

Метод дискретных диполей для несимметричной сетки

В.М. Белкин, Д.А. Смунёв

Белорусский государственный университет, Минск

E-mail: rct.belkinVM1@bsu.by

Уравнения Максвелла являются основой теоретических и вычислительных методов, описывающих рассеяние света, но, поскольку, аналитические решения известны только для некоторых геометрий (таких как сферическая частица), для остальных частиц необходимо использовать численные методы. Метод дискретных диполей (МДД) позволяет решать задачу светорассеяния для неоднородных частиц, которые имеют произвольную геометрическую форму и внутреннюю структуру. МДД использует интегральное уравнение

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) + k^2 \int_{V/V_0} d^3\mathbf{r}' \bar{\chi}(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') - \bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r}) \bar{\chi}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \bar{\mathbf{M}}(V_0, \mathbf{r}) \quad (1)$$

где $\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ – падающее и суммарное электрическое поле в точке $\mathbf{r}$, $\bar{\chi}(\mathbf{r}')$ – тензор электрической восприимчивости среды в точке $\mathbf{r}$, V – объем частицы, $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – тензорная функция Грина в свободном пространстве, $\bar{\mathbf{M}}$ – интеграл, связанный с тем, что исключенный объем V_0 является конечным, $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r})$ описывает действие элемента объема на себя.

Обычно исследуемая частица дискретизируется кубическими диполями, однако в задачах с рассеивателями очень вытянутой форму кубические диполи могут оказаться неэффективными, поскольку размер диполя должен соответствовать толщине таких рассеивателей. В этом случае использование прямоугольных диполей могло бы решить проблему. Под прямоугольными диполями понимаются точечные диполи или элементарные объемы в форме прямоугольных параллелепипедов, расположенных на прямоугольной сетке. В данном случае используется поляризуемость [1]:

$$a_{\mu\nu} = L_{\mu\mu} \delta_{\mu\nu} + m^2 a_\mu a_\nu K_{\mu\nu}, \quad (2)$$

где

$$L_{\mu\mu} = c_1 + m^2 c_2 (1 - 3a_\mu^2) - m^2 c_3 a_\mu^2 - R_1 - (m^2 - 1) R_2(\mu) - 8m^2 \alpha_\mu^2 R_3(\mu, \mu) + 4m^2 \sum_\nu \alpha_\nu^2 R_3(\mu, \nu) \quad (3)$$

$$K_{\mu\nu} = c_3 + R_1 - 2R_2(\mu) - 2R_2(\nu) + 8R_3(\mu, \nu), \quad (4)$$

$c_1 = -5,9424219$, $c_2 = 0,5178819$, и $c_3 = 4,0069747$ – ДСР константы, а c_4 – произвольная постоянная. R_0 , R_1 , R_2 и R_3 дополнительные суммы решетки, от которых в основном и зависит точность нахождения поляризуемости.

Коэффициенты R зависят от расстояния от начала координат до решетки (n^2), от расстояния от начала координат до обратной решетки (Q^2) и от Q — обратной решетки, которая определяется как:

$$Q = \sqrt[3]{V_d} (n_1/d_1, n_2/d_2, n_3/d_3) \quad (5)$$

При переходе к большим расстояниям, суммы начинают стермиться к бесконечности. Для решения данной проблемы используется дополнительный коэффициент, который играет роль фильтра. Таким образом были получены следующие формулы для расчета коэффициентов:

$$R_0(\mu) = \sum_{\mathbf{n}} \frac{n_\mu^2}{|\mathbf{n}|} \cdot \exp(-\alpha \cdot n) - \sum_{\mathbf{n}} \frac{Q_\mu^2}{|\mathbf{Q}|} \cdot \exp(-\alpha \cdot Q^2), \quad (6)$$

$$R_1 = \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{|\mathbf{n}|^2} \cdot \exp(-\alpha \cdot \mathbf{n}^2) - \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{|\mathbf{Q}|^2} \cdot \exp(-\alpha \cdot Q^2), \quad (7)$$

$$R_3(\mu, \nu) = \sum_{\mathbf{n}} \frac{n_\mu^2 n_\nu^2}{|\mathbf{n}|^3} \cdot \exp(-\alpha \cdot \mathbf{n}^2) - \sum_{\mathbf{n}} \frac{Q_\mu^2 Q_\nu^2}{|\mathbf{Q}|^3} \cdot \exp(-\alpha \cdot Q^2), \quad (8)$$

$$R_0(\mu) = \sum_{\mathbf{n}} R_3(\mu, \nu), \quad (9)$$

где $|\mathbf{n}| = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$, $|\mathbf{Q}| = Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2$.

Были проведены тесты, в которых с помощью ADDA [2] при одинаковых входных параметрах, описывающих рассеиватель, были рассчитаны сечения экстинкции и поглощения, а также матрица Мюллера при использовании кубической и прямоугольной дискретизаций, после чего сравнивались результаты данных подходов. Показано, что при соотношении максимального и минимального размера прямоугольного диполя до 3 разница не превышала 1 %.

1. *Draine, B.T. Goodman J.J.* // *Astrophysical Journal*. 1993. Vol. 405, № 2. P. 685–697.
2. *Smuneev, D.A., Chaumet P.C., Yurkin M.A.* // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2015. Vol. 156, № 5. P. 67–79.