

Monika Kubek

Implementacja funkcji Greena dla sfery

3 października 2017

Implementacja funkcji Greena dla sfery na podstawie publikacji „Green’s function formalism for phononic crystals“ R. Sainidou, N. Stefanou, A. Modinos (Phys. Rev. B 69, 064301). Oznaczenia zostały zachowane według oryginału.

Konwencja

Używane są układy współrzędnych kartezjańskich (x, y, z) i sferycznych (r, θ, ϕ) .

Kartezjański układ współrzędnych (x, y, z) - jego relacja z układem sferycznym jest następująca

$$x = r \cos \theta \sin \phi \quad (1)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (2)$$

$$z = r \cos \phi \quad (3)$$

Sferyczny układ współrzędnych (r, θ, ϕ) - jego relacja z układem kartezjańskim jest następująca

$$\text{radialna} \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (4)$$

$$\text{azymutalna} \quad \theta = \text{tg}^{-1} \left(\frac{y}{x} \right) \quad (5)$$

$$\text{polarna} \quad \phi = \cos^{-1} \left(\frac{z}{r} \right), \quad (6)$$

gdzie $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, 2\pi)$, $\phi \in [0, \pi]$. Jednostkowe wektory we współrzędnych sferycznych można zdefiniować w układzie kartezjańskim następująco

$$\text{radialny} \quad \hat{\mathbf{r}} = [\cos \theta \sin \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \phi] \quad (7)$$

$$\text{azymutalny} \quad \hat{\boldsymbol{\theta}} = [-\sin \theta, \cos \theta, 0] \quad (8)$$

$$\text{polarny} \quad \hat{\boldsymbol{\phi}} = [\cos \theta \cos \phi, \sin \theta \cos \phi, -\sin \phi]. \quad (9)$$

Gradient we współrzędnych sferycznych wynosi

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{r \sin \phi} \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (10)$$

Źródło

Weisstein, Eric W. "Spherical Coordinates." From MathWorld--A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/SphericalCoordinates.html>

Implementacja

Rozważamy pojedynczą, jednorodną sferę o promieniu S i gęstości ρ_S umieszczoną w centrum układu współrzędnych. Jest ona zanurzona w jednorodnym ośrodku o gęstości ρ .

Zastosowano układ współrzędnych sferycznych oraz następujące oznaczenia:

- \mathbf{r} - wektor położenia w przestrzeni,
- \mathbf{q} - wektor falowy, $q = \omega/c_\nu$,
- ω - częstość kołowa fali,
- c_ν - prędkość fali w ośrodku, gdzie $\nu = l, t$ kolejno dla fali podłużnej i poprzecznej,
- indeks $L = Plm$ jest zbiorem trzech indeksów, gdzie:
 - $P = L, M, N$, gdzie L to fala podłużna, M i N to fale poprzeczne kolejno o polaryzacji p i s ,
 - l - liczba naturalna,
 - m - liczba naturalna mniejsza lub równa l ,
- Θ - jest funkcją skokową Heaviside'a,
- indeksy $i, i' = 1, 2, 3$ to składowe wektora.

Sferyczne funkcje własne odpowiadające wartości własnej $c_\nu q$ oznaczamy \mathbf{u}_{Lq} . Zbiór podłużnych, sferycznych funkcji własnych odpowiadających wartości własnej $c_l q$ dany jest jako

$$\sqrt{\rho V} \mathbf{u}_{Llmq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q} \nabla [f_l(qr) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})], \quad (11)$$

a zbiór poprzecznych, sferycznych funkcji własnych odpowiadających wartości własnej $c_t q$ dany jest wzorami

$$\sqrt{\rho V} \mathbf{u}_{Mlmq}(\mathbf{r}) = f_l(qr) \mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (12)$$

$$\sqrt{\rho V} \mathbf{u}_{Nlmq}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q} \nabla \times [f_l(qr) \mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})]. \quad (13)$$

W powyższych wzorach:

- Y_l^m - to harmoniki sferyczne,
- \mathbf{X}_{lm} - to wektorowe harmoniki sferyczne,
- f_l - w zależności od rodzaju fali jest to sferyczna funkcja Bessel'a j_l (dla fali padającej, funkcja własna oznaczona jest wtedy jako $\mathbf{J}_L(\mathbf{r})$) lub sferyczna funkcja Hankel'a h_l^+ (dla fali rozproszonej, funkcja własna oznaczona jest wtedy jako $\mathbf{H}_L(\mathbf{r})$).

Wektorowe harmoniki sferyczne (VSH3) $\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ są zdefiniowane w następujący sposób

$$\sqrt{l(l+1)} \mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = -i\mathbf{r} \times \nabla Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}), \quad (14)$$

a dokładne wyrażenia podają wzory (39-40) w pracy źródłowej. Składowe $\hat{\mathbf{e}}_2$ i $\hat{\mathbf{e}}_3$ to wektory jednostkowe kolejno polarny i azymutalny, które są prostopadłe do wektora $\mathbf{r} = (r, 0, 0)$.

VSH3 spełniają poniższą własność

$$\mathbf{X}_{l-m} = (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{lm}^*, \quad (15)$$

oraz dla pola multipolowego

$$i\nabla \cdot (f(r) \mathbf{X}_{lm}) = 0, \quad (16)$$

$$i\sqrt{l(l+1)} \nabla \times (f(r) \mathbf{X}_{lm}) = -\frac{l(l+1)}{r} f \mathbf{Y}_{lm} - \left(\frac{df}{dr} + \frac{1}{r} f \right) \boldsymbol{\Psi}_{lm}, \quad (17)$$

gdzie:

- $\mathbf{Y}_{lm} = Y_{lm} \hat{\mathbf{r}}$ (VSH1),
- $\boldsymbol{\Psi}_{lm} = r \nabla Y_{lm}$ (VSH2).

Falę płaską rozwijamy jako $\mathbf{u}_{pq}(\mathbf{r}) = \sum_L a_L^{pq} \mathbf{u}_L^0(\mathbf{r})$ co jest sumą powyższych fal kulistych z pewnymi współczynnikami a_L .

Fala padająca zostaje rozwinięta w falę sferyczną i ma formę $\sum_L a_L^I \mathbf{J}_L^S(\mathbf{r})$ wewnątrz sfery oraz $\sum_L [a_L^0 \mathbf{J}_L(\mathbf{r}) + a_L^+ \mathbf{H}_L(\mathbf{r})]$ na zewnątrz (jako suma padającej i rozproszonej). Z założenia ciągłości na granicy otrzymujemy układ równań liniowych

$$a_L^+ = \sum_{L'} T_{LL'} a_{L'}^0, \quad (18)$$

$$a_L^I = \sum_{L'} C_{LL'} a_{L'}^0, \quad (19)$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

$$\mathbf{M}_{4 \times 4} \begin{pmatrix} a_{Nlm}^+ \\ a_{Llm}^+ \\ a_{Nlm}^I \\ a_{Llm}^I \end{pmatrix} = \mathbf{N}_{4 \times 2} \begin{pmatrix} a_{Nlm}^0 \\ a_{Llm}^0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A1})$$

$$\mathbf{K}_{2 \times 2} \begin{pmatrix} a_{Mlm}^+ \\ a_{Mlm}^I \end{pmatrix} = a_{Mlm}^0 \mathbf{L}_{2 \times 1}, \quad (\text{A2})$$

skąd otrzymujemy, że

$$\begin{pmatrix} a_{Nlm}^+ \\ a_{Llm}^+ \\ a_{Nlm}^I \\ a_{Llm}^I \\ a_{Mlm}^+ \\ a_{Mlm}^I \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{N} & \\ \hline & \mathbf{K}^{-1} \mathbf{L} \end{array} \right) \begin{pmatrix} a_{Nlm}^0 \\ a_{Llm}^0 \\ a_{Mlm}^0 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy \mathbf{T} i \mathbf{C} z (18,19). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM', LL', NN', LN', NL'$. Funkcja dla fali regularnej ostatecznie ma postać

$$\mathbf{R}_L(\mathbf{r}) = \left[\mathbf{J}_L(\mathbf{r}) + \sum_{L'} T_{L'L} \mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r}) \right] \Theta(r - S) + \sqrt{\rho_S/\rho} \sum_{L'} C_{L'L} \mathbf{J}_{L'}^S(\mathbf{r}) \Theta(S - r). \quad (21)$$

Fala rozproszona zostaje rozwinięta w falę sferyczną i ma wewnątrz sfery formę $\sum_L [c_L^I \mathbf{J}_L^S(\mathbf{r}) + c_L^{I+} \mathbf{H}_L^S(\mathbf{r})]$ (jako suma padającej i rozproszonej) oraz $\sum_L c_L^0 \mathbf{H}_L(\mathbf{r})$ na zewnątrz. Z założenia ciągłości na granicy otrzymujemy układ równań liniowych

$$c_L^{I+} = \sum_{L'} Q_{LL'} c_{L'}^0, \quad (22)$$

$$c_L^I = \sum_{L'} P_{LL'} c_{L'}^0 \quad (23)$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

$$\mathbf{M}'_{4 \times 4} \begin{pmatrix} c_{Nlm}^{I+} \\ c_{Llm}^{I+} \\ c_{Nlm}^I \\ c_{Llm}^I \end{pmatrix} = \mathbf{N}'_{4 \times 2} \begin{pmatrix} c_{Nlm}^0 \\ c_{Llm}^0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A5})$$

$$\mathbf{K}'_{2 \times 2} \begin{pmatrix} a_{Mlm}^{I+} \\ a_{Mlm}^I \end{pmatrix} = c_{Mlm}^0 \mathbf{L}'_{2 \times 1}, \quad (\text{A6})$$

skąd analogicznie jak wcześniej otrzymujemy

$$\begin{pmatrix} c_{Nlm}^{I+} \\ c_{Llm}^{I+} \\ c_{Nlm}^I \\ c_{Llm}^I \\ a_{Mlm}^{I+} \\ a_{Mlm}^I \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{M}'^{-1} \mathbf{N}' & \\ \hline & \mathbf{K}'^{-1} \mathbf{L}' \end{array} \right) \begin{pmatrix} c_{Nlm}^0 \\ c_{Llm}^0 \\ c_{Mlm}^0 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy \mathbf{Q} i \mathbf{P} z (22,23). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM', LL', NN', LN', NL'$. Funkcja dla fali nieregularnej ostatecznie ma postać

$$\mathbf{I}_L(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_L(\mathbf{r}) \Theta(r - S) + \sqrt{\rho_S/\rho} \sum_L [P_{LL'} \mathbf{J}_{L'}^S(\mathbf{r}) + Q_{L'L} \mathbf{H}_{L'}^S(\mathbf{r})] \Theta(S - r). \quad (25)$$

Wyrazy macierzy \mathbf{M} , \mathbf{N} , \mathbf{K} , \mathbf{L} są zdefiniowane w Appendix A za pomocą wzorów (A3-4) i (A7-8), gdzie $z_\nu = \omega S/c_\nu$, $x_\nu = \omega S/c_{s\nu}$

Funkcja Greena dla sfery, którą implementujemy, ma postać

$$G_{ii'}^{(s)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -i \sum_L \frac{\omega}{c_\nu^3} \left[R_{L;i}(\mathbf{r}) \bar{I}_{L;i'}(\mathbf{r}') \Theta(r' - r) + I_{L;i}(\mathbf{r}) \bar{R}_{L;i'}(\mathbf{r}') \Theta(r - r') \right], \quad (26)$$

gdzie

$$\bar{\mathbf{u}}_{Plm}(\mathbf{r}) = (-1)^f \mathbf{u}_{Pl-m}(\mathbf{r}) \quad \text{dla} \quad \begin{cases} f = m & \text{gd}y \ P = L, N \\ f = m + 1 & \text{gd}y \ P = M \end{cases}.$$

Wzory pomocnicze

$$\nabla(fg) = f(\nabla g) + g(\nabla f) \quad (27)$$

$$\nabla \times (f\mathbf{A}) = f(\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \times (\nabla f) \quad (28)$$

Pytania

1. brak