

03

## Новый подход к решению задач рассеяния света частицами, имеющими плоскость симметрии, при использовании разложения полей по волновым функциям

© В.Г. Фарафонов<sup>1</sup>, Д.Г. Туричина<sup>2</sup>, В.Б. Ильин<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, 190000 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория РАН, 196140 Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: far@aanet.ru

Поступила в редакцию 29.10.2023 г.

В окончательной редакции 29.10.2023г.

Принята к публикации 10.11.2023г.

Решение задачи рассеяния света частицами с серединной плоскостью симметрии (например, сфероидом) при использовании точных методов, основанных на разложении полей по базисным функциям, приводит к линейным системам, в которых половина матричных элементов равна нулю. Предлагается подход, который позволяет заменять такую систему двумя, имеющими вдвое меньший размер, что существенно сокращает время расчетов. Подход применен к недавно полученному решению задачи светорассеяния для однородных сфероидов с разложением полей по сфероидальным функциям. Подход может быть использован в случае разложения полей по сферическим и другим функциям, а также для иных рассеивателей, например конечных цилиндров, чебышевских частиц с четным параметром  $n$  и т.п., причем как однородных, так и слоистых.

**Ключевые слова:** рассеяние света, сфероидальные рассеиватели,  $T$ -матрица.

DOI: 10.61011/OS.2023.11.57027.5706-23

### 1. Введение

Аппроксимация реальных рассеивателей частицами простых форм достаточно часто встречается в различных приложениях теории рассеяния света [1–3]. Реализация подобного подхода во многих случаях требует быстрого решения задачи о рассеянии плоской электромагнитной волны, падающей на частицу соответствующей (несферической) формы.

Численные решения этой задачи, получаемые универсальными методами (например, discrete dipole approximation, DDA, finite difference time domain method, FDTD, и т.п. [4,5]), часто требуют очень большого времени вычислений и, таким образом, существенно ограничены в применении.

Решения, основанные на разложении полей по выбранному базису в рамках разных методов (separation of variables method, SVM, extended boundary condition method, EBCM, и т.п. [6]), имеют более широкую область применимости. Здесь при рассмотрении частиц с большим дифракционным параметром и т.п., как правило, требуется учитывать много членов разложения, т.е. необходимо решать большие линейные системы. Поскольку при этом время вычислений растет примерно как  $N^4$ , где  $N$  — порядок матрицы системы, то уменьшение этого параметра может дать существенное ускорение.

Такого эффекта, в частности, можно ожидать при разделении системы уравнений относительно неизвестных коэффициентов разложений полей на две системы, вдвое меньшего размера, возможное для частиц с серединной плоскостью симметрии. Как известно, в этом случае матрица системы содержит половину нулевых элементов [7], и их исключение эквивалентно расщеплению системы на две части с матрицами, не содержащими такие элементы.

В работе мы рассматриваем применение подобного подхода при решении задачи рассеяния света однородным сфероидом недавно полученном нами методом EBCM с использованием разложений полей по сфероидальным функциям и подробно изложенном в работе [8]. В разд. 2 кратко представлены базовые элементы решения задачи в [8]. В разд. 3 описывается предлагаемый новый подход, в разд. 4 приведены некоторые данные численных расчетов и обсуждается реальное ускорение вычислений. В Заключение резюмированы результаты данной работы.

### 2. Основные соотношения

В работе [8], как обычно в методе EBCM, решались не уравнения Гельмгольца (волновые) для гармонических полей  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  совместно с граничными условиями [1], а эквивалентные им поверхностные интегральные уравне-

ния, часто называемые расширенным граничным условием,

$$\begin{aligned} & \nabla \times \int_S \mathbf{n} \times \mathbf{E}^{\text{int}}(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds' - \frac{1}{ik\varepsilon} \nabla \times \nabla \\ & \times \int_S \mathbf{n} \times \mathbf{H}^{\text{int}}(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds' \\ & = \begin{cases} -\mathbf{E}^{\text{int}}(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in D, \\ \mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \bar{D} \setminus S, \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

где  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \exp(ik_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)/(4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  — функция Грина скалярного уравнения Гельмгольца для свободного пространства,  $k_0 = 2\pi/\lambda$  — волновое число в вакууме,  $\lambda$  — длина волны излучения,  $S$  — поверхность частицы,  $\mathbf{n}$  — внешняя нормаль к  $S$ ,  $D$  — область внутри  $S$ ,  $\varepsilon$  и  $\mu$  — диэлектрическая проницаемость и магнитная восприимчивость среды, при этом  $k = k_0\sqrt{\varepsilon\mu}$  — волновое число в среде,  $\mathbf{E}^{\text{in}}$  и  $\mathbf{E}^{\text{sca}}$  — поля падающего и рассеянного излучения соответственно,  $\mathbf{E}^{\text{int}}$ ,  $\mathbf{H}^{\text{int}}$  — поле внутри частиц.

Электромагнитные поля представлялись бесконечными рядами следующим образом:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} (a_{\nu} \mathbf{M}_{\nu}^{\text{s}}(\mathbf{r}) + b_{\nu} \mathbf{N}_{\nu}^{\text{s}}(\mathbf{r})),$$

где  $a_{\nu}$  и  $b_{\nu}$  — коэффициенты разложения, а  $\mathbf{M}_{\nu}^{\text{s}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{N}_{\nu}^{\text{s}}(\mathbf{r})$  — базисные функции, являющиеся решениями уравнения Гельмгольца, которые удовлетворяют необходимым условиям,

$$\mathbf{M}_{\nu}^{\text{s}}(\mathbf{r}) = \nabla \times (\mathbf{s}\psi_{\nu}(\mathbf{r})), \quad \mathbf{N}_{\nu}^{\text{s}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{k} \nabla \times \mathbf{M}_{\nu}^{\text{s}}(\mathbf{r}),$$

где  $\mathbf{s}$  есть или радиус-вектор  $\mathbf{r}$ , или орт  $\mathbf{i}_z$ , а  $\psi_{\nu}$  — решения соответствующего скалярного уравнения Гельмгольца.

В сфероидальной системе координат  $(\xi, \eta, \varphi)$  имеем

$$\tilde{\psi}_{\nu}^{(j)}(\xi, \eta, \varphi) = \tilde{c}_{mn} R_{mn}^{(j)}(c, \xi) \tilde{S}_{mn}(c, \eta) e^{im\varphi}, \quad (4)$$

где  $\nu = \{m, n\}$ ,  $n = 0, 1, \dots, m = -n, \dots, n$ ,  $\tilde{c}_{mn}$  — некоторый коэффициент порядка 1,  $R_{mn}^{(j)}(c, \xi)$  — сфероидальные радиальные функции  $j$ -го рода ( $j = 1, 3$ ). Параметр  $c$  равен  $kd/2$  и  $-ikd/2$  для вытянутых и сплюснутых сфероидальных координат соответственно,  $d$  — их фокусное расстояние [9]. Используются нормированные сфероидальные угловые функции  $\tilde{S}_{mn}(c, \eta) = S_{mn}(c, \eta)/N_{mn}$ , где  $N_{mn} = [2(n+m)!/(2n+1)/(n-m)!]^{1/2}$  согласно [10]. Решение несколько упрощается, если в формуле (4) применять тригонометрические функции  $\varphi$ , как это и делается ниже. Тогда появляются понятия ТЕ- и ТМ-мод и т.д. [8]. Заметим, что в разложении (2) мы используем в ТМ-мод функции  $\mathbf{M}_{\nu}^{\text{r}}$ ,  $\mathbf{M}_{\nu}^{\text{z}}$ , а в ТЕ-мод —  $\mathbf{N}_{\nu}^{\text{r}}$ ,  $\mathbf{N}_{\nu}^{\text{z}}$ .

Сфероидальная система координат естественным образом связывается с поверхностью сфероидальной частицы, так что координата  $\xi$  на ее границе постоянна. Тогда подстановка соотношений (2)–(4) и известного разложения функции Грина [11] в уравнение (1) с учетом свойств сфероидальных функций стандартно приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} \mathbf{Z}^{\text{in}} = -\tilde{A}_{31} \mathbf{Z}^{\text{int}}, \\ \mathbf{Z}^{\text{sca}} = \tilde{A}_{11} \mathbf{Z}^{\text{int}}. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь векторы имеют две части (в соответствии с разложением (2)):  $\mathbf{Z}^{\text{in}} = \{\mathbf{Z}_{\text{U}}^{\text{in}}, \mathbf{Z}_{\text{V}}^{\text{in}}\}^T$ ,  $\mathbf{Z}^{\text{int}} = \{\mathbf{Z}_{\text{U}}^{\text{int}}, \mathbf{Z}_{\text{V}}^{\text{int}}\}^T$ ,  $\mathbf{Z}^{\text{sca}} = \{\mathbf{Z}_{\text{U}}^{\text{sca}}, \mathbf{Z}_{\text{V}}^{\text{sca}}\}^T$  с компонентами

$$\begin{aligned} z_{\text{U},ml}^{\text{in}} &= k_1 \tilde{a}_{ml}^{\text{in}} R_{ml}^{(1)}(c_1, \xi_0), & z_{\text{U},ml}^{\text{int}} &= 0, \\ z_{\text{U},ml}^{\text{int}} &= k_1 \tilde{a}_{ml}^{\text{int}} R_{ml}^{(1)}(c_2, \xi_0), \\ z_{\text{V},ml}^{\text{int}} &= c_1 \tilde{b}_{ml}^{\text{int}} R_{ml}^{(1)}(c_2, \xi_0), \\ z_{\text{U},ml}^{\text{sca}} &= k_1 \tilde{a}_{ml}^{\text{sca}} R_{ml}^{(3)}(c_1, \xi_0), \\ z_{\text{V},ml}^{\text{sca}} &= c_1 \tilde{b}_{ml}^{\text{sca}} R_{ml}^{(3)}(c_1, \xi_0), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $\xi_0$  — значение координаты  $\xi$  на поверхности  $S$ ,  $c_1$  и  $c_2$  — значение параметра  $c$  вне и внутри частицы,  $k_1$  — волновое число в среде, окружающей частицу.

Заметим, что для осесимметричных частиц оператор, соответствующий задаче рассеяния света, коммутирует с оператором вращения  $L_z = \partial/\partial\varphi$ , что дает возможность разделения задачи относительно одной из переменных — азимутального угла  $\varphi$ , т.е. задачу можно решать независимо для каждого значения азимутального числа  $m$  [6]. Хотя все векторы и матрицы ниже должны иметь индекс  $m$  (как в [8]), мы опускаем его для простоты везде, кроме нескольких случаев.

Обе матрицы в системе (5) имеют 4 блока ( $i = 1, 3$ ;  $k = 1$ )

$$\tilde{A}_{ik} = \begin{pmatrix} \alpha_{\text{U},ik} & \alpha_{\text{V},ik} \\ \beta_{\text{U},ik} & \beta_{\text{V},ik} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

В работе [8] даны выражения матричных элементов в формуле (7) для ТЕ-моды. Ниже для простоты, но не теряя общности, рассмотрим случай ТМ-моды. Переход от первой ко второй моде происходит циклической заменой  $\varepsilon \rightarrow \mu$ ,  $\mu \rightarrow \varepsilon$ . При обычных значениях магнитной восприимчивости сред  $\mu_1 = \mu_2 = 1$  для элементов  $\tilde{A}_{31}$  в ТМ-моды получаем

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{U},31} &= W \left\{ R_{3,1} \Delta_{1,2} - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \Delta_{1,2} R_{1,2} + \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \right. \\ & \times \xi_0^2 Q_{1,2} R_{1,2} - \left. \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \frac{f \xi_0}{\xi_0^2 - f} Q_{1,2} E_{2,2} \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{V},31} &= W \left\{ \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) f \xi_0 Q_{1,2} \Gamma_{2,2} R_{1,2} - \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \right. \\ & \times \left. \frac{f}{\xi_0^2 - f} [(\xi_0^2 Q_{1,2} - \Delta_{1,2}) K_{2,2} + \Gamma_{1,2}] \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\beta_{U,31} = W \left\{ - \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \xi_0 Q_{1,2} \Gamma_{2,2} R_{1,2} + \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \frac{\xi_0^2}{\xi_0^2 - f} Q_{1,2}, K_{2,2} \right\}, \quad (10)$$

$$\beta_{V,31} = W \left\{ R_{3,1} \Delta_{1,2} - \Delta_{1,2} R_{1,2} - \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \times \xi_0^2 Q_{1,2} R_{1,2} + \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \frac{\xi_0}{\xi_0^2 - f} [Q_{1,2} E_{2,2} + \Delta_{1,2}] \right\}, \quad (11)$$

где  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  — диэлектрическая проницаемость вне и внутри частицы,  $f = -1$  и  $1$  для сплюснутых и вытянутых сфероидальных координат,  $I$  — единичная матрица. Аналогично выглядят элементы матрицы  $\tilde{A}_{11}$  [8].

При нашем выборе сфероидальных координат использованные радиальные функции постоянны на поверхности частицы и, следовательно, выносятся за знак интеграла по ее поверхности в элементах матриц в системе (5). Поэтому такие функции присутствуют только в следующих диагональных матрицах:

$$R_{k,j} = \left\{ \frac{R_{ml}^{(k)'}}{R_{ml}^{(k)}}(c_j, \xi_0) \delta_{nl} \right\}_{n,l=m}^{\infty}, \quad (12)$$

$$W = - [R_{3,1} - R_{1,1}]^{-1} = \left\{ ic_1 (\xi_0^2 - f) R_{ml}^{(1)}(c_1, \xi_0) R_{ml}^{(3)}(c_1, \xi_0) \delta_{nl} \right\}_{n,l=m}^{\infty}, \quad (13)$$

где  $R_{ml}^{(k)'}(c, \xi)$  — производная сфероидальной радиальной функции  $k$ -го рода,  $\delta_{nl}$  — символ Кронекера,  $k = 1, 3$  и  $j = 1, 2$ .

Элементы матриц  $\Delta_{i,j}$ ,  $\Gamma_{i,j}$ ,  $K_{i,j}$ ,  $E_{i,j}$  ( $i = 1, 2$ ;  $j = 1, 2$ ) представляют собой соответственно следующие интегралы от нормированных сфероидальных угловых функций и их производных:

$$\delta_{nl}(c_i, c_j) = \int_{-1}^1 \bar{S}_{mn}(c_i, \eta) \bar{S}_{ml}(c_j, \eta) d\eta, \quad (14)$$

$$\gamma_{nl}(c_i, c_j) = \int_{-1}^1 \bar{S}'_{mn}(c_i, \eta) \bar{S}_{ml}(c_j, \eta) \eta d\eta, \quad (15)$$

$$\kappa_{nl}(c_i, c_j) = \int_{-1}^1 \bar{S}'_{mn}(c_i, \eta) \bar{S}'_{ml}(c_j, \eta) (1 - \eta^2) d\eta, \quad (16)$$

$$\varepsilon_{nl}(c_i, c_j) = \int_{-1}^1 \bar{S}'_{mn}(c_i, \eta) \bar{S}'_{ml}(c_j, \eta) (1 - \eta^2) \eta d\eta, \quad (17)$$

где  $n, l = m, m + 1, \dots$

Наконец,

$$Q_{1,2} = \Delta_{1,2} [\xi_0^2 I - f \Gamma^2(c_2, c_2)]^{-1}. \quad (18)$$

В случае одиночной частицы, решив систему (5), получаем элементы  $z_{U,ml}^{sca}$ ,  $z_{V,ml}^{sca}$  и далее коэффициенты разложения (2) рассеянного поля  $\tilde{a}_{ml}^{sca}$ ,  $\tilde{b}_{ml}^{sca}$ . Эти данные позволяют найти любые сечения и матрицу рассеяния для данной частицы [8].

С другой стороны, для ансамблей частиц (в частности, хаотически ориентированных) из матриц системы (5) можно составить аналог  $T$ -матрицы:  $\tilde{T} = \tilde{A}_{11}(\tilde{A}_{31})^{-1}$ , который в общем случае имеет 4 блока  $\tilde{T}_{ij}$  ( $i, j = 1, 2$ ):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{z}_{U}^{sca} \\ \mathbf{z}_{V}^{sca} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{T}_{11} & \tilde{T}_{12} \\ \tilde{T}_{21} & \tilde{T}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{z}_{U}^{in} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Это позволяет определить 2 блока нормированной сфероидальной  $T$ -матрицы (случай ТМ-моды)

$$\tilde{\mathbf{a}}^{sca} = -\tilde{T}_{11}^{sp} \tilde{\mathbf{a}}^{in}, \quad \tilde{\mathbf{b}}^{sca} = -\tilde{T}_{21}^{sp} \tilde{\mathbf{a}}^{in}, \quad 20$$

где

$$\tilde{T}_{11}^{sp} = \tilde{R}_3^{-1} \tilde{T}_{11} \tilde{R}_1, \quad \tilde{T}_{21}^{sp} = \frac{k_1}{c_1} \tilde{R}_3^{-1} \tilde{T}_{21} \tilde{R}_1, \quad (21)$$

диагональные матрицы  $\tilde{R}_i = \left\{ R_{mn}^{(i)}(c_1, \xi_0), \delta_{nl} \right\}_{n,l=m}^{\infty}$ .

Основываясь на  $\tilde{T}^{sp}$ , в работе [8] построена стандартная  $T$ -матрица, связывающая коэффициенты разложения рассеянного и падающего полей по определенному сферическому базису и принципиально ускоряющая расчет оптических свойств ансамблей (хаотически ориентированных) частиц [4].

### 3. Описание предлагаемого подхода

Новый подход использует тот факт, что для частиц с плоскостью симметрии при подходящем выборе базиса в методах SVM, ЕВСМ и т.п. нулевыми оказывается половина матричных элементов в возникающих системах линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов разложения полей, которые по сути сходны с системой (5).

Это свойство систем связано с нечетностью угловых функций. Например, в случае, описанном в разд. 2, матричные элементы включают интегралы (14)–(17). Функции  $S_{mn}(c, \eta)$  и  $\eta S'_{mn}(c, \eta)$ , входящие в эти интегралы, являясь четными и нечетными функциями  $\eta$ , когда разность  $n - m$  четная и нечетная соответственно [9]. Поэтому независимо от  $m$  интегралы  $\delta_{nl}(c_1, c_2)$  и  $\varepsilon_{nl}(c_1, c_2)$  равны нулю, когда  $n - l$  нечетно, а интегралы  $\gamma_{nl}(c_1, c_2)$  и  $\kappa_{nl}(c_1, c_2)$  являются нулями, когда  $n - l$  четно.

Как следствие, матрицы  $\tilde{A}_{31}$ ,  $\tilde{A}_{11}$  в системе (5) содержат два типа матриц, включающих сфероидальные угловые функции: матрицы, подобные  $\Delta$  и  $\Gamma$ . В первом случае (матрицы  $\Delta, E, Q$ ) равны нулю элементы, индексы которых имеют разную четность, а во втором ( $\Gamma, K$ ) — одинаковую (8)–(11) и (14)–(17).

Для матриц  $\Delta$ -типа можно ввести уменьшенные матрицы, не содержащие нулей, следующим образом:

$$\Delta_1 = \begin{pmatrix} \delta_{11} & \delta_{13} & \dots \\ \delta_{31} & \delta_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{pmatrix} \delta_{22} & \delta_{24} & \dots \\ \delta_{42} & \delta_{44} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Эти матрицы получаются вычеркиванием в первом случае четных строк и столбцов, а во втором – нечетных. Заметим, что матрицы почти симметричны:  $\delta_{nl}(c_1, c_2) = \delta_{ln}(c_2, c_1)$ .

Для матриц  $\Gamma$ -типа уменьшенные аналоги соответственно имеют вид

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} \gamma_{12} & \gamma_{14} & \dots \\ \gamma_{32} & \gamma_{34} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

$$\Gamma_2 = \begin{pmatrix} \gamma_{21} & \gamma_{23} & \dots \\ \gamma_{41} & \gamma_{43} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (23)$$

В данном случае для получения матриц  $\Gamma_1$  в матрице  $\Gamma$  вычеркнуты четные строки и нечетные столбцы, для получения  $\Gamma_2$  исключены нечетные строки и четные столбцы. Эти интегралы также связаны:  $\gamma_{nl}(c_1, c_2) = \gamma_{ln}(c_2, c_1)$ .

Таким образом, в системе (5) целесообразно разделить векторы коэффициентов  $\mathbf{Z}_X^Y$  для каждого верхнего и нижнего индексов ( $X = U, V; Y = \text{in, int, sca}$ ) на два:  $\mathbf{Z}_{1,X}^Y$  и  $\mathbf{Z}_{2,X}^Y$ , по-разному проредив части  $\mathbf{Z}_X^Y$ . Компоненты новых векторов для каждого  $m$  равны

$$z_{1,X,ml}^Y = z_{X,ml}^Y, \quad l = m, m + 2, \dots, \quad (24)$$

$$z_{2,X,ml}^Y = z_{X,ml}^Y, \quad l = m + 1, m + 3, \dots, \quad (25)$$

где правые части подобны приведенным в соотношениях (6).

Тогда, например, первое уравнение системы (5) распадается на два ( $j = 1, 2$ ) уравнения:

$$\begin{pmatrix} -\alpha_{j,U,31} & -\alpha_{3-j,V,31} \\ -\beta_{3-j,U,31} & -\beta_{j,V,31} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{j,U}^{\text{int}} \\ \mathbf{Z}_{3-j,V}^{\text{int}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{j,U}^{\text{in}} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Для ТМ-моды при условии  $\mu_1 = \mu_2 = 1$  соответственно имеем ( $j = 1, 2$ )

$$\alpha_{j,U,31} = W_j \left\{ R_{j,3,1} \Delta_{j,1,2} - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \Delta_{j,1,2} R_{j,1,2} + \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \right.$$

$$\left. \times \xi_0^2 Q_{j,1,2} R_{j,1,2} - \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \frac{f \xi_0}{\xi_0^2 - f} Q_{j,1,2} E_{j,2,2} \right\}, \quad (27)$$

$$\alpha_{j,V,31} = W_{3-j} \left\{ f \xi_0 Q_{j,1,2} \Gamma_{j,2,2} R_{3-j,1,2} - \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \right.$$

$$\left. \times \frac{f}{\xi_0^2 - f} [(\xi_0^2 Q_{j,1,2} - \Delta_{j,1,2}) K_{j,2,2} + \Gamma_{j,1,2}] \right\}, \quad (28)$$

$$\beta_{j,U,31} = W_j \left\{ - \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \xi_0 Q_{3-j,1,2} \Gamma_{3-j,2,2} R_{j,1,2} \right.$$

$$\left. + \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \frac{\xi_0^2}{\xi_0^2 - f} Q_{3-j,1,2} K_{3-j,2,2} \right\}, \quad (29)$$

$$\beta_{j,V,31} = W_{3-j} \left\{ R_{3-j,3,1} \Delta_{3-j,1,2} - \Delta_{3-j,1,2} R_{3-j,1,2} \right.$$

$$\left. - \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \xi_0^2 Q_{3-j,1,2} R_{3-j,1,2} \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \right.$$

$$\left. \times \frac{\xi_0}{\xi_0^2 - f} [Q_{3-j,1,2} E_{3-j,2,2} + \Delta_{3-j,1,2}] \right\}. \quad (30)$$

Очевидно, что диагональные матрицы  $R_{ik}$  должны содержать либо 1-ю, 3-ю и т.д. строки (это будет матрица  $R_{1,ik} = \{(r_{ik})_{nl}\}_{n,l=m,m+2,\dots}$ ), либо 2-ю, 4-ю и т.д. строки (матрица  $R_{2,ik} = \{(r_{ik})_{nl}\}_{n,l=m+1,m+3,\dots}$ ). Аналогично строятся матрицы  $W_1$  и  $W_2$ .

Также и второе уравнение системы (5) распадается на два уравнения при использовании переменных  $\mathbf{Z}_{1,X}^Y$  и  $\mathbf{Z}_{2,X}^Y$  ( $X = U, V; Y = \text{in, int, sca}$ ).

Таким образом, из системы уравнений (5), имеющей размерность  $2N \times 2N$ , где  $N$  — число членов, удерживаемых при вычислениях в разложениях полей (2), мы получили 2 системы размерностью  $N \times N$ . Далее для одиночной частицы легко собрать коэффициенты разложения рассеянного поля из двух решений, имеющих вид  $\mathbf{Z}_{1,\text{sca}}^{\text{sca}} = \{\mathbf{z}_{1,U}^{\text{sca}}, \mathbf{z}_{1,V}^{\text{sca}}\}$  и  $\mathbf{Z}_{2,\text{sca}}^{\text{sca}} = \{\mathbf{z}_{2,U}^{\text{sca}}, \mathbf{z}_{2,V}^{\text{sca}}\}$ , и определить любые оптические характеристики частицы. Для ансамблей частиц обе полученные  $T$ -матрицы, не содержащие нулевых элементов, следует преобразовывать, как описано в работе [8], до нахождения двух уменьшенных аналогов стандартной  $T$ -матрицы и только на этой стадии объединить их в одну, окончательную.

Добавим, что при использовании тригонометрических функций азимутального угла  $\varphi$  в базисных функциях (4) потенциал  $V^{\text{in}}$  падающей плоской волны равен нулю [6], и, следовательно, вектор коэффициентов разложения  $\mathbf{Z}_V^{\text{in}} = 0$ . Модификация системы уравнений (5), использующая этот факт, позволяет сделать численные расчеты еще более экономичными.

Запишем первое уравнение системы (5) с учетом блочной схемы (6), (7)

$$- \begin{pmatrix} \alpha_{U,31} & \alpha_{V,31} \\ \beta_{U,31} & \beta_{V,31} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_U^{\text{int}} \\ \mathbf{Z}_V^{\text{int}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_U^{\text{in}} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Второе уравнение этой системы представим в виде

$$\mathbf{Z}_V^{\text{int}} = -(\beta_{V,31})^{-1} \beta_{U,31} \mathbf{Z}_U^{\text{int}}. \quad (32)$$

Теперь первое уравнение системы (31) можно решить относительно вектора  $\mathbf{Z}_U^{\text{int}}$ :

$$\mathbf{Z}_U^{\text{int}} = \left[ \alpha_{V,31} (\beta_{U,31})^{-1} \beta_{U,31} - \alpha_{U,31} \right]^{-1} \mathbf{Z}_U^{\text{in}} = \mathbf{A}_U^{-1} \mathbf{Z}_U^{\text{in}}, \quad (33)$$

и после несложных преобразований получим решение и для вектора  $\mathbf{Z}_V^{\text{int}}$ :

$$\mathbf{Z}_V^{\text{int}} = \left[ \alpha_{U,31} (\beta_{U,31})^{-1} \beta_{V,31} - \alpha_{V,31} \right]^{-1} \mathbf{Z}_U^{\text{in}} = \mathbf{A}_V^{-1} \mathbf{Z}_U^{\text{in}}, \quad (34)$$

где введены обозначения для матриц, записанных в квадратных скобках.

Окончательное решение для коэффициентов разложения рассеянного поля найдем из второго уравнения системы (5) с учетом соотношений (33), (34):

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_U^{\text{sca}} &= (\alpha_{U,11} \mathbf{A}_U^{-1} + \alpha_{V,11} \mathbf{A}_V^{-1}) \mathbf{Z}_U^{\text{in}}, \\ \mathbf{Z}_V^{\text{sca}} &= (\beta_{U,11} \mathbf{A}_U^{-1} + \beta_{V,11} \mathbf{A}_V^{-1}) \mathbf{Z}_U^{\text{in}}. \end{aligned} \quad (35)$$

Упрощение изначального решения состоит в том, что вместо обращения блочной матрицы  $\tilde{\mathbf{A}}_{31}$  требуется найти четыре обратные матрицы  $\mathbf{A}_U^{-1}$ ,  $\mathbf{A}_V^{-1}$ ,  $\beta_{U,11}^{-1}$ ,  $\beta_{V,11}^{-1}$ , размерность которых в два раза меньше исходной.

Естественно, что в рамках данной схемы также может быть сделано исключение нулевых элементов в матрицах системы (35). Разделяя векторы коэффициентов на две части, как было сделано выше, получаем ( $j = 1, 2$ )

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{j,U}^{\text{sca}} &= \left( \alpha_{j,U,11} \mathbf{A}_{j,U}^{-1} + \alpha_{3-j,V,11} \mathbf{A}_{3-j,V}^{-1} \right) \mathbf{Z}_{j,U}^{\text{in}}, \\ \mathbf{Z}_{3-j,V}^{\text{sca}} &= \left( \beta_{3-j,U,11} \mathbf{A}_{j,U}^{-1} + \beta_{j,V,11} \mathbf{A}_{3-j,V}^{-1} \right) \mathbf{Z}_{j,U}^{\text{in}}, \end{aligned} \quad (36)$$

где

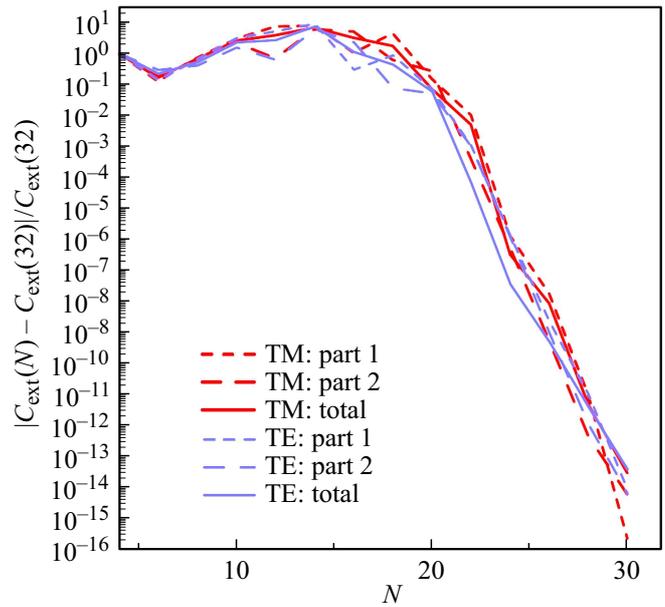
$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{j,U} &= \alpha_{3-j,V,31} (\beta_{j,V,31})^{-1} \beta_{3-j,U,31} - \alpha_{j,U,31}, \\ \mathbf{A}_{3-j,V} &= \alpha_{j,U,31} (\beta_{3-j,U,31})^{-1} \beta_{j,V,31} - \alpha_{3-j,V,31}. \end{aligned} \quad (37)$$

Выражения для матриц  $\alpha_{j,X,ik}$  и  $\beta_{j,X,ik}$  те же, что и выше (27)–(30).

Отметим, что простая модификация системы уравнений, описанная соотношениями (31)–(37), дополнительно ускоряет расчеты заметным образом.

#### 4. Результаты численных тестов

Мы применили предложенный в разд. 3 подход с исключением нулей к алгоритму, изложенному в [8] и кратко описанному в разд. 2. Используя алгоритм в первоначальном виде и после модификации, исключая нулевые элементы в матрицах системы (5) и разбивающей последнюю на две системы вдвое меньшего размера, были проведены расчеты оптических свойств сфероидов различной формы с разным показателем преломления  $\tilde{m}$ . Варьировался дифракционный

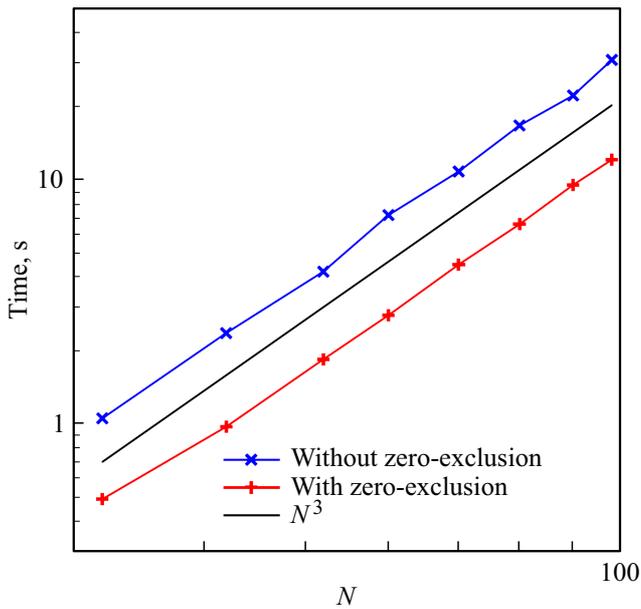


**Рис. 1.** Сходимость сечений поглощения  $C_{\text{ext}}$  с ростом числа членов, учитываемых в разложениях полей,  $N$  для ТЕ- и ТМ-мод в случае начальной системы  $2N \times 2N$  и каждой из двух систем  $N \times N$ , получающихся после исключения нулей. Рассмотрен сплюснутый сфероид с  $a/b = 2$ ,  $\tilde{m} = 1.5$  и  $x_V = 30$  при  $\alpha = 45^\circ$ .

параметр частиц  $x_V = 2\pi r_V / \lambda$ , где  $r_V$  — радиус шара, объем которого равен объему сфероида,  $\lambda$  — длина волны излучения, и определялось минимальное число членов разложения полей  $N_{\text{min}}$ , позволяющее получить сечения с погрешностью около  $10^{-6}$ . Оценка точности вычисленных сечений проводилась как в [8].

Зависимость времени вычислений от  $N_{\text{min}}$  наиболее важна для обсуждения эффективности предлагаемой модификации алгоритма из [8]. Однако перед этим должен быть рассмотрен вопрос о сходимости решений в исходном и модифицированном алгоритмах для каждой из мод с ростом числа учитываемых слагаемых в разложениях полей  $N$ . Типичные результаты подобного рассмотрения представлены на рис. 1. Они иллюстрируют сходимость сечений поглощения  $C_{\text{ext}}$  для сплюснутого сфероида с отношением полуосей  $a/b = 2$ , показателем преломления  $\tilde{m} = 1.5$ , дифракционным параметром  $x_V = 30$  ( $N_{\text{min}} = 32$ ) при наклонном падении излучения (угол между осью симметрии частицы и волновым вектором  $\alpha = 45^\circ$ ). Эти результаты, как и в целом наше исследование, показывают, что для каждой из мод скорость сходимости решений обеих уменьшенных систем практически сходна со скоростью сходимости для изначальной системы.

Проанализировав эти и другие полученные результаты, мы нашли следующее. Время решения задачи (вычисление части стандартной  $T$ -матрицы) для одной азимутальной моды (одного числа  $m$ ) зависит от числа членов разложения (размера системы)  $N_{\text{min}}$  примерно



**Рис. 2.** Время решения проблемы рассеяния света (для одной азимутальной моды) сплюснутыми сфероидами с  $a/b = 2$ ,  $\tilde{m} = 1.5$ ,  $\alpha = 45^\circ$  и разным дифракционным параметром  $x_V$ , потребовавшим учета  $N = N_{\min} \approx x_V$  членов разложения полей для достижения погрешности сечений порядка  $10^{-6}$ . Крестики и плюсы — расчеты без и с исключением нулей соответственно.

как  $N_{\min}^3$  при  $N_{\min} > 40$ . При этом ускорение вследствие применения предлагаемого подхода, т.е. отношение времен расчета без исключения и с исключением нулевых элементов, составляет в среднем 2.5.

Эти выводы проиллюстрированы рис. 2, на котором мы привели время расчета сечений и  $T$ -матриц для сплюснутых сфероидов с  $a/b = 2$ ,  $\tilde{m} = 1.5$ ,  $\alpha = 45^\circ$  и разными  $x_V$  при применении РС с процессором Intel Core i7 2.7 GHz (использовалось 1 ядро). Рассматривались частицы разного размера в диапазоне  $x_V = 30 - 100$  (при данных значениях параметров  $N_{\min} \approx x_V$ ).

Заметим, что для полного решения задачи необходимо рассматривать  $m_{\max}$  азимутальных мод (2)–(4), где  $m_{\max}$  во многом определяется подобно  $N_{\min}$  рассмотрением внутренней сходимости результатов вычислений. Для сфероидов одной формы с одинаковым показателем преломления, как известно,  $m_{\max}/N_{\min} \approx \text{const}$ , и поэтому полное время вычислений для одной частицы  $t \sim N_{\min}^4$ . Однако сходимость результатов с ростом азимутального числа  $m$  (и, следовательно, значение  $m_{\max}$ ), очевидно, не затрагивается рассматриваемым разделением систем на 2 части.<sup>1</sup> Поэтому максимальное ускорение при таком подходе должно быть не  $2^4/2 = 8$ , а около  $2^p/2 \approx 3.3 - 4$ , где в зависимости от оптимизации умножения и обращения матриц  $p \approx 2.7 - 3$ .

<sup>1</sup> Соответственно, на рис. 2,3 приведены времена для моды  $m = m_{\max}$ .

Далее, очевидно, что подход с исключением нулей должен по-разному влиять на различные блоки алгоритма, и соответственно реальное ускорение вычислений в рамках подхода должно быть ощутимо меньше максимального, отмеченного выше. Мы разбили алгоритм на следующие части: 1) блок *integrals* — вычисление элементов матриц  $\Delta_{i,j}, \Gamma_{i,j}, K_{i,j}, E_{i,j}$  ( $i = 1, 2; j = 1, 2$ ), используя представление этих интегралов в виде рядов [12]; 2) блок *core* — расчет элементов матриц  $A_{ik}$  ( $i = 1, 3; k = 1$ ) по формулам (7), (8)–(11) и т.д.; 3) *inversion* — обращение матрицы  $A_{31}$ ; 4) *multiplication* — умножение матриц  $\tilde{A}_{11} \tilde{A}_{31}^{-1}$ .

Время работы этих блоков для сфероидальных частиц, которые были рассмотрены на рис. 2, приведены на левой панели рис. 3. Как видно, при  $N_{\min} > 40$  времена работы всех блоков пропорциональны  $N_{\min}^3$  (несмотря на то, что применялась оптимизация в фортрановском компиляторе). Относительный вклад блоков в суммарное время расчетов (на рисунке — TOTAL) слабо зависит от  $N_{\min}$  и составляет: *integrals* —  $\sim 20\%$ , *multiplication* —  $\sim 15\%$ , *inversion* —  $\sim 25\%$ , *core* —  $\sim 40\%$ . Последние три обозначены на рисунке как T-matrix total и в сумме дают  $\sim 80\%$ .

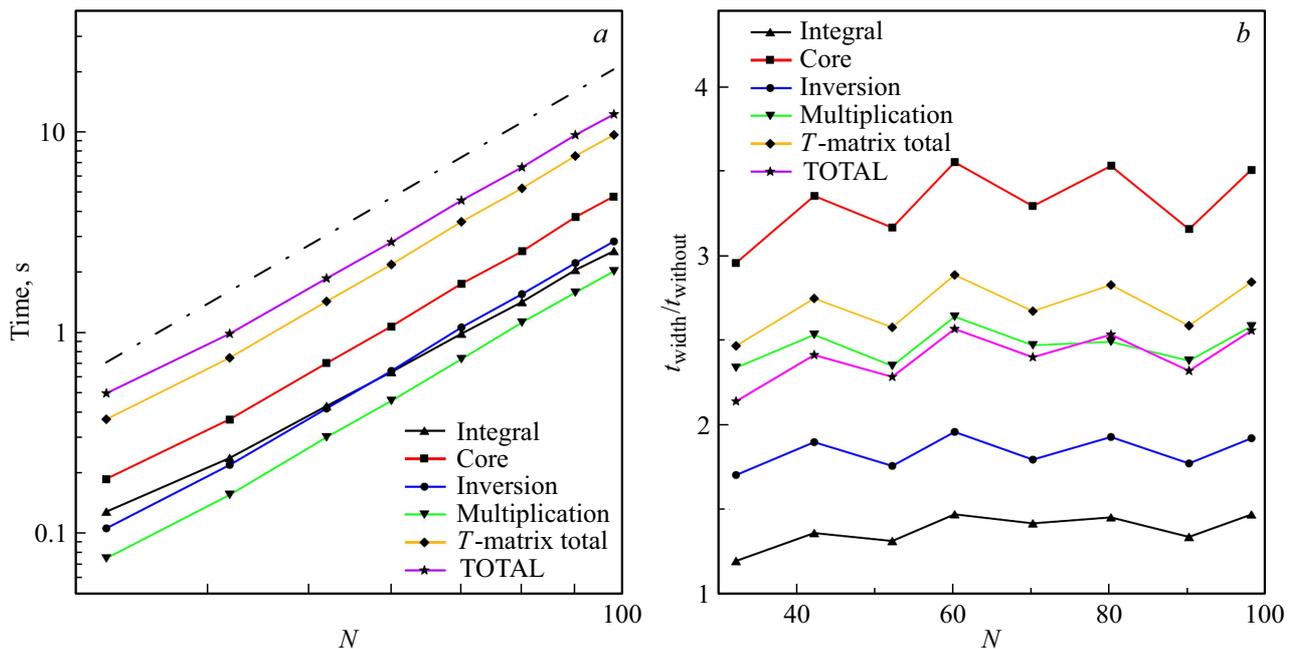
Естественно, что применение предлагаемого подхода дает различный эффект для разных блоков (см. правую панель рис. 3): ускорение минимально для *integrals* ( $\sim 1.3$ ) и максимально для *core* ( $\sim 3.4$ ). В первом случае формулы включают обращение матрицы, которое, однако, занимает лишь малую часть времени. Во втором случае имеем практически максимальное ускорение (см. обсуждение выше). Обращение матрицы ускорилось слабо ( $\sim 1.8$ ), поскольку в программе оно изначально делалось блочно по формуле Фробениуса. Тем не менее в среднем коэффициент ускорения устойчиво составляет порядка 2.5 как для рассмотренных частиц, так и для сфероидов другой формы и с иным показателем преломления.

Заметим, что предлагаемый подход ускоряет вычисления во всех блоках, а не только в самом затратном блоке *core*. С другой стороны, полученная оценка коэффициента ускорения показывает, что простое ускорение расчетов, описанное в конце разд. 3, может оказаться таким же важным, как исключение нулей.

Уместно сравнить полученный эффект с ускорением расчетов в данной задаче при использовании стандартного MPI-распараллеливания вычислений. В [8] было найдено, что при 8 процессорах распараллеленный код работал в  $\sim 4$  раза быстрее исходного. Простая оценка с использованием закона Амдала тогда показывает, что максимальное ускорение достигается исключением нулей, дополненным упрощением, описанным в конце разд. 3.

## 5. Заключение

При аналитическом решении проблемы рассеяния света частицей с плоскостью симметрии методами, основан-



**Рис. 3.** Слева: время, необходимое для расчетов после исключения нулевых элементов в разных частях алгоритма (см. подробнее текст) для тех же сфероидов, что на рис. 2 при разном числе слагаемых, учитываемых в разложении полей,  $N = N_{min}$ . Штрихпунктир показывает зависимость  $N^3$ . Справа: отношение времен расчетов без исключения ( $t_{with}$ ) и с исключением ( $t_{without}$ ) нулевых элементов в разных частях алгоритма для тех же сфероидов при разном числе слагаемых  $N = N_{min}$ .

ными на разложении полей по соответствующим базисным функциям, возникают системы линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов рассеянного поля. В этих системах половина матричных элементов равна нулю. Мы предложили использовать этот факт для ускорения расчетов. Исключая нулевые элементы, получили две линейные системы вдвое меньшего размера, чем первоначальная.

Этот общий подход применен к недавнему решению проблемы рассеяния света сфероидом, полученному методом ЕВСМ с нестандартным сфероидальным базисом. Численные расчеты показали, что подход ускоряет расчеты примерно в 2.5 раза, что сравнимо с ускорением, даваемым распараллеливанием вычислений, особенно если дополнительно упростить системы, возникающие для ТЕ- и ТМ-мод.

Отметим, что предлагаемый подход может быть применен к неосесимметричным рассеивателям, а также к слоистым частицам при выборе подходящего сферического, цилиндрического или сфероидального базисов.

### Благодарности

Авторы благодарны А.Л. van Buren за созданные программы расчета сфероидальных функций, свободно доступные по сети Интернет.

### Финансирование работы

Работа В.Ф. по теоретическому изучению систем уравнений была поддержана Министерством высшего образования и науки РФ, грант FSRF-2023-0003; написание программ и численные расчеты, выполненные В.И. и Д.Т. в рамках данной статьи, — грантом Российского научного фонда РФФ 20-72-10052.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] C.F. Bohren, D.R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles* (John Wiley, NY, 1983). DOI: 10.1002/9783527618156
- [2] F.M. Kahnert, J.J. Stamnes, K. Stamnes. *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **74**, 167–182 (2002). DOI: 10.1016/S0022-4073(01)00194-7
- [3] P. Piedra, A. Kalume, E. Zubko et al. *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **231**, 140–156 (2019). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.04.013
- [4] M.I. Mishchenko, J.W. Hovenier, L.D. Travis. *Light scattering by nonspherical particles: theory, measurements, and applications* (Academic Press, San Diego, 2000).
- [5] B. Sun, G.W. Kattawar, P. Yang, X. Zhang. *Appl. Sci.*, **8**, 2686 (2018). DOI: 10.3390/app8122686
- [6] V.G. Farafonov, V.B. Il'in. *Light Scatt. Rev.*, **1**, 125–177 (2006). DOI: 10.1007/3-540-37672-0\_4

- [7] P.W. Barber, S.C. Hill. *Light scattering by particles: computational methods* (World Scientific, Singapore, 1990). DOI: 10.1142/0784
- [8] V.B. Il'in, D.G. Turichina, V.G. Farafonov et al. *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **311**, 108759 (2023). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2023.108759
- [9] C. Flammer. *Spheroidal wave functions* (Stanford Univ. Press, Stanford, 1957).
- [10] J. Meixner, F.W. Schäfer. *Mathieusche Funktionen and Sphäroidfunktionen* (Springer, Berlin, 1954).
- [11] И.В. Комаров, Л.И. Пономарев, С.Ю. Славянов. *Сферoidalные и кулоновские сферoidalные функции* (Наука, М., 1976).
- [12] N.V. Voshchinnikov, V.G. Farafonov. *Astrophys. Spa. Sci.*, **204**, 19–86 (1993). DOI: 10.1007/BF00658095