

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

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.

Конкретные задачи состоят в развитие МДД (и его программной реализации) для моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с сильно вытянутыми или сжатыми частицами; сравнения МДД с методом Т-матриц для моделирования светорассеяния кубами и неоднородными частицами, состоящих из нескольких шаров внутри большого сферического объема.

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.

Для применения МДД к сильно вытянутым или сплюснутым частицам ранее было предложено использование «прямоугольных диполей», т.е. объемных элементов дискретизации в виде прямоугольных параллелепипедов. Однако, конкретные предложенные алгоритмы (формулы) противоречили друг другу и не использовались на практике.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Для МДД с прямоугольными диполями был проведен теоретический анализ двух разных подходов, на основе взаимодействия точечных диполей или на основе интегрирования функции Грина (ИФГ), исходя из строгого интегрального уравнения на электрическое поле. Также был проанализирован спектр матрицы взаимодействия для этих двух подходов, и они оба были реализованы в программе ADDA и продемонстрировали их возможности на нескольких тестовых примерах (включая, лист графена).

Было проведено моделирование светорассеяния малыми и сравнимыми с длиной волны кубами с тремя сильно различающимися показателями преломления, используя МДД и метод Т-матриц. Главная задача состояла в получении результатов с наилучшей возможной

точностью. Для МДД была использована программа ADDA и разработанная ранее методика экстраполяции, основанная на результатах моделирования для разных уровней дискретизации. Для метода Т-матриц была разработана процедура оценки доверительного интервала на вычисляемое значение, используя результаты для разных значений параметра отсечения (числа мультиполей).

Для проверки возможностей нескольких методов, включая МДД, для моделирования светорассеяния сложными частицами, был рассмотрен шар, содержащий 10 сферических гранул с другим показателем преломления. При этом предполагалось случайная ориентация рассеивателя (т.е. усреднение по ориентации). Для моделирования с помощью МДД использовалась программа ADDA и методика экстраполяции. При этом основная вычислительная сложность заключалась в необходимости вычисления для многих ориентаций рассеивателя (для последующего усреднения). В качестве эталона использовался метод суперпозиции Т-матриц.

4. Полученные результаты.

Было показано, что выражения для поляризуемости и взаимодействия между диполями должны строго соответствовать друг другу, что разрешает существующие в литературе противоречия. Более того, между этими двумя модификациями МДД имеются значительные различия в спектре матрицы взаимодействия, что сильно ограничивает применимость стандартной модификации МДД на основе точечных диполей. Для листа графена с толщиной много меньше длины волны использование прямоугольных диполей (с интегрированием функции Грина) привело к до 100-кратному уменьшению как времени моделирования, так и требуемой памяти при сохранении удовлетворительной точности. Схожее улучшение ожидается для любого сильно вытянутого или сжатого рассеивателя, у которого наименьший размер много меньше длины волны. Данные результаты опубликованы в (Smunev et al. 2015).

Для кубов результаты МДД и Т-матриц в большинстве случаев совпадали в рамках соответствующих доверительных интервалов. Неожиданно, оцененные относительные погрешности для МДД были беспрецедентно малы (от 10^{-7} до 10^{-3}), в то время как относительные различия между результатами МДД и метода Т-матриц более значительны (от 10^{-4} до 0.2). Однако последние соответствовали оценкам погрешности метода Т-матриц. Данные результаты опубликованы в (Yurkin & Kahnert 2013).

Для гранулярного шара МДД показал хорошую точность в сравнении с эталонным методом. Точность разрешенных по углу характеристик рассеяния в большинстве случаев была не хуже 1%, а интегральных характеристик – от 0.1% до 0.5%. В частности, это превосходило точность других используемых методов, основанных на решении дифференциальных уравнений Максвелла во временной области. Однако, основной вывод состоит в том, что все использованные численные методы позволяют моделировать оптические свойства сложных неоднородных объектов при наличии достаточных вычислительных ресурсов. Данные результаты опубликованы в (Mishchenko et al. 2016).

5. Иллюстрации, визуализация результатов.

Геометрия частицы, использованная в статье (Mishchenko et al. 2016), и результаты моделирования с помощью МДД в сравнении с эталонным методом приведены на Рис. 1 и 2, соответственно.

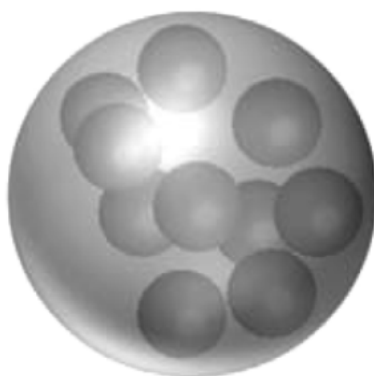


Рис. 1. Модель неоднородного рассеивателя.

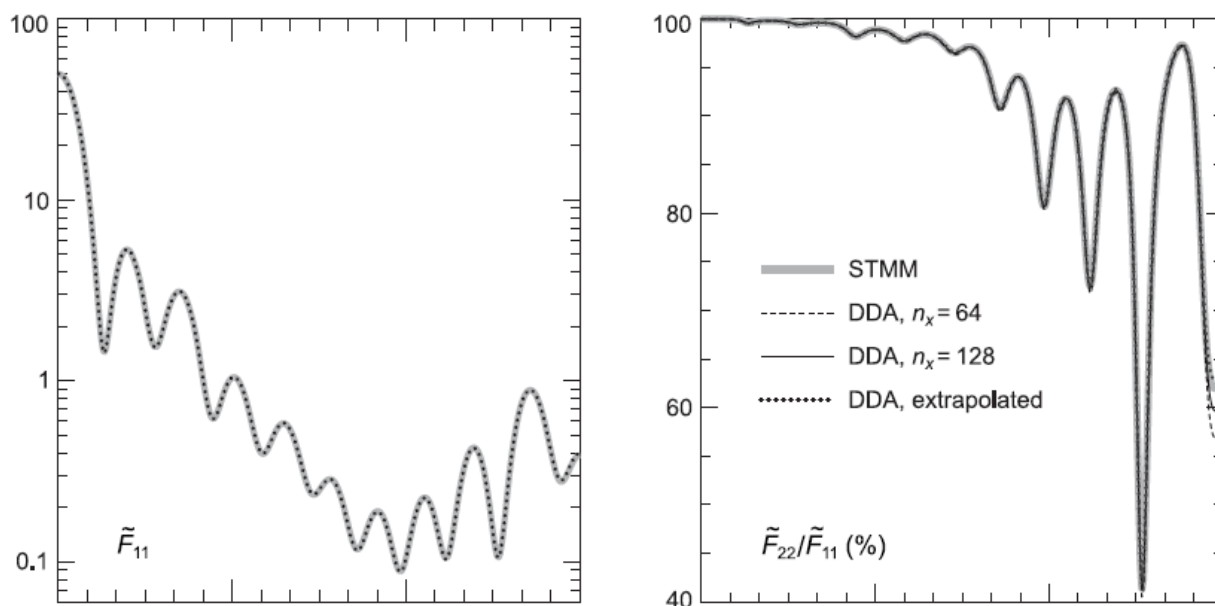


Рис. 2. Элементы матрицы рассеяния, посчитанные с использованием метода суперпозиции Т-матриц (MSTM) и МДД (DDA) для случайно-ориентированного рассеивателя, показанного на Рис.1. Результаты МДД с использованием количества диполей на диаметр шара (n_x) равного 64 и 128 приведены только на правой части рисунка.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Некоторые из целей работы можно было бы достичь 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).

В других случаях задачей является изучение самих возможностей современных кластеров. В этом случае, кластер НГУ выступает в качестве первого шага для отладки протоколов, скриптов и т.д, после чего задача запускается на больших кластерах (например, на главном кластере Университета Хельсинки).

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

Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть).

3 статьи:

1. Mishchenko M.I., Dlugach J.M., Yurkin M.A., Bi L., Cairns B., Liu L., Panetta R.L., Travis L.D., Yang P., and Zakharova N.T. First-principles modeling of electromagnetic scattering by discrete and discretely heterogeneous random media, *Phys. Rep.* **632**, 1–75 (2016). ([PDF](#))
2. Smunev D.A., Chaumet P.C., and Yurkin M.A. Rectangular dipoles in the discrete dipole approximation, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **156**, 67–79 (2015). ([PDF](#))
3. Yurkin M.A. and Kahnert M. Light scattering by a cube: accuracy limits of the discrete dipole approximation and the T-matrix method. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **123**, 176–183 (2013). ([PDF](#))

6 тезисов конференций:

4. Yurkin M.A. Exact solution, capabilities of discrete-dipole approximation code ADDA, *Workshop "One-Billion-Particle electromagnetic scattering Problem (OBPP)", part of EMTS 2016*, 19 August 2016, Helsinki, Finland. ([slides](#))
5. Yurkin M.A. Capabilities of the discrete dipole approximation for large particle systems, *URSI Commission B International Symposium on Electromagnetic Theory (EMTS 2016)*, 14–18 August 2016, Espoo, Finland, [pp. 386–389](#) (invited). ([abstract](#), [slides](#))
6. Yurkin M.A. Performance of iterative solvers in the discrete dipole approximation, *URSI Commission B International Symposium on Electromagnetic Theory (EMTS 2016)*, 14–18 August 2016, Espoo, Finland, [pp. 488–491](#). ([abstract](#), [slides](#))
7. Smunev D.A., Chaumet P.C., and Yurkin M.A. Extension of the discrete dipole approximation to rectangular cuboid dipoles, *Electromagnetic and Light Scattering XV*, 21–26 June 2015, Leipzig, Germany, paper 148. ([abstract](#), [slides](#))
8. Yurkin M.A. and Kahnert M. Benchmark calculations with the discrete dipole approximation and the T-matrix method for cubes, *Electromagnetic and Light Scattering XIV*, 17–21 June 2013, Lille, France, paper 25. ([abstract](#), [slides](#))
9. Yurkin M.A. Challenges in simulation of optical properties of metallic nanoparticles using the discrete dipole approximation. *Tacona-Photonics 2012*, 24–26 October 2012, Bad Honnef, Germany, *AIP Conf. Proc.* **1475**: 98–100. ([abstract](#), [slides](#))

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

Все работает стабильно. Сотрудники ИВЦ оперативно реагируют на любые просьбы. В частности, был быстро установлен git, когда он мне понадобился.