

Vilniaus universitetas
Fizikos fakultetas
Teorinės fizikos ir astronomijos institutas

Alfonsas Juršėnas

DISKREČIŲ OPTINIŲ FUNKCINIŲ METASTRUKTŪRŲ GRADIENTINĖ PAIEŠKA

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Teorinės fizikos ir astrofizikos studijų programa

Studentas:	Alfonsas Juršėnas
Leista ginti:	2020-05-27
Darbo vadovas:	dr. Algis Džiugys
Konsultantas:	dr. Vytautas Jukna
Instituto atstovas:	prof. dr. Egidijus Anisimovas

Vilnius 2020

Turinys

Įvadas	2
1 Metamedžiagos optikoje	3
1.1 Netvarkios sferinių dalelių struktūros	4
1.2 Plokščioji optika	5
1.2.1 Daugelio sluoksnių metastruktūros optimizuotos gradiento nusileidimo metodu	5
1.2.2 Metalešiai	6
1.2.3 Metalešis apskaičiuotas Mie sklaidos metodu greičiausio nusileidimo metodu	6
1.3 Sferinių dalelių chiraliniai klasteriai	7
2 Automatinio diferencijavimo programiniai karkasai	9
3 Elektromagnetinių bangų sklaida nuo dalelių klasterių	11
3.1 Prielaidos ir apibrėžimai	11
3.2 Sferinės dalelės T-matrica	12
3.2.1 Kraštinės sąlygos	12
3.3 EM sklaida nuo dalelių klasterių	14
3.4 Dalelių klasterio sklaidos parametrai	17
3.4.1 Išsklaidyta, absorbuota, ekstinkcijos galia	17
3.4.2 Klasterio sklaidos, ekstinkcijos, bei sugerties skerspjūviai	18
3.4.3 Išraiškos per sklaidos koeficientus sferinių vektorinių bangų bazėje	18
3.5 Plokščia banga sferinių vektorinių bangų bazėje	19
3.6 Vektorinių sferinių bangų poslinkio teoremos	20
3.6.1 Skaliarinių sferinių bangų poslinkio teorema	20
3.6.2 Vektorinių sferinių bangų poslinkio teorema	21
4 Rezultatai ir jų aptarimas	23
4.1 Dalelių susidūrimų (dėl optimizacijos) sprendimas	25
4.2 Tiesiškai poliarizuota plokščia banga apšviestų dalelių sklaidos maksimizavimas ..	25
4.3 Chiralinės sklaidos struktūros paieška	27
4.4 Skirtingas pradinis dalelių tankis, Ag nanodalelės	28
4.5 Darbo apribojimai	30
5 Išvados	31
Literatūros sąrašas	33
Santrauka	36
Priedas Nr. 1.	37
Priedas Nr. 2.	38
Priedas Nr. 3.	39

Įvadas

Elektromagnetinės spinduliuotės sąveika su metastruktūromis yra svarbus uždavinys turintis daug technologinių taikymų. Pastebėta, kad gęstančios bangos susiformavusios laidžių nanodalelių paviršiuje gali būti panaudotos sukoncentruoti optinės spinduliuotės energiją į nanometrinius matmenis [1]. Keletas šio efekto taikymų yra: ląstelių žūtis dėl pakeltos lokalsios temperatūros [2], padidinamas saulės elementų efektyvumas [3] ir kita. Metastruktūros taip pat naudojamos kaip optiniai elementai. Suformuojami nanostruktūrų raštai, pro kuriuos sklindant arba atsispindint elektromagnetinei bangai įvyksta valdomi poliarizacijos [4], orbitinio judesio kiekio momento [5], fazės fronto pokyčiai [6]. Tokios nanostruktūros įprastai yra formuojamos ant plokščio padėklo, todėl ši sritis yra vadinama plokščia optika (*angl. flat optics*) [6]. Tikimasi, kad plokščios optikos komponentai (dėl mikrometrinio storio bei pluošto poliarizacijos valdymo) dalyje taikymų pakeis šiuo metu naudojamus įprastus optinius elementus.

Tačiau daugelyje išvardintų taikymų metastruktūros yra suplanuojamos specialisto ir visa struktūra nėra optimizuojama. Todėl, autorius nuomone, tiesioginė metastruktūrų optimizacija turi potencialo pagerinti jau žinomas funkcines metastruktūras arba aptikti naujų optimalių struktūrų. Mie sklaidos temoje autoriui nepavyko rasti publikacijų, kuriose būtų sferinių dalelių padėtys būtų optimizuojamos diferencijuojant tikslo funkciją pagal jų koordinatas.

Šiame darbe yra nagrinėjama nepersiklojančių sferinių nanodalelių sistemos sąveika su optinio diapazono elektromagnetiniu lauku. Elektromagnetinio lauko sklaida nuo dalelių yra modeliuojama pasinaudojant Mie sklaidos teorija, kuri suformuluota tenkinant kraštinės sąlygas Maksvelo lygtims sferinės dalelės ir aplinkinės terpės paviršiuje.

Šio darbo tikslas yra pasinaudojant daugelio dalelių Mie sklaidos formalizmu bei automatinio diferencijavimo karkasais pademonstruoti jog nanodalelių padėtys gali būti optimizuojamos greičiausio pakilimo (arba nusileidimo (t.y. gradiento kryptimi)) metodu optimizuojant tikslo funkciją, kuri priklauso nuo išsklaidyto elektrinio lauko koeficientų.

Siekiant šio tikslo yra suformuluoti trys uždaviniai:

1. Sukurti daugelio dalelių Mie sklaidos skaičiavimo programą Python programavimo kalboje naudojantis Autograd automatinio diferencijavimo karkasą;
2. Naudojant šią programą optimizuoti dalelių išsidėstymą siekiant
 - (a) maksimalios sklaidos tiesinei poliarizacijai (išsklaidyto el. lauko sferinių bangų koeficientų modulio kvadrato prasme),
 - (b) maksimalios sklaidos dešininei ir minimalios sklaidos kairinei poliarizacijai toje pačioje struktūroje.
3. Patikrinti kaip keičiasi dalelių padėčių konvergavimas keičiant jų pradinio išsidėstymo tankį.

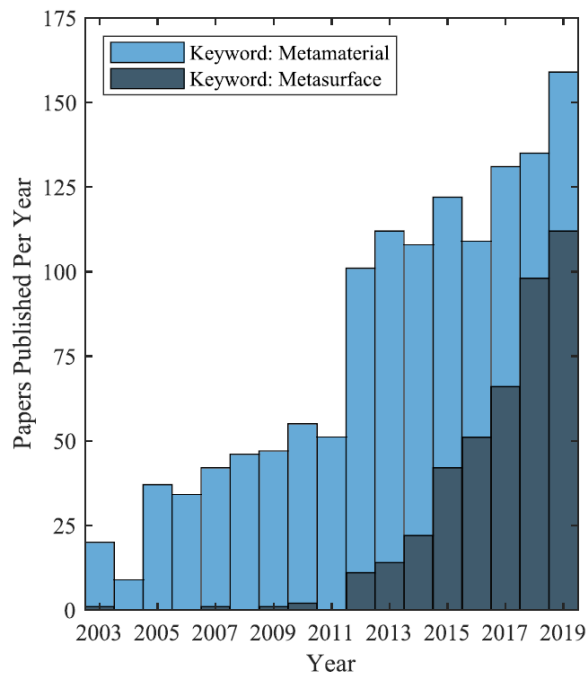
1 Metamedžiagos optikoje

Metamedžiagomis vadinamos (dažniausia periodinės) struktūros sudarytos iš mažesnių už elektromagnetinės (toliau EM) bangos ilgį metalinių arba dielektrinių dalių, kurių geometrija ir išdėstymas parinktas taip, kad visa struktūra pasižymėtų elektromagnetinėmis savybėmis, kurių neturi pavienės šios struktūrą sudarančios medžiagos. [7]

Manoma, kad terminas metastruktūra pirmą kartą buvo panaudotas prof. Rodger M. Walser 1999 m. JAV gynybos ministerijos technologijų skyrius (*angl. The Defense Advanced Research Projects Agency - DARPA*) kompozitinių medžiagų temos dirbtuvėse. Priešdėlis "meta" buvo pasirinktas siekiant perteikti faktą, jog tokios kompozitinės medžiagos pasižymi elektromagnetinėmis savybėmis, kurių gamtoje įprastai nestebime [8].

Šiame darbe nagrinėjamos metastruktūros vadinamos diskrečiomis, nes jas sudaro diskretūs elementai - dalelės, kurių lūžio rodiklis šuoliškai kinta aplinkos ir dalelės sandūroje.

Publikacijų skaičius metastruktūrų temoje sparčiai auga, Scopus (www.scopus.com) duomenų bazėje aptinkama daugiau nei 43 000 publikacijų su raktažodžiais "metamaterial", "metasurface". Mokslinių straipsnių skaičius IEEE grupės žurnale pateikiamas iliustracijoje 1. Stebimas augimas yra panašus į eksponentinį.

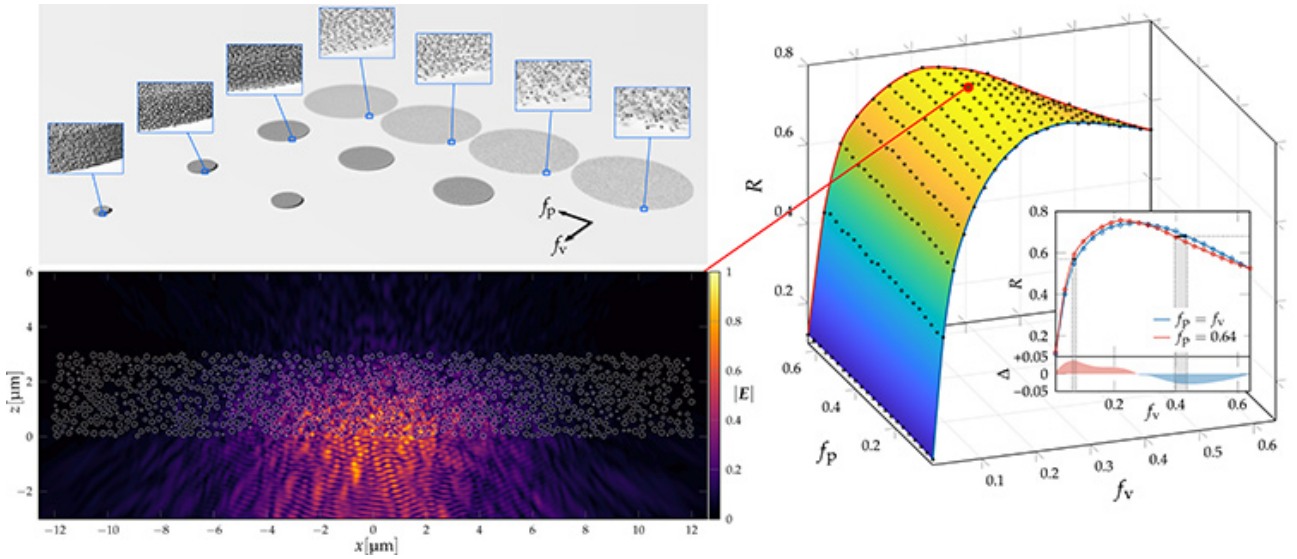


1 pav. Metamedžiagų ir metapaviršių temos publikacijų augimas moksliniame žurnale IEEE Transactions on Antennas and Propagation [8].

Sekančiuose skyreliuose yra aptariama keletas publikacijų, kurios sudaro motyvaciją šio darbo tikslui.

1.1 Netvarkios sferinių dalelių struktūros

Elektromagnetinių bangų skaičiavimai sklaidai nuo daugelio sferinių dalelių yra jau seniai nagrinėjama sritis [9], tačiau vis dar išlieka uždavinių susijusių su situacijomis, kuomet dalelių skaičius bei tankis yra pakankamai didelis, tuomet perspinduliavimo tarp dalelių neįskaitančios aproksimacijos tampa netinkamos [10]. Straipsnio [11] autoriai sukūrė MATLAB programinį



2 pav. Tyrimo [11] autoriai nagrinėjo kaip keičiasi didelės TiO_2 nanosferų (dalelių skaičius $8 \cdot 10^4$) sistemos atspindžio koeficientas R priklausomai nuo dalelių tūrinio tankio f_v ir dalelių tarpuose esančio tūrio santykio su struktūros tūriu f_p . Dalelės yra apšviestos tiesinės poliarizacijos Gauso pluoštu, z ašies didėjimo kryptimi.

paketą "CELES" [12], siekdami panaudoti sparčiai išaugusius grafikos plokščių skaičiavimo pajėgumus, kad galėtų apskaičiuoti sklaidą nuo sistemų iš labai didelio skaičiaus sferinių dalelių (žr. pav 2) Mie sklaidos metodu [9]. Minėtoje publikacijoje jie parodo, jog 32 bitų slankaus kablelio skaičiaus tikslumas yra pakankamas gauti teisingą klasterio tolumo EM lauko sklaidos kampų pasiskirstymą. Tai svarbu, nes daugelis plačiai prieinamų grafikos kortų veikia būtent 32 bitų tikslumu. Iliustracijoje 2 (dešinėje) matome, kad egzistuoja optimalus dalelių tankis f_v (*ang. volume fraction*) bei ertmių tarp jų tūrio santykis su sistemos tūriu f_p (*angl. packing fraction*), kuomet atspindžio koeficientas yra maksimalus. Tačiau visų galimų f_p, f_v parametru kombinacijų paieška (maksimizuojant R) yra neefektyvi palyginus su gradientinio nusileidimo metodika.

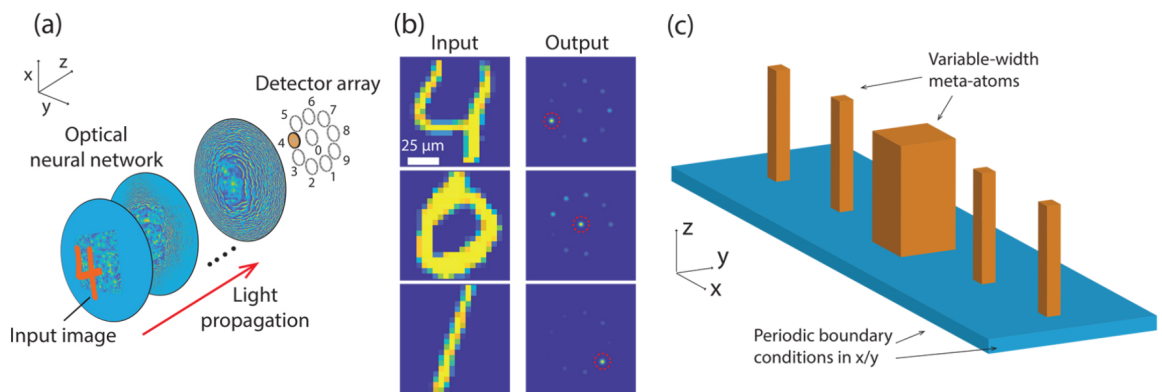
Pastebime, kad užuot atlikus visų galimų f_p, f_v parametru kombinacijų paiešką (maksimizuojant R), galima būtų atlikti gradientinio nusileidimo optimizaciją kryptimi $(\partial_{f_p}, \partial_{f_v})R$, siekiant spartaus optimalių struktūrų suradimo.

1.2 Plokščioji optika

Vienas iš metastruktūrų taikymų yra plokščių optinių elementų sukūrimas. Šiame skyrelyje trumpai apžvelgiami keletas publikacijų susijusių su optimalių metastruktūrų paieška.

1.2.1 Daugelio sluoksnių metastruktūros optimizuotos gradiento nusileidimo metodu

Tyrime [13] autoriai gradientinio nusileidimo metodu optimizavo metastruktūrą, sudarytą iš stačiakampio formos dalelių (žr. pav. 3). Autoriai pasinaudojo uždaro kodo Lumerical programine įranga, joje įgyvendintu baigtinių elementų metodu. Jie apskaičiavo plokščių bangų sklaidos kompleksines amplitudes nuo pavienių stačiakampių dalelių. Šios amplitudės vėliau buvo panaudotos sklaidą aprašant plokščių bangų superpozicija. Šis darbas įdomus tuo, kad vienu metu optimizuojama seka metastruktūrų pro kurias sklindančio pluošto intensyvumas yra valdomas parenkant visose metastruktūrose esančių dalelių diametrus. Taip pat yra atsižvel-

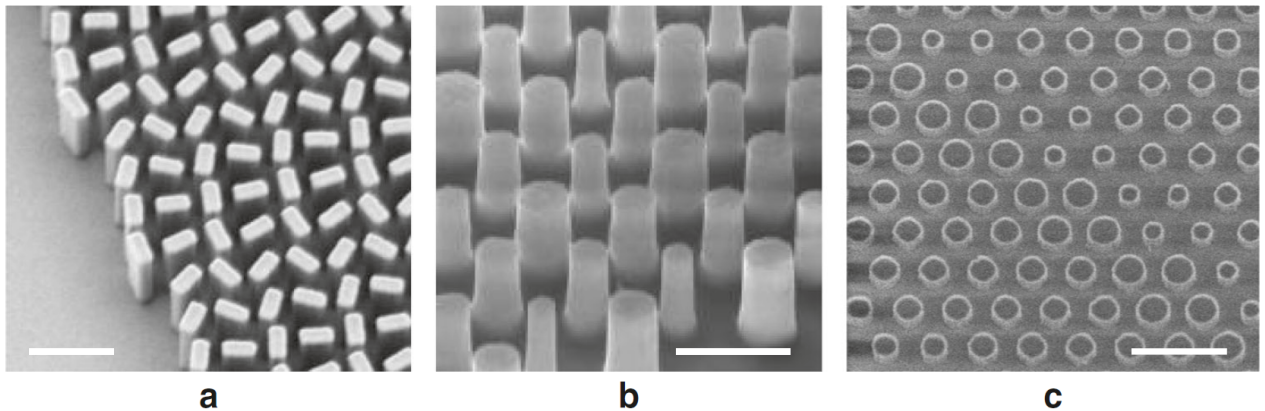


3 pav. Optinis neuroninis tinklas [13], sudarytas iš daugelio sluoksnių metastruktūrų (a), tinklo įvestis yra ranka rašyto skaičiaus formos apšvietimas (MNIST duomenų rinkinys [14]). Išvestyje šviesa yra sufokusuojama į vieną iš detektorių, kuris atitinka konkretų skaičių (b). Pasiektas 84% tikslumas skaičių klasifikacijoje.

giama į pasirinktas diskrečias bangos ilgio vertes - siekiama jog gautos struktūros veiktų ne vien monochromatiniam apšvietimui (tai yra vienas iš didelių apribojimų daugelio metastruktūrų atveju). Iliustracijoje 3 matome, kaip seka metastruktūrų gali būti panaudota vaizdų klasifikacijai nukreipiant šviesos intensyvumą į tam tikrą klasę atitinkantį detektorį. Šis taikymas galimai naudingas informacijos apdorojimui situacijose, kuomet svarbus didelis energetinis našumas ir greitaveika.

1.2.2 Metalėšiai

Metalešiais vadiname optinius elementus atliekančius lęšio funkciją tačiau sudarytus iš metamedžiagos. Tokie lęšiai pasižymi poliarizacijai selektyviu fokusavimu bei dažniausiai jautriai reaguoja į krentančio bangos ilgio kitimą. 4 pav. (c) pateiktas metalėšis pasiekė skaitinę aper-



4 pav. Keletas metalėšių sandaros pavyzdžių [15], mastelio juosta yra $1\mu m$ dydžio. (a) - geometrinės fazės metalėšis (EM bangos fazės fronto valdymas apskritiminei poliarizacijai)

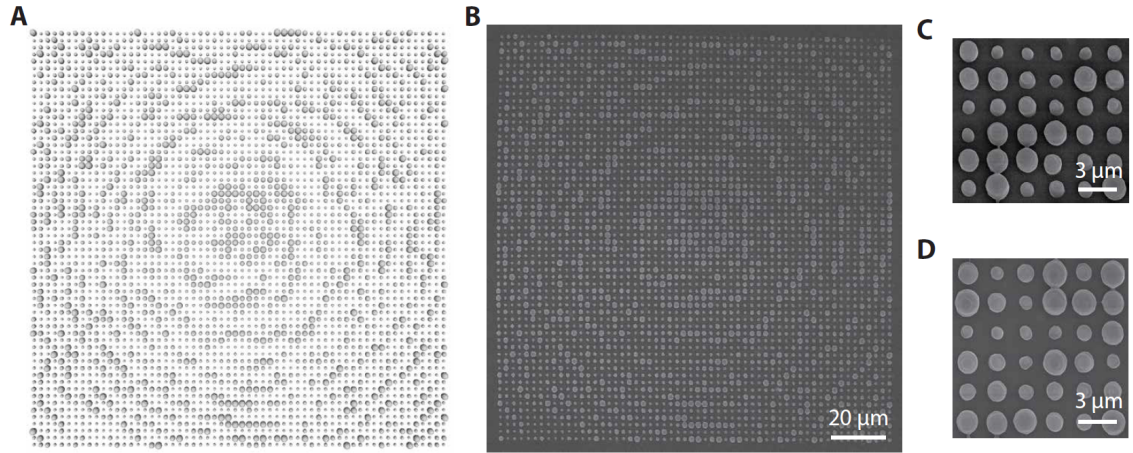
tūrą artimą 1, fokusavimą kampais iki 82° , lęšio storis $238nm$ [16]. Šaltinis [17] nurodo šiuos metalėšių ir metaoptikos privalumus:

1. polarimetrinis vaizdinimas (*angl. polarimetric imaging*),
2. didelio našumo poliarizatoriai,
3. taikymai integruotoje optikoje ir fotonikoje, kuomet integracijos tankis yra kritiškai svarbus parametras.

1.2.3 Metalėšis apskaičiuotas Mie sklaidos metodu greičiausio nusileidimo metodu

Tiesioginei sklaidos problemai spręsti autoriai naudojo CELES programinį paketą [12]. Optimizuojant intensyvumo profilį autoriai modifikavo CELES paketą analitiškai apskaičiuodami intensyvumo pasiskirstymo gradientą pagal visų dalelių diametrus (žr pav. 5).

Pastebime, kad toks įgyvendinimas turi trūkumą - pakeitus dalelių geometriją arba įvedus sudėtingas nuostolio funkcijas ar aproksimacijas, analitinis gradientų įgyvendinimas užtrunka daug laiko. Taip pat nėra optimizuojamos dalelių padėtys.



5 pav. Metalėšio [18] suformuoto iš daugelio sferinių dalelių SEM nuotrauka. Optinis elementas pagamintas naudojantis daugiafotonės litografijos metodu, padengtas Au danga. (A) Sferų išdėstymo schema. (B) SEM nuotrauka iš viršaus. (C) Priartintas vaizdas kampu, matomi nukrypimai nuo sferinės formos. (D) Priartintas vaizdas iš viršaus.

1.3 Sferinių dalelių chiraliniai klasteriai

Chiralinėmis vadiname struktūras, kurios nepasižymi veidrodine simetrija. Kairinės ir dešinės struktūros yra susietos veidrodinio atspindžio transformacija.

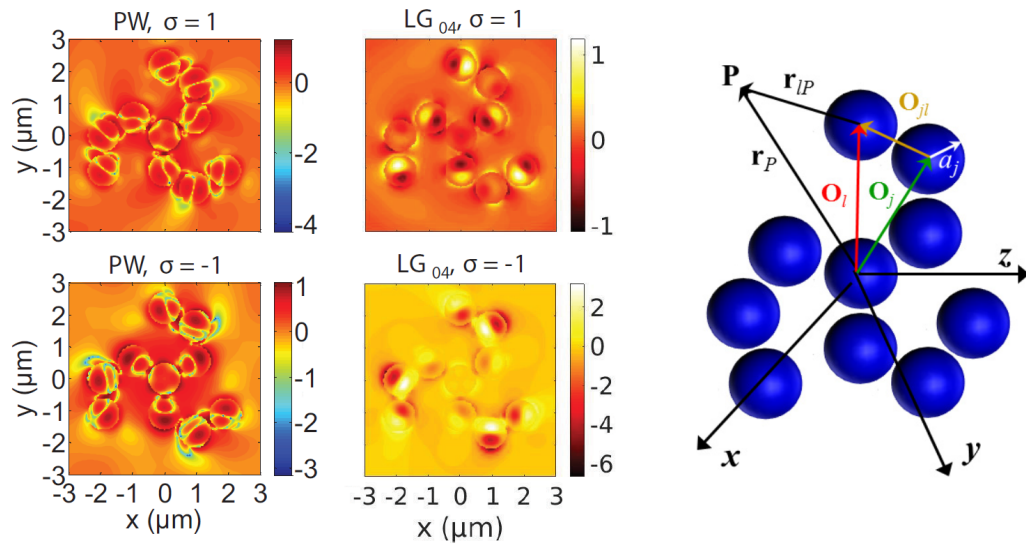
Publikacijoje [5] pademonstruotas lokalaus EM lauko chiraliskumo parametro [19] sustiprinimas aplink sferinių nanodalelių klasterį

$$C(\mathbf{r}) = -\frac{\epsilon\omega}{2} \text{Im} [\mathbf{E}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})] \quad (1)$$

čia ω ciklinis dažnis, ϵ dielektrinė skvarba, \mathbf{E} - elektrinio lauko stipris, \mathbf{B} - magnetinio lauko indukcija. Elektromagnetinio lauko pasiskirstymas, kuriame chiraliskumo parametras (1) yra didesnis negu apskritiminės poliarizacijos plokščios bangos yra vadinamas superchiraliniu. Šiame straipsnyje taip pat pademonstruotas taip vadinamas superchiralinis EM laukas. Didelės chiraliskumo parametro vertės yra svarbios chemijos taikymuose, kuomet chiralinės molekulės (*angl. enantiomers*) gali būti selektyviai paveiktos (t.y. vien tik kairinės arba vien tik dešinės). Todėl didelio chiraliskumo EM lauko pasiskirstymai įgalina sukurti kairinių arba dešinių molekulių sensorius arba vykdyti pilnai asimetrinę sintezę [19].

Pagrindinis šio straipsnio rezultatas yra lokalaus chiraliskumo parametro vertė yra viena eile didesnė negu apskritiminės poliarizacijos plokščios bangos atveju, kuomet dalelės yra dielektrinės.

Skaičiavimai atlikti Mie sklaidos metodika daugeliui dalelių [9]. Klasterio geometrija parinkta žmogaus ir nėra optimizuota. Galbūt optimizuojant dalelių padėtis būtų gautos dar didesnės lokalaus chiraliskumo parametro vertės.



6 pav. Kairėje matome lokalaus chiralitumo parametro (1) pasiskirstymus [5], kurie yra normuoti į apskritiminės poliarizacijos plokščios bangos chiralitumo vertę. Čia PW žymi klasterio apšvietimą plokščia apskritiminės poliarizacijos banga, LG - Lagero-Gauso pluoštu. $\sigma = +1, -1$ atitinkamai nusako kairinę ir dešinę apskritiminę poliarizaciją. Nagrinėjamas Si nanodalelių klasteris pavaizduotas dešinėje.

Apibendrinimas

Galime teigti, jog metastruktūrų optimizacija yra svarbus technologinį bei mokslinį potencialą turintis uždavinys, kuris yra sprendžiamas daugelio tyrėjų grupių. Atsižvelgiant į apžvalgoje paminėtus pastebėjimus, atrodo jog daugelio dalelių Mie sklaidos skaičiavimai (įskaitant perspinduliavimą tarp dalelių) įgyvendinti programoje pasitelkiant automatinio diferencijavimo karkasus būtų naudingas įrankis, lanksčiai sprendžiantis įvairius nanodalelių struktūrų optimizacijos uždavinius.

2 Automatinio diferencijavimo programiniai karkasai

Svarbus mašininio mokymo komponentas yra automatinio diferencijavimo programiniai karkasai. Dėka šių karkasų tyrėjui pakanka programoje apibrėžti funkciją, o diferencijavimas pagal šios funkcijos (ar simuliacijos) parametrus bus atliktas automatiškai. Tai labai reikšmingai sutaupto laiko, nes kai kurie modeliai (ar simuliacijos) gali turėti itin sudėtingas išvestines, kurių įgyvendinimas programiniame kode užimtų didžiąją dalį laiko skirto modeliui kurti.

Šio metu populiariausi automatinio diferencijavimo karkasai yra Pytorch [20] bei Tensorflow [21]. Šių programinių karkasų pagrindinis taikymas yra milijonus laisvai parenkamų parametrų turintys konvoliuciniai bei rekursiniai neuroniniai tinklai ir jų hibridai.

Tačiau Pytorch bei Tensorflow programiniuose karkasuose yra įgyvendinta tik nedaugelis specialiųjų matematinių funkcijų ir jie nepalaiko kompleksinių skaičių. Todėl šiame darbe pasirinktas Pytorch pirmtakas Autograd [22], kuris nepasižymi šiais trūkumais. Šiame skyrelyje trumpai aptariama, kaip veikia Autograd programinis karkasas.

Automatinio diferencijavimo programinių karkasų veikimas

Siekiant atlikti greičiausio nusileidimo (pakilimo) optimizaciją gradiento kryptimi reikia apskaičiuoti skaliarinės tikslo funkcijos f gradientą pagal optimizuojamus parametrus. Ši funkcija yra sudaryta iš kitų funkcijų (kurios atitinka skaičiavimo etapus)

$$f(\mathbf{x}) = d(c(\mathbf{b}(\mathbf{a}(\mathbf{x})))) \quad (2)$$

taip galime išrašyti atskirus skaičiavimo etapus

$$f = f(\mathbf{c}), \quad \mathbf{c} = \mathbf{c}(\mathbf{b}), \quad \mathbf{b} = \mathbf{b}(\mathbf{a}), \quad \mathbf{a} = \mathbf{a}(\mathbf{x}) \quad (3)$$

funkcijos f gradientas pagal vektorių \mathbf{x} , yra sudarytas iš ją sudarančių funkcijų Jakobianų sandaugos:

Jakobiano matricos skaičiavimo algoritminis sudėtingumas priklauso nuo šių matricų sandaugos eiliškumo. Todėl Autograd įgyvendinti du metodai apskaičiuojant funkcijos f gradientą.

1) Jakobianų sandaugos skaičiuojant pirmyn (angl. autograd forward mode)

Pirmiausia yra sudauginami Jakobianai $\partial \mathbf{a} / \partial \mathbf{x}$ ir $\partial \mathbf{b} / \partial \mathbf{a}$ ir tolesni nuo link $\partial f / \partial \mathbf{c}$

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \left(\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{b}} \left(\underbrace{\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{a}} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}}}_{\text{ }} \right) \right) \quad (4)$$
$$\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial b_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial b_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial b_m}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial b_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

čia išskirta Jakobianų sandauga $\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{a}} \cdot \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}}$. Toks skaičiavimas efektyvus, kai diferencijuojame vektorių pagal nedidelės dimensijos vektorių [22]. Todėl šis metodas nebus naudojamas.

2) Jakobianų sandaugos skaičiuojant atgal (angl. autograd backward mode)

Šiame darbe buvo naudojama priešinga (lyginant su (4)) Jakobianų sandaugų tvarka

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \left(\left(\begin{array}{c} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{b}} \\ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{b}} \end{array} \right) \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{a}} \right) \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} \quad (5)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{b}} = \left[\frac{\partial y}{\partial b_1} \quad \dots \quad \frac{\partial y}{\partial b_m} \right]$$

efektyvu, kai diferencijuojame skaliarą pagal aukštos dimensijos vektorių [22]. Šiame darbe daugelio dalelių sklaidą aprašančių funkcijų Jakobianų skaičiavimas yra naudojamas tik kaip tarpinis etapas apskaičiuojant tikslo funkcijos gradientą. Funkcijos, kurių išvestinės turi būti nurodytos programuotojo yra vadinamos primityviomis. Primityvios funkcijos yra "apgaubiamos" kitos autograd paketo funkcijos, kuri perduoda primityvių funkcijų išvestines.

Programine karkase Autograd nebuvo apibrėžtos sferinių Noimano, Beselio funkcijų bei sferinių harmoninių funkcijų išvestinės pagal tolydžius parametrus. Todėl atliekant darbą šis karkasas buvo papildytas apibrėžiant šių funkcijų išvestines (žr. priedas Nr. 3.).

3 Elektromagnetinių bangų sklaida nuo dalelių klasterių

3.1 Prielaidos ir apibrėžimai

Šiame darbe laikysime, jog elektromagnetinė spinduliuotė yra susiduria su dalelių sistema, kuri yra patalpinta nesugeriančioje, tiesinėje, izotropinėje terpėje kurioje nėra laisvų krūvių ir srovių. Taip pat apsiribojame harmonine priklausomybe nuo laiko $e^{-i\omega t}$, kur ω yra ciklinis virpesių dažnis. Tuomet EM bangų sklaidimą nagrinėjamoje erdvėje aprašo šios formos Maksvelo lygtys

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 & \nabla \times \mathbf{E} &= i\omega\mu\mathbf{H} \\ \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0 & \nabla \times \mathbf{H} &= -i\omega\epsilon\mathbf{E}\end{aligned}\tag{6}$$

čia \mathbf{E} - elektrinio lauko stipris, \mathbf{H} - magnetinio lauko stipris, μ - magnetinė terpės skvarba, ϵ - dielektrinė terpės skvarba, Pritaikius rotoriaus operaciją šioms lygtims dešinėje (6) pusėje gaunama, kad \mathbf{E} ir \mathbf{H} tenkina vektorinę Helmholco lygtį

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0 \quad \nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0\tag{7}$$

čia $k = 2\pi/\lambda$ bangos skaičius nagrinėjamoje terpėje. Formaliai sprendžiant Helmholco vektorinę lygtį (7) sferinėje koordinačių sistemoje gaunami sprendiniai vadinami sferinėmis vektorinėmis bangomis [23], taip pat sferiniais vektoriniais multipoliais [24]

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_{mn}(\mathbf{r}) &= z_n(kr) \left[\hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{imP_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta} \exp(im\phi) - \hat{\boldsymbol{\phi}} \exp(im\phi) \frac{d}{d\theta} P_n^m(\cos\theta) \right] \\ \mathbf{N}_{mn}(\mathbf{r}) &= \hat{\mathbf{r}} \frac{z_n(kr)}{kr} n(n+1) P_n^m(\cos\theta) \exp(im\phi) \\ &+ \frac{1}{kr} \frac{d}{dr} [rz_n(kr)] \left[\hat{\boldsymbol{\theta}} \exp(im\phi) \frac{d}{d\theta} P_n^m(\cos\theta) + \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{imP_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta} \exp(im\phi) \right]\end{aligned}\tag{8}$$

čia $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \hat{\boldsymbol{\phi}}$ - sferinių koordinačių baziniai vektoriai, (r, θ, ϕ) - sferinių koordinačių sistema, P_n^m - Ležandro funkcija, $z_n(r)$ - sferinė Beselio arba sferinė Hankelio funkcija (žr. priede Nr. 2.) atitinkamai aprašančios į objektą krentančias ir objekto perspinduliuotas bangas [25,26]. Hankelio funkcijos atveju žymėsime $\mathbf{M}_{m,n}^{(3)}, \mathbf{N}_{m,n}^{(3)}$, o Beselio funkcijos $\mathbf{M}_{m,n}^{(1)}, \mathbf{M}_{m,n}^{(1)}$. Šių funkcijų atitikimas kraštinėms sąlygoms sferos paviršiuje yra parodomas [27] 1759 psl. 13 skyriuje "Vector Fields". Šios vektorinės (69) funkcijos sudaro pilną ir ortogonalią bazę [23], todėl jomis galime išreikšti bet kokius kitus vektorinės Helmholco lygties sprendinius. Tą patį galima atlikti ir panaudojant vektorinėmis plokščiomis bangomis, tačiau motyvacija panaudoti sferines bangas kyla dėl dvejų priežasčių:

1. paprastas kraštinių sąlygų tenkinimas sferinėms dalelėms,
2. tikimasi, kad nedidelis skaičius sferinių vektorinių bangų bus pakankamas apytiksliai apra-

šyti sklaidą nuo į sferą panašios geometrijos dalelėms (lyginant su plokščiomis bangomis).

3.2 Sferinės dalelės T-matrica

Šiame skyrelyje, remiantis [25], glaustai aptariamas sklaidos uždavinio vienai sferinei dalelei sprendimas, bei įvedama T-matricos (pernašos matrica - angl. transfer matrix) sąvoka. Pilnas T-matricos metodo aprašymas pateikiamas [28] bei [29, 30]

Tarkime, kad sferinė dalelė yra apšviečiama išorinio elektromagnetinio lauko \mathbf{E}_{inc} , dalelės išsklaidytą el. lauką pažymėkime \mathbf{E}_{sca} o vidinį el. lauką \mathbf{E}_{int} . Visas šias elektrinio lauko dedamąsias atitinkamai išreiškiame begaline \mathbf{M} ir \mathbf{N} funkcijų eilute

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{int} &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n c_{m,n} p_{m,n} \mathbf{M}_{m,n}^{(1)} + d_{m,n} q_{m,n} \tilde{\mathbf{N}}_{m,n}^{(1)} \\ \mathbf{E}_{sca} &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n a_{m,n} p_{m,n} \mathbf{M}_{m,n}^{(3)} + b_{m,n} q_{m,n} \mathbf{N}_{m,n}^{(3)} \\ \mathbf{E}_{inc} &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n p_{m,n} \mathbf{M}_{m,n}^{(1)} + q_{m,n} \tilde{\mathbf{N}}_{m,n}^{(1)}\end{aligned}\tag{9}$$

čia a, b, c, d, p, q - kompleksiniai skleidinių koeficientai. Tiesioginio sklaidos uždavinio atveju, mes iš anksto žinome tik sklaidančio objekto geometriją, padėtį ir savybes bei jį apšviečiančio elektrinio lauko koeficientus p, q . Taip pat čia spėjama (kadangi iš anksto žinoma sferinės dalelės atveju), kad išsklaidyto lauko koeficientai yra tiesiškai priklausantys nuo krentančio lauko koeficientų: $\tilde{a}_{mn} = a_{mn} p_{mn}$, $\tilde{b}_{mn} = b_{mn} q_{mn}$, $\tilde{c}_{mn} = c_{mn} p_{mn}$, $\tilde{d}_{mn} = d_{mn} q_{mn}$.

3.2.1 Kraštinės sąlygos

Iš energijos tvermės dėsnio ir Maksvelo lygčių gaunamos kraštinės sąlygos, jog tangentinės (dalelės paviršiaus atžvilgiu) elektrinio bei magnetinio lauko komponentės turi būti tolydžios ties išorinės terpės ir dalelės sandūra [25], tai išreiškiame šiomis lygtimis

$$\begin{aligned}E_{inc,\theta} + E_{sca,\theta} &= E_{int,\theta}, & E_{inc,\phi} + E_{sca,\phi} &= E_{int,\phi} \\ H_{inc,\theta} + H_{sca,\theta} &= H_{int,\theta}, & H_{inc,\phi} + H_{sca,\phi} &= H_{int,\phi}\end{aligned}\quad r = r_1\tag{10}$$

čia r_1 - dalelės spindulys. Sferinės vektorinės bangos čia yra patogios tuo, kad jos atitinka dalelės paviršių, kai koordinatė r yra fiksuota $r = r_1$.

Į kraštines sąlygas (10) įstačius elektrinio bei magnetinio lauko skleidinius (9) sferinėmis vektorinėmis bangomis ir pasinaudojus jų savybėmis gaunama 4 tiesinių lygčių sistema dėl

vidinio ir išsklaidyto elektrinio lauko koeficientų [25]

$$\begin{aligned}
j_n(n_1x)c_{mn} + h_n^{(1)}(x)b_{mn} &= j_n(x) \\
\mu [n_1xj_n(n_1x)]' c_{mn} + \mu_1 [xh_n^{(1)}(x)]' b_{mn} &= \mu_1 [xj_n(x)]' \\
\mu n_1j_n(n_1x)d_{mn} + \mu_1 h_n^{(1)}(x)a_{mn} &= \mu_1 j_n(x) \\
[n_1xj_n(n_1x)]' d_{mn} + n_1 [xh_n^{(1)}(x)]' a_{mn} &= n_1 [xj_n(x)]'
\end{aligned} \tag{11}$$

čia dydis x - vadinamas dalelės dydžio parametru, μ_1, μ - dalelės bei aplinkos magnetinė skvarba atitinkamai, n_1 - santykinis dalelės lūžio rodiklis, ženklas $'$ - žymi diferencijavimą pagal argumentą įprastuose skliausteliuose,

$$x = kr_1 = \frac{2\pi Nr_1}{\lambda}, \quad n_1 = \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N_{env}} \tag{12}$$

čia N_{env} - aplinkos lūžio rodiklis, N_1 - dalelės lūžio rodiklis, k - bangos skaičius, λ - spinduliuotės bangos ilgis vakuume.

Išsprendus lygčių sistemą (11) gautą iš kraštinių sąlygų, gaunamos išraiškos dėl vidinio el. lauko koeficientų

$$\begin{aligned}
c_{m,n} &= \frac{\mu_1 j_n(x) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [xj_n(x)]'}{\mu_1 j_n(n_1x) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [n_1xj_n(n_1x)]'} \\
d_{m,n} &= \frac{\mu_1 n_1 j_n(x) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 n_1 h_n^{(1)}(x) [xj_n(x)]'}{\mu n_1^2 j_n(n_1x) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [n_1xj_n(n_1x)]'}
\end{aligned} \tag{13}$$

ir išsklaidyto el. lauko koeficientų

$$\begin{aligned}
a_{m,n} &= \frac{\mu n_1^2 j_n(n_1x) [xj_n(x)]' - \mu_1 j_n(x) [n_1xj_n(n_1x)]'}{\mu n_1^2 j_n(n_1x) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [n_1xj_n(n_1x)]'} \\
b_{m,n} &= \frac{\mu_1 j_n(n_1x) [xj_n(x)]' - \mu j_n(x) [n_1xj_n(n_1x)]'}{\mu_1 j_n(n_1x) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [n_1xj_n(n_1x)]'}
\end{aligned} \tag{14}$$

Svarbu atkreipti dėmesį, koeficientų išraiškos nepriklauso nuo skaičiaus m .

Apribojus sferinių vektorinių bangų sumas (21) iki baigtinės eilės $n = n_{max}$ ir išdėsčius krentančio bei išsklaidyto elektrinio lauko koeficientus į vektorių

$$\mathbf{v}_{inc} = \left(p_{-1,1} \quad p_{0,1} \quad \dots \quad p_{n_{max},n_{max}} \quad q_{-1,1} \quad q_{0,1} \quad \dots \quad q_{n_{max},n_{max}} \right)^T \tag{15}$$

$$\mathbf{v}_{sca} = \left(\tilde{a}_{-1,1} \quad \tilde{a}_{0,1} \quad \dots \quad \tilde{a}_{n_{max},n_{max}} \quad \tilde{b}_{-1,1} \quad \tilde{b}_{0,1} \quad \dots \quad \tilde{b}_{n_{max},n_{max}} \right)^T \tag{16}$$

Galime apibrėžti matricas, kurios atvaizduoja krentančio elektrinio lauko koeficientų vektorių į išsklaidyto lauko koeficientus bei į vidinio lauko koeficientus

$$\mathbf{v}_{sca} = T_{sca} \mathbf{v}_{inc} \quad \mathbf{v}_{int} = T_{int} \mathbf{v}_{inc} \quad (17)$$

matrica T_{sca} yra vadinama dalelės T-matrica ir žinodami jos elementus galime apskaičiuoti išsklaidytą lauką bei iš to sekančias sklaidos charakteristikas. Toliau šią matricą žymėsime sutrumpintai $T = T_{sca}$

Dėl apibrėžimų (9) bei (17) T-matrica yra diagonali ir sudaryta iš

$$\begin{aligned} T_{sca} &= \text{diag} \left(a_{-1,1} \quad a_{0,1} \quad \dots \quad a_{n_{\max},n_{\max}} \quad b_{-1,1} \quad b_{0,1} \quad \dots \quad b_{n_{\max},n_{\max}} \right) \\ T_{int} &= \text{diag} \left(c_{-1,1} \quad c_{0,1} \quad \dots \quad c_{n_{\max},n_{\max}} \quad d_{-1,1} \quad d_{0,1} \quad \dots \quad d_{n_{\max},n_{\max}} \right) \end{aligned} \quad (18)$$

Turėdami išsklaidyto bei vidinio elektrinio lauko išraiškas galime pereiti prie daugelio dalelių EM lauko sklaidos uždavinio sprendimo, kuris aptariamas sekančiame skyrelyje.

3.3 EM sklaida nuo dalelių klasterių

Šiame skyrelyje aprašomas remiantis [9] daugelio dalelių EM bangų sklaidos uždavinio sprendimas pasinaudojant pavienių dalelių T-matricomis bei transliacijos matricomis (žr. skyrelį 3.6) tarp jų.

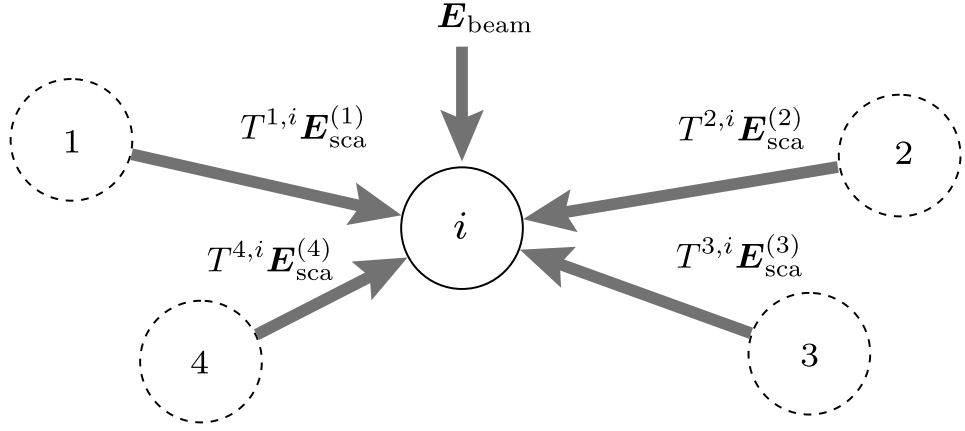
Į dalelę i krentantis elektrinis laukas $\mathbf{E}_{inc}^{(i)}$ yra sudarytas iš dvejų dedamųjų. Tai yra išorinis žadinantis elektrinis laukas \mathbf{E}_{beam} bei kitų dalelių perspinduliuotas elektrinis laukas $\sum_{j \neq i}^N \mathbf{E}_{sca}^{(j)}$ (žr. pav. 7), tai galime užrašyti sekančia lygtimi

$$\mathbf{E}_{inc}^{(i)} = \mathbf{E}_{beam} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{E}_{sca}^{(j)} \quad (19)$$

čia $i = 1, 2, \dots, N$, kur N - dalelių skaičius. Pasinaudojus kiekvienos dalelės pernašos matrica $T^{(i)}$ yra gaunamas atitinkamai kiekvienos dalelės išsklaidytas elektrinis laukas $\mathbf{E}_{sca}^{(i)} = T^{(i)} \mathbf{E}_{inc}^{(i)}$, tuomet lygtį (19) galime perrašyti per į i -tąją dalelę krentantį el. lauką

$$\mathbf{E}_{sca}^{(i)} = T^{(i)} \mathbf{E}_{inc}^{(i)} = T^{(i)} \mathbf{E}_{beam} + T^{(i)} \sum_{j \neq i}^N T^{j \rightarrow i} \mathbf{E}_{sca}^{(j)} \quad (20)$$

Elektrinius laukus (dėl atminties apribojimų) apytiksliai atvaizduojame sferinių vektorinių ban-



7 pav. Į i -tąją dalelę krentantis el. laukas (šios dalelės sferinių vektorinių bangų bazėje) yra sudarytas iš išorinio žadinančio el. lauko dedamosios ir .

gų bazėje iki eilės n_{\max}

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_{\text{int}}^{(i)} &= \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sum_{m=-n}^n c_{m,n}^{(i)} \mathbf{M}_{m,n}^{(1)} + d_{m,n}^{(i)} \mathbf{N}_{m,n}^{(1)} \\
 \mathbf{E}_{\text{sca}}^{(i)} &= \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sum_{m=-n}^n a_{m,n}^{(i)} \mathbf{M}_{m,n}^{(3)} + b_{m,n}^{(i)} \mathbf{N}_{m,n}^{(3)} \\
 \mathbf{E}_{\text{beam}} &= \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sum_{m=-n}^n p_{m,n} \mathbf{M}_{m,n}^{(1)} + q_{m,n} \mathbf{N}_{m,n}^{(1)}
 \end{aligned} \tag{21}$$

el. lauko vektorius pakeiskime jų sferinių vektorinių bangų (toliau SVB) koeficientų vektoriais $\mathbf{v}_{\text{sca}}^{(i)}$, $\mathbf{v}_{\text{inc}}^{(i)}$, \mathbf{v}_{beam} , tuomet išsklaidyto el. lauko $T^{(i)}$ bei translacijos ($T^{j \rightarrow i}$) operatorius atitinka matricos. Visus šiuos SVB koeficientus išdėstome minėtuose vektoriuose fiksuota eiliškumo tvarka

$$\mathbf{v}_{\text{int}}^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{-1,1}^{(i)} \\ c_{0,1}^{(i)} \\ \vdots \\ c_{n_{\max},n_{\max}}^{(i)} \\ d_{-1,1}^{(i)} \\ d_{0,1}^{(i)} \\ \vdots \\ d_{n_{\max},n_{\max}}^{(i)} \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(i)} = \begin{pmatrix} a_{-1,1}^{(i)} \\ a_{0,1}^{(i)} \\ \vdots \\ a_{n_{\max},n_{\max}}^{(i)} \\ b_{-1,1}^{(i)} \\ b_{0,1}^{(i)} \\ \vdots \\ b_{n_{\max},n_{\max}}^{(i)} \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_{\text{beam}} = \begin{pmatrix} p_{-1,1} \\ p_{0,1} \\ \vdots \\ p_{n_{\max},n_{\max}} \\ q_{-1,1} \\ q_{0,1} \\ \vdots \\ q_{n_{\max},n_{\max}} \end{pmatrix} \tag{22}$$

multi-indeksas [12] nustato tvarką kuria yra išdėstomos šių vektorių komponentės čia laikome,

kad vektoriaus komponentų numeracija prasideda nuo 0, $\tau = 1, 2$ čia 1 - atitinka \mathbf{M} , 2 - \mathbf{N} ,

$$\begin{aligned} \text{multi-index}(n, m, \tau, j) &= (j-1)2n_{\max}(n_{\max}+2) && \leftarrow \text{dalelės } j \text{ koeficientų sritis} \\ &+ (\tau-1)n_{\max}(n_{\max}+2) && \leftarrow \mathbf{M} \text{ arba } \mathbf{N} \text{ koeficientų sritis} \\ &+ (n-1)(2+n-1) + n + m && \leftarrow \mathbf{M} \text{ arba } \mathbf{N} \text{ koeficientas } (m, n) \end{aligned} \quad (23)$$

čia $j = 1, \dots, N$ - dalelės numeris.

Sferinių vektorinių bangų koeficientų bazėje daugelio dalelių el. lauko sklaidos lygtį galime perrašyti šitaip

$$\mathbf{v}_{\text{inc}}^{(i)} = \mathbf{v}_{\text{beam}} + \sum_{j \neq i} T^{j \rightarrow i} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(j)} \quad (24)$$

gauname N lygčių sistemą dėl N nežinomųjų $\mathbf{v}_{\text{sca}}^{(i)}$

$$\mathbf{v}_{\text{sca}}^{(i)} = T^{(i)} \mathbf{v}_{\text{inc}}^{(i)} = T^{(i)} T^{O \rightarrow i} \mathbf{v}_{\text{beam}} + T^{(i)} \sum_{j \neq i} T^{j \rightarrow i} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(j)} \quad (25)$$

perrašome šią lygčių sistemą vaizdžiau, kuri motyvuos tolesnę notaciją

$$\begin{array}{ccccccc} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(1)} & - & T^1 T^{2 \rightarrow 1} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(2)} & - & T^1 T^{3 \rightarrow 1} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(3)} & - \dots - & T^1 T^{N \rightarrow 1} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(N)} & = & T^1 T^{O \rightarrow 1} \mathbf{v}_{\text{beam}} \\ -T^2 T^{1 \rightarrow 2} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(1)} & + & \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(2)} & - & T^2 T^{3 \rightarrow 2} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(3)} & - \dots - & T^2 T^{N \rightarrow 2} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(N)} & = & T^2 T^{O \rightarrow 2} \mathbf{v}_{\text{beam}} \\ -T^3 T^{1 \rightarrow 3} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(1)} & - & T^3 T^{2 \rightarrow 3} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(2)} & + & \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(3)} & - \dots - & T^3 T^{N \rightarrow 3} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(N)} & = & T^3 T^{O \rightarrow 3} \mathbf{v}_{\text{beam}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \dots & \vdots & & \vdots \\ -T^N T^{1 \rightarrow N} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(1)} & - & T^N T^{2 \rightarrow N} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(2)} & - & T^N T^{3 \rightarrow N} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(3)} & - \dots + & \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(N)} & = & T^N T^{O \rightarrow N} \mathbf{v}_{\text{beam}} \end{array} \quad (26)$$

čia T^j žymi dalelės j sklaidos T-matricą. Įvedame visą dalelių sistemą aprašančius sklaidos koeficientų vektorius

$$\mathbf{V}_{\text{int}} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\text{int}}^{(1)} \\ \mathbf{v}_{\text{int}}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{\text{int}}^{(N)} \end{pmatrix} \quad \mathbf{V}_{\text{sca}} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(1)} \\ \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{\text{sca}}^{(N)} \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} T^1 T^{O,1} \mathbf{v}_{\text{beam}} \\ T^2 T^{O,2} \mathbf{v}_{\text{beam}} \\ \vdots \\ T^3 T^{O,3} \mathbf{v}_{\text{beam}} \end{pmatrix} \quad (27)$$

čia $\mathbf{V}_{\text{int}}, \mathbf{V}_{\text{sca}}$ yra sudaryti iš kiekvienos dalelės sferinių vektorinių bangų kompleksinių amplitudžių, kurios yra įvertintos SVB bazėje centruotoje apie kiekvienos dalelės centrą atitinkamai. Pasinaudodami notacija (27) galime lygčių sistemą (26) išreikšti matricinėje formoje

$$\mathbf{T} \mathbf{V}_{\text{sca}} = \mathbf{B} \quad (28)$$

čia matrica \mathbf{T} apibrėžiama taip

$$\mathbf{T}^{i,j} = \delta_{i,j}I + (\delta_{i,j} - 1)T^{(i)}T^{j \rightarrow i} \quad (29)$$

ši matrica yra sudaryta iš daug sklaidos bei poslinkio matricų pavienėms dalelėms (i, j - dalelių numeriai). Tuomet visų dalelių sklaidos vektorių SVB bazėje apskaičiavimui užtenka apskaičiuoti atvirkštinę matricą \mathbf{T}^{-1}

$$\mathbf{V}_{\text{sca}} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{B} \quad (30)$$

Daleles apšviečiančio EM lauko vektoriaus \mathbf{B} bei Matricos \mathbf{T} sudarymas ir atvirkštinės matricos apskaičiavimas sudaro daugelio dalelių EM sklaidos tiesioginio uždavinio išsprendimą.

3.4 Dalelių klasterio sklaidos parametrai

Šiame skyrelyje, remiantis [9], [29], [25] (p. 70) aprašoma nanodalelių klasterio sklaidos charakteristikų skaičiavimo metodika bei apibrėžimai. Pateikiamos sklaidos charakteristikų išraiškos per sferinių vektoriųjų bangų kompleksinius koeficientus.

3.4.1 Išsklaidyta, absorbuota, ekstinkcijos galia

Klasterio išsklaidytą galią gauname suintegravę išsklaidytos spinduliuotės Pointingo vektoriaus laiko vidurkį ant sferinio paviršiaus A gaubiančio klasterį [25] (69 p.)

$$W_{\text{abs}} = - \int_A \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \hat{\mathbf{r}} dA \quad (31)$$

Minuso ženklas prieš integralą pasirinktas, nes dažniausiai susiduriame su atveju, kai klasteris sugeria spinduliuotę, tuomet $W_{\text{abs}} > 0$. Jei terpė yra nesugerianti ir nestiprinanti, tuomet W_{abs} reiškia dalelės sugeriamą spinduliuotės galią.

Sugerties galia W_{abs} yra sudaryta iš trijų dedamųjų $W_{\text{abs}} = W_{\text{int}} - W_{\text{sca}} + W_{\text{ext}}$, kurie atitinkamai apibrėžti

$$W_{\text{inc}} = - \int_A \langle \mathbf{S}_{\text{inc}} \rangle \cdot \mathbf{r} dA, \quad W_{\text{sca}} = \int_A \langle \mathbf{S}_{\text{sca}} \rangle \cdot \mathbf{r} dA, \quad W_{\text{ext}} = - \int_A \langle \mathbf{S}_{\text{ext}} \rangle \cdot \mathbf{r} dA \quad (32)$$

čia W_{inc} - klasterį apšviečiančios spinduliuotės galia, sugerta W_{sca} - klasterio perspinduliuota galia; W_{ext} - klasterio ekstinkcijos galia. aplinkinės terpės ($W_{\text{inc}} = 0$, jei aplinkos terpė nesugerianti); Tuomet ekstinkcijos galia yra sugerties bei sklaidos galių suma:

$$W_{\text{ext}} = W_{\text{sca}} + W_{\text{abs}} \quad (33)$$

Paviršių A dėl patogumo pasirenkame be galo nutolusį nuo klasterio. Tai leidžia supaprastinti vektoriųjų sferinių bangų išraiškas, kad galėtume suintegruoti integralą pagal sferinius

kampus. Taip pat, laikome kad terpė, kurioje yra klasteris, nesugeria bei nestiprina spinduliuotės, tuomet W_{abs} nepriklauso nuo to kokių atstumu r buvo pasirinktas menamas paviršius A .

3.4.2 Klasterio sklaidos, ekstinkcijos, bei sugerties skerspjūviai

Sugertos, išsklaidytos bei ekstinkcijos galios santykiai su krentančios spinduliuotės galia turi ploto dimensiją ir yra vadinami atitinkamai sugerties, sklaidos bei ekstinkcijos skerspjūviais [25]

$$C_{abs} = \frac{W_{abs}}{|\langle \mathbf{S}_{inc} \rangle|}, \quad C_{sca} = \frac{W_{sca}}{|\langle \mathbf{S}_{inc} \rangle|}, \quad C_{ext} = \frac{W_{ext}}{|\langle \mathbf{S}_{inc} \rangle|}, \quad (34)$$

dėl lygties (33) gauname, kad ekstinkcijos skerspjūvis gali būti apskaičiuojamas kaip sugerties bei sklaidos skerspjūvių suma

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca} \quad (35)$$

Nepersiklojančių sferinių dalelių ansamblio sugerties bei ekstinkcijos skerspjūvis yra atskirų dalelių sklaidos skerspjūvių suma [9]

$$C_{abs} = \sum_{j=1}^N C_{abs}^j, \quad C_{ext} = \sum_{j=1}^N C_{ext}^j \quad (36)$$

čia N - sferinių dalelių skaičius.

3.4.3 Išraiškos per sklaidos koeficientus sferinių vektorinių bangų bazėje

Pasak [9], viso klasterio sklaidos skerspjūvis yra apskaičiuojamas iš SVB kompleksinių amplitudžių (aprašančių bendrą klasterio sklaidą) modulio kvadratų sumos

$$C_{sca} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{n(n+1)}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \left(|a_{mn}^T|^2 + |b_{mn}^T|^2 \right) \quad (37)$$

čia a_{mn}^T, b_{mn}^T viso klasterio sklaidos koeficientai, gaunami transformuojant ir sudedant kiekvienos sferos sklaidos koeficientus. Atliekama transliacijos transformacija į sferinių vektorinių bangų bazę, kurios koordinatų pradžios taškas yra pirmoji dalelė (taip pasirinkta siekiant sumažinti poslinkio koeficientų skaičiavimus)

$$\begin{aligned} a_{mn}^T &= a_{mn}^1 + \sum_{\substack{j \neq 1 \\ j \neq i}}^N \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=-l}^l \left[A_{m,n;k,l}^{(3 \rightarrow 3)}(\mathbf{t}^{(j \rightarrow 1)}) a_{kl}^j + B_{m,n;k,l}^{(3 \rightarrow 3)}(\mathbf{t}^{(j \rightarrow 1)}) b_{kl}^j \right] \\ b_{mn}^T &= b_{mn}^1 + \sum_{\substack{j \neq 1 \\ j \neq i}}^N \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=-l}^l \left[A_{m,n;k,l}^{(3 \rightarrow 3)}(\mathbf{t}^{(j \rightarrow 1)}) b_{kl}^j + B_{m,n;k,l}^{(3 \rightarrow 3)}(\mathbf{t}^{(j \rightarrow 1)}) a_{kl}^j \right] \end{aligned} \quad (38)$$

čia A, B yra SVB poslinkio koeficientai aprašyti skyrelyje 3.6, $(\mathbf{t}^{(j \rightarrow 1)})$ - vektorius nukreiptas iš dalelės j į dalelę nr. 1.

3.5 Plokščia banga sferinių vektorinių bangų bazėje

Šiame darbe dalelių sistemą sužadina tik plokščios elektromagnetinės bangos. Siekiant apskaičiuoti jų SVB skleidinio koeficientus, yra panaudojami sferinių vektorinių bangų ortogonalumo sąryšiai [23] p. 418 (eq 23.)

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{l,m,n} \cdot \mathbf{M}_{l',m',n'} \sin \theta d\theta d\varphi &= \delta_{l,l'|m,m'|n,n'} (1 + \delta_{m,0}) \frac{2\pi(n+1)n(n+m)!}{2n+1(n-m)!} [z_n(kr)]^2 \\
\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{N}_{l,m,n} \cdot \mathbf{N}_{l',m',n'} \sin \theta d\theta d\varphi &= \delta_{l,l'|m,m'|n,n'} (1 + \delta_{m,0}) \frac{2\pi(n+1)n(n+m)!}{(2n+1)^2(n-m)!} \times \\
&\times \left[(n+1)z_{n-1}^2(kr) + nz_{n+1}^2(kr) \right] \\
\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{l,m,n} \cdot \mathbf{N}_{l',m',n'} \sin \theta d\theta d\varphi &= 0
\end{aligned} \tag{39}$$

čia $l, l' \in \{e, o\}$ Pasak [23] p. 419 (lygtis 33.) x bei y kryptimi poliarizuota plokščia banga gali būti išreikšta sekančiomis lyginių bei nelyginių sferinių vektorinių bangų sumomis

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{x}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= \sum_{n=0}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[\mathbf{M}_{o,1,n}^{(1)} - i\mathbf{N}_{e,1,n}^{(1)} \right] \\
\hat{\mathbf{y}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= \sum_{n=0}^{\infty} -i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[\mathbf{M}_{e,1,n}^{(1)} + i\mathbf{N}_{o,1,n}^{(1)} \right]
\end{aligned} \tag{40}$$

šios išraiškos gautos $\mathbf{E} = \mathbf{x}$ elektrinio lauko išraišką sferinėje koordinačių sistemoje dauginant iš \mathbf{M}, \mathbf{N} funkcijų ir pasinaudojant jų ortogonalumu (39) Pasinaudodami sąryšiais (69) gauname plokščios bangos išraišką \mathbf{M}, \mathbf{N} funkcijomis

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{x}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= \sum_{n=0}^{\infty} p_n (\mathbf{M}_{1,n} - \mathbf{N}_{1,n}) + q_n (\mathbf{M}_{-1,n} + \mathbf{N}_{-1,n}) \\
\hat{\mathbf{y}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= i \sum_{n=0}^{\infty} p_n (\mathbf{M}_{1,n} + \mathbf{N}_{1,n}) - q_n (\mathbf{M}_{-1,n} - \mathbf{N}_{-1,n})
\end{aligned} \tag{41}$$

$$p_n = -\frac{i^{n+1}(2n+1)}{2n(n+1)}, \quad q_n = -\frac{i^{n+1}(2n+1)}{2} \tag{42}$$

Šie koeficientai bus naudojami tolesniuose skaičiavimuose, aprašant dalelių klasterį apšviečiančią plokščią bangą.

3.6 Vektorinių sferinių bangų poslinkio teoremos

Kaip jau minėta skyriuje apie daugelio sferinių dalelių sklaidą, kraštinės sąlygos dalelėms yra pritaikomos atlikus krentančios EM bangos sferinių vektorinių bangų bazės pakeitimą į bazę kurios koordinatinių centras sutampa su nagrinėjamos dalelės centru. Didžiausią algoritminių sudėtingumą daugelio dalelių sklaidos skaičiavime sudaro būtent poslinkio operatoriaus įvaizdžio matricos sferinėms vektorinėms bangoms apskaičiavimas. Šiame skyrelyje remiantis [31] aprašoma poslinkio matricos elementų apskaičiavimo metodika: vektorinių sferinių bangų poslinkio koeficientai yra apskaičiuojami juos išreiškiant per skaliarinius koeficientus.

3.6.1 Skaliarinių sferinių bangų poslinkio teorema

Tarkime, kad turime skaliarinį lauką $F(\mathbf{r})$, tenkinantį skaliarinę Helmholco lygtį, kurį aprašo ši sprendinių $\psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = z_l Y_{l,m}(\theta, \phi)$ eilutė

$$F(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l b_{l,m} \psi_{l,m}(\mathbf{r}) \quad (43)$$

transliacija laikysime funkcijos $F(\mathbf{r})$ perrašymą sprendiniais paslinktoje (vektoriumi \mathbf{t}) koordinatinių sistemoje

$$F(\mathbf{t} + \mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=-n}^n c_{n,p} \psi_{n,p}(\mathbf{r}) \quad (44)$$

siekiant išspręsti šį uždavinį mums reikia rasti sąryšį tarp koeficientų $b_{l,m}$ ir $c_{n,p}$. Spėjame, kad šis sąryšis yra tiesinis ir įvedame poslinkio koeficientus $a_{l,m;n,p}$

$$\psi_{l,m}(\mathbf{t} + \mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=-n}^n a_{l,m;n,p}(\mathbf{t}) \psi_{n,p}(\mathbf{r}) \quad (45)$$

įstatę (45) į (44) gauname sąryšį tarp skleidinio koeficientų paslinktoje $c_{n,p}$ ir pradinėje koordinatinių sistemoje $b_{l,m}$

$$c_{n,p} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{l,m;n,p}(\mathbf{t}) b_{l,m} \quad (46)$$

Išskiriame poslinkio teoremos atvejus krentančiai $\psi_{l,m}^{(1)} = j_l(kr)Y_{l,m}$ ir perspinduliuotai $\psi_{l,m}^{(3)} = h_l^{(1)}(kr)Y_{l,m}$ bangoms

$$\psi_{l,m}^{(j_1)}(\mathbf{t} + \mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=-n}^n a_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)}(\mathbf{t}) \psi_{n,p}^{(j_2)}(\mathbf{r}) \quad (47)$$

čia $j_1, j_2 = 1, 3$, todėl gaunami keturi transliacijos teoremos atvejai $1 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 1, 3 \rightarrow 3$.

Riboje $r \rightarrow \infty$ pasinaudojus sferinių Harmoninių funkcijų ortogonalumu yra gaunama ši

išraiška dėl poslinkio koeficientų [31]

$$a_{l,m;n,p}^{(3 \rightarrow 1)}(\mathbf{t}) = 4\pi \sum_{q=|l-n|}^{l+n} (-i)^{l-n-q} \psi_{q,m-p}^{(3)}(\mathbf{t}) \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \phi) Y_{n,p}^*(\theta, \phi) Y_{q,m-p}^*(\theta, \phi) \sin(\theta) d\theta d\phi \quad (48)$$

$$a_{l,m;n,p}^{(1 \rightarrow 1)}(\mathbf{t}) = 4\pi \sum_{q=|l-n|}^{l+n} (-i)^{l-n-q} \psi_{q,m-p}^{(1)}(\mathbf{t}) \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \phi) Y_{n,p}^*(\theta, \phi) Y_{q,m-p}^*(\theta, \phi) \sin(\theta) d\theta d\phi \quad (49)$$

tyrimo [31] autoriai, taip pat pademonstruoja šie poslinkio koeficientai yra lygūs

$$a_{l,m;n,p}^{(1 \rightarrow 1)}(\mathbf{t}) = a_{l,m;n,p}^{(3 \rightarrow 3)}(\mathbf{t}) \quad (50)$$

Trigubas sferinių harmoninių funkcijų integralas (49) apskaičiuojamas naudojantis Wignerio 3j koeficientais [32]

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \phi) Y_{n,p}^*(\theta, \phi) Y_{q,m-p}^*(\theta, \phi) \sin(\theta) d\theta d\phi = \frac{(-1)^m \sqrt{(2l+1)(2n+1)(2q+1)}}{2\sqrt{\pi}} \begin{pmatrix} l & n & q \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & n & q \\ m & -p & p-m \end{pmatrix} \quad (51)$$

čia $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ Wignerio 3j koeficientai.

3.6.2 Vektorinių sferinių bangų poslinkio teorema

Poslinkio teorema vektorinėms sferinėms bangoms yra suformuluojama [31] taip

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{l,m}^{(j_1)}(\mathbf{t} + \mathbf{r}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{p=-n}^n \left[A_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)}(\mathbf{t}) \mathbf{M}_{n,p}^{(j_2)}(\mathbf{r}) + B_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)}(\mathbf{t}) \mathbf{N}_{n,p}^{(j_2)}(\mathbf{r}) \right] \\ \mathbf{N}_{l,m}^{(j_1)}(\mathbf{t} + \mathbf{r}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{p=-n}^n \left[B_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)}(\mathbf{t}) \mathbf{M}_{n,p}^{(j_2)}(\mathbf{r}) + A_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)}(\mathbf{t}) \mathbf{N}_{n,p}^{(j_2)}(\mathbf{r}) \right] \end{aligned} \quad (52)$$

čia A , B , yra sferinių vektorinių bangų poslinkio koeficientai, \mathbf{t} - poslinkio vektorius, $j_1 = 1, 3$, $j_2 = 1, 3$ sprendinio tipas (žr. paaiškinimą po (8) lygtimi). Vektorinių sprendinių poslinkio koeficientus [31] išreiškia per skaliarinių sprendinių koeficientą $a_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)}$ apibrėžtą lygtyse (48),

(49)

$$\begin{aligned}
A_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)} &= a_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)} \\
&- \frac{1}{2}k(t_x + it_y) \left[\frac{1}{n+1} \sqrt{\frac{(n+p+1)(n+p+2)}{(2n+1)(2n+3)}} a_{l,m;n+1,p+1}^{(j_1 \rightarrow j_2)} - \frac{1}{n} \sqrt{\frac{(n-p-1)(n-p)}{(2n-1)(2n+1)}} a_{l,m;n-1,p+1} \right] \\
&+ \frac{1}{2}k(t_x - it_y) \left[\frac{1}{n+1} \sqrt{\frac{(n-p+1)(n-p+2)}{(2n+1)(2n+3)}} a_{l,m;n+1,p-1}^{(j_1 \rightarrow j_2)} - \frac{1}{n} \sqrt{\frac{(n+p-1)(n+p)}{(2n-1)(2n+1)}} a_{l,m;n-1,p-1}^{(j_1 \rightarrow j_2)} \right] \\
&+ kt_z \left[\frac{1}{n+1} \sqrt{\frac{(n+p+1)(n-p+1)}{(2n+1)(2n+3)}} a_{l,m;n+1,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)} + \frac{1}{n} \sqrt{\frac{(n+p)(n-p)}{(2n-1)(2n+1)}} a_{l,m;n-1,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)} \right]
\end{aligned} \tag{53}$$

$$\begin{aligned}
B_{l,m;n,p}^{(j_1 \rightarrow j_2)} &= \frac{i}{n(n+1)} \left[\frac{1}{2}k(t_x + it_y) \sqrt{(n-p)(n+p+1)} a_{l,m;n,p+1} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2}k(t_x - it_y) \sqrt{(n+p)(n-p+1)} a_{l,m;n,p-1} + kt_z p a_{l,m;n,p} \right]
\end{aligned} \tag{54}$$

būtent šios poslinkio koeficientų išraiškos (53), (54) yra naudojamos šiame darbe kuriamoje programoje.

4 Rezultatai ir jų aptarimas

Šiame skyriuje pademonstruojama, jog gradientinio pakilimo optimizacija pagal dalelių padėtis sėkmingai veikia nepaisant daugelio numanomų lokalių minimumų ir balnų optimizacijos parametrų erdvėje (dalelių padėtys). Tai yra svarbiausias darbo rezultatas, kuris leidžia rasti dalelių išsidėstymus pritaikytus norimam fizikiniui efektui pasiekti.

Vietoje sklaidos skerspjūvio tikslo funkcijos naudojama pavienių dalelių sklaidos kompleksinių amplitudžių modulio kvadratų suma, kadangi šios funkcijos turi panašią prasmę, tačiau antroji nereikalauja papildomos poslinkio transformacijos.

Nors pademonstruojamas tik dalelių išsklaidyto el. lauko koeficientų maksimizavimas, tačiau galimos daug praktiškesnės tikslo funkcijos, kaip kad: norimi spinduliuotės sklaidos kampai, pralaidumo spektras, tolumo arba lokalaus el. lauko sufokusavimas, dalelių klasterio sklaidos skerspjūvis ir kita. Tačiau jos reikalauja daugiau skaičiavimo resursų.

Pagal skyriuje 3 aprašytą daugelio dalelių EM sklaidos skaičiavimų metodiką buvo parašyta python programa naudojanti skyriuje 2 minėtą automatinio diferencijavimo programinį karkasą. Tai atliekant reikėjo atsižvelgti į Autograd keliamus apribojimus skaičiavimui (t.y. negalima skaičiavimo metu keisti pavienių masyvo elementų verčių priklausančių nuo diferencijuojamo parametro bei kita). Įgyvendinus tiesioginės sklaidos uždavinio sprendimą (dėka automatinio diferencijavimo karkaso) yra automatiškai apskaičiuojamas tikslo funkcijos gradientas.

Atvirkštinės sklaidos uždavinio sprendimas kylant gradiento kryptimi

Visuose toliau pateikiamuose pavyzdžiuose buvo atlikta analogiška optimizacijos procedūra

1. nurodomos pradinės dalelių padėtys $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_p}$ plokštumoje $Z = 0$,
2. apskaičiuojamos pavienių dalelių sklaidos matricos, poslinkio matricos,
3. naudojant šias matricas sudaroma visos dalelių sistemos \mathbf{T} matrica (30),
4. sudaromas daleles apšviečiantį el. lauką aprašantis vektorius \mathbf{B} ,
5. apskaičiavus atvirkštinę matricą \mathbf{T}^{-1} gaunamas visų sistemos dalelių sklaidos vektorius $\mathbf{V}_{sca} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{B}$.

primename, kad čia \mathbf{V}_{sca} kuri sudaro visų dalelių sklaidos koeficientų vektoriai

$$\mathbf{V}_{sca} = \left(\mathbf{v}_{sca}^{(1)}, \mathbf{v}_{sca}^{(2)}, \dots, \mathbf{v}_{sca}^{(N)} \right)^T \quad (55)$$

Optimizacijos tikslo funkcija šiame darbe priklauso tik nuo dalelių sklaidos koeficientų:

$$f = f(\mathbf{V}_{sca})$$

tuomet gradientinį pakilimą nusako lygtis

$$\Delta x_1, \Delta y_1, \Delta x_2, \Delta y_2, \dots, \Delta x_{N_p}, \Delta y_{N_p} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial y_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_{N_p}}, \frac{\partial}{\partial y_{N_p}} \right) f(\mathbf{V}_{sca}) \quad (56)$$

čia $\Delta x_j, \Delta y_j$ - dalelių padėties pokytis. Siekiant lengviau valdyti optimizacijos žingsnio dydį normuojame dalelių koordinačių pokyčius į vidutinį dalelių žingsnio dydį ir padauginame iš naujo žingsnio dydžio α

$$\begin{aligned} \Delta x_j &:= \alpha \Delta x_j / \langle |x_j| \rangle \\ \Delta y_j &:= \alpha \Delta y_j / \langle |y_j| \rangle \end{aligned} \quad (57)$$

čia α , gardiento žingsnio dydis, $\langle \cdot \rangle$ žymi vidurkinimą pagal daleles. Atliekant tiesioginės sklaidos skaičiavimą ir pasitelkus Autograd programinio paketo funkciją ‘grad’ yra automatiškai apskaičiuojamas tikslo funkcijos gradientas pagal dalelių padėtis (56).

Gradiento žingsnio dydžio pasirinkimas

Gradientinio žingsnio parinkimas yra labai reikšmingas siekiant kokybiškos optimizacijos, jis negali būti per didelis (persoks minimumą) ir per mažas (reikės labai daug žingsnių optimizacijai, rizika įstrigti į negilius minimumus). Tačiau šiuo atveju turime gerą orientyrą optimizacijai - dalelių radiusą. Pasirinktas gradiento žingsnio dydis: $r_1/6$ buvo fiksuotas toks pats kiekviename žingsnyje.

Alternatyviai buvo eksperimentuojama su kiekviename žingsnyje eksponentiškai kintančiu gradiento žingsniu ribose $[r/6, r/20]$, šio eksperimento rezultatai pateikiami skyrelyje 4.4.

Skaičiavimo optimizacijos

Siekiant skaičiavimo spartos, Wignerio 3j koeficientai naudojami transliacijos matricos elementams apskaičiuoti (žr. lygtis (51)) buvo iš anksto suskaičiuoti (iki $l = 30, n = 30, q = 30$) ir saugomi kietajame diske. Pavienių dalelių poslinkio matricių apskaičiavimas buvo vektorizuotas (naudojant python numpy paketą) pagal jų poslinkio vektorius. Tai ženkliai paspartino skaičiavimus, kuomet dalelių yra bent 5.

Naudoto SVB skleidinio dydis

Visose optimizacijose SVB skleidinio eilė buvo apribota iki $n_{max} = 3$. Iš to sekančios sklaidos vektoriaus paklaidos nėra įvertintos. Toks apribojimas pasirinktas dėl atminties ir skaičiavimo laiko apribojimų, kurie auga su dalelių skaičiumi. Tuomet daleles apšviečiantis el. laukas aprašomas $2n_{max}(2 + n_{max}) = 30$ koeficientų, taip pat ir atskirai kiekvienos dalelės sklaidos bei vidinio elektrinio lauko koeficientų vektoriai. Dalelių sistemos T-matrica (žr. lygtis

(29)) \mathbf{T} yra $2Nn_{max}(2+n_{max}) \times 2Nn_{max}(2+n_{max})$ dimensijos, pvz. 29 dalelių atveju 870×870 dimensijos kompleksinė matrica. Naudojamas duomenų tipas complex64 - 32 bitai skirti realiai ir menamai daliai atitinkamai aprašyti slankaus kablelio skaičiais.

Sprendžiama 870 narių lygčių sistema, tačiau kai grafikuose apskaičiuojamas vidinis dalelių el. laukas, tuomet sprendžiama antra 870 lygčių sistema. Ją sudaro lygtys kiekvienai dalelei j dėl vidinio el. lauko koeficientų $\mathbf{v}_{int}^{(j)}$, kurie išreiškiami per j dalelę krentančio el. lauko koeficientus $\mathbf{v}_{inc}^{(j)}$

$$\mathbf{v}_{int}^{(j)} = T_{int}^{(j)} \mathbf{v}_{inc}^{(j)} = T_{int}^{(j)} T_{sca}^{(j)-1} \mathbf{v}_{sca}^{(j)} \quad (58)$$

Dalelių parametrai

Pasirinktas dalelių skaičius: 29, dalelių diametras 0.08λ (žaliai šviesai tai būtų $500nm \cdot 0.08 = 40nm$), $N_{env} = 1$, $N_1 = 1.5$ aplinkos ir dalelių lūžio rodikliai atitinkamai.

Autograd paketo primityvių funkcijų praplėtimas

Sferinės harmoninių funkcijų, sferinių Beselio ir Noimano funkcijų bei Ležandro funkcijų išvestinės buvo įtrauktos į HIPS Autograd python paketą [22], tai atlikta įrašant visų išvardintų funkcijų išvestinių pagal tolydžius argumentus analitines išraiškas kaip Autograd paketo primityvias funkcijas.

4.1 Dalelių susidūrimų (dėl optimizacijos) sprendimas

Dalelių susidūrimas spręsti buvo iškelti du sprendimo variantai:

1. Gradiento projekcijos dalis į ašį jungiančią dalelių centrus yra prilyginama nuliui. Šioje situacijoje dalėlės sustoja susidūrusios, tačiau jos gali "slysti" viena kitos paviršiumi (ortogonaliomis kryptimis ašiai jungiančiai dalelių centrus).
2. Vykstant dalelių susidūrimui išvedamas dvejų dalelių pozicijų gradientų vidurkis ir abi žengia žingsnį šia kryptimi (tai tarsi vienodos masės dalelių susidūrimas). Tokiu būdu dalelė, kurios gradientas yra didesnis, gali pastumti dalelę, nuo kurios pozicijos tikslo funkcijos vertė priklauso mažiau reikšmingai.

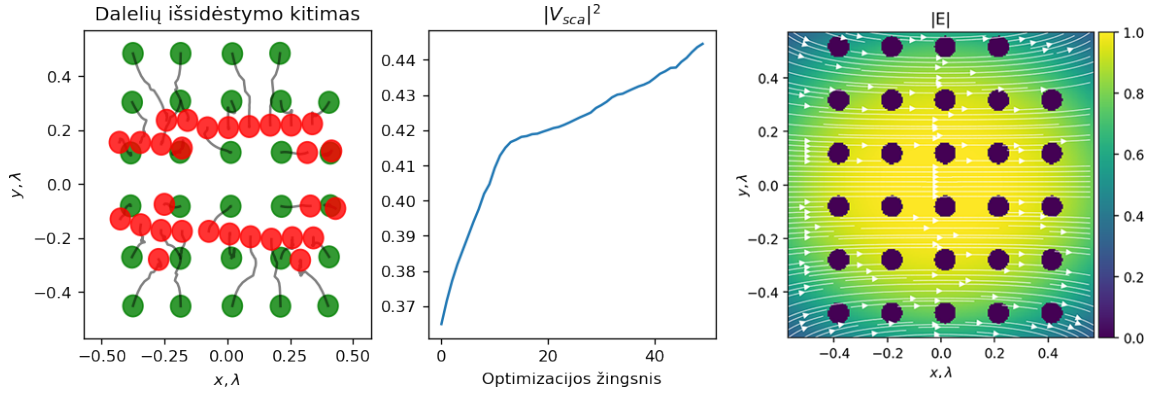
4.2 Tiesiškai poliarizuota plokščia banga apšviestų dalelių sklaidos maksimizavimas

Tikslo funkcija pasirinkta dalelių sklaidos vektoriaus modulio kvadratas SVB bazėje, kuomet apšviečianti spinduliuotė yra $\hat{\mathbf{x}}$ poliarizacijos

$$f(\boldsymbol{\rho}^{(1)}, \dots, \boldsymbol{\rho}^{(N)}) = |\mathbf{V}_{sca}|^2 = \sum_j^N \sum_{n=1}^{n_{max}} \sum_{m=-n}^n |a_{m,n}^{(j)}|^2 + |b_{m,n}^{(j)}|^2 \quad (59)$$

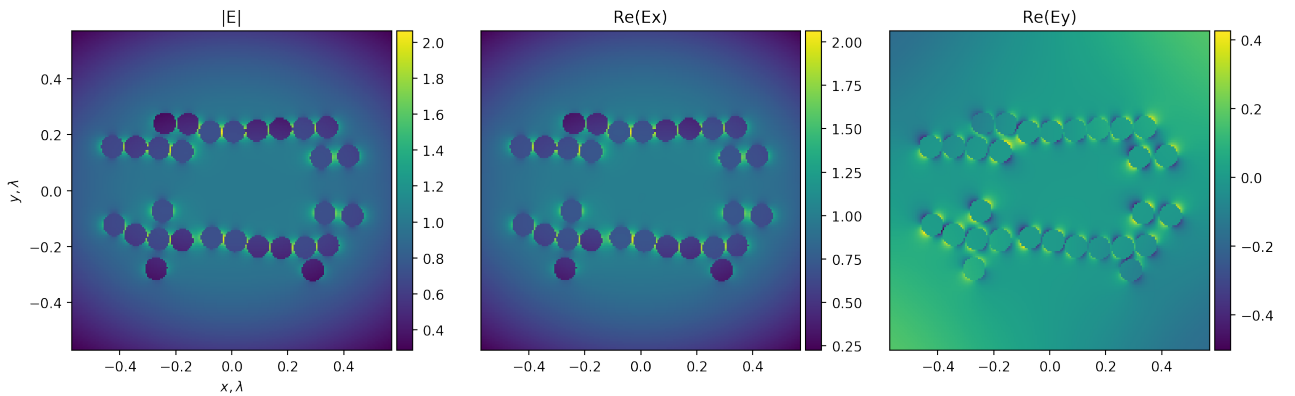
Tokia tikslo funkcija auga ir mažėja kartu su klasterio sklaidos skerspjūviu C_{sca} žr. (37), tačiau yra lengviau apskaičiuojama, nes nereikia skaičiuoti visų dalelių sklaidos vektorių transformavimo į SVB bazę centruotą apie bendrą tašką. Krentančio elektrinio lauko vektoriaus \mathbf{v}_{inc} koeficientai buvo apskaičiuoti pagal (42).

Optimizuojame dalelių radialines koordinatas $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ plokštumoje $z = 0$ Stebime dalelių



8 pav. Dalelių pozicijų optimizacijos trajektorija bei tikslo funkcijos vertės kitimas. Raudona spalva pažymėtos galutinės padėtys, žalia - pradinės. Dešinėje pateikiamas krentančio elektrinio lauko pasiskirstymas bei pradinis dalelių išsidėstymas (dešinėje sklaidos ir vidinis el. laukas, nėra įskaičiuoti).

išsidėstymą išilgai el. lauko jėgų linijų (pav. 8). Tikslo funkcijos kitimas nėra įsisotinęs, galima tolesnė optimizacija. Taip pat matome, kad dalelės juda link pluošto centro, kur elektrinio lauko modulio vertės didžiausios. Elektrinio lauko pasiskirstymo grafike (9 pav.) stebime lokalaus el.



9 pav. Galutinio dalelių išsidėstymo elektrinio lauko pasiskirstymas apšviečiant x-polarizuotai plokščios bangos aproksimacijai. Stebimas dalelių išsidėstymas išilgai elektrinio lauko polarizacijos krypties. Čia pateikiamas suminis elektrinis laukas $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{sca} + \mathbf{E}_{int} + \mathbf{E}_{inc}$.

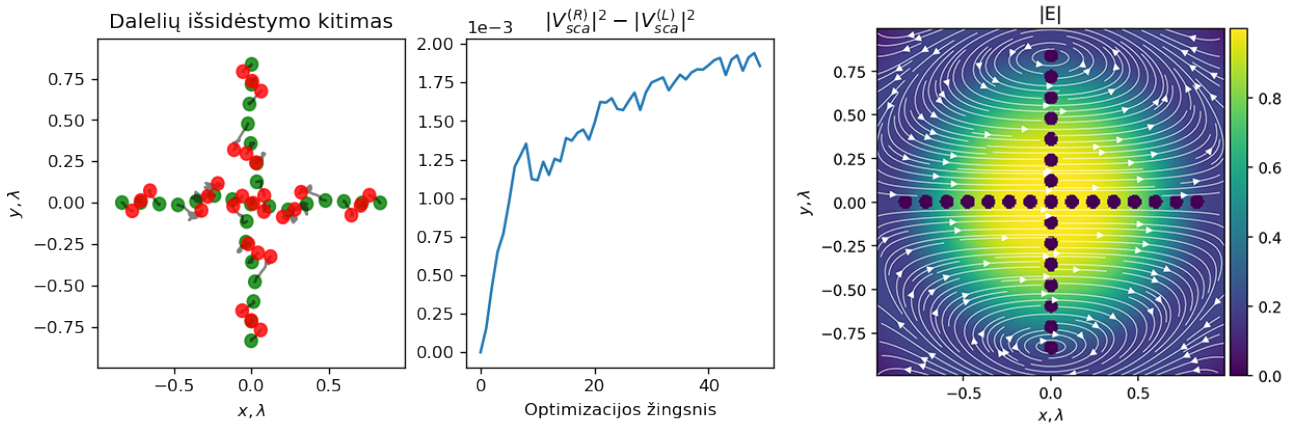
lauko sufokusavimas į intensyvumą didesnę 2 kartus už pradinį krentančio lauko intensyvumą.

4.3 Chiralinės sklaidos struktūros paieška

Šiame kontekste chiraline struktūra vadiname tą, kurios optinės savybės skiriasi priklausomai nuo to ar ją apšviečia kairinės ar dešinės polarizacijos pluoštas. Todėl tikslo funkcija sudarome taip: apskaičiuojamas dalelių sklaidos vektoriaus modulio kvadratų SVB bazėje skirtumas tarp atvejų, kai apšviečia kairinės ($\mathbf{E}_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}})$) ir dešinės apskritiminės poliarizacijos ($\mathbf{E}_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})$) plokščios bangos aproksimacija (nes plokščią bangą aprašome ribotu skaičiumi sferinių vektorinių bangų)

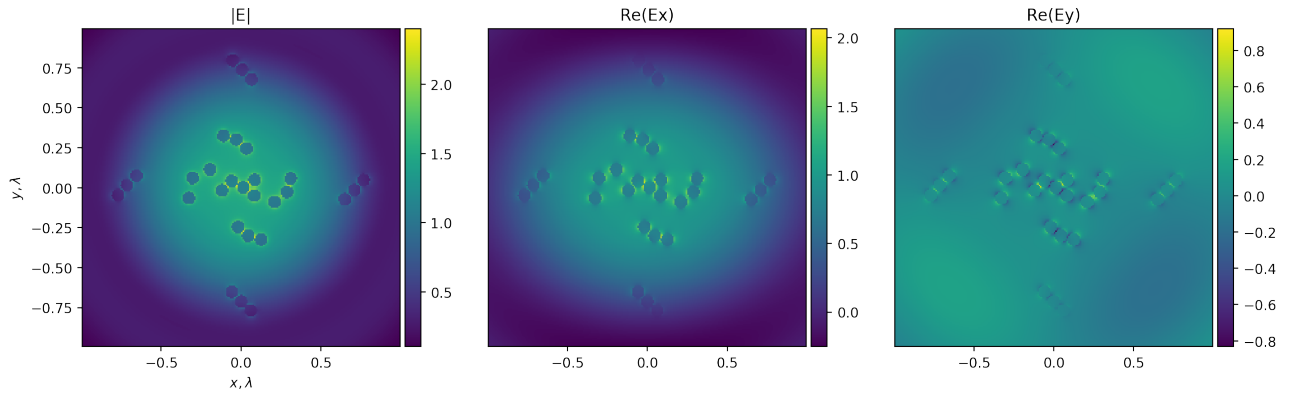
$$f(\boldsymbol{\rho}^{(1)}, \dots, \boldsymbol{\rho}^{(N)}) = |\mathbf{V}_{sca}^{(L)}|^2 - |\mathbf{V}_{sca}^{(R)}|^2 \quad (60)$$

optimizuojame dalelių radialines koordinates $\boldsymbol{\rho}_j = (x, y)$ plokštumoje $z = 0$



10 pav. Dalelių pozicijų optimizacijos trajektorija bei tikslo funkcijos vertės kitimas. Dešinėje pateikiamas krentančio elektrinio lauko pasiskirstymas bei pradinis dalelių išsidėstymas (dešinėje sklaidos ir vidinis el. laukas, nėra įskaičiuoti). Raudona spalva pažymėtos galutinės padėties, žalia - po vieno optimizacijos žingsnio.

Matome, kad besiformuojančios struktūros (žr. pav. 10) yra panašios į skyrelyje 1.3 aptartus chiralinius dalelių klasterius (žr. pav. 6). Apšviečiantis elektrinis laukas turėjo būti plokščia banga, tačiau dėl baigtinio sferinių vektorinių bangų skaičiaus (30 dedamųjų) yra gautama plokščios bangos aproksimacija.

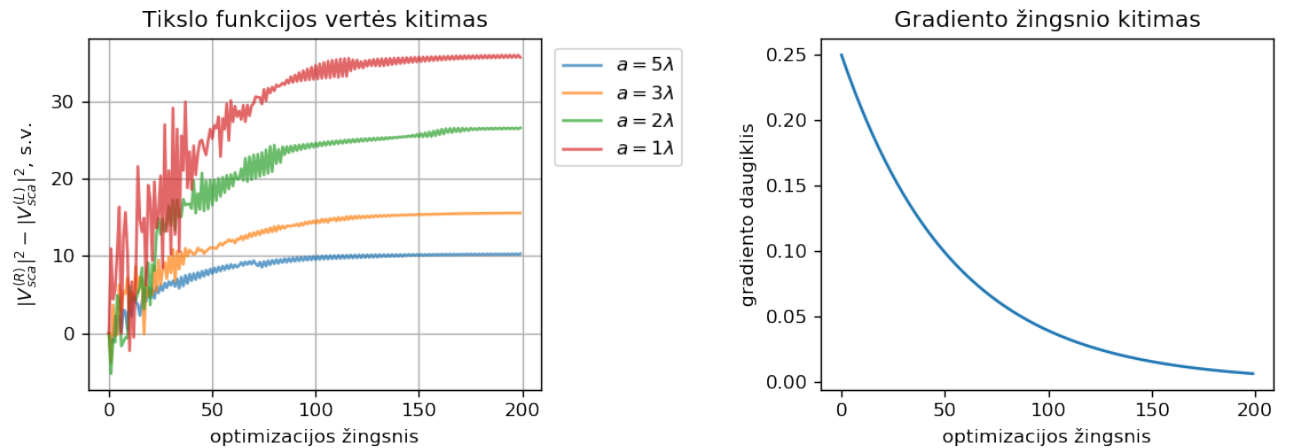


11 pav. Galutinio dalelių išsidėstymo elektrinio lauko pasiskirstymas. Čia pateikiamas suminis elektrinis laukas $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{sca} + \mathbf{E}_{int} + \mathbf{E}_{inc}$.

Pavyzdyje 11 taip pat matomas lokalaus elektrinio lauko sufokusavimas į 2 kartus didesnę vertę.

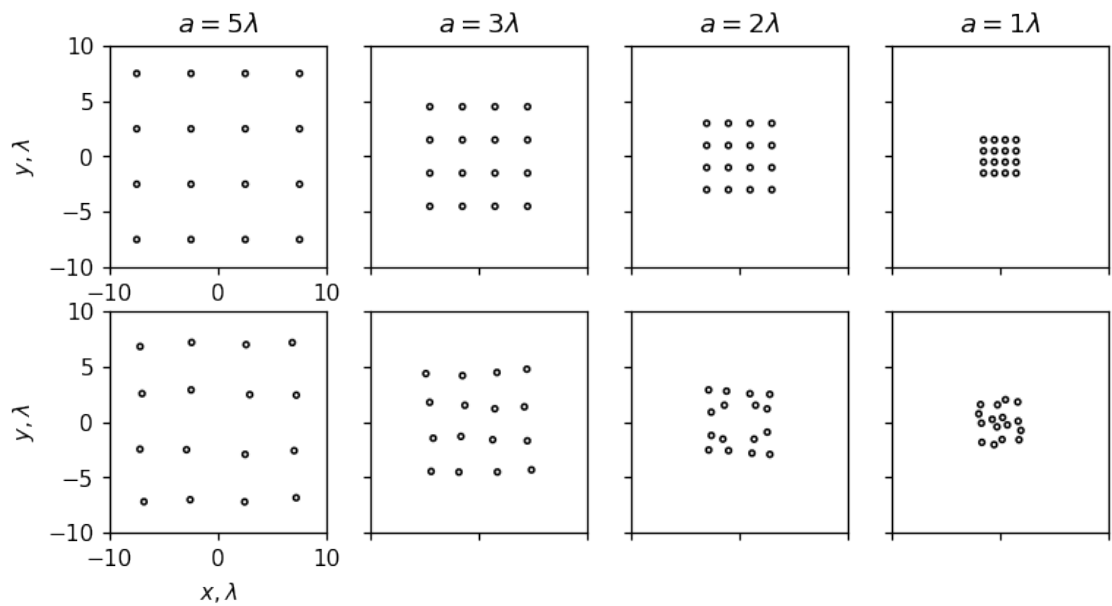
4.4 Skirtingas pradinis dalelių tankis, Ag nanodalelės

Šiame skyrelyje nagrinėjamos Ag nanodalelės, $\lambda/2$ diametro. Dalelių lūžio rodiklis $N_1 = 0.051585 + 3.9046i$ (lūžio rodiklio vertė paimta iš [33]) $\lambda = 587.6nm$. Naudojama 16 dalelių. Šiuo atveju begalinės plokščios bangos aproksimacija įgyvendinama užtikrinant, kad krentančio el. lauko koeficientai visada yra SVB bazėje centruotoje apie kiekvieną dalelę. Taip pat yra

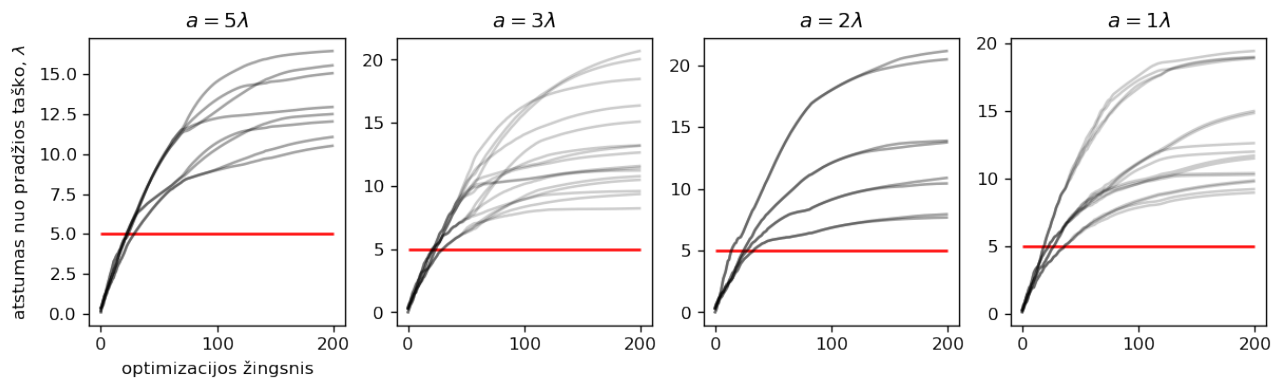


12 pav. Optimizacija su skirtingais pradiniais Ag nanodalelių tankiais. Kairėje pateikiamas tikslo funkcijos kitimas optimizacijos metu, kuomet parenkami skirtingi pradiniai atstumai tarp dalelių (stačiakampės gardelės konstanta a).

naudojamas kiekvienos dalelės padėties gradiento modulio vidurkio normavimas į kiekviena-me žingsnyje besikeičiančią normą kuri yra pateikiama pav. 12 dešinėje "Gradianto žingsnio kitimas".



13 pav. Pradinės ir galutinės Ag nanodalelių išsidėstymo padėtys. Kiekvieną pradinį išsidėstymą atitinka galutinis išsidėstymas pateikiamas iškart žemiau po pradinių padėčių grafiku. Skaičius a yra dalelių išsidėstymo stačiakampės gardelės konstanta.



14 pav. Kiekvienos dalelės nueitas kelias vykstant optimizacijai esant skirtingam pradiniam dalelių tankiui. Matome, kad visos dalelės nueina didesnę atstumą negu minimalus atstumas tarp dalelių mažiausio tankio atveju.

Pastebime, kad ties mažu dalelių tankiu optimizacija įstringa į lokalų minimumą, nes didesniame tankyje yra galimas optimalesnis išsidėstymas (žr. pav. 13 bei 12). Taip pat matome, kad visais pradinio dalelių tankio atvejais kiekvienos dalelės nueitas kelias yra didesnis negu 5λ , tai yra pakankamas atstumas dalelėms persikloti. Todėl žemo pradinio tankio atveju dalelės nesuartėja, o svyruoja apie savo pradines padėtis.

4.5 Darbo apribojimai

Pagrindiniai darbo apribojimai yra šie:

1. Žema sferinių vektorinių bangų skleidinio eilė $n_{max} = 3$. Taip nuspręsta vien dėl skaičiavimo greičio ir atminties apribojimų, buvo naudojamas vienas 4 branduolių procesorius ir 8GB operatyvinė atmintis.
2. Nebuvo tiesiogiai optimizuojamas dalelių sklaidos skerspjūvis. Pavienių dalelių sklaidos koeficiento modulio kvadrato maksimizavimas neatsižvelgia į tai, kad sudėjus visų dalelių išsklaidytą lauką galima interferencija tarp kiekvienos dalelės perspinduliuoto elektrinio lauko (kadangi sklaidos skerspjūvio skaičiavime dalelių sklaidos koeficientai transformuojami į bendrą bazę ir sudedami žr. lygtis (38) skyriuje 37).

Nepaisant šių apribojimų pagrindinis tikslas yra pasiektas: pademonstruota metastruktūrą sudarančių dalelių padėčių optimizacija siekiant fizikinio efekto - maksimalios individualių dalelių sklaidos.

5 Išvados

Darbo temai artimiausiuose tyrimuose optimizuojami dalelių posūkio kampai ir diametrai [34, 35] arba vien tik diametrai [18, 36]. Todėl autoriaus žiniomis iki šiol daugelio dalelių Mie sklaidos skaičiavimuose nebuvo gradiento nusileidimo metodu optimizuojamos dalelių padėtys ir tai yra naujas rezultatas.

Atsižvelgiant į rezultatus galime padaryti šias išvadas:

1. Kokybiškai vertinant gradientinio pakilimo metodas konverguoja į artimus optimaliems dalelių išsidėstymus nepaisant:
 - (a) sąlyginai didelio parametrų skaičiaus (daugiausia išbandyta: 58),
 - (b) tikslo funkcijos lokalių minimumų, kuriuos galėjo sukelti Beselio bei Noimano funkcijomis aprašomas el. lauko pasiskirstymas, poslinkio matrica bei T-matrica,
 - (c) dalelių nepersiklojimo apribojimo iškreipiančio gradiento žingsnio kryptį;
2. Mažo tankio pradiniai dalelių išsidėstymai įstringa į lokalius optimizacijos minimumus, todėl svarbu parinkti tinkamą pradinį dalelių tankį.

Padėka

Norėčiau padėkoti dr. Algiui Džiugiui už naudingus komentarus ir pastabas rengiant darbą, doc. dr. Juozui Bučinskui už gilius techninius darbo komentarus, dr. Sergejui Orlovui už įvadą į Mie sklaidos ir optikos tematiką, Vilniaus universiteto fizikos fakulteto personalui už įdomias studijas.

Literatūros sąrašas

- [1] B. Lee, I.-M. Lee, S. Kim, D.-H. Oh, L. Hesselink, Review on subwavelength confinement of light with plasmonics, *Journal of Modern Optics* **57**(16), 1479–1497 (2010).
- [2] R. S. Riley, E. S. Day, Gold nanoparticle-mediated photothermal therapy: applications and opportunities for multimodal cancer treatment, *Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology* **9**(4) (2017).
- [3] H. A. Atwater, A. Polman, Plasmonics for improved photovoltaic devices, *Nature materials* **9**(3), 205 (2010).
- [4] S. Yue, S. Liu, Y. Hou, Z. Zhang, Tailorable chiral optical response through coupling among plasmonic meta-atoms with distinct shapes, *Optics letters* **43**(5), 1111–1114 (2018).
- [5] A. Al-Jarro, C. G. Biris, N. C. Panoiu, Resonant mixing of optical orbital and spin angular momentum by using chiral silicon nanosphere clusters, *Optics express* **24**(7), 6945–6958 (2016).
- [6] N. Yu, F. Capasso, Flat optics with designer metasurfaces, *Nature materials* **13**(2), 139 (2014).
- [7] A. K. Iyer, A. Alù, A. Epstein, Metamaterials and metasurfaces—historical context, recent advances, and future directions, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **68**(3), 1223–1231 (2020).
- [8] R. W. Ziolkowski, Metamaterials: The early years in the usa, *EPJ Applied Metamaterials* (2014).
- [9] D. W. Mackowski, Analysis of radiative scattering for multiple sphere configurations, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences* **433**(1889), 599–614 (1991).
- [10] L. P. Diederik S. Wiersma, Disorder–Density Interplay for Optimal Multiple Scattering, library Catalog: www.osa-opn.org.
- [11] L. Pattelli, A. Egel, U. Lemmer, D. S. Wiersma, Role of packing density and spatial correlations in strongly scattering 3d systems, *Optica* **5**(9), 1037–1045 (2018).
- [12] A. Egel, L. Pattelli, G. Mazzamuto, D. S. Wiersma, U. Lemmer, CELES: CUDA-accelerated simulation of electromagnetic scattering by large ensembles of spheres, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **199**, 103–110, arXiv: 1706.02145 (2017).

- [13] A. S. Backer, Computational inverse design for cascaded systems of metasurface optics, *Optics express* **27**(21), 30308–30331 (2019).
- [14] Y. LeCun, L. Bottou, Y. Bengio, P. Haffner, Gradient-based learning applied to document recognition, *Proceedings of the IEEE* **86**(11), 2278–2324 (1998).
- [15] J. Engelberg, U. Levy, The advantages of metalenses over diffractive lenses, *Nature Communications* **11**(1), 1–4 (2020).
- [16] R. Paniagua-Dominguez, Y. F. Yu, E. Khaidarov, S. Choi, V. Leong, R. M. Bakker, X. Liang, Y. H. Fu, V. Valuckas, L. A. Krivitsky, et al., A metalens with a near-unity numerical aperture, *Nano letters* **18**(3), 2124–2132 (2018).
- [17] S. Banerji, M. Meem, A. Majumder, F. G. Vasquez, B. Sensale-Rodriguez, R. Menon, Imaging with flat optics: metalenses or diffractive lenses?, *Optica* **6**(6), 805–810 (2019).
- [18] A. Zhan, R. Gibson, J. Whitehead, E. Smith, J. R. Hendrickson, A. Majumdar, Controlling three-dimensional optical fields via inverse mie scattering, *Science advances* **5**(10), eaax4769 (2019).
- [19] Y. Tang, A. E. Cohen, Enhanced enantioselectivity in excitation of chiral molecules by superchiral light, *Science* **332**(6027), 333–336 (2011).
- [20] A. Paszke, S. Gross, F. Massa, A. Lerer, J. Bradbury, G. Chanan, T. Killeen, Z. Lin, N. Gimeshin, L. Antiga, A. Desmaison, A. Kopf, E. Yang, Z. DeVito, M. Raison, A. Tejani, S. Chilamkurthy, B. Steiner, L. Fang, J. Bai, S. Chintala, Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library, in H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d'Alché-Buc, E. Fox, R. Garnett (eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems 32* (Curran Associates, Inc., 2019), 8024–8035.
- [21] M. Abadi, A. Agarwal, P. Barham, E. Brevdo, Z. Chen, C. Citro, G. S. Corrado, A. Davis, J. Dean, M. Devin, S. Ghemawat, I. Goodfellow, A. Harp, G. Irving, M. Isard, Y. Jia, R. Jozefowicz, L. Kaiser, M. Kudlur, J. Levenberg, D. Mané, R. Monga, S. Moore, D. Murray, C. Olah, M. Schuster, J. Shlens, B. Steiner, I. Sutskever, K. Talwar, P. Tucker, V. Vanhoucke, V. Vasudevan, F. Viégas, O. Vinyals, P. Warden, M. Wattenberg, M. Wicke, Y. Yu, X. Zheng, TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems, software available from tensorflow.org (2015).
- [22] D. Maclaurin, D. Duvenaud, M. Johnson, R. P. Adams, Autograd: Reverse-mode differentiation of native python, 2015, URL <http://github.com/HIPS/autograd> (2015).
- [23] J. Stratton, I. Antennas, P. Society, *Electromagnetic Theory*, An IEEE Press classic reissue (Wiley, 2007).

- [24] S. Stein, Addition theorems for spherical wave functions, *Quarterly of Applied Mathematics* **19**(1), 15–24 (1961).
- [25] C. F. Bohren, D. R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles* (John Wiley & Sons, 2008).
- [26] L. Tsang, J. A. Kong, K.-H. Ding, *Scattering of electromagnetic waves.[Vol. 1], Theories and applications* (Wiley, 2000).
- [27] P. M. Morse, H. Feshbach, *Methods of theoretical physics* (1953).
- [28] B. Peterson, S. Ström, T matrix for electromagnetic scattering from an arbitrary number of scatterers and representations of e (3), *Physical review D* **8**(10), 3661 (1973).
- [29] M. I. Mishchenko, L. D. Travis, A. A. Lacis, *Scattering, absorption, and emission of light by small particles* (Cambridge university press, 2002).
- [30] L. Tsang, J. A. Kong, K.-H. Ding, *Scattering of Electromagnetic Waves, Theories and Applications*, volume 27 (John Wiley & Sons, 2004).
- [31] T. J. Dufva, J. Sarvas, J. C.-E. Sten, Unified derivation of the translational addition theorems for the spherical scalar and vector wave functions, *Progress In Electromagnetics Research* **4**, 79–99 (2008).
- [32] E. W. Weisstein, Wigner 3j-Symbol, library Catalog: mathworld.wolfram.com Publisher: Wolfram Research, Inc.
- [33] P. B. Johnson, R. W. Christy, Optical constants of the noble metals, *Phys. Rev. B* **6**, 4370–4379 (1972).
- [34] B. Blankrot, C. Heitzinger, Particlescattering: Solving and optimizing multiple-scattering problems in Julia, *Journal of Open Source Software* **3**(25), 691 (2018).
- [35] B. Blankrot, C. Heitzinger, Efficient computational design and optimization of dielectric metamaterial structures, *IEEE Journal on Multiscale and Multiphysics Computational Techniques* **4**, 234–244 (2019).
- [36] B. Blankrot, C. Heitzinger, Design of aperiodic demultiplexers and optical diodes by optimizing photonic crystals, *OSA Continuum* **2**(7), 2244–2252 (2019).

GRADIENT BASED SEARCH OF DISCRETE OPTICAL FUNCTIONAL
METASTRUCTURES

Summary

Optimization of metastructures for specific scattering functionality (e.g. optical elements, local field manipulation, etc.) is an important scientific and technological problem.

In this work we develop generalized multi-particle Mie scattering program that is implemented in python using automatic differentiation framework Autograd [22]. This enables us to compute gradients of any final quantities (intensity distribution difference to a desired distribution, scattered field parameters, etc.) in a way that is easily adaptive to changes of the computation procedure and goal functions.

We believe that such implementation will serve as a useful tool for search of optimal spherical nano-particle distributions. To best of our knowledge particle positions (in the field of multi-particle Mie scattering) have not been optimized previously using gradient based methods. Therefore the position optimization may be a new result. There have been gradient based optimizations of particle radii and non-spherical particle orientations [18, 34–36].

The main results of this project are the following:

1. Successful implementation of multiple particle Mie scattering using automatic differentiation framework Autograd [22].
2. The convergence of particle positions into functional metastructures is demonstrated in two cases:
 - (a) The arrangement of spherical particles into a linear structure that is parallel to linear polarization vector of a plane wave was demonstrated when optimizing for maximum scattering coefficients absolute squared values at each individual particle.
 - (b) The arrangement of spherical particles into a chiral spiral structure when illuminated by circular polarization plane wave was demonstrated. At this instance the optimization goal function was a difference of scattering coefficients absolute squared values between right and left handed circular polarization.
3. It was observed that at low initial particle densities the optimization get stuck in a local minima.

Priedas Nr. 1.

Trumpiniai

1. EM - Elektromagnetinis
2. SVB - Sferinės vektorinės bangos

Priedas Nr. 2.

Specialiosios funkcijos

Šiame skyrelyje pateikiami naudotų funkcijų apibrėžimai. Juos lengva rasti internete, tačiau dėl esamų alternatyvių apibrėžimų, pridedami apibrėžimai naudoti šiame darbe.

Ležandro funkcija

$$P_n^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^n n!} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n, \quad |m| \leq n \quad (61)$$

sferinė pirmo tipo Beselio funkcija

$$j_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+1/2}(z) \quad (62)$$

antro tipo sferinė Beselio funkcija

$$y_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} Y_{n+1/2}(z) \quad (63)$$

pirmo tipo Hankelio sferinė funkcija

$$h_n^{(1)}(z) = j_n(z) + iy_n(z) \quad (64)$$

Lyginės ir nelyginės sferinės vektorinės funkcijos

Lyginės bei nelyginės sferinės bangos funkcijos naudojamos [23, 25], apibrėžiamos taip

$$\begin{aligned} \psi_{e,m,n} &= z_n(kR) P_n^m(\cos \theta) \cos(m\phi), \\ \psi_{o,m,n} &= z_n(kR) P_n^m(\cos \theta) \sin(m\phi) \end{aligned} \quad (65)$$

tuomet atitinkamos vektorinės bangos yra

$$\mathbf{M}_{l,m,n} = (\nabla \psi_{l,m,n}) \times \mathbf{r} \quad \mathbf{N}_{l,m,n} = \frac{1}{k} \nabla \times \mathbf{M}_{l,m,n} \quad (66)$$

Lyginių bei nelyginių funkcijų sąryšis

Pasinaudodami Ležandro funkcijų savybe

$$P_\ell^{-m} = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m \quad (67)$$

(ši savybė galioja ir Ležandro funkcijoms apibrėžtomis su $(-1)^m$ daugikliu (Condon–Shortley fazė)) galime susieti lyginius ψ_e bei nelyginius ψ_o skaliarinės Helmholco lygties sprendinius su kompleksiniais sprendiniais ψ (atveju, kuomet $m=1$)

$$\psi_{e,1,n} = \frac{1}{2} \left(\psi_{1,n} - \frac{(n+1)!}{(n-1)!} \psi_{-1,n} \right) \quad \psi_{o,1,n} = \frac{1}{2i} \left(\psi_{1,n} + \frac{(n+1)!}{(n-1)!} \psi_{-1,n} \right) \quad (68)$$

įstatę (68) išraiškas atitinkamai į vektorinių Helmholco lygčių sprendinių apibrėžimus (66) ir (??) gauname sąryšį tarp lyginių ir nelyginių banginių sferinių vektorinių bangų

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{e,1,n} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{1,n} - n(n+1) \mathbf{M}_{-1,n} \\ \mathbf{N}_{1,n} \end{pmatrix} & \mathbf{M}_{o,1,n} &= \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{1,n} + n(n+1) \mathbf{M}_{-1,n} \\ \mathbf{N}_{1,n} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (69)$$

čia supaprastinome faktorialų santykį $\frac{(n+1)!}{(n-1)!} = n(1+n)$.

Priedas Nr. 3.

Specialiųjų funkcijų išvestinių programos kodas Autograd programiniui karkasui

Šie vektoriaus ir Jakobiano sandaugos funkcijų apibrėžimai buvo įrašyti į Autograd programinio paketo `autograd.scipy.special` modulį. Tai įgalina diferencijuoti sferines Beselio funkcijas, Ležandro funkciją, sferines harmonines funkcijas.

```
legendre = primitive(scipy.special.lpmv)

def vjp_legendre(ans, m, n, x):
    def vjp(g):
        return g * ((n+1-m)*legendre(m,n+1,x) - (n+1)*x*ans) / (x*x - 1)

    return vjp
# Perduodame None argument nediferencijuojamiems diskretiems parametrms
defvjp(legendre, None, None, vjp_legendre)

@primitive
def sph_harm(m, n, ph, th):
    return scipy.special.sph_harm(m, n, ph, th)

def vjp_sph_harm_d_th(ans, m, n, ph, th):
    def vjp(g):
        a = m * 1/np.tan(th)*ans

        if abs(m+1) <= n:
            b = np.exp(-1j*ph) * np.sqrt((n+1)*n - (m+1)*m) \
                * sph_harm(m+1, n, ph, th)
        else:
            b = 0

        return g * (a + b)
    return vjp

def vjp_sph_harm_d_ph(ans, m, n, ph, th):
    def vjp(g):
        return g * (1.0j * m * ans)
    return vjp
```



```
defvjp(sph_harm, None, None, vjp_sph_harm_d_ph, vjp_sph_harm_d_th)
```

```
## ----- Bessel jn -----
```

```
spherical_jn = primitive(scipy.special.spherical_jn)
```

```
def vjp_spherical_jn_dz(ans, n, z):  
    def vjp(g):  
        return g*spherical_jn(n, z, derivative=True)  
    return vjp
```

```
defvjp(spherical_jn, None, vjp_spherical_jn_dz)
```

```
## ----- Bessel yn -----
```

```
spherical_yn = primitive(scipy.special.spherical_yn)
```

```
def vjp_spherical_yn_dz(ans, n, z):  
    def vjp(g):  
        return g*spherical_yn(n, z, derivative=True)  
    return vjp
```

```
defvjp(spherical_yn, None, vjp_spherical_yn_dz)
```