УДК 535.311, 535.312, 535.314

РАЗВИТИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ВЕНТЦЕЛЯ-КРАМЕРСА-БРИЛЛЮЭНА ДЛЯ УСКОРЕНИЯ МЕТОДА ДИСКРЕТНЫХ ДИПОЛЕЙ

Инжеваткин К.Г.

(Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН)

Научный руководитель – к.ф.-м.н., с.н.с. Юркин М.А.

(Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН)

В докладе рассматривается развитие и применение приближения электрического поля Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ) для ускорения метода дискретных диполей (МДД). Данное приближение и его модификация позволяют получить более точное электрическое поле внутри частицы по сравнению со стандартными подходами (нулевое поле, поле от невозмущенной падающей волны) и таким образом помогают ускорить решение МДД.

Введение. МДД решает прямую задачу светорассеяния, т.е. находит индикатрисы светорассеяния по известным параметрам частицы (рассеивателя) и падающей волны. Основным недостатком этого метода является большое время вычислений. Кроме того, зачастую требуется проводить многократные расчёты для генерации базы данных (до миллиона элементов), в которой хранятся индикатрисы и соответствующие им параметры рассеивателя. После того как база данных сгенерирована, решают обратную задачу светорассеяния, т.е. определяют параметры частицы по полученным в эксперименте индикатрисам.

В биологических задачах сталкиваются с большими оптически мягкими частицами, т.е. $|m-1| \ll 1$ и $x \gg 1$, где m – относительный показатель преломления, $x = kR$ – размерный параметр, k – волновой вектор, R – радиус частицы. Поэтому оптимизация МДД для таких частиц является актуальной задачей. Наиболее трудоёмкой частью МДД является решение системы линейных уравнений (до миллиарда элементов). Решение таких больших систем получают с помощью итерационных алгоритмов, в которых на первом шаге делается предположение об электрическом поле внутри рассеивателя, которое далее шаг за шагом уточняется. Поэтому использование более точного электрического поля на первом шаге позволяет находить решение за меньшее количество итераций и таким образом ускоряет работу МДД.

Основная часть. Для решения данной проблемы мы предложили использовать более точное приближение электрического поля – ВКБ с учетом преломления лучей (ВКБп). Метод ВКБ учитывает изменение фазы волны за счёт прохождения в частице с показателем преломления отличным от окружающей среды. Метод ВКБп, помимо этого, учитывает преломление лучей на границе рассеивателя. Для учёта изменения фазы волны при прохождении внутри частицы был предложен и проанализирован алгоритм расчёта оптического пути. Кроме этого, показано что внутри шара существуют области с различным количеством решений, т.е. область тени (без решений), с одним решением (в каждую точку приходит один луч) и двумя решениями (в каждую точку приходят два луча). В работе мы показали, что ВКБ компенсирует ошибки порядка $x(m-1)$, а ВКБп – все ошибки порядка x (с любой зависимостью от m). Иными словами, ВКБп получается из геометрической оптики (которая точна в пределе $x \to \infty$) в пределе $m \to 1$. Соответственно, остаточная ошибка при использовании ВКБп была порядка $(m-1)$ (независимо от x) – ее устранение требует полной трассировки лучей с многократными отражениями внутри частицы, что в данной работе не проводилось. Кроме этого, мы провели экспериментальное исследование приближения ВКБп, где попытались

оценить вклад в остаточную ошибку от различных явлений: поворот вектора электрического поля и изменение его амплитуды при преломлении, сложение электрических полей в области двух решений, зануление электрического поля в области тени. Это помогло понять, какие эффекты имеет смысл учитывать в ВКБп при различных значениях параметров частицы.
Кроме этого, электрическое поле, полученное с помощью различных приближений, было использовано на первом шаге итерационного алгоритма в МДД. В качестве реализации МДД использовали программу ADDA. Далее мы рассматривали графики сходимости итерационного алгоритма (норма невязки, как функция номера итерации) для случая шаров с параметрами $x = 50, 250$ и $m = 1.01, 1.05, 1.1$. Во всех случаях скорость сходимости для ВКБ и ВКБп превосходит стандартные подходы. Для случая $x = 50$, $m = 1.01, 1.05$ не наблюдаются отличия в скорости сходимости между ВКБ и ВКБп (аналогично при $x = 250$, $m = 1.01$), а при $m = 1.1$ – заметна более быстрая сходимость в случае ВКБп, но разница не большая (до 10 итераций). В случае $x = 250$, при $m = 1.05$ – лучшая сходимость в случае ВКБп, разница достигает 100 итераций, при $m = 1.1$ – разница достигает 1000 итераций.

Выводы. Исходя из полученных результатов видно, что приближения ВКБ и ВКБп дают более быструю сходимость итерационного алгоритма по сравнению со стандартными подходами, а ВКБп даёт лучшую сходимость по сравнению с ВКБ. Последнее становится наиболее ощутимо для случаев, когда величина фазового сдвига $x|m - 1|$ принимает наибольшие значения.

Инжеваткин К.Г. (автор) Подпись

Юркин М.А. (научный руководитель) Подпись