

Тема работы

Развитие и исследование метода дискретных диполей для моделирования светорассеяния

Состав коллектива

Юркин Максим Александрович, с.н.с. ИХКГ (ст. преп. и с.н.с. в НГУ), к.ф.-м.н., yurkin@gmail.com, уч. запись: mayurkin

Аннотация

Было исследовано быстродействие метода дискретных диполей для задачи рассеяния частицей вблизи плоской подложки. В частности, с помощью программного пакета ADDA исследовалась зависимость числа итераций, необходимого для сходимости итерационного метода, от параметров объекта (шара или куба) и плоской подложки. Показатель преломления частицы варьировался в широких пределах (вещественная и мнимая часть от 0 до 10), а показатель преломления подложки выбирался из нескольких вариантов. В случае размера частицы порядка длины волны наличие и свойства подложки не оказывали заметного влияния на число итераций, но в случае частиц много меньше длины волны наличие идеально проводящей подложки значительно увеличивало число итераций. Последнее противоречит разработанной теории на основе анализа спектра матрицы взаимодействия для бесконечно-малых частиц. Однако, это объясняется тем, что в ADDA не используется интегрирование по объему диполя для отраженного тензора Грина. Именно эти погрешности искажают спектр матрицы взаимодействия и увеличивают число итераций.

Научное содержание работы

1. Постановка задачи

Взаимодействие электромагнитного излучения с частицами произвольной формы и внутренней структуры (рассеяние и поглощение) широко используется во многих научных областях, от нанофотоники и биологии до исследований атмосферных аэрозолей и межзвездной пыли. При этом количественное описание этих явлений невозможно без точного моделирования, которое сильно усложняется, как только форма частиц отличается от простейшей (шар). Метод дискретных диполей (МДД), основанный на объемной дискретизации интегральных уравнений Максвелла в частотной области, идеально подходит для произвольных частиц.

Конкретная задача состоит в изучении быстродействия МДД для задачи рассеяния частицей вблизи плоской подложки. А именно, изучение времени вычисления, которое зависит в основном от сходимости итерационного метода, от параметров объекта и плоской подложки. Другая общая задача состоит в развитии МДД (и его программной реализации) для различных новых приложений (где кластер НГУ используется для тестирования).

2. Современное состояние проблемы

Для моделирования светорассеяния используется много методов, однако МДД давно зарекомендовал себя как один из наиболее эффективных для широкого класса задач. Его популярность также объясняется наличием двух программных пакетов с открытым исходным кодом: DDSCAT и ADDA, которые используются многими исследователями по всему миру. Главным разработчиком программы ADDA (<https://github.com/adda-team/adda/>) является исполнитель данной работы. Основным преимуществом ADDA является использование технологий параллелизации MPI и OpenCL.

Несмотря на широкое использование МДД, его точность и время вычисления до сих пор слабо предсказуемы. Причем, точность связана с временем, так как всегда есть возможность использовать большее число диполей (объемных элементов) для улучшения точности. Время вычисления определяется итерационным решением системы линейных уравнений. И если время одной итерации жестко связано с числом диполей (и предсказуемо), то необходимое число итерации N_{iter} для достижения заданной точности сильно зависит от всех параметров

задачи. Поэтому все пользователи ориентируются на некоторые эмпирические закономерности, полученные на множестве тестовых данных (в том числе, в рамках нашей предыдущей работы). Но такие данные практически отсутствуют для задачи рассеяния частицей вблизи подложки, не говоря об аналитических зависимостях.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Были проведены численные эксперименты по моделированию шаров и кубов размера $kD = 1$ (т.е. много меньше длины волны) вблизи плоской подложки (k – волновой вектор, D – диаметр). Определялось число итераций N_{iter} , варьируя показатель преломления частицы m : $\text{Re } m = 0.05, 0.5, 1, \dots, 10$ и $\text{Im } m = 0, 0.5, \dots, 10$. При этом использовался стандартный итерационный метод квази-минимальной невязки и уровень сходимости (относительная невязка 10^{-5}), а также дискретизация с использованием 32 диполей вдоль любой из осей и формулировка МДД на основе фильтрации функции Грина. Показатель преломления подложки m_s был либо бесконечный (идеально проводящая подложка), либо $m_s = 2 + i$, либо такой же, как для частицы (только для шара).

Во всех случаях число итераций увеличивалось с показателем преломления подложки. Для $m_s = 2 + i$ общий вид зависимости $N_{\text{iter}}(m)$ не сильно отличался от того же в отсутствие подложки (за исключением области в районе $m = 10$), но отличия были более существенны для идеально проводящей подложки. Особенно заметными отличия были для куба (Рис. 1 и 2 ниже), и особенно в области больших значений m вблизи вещественной оси. В частности, для $m = 10$ $N_{\text{iter}} = 7218$ и 285 в присутствии и отсутствии подложки ($m_s = \infty$). Из нашего предыдущего опыта было сделано предположение, что это связано с тем, что использование фильтрации функции Грина плохо работает для диполей вблизи подложки (что искажает спектр интегрального оператора). Частично подтвердить это предположение получилось с помощью использования интегрирования функции Грина для $m = 10$, получив $N_{\text{iter}} = 1383$ и 200 в присутствии и отсутствии подложки ($m_s = \infty$). Однако полное решение проблемы можно ожидать только за счет реализации интегрирования отраженной части тензора Грина.

Дополнительное подтверждение последнему факту было получено из анализа спектра матрицы взаимодействия. Был рассмотрен шар (16 диполей на диаметр) и куб (12 диполей на диаметр) в пределе бесконечно малого размера на идеально проводящей подложке. Ограничение по количеству диполей связано с тем, что была использована отдельная программа для вычисления спектра, которая сильно замедляется при увеличении числа диполей (во всей частице) больше 1000. При этом было использовано приближение малых расстояний и для прямого, и для отраженного тензора Грина, что позволило аналитически интегрировать тензор Грина по объему диполя. В обоих случаях спектр матрицы взаимодействия лежал в тех же пределах, что и в отсутствие подложки. В этих же пределах спектр находится и для любой непоглощающей подложки. Ввиду теории, разработанной нами ранее, из этого следует, что зависимость $N_{\text{iter}}(m)$ не должна меняться от присутствия такой подложки. Таким образом, все численные различия следуют из погрешностей интегрирования отраженного тензора Грина.

Также были проведены численные эксперименты для $kD = 10$ (размер сравним с длиной волны), $m_s = 2 + i$. При этом количество диполей вдоль одной из осей изменялось от 32 до 226 так, чтобы всегда было не менее 10 диполей на длину волны внутри частицы. Но результаты для N_{iter} (и для шара, и для куба) практически не отличались от тех же результатов в отсутствие подложки. Видимо, здесь погрешности в интегрировании отраженного тензора Грина не столь существенны.

4. Полученные результаты.

Вычислен спектр матрицы взаимодействия для бесконечно-малых частиц (шара и куба) вблизи подложки, используя аналитические результаты для интегрирования полного тензора Грина по объему диполя. Показано, что для любой непоглощающей подложки этот спектр лежит в тех же пределах, что и в отсутствие подложки. Следовательно, и зависимость числа итераций N_{iter} от m (показателя преломления частицы) должна быть такая же. Данная

зависимость $N_{\text{iter}}(m)$ была определена численно с использованием программного пакета ADDA для шаров и кубов вблизи подложки в диапазоне вещественной и мнимой части m от 0 до 10. В случае размера частицы порядка длины волны наличие и свойства подложки не оказывали заметного влияния на $N_{\text{iter}}(m)$, но в случае частиц много меньше длины волны наличие идеально проводящей подложки значительно увеличивало N_{iter} , особенно при больших вещественных m . Это противоречие объясняется тем, что не использовалось интегрирование по объему диполя для отраженного тензора Грина, так как это еще не реализовано в ADDA (и не тривиально для произвольных расстояний). Именно эти погрешности искажают спектр матрицы взаимодействия и увеличивают N_{iter} .

5. Иллюстрации, визуализация результатов.

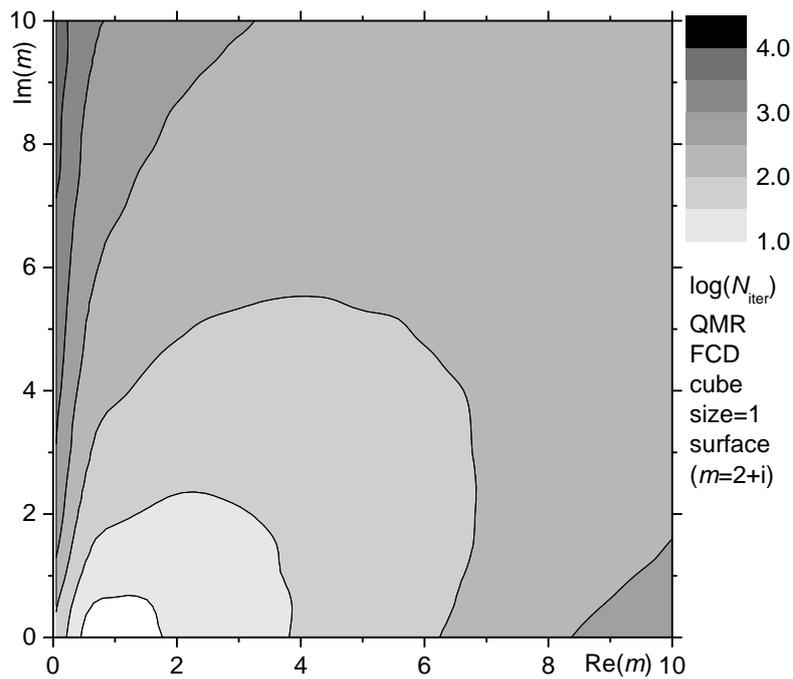


Рис. 1. Логарифм от числа итераций стандартного итерационного метода в ADDA для куба размером $kD = 1$ на плоской подложке с показателем преломления $m_s = 2 + i$ в зависимости от показателя преломления частицы m . Использовалось 32 диполя вдоль любой из осей и формулировка МДД на основе фильтрации функции Грина. Плоская волна падает сверху.

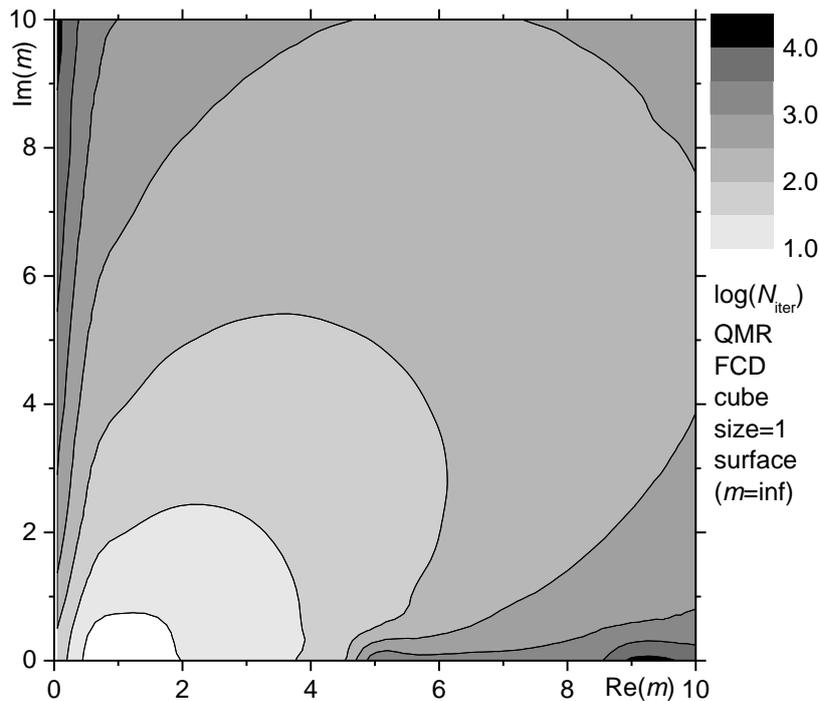


Рис. 2. То же, что и Рис. 1, но для идеально отражающей подложки ($m_s = \infty$).

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Часть вычислительных задач можно было бы выполнить и на обычных компьютерах, но только потратив дни и недели вычислений и ограничивая себя по уровню дискретизации, а значит, и по достижимой точности моделирования. Наличие суперкомпьютера в режиме постоянной доступности принципиально упрощает все эти задачи и изменяет саму постановку задач. В частности, практически для всех задач моделирования заранее неявно предполагается, что будет достигнута хорошая точность (вследствие доступных вычислительных мощностей), а значит используемый метод дискретных диполей может рассматриваться как численно-точный (эталонный). Более того, если вдруг размера кластера НГУ будет недостаточно, с помощью него можно точно определиться с требуемыми вычислительными ресурсами для поиска другого кластера.

Кроме того, повседневное использование кластера НГУ помогает в разработке программы ADDA для различных новых приложений, для которой режим с использованием MPI является основным конкурентным преимуществом по сравнению с аналогами.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть).

Основные результаты работы (в частности, приведенные графики) еще не опубликованы. Но различные новые возможности программы ADDA, для тестирования которых также использовался кластер НГУ, докладывались на нескольких конференциях:

1. Yurkin M.A., Smunev D.A., Akhmetyanova A.E., and Glukhova S.A. Capabilities of ADDA code for nanophotonics, *IV International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2019)*, 15–19 July 2019, St. Petersburg, Russia (invited). ([abstract](#), [slides](#))
2. Smunev D.A. and Yurkin M.A. Simulating optical properties of extremely oblate inhomogeneous particles with the discrete dipole approximation, *IV International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2019)*, 15–19 July 2019, St. Petersburg, Russia. ([abstract](#), [slides](#))
3. Smunev D.A. and Yurkin M.A. Simulations of scattering by extremely oblate particles with the discrete dipole approximation, *The 18th Electromagnetic and Light Scattering Conference*, 10–14 June 2019, Hangzhou, China, p. 129. ([abstract](#))

4. Glukhova S.A. and Yurkin M.A. Scattering of Bessel beams in the framework of the discrete dipole approximation, The 18th Electromagnetic and Light Scattering Conference, 10–14 June 2019, Hangzhou, China, p. 60. ([abstract](#))
5. Akhmetyanova A.E. and Yurkin M.A. Optimization of the discrete dipole approximation applied to particles on a plane substrate, The 18th Electromagnetic and Light Scattering Conference, 10–14 June 2019, Hangzhou, China, p. 22. ([abstract](#)).
6. Yurkin M.A. Convergence of iterative solution of a linear system in the framework of the discrete dipole approximation, *Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS 2018 Toyama)*, 1–4 August 2018, Toyama, Japan, p. 197. ([abstract](#), [slides](#))

Ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также Ваши предложения по их совершенствованию.
Все работает стабильно.