

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 химической и биологической физики

Направление подготовки **03.03.02 ФИЗИКА**

Образовательная программа: **БАКАЛАВРИАТ**

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Манина Антонина Андреевна

Тема работы: «Использование взвешенной дискретизации в методе дискретных диполей».

«К защите допущена»

Виталий Георгиевич Киселёв

к. ф.-м. н., доцент

с.н.с. ЛКХКМ, ИХКГ СО РАН

Киселев В. Г./.....
(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....20...г.

Научный руководитель

к. ф.-м. н.

с. н. с. ИХКГ СО РАН

Юркин М. А./.....

«.....».....20...г.

Дата защиты: «.....».....20...г.

Новосибирск, 2022

Оглавление

1. Введение	3
2. Литературный обзор	4
2.1. Метод дискретных диполей	4
2.1.1. Основное уравнение	5
2.1.2. Сходимость метода дискретных диполей	7
2.2. Взвешенная дискретизация	9
2.3. Теория Ми	10
3. Цель и задачи текущей работы	11
4. Реализация взвешенной дискретизации в ADDA	12
4.1. Простейший вариант взвешенной дискретизации	12
4.2. Взвешенная дискретизация по Пиллеру	14
4.2.1. Вычисление тензора L	15
4.2.2. Корень из поляризуемости	17
5. Результаты	18
6. Заключение	24
7. Список литературы	25

1. Введение

Многие явления, происходящие в природе, не поддаются непосредственному анализу с помощью измерительных приборов в силу малых размеров участвующих тел, значительного расстояния от поверхности Земли и других всевозможных факторов. Благодаря оптическим методам появилась возможность получать информацию, анализируя светорассеяние, например, проследив, как меняется показатель преломления, определить морфологию изучаемого тела. Оптические методы активно используются в астрофизике, в биомедицине для изучения структур клеток человека, в метеорологии для анализа состава атмосферы, в нанофотонике, в промышленности и так далее. Для успешной интерпретации полученных данных необходимо иметь возможность моделировать различные структуры и рассеяние на них, получая результаты, близкие к истинным. Не каждая поставленная задача может быть решена аналитически, и поэтому для расширения многообразия исследуемых тел необходимо прибегать к численным методам.

В данной работе изучается метод дискретных диполей, важным преимуществом которого является возможность моделировать рассеяние на частицах и агломератах произвольной формы. Основная идея состоит в разбиении тела на прямоугольные параллелепипеды, каждый из которых приблизительно является диполем (более точно, имеет постоянное электрическое поле внутри), вследствие чего нахождение рассеянного электрического поля сводится к решению системы линейных уравнений. Чем больше диполей, тем ближе результат к действительности, но, к сожалению, объём занимаемой памяти также увеличивается, и в какой-то момент дальнейшее увеличение точности путём добавления новых диполей становится непосильной задачей. Поэтому для того, чтобы сделать программу более универсальной и точной, необходимо искать другие пути увеличения точности вычислений. Один из этих путей – введение взвешенной дискретизации – учёта краевых эффектов при дискретизации рассеивателя.

Особенно существенное влияние взвешенной дискретизации заметно для тел, имеющих развитую поверхность (т.е. пористых частиц или агрегатов), сетчатую структуру, например, частиц сажи [1], а также для частиц со значительной мнимой частью, так называемых плазмонных частиц. Реализация взвешенной дискретизации проводилась Пиллером [2] и другими, в т.ч. Юркиным в программе ADDA для частиц шарообразной формы [3]. В результате данной работы взвешенная дискретизация в формулировке Пиллера была реализована в программе ADDA для шаров и цилиндров и была протестирована для различных частиц и разных размеров дипольной решетки.

2. Литературный обзор

2.1. Метод дискретных диполей

Метод дискретных диполей (МДД) – численный метод для моделирова-

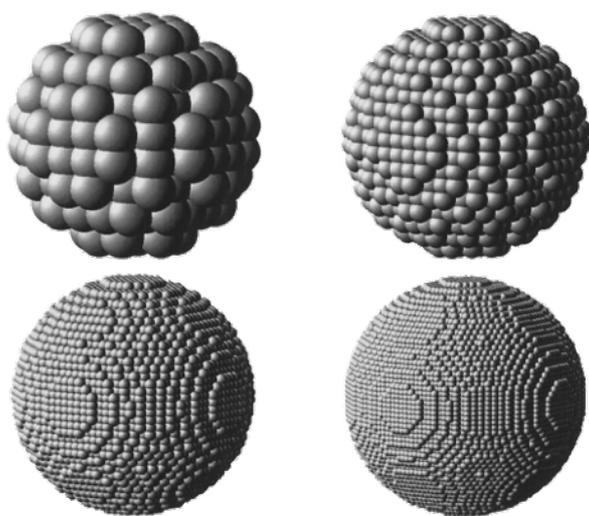


Рис. 1. Визуализации шарообразной частицы, разбитой на 280, 2176, 17256 и 57856 элементарных объемов. Взято из [5].

ния взаимодействия электромагнитных волн с частицами произвольной формы и структуры (Рис. 1) [4,5]. Решение задачи рассеяния на произвольной частице может быть найдено путём дискретизации объёмного интегрального уравнения для электрического поля. В МДД частица делится на относительно небольшое число одинаковых элементов, каждый из которых содержит большое число атомов, но всё ещё достаточно мал,

чтобы рассматриваться как дипольный осциллятор [6]. Из этих элементов образуется кубическая решётка, поляризуемость элементов выбирается такой, чтобы при подстановке в соотношения Клаузиуса-Моссотти получилась диэлектрическая проницаемость вещества, из которого состоит частица. Далее

определяется векторная амплитуда поля, рассеянного каждым из осцилляторов. Полное рассеянное поле представляет собой сумму полей от всех диполей.

2.1.1. Основное уравнение

Пусть некоторая частица (или система частиц) находится внутри конечного объёма V_{int} , который, в свою очередь, окружён однородной, изотропной и непоглощающей внешней средой, занимающей всё оставшееся пространство: $V_{\text{ext}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{R}^3 \setminus V_{\text{int}}$ [7]. Мы не рассматриваем магнитные эффекты ($\mu = 1$), и временная зависимость всех рассматриваемых полей принимается $e^{i\omega t}$. Диэлектрическая проницаемость и показатель преломления окружающей частицу среды $\varepsilon_h > 0$ и $m_h > 0$ соответственно. Они связаны между собой соотношением $\varepsilon_h = m_h^2 \varepsilon_0$, где ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. Опре-

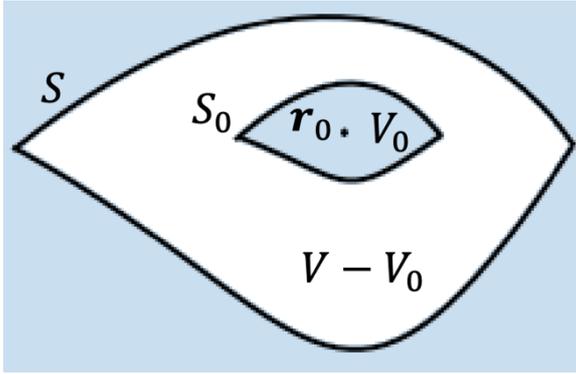


Рис 2. Исключаемая область

делим также волновое число среды $k \stackrel{\text{def}}{=} \omega \sqrt{\varepsilon_h \mu_0} = m_h k_0$, где μ_0 , $k_0 \stackrel{\text{def}}{=} \omega/c$, и c – магнитная проницаемость вакуума, волновое число в вакууме и скорость света соответственно.

Метод дискретных диполей берёт своё начало с объёмного интегрального уравнения для электрического поля [8]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + k^2 \lim_{V_0 \rightarrow 0} \int_{V_{\text{int}} \setminus V_0} d^3 \mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \bar{\chi}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') - \bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r}) \cdot \bar{\chi}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ – падающее и результирующее поля в точке \mathbf{r} , V_0 – конечный исключаемый объём с центром в точке \mathbf{r} (Рис 2) (необходимость исключать область с точкой \mathbf{r} связана с особенностью подынтегральной функции в точке \mathbf{r} . Исключаемая область не обязана повторять форму тела).

$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ - тензор Грина в свободном пространстве, определяемый как:

$$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{R}) = \frac{\exp(ikR)}{4\pi R} \left[\left(\bar{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) + \frac{ikR - 1}{k^2 R^2} \left(\bar{\mathbf{I}} - 3 \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) \right], \quad (2)$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, $R = |\mathbf{R}|$, и $\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}$ – это тензор, определяемый как $(\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})_{\mu\nu} = \mathbf{R}_\mu \mathbf{R}_\nu$ (μ и ν – декартовы компоненты вектора). Тензор $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r})$ – самонаведённый член, возникающий, когда V_0 устремляется к нулю:

$$\bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \oint_{\partial V_0} d^2 \mathbf{r}' \frac{\mathbf{n}' \otimes (-\mathbf{R})}{4\pi R^3}, \quad (3)$$

где \mathbf{n}' – внешняя нормаль к поверхности ∂V_0 . Уравнение (1) эквивалентно дифференциальным уравнениям Максвелла.

Для дискретизации уравнения (1) V_{int} делится на части V_i , $i = 1, \dots, N$, с центром в точках \mathbf{r}_i , и для каждого V_i принимается $\mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_i$, $\bar{\chi}(\mathbf{r}) \approx \bar{\chi}(\mathbf{r}_i) \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\chi}_i$. Объёмы V_i в МДД называются диполями и представляют собой одинаковые прямоугольные параллелепипеды (в частном случае – кубы), поэтому $V_{\text{int}} = \cup_i V_i$ выполняется лишь приближённо, то есть, частица с некоторой точностью разделена на набор одинаковых параллелепипедов. Дискретизация приводит к замене интеграла суммой:

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i^{\text{inc}} + k^2 V_d \sum_{j \neq i} \bar{\mathbf{G}}_{ij} \cdot \bar{\chi}_j \cdot \mathbf{E}_j + (\bar{\mathbf{M}}_i - \bar{\mathbf{L}}_i) \cdot \bar{\chi}_i \cdot \mathbf{E}_i, \quad (4)$$

где $\mathbf{E}_i^{\text{inc}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}_i)$, $\bar{\mathbf{L}}_i \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\mathbf{L}}(\partial V_i, \mathbf{r}_i)$,

$$\bar{\mathbf{M}}_i \stackrel{\text{def}}{=} k^2 \int_{V_i} d^3 \mathbf{r}' [\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}') - \bar{\mathbf{G}}_{\text{st}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}')], \quad (5)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V_d} \int_{V_j} d^3 \mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'). \quad (6)$$

$\bar{\mathbf{G}}_{\text{st}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – статический предел ($kR \rightarrow 0$) функции $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$\bar{\mathbf{G}}_{\text{st}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi k^2 R^3} \left(\bar{\mathbf{I}} - 3 \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right), \quad (7)$$

эта функция тесно связана с $\bar{\mathbf{L}}$, а именно [7]:

$$k^2 \int_{V_i \setminus V_0} d^3 \mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}_{\text{st}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r}) - \bar{\mathbf{L}}(\partial V_i, \mathbf{r}). \quad (8)$$

Определим относительную поляризацию диполя как $\mathbf{p}_i \stackrel{\text{def}}{=} V_d \bar{\chi}_i \cdot \mathbf{E}_i$ и относительную поляризуемость:

$$\bar{\alpha}_i \stackrel{\text{def}}{=} V_d \bar{\chi}_i \cdot [\bar{\mathbf{I}} + (\bar{\mathbf{L}}_i - \bar{\mathbf{M}}_i) \cdot \bar{\chi}_i]^{-1}. \quad (9)$$

Когда частицу окружает вакуум, эти выражения переходят в обыкновенные поляризацию и поляризуемость, делённые на ε_0 . Теперь мы можем получить простейшую форму основного уравнения МДД:

$$\bar{\alpha}_i^{-1} \cdot \mathbf{p}_i - k^2 \sum_{j \neq i} \bar{\mathbf{G}}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j = \mathbf{E}_i^{\text{inc}}. \quad (10)$$

Основная задача МДД – получить \mathbf{p}_i или \mathbf{E}_i , после чего могут быть вычислены любые величины, связанные с поляризацией или электрическим полем, например: сечения экстинкции и поглощения (мощность извлекаемая из падающей волны или поглощаемая частицей, делённая на интенсивность волны [6]) и эффективности экстинкции и поглощения (отношение сечения экстинкции (поглощения) к величине проекции частицы на плоскость, перпендикулярную падающей электромагнитной волне [6]). Выражения для $\bar{\mathbf{G}}_{ij}$ и $\bar{\alpha}_i$ (или $\bar{\mathbf{M}}_i$) могут различаться в зависимости от точной формулировки МДД.

2.1.2. Сходимость метода дискретных диполей

В области применимости МДД ($kd < 2$), где k - волновое число, а d – линейный размер диполя, ошибка вычислений приблизительно представляется в виде суммы квадратичной и линейной функций параметра дискретизации $y = kd|m|$ [9]:

$$|\delta\phi^y| \leq (a_2^\phi - b_2^\phi \ln y)y^2 + (a_1^\phi - b_1^\phi \ln y)y, \quad (11)$$

где ϕ^y – некоторая измеряемая величина, $\delta\phi^y$ – ошибка, $a_2^\phi, b_2^\phi, a_1^\phi, b_1^\phi$ – константы, не зависящие от y . Логарифм при малых y можно считать постоянным. Из теоретического анализа и экспериментальных симуляций [10] стало известно: чем больше размер диполя, тем меньше доля линейной части ошибки.

Ошибки МДД можно разделить на 2 типа: ошибки формы (частицу произвольной формы нельзя идеально приблизить конечным набором прямоугольных параллелепипедов) и ошибки дискретизации (каждый диполь имеет

конечный размер, и, следовательно, поле внутри него можно считать постоянным лишь приближённо). Ошибки формы линейны, а ошибки дискретизации в некоторых случаях квадратичны, это было подтверждено различными симуляциями. Наибольшее влияние на результат ошибки формы оказывают при грубой дискретизации частицы (чем больше доля граничных диполей относительно внутренних, тем меньше ячеек в решётке) и при значительной мнимой части показателя преломления m (поле внутри сильно поглощающей частицы значительно только вблизи поверхности). Уменьшить ошибку формы с помощью дополнительного раздробления граничных ячеек в рамках метода дискретных диполей не получится, так как регулярная решётка необходима для применения быстрого преобразования Фурье для кардинального ускорения произведения матрицы взаимодействия на вектор [4]. Следовательно, нужны другие способы, не нарушающие регулярность решётки и не занимающие значительных затрат вычислительных ресурсов. Разумеется, ошибку формы можно уменьшить, увеличив дискретизацию, тем самым сократив относительное количество граничных ячеек, однако, это повлечёт существенные затраты компьютерной памяти, что делает данный метод неприменимым для случаев, когда исследователю необходимо провести множество недолгих симуляций для набора разных частиц, при этом обладающих какой-либо приемлемой точностью. Также, в теории, направив силы на уменьшение линейной ошибки, можно существенно увеличить точность вычислений для плазмонных частиц.

2.2. Взвешенная дискретизация

Способ уменьшить ошибку формы предложил Пиллер [2] и назвал его

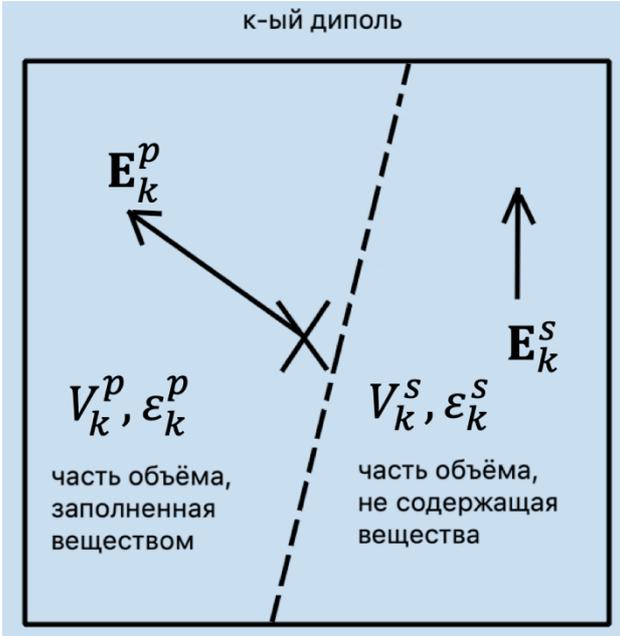


Рис. 3. Граничный диполь. Проекция на плоскость.

взвешенной дискретизацией. Суть состоит в том, чтобы распознать граничные диполи и разделить их на две части: часть, содержащую рассеиватель и часть без него. Взвешенная дискретизация по Пиллеру изменяет выражения для восприимчивости и поляризуемости граничных диполей. Пусть i -й диполь имеет ненулевое пересечение с границей частицы (Рис. 3). Так как размер ячейки мал по сравнению с размером рассеивателя, границу раздела можно с хорошей точностью

приблизить плоскостью. Индексом p будем обозначать все величины, связанные с частью объёма, содержащего центр (primary), индексом s – величины, связанные с другой частью объёма (secondary). Поверхность разделяет частицу на объёмы V_i^p и V_i^s , с восприимчивостями $\chi_i^p \equiv \chi_i, \chi_i^s$ и электрическими полями $\mathbf{E}_i^p \equiv \mathbf{E}_i, \mathbf{E}_i^s$ соответственно. Электрические поля постоянны внутри каждого объёма и связаны друг с другом граничными условиями, выражающимися через тензор граничных условий $\bar{\mathbf{T}}_i$, который определяется показателями преломления обеих сред и конкретной геометрией рассеивателя:

$$\mathbf{E}_i^s = \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \mathbf{E}_i, \quad (12)$$

$$\bar{\mathbf{T}}_i = \bar{\mathbf{I}} + \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \left(\frac{\epsilon_i^p}{\epsilon_i^s} - 1 \right), \quad (13)$$

$\bar{\mathbf{I}}$ – единичный тензор, \mathbf{n}_i – единичный вектор нормали к поверхности раздела, а тензор $\mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i$ – проектор на направление \mathbf{n}_i . Поляризация выбранного диполя определяется как:

$$\mathbf{P}_i = V_i^p \chi_i^p \mathbf{E}_i + V_i^s \chi_i^s \mathbf{E}_i = V_i \bar{\chi}_i^e \cdot \mathbf{E}_i, \quad (14)$$

$$\bar{\chi}_i^e = \frac{(V_i^p \chi_i^p \bar{\mathbf{I}} + V_i^s \chi_i^s \bar{\mathbf{T}}_i)}{V_i}, \quad (15)$$

то есть, восприимчивость заменяется эффективной. По аналогии с тем, как получались выражения для метода дискретных диполей, получаем с учётом эффективных χ и \mathbf{E} :

$$\bar{\mathbf{M}}_i^e \cdot \bar{\chi}_i^e = \bar{\mathbf{M}}(V_i^p) \chi_i^p + \bar{\mathbf{M}}(V_i^s) \chi_i^s \cdot \bar{\mathbf{T}}_i - \bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^s, \mathbf{r}_i) \cdot (\chi_i^s \bar{\mathbf{T}}_i - \chi_i^p \bar{\mathbf{I}}), \quad (16)$$

Теперь мы можем получить выражение для поляризуемости граничных диполей:

$$\bar{\alpha}_i^e = V_i \bar{\chi}_i^e \cdot \{\bar{\mathbf{I}} + [\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^p, \mathbf{r}_i) - \bar{\mathbf{M}}(V_i^p)] \chi_i^p + [\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^s, \mathbf{r}_i) - \bar{\mathbf{M}}(V_i^s)] \cdot \chi_i^s \bar{\mathbf{T}}_i\}^{-1}. \quad (17)$$

2.3. Теория Ми

Для того, чтобы иметь возможность оценить надёжность полученных результатов, необходимо прибегнуть к теории Ми [6], позволяющей получить выражения для электрического и магнитного полей, а также сечений экстинкции, рассеяния и поглощения шара.

Получить электрическое и магнитное поля можно, решая соответствующие векторные волновые уравнения:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = \mathbf{0}, \quad \nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = \mathbf{0}. \quad (18)$$

Решения можно найти с помощью производящей функции ψ , являющейся решением соответствующего скалярного волнового уравнения:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0. \quad (19)$$

С учётом симметрии поставленной задачи, уравнение может быть записано в сферических координатах. Разделяя переменные, можно получить 2

вида решений, являющихся произведением тригонометрической функции, полинома Лежандра [11] и сферической функции Бесселя [12]. Любая функция, удовлетворяющая скалярному волновому уравнению в сферических координатах, может быть разложена в ряд по этим решениям. Таким образом, мы можем получить решение волнового уравнения любой желаемой точности, и теория Ми становится эталоном в данном исследовании.

3. Цель и задачи текущей работы

Цель данной работы – реализовать взвешенную дискретизацию, сформулированную Пиллером, в открытом ПО ADDA [13] и сравнить полученные результаты с теорией Ми и результатами Пиллера [2,14].

Для выполнения поставленной цели необходимо выполнить следующие задачи:

- 1) Вычислить объёмные доли, отсекаемые рассеивателем от граничных диполей.
- 2) Найти точки пересечения поверхности рассеивателя и граней диполя (поверхность сечения приближается плоскостью).
- 3) Получить аналитическое выражение для тензора (3) граничных диполей.
- 4) Реализовать поляризуемость и восприимчивость Пиллера для граничных диполей в ADDA.

4. Реализация взвешенной дискретизации в ADDA

4.1. Простейший вариант взвешенной дискретизации

Путь к реализации формул Пиллера был начат с простейшего варианта взвешенной дискретизации, реализованного в старой версии ADDA в 2011 году [15]. Идея состояла в усреднении диэлектрической восприимчивости в граничных диполях, предложенная Эвансом и Стивенсоном [16]. Усреднение было проведено при помощи формулы Лорентц-Лоренца для внешней поверхности рассеивателя:

$$\frac{\chi_i^e}{4\pi\chi_i^e + 3} = f \frac{\chi_i}{4\pi\chi_i + 3} \quad (20)$$

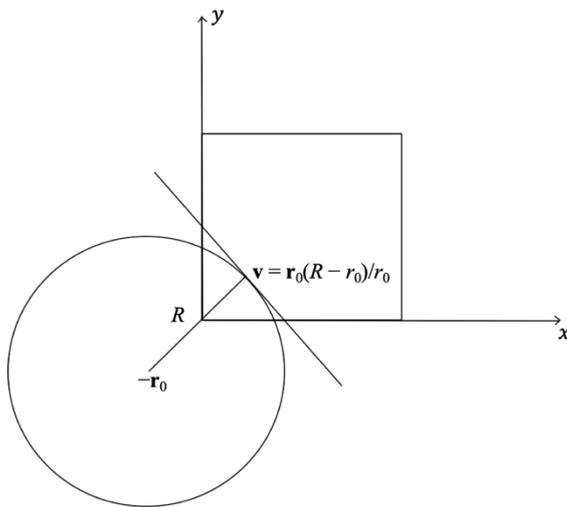


Рис. 4. Задача о нахождении объёмной доли. Проекция на плоскость

где χ_i^e – скалярная эффективная восприимчивость, f – доля объёмного элемента, реально занятая рассеивателем. Восприимчивость граничных элементов с ненулевым пересечением с поверхностью частицы заменяется на эффективную, вид остальных формул не меняется.

Основная сложность состояла в вычислении объёмной доли f . Это необходимо как для реализации простейшего варианта взвешенной дискретизации, так и для варианта Пиллера. Поскольку в реальных ситуациях размер диполя много меньше, чем характерный размер моделируемой частицы, поверхность пересечения диполя частицей можно приблизить плоскостью. Алгоритм нахождения f был реализован для шаров и цилиндров, приведём алгоритм вычисления для шаров.

Пусть единичный куб находится одной из вершин в начале координат (Рис. 4) Шар радиуса R имеет центр в точке $-\mathbf{r}_0$, где без ограничения общности

можно считать, что все компоненты $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ неотрицательны. Проведём радиус шара через начало координат, он пересечёт сферу в точке $\mathbf{v} = \mathbf{r}_0(R - r_0)/r_0$. Формула касательной плоскости через эту точку:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{r} = ax + by + cz = 1, \mathbf{u} = \frac{\mathbf{r}_0}{r_0(R - r_0)}. \quad (21)$$

Объёмную долю куба, занятую шаром, можно вычислить, рассматривая получившиеся подобные пирамиды:

$$f_0 = \frac{1}{6abc} [1 - h(a) - h(b) - h(c) + h(a + b) + h(b + c) + h(a + c) - h(a + b + c)], \quad (22)$$

$$h(x) = \begin{cases} 0, & x \geq 1 \\ (1 - x)^3, & 0 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (23)$$

Попутно с нахождением объёмной доли вычисляются координаты точек пересечения рёбер куба с секущей плоскостью. С использованием полученных значений была вычислена эффективная восприимчивость по формуле (20) для каждого граничного диполя, после чего были проведены симуляции с шарами. Результаты симуляций представлены в таблице 1. m – показатель преломления, x – дифракционный параметр, n_x – число диполей вдоль одного измерения. Легко заметить, что взвешенная дискретизация показывает себя лучше, чем обычная, при малом числе диполей в решётке. Это хорошо соотносится с теорией, так как ошибка формы тем заметнее, чем больше отношение граничных ячеек к внутренним. Взвешенная дискретизация показала себя перспективным методом, после чего была начата работа над реализацией формул Пиллера.

Таблица 1. Эффективность экстинкции для двух различных шаров в зависимости от способа дискретизации и числа ячеек

$Q_{\text{ext}}, m=1.5, x=0.5$ Точное значение = 0.0145666			$Q_{\text{ext}}, m=2+i, x=0.5$ Точное значение = 0.838654		
n_x	ВД	Обычная дискретизация	n_x	ВД	Обычная дискретизация
8	0.0141901	0.0156538	8	0.891596	0.905739
16	0.0147189	0.0149896	16	0.875693	0.878999
32	0.0146548	0.0147494	32	0.860097	0.858606
64	0.0146147	0.0146199	64	0.850278	0.848140

4.2. Взвешенная дискретизация по Пиллеру

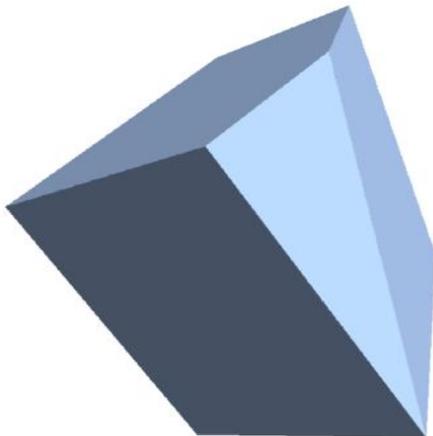


Рис. 6. Часть куба, содержащая центр.

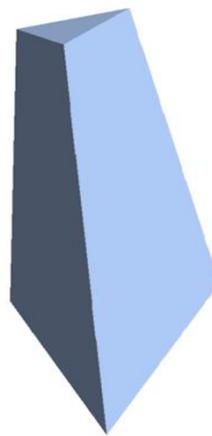


Рис. 5. Часть куба, не содержащая центр.

Использование взвешенной дискретизации Пиллера включает в себя реализацию формул (15) и (17). Пиллер предлагает вычислять тензор $\bar{\mathbf{M}}(V)$ по формуле (16) численно. Однако, $\bar{\mathbf{M}}(V) = O((kd)^2)$, поэтому его влияние мало в сравнении с остальными членами формулы (17). Для вычисления $\bar{\mathbf{M}}(V^S)$ и $\bar{\mathbf{M}}(V^P)$ используется значение $\bar{\mathbf{M}}(V)$, полученное численно для формулировки МДД IGT_SO [17], взятое с весами V^S и V^P соответственно.

Основная сложность заключается в вычислении тензоров $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$ и $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^P, \mathbf{r}_i)$. Тензор $\bar{\mathbf{L}}$ вычисляется по поверхности и является аддитивной величиной. Значение $\bar{\mathbf{L}}$ для куба известно и является справедливым следующее тождество [18]:

$$\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i) + \bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^P, \mathbf{r}_i) = \frac{1}{3} \bar{\mathbf{I}}. \quad (24)$$

Из тождества (24) следует, что достаточно вычислить лишь один из $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$ и $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^P, \mathbf{r}_i)$. Мы выбрали $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$, так как в объём, связанный с этим тензором, не входит центр куба и не происходит смена знака тензора внутри выбранного объёма. Для вычисления $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$ потребовалось решение нескольких более мелких алгоритмических задач. (24)

4.2.1. Вычисление тензора \mathbf{L}

Во время работы над реализацией простейшего варианта взвешенной дискретизации был получен алгоритм для вычисления координат точек пересечения

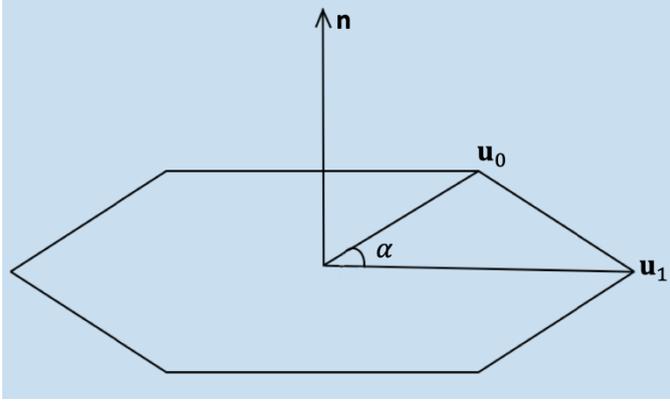


Рис. 7. Иллюстрация к задаче упорядочивания точек сечения

плоскости и куба в качестве побочного результата. Эти точки оказались необходимы для вычисления $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$, взятые в таком порядке, чтобы упорядоченный набор точек и нормаль к секущей плоскости, смотрящая от центра куба, составляли правовинтовую систему. Найдём центр плоскости и проведем через него вектора к

точкам сечения, назовём их \mathbf{u}_i (Рис. 7). Пусть $Ord(\mathbf{u}_i)$ – некоторые числа, сортировка которых приводит к искомому порядку. Выберем $Ord(\mathbf{u}_0) = 2$. Остальные Ord вычисляются по формуле:

$$\bar{\mathbf{M}}_i Ord(\mathbf{u}_i) = S(\mathbf{u}_i)[1 + \cos(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_i)], \quad (25)$$

$$S(\mathbf{u}_i) = \frac{(\mathbf{u}_0 \times \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{u}_0 \times \mathbf{u}_i| |\mathbf{n}|}. \quad (26)$$

Таким образом, точки упорядочиваются по углу между вектором, отвечающим точке и нулевым вектором и по знаку смешанного произведения.

Вычисление $\bar{L}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$ происходит по каждой грани имеющегося многогранника (Рис. 8). Обозначим \mathbf{p}_i вектора, проведённые к точкам сечения или граней куба из его центра. Ω – телесный угол, из под которого видна рассматриваемая грань. Ω можно вычислить, разбив полученный многогранник на пирамиды, для каждой из которых можно вычислить Ω_i по следующей формуле:

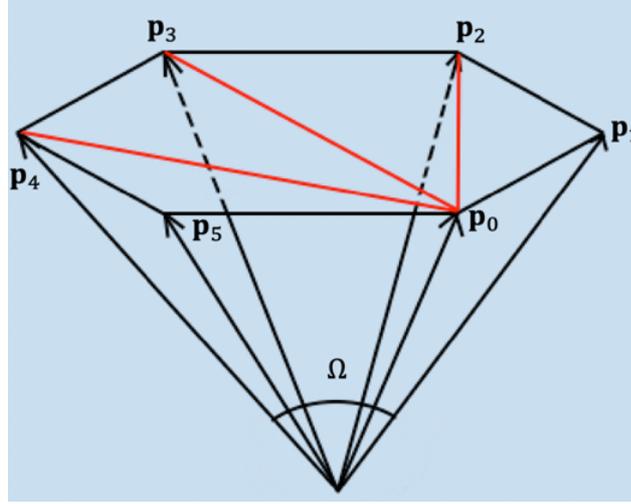


Рис. 8. Иллюстрация к задаче вычисления $\bar{L}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$

$$\tan \frac{\Omega_i}{2} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_i \cdot (\hat{\mathbf{p}}_{i+1} \times \hat{\mathbf{p}}_{i+2})}{(1 + (\hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_{i+1}) + (\hat{\mathbf{p}}_{i+2} \cdot \hat{\mathbf{p}}_{i+1}) + (\hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_{i+2}))}, \quad (27)$$

где $\hat{\mathbf{p}}_i = \mathbf{p}_i / |\mathbf{p}_i|$. Полный телесный угол получается после суммирования по всем пирамидам. Также необходимо получить вектора следующего вида:

$$\mathbf{h}_i = \sum_{j=1}^n \mathbf{q}_j \ln \frac{\mathbf{p}_{i+1} \cdot \mathbf{q}_j + |\mathbf{p}_{i+1}|}{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{q}_j + |\mathbf{p}_i|}, \quad \mathbf{q}_j = \frac{\mathbf{p}_{i+1} - \mathbf{p}_i}{|\mathbf{p}_{i+1} - \mathbf{p}_i|}. \quad (28)$$

$\bar{L}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$ получается суммированием следующего выражения по каждой грани:

$$\Omega \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i + \mathbf{h}_i \times \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i. \quad (29)$$

Таким образом, получив $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$, легко посчитать тензор поляризуемости. Алгоритм вычисления $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^S, \mathbf{r}_i)$ был изменён с целью проверки и вычислял $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_i^P, \mathbf{r}_i)$, после чего полученные значения складывались и проверялось тождество (24). Только после нескольких проверок был совершён переход к следующим задачам.

4.2.2. Корень из поляризуемости

Во время работы над взвешенной дискретизацией были реализованы многие функции, выполняющие операции с матрицами: вычисление определителя, произведения матриц, вычисление обратной матрицы и т. д. Ранее в ADDA поляризуемость представляла собой диагональный тензор, значения на диагонали которого совпадали (случай изотропной частицы), либо были различны (случай анизотропии). В любом случае, вычисление корня из такой матрицы не составляет труда: это будет матрица, диагональные элементы которой являются корнями диагональных элементов исходной матрицы. В нашем случае, матрица поляризуемости не диагональна, а её фундаментальным свойством является симметричность. В случае, если частица находится не в вакууме, поляризуемость приходится симметризовать (погрешность численного метода). Для комплексной симметричной матрицы существует разложение Автонна-Такаги [19]: существует $\bar{\boldsymbol{\beta}}_i$ такая, что $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_i = \bar{\boldsymbol{\beta}}_i^T \cdot \bar{\boldsymbol{\beta}}_i$. Это позволяет переписать уравнение (10) в следующей форме:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad \bar{\mathbf{A}}_{ij} = \bar{\mathbf{I}}\delta_{ij} - \bar{\boldsymbol{\beta}}_i \cdot \bar{\mathbf{G}}_{ij} \cdot \bar{\boldsymbol{\beta}}_j^T, \mathbf{x}_i = \bar{\boldsymbol{\beta}}_i^{-T} \cdot \mathbf{p}_i, \mathbf{b}_i = \bar{\boldsymbol{\beta}}_i \cdot \mathbf{E}_i^{\text{inc}}. \quad (30)$$

Алгоритм Такаги был реализован в ADDA, после чего все операции с поляризуемостью и корнем из неё были заменены на матричные, в случае, если диполь является граничным.

5. Результаты

Взвешенная дискретизация была реализована и протестирована в ADDA для шаров и цилиндров [20]. Были проведены симуляции с шарами для взвешенной дискретизации и простой дискретизации и результат сравнивался с теорией Ми. Симуляции были проведены для частиц с показателем преломления $m = 2 + i$ и диаметром, равным длине волны и половине длины волны соответственно. Графики были построены при помощи библиотеки Matplotlib [21].

Результаты для сечений экстинкции представлены на (Рис. 9) и (Рис. 10). Хорошо видно, что взвешенная дискретизация показывает значительно лучший результат для малых сеток ($\text{grid} = 8; 16$) и близкий к обычной дискретизации результат при больших сетках. Это вполне соотносится с теорией, так как при увеличении числа диполей в решётке, доля граничных диполей (по отношению к полному числу диполей) уменьшается, и соответственно уменьшается линейная часть ошибки. Чем больше диполей в решётке, тем меньше влияние взвешенной дискретизации. Введем переменную N , обозначающую величину grid , тогда $\frac{1}{N} \equiv \frac{1}{\text{grid}}$.

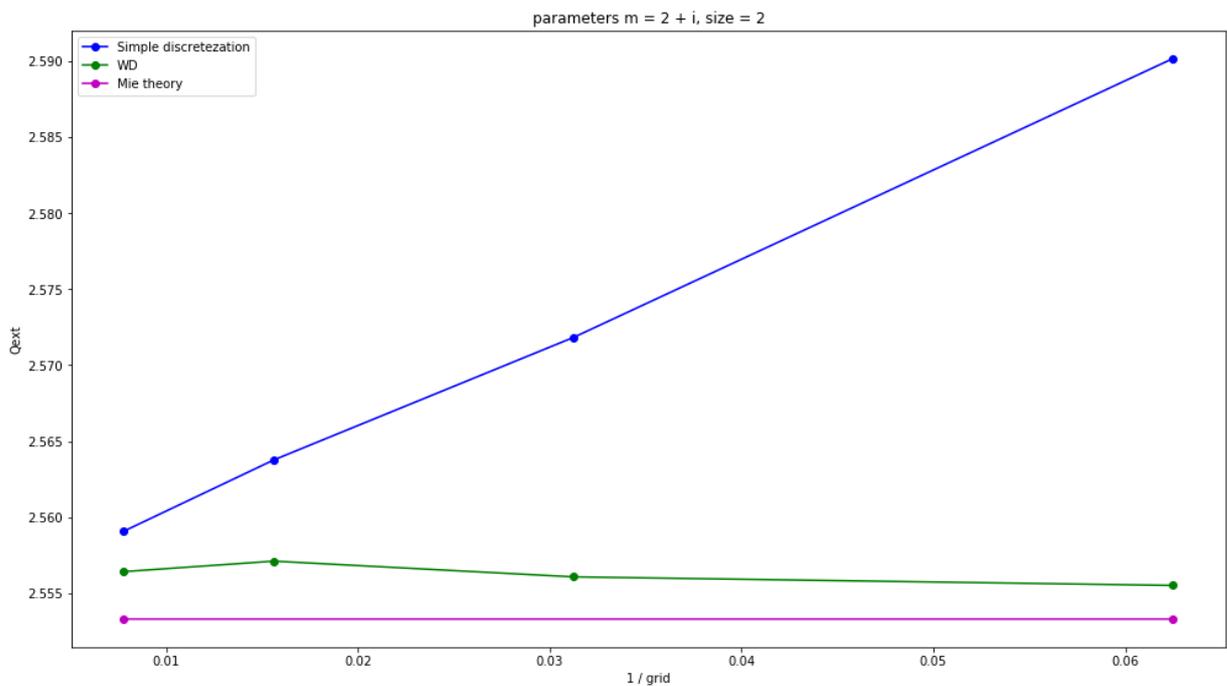


Рис. 9. Результаты симуляций. Q_{ext} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = \lambda$

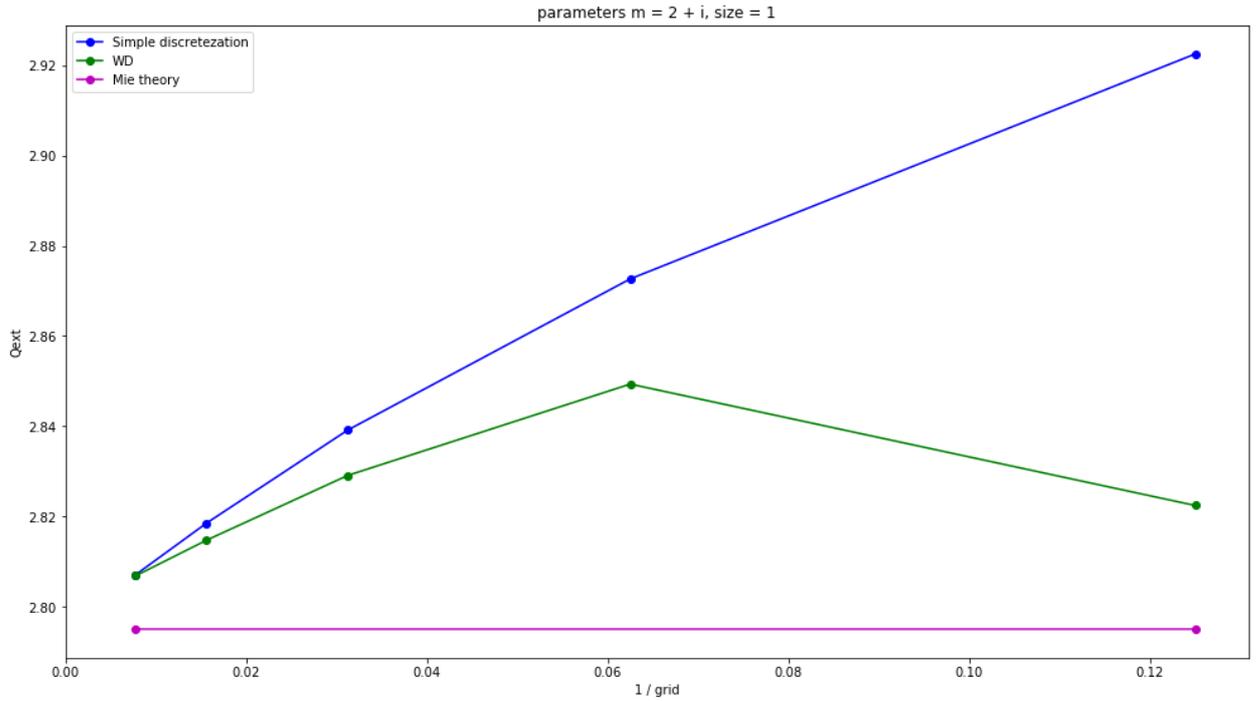


Рис. 10. Результаты симуляций. Q_{ext} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = 0.5\lambda$

Не всё так гладко оказалось с эффективностью рассеяния (просуммированной по всем углам рассеяния). Результаты симуляций представлены на (Рис. 11) и (Рис. 12):

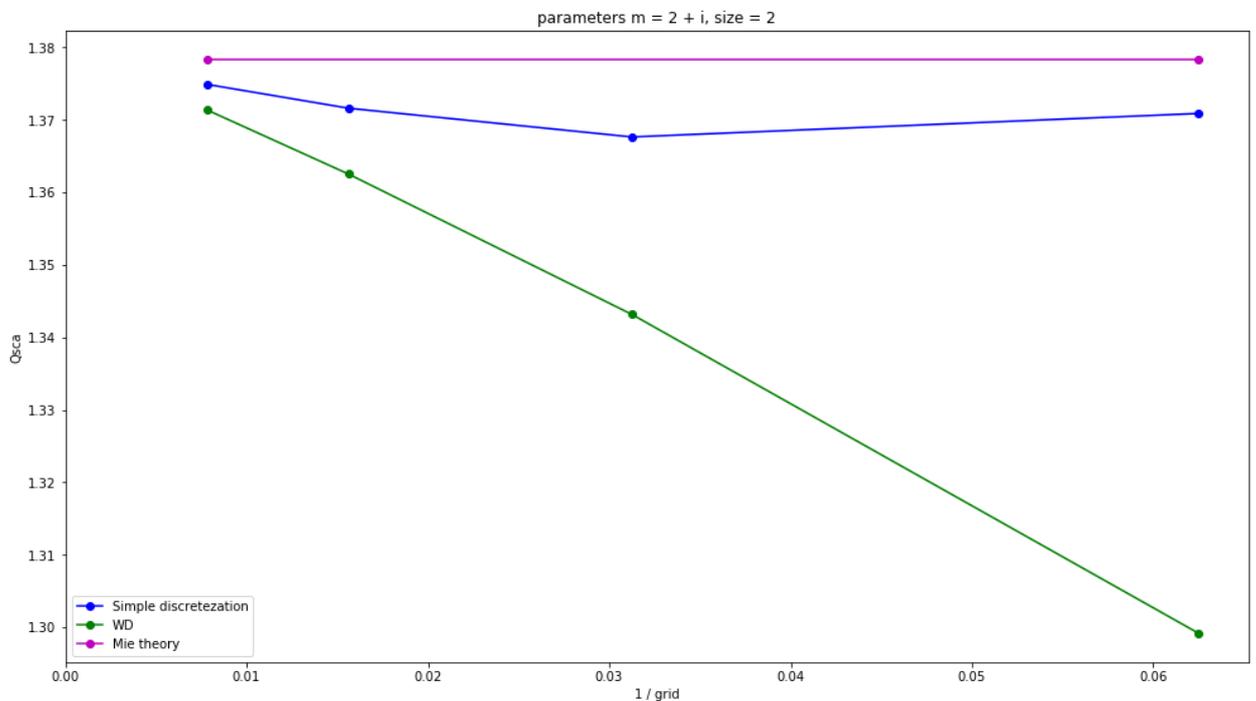


Рис. 11. Результаты симуляций. Q_{sca} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = \lambda$

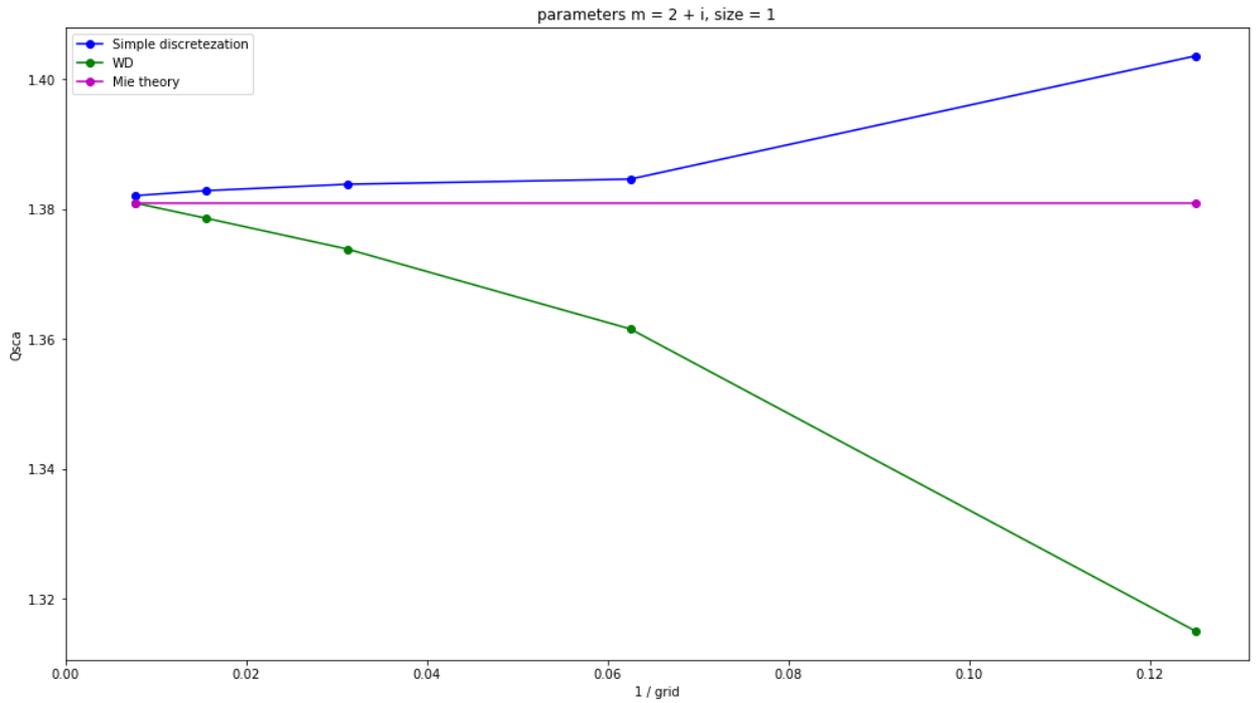


Рис. 12 Результаты симуляций. Q_{sca} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = 0.5\lambda$

Возможно, присутствуют некоторые ошибки в коде, либо существует более глубокое объяснение данного несоответствия. В любом случае, взвешенная дискретизация пока неприменима для расчёта эффективности рассеяния.

Также, было проведено моделирование на тех же частицах с использованием формулировки МДД IGT_SO [17]:

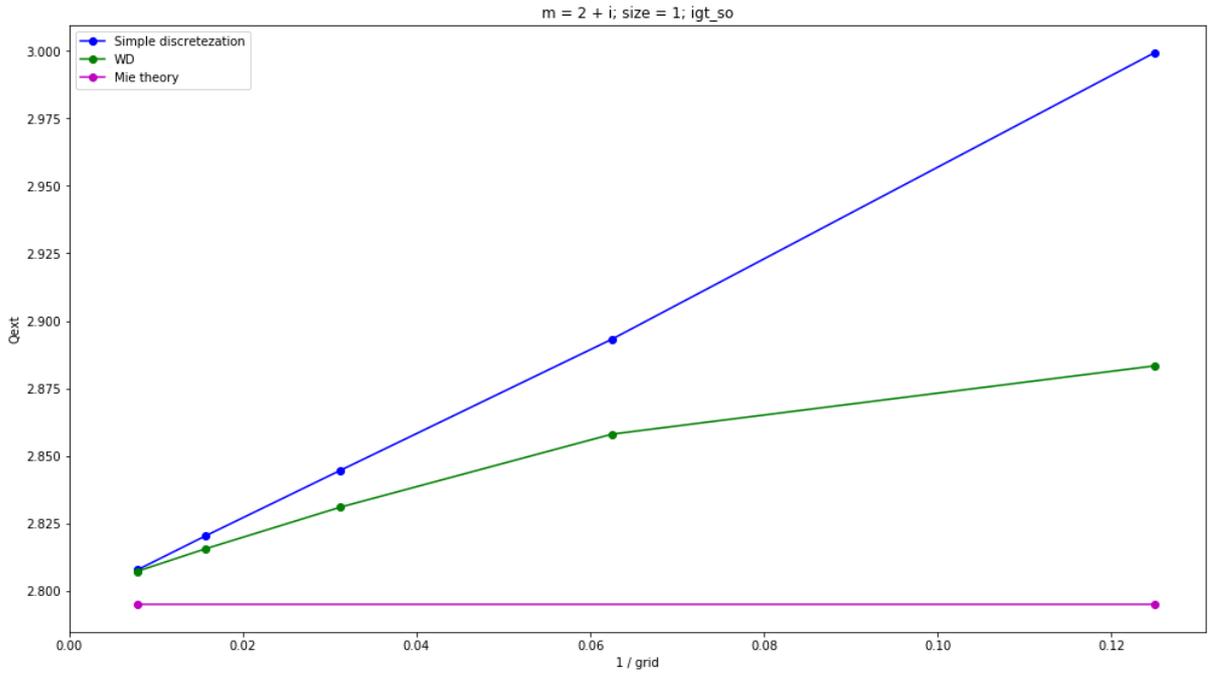


Рис. 13. Результаты симуляций. Q_{sca} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = \lambda$. Формулировка МДД IGT_SO

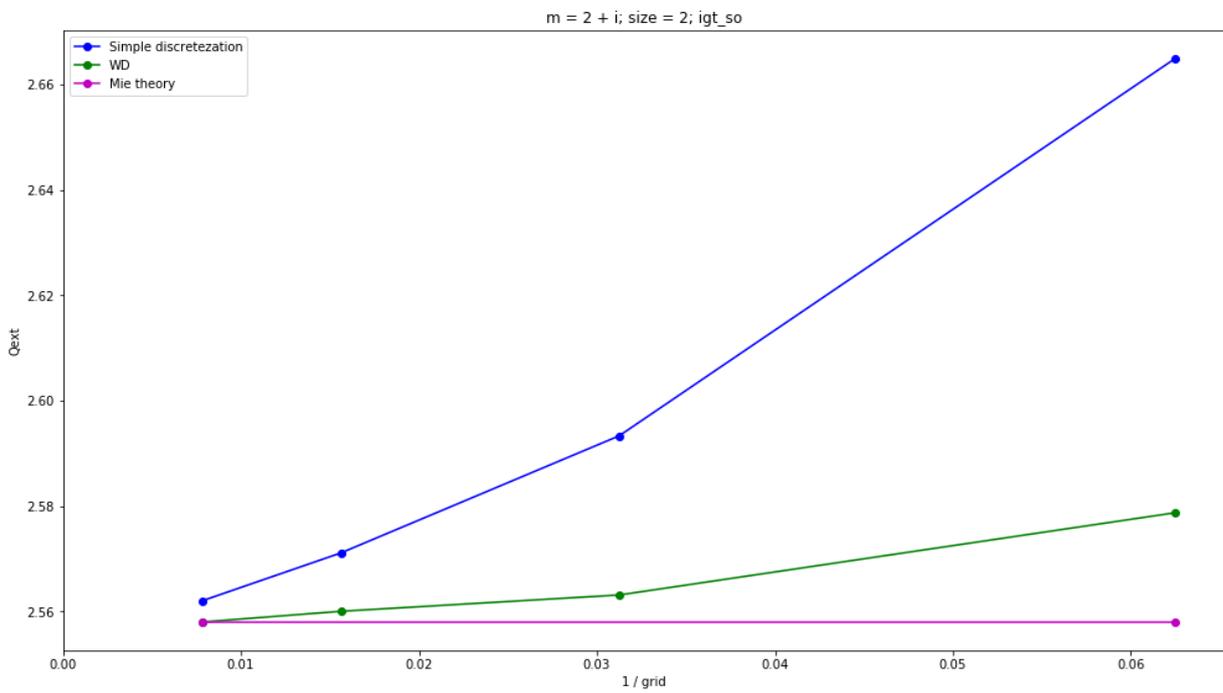


Рис. 14. Результаты симуляций. Q_{sca} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = 0.5\lambda$. Формулировка МДД IGT_SO

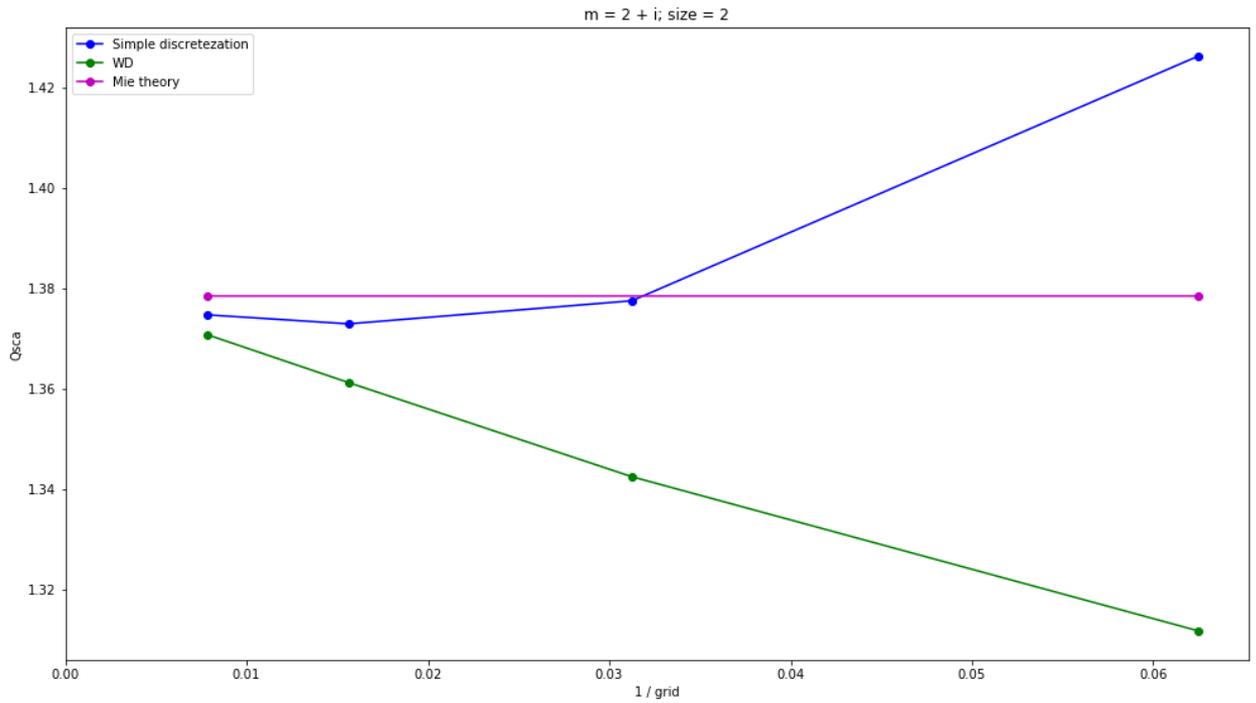


Рис. 15. Результаты симуляций. Q_{sca} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = \lambda$, Формулировка МДД IGT_SO

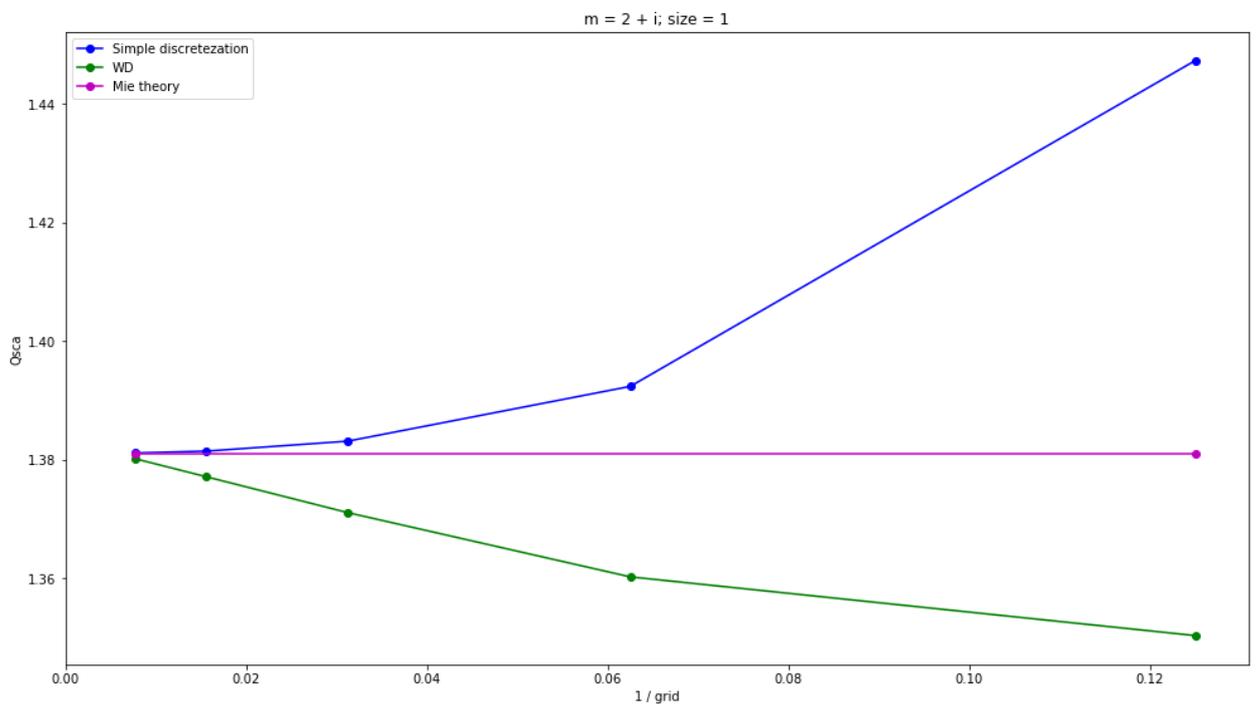


Рис. 16. Результаты симуляций. Q_{sca} в зависимости от $\frac{1}{N}$. $m = 2 + i$, $d = 0.5\lambda$, Формулировка МДД IGT_SO

Пиллер вычислял ошибку симуляции по следующей формуле[2]:

$$\Psi = \frac{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\mathbf{E}_{FF}(\theta, \varphi) - \mathbf{E}_{FF}^a(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta \, d\varphi d\theta}{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\mathbf{E}_{FF}^a(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta \, d\varphi d\theta}, \quad (31)$$

где \mathbf{E}_{FF} – поле вдалике от рассеивателя, рассеянное в направлении (θ, φ) , а \mathbf{E}_{FF}^a – поле, рассеянное в том же направлении, вычисленное по теории Ми. Мы попытались повторить вычисления Пиллера для одной из частиц и получили следующие результаты:

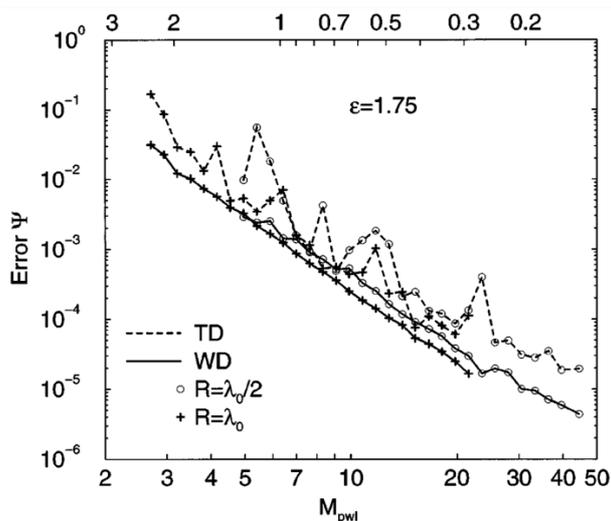


Рис. 17. Ошибки обычной дискретизации и взвешенной в сравнении с теорией Ми, вычисленные по формуле (31). Взято из [2].

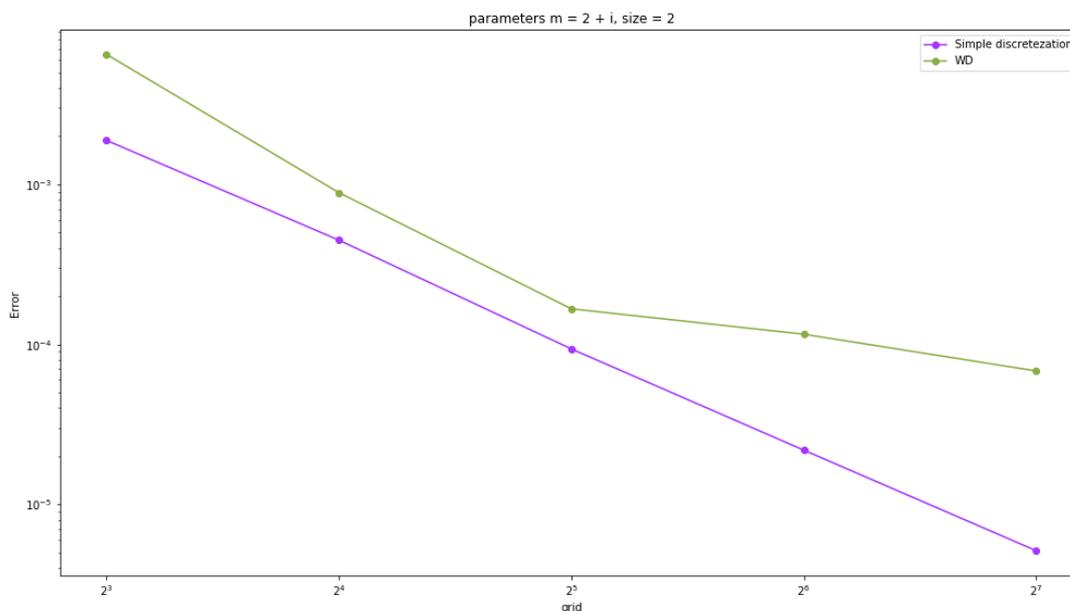


Рис. 18. Ошибки взвешенной дискретизации, реализованной в ADDA

Результат предсказуемый, так как рассеянное поле непосредственно связано с сечением и эффективностью рассеяния, которые, как мы видели, вычисляются с худшей точностью, чем без взвешенной дискретизации.

6. Заключение

Таким образом, был разработан и реализован алгоритм взвешенной дискретизации для шаров и цилиндров. Были выполнены поставленные задачи. Взвешенная дискретизация, сформулированная Пиллером, была реализована и протестирована в ADDA для нескольких шаров, включая шары с показателем преломления $m = 2 + i$ и диаметром, равным длине волны и половине длины волны. У реализованного метода есть свои достоинства и недостатки. Первые заключаются в том, что сечение и эффективность экстинкции считаются на порядок эффективнее при малых размерах решетки с использованием взвешенной дискретизации чем без нее. Недостатки являют себя в виде сниженной точности при расчёте электрического поля, а также сечения и эффективности рассеяния. Причина может скрываться в ошибках в коде, а также в самом методе, например, в разности знаков получаемых линейной и квадратичной ошибок. Однако, взвешенная дискретизация хорошо работает при вычислении сечений и эффективности экстинкции, что было показано при проведении нескольких симуляций для разных частиц различных размеров и показателей преломления.

Взвешенная дискретизация может быть успешно использована для вычислений сечений и эффективностей экстинкции при малых размерах решётки.

7. Список литературы

1. Liu C. et al. Performance of the discrete dipole approximation for optical properties of black carbon aggregates // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2018. Vol. 221. P. 98–109.
2. Piller N.B. Influence of the edge meshes on the accuracy of the coupled-dipole approximation // *Opt. Lett.* 1997. Vol. 22, № 22. P. 1674.
3. Юркин М.А. Метод дискретных диполей, моделирование светорассеяния, итерационный метод, частицы произвольной формы и структуры. Новосибирск: ИХКиГ, 2011.
4. Юркин М.А. Моделирование светорассеяния клетками крови с помощью метода дискретных диполей. Институт Химической Кинетики и Горения СО РАН, 2008.
5. Moskalensky A.E., Yurkin M.A. Energy budget and optical theorem for scattering of source-induced fields // *Phys. Rev. A*. 2019. Vol. 99, № 5. P. 053824.
6. Boren C.F., Huffman D.R. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Pergamon, New York, 1980.
7. Yurkin M.A. *Discrete Dipole Approximation*.
8. Mishchenko M.I., Yurkin M.A. Impressed sources and fields in the volume-integral-equation formulation of electromagnetic scattering by a finite object: A tutorial // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2018. Vol. 214. P. 158–167.
9. Yurkin M.A., Maltsev V.P., Hoekstra A.G. Convergence of the discrete dipole approximation II An extrapolation technique to increase the accuracy // *J. Opt. Soc. Am. A*. 2006. Vol. 23, № 10. P. 2592.
10. Yurkin M.A., Maltsev V.P., Hoekstra A.G. Convergence of the discrete dipole approximation I Theoretical analysis // *J. Opt. Soc. Am. A*. 2006. Vol. 23, № 10. P. 2578.
11. Weisstein E.W. Legendre polynomial // *Mathematical methods*. 2015. № 43.
12. Korenev B.G. *Bessel functions and their applications* // CRC Press. 2002.
13. Yurkin M.A. ADDA: C, Fortran.

14. Piller N.B. Coupled-dipole approximation for high permittivity materials // Optics Communications. 1999. Vol. 160, № 1–3. P. 10–14.
15. Yurkin M.A. WD tree of ADDA: C, Fortran. 2011.
16. Evans K.F., Stephens G.L. Microwave Radiative Transfer through Clouds Composed of Realistically Shaped Ice Crystals. Part I. Single Scattering Properties // J. Atmos. Sci. 1995. Vol. 52, № 11. P. 2041–2057.
17. Yurkin M.A. User Manual for the Discrete Dipole Approximation Code ADDA 1.4.0. Voevodsky Institute of Chemical Kinetics and Combustion. Vol. 1.
18. Yaghjian A.D. Electric dyadic Green's functions in the source region // Proc. IEEE. 1980. Vol. 68, № 2. P. 248–263.
19. Hahn T. Routines for the diagonalization of complex matrices. arXiv, 2006.
20. Manina A.A. new WD for ADDA: C.
21. Matplotlib: Python.