

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 **БИОМЕДИЦИНСКОЙ ФИЗИКИ**

Направление подготовки **03.03.02 ФИЗИКА**

Образовательная программа: **БАКАЛАВРИАТ**

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

(научно-исследовательский формат)

Шершнёв Данил Витальевич

Тема работы: «Моделирование ближнеполюсного радиационного теплопереноса методом дискретных диполей».

«К защите допущена»

Заведующий кафедрой

д.ф.-м.н., профессор.

Зав. лаб. «Цитометрии и биокинетики» ИХКГ
СО РАН

Мальцев В.П. /.....
(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

<i>1</i>	<i>Введение</i>	<i>3</i>
<i>2</i>	<i>Теоретическая часть</i>	<i>4</i>
2.1	Формулировка проблемы	4
2.2	Вывод объёмного интегрального уравнения.....	6
2.3	Дискретизация ОИУ	9
2.4	Вывод характеристик ближнепольного радиационного теплопереноса	11
<i>3</i>	<i>Цель и задачи текущей работы</i>	<i>13</i>
<i>4</i>	<i>Реализация ближнепольного радиационного теплопереноса</i>	<i>14</i>
4.1	Как получить ТФГ системы с помощью ADDA.	14
4.2	Существующие численные схемы размещения источников внутри частицы.....	15
4.3	Реализация БРТП с помощью ADDA.....	22
<i>5</i>	<i>Результаты моделирования</i>	<i>23</i>
5.1	Сравнение с точным решением	23
5.2	Сравнение с другими реализациями МДД	26
<i>6</i>	<i>Заключение</i>	<i>30</i>
<i>7</i>	<i>Список литературы</i>	<i>31</i>

1 Введение

Радиационный теплообмен между телами, которые разделены расстоянием, превышающим характерную тепловую длину волны, ограничен моделью абсолютно чёрного тела. В этом приближении дальнего поля существуют аналитическая теория, которая позволяет без труда рассчитывать радиационный теплообмен между трёхмерными телами сложной формы. Но в приближении ближнего поля, то есть, когда величина зазора между телами порядка тепловой длины волны, теплообмен может превышать на несколько порядков предел, предсказываемый законом Стефана–Больцмана. Дело в том, что в случае ближнего поля существенный вклад вносит интерференция волн и затухающие моды, которые не учитывает классическая теория Планка для абсолютно чёрного тела. Эти моды включают затухающие волны, генерируемые полным внутренним отражением распространяющейся волны на границе раздела материал-зазор, а также резонансные поверхностные волны, такие как поверхностные фонон-поляритоны и поверхностные плазмон-поляритоны.

Чтобы учесть дополнительный вклад в теплоперенос ближнего поля прибегают к использованию численных методов с использованием флуктуационной электродинамики. Одним из таких численных методов является метод дискретных диполей (МДД), который является численно точным методом вычисления рассеяния и поглощения электромагнитных волн частицами произвольной формы. Суть метода заключается в том, что рассеиватель разделяется на малые кубические объёмы, которые можно представить как точечные диполи, которые взаимодействуют друг с другом и с падающей волной. Поэтому с помощью МДД можно решать совершенно разные электромагнитные задачи.

Одной из существующих реализаций МДД является программный пакет ADDA [1], который является универсальным инструментом, подходящим для широкого спектра применений, от межзвездной пыли и атмосферных аэрозолей до биологических клеток и нано-частиц; его применимость

ограничена только доступными компьютерными ресурсами. Таким образом, основной целью данной работы является реализация моделирования ближнепольного радиационного теплопереноса (БРТП) методом дискретных диполей в программном пакете ADDA.

2 Теоретическая часть

2.1 Формулировка проблемы

Данная глава повторяет некоторые определения из [2–6]. Пусть, у нас есть набор частиц произвольной формы и размера, которые окружены бесконечной средой (вакуумом) объёмом V_{ext} . Среду считаем однородной, линейной и изотропной. Кроме того, предполагается, что и бесконечная среда, и объекты не имеют магнитных свойств, а все частицы находятся в локальном термодинамическом равновесии.

Задача состоит в том, чтобы рассчитать теплоперенос от одной частицы к другой, поэтому далее из набора частиц объёмом V_{int} будем выделять частицу «А» объёмом V_A и частицу «В» объёмом V_B , то есть полный объём частиц равен $V_{int} = V_A \cup V_B \cup \dots$. Физически теплопередача между телами осуществляется из-за тепловых флуктуаций, случайно возникающих в телах [3]. Обозначим на Рис. 1 тепловую флуктуацию красной звездой, которая возникает в частице «А» на расстоянии \mathbf{r}' от начала координат, а её действие происходит на расстоянии \mathbf{r} от начала координат в частице «В».

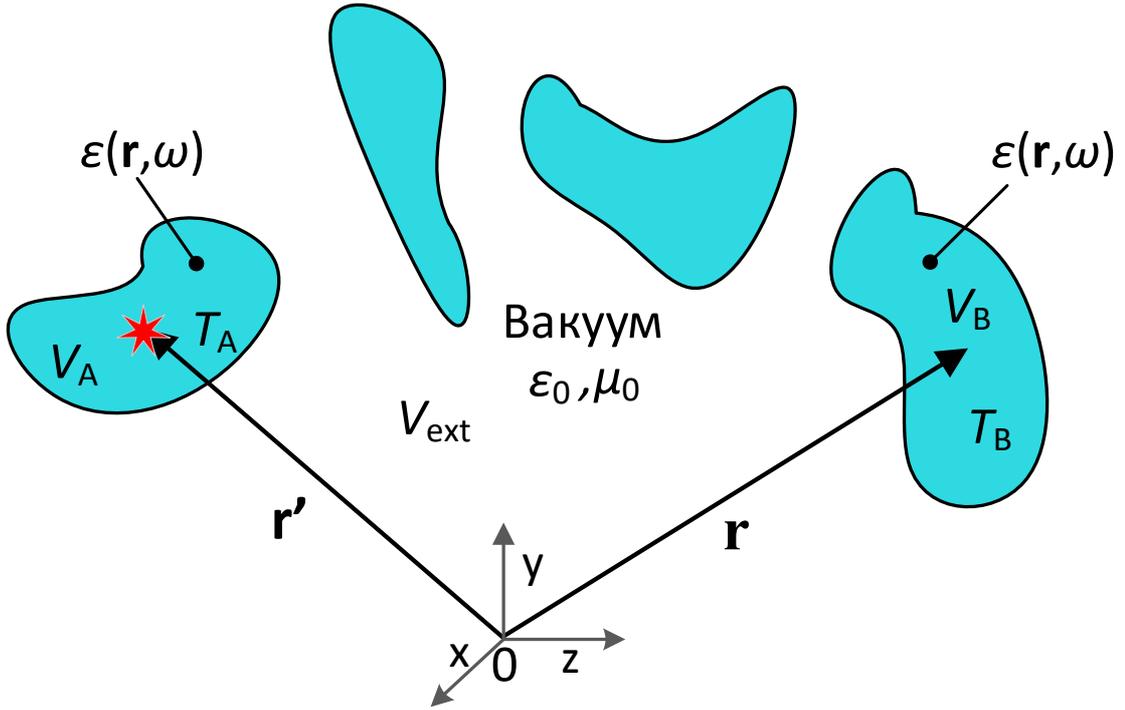


Рис. 1 Схематичное изображение расположения частиц произвольной формы и размера в пространстве.

На макроскопическом уровне эти флуктуации можно представить как колебание стохастической плотности тока $\mathbf{J}^{(fl)}$ внутри частиц. Поскольку электрические поля имеют случайный характер, то их средние по времени значения равны нулю (то есть $\langle \mathbf{J}^{(fl)}(\mathbf{r}, \omega) \rangle = 0$). Поэтому для описания теплопередачи рассматривают поток и плотность энергии, которые определяются средней по ансамблю пространственной корреляционной функцией токов. Для расчета этой функции можно применить флуктуационно-диссипационную теорему, которая устанавливает связь между флуктуациями токов и диссипацией энергии в системе [3]

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}^{(fl)}(\mathbf{r}, \omega) \otimes \mathbf{J}^{(fl)*}(\mathbf{r}', \omega') \rangle \\ = \frac{4\omega\epsilon_0 \operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{r}, \omega)}{\pi} \theta(\omega, T) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\omega - \omega') \bar{\mathbf{I}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где знак \otimes – означает тензорное произведение; $\operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{r})$ – мнимая часть относительной диэлектрической проницаемости; $\theta(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1}$ – средняя энергия электромагнитного состояния (распределение Бозе-

Эйнштейна); \hbar – приведённая постоянная Планка; k_B – постоянная Больцмана; ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума.

2.2 Вывод объёмного интегрального уравнения

Определим поля, создаваемые флуктуирующими токами $\mathbf{J}^{(\text{fl})}$, считая, что они являются гармоническими с временной зависимостью $\exp(-i\omega t)$, где i – мнимая единица. При этом далее большинство величин будут являться функциями от частоты ω , но явно это зависимость будет указана только у итоговых величин, получающихся после интегрирования по координатам. Тогда уравнения Максвелла для монохроматического электромагнитного поля в частотной области можно записать в системе СИ как [7]:

$$\left. \begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= i\omega\mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -i\omega\varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \end{aligned} \right\} \mathbf{r} \in V_{\text{ext}}, \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= i\omega\mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -i\omega\varepsilon_0 m^2(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}) \end{aligned} \right\} \mathbf{r} \in V_{\text{int}},$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ — электрическое и $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ — магнитное поле; μ_0 — магнитная проницаемость вакуума; m — комплексный показатель преломления объекта (частицы); $\mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r})$ — плотность флуктуирующего тока.

Из (2) следуют следующие векторные волновые уравнения для $\mathbf{E}(\mathbf{r})$:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k_0^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{r} \in V_{\text{ext}}, \quad (3)$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k_0^2 m^2(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega\mu_0 \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in V_{\text{int}}, \quad (4)$$

Эти два уравнения можно переписать как одно неоднородное дифференциальное уравнение:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k_0^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) + i\omega\mu_0 \mathbf{J}^{(\text{eq})}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3, \quad (5)$$

где $k_0 \stackrel{\text{def}}{=} \omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ – волновое число в вакууме.

Эквивалентная плотность тока $\mathbf{J}^{(\text{eq})}$ определяется как

$$\mathbf{J}^{(\text{eq})} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \in V_{\text{ext}} \\ \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in V_{\text{int}} \end{cases}, \quad (6)$$

где $U(\mathbf{r})$ – функция (оптического) контраста:

$$U(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \in V_{\text{ext}} \\ k_0^2 [m^2(\mathbf{r}) - 1], & \mathbf{r} \in V_{\text{int}} \end{cases}. \quad (7)$$

Решение для электрического поля волнового уравнения (5) находится с помощью интегрирования по пространству $\mathbb{R}^3 = V_{\text{int}} \cup V_{\text{ext}}$, но так как вне частиц плотность флуктуирующих токов $\mathbf{J}^{(\text{fl})}$ равна нулю, то остаётся только интеграл по объёму частиц V_{int} . Полное электрическое поле представляет собой сумму однородного и частного решений [6]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + i\omega\mu_0 \int_{V_{\text{int}}} d^3\mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}^{(\text{eq})}(\mathbf{r}'), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3, \quad (8)$$

где $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$ — однородное решение, интегральный член — частное решение, $\bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — функция Грина системы. Однородное решение $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$ представляет собой поле, существующее в системе при отсутствии флуктуирующих источников тепла и удовлетворяющее волновому уравнению:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) - k_0^2 \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3. \quad (9)$$

В данной работе мы сосредоточимся на случае, когда нет внешних полей, то есть $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = 0$. Тогда полное электрическое поле упрощается до вида

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega\mu_0 \int_{V_{\text{int}}} d^3\mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}'), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3, \quad (10)$$

где условие, что $\mathbf{J}^{(\text{eq})}(\mathbf{r}') = 0$ для $\mathbf{r}' \in V_{\text{ext}}$, используется для ограничения интеграла областью частицы. Тензорная функция Грина (ТФГ) $\bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ устанавливает связь между электрическим полем в точке \mathbf{r} и точечным источником в точке \mathbf{r}' для заданной частоты ω . ТФГ полностью определяет электромагнитный отклик системы и удовлетворяет исходному волновому уравнению (5):

$$\nabla \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k_0^2 \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \bar{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathbb{R}^3 \quad (11)$$

Функция Грина системы $\bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ может быть выражена через функцию Грина в свободном пространстве $\bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, которая имеет известное аналитическое решение [8]:

$$\bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(ikR)}{4\pi R} \left[\left(\bar{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) + \frac{ikR - 1}{k^2 R^2} \left(\bar{\mathbf{I}} - 3 \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) \right], \quad (12)$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, $R = |\mathbf{R}|$ и $\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}$ — это тензор $(\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})_{\mu\nu} = \mathbf{R}_\mu \mathbf{R}_\nu$ (μ и ν — это декартовы компоненты вектора).

Функция Грина в свободном пространстве описывает реакцию на возбуждение бесконечной однородной среды и удовлетворяет волновому уравнению:

$$\nabla \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k_0^2 \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3. \quad (13)$$

Комбинируя уравнения (13) и (11), получаем модифицированное объёмное интегральное уравнение:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r}'' U(\mathbf{r}'') \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \cdot \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3. \end{aligned} \quad (14)$$

Или это можно переписать в более часто встречающейся форме [7]:

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}'), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3, \quad (15)$$

где $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ — это падающее электрическое поле, создаваемое источниками:

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = i\omega\mu_0 \int_{V_{\text{int}}} d^3 \mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}'), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3. \quad (16)$$

Стоит отметить что в подынтегральном выражении ОИУ (15) содержится тензорная функция Грина (ТФГ), которая имеет особенность (сингулярность) в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, то есть когда точка наблюдения совпадает с точкой источника поля. Для обхода этой проблемы используется интегрирование в смысле главного значения, что позволяет вычислять интегралы с особенностями [9]. При таком подходе из интеграла исключается бесконечно малый объем, содержащий точку сингулярности. Для сферического или кубического исключаяющего объема применение интегрирование в смысле главного значения приводит к тому, что интеграл разбивается на две части: одна содержит особенность, а другая — нет. В итоге интеграл по объёму частицы преобразуется следующим образом [4]:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega)$$

$$= \lim_{V_0 \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus V_0} d^3\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') - \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r})}{3k_0^2}. \quad (17)$$

Подставляя выражение (17) в (15), получаем классическую форму ОИУ:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \left(1 + \frac{U(\mathbf{r})}{3k_0^2} \right) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \lim_{V_0 \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus V_0} d^3\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}'), \quad (18)$$

$$\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3.$$

Уравнение (18) можно переписать в другом виде, как используется в статье [5]:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) k_0^2 \left(\frac{3 + U(\mathbf{r})}{3 U(\mathbf{r})} \right)$$

$$= \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + k_0^2 \lim_{V_0 \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus V_0} d^3\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}'), \quad (19)$$

$$\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3,$$

где $\mathbf{P}(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_0 [\varepsilon(\mathbf{r}) - 1] \mathbf{E}(\mathbf{r})$ – плотность поляризации связана с электрическим полем через оптический поляризационный контраст:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \frac{U(\mathbf{r})}{k_0^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (20)$$

Далее ОИУ (19) будет дискретизировано чтобы получить систему линейных уравнений.

2.3 Дискретизация ОИУ

Метод дискретных диполей, в англоязычной литературе – Discrete dipole approximation (DDA), является численно точным методом для моделирования взаимодействия электромагнитных волн с частицей произвольной формы и внутренней структуры [9,10].

Применим подход МДД для дискретизации ОИУ (19). В самом простом варианте МДД объект разбивается на некоторое конечное количество кубических объемных элементов (вокселей) N с центрами в точках \mathbf{r}_i . Предполагается, что размер вокселей достаточно мал по сравнению с тепловой

длиной волны, и такой, что все характеристические функции, такие как показатель преломления, температура и электрическое поле можно считать постоянными внутри каждого вокселя. Таким образом, каждый воксель обладает свойствами точечного электрического диполя и для которых мы можем оценить ОИУ (19) при $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i$ и аппроксимировать интеграл суммой по всем N диполям. Тогда после дискретизации ОИУ получаем систему линейных уравнений (СЛУ) [5]:

$$\boldsymbol{\alpha}_i^{-1} \mathbf{P}_i = \mathbf{E}_i^{\text{inc}} + k_0^2 \sum_{i \neq j} \bar{\mathbf{G}}_{ij}^0 \mathbf{P}_j, \quad (21)$$

где $\mathbf{P}_i \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{P}(\mathbf{r}_i) V_d$, где $V_d = d^3$ – объем диполя; $\mathbf{E}_i^{\text{inc}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}_i)$; $\bar{\mathbf{G}}_{ij}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega)$; $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_i$ – тензор поляризуемости:

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}}_i = V_d \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \frac{\varepsilon_i + 2\varepsilon_0}{\varepsilon_i - \varepsilon_0} \bar{\mathbf{I}} - \bar{\mathbf{M}}_i \right)^{-1}, \quad (22)$$

где $\varepsilon_i \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon(\mathbf{r}_i)$, $\bar{\mathbf{I}}$ – единичный тензор, а $\bar{\mathbf{M}}_i$ – аппроксимирует собственный интеграл с исключённой сингулярностью:

$$k_0^2 \lim_{V_0 \rightarrow 0} \int_{V_i \setminus V_0} d^3 \mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}') \approx \bar{\mathbf{M}}_i \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}_i), \quad (23)$$

где знак « \approx » подразумевает дискретизацию. Выражение для $\bar{\mathbf{M}}_i$ зависит от конкретного варианта МДД.

Формулы (21) и (22) иллюстрируют наиболее простой вариант МДД, который называется методом точечных диполей с поляризацией Клаузиуса–Моссотти (СМ). Существуют и другие варианты, которые учитывают разные эффекты, связанные с откликом диполя на падающее электрическое поле. Различия разных методов МДД можно видеть по их выражению для поляризуемости и члена взаимодействия $\bar{\mathbf{G}}_{ij}$. Например, в ADDA реализованы такие варианты [1] как «LDR», который учитывает зависимость показателя преломления от периодичности структуры дипольной решётки; метод «RR» – модификация СМ, которая вводит поправку влияния излучения диполя на самого себя; «FCD» – использует фильтрацию для уменьшения ошибок, связанных с дискретизацией структуры; а также метод «IGT», который

основан на интегрировании тензора Грина по объему диполя, что позволяет учесть влияние формы и размера диполя на его поляризацию [11]. Последние 2 варианта изменяют $\bar{\mathbf{G}}_{ij}$, который более не равен выражению $\bar{\mathbf{G}}_{ij}^0$ для точечных диполей.

Таким образом, решение УМ (2) для произвольной частицы сводится к решению СЛУ (21). Эту задачу можно эффективно решать численно, а точность конечного решения определяется глубиной дискретизации по объему. Программа ADDA решает СЛУ (21) и позволяет найти неизвестные дипольные поляризации \mathbf{P}_i чтобы определить характеристики рассеяния, такие как сечение экстинкции и сечение поглощения.

2.4 Вывод характеристик ближнепольного радиационного теплопереноса

Основная характеристика, которая используется при изучении ближнепольного радиационного теплопереноса — это мощность теплопередачи [2,3], то есть количество тепловой энергии, которое передается между двумя телами за единицу времени через электромагнитное излучение. Однако, в отличие от дальнепольного случая, где мощность теплопередачи определяется только температурой и излучательной способностью поверхностей, в ближнепольном случае она также зависит от расстояния между телами и их геометрии.

Как уже было отмечено ранее, в радиационном теплопереносе важную роль играют флуктуационные токи, которые являются источниками стохастических полей. Поэтому основной характеристикой будет выступать мощность теплопередачи, усреднённая по времени.

Рассмотрим тепловой поток между двумя произвольными частицами «А» и «В». Согласно определению [5] мощность поглощаемая частицей «В» равна

$$W_B^{\text{abs}} = \frac{\omega}{2} \int_{V_B} d^3\mathbf{r} \mathbf{E}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) \varepsilon_0 \text{Im} \varepsilon(\mathbf{r}), \quad (24)$$

где полное электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ определяется выражением (10).

Если провести усреднение W_B^{abs} (24) по времени, то мощность теплового потока, передаваемая от частицы «А» к частице «В», можно выразить следующим образом:

$$\begin{aligned}
Q_B(\omega, T_B) &= \langle W_B^{\text{abs}} \rangle = \frac{\omega \varepsilon_0}{2} \int_{V_B} d^3 \mathbf{r} \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}) \langle \|\mathbf{E}(\mathbf{r})\|^2 \rangle \\
&= \frac{\omega^3 \varepsilon_0 \mu_0^2}{2} \int_{V_B} d^3 \mathbf{r} \int_{V_A} d^3 \mathbf{r}' \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}) \langle \|\bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}')\|^2 \rangle \\
&= \frac{k_0^2 \omega \mu_0}{2} \int_{V_B} d^3 \mathbf{r} \int_{V_A} d^3 \mathbf{r}' \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}) \langle \mathbf{J}^{(\text{fl})*}(\mathbf{r}') \cdot (\bar{\mathbf{G}}^{s,H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \cdot \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}') \rangle \\
&= \frac{k_0^2 \omega \mu_0}{2} \int_{V_B} d^3 \mathbf{r} \int_{V_A} d^3 \mathbf{r}' \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}) \operatorname{Tr}[\bar{\mathbf{G}}^{s,H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \langle \mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r}') \otimes \mathbf{J}^{(\text{fl})*}(\mathbf{r}') \rangle \\
&= \frac{2k_0^4}{\pi} \theta(\omega, T_A) \int_{V_B} d^3 \mathbf{r} \int_{V_A} d^3 \mathbf{r}' \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}') \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}) \operatorname{Tr}[\bar{\mathbf{G}}^{s,H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \\
&= \theta(\omega, T_A) \mathcal{F}_{A \rightarrow B}(\omega),
\end{aligned} \tag{25}$$

где H – означает Эрмитово сопряжение, флуктуирующие токи рассматриваются только для той же частоты ω (другие не дают вклада), $\mathcal{F}_{A \rightarrow B}$ – коэффициент спектрального пропускания

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{A \rightarrow B}(\omega) &\stackrel{\text{def}}{=} \iint_{V_A, V_B} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \\
\mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{\pi} k_0^4 \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}) \operatorname{Im} \varepsilon(\mathbf{r}') \operatorname{Tr}[\bar{\mathbf{G}}^{s,H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')].
\end{aligned} \tag{26}$$

Можно заметить, что $\mathcal{F}_{B \rightarrow A}(\omega) = \mathcal{F}_{A \rightarrow B}(\omega)$, поэтому мощность теплообмена между частицами можно определить как [12]:

$$Q_{A,B}(\omega, T_A, T_B) = [\theta(\omega, T_A) - \theta(\omega, T_B)] \mathcal{F}_{A \rightarrow B}(\omega). \tag{27}$$

Таким образом, мощность теплообмена между частицами является функцией двух значений температур. Если температуры равны между собой, то мощность теплообмена, строго говоря, равна нулю и это не является информативным параметром системы. Но в реальности у равных по температуре частиц $T_A = T_B = T$ постоянно происходят малые отклонения температуры $\delta T = T_A - T_B$ вследствие тепловых флуктуаций. Следовательно, характеристикой процесса ближнепольного теплопереноса должна быть производная по температуре от мощности теплообмена, которую

называют спектральная проводимость. Она определяется следующей формулой:

$$G_{A,B}(\omega, T) = \lim_{T_A \rightarrow T_B = T} \frac{Q_{A,B}}{T_A - T_B} = \frac{\partial \theta(\omega, T)}{\partial T} \mathcal{F}_{A \rightarrow B}(\omega). \quad (28)$$

При дискретизации интегралы превращаются в суммы и получается:

$$G_{A,B}(\omega, T) = \frac{\partial \theta(\omega, T)}{\partial T} \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} \mathcal{F}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Delta V_i \Delta V_j, \quad (29)$$

где N_A, N_B – число диполей в частице «А» и «В», соответственно.

Формулы (26) – (29) соответствуют математически более строгому выводу теории БРТП в статье [12], где было показано обобщение данной теории для случая излучения абсолютно чёрных тел. В этой статье все объёмные интегралы были преобразованы в интегралы по поверхностям частиц используя теорему Грина для тензорной функции [13]. Если характерный размер $l_1 \gg 1$ и расстояние между частицами $l_2 \gg 1$, то рассеянием можно пренебречь. Таким образом, $\bar{\mathbf{G}}^s$ в формуле (26) можно заменить на предел ТФГ в свободном пространстве $\bar{\mathbf{G}}_1^0 = \frac{\exp(ikR)}{4\pi R} \left[\left(\bar{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) \right]$, и тогда аналог формулы (27) в виде поверхностных интегралов преобразуется в классический закон Стефана-Больцмана.

3 Цель и задачи текущей работы

Цель: эффективно моделировать ближнепольный радиационный теплоперенос для частиц произвольной формы и внутренней структуры, используя ADDA.

Основные задачи:

1. Реализовать алгоритм (скрипт на Python) расчёта ближнепольного радиационного теплопереноса для двух частиц;
2. Сравнить результаты моделирования с аналитическим решением (в случае сферических частиц) и с другими работами в этой области;
3. Оптимизировать работу скрипта, то есть уменьшить использование вычислительных ресурсов.

Постановка задачи:

Условие: Две частицы произвольной формы расположены в вакууме на расстоянии порядка тепловой длины волны друг от друга. Температуры и диэлектрические свойства частиц могут быть любые. Материал и окружающая среда не магнитные.

Задача: рассчитать спектральную проводимость между частицами.

4 Реализация ближнепольного радиационного теплопереноса

4.1 Как получить ТФГ системы с помощью ADDA.

В этом пункте разберёмся что из себя представляет тензор Грина $\bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ с математической точки зрения. Ранее было показано, что тензор Грина зависит от двух переменных – от положения источника излучения \mathbf{r}' и от той точки, в которой мы наблюдаем его действие \mathbf{r} (для произвольной частоты). Получается, что ТФГ это тензор второго ранга, у которого девять комплексных компонент. Компоненты ТФГ можно записать в виде комплексной матрицы 3×3

$$\bar{\mathbf{G}}^s = \begin{pmatrix} G_{11}^s & G_{12}^s & G_{13}^s \\ G_{21}^s & G_{22}^s & G_{23}^s \\ G_{31}^s & G_{32}^s & G_{33}^s \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Результирующее электрическое поле \mathbf{E} связано с дипольным моментом \mathbf{P}_0 источника через ТФГ системы

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{k^2}{\varepsilon_0} \bar{\mathbf{G}}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{P}_0. \quad (31)$$

Математически это выражение означает произведение матрицы тензора $\bar{\mathbf{G}}^s$ на вектор поляризации (дипольного момента) пробного источника \mathbf{P}_0 . В результате чего получается вектор из трёх комплексных компонент.

Дипольный момент \mathbf{P}_0 определяется формулой

$$\mathbf{P}_0 = |k^{-3}| \mathbf{a}, \quad (32)$$

где \mathbf{a} – вектор направления дипольного момента пробного источника, который может быть направлен вдоль одной из декартовых осей координат, то есть

$$\mathbf{a} = \mathbf{e}_\nu, \quad \nu = 1, \dots, 3 \quad (33)$$

Причём выбор модуля дипольного момента $|k^{-3}|$ не имеет значения, так как электрические поля, порождённые пробным источником \mathbf{P}_0 делятся на величину дипольного момента, чтобы, в итоге, получить компоненты ТФГ.

Зафиксируем положения источника \mathbf{r}_0 и точки наблюдения \mathbf{r} , и запишем произведение (31) через индексы

$$E_\mu^\nu = \frac{1}{\varepsilon_0 k} G_{\mu\nu}^s, \quad (34)$$

где $\mu, \nu = 1, 2, 3$ – декартовых компоненты векторов и тензоров, при этом верхний индекс ν обозначает поля, полученные для разных направлений дипольного момента. Таким образом, с помощью трёх разных по направлению и одинаковых по модулю поляризацій пробного источника можно получить все компоненты ТФГ.

Далее если внимательно посмотреть на коэффициент спектрального пропускания (26), можно заметить, что он содержит квадрат нормы Фробениуса от ТФГ

$$\begin{aligned} \|\bar{\mathbf{G}}^s\|_F^2 &= \text{Tr}[\bar{\mathbf{G}}^{s,H}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \bar{\mathbf{G}}^s(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}')] = \sum_{\mu, \nu} |G_{\mu\nu}^s|^2 = (\varepsilon_0 k)^2 \sum_{\mu, \nu} |E_\mu^\nu|^2 \\ &= (\varepsilon_0 k)^2 \sum_\nu \|\mathbf{E}^\nu\|^2. \end{aligned} \quad (35)$$

То есть, по сути, требуется вычислить квадраты электрических полей для каждого направления дипольного момента пробного источника. Именно поэтому для каждого положения источника требуется трижды запускать ADDA.

4.2 Существующие численные схемы размещения источников внутри частицы.

Существует множество вариантов МДД и достоверно известно, что все они при увеличении дискретизации сходятся к точному решению, если источник располагается вне частицы [14]. Но для моделирования ближнепольного радиационного теплопереноса (БРТП) требуется размещение

источников внутри частицы, и в этом случае уже нет готовых теоретических результатов, а следовательно, нет гарантий, что какой-то из вариантов МДД будет корректно работать. Вообще, задача правильного размещения источников внутри частиц не является тривиальной и требует тщательно изучения. Тем не менее уже существует немало работ в области моделирования БРТП, где используются разные методы, приводящие к разумным результатам, но без должного теоретического обоснования. В этом разделе будет сделан небольшой обзор разных вариантов МДД, которые можно применить к БРТП, и показана их эквивалентность без строгих математических доказательств.

Для начала нужно установить критерий сходимости метода. В недавнем докладе [15] было представлено необходимое условие сходимости ММД при помещении источников внутрь частицы. Далее будем ориентироваться на этот критерий, то есть если он выполняется, то можно надеяться, что вариант МДД будет сходиться к точному решению.

Рассмотрим сумму линейных уравнений МДД в статическом пределе, то есть, когда $kr \rightarrow 0$:

$$\sum_i \left| \mathbf{P}_i - k^2 V_d \chi \sum_j \bar{\mathbf{G}}_{ij}^{\text{st}} \cdot \mathbf{P}_j = k^2 V_d \chi \bar{\mathbf{G}}^{\text{st}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{P}_0, \right. \quad (36)$$

где $\chi = \varepsilon_0[\varepsilon(\mathbf{r}) - 1]$, $\bar{\mathbf{G}}_{ij}^{\text{st}}$ – статический тензор Грина

$$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \xrightarrow{kr \rightarrow 0} \bar{\mathbf{G}}^{\text{st}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (37)$$

где $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – определяется вариантом МДД (в случае СМ $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$).

Определим $\mathbf{P}_\Sigma \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i \mathbf{P}_i$; $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} k^2 V_d \sum_i \bar{\mathbf{G}}^{\text{st}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r})$. Причём $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_j) = \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{0})$, если мы рассматриваем большую регулярную решетку диполей (за исключением края решетки). При этом использование статического предела не позволяет перейти к пределу действительно бесконечных расстояний. Поэтому мы рассматриваем предел, когда вся частица много больше длины волны, но состоит из большого количества диполей, для большинства из которых сумма в определении $\bar{\mathbf{N}}$ может считаться бесконечной. При этом данная сумма является лишь условно сходящейся, поэтому важно определить

внешнюю геометрическую границу [16]. Это обсуждается для конкретного примера ниже.

В рамках данных предположений получаем

$$\mathbf{P}_\Sigma - \chi \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{P}_\Sigma = \chi \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{P}_0. \quad (38)$$

Далее применим этот анализ к задаче точечного источника внутри маленького шара (вдали от границы). Для этой задачи известно точное решение, как экранируется дипольный момент источника, а именно полный результирующий дипольный момент должен равняться $3\mathbf{P}_0/(\chi + 3)$. Необходимым условием адекватности МДД является согласие с этим решением, т. е.

$$\mathbf{P}_0 + \mathbf{P}_\Sigma = \frac{3}{\chi + 3} \mathbf{P}_0. \quad (39)$$

Или это можно переписать как условие согласованности на сумму ТФГ по сферическим оболочкам (что соответствует форме внешней границы):

$$\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = k^2 V_d \sum_i \bar{\mathbf{G}}^{st}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = -\bar{\mathbf{I}}/3. \quad (40)$$

Если $\forall \mathbf{r}: \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = -\bar{\mathbf{I}}/3$, то метод работает корректно и ожидаются разумные результаты для частиц любой формы. Если же $\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{r}_0) \neq -\bar{\mathbf{I}}/3$, то метод явно дает неправильные результаты, но остается потенциальная возможность, что рассчитанную таким методом ТФГ можно исправить с помощью умножения на некий коэффициент. Отметим также, что данный анализ можно рассматривать как обобщение [16], где рассматривалась задача рассеяния плоской волны малым шаром для решетки диполей в виде прямоугольных параллелепипедов. Это приводит к такому же условию, но только для $\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{0})$. В частности, в той работе было показано, что для кубических диполей (которые рассматриваются в данной работе) $\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{0}) = -\bar{\mathbf{I}}/3$ выполняется для любых вариантов МДД за счет симметрии, что объясняет их успешное применение в любых задачах рассеяния. Однако, условие (40) для произвольного \mathbf{r} намного более сильное ввиду нарушенной симметрии.

До сих пор при моделировании БРТП с помощью МДД применялся только классический подход на основе взаимодействия точечных диполей, который в статическом пределе сводится к поляризуемости Клаузиуса–Моссотти (СМ), которая была выведена в пунктах 2.2 и 2.3. Чтобы удовлетворить условию согласованности (40) или скорректировать результат после, разными группами учёных было реализовано несколько оригинальных способов размещения источников.

Первый способ заключается в том, чтобы размещать источники между диполями частицы, при этом $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_0)$ автоматически равна нулю. Этот подход был предложен Rahmani [17], но применялся не для БРТП, а для усиления излучения источника. Объяснение состоит в том, что все точечные диполи частицы, по которым происходит суммирование, можно разбить на кубические оболочки. При этом статический тензор Грина $\bar{\mathbf{G}}^{\text{st}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_i)$ обладает свойством симметрии, таким что сумма по любой кубической оболочке равна нулю [16].

Согласно статье Rahmani [17], чтобы удовлетворить правилу суммы, требуется заменить пробный дипольный момент \mathbf{P}_0 на скорректированный тензором $\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{r}_0)$, то есть $\mathbf{P}_0 \rightarrow \bar{\mathbf{C}}(\mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{P}_0$, где $\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{r}_0)$ равен

$$\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{r}_0) \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\mathbf{I}} + \chi \left[\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_0) + \frac{\bar{\mathbf{I}}}{3} \right], \quad (41)$$

что следует из ур. (38) и свойства $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{0}) = -\bar{\mathbf{I}}/3$. В данном случае $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_0) = 0$, следовательно

$$\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{r}_0) = \left(1 + \frac{\chi}{3} \right) \bar{\mathbf{I}}. \quad (42)$$

Получается, что, когда происходит деление электрического поля на пробный дипольный момент (см. пункт 4.1) модуль величины ТФГ делится на коэффициент $L = |1 + \chi/3|$. Но так как в искомую спектральную проводимость входит квадрат нормы Фробениуса ТФГ, то конечная формула делится уже на L^2 . Соответственно, $\|\bar{\mathbf{G}}^{\text{s}}\|_F^2$, полученное через ур. (35), нужно

поделить на L^2 . В следующей главе будет показана реализация этого метода в ADDA.

Второй способ похож на первый, но отличается в расположении источников внутри частицы. Согласно этому методу, источники помещаются точно в узлы дипольной решётки частицы, при этом сами диполи частицы удаляются, что позволяет обойти проблему сингулярности (см. пункт 2.2). Таким образом, в этом случае сумма $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_0)$ равна нулю по тем же самым причинам что и в первом способе. Данный метод был предложен Rahmani [18] и реализован Edalatpour [3] в программе T-DDA или «thermal discrete dipole approximation», что означает применение МДД к БРТП. При этом Edalatpour использует другую теоретическую схему, в которой рассматривается не источник, помещенный внутрь однородной частицы, а флуктуирующий один из диполей дискретизации. В частности, флуктуационно-диссипационная теорема (ФДТ), записывается в терминах дипольных моментов $\mathbf{p}^{(\text{fl})}$ (а не токов):

$$\langle \mathbf{p}^{(\text{fl})} \otimes \mathbf{p}^{(\text{fl})*} \rangle = \frac{4 \text{Im}[\alpha^{\text{CM}}(\mathbf{r}, \omega)]}{\pi \omega} \theta(\omega, T) \bar{\mathbf{I}}, \quad (43)$$

где $\text{Im}[\alpha^{\text{CM}}]$ – мнимая часть дипольной поляризуемости СМ:

$$\text{Im}[\alpha^{\text{CM}}] = V_d \varepsilon_0 \text{Im} \varepsilon \left| \frac{3}{\varepsilon + 2} \right|^2 = \frac{V_d \varepsilon_0 \text{Im} \varepsilon}{L^2}. \quad (44)$$

Можно заметить, что данная ФДТ (43) отличается от классической (1) не только на ожидаемый размерный коэффициент V_d/ω^2 , но и на коэффициент L^2 . Это связано с нетривиальной связью между $\mathbf{p}^{(\text{fl})}$ и $\mathbf{J}^{(\text{fl})}(\mathbf{r})$ для малой частицы (диполя), что обсуждается в главе 3.2 в [19]. Но и ТФГ вычисляется тоже для этой же задачи (один из диполей дискретизации в качестве источника), отличающейся на коэффициент L от $\bar{\mathbf{G}}^s$, используемый в данной работе. И именно для этой ТФГ численная схема с заменой диполя дает правильный результат. Можно сказать, что в T-DDA используется другая ТФГ и другая ФДТ (43) но, в итоге, получается та же величина спектральной

проводимости (29). При этом не требуется явно использовать корректирующие коэффициенты.

Третий способ реализован в недавней статье Walter [6] и называется «discrete system Green's function» или DSGF подход. Источники здесь также располагаются в узлах дипольной решётки частицы, но сами диполи дискретизации не удаляются. В этой точке возникает сингулярность (см. пункт 2.2), которую необходимо правильно разрешить. Естественное решение состоит в том, чтобы вычислить интеграл в ОИУ (15) так же, как это делается в строгом выводе МДД [9], и получить значение $\bar{\mathbf{G}}_{ii}$, которое связано с поляризуемостью. В статическом пределе $\bar{\mathbf{G}}_{ii}^{\text{st}} = -\bar{\mathbf{I}}/(3k^2V_d)$ для любого варианта МДД, что гарантирует выполнение условия (40), и корректную работу метода. В дополнительных материалах статьи [6] показано, что DSGF подход численно эквивалентен методу реализованному в T-DDA, поэтому имеет смысл сравнивать только с одним из этих методов. В следующей главе будет проведено непосредственное сравнение результатов ADDA с DSGF подходом, исходный код которого был любезно предоставлен Walter.

Далее разберём новый подход к моделированию БРТП на основе варианта IGT, реализованной в ADDA – это будет являться основным методом в данной работе. IGT (integration of Green's tensor) получается непосредственно из ОИУ (14), путем интегрирования тензора Грина по объему диполя (в нашем случае по кубу):

$$\bar{\mathbf{G}}^{\text{IGT}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V_d} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{V_d \setminus V_\delta} d^3\mathbf{R} \bar{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{R}) - \frac{\mathbf{1}_{V_d}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{3k^2V_d} \bar{\mathbf{I}}, \quad (45)$$

где $\mathbf{1}_{V_d}$ индикаторная функция объема (равна 1, когда аргумент внутри объема, и 0 иначе), и соответствующий член определяет результат, когда источник находится внутри объема (включая $\bar{\mathbf{G}}_{ii}$, обсуждаемый выше).

По сути этот метод отличается от рассмотренного ранее СМ тем, что в ОИУ (21) аналитическая ТФГ $\bar{\mathbf{G}}^0$ заменяется на более точную $\bar{\mathbf{G}}^{\text{IGT}}$, которую можно рассчитать численно. Единственное используемое приближение — это

медленное изменение χ и \mathbf{E} , что разумно, если частица разбивается на достаточно маленькие диполи (воксели) [16].

Главное преимущество IGT в том, что сумма в определении $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_0)$ преобразуется в интеграл по всему объему частицы (аналогично [16]), откуда легко доказать выполнение условия (40) для любого положения источника. При этом далее мы используем так называемый IGT_{SO} вариант МДД, в котором интегралы вычисляются в квадратурах за счет небольших погрешностей. SO – обозначает «second order», т.е. формулы точно учитывают все члены $\mathcal{O}[(kd)^2]$, и остающаяся погрешность $\mathcal{O}[(kd)^4]$ [11]. Эта погрешность в большинстве случаев пренебрежимо мала по сравнению с другими ошибками в МДД (например, за счет приближения поля постоянным внутри диполя). Особенно мала эта ошибка для частиц меньше длины волны, так как тогда kd очень мало. В частности, в докладе [15] было показано, что IGT_{SO} надежно работает для малых частиц – рассчитанное усиление излучения плавно меняется от положения источника внутри частицы. Результат практически не зависит от положения внутри одного диполя в резком контрасте с поведением для варианта МДД на основе взаимодействия точечных диполей.

Таким образом, при использовании IGT_{SO} конкретный способ размещения источников внутри частицы не имеет большого значения. В дальнейших моделированиях БРТП источники помещаются на расстоянии одной сотой размера диполя от центра диполей для исключения потенциальных проблем с ошибками округления (для текущей реализации IGT_{SO} в ADDA). С точки зрения результатов, данное расположение источников внутри частицы эквивалентно их размещению на дипольной решётке частицы. Результаты для другого расположения (например, равноудаленно от центров диполей) будут отличаться лишь за счет граничных эффектов (но это пока не исследовалось).

В следующей главе будет проведено сравнение моделирования БРТП с помощью IGT_{SO} в ADDA с другими описанными выше методами, также будет

показана сходимость метода IGT к аналитическому решению в случае сферических частиц.

4.3 Реализация БРТП с помощью ADDA.

Как уже было ранее упомянуто тепловые флуктуации можно моделировать, помещая источник (осциллирующий диполь) электрического поля в частицу. Для того чтобы учесть возникновение случайных тепловых флуктуаций во всём объёме частицы, нужно помещать источник в каждый диполь (воксель) частицы. Таким образом, с помощью скрипта на языке Python происходит многократный запуск ADDA IGT_{SO}, причём для каждого положения диполя частицы трижды (см. пункт 4.1), то есть $3N_g^3$ раз для фиксированной частоты источника, где N_g – число диполей, приходящихся на одно измерение (декартову координату). При каждом запуске ADDA сохраняется файл со значениями электрического поля внутри каждой из частиц.

В разделе 2.4 было показано, что при расчёте БРТП между двумя частицами «А» и «В» необходимо вычислить два интеграла по объёму каждой из частиц. Для вычисления этих интегралов скрипт запускает ADDA с источником внутри частицы «А» (с тремя разными направлениями дипольного момента) и суммирует квадрат модуля вычисленного поля по диполям внутри частицы «В» (получается интеграл по частице «В»). Далее этот процесс повторяется для разных положения источника, чтобы вычислить интеграл по частице «А». Этот процесс вычисления интегралов иллюстрирует формула (29). Повторяя эту процедуру на разных частотах, скрипт строит график спектральной проводимости в интересующем диапазоне.

По сути, вышеизложенный метод вычисления интегралов можно назвать трёхмерным методом трапеций. Поэтому если говорить о погрешности нахождения интегралов, то её грубая оценка составляет $\mathcal{O}[(N_g)^{-2}]$. Порядок величины этой погрешности не больше, чем погрешность метода IGT_{SO} применённому к МДД (т. е. погрешность подынтегральной функции), конечно, при достаточной дискретизации. Поэтому каких-то проблем,

связанных с точностью вычисления интегралов, не ожидается, что далее будет видно в результатах моделирования.

5 Результаты моделирования

5.1 Сравнение с точным решением

Для начала проведём сравнение текущей реализации IGT_{SO} в ADDA с аналитическим решением для шаров, чтобы убедиться в правильности его работы. В случае двух шаров существует аналитическое решение задачи БРТП, которое можно получить с помощью теории Ми. Общая теория БРТП и её реализация в рамках теории Ми была проведена в статье [20], в результате чего был разработан код в ПО Wolfram Mathematica и выложен в открытый доступ. Именно с помощью этого кода далее будет получено аналитическое решение БРТП для шаров.

Промоделируем взаимодействие двух шаров в вакууме. Конкретные геометрические и физические параметры частиц были выбраны для удобства такими же, что представлены в статье [3]. А именно: расстояние между частицами $d = 0.5$ мкм, диаметр частиц $D = 0.5$ мкм, температура каждой частицы $T = 400$ К. В качестве материала использовался аморфный диоксид кремния [21], так как он даёт заметные резонансы в области теплового излучения при комнатной температуре.

Чтобы продемонстрировать сходимость решения ADDA были проведены три моделирования для разной дискретизации частиц (см. Рис. 2). На Рис. 2 видно, что с увеличением дискретизации пунктирные линии (ADDA) всё ближе приближаются к аналитике (зелёной линии). По сути, этот график (Рис. 2) повторяет результат моделирования шаров из статьи Edalatpour [3].

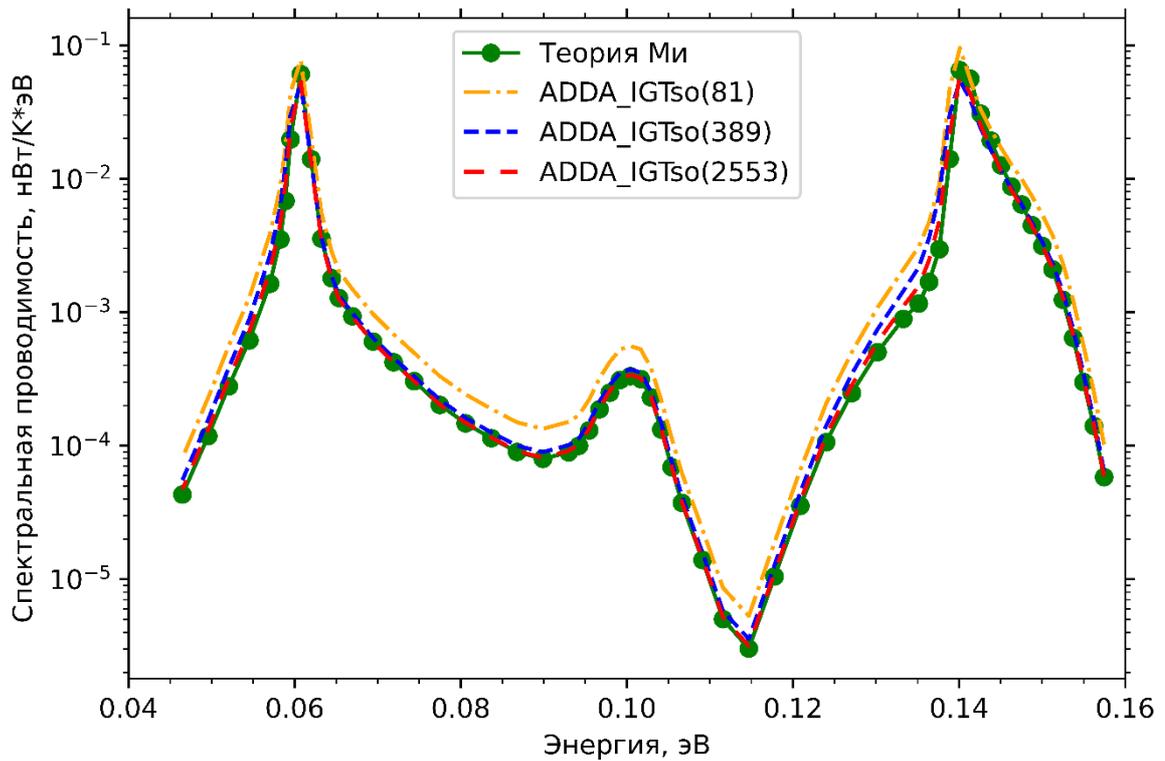


Рис. 2 Графики спектральной проводимости для шаров в вакууме с температурой $T = 400\text{K}$, расстояние между частицами $d = 0.5\text{ мкм}$, размер (диаметр) частиц $D = 0.5\text{ мкм}$; зеленая линия – теория Ми, пунктирные линии – метод IGT_{SO} с разной дискретизацией (81/389/2553 диполей на частицу).

Для того, чтобы количественно показать сходимость решения ADDA IGT_{SO}, зафиксируем энергию падающей волны $E = 0.1351\text{eV}$ (где наблюдается одно из самых больших отличий от теории Ми – около 35 %). На Рис. 3, продемонстрирована сходимость значений как функция от $1/N_g$. Самая большая дискретизация на этом графике (Рис. 3) $N_g = 31$, что эквивалентно 15520 диполей на одну частицу. Здесь нужно отметить, что уже дискретизация $N_g = 31$ требует больших вычислительных ресурсов, так как при моделировании учитывается взаимодействие между двумя частицами. Конкретно на 6 ядрах процессора «AMD Ryzen 7 6800 3.20 GHz» моделирование заняло около суток только для одной частоты.

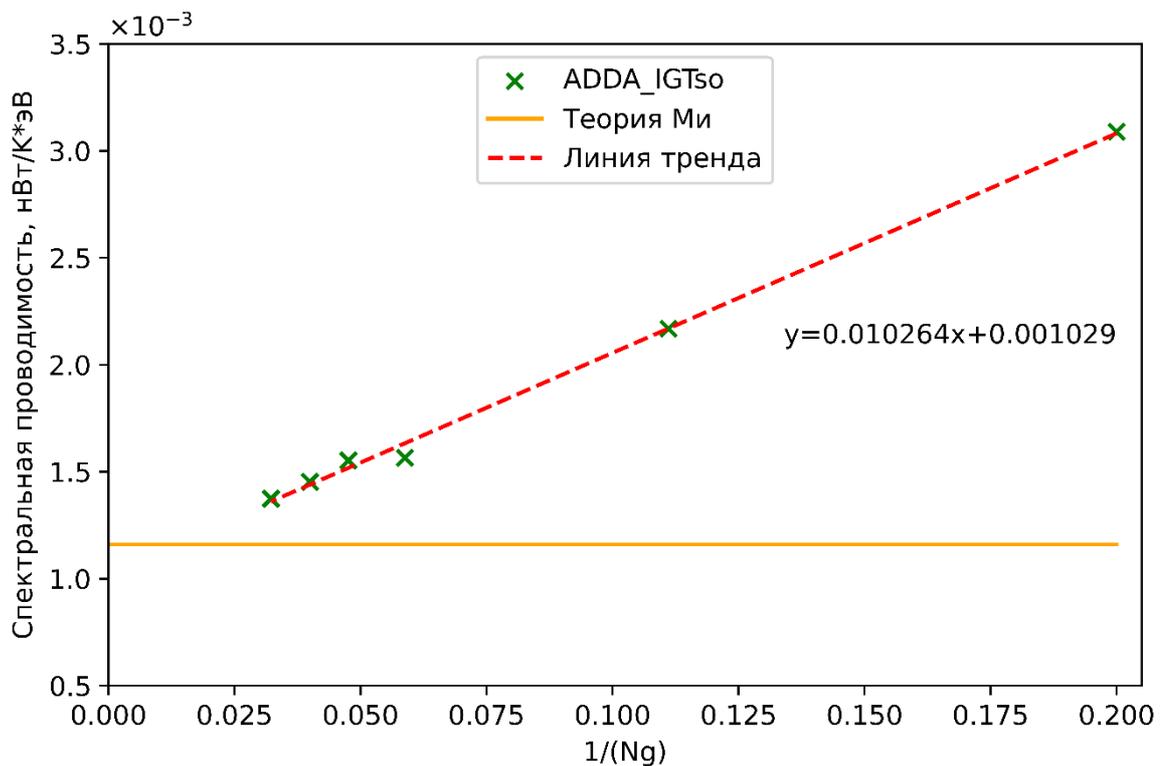


Рис. 3 Сходимость метода IGT_{SO} (обозначено зелёными крестиками) к теории Ми (оранжевая линия) в точке с энергией падающей волны $E = 0.1351$ эВ; красным пунктиром обозначена линейная регрессия.

Если провести прямую линию тренда через все полученные при моделировании точки, она пересечет ось ординат в точке со значением 1.03×10^{-3} нВт/(К эВ), что отличается от эталонного значения на 11%. Такой анализ является простейшим случаем экстраполяции Ричардсона (т.к. значение в нуле соответствует бесконечной дискретизации) и само получаемое таким образом значение имеет погрешность [14]. Изучение такой экстраполяции для моделирования БРТП является актуальной темой для дальнейших исследований, но данные результаты уже качественно демонстрируют сходимость метода. В частности, они показывают, что практически достижима точность порядка 10% даже для «металлических» показателей преломления, которые особо сложны для МДД [22]. Тем более, если смотреть на различия с теорией Ми вдали от резонансных пиков (0.08 эВ, 0.16 эВ), то ошибка составляет менее чем 10% уже для дискретизации 2553 диполей на частицу.

Также интересно будет рассмотреть сходимость решения $ADDA\ IGT_{SO}$ для случая взаимодействия кубов с теми же характеристиками что и для

шаров. Конечно, в этом случае уже не существует аналитического решения, но всё же можно ориентироваться на различия между результатами для разных уровней дискретизации. На Рис. 4 видно, что решение очень быстро сходится (пунктирные линии), и даже при относительно небольшой дискретизации (оранжевая пунктирная линия) получается правильное решение (мало отличающееся от красной пунктирной линии). Этот результат полностью согласуется с результатами статьи [22] по исследованию наночастиц золота, где было показано, что для кубов ошибка моделирования на порядок меньше, чем для шаров при той же дискретизации. Объяснение состоит в том, что в случае кубов отсутствует ошибка формы, которая возникает, когда частицу аппроксимируют набором кубических диполей.

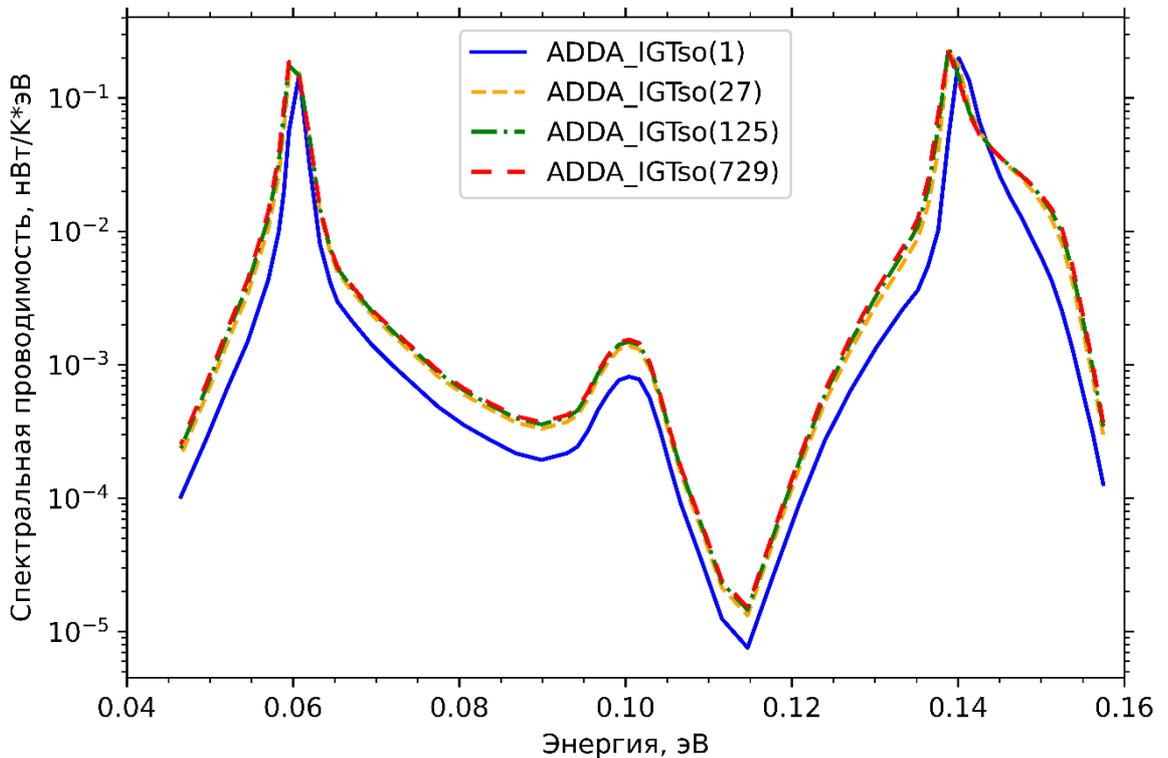


Рис. 4 Спектральная проводимость между двумя кубами в вакууме, полученная методом IGT_{SO} с разной дискретизацией (1/27/125/729 диполей на частицу). Температура частиц $T = 400\text{K}$, расстояние между частицами $d = 0.5\text{ мкм}$, размер (длина стороны) частиц $D = 0.5\text{ мкм}$.

5.2 Сравнение с другими реализациями МДД

Первый метод, с которым будет проведено сравнение — это метод точечных диполей (CM), в котором источники располагаются строго между диполями частицы. Так как метод CM реализован в ADDA, можно

непосредственно проверить на работоспособность данный метод моделирования БРТП.

Промоделируем спектральную проводимость для той же задачи двух кубов, что и в предыдущем пункте (см. Рис. 4). На Рис. 5 видно, что при делении на коэффициент L^2 спектра без коррекции (красная пунктирная линия) получается график (оранжевая пунктирная линия), который уже довольно хорошо повторяет спектр IGT_{SO} (зелёная линия). Но всё же в области одного из резонансных пиков с энергией 0.14 эВ наблюдается заметная ошибка в сравнении с IGT_{SO} более чем в несколько раз. Данная погрешность появляется из-за использования поправочного коэффициента L^2 для источников на границе частицы.

В этой численной схеме дипольная решётка частицы оказывается вложена в решётку источников, то есть число источников вдоль оси равно N_g+1 . Как уже было упомянуто в пункте 4.3, для вычисления интегралов используется трёхмерный метод трапеции, поэтому источники на границе частицы суммируются с соответствующими весами, что, в итоге, даёт полный объём частицы. При этом для источников на границе используется тот же самый поправочный коэффициент L^2 который верен только для источников внутри частицы. Существенные отличия в резонансных пиках можно объяснить тем, что в области резонансных пиков величина L^2 имеет экстремумы в результате чего при нормировке на этот коэффициент получается большая ошибка для граничных диполей. Это объяснение подтверждает и то, что при увеличении дискретизации частицы (синяя пунктирная линия) решение начинает сходиться к IGT_{SO} , так как доля граничных источников по отношению к внутренним сокращается. В общем, можно сделать вывод, что этот метод работает, но из-за проблем с учётом граничных диполей такой подход к моделированию БРТП не рекомендуется использовать на практике.

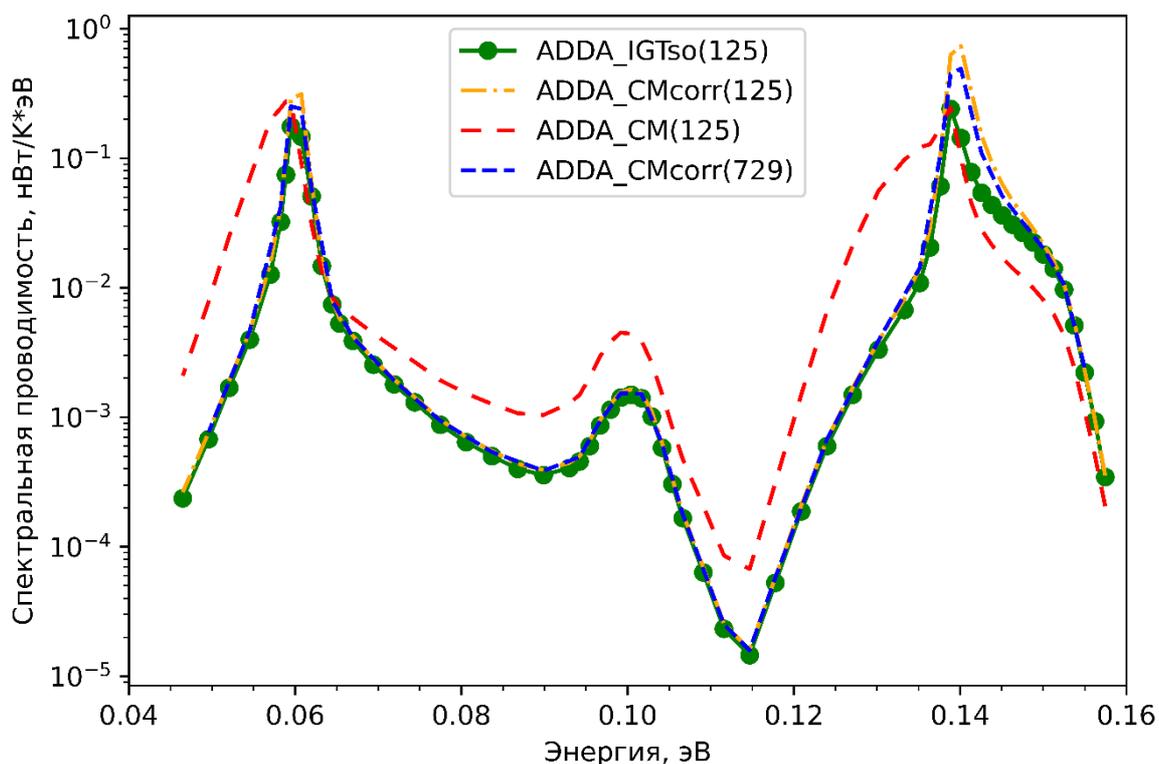


Рис. 5 Сравнение спектральной проводимости для кубов, которая получена с помощью метода IGT_{SO} и Клаузиуса-Моссотти в ADDA. Синяя и оранжевая пунктирные линии получены с учётом коэффициента L^2 , красная — без учёта.

Другие два метода моделирования БРТП, описанные в пункте 4.2, численно эквивалентны, поэтому проведём сравнение с более новым DSGF подходом. Для удобства возьмём все те же параметры кубических частиц из пункта 5.1 и промоделируем спектры с разной дискретизацией. На Рис. 6 и Рис. 7 можно видеть, что спектры, полученные с помощью ADDA и DSGF совпадают так, что относительная ошибка составляет не более 10%, причём с увеличением дискретизации она (ошибка) уменьшается. Причиной данной погрешности, естественно, является то, что в этих методах используются разные численные схемы, которые с разной скоростью сходятся к точному решению. Тем не менее этот результат впечатляет и ещё раз подтверждает то, что моделирование с помощью ADDA IGT_{SO} происходит правильно.

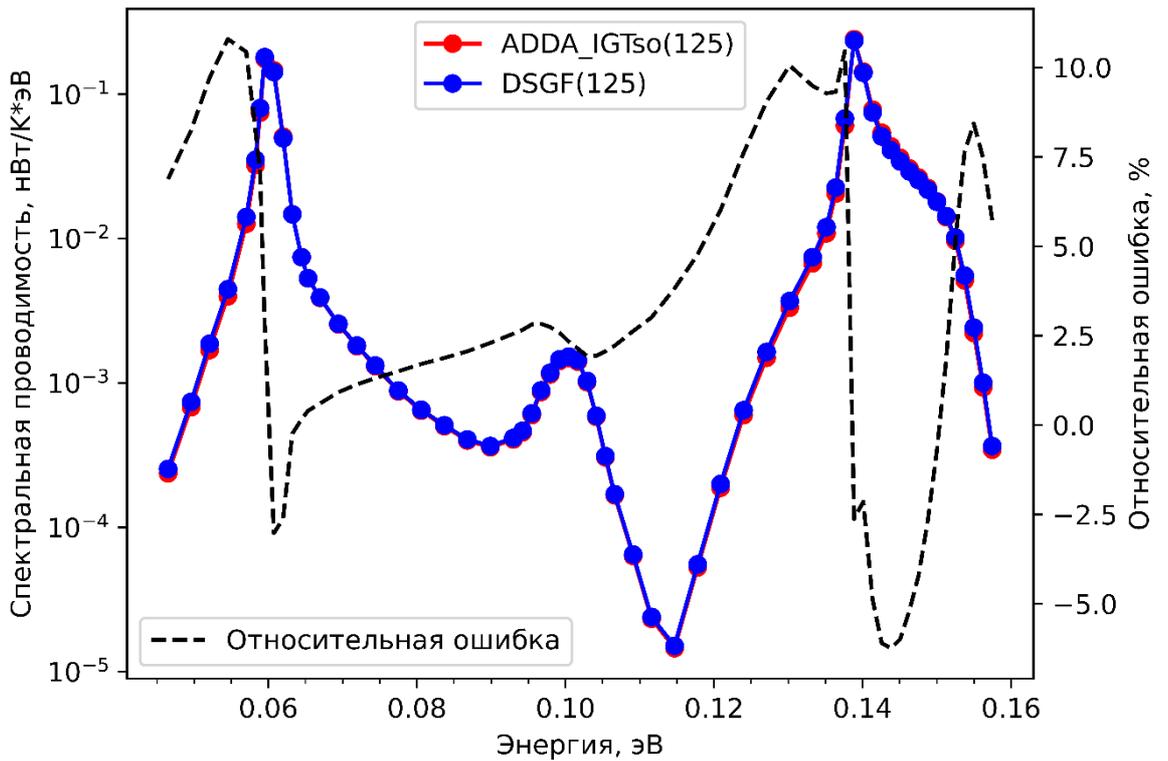


Рис. 6 Сравнение спектральных проводимостей, вычисленных с помощью метода ADDA IGT_{SO} и DSGF, для кубов в вакууме с дискретизацией 125 диполей на всю частицу; температурой частиц $T = 400\text{K}$, расстояние между частицами $d = 0.5\text{ мкм}$, размер (длина стороны) частиц $D = 0.5\text{ мкм}$.

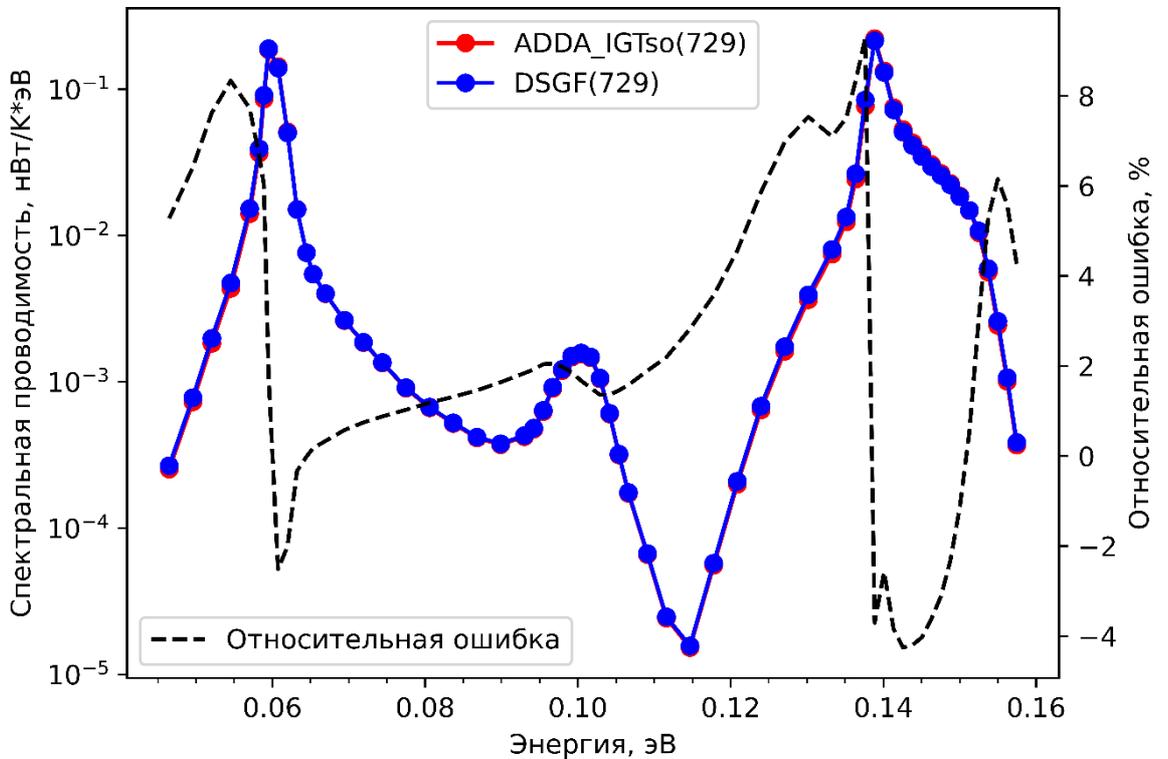


Рис. 7 Сравнение спектральных проводимостей метода ADDA IGT_{SO} с DSGF для кубических частиц в вакууме с дискретизацией 729 диполей на частицу; температурой частиц $T = 400\text{K}$, расстояние между частицами $d = 0.5\text{ мкм}$, размер частиц $D = 0.5\text{ мкм}$.

6 Заключение

В данной работе был проведён литературный обзор теории БРТП на основе объемного интегрального уравнения, а также существующих методов моделирования БРТП с помощью МДД. Далее было предложено два новых метода, которые ранее не применялись к БРТП. Была строго выведена эквивалентность всех этих подходов к моделированию БРТП (в пределах бесконечной дискретизации) на основе выполнения условия согласованности (40).

Для моделирования БРТП в программном пакете ADDA был разработан скрипт на языке Python, который запускает ADDA с необходимыми параметрами. Этот скрипт был протестирован на относительно простых формах частицы (кубы и шары), в сравнении с аналитическими методами и другими методами на основе МДД. Подход ADDA IGT_{SO} показал самую быструю сходимость к точному решению, а при сравнении с подходом DSGF получилось хорошее совпадение (ошибка не более 10% и уменьшается при увеличении числа диполей). Другой подход к моделированию БРТП на основе СМ, реализованный в ADDA, на практике продемонстрировал свою неэффективность из-за больших ошибок в области резонансных пиков, основной вклад в которые вносят источники на границе частицы. Если в дальнейшем удастся найти корректировочный коэффициент для граничных источников, это улучшит точность данного подхода.

Таким образом, в результате работы был реализован надёжный способ моделирования БРТП с использованием открытого ПО ADDA, который можно применять к частицам произвольной формы и размера. Все полученные результаты моделирования согласуются с литературой. В будущем этот код [23] будет перенесён в основную ветку ADDA и доступен любому желающему.

7 Список литературы

1. 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.
2. Edalatpour S. et al. Convergence analysis of the thermal discrete dipole approximation // *Phys. Rev. E*. 2015. Vol. 91, № 6. P. 063307.
3. Edalatpour S., Francoeur M. The Thermal Discrete Dipole Approximation (T-DDA) for near-field radiative heat transfer simulations in three-dimensional arbitrary geometries // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2014. Vol. 133. P. 364–373.
4. Yurkin M.A., Mishchenko M.I. Volume integral equation for electromagnetic scattering: Rigorous derivation and analysis for a set of multilayered particles with piecewise-smooth boundaries in a passive host medium // *Phys. Rev. A. American Physical Society*, 2018. Vol. 97, № 4. P. 043824.
5. Moskalensky A.E., Yurkin M.A. Energy budget and optical theorem for scattering of source-induced fields // *Phys. Rev. A*. 2019. Vol. 99. P. 053824.
6. Walter L.P., Tervo E.J., Francoeur M. Near-field radiative heat transfer between irregularly shaped dielectric particles modeled with the discrete system Green's function method // *Phys. Rev. B. American Physical Society*, 2022. Vol. 106, № 19. P. 195417.
7. 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.
8. Yaghjian A.D. Electric dyadic Green's functions in the source region // *Proceedings of the IEEE*. 1980. Vol. 68, № 2. P. 248–263.
9. 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.
10. Draine B.T. The Discrete-Dipole Approximation and Its Application to Interstellar Graphite Grains // *The Astrophysical Journal*. 1988. Vol. 333. P. 848.
11. Yurkin M.A., Smunev D.A. Analytical integration of the Green's tensor in the discrete dipole approximation // *Proceedings of Bremen Zoom Workshop on Light Scattering 2023* / ed. Wriedt T., Gienger J. Online, 2023. P. 67–71.
12. Narayanaswamy A., Zheng Y. A Green's function formalism of energy and momentum transfer in fluctuational electrodynamics // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2014. Vol. 132. P. 12–21.
13. Robert Stratman Elliott. *Electromagnetics History, Theory, and Applications*. 1993. Vol. 631.
14. 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. 2592–2601.
15. Yurkin M.A., Shershnev D.V. Robust DDA simulations for exciting sources inside a particle // *Program and Abstracts Book of the 20th Conference on Electromagnetic & Light Scattering*. Almunecar, Spain: Instituto de Astrofísica de Andalucía, 2023. P. 004.
16. Smunev 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.
17. Rahmani A., Chaumet P.C., Bryant G.W. Local-field correction for an interstitial impurity in a crystal // *Opt. Lett.* 2002. Vol. 27, № 6. P. 430–432.
18. Rahmani A., Bryant G.W. Spontaneous emission in microcavity electrodynamics // *Phys. Rev. A*. 2002. Vol. 65, № 3. P. 033817.
19. Moskalensky A.E., Yurkin M.A. A point electric dipole: From basic optical properties to the fluctuation-dissipation theorem // *Rev. Phys.* 2021. Vol. 6. P. 100047.

20. Czapla B., Narayanaswamy A. Thermal radiative energy exchange between a closely-spaced linear chain of spheres and its environment // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2019. Vol. 227. P. 4–11.
21. Palik E.D. *Handbook of Optical Constants of Solids*. San Diego: Academic Press, 1985. 832 p.
22. Yurkin M.A., de Kanter D., Hoekstra A.G. Accuracy of the discrete dipole approximation for simulation of optical properties of gold nanoparticles // *J. Nanophoton.* 2010. Vol. 4, № 1. P. 041585.
23. Danil169/Applying-ADDA-to-NFRHT: Script to simulate NFRHT between two particles of arbitrary shape and size using ADDA [Electronic resource] // GitHub. URL: <https://github.com/Danil169/Applying-ADDA-to-NFRHT> (accessed: 08.06.2023).