



Pro gradu -tutkielma
Teoreettinen fysiikka

Tähtienvälisen pölyn dynamiikkaa sähkömagneettisessa säteilykentässä

Joonas Herranen

2016

Ohjaajat: Johannes Markkanen
Karri Muinonen

Tarkastajat: Mika Juvela
Karri Muinonen
Kari Rummukainen

HELSINGIN YLIOPISTO
FYSIIKAN LAITOS

PL 64 (Gustaf Hällströmin katu 2)
00014 Helsingin yliopisto

Tiedekunta — Fakultet — Faculty		Laitos — Institution — Department	
Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta		Fysiikan laitos	
Tekijä — Författare — Author			
Joonas Herranen			
Työn nimi — Arbetets titel — Title			
Tähtienvälisen pölyn dynamiikkaa sähkömagneettisessa säteilykentässä			
Oppiaine — Läroämne — Subject			
Teoreettinen fysiikka			
Työn laji — Arbetets art — Level		Aika — Datum — Month and year	Sivumäärä — Sidoantal — Number of pages
Pro gradu -tutkielma		toukokuu 2016	67 sivua
Tiivistelmä — Referat — Abstract			
<p>Tässä tutkielmassa tarkastellaan tähtienvälisen pölyn dynamiikkaa, joka kytkeytyy sähkömagneettisen säteilyn sirontaan. Klassisen mekaniikan perustavanlaatuisimpiin pyörimisyhtälöihin perustuva pölyhiukkasen dynamiikka ja sirontatapahtuman Maxwellin yhtälöistä juontuva dynaaminen perusta kytketään tutkielmassa uudella tavalla ratkaisemalla ongelmassa keskeinen sirontatapahtuma sironnan integraaliyhtälömenetelmän avulla.</p> <p>Lukija johdatellaan myös esiteltyyn teoriaan pohjautuvan numeerisen menetelmän äärelle. Erään olemassa olevan sironnan integraaliyhtälöesityksen toteutuksen ympärille laaditaan viitekehys Fortran-ohjelmistolle, joka laskee hilaverkon avulla mallinnetun homogeenisen hiukkasen dynamiikkaa.</p> <p>Tutkielman teoreettisessa osuudessa luodaan teoreettinen viitekehys mielivaltaisen muotoisen hiukkasen dynamiikalle, jossa liikeyhtälöiden voimatermit ovat seurausta sähkömagneettisesta sirontatapahtumasta. Lisäksi sirontatapahtumaan liittyvät elektrodynamiikan perusteet sekä itse sirontaongelman ratkaisu pintaintegraaliyhtälöformalismilla esitellään teoreettisessa osuudessa.</p> <p>Numeerisessa osuudessa esitellään hiukkasen mallinnus sekä luonnehditaan teoreettisen viitekehyyksen sekä olemassa olevan pintaintegraalimenetelmän yhdistävän Fortran-ohjelmiston rakenne. Osuudessa käsitellään myös ohjelmiston toiminnan kannalta oleelliset algoritmit.</p> <p>Liikeyhtälöitä ratkaisevan Runge-Kutta-integraattorin oikea toiminta varmennetaan työssä asettamalla tunnettuja tuloksia tuottavia sidosehtoja ja vääntöjä. Kosmista ympäristöä mallintavilla alkuehdoilla pintaintegraaliyhtälömenetelmällä lasketun sirontavuorovaikutuksen määräämä dynamiikka tuottaa odotettuja tuloksia. Tulosten perusteella voidaan tulkita työssä esitetyn viitekehyyksen olevan kehityskelpoinen, kun tavoitteena on mallintaa hiukkasdynamiikkaa erilaisissa kosmisisissa ympäristöissä.</p>			
Avainsanat — Nyckelord — Keywords			
ISM, dynamiikka, sähkömagneettinen sironta, pintaintegraaliyhtälöesitys			
Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited			
Kumpulan kampuskirjasto			
Muita tietoja — övriga uppgifter — Additional information			

Sisältö

1 Johdanto	1
1.1 Käytetyt konventiot	3
2 Tähtienvälisen aineen dynamiikkaa	4
2.1 Kiinteän jäykän kappaleen liikeyhtälöt	5
2.2 Ellipsoidin liikeyhtälöistä	9
2.3 Koordinaattimuunnokset	10
2.4 Runge-Kutta-menetelmä	12
2.5 Rotaatiomatriisin päivitys	13
2.6 Stabiili pyörimisliike ja dissipaatiot	15
3 Sähkömagneettisen sironnan perusteet	17
3.1 Maxwellin yhtälöt	18
3.2 Tasoallot	19
3.3 Rajapinta- ja reunaehdot	20
3.4 Maxwellin jännitystensori	22
4 Sironnan integraaliyhtälöesitys	24
4.1 Sironnan pintaintegraaliesitys	26
4.2 Pintaintegraaliyhtälöiden johto ja diskretointi	31
5 Dynamiikan numeerinen ratkaiseminen	36
5.1 Geometrian käsittely	37
5.2 Liikeyhtälöiden integrointi	39
6 Tulokset ja johtopäätökset	42
6.1 Integraattorin toiminta	42
6.2 Sirottavan hiukkasen pyöriminen	51
7 Yhteenveto	62
Kirjallisuusluettelo	64

1. Johdanto

Tähtienvälinen pöly on tunnettu epäsuorasti vuodesta 1785 Uranuksenkin ensimmäisenä havainneen William Herschelin avaruuden pimeistä alueista tekemien epäsuorien havaintojen kautta [1]. Täydellinen varmuus pölyn olemassaolosta saatiin vuonna 1930 Trumplerin absorptio- ja punertumamittausten perusteella [2]. Myöhemmin, vuonna 1949, Hall ja Hiltner havaitsivat toisistaan riippumatta tähtienvälisen pölyn määrän kanssa korreloivan galaktisen valon polarisaation, joka yleisesti oli galaktista tasoa vasten kohtisuorassa [3, 4]. Hiltner tunnisti nopeasti polarisaation synnyttäjiksi magneettikentän suhteen orientoituneet epäsymmetriset pölyhiukkaset [5].

Sittemmin tähtienvälisen pölyn polarisoimaa säteilyä on tutkittu ultravioletialueelta [6] lähi-infrapuna-alueelle [7]. Havainnot osoittavat tähtienvälisen pölyn olevan magneettista ja mahdollistavan magneettikenttien geometrian ja voimakkuuden tutkimisen [8, 9]. Pölyn polarisaatio tarjoaa kattavan ja taloudellisen tavan tutkia tähtienvälistä aluetta, mikäli pölyn orientoitumismekanismit tunnetaan [10].

Systemaattista tähtienvälisen pölyn orientoitumista selittämään kehitettiin useita mekanismeja. Davisin ja Greensteinin galaktisen magneettikentän aiheuttama paramagneettinen relaksaatiomekanismi [8] oli ensimmäisiä, joskin sittemmin painoarvoltaan melko mitättömäksi todettuja mekanismeja [11]. Erilaisista mekanismeista tietyssä tilanteessa dominoivin määräytyy monimuotoisten kosmisten ympäristöjen mukaisesti. Kuitenkin Lazarianin pitkäaikaisen työn perusteella eräs merkittävimmistä pölyhiukkasten orientoitumismekanismeista on niin kutsuttu säteilyvääntö (*Radiative Torque, RAT*). Yksinkertaistettuna mekanismi perustuu epäsymmetrisessä hiukkasessa tapahtuvan valonsironnan voimavaikutuksiin [12].

Säteilyvääntöjen tutkimuksessa käsitellään valonsirontaa enintään mikrometriluokan hiukkasista, jonka yhteydessä tehty numeerinen analyysi on tapahtunut usein diskreettiä dipoliapproksimaatiota käyttävien numeeristen sirontaoh-

jelmistojen, esimerkiksi Discrete Dipole Scattering -ohjelmiston (DDSCAT) [13] avustuksella. Pölyhiukkasen orientoitumismekanismien määrän sekä numeeristen rajoitusten vuoksi säteilyvääntömekanismien tutkimus on kattanut vuosikymmeniä. Eri mekanismien yhteensovittaminen ja pölyhiukkasen orientoitumiseen kytkeytyvien tähtitieteellisten havaintojen tekeminen on ollut tutkimuksen pääosassa. Kerätyn tiedon avulla on esimerkiksi määritetty galaktinen magneettikenttä Planck-satelliitin polarisaatiodatan kautta ratkaisemalla inversio-ongelma, jossa mitatun polarisaation avulla määritettiin pölyn pyörimiseen kytkeytyvä magneettikenttä [14, 15].

Maxwellin yhtälöiden numeeriseen ratkaisuun liittyvät eri menetelmät ovat kehittyneet viime vuosikymmeninä. Sironaongelmissa käytettyjä menetelmiä on useita, joista erityisesti niin kutsutut sironnan integraaliyhtälöesitykset ovat kehittyneet sekä matemaattisen että numeerisen perustansa osalta. Tässä tutkielmassa tarkastellaan yksittäisen pölyhiukkasen dynamiikkaa säteilykentässä niin teoreettisista kuin numeerisista perustavanlaatuisista lähtökohdista. Pintaintegraaliyhtälöesityksen avulla ratkaistaan sironnatapahtuman aiheuttamat voimat tehokkaasti hiukkasen orientaation muuttuessa, mikä mahdollistaa liikeyhtälöiden eksplisiittisen integroinnin.

Työssä yhdistetään jäykän kappaleen liikeyhtälöt, hiukkasen diskretisointiskeema ja pintaintegraaliyhtälöesitys elektrodynaamisine perusteineen teoreettiseksi viitekehykseksi. Viitekehyksen mukaisesti laadittu Fortran-ohjelmisto ja sen testitulokset niin teoreettisesti tunnetuille erikoistapauksille kuin vapaille värähtelijöille esitetään työn lopussa.

1.1 Käytetyt konventiot

Tässä tutkielmassa merkitään matemaattisia ja fysikaalisia olioita selkeyden vuoksi seuraavalla tavalla.

Symboli	Kuvaus
\vec{F}, \vec{a}	Vektori
\hat{e}	Yksikkövektori
M	Matriisi
T	Tensori
T_{ij}, M_{ij}	Tensori- tai matriisikomponentti
\mathcal{L}	(Integrodifferentiaali)operaattori
$(\dot{\quad})$	Aikaderivaatta $\frac{d}{dt}$
ϵ_{ijk}	Levi-Civita-symboli

2. Tähtienvälisen aineen dynamiikkaa

Tähtienvälisen pölyhiukkasen dynamiikan määräävät sen liikeyhtälöt, jotka voidaan esittää Newtonin toisen lain mukaisesti niin etenemis- kuin pyörimisliikkeelle vektori-yhtälöinä

$$\begin{aligned}\vec{F} &= \frac{d\vec{p}}{dt}, \\ \vec{N} &= \frac{d\vec{L}}{dt},\end{aligned}\tag{2.1}$$

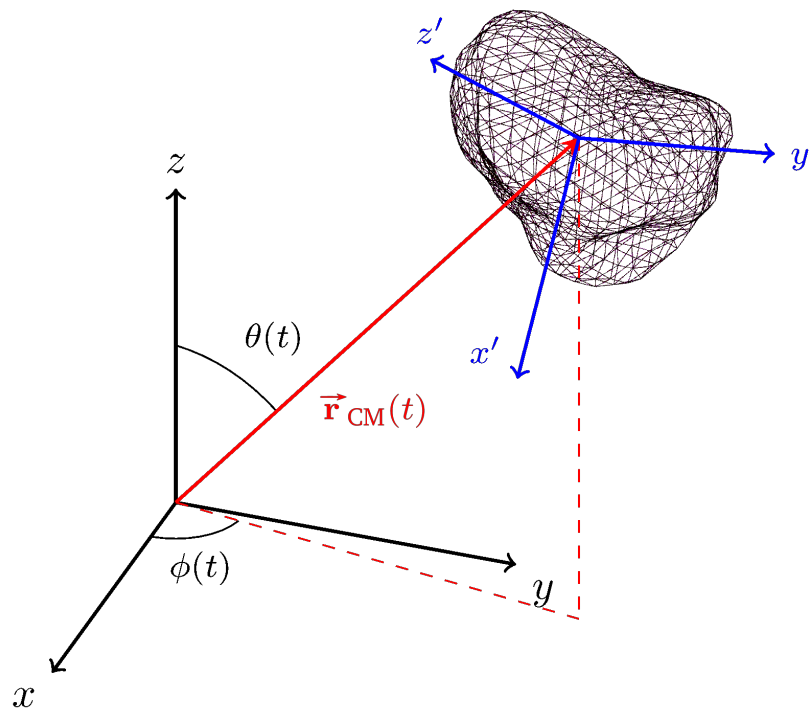
missä \vec{F} on hiukkaseen vaikuttava voima, \vec{p} hiukkasen liikemäärä ja analogisesti \vec{N} hiukkaseen vaikuttava voiman momentti sekä \vec{L} hiukkasen pyörimismäärä.

Kun liikeyhtälöitä käsitellään kosmisessa ympäristössä, ovat vuorovaikutukset pelkistettyjä, ja yksittäinen pölyhiukkanen voi tietyissä tapauksissa olla hyvinkin eristyksissä muusta maailmankaikkeudesta mahdollisia sähkömagneettisia taustakenttiä lukuun ottamatta. Tästä syystä ja hiukkasten epäsymmetrisyyden vuoksi liikeyhtälöt jäävät vaille vahvoja reunaehtoja, eli yhtälöitä (2.1) ei ole mahdollista sieventää erityisen pitkälle niiden alkuperäisestä muodostaan.

Liikeyhtälöiden käsittely etenemisliikkeen tapauksessa on suoraviivaista, ja se ohitetaan tässä luvussa. Pyörimisen liikeyhtälöt ovat sen sijaan keskiössä, tässä luvussa esitellään viitekehys, jonka mukaisesti pölyhiukkasen liikeyhtälöiden oikeaa puolta, eli hiukkasen vastetta ulkoisiin voima- ja vääntötermeihin myöhemmin numeerisesti käsitellään.

2.1 Kiinteän jäykän kappaleen liikeyhtälöt

Avaruuspöly muodostuu kiinteistä kappaleista, joita tässä työssä approksimoidaan jäykkänä kappaleina. Hiukkasen inertiaalikoordinaatistossa $\{x\}$ hiukkasen paikka voi muuttua ajan funktiona, kun taas hiukkasen lepokoordinaatisto $\{y\}$ on kiinteästi hiukkasen massakeskipisteessä \vec{r}_{CM} , jossa hiukkasen muodostavien massapisteiden hitausmomenttien summa kumoutuu, $\sum_i m_i \vec{r}_i = 0$. Lisäksi lepokoordinaatiston akselit kiinnitetään hiukkaseen, jolloin koordinaatisto myös pyörii hiukkasen mukana. Muodostuu klassisen mekaniikan perusteista tuttu systeemi, jonka teoriaa käsitellään nyt mukaillen alan perusteoksia, esimerkiksi Goldsteinin, Poo- len ja Safkon teosta [16].



Kuva 1: Hiukkasen paikka inertiaali- sekä lepokoordinaatistoidensa avulla esitettyinä. Massakeskipisteen sijainti muuttuu ajan funktiona. Kuvassa lepokoordinaatisto on kiinnitetty hiukkasen päähitausmomenttiakselihin, jotka esitellään myöhemmin.

Hiukkanen on jäykkä kappale, mikäli hiukkasen osien väliset etäisyydet eivät muutu, eli hiukkanen säilyttää muotonsa. Merkitään pisteen paikkaa koordinaatiston origosta vektorilla \vec{r}' inertiaalikoordinaatistossa ja vektorilla \vec{r} hiukkasen lepokoordinaatistossa. Merkitään lisäksi inertiaali- ja lepokoordinaatiston etäisyyss-

vektoriksi $\vec{\mathbf{R}} = \vec{\mathbf{r}}_{\text{CM}}$. Tällöin inertiaalikoordinaatistossa paikan muutos voidaan kiinnittää lepokoordinaatiston koordinaattien avulla:

$$\dot{\vec{\mathbf{r}}}' = \dot{\vec{\mathbf{R}}} + \dot{\vec{\mathbf{r}}} + \vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}} = \dot{\vec{\mathbf{R}}} + \vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}}, \quad (2.2)$$

jossa $\dot{\vec{\mathbf{r}}} = 0$ jäykän kappaleen ehdon nojalla. Ristitulotermissä kulmanopeus $\vec{\omega}$ on hiukkasen kulmanopeus inertiaalikoordinaatistossa.

Erillisistä massapisteistä muodostuvan hiukkasen liike-energiaksi saadaan

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2} \sum_i m_i (\dot{\vec{\mathbf{r}}}')^2 = \frac{1}{2} \sum_i m_i (\dot{\vec{\mathbf{R}}} + \vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}})^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{\mathbf{R}}}^2 + \sum_i m_i \dot{\vec{\mathbf{R}}} \cdot (\vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2} \sum_i m_i (\vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}})^2. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Jokaisessa massapisteessä $\vec{\mathbf{R}}$ ja $\vec{\omega}$ pysyvät vakioina. Merkitään lisäksi hiukkasen kokonaismassaksi $\sum_i m_i = M$, jolloin $\frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{\mathbf{R}}}^2 = \frac{1}{2} M \dot{\vec{\mathbf{R}}}^2$ ja $\sum_i m_i \dot{\vec{\mathbf{R}}} \cdot (\vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}}) = \dot{\vec{\mathbf{R}}} \cdot (\vec{\omega} \times \sum_i m_i \vec{\mathbf{r}}_i) = 0$, sillä summatermi lasketaan massakeskipisteessä. Muutetaan ristitulon neliö vektori-identiteettien avulla muotoon $(\vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}})^2 = (\vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}}) \cdot (\vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}}) = \omega^2 r_i^2 - (\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{r}}_i)^2$, näin ollen liike-energia saa muodon

$$K = \frac{1}{2} M \dot{\vec{\mathbf{R}}}^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i [\omega^2 r_i^2 - (\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{r}}_i)^2] \equiv K_{\text{CM}} + K_{\text{rot}}, \quad (2.4)$$

jossa K_{CM} on hiukkasen etenemisliike-energia, joka voidaan samaistaa massakeskipisteen etenemisen kanssa ja K_{rot} on hiukkasen pyörimisenergia. Pyörimisenergian lauseketta voidaan käsitellä komponenttimuodossa, esimerkiksi massapisteen m_i etäisyys lepokoordinaatiston origosta on $\vec{\mathbf{r}}_i = \sum_{j=1}^3 y_{ij} \hat{\mathbf{e}}_j$, missä kertoimet y_{ij} ovat karteesiset komponentit. Nyt pyörimisenergia saa muodon

$$K_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \sum_i m_i \left[\sum_{j=1}^3 \omega_j^2 \sum_{k=1}^3 y_{ik}^2 - \left(\sum_{j=1}^3 \omega_j y_{ij} \right) \left(\sum_{k=1}^3 \omega_k y_{ik} \right) \right]. \quad (2.5)$$

Kirjoitetaan pyörimisenergia Einsteinin summaussäännön avulla, jolloin jäljelle jäävä summa on massapisteiden yli, ja merkintä voidaan lyhentää $\sum_i m_i [\dots]_i =$

$\sum m[\dots]$, jolloin saadaan

$$\begin{aligned}
 K_{\text{rot}} &= \frac{1}{2} \sum m [\omega_j^2 y_k^2 - (\omega_j y_j)(\omega_k y_k)]_i \\
 &= \frac{1}{2} \sum m [\omega_i \omega_k \delta_{ik} y_k^2 - \omega_i \omega_k y_i y_k] \\
 &= \frac{1}{2} \sum \omega_i m [\delta_{ik} y_k^2 - y_i y_k] \omega_k \\
 &\equiv \sum \frac{1}{2} \omega_i I_{ik} \omega_k \\
 &= \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \mathbf{I} \cdot \vec{\omega},
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

tai tensorimuodon sijaan vektorimuodossa, jolloin tensorin \mathbf{I} korvaa matriisi \mathbf{I} , jolloin

$$K_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \mathbf{I} \vec{\omega}. \tag{2.7}$$

Yllä on siis määritelty niin kutsuttu hitausmomenttitensori \mathbf{I} , jonka komponentit hiukkasen lepokoordinaatistossa $\{y\}$ ovat

$$(I_{jk}) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1,N} m_i (y_i^2 + z_i^2) & - \sum_{i=1,N} m_i x_i y_i & - \sum_{i=1,N} m_i x_i z_i \\ - \sum_{i=1,N} m_i x_i y_i & \sum_{i=1,N} m_i (x_i^2 + z_i^2) & - \sum_{i=1,N} m_i y_i z_i \\ - \sum_{i=1,N} m_i x_i z_i & - \sum_{i=1,N} m_i y_i z_i & \sum_{i=1,N} m_i (x_i^2 + y_i^2) \end{pmatrix}, \tag{2.8}$$

missä kappaleen muodostavat N kappaletta massapisteitä m_i . Kyseessä on siis symmetrinen tensori $I_{jk} = I_{kj}$, jonka komponentit ovat jatkuvalle aineelle ilmaistavissa myös integraaleina

$$(I_{jk}) = \begin{pmatrix} \int (y^2 + z^2) dm & - \int xy dm & - \int xz dm \\ - \int xy dm & \int (x^2 + z^2) dm & - \int yz dm \\ - \int xz dm & - \int yz dm & \int (x^2 + y^2) dm \end{pmatrix}, \tag{2.9}$$

jossa massa-alkio on $dm = \rho(\vec{\mathbf{r}}) dr^3$. Koska tensorin komponenttimatriisi on reaalinen ja symmetrinen, on se diagonalisoitava. Komponenttimatriisi diagonalisoituu niin kutsutussa pääakselikoordinaatistossa, jossa diagonaalisia hitausmomenteja I_{jj} kutsutaan hiukkasen päähitausmomenteiksi. Diagonaalisessa tapauksessa liikeyhtälöt ovat yksinkertaisimmassa muodossaan, ja tästä syystä pääakselikoordinaatisto on hyödyllinen pyörimisen analyttisessä ja numeerisessä käsittelyssä.

Hiukkasen pyörimismäärä massakeskipisteen suhteen laboratoriokoordinaatistossa $\{x\}$ on

$$\vec{\mathbf{L}} = \sum m \vec{\mathbf{r}} \times \dot{\vec{\mathbf{r}}}_x = \sum m \vec{\mathbf{r}} \times (\vec{\omega} \times \vec{\mathbf{r}}) = \sum m [r^2 \vec{\omega} - \vec{\mathbf{r}}(\vec{\mathbf{r}} \cdot \vec{\omega})]. \tag{2.10}$$

Vastaavasti pyörimismäärän komponentit hiukkasen lepokoordinaatistossa $\{y\}$, summaussäännön avulla merkittynä ovat

$$\begin{aligned} L_i &= \sum m [y_j^2 \omega_i - y_i (y_k \omega_k)] & \left| \omega_i &= \omega_k \delta_{ik} \right. \\ &= \omega_k \sum m [y_j^2 \delta_{ik} - y_i y_k] \\ &= I_{ik} \omega_k, \end{aligned} \quad (2.11)$$

eli vektorimuodossa $\vec{L} = \mathbf{I}\vec{\omega}$. Jos lepokoordinaatisto $\{y\}$ on pääakselikoordinaatisto, saadaan $\vec{L} = (I_1 \omega_1, I_2 \omega_2, I_3 \omega_3)$. Yleisesti ottaen siis $\vec{L} \nparallel \vec{\omega}$, paitsi jos kyseessä on joko pallohyrrä ($I_j = I$) tai muuten symmetrinen tapaus sopivin sidosehdoin tai kulmanopeus on jonkin pääakselin suuntainen.

Analogisesti etenemisliikkeen tapauksen kanssa pyörimismäärää voi muuttaa vääntö \vec{N} , siis akselin suhteen vaikuttava voima. Laboratoriokoordinaatistossa $\{x\}$ siis $\vec{N} = \left. \frac{d\vec{L}}{dt} \right|_x$. Koska hiukkasen lepokoordinaatistossa $\{y\}$ aikaderivaatta voidaan kirjoittaa operaattorimuodossa $\left. \frac{d}{dt} \right|_x = \left. \frac{d}{dt} \right|_y + \vec{\omega} \times$, saadaan komponenttimuodossa

$$N_i = \frac{dL_i}{dt} + \epsilon_{ijk} \omega_j L_k. \quad (2.12)$$

Jos lepokoordinaatistoksi valitaan hiukkasen pääakselikoordinaatisto, jossa $L_i = I_i \omega_i$ ja $\frac{dL_i}{dt} = 0$, saadaan lopulta

$$N_i = I_i \frac{d\omega_i}{dt} + \epsilon_{ijk} \omega_j \omega_k I_k, \quad (2.13)$$

eli vektorimuodossa

$$\vec{N} = \mathbf{I}\dot{\vec{\omega}} + \vec{\omega} \times (\mathbf{I}\vec{\omega}). \quad (2.14)$$

Tarkastellaan vielä origon suhteen pyörivän pisteen \vec{r} muutosta. Tangentiaalisen nopeuden määritelmä $\dot{\vec{r}} = \vec{\omega} \times \vec{r}$ voidaan nyt kirjoittaa karteestisten sarakesikkövektoreiden avulla matriisimuodossa

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{R}} &= \left(\vec{\omega} \times \begin{pmatrix} r_{xx} \\ r_{xy} \\ r_{xz} \end{pmatrix} \quad \vec{\omega} \times \begin{pmatrix} r_{yx} \\ r_{yy} \\ r_{yz} \end{pmatrix} \quad \vec{\omega} \times \begin{pmatrix} r_{zx} \\ r_{zy} \\ r_{zz} \end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{pmatrix} \mathbf{R} \\ &\equiv \mathbf{\Omega}^* \mathbf{R}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Yllä merkintätapojen yhdistämisen apuna käytetään matriisimuunnosta ^{*},

$$\mathbf{\Omega}^* = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & \omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

jonka avulla vektorien ristitulo voidaan esittää matriisitulona. Matriisimuotoinen liikeyhtälö on yhtäpitävä liikeyhtälön $\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{r}$ kanssa, sillä $\vec{r}(t) = \mathbf{R}(t)\vec{r}_0$.

Pyörimisdynamiikan määräävät yhtälöt ovat yksinkertaisimmassa muodossaan, kun hiukkasen lepokoordinaatistoksi on valittu sen pääakselikoordinaatisto, jonka määrittäminen on numeerisesti suoraviivaista diagonalisoimalla hiukkasen hitausmomenttitensori tunnettuja matriisimenetelmiä hyödyntäen.

2.2 Ellipsoidin liikeyhtälöistä

Kun pyörivä kappale on jollain tavalla symmetrinen, voidaan kappaleen liikeyhtälöitä tarkastella myös analyyttisesti. Tarkastellaan ellipsoidin muotoisen kappaleen, jonka päähitausmomentit ovat $I_1 = I_2 < I_3$, vapaata pyörimistä tilanteessa $\vec{N} = 0$. Tällöin Eulerin yhtälöistä (2.13) saadaan

$$I_3\dot{\omega}_3 = (I_1 - I_2)\omega_1\omega_2 = 0, \quad (2.17)$$

eli $\dot{\omega}_3 = 0$.

Kappaleen lepokoordinaatistossa siis suurinta hitausmomenttia vastaava kulmanopeuden komponentti, ω_3 , on vakio. Tämän, sekä alkuoletuksen $I_1 = I_2$ avulla loput Eulerin yhtälöistä voidaan kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_1 &= \frac{(I_1 - I_3)\omega_3}{I_3}\omega_2 = \Omega_b\omega_2, \\ \dot{\omega}_2 &= -\frac{(I_1 - I_3)\omega_3}{I_3}\omega_1 = -\Omega_b\omega_1, \end{aligned} \quad (2.18)$$

missä $\Omega_b = \frac{(I_1 - I_3)\omega_3}{I_3}$ on vakiotaaajuus.

Asetetaan $u = \omega_1 + i\omega_2$, jolloin kirjoittamalla

$$\dot{\omega}_1 + i\dot{\omega}_2 = -\Omega_b(\omega_2 - i\omega_1) = -i\Omega_b(\omega_1 + i\omega_2), \quad (2.19)$$

saadaan differentiaaliyhtälöpari (2.18) muotoon

$$\dot{u} = -i\Omega_b u. \quad (2.20)$$

Differentiaaliyhtälön (2.20) ratkaisuksi saadaan yhtälö

$$u = u_0 e^{-i\Omega_b t}, \quad (2.21)$$

joka voidaan ratkaista alkuarvo-ongelmana. Asettamalla ajanhetkellä $t = 0$ alkuarvot $\omega_1 = \omega_0$ ja $\omega_2 = 0$ saadaan $u_0 = \omega_0$. Edelleen apumuuttujan u reaali- ja imaginaariosista saadaan kappaleen lepokoordinaateissa kulmanopeudeksi

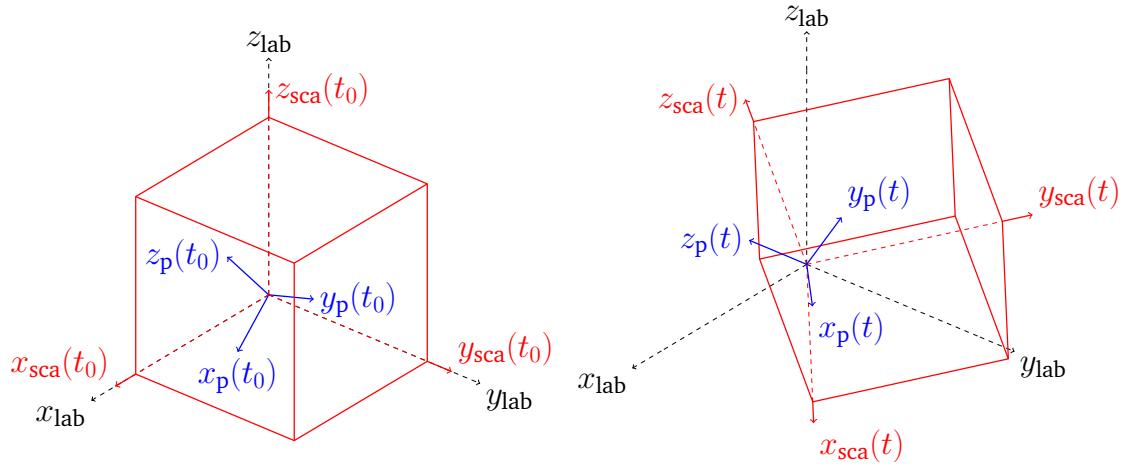
$$\vec{\omega} = (\omega_0 \cos \Omega_b t, \omega_0 \sin \Omega_b t, \omega_3). \quad (2.22)$$

Lepokoordinaateissa pyörivän kulmanopeusvektorin muodostama pyörähdyskappale on siis ympyräkartio.

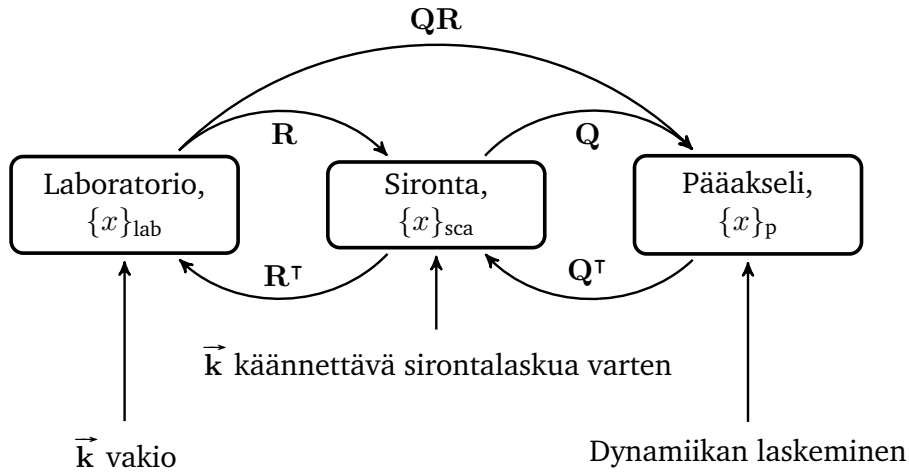
2.3 Koordinaattimuunnokset

Menetelmät, joita tässä työssä sovelletaan, käyttävät kolmea eri koordinaatistoa numeerisen työskentelyn eri vaiheissa. Koordinaatisto, jossa hiukkaseen kohdistuva säteily pysyy jatkuvasti samansuuntaisena, eli sen aaltovektori on vakio, on laboratorikoordinaatisto, kun taas sirontalaskenta tapahtuu niin kutsutussa sirontakoordinaatistossa, jossa pölyhiukkanen orientaatio säilyy ja aaltovektorin suunta muuttuu. Simulaation alussa luonnollisesti sirontakoordinaatisto yhtyy laboratorikoordinaatiston kanssa. Pyörimisdynamiikkaan liittyvä numeriikka ratkaistaan hiukkasen pääakselikoordinaatistossa, joka on laboratorikoordinaatiston tapaan paikallaan hiukkasen massakeskipisteessä. Koordinaatistojen aikakehitystä esitetään kuvassa 2.

Kaikkiaan hiukkasen liikettä tarkastellaan käyttäen kolmea koordinaatistoa, joiden väliset muunnokset vektoreille on oleellista tunnistaa ja nimetä yksiselitteisesti. Nimetään sironta- ja pääakselikoordinaatistojen $\{x\}_{\text{sca}}$ ja $\{x\}_{\text{p}}$ välinen lineaarikuvaus, $Q : \{x\}_{\text{sca}} \rightarrow \{x\}_{\text{p}}$. Kuvaus laboratorikoordinaatistosta sirontakoordinaatistoon saadaan vastaavasti suoraan rotaatiomatriisin avulla, lineaarikuvauksella $R : \{x\}_{\text{lab}} \rightarrow \{x\}_{\text{sca}}$, sillä laboratio- ja sirontakoordinaatistot ovat alkutilanteessa yhtenevät. Yhdistämällä kuvauksia Q ja R eri tavoin saadaan muodostettua kaikki muut kuvaukset koordinaatistojen välillä, esimerkiksi kuvaus $QR : \{x\}_{\text{lab}} \rightarrow \{x\}_{\text{p}}$, jossa kuvaus on nimetty esitysmatriisinsa \mathbf{QR} mukaisesti, kuten kuvassa 3 esitetään.



Kuva 2: Koordinaatistot $\{x\}_{\text{lab}}$, $\{x\}_{\text{sca}}$ ja $\{x\}_{\text{p}}$ ajanhetkillä $t = 0$ ja t . Laboratoriokoordinaatisto $\{x\}_{\text{lab}}$ pysyy paikoillaan, kun taas sirontakoordinaatisto $\{x\}_{\text{sca}}$ sekä pääakselikoordinaatisto $\{x\}_{\text{p}}$ pyörivät hiukkaseen kiinnitettyinä.



Kuva 3: Yksinkertainen kaavio tässä työssä käytetyistä muunnoksista eri koordinaatistojen välillä ja jokaisen koordinaatiston merkitys tiivistettynä.

Koordinaatistoista sekä sirontakoordinaatisto $\{x\}_{\text{sca}}$ että pääakselikoordinaatisto $\{x\}_{\text{p}}$ ovat aikariippuvaisia, sillä $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$. Kuten luvussa 4 myöhemmin osoitetaan, sirontatapahtumaan liittyvien voimien yksinkertaisin ratkaisu vaatii mallinnetun hiukkasen orientaation säilymistä, eli on toimittava hiukkasen inertiaalikoordinaatistossa. Sen sijaan herättävän kentän suuntaa, eli tasoallion tapauksessa aaltovektoria \vec{k} , voidaan kääntää vapaasti. Aaltovektorin \vec{k} rotaatiot on tämän näkökulmaeron vuoksi tehtävä käänteisrotaatioina aaltovektoriin \vec{k} , jolloin

sironta- ja laboratoriokoordinaatistojen väliset muunnokset kääntyvät myös voimien ja vääntöjen suhteen. Tensorien koordinaattimuunnoksien tapauksessa käytetään kaavaa

$$\mathbf{T}' = \mathbf{R}\mathbf{T}\mathbf{R}^\top, \quad (2.23)$$

missä \mathbf{T} on tensori ja \mathbf{R} rotaatiomatriisi.

2.4 Runge-Kutta-menetelmä

Pölyhiukkasen pyörimisdynamiikan määräävät luvussa 2.1 määritetyt liikeyhtälöt

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{R}}{dt} &= \boldsymbol{\Omega}^* \mathbf{R}, \\ \frac{d\vec{\omega}}{dt} &= \mathbf{I}^{-1} \left(\vec{\mathbf{N}} - \vec{\omega} \times (\mathbf{I}\vec{\omega}) \right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Etenemisliikkeen liikeyhtälö $\vec{\mathbf{F}} = \frac{d\vec{\mathbf{p}}}{dt} = m\vec{\mathbf{a}}$ voidaan kirjoittaa kahtena yhtälönä muodossa

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{\mathbf{v}}}{dt} &= \vec{\mathbf{F}}/m, \\ \frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} &= \vec{\mathbf{v}}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Nopeuden $\vec{\mathbf{v}}$ avulla paikan toista derivaattaa sisältävä differentiaaliyhtälö voidaan siis muuttaa lineaariseksi differentiaaliyhtälöpariksi.

Muotoa $\frac{dy}{dt} = f(y, t)$ olevia differentiaaliyhtälöitä voidaan ratkaista numeerisesti useilla menetelmillä, joista mahdollisesti yleisin on niin kutsuttu Runge-Kutta-menetelmä. Menetelmä vastaa päällisin puolin hieman korjailtua Eulerin menetelmää, joka perustuu päivitysyhtälön rakentamiseen suoraan erotusosamäärän kaavasta. Korjatussa menetelmässä integrointi tapahtuu käyttämällä hyödyksi integrointipisteiden välillä testipisteitä, jotka eliminovat virhetermejä alhaisissa kertaluvuissa. Yleisessä muodossaan kertaluvun s Runge-Kutta-menetelmän muodostaa algoritmi, jossa uusi askel aika-askeleen h kuluttua saadaan kaavasta

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (2.26)$$

jossa $k_1 = f(y_n, t_n)$ ja $k_i = f(y_i + h(a_{i,1}k_1 + a_{i,2}k_2 + \dots + a_{i,i-1}k_{i-1}), t_i + c_i h)$. Kertoimet a_{ij} , b_i ja c_i , joissa $1 \leq j \leq i \leq s$, on määrättävä sopivalla tavalla. Eksplisiittisiä Runge-Kutta-menetelmiä on siis useita erilaisia [17].

Eräs yleisimmin käytetty Runge-Kutta-menetelmä on neljännen kertaluvun menetelmä, jossa mahdolliset kertoimet yksinkertaistuvat huomattavasti, yleisin valinta kertoimille on $b_i = c_i = 1$, $a_{ii} = (\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6})$. Neljännen kertaluvun menetelmä on suhteellisen tarkka, mutta implementoinniltaan yksinkertainen ja nopea varsinkin korkeamman kertaluvun menetelmiin verrattuna.

2.5 Rotaatiomatriisin päivitys

Jäykän kappaleen liikeyhtälöiden integroiminen Runge-Kutta menetelmällä on tehokas ja implementoinniltaan yksinkertainen menetelmä ratkaista kappaleen kulmanopeus kun voimat tunnetaan. Menetelmän päivitysyhtälöt ovat kuitenkin additiivisia, mikä on ongelma menetelmän soveltamisessa rotaatiomatriiseihin, joiden on toteutettava ortogonaalisuusehto $\mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbf{I}$, missä \mathbf{R} on rotaatiomatriisi ja \mathbf{I} on ykkösmatriisi.

Tarkastellaan vektorin $\vec{\mathbf{r}}$ pyörähdystä akselin $\hat{\mathbf{n}}$ ympäri kulman θ verran. Olkoon pyörähtänyt vektori $\vec{\mathbf{r}}'$. Vektori $\vec{\mathbf{r}}$ voidaan hajottaa pyörähdysakselin suhteen yhdensuuntaiseen ja kohtisuoraan komponenttiin

$$\vec{\mathbf{r}} = \vec{\mathbf{r}}_{\parallel} + \vec{\mathbf{r}}_{\perp} = \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{r}}) - \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{r}}). \quad (2.27)$$

Ainoastaan komponentti $\vec{\mathbf{r}}_{\perp}$ muuttuu pyörähdysten aikana, jolloin tuloksena on Rodriguesin rotaatiokaava [18]

$$\vec{\mathbf{r}}' = \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{r}}) + \sin \theta (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{r}}) - \cos \theta \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{r}}). \quad (2.28)$$

Yhtälön (2.27) avulla saadaan pyörähdys esitettyä muodossa

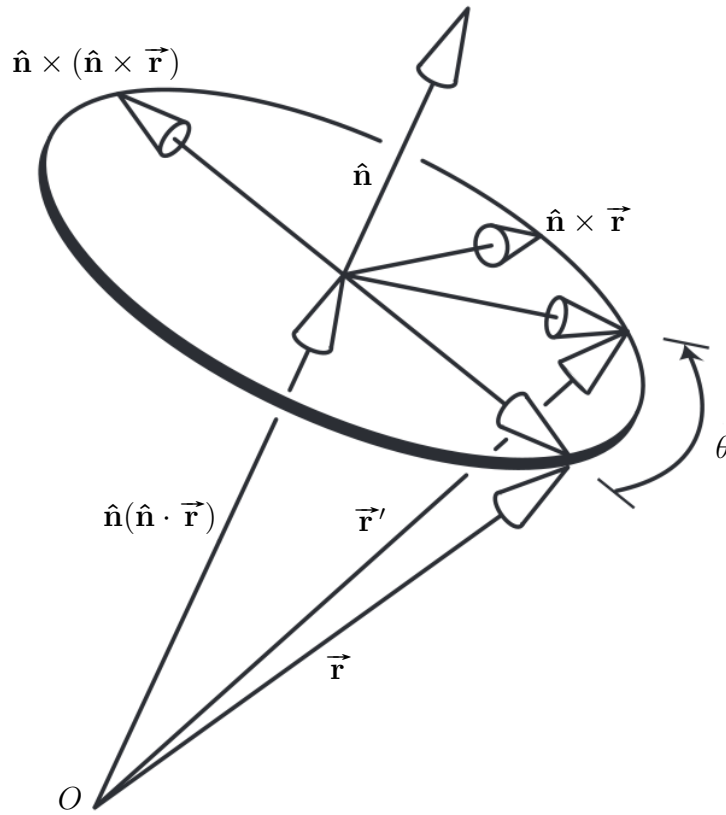
$$\vec{\mathbf{r}}' = \vec{\mathbf{r}} + \sin \theta (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{r}}) + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{r}}). \quad (2.29)$$

Rodriguesin kaava saadaan esitettyä matriisimuodossa, kun merkitään $\vec{\mathbf{r}}' = \mathbf{R} \vec{\mathbf{r}}$ ja käytetään matriisimuunnosta * pyörähdysakselivektoriin. Tällöin tuloksena on

$$\begin{aligned} \mathbf{R} \vec{\mathbf{r}} &= \vec{\mathbf{r}} + \sin \theta \mathbf{N}^* \vec{\mathbf{r}} + (1 - \cos \theta) \mathbf{N}^* \mathbf{N}^* \vec{\mathbf{r}} \\ &= [\mathbf{I} + \sin \theta \mathbf{N}^* + (1 - \cos \theta) (\mathbf{N}^*)^2] \vec{\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Koska alkuperäinen vektori $\vec{\mathbf{r}}$ löytyy yhtälön molemmilta puolilta, voidaan yhtäpitävästi kirjoittaa matriisirelaatio

$$\mathbf{R} = \mathbf{I} + \sin \theta \mathbf{N}^* + (1 - \cos \theta) (\mathbf{N}^*)^2. \quad (2.31)$$



Kuva 4: Skematiikka, kuinka pyörähdysvektori \vec{r}' ilmaistaan alkuperäisen vektorin \vec{r} ja pyörähdysakselivektorin \hat{n} avulla.

Rotaatiomatriisin päivitysyhtälönä voidaan käyttää Rodriguesin rotaatiokaavaa, kun pyörähdysakselivektoriksi valitaan keskimääräinen kulmanopeusvektori $\vec{\omega}_{\text{avg}} = \vec{\omega}(t) + \frac{d\vec{\omega}}{2}$, missä vektori $d\vec{\omega}$ on kulmanopeuden muutos aika-askeleen aikana. Tällöin pyörähdyskulma $d\phi$ askeleen dt aikana on ensimmäisessä kertaluvussa

$$d\phi = |\vec{\omega}_{\text{avg}}|dt. \quad (2.32)$$

Nyt Rodriguesin kaavaa voidaan käyttää rotaatiomatriisin päivitysyhtälönä

$$\mathbf{R}(dt) = \mathbf{I} + \sin d\phi \mathbf{\Omega}_{\text{avg}}^* + (1 - \cos d\phi)(\mathbf{\Omega}_{\text{avg}}^*)^2, \quad (2.33)$$

ja rotaatiomatriisin päivitys voidaan toteuttaa matriisikertolaskuna

$$\mathbf{R}(t + dt) = \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(dt). \quad (2.34)$$

On huomattava, että vaikka rotaatiomatriisin päivitysyhtälö on rakennettu ensimmäisessä kertaluvussa skalaarille $d\phi$, yhtälön tärkein ominaisuus on rotaatiomatriisin ortogonaalisuuden säilyttäminen. Rodriguesin rotaatiokaavassa keskeinen oletus on kulmanopeusvektorin vakioisuus aika-askeleen yli, joten esimerkiksi puolisuunnikkasäännön tai Runge-Kutta-algoritmin soveltaminen ei menetelmässä ole mahdollista suoraviivaisesti. Esimerkiksi kattavassa rotaatiointegraattoreiden vertailussa [19] käytetyt rotaatiopäivitysyhtälöt nojaavat ensimmäisen kertaluvun rotaatiopäivitysyhtälöihin vailla suuria ongelmia.

2.6 Stabiili pyörimisliike ja dissipaatiot

Tarkastellaan tilannetta, jossa epäsymmetrinen kappale pyörii vapaasti ilman ulkoisia vääntömomentteja. Pääakselikoordinaatistossa kappaleella on kolme päähitausmomenttia, $I_1 > I_2 > I_3$. Kappaleella on kulmanopeus $\vec{\omega} = \omega_i \hat{e}_i$, $i = 1, 2, 3$, jota perturboidaan eri tilanteissa.

Kun kappale pyörii suurinta päähitausmomenttia vastaavan akselin ympäri, perturboidaan pyörimistä kahden muun akselin suhteen, jolloin $\vec{\omega} = (\omega_1, \lambda, \mu)$, missä λ ja μ ovat hyvin pieniä. Nyt Eulerin yhtälöt saavat muodon

$$\begin{aligned} I_1 \dot{\omega}_1 - (I_2 - I_3) \lambda \mu &= 0, \\ I_2 \dot{\lambda} - (I_3 - I_1) \omega_1 \mu &= 0, \\ I_3 \dot{\mu} - (I_1 - I_2) \omega_1 \lambda &= 0. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Termi $\lambda \mu$ on toista kertalukua, joten se voidaan jättää huomiotta pienillä perturbaatioilla. Tämän johdosta ω_1 on likimain liikevakio. Kaksi muuta yhtälöä voidaan kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned} \dot{\lambda} &= \left[\frac{(I_3 - I_1) \omega_1}{I_2} \right] \mu, \\ \dot{\mu} &= - \left[\frac{(I_2 - I_1) \omega_1}{I_3} \right] \lambda. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Derivoimalla ylempää yhtälöä ja sijoittamalla tulokseen alempi yhtälö saadaan

$$\ddot{\lambda} + \left[\frac{(I_2 - I_1)(I_3 - I_1)}{I_2 I_3} \right] \omega_1^2 \lambda = 0. \quad (2.37)$$

Täsmälleen vastaava μ -yhtälö saadaan päinvastaisella sijoituksella. Termi kulmasulkeissa on nyt positiivinen, jolloin kyseessä on harmonisen värähtelijän yhtälö,

jonka ratkaisu on muotoa $\lambda = \lambda_0 \cos(\Omega_1 t - \alpha)$, missä λ_0 ja α ovat integrointivakioita ja $\Omega_1 = \left[\frac{(I_2 - I_1)(I_3 - I_1)}{I_2 I_3} \right]^{\frac{1}{2}} \omega_1$. Kappale siis värähtelee alkuperäisen kulmanopeusvektorinsa ympäri kulmanopeudella Ω_1 . Vastaavaan tilanteeseen päästään pienimmän päähitausmomentin tapauksessa, eli perturbaatioista huolimatta pyöriminen on vakaata näiden kahden akselin ympäri.

Keskimmäisen päähitausmomentin suhteen, jolloin kulmanopeus perturbaatioineen on $\vec{\omega} = (\lambda, \omega_2, \mu)$. Aiempaan tapaan menettelemällä saadaan

$$\ddot{\lambda} - \left[\frac{(I_2 - I_1)(I_3 - I_2)}{I_1 I_3} \right] \omega_2^2 \lambda = 0. \quad (2.38)$$

Kyseinen yhtälö ei ole yksinkertaisen harmonisen värähtelyn yhtälö, vaan tämän yhtälön ratkaisut ovat muotoa $\lambda = Ae^{kt} + Be^{-kt}$, missä A ja B ovat integrointivakioita ja $k = \left[\frac{(I_2 - I_1)(I_3 - I_2)}{I_1 I_3} \right]^{-\frac{1}{2}} \omega_2$. Perturbaatiot siis kasvavat eksponentiaalisesti ajassa, ja kyseessä on epästabiili pyöriminen. Edelleen symmetrisessä tilanteessa, jossa kaksi päähitausmomenttia ovat samat, voidaan pyörimisen osoittaa olevan perturboidessa stabiilia ainoastaan kolmannen päähitausmomentin suhteen.

Käsitellessä realistisempaa pyörimistä on otettava huomioon erilaiset pyörimistä stabiloivat dissipaatiomekanismit. Dissipaatiolla tarkoitetaan pyörimisenergian muuttumista muiksi energian muodoiksi, esimerkiksi ei-jäykän kappaleen muodonmuutoksiin tai jäykän kappaleen tapauksessa pyörimisen stabiloitumista suurimman päähitausmomentin määräämälle akselille. Myös jäykälle kappaleelle on hahmoteltavissa useita erilaisia mekanismeja, jotka kytkevät kappaleen materiaaliominaisuudet ympäristötekijöihin. Eri dissipaatiomekanismit palauttavat kappaleen pyörimisen sille ominaiselle pyörimisenergia-alueelle [20]. Kaikkiaan erilaisten dissipaatiomekanismien tutkimus on monipuolinen ja alati kehittyvä [21] ala, joka myös tämän työn viitekehyksessä tarjoaa jatkotutkimuskohteita.

3. Sähkömagneettisen sironnan perusteet

Tässä luvussa tarkastellaan sähkömagneettisen sironnan numeerisen käsittelyn kannalta klassisen elektrodynamiikan keskeisimpiä osa-alueita. Aiheet ovat laajalti tunnettuja ja alan peruskirjallisuudessa perinpohjaisesti käsiteltyjä. Esimerkiksi Jacksonin *Classical Electrodynamics* [22] on erinomainen perusteos.

Sähkömagneettisen sironnan teoria on pitkälti toista sataa vuotta vanhaa klassiseen elektrodynamiikkaan perustuvaa teoriaa. Keskeisimmät kontribuutiot tehtiin jo 1800- ja 1900-lukujen vaihteessa. Sironta valon aallonpituuteen verrattuna häviävän pienestä hiukkasesta on nimetty Lordi Rayleighin mukaan [23]. Vastaavaa suuren kappaleen teoriaa, geometrasta sirontaa, on tutkittu optiikan muodossa jo klassisten filosofien aikana.

Kahden ääripään väliin jää sironta hiukkasesta, jonka koko vastaa likimain saapuvan valon aallonpituutta. Tässä tapauksessa ongelman yksinkertaistamiseksi ei voi hyödyntää suoraviivaisia likimääräistyksiä. Gustav Mie kehitti analyyttisen ratkaisun saapuvan säteilyn aallonpituutta vastaavan kokoluokan homogeenisesta pallosta siroavalle valolle [24]. Tätä aallonpituusluokan sironnan erikoistapausta kutsutaan Mien sironnaksi. Ratkaisua on onnistuttu laajentamaan muun muassa ellipsoidille ja äärettömille sylintereille sekä erilaisille koostumussymmetrioille. Analyyttisiä ratkaisuja on tosin edelleen vain kourallinen, ja ratkaisut koskevat vähintäänkin optimistisesti idealisoituja kappaleita.

Numeeriset menetelmät mahdollistavat muodoltaan ja koostumukseltaan mielivaltaisten kappaleiden elektrodynaamisen käsittelyn myös aallonpituutta vastaavassa kokoluokassa. Kulloinkin kyseessä olevan kappaleen ominaisuudet määrittävät ongelman, ja näitä ominaisuuksia pyritään parametrisoimaan järkevästi.

3.1 Maxwellin yhtälöt

Kaiken elektrodynamiikan pohjalla ovat Maxwellin yhtälöt, jotka voidaan kirjoittaa väliaineen pisteessä vaikuttavien makroskooppisten kenttien avulla muodossa

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \vec{\mathbf{D}} &= \rho, \\
 \nabla \times \vec{\mathbf{E}} &= -\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t}, \\
 \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} &= 0, \\
 \nabla \times \vec{\mathbf{H}} &= \vec{\mathbf{J}} + \frac{\partial \vec{\mathbf{D}}}{\partial t},
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

missä $\vec{\mathbf{D}} = \varepsilon \vec{\mathbf{E}}$ on siirrosvirta, tai yhtälöiden symmetrisyyttä alleviivaten sähkövuon tiheys, ε väliaineen permittiivisyys, $\vec{\mathbf{B}} = \mu \vec{\mathbf{H}}$ magneettivuon tiheys, μ väliaineen permeabiliteetti ja $\vec{\mathbf{J}}$ on magneettivuon indusoiva sähkövirta. Suureet $\vec{\mathbf{E}}$ ja $\vec{\mathbf{H}}$ ovat sähkö- ja magneettikentän voimakkuudet, ja näitä suureita kutsutaan jatkossa lyhyemmin pelkiksi kentiksi. Yhtälöt voidaan myös nimetä erikseen, jolloin esitettyssä järjestyksessä ensimmäinen tunnetaan Gaussin lakina sähkökentille, toinen Faradayn induktiolakina, kolmas Gaussin lakina magneettikentille ja neljäs Maxwellin-Ampèren lakina.

Sähkömagneettisen varauksen tiedetään säilyvän, ja tästä syystä Maxwell lisäsi aiemmin Ampèren lakina tunnettuun lakiin siirrosvirtatermin $\frac{\partial \vec{\mathbf{D}}}{\partial t}$. Tällöin saadaan sähkövirran jatkuvuusyhtälö laskemalla muodostetun Maxwellin-Ampèren lain divergenssi,

$$\nabla \cdot \nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \nabla \cdot \left(\vec{\mathbf{J}} + \frac{\partial \vec{\mathbf{D}}}{\partial t} \right) = \nabla \cdot \vec{\mathbf{J}} + \frac{\partial \nabla \cdot \vec{\mathbf{D}}}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{\mathbf{J}} + \frac{\partial \rho}{\partial t}. \tag{3.2}$$

Yllä $\nabla \cdot \nabla \times \vec{\mathbf{H}} = 0$ vektorianalyysin identiteettien nojalla ja $\nabla \cdot \vec{\mathbf{D}} = \rho$ Gaussin lain nojalla, jolloin saadaan sähkövarauksen jatkuvuusyhtälö

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{J}} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \tag{3.3}$$

Maxwellin yhtälöt voidaan myös ilmaista symmetrisessä muodossa,

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{\mathbf{D}} &= \rho, \\ \nabla \times \vec{\mathbf{E}} &= -\vec{\mathbf{M}} - \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} &= m, \\ \nabla \times \vec{\mathbf{H}} &= \vec{\mathbf{J}} + \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t},\end{aligned}\tag{3.4}$$

missä on postuloitu klassisessa elektrodynamiikassa kiellettyjä magneettisia lähde-termejä, magneettinen varaus m ja magneettinen virta $\vec{\mathbf{M}}$. Tällöin voidaan myös muodostaa analogia magneettisten varausten säilyvyydelle magneettisen varauksen jatkuvuusyhtälön muodossa,

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{M}} + \frac{\partial m}{\partial t} = 0.\tag{3.5}$$

Sähkömagneettisen kentän sisältämää energiaa voidaan tutkia kenttien tekemän työn kautta lähtien liikkeelle suoraan Maxwellin yhtälöistä. Näin löydetyn energiatheyden postuloidaan käsittävän myös staattiset kentät, ja määritellään lineaarisessa ja isotrooppisessa väliaineessa kaavalla

$$u_{\text{EM}} = u_{\text{E}} + u_{\text{M}} = \frac{1}{2}\varepsilon E^2 + \frac{1}{2\mu} B^2,\tag{3.6}$$

missä u_{E} on sähkökentän energiatiheys ja u_{M} magneettikentän energiatiheys.

Tässä muodossa esitetyistä Maxwellin yhtälöistä on mahdollista johtaa erilaisia esityksiä matemaattisesti suoraviivaisemmin, joskin tiettävästi epäfysikaaliset magneettiset lähde-termit on lopullisesta esityksestä poistettava. Myöhemmin tässä työssä magneettisia lähde-termejä käytetään matemaattisina apuvälineinä, joissa ne esiintyvät ekvivalenttilähteinä, eli lähteinä, jotka voisivat indusoida todellisia kenttiä sirottavien pintojen sijaan.

3.2 Tasoaalot

Sähkömagneettinen tasoaalto, joka on ajan ja paikan funktiona värähtelevä kenttä, voidaan esittää matemaattisesti muodossa

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{E}} &= \vec{\mathbf{E}}_0 \exp\left(i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}} - i\omega t\right), \\ \vec{\mathbf{H}} &= \vec{\mathbf{H}}_0 \exp\left(i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}} - i\omega t\right).\end{aligned}\tag{3.7}$$

Tasoaalto on erikoistapaus aikaharmonisesta sähkömagneettisesta kentästä, jonka aikariippuvuus on muotoa $e^{-i\omega t}$. Aikaharmoniset kentät merkitään vastaisuudessa merkintöjen yksinkertaistamiseksi samoilla symboleilla kuin yleiset kentät, kun kentän laatu on asiayhteydestä selvä.

Fysikaalinen tasoaaltokenttä tulkitaan kompleksisen kentän reaali-osana, jolloin kentän matemaattinen käsittely on mahdollisimman yksinkertaista. Vektorit $\vec{\mathbf{E}}_0$ ja $\vec{\mathbf{H}}_0$ ovat vakiovektoreita, mahdollisesti kompleksisia, ja lisäksi myös aaltovektori $\vec{\mathbf{k}}$ on mahdollisesti kompleksiarvoinen, jolloin se voidaan esittää reaali- ja imaginaariosiensa avulla $\vec{\mathbf{k}} = \vec{\mathbf{k}}' + i\vec{\mathbf{k}}''$, jossa $\vec{\mathbf{k}}', \vec{\mathbf{k}}'' \in \mathbb{R}$.

Yhtälö $\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}} = \text{vakio}$ määrää reaaliselle vektorille $\vec{\mathbf{k}}$ tason, jonka normaali on $\vec{\mathbf{k}}$. Tällöin siis $\vec{\mathbf{k}}'$ on vakiovaiheiden tason normaali ja $\vec{\mathbf{k}}''$ on vakioamplitudien tason normaali. Jos $\vec{\mathbf{k}}' \parallel \vec{\mathbf{k}}''$, kutsutaan tasoaaltoa homogeeniseksi. Linearisessa, homogeenisessa ja isotrooppisessa väliaineessa, joka ei absorboi, tasoaalto on homogeeninen, ja näin ollen sen aaltovektori on aallon etenemissuunnassa. Mikäli tasoaalto on epähomogeeninen, aaltovektorin reaali-osa $\vec{\mathbf{k}}'$ on kohtisuorassa aallon tasavaihepintoja vasten, kun taas aaltovektorin imaginaariosa $\vec{\mathbf{k}}''$ on kohtisuorassa aallon tasa-amplitudipintoja vasten.

Tasoaaltojen matemaattisesta esityksestä saadaan Maxwellin yhtälöt kirjoitettua lähteettömässä tilanteessa suoraviivaisesti muodossa

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_0 &= 0, \\ \vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{H}}_0 &= 0, \\ \vec{\mathbf{k}} \times \vec{\mathbf{E}}_0 &= \omega\mu\vec{\mathbf{H}}_0, \\ \vec{\mathbf{k}} \times \vec{\mathbf{H}}_0 &= -\omega\varepsilon\vec{\mathbf{E}}_0.\end{aligned}\tag{3.8}$$

3.3 Rajapinta- ja reunaehdot

Tarkastellaan sähkömagneettisen kentän käyttäytymistä kahden väliaineen rajapinnassa. Merkitään kenttiä ensimmäisessä väliaineessa parilla $(\vec{\mathbf{E}}_1, \vec{\mathbf{H}}_1)$ ja toisessa väliaineessa parilla $(\vec{\mathbf{E}}_2, \vec{\mathbf{H}}_2)$. Kun väliaineen i permittiivisyys ε_i ja permeabilitteetti μ_i ovat vakioita, voidaan symmetristen Maxwellin yhtälöiden integroidusta

muodosta johtaa reunaehdot

$$\begin{aligned}
 \vec{\mathbf{E}}_{1t} - \vec{\mathbf{E}}_{2t} &= -\vec{\mathbf{M}}_s \times \hat{\mathbf{n}}, \\
 \vec{\mathbf{H}}_{1t} - \vec{\mathbf{H}}_{2t} &= \vec{\mathbf{J}}_s \times \hat{\mathbf{n}}, \\
 D_{1n} - D_{2n} &= \rho_s, \\
 B_{1n} - B_{2n} &= m_s.
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Nyt ρ ja m ovat mitä tahansa sähköisiä ja magneettisia pintavaraustiheyksiä rajapinnassa ja vastaavasti $\vec{\mathbf{J}}_s$ ja $\vec{\mathbf{M}}_s$ mitkä tahansa sähköiset ja magneettiset rajapintavirrat.

Kenttien tangentialisten komponenttien erotukset vastaavat siis nyt rajapintavirtoja ja normaalikomponenttien erotukset rajapinnan varaustiheyksiä. Toisaalta kenttävektorien tangenti- ja normaalikomponentit voidaan esittää pinnan normaalivektorin $\hat{\mathbf{n}}$ avulla, esimerkiksi sähkökentälle

$$\vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{E}}_t + \vec{\mathbf{E}}_n = \hat{\mathbf{n}} \times (\vec{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{n}}) + \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{E}}). \tag{3.10}$$

Tämän ja magneettikentän vastaavan hajotelman avulla saadaan tangentialiset reunaehdot muotoon

$$\begin{aligned}
 (\vec{\mathbf{E}}_2 - \vec{\mathbf{E}}_1) \times \hat{\mathbf{n}} &= -\vec{\mathbf{M}}_s, \\
 (\vec{\mathbf{H}}_2 - \vec{\mathbf{H}}_1) \times \hat{\mathbf{n}} &= \vec{\mathbf{J}}_s.
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Yllä pintavirrat ovat määritelmänsä mukaan tangentialisia, jolloin oikean puolen ristitulotermit siistiytyvät pelkiksi pintavirtatermeiksi. Normaalikomponenttien yhtälöiden muoto ei hajotelmassa muutu, sillä esimerkiksi sähkövuon tiheydelle saadaan $\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{D}} = D_n$.

Saatuja reunaehtoja voidaan muokata vastaamaan erilaisia sähköisiä kappaleita. Esimerkiksi ideaalisen eristeen tapauksessa pintavaraustiheydet ja pintavirrat katoavat, jolloin saadaan lähteettömiksi reunaehdoiksi kutsutut ehdot.

Maxwellin yhtälöihin voidaan vaihtoehtoisesti liittää reunaehtoja, jotka mahdollistavat ongelmien käsittelyn sisemmästä väliaineesta riippumattomasti. Tällaisia reunaehtoja ovat esimerkiksi erilaisten täydellisten johteiden reunaehdot sekä epätäydellisen johteen reunaehto, niin kutsuttu impedanssireunaehto (*IBC, Impedance Boundary Condition*) [25].

3.4 Maxwellin jännitystensori

Tutkielman myöhemmissä luvuissa käsitellään ilmiöitä, jotka liittyvät oleellisesti sähkömagneettisen kentän liikemäärään. Kvantitatiivisesti tämän liikemäärän vuota ja siitä seuraavia vääntöilmiöitä voidaan käsitellä Lorentzin voiman tensorimuodon avulla. Ulkoisissa kentissä $\vec{\mathbf{E}}$ ja $\vec{\mathbf{B}}$ nopeudella $\vec{\mathbf{v}}$ tilavuudessa V liikkuviin varauksiin ρ kohdistuva voima on

$$\vec{\mathbf{F}} = \int_V (\vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{B}}) \rho dV = \int_V (\rho \vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{J}} \times \vec{\mathbf{B}}) dV, \quad (3.12)$$

jolloin voima tilavuusyksikköä kohti voidaan kirjoittaa muodossa

$$\vec{\mathbf{f}} = \rho \vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{J}} \times \vec{\mathbf{B}}. \quad (3.13)$$

Käyttämällä Gaussin ja Maxwellin-Ampèren lakeja saadaan yhtälö (3.13) kirjoitettua pelkkien kenttien $\vec{\mathbf{E}}$ ja $\vec{\mathbf{B}}$ avulla,

$$\vec{\mathbf{f}} = \varepsilon_0 (\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}}) \vec{\mathbf{E}} + \left(\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \vec{\mathbf{B}} - \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} \right) \times \vec{\mathbf{B}}. \quad (3.14)$$

Yhtälöstä ristitermit saadaan siistittyä edelleen, esimerkiksi jälkimmäisin termi tulon derivointisäännön ja Faradayn lain avulla, ja saadaan

$$\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\mathbf{E}} \times \vec{\mathbf{B}}) = \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} \times \vec{\mathbf{B}} + \vec{\mathbf{E}} \times \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} = \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} \times \vec{\mathbf{B}} - \vec{\mathbf{E}} \times (\nabla \times \vec{\mathbf{E}}), \quad (3.15)$$

eli

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} \times \vec{\mathbf{B}} = \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\mathbf{E}} \times \vec{\mathbf{B}}) + \vec{\mathbf{E}} \times (\nabla \times \vec{\mathbf{E}}). \quad (3.16)$$

Sijoittamalla saatu tulos ja lisäämällä ennalta viisaasti yhtälöön nolla muodossa $(\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}}) \vec{\mathbf{B}}$ yhtälöön (3.13) saadaan

$$\vec{\mathbf{f}} = \varepsilon_0 [(\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}}) \vec{\mathbf{E}} - \vec{\mathbf{E}} \times (\nabla \times \vec{\mathbf{E}})] + \frac{1}{\mu_0} [(\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}}) \vec{\mathbf{B}} - \vec{\mathbf{B}} \times (\nabla \times \vec{\mathbf{B}})] - \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\mathbf{E}} \times \vec{\mathbf{B}}). \quad (3.17)$$

Vektorikentän ristitulo roottorinsa kanssa saadaan sievennettyä käyttämällä vektorikentän neliön gradientin kaavaa, esimerkiksi sähkökentälle pätee

$$\nabla (E^2) = 2(\vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla) \vec{\mathbf{E}} + 2\vec{\mathbf{E}} \times (\nabla \times \vec{\mathbf{E}}), \quad (3.18)$$

eli

$$\vec{\mathbf{E}} \times (\nabla \times \vec{\mathbf{E}}) = \frac{1}{2} \nabla (E^2) - (\vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla) \vec{\mathbf{E}}. \quad (3.19)$$

Sama pätee myös magneettikentälle. Näin päästään varsin symmetriseen muotoon

$$\begin{aligned} \vec{f} = \varepsilon_0 [(\nabla \cdot \vec{E})\vec{E} + (\vec{E} \cdot \nabla)\vec{E}] + \frac{1}{\mu_0} [(\nabla \cdot \vec{B})\vec{B} + (\vec{B} \cdot \nabla)\vec{B}] \\ - \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2 \right) - \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} (\vec{E} \times \vec{B}). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Siirrytään tensorimuotoiseen yhtälöön esittelemällä Maxwellin jännitystensori

$$T_{ij} = \varepsilon_0 \left(E_i E_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} E^2 \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(B_i B_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} B^2 \right). \quad (3.21)$$

Nyt yhtälöstä (3.20) löytyvät jännitystensorin divergenssi ja Poyntingin vektorin $\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B}$ aikaderivaatta, eli lopulta tensorimuodossa yhtälö (3.13) saa yksinkertaisen muodon

$$\vec{f} = \nabla \cdot \mathbb{T} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{S}}{\partial t}. \quad (3.22)$$

Kokonaisvoima saadaan integraalina kokonaistilavuuden yli, jolloin divergenssilauseen $\int_V \nabla \cdot \vec{A} dV = \oint_S \vec{A} \cdot \hat{n} dS$ avulla, missä \vec{A} on yleinen vektorikenttä, tuloksena on

$$\vec{F} = \oint_S \mathbb{T} \cdot \hat{n} dS - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{d}{dt} \int_V \vec{S} dV. \quad (3.23)$$

Fysikaalisesti jännitystensori \mathbb{T} siis kertoo voiman pinta-alayksikköä kohden. Jännitystensorin diagonaalialkiot T_{ii} kertovat säteilypaineen ja loput alkiot leikkausjännityksen. Yhtälön (3.23) jälkimmäinen termi kertoo säteilykenttien kuljetaman energiavuon muutoksen, ja tämän termin keskiarvo yhdessä jaksonajassa on nolla. Keskimääräinen voima on näin ollen

$$\langle \vec{F} \rangle = \oint_S \langle \mathbb{T} \rangle \cdot \hat{n} dS. \quad (3.24)$$

Jatkossa käsiteltävät suureet oletetaan aikakeskiarvoistetuiksi, ja merkintöjen yksinkertaistamisen vuoksi keskiarvoistukset jätetään eksplisiittisesti merkitsemättä, ellei samanaikaisesti käsitellä keskiarvoistamattomia suureita.

Vastaavasti kokonaisvääntömomentti \vec{N} pisteessä \vec{r} saadaan ristitulona $\vec{N} = \vec{r} \times \vec{F}$, eli

$$\vec{N} = \oint_S \vec{r} \times (\mathbb{T} \cdot \hat{n}) dS. \quad (3.25)$$

Tunnettua Maxwellin jännitystensoria käyttämällä voidaan siis ratkaista muun muassa kappaleen pyörimisdynamiikka sähkömagneettisten kenttien vaikutuksesta.

4. Sironnan integraaliyhtälöesitys

Systeemissä, jossa on sähkömagneettinen aalto ja sen kanssa vuorovaikuttavia kappaleita, esiintyy aina sirontaa, eli vuorovaikutuksessa kokonaiskenttä muuttuu ja vuorovaikutuksen läpikäynyttä kenttää kutsutaan sironneeksi aalloksi. Kun saapuva aalto, esimerkiksi tasoaalto, ja sirottavan kappaleen geometria tunnetaan, voidaan siroavat kentät ratkaista eri tavoilla. Sirottajan sisäiset ja ulkoiset kentät voidaan ratkaista esimerkiksi kehittämällä ratkaisu sarjaksi Maxwellin yhtälöiden tunnettuja ratkaisuja geometrian suhteen hyödyllisessä koordinaatistossa ja asettamalla kertoimet samoiksi. Pallogeometrialla saadaan tällöin Mie-sirontaratkaisu ja puoliavaruuksien rajapinnan tapauksessa Fresnel-kertoimet. Kehitelmämenetelmät toimivat kuitenkin vain hyvin rajalliselle joukolle erilaisia geometrioita, joskin olemassa olevat ratkaisut toimivatkin erittäin hyvin näille erikoistapauksille.

Eräs toinen sirontaongelman ratkaisumenetelmä on diskretoida Maxwellin yhtälöt differenssiyhtälöiksi ja diskretoida kappaleen geometria hilaverkon avulla. Tällöin muodostuu harva lineaarinen yhtälöryhmä, joka on ratkaistavissa hilan jokaisessa pisteessä. Menetelmä mahdollistaa mielivaltaisten geometrioiden käsittelyn ja on suhteellisen yksinkertainen implementoida, mutta ei hyödynnä tunnettuja Maxwellin yhtälöiden ratkaisuja tai ole kustannustehokkain tapa, sillä koko avaruus, kappale ja sen ympäristö, on diskretoitava näissä menetelmissä.

Sironnan integraaliyhtälömenetelmät muodostavat kolmannen menetelmäryhmän. Tässä luvussa keskitytään tämän ryhmän edustajiin, pintaintegraaliyhtälömenetelmiin. Kyseisissä menetelmissä pyritään korvaamaan fysikaalinen sirottaja myöhemmin esiteltävän pintaekvivalenssiperiaatteen avulla ekvivalenteilla sähköisillä ja magneettisilla pintavirrantiheyksillä, jotka kokonaiskenttien \vec{H} ja \vec{E} avulla ovat

$$\begin{aligned}\vec{J}_s(\vec{x}) &= \hat{n} \times \vec{H}, \\ \vec{M}_s(\vec{x}) &= -\hat{n} \times \vec{E}.\end{aligned}\tag{4.1}$$

Ekvivalentit pintavirrantiheydet ovat matemaattisia apusuureita, joiden avulla si-

ronnut kenttä on mahdollista laskea homogeenisessä avaruudessa.

Hyödynnetään vektorimuotoista Greenin teoremaa, jonka mukaisesti sirottavan kappaleen pinnalla vaikuttavat kokonaiskenttien tangentialikomponentit pitävät sisällään kaiken tiedon kappaleen sisäisistä kentistä. Tällöin samaistamalla kokonaiskenttien tangentialiosat ekvivalenttien pintavirrantiheyksien kanssa saadaan kokonaiskenttien pintaintegraaliesitykset.

Pintavirrantiheydet voidaan ratkaista käyttämällä hyväksi reunaehtoja. Esimerkiksi kun sirottaja on täydellinen sähköjohdin, saapuvan sähkökentän tangentialinen komponentti katoaa. Tällöin virrantiheys voidaan kirjoittaa integraaliyhtälönä saapuvan sähkökentän suhteen. Tätä ja vastaavia eri reunaehdoilla rakennettuja yhtälöitä kutsutaan sähkökentän tapauksessa sähkökentän integraaliyhtälöiksi (EFIE, *Electric Field Integral Equation*) ja magneettikenttien tapauksessa magneettikentän integraaliyhtälöiksi (MFIE).

Integraaliesityksistä asetettujen reunaehtojen avulla rakennettujen integraaliyhtälöiden sisältämät virrantiheydet $\vec{\mathbf{J}}_s(\vec{\mathbf{x}})$ ja $\vec{\mathbf{M}}_s(\vec{\mathbf{x}})$ voidaan ratkaista numeerisesti erilaisten raja-alkiomenetelmien (BEM, *Boundary Element Method*) avulla. Raja-alkiomenetelmissä pintavirrantiheydet kehitetään sarjoiksi jonkin kantafunktiojoukon $\{f_n\}$, $n = 1, \dots, N$ avulla. Summissa on N tuntematonta kerrointa j_n ja m_n ,

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{J}}_s(\vec{\mathbf{x}}) &\approx \sum_{n=1}^N j_n \vec{\mathbf{f}}_n(\vec{\mathbf{x}}), \\ \vec{\mathbf{M}}_s(\vec{\mathbf{x}}) &\approx \sum_{n=1}^N m_n \vec{\mathbf{f}}_n(\vec{\mathbf{x}}).\end{aligned}\tag{4.2}$$

Yllä $\vec{\mathbf{f}}_n(\vec{\mathbf{x}})$ on tangentialinen vektoriarvoinen kantafunktio, joka on määritelty sirottajan pinnalla. Seuraavaksi muodostetaan sisätulo integraaliyhtälön kanssa jokaisen kantafunktion kanssa, jolloin muodostuu kaksi kappaletta $N \times N$ lineaarisia yhtälöryhmiä.

Pintaintegraaliyhtälömenetelmien etuna on niiden perustuminen tunnettuihin Maxwellin yhtälöiden ratkaisuihin, mikä tekee menetelmistä tehokkaita. Ne eivät myöskään ole rajoittuneita tiettyihin geometrioihin, vaan sirottajat voivat olla lähes mielivaltaisen muotoisia diskretoinnin rajoissa. Menetelmissä ongelmat rajoittuvat myös tarkasti sirontaongelman kannalta relevantille alueelle, eikä laskentatehoa tarvitse tuhjata tyhjän avaruuden alueella.

Kolikon kääntöpuolena menetelmä on hankalahko implementoida, sillä rat-

kaistavana on suuri joukko moniulotteisia, useassa tapauksessa vahvasti singulaarisia integraaleja, ja geometrioiden on oltava vähintäänkin paloittain homogeenisiä, ja jokaisella homogeenisellä alueella on käytettävä alueelle ominaisia Greenin funktioita ja integraaliyhtälöitä. Lisäksi ratkaistavat matriisiyhtälöt eivät ole harvoja, kuten elementtimenetelmissä, jolloin ongelman kasvaessa on hyödynnettävä entistä monimutkaisempia optimointimenetelmiä.

Yllä mainitut vahvuudet ja heikkoudet huomioiden tässä luvussa esitellään perusta eräälle pintaintegraaliyhtälöesitykselle, jonka avulla työn numeerisessa osuudessa ratkaistaan tähtienvälisen pölyhiukkasen dynamiikkaan kytkeytyvä sirontaongelma.

4.1 Sironnan pintaintegraaliesitys

Sähkömagneettisen sironnan integraaliyhtälöt voidaan ilmaista yleisessä muodossa, joka soveltuu niin sironta- kuin antenniongelmiin. Integraaliyhtälöille tavoitellaan pintaintegraalien avulla ilmaistua muotoa. Pintaintegraalimuotoiset yhtälöt soveltuvat ongelmien ratkaisujen kytkemiseen selkeämmin johonkin tiettyyn sirottajan muotoon verrattuna tavanomaisiin reunaehtoihin nojautuvaan aaltoyhtälöratkaisuun. Ensin on ilmaistava sähkö- ja magneettikentät yleisessä muodossa integraalien avulla, minkä jälkeen erilaisia reunaehtoja vastaavia integraaliyhtälöformulaatioita on muodostettavissa. Alaluvun loppuun asti edetään Poggion ja Millerin [26] sekä Strattonin [27] mallien mukaisesti sironneiden kenttien integraalimuotoja johdettaessa.

Käsitellään aikaharmonista ongelmaa symmetrisoitujen Maxwellin yhtälöiden

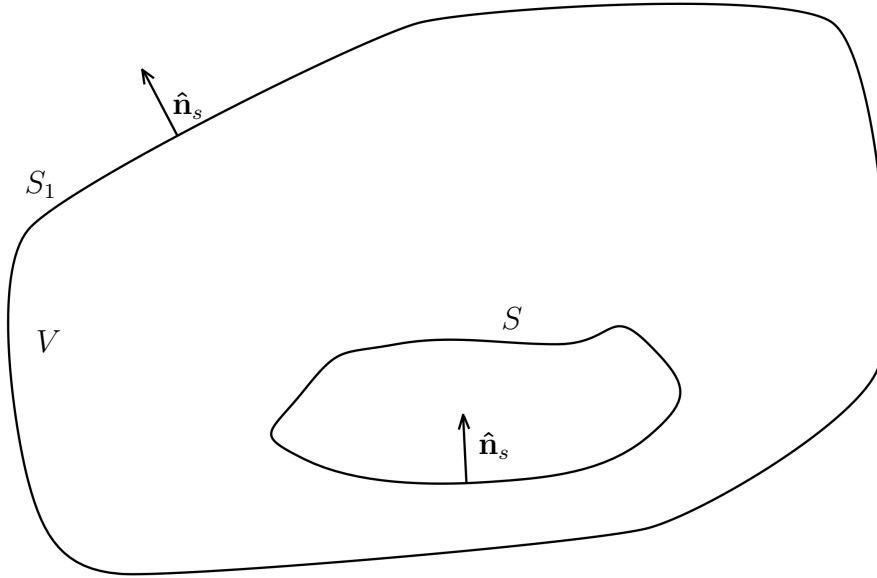
$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{\mathbf{E}} &= i\omega\mu\vec{\mathbf{H}} - \vec{\mathbf{M}}, & \nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} &= \frac{\rho}{\epsilon}, \\ \nabla \times \vec{\mathbf{H}} &= -i\omega\epsilon\vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{J}}, & \nabla \cdot \vec{\mathbf{H}} &= \frac{m}{\mu}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

jatkuvuusyhtälöiden

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{J}} = i\omega\rho, \quad \nabla \cdot \vec{\mathbf{M}} = i\omega m, \quad (4.4)$$

ja lineaarisen, homogeenisen ja isotrooppisen väliaineen vektorimuotoisten aaltoyhtälöiden

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \vec{\mathbf{E}} - k^2\vec{\mathbf{E}} &= i\omega\mu\vec{\mathbf{J}} - \nabla \times \vec{\mathbf{M}}, \\ \nabla \times \nabla \times \vec{\mathbf{H}} - k^2\vec{\mathbf{H}} &= i\omega\epsilon\vec{\mathbf{M}} + \nabla \times \vec{\mathbf{J}}, \end{aligned} \quad (4.5)$$



Kuva 5: Sirontaongelma on rajattu tilavuuteen V , jonka reunapinta on S_1 , ja jossa sijaitsee säteilyä sirottavia dielektrisiä kappaleita, joiden rajapintoja merkitään pinnaksi S . Pintojen normaalivektoreiden suunnat on valittu kuvan mukaisesti.

avulla. Yllä \vec{E} ja \vec{H} ovat sähkö- ja magneettivektorikentät, vastaavasti \vec{J} ja \vec{M} ovat sähkö- ja magneettivirrantiheydet ja ρ ja m sähköiset ja magneettiset varaustiheydet. Symmetrisoidessa Maxwellin yhtälöt otetaan siis käyttöön tietävästi epäfyysikaalisia magneettisia lähdetermejä, joiden avulla yhtälöiden keskinäinen symmetrisyys alleviivautuu entisestään.

Sirontaongelmassa nämä annetut yhtälöt pyritään ratkaisemaan tilavuudessa V , jossa erilaiset lähdetermit muodostavat herättävän kentän, niin kutsutun primäärkentän, ja jossa on erilaisia väliaineita eri sähköisin ominaisuuksin. Ensimmäinen askel on soveltaa vektorimuotoista Greenin lausetta

$$\int_V (\vec{Q} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{P} - \vec{P} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{Q}) dV = \int_{\Sigma} (\vec{P} \times \nabla \times \vec{Q} - \vec{Q} \times \nabla \times \vec{P}) \cdot d\vec{S}, \quad (4.6)$$

jossa $\Sigma = \partial V$ tai $\Sigma = S + S_1$ on tilanteesta riippuen joko pelkkä tilavuuden V reuna tai rajapintojen ja tilavuuden V reunojen S ja S_1 summa ja \vec{Q} ja \vec{P} ovat tilavuudessa V kahdesti jatkuvasti derivoituvia vektorifunktioita.

Valitaan vektorikentiksi \vec{P} ja \vec{Q} annettujen reunaehtojen sallimin vapauksin $\vec{P} = \vec{E}$ ja $\vec{Q} = \phi \hat{a}$, jossa $\phi = \frac{e^{ikr}}{r}$, $r = |\vec{x} - \vec{x}'|$ on Helmholtzin operaattorin

Greenin funktion muotoa ja v on mielivaltainen yksikkövakiovektori. Tällöin

$$\begin{aligned}
\nabla \times \vec{\mathbf{Q}} &= \nabla \times (\phi \hat{\mathbf{a}}) = \nabla \phi \times \hat{\mathbf{a}} + \phi \nabla \times \hat{\mathbf{a}} = \nabla \phi \times \hat{\mathbf{a}} + 0 = \nabla \phi \times \hat{\mathbf{a}}, \\
\nabla \times \nabla \times \vec{\mathbf{Q}} &= \nabla \times (\nabla \phi \times \hat{\mathbf{a}}) \\
&= \nabla \phi (\nabla \cdot \hat{\mathbf{a}}) - \hat{\mathbf{a}} \nabla \cdot (\nabla \phi) + (\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla) \nabla \phi - (\nabla \phi \cdot \nabla) \hat{\mathbf{a}} \\
&= 0 + \hat{\mathbf{a}} k^2 \phi + (\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla) \nabla \phi - 0 \\
&= \nabla (\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) + \hat{\mathbf{a}} k^2 \phi,
\end{aligned} \tag{4.7}$$

eli saadaan Greenin lauseen vasemman puolen integrandin ensimmäiseksi termiksi

$$\begin{aligned}
\vec{\mathbf{P}} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{\mathbf{Q}} &= \vec{\mathbf{E}} \cdot (\nabla (\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) + \hat{\mathbf{a}} k^2 \phi) \\
&= k^2 \phi \vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{E}} (\nabla (\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi)) \\
&= k^2 \phi \vec{\mathbf{E}} + \nabla \cdot ((\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) \vec{\mathbf{E}}) - (\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) (\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}}) \\
&= k^2 \phi \vec{\mathbf{E}} + \nabla \cdot ((\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) \vec{\mathbf{E}}) - \frac{\rho}{\varepsilon} (\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi).
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Integrandin toinen termi on vektoriaaltoyhtälöiden (4.5) avulla yksinkertaisesti

$$\begin{aligned}
\vec{\mathbf{Q}} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{\mathbf{P}} &= \phi \hat{\mathbf{a}} \cdot (k^2 \vec{\mathbf{E}} + i\omega\mu \vec{\mathbf{J}} - \nabla \times \vec{\mathbf{M}}) \\
&= k^2 \phi \vec{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{a}} + i\omega\mu \phi \vec{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{a}} - \phi (\nabla \times \vec{\mathbf{M}}) \cdot \hat{\mathbf{a}}.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Greenin lauseen oikean puolen termeiksi saadaan vastaavanlaisella menettelyllä

$$\begin{aligned}
\vec{\mathbf{P}} \times \nabla \times \vec{\mathbf{Q}} &= \vec{\mathbf{E}} \times (\nabla \phi \times \hat{\mathbf{a}}) = (\vec{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{a}}) \nabla \phi - (\vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla \phi) \hat{\mathbf{a}}, \\
\vec{\mathbf{Q}} \times \nabla \times \vec{\mathbf{P}} &= \phi \hat{\mathbf{a}} \times (i\omega\mu \vec{\mathbf{H}} - \nabla \times \vec{\mathbf{M}}) = i\omega\mu \phi \hat{\mathbf{a}} \times \vec{\mathbf{H}} - \phi \hat{\mathbf{a}} \times \nabla \times \vec{\mathbf{M}}.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Koska $d\vec{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{n}} dS$, saadaan lopulta integraalitermeiksi skalaarikolmitulon ominaisuuksien avulla

$$\begin{aligned}
(\vec{\mathbf{P}} \times \nabla \times \vec{\mathbf{Q}}) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= (\vec{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{a}}) (\nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{n}}) - (\vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla \phi) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{a}}), \\
(\vec{\mathbf{Q}} \times \nabla \times \vec{\mathbf{P}}) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= i\omega\mu (\phi \hat{\mathbf{a}} \times \vec{\mathbf{H}}) \cdot \hat{\mathbf{n}} - \phi (\hat{\mathbf{a}} \times \nabla \times \vec{\mathbf{M}}) \cdot \hat{\mathbf{n}} \\
&= i\omega\mu \phi (\vec{\mathbf{H}} \times \hat{\mathbf{n}}) \cdot \hat{\mathbf{a}} - \phi (\vec{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{n}}) \cdot \hat{\mathbf{a}}.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Kaikki integraalien termit lukuun ottamatta termiä $\nabla \cdot ((\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) \vec{\mathbf{E}})$ ovat verrannollisia mielivaltaiseen vakiovektoriin $\hat{\mathbf{a}}$. Käyttämällä divergenssilauseetta saadaan viimeinenkin termeistä hyödylliseen muotoon:

$$\int_V \nabla \cdot ((\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) \vec{\mathbf{E}}) dV = \int_{\Sigma} ((\hat{\mathbf{a}} \cdot \nabla \phi) \vec{\mathbf{E}}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \int_{\Sigma} (\vec{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) (\nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{a}}) dS, \tag{4.12}$$

eli kaikki integraalien termit ovat samalla tavalla verrannollisia vektorin $\hat{\mathbf{n}}$ kanssa, jolloin Greenin lauseen vasen ja oikea puoli muodostavat yhtälön

$$\begin{aligned} & \int_V i\omega\mu\phi\vec{\mathbf{J}} + \phi\nabla \times \vec{\mathbf{M}} - \frac{\rho}{\varepsilon}\nabla\phi dV \\ &= \int_{\Sigma} (\vec{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\nabla\phi + (\nabla\phi \cdot \hat{\mathbf{n}})\vec{\mathbf{E}} - (\vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla\phi)\hat{\mathbf{n}} - i\omega\mu\phi(\vec{\mathbf{H}} \times \hat{\mathbf{n}}) + \phi(\vec{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{n}}) dS. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Siistitään yhtälöä edelleen. Vektori-identiteetin $(\nabla\phi \cdot \hat{\mathbf{n}})\vec{\mathbf{E}} - (\vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla\phi)\hat{\mathbf{n}} = \vec{\mathbf{E}} \times (\nabla\phi \times \hat{\mathbf{n}})$, tulon derivointisäännön $\nabla \times (\phi\vec{\mathbf{A}}) = \nabla\phi \times \vec{\mathbf{A}} + \phi\nabla \times \vec{\mathbf{A}}$ sekä Stokesin lauseen avulla saadaan

$$\int_V \phi\nabla \times \vec{\mathbf{M}} dV = \int_V \nabla \times (\phi\vec{\mathbf{M}}) - \nabla\phi \times \vec{\mathbf{M}} dV = \int_{\Sigma} \hat{\mathbf{n}} \times (\phi\vec{\mathbf{M}}) dS - \int_V \nabla\phi \times \vec{\mathbf{M}} dV, \quad (4.14)$$

jolloin päädytään viimein esitykseen, jossa virrantiheydet tilavuuden V sisällä on ilmaistu pintaintegraalien avulla:

$$\int_V i\omega\mu\phi\vec{\mathbf{J}} + \nabla\phi \times \vec{\mathbf{M}} + \frac{\rho}{\varepsilon}\nabla\phi dV = \int_{\Sigma} (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}}) \times \nabla\phi + (\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{E}})\nabla\phi + i\omega\mu(\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{H}})\phi dS. \quad (4.15)$$

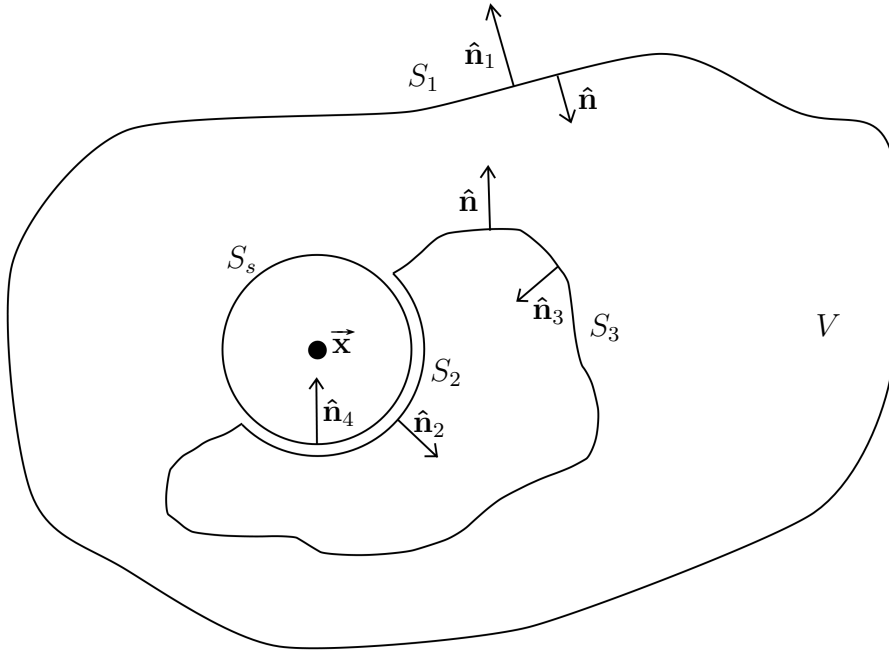
Yhtälön (4.15) käyttökelpoisuus eri tilanteissa riippuu siitä, millaisia derivoituvuus- ja jatkuvuusehtoja sähkökentällä $\vec{\mathbf{E}}$ ja funktiolla $\vec{\mathbf{Q}}$ on. Lisäksi Greenin funktiolla ϕ on singulariteetti lähdepisteessä $\vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{x}}'$. Tapaukset, joissa tarkastelupiste $\vec{\mathbf{x}}$ on rajapinnoilla tai lähdepisteessä, on siis eristettävä integraaliyhtälöstä, jotta sillä käytännössä olisi ratkaisuja.

Tarkastellaan siis kuvan 5 kaltaista esimerkkialuetta tilanteessa, jossa lähdepiste on kappaleen pinnalla S . Suljetaan lähdepiste pallokuoren S_s sisälle ja deformaadaan kappaleen pintaa $S \rightarrow S_2 + S_3$, jossa S_2 vastaa kappaleen reunan painauma kappaleen sisälle, kun pallokuori asetetaan paikoilleen ja $S_3 \rightarrow S$, kun pallokuori kutistetaan olemattomiin. Pintojen normaalivektorit $\hat{\mathbf{n}}$ ovat alueen V sisänormaaleita, kun taas normaalivektorit $\hat{\mathbf{n}}_i$ ovat normaalivektoreita pinnoilla S_i pois päin alueesta V , kuten kuvassa 6 esitetään.

Tarkastellaan aluksi pelkkiä pintaintegraaleja lähdepisteen ympäristössä,

$$I = \int_{S_s+S_2} (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}}) \times \nabla\phi + (\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{E}})\nabla\phi + i\omega\mu(\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{H}})\phi dS, \quad (4.16)$$

rajalla $r = |\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}'| \rightarrow 0$. Infinitesimaalisen lähellä lähdepistettä kaikki vaihetekijät tekijöissä ϕ ja $\nabla\phi$ voidaan jättää huomiotta ja käsitellä pelkkiä kenttien keskiarvoja



Kuva 6: Tilanne, jossa tarkastelupiste sijaitsee sirottavalla pinnalla S . Tässä tapauksessa tarkastelupiste on erotettava muusta kappaleesta pallopinnan sisälle ja pintaa S_i on deformoitava siten, että pallopinta ja kappaleen deformoitu pinta eivät kohtaa. Myöhemmin tilannetta tarkastellaan rajalla, jossa peittävä pinta kutistuu olemattomiin.

lähdepisteessä \vec{x}' . Nyt

$$\begin{aligned}
 \nabla' \phi &= \hat{x}_i \frac{\partial \phi}{\partial x'_i} = \hat{x}_i \frac{\partial}{\partial x'_i} \frac{e^{-ikr}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} = \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \hat{x}_i \frac{\partial}{\partial x'_i} e^{-ikr} + e^{-ikr} \hat{x}_i \frac{\partial}{\partial x'_i} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \\
 &= \frac{-ike^{-ikr}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \hat{x}_i \frac{\partial}{\partial x'_i} |\vec{x} - \vec{x}'| + e^{-ikr} \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \\
 &= \left(\frac{ike^{-ikr}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} + e^{-ikr} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|^2} \right) \hat{x} \\
 &= \left(\frac{1 + ikr}{r} \frac{e^{ikr}}{r} \right) \hat{x}.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Ylläolevan ja kenttien keskimääräisten arvojen avulla saadaan

$$I = \lim_{r \rightarrow 0} \left[-\vec{\mathbf{E}} \int_{S_s} d\Omega_s + \vec{\mathbf{E}} \int_{S_2} d\Omega_2 \right] = -\vec{\mathbf{E}}(\vec{x}) [4\pi - \Omega_2], \tag{4.18}$$

missä Ω_2 on pinnan S_2 pisteessä \mathbf{x} näkyvä avaruuskulma rajalla $r \rightarrow 0$. Yksityiskoh-
t aisemmin tilanne käsitellään esimerkiksi Volakiksen teoksessa [28]. Toisin sanoen
pinnalla S kenttä saadaan ottamalla kentän keskiarvo aivan pinnan sisä- ja ulko-
puolesta. Tämä voidaan yleistää mille tahansa rajapinnalle tilavuuden V sisällä ja

pudottaa alaindeksi tämän tiedon nojalla merkinnöistä. Jonkin pinnan ulkopuolella taas $\Omega = 0$. Sijoittamalla I yhtälöön (4.15) saadaan ilmaistua sähkökenttä

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{x}}) &= \frac{T(\vec{\mathbf{x}})}{4\pi} \int_V i\omega\mu\phi\vec{\mathbf{J}} + \nabla'\phi \times \vec{\mathbf{M}} + \frac{\rho}{\varepsilon}\nabla'\phi dV' \\ &\quad - \frac{T(\vec{\mathbf{x}})}{4\pi} \int_{S_1+S} (\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{E}}) \times \nabla'\phi + (\hat{\mathbf{n}}' \cdot \vec{\mathbf{E}})\nabla'\phi + i\omega\mu(\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{H}})\phi dS',\end{aligned}\quad (4.19)$$

missä $T(\vec{\mathbf{x}}) = (1 - \Omega/4\pi)^{-1}$ ja f_{S_1+S} on pintojen S_1 ja S pääarvointegraali. Magneettikenttä saadaan helposti korvaamalla kentät symmetristen Maxwellin yhtälöiden avulla, jolloin saadaan

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{x}}) &= \frac{T(\vec{\mathbf{x}})}{4\pi} \int_V i\omega\varepsilon\phi\vec{\mathbf{M}} + \vec{\mathbf{J}} \times \nabla'\phi + \frac{m}{\mu}\nabla'\phi dV' \\ &\quad - \frac{T(\vec{\mathbf{x}})}{4\pi} \int_{S_1+S} (\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{H}}) \times \nabla'\phi + (\hat{\mathbf{n}}' \cdot \vec{\mathbf{H}})\nabla'\phi - i\omega\varepsilon(\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{E}})\phi dS'.\end{aligned}\quad (4.20)$$

Nykykirjallisuudessa tässä muodossa ilmaistuja sironneiden kenttien integraaliyhtälöitä kutsutaan Stratton-Chu-yhtälöiksi [27].

4.2 Pintaintegraaliyhtälöiden johto ja diskretointi

Seuraavaksi muodostetaan sironneiden kenttien Stratton-Chu-yhtälöistä eräs dielektristen kappaleiden sironnassa yksikäsitteisiä ja resonanssittomia ratkaisuja tuottava [29] esitys, Poggio-Miller-Chan-Harrington-Wu-Tsai-esitys (PMCHWT). Kyseiseen esitykseen viitataan jatkossa pintaintegraaliesityksenä aina, kun sekaannuksen mahdollisuutta ei ole. Oletetaan kaikkien lähde-termien sijaitsevan kaukana sirottajista ja nimetään yhtälöiden (4.19) ja (4.20) tilavuusintegraalit niiden sisältämien lähdekenttien mukaisesti primäärkentiksi $\vec{\mathbf{E}}^i$ ja $\vec{\mathbf{H}}^i$, käsitellään mieltä valtaista määrää sirottavia pintoja S_i sekä sisällytetään kerroin $1/4\pi$ Greenin funktioon ϕ , jolloin saadaan tiiviimmin kirjoitettua

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{x}}) &= T(\vec{\mathbf{x}}) \left[\vec{\mathbf{E}}^i(\vec{\mathbf{x}}) - \int_{S_i} (\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{E}}) \times \nabla'\phi + (\hat{\mathbf{n}}' \cdot \vec{\mathbf{E}})\nabla'\phi + i\omega\mu(\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{H}})\phi dS' \right], \\ \vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{x}}) &= T(\vec{\mathbf{x}}) \left[\vec{\mathbf{H}}^i(\vec{\mathbf{x}}) - \int_{S_i} (\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{H}}) \times \nabla'\phi + (\hat{\mathbf{n}}' \cdot \vec{\mathbf{H}})\nabla'\phi - i\omega\varepsilon(\hat{\mathbf{n}}' \times \vec{\mathbf{E}})\phi dS' \right].\end{aligned}\quad (4.21)$$

Nyt niin kutsuttu pintaekvivalenssiperiaate [30] toteaa, että kentät tarkastelutilavuudessa V määräytyvät yksiselitteisesti saapuvista primäärikentistä ja kappaleiden pinnoille muodostuvisten kenttien tangenttikomponenteista, joita kutsutaan ekvivalenteiksi pintavirroiksi $(\vec{\mathbf{J}}_S, \vec{\mathbf{M}}_S)$, missä

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{J}}_S &= \hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{H}}, \\ \vec{\mathbf{M}}_S &= \vec{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{n}}.\end{aligned}\tag{4.22}$$

Maxwellin yhtälöiden ja ekvivalenttien pintavirtojen avulla voidaan ensin kirjoittaa [31]

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{E}} &= \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{H}}) = \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla \cdot \vec{\mathbf{J}}_S, \\ \hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{H}} &= \frac{1}{i\omega\epsilon} \nabla \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}}) = \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla \cdot \vec{\mathbf{M}}_S,\end{aligned}\tag{4.23}$$

jolloin kokonaisuudessaan kokonaiskentät ovat

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{x}}) &= T(\vec{\mathbf{x}}) \left[\vec{\mathbf{E}}^i(\vec{\mathbf{x}}) - \int_{S_i} -\vec{\mathbf{M}}_S \times \nabla' \phi + \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla' \cdot \vec{\mathbf{J}}_S \nabla' \phi + i\omega\mu \vec{\mathbf{J}}_S \phi dS' \right] \\ &= T(\vec{\mathbf{x}}) \left[\vec{\mathbf{E}}^i(\vec{\mathbf{x}}) + \int_{S_i} \vec{\mathbf{M}}_S \times \nabla' \phi - \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla' (\nabla' \cdot \vec{\mathbf{J}}_S) \phi - i\omega\mu \vec{\mathbf{J}}_S \phi dS' \right], \\ \vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{x}}) &= T(\vec{\mathbf{x}}) \left[\vec{\mathbf{H}}^i(\vec{\mathbf{x}}) - \int_{S_i} \vec{\mathbf{J}}_S \times \nabla' \phi + \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla' \cdot \vec{\mathbf{M}}_S \nabla' \phi + i\omega\epsilon \vec{\mathbf{M}}_S \phi dS' \right] \\ &= T(\vec{\mathbf{x}}) \left[\vec{\mathbf{H}}^i(\vec{\mathbf{x}}) - \int_{S_i} \vec{\mathbf{J}}_S \times \nabla' \phi + \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla' (\nabla' \cdot \vec{\mathbf{M}}_S) \phi + i\omega\epsilon \vec{\mathbf{M}}_S \phi dS' \right].\end{aligned}\tag{4.24}$$

Määritellään integrodifferentiaalioperaattorit \mathcal{L} ja \mathcal{K} [32]:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}[\vec{\mathbf{F}}] &\equiv \int_{S_i} k^2 \vec{\mathbf{F}} \phi + \nabla (\nabla' \cdot \vec{\mathbf{F}}) \phi dS', \\ \mathcal{K}[\vec{\mathbf{F}}] &\equiv \int_{S_i} \nabla' \times \vec{\mathbf{F}} \phi dS',\end{aligned}\tag{4.25}$$

jossa $k = \omega\sqrt{\epsilon\mu}$. Mikäli lähdeterminit sijaitsevat jossain pinnalla S_i , on operaattoreissa käsiteltävä jälleen integraalien pääarvoja. Nyt kokonaiskentät voidaan määritelyjen operaattoreiden avulla kirjoittaa tiiviisti

$$\begin{aligned}\Theta(\vec{\mathbf{x}}) \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{x}}) &= \vec{\mathbf{E}}^i(\vec{\mathbf{x}}) - \frac{\eta}{ik} \mathcal{L}[\vec{\mathbf{J}}_S] - \mathcal{K}[\vec{\mathbf{M}}_S], \\ \Theta(\vec{\mathbf{x}}) \vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{x}}) &= \vec{\mathbf{H}}^i(\vec{\mathbf{x}}) - \frac{1}{ik\eta} \mathcal{L}[\vec{\mathbf{M}}_S] + \mathcal{K}[\vec{\mathbf{J}}_S],\end{aligned}\tag{4.26}$$

missä $\eta = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}$ on väliaineen impedanssi ja $\Theta(\vec{\mathbf{x}}) = \frac{1}{T(\vec{\mathbf{x}})}$.

Saatuihin integraaliesityksiin ei vielä ole kiinnitetty mitään reunaehtoakaan kahden väliaineen rajapintaan, eli ne eivät ole vielä ratkaistavissa. Pintaintegraaliesitysyhtälöihin päästään, kun vaaditaan kenttien tangentialisten komponenttien olevan jatkuvia rajapinnassa. Määritellään merkintöjä lyhentämään niin kutsuttu tangentialkioperaattori $\gamma_t[\vec{\mathbf{F}}] \equiv -\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{F}}$ ja saadaan reunaehdoiksi

$$\begin{aligned}\gamma_t(\vec{\mathbf{E}}_1 - \vec{\mathbf{E}}_2) &= 0, \\ \gamma_t(\vec{\mathbf{H}}_1 - \vec{\mathbf{H}}_2) &= 0.\end{aligned}\tag{4.27}$$

Yhdistämällä kentät saadaan koottua tavoitellut pintaintegraaliesitysyhtälöt [26, 31, 32], jotka matriisimuodossa ovat

$$\begin{pmatrix} \frac{\eta_1}{ik_1}\gamma_t\mathcal{L}_1 + \frac{\eta_2}{ik_2}\gamma_t\mathcal{L}_2 & \gamma_t\mathcal{K}_1 + \gamma_t\mathcal{K}_2 \\ -\gamma_t\mathcal{K}_1 - \gamma_t\mathcal{K}_2 & \frac{1}{ik_1\eta_1}\gamma_t\mathcal{L}_1 + \frac{1}{ik_2\eta_2}\gamma_t\mathcal{L}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\mathbf{J}} \\ \vec{\mathbf{M}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_t\vec{\mathbf{E}}^i \\ \gamma_t\vec{\mathbf{H}}^i \end{pmatrix},\tag{4.28}$$

missä alaindeksillä 1 ja 2 erotetaan keskenään homogeeniset ja isotrooppiset tausta ja kappale. Erilaisia reunaehtoja käyttämällä ja yhdistelemällä niitä eri tavoin voidaan muodostaa mielivaltaisen monta menetelmää, joita on esimerkiksi listattu viitteessä [32].

Yleisiä pintaintegraaliesitysyhtälöitä voidaan ratkaista numeerisesti niin kutsutun momenttimenetelmän avulla. Momenttimenetelmä on elektrodynamiikan alalla vallitseva nimitys raja-alkiomenetelmälle (BEM) [33]. Yleisessä tapauksessa momenttimenetelmässä ratkaistaan operaattoriyhtälö

$$\mathcal{A}\vec{\mathbf{f}} = \vec{\mathbf{s}},\tag{4.29}$$

jossa \mathcal{A} on operaattori, $\vec{\mathbf{s}}$ on tunnettu lähde(kenttä) ja $\vec{\mathbf{f}}$ on tuntematon vastekenttä. Yhtälön numeerisessa käsittelyssä sovelletaan yleensä elementtimenetelmiä (FEM, *Finite Element Method*). Kehitetään $\vec{\mathbf{f}}$ sarjaksi vektorifunktioiden $\vec{\mathbf{f}}_1, \vec{\mathbf{f}}_2, \vec{\mathbf{f}}_3, \dots$, avulla:

$$\vec{\mathbf{f}} = \sum_n \alpha_n \vec{\mathbf{f}}_n,\tag{4.30}$$

jossa α_n ovat vakioita. Funktioita $\vec{\mathbf{f}}_n$ kutsutaan kantafunktioiksi. Kun momenttimenetelmää sovelletaan numeerisessa, katkaistaan sarja (4.30) äärelliseksi summaksi. Tämä vastaa tutkittavan pinnan jakamista hilaverkoksi, jonka jokaista hilaalkiota vastaa yksi kantafunktio.

Kantafunktiot voidaan valita hyvin vapaasti siten, että ne sopivat luonnollisesti yhteen annetun ongelman reunaehtojen kanssa. Pintaintegraaliesitysyhtälöiden tapauksessa on luontevaa jakaa sirottava pinta kolmioverkoksi ja kantafunktioiksi valita niin kutsutut Rao-Wilton-Glisson-kantafunktiot (RWG) [34]:

$$\vec{\mathbf{f}}_n(\vec{\mathbf{r}}) = \begin{cases} \frac{l_n}{2A_1}(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_1), & \vec{\mathbf{r}} \in S_1, \\ \frac{l_n}{2A_2}(\vec{\mathbf{r}}_2 - \vec{\mathbf{r}}), & \vec{\mathbf{r}} \in S_2, \\ 0, & \text{muutoin.} \end{cases} \quad (4.31)$$

Kantafunktion määritelmässä A_i on hila-alkion S_i pinta-ala, l_n on kolmioparin yhteisen sivun pituus ja vektorit $(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_1)$ sekä $(\vec{\mathbf{r}}_2 - \vec{\mathbf{r}})$ ovat kolmioelementtien vapaasta kärjestä $\vec{\mathbf{r}}_i$ lähtevät paikkavektorit. Valinta on luonteva, sillä RWG-funktiot ovat divergenssikonformisia funktioita, jotka pakottavat kahden vierekkäisen elementin väliset normaalikomponentit jatkuviksi ja mahdollistavat integrandeissa olevien singulariteettien heikentämisen [32].

Seuraavaksi operaattori \mathcal{A} diskretoidaan testifunktioiden avulla muodostamalla matriisiyhtälö

$$\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{b}}, \quad (4.32)$$

missä \mathbf{A} on niin kutsuttu systeemimatriisi, vektori $\vec{\mathbf{x}}$ sisältää diskretoidun tuntemattoman funktion vakiokertoimet ja vektori $\vec{\mathbf{b}}$ on herätevektori. Komponentit A_{mn} ja b_m saadaan L^2 -sisätuloon $\langle \vec{\mathbf{w}}, \vec{\mathbf{s}} \rangle = \int_{\Omega} \vec{\mathbf{w}}(\vec{\mathbf{r}}) \cdot \vec{\mathbf{s}}(\vec{\mathbf{r}}) d\Omega$ perustuvan testauksen avulla:

$$A_{mn} = \langle \vec{\mathbf{w}}_m, \mathcal{A}(\vec{\mathbf{f}}) \rangle, \quad b_m = \langle \vec{\mathbf{w}}_m, \vec{\mathbf{b}} \rangle, \quad m, n = 1, \dots, N. \quad (4.33)$$

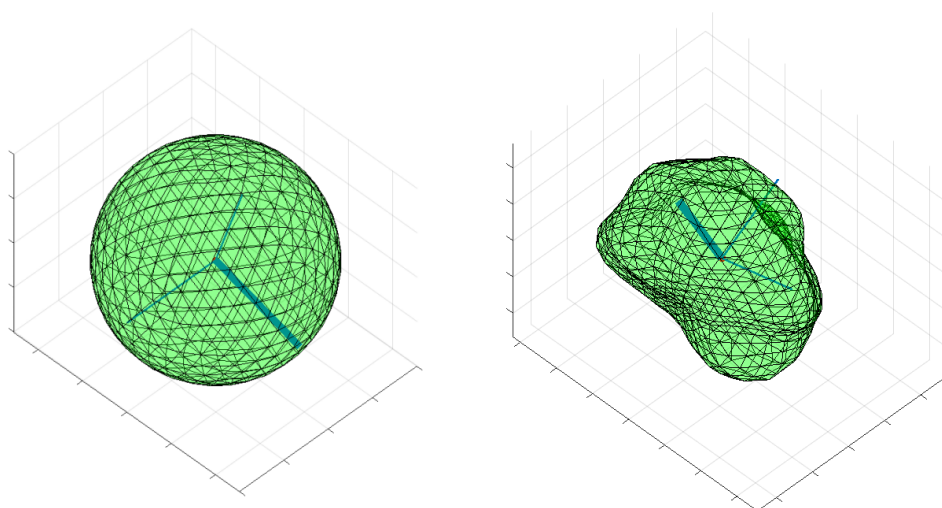
Testifunktiot $\vec{\mathbf{w}}_m$ valitaan siten, että matriisiyhtälö on voimassa operaattorin \mathcal{A} kuva-avaruudessa. Esimerkiksi pintaintegraaliesitykseen pohjautuvassa sironnassa virtatermeistä saatavat kentät $\vec{\mathbf{E}}$ ja $\vec{\mathbf{H}}$ kuuluvat kuva-avaruuteen H_{curl} , joten testifunktiot \mathbf{t} kuuluvat avaruuteen H_{div} . Testifunktioilla testataan esimerkiksi sisätulo $\langle \vec{\mathbf{t}}, \mathcal{L}(\vec{\mathbf{J}}) \rangle$ [32]. Nyt käsiteltävässä tapauksessa testifunktioiksi voidaan valita Galerkinin menetelmän [33] mukaisesti kantafunktiot itsensä, siis esimerkiksi sähköisen pintavirran tapauksessa $\vec{\mathbf{t}}_n = \vec{\mathbf{J}}_n$.

Yhtälön (4.28) systeemimatriisin ja herätevektoreiden alkiot lasketaan tässä luvussa kuvatulla menetelmällä, ja tuntemattomat kertoimet ratkaistaan kääntämällä systeemimatriisi. Ratkaistuista kertoimista voidaan lopulta ratkaista integraaliesitysten avulla sironneet kentät kaikkialla avaruudessa paitsi sirottavalla

pinnalla. Kuitenkin integrodifferentiaalioperaattorit \mathcal{L} ja \mathcal{K} ovat yhä singulaarisia termien ϕ , $\nabla\phi$ ja $\nabla^2\phi$ osalta. Singulaarisuuden käsittely tapahtuu työssä käytetyssä ohjelmistossa tekstin [35] esittämällä tavalla.

5. Dynamiikan numeerinen ratkaiseminen

Tähän mennessä on tarkasteltu niin pölyhiukkasen pyörimisdynamiikkaa, sähkömagneettisen sironnan pohjalla olevaa elektrodynamiikkaa sekä eksplisiittistä menetelmää ratkaista sirontaongelma pintaintegraaliyhtälömenetelmän avulla. Tässä luvussa muodostetaan aiemmin esiteltyjen osa-alueiden avulla viitekehys sähkömagneettisessa säteilykentässä vuorovaikuttavan pölyhiukkasen dynamiikan numeeriseen ratkaisemiseen. Lisäksi esitellään viitekehysten mukaisesti toteutetun Fortran-ohjelmiston algoritmeja sekä ohjelmiston testaamiseen laadittu testiympäristö. Hiukkasgeometrioina käytetään niin palloa, ellipsoidia kuin gaussista satunnaispalloa (*Gaussian Random Sphere*, GRS) [36].



Kuva 7: Diskretisoidut esimerkkigeometriat pallon ja gaussisen pallon tapauksissa. Ohjelmiston määrittämät hiukkasten pääakselit, joista suurinta hitausmomenttia vastaava on korostettuna, ovat kappaleiden massakeskipisteissä.

5.1 Geometrian käsittely

Työssä käytetty pintaintegraaliyhtälömenetelmä ratkoo homogeenisen, kolmioelementein monitahokkaaksi diskretoitun kappaleen sirontaa, josta seuraava dynamiikka on luontevaa ratkaista samaista diskretoitua kappaletta käyttäen. Homogeenisen monitahokkaan tapauksessa dynamiikan kannalta tärkeimmät hitaussuureet eli kappaleen massa, massakeskipiste ja hitausmomenttitensori, on mahdollista ratkaista tehokkaasti monitahokkaan kärkipisteiden avulla. Edetään kuten viitteessä [37].

Monitahokkaan massan, massakeskipisteen ja hitausmomenttitensorin määrittäminen vaatii kymmenen tilavuusintegraalin ratkaisua, kukin muotoa

$$\int_V p(x, y, z) dV, \quad (5.1)$$

missä funktio $p(x, y, z)$ on yksi kymmenestä polynomista

$$p(x, y, z) \in \{1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}. \quad (5.2)$$

Valitsemalla vektoriarvoinen funktio $\vec{\mathbf{F}}(x, y, z)$, joka toteuttaa ehdon $\nabla \cdot \vec{\mathbf{F}}(x, y, z) = p(x, y, z)$, voidaan divergenssilauseen avulla tilavuusintegraali muuttaa pintaintegraaliksi

$$\int_V p(x, y, z) dV = \int_V \nabla \cdot \vec{\mathbf{F}}(x, y, z) dV = \int_S \hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{F}}(x, y, z) dS = \sum_{f \in S} \int_f \hat{\mathbf{n}}_f \cdot \vec{\mathbf{F}}(x, y, z) dS, \quad (5.3)$$

missä $\hat{\mathbf{n}}$ on monitahokkaan pinnan S ulospäin osoittava yksikkönormaali ja f yksittäinen kolmiotahkopinta. Valitaan jokaista funktiota $p(x, y, z)$ vastaavat funktiot $\vec{\mathbf{F}}(x, y, z)$ taulukon 1 mukaisesti.

p	$\vec{\mathbf{F}}$	p	$\vec{\mathbf{F}}$
1	$(x, 0, 0)$	y^2	$(0, y^3/3, 0)$
x	$(x^2/2, 0, 0)$	z^2	$(0, 0, z^3/3)$
y	$(0, y^2/2, 0)$	xy	$(x^2y/2, 0, 0)$
z	$(0, 0, z^2/2)$	xz	$(0, 0, xz^2/2)$
x^2	$(x^3/3, 0, 0)$	yz	$(0, y^2z/2, 0)$

Taulukko 1: Massasuureiden laskemiseen käytetyt funktiot p sekä jokaista vastaava vektorifunktio $\vec{\mathbf{F}}$, jonka divergenssi $\nabla \cdot \vec{\mathbf{F}} = p$.

Ratkaistavat integraalit ovat muotoa $(\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{l}}) \int_f q(x, y, z) dS$, missä $\hat{\mathbf{l}}$ on jokin yksikkövektoreista $\hat{\mathbf{i}}$, $\hat{\mathbf{j}}$ tai $\hat{\mathbf{k}}$ ja $q(x, y, z) \in \{x, x^2, y^2, z^2, x^3, y^3, z^3, x^2y, xz^2, y^2z\}$. Jokaisella kolmiotahkolla on vastapäivään numeroidut kärkipisteet $\vec{\mathbf{P}}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 0, 1, 2$. Referenssikärjestä $\vec{\mathbf{P}}_0$ lähtee kaksi särmää $\vec{\mathbf{E}}_i = \vec{\mathbf{P}}_i - \vec{\mathbf{P}}_0 = (\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)$, $i = 1, 2$. Kolmiotahko voidaan parametrisoida lukujen u ja v avulla, missä $u \geq 0$, $v \geq 0$ ja $u + v \leq 1$, jolloin

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{P}}(u, v) &= \vec{\mathbf{P}}_0 + u\vec{\mathbf{E}}_1 + v\vec{\mathbf{E}}_2 \\ &= (x_0 + \alpha_1u + \alpha_2v, y_0 + \beta_1u + \beta_2v, z_0 + \gamma_1u + \gamma_2v) \\ &= (x(u, v), y(u, v), z(u, v)). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Nyt pinta-alkio voidaan esittää muodossa

$$dS = \left| \frac{\partial \vec{\mathbf{P}}}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{\mathbf{P}}}{\partial v} \right| dudv = \left| \vec{\mathbf{E}}_1 \times \vec{\mathbf{E}}_2 \right| dudv, \quad (5.5)$$

ja vastaavasti yksikkönormaali

$$\hat{\mathbf{n}}_f = \frac{\vec{\mathbf{E}}_1 \times \vec{\mathbf{E}}_2}{\left| \vec{\mathbf{E}}_1 \times \vec{\mathbf{E}}_2 \right|} = \frac{(\beta_1\gamma_2 - \beta_2\gamma_1, \alpha_2\gamma_1 - \alpha_1\gamma_2, \alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)}{\left| \vec{\mathbf{E}}_1 \times \vec{\mathbf{E}}_2 \right|} = \frac{(\delta_0, \delta_1, \delta_2)}{\left| \vec{\mathbf{E}}_1 \times \vec{\mathbf{E}}_2 \right|}. \quad (5.6)$$

Parametrisaation avulla voidaan integraalit kirjoittaa muodossa

$$(\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{l}}) \int_f q(x, y, z) dS = (\vec{\mathbf{E}}_1 \times \vec{\mathbf{E}}_2 \cdot \vec{\mathbf{l}}) \int_0^1 \int_0^{1-v} q(x(u, v), y(u, v), z(u, v)) dudv, \quad (5.7)$$

missä $x(u, v)$, $y(u, v)$ ja $z(u, v)$ ovat kolmiotahkon $\vec{\mathbf{P}}(u, v)$ komponentit. Yhtälön (5.7) oikean puolen integraalit voidaan laskea kaikilla mahdollisilla funktioilla q . Tuloksena saadaan termejä, jotka voidaan ilmaista kuuden apulausekkeen f_i, g_i , $i = 1, 2, 3$, avulla. Kyseiset apulausekkeet lasketaan argumenteille w , jotka ovat muotoa $x = (x_0, x_1, x_2)$, $y = (y_0, y_1, y_2)$ ja $z = (z_0, z_1, z_2)$ algoritmin

$$\begin{aligned} f_1(w) &= a + w_2, \\ f_2(w) &= c + w_2f_1(w), \\ f_3(w) &= w_0b + w_1c + w_2f_2(w), \\ g_i(w) &= f_2(w) + w_i(f_1(w) + w_i), \end{aligned} \quad (5.8)$$

avulla, missä $a = w_0 + w_1$, $b = w_0^2$ ja $c = b + w_1a$ ovat tilapäismuuttujia.

Nyt kaikki integraalit kolmiotahkon yli voidaan kirjoittaa muodossa

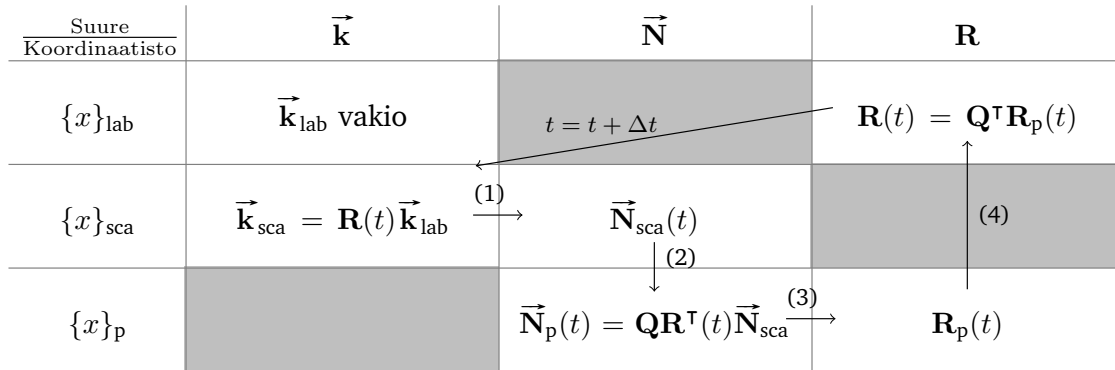
$$\begin{aligned}
(\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{i}}) \int_f x \, dS &= \frac{\delta_0}{6} f_1(x), & (\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{j}}) \int_f y^3 \, dS &= \frac{\delta_1}{20} f_3(y), \\
(\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{i}}) \int_f x^2 \, dS &= \frac{\delta_0}{12} f_2(x), & (\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{k}}) \int_f z^3 \, dS &= \frac{\delta_2}{20} f_3(z), \\
(\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{j}}) \int_f y^2 \, dS &= \frac{\delta_0}{12} f_2(y), & (\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{i}}) \int_f x^2 y \, dS &= \frac{\delta_0}{60} (y_0 g_0(x) + y_1 g_1(x) + y_2 g_2(x)), \\
(\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{k}}) \int_f z^2 \, dS &= \frac{\delta_0}{12} f_2(z), & (\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{j}}) \int_f y^2 z \, dS &= \frac{\delta_1}{60} (z_0 g_0(y) + z_1 g_1(y) + z_2 g_2(y)), \\
(\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{i}}) \int_f x^3 \, dS &= \frac{\delta_0}{20} f_3(x), & (\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \hat{\mathbf{k}}) \int_f z^2 x \, dS &= \frac{\delta_2}{60} (x_0 g_0(z) + x_1 g_1(z) + x_2 g_2(z)).
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Summattaessa kaikkien kolmiotahkojen yli ensimmäisestä integraalista saadaan kappaleen tilavuus, kolmesta seuraavasta sen massakeskipiste ja lopuista kuudesta hitausmomenttitensoriin yläkolmiokomponentit. Diagonalisoimalla ratkaistu hitausmomenttitensori löydetään rotaatiomatriisi \mathbf{Q} laboratoriokoordinaatistosta pääakselikoordinaatistoon.

5.2 Likeyhtälöiden integrointi

Tässä alaluvussa rakennetaan viitekehys integrointiohjelmistolle perustuen aiempaan teoriaan sekä aiemmin esitettyihin numeerisiin algoritmeihin. Ohjelmiston sirontaongelman ratkaiseva osa perustuu Johannes Markkasen laatimaan pintaintegraaliyhtälömenetelmän sirontaohjelmistoon [32]. Sirontaohjelmisto määrittää siroamistapahtumassa hiukkaseen vaikuttavat voimat ja väännöt kolmioelementtidiskretisaation avulla. Ohjelmistoa on muokattu vastaamaan fysikaalista lähtötilannetta, jossa hiukkasen kokoparametri ka on säädettävissä hiukkaskokoa kuvaavan samantilavuuksisen pallon säteen a sekä saapuvan säteilyn aaltoluvun k avulla. Lisäksi hiukkasen kompleksinen permittiivisyys ja saapuvan sähkökentän amplitudi sekä dynamiikkaintegroinnissa käytettävä hiukkasen tiheys ovat säädettäviä suureita.

Sirontaohjelmisto määrittää hiukkasgeometriaan perustuen sironnan systemimatriisiin yhtälön (4.32) mukaisesti ja kääntää matriisin, jolloin sirontatapahuman ratkaisu vaatii ainoastaan yhtälön (4.32) oikean puolen päivittämistä vastaamaan saapuvan säteilykentän ominaisuuksia sekä matriisi-vektoritulon laske-



Kuva 8: Dynamiikkaintegraattorin toimintaperiaate tiivistettynä: Ensimmäiseksi käännetään aaltovektori ja tuloksen avulla ratkaistaan vääntömomentit sirontaohjelmiston avulla. Seuraavaksi käännetään vääntömomentit pääakselikoordinaatteihin ja kolmanneksi päivitetään rotaatiomatriisi pääakselikoordinaateissa. Lopuksi ratkaistaan uusi rotaatiomatriisi laboratoriokoordinaateissa. Iteraatioiden yhteydessä päivitetään systeemimatriisiyhtälön oikea puoli.

mista. Kun systeemimatriisi on käännetty, voidaan liikeyhtälöiden integroiminen aloittaa.

Alaluvussa 2.3 kuvataan menetelmä ratkaista sirontaongelma sirontakoordinaatistossa $\{x\}_{sca}$, jossa koordinaatisto on kiinnitetty hiukkasen massakeskipisteseen ja ulkoinen säteilykenttä muuttaa suuntaansa. Kun ulkoisia kenttiä käännetään, on pidettävä mielessä, että kuvan 3 mukaiset muunnokset laboratoriokoordinaateista sirontakoordinaatteihin on tehtävä käänteismuunnoksina aaltovektorille \vec{k} . Tämä on seurausta siitä, että rotaatiomatriisi \mathbf{R} on koordinaatistojen välinen kuvaus, mutta sirontaongelman näkökulmasta koordinaatisto ei muutu, vaan aaltovektori \vec{k} muuttaa suuntaansa.

Sirontaongelman ratkaisu valmiin systeemimatriisin avulla on suhteellisen nopeaa, ja laskenta-aika on verrannollinen diskretointiin käytettyjen kolmioelementtien määrään. Määritetyt voimat ja väännöt käännetään laboratoriokoordinaattien kautta hiukkasen pääakselikoordinaatteihin. Muunnoksessa laboratoriokoordinaatteihin on jälleen otettava huomioon oikeat muunnosmatriisit, minkä jälkeen muunnos pääakselikoordinaatteihin tapahtuu normaalin käytännön mukaisesti.

Liikeyhtälöistä ratkaistaan kulmanopeus Runge-Kutta-algoritmin avulla pääakselikoordinaateissa ja hiukkasen orientaatiota kuvaava rotaatiomatriisi päivitetään Rodriguesin rotaatiokaavan (2.31) avulla. Massakeskipisteen etenemisliikettä kuvaavat yhtälöt voidaan sen sijaan ratkaista suoraviivaisen Runge-Kutta-

algoritmin sovelluksen avulla.

Ratkaistu rotaatiomatriisi käännetään laboratoriokoordinaatteihin, jolloin sitä voidaan käyttää seuraavassa iteraatiossa jälleen aaltovektorin \vec{k} kääntämiseen. Iterointien yhteydessä päivitetään myös systeemimatriisiyhtälön (4.32) oikea puoli. Kokonainen iterointikierrös on esitetty kuvassa 8.

6. Tulokset ja johtopäätökset

Ohjelmiston testaus jakaantuu kahteen osa-alueeseen, rotaatiointegraattorin oikean toiminnan varmentamiseen analyttisiin tuloksiin verrattaessa sekä tähtienvälistä pölyhiukkasta mallintavien ajojen tulosten käsittelyyn.

6.1 Integraattorin toiminta

Integraattorin testaaminen tapahtuu tilanteissa, joissa pyörimisliike ja etenemisliike on erotettu toisistaan. Etenemisliikkeen testaus on yksinkertaista, ja tapahtuu kohdistamalla massakeskipisteeseen erilaisia voimia ajan funktiona. Analyttiseen ratkaisuun verrattaessa voidaan arvioida integraattorin virhettä aika-askeleen funktiona.

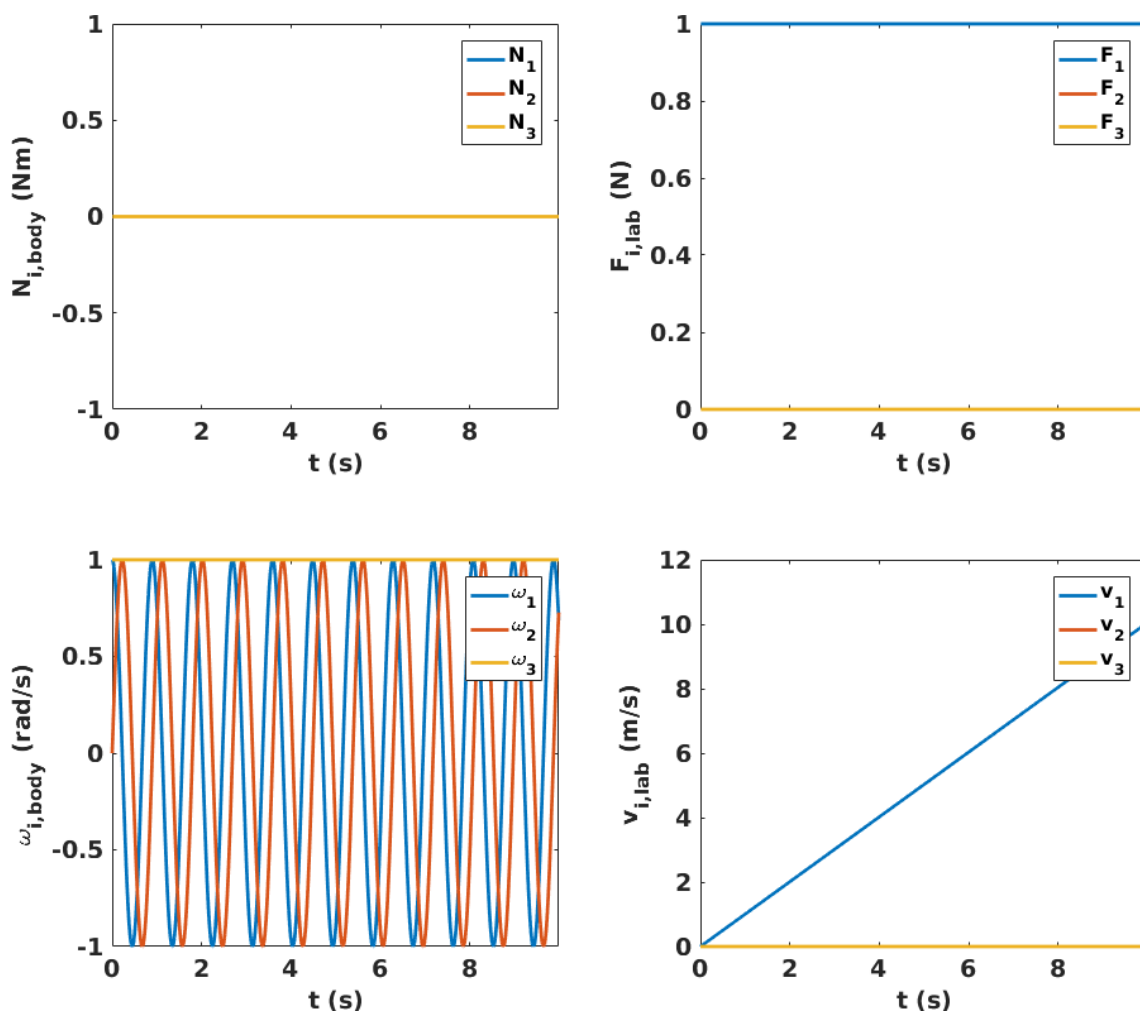
Integraattorin testauksessa käytetään eksplisiittisen geometrian sijasta alkuparametrina asetettavaa hitausmomenttitensoria. Testikappaleet pyörivät jollain alkukulmanopeudella $\vec{\omega}_0$ sekä ilman ulkoisia vääntömomenteja että ulkoisen vääntömomentin $\vec{N}_{\text{ext}} = \hat{z}_{\text{lab}} \times \hat{x}_{\text{b},3}$ vaikutuksen alaisuudessa.

Analyttiseen ratkaisuun verrattaessa saadaan arvioitua integraattorin virhettä asettamalla yläraja aika-askeleen aikana tapahtuvalle pyörähdykselle. Tämä maksimipyörähdys θ_{max} rajoittaa aika-askelta yhtälön $\Delta t = \frac{\theta_{\text{max}}}{\omega}$ mukaisesti. Kuvassa 11 esitetään absoluuttinen numeerinen virhe ajan funktiona. Kuvassa 12 havaitaan absoluuttisen virheen kasvavan spiraalimaisesti $(\Delta\omega_1, \Delta\omega_2)$ -tasossa. Absoluuttinen virhe kasvaa noin 10000-kertaisesti maksimipyörähdysten kasvaessa 0.01 radiaanista 0.1 radiaaniin.

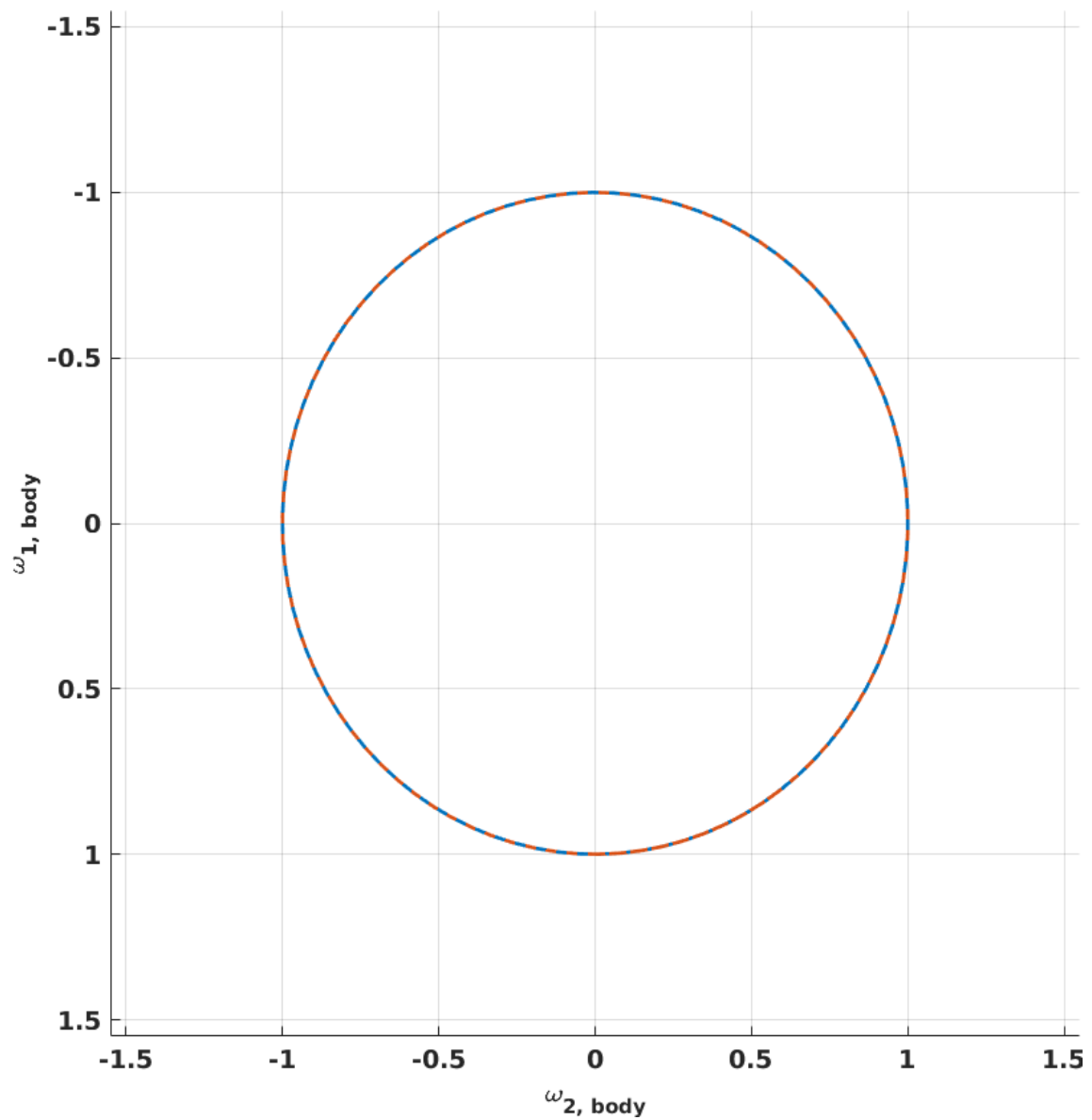
Epäsymmetrisen hyrrän tapauksessa luvussa 2.6 ennustettu käytös saadaan toisinnettua integraattorissa. Asetetaan testikappaleen hitausmomenttitensoriksi $I = \text{diag}(1, 8, 4)$ ja tarkastellaan kahta eri alkukulmanopeutta, $\vec{\omega}_{0,\text{stab}} = (0, 1, 0.1)$ sekä $\vec{\omega}_{0,\text{unstab}} = (0, 0.1, 1)$. Stabiili ja epästabiili tilanne eroavat toisistaan niin kul-

manopeuksien aikakehityksen kuin testivektorin $(0, 0, 1)_{\text{body}}$ radan suhteen, kuten kuvissa 13 ja 14 on esitetty.

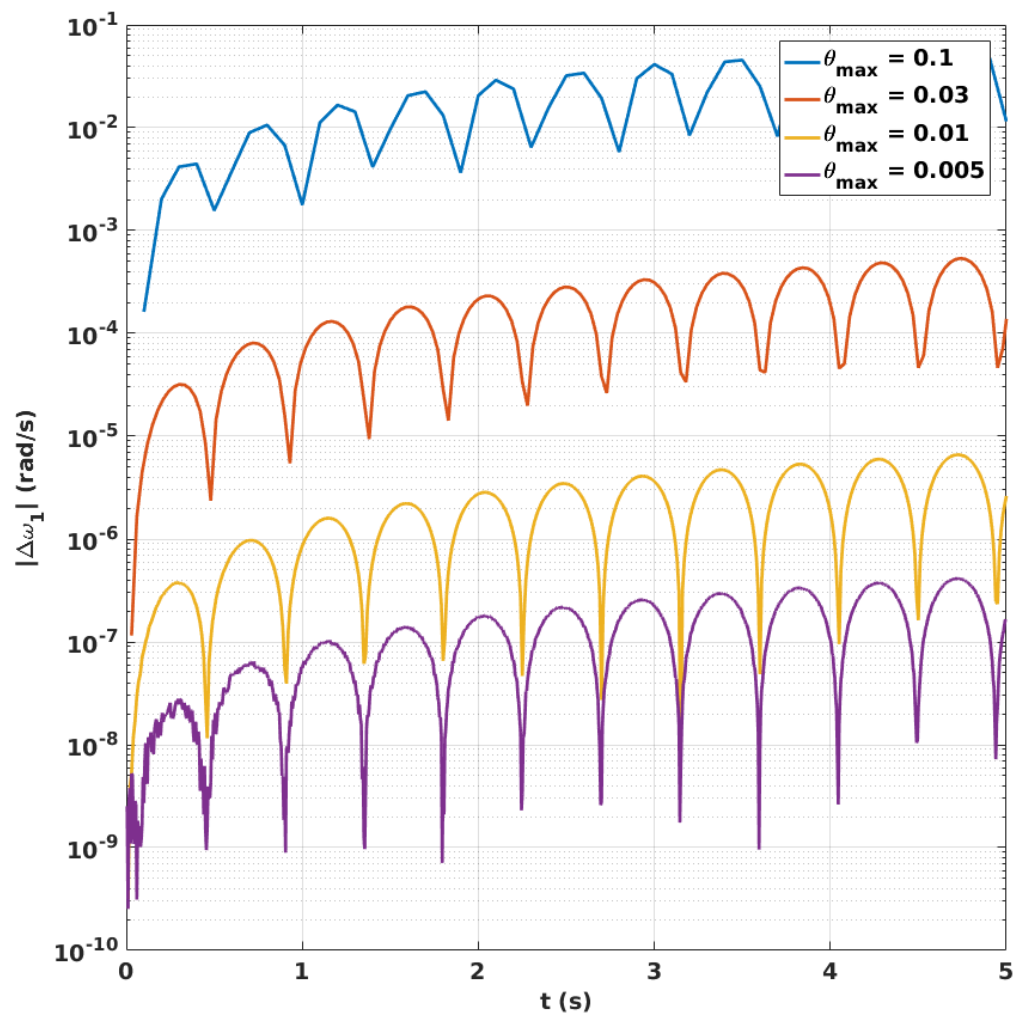
Ulkoista vääntömomenttia voidaan mallintaa vektorilla $\vec{N}_{\text{ext}} = \hat{z}_{\text{lab}} \times \hat{x}_{3,\text{body}}$, joka vastaa tilannetta, jossa symmetrisen ellipsoidin vastakkaisiin päihin asetetaan vastakkaisiin suuntiin osoittavat raketit. Tilanne on analoginen toisesta päästään kiinnitetyn hyrrän pyörimiseen gravitaatiokentässä, vaikka testikappaleeseen ei ole asetettu sidosehtoja. Vakaassa pyörimisessä ulkoinen vääntö saa kulmanopeuskomponenteissa aikaan ylimääräisen värähtelytilan, kuten kuvissa 16 ja 17 esitetään.



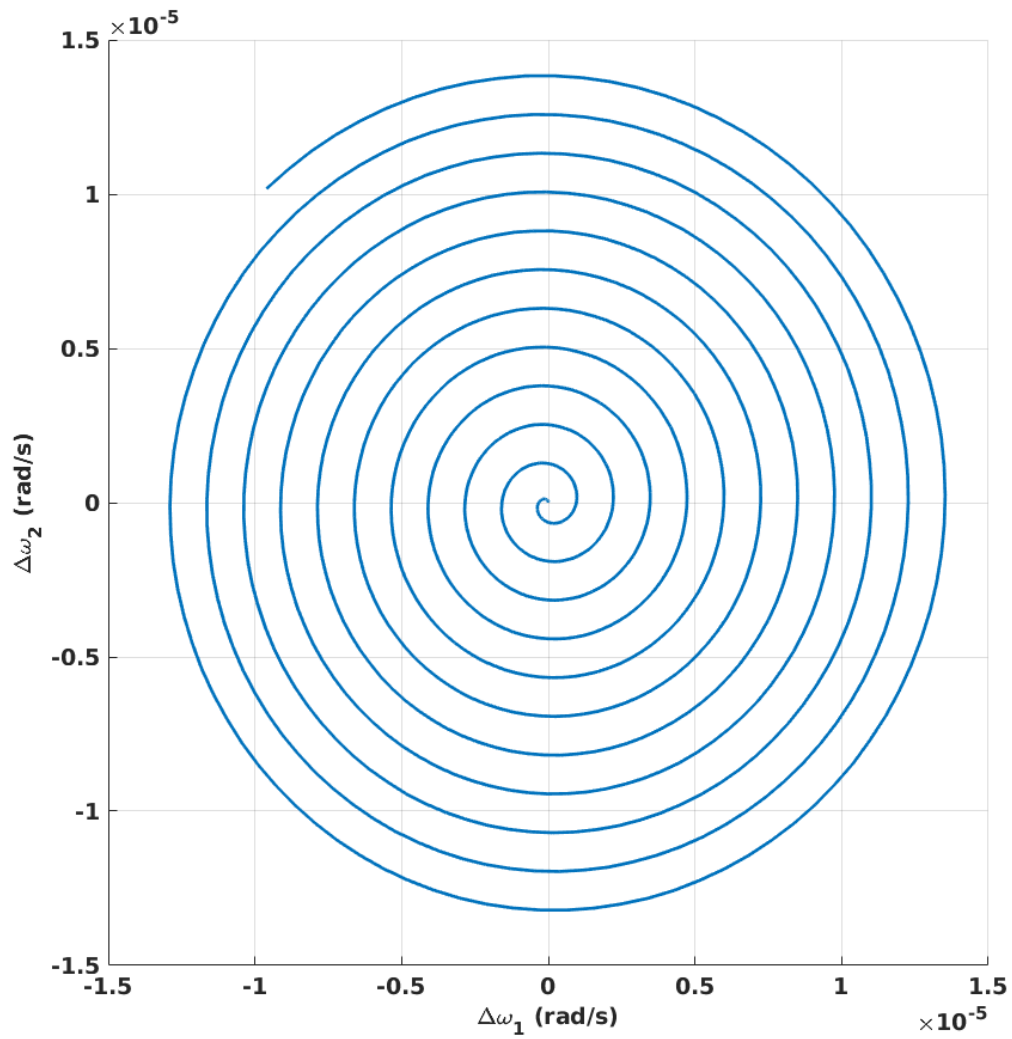
Kuva 9: Symmetrisen ellipsoidin, $I = \text{diag}(1, 1, 8)$, kulmanopeuden ja nopeuden ratkaisut tilanteessa, jossa alkukulmanopeus $\vec{\omega}(t = 0) = (1, 0, 1)$. Tasainen kiihtyvyys näkyy nopeuden kuvaajassa, kun taas kulmanopeuden kuvaajassa näkyy ympyräliike (ω_1, ω_2) -tasossa.



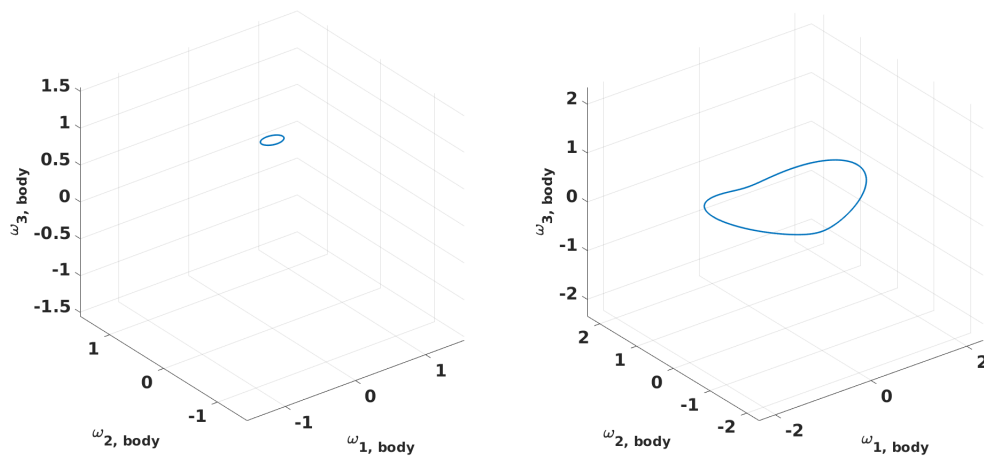
Kuva 10: Sama tilanne kuin kuvassa 9, kulmanopeudet ajan funktiona teoreettisen ennusteen mukaisesti punaisella katkoviivalla ja numeerinen tulos yhtenäisellä sinisellä viivalla, kun maksimipyörähdys yhden akselin ympäri on rajoitettu 0.01 radiaaniin. Esityksen tarkkuuden puitteissa numeerinen ja analyyttinen ratkaisu ovat päällekkäin.



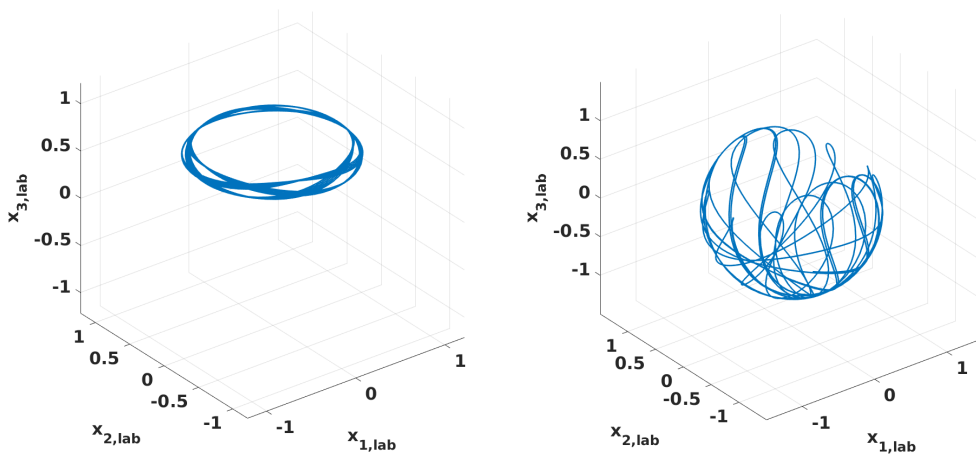
Kuva 11: Symmetrisen hyrrän numeerisen ratkaisun absoluuttisen virheen itseisarvo $|\Delta\omega_1|$ ajan funktiona eri maksimipörähdyksillä θ_{\max} .



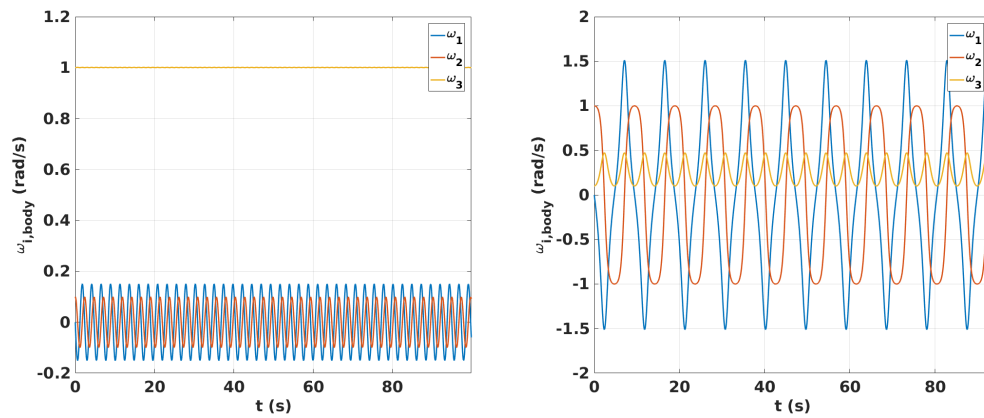
Kuva 12: Symmetrisen hyrrän numeerisen ratkaisun absoluuttinen virhe $(\Delta\omega_1, \Delta\omega_2)$ -tasolla maksimipöyhdyksellä $\theta_{\max} = 0.01$ radiaania. Virhe kasvaa spiraalimaisesti ajan funktiona.



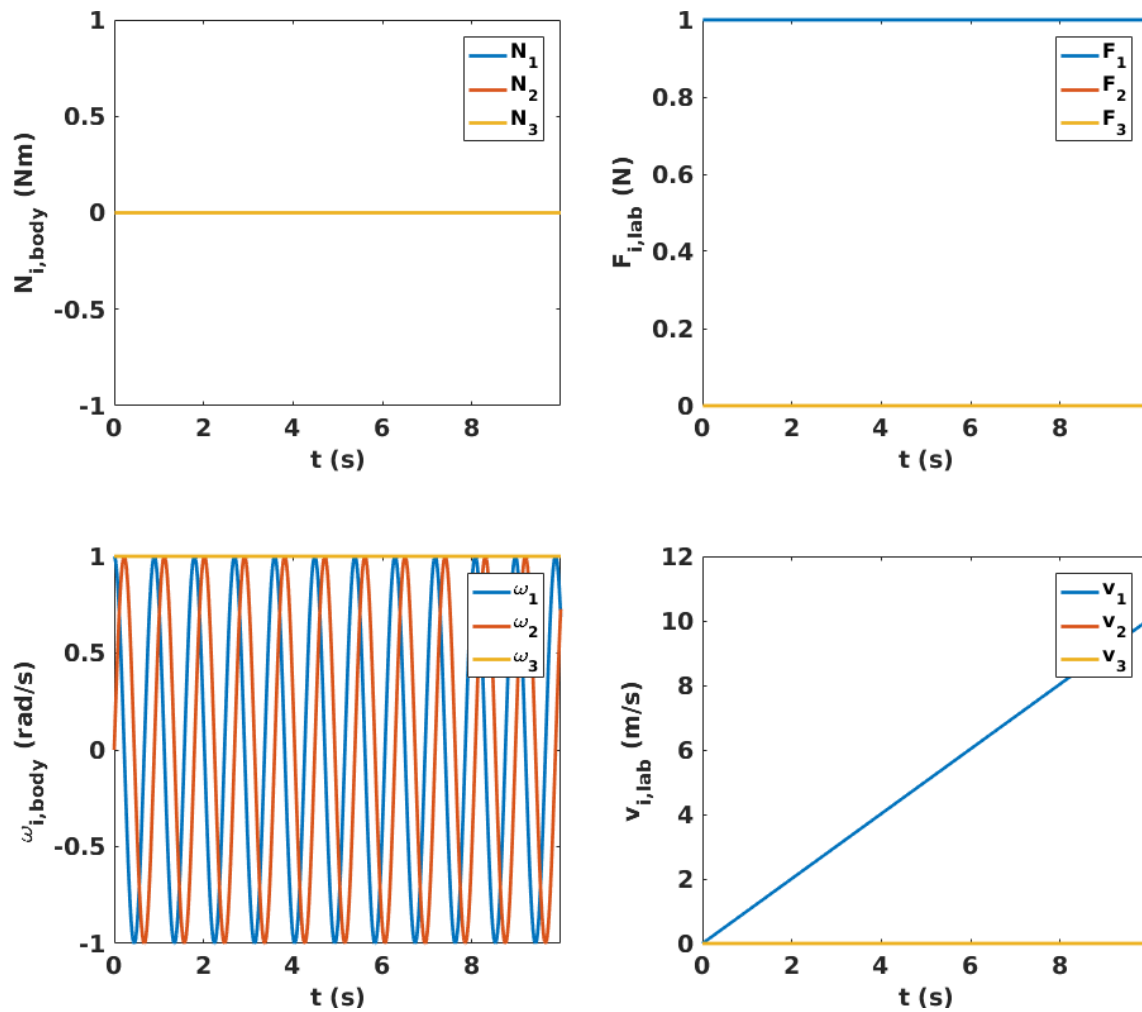
Kuva 13: Epäsymmetrisen testikappaleen, $I = \text{diag}(1, 8, 4)$, kulmanopeuden aikakehitys stabiilissa ja epästabiilissa tilanteessa. Vasemmalla stabiili tilanne ja oikealla epästabiili tilanne.



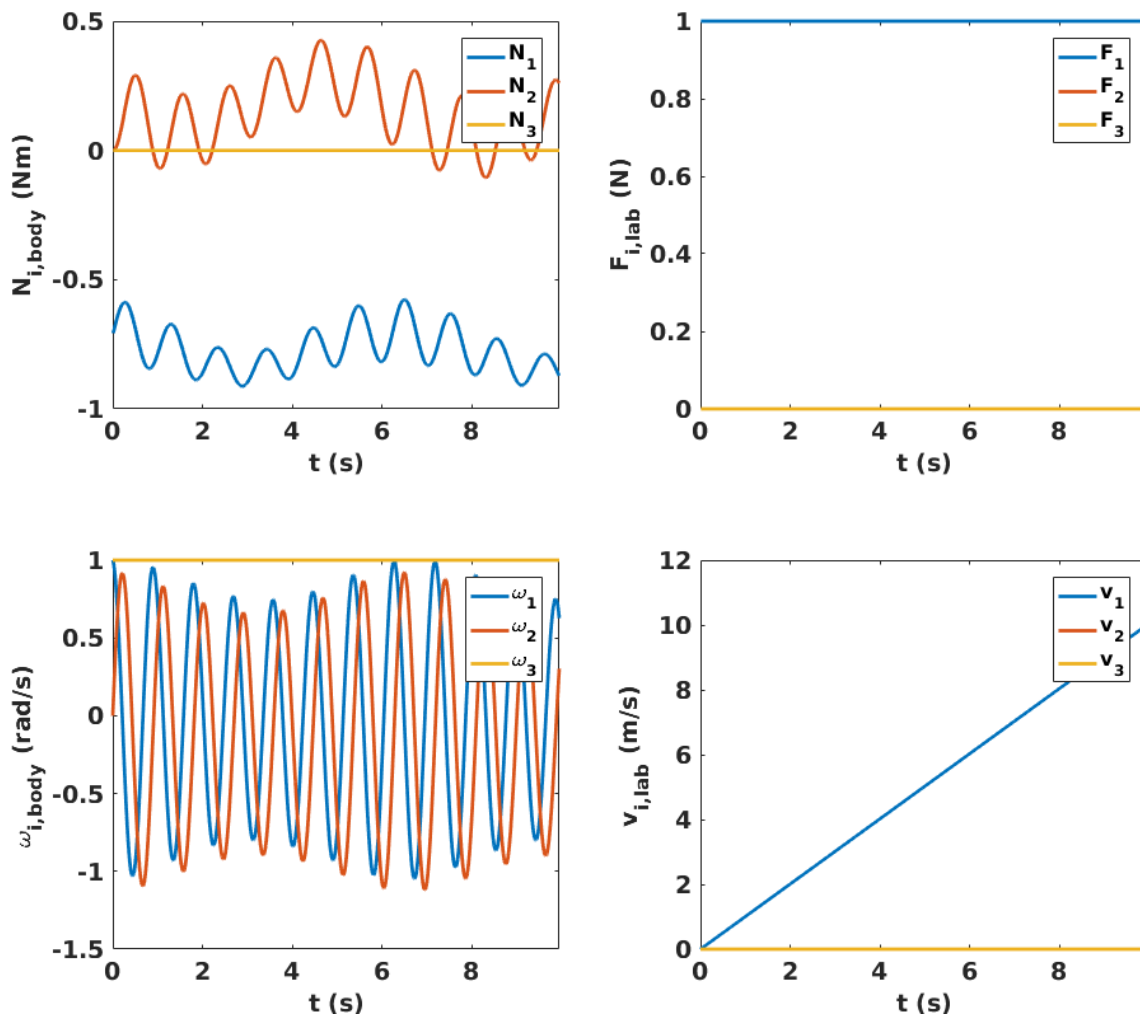
Kuva 14: Tilanne kuten kuvassa 13, testivektorin ratakäyrät vasemmalla stabiilissa tilanteessa ja oikealla epästabiilissa tilanteessa.



Kuva 15: Tilanne kuten kuvissa 13 ja 14. Stabiilin pyörimisen tapauksessa pyöriminen tapahtuu pääasiassa suurinta hitausmomenttia vastaavan akselin ympäri, kun taas epästabiilissa tilanteessa kulmanopeusvektorin kaikki komponentit värähtelevät merkittävästi.



Kuva 16: Symmetrisen hyrrän kulmanopeudet tilanteessa, jossa ulkoinen vääntömomentti on 0 ja testihiukkaseen vaikuttaa vakiovoima. Kulmanopeusvektorin prekessio näkyy sinimuotoisena kulmanopeuskomponenttien värähtelynä.



Kuva 17: Tilanne kuin kuvassa 16, mutta jossa vääntömomentti on $\vec{N} = \hat{z}_{\text{lab}} \times \hat{x}_{3,\text{body}}$. Ulkoinen vääntömomentti aiheuttaa kulmanopeuskomponenttien ylimääräisen värähtelytilan.

6.2 Sirottavan hiukkasen pyöriminen

Tarkastellaan kuvassa 7 esitetyn gaussisen satunnaispallon muotoisen hiukkasen dynamiikkaa sirontavuorovaikutuksessa. Hiukkasen pyörimistä mallinnetaan niin levosta kuin sekä stabiilista että epästabiilista pyörimistilasta lähtien. Kokoparametrille ka asetetaan arvot 0.1, 1 ja 5 varioimalla kokoparametriä hiukkasen palloekvivalenttisäteen a avulla ja asettamalla aaltoluvuksi $1.0 \cdot 10^7 \frac{1}{m}$. Kolmioelementtidiskretisaation karkeus asettaa rajan pintaintegraaliyhtälömenetelmän tarkkuudelle, tarkat tulokset vaativat vähintään kymmenen elementin mahtuvan yhden aallonpituuden sisälle.

Hiukkasen diagonalisoidussa hitausmomenttitensorissa $I_1 \leq I_2 \leq I_3$. Kolmen testikokoparametrin tapauksessa hiukkasten massat ja diagonalisoidut hitausmomenttitensorit ovat

$$m_{ka=0.1} = 9.0 \cdot 10^{-19} \text{ kg}, I_{ka=0.1} = \text{diag}(1.61010, 2.26925, 2.72165) \cdot 10^{-40} \text{ kgm}^2,$$

$$m_{ka=1} = 9.0 \cdot 10^{-16} \text{ kg}, I_{ka=1} = \text{diag}(1.61010, 2.26925, 2.72165) \cdot 10^{-35} \text{ kgm}^2 \text{ ja}$$

$$m_{ka=5} = 1.12 \cdot 10^{-13} \text{ kg}, I_{ka=5} = \text{diag}(5.03158, 7.09141, 8.50516) \cdot 10^{-32} \text{ kgm}^2.$$

Hiukkasten tiheys jokaisessa tilanteessa on $2000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$. Stabiileissa alkutiloissa kulmanopeuden suurin komponentti on suurinta hitausmomenttia vastaava $\omega_3 = -1.0$ ja perturbatiivinen komponentti on $\omega_2 = 0.1$. Epästabiilissa tilanteessa komponentit on valittu päinvastaisiksi.

Simulaatiossa hiukkasen sähkömagneettista ympäristöä pidetään yksinkertaisimpana mahdollisena. Primaarinen sähkökenttä on lineaarisesti polarisoitunut ja kentän amplitudi on $E_0 = 0.01 \text{ V/m}$. Amplitudia vastaava sähkökentän energiatiheys on likimäärin Linnunradan taustasäteilyn energiatiheys [38], mallinnettu hiukkanen vastaa näin ollen kylmää pölyhiukkasta. Lisäksi jokaisen testihiukkasen suhteellinen kompleksinen permittiivisyys on $\varepsilon_r = 2.000 + 0.000i$.

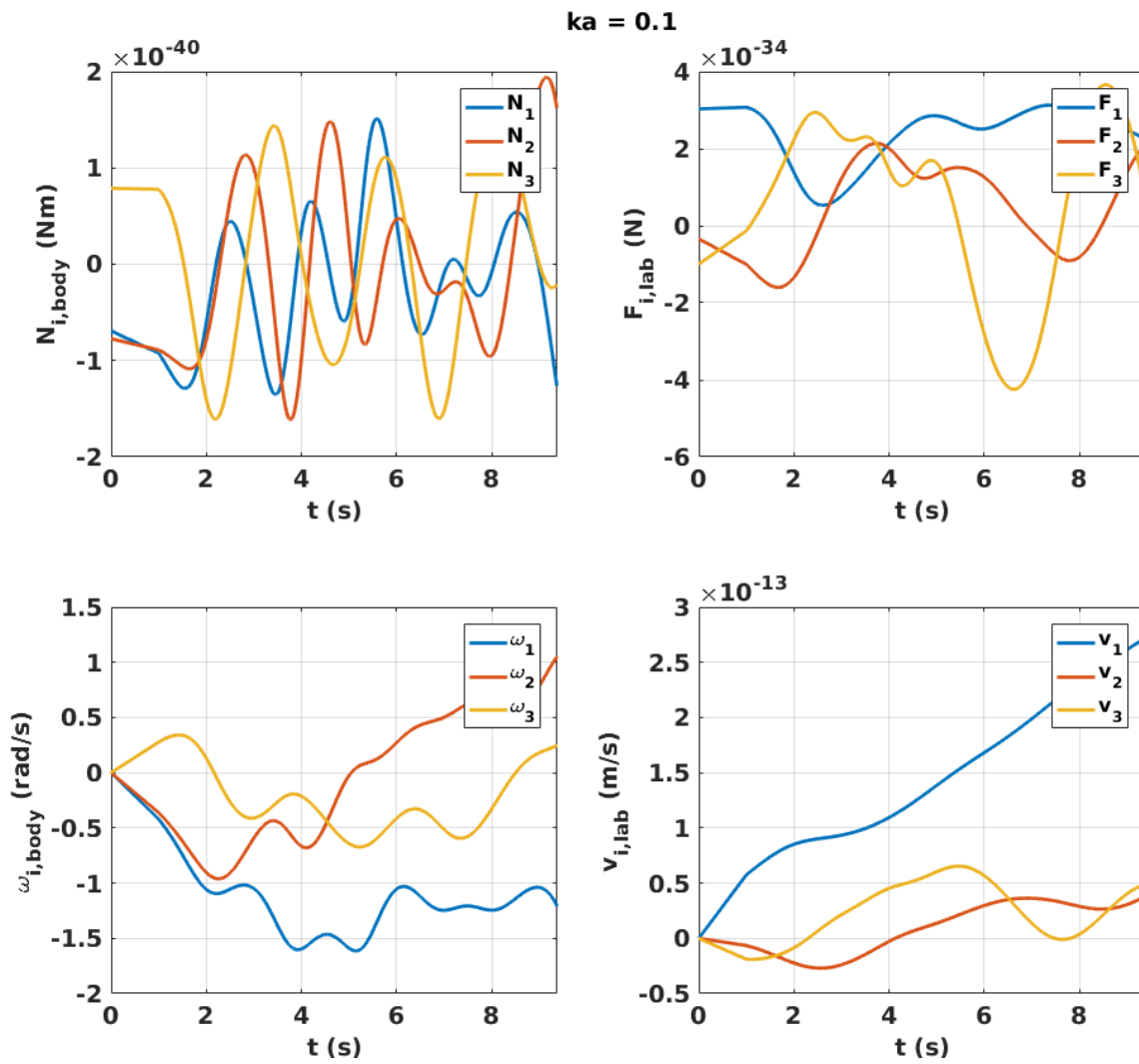
Kaikissa tilanteissa adaptiivista aika-askelta rajoittavana maksimipyörähdysenä pidettiin 0.01 radiaania ja simulaatioiden pituudet rajattiin 1000 aika-askelleeseen. Ensimmäisenä tarkastellaan tilannetta, jossa erikokoiset hiukkaset lähtevät liikkeelle levosta. Kolmen eri kokoluokan hiukkasen dynamiikkaa käsitellään kuvissa 18 – 20.

Stabiilista pyörähdystilasta aloittaessa kulmanopeuksien muutosten kokoluokat pysyvät likimain samoina kolmen erikokoisen hiukkasen tapauksissa, kun

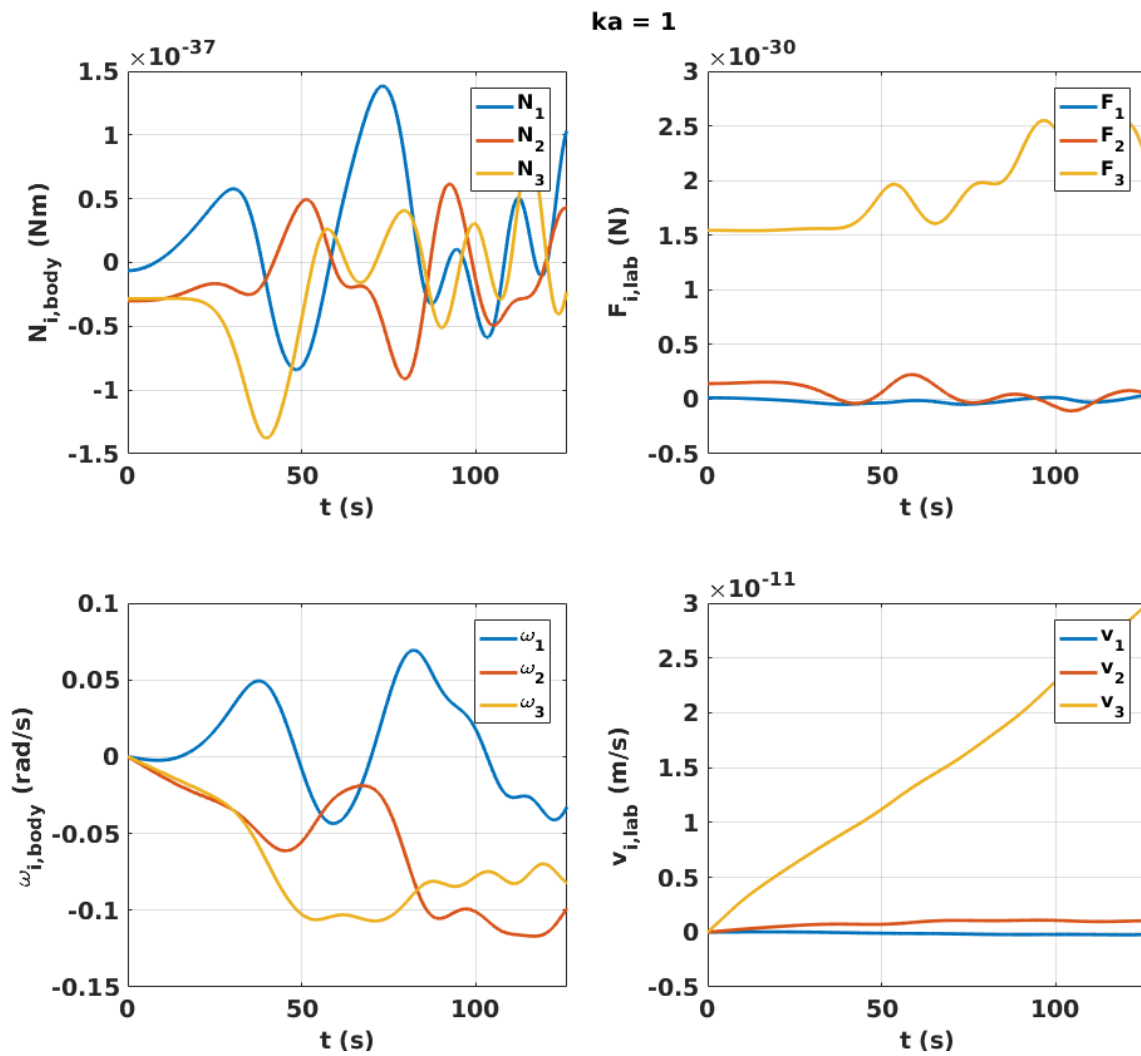
verrataan vastaavankokoisia hiukkasia paikaltaan lähtiessä. Stabiilia alkutilannetta käsitellään kuvissa 21 – 23.

Stabiilin ja epästabiilin tilan ero on samankaltainen kuin testikappaleella, jota käsiteltiin kuvassa 15, joskin aikaskaalat ovat pienempiä. Kaikissa tapauksissa osa kulmanopeuden kehityksestä selittyy siis epästabiililla alkutilanteella. Tilannetta käsitellään kuvissa 24 – 26.

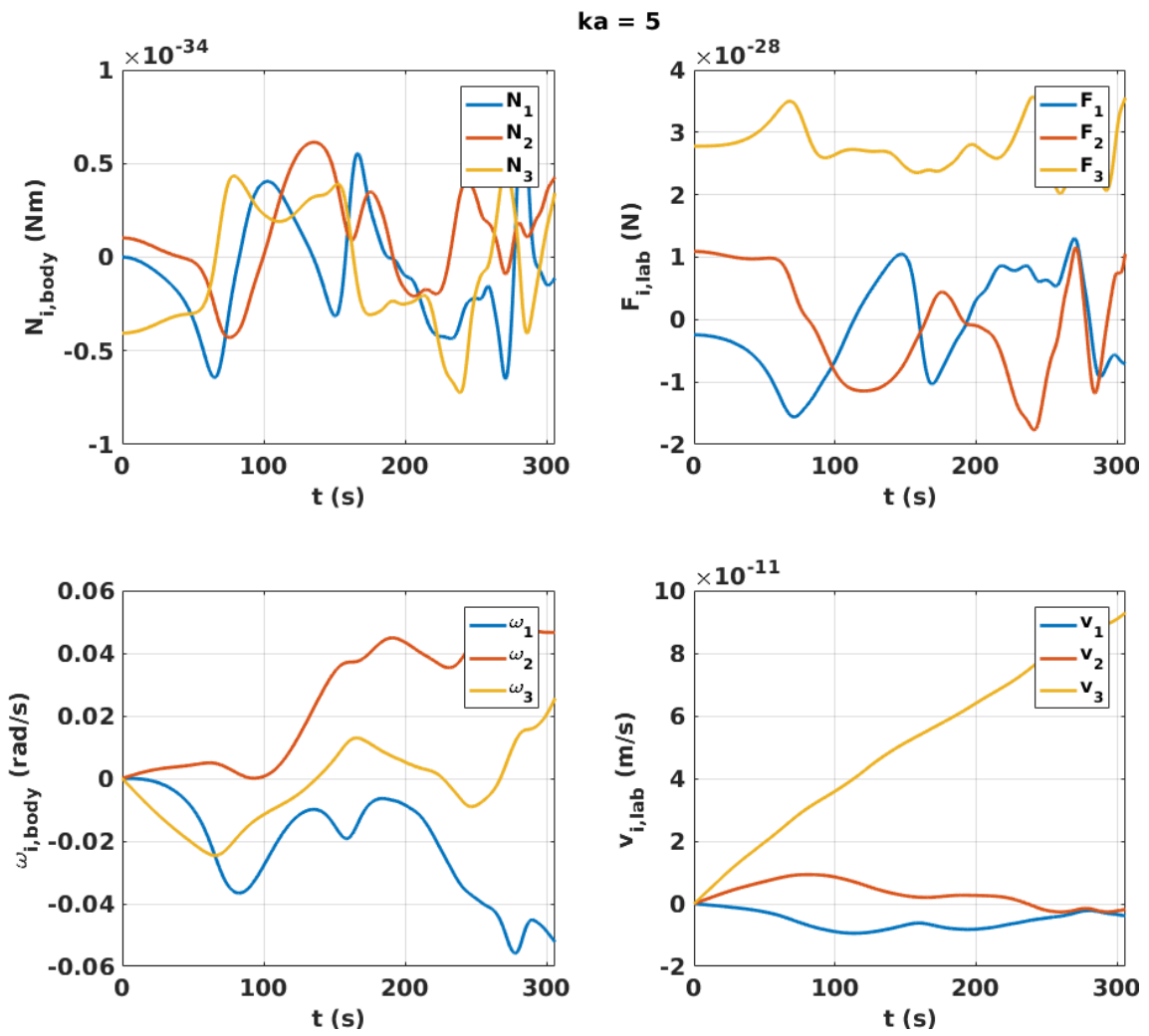
Kolmessa testitapauksessa hiukkasen vaste näkyvään valoon on selkein, kun kokoparametri on pienimmillään, $ka = 0.1$. Muissa tapauksissa säteilyn vääntövaikutukset jäävät pieniksi verrattuna hiukkasen vääntömomenteista riippumattomaan pyörimiseen. Myös paikaltaan lähtevien hiukkasten tapauksessa erot eri kokoparametrien välillä ovat selkeitä. Systemin pidemmän ajan aikakehityksestä saatujen tuloksien perusteella ei voi tehdä varmoja ennusteita, tämä siis jää suurteholaskennan menetelmin ratkaistavaksi jatkokysymykseksi.



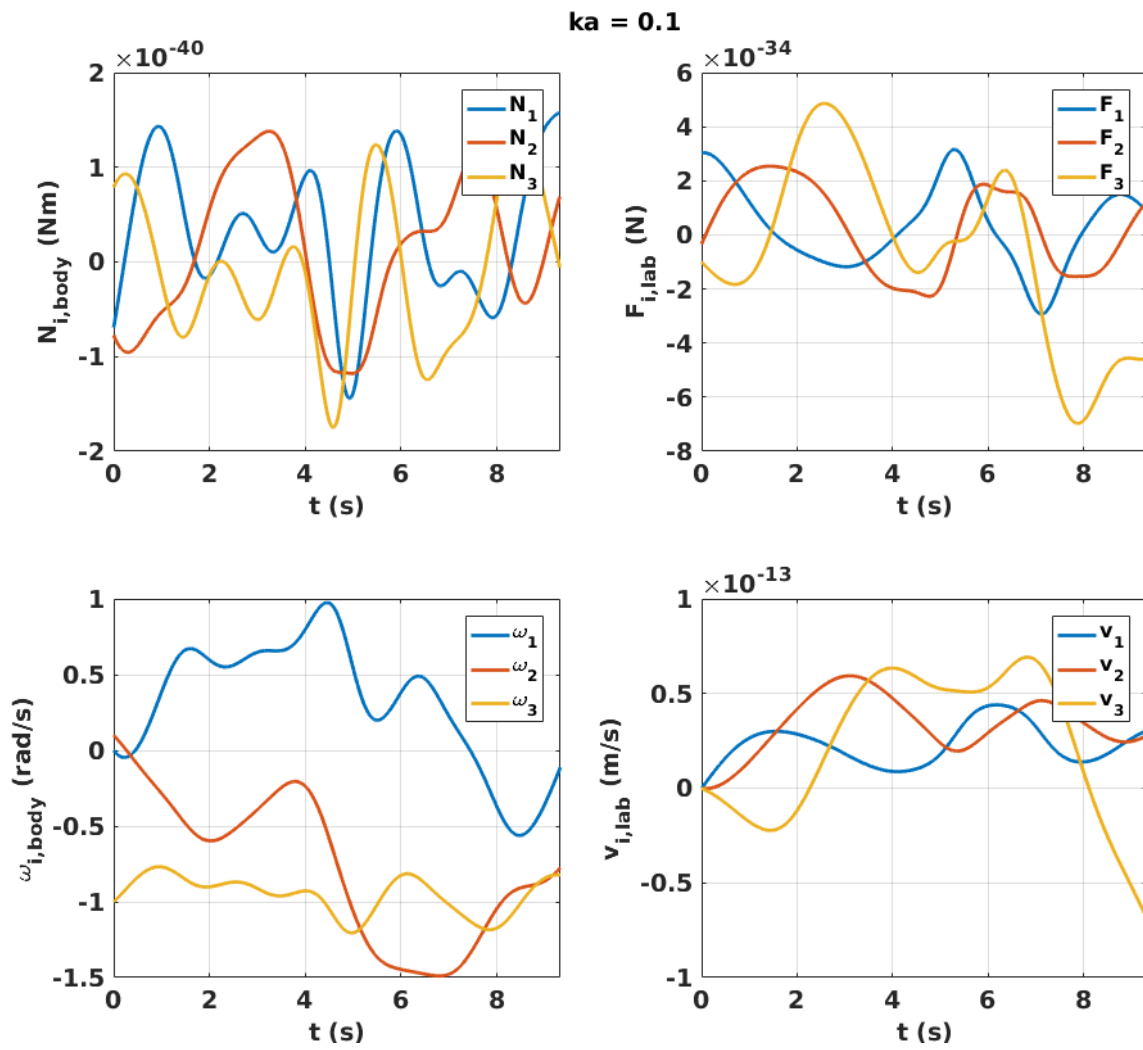
Kuva 18: Hiukkasen sirontadynamiikka tilanteessa $ka = 0.1$, kun hiukkanen lähtee liikkeelle levosta. Kulmanopeudet kehittyvät 10 sekunnin aikana selvästi.



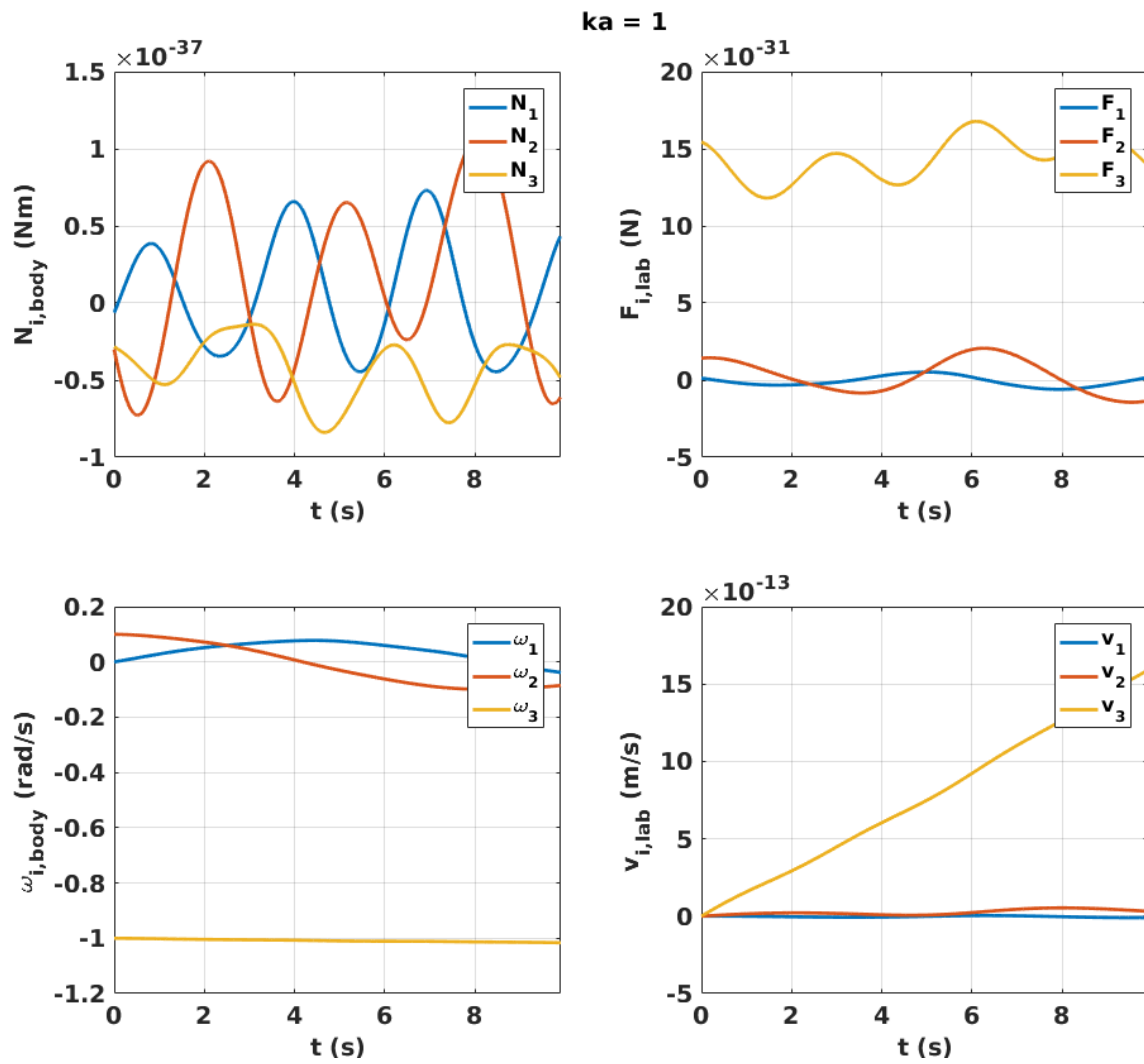
Kuva 19: Tilanne kuin kuvassa 18, mutta jossa $ka = 1$. Sirottavuorovaikutuksen väännöt muuttavat pyörimistilaa kertaluokkaa heikommin. Voimat kiihdyttävät hiukkasta likimain tasaisesti saapuvan säteilyn suunnassa.



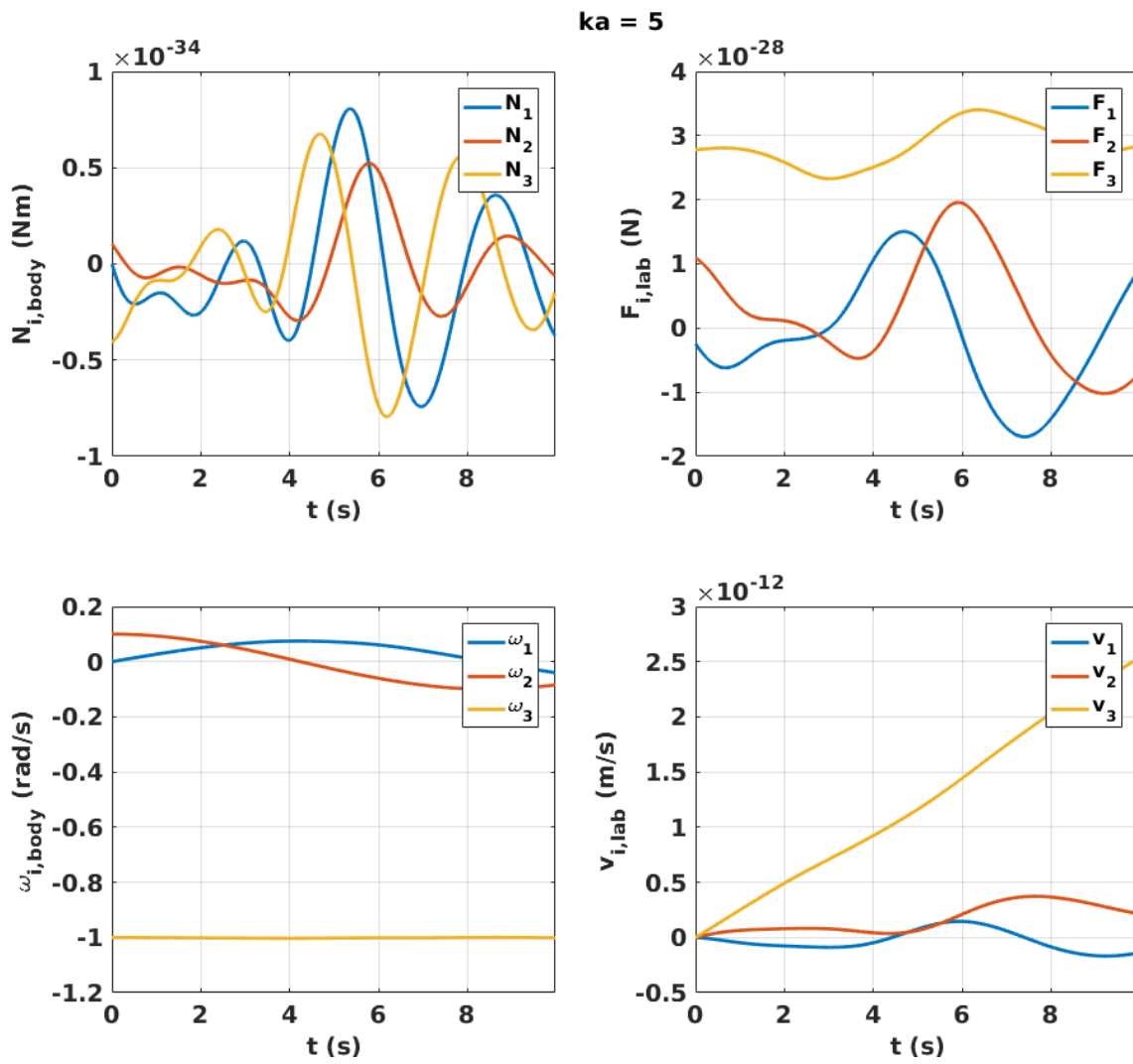
Kuva 20: Tilanne kuin kuvissa 18 ja 19, mutta jossa $ka = 5$.



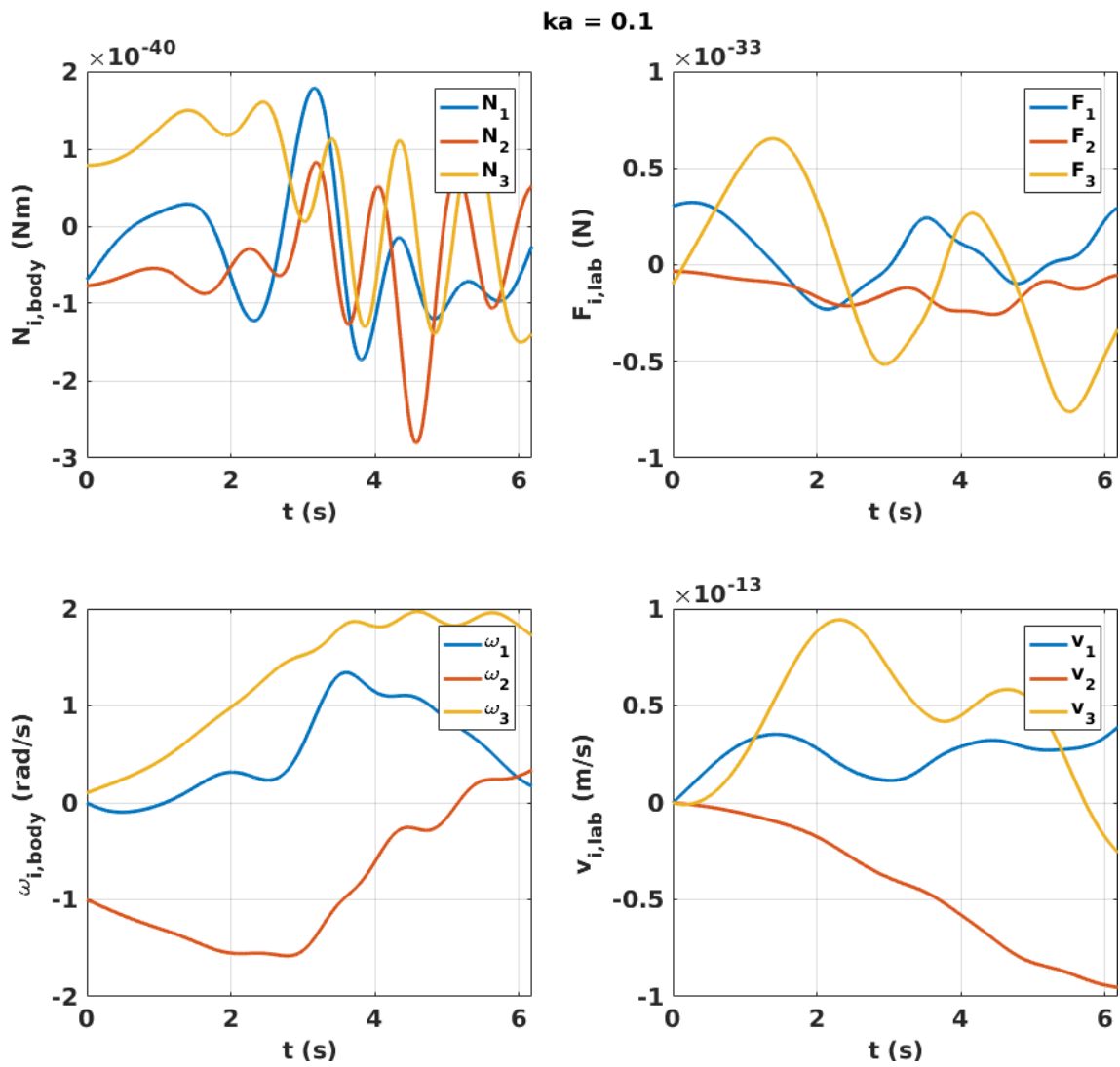
Kuva 21: Hiukkasen sirontadynamiikka tilanteessa $ka = 0.1$, kun alkukulmanopeus on stabiili. Siirontavuorovaikutuksessa ilmaantuvat väännöt muuttavat hiukkasen pyörimistilaa selvästi. Voimat muuttavat hiukkasen etenemistilaa epälineaarisesti.



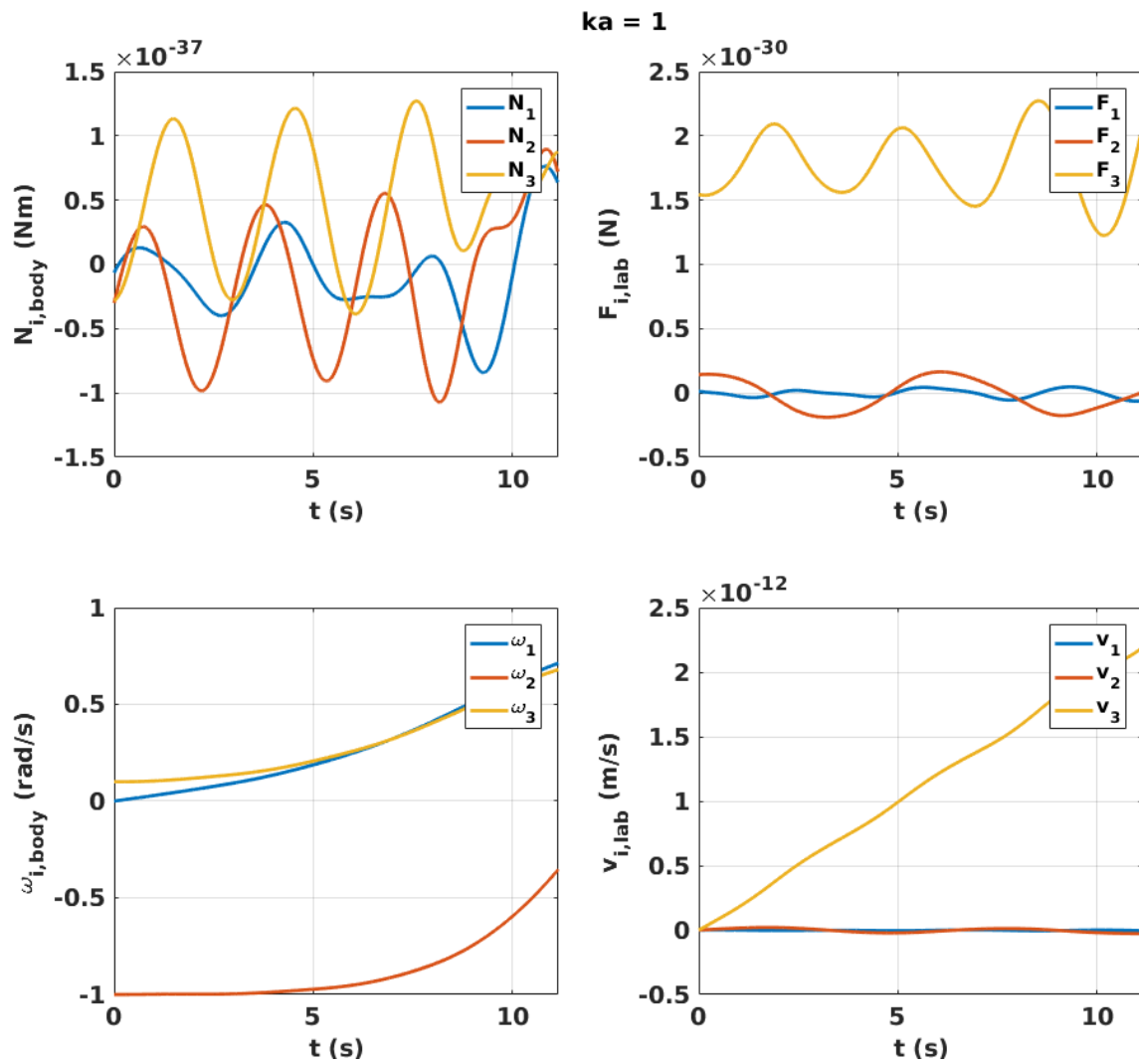
Kuva 22: Tilanne kuin kuvassa 21, mutta jossa $ka = 1$. Sirottavuorovaikutuksen väännöt eivät muuta pyörimistilaa enää mainittavasti. Voimat kiihdyttävät hiukkasta likimain tasaisesti saapuvan säteilyn suunnassa.

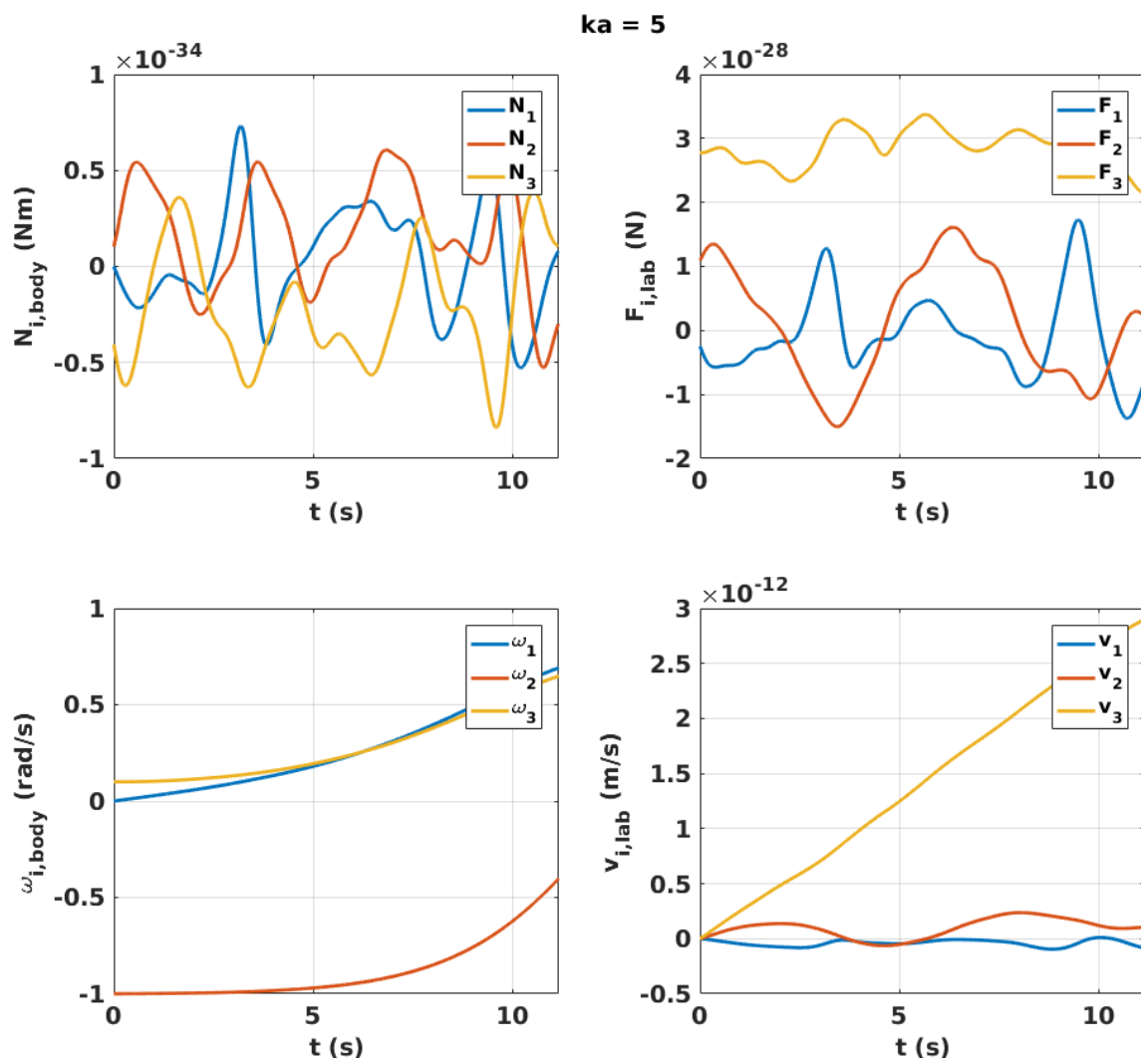


Kuva 23: Tilanne kuin kuvissa 21 ja 22, mutta jossa $ka = 5$.



Kuva 24: Hiukkasen sirontadynamiikka tilanteessa $ka = 0.1$, kun alkukulmanopeus on epästabiili.

Kuva 25: Tilanne kuin kuvassa 24, mutta jossa $ka = 1$.



Kuva 26: Tilanne kuin kuvissa 24 ja 25, mutta jossa $ka = 5$.

7. Yhteenveto

Tämän tutkielman tavoitteena oli luoda viitekehys tähtienvälisen pölyhiukkasen dynamiikan laskemiseen tilanteessa, jossa dynamiikan määräävät sirontavuorovaikutukset. Testisimulaatioiden perusteella voidaan todeta liikeyhtälöiden suoran ratkaisemisen pintaintegraaliyhtälömenetelmän kautta olevan mahdollinen tapa tutkia hiukkasdynamiikkaa realistisin alkuparametrein.

Integraattorin toimintaa testatessa todettiin, että liikeyhtälöiden suora numeerinen ratkaisu yhtyy symmetristen hyrrien tapauksessa analyttisen ratkaisun kanssa. Virheen minimoimiseksi adaptiivisen aika-askelluksen määräävän maksimipyörähdyksen arvon on hyvä olla alle 0.1 radiaania. Tämä maksimipyörähdys mahdollistaa simulaation käsittävän useita tunteja myös ilman suurteholaskennan työkaluja.

Sirontavuorovaikutuksen implementointi on testien perusteella onnistunut. Numeerinen dynamiikan ratkaisu vastaa teoreettisia odotuksia. Tulosten perusteella simuloidun hiukkasen dynaaminen vaste sirontavuorovaikutukseen on merkittävä, kun kokoparametri $ka = 0.1$. Näkyvän valon aallonpituuksien tapauksessa tämä vastaa mikrometriluokan hiukkasen dynamiikan olevan tiukasti kytköksissä valonsirontaan.

Menetelmän laajentaminen kattamaan erilaisia kosmisia ympäristöjä ja hiukkasrakenteita on suoraviivaista. Pintaintegraalimenetelmän sijasta tilavuusintegraalimenetelmiä käyttämällä voidaan käsitellä paloittain homogeenisten rakenteiden dynamiikkaa mielivaltaisten geometrioiden tapauksessa. Erilaisiin ympäristöihin tilanteen kytkeminen on mahdollista kytkentämekanismeja liikeyhtälöiden yhteyteen lisäämällä. Esimerkiksi polarisoitumattoman valon ja useiden näkyvän valon aallonpituuksien implementointi on suoraviivaista olemassa olevaan ohjelmistoon.

Tähtienvälisen pölyn polarisoitumisilmiöihin kiinteästi liittyvän orientaatio-ongelman käsittely esitellyllä ohjelmistolla on mahdollista suurteholaskennan me-

netelmin. Systemin pitkän ajan aikakehitystä valottavissa suuren aikaskaalan simulaatioissa on menetelmään lisättävä myös erilaisia kosmiseen ympäristöön kytkeytyviä kulmanopeuden dissipaatiomekanismeja. Dissipaatiomekanismien on aiemmissa tutkimuksissa todettu liittyvän oleellisesti siihen, mihin tilaan hiukkasen pyöriminen lopulta stabiloituu.

Todellisuudessa tähtienvälisessä pölyssä tapahtuu myös sähkömagneettisen säteilyn emissiota, jolla on myös vaikutus pölyhiukkasen dynamiikkaan. Emissiodynamiikan mallintaminen hyödyntäen tilavuusintegraaliyhtälömenetelmiä on kiinnostava jatkotutkimusaihe.

Tutkimuskäyttöön soveltuakseen ohjelmiston ensisijaiseen jatkokehitykseen kuuluu primäärkentän useiden polarisaatiotilojen sekä aallonpituuksien implementointi. Erilaisten dissipaatiomekanismien ja dynamiikkaan vaikuttavien tekijöiden, kuten ulkoisten magneettikenttien, lisääminen on oleellinen askel käytettäessä ohjelmistoa todellisia ympäristöjä vastaavissa tilanteissa. Lisäksi ohjelmiston muokkaus rinnakkaislaskentaa hyödyntäväksi on keskeinen askel ohjelmiston optimoinnissa. Monimutkaisempien hiukkasrakenteiden mallinnuksessa vastaavaa dynamiikkaohjelmiston viitekehystä voidaan soveltaa tilavuusintegraaliyhtälömenetelmiä hyödyntäen.

Kirjallisuusluettelo

- 1 W. Herschel. On the Construction of the Heavens. *Philosophical Transactions*, 75:213–266, 1785.
- 2 R. J. Trumpler. Absorption of Light in the Galactic System. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 42(248):214–227, 1930.
- 3 J. S. Hall. Observations of the Polarized Light from Stars. *Science*, 109:166, 1949.
- 4 W.A. Hiltner. On the Presence of Polarization in the Continuous Radiation of Stars. II. *Astrophysical Journal*, 109:471, 1949. DOI: [10.1086/145151](https://doi.org/10.1086/145151).
- 5 W.A. Hiltner. Polarization of Light from Distant Stars by Interstellar Medium. *Science*, 109:165, 1949.
- 6 C. M. Anderson, A. J. Weitenbeck, A. D. Code, K. H. Nordsieck, M. R. Meade, B. L. Babler, N. E. B. Zellner, K. S. Bjorkman, G. K. Fox, J. J. Johnson, W. T. Sanders, O. L. Lupie, and R. J. Edgar. Ultraviolet Interstellar Polarization of Galactic Starlight. I. Observations by the Wisconsin Ultraviolet Photo Polarimeter Experiment. *The Astronomical Journal*, 112:2726, 1996. DOI: [10.1086/118217](https://doi.org/10.1086/118217).
- 7 D. P. Clemens, A. F. Pinnick, M. D. Pavel, and B. W. Taylor. The Galactic Plane Infrared Polarization Survey (GPIPS). *The Astrophysical Journal Supplement*, 200:19, 2012. DOI: [10.1088/0067-0049/200/2/19](https://doi.org/10.1088/0067-0049/200/2/19).
- 8 L. Davis and J. L. Greenstein. The Polarization of Starlight by Aligned Dust Grains. *Astrophysical Journal*, 114:206–240, 1951.
- 9 S. Chandrasekhar and E. Fermi. Magnetic Fields in Spiral Arms. *Astrophys Journal*, 118:113, 1953. DOI: [10.1086/145731](https://doi.org/10.1086/145731).

- 10 B-G. Andersson, A. Lazarian, and John E. Vaillancourt. Interstellar Dust Grain Alignment. *ARAA*, 53, 2015. DOI: [10.1146/annurev-astro-082214-122414](https://doi.org/10.1146/annurev-astro-082214-122414).
- 11 A. Lazarian. Magnetic Fields via Polarimetry: Progress on Grain Alignment Theory. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 79-80:881–902, 2003.
- 12 A. Lazarian and T. Hoang. Alignment of Dust by Radiative Torque: Recent Developments. In *Astronomical Polarimetry 2008: Science from Small to Large Telescopes*, volume 449 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, 2008. arXiv: [0901.0146](https://arxiv.org/abs/0901.0146).
- 13 B. Draine and P. Flatau. Discrete-Dipole Approximation For Scattering Calculations. *Journal of the Optical Society of America*, 11:1491–1499, 1994.
- 14 R. Adam et al. Planck 2015 results. X. Diffuse component separation: Foreground maps. *Astronomy and Astrophysics*, 2015. DOI: [10.1051/0004-6361/201525967](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201525967).
- 15 Planck Collaboration, P. A. R. Ade, N. Aghanim, D. Alina, M. I. R. Alves, C. Armitage-Caplan, M. Arnaud, D. Arzoumanian, M. Ashdown, F. Atrio-Barandela, and et al. Planck intermediate results. XIX. An overview of the polarized thermal emission from Galactic dust. *Astronomy and Astrophysics*, 576:A104, 2015. DOI: [10.1051/0004-6361/201424082](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201424082).
- 16 H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 2000.
- 17 W. H. Press, S. A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, 2007.
- 18 O. Rodrigues. Des lois géométriques qui régissent les déplacements d’un système solide dans l’espace, et de la variation des coordonnées provenant de ces déplacements considérés indépendamment des causes qui peuvent, les produire. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 5:380–440, 1840.
- 19 S. R. Buss. Accurate and Efficient Simulation of Rigid-Body Rotations. *Journal of Computational Physics*, 164(2):377–406, 2000. DOI: [10.1006/jcph.2000.6602](https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6602).

- 20 M. Efroimsky, A. Lazarian, and V. Sidorenko. Complex rotation with internal dissipation. Applications to cosmic-dust alignment and to wobbling comets and asteroids. *Recent Research Development in Astrophysics*, 1:59–123, 2003.
- 21 R. Papoular. On the Dissipation of the Rotation Energy of Dust Grains in Interstellar Magnetic Fields. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 457:1626–1635, 2016. DOI: [10.1093/mnras/stw020](https://doi.org/10.1093/mnras/stw020).
- 22 J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. Wiley, 1998. ISBN: 0-471-30932-X.
- 23 J. W. Strutt. On the Scattering of Light by Small Particles. *Philosophical Magazine*, 41(4):447–454, 1871.
- 24 G. Mie. Contributions to the Optics of Turbid Media, Particularly of Colloidal Metal Solutions. *Annalen der Physik*, 25(3):377–445, 1908. Translated for Royal Aircraft Establishment by Barbara Crossland.
- 25 A. Mohsen. On the impedance boundary condition. *Applied Mathematical Modelling*, 6(5):405–407, 1982. DOI: [10.1016/S0307-904X\(82\)80109-1](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(82)80109-1).
- 26 A. J. Poggio and E. K. Miller. Integral Equation Solutions of Three-dimensional Scattering Problems. *International Series of Monographs in Electrical Engineering*, pages 159–264, 1973.
- 27 J.A. Stratton. *Electromagnetic Theory*, volume 1. McGraw-Hill Company, 1941.
- 28 J. L. Volakis and K. Sertel. *Integral Equation Methods for Electromagnetics*. Scitech Publishing, 2012.
- 29 J. R. Mautz and R. F. Harrington. Electromagnetic Scattering from a Homogeneous Material Body of Revolution. *Archiv fuer Elektronik und Uebertragungstechnik*, 33:71–80, 1979.
- 30 S.R. Rengarajan and Y. Rahmat Samii. The Field Equivalence Principle: Illustration of the Establishment of the Non-intuitive Null Fields. *Antennas and Propagation Magazine, IEEE*, 42(4):122 – 128, 2000. DOI: [10.1109/74.868058](https://doi.org/10.1109/74.868058).

- 31 E. Topsakal, M.A. Carr, and John Leonidas Volakis. Simulation of 3D Non-metallic Scatterers with Circuit Analog Surfaces and Matrix Compression Based on the Adaptive Integral Method. 1999. Engineering, College of - Technical Reports.
- 32 P. Ylä-Oijala, J. Markkanen, S. Järvenpää, and S.P. Kiminki. Surface and Volume Integral Equation Methods for Time-harmonic Solutions of Maxwell's Equations. *Progress In Electromagnetics Research*, 149:15–44, 2014.
- 33 A. Bondeson, T. Rylander, and P. Ingelström. *Computation Electromagnetics*, volume 51 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, 2005. eISBN 0-387-26160-5.
- 34 S.M. Rao, D. Wilton, and A.W. Glisson. Electromagnetic Scattering by Surfaces of Arbitrary Shape. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 30(3): 409–418, 1982. DOI: [10.1109/TAP.1982.1142818](https://doi.org/10.1109/TAP.1982.1142818).
- 35 S. Järvenpää, M. Taskinen, and P. Ylä Oijala. Singularity subtraction technique for high-order polynomial vector basis functions on planar triangles. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions*, 54(1):42–49, 1 2006.
- 36 K. Muinonen, T. Nousiainen, P. Fast, K. Lumme, and J. Peltoniemi. Light scattering by Gaussian random particles: ray optics approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 55:577–601, 1996.
- 37 D. Eberly. Polyhedral Mass Properties (Revisited). Technical report, Geometric Tools, LLC, 2009. URL <http://www.geometrictools.com/Documentation/PolyhedralMassProperties.pdf>.
- 38 J. S. Mathis, P. G. Mezger, and N. Panagia. Interstellar radiation field and dust temperatures in the diffuse interstellar matter and in giant molecular clouds. *Astronomy and Astrophysics*, 128:212–229, 11 1983.