Ми мы используем `Bhfield` [53,54] для шара с $x = 50$ (сетка $160 \times 160 \times 160$) и `Scattnlay` [55,56] – для шаров большего размера. Мы не могли использовать `Bhfield` для более крупных частиц с большим количеством узлов сетки из-за долгого времени вычислений, но мы проверили, что средняя разница между электрическими полями, рассчитанная с использованием этих двух программных пакетов, не превышает 10^{-5} .

Для основной части численных тестов мы используем шары с $x = 50$ и $m = 1.01, 1.05, 1.1, 1.2, 1.3$. Рассмотрим отдельно три области внутри шара, соответствующие разному числу решений (см. раздел 1.3.2), и вычислим среднеквадратичную ошибку внутри каждой области отдельно, обозначив их $\bar{\delta}_0, \bar{\delta}_1, \bar{\delta}_2$. В R1 тестировались ВКБ и варианты ВКБп (см. раздел 1.3.3): учтено только преломления падающего луча (в.1), дополнительный учёт вращения электрического поля (в.2), коэффициента пропускания Френеля (в.3) и фокусировки волнового фронта из-за кривизны поверхности (в.4). ВКБп в.5 аналогичен в.4, но без учёта коэффициента передачи Френеля. Результаты показаны в Таб. 1.

Таб. 1. Среднеквадратичная ошибка $\bar{\delta}_1$ внутри R1 для различных m и приближений внутреннего поля.

m	ВКБ	ВКБп в.1	ВКБп в.2	ВКБп в.3	ВКБп в.4	ВКБп в.5
1.01	0.02	0.02	0.02	0.04	0.03	0.04
1.05	0.13	0.11	0.11	0.15	0.10	0.14
1.1	0.3	0.23	0.22	0.26	0.20	0.26
1.2	0.76	0.51	0.5	0.54	0.48	0.55
1.3	0.97	0.47	0.43	0.48	0.36	0.54

Видно, что все варианты ВКБп работают точнее ВКБ, кроме в.3, в.5 при $m \leq 1.05$ и в.4, $m = 1.01$. Учёт вращения электрического поля (в.2 по сравнению с в.1) полезен в ВКБп при любых m , а учёт только коэффициента передачи или фокусировки волнового фронта повсеместно вреден (в.3 и в.5 по сравнению с в.2). Напротив, объединение двух последних поправок (в.4) приводит к лучшим результатам, за исключением $m = 1.01$. Однако результаты в.4 ненамного лучше, чем в.2.

Для лучшего понимания рассмотрим карты ошибок в меридианной плоскости на Рис. 11 (данные для в.5 не показаны, но величина ошибок близка к в.4). При построении карт мы брали нулевые значения в R0; этот момент подробно обсуждаются ниже. Падающее поле поляризовано вдоль оси x (параллельно показанной плоскости), чтобы сделать эффект вращения поля во время преломления заметным.

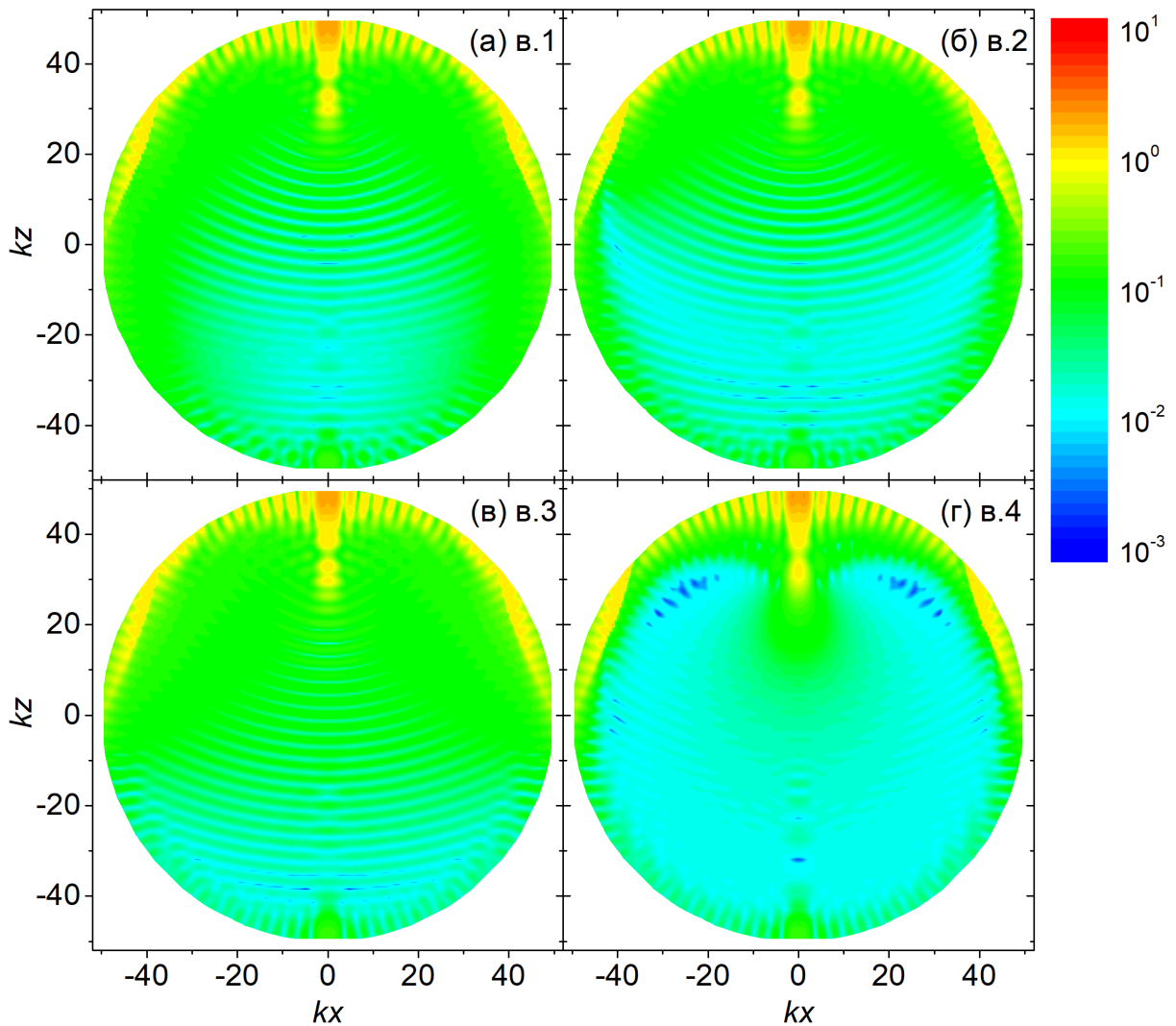


Рис. 11. Карты ошибок в отдельных точках δ (в логарифмическом масштабе) для четырёх вариантов ВКБп (см. текст для деталей). Меридианная плоскость изображена для шара с $x = 50$, $m = 1.1$, разрешение расчётной сетки – $k\Delta = 0.5$ и $y = 0$. Падающее излучение распространяется снизу вверх и поляризовано вдоль оси x .

Видно, что вращение поля (в.2) уменьшает δ по всей нижней полусфере, а в остальном мало влияет. Напротив, учёт коэффициента передачи уменьшает ошибку в нижней четверти шара и увеличивает ошибку далее по ходу фронта волны. Кроме того, дополнительный учёт фокусировки волнового фронта значительно уменьшает ошибку в нижней полусфере, но мало влияет на верхнюю (за исключением некоторых частей). Это согласуется с теоретическим выводом раздела 1.4.2 в том, что учёт первого отражения (и соответствующей передачи) имеет смысл только в том случае, если мы можем также учесть и второе отражение. В попытке понять влияние от отражений, рассмотрим более

крупную частицу ($x = 250$, сетка 500×500) с малым поглощением ($m = 1.1 + 0.01i$). Малая мнимая часть m очень слабо влияет на коэффициент прохождения [57], и прошедшую волну всё же можно считать однородной [1]. Однако затухание волны по диаметру шара существенно и уменьшает влияние вторичного отражения. Результаты для трёх вариантов ВКБп (в.2, в.3, в.4) показаны на Рис. 12.

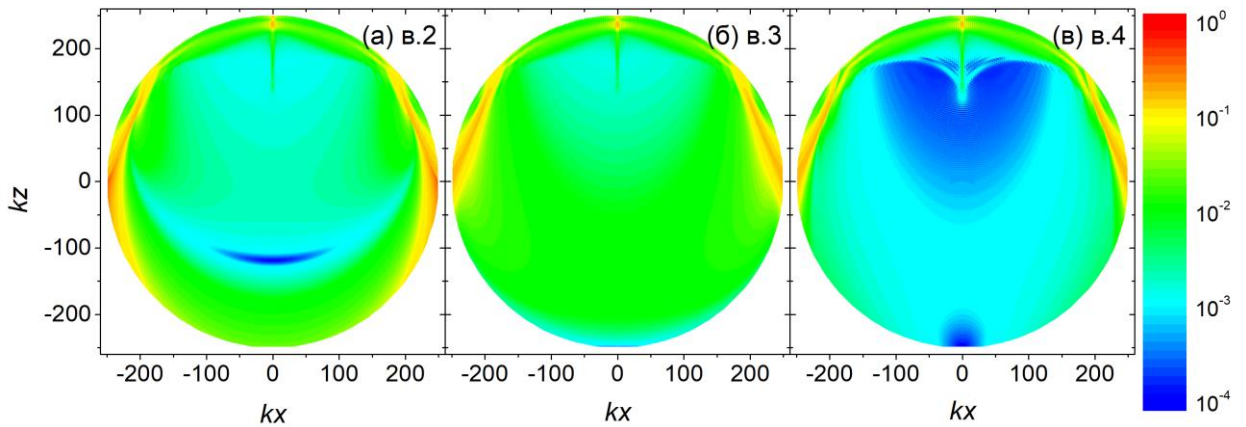


Рис. 12. Аналогично Рис. 11, но $x = 250$, $m = 1.1 + i0.01$, разрешение расчётной сетки $k\Delta = 1$. Сравниваются три варианта ВКБп.

В этом случае учёт фокусировки волнового фронта, безусловно, полезен, а эффект вторичного отражения виден только вблизи задней поверхности шара. ВКБп в.3 уменьшает ошибки вблизи входной поверхности (включая области, которым соответствуют большие θ_i) и оказывает незначительное влияние в остальной части шара. Но именно его сочетание с фокусировкой волнового фронта (в.4) творит чудеса, приводя к крайне малым ошибкам в большей части поперечного сечения шара. Этот вывод подтверждается также значениями $\bar{\delta}_1$, которые составляют 0.05, 0.03 и 0.02 для ВКБп в.2, в.3 и в.4 соответственно.

В остальной части работы мы рассматриваем только ВКБп в.2 и в.4, поскольку эти методы показали наиболее точные результаты для очень малых и больших значений p соответственно. Данные методы являются самыми простыми и успешными среди версий ВКБп.

Чтобы начать анализ R2, рассмотрим карты электрического поля, полученные суперпозицией двух лучей. Они изображены на Рис. 13 для случая

большой частицы ($x = 500$, сетка 500×500 , $m = 1.1$) и здесь видны ярко выраженные стоячие волны. Здесь мы видим интерференционную картину, которая смещается и становится правильной для случая ВКБп в.4 при качественном сравнении с в.2. В в.4 используется фокусировка фронта волны с коэффициентом $\sqrt{\frac{f_1 f_2}{(f_1 - l)(f_2 - l)}}$, где l – оптический путь, f_1, f_2 – фокусы волнового фронта (все параметры зависят от точки и направления падения луча). Луч с большим углом падения θ_i пересекает фокальную линию или каустику, которая совпадает с границей R2 и R0 (верхняя часть декартового луча) [58]. Поэтому в этом случае требуется дополнительно учесть фактор $e^{-i\pi/2}$, чтобы компенсировать возникший минус под корнем в коэффициенте фокусировки [34]. Аналогичные выводы получены расчётом $\bar{\delta}_2$: ВКБп в.2 – 0.85, в.4 – 0.65.

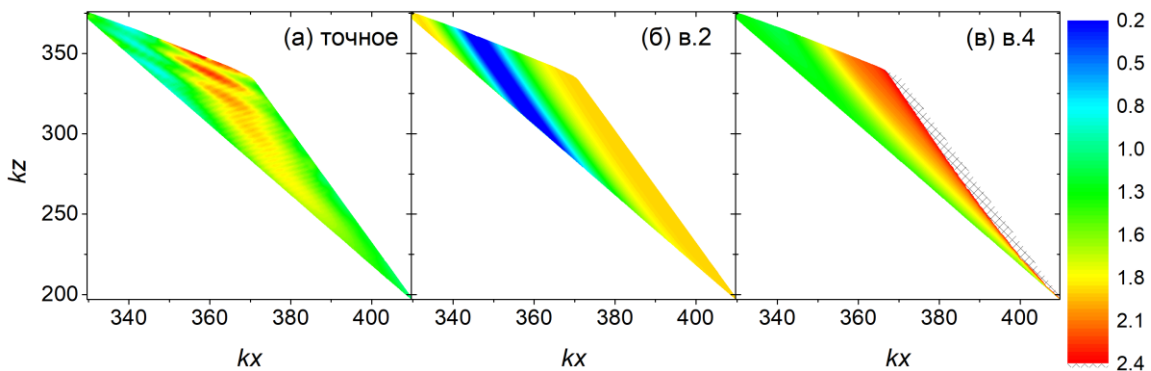


Рис. 13. Карты амплитуды электрического поля в R2 для (а) точного решения и (б, в) ВКБп в.2, в.4 соответственно (см. текст для деталей). Меридианная плоскость изображена для шара с $x = 500$, $m = 1.1$, разрешение расчётной сетки $k\Delta = 2$, и $y = 0$. Падающее излучение распространяется снизу вверх и поляризовано вдоль оси x . Заштрихованная область показывает расположение фокальной линии.

Далее мы возвращаемся к обычному шару ($x = 50$) и рассмотрим приближение электрического поля с одним лучом (с меньшим θ_i) и с двумя лучами (с дополнительной фазой). Соответствующие среднеквадратичные ошибки метода ВКБп в.2 и в.4 показаны в Таб. 2. Из таблицы видно, что ни один из вариантов нельзя назвать наилучшим. Это объясняется небольшим размером R2, поэтому на электрическое поле внутри в значительной степени влияют каустики, и стоячая волна не может быть четко различима (данные не показаны)

в отличие от гораздо большего шара на Рис. 13. При малых p эта область становится меньше длины волны, что может объяснить превосходство однолучевого ВКБп в.2 в этом случае. Но это также показывает пренебрежимо малое влияние используемого приближения на ошибку $\bar{\delta}$, рассчитанную по всему объему шара. Для больших показателей преломления ($m \geq 1.1$) ВКБп в.4 обычно предпочтительнее в.2 (в соответствии с Таб. 1), но улучшение за счёт использования двух лучей незначительно.

Таб. 2. $\bar{\delta}_2$ для R2 при различных m и приближений внутреннего электрического поля.

m	ВКБ	ВКБп в.2	ВКБп в.4
1.01	0.06	0.04	0.88
1.05	0.56	0.35	0.71
1.1	1.14	0.73	0.77
1.2	1.93	1.32	1.24
1.3	2.23	1.39	1.16

Давайте теперь рассмотрим R0. В этом случае у нас есть два варианта: ВКБ и нулевое поле; ошибки для этих вариантов представлены в Таб. 3. Удивительно что нулевое поле не является универсально полезным подходом – оно лучше только для больших m . Это связано с тем, что при умеренных значениях параметров (x и m) R0 становится уже чем длина волны. Это также наблюдается на Рис. 14, на котором представлена амплитуда электрического поля для трёх значений x (50, 250 и 500). Данные получены с помощью теории Лоренца-Ми. Результат для $x = 50$ [Рис. 14 (а)] сильно отличается от нулевого поля и похоже, что интерференция из R2 переходит (туннелирует) в R0. Этот эффект наблюдается и при больших размерах частицы [Рис. 14 (б), (в)], область перехода уменьшается с ростом x . Оставшаяся большая часть области имеет малую амплитуду электрического поля. Таким образом, подход нулевого поля – наилучший метод для достаточно больших x и m (когда ширина R0 занимает хотя бы пару длин волн), но он приводит к большим ошибкам при $m \approx 1$. В данном случае ВКБ является подходящим приближением потому,

что ВКБ и точное решение близки к падающему полю. В случае оптически мягких шаров относительный объём R_0 пренебрежимо мал, поэтому его влияние на общую ошибку $\bar{\delta}$ мало. Таким образом, самый простой вариант – использовать приближение нулевого поля во всех случаях.

Таб. 3. Среднеквадратичная ошибка $\bar{\delta}_0$ внутри R_0 для различных показателей преломления и приближений внутреннего электрического поля.

m	ВКБ	ноль
1.01	0.05	0.97
1.05	0.42	0.94
1.1	0.98	0.92
1.2	1.71	1.05
1.3	1.47	0.77

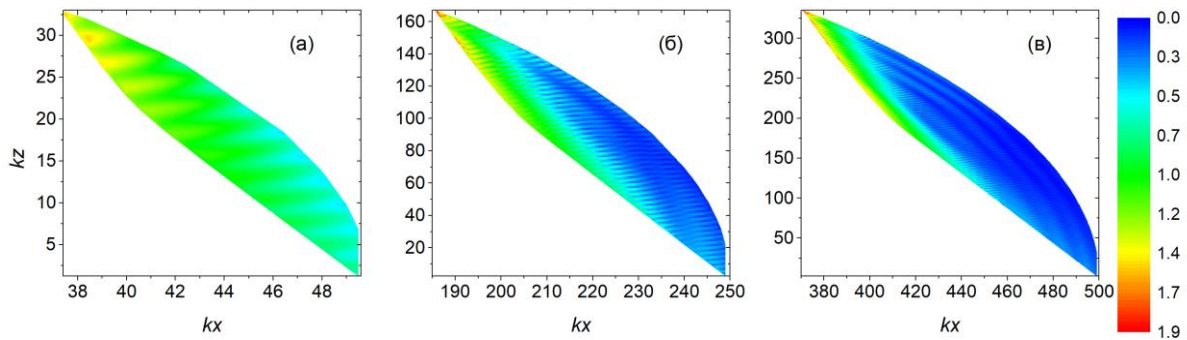


Рис. 14. Точное решение для амплитуды электрического поля в R_0 (внутри меридианной плоскости) для шаров с $x = 50, 250, 500$ и $m = 1.1$, разрешение расчётной сетки равно (а) 0.5 и (б, в) 1, а $y = 0$. Падающее излучение распространяется снизу вверх и поляризовано вдоль оси x .

Основываясь на проведённых тестах, мы определим основные варианты приближения ВКБп: ВКБп I and ВКБп II. Первый подход учитывает поворот электрического поля, но не изменение его амплитуды (ранее в.2), используется нулевое поле в R_0 и только один луч (с меньшим θ_i) в R_2 . Второй подход также учитывает поворот электрического поля, коэффициенты Френеля и фокусировку волнового фронта (ранее в.4), предполагает нулевое поле в R_0 и комбинирует два луча в R_2 . В итоге ВКБп II должен приближать электрическое поле более точно, особенно при больших ρ и/или в слабо поглощающих средах. Однако, для него требуются дополнительные расчёты. Два данных подхода встречаются в следующем разделе.

1.4.4 Сходимость итерационного алгоритма в МДД

В некоторых приложениях метод ВКБп может приближать внутреннее электрическое поле достаточно точно для быстрых расчётов величин рассеяния. Однако мы планируем использовать данный метод в более широком диапазоне приложений как первый шаг в итерационном алгоритме МДД. Таким образом, даже умеренно точное приближение может уменьшить время расчётов без изменения итоговой точности МДД.

Мы выбрали шар $x = 50$ как первый тестовый объект и рассмотрели три показателя преломления $m = 1.01, 1.05, 1.1$. Мы следили за сходимостью стандартного итерационного метода (quasi-minimal residual, QMR) в программном пакете ADDA версии 1.4.0 [25]. Здесь мы использовали 160 диполей на диаметр шара (примерно 10 диполей на длину волны). Относительная невязка:

$$\varepsilon = \frac{\|\bar{\mathbf{A}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}, \quad (23)$$

где компоненты линейной системы $\bar{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ определены в Ур. (3), а для векторов используется стандартная евклидова норма. Отметим, что начальное предположение \mathbf{x}_0 получено путём поэлементного умножения внутреннего поля на $\bar{\beta}_i$. Три варианта начальных оценок (нулевое, падающее и ВКБ) уже реализованы в ADDA и таким образом используются с помощью командной строки “-init_field {zero|inc|wkb}” [37]. Для других приближений поле ищется отдельно и передаётся в ADDA с помощью команды “-init_field read ...”. Уменьшение ε как функция числа итераций N_{it} показано на Рис. 15. Мы показываем результаты до $\varepsilon = 10^{-6}$; однако, похожая линейная сходимость этого графика сохраняется вплоть до $\varepsilon = 10^{-16}$ (данные не показаны).

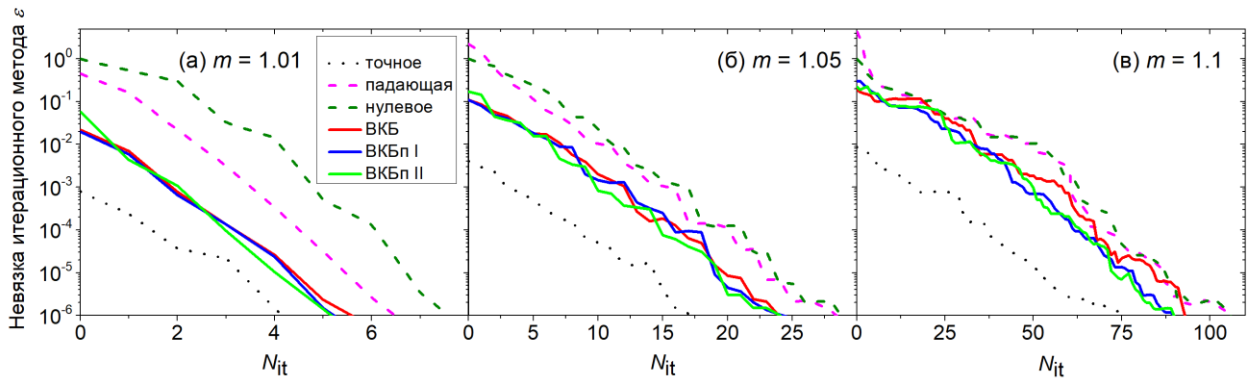


Рис. 15. Невязка итерационного метода (в логарифмическом масштабе) от числа итераций для шара с $x = 50$ и $m = 1.01, 1.05$ и 1.1 , соответствующих $\rho = 1, 5$ и 10 . Различные приближения внутреннего поля и точное решение используются для начальной оценки в итерационном методе.

Общим свойством для всех графиков является то, что скорость сходимости уменьшается с ростом m (в более общем смысле, с ростом ρ – см. Ур (4)), это хорошо известно для МДД [5]. Помимо приближения невозмущённого падающего поля, мы находили точное решение с помощью теории Лоренца-Ми. Данный подход, естественно, приводил к наискорейшей сходимости алгоритма, но удивительно, что она не идеальная (т.е. начальная невязка не равна нулю). Данный факт можно объяснить тем, что решение МДД немного отличается от точного за счёт конечной дискретизации. Поэтому, итерационный алгоритм стартуя от точного решения отклоняется от него чтобы решить СЛАУ в МДД. Кривая сходимости всё же похожа на другие кривые в Рис. 15.

Самая медленная сходимость (в терминах N_{it} для получения заданного ε) наблюдается при нулевом и падающем поле, и они очень близки (в основном в пределах 1-2 итераций) для всех случаев. Последнее не удивительно, т.к. используемый итерационный метод ищет решение в подпространстве Крылова, базис которого строится во время работы итерационного алгоритма [59,60]. При $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ этот базис равен $\{\mathbf{b}, \mathbf{A}\mathbf{b}, \mathbf{A}^2\mathbf{b}, \dots\}$, тогда как для произвольного \mathbf{x}_0 мы эффективно решаем $\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$, а базис Крылова равен $\{\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, \mathbf{A}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0), \dots\}$. Подпространство Крылова на основе $\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$ для n итераций полностью лежит внутри подпространства Крылова на основе $\mathbf{x}_0 =$

$\mathbf{0}$ для $n + 1$ итераций. Остальные небольшие различия между кривыми сходимости связаны с тем, что QMR не обязательно находит решение с минимальной невязкой в конечном подпространстве Крылова, а только квазимиимальное.

Напротив, когда \mathbf{x}_0 значительно отличается от (имеет большие компоненты, перпендикулярные) \mathbf{b} , построенное подпространство Крылова отличается, что приводит к другому поведению сходимости. Так обстоит дело и с ВКБ, и с ВКБп, и с точным решением (по крайней мере, частота колебаний отличается от частоты падающего поля). ВКБ и ВКБп дают систематическое уменьшение N_{it} , но для типичных порогов сходимости (относительной нормы невязки), 10^{-3} или 10^{-5} , оно находится в пределах 20%. При $m = 1.01, 1.05$ разница между кривыми ВКБ и ВКБп отсутствует, что и ожидается из-за относительно малых значений ρ (см. раздел 1.4). ВКБп при $m = 1.1$ даёт заметно более быструю сходимость (чем ВКБ), но уменьшение N_{it} не является систематическим и находится в пределах 20%. При этом наклон кривых во всех случаях почти одинаков, так как определяется спектром матрицы \mathbf{A} , по крайней мере, в режиме линейной сходимости [61,62]. Кроме этого, разница между ВКБп I и II для этих случаев невелика.

Далее повторяем аналогичные тесты для гораздо бóльших шаров ($x = 250$) используя точно такой же уровень дискретизации, результаты для разных m показаны на Рис. 16. Для $m = 1.01$ [Рис. 16(а)] результаты аналогичны $\rho = 5$, $x = 50$ [Рис. 15(б)]. Наибольшее отличие состоит в слиянии графиков для ВКБ, ВКБп и точного решения, что связано с тем, что различия между ними (ошибки ВКБ и ВКБп) становятся меньше, чем ошибка дискретизации МДД. Напомним, что их ошибки масштабируются как $\mathcal{O}(xp^2)$ и $\mathcal{O}(p)$, т.е. уменьшаются с x при фиксированном ρ . Для $m = 1.05$ [Рис. 16(б)] линейная сходимость при больших N_{it} дополняется интервалами стагнации (для всех графиков, кроме кривой Лоренца-Ми). Однако общие выводы остаются прежними: поведение сходимости для ВКБ и ВКБп качественно такое же, как для нулевого и падающего поля, но примерно на 20% быстрее для типичных порогов

ε. Кроме того, ВКБп приводит к несколько меньшему N_{it} (улучшение до 10%), чем ВКБ. Помимо этого, ВКБп II сходится немного быстрее (также до 10%), чем ВКБп I.

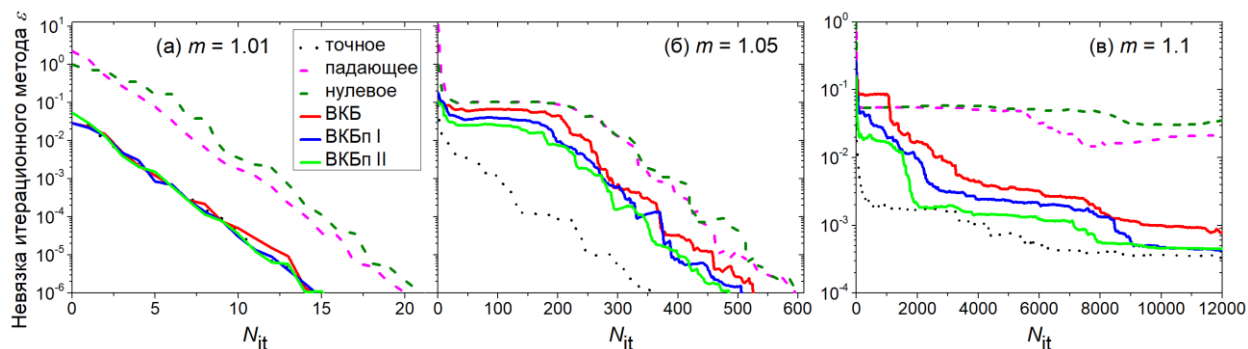


Рис. 16. Аналогично Рис. 15, но для $x = 250$. Соответствует значениям $\rho = 5, 25$ и 50 . В случае (v) моделирования остановили при $N_{it} = 12\ 000$.

При $m = 1.1$ [Рис. 16(v)] различные исходные приближения также приводят к качественно похожей сходимости, но уже с длительными интервалами стагнации, которые чередуются с более короткими линейными областями сходимости. Чтобы ограничить время моделирования мы остановились на $N_{it} = 12\ 000$. Эти данные предполагают, что кривые сходимости смещены относительно друг друга скорее вдоль вертикальной, а не горизонтальной оси (эти два описания эквивалентны для линейной сходимости). Это приводит к огромной разнице N_{it} , необходимой для достижения, например, порога $\varepsilon = 10^{-3}$. Он кажется совершенно недостижим при старте из нулевого или падающего поля, но может быть достигнут с помощью других четырёх методов (хотя и со значительными различиями между ними).

Отметим, что стагнация с медленно растущей невязкой, наблюдаемая при нулевом и падающем поле после 11 000 и 8 000 итераций, соответственно, является признаком «поломки» итерационного алгоритма, т.е. дальнейшие итерации не приведут к уменьшению невязки [22]. Хотя существуют стратегии обнаружения и, в некоторой степени, смягчения таких поломок [60], они не реализованы ни в одном пакете на основе МДД. Расхождение графиков сходимости нулевого и падающего поля, которое происходит, казалось бы, в слу-

чайной точке, также является признаком численной неустойчивости (в сочетании с квазиминимальным алгоритмом), которая аналогична поломке численного метода. Мы считаем, что старт с ВКБ, ВКБп (и даже с теории Лоренца-Ми) также не гарантирует что такие поломки не появятся снова, т.е. существует минимальный ε , который в принципе алгоритмы могут достигнуть. Однако, на практике $\varepsilon = 10^{-3}$ обычно считается как достаточная сходимость, а невязка в диапазоне 10^{-1} до 10^{-2} весьма спорная (может стать основным источником ошибок для рассчитанных величин рассеяния). Более того, наилучшее значение ε достижимое для ВКБп (и в некоторой степени для ВКБ) кажется близким к теории Лоренца-Ми, а данный подход, возможно, является наилучшим для начальной оценки поля. Интересно, что сходимость ВКБп II лучше, чем ВКБп I и разница растёт с ростом фазового сдвига ρ , что согласуется с теоретическим анализом раздела 1.4.3. В конце (приближаясь к 12 000 итераций) ВКБп I и II, и точная теория сходятся почти к одинаковой ε .

Важно отметить, что Рис. 16(в) является примером улучшения, где использование ВКБ или ВКБп показывает разницу между поломкой итерационного алгоритма и удовлетворительной сходимостью. Другими словами, использование более точных приближений электрического поля расширяет диапазон применимости МДД. Далее мы рассмотрим 2 других случая ($x = 140$, $m = 1.3$ и $x = 160$, $m = 1.2$), используя приближения падающего поля на основе падающего поля, ВКБ и ВКБп II. Мы использовали 536 и 612 диполей на диаметр шара, соответственно. Результаты представлены на Рис. 17, они показывают, что стандартный подход (падающее поле) в обоих случаях неудовлетворителен (по крайней мере, вплоть до 50 000 итераций). Это согласуется с предыдущим опытом работы с ADDA [22]. В отличие от подхода выше, ВКБ и ВКБп II дают удовлетворительную сходимость в двух случаях, при этом ВКБп II значительно превосходит ВКБ, что согласуется с Рис. 16(в). Но подчеркнём, что моделирования с помощью ВКБ и ВКБп II вовсе не являются элементарными с точки зрения требуемых вычислительных ресурсов. Например,

для одного графика сходимости нужно 12 и 14 дней расчётов для (а) и (б) соответственно, при этом использовались 72 процессорных ядра в суперкомпьютере Новосибирского государственного университета (каждый по 2.5 ГГц). Именно поэтому представлено не так много случаев – требуется дальнейшее систематическое исследование с построением карт расширенной области применимости ADDA, включая случай слабого поглощения.

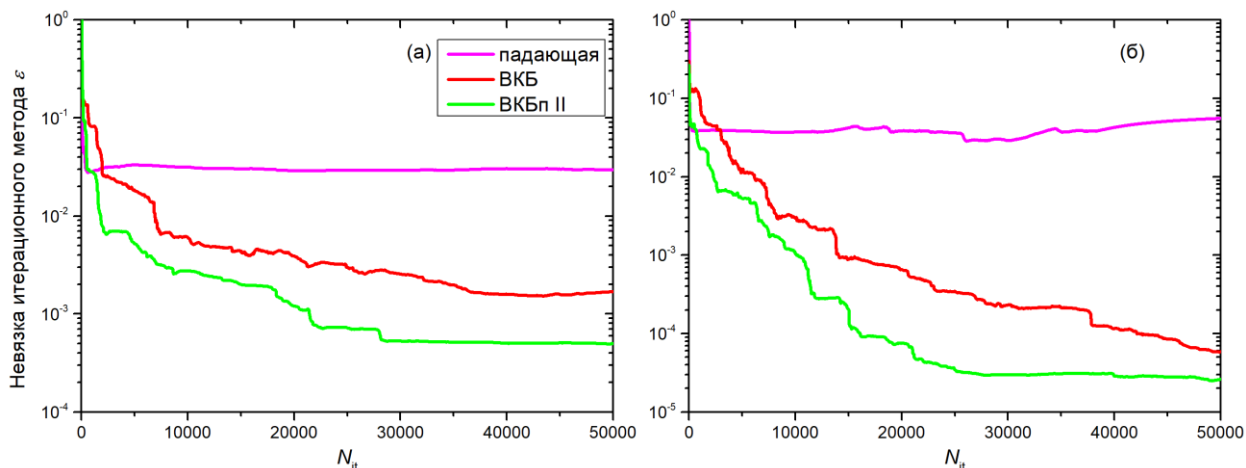


Рис. 17. Аналогично Рис. 15, но для (а) $x = 140$, $m = 1.3$ и (б) $x = 160$, $m = 1.2$.

Перейдём к выводам; ВКБ или ВКБп в качестве начальных полей в итерационном методе всегда дают выигрыш по сравнению с нулевым или падающим полем. Хотя при малых ρ улучшение несущественно, при $\rho \gtrsim 10$ оно становится значительным. При бóльшем ρ выбор начального приближения может быть критичным для удовлетворительного уровня сходимости. Также при $x\rho^2 \gtrsim 1$ ВКБп даёт всегда более быструю сходимость чем ВКБ. Хотя все выводы были сделаны для шаров, мы считаем, что они не изменятся с другими формами частиц. В этом отношении, многие практические задачи могут значительно выиграть если пользоваться командой “`-init_field wkb`” при работе с ADDA, данная команда работает с частицами произвольной формы и внутренней структуры [37]. Реализация метода ВКБп в данном программном пакете явно перспективна, но технически сложная для частиц произвольной формы.

В качестве примечания, настройка начального приближения итерационного алгоритма имеет свои ограничения, т.к. не меняется спектр матрицы взаимодействия, определяющий общую скорость сходимости и наличие интервалов стагнации. Чтобы изменить спектр нужно использовать предобуславливатели (эффективно применяемые на каждой итерации) [60], но это затруднительно в МДД из-за блочно-тёплицевой структуры матрицы взаимодействия, которую необходимо сохранить [5]. Хотя в последнее время в этом отношении был достигнут некоторый прогресс [63,64], эффективное предобуславливание для МДД остаётся открытой проблемой. С учетом наших результатов перспективным направлением исследований для больших оптически мягких частиц является построение предобуславливателя на основе некоторых из обсуждаемых приближений внутреннего поля.

1.5 Выводы по первой главе

Мы предложили модификацию метода ВКБ, названную ВКБп, для расчета электрического поля внутри оптически мягкого рассеивателя и подробно изучили её точность для различных шаров. Основная идея заключается в учёте преломления лучей на границе рассеивателя, решая вспомогательную задачу поиска точки входа луча. Мы предложили надежное решение этой задачи для шаров и изучили количество решений в зависимости от местоположения точки внутри шара. Относительный объём областей, где количество решений равно нулю или двум, почти линейно пропорционален контрасту показателя преломления p и в большинстве случаев мал. Аналогичный анализ, в принципе, можно провести и для других форм.

Затем мы изучили масштабирование ошибок электрического поля (в области с одним решением) с x и p , используя как общий теоретический анализ (применим к любым формам), так и численные эксперименты для шаров. Для приближения невозмущённого падающего поля ошибка составляет $\mathcal{O}(xp) + \mathcal{O}(p)$, для ВКБ – $\mathcal{O}(xp^2) + \mathcal{O}(p)$, для ВКБп – $\mathcal{O}(p)$. Таким образом, хотя

обычно считается, что ВКБ является хорошим приближением для больших оптически мягких рассеивателей, его точность ухудшается при достаточно больших x (при любом фиксированном p). Напротив, приближение ВКБп действительно равномерно по x , что также можно объяснить тем, что оно является пределом ГО при $p \rightarrow 0$.

Затем мы систематически проанализировали различные варианты ВКБп. Сюда входит учёт коэффициентов Френеля, вращение вектора электрического поля, фокусировка волнового фронта для входящих в рассеиватель лучей, объединение двух лучей в области двойного решения (с дополнительной фазой $-\pi/2$ для луча с большими θ_1), и пренебрежение электрическим полем в области тени. Эти варианты не влияют на порядок масштабирования ошибок, т.к. для этого потребовалось бы дополнительно учитывать первое внутреннее отражения и соответствующую трассировку лучей (это оставлено для будущих исследований). Тем не менее, данные варианты ВКБп оказывают существенное влияние на ошибки для реалистичных значений x и m . В результате мы определили два варианта ВКБп, которые сводятся к простому (ВКБп I) и сложному (ВКБп II) алгоритму. Последнее, как правило, точнее за счет дополнительных вычислений.

Приближение внутреннего поля, заданное с ВКБп, может быть использовано само по себе для вычисления любых величин рассеяния. Но мы использовали его в качестве начального предположения в итерационном алгоритме МДД, чтобы ускорить решение без уменьшения точности. Моделирование с использованием пакета ADDA для шаров с различными x и m показало, что ВКБ и ВКБп всегда ускоряют сходимость итеративного решателя, и эффект становится более выраженным с увеличением фазового сдвига p . Последнее также влияет на разницу между ВКБ и различными вариантами ВКБп. В частности, при $x\rho^2 \gtrsim 1$ ВКБп работает значительно лучше, чем ВКБ, тогда как ВКБп II лучше, чем ВКБп I, когда дополнительно $p \gtrsim 0.1$.

Начиная со значений $\rho \approx 50$, использование стандартных подходов для инициализации итерационного решения в МДД (падающее невозмущённое

или нулевое поле) совершенно неудовлетворительно, приводя к стагнации при недопустимо больших значениях нормы невязки. В этом случае использование ВКБ или ВКБп становится единственным способом получить удовлетворительную сходимость. Хотя эти приближения не решают проблему полностью, они расширяют область применимости МДД для огромных оптически мягких частиц. Мы продемонстрировали такое расширение для трёх шаров ($x = 250$, $m = 1.1$; $x = 160$, $m = 1.2$ и $x = 140$, $m = 1.3$), которые ранее не могли быть промоделированы в рамках МДД. Мы ожидаем аналогичные улучшения в области применимости для частиц других форм – каждый пользователь может легко проверить это для случая ВКБ, поскольку он уже реализован в программном пакете ADDA с открытым кодом.

Будущие исследования по ускорению МДД для крупных оптически мягких частиц могут быть основаны на прямом пределе ГО, которое включает рассмотрение одного или нескольких внутренних отражений. Однако выбор начального предположения итерационного алгоритма имеет свои ограничения. Таким образом, настоящая гибридизация МДД и асимптотических методов потребует использование предобуславливателя (применяемого на каждой итерации), который будет основан на некотором легко вычисляемом приближении внутреннего поля.

2. Оптимизация расчётов в МДД для нескольких m

2.1 Предварительные детали

Давайте рассмотрим другой подход к ускорению расчётов в МДД. В работе [65] описан алгоритм – Метод сопряжённых градиентов со сдвигами (Shifted CG). Он позволяет одновременно решать системы линейных уравнений, которые имеют форму:

$$(\mathbf{A} + \sigma_i \mathbf{I})\mathbf{x}_i = \mathbf{b}, \quad (24)$$

где $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $\sigma_i \in \mathbb{C}$ – сдвиг для i -й системы и $i \in \{1, 2, \dots, s\}$, \mathbf{I} – единичная матрица. При этом требуется чтобы матрица $\mathbf{A} + \sigma_i \mathbf{I}$ была эрмитова положительно-определённой для любого σ_i .

Оказалось, что СЛАУ (3) (из программного пакета ADDA) не соответствует виду (24). Однако, систему можно переписать в эквивалентном виде (1), для такого вида Shifted CG уже применим. Для диэлектрической восприимчивости мы используем формулу Клаузиуса-Моссотти:

$$\bar{\alpha}_i^{\text{CM}} = \bar{1} \frac{3V_d \varepsilon_i - 1}{4\pi \varepsilon_i + 2}, \quad (25)$$

где V_d задаёт объём диполя, ε_i – диэлектрическая проницаемость среды в \mathbf{r}_i , которая для немагнитных материалов равна m^2 (m – показатель преломления в \mathbf{r}_i).

Единственная сложность, которая не даёт нам воспользоваться методом Shifted CG – в нашем случае матрица решаемой системы не эрмитова, но комплексно-симметричная. Чтобы обобщить алгоритм на неэрмитовый случай нам нужно понять, как он работает. В алгоритме Shifted CG ищется решение в подпространстве Крылова: $\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)}) \stackrel{\text{def}}{=} \text{span}\{\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}^2\mathbf{r}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}^{(0)}\}$, где $\mathbf{r}^{(0)}$ – невязка на нулевой итерации, k – номер итерации. При этом главным требованием построения алгоритма в эрмитовом случае является *условие Рунца-Галёркина*:

$$\mathbf{r}^{(k)} \perp \mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)}), \quad (26)$$

где $\mathbf{r}^{(k)}$ – невязка на k итерации. На каждой итерации строится ортонормированный базис подпространства Крылова $\mathbf{V}^{(k)} = [\mathbf{v}^{(1)} | \mathbf{v}^{(2)} | \dots | \mathbf{v}^{(k)}]$ с помощью метода Ланцоша (см. [65], стр. 18). Решение в таком базисе можно записать в виде:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{V}^{(k)}\mathbf{y}^{(k)}, \quad (27)$$

где $\mathbf{x}^{(0)}$ – начальная оценка решения, $\mathbf{y}^{(k)}$ – столбец коэффициентов.

2.2 Обобщение метода для матрицы из МДД

В нашем случае, когда матрица неэрмитова ($\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^H$) и комплексно-симметричная ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$), мы вынуждены использовать *условие Петрова-Галёркина* в виде [66–68]:

$$\mathbf{r}^{(k)} \perp \mathcal{L}_k \text{ и } \mathbf{x}^{(k)} \in \mathbf{x}^{(0)} + \mathcal{K}_k, \quad (28)$$

где в простом виде $\mathcal{L}_k \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{K}_k(\mathbf{A}^H, \bar{\mathbf{r}}^{(0)})$, т.е. $\mathcal{L}_k = \text{span}\{\bar{\mathbf{r}}^{(0)}, \mathbf{A}^H \bar{\mathbf{r}}^{(0)}, (\mathbf{A}^H)^2 \bar{\mathbf{r}}^{(0)}, \dots, (\mathbf{A}^H)^{k-1} \bar{\mathbf{r}}^{(0)}\}$, здесь черта означает комплексное сопряжение. Подпространству \mathcal{L}_k соответствует свой ортонормированный базис $\mathbf{W}^{(k)} = [\boldsymbol{\omega}^{(1)} | \dots | \boldsymbol{\omega}^{(k)}]$. При этом базисы являются биортогональными, т.е. $\langle \mathbf{v}^{(i)}, \boldsymbol{\omega}^{(i)} \rangle = 1$ (см. Список сокращений).

Таким образом, в этом случае мы строим два базиса: $\mathbf{V}^{(k)}$ и $\mathbf{W}^{(k)}$, и вместо обычного метода Ланцоша нужно использовать более сложный вариант – двухсторонний метод Ланцоша (см. [65], стр. 20), который работает в случае $\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^H$. Такой алгоритм, при $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ и $\mathbf{v}^{(1)} = \bar{\boldsymbol{\omega}}^{(1)}$, можно заменить простым методом Ланцоша с псевдоскалярным произведением:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_p \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{y}^T \mathbf{x}, \quad (29)$$

где $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$. Следовательно, и норма вектора везде в алгоритме заменяется на псевдонорму:

$$\|\mathbf{x}\|_p \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_p} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}. \quad (30)$$

При такой замене получим $\mathbf{V}^{(k)} = \bar{\mathbf{W}}^{(k)}$. Переход от эрмитова сопряжения к транспонированию наиболее очевиден если сравнить несколько первых итераций в простом и двухстороннем алгоритме Ланцоша. Кроме этого, это естественный аналог скалярного произведения для комплексно-симметричных матриц согласно работам [69,70].

Из определения невязки $\mathbf{r}^{(k)}$ следует уравнение:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{r}^{(k)} + \mathbf{A}^{-1} \mathbf{r}^{(0)}. \quad (31)$$

Из [65] (стр. 20) можно выписать соотношение алгоритма Ланцоша (для $\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^H$ и $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ случая, одно уравнение вместо двух):

$$\mathbf{A} \mathbf{V}^{(k)} = \mathbf{V}^{(k)} \mathbf{T}^{(k)} + \gamma^{(k)} \mathbf{v}^{(k+1)} (\mathbf{e}_k)^T = \mathbf{V}^{(k+1)} \mathbf{T}^{(k+1,k)}, \quad (32)$$

где $\mathbf{T}^{(k)}$ – симметричная трёхдиагональная матрица с $\gamma^{(k)}$ на неглавной диагонали, $\mathbf{T}^{(k+1,k)} = \begin{bmatrix} & & \mathbf{T}^{(k)} \\ 0 & \dots & 0 \\ & & \gamma^{(k)} \end{bmatrix}$, \mathbf{e}_k – k -й столбец единичной матрицы. Умножая (32) на $(\mathbf{W}^{(k)})^H$ получим:

$$(\mathbf{W}^{(k)})^H \mathbf{A} \mathbf{V}^{(k)} = \mathbf{T}^{(k)}. \quad (33)$$

Далее выражаем \mathbf{A}^{-1} и подставляем в (31), используя условие (28) получим:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{V}^{(k)} (\mathbf{T}^{(k)})^{-1} (\mathbf{V}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(0)}. \quad (34)$$

Таким образом мы получили выражение для неизвестных $\mathbf{x}^{(k)}$ на разных итерациях.

2.2.1 Обобщённое разложение Холецкого

Известно, что $\mathbf{T}^{(k)}$ – симметричная и трёхдиагональная матрица. Для вычисления $(\mathbf{T}^{(k)})^{-1}$ будем использовать разложение, описанное в [71,72]:

$$\mathbf{T}^{(k)} = \mathbf{L}^{(k)} \mathbf{D}^{(k)} (\mathbf{L}^{(k)})^T, \quad (35)$$

где $\mathbf{L}^{(k)}$ – нижнетреугольная матрица $k \times k$ с единичной диагональю, $\mathbf{D}^{(k)}$ – диагональная матрица $k \times k$. Тогда можем записать:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^{(k)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{T}^{(k-1)} & (\mathbf{t}^{(k)})^T \\ \mathbf{t}^{(k)} & t^{(k,k)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{L}^{(k-1)} & 0 \\ \mathbf{I}^{(k)} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{D}^{(k-1)} & 0 \\ 0 & d^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\mathbf{L}^{(k-1)})^T & (\mathbf{I}^{(k)})^T \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{L}^{(k-1)} \mathbf{D}^{(k-1)} (\mathbf{L}^{(k-1)})^T & \mathbf{L}^{(k-1)} \mathbf{D}^{(k-1)} (\mathbf{I}^{(k)})^T \\ \mathbf{I}^{(k)} \mathbf{D}^{(k-1)} (\mathbf{L}^{(k-1)})^T & \mathbf{I}^{(k)} \mathbf{D}^{(k-1)} (\mathbf{I}^{(k)})^T + d^{(k)} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (36)$$

где $\mathbf{I}^{(k)}, \mathbf{t}^{(k)} \in \mathbb{C}^{1 \times (k-1)}$, причём $\mathbf{t}^{(k)} = [0 \dots 0 \ \gamma^{(k-1)}]$ и $d^{(\mu)} \in \mathbb{C}$. Отсюда следуют уравнения для новых членов в матрицах $\mathbf{L}^{(k)}, \mathbf{D}^{(k)}$:

$$\mathbf{I}^{(k)} = \mathbf{t}^{(k)} [\mathbf{L}^{(k-1)}]^{-T} [\mathbf{D}^{(k-1)}]^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \frac{\gamma^{(k-1)}}{d^{(k-1)}} \end{bmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} [0 \dots 0 \ l^{(k-1)}], \quad (37)$$

$$d^{(k)} = t^{(k,k)} - \mathbf{I}^{(k)} \mathbf{D}^{(k-1)} (\mathbf{I}^{(k)})^T = t^{(k,k)} - \gamma^{(k-1)} l^{(k-1)}. \quad (38)$$

Получаем, что $\mathbf{L}^{(k)}$ – нижне bidiagonalная матрица $k \times k$ с единичной диагональю, этот факт значительно упрощает дальнейшие рассуждения. Исходя из (34) запишем выражение для $\mathbf{x}^{(k)}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(k)} &= \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{V}^{(k)} \left(\mathbf{L}^{(k)} \mathbf{D}^{(k)} (\mathbf{L}^{(k)})^T \right)^{-1} (\mathbf{V}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(0)} \\ &= \mathbf{x}^{(0)} + [\mathbf{V}^{(k-1)} \quad \mathbf{v}^{(k)}] (\mathbf{L}^{(k)})^{-T} (\mathbf{D}^{(k)})^{-1} (\mathbf{L}^{(k)})^{-1} [\mathbf{V}^{(k-1)} \quad \mathbf{v}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(0)} \\ &= \mathbf{x}^{(0)} + [\mathbf{P}^{(k-1)} \quad \mathbf{p}^{(k)}] (\mathbf{D}^{(k)})^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(k-1)} \\ \mathbf{u}^{(k)} \end{bmatrix} = \mathbf{x}^{(k-1)} + \frac{\mathbf{u}^{(k)}}{\mathbf{d}^{(k)}} \mathbf{p}^{(k)}, \end{aligned} \quad (39)$$

где

$$\mathbf{P}^{(k)} \stackrel{\text{def}}{=} [\mathbf{P}^{(k-1)} \quad \mathbf{p}^{(k)}] = [\mathbf{V}^{(k-1)} \quad \mathbf{v}^{(k)}] (\mathbf{L}^{(k)})^{-T}, \quad (40)$$

$$\mathbf{U}^{(\mu)} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(k-1)} \\ \mathbf{u}^{(k)} \end{bmatrix} = (\mathbf{L}^{(k)})^{-1} \begin{bmatrix} (\mathbf{V}^{(k-1)})^T \\ (\mathbf{v}^{(k)})^T \end{bmatrix} \mathbf{r}^{(0)} = (\mathbf{L}^{(k)})^{-1} \|\mathbf{r}^{(0)}\|_{\mathbf{p}} \mathbf{e}_1, \quad (41)$$

где $\mathbf{p}^{(k)} \in \mathbb{C}^{n \times 1}$, $\mathbf{U}^{(k)} \in \mathbb{C}^{k \times 1}$, $u^{(k)}$ – k -й элемент в $\mathbf{U}^{(k)}$. Кроме этого, можно записать:

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}^{(k)})^{-1} &= \begin{bmatrix} (\mathbf{L}^{(k-1)})^{-1} & 0 \\ -\mathbf{I}^{(k)} (\mathbf{L}^{(k-1)})^{-1} & \mathbf{1} \end{bmatrix}, \\ (\mathbf{L}^{(k)})^{-T} &= \begin{bmatrix} (\mathbf{L}^{(k-1)})^{-T} & -(\mathbf{L}^{(k-1)})^{-T} (\mathbf{I}^{(k)})^T \\ 0 & \mathbf{1} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (42)$$

Подставляя (42) в (40), (41) получаем выражения для $\mathbf{p}^{(k)}$, $u^{(k)}$:

$$[\mathbf{P}^{(k-1)} \quad \mathbf{p}^{(k)}] = [\mathbf{V}^{(k-1)} (\mathbf{L}^{(k-1)})^{-T} \quad \mathbf{v}^{(k)} - l^{(k-1)} \mathbf{p}^{(\mu-1)}], \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(k-1)} \\ \mathbf{u}^{(k)} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} (\mathbf{L}^{(k-1)})^{-1} (\mathbf{V}^{(k-1)})^T \\ (\mathbf{v}^{(k)})^T - \mathbf{I}^{(k)} \mathbf{U}^{(k-1)} (\mathbf{r}^{(0)})^{-1} \end{bmatrix} \mathbf{r}^{(0)} \\ &\xrightarrow{k>1} \begin{bmatrix} (\mathbf{L}^{(k-1)})^{-1} (\mathbf{V}^{(k-1)})^T \mathbf{r}^{(0)} \\ -l^{(k-1)} \mathbf{u}^{(k-1)} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (44)$$

или

$$u^{(k)} = \|\mathbf{r}^{(0)}\|_{\mathbf{p}} \delta_{1k} - l^{(k-1)} u^{(k-1)}. \quad (45)$$

Удивительно, но в итоговых выражениях для $\mathbf{d}^{(k)}$, $u^{(k)}$, $\mathbf{p}^{(k)}$ и поэтому для $\mathbf{x}^{(k)}$ не встречается знак транспонирования. Поэтому формулы для разложения

остаются такими же как в работе [65] для разложения Холецкого, за исключением замены нормы на псевдонорму в Ур. (45).

2.2.2 Изменение формул при смещениях

Предположим, что теперь матрица имеет форму $\mathbf{A}_\sigma = \mathbf{A} + \sigma\mathbf{I}$. Здесь мы для простоты пишем только одно смещение σ , но их может быть много. Из работы [65] следует, что единственное ограничение – необходимо, чтобы начальные невязки были коллинеарны для всех смещений. Тогда выполняется $\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \mathcal{K}_k(\mathbf{A}_\sigma, \mathbf{b})$, т.е. подпространство Крылова *сдвиг-инвариантное* и поэтому можно использовать один алгоритм поиска базиса для всех смещений. Поэтому, из формул (32), (33), (34) следует:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{V}^{(k)} \left(\mathbf{T}_\sigma^{(k)} \right)^{-1} \left(\mathbf{V}^{(k)} \right)^T \mathbf{r}^{(0)}, \quad (46)$$

где $\mathbf{T}_\sigma^{(k)} = \mathbf{T}^{(k)} + \sigma\mathbf{I}^{(k)}$. Таким образом, при наличии сдвигов только диагональные элементы в матрице $\mathbf{T}^{(k)}$ изменяются.

2.2.3 Критерий остановки

Здесь мы повторили рассуждения из работе [65], стр. 74. Из условия (28) следует, что $\mathbf{r}^{(k)} \perp \boldsymbol{\omega}^{(j)}$, при $j \leq k$ и $\mathbf{r}^{(k)} \in \mathbf{r}^{(0)} + \mathbf{A}\mathcal{K}_k(\mathbf{A})$. Кроме этого, известно, что $\|\boldsymbol{\omega}^{(j)}\|_p = \|\mathbf{v}^{(j)}\|_p = 1$ и $\bar{\boldsymbol{\omega}}^{(j)} = \mathbf{v}^{(j)}$ (при специальном выборе начальных базисных векторов). Рассмотрим выражение:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{v}^{(k+1)})^T \mathbf{r}^{(k)} &= (\mathbf{v}^{(k+1)})^T (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}) \\
&= (\mathbf{v}^{(k+1)})^T \left[\mathbf{b} - \mathbf{A} \left(\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{V}^{(k)} (\mathbf{T}^{(k)})^{-1} (\mathbf{V}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(0)} \right) \right] \\
&= (\mathbf{v}^{(k+1)})^T \left[\mathbf{r}^{(0)} - \mathbf{A}\mathbf{V}^{(k)} (\mathbf{T}^{(k)})^{-1} (\mathbf{V}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(0)} \right] \\
&= \underbrace{(\mathbf{v}^{(k+1)})^T \mathbf{r}^{(0)}}_{=0 \text{ при } k>0} \\
&\quad - \underbrace{\left[0|0| \dots \left| (\boldsymbol{\omega}^{(k+1)})^H \mathbf{v}^{(k+1)} \gamma^{(k)} \right| \right]}_{\text{вектор длиной } k} (\mathbf{T}^{(k)})^{-1} \|\mathbf{r}^{(0)}\|_p \mathbf{e}_1 \\
&= -\gamma^{(k)} \mathbf{e}_k^H (\mathbf{L}^{(k)})^{-T} (\mathbf{D}^{(k)})^{-1} (\mathbf{L}^{(k)})^{-1} \|\mathbf{r}^{(0)}\|_p \mathbf{e}_1 \\
&= -\gamma^{(k)} \frac{1}{d^{(k)}} \underbrace{\mathbf{e}_k^H \mathbf{U}^{(k)}}_{\mathbf{u}^{(k)}} = -l^{(k)} \mathbf{u}^{(k)} = \mathbf{u}^{(k+1)}.
\end{aligned} \tag{47}$$

Отсюда следует (учитываем, что $\mathbf{v}^{(k+1)}$ параллелен $\mathbf{r}^{(k)}$):

$$\|\mathbf{r}^{(k)}\|_2 = \|\mathbf{v}^{(k+1)}\|_2 |\mathbf{u}^{(k+1)}|. \tag{48}$$

Таким образом на $k + 1$ итерации можно вычислить предыдущую норму невязки $\|\mathbf{r}^{(k)}\|_2$. Аналогичные уравнения будут выполняться при наличии сдвигов:

$$\|\mathbf{r}_\sigma^{(k)}\|_2 = \|\mathbf{v}^{(k+1)}\|_2 |\mathbf{u}_\sigma^{(k+1)}|. \tag{49}$$

Таким образом, нам требуется только вычислить $\|\mathbf{v}^{(k+1)}\|_2$ один раз и применить её для всех сдвигов.

2.3 Тестирование

Далее для тестирования алгоритма мы реализовали его в программном пакете Mathematica. В тестах рассматривали случай, который соответствует сферической частице с $x = 12$, расчётная сетка $12 \times 12 \times 12$, m варьировался. При этом тензор Грина в Ур. (1) представляет собой матрицу размером $n = 2736$. Выбираем требуемый уровень невязки $\varepsilon = 10^{-10}$, в алгоритме мы вычисляли относительную невязку $\|\mathbf{r}_\sigma^{(k)}\|_2 / \|\mathbf{b}\|_2$.

В первом тесте мы убедились, что алгоритм сходится к ε при решении системы вида (1), $m = 1.01, 1.1, 1.2$. Затем пересчитали решение так, чтобы оно соответствовало системе (3) и убедились, что невязка осталась в пределах допустимого значения ($\leq 10^{-10}$). Таким образом, мы численно подтвердили, что решение системы (1) годится для использования в качестве решения (3).

Во втором тесте мы сравнили время расчётов с помощью Shifted CG для системы (1) в двух случаях: 1) двадцать одинаковых частиц с $m = 1.2$; 2) одна, $m = 1.2$. Время расчётов для первого случая примерно равно 4.2 сек, для второго – 4 сек. Что подтверждает ускорение расчётов данным методом, поскольку при последовательном запуске вычислений потребовалось бы около 80 сек.

В третьем тесте мы продемонстрировали работу алгоритма в реалистичном случае, когда $m = 1.01 - 1.2$, шаг – 0.01. График представлен ниже на Рис. 18. Как видно из рисунка самая быстрая сходимость для наименьшего m и она растёт с m . Алгоритм построен так, что если решение для какого-то сдвига сошлось (до заданной невязки), то эту систему удаляют из рассмотрения. Видно, что сходимость при малых m линейная, а при больших m наблюдаются небольшие интервалы немонотонной сходимости.

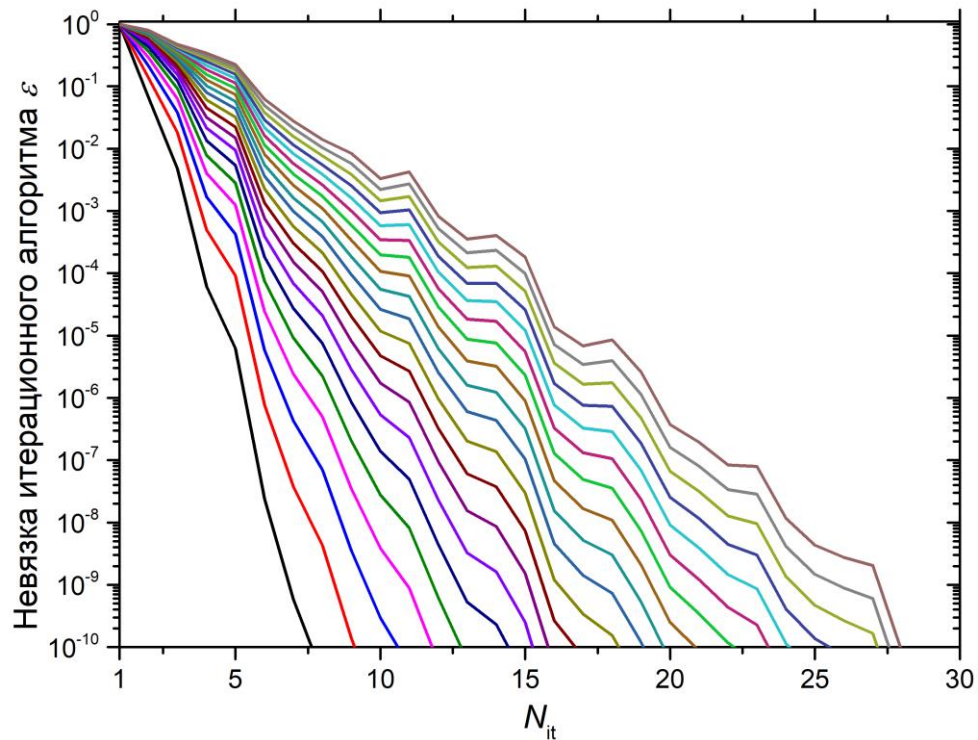


Рис. 18. Невязка итерационного метода (в логарифмическом масштабе) от числа итераций для шара с $x = 12$ и $m = 1.01 - 1.2$, шаг $- 0.01$. Здесь m растёт слева направо, т.е. чёрный график $- 1.01$, красный $- 1.02$ и т.д.

2.4 Выводы по второй главе

Мы рассмотрели другой вариант оптимизации расчётов в МДД – метод сопряженных градиентов со сдвигами (Shifted CG). В программном пакете Mathematica реализовали код данного метода. Кроме этого, мы адаптировали алгоритм для комплексно-симметричной (неэрмитовой) матрицы. Метод позволяет решать системы с матрицами вида $\mathbf{A} + \sigma_i \mathbf{I}$ одновременно для многих сдвигов σ_i . Суть оптимизации – на каждой итерации мы находим базисный вектор (одно произведение матрицы на вектор), а затем вычисляем решение сразу для всех σ_i (небольшие дополнительные вычисления). В нашем случае это аналогично решению задачи, когда рассеяние производится на частице с переменным m (σ — функция от m). Мы показали, что алгоритм даёт большой выигрыш в реалистичных задачах. Сейчас мы реализуем данный алгоритм в программном пакете ADDA в отдельной ветке: https://github.com/inzhevatkin/adda/tree/Shifted_CG.

Рассуждения в [65], касающиеся сложности вычислений и объёма памяти можно считать верными и в нашем случае. Таким образом, требуется $\max_{i \in \{1, \dots, s\}} \{k_i\} \cdot (c_A + 4) + 2 \sum_{i=1}^s k_i$ векторные операции, где k_i – число итераций i системы, c_A – число векторных операций при вычислении произведения матрицы на вектор; необходимый объём памяти: $3 + 2s$ векторов длиной n плюс 2 скаляра. Сходимость алгоритма остаётся открытым вопросом, поскольку теория в [65] относится к случаю, когда матрица \mathbf{A} эрмитова и положительно-определённая, для неэрмитова случая требуются дальнейшие исследования.

3. Блочные методы

3.1 Предварительные детали

Результаты по этой главе были кратко представлены в работе [73]. В задачах усреднения величин рассеяния (сечения поглощения, экстинкции) по ориентациям частицы [74], а также при возбуждении точечным источником или быстрым электроном с переменным положением [75] требуется решать множество СЛАУ с одинаковой матрицей \mathbf{A} , но разными правыми частями \mathbf{b}_i . Для этого удобно использовать Блочный метод сопряжённых градиентов (BCG). При таком подходе комбинируются подпространства Крылова, которые соответствуют различным системам и решение ищется в таком наборе [76]:

$$\mathbf{x}_l^{(k)} \in \mathbf{x}_l^{(0)} + \bigcup_{i=1}^s \text{span} \{ \mathbf{r}_i^{(0)}, \mathbf{A}\mathbf{r}_i^{(0)}, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_i^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}_i^{(0)} \}. \quad (50)$$

Алгоритм позволяет делиться информацией между различными системами и поэтому уменьшает вычислительную нагрузку по сравнению с последовательными запусками. Число умножений матрицы на вектор равно s за одну итерацию для BCG и CG (применяемое к s системам). При $n \gg s$ это является главным фактором, который влияет на время вычислений. В реальных задачах

число итераций (N_{it}) обычно намного меньше чем n для стандартного и блочного метода. Систему для блочного алгоритма можно записать в виде: $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$, где $\mathbf{X}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times s}$.

Основы метода VCG для вещественных систем уже были описаны в работе [77]. Однако, в МДД мы работаем с комплексно-симметричными неэрмитовыми матрицами $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T \neq \mathbf{A}^H$. В работе [69] представлен метод бисопряженных градиентов (BiCG) для комплексно-симметричных матриц. Здесь показано, что этот метод аналогичен CG с транспонированием вместо эрмитова сопряжения. Мы применили те же рассуждения к блочным алгоритмам, расширив VCG на случай комплексно-симметричной матрицы. В результате получился блочный алгоритм бисопряженных градиентов (BBiCG), который совпадает с алгоритмом VCG для вещественной симметричной матрицы. Таким образом, наша реализация основана на алгоритме из [77] (стр. 300, форма Hestenes-Stiefel).

В работе [77] также упоминаются основные трудности применения VCG: обращение сингулярной или плохо обусловленной матрицы размера $s \times s$. В работе предлагается использовать QR-разложение или модифицированный процесс Грама-Шмидта для ортогонализации векторов направлений \mathbf{P} на каждой итерации и перезапускать алгоритм или удалять избыточный столбец, если при этом получается матрица с неполным рангом. Аналогичный подход был использован в [78] (алгоритм 3, в некоторых источниках используется сокращение VCGbQ), который использует QR-разложение для устранения неполного ранга матрицы \mathbf{B} (*начальная дефляция*) и учитывает изменение скорости сходимости для различных столбцов матрицы \mathbf{B} . Также в работе обсуждалось, но не применялось удаление линейно зависимых векторов во время работы алгоритма (*внутренняя дефляция*).

В другой работе [79] предложены различные варианты метода VCG. После тестирования видно, что наилучшие результаты показал VCG с ортогонализацией матрицы остатков \mathbf{R} (на каждой итерации) при помощи QR-разложения (VCGrQ). Обобщение данного метода на комплексный случай приводится

в [80] (СОСGrQ). В связи с этим, мы реализовали методы ВBiCG, ВСGbQ (без учёта скорости сходимости блоков) и СОСGrQ в программном пакете ADDA в отдельной ветке https://github.com/inzhevatkin/adda/tree/Bicg_block. Далее мы расскажем об их тестировании.

3.2 Тестирование

Мы протестировали ВBiCG, ВСGbQ и СОСGrQ (с нулевой инициализацией, т.е. $\mathbf{X}_0 = \mathbf{0}$) на шарах $x = 12, m = 1.5, n_D = 12$ (число диполей на диаметр шара). Эта задача соответствует $n = 2736$, а матрица \mathbf{V} определяется направлениями падения излучения на частицу. Размер блока s меняется от 1 до 300, с шагом 5. Мы отдельно рассмотрели два случая: 1) полный диапазон, т.е. $0 \leq \varphi \leq 360^\circ$ и $0 \leq \theta \leq 180^\circ$; 2) узкий диапазон, т.е. $0 \leq \varphi, \theta \leq 10^{-5^\circ}$ (соответствует очень близким направлениям). В обоих случаях углы падения выбираются равномерно из указанных диапазонов. Алгоритмы сходятся до относительной невязки 10^{-6} . Результаты представлены на Рис. 19, Рис. 20.

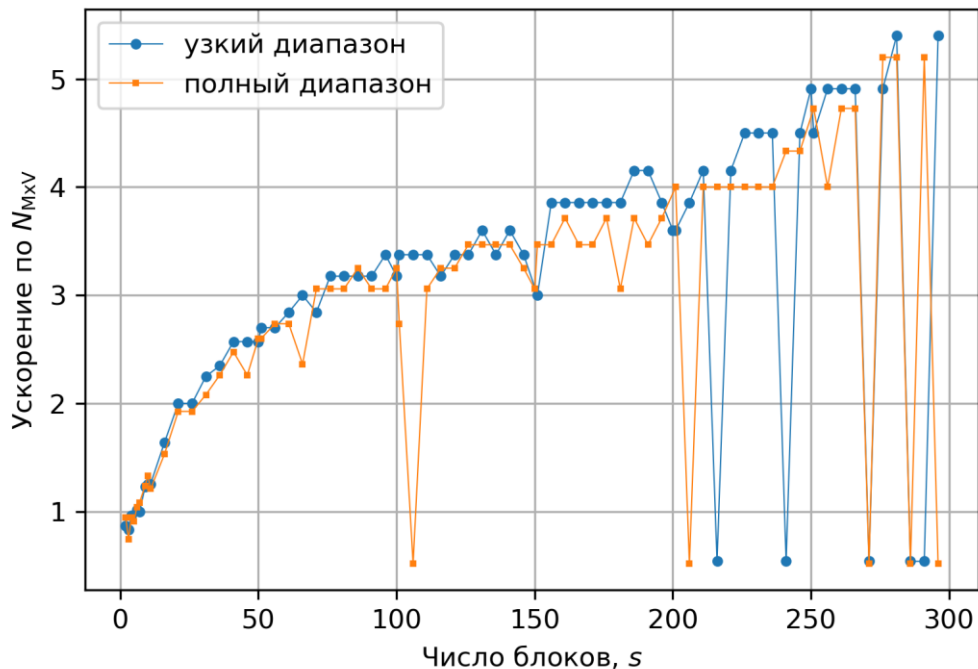


Рис. 19. Ускорение по числу умножений матрицы на вектор от количества блоков (s) для алгоритма ВСGbQ.

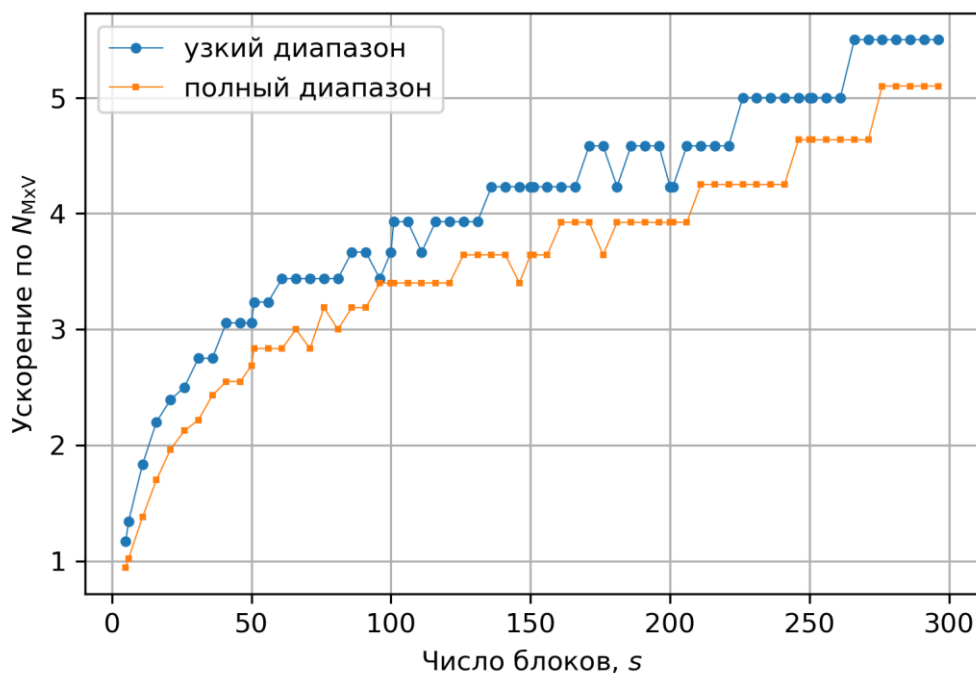


Рис. 20. Аналогично Рис. 19 для алгоритма СОСGrQ.

Тесты показали, что СОСGrQ превосходит другие подходы по числу умножений матрицы на вектор $N_{M \times V}$. С ростом числа блоков s , выигрыш по $N_{M \times V}$ растёт и достигает 5 при $s > 250$. Кроме этого, алгоритм работает стабильно и превосходит ВViCG при $s > 5$ (данные для ВViCG не показаны) и ВСGbQ при $s > 200$. С одной стороны, СОСGrQ не ломается и обеспечивает значительное ускорение (более чем в 5 раз). С другой стороны, ускорение не сильно зависит от диапазона углов падения. Можно ожидать, что блочный подход будет особенно эффективен для случая узкого диапазона (при $s \approx N_{it}$), поскольку решение одной линейной системы даёт очень хорошее приближение для других. Но как видно из тестирования, этот эффект присутствует, но он незначительный.

Помимо данных методов в программном пакете Mathematica мы протестировали блочный метод сопряжённых градиентов с дефляцией (DSBlockCG) из работы [65] (стр. 167). Основная особенность метода – возможность удалять базисные вектора (полученные методом Ланцоша), норма которых меньше

значения отсечки ($|\mathbf{v}_i| < \text{tol}$, $\text{tol} \sim \varepsilon$). Такая операция также называется *дефляция*, что создаёт путаницу поскольку выше мы уже использовали этот термин. Мы протестировали DSBlockCG на реальных задачах и заметили, что $|\mathbf{v}_i| \gg \text{tol}$ и поэтому нельзя осуществить дефляцию. При увеличении tol до уровня, когда возможна дефляция, алгоритм сходится хуже, чем без дефляции. Это можно объяснить тем что, удаляя базисные вектора мы теряем полезную информацию, что отрицательно влияет на работу алгоритма. Единственное, где алгоритм показал ускорение – случай малого диапазона. Здесь, после алгоритма Ланцоша, на первых итерациях ($\leq s$) удалялись базисные вектора с малой нормой, что приводит к ускорению метода.

3.3 Выводы по третьей главе

Мы рассмотрели и протестировали несколько вариантов блочных методов на системах из МДД. Суть оптимизации – обмен информацией о подпространствах Крылова для каждой правой части. Из тестирования наиболее интересных алгоритмов (BViCG, BCGbQ и COCGrQ) видно, что метод COCGrQ работает стабильнее и быстрее остальных. Он позволяет ускорить вычисления более чем в 5 раз (при $s > 250$) по сравнению с последовательным решением систем (с точки зрения умножения матрицы на вектор). COCGrQ даёт большее ускорение в случае узкого диапазона по сравнению с полным диапазоном углов падения излучения на частицу. Однако, данный эффект незначительный и для его увеличения мы применили дефляцию базисных векторов (DSBlockCG). Она помогла ускорить вычисления в случае узкого диапазона, но не показала положительных результатов в остальных задачах.

4. Заключение

В данной работе проведено исследование и применение различных подходов для оптимизации решения СЛАУ в МДД.

В первой главе мы предложили использовать модифицированное приближение ВКБ (ВКБп) для вычисления электрического поля внутри оптически

мягкой частицы. Основная идея ВКБп состоит в учёте преломления лучей на границе рассеивателя. Мы сделали вывод, что для приближения падающего невозмущённого поля ошибка составляет $\mathcal{O}(xp) + \mathcal{O}(p)$, для ВКБ – $\mathcal{O}(xp^2) + \mathcal{O}(p)$, для ВКБп – $\mathcal{O}(p)$. Таким образом, точность ВКБ уменьшается с увеличением x , а ВКБп – равномерно по x . Мы протестировали учёт различных явлений в ВКБп, которые не влияют на порядок ошибок, так как для его изменения требуется дополнительно учитывать первое внутреннее отражение и последующую трассировку лучей (такой подход приближает нас к полной трассировке лучей что выходит за рамки данной работы). В результате мы определили два вида алгоритма: простой (ВКБп I) и сложный (ВКБп II), который является более точным. Моделирование с использованием программного пакета ADDA для шаров показало, что ВКБ и ВКБп всегда улучшают сходимость итерационного алгоритма, и эффект становится более заметным с увеличением фазового сдвига ρ . Параметр также влияет на разницу между ВКБ и различными вариантами ВКБп. В частности, при $x\rho^2 \gtrsim 1$ ВКБп работает значительно лучше, чем ВКБ, а ВКБп II лучше, чем ВКБп I, когда дополнительно $p \gtrsim 0.1$. Начиная с $\rho \approx 50$ стандартные подходы (падающее невозмущённое или нулевое поле) терпят неудачу, приводя к стагнации итерационного алгоритма при недопустимо больших значениях невязки. В этом случае использование ВКБ или ВКБп становится единственным способом получить удовлетворительную сходимость. Хотя эти приближения не решают проблему полностью, они расширяют применимость МДД для больших оптически мягких частиц. Дальнейшие исследования по ускорению МДД для крупных оптически мягких частиц могут быть основаны на геометрической оптике, которая включает учёт одного или нескольких внутренних отражений. Однако настройка только начального предположения итеративного алгоритма имеет свои ограничения. Поэтому, настоящая гибридизация МДД и асимптотических методов потребует предобуславливателя (который будет применяться на каждой итерации), основанного на некотором легко вычисляемом приближении внутреннего поля.

Во второй главе мы предложили использовать другой вариант оптимизации вычислений – метод сопряжённых градиентов со сдвигами. Мы адаптировали данный алгоритм для комплексно-симметричной (неэрмитовой) матрицы. И благодаря специальной структуре СЛАУ, мы применили метод в качестве итерационного алгоритма в МДД. При этом мы решаем задачу сразу для набора частиц, у которых меняется только m . Суть оптимизации – на каждой итерации мы находим базисный вектор (одно произведение матрицы на вектор), а затем вычисляем решение сразу для всех σ_i (небольшие дополнительные вычисления). Мы показали, что алгоритм даёт большой выигрыш в реальных задачах.

В третьей главе мы рассмотрели и протестировали несколько вариантов блочных методов применительно к системам из МДД. Суть оптимизации – обмен информацией о подпространствах Крылова для каждой правой части. Из тестирования удалось сделать вывод о стабильности алгоритмов и быстродействии. Показали, что блочные методы могут значительно ускорить вычисления (более чем в 5 раз) по сравнению с последовательным решением систем. Показали, что узкий диапазон углов падения излучения на частицу (по сравнению с полным) увеличивает ускорение блочных методов. Однако, данный эффект незначительный и для его увеличения можно применять дефляцию базисных векторов.

Список сокращений

R_0 – область без решений Ур. (8), сюда не приходит ни один луч; область тени внутри шара.

R_1 – область с одним решением, сюда приходит один луч; основная область.

R_2 – область с двумя решениями, здесь пересекаются двух луча.

$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{b}^H \mathbf{a}$ – скалярное произведение.

Список литературы

1. Bohren C.F., Huffman D.R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. New York: Wiley, 1983. 544 p.
2. Mishchenko M.I. Electromagnetic Scattering by Particles and Particle Groups: An Introduction. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2014. 450 p.
3. Romanov A.V., Yurkin M.A. Single-particle characterization by elastic light scattering // *Laser & Photon. Rev.* 2021. Vol. 15. P. 2000368.
4. Draine B.T. The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains // *ApJ.* 1988. Vol. 333. P. 848.
5. Yurkin M.A., Hoekstra A.G. The discrete dipole approximation: an overview and recent developments // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2007. Vol. 106, № 1–3. P. 558–589.
6. Konokhova A.I. et al. High-precision characterization of individual *E. coli* cell morphology by scanning flow cytometry // *Cytometry A.* 2013. Vol. 83, № 6. P. 568–575.
7. Wang A., Garmann R.F., Manoharan V.N. Tracking *E. coli* runs and tumbles with scattering solutions and digital holographic microscopy // *Opt. Express.* 2016. Vol. 24, № 21. P. 23719–23725.
8. Gilev K.V. et al. Mature red blood cells: from optical model to inverse light-scattering problem // *Biomed. Opt. Express.* 2016. Vol. 7, № 4. P. 1305–1310.
9. Strokotov D.I. et al. Is there a difference between T- and B-lymphocyte morphology? // *J. Biomed. Opt.* 2009. Vol. 14, № 6. P. 064036.
10. Moskalensky A.E. et al. Method for the simulation of blood platelet shape and its evolution during activation // *PLoS Comput. Biol.* 2018. Vol. 14, № 3. P. e1005899.
11. Orlova D.Yu. et al. Light scattering by neutrophils: model, simulation, and experiment // *J. Biomed. Opt.* 2008. Vol. 13, № 5. P. 054057.
12. Sharma S.K., Somerford D.J. Light Scattering by Optically Soft Particles: Theory and Applications. Berlin: Springer, 2006. 195 p.
13. Sun B. et al. Simulation of the scattering properties of a chain-forming triangular prism oceanic diatom // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* 2016. Vol. 178. P. 390–399.
14. Sander K. et al. Influence of wavelength and pulse duration on single-shot x-ray diffraction patterns from nonspherical nanoparticles // *J. Phys. B.* 2015. Vol. 48, № 20. P. 204004.
15. Wriedt T. et al. Light scattering by single erythrocyte: Comparison of different methods // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* 2006. Vol. 100, № 1–3. P. 444–456.
16. Yurkin M.A. et al. Systematic comparison of the discrete dipole approximation and the finite difference time domain method for large dielectric scatterers // *Opt. Express.* 2007. Vol. 15, № 26. P. 17902–17911.

17. Gilev K.V. et al. Comparison of the discrete dipole approximation and the discrete source method for simulation of light scattering by red blood cells // *Opt. Express*. 2010. Vol. 18, № 6. P. 5681–5690.
18. Bi L., Yang P. Modeling of light scattering by biconcave and deformed red blood cells with the invariant imbedding T-matrix method // *J. Biomed. Opt.* 2013. Vol. 18, № 5. P. 055001.
19. Konokhova A.I. et al. Super-resolved calibration-free flow cytometric characterization of platelets and cell-derived microparticles in platelet-rich plasma // *Cytometry A*. 2016. Vol. 89. P. 159–168.
20. Moskalensky A.E. et al. Accurate measurement of volume and shape of resting and activated blood platelets from light scattering // *J. Biomed. Opt.* 2013. Vol. 18, № 1. P. 017001.
21. Gienger J. et al. Assessment of deformation of human red blood cells in flow cytometry: measurement and simulation of bimodal forward scatter distributions // *Biomed. Opt. Express*. 2019. Vol. 10, № 9. P. 4531.
22. Yurkin M.A., Maltsev V.P., Hoekstra A.G. The discrete dipole approximation for simulation of light scattering by particles much larger than the wavelength // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2007. Vol. 106, № 1–3. P. 546–557.
23. Yurkin M.A., Min M., Hoekstra A.G. Application of the discrete dipole approximation to very large refractive indices: Filtered coupled dipoles revived // *Phys. Rev. E*. 2010. Vol. 82, № 3. P. 036703.
24. Smuneev D.A., Chaumet P.C., Yurkin M.A. Rectangular dipoles in the discrete dipole approximation // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2015. Vol. 156. P. 67–79.
25. Yurkin M.A., Hoekstra A.G. The discrete-dipole-approximation code ADDA: capabilities and known limitations // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2011. Vol. 112, № 13. P. 2234–2247.
26. Muinonen K., Zubko E. Optimizing the discrete-dipole approximation for sequences of scatterers with identical shapes but differing sizes or refractive indices // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2006. Vol. 100, № 1–3. P. 288–294.
27. Okada Y. et al. Acceleration of the iterative solver in the discrete dipole approximation: Application to the orientation variation of irregularly shaped particles // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2008. Vol. 109, № 8. P. 1461–1473.
28. Klett J.D., Sutherland R.A. Approximate methods for modeling the scattering properties of nonspherical particles: evaluation of the Wentzel-Kramers-Brillouin method // *Appl. Opt.* 1992. Vol. 31, № 3. P. 373–386.
29. Malinka A.V. Analytical expressions for characteristics of light scattering by arbitrarily shaped particles in the WKB approximation // *J. Opt. Soc. Am. A*. 2015. Vol. 32, № 7. P. 1344–1351.
30. Habashy T.M., Groom R.W., Spies B.R. Beyond the Born and Rytov approximations: A nonlinear approach to electromagnetic scattering // *J. Geophys. Res.* 1993. Vol. 98, № B2. P. 1759–1775.
31. Van Roey J., van der Donk J., Lagasse P.E. Beam-propagation method: analysis and assessment // *J. Opt. Soc. Am.* 1981. Vol. 71, № 7. P. 803.

32. Kamilov U.S. et al. Optical Tomographic Image Reconstruction Based on Beam Propagation and Sparse Regularization // *IEEE Trans. Comput. Imaging*. 2016. Vol. 2, № 1. P. 59–70.
33. Malinka A. Asymptotic Methods in the Theory of Light Scattering by Non-spherical Particles // *Springer Series in Light Scattering 5* / ed. Kokhanovsky A. Cham: Springer International Publishing, 2020. P. 193–234.
34. van de Hulst H.C. *Light Scattering by Small Particles*. New York: Dover, 1981. 479 p.
35. Inzhevatin K.G., Yurkin M.A. Uniform-over-size approximation of the internal fields for scatterers with low refractive-index contrast // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2022. Vol. 277. P. 107965.
36. Draine B.T., Flatau P.J. Discrete-dipole approximation for scattering calculations // *J. Opt. Soc. Am. A*. 1994. Vol. 11, № 4. P. 1491–1499.
37. Yurkin M.A., Hoekstra A.G. User manual for the discrete dipole approximation code ADDA 1.4.0 [Electronic resource]. 2020. URL: <https://github.com/adda-team/adda/raw/v1.4.0/doc/manual.pdf> (accessed: 05.12.2022).
38. Lopatin V.N., Shepelevich N.V. Consequences of the integral wave equation in the Wentzel-Kramers–Brillouin approximation // *Opt. Spectrosc.* 1996. Vol. 81. P. 103–106.
39. Chowdhury D.Q., Barber P.W., Hill S.C. Energy-density distribution inside large nonabsorbing spheres by using Mie theory and geometrical optics // *Appl. Opt.* 1992. Vol. 31, № 18. P. 3518–3523.
40. Popov A.A. New method for calculating the characteristics of light scattering by spatially oriented atmospheric crystals / ed. Hassanzadeh S. Denver, CO, 1996. P. 186–194.
41. Konoshonkin A.V., Kustova N.V., Borovoi A.G. Beam-splitting code for light scattering by ice crystal particles within geometric-optics approximation // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2015. Vol. 164. P. 175–183.
42. Jarzembski M.A., Srivastava V. Electromagnetic field enhancement in small liquid droplets using geometric optics // *Appl. Opt.* 1989. Vol. 28, № 23. P. 4962–4965.
43. Nussenzveig H.M. The Theory of the Rainbow // *Sci. Am.* 1977. P. 116–128.
44. Deschamps G.A. Ray techniques in electromagnetics // *Proc. IEEE*. 1972. Vol. 60, № 9. P. 1022–1035.
45. Shung-Wu Lee et al. Refraction at a Curved Dielectric Interface: Geometrical Optics Solution // *IEEE Trans. Microwave Theory Techn.* 1982. Vol. 30, № 1. P. 12–19.
46. James G.L. *Geometrical theory of diffraction for electromagnetic waves*. Third edition. Stevenage [England]: The Institution of Engineering and Technology, 2007. 293 p.
47. Ren K.F. et al. Vectorial complex ray model and application to two-dimensional scattering of plane wave by a spheroidal particle // *Opt. Lett.* 2011. Vol. 36, № 3. P. 370.

48. Stegmann P.G. et al. Comparison of measured and computed phase functions of individual tropospheric ice crystals // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2016. Vol. 178. P. 379–389.
49. Lopez N.A., Dodin I.Y. Metaplectic geometrical optics for modeling caustics in uniform and non-uniform media // *J. Opt.* 2021. Vol. 23, № 2. P. 025601.
50. Kravtsov Y.A., Orlov Y.I. *Caustics, Catastrophes and Wave Fields*. 2nd ed. Berlin: Springer, 1999. 216 p.
51. Hill S.S., Benner R.E. Morphology-dependent resonances // *Optical Effects Associated with Small Particles* / ed. Chang R.K., Barber P.W. Singapore: World Scientific, 1988. P. 1–61.
52. Zhu Y., Chao L., Yurkin M.A. Reproducing the morphology-dependent resonances of spheres with the discrete dipole approximation // *Opt. Express*. 2019. Vol. 27, № 16. P. 22827–22845.
53. Suzuki H., Sandy Lee I.-Y. Mie scattering field inside and near a coated sphere: Computation and biomedical applications // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2013. Vol. 126. P. 56–60.
54. Suzuki H., Lee I.-Y.S. Calculation of the Mie scattering field inside and outside a coated spherical particle // *Int. J. Phys. Sci.* 2008. Vol. 3(1). P. 38–41.
55. Peña O., Pal U. Scattering of electromagnetic radiation by a multilayered sphere // *Computer Physics Communications*. 2009. Vol. 180, № 11. P. 2348–2354.
56. Ladutenko K. et al. Mie calculation of electromagnetic near-field for a multilayered sphere // *Computer Physics Communications*. 2017. Vol. 214. P. 225–230.
57. Chang P.C.Y., Walker J.G., Hopcraft K.I. Ray tracing in absorbing media // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2005. Vol. 96, № 3–4. P. 327–341.
58. Laven P. Supernumerary arcs of rainbows: Young’s theory of interference // *Appl. Opt.* 2017. Vol. 56, № 19. P. G104.
59. Freund R.W. Conjugate gradient-type methods for linear systems with complex symmetrical coefficient matrices // *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 1992. Vol. 13, № 1. P. 425–448.
60. Saad Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 2nd ed. Philadelphia: SIAM, 2003. 528 p.
61. Rahola J. On the eigenvalues of the volume integral operator of electromagnetic scattering // *SIAM J. Sci. Comput.* 2000. Vol. 21, № 5. P. 1740–1754.
62. Yurkin M.A. Computational approaches for plasmonics // *Handbook of Molecular Plasmonics* / ed. Della Sala F., D’Agostino S. Singapore: Pan Stanford Publishing, 2013. P. 83–135.
63. Groth S.P. et al. Circulant preconditioning in the volume integral equation method for silicon photonics // *J. Opt. Soc. Am. A*. 2019. Vol. 36, № 6. P. 1079–1088.
64. Groth S.P., Polimeridis A.G., White J.K. Accelerating the discrete dipole approximation via circulant preconditioning // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2020. Vol. 240. P. 106689.
65. Birk S. Deflated shifted block Krylov subspace methods for Hermitian positive definite matrices: PhD Thesis. Bergischen Universität Wuppertal, 2015.

66. Clemens M., Weiland T. Iterative methods for the solution of very large complex symmetric linear systems of equations in electrodynamics. Front Range Scientific Computations, Inc., Lakewood, CO (United States), 1996.
67. Gu X.-M. et al. The SCBiCG class of algorithms for complex symmetric linear systems with applications in several electromagnetic model problems // Computer Physics Communications. 2015. Vol. 191. P. 52–64.
68. Clemens M., Weiland T., Van Rienen U. Comparison of Krylov-type methods for complex linear systems applied to high-voltage problems // IEEE Trans. Magn. 1998. Vol. 34, № 5. P. 3335–3338.
69. Freund R.W. Conjugate gradient-type methods for linear systems with complex symmetric coefficient matrices // SIAM J. Sci. and Stat. Comput. 1992. Vol. 13, № 1. P. 425–448.
70. Craven B.D. Complex symmetric matrices // J. Aust. Math. Soc. 1969. Vol. 10, № 3–4. P. 341–354.
71. Golub G.H., Van Loan C.F. Matrix computations. 3rd ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 1996. 694 p.
72. Wilkinson J.H. The algebraic eigenvalue problem. Oxford : Oxford ; New York: Clarendon Press ; Oxford University Press, 1988. 662 p.
73. Inzhevatin K.G., Yurkin M.A. Acceleration of the discrete dipole approximation for multiple incident fields and refractive indices // Proceedings of Bremen Zoom Workshop on Light Scattering 2023 / ed. Wriedt T., Gienger J. Online, 2023. P. 32–35.
74. Yurkin M.A. Fair evaluation of orientation-averaging techniques in light-scattering simulations: Comment on “Evaluation of higher-order quadrature schemes in improving computational efficiency for orientation-averaged single-scattering properties of nonspherical ice particles” by Fenni et al. // J. Geophys. Res. Atmos. 2023. Vol. 128. P. e2021JD036088.
75. Kichigin A.A., Yurkin M.A. Simulating electron energy-loss spectroscopy and cathodoluminescence for particles in arbitrary host medium using the discrete dipole approximation // J. Phys. Chem. C. American Chemical Society, 2023. Vol. 127. P. 4154–4167.
76. Greenbaum A. Iterative methods for solving linear systems. SIAM, 1997.
77. O’Leary D.P. The block conjugate gradient algorithm and related methods // Linear Algebra Appl. 1980. № 29. P. 293–322.
78. Cockett R. The block conjugate gradient for multiple right hand sides in a direct current resistivity inversion. 2015.
79. Dubrulle A.A. Retooling the method of block conjugate gradients // Electron. Trans. Numer. Anal. 2001. Vol. 12, № 17. P. 216–233.
80. Futamura Y. et al. A real-valued block conjugate gradient type method for solving complex symmetric linear systems with multiple right-hand sides // Appl. Math. 2017. Vol. 62, № 4. P. 333–355.