MSTM改造版の使い方

2024/10/09 茂木信宏

MSTM v4.0のD.W. Mackowskiによるオリジナルコードはこちら

https://github.com/dmckwski/MSTM

改造の目的：散乱振幅行列の４つ要素（複素数値）を出力できるようにすること。

改造前のソースコード名：mstm-v4.0.f90

改造後のソースコード名：mstm-v4.0-ampmat\_fb.f90

### 実行環境の準備

MSTMの実行にはOSとしてLinux を用いる必要がある。OSがWindows 11の場合、Windowsの中でLinuxを実行できるWindows Subsystem for Linux (WSL)という機能を使います。Linuxのディストリビューションの一つであるUbuntuをインストールしてください。 WSLにUbuntuをインストールする方法はweb検索すればわかります。

以下の説明では、Ubuntuはインストール済みであるとし、行頭の”>”マークはUbuntuのターミナルのプロンプトを表すものとします。

並列計算用のFortranコンパイラmpichを、下記コマンドでインストールしてください。

>sudo apt install mpich

### ソースコードのコンパイル

下記コマンドで、MSTMのソースコード群をコンパイルしてください。

>mpif90 -o mstm-ampmat\_fb-mpi mstm-intrinsics.f90 mpidefs-parallel.f90 mstm-v4.0-ampmat\_fb.f90

### 計算条件と入力パラメータの指定

計算条件と入力パラメータは、テキストファイルmstm-v4.0.inpに記述します。

記述法はMackowskiによるMSTMのマニュアルに従ってください。

mstm-v4.0.inp のパラメータ指定における留意事項および、BH83とMishchenko2002の scattering amplitude matrixの関係について、茂木ノート”scattering theory 2, 2023/1/21”にまとめてあります（別添の写真画像）。

### 計算の実行

実行方法（例として４つのCPUコアで並列計算する場合）:

>mpiexec -n 4 ./mstm-ampmat\_fb-mpi mstm-v4.0.inp

凝集体のサイズが小さい場合(N < ~100)、マルチコア実行のご利益はあまりなく、

シングルコア実行で十分だと思います。

### 出力ファイル

MSTM実行の結果は、以下の例のようなフォーマットで、指定した出力ファイルに書き出されます。

各パラメータの意味についてMSTMのマニュアルや、茂木ノート”scattering theory 2, 2023/1/21”を見てください。

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

mstm calculation results

date, time:

20240915 170619.650

input file:

mstm-v4.0.inp

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

input variables for run 1

sphere data input file:

temp\_pos.dat

number spheres

1

length, ref index scale factors

7.5340000E+00 1.0000000E+00 0.0000000E+00

volume cluster radius, area mean sphere radius, circumscribing radius, cross section radius

1.5067994E+00 1.5068000E+00 1.5068000E+00 1.5067994E+00

sphere properties and associations

sphere host layer radius x y z ref indx

1 0 0 1.507 0.000 0.000 0.000 1.5800E+00 0.0000E+00

incident plane wave

incident alpha, beta(deg)

0.0000E+00 0.0000E+00

t matrix order:

3

layer 0 refractive index

1.0000E+00 0.0000E+00

number of plane boundaries

0

max\_iterations,solution\_epsilon, mie\_epsilon

10000 1.0000E-06 1.0000E-06

maximum Mie order, number of equations:

3 30

mean sphere Mie extinction, absorption efficiencies

1.0525E+00 -4.4409E-16

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

calculation results for run

1

number iterations, error, solution time

0 0.0000E+00 3.9405E-04

sphere extinction, absorption, volume absorption efficiencies (unpolarized incidence)

sphere Qext Qabs Qvabs

1 1.0525E+00 7.3969E-17 7.3969E-17

total extinction, absorption, scattering efficiencies (unpol, par, perp incidence)

1.0525E+00 7.3969E-17 1.0525E+00 1.0525E+00 7.3969E-17 1.0525E+00 1.0525E+00 7.3969E-17 1.0525E+00

scattering matrix in incident plane: 0 deg = incident direction

forward scattering amplitude matrix (BH83,Eq3.12)

( 0.5974E+00, -0.1401E+01) ( 0.5974E+00, -0.1401E+01) ( -0.3795E-17, 0.5463E-19) ( 0.1789E-16, -0.2841E-16)

backward scattering amplitude matrix (BH83,Eq3.12)

( 0.2559E+00, -0.6724E-01) ( -0.2559E+00, 0.6724E-01) ( 0.3795E-17, -0.3226E-18) ( 0.7264E-17, 0.1377E-16)

最下4行が複素散乱振幅scattering amplitude matrixについての出力です。Forward（散乱角0°）, backward（散乱角180°）それぞれの出力行において左からS1,S2, S3,S4です。各Sは複素数であり（実部, 虚部）というフォーマットで出力されています。これらのS1,S2,S3,S4の定義は BH83 Eq. 3.12に従っています。

これは以下の関係式によりMishchenko et al. 2002 Eq 2.30-34の 定義のS11,S12,S21,S22に変換できます。

S11 = S2/(-jk),

S12 = S3/(jk),

S21 = S4/(jk),

S22 = S1/(-jk).

ここでkは媒質中におけるwavenumber(=真空中のwavenumber × 媒質の屈折率), jは虚数。詳しくは茂木ノート”scattering theory 2, 2023/1/21”を見てください。

球形粒子について、改造後のMSTMのS1(0),S1(180), S2(0),S2(180)の出力結果が、Mieコードの出力と一致することは確認済みです。

BH83, Mishchenko2002はそれぞれ以下の本のことです。

* Bohren and Huffman 1983, Absorption and Scattering of Light by Small Particles
* Mishchenko, Travis, and Lacis 2002, Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles, 3rd electronic release.