

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, находящейся в бесконечной поглощающей среде. В частности, с помощью программного пакета ADDA исследовалась зависимость числа итераций, необходимого для сходимости итерационного метода, от параметров объекта (шара или куба). Показатель преломления частицы варьировался в широких пределах (вещественная и мнимая часть от 0 до 10), а показатель преломления внешней среды был равен $2 + i$. Показано, что сходимость итерационного метода в МДД для частиц много меньше длины волны полностью описывается относительным показателем преломления. При этом число итераций приближенно описывается простой формулой, полученной ранее, как и ожидалось из теоретических соображений. Для частиц больше длины волны было показано наличие двух особых областей (медленной сходимости) в комплексной плоскости показателя преломления частицы m , вдоль лучей, соответствующих нулевой мнимой части как абсолютного, так и относительного показателя преломления. Первая область соответствует внутренним резонансам самого рассеивателя, а вторая – является артефактом дискретизации.

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 в поглощающей внешней среде. А именно, изучение времени вычисления, которое зависит в основном от сходимости итерационного метода, от параметров объекта для комплексного показателя преломления внешней среды. 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 итераций 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 отсутствуют для задачи рассеяния частицей, помещенной в поглощающую внешнюю среду (это вообще новая область для моделирования), не говоря об аналитических зависимостях.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

В течение отчетного периода проводилась работа по обобщению МДД на случай поглощающей внешней среды. Реализация в программе ADDA велась в рамках отдельной ветки – <https://github.com/Sunmosk/adda-complex-freq>. С использованием кластера были проведены численные эксперименты с этой версией ADDA по моделированию шаров и кубов размера $k_0 D = 1$ (т.е. много меньше длины волны, даже внутри внешней среды, k_0 – волновой вектор в вакууме, D – диаметр шара или длина ребра куба) внутри однородной внешней среды с показателем преломления $m_h = 2 + i$. 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 приближения точечных диполей. Результаты для шара приведены на Рис.1, результаты для кубов отличаются лишь незначительно.

Кроме того, была проанализирована теоретическая оценка (разработанная ранее), которая зависит от относительного показателя преломления (т.е. m/m_h). Во-первых, мы теоретически доказали, что эта оценка полностью применима к малым частицам в поглощающей среде (так как матрица взаимодействия в этом пределе определяется статическим тензором Грина, который не зависит от волнового вектора). Результаты ее применения также показаны на Рис.1, показывая очень хорошее согласие с численным экспериментом. Это же объясняет, почему результаты слабо зависят от формы рассеивателя. При этом важно отметить, что оценка была построена для формулировки МДД на основе взаимодействия точечных диполей с использованием предположения, что при дискретизации спектр интегрального оператора расширяется на $h = 0.1$ в обе стороны (от диапазона $[0,1]$). Эта же оценка предсказывает, что при $h = 0$ должна исчезнуть зона плохой сходимости вдоль луча через 0 и m_h – ранее это наблюдалось для частиц в вакууме. Это условие соответствует использованию формулировок МДД на основе интегрирования или фильтрации функции Грина, которые, к сожалению, пока не поддерживают комплексный волновой вектор (но мы над этим работаем).

Также мы провели численные эксперименты для частиц примерно в 1.5 раза больше длины волны в вакууме ($k_0 D = 10$). Они заняли примерно в 100 раз больше времени, но показали, что плохая сходимость появляется вдоль двух лучей, соответствующих нулевой мнимой части как абсолютного, так и относительного показателя преломления (см. Рис. 2). Первый луч (вдоль оси абсцисс на графике) соответствует внутренним резонансам самого рассеивателя. Для шаров это соответствует резонансам Лоренца-Ми, которые (в терминах m) находятся снизу вещественной оси (с небольшой отрицательной мнимой частью) и лишь немного смещаются в зависимости от m_h . Поэтому, проблемы для этих значений m (большое количество итераций) не зависят от конкретной формулировки МДД. И, наоборот, луч вдоль вещественного m/m_h является, на наш взгляд, артефактом дискретизации и должен исчезнуть при использовании современных формулировок МДД.

4. Полученные результаты.

На основе численных экспериментов показано, что сходимость итерационного метода в МДД для частиц много меньше длины волны, помещенных в поглощающую внешнюю среду, полностью описывается относительным показателем преломления. При этом число итераций приближенно описывается простой формулой, полученной ранее, как и ожидалось из

теоретических соображений. Для частиц больше длины волны было показано наличие двух особых областей (медленной сходимости) в комплексной плоскости показателя преломления частицы m , вдоль лучей, соответствующих нулевой мнимой части как абсолютного, так и относительного показателя преломления. Первая область соответствует внутренним резонансам самого рассеивателя, а вторая – является артефактом дискретизации.

5. Иллюстрации, визуализация результатов.

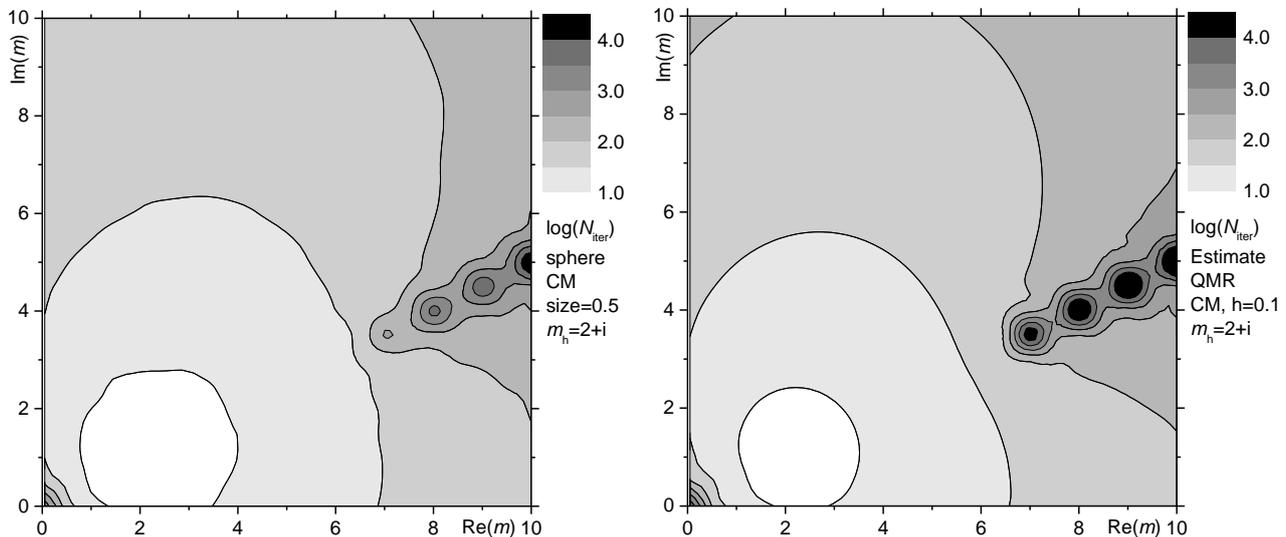


Рис. 1. Логарифм от числа итераций стандартного итерационного метода в ADDA для шара размером много меньше длины волны ($k_0D = 0.5$, k_0 – волновой вектор в вакууме, D – диаметр шара) в однородной среде с показателем преломления $m_h = 2 + i$ в зависимости от показателя преломления частицы m . Слева – численный эксперимент, справа – теоретическая оценка. Использовалось 32 диполя вдоль любой из осей и формулировка МДД на основе взаимодействия точечных диполей. Отдельные пятна в правой части графиков связаны с использованным шагом 0.5 по $\text{Re } m$ и $\text{Im } m$ в численных экспериментах. При более мелкой сетке, они сольются в одну область.

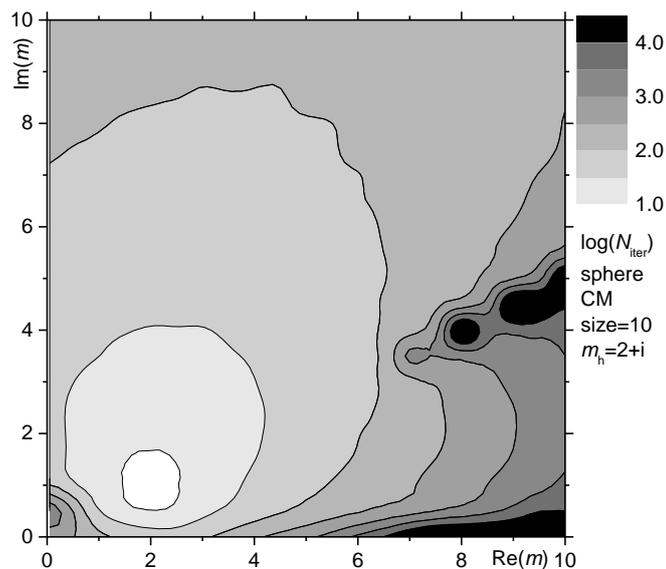


Рис. 2. То же, что и Рис. 1(слева), но для большего шара ($k_0D = 10$). Количество диполей увеличивалось с m , чтобы всегда выполнялось условие – не менее 10 диполей на длину волны внутри частицы.

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. Kichigin A.A. and Yurkin M.A. Electron-energy-loss spectroscopy and cathodoluminescence for particles inside substrate, *VI International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2021)*, 13–17 September 2021, Online, [J. Phys.: Conf. Ser. 2015, 012064](#) ([paper](#), [video](#))
2. Glukhova S.A. and Yurkin M.A. Scattering of generalized Bessel beams simulated with the discrete dipole approximation, *VI International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2021)*, 13–17 September 2021, Online, [J. Phys.: Conf. Ser. 2015, 012046](#) ([paper](#), [video](#))
3. Kichigin A.A. and Yurkin M.A. Simulating nanoparticles interaction with an electron beam using the discrete dipole approximation, *The 19th Electromagnetic and Light Scattering Conference*, 12–16 July 2021, Online, p. 119. ([abstract](#), [video](#))
4. Glukhova S.A. and Yurkin M.A. Scattering simulation of generalized Bessel beams by arbitrary particles, *The 19th Electromagnetic and Light Scattering Conference*, 12–16 July 2021, Online, p. 57. ([abstract](#), [video](#))
5. Yurkin M.A., Smunev D.A., Glukhova S.A., Kichigin A.A., Moskalensky A.E., and Inzhevatkin K.G. Capabilities of the ADDA code for electromagnetic simulations, *Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves (RSEMW 2021)*, 28 June – 2 July 2021, Divnomorskoe, Russia, [pp. 111–114](#). ([paper](#), slides in [English](#) and [Russian](#))
6. Kichigin A.A. and Yurkin M.A. Simulating nanoparticles interaction with electrons, *Bremen Zoom Workshop on Light Scattering 2021*, 22–23 March 2021, Online, pp. 62–65. ([paper](#))
7. Glukhova S.A. and Yurkin M.A. Implementation of scattering of generalized Bessel beams in the framework of the discrete dipole approximation, *Bremen Zoom Workshop on Light Scattering 2021*, 22–23 March 2021, Online, pp. 43–44. ([paper](#))
8. Kichigin A.A. and Yurkin M.A. Electron energy loss spectroscopy in the framework of the discrete dipole approximation, *V International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2020)*, 14–18 September 2020, Online. [AIP Conf. Proc. 2300, 020053](#). ([paper](#), [video](#))
9. Glukhova S.A. and Yurkin M.A. Implementation of various Bessel beams in the framework of the discrete dipole approximation, *V International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2020)*, 14–18 September 2020, Online. [AIP Conf. Proc. 2300, 020037](#). ([paper](#), [video](#))

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