

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

Была разработана новая модификация метода дискретных диполей (МДД), на основе аналитического вычисления интегралов функции Грина по объему диполя с контролируемой точностью (IGT_SO). Данная модификация была реализована в программном пакете ADDA, и тестовое моделирование показало, что аналитическое интегрирование имеет погрешность порядка 4-й степени от размера вокселя в сравнении с полным (времязатратным) вариантом. При расчете оптических свойств кубов, степенной показатель зависимости погрешности от размера вокселя составлял от 1.4 до 2, что можно объяснить сингулярностью электрического поля вблизи ребер и вершин куба. Также было показано, что IGT_SO является надежным способом моделирования усиления излучения источника, находящегося внутри частицы произвольной формы. В частности, результат непрерывно зависит от положения источника с небольшими изменениями при движении внутри одного вокселя. При этом, эти изменения уменьшаются с уменьшением размера диполя, что делает моделирование особенно точным для частиц меньше длины волны.

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 развитии модификации МДД на основе интегрирования функции Грина (IGT). В частности, это развитие состоит в выводе, реализации в программном пакете с открытым кодом ADDA и тестировании аналитических выражений для интегралов, которые значительно ускоряют вычисления. Вторая задача состоит в практическом применении этой модификации МДД в различных практических задачах, включая изучение порядка сходимости при увеличении количества элементов дискретизации (вокселей), а также случая возбуждения точечным источником внутри частицы.

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.

Наиболее распространенным способом вычисления взаимодействия между двумя вокселями внутри частицы является одноточечное приближение. Вычисление интеграла от функции Грина по объему вокселя (модификация IGT) было предложено около 20 лет и хорошо показало себя в некоторых приложениях. Уже более 10 лет этот подход реализован в

программном пакете ADDA. Однако эта реализация использует адаптивное интегрирование, которое занимает большое время вычисления, и пользователям приходится искать компромисс между точностью и скоростью. Это ограничивало широкое применение и детальное исследование этой модификации МДД.

Задачи рассеяния, в которых падающего (внешнее) поле вызывается источником внутри частицы, важны для квази-классического моделирования нескольких явлений нанопластики, таких как усиление излучения молекул, ближнепольный радиационный теплоперенос и силы Казимира. Фундаментальная проблема с точки зрения вычислительной математики состоит в том, что падающее поле не принадлежит L^2 . Для фиксированной дискретизации решение не вызывает проблем, но при улучшении дискретизации (дискретная) L^2 норма правой части растет до бесконечности. Это приводит к нарушению некоторых «ожидаемых» свойств непрерывности. МДД с таким сингулярным падающим полем использовался в литературе, но только с плохо-описанными эмпирическими ограничениями на положение источников.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Мы получили явные аналитические выражения для вычисления интегралов от тензора Грина по объему диполя в виде произвольного прямоугольного параллелепипеда с относительной погрешностью порядка $(kd)^4$ (k – волновой вектор, d – наибольший размер вокселя) для любых расстояний, что является достаточной точностью, так как итоговая погрешность МДД составляет порядка $(kd)^2$ в виду предположения о постоянстве электрического поля внутри вокселя. Данные выражения основаны на разделении тензора Грина на статическую часть ($\sim R^{-3}$), слабо-сингулярную динамическую часть ($\sim R^{-1}$), и все остальное. Первые два могут быть проинтегрированы аналитически, а оставшаяся часть исчезает при $R \rightarrow 0$, поэтому может быть приближена с хорошей точностью (для любых расстояний) с помощью ряда Тейлора. Данные выражения реализованы в программном пакете ADDA (опция командной строки ``-int igt_so``, SO – сокращение от Second Order, т.е. расчеты верные вплоть до второго порядка), что позволило отказаться от компромиссов, получив высокую точность и скорость одновременно.

Далее мы исследовали точность аналитического вычисления с помощью моделирования оптических свойств (эффективность поглощения и рассеяния) кубов с разными размерами ($kD = 0.1$ и 8 , где D – длина ребра куба) и показателями преломления ($m = 1.6 + 0.01i$, $0.1 + i$ и $10 + 10i$), изменяя количество вокселей дискретизации (количество вокселей вдоль ребра, n_x , от 8 до 256).

Далее мы использовали модификацию IGT_{SO} для случаев возбуждения точечным источником внутри частицы. Общий анализ данной задачи показал, что данная модификация МДД является самосогласованной, поэтому результат моделирования должен непрерывно зависеть от положения источника. Это было проверено в моделировании усиления излучения для шаров и кубов разных размеров ($kD = 0.1$ и 8) и $m = 1.5$ при изменении положения источника от центра частицы до границы и далее вне частицы.

4. Полученные результаты.

Моделирование показало, что модификация IGT_{SO} действительно имеет погрешность порядка $(kd)^4$ в сравнении с полным (времязатратным) интегрированием. При этом, итоговая погрешность МДД в сравнении с более затратным моделированием (опубликовано ранее) порядка $(kd)^2$ для случая $kD = 8$ и $m = 1.6 + 0.01i$ (Рис. 1). Для других параметров показатель сходимости (наклон в лог-лог масштабе) составлял от 1.4 до 2 , что можно объяснить сингулярностью электрического поля вблизи ребер и вершин куба. Последнее делает недействительным существующий теоретический анализ, который предсказывает показатель 2 для гладкого внутреннего поля.

При моделировании усиления излучения внутри частицы использовалась модификация IGT_{SO} , а также FCD и стандартная модификация LDR (на основе одноточечного приближения). При этом в случае LDR применялась эмпирическая поправка после расчета. При этих условиях все три модификации приводили к разумным результатам – непрерывно

изменяющееся усиление излучения с небольшими изменениями при движении внутри одного вокселя. Случай шара с $kD = 8$ показан на Рис. 2. При этом LDR (даже с эмпирической коррекцией) явно разваливается при приближении источника к центру вокселя, что происходит для нечетных значений n_x , так как источник перемещается вдоль оси z (сдвинутый на $d/1000$ в сторону). Также у LDR и FCD имеются артефакты вблизи границы частицы, у FCD это напоминает явление Гиббса, включающее осцилляции снаружи частицы. У IGT_{SO} , напротив, самые большие осцилляции внутри частицы, однако они находятся в пределах ожидаемой ошибки $\mathcal{O}[(kd)^2]$ – они уменьшаются при увеличении n_x , а также при уменьшении размера частицы. Поэтому IGT_{SO} работает практически идеально для частиц меньше длины волны, в частности, для $kD = 0.1$. В итоге, модификация IGT_{SO} является надежным способом моделирования точечного источника внутри частицы произвольной формы, не чувствительный к положению источника относительно дипольной решетки.

5. Иллюстрации, визуализация результатов.

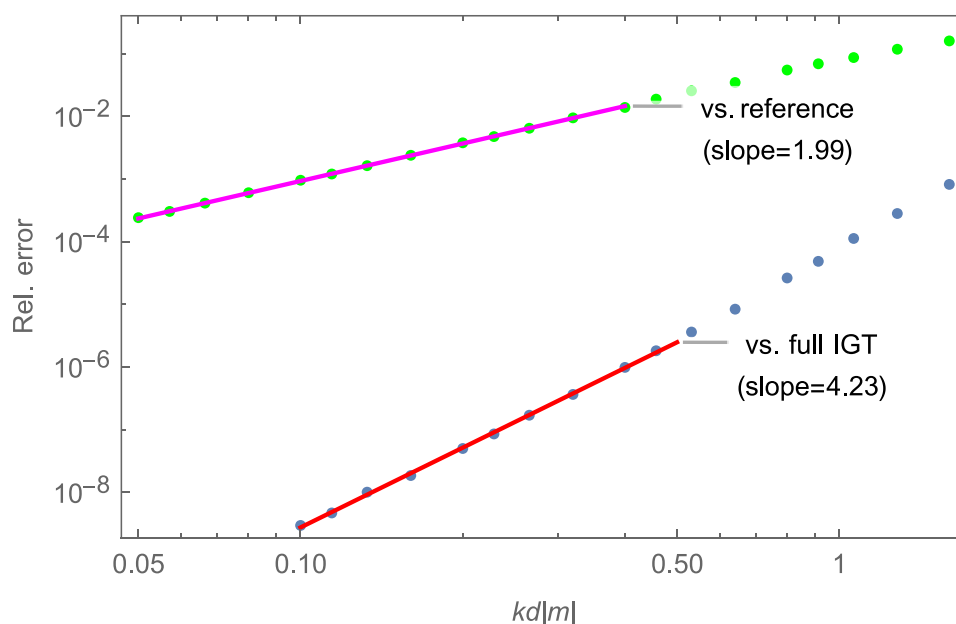


Рис. 1. Относительная ошибка (разница с эталоном) для эффективности поглощения Q_{abs} для куба с $kD = 8$ и $m = 1.6 + 0.01i$ (рассчитанного с помощью IGT_{SO}) в зависимости от размерного параметра вокселя в лог-лог масштабе. В качестве эталона используется такой же расчет с полным IGT или ранее опубликованное решение на основе еще большего количества вокселей.

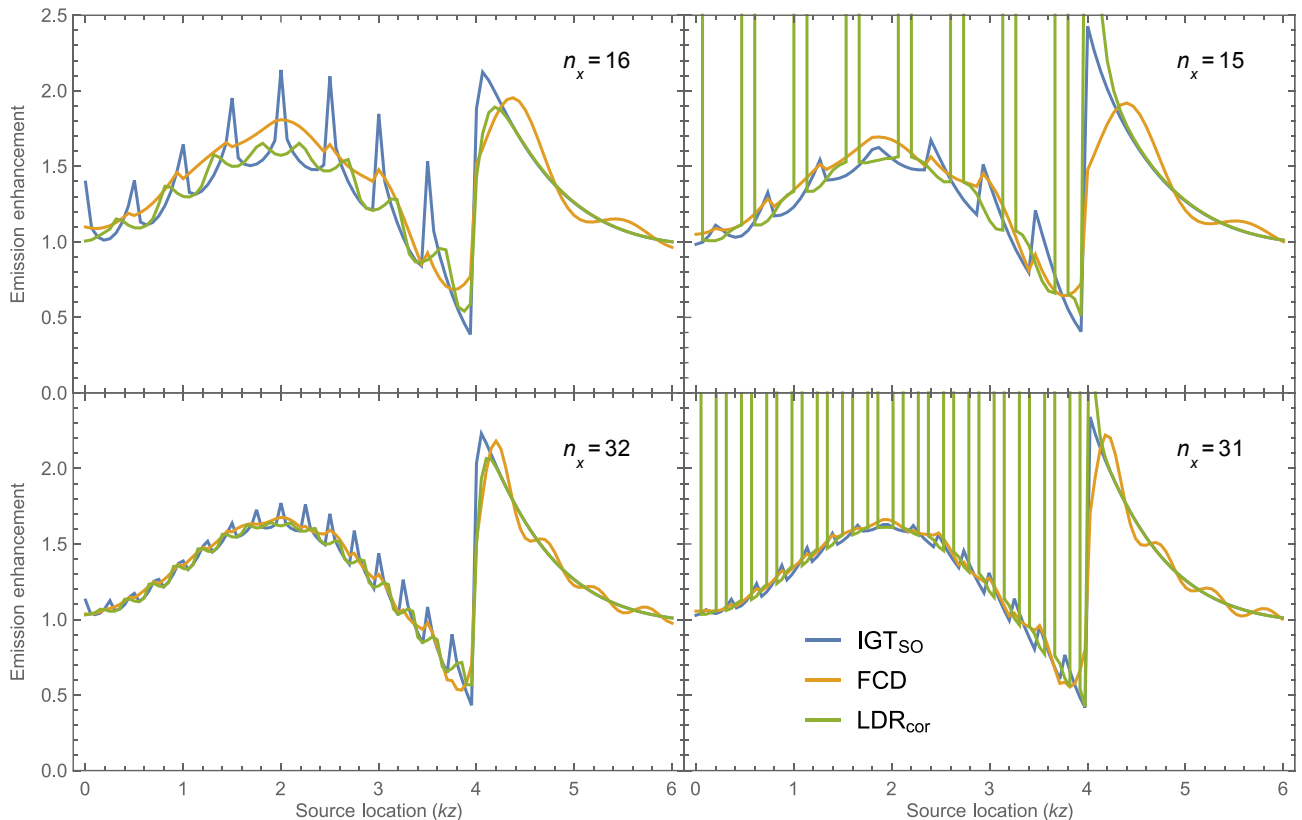


Рис. 2. Зависимость усиления излучения от положения источника внутри и рядом с шаром с $kD = 8$ и $m = 1.5$ (источник движется вдоль оси z и поляризован вдоль нее).

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.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть).

Основные результаты работы были доложены на конференциях:

1. Yurkin M.A. and Smunev D.A. Analytical integration of the Green's tensor in the discrete dipole approximation, *Bremen Zoom Workshop on Light Scattering 2023*, 20–21 March 2023, Online, pp. 67–71. ([paper](#), [slides](#))
2. Yurkin M.A. and Shershnev D.V. Robust DDA simulations for exciting sources inside a particle, *The 20th Electromagnetic and Light Scattering Conference*, 15–19 May 2023, Almunecar, Spain, p. O04. ([abstract](#), [slides](#), [video](#))
3. Yurkin M.A. Capabilities of the ADDA code for nanophotonics, *Frontiers in Nanophotonics and Optoelectronics 2023*, 24–25 October 2023, Qingdao, China. ([slides](#))

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

Все работает стабильно.