

## Высокоэффективный метод вычисления интеграла Стрэттона – Чу в задачах взаимодействия лазерного излучения с веществом

В. П. ЖУКОВ<sup>1,2,3,\*</sup>, М. П. ФЕДУРУК<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>3</sup>Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия

\*Контактный автор: Жуков Владимир Петрович, e-mail: [zukov@ict.nsc.ru](mailto:zukov@ict.nsc.ru)

Поступила 19 февраля 2021 г., доработана 9 апреля 2021 г., принята в печать 15 апреля 2021 г.

Описан высокоэффективный метод вычисления интеграла Стрэттона – Чу для определения электромагнитного поля, создаваемого отражением плоскопараллельного лазерного импульса от параболического зеркала. Рассмотрены импульс с постоянной во времени амплитудой и импульс фемтосекундной длительности, с зависимостью от времени в виде функции Гаусса. Описанный метод актуален для решения задач о взаимодействии сильно сфокусированных лазерных импульсов с веществом.

*Ключевые слова:* интеграл Стрэттона – Чу, интеграл от быстро осциллирующей функции, взаимодействие лазерного излучения с веществом, параболическое зеркало, фемтосекундный лазерный импульс, большая апертура.

*Цитирование:* Жуков В.П., Федорук М.П. Высокоэффективный метод вычисления интеграла Стрэттона – Чу в задачах взаимодействия лазерного излучения с веществом. Вычислительные технологии. 2021; 26(3):42–60. DOI:10.25743/ICT.2021.26.3.004.

### Введение

Для создания ультрарелятивистских электронных пучков [1], модификации прозрачных сред [2–5], микрохирургии [6–8] и многих других приложений используются сильно сфокусированные лазерные импульсы. На практике в качестве фокусирующего элемента часто выступает параболическое зеркало. Именно этот случай рассмотрен в данной работе. При математическом моделировании взаимодействия лазерных импульсов с веществом возникает необходимость вычисления электромагнитного поля сфокусированного импульса на расстоянии около 100 мкм от фокуса [1, 2, 5, 8–10]. Параксиальное приближение (уравнение Шрёдингера), в котором зависимость электрического поля от радиуса и времени имеет вид функции Гаусса, ввиду необходимости сильной фокусировки (большой апертуры) бывает неприменимо [11]. Решать уравнения Максвелла на расстояниях около сантиметра конечно-разностным методом с шагом меньше длины

волны нереально, поэтому используется представление искомых полей в виде интеграла Стрэттона – Чу (ИСЧ) [12].

Формулы Стрэттона – Чу применимы к излучению с постоянной амплитудой электромагнитного поля (зависимость от времени соответствует колебанию с заданной частотой). Для многих приложений используются ультракороткие (фемтосекундные) лазерные импульсы (ФЛИ), для которых простое умножение пространственного распределения электромагнитного поля постоянной амплитуды на некоторую функцию времени дает неправильный результат [11].

В настоящей работе выполнено обобщение ИСЧ на случай падающего на зеркало лазерного импульса с амплитудой, имеющей гауссову зависимость от времени. Подчеркнем, что возможность описания зависимости ФЛИ от времени функцией Гаусса в окрестности фокуса неочевидна и не может быть проконтролирована экспериментально. Распределение же макроскопического поля, падающего на зеркало лазерного излучения, может быть измерено. Ситуация, когда зависимость этого распределения от времени описывается функцией Гаусса, часто возникает в приложениях.

Распределение электромагнитного поля в отраженном от зеркала импульсе зависит от размеров зеркала  $w_0$  (или падающего на него пучка) и расстояния от зеркала до фокуса  $f_0$ . Однако величина поля в точке, расстояние от которой до фокуса много меньше  $f_0$ , зависит только от отношения  $w_0/f_0$  (с точностью до фазы), что имеет место во всех практически значимых случаях, при этом формулы ИСЧ значительно упрощаются.

Как и при лазерном импульсе постоянной амплитуды, так и в случае ФЛИ возникает необходимость вычисления ИСЧ, являющегося интегралом от быстроосциллирующей функции, в большом числе пространственных и временных точек. Это является непростой задачей. Например, в [1] из-за численных трудностей диаметр фокусирующего зеркала предполагался равным нескольким долям миллиметра, в то время как в действительности он был более 1 см.

В настоящей статье изложен высокоэффективный метод взятия ИСЧ, позволяющий без труда даже на маломощных компьютерах вычислять распределение полей, возникающих при отражении параллельного линейно-поляризованного лазерного импульса от параболического зеркала.

## 1. Импульс бесконечной длительности. Интеграл Стрэттона – Чу для параболического зеркала

Пусть на параболическое зеркало, находящееся в среде с показателем преломления  $n$ , падает линейно-поляризованная монохроматическая волна с декартовыми компонентами электрического поля в комплексной форме  $\mathbf{E}_{inc} = (E_0(x, y) \exp(-i\omega_0 t - ik_0 z), 0, 0)$ . Физическое электрическое поле равно действительной части  $\mathbf{E}_{inc}$ . Комплексные значения электрического  $\mathbf{E}$  и магнитного  $\mathbf{B}$  полей в точке наблюдения  $\mathbf{r}_p$ , возникающих при отражении этой волны от зеркала, вычисляются с помощью интеграла Стрэттона – Чу [1] (обозначения отличаются от принятых в [1]):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_p) = \frac{1}{8\pi f_0} \iint \left\{ ik_0 \left[ \frac{\mathbf{a}}{u} + \frac{\mathbf{b}}{u^2} \right] - \frac{\mathbf{b}}{u^3} \right\} \exp(-ik_0(z - u) - i\omega_0 t) E_0(x, y) dx dy, \quad (1)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}_p) = \frac{n}{8\pi f_0} \iint \left\{ \frac{ik_0}{u^2} - \frac{1}{u^3} \right\} \mathbf{c} \exp(-ik_0(z - u) - i\omega_0 t) E_0(x, y) dx dy, \quad (2)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{a} &= (4f_0, 0, 2x), \\
\mathbf{b} &= -2x(x - x_p, y - y_p, z - z_p), \\
\mathbf{c} &= (-2x(y - y_p), 2x(x - x_p) - 4f_0(z - z_p), 4f_0(y - y_p)), \\
u &= \sqrt{(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2 + (z - z_p)^2}, \\
z &= (x^2 + y^2)/(4f_0).
\end{aligned} \tag{3}$$

Здесь  $\omega_0 = k_0 \bar{c}$ ,  $\bar{c} \equiv c/n$  и  $c$  — скорости света в среде и вакууме соответственно;  $k_0$  — волновой вектор в среде. Интегралы берутся по поверхности параболического зеркала с фокусным расстоянием  $f_0$ , задаваемой выражением (3). Физические поля равны реальной части от (1), (2). В выражении для  $\mathbf{E}_{inc}$  расходимостью пучка пренебрегаем, поскольку интерес представляют только случаи, когда размеры зеркала и/или пучка значительно больше  $\lambda$ . Рассмотрим аксиально-симметричный падающий импульс  $E_0 = w_0^{-1} \tilde{E}_0(r/w_0)$ , где  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $w_0$  — размер зеркала (или радиальный размер падающего на зеркало лазерного импульса). Множитель  $w_0^{-1}$  добавлен для того, чтобы полная энергия импульса при одном и том же значении  $\tilde{E}_0$  была одинаковой при разных размерах зеркала  $w_0$ . Величину  $N_A = w_0/f_0$  будем называть апертурой зеркала.

Для анализа (1), (2) сделаем следующие преобразования. Введем цилиндрические координаты  $(r, \varphi, z)$ , по которым выполняется интегрирование, цилиндрические координаты точки вычисления поля  $(r_p, \varphi_p, z_p)$  и расстояние вдоль оси от точки вычисления поля до фокуса  $\Delta_p = z_p - f_0$ . Примем  $\tilde{u} = u/f_0$ ,  $\tilde{E}_0 = w_0 E_0$ ,  $\rho = r/w_0$  и учтем, что, например,  $\int_0^{2\pi} \sin(\varphi) F(\cos(\varphi - \varphi_p)) d\varphi = \sin \varphi_p \int_0^{2\pi} \cos \varphi F(\cos \varphi) d\varphi$  для произвольной функции  $F$ . В результате несложных выкладок можно убедиться в том, что при не зависящей от угла  $\varphi$  функции  $E_0$  компоненты полей в цилиндрических координатах имеют структуру (знак в выражении для  $E_\varphi$  выбран для удобства)

$$\begin{aligned}
E_r &= \eta_r \cos \varphi_p, & E_\varphi &= -\eta_\varphi \sin \varphi_p, & E_z &= \eta_z \cos \varphi_p, \\
B_r &= n\beta_r \sin \varphi_p, & B_\varphi &= n\beta_\varphi \cos \varphi_p, & B_z &= n\beta_z \sin \varphi_p.
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь функции  $\eta_r, \eta_\varphi, \eta_z, \beta_r, \beta_\varphi, \beta_z$  зависят от  $r_p, z_p, t$ . Для них запишем выражения

$$\begin{aligned}
\eta(r_p, \Delta_p, t, N_A, f_0, k_0) &= \frac{N_A k_0}{4\pi} e^{i(k_0 \Delta_p - \omega_0 t)} \int_0^\pi \int_0^\infty \rho d\rho d\varphi \tilde{E}_0(\rho) \times \\
&\times \left( i \frac{\mathbf{a}_\eta}{\tilde{u}} + i \frac{\mathbf{b}_\eta}{\tilde{u}^2} - \frac{\mathbf{b}_\eta}{k_0 f_0 \tilde{u}^3} \right) \cdot \exp(-ik_0 \tilde{g}),
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
\beta(r_p, \Delta_p, t, N_A, f_0, k_0) &= \frac{N_A k_0}{4\pi} e^{i(k_0 \Delta_p - \omega_0 t)} \int_0^\pi \int_0^\infty \rho d\rho d\varphi \tilde{E}_0(\rho) \times \\
&\times \left\{ \frac{i}{\tilde{u}^2} - \frac{1}{k_0 f_0 \tilde{u}^3} \right\} \mathbf{c}_\beta \cdot \exp(-ik_0 \tilde{g}),
\end{aligned} \tag{6}$$

$$\tilde{g} = f_0 \left( 1 + \Delta_p/f_0 + \frac{N_A^2 \rho^2}{4} \right) \left\{ 1 - \left( 1 + \frac{r_p^2/f_0^2 - N_A^2 \rho^2 (\Delta_p/f_0) - 2N_A \rho (r_p/f_0) \cos \varphi}{(1 + \Delta_p/f_0 + N_A^2 \rho^2/4)^2} \right)^{1/2} \right\},$$

$$\tilde{u} = \left( 1 + \Delta_p/f_0 + \frac{N_A^2 \rho^2}{4} \right) \left( 1 + \frac{r_p^2/f_0^2 - N_A^2 \rho^2 (\Delta_p/f_0) - 2N_A \rho (r_p/f_0) \cos \varphi}{(1 + \Delta_p/f_0 + N_A^2 \rho^2/4)^2} \right)^{1/2},$$

$$a_{\eta r} = a_{\eta \varphi} = 4,$$

$$b_{\eta r} = -2N_A^2 \rho^2 \cos^2 \varphi + 2N_A \rho (r_p/f_0) \cos \varphi, \quad b_{\eta \varphi} = -2N_A^2 \rho^2 \sin^2 \varphi,$$

$$c_{\beta \varphi} = -b_{\eta r} + 4(1 + \Delta_p/f_0 - N_A^2 \rho^2/4), \quad c_{\beta r} = -b_{\eta \varphi} + 4(1 + \Delta_p/f_0 - N_A^2 \rho^2/4),$$

$$a_{\eta z} = 2N_A \rho \cos \varphi,$$

$$b_{\eta z} = 2N_A \rho [1 + \Delta_p/f_0 - N_A^2 \rho^2/4] \cos \varphi,$$

$$c_{\beta z} = 4[N_A \rho \cos \varphi - (r_p/f_0)].$$

В (5), (6) отсчет времени сдвинут таким образом, чтобы в фокусе в момент времени  $t = 0$  фаза  $k_0 z_p - \omega_0 t$  равнялась нулю.

Из приведенных выше выражений легко видеть, что  $\beta_r - \beta_\varphi = \eta_r - \eta_\varphi$  или  $\beta_r - \eta_r = \beta_\varphi - \eta_\varphi$ . Кроме того,  $\eta_r \rightarrow \eta_\varphi$ , а  $\eta_z \sim r_p$  при  $r_p \rightarrow 0$ . Из общих свойств функций  $\eta$  и  $\beta$  отметим, что, как показывают расчеты, их фурье-образ по  $x$  и  $y$  при поперечном волновом числе  $\sqrt{k_x^2 + k_y^2} \geq \omega_0/\bar{c}$  равен нулю. Этого результата следовало ожидать.

## 2. Диапазон параметров. Зависимость ИСЧ от размеров зеркала

При исследованиях взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов со стеклами  $N_A = 0.1 \dots 1$ ,  $\lambda \sim 1$  мкм,  $w_0 \geq 0.5 \dots 2$  см [2, 5, 9–11]. Интерес представляли области, удаленные от фокуса на расстояние меньше или порядка 100 мкм.

Из (5), (6) следует, что при одинаковой функции  $\tilde{E}(\rho)$  (одной и той же мощности пучка) распределения электрического и магнитного полей зависят как от апертуры  $N_A$ , так и от фокусного расстояния зеркала  $f_0$  или, что при постоянной апертуре одно и то же, от размеров зеркала  $w_0$ . Однако при достаточно малых отношениях  $r_p/f_0$ ,  $\Delta_p/f_0$  зависимость распределения полей от  $f_0$  пропадает (с точностью до несущественной фазы), т. е. размер зеркала перестает играть роль. Разложение в ряд Тейлора и требование малости соответствующих членов (наиболее жесткие условия диктует показатель экспоненты) показывают, что это справедливо при  $f_0 \gg 2\pi r_p^2/\lambda$  и  $f_0 \gg 2\pi N_A^2 \Delta_p^2/\lambda$  или в интересующем нас диапазоне параметров  $f_0 \sim w_0$  более нескольких десятков миллиметров. Однако численное взятие ИСЧ (см. ниже) дает значительно меньшую величину: в случае импульса с распределением поля по радиусу в виде функции Гаусса (гауссов импульс)

$$\tilde{E}_0(\xi) \sim e^{-\xi^2}$$

зависимость  $\eta$  и  $\beta$  от  $f_0$  в области взаимодействия исчезает уже при размере зеркала более нескольких долей миллиметра. В случае однородного пучка, падающего на ограниченное зеркало, или резко ограниченного импульса ( $\tilde{E}_0(\xi) = 1$  при  $\xi < 1$ ,  $\tilde{E}_0(\xi) = 0$  при  $\xi > 1$ , hat-top-импульс) зависимость распределения полей от размера зеркала становится несущественной при размерах зеркала порядка нескольких миллиметров. При уменьшении апертуры предел  $f_0 \rightarrow \infty$  достигается при меньших  $f_0$ . Таким образом, приближение  $f_0 \rightarrow \infty$  приемлемо практически во всех важных случаях, поэтому рассмотрим именно его. В этом пределе формулы (5), (6) принимают вид

$$\eta_{\infty, r}(r_p, \Delta_p, t, N_A, k_0) = \frac{iN_A k_0}{4\pi} e^{i(k_0 \Delta_p - \omega_0 t)} \times$$

$$\times \int_0^\pi \int_0^\infty \left( \frac{4 + N_A^2 \rho^2 (\sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi)}{u^2} \right) \cdot \exp(-ik_0 g) \tilde{E}_0(\rho) \rho d\rho d\varphi, \quad (7)$$

$$\eta_{\infty, \varphi} = \frac{iN_A k_0}{4\pi} e^{i(k_0 \Delta_p - \omega_0 t)} \int_0^\pi \int_0^\infty \left( \frac{4 - N_A^2 \rho^2 (\sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi)}{u^2} \right) \cdot \exp(-ik_0 g) \tilde{E}_0(\rho) \rho d\rho d\varphi, \quad (8)$$

$$\eta_{\infty, z} = \frac{iN_A k_0}{4\pi} e^{i(k_0 \Delta_p - \omega_0 t)} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{4N_A \rho \cos \varphi}{u^2} \cdot \exp(-ik_0 g) \tilde{E}_0(\rho) \rho d\rho d\varphi, \quad (9)$$

$$u = 1 + N_A^2 \rho^2 / 4, \quad g = \frac{N_A^2 \rho^2 \Delta_p + 2N_A \rho r_p \cos \varphi}{2(1 + N_A^2 \rho^2 / 4)}, \quad (10)$$

$$\beta_\infty = \eta_\infty.$$

Если к тому же  $N_A \rightarrow 0$ , то  $\eta_{\infty, r} = \eta_{\infty, \varphi}, \eta_{\infty, z} \rightarrow 0$ . При гауссовом распределении падающего на зеркало импульса и  $N_A \rightarrow 0$  получаем распределение Гаусса, соответствующее точному решению линейного уравнения Шрёдингера (параксиальное приближение)

$$\eta_{\infty, r} = \frac{iN_A k_0 w_f}{2w} e^{i(k_0 \Delta_p - \omega_0 t)} \exp \left( -\frac{r_p^2}{w^2} + i \frac{k_0}{2f} r_p^2 - i \arctg \left( \frac{\Delta_p}{z_f} \right) \right),$$

$$w_f = 2/(k_0 N_A), \quad w = w_f (1 + \Delta_p^2 / z_f^2)^{1/2}, \quad f = \Delta_p + z_f^2 / \Delta_p, \quad z_f = 2/(k_0 N_A^2).$$

### 3. Импульс конечной длительности

Пусть электрическое поле падающей на зеркало волны зависит от времени и описывается формулой

$$\mathbf{E}_{inc} = (E_0(r) \exp(-i\omega_0 t - ik_0 z - (t + z/\bar{c})^2 / t_L^2), 0, 0).$$

Для вычисления распределения отраженного поля представим эту волну в виде набора плоских волн, проведя фурье-преобразование по времени. Для каждой из волн получим распределения (5), (6), (7)–(9). Выполнив обратное фурье-преобразование в пределе  $f_0 \rightarrow \infty$  (формулы (7)–(9)), установим, что отличия от (7)–(9) будут заключаться в том, что подынтегральное выражение умножится на фактор

$$\left( 1 + 2i \frac{\tau - g/(\bar{c}t_L)}{k_0 \bar{c}t_L} \right) e^{-(\tau - g/(\bar{c}t_L))^2},$$

где  $\tau = (\Delta_p - \bar{c}t)/(\bar{c}t_L)$ . Например, для  $\eta_r$  имеем

$$\eta_{\infty, r} = \frac{iN_A k_0 e^{ik_0(\Delta_p - \bar{c}t)}}{4\pi} \times$$

$$\times \int_0^\pi \int_0^\infty \left( \frac{4 + N_A^2 \rho^2 (\sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi)}{u^2} \right) e^{-ik_0 g} \tilde{E}_0(\rho) \left( 1 + 2i \frac{\tau - g/(\bar{c}t_L)}{k_0 \bar{c}t_L} \right) e^{-(\tau - g/(\bar{c}t_L))^2} \rho d\varphi d\rho. \quad (11)$$

Здесь для удобства сравнения с (7) амплитуда волны и начало отсчета времени выбираются такими, чтобы при  $\tau = 0$  и  $t_L \rightarrow \infty$  выражение (11) переходило в (7). При

большом  $\tau$  поле экспоненциально мало. Интерес представляют  $\tau$  меньше либо порядка нескольких единиц. При большой длительности импульса  $t_L$  формула (11) переходит в (7) после умножения на  $\exp(-\tau^2)$ . В этом случае можно использовать формулы для импульса бесконечной длительности, умноженные на гауссов временной фактор. Однако при длительности импульса несколько десятков фемтосекунд, что является типичным, величина  $g/(\bar{c}t_L)$  в исследуемом диапазоне параметров может быть порядка единицы и более, т. е. необходимо вычислять интеграл (11).

Не сложно показать, что выражения типа (11) обладают следующим свойством:

$$\begin{aligned}\eta_{\infty,r}(-\Delta_p, -t) &= -\eta_{\infty,r}^*(\Delta_p, t), & \eta_{\infty,\varphi}(-\Delta_p, -t) &= -\eta_{\infty,\varphi}^*(\Delta_p, t), \\ \eta_{\infty,z}(-\Delta_p, -t) &= \eta_{\infty,z}^*(\Delta_p, t),\end{aligned}$$

поэтому ниже для определенности будем вычислять поле перед фокусом:

$$\Delta_p \leq 0.$$

#### 4. Эффективный метод взятия ИСЧ

Как легко оценить, величина  $k_0g$ , стоящая под экспонентой, изменяется в большом диапазоне значений (тысячи и более), т. е. мы имеем дело с интегралом от быстроосциллирующей функции. Обычные методы (например, метод Симпсона) в этом случае не применимы [1]. Ниже в Приложении 1 описана идея метода, который существенно улучшает ситуацию. Но и он, как показывают расчеты, требует неприемлемо больших вычислительных ресурсов, когда необходимо рассчитать электрические поля в тысячах точек по времени и пространству. Поэтому в настоящей работе предложен намного более эффективный метод вычисления интегралов типа (11). Он заключается в переходе от координат интегрирования  $\rho$  и  $\varphi$  к переменной  $g$  (10) и некоторой угловой переменной  $\theta$ . Сокращение вычислительных ресурсов происходит за счет следующих обстоятельств.

Поскольку подынтегральная функция в интеграле по  $\theta$  является плавной, этот интеграл для вычисления требует мало ресурсов. В методе, описанном в Приложении 1, интегралы как по  $\rho$ , так и по  $\varphi$  берутся от быстроосциллирующих функций.

Интегралы по  $\theta$  не зависят от времени. При вычислении интегралов вида (11) в разные моменты времени интеграл по  $\theta$  рассчитывается один раз. А, например, в упомянутой задаче о расчете граничных условий требуется вычислять электрическое поле в сотнях (до тысячи) точек по времени. Таким образом, если для расчета в одной точке пространства и в  $K$  точках по времени метод, описанный в Приложении 1, требует порядка  $KI_1J_1$  ( $I_1$  и  $J_1$  — число точек интегрирования по  $\rho$  и  $\varphi$ ) числа операций, то предлагаемый метод требует только  $I_2J_2 + KI_2$  ( $I_2$  и  $J_2$  — число точек интегрирования по  $g$  и  $\theta$ ), причем  $J_2$  существенно меньше  $J_1$ .

Рассмотрим этот метод подробнее. Изучим поведение функции  $g$ . Используя декартовы координаты  $x = \rho \cos \varphi$ ,  $y = \rho \sin \varphi$  (здесь и ниже определение  $x$ ,  $y$  отличается от (1)–(3)), уравнение (10) можно переписать в виде

$$g - g_{med} = N_A r_p \frac{x - X_{med}}{1 + N_A^2(x^2 + y^2)/4}, \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned}g_{med} &= 2\Delta_p, \\ X_{med} &= 2\Delta_p/(N_A r_p).\end{aligned} \quad (13)$$

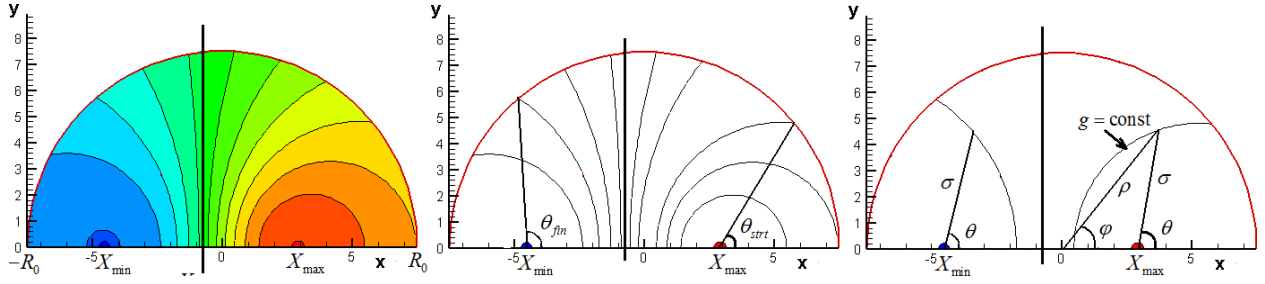


Рис. 1. Типичные изолинии функции  $g$  и координаты  $\sigma$ ,  $g$  и  $\theta$   
 Fig. 1. Typical isolines for function  $g$  and the coordinates  $\sigma$ ,  $g$  и  $\theta$

Из (12) следует, что изолинии  $g$  состоят из двух семейств вложенных окружностей ( $g < g_{med}$ ,  $x < X_{med}$  и  $g > g_{med}$ ,  $x > X_{med}$ ), разделенных прямой  $x = X_{med}$ , на которой, как и на бесконечности,  $g = g_{med}$  (рис. 1). Центры окружностей лежат на оси  $x$ .

Максимум и минимум  $g$  достигаются на оси  $x$  в точках  $x = X_m$ , определяемых уравнением

$$\frac{N_A^2 X_m^2}{4} = 1 + \frac{N_A \Delta_p X_m}{r_p}, \quad m = \max, \min, \quad (14)$$

и они равны

$$g_m = \frac{N_A^2 \Delta_p X_m^2 + 2 N_A r_p X_m}{2(1 + N_A^2 X_m^2 / 4)}. \quad (15)$$

Можно показать (Приложение 2), что при  $\Delta_p < 0$

$$X_{\min} < X_{med} < 0, \quad g_{\min} < g_{med} < 0, \quad X_{\max} > 0, \quad g_{\max} > 0, \quad |X_{\min}| > X_{\max}.$$

При численном взятии ИСЧ интегрирование ведется по кругу  $\rho \leq R_0$ , где  $R_0$  определяется размером падающего на зеркало лазерного пучка ( $\tilde{E}_0(\rho > R_0) = 0$ ) или такими значениями  $\rho$ , при которых функция  $\tilde{E}_0$  настолько мала, что не дает существенного вклада в интеграл.

Разделим область интегрирования на две подобласти (это необходимо при  $R_0 > |X_{med}|$ ), лежащие слева и справа от прямой  $x = X_{med}$ . В каждой из подобластей от полярных координат  $\rho$  и  $\varphi$  перейдем к новым полярным координатам  $\sigma$  и  $\theta$  с центром в точках экстремума  $m = \min, \max$  (рис. 1):

$$\rho \cos \varphi = X_m + \sigma \cos \theta, \quad (16)$$

$$\rho \sin \varphi = \sigma \sin \theta. \quad (17)$$

В каждой из подобластей  $g$  — однозначная функция  $\sigma$  и  $\theta$ . В дальнейшем при взятии интеграла будем использовать переменные  $g$  и  $\theta$ . В Приложении 2 приведены формулы, позволяющие записывать различные выражения в удобной для аналитического исследования и создания вычислительных кодов форме.

Таким образом, для вычисления, например,  $\eta_{\infty, r}$  необходимо взять интеграл ( $\rho$ ,  $\varphi$ ,  $\sigma$  — функции  $g$  и  $\theta$ )

$$\Phi(g) = \int_{\theta_{strt}(g)}^{\theta_{fin}(g)} Y d\theta, \quad Y = \left( \frac{4 + N_A^2 \rho^2 (\sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi)}{u^2} \right) \tilde{E}_0(\rho) \sigma \frac{d\sigma}{dg},$$

а затем интегралы

$$\int_{g_{strt}}^{g_{fin}} e^{-\chi-ik_0g} \Phi dg, \quad \int_{g_{strt}}^{g_{fin}} e^{-\chi-ik_0g} g \Phi dg, \quad \chi = (\tau - g/(\bar{c}t_L))^2.$$

В зависимости от того, лежат ли точки минимума и/или максимума и прямая  $x = X_{med}$  в области интегрирования, интеграл распадается на несколько интегралов (см. таблицу и рис. 1) с соответствующими пределами интегрирования по  $g$ . Через  $g_{maxbc}$ ,  $g_{minbc}$  обозначены максимум и минимум  $g$  на границе  $\rho = R_0$ , которые при  $\Delta_p \leq 0$  достигаются на оси  $x$  в точках  $x = R_0$  и  $x = -R_0$  соответственно. Необходимость разделения области интегрирования на участки  $(g_{min} : g_{minbc})$ ,  $(g_{minbc} : g_{med})$  и т. д. связана с тем, что в этих точках первые или вторые производные  $\Phi(g)$  терпят разрыв.

Знак “–” в выражениях, приведенных в таблице, связан с тем, что интеграл по  $g$  берется по нарастанию  $g$ , в то время как интегралу по  $\sigma$  от нуля до некоторого значения в случае полярной системы координат, связанной с точкой максимума, соответствует изменение  $g$  от  $g_{max}$  в сторону уменьшения  $g$ .

Функция  $Y$  меняется плавно, и взятие интеграла от нее (например, методом Симпсона) не представляет труда и требует незначительного числа операций. Интегралы по  $g$

Разбиение области интегрирования в зависимости от соотношений между  $R_0$ ,  $X_{max}$ ,  $X_{min}$  и  $X_{med}$

	$X_{max} \leq R_0$	$X_{max} > R_0$
$X_{med} \leq -R_0$	$- \int_{g_{minbc}}^{g_{maxbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_{\theta_{strt}(g)}^{\pi} Y d\theta -$ $- \int_{g_{maxbc}}^{g_{max}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\pi} Y d\theta$	$- \int_{g_{minbc}}^{g_{maxbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_{\theta_{strt}(g)}^{\pi} Y d\theta$
$X_{min} \leq -R_0$ и	$\int_{g_{minbc}}^{g_{med}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\theta_{fin}(g)} Y d\theta -$ $- \int_{g_{med}}^{g_{maxbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_{\theta_{strt}(g)}^{\pi} Y d\theta -$	$\int_{g_{minbc}}^{g_{med}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\theta_{fin}(g)} Y d\theta -$ $- \int_{g_{med}}^{g_{maxbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_{\theta_{strt}(g)}^{\pi} Y d\theta$
$X_{med} > -R_0$	$- \int_{g_{maxbc}}^{g_{max}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\pi} Y d\theta$	
$X_{min} > -R_0$	$\int_{g_{min}}^{g_{minbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\pi} Y d\theta +$ $+ \int_{g_{minbc}}^{g_{med}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\theta_{fin}(g)} Y d\theta -$ $- \int_{g_{med}}^{g_{maxbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_{\theta_{strt}(g)}^{\pi} Y d\theta -$ $- \int_{g_{maxbc}}^{g_{max}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\pi} Y d\theta$	$\int_{g_{min}}^{g_{minbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\pi} Y d\theta +$ $+ \int_{g_{minbc}}^{g_{med}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_0^{\theta_{fin}(g)} Y d\theta -$ $- \int_{g_{med}}^{g_{maxbc}} dge^{-\chi-ik_0g} \int_{\theta_{strt}(g)}^{\pi} Y d\theta$



вида  $\int_{g_{strt}}^{g_{fin}} f e^{-ik_0 g} dg$  берутся методом, аналогичным методу, описанному в Приложении 1:

$$\begin{aligned} & \int_{g_{strt}}^{g_{fin}} f e^{-ik_0 g} dg = \\ & = \sum_{i=1,3,\dots,I_0-1} e^{-ik_0 g_i} \int_{g_{i-1}}^{g_{i+1}} \left( f_i + \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{g_{i+1} - g_{i-1}} (g - g_i) + \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(g_{i+1} - g_{i-1})^2/2} (g - g_i)^2 \right) e^{-ik_0 (g - g_i)} dg. \quad (18) \end{aligned}$$

Здесь сетка такова, что  $g_{i=0} = g_{strt}$ ,  $g_{i=I_0} = g_{fin}$ . Сетка может быть неравномерной, но для нечетных  $i$  должно быть  $g_i = (g_{i+1} + g_{i-1})/2$ . Легко видеть, что в пределе  $k_0(g_{i+1} - g_i) \rightarrow 0$  метод переходит в метод Симпсона четвертого порядка. Но в отличие от последнего он позволяет вычислять интеграл с приемлемой точностью при  $k_0(g_{i+1} - g_i) \geq 1$ .

Конечная длительность импульса не усложняет взятие ИСЧ, так как в этом случае подынтегральное выражение умножается на функцию Гаусса от  $g$ :  $e^{-(\tau - g/(\bar{c}t_L))^2}$ . При больших значениях  $t_L$  эта функция плавная и ее наличие принципиально ничего не меняет. При малых  $t_L$  интеграл по  $g$  достаточно брать только по отрезку, где  $e^{-(\tau - g/(\bar{c}t_L))^2}$  непренебрежимо мала. Это даже облегчает задачу, поскольку диапазон изменений  $g$  уменьшается. Отметим, что описываемый метод показывает достаточно хорошие результаты, поэтому при подготовке настоящей работы усовершенствования, учитывающие последнее обстоятельство, не проводились.

Все приведенные ниже примеры расчетов по изложенным причинам относятся к случаю  $t_L \rightarrow \infty$ . Остальные параметры:  $\lambda = 0.8$  мкм,  $n = 1.4533$  (показатель преломления для плавленого кварца),  $k_0 = 11.4$  мкм<sup>-1</sup>,  $N_A = 0.8/n$ . Будем вычислять величину  $\eta_{\infty,r}$  (результаты для других компонентов аналогичны) в точке  $\Delta_p = -100$  мкм,  $r_p = 101$  мкм. При этих параметрах  $X_{\max} \approx 1.515$ ,  $X_{\min} \approx -8.7$ ,  $X_{med} \approx -3.6$ .

Подчеркнем, что для физических приложений представляют интерес точки наблюдения, расположенные ближе к оси зеркала. А при уменьшении  $r_p$  точность вычислений значительно улучшается, поскольку уменьшается диапазон изменения  $g$ . Поэтому физические расчеты будут требовать меньше вычислительных ресурсов, чем исследуемый вариант.

Рассмотрим поведение относительной погрешности вычисления  $E_{rr} = |\eta_{\infty,r} - \eta_{r_{exact}}|/|\eta_{r_{exact}}|$ . В качестве точного значения интеграла  $\eta_{r_{exact}}$  выступает величина, вычисленная на очень мелкой сетке, на которой начинают сказываться ошибки округления. Отметим, что излагаемый метод вычисления ИСЧ и метод, описанный в Приложении 1, демонстрируют сходимость к одной и той же величине, однако последний метод требует несравнимо больших вычислительных ресурсов.

На рис. 2 (кривая 1) приведена зависимость относительной погрешности  $E_{rr}$  в случае гауссова импульса от произведения  $k_0 h \sim h/\lambda$ , где  $h$  — шаг сетки по  $g$  на отрезке  $(g_{med} : g_{\max bc})$ . Сетка равномерная на отрезках  $(g_{\min bc} : g_{med})$ ,  $(g_{med} : g_{\max bc})$ ,  $(g_{\max bc} : g_{\max})$ . Число узлов на отрезках  $(g_{\min bc} : g_{med})$  и  $(g_{\max bc} : g_{\max})$  выбиралось таким, чтобы на них укладывалось четное число шагов длины, близкой к  $h$ . По  $\theta$  сетка также равномерная с одинаковым числом узлов для всех  $g$ , равным 40. Заметим, что:

- 1) число узлов по  $\theta$  взято с большим запасом;

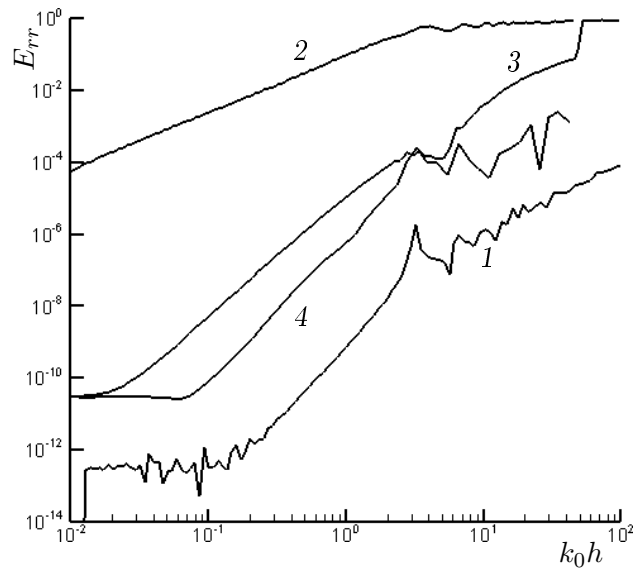


Рис. 2. Относительная погрешность вычисления ИСЧ в случае гауссова импульса (кривая 1) и импульса (23) при  $R_0 = 1$  (кривые 2–4). Кривая 2 соответствует равномерной сетке без вычета асимптотики, 3 — равномерной сетке с вычетом асимптотики, 4 — неравномерной сетке с вычетом асимптотики

Fig. 2. Relative error for Stratton–Chu integral in the case of Gaussian pulse and the pulse (23) for  $R_0 = 1$  (lines 2–4). line 2 corresponds to equidistant grid without deduction of the asymptotic, 3 — equidistant grid with deduction of the asymptotic, 4 — non-equidistant grid with deduction of the asymptotic

- 2) для некоторых  $g$  зависимости от  $\theta$  практически нет, что также дает дополнительные возможности для уменьшения вычислительных затрат, которые при подготовке настоящей работы не использовались.

Радиус расчетной области  $R_0 = 7$ . Его дальнейшее увеличение приводило к изменениям  $\eta_{\infty,r}$  в десятом знаке. При таком  $R_0$  интервал  $(g_{\min} : g_{\min bc})$  отсутствует.

Из рис. 2 (кривая 1) видно, что уже при  $k_0 h \leq 100$  погрешность  $E_{rr} \leq 10^{-4}$ . Для большинства физических расчетов приемлемой является величина 1 %, т.е.  $E_{rr} = 10^{-2}$ . Прямолинейный участок кривой 1 соответствует зависимости  $E_{rr} \sim h^4$ . Ошибки округления начинают сказываться при  $k_0 h \leq 0.2$ . Однако в случае резко ограниченного импульса, падающего на зеркало, сходимость сильно ухудшается (кривая 2). Погрешность становится меньше приемлемого 1 % только при  $k_0 h \leq 0.3$ , а на прямолинейном участке  $E_{rr} \sim h^{1.5}$ . Это связано с тем, что пределы интегрирования по  $\theta$  и, соответственно, функция  $\Phi$ , получающаяся после интегрирования по  $\theta$ , зависят от  $g$  в окрестности точек  $g_{mbc}$  ( $m = \max, \min$ ) как  $\sqrt{|g - g_{mbc}|}$ . Метод (18) предназначен для функций, разлагаемых в ряды по целым степеням  $g$ , что является причиной ухудшения точности расчета. В случае падающего на зеркало импульса, имеющего распределение Гаусса, это не играет роли, так как значение  $\tilde{E}_0(\rho)$  экспоненциально мало в окрестности границы  $\rho = R_0$  ( $g \rightarrow g_{mbc}$ ).

Рассматривая изолинии  $g$ , проходящие через окрестность точек  $|x| = R_0, y = 0$  (см. рис. 1), из геометрических соображений следует ожидать зависимость  $\Phi \sim \sqrt{|g - g_{mbc}|}$  в окрестности соответствующих точек. Более того, когда область интегрирования целиком лежит в полуплоскости  $x > X_{med}$ , т.е.  $X_{med} < -R_0$ , имеем (рис. 3, см. также Приложение 2):

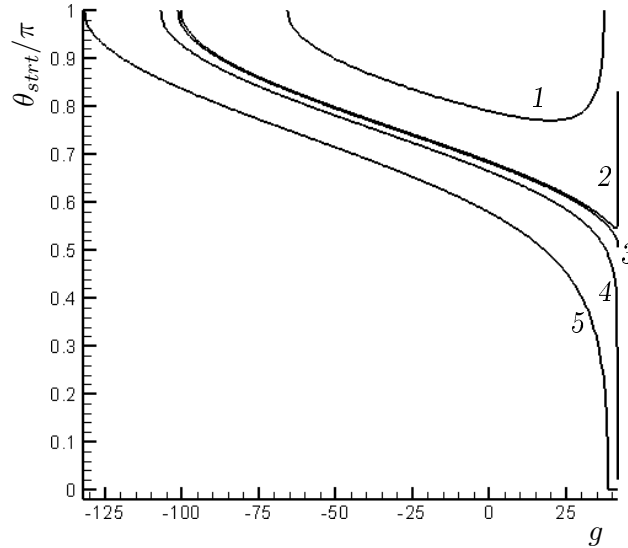


Рис. 3. Зависимость  $\theta_{strt}(g)$  при  $R_0 = 1; 1.5; X_{max}; 1.6; 2$  (кривые 1–5 соответственно). Пределы изменения  $g$  зависят от  $R_0$

Fig. 3. Dependence of  $\theta_{strt}(g)$  for  $R_0 = 1; 1.5; X_{max}; 1.6; 2$  (lines 1–5). The limits of variation of  $g$  depends on  $R_0$

при  $g \rightarrow g_{min bc}$

$$\theta_{strt} \approx \pi - \frac{2R_0}{R_0 + X_{max}} \left( \frac{g - g_{min bc}}{g_{max bc} - g_{min bc}} \right)^{1/2}, \quad (19)$$

при  $g \rightarrow g_{max bc}$  и  $R_0 > X_{max}$

$$\theta_{strt} \approx \frac{2R_0}{R_0 - X_{max}} \left( \frac{g_{max bc} - g}{g_{max bc} - g_{min bc}} \right)^{1/2}, \quad (20)$$

при  $g \rightarrow g_{max bc}$  и  $R_0 = X_{max}$

$$\theta_{strt} \approx \frac{\pi}{2} + \left( \frac{g_{max bc} - g}{g_{max bc} - g_{min bc}} \right)^{1/2}, \quad (21)$$

при  $g \rightarrow g_{max bc}$  и  $R_0 < X_{max}$

$$\theta_{strt} \approx \pi - \frac{2R_0}{|R_0 - X_{max}|} \left( \frac{g_{max bc} - g}{g_{max bc} - g_{min bc}} \right)^{1/2}, \quad (22)$$

т. е.

$$\frac{\theta_{strt}}{\sqrt{g_{max bc} - g}} \sim \frac{1}{R_0 - X_{max}} \rightarrow \infty$$

при  $R_0 \rightarrow X_{max}$ , но  $R_0 \neq X_{max}$ .

Функция  $\lim_{g \rightarrow g_{max bc}} \theta_{strt}(g, R_0)$  является разрывной функцией аргумента  $R_0 - X_{max}$ . Аналогичная ситуация имеет место для  $\theta_{fin}$  в окрестности соответствующей точки.

Рассмотрим методы повышения точности вычисления ИСЧ при резко ограниченном импульсе. Для удобства дальнейшего анализа положим, что радиус этого импульса может быть отличен от 1:

$$\tilde{E}_0(\xi) = 1 \quad \text{при} \quad \xi < R_0, \quad \tilde{E}_0(\xi) = 0 \quad \text{при} \quad \xi > R_0. \quad (23)$$

В противном случае необходимо подбирать соответствующие параметры  $r_p$  и  $\Delta_p$  для того, чтобы добиться желаемого соотношения  $R_0$  и  $X_{\max}$ , что делает изложение более громоздким и менее наглядным.

Заметим, что функция, стоящая под интегралом по  $\theta$ , в окрестности минимума и максимума также разлагается по степеням  $\sqrt{g - g_{\min}}$  и  $\sqrt{g_{\max} - g}$ . Однако можно показать, что после интегрирования по  $\theta$  от нуля до  $\pi$  останутся только целые степени  $g$ . Поэтому вычисление интегралов по  $g$  в пределах  $(g_{\min} : g_{\min bc})$  и  $(g_{\max bc} : g_{\max})$  в тех случаях, когда это требуется (см. таблицу), не составляет труда. Более того, результаты расчетов позволяют высказать предположение, что при постоянном значении  $\tilde{E}_0$  в результате интегрирования по  $\theta$  от нуля до  $\pi$  получается не зависящая от  $g$  функция для всех компонент  $\eta_\infty$ . Доказательство или опровержение этого предположения не входит в задачу авторов статьи.

Для преодоления трудностей, связанных с зависимостью вида  $\sqrt{|g - g_{mbc}|}$ , когда  $|R_0 - X_{\max}|/R_0$  не очень мал или имеется точное равенство  $R_0 = X_{\max}$ , эффективным оказывается следующий метод. В окрестности проблемных точек представим функцию  $\Phi$  как  $P_4 + \phi$ , где  $P_4$  — полином четвертой степени от  $\sqrt{|g - g_{mbc}|}$ . Коэффициенты этого полинома находятся из равенства  $P_4 = \Phi$  в ближайших к  $g_{mbc}$  пяти узлах сетки  $g_i$ . Возможно также аналитическое разложение подынтегральных функций в соответствующие ряды. Но аналитический подход слишком громоздок. Интегралы вида

$\int_{g_{mbc}}^{g_*} |g - g_{mbc}|^{n/2} e^{-ik_0 g} dg$  берутся с высокой точностью численно (Приложение 3). Интеграл от  $\phi$  берется методом (18). Вблизи проблемной точки  $\phi$  имеет порядок  $|g - g_{mbc}|^{5/2}$ , и интеграл от нее мал, а вдали от этой точки  $\phi$  разлагается в ряд Тейлора по целым степеням  $|g - g_{mbc}|$  и использование (18) оправданно. Значение  $g_*$  ограничивается либо значениями  $g$ , при которых хорошо выполняется приближенное равенство  $\Phi \approx P_4$ , либо простирается на какую-то часть области интегрирования, например, в окрестности точки  $g_{\max bc}$  используется  $g_* = g_{\max bc} - (g_{\max bc} - g_{\min bc})/4$ . Отметим, что в некоторых случаях  $\Phi \approx P_4$  на значительной части области интегрирования.

На рис. 2 кривая 3 соответствует импульсу (23) при  $R_0 = 1$ , равномерной сетке по  $g$  и с вычетом  $P_4$  из крайних точек. Видно, что точность вычисления, в том числе на грубой сетке, значительно выше, чем без вычета  $P_4$ . Прямолинейный участок кривой 3 соответствует  $E_{rr} \sim h^{3.5}$ . Если в небольшой окрестности  $g_{\max bc}$  и  $g_{\min bc}$  существенно уменьшить шаг сетки, то результат будет еще лучше. Например, кривая 4 на рис. 2 соответствует тому, что на расстоянии менее  $(g_{\max bc} - g_{\min bc})/80$  от граничных точек шаг сетки уменьшен в 12 раз по отношению к шагу сетки в остальной части области.

На рис. 2 кривая 3 соответствует импульсу (23) при  $R_0 = 1$ , равномерной сетке по  $g$  и с вычетом  $P_4$  из крайних точек. Видно, что точность вычисления, в том числе на грубой сетке, значительно выше, чем без вычета  $P_4$ . Прямолинейный участок кривой 3 соответствует  $E_{rr} \sim h^{3.5}$ . Если в небольшой окрестности  $g_{\max bc}$  и  $g_{\min bc}$  существенно уменьшить шаг сетки, то результат будет еще лучше. Например, кривая 4 на рис. 2 соответствует тому, что на расстоянии менее  $(g_{\max bc} - g_{\min bc})/80$  от граничных точек шаг сетки уменьшен в 12 раз по отношению к шагу сетки в остальной части области.

Рассмотренный случай ( $R_0 = 1$ ) соответствует величине  $|R_0 - X_{\max}|/R_0 \approx 0.5$ ,  $R_0 < X_{\max}$ . Аналогичная картина наблюдается при точном равенстве  $R_0 = X_{\max}$  и когда  $R_0$  ощутимо больше  $X_{\max}$ .

При  $|R_0 - X_{\max}|/R_0 \ll 1$  изменения  $\theta_{strt}$  в окрестности  $g_{\max bc}$  более резкие и немонотонные (см. рис. 3). Попытка вычесть особенности в этом случае приводит к громоздким выражениям и неоправданному усложнению программы. Кроме того, при, например, сглаженном распределении (23), которое имеет вид

$$\tilde{E}_0(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi \leq R_0 - 2\delta, \\ (1 + \cos(\pi(\xi - R_0 + 2\delta)/(2\delta)))/2, & R_0 - 2\delta < \xi < R_0, \\ 0, & \xi \geq R_0, \end{cases} \quad (24)$$

вторая производная  $\tilde{E}_0(\xi)$  терпит разрыв в точках  $\xi = R_0 - 2\delta$  и  $R_0$ , что также ухудшает точность вычисления интеграла. Возможны и более сложные зависимости  $\tilde{E}_0(\xi)$ . Поэтому рациональнее представляется комбинация описанного выше вычитания корневых особенностей и сильного уменьшения шага сетки по  $g$  в окрестностях  $g = g_{mbc}$ . При не очень малом  $|R_0 - X_{\max}|/R_0$  или  $R_0 = X_{\max}$  точность достигается за счет как вычитания особенностей, так и уменьшения шага сетки. В обратном случае — только за счет уменьшения шага. Например, вариант импульса (23) и  $R_0 = 1.5$  соответствует  $|R_0 - X_{\max}|/R_0 \approx 0.01 \ll 1$ , т. е. относится к обсуждаемому проблемному случаю. Однако использование экспоненциального уменьшения шага сетки на проблемном участке ( $g > g_{\max bc} - 2$ ) от  $h \approx 8.7$  при  $g < g_{\max bc} - 2$  до  $h \approx 2.6 \cdot 10^{-4}$  при  $g \approx g_{\max bc}$  обеспечивает относительную ошибку взятия ИСЧ менее 0.1 % при  $k_0 h \leq 100$ . Общее число шагов по  $g$  порядка 70. Отметим, что при использованных параметрах  $g_{\max bc} - g_{\min bc} \approx 142.5$ .

В случае распределения (24) при  $R_0 = 1.5$ ,  $\delta = 0.05$ ,  $k_0 h \leq 100$  погрешность  $E_{rr} \leq 2 \cdot 10^{-3}$  достигалась при использовании следующей сетки: в интервале  $(g_{\min bc} : g_{\min bc} + 25)$  шаг изменялся по экспоненциальному закону от 1.9 до 3, на интервале  $(g_{\min bc} + 25 : g_{\max bc} - 3)$  шаг был постоянным и порядка 8.25, на интервале  $(g_{\max bc} - 3 : g_{\max bc})$  изменялся по экспоненциальному закону от 0.35 до  $5 \cdot 10^{-5}$ . Эта сетка имела менее 100 узлов.

## Заключение

Описан высокоэффективный численный метод вычисления интеграла Стрэттона–Чу для нужд построения граничных условий при решении задач о взаимодействии сильно сфокусированного параболическим зеркалом линейно-поляризованного лазерного импульса с материалом. Метод также может быть использован для расчетов ускорения заряженных частиц лазерным импульсом, исследования распределения полей излучения и т. п.

Метод настолько эффективен, что в настоящее время потребности его улучшения нет, но, в принципе, существуют следующие возможности его совершенствования.

1. Использование сеток по  $g$  и  $\theta$ , учитывающих особенности конкретных подынтегральных функций. По-видимому, такие сетки могут ускорить вычисление ИСЧ в разы.
2. Применение более совершенных методов аналитического исследования поведения функций в окрестности проблемных точек.

Метод может быть обобщен на случай неаксиально-симметричного импульса, падающего на зеркало. Однако в этом случае нет формул типа (4), упрощающих вычисления, и распределение полей зависит от трех координат точки вычисления поля.

**Благодарности.** Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-11-20040).

## Список литературы

- [1] Popov K.I., Bychenkov V.Yu., Rozmus W., Sydora R.D. Electron vacuum acceleration by tightly focused laser pulse. *Physics of Plasmas*. 2008; (15):013108.

- [2] **Popov K.I., McElcheran C., Briggs K., Mack S., Ramunno L.** Morphology of femtosecond laser modification of bulk dielectrics. *Optics Express*. 2011; 19(1):271–282.
- [3] **Tan D., Sharafudeen K.N., Yue Y., Qiu J.** Femtosecond laser induced phenomena in transparent solid materials: Fundamentals and applications. *Progress in Materials Science*. 2016; (76):154–228.
- [4] **Gattass R.R., Mazur E.** Femtosecond laser micromachining in transparent materials. *Nature Photonics*. 2008; (2):219–225.
- [5] **Dostovalov A.V., Wolf A.A., Mezentsev V.K., Okhrimchuk A.G., Babin S.A.** Quantitative characterization of energy absorption in femtosecond laser micro-modification of fused silica. *Optics Express*. 2015; 23(25):32541–32547.
- [6] **Vogel A., Venugopalan V.** Mechanisms of pulsed laser ablation of biological tissues. *Chemical Reviews*. 2003; (103):577–644.
- [7] **Sugioka K., Hanada Y., Midorikawa K.** Three-dimensional femtosecond laser micromachining of photosensitive glass for biomicrochips. *Laser & Photonics Reviews*. 2010; (4):386–400.
- [8] **Arnold C.L., Heisterman A., Ertmer W., Lubatschowski H.** Computational model for nonlinear plasma formation in high NA micromachining of transparent materials and biological cells. *Optical Express*. 2007; 15(16):10303–10317.
- [9] **Zhukov V.P., Akturk S., Bulgakova N.M.** Asymmetric interactions induced by spatiotemporal couplings of femtosecond laser pulses in transparent media. *Journal of the Optical Society of America B*. 2019; 36(6):1556–1564.
- [10] **Жуков В.П., Федорук М.П.** Численная реализация модели воздействия фемтосекундного лазерного импульса на стекло в приближении нелинейных уравнений Максвелла. *Математическое моделирование*. 2019; 31(6):107–128.
- [11] **Жуков В.П., Булгакова Н.М., Федорук М.П.** Уравнения Максвелла и нелинейное уравнение Шрёдингера для описания объемного взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с прозрачными диэлектриками: Влияние граничных условий. *Оптический журнал*. 2017; 84(7):13–21.
- [12] **Stratton J.A., Chu L.J.** Diffraction theory of electromagnetic waves. *Physcall Review*. 1939; (56):99–107.

## Приложение 1

Пусть необходимо вычислить интеграл

$$I = \int_0^{R_0} \int_0^\pi F \exp(-ik_0g) d\rho d\varphi,$$

где  $F$  и  $g$  — плавные функции  $\rho$  и  $\varphi$ . Показатель экспоненты  $k_0g$  в области интегрирования может изменяться на величину много больше 1.

Введем сетку  $r_i = ih_r$ ,  $\varphi_j = jh_\varphi$  с шагами  $h_r$ ,  $h_\varphi$  и вычислим  $I$  с помощью формулы

$$I = \sum_{i,j} \int_{r_i}^{r_{i+1}} \int_{\varphi_j}^{\varphi_{j+1}} F(r, \varphi) e^{-ik_0g(r, \varphi)} dr d\varphi \approx$$

$$\approx \int_{r_i}^{r_{i+1}} \int_{\varphi_j}^{\varphi_{j+1}} \left( F_{i+1/2j+1/2} + \frac{\partial F}{\partial r} \Big|_{i+1/2j+1/2} (r - r_{j+1/2}) + \frac{\partial F}{\partial \varphi} \Big|_{i+1/2j+1/2} (\varphi - \varphi_{j+1/2}) \right) \times \\ \times \exp \left( -ik_0(g_{i+1/2j+1/2} + \frac{\partial g}{\partial r} \Big|_{i+1/2j+1/2} (r - r_i) + \frac{\partial g}{\partial \varphi} \Big|_{i+1/2j+1/2} (\varphi - \varphi_{j+1/2})) \right) dr d\varphi.$$

Последние интегралы берутся элементарно. В настоящей работе  $F$  и аналогично  $g$  вычислялись в точках  $i, j$ . Соответственно,

$$F_{i+1/2,j+1/2} = (F_{i,j} + F_{i+1,j} + F_{i,j+1} + F_{i+1,j+1})/4, \\ \partial F / \partial r \Big|_{i+1/2,j+1/2} = (F_{i+1,j} + F_{i+1,j+1} - F_{i,j} - F_{i+1,j+1}) / (2h_r), \\ \partial F / \partial \varphi \Big|_{i+1/2,j+1/2} = (F_{i,j+1} + F_{i+1,j+1} - F_{i,j} - F_{i+1,j}) / (2h_\varphi).$$

## Приложение 2

Приведем некоторые выражения, полезные при написании кодов и анализе ИСЧ.

Вычислим пределы интегрирования  $\theta_{strt}$  и  $\theta_{fin}$  (см. рис. 1). Из (10) и определения  $g_{min bc}$ ,  $g_{max bc}$  легко показать, что значению  $g \in (g_{min bc} : g_{max bc})$  на границе области интегрирования  $\rho = R_0$  соответствует угол  $\varphi = \varphi_g$ , определяемый формулой

$$\cos \varphi_g = 1 - 2 \frac{g_{max bc} - g}{g_{max bc} - g_{min bc}}. \quad (\text{П1})$$

Из (П1), (16), (17) следует

$$\cos \theta_{strt} = \frac{R_0 \cos \varphi_g - X_{max}}{((R_0 \cos \varphi_g - X_{max})^2 + R_0^2 \sin^2 \varphi_g)^{1/2}}, \\ \cos \theta_{fin} = \frac{R_0 \cos \varphi_g - X_{min}}{((R_0 \cos \varphi_g - X_{min})^2 + R_0^2 \sin^2 \varphi_g)^{1/2}}.$$

В частности, при  $X_{max} = R_0$  (максимум лежит на границе) запишем

$$\cos \theta_{strt} \equiv -(1 - \cos \varphi_g)^{1/2} / \sqrt{2} = - \left( \frac{g_{max bc} - g}{g_{max bc} - g_{min bc}} \right)^{1/2}.$$

В предельных случаях  $g \rightarrow g_{max bc}$ ,  $g_{min bc}$  получаем (19)–(22), а также следующие выражения:

при  $X_{med} \leq -R_0$  и  $g \rightarrow g_{min bc}$

$$\theta_{strt} \approx \pi - \frac{2R_0}{R_0 + X_{max}} \left( \frac{g - g_{min bc}}{g_{max bc} - g_{min bc}} \right)^{1/2},$$

при  $X_{min} = -R_0$

$$\cos \theta_{fin} = (1 + \cos \varphi_g)^{1/2} / \sqrt{2} = \left( \frac{g - g_{min bc}}{g_{max bc} - g_{min bc}} \right)^{1/2},$$

при  $g \rightarrow g_{\min bc}$

$$\theta_{fin} = \frac{\pi}{2} - \left( \frac{g - g_{\min bc}}{g_{\max bc} - g_{\min bc}} \right)^{1/2},$$

при  $X_{med} \leq -R_0$  и  $g \rightarrow g_{\min bc}$

$$\cos \theta_{strt} \approx -1 + \frac{2R_0^2}{(R_0 + X_{\max})^2} \frac{g - g_{\min bc}}{g_{\max bc} - g_{\min bc}},$$

а следовательно,

$$\theta_{strt} \approx \pi - \frac{2R_0}{R_0 + X_{\max}} \left( \frac{g - g_{\min bc}}{g_{\max bc} - g_{\min bc}} \right)^{1/2}.$$

Приведем полезные выражения, связывающие  $X_{\max}$ ,  $X_{\min}$ ,  $g_{\max}$ ,  $g_{\min}$ . Из (14) имеем (везде рассматривается случай  $\Delta_p \leq 0$ )

$$X_{\max} = \frac{2}{N_A} \text{sign}(\Delta_p) \left( \frac{|\Delta_p|}{r_p} - \sqrt{1 + \Delta_p^2/r_p^2} \right),$$

$$X_{\min} = \frac{2}{N_A} \text{sign}(\Delta_p) \left( \frac{|\Delta_p|}{r_p} + \sqrt{1 + \Delta_p^2/r_p^2} \right).$$

Соответственно,  $X_{\min}X_{\max} = -4/N_A^2$ ,  $(X_{\min} + X_{\max})/2 = X_{med}$ . Из последнего выражения видно, что расстояние от точек максимума и минимума до прямой  $x = X_{med}$  одинаковое и равно

$$\sigma_0 = X_{\max} - X_{med} = X_{med} - X_{\min} = \frac{X_{\max} - X_{\min}}{2}.$$

С учетом (14) можно переписать формулу (15) в виде

$$g_m = 2 \frac{N_A X_m \Delta_p + r_p}{N_A X_m}. \quad (\text{П2})$$

Действительно, необходимо доказать  $\frac{N_A^2 \Delta_p X_m^2 + 2N_A r_p X_m}{2(1 + N_A^2 X_m^2/4)} = 2 \frac{N_A X_m \Delta_p + r_p}{N_A X_m}$  или  $(N_A^2 \Delta_p X_m^2 + 2N_A r_p X_m) N_A X_m = 4(N_A X_m \Delta_p + r_p)(1 + N_A^2 X_m^2/4)$ . Подставляя  $X_m^2$  из (14) и раскрывая скобки, приходим к равенству (П2). С учетом (13) из (П2) получим

$$g_m = g_{med} + \frac{2r_p}{N_A X_m},$$

или

$$X_{\max}(g_{\max} - g_{med}) = X_{\min}(g_{\min} - g_{med}) = 2r_p/N_A, \quad (\text{П3})$$

или

$$X_m = \frac{2r_p}{N_A(g_m - g_{med})}.$$

Для вычисления ИСЧ требуется величины  $\rho^2$  и  $\rho \cos \varphi$  выразить через  $g$  и  $\theta$ , но сначала выразим их через  $\sigma$  и  $\theta$ . Это легко сделать с помощью (16) и (17). Имеем  $\rho^2 = \sigma^2 + X_m^2 + 2X_m \sigma \cos \theta$ . Затем, зная  $\rho$ , по (16) вычислим  $\rho \cos \varphi$ .

Теперь необходимо вычислить зависимость  $\sigma$  от  $g$  и  $\theta$ . Подставляя (16), (17) в (10), запишем

$$g = \frac{N_A^2 \Delta_p (\sigma^2 + X_m^2 + 2X_m \sigma \cos \theta) + 2N_A r_p (X_m + \sigma \cos \theta)}{2(1 + N_A^2 (\sigma^2 + X_m^2 + 2X_m \sigma \cos \theta)/4)}.$$



Отсюда, используя (15), получим

$$N_A^2 (g/2 - \Delta_p) \sigma^2 + (gN_A^2 X_m - 2N_A (N_A X_m \Delta_p + r_p)) \sigma \cos \theta + 2(1 + N_A^2 X_m^2/4)(g - g_m) = 0.$$

С учетом (13) и (П2) запишем

$$(N_A^2/2)(g - g_{med})\sigma^2 - N_A^2 X_m (g_m - g)\sigma \cos \theta - 2(g_m - g)(1 + N_A^2 X_m^2/4) = 0$$

или

$$\sigma = \frac{(g - g_{med}) \sigma^2}{2X_m (g_m - g) \cos \theta} - \frac{2(1 + N_A^2 X_m^2/4)}{N_A^2 X_m \cos \theta}.$$

Используя обозначение  $a = \frac{g - g_{med}}{2X_m \sigma_m (g_m - g)}$ , где  $\sigma_m = \sigma_0$ , если  $m = \max$ , и  $\sigma_m = -\sigma_0$ , если  $m = \min$ , это выражение можно переписать как

$$a\sigma^2 - (\sigma/\sigma_m) \cos \theta - 1 = 0,$$

что при  $x \geq X_{med}$  дает

$$\sigma = \frac{\cos \theta + \sqrt{\cos^2 \theta + 4a\sigma_0^2}}{2a\sigma_0},$$

а при  $x \leq X_{med}$

$$\sigma = \frac{\sqrt{\cos^2 \theta + 4a\sigma_0^2} - \cos \theta}{2a\sigma_0}. \quad (\text{П4})$$

Остальные корни соответствуют отрицательным значениям  $\sigma$ .

Элемент площади  $\rho d\rho d\varphi = \sigma d\sigma d\theta$  в координатах  $g$  и  $\theta$  перейдет в  $\sigma(\partial\sigma/\partial g)dg d\theta$ . Для величины  $\sigma\partial\sigma/\partial g$  из (П4) запишем

$$\sigma\partial\sigma/\partial g = \left( \frac{\sigma_0}{\sqrt{\cos^2 \theta + 4a\sigma_0^2}} - \sigma \right) \frac{(g_m - g_{med})\sigma}{(g - g_{med})(g_m - g)}.$$

Рассмотрим предельные случаи. В точках минимума и максимума  $a \rightarrow \infty$ . В случае  $g \rightarrow g_{\max}$  имеем  $\sigma \approx \frac{1}{\sqrt{a}} + \frac{\cos \theta}{2a\sigma_0}$ , т. е.  $\sigma^2 \approx \frac{1}{a} + \frac{\cos \theta}{a^{3/2}\sigma_0}$ , а  $\frac{\sigma\partial\sigma}{\partial g} \approx -\frac{X_{\max}\sigma_0}{g_{\max} - g_{med}}$ . При  $g \rightarrow g_{\min}$  аналогично получим  $\frac{\sigma\partial\sigma}{\partial g} \approx \frac{X_{\min}\sigma_0}{g_{\min} - g_{med}}$ .

В случае  $g \rightarrow g_{med}$  и  $x \geq X_{med}$  с учетом того, что прямая  $x = X_{med}$  соответствует  $\cos \theta < 0$ , из (П4) имеем  $\sigma \approx -\frac{\sigma_0}{\cos \theta} + \frac{a\sigma_0^3}{\cos^3 \theta}$ . Следовательно,

$$\frac{\sigma\partial\sigma}{\partial g} \approx -\frac{\sigma_0^4}{\cos^4 \theta} \frac{da}{dg} = \frac{(-\sigma_0/\cos \theta)^3}{2X_{\max}(g_{\max} - g_{med}) \cos \theta}.$$

При  $g \rightarrow g_{med}$  и  $x \leq X_{med}$ , учитывая, что  $\cos \theta > 0$ , и принимая во внимание (П3), из (П4) получим, что  $\sigma$  и  $\sigma\partial\sigma/\partial g$  имеют те же значения, что и при  $g \rightarrow g_{med}$  и  $x \geq X_{med}$ . Заметим, что для  $\sigma$  этот результат очевиден, поскольку  $X_{\max} - X_{med} = X_{med} - X_{\min}$ .

При вычислении полей на оси  $r_p = 0$  интеграл по  $\varphi$  легко берется аналитически.

### Приложение 3

Интегралы вида  $\int_{g_{mbc}}^{g^*} |g - g_{mbc}|^{n/2} e^{-ik_0g} dg$  при нечетных  $n$  легко сводятся к интегралу

$I_0 = \int_0^x e^{-iy^2} dy$ , который в описываемых расчетах при  $x < 1$  берем с помощью 12 первых членов разложения в ряд Тэйлора:

$$I_0 = \int_0^x e^{-iy^2} dy = x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n x^{2n}}{n!(2n+1)} = x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_n}{2n+1}, \quad s_n = (-ix^2/n)s_{n-1}, \quad s_0 = 1.$$

При  $x > 100$  используем асимптотику

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-i\pi/4} - \frac{e^{-ix^2}}{2ix} - \frac{e^{-ix^2}}{4x^3}.$$

На оставшемся промежутке решаем дифференциальное уравнение  $dI_0/dx = e^{-ix^2}$  с помощью метода Рунге–Кутты четвертого порядка с шагом 0.001. Описанная процедура позволяет вычислять  $I_0$  с относительной погрешностью менее  $10^{-8}$ .

#### High efficient method for calculating the Stratton–Chu integral for problems of interaction of laser radiation with materials

ZHUKOV VLADIMIR P.<sup>1,2,3,\*</sup>, FEDORUK MIKHAIL P.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Federal Research Center for Information and Computational Technologies, 630090, Novosibirsk, Russia

<sup>2</sup>Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia

<sup>3</sup>Novosibirsk State Technical University, 630073, Novosibirsk, Russia

\*Corresponding author: Zhukov Vladimir P., e-mail: zukov@ict.nsc.ru

Received February 19, 2021, revised April 9, 2021, accepted April 15, 2021.

#### Abstract

The interaction of femtosecond laser pulses with materials is usually modelled within the approach of nonlinear Maxwell equations. The laser pulse in the calculations is initiated by specifying the conditions for the electric field at the boundary of the computational domain, which is located at a distance of 100–200 micron from the focus. The usually used Gaussian distribution for the radius and time in the boundary conditions are not applicable for such pulses. It is necessary to consider a real optic system, or a system, which can be realized. In the presented paper we address the situation in which the laser pulse is created by the reflection of parallel pulse from a parabolic mirror. To determine the field near the focus we use the Stratton–Chu integral (SCI), with fast oscillating sub-integral function. It makes very difficult to calculate SCI. In the presented paper a

highly efficient method allows to overcome this difficulty. The main idea is that a change of variables is made in the integral, which, in the case of a short pulse being important for applications, allows calculating the integral over one of the variables once for all times. In addition, for this variable, the integrand is smooth and its calculation does not require large computational resources. The paper investigates the accuracy of calculating the SCI by the proposed method and demonstrates its high efficiency.

*Keywords:* Stratton–Chu integral, integration of fast oscillating function, laser-matter interaction, parabolic mirror, femtosecond laser pulse, large aperture.

*Citation:* Zhukov V.P., Fedoruk M.P. High efficient method for calculating the Straton–Chu integral for problems of interaction of laser radiation with materials. Computational Technologies. 2021; 26(3):42–60. DOI:10.25743/ICT.2021.26.3.004. (In Russ.)

**Acknowledgements.** This research was partly supported by Russian Science Foundation (project No. 20-11-20040).

### References

1. **Popov K.I., Bychenkov V.Yu., Rozmus W., Sydora R.D.** Electron vacuum acceleration by tightly focused laser pulse. *Physics of Plasmas*. 2008; (15):013108.
2. **Popov K.I., McElcheran C., Briggs K., Mack S., Ramunno L.** Morphology of femtosecond laser modification of bulk dielectrics. *Optics Express*. 2011; 19(1):271–282.
3. **Tan D., Sharafudeen K.N., Yue Y., Qiu J.** Femtosecond laser induced phenomena in transparent solid materials: Fundamentals and applications. *Progress in Materials Science*. 2016; (76):154–228.
4. **Gattass R.R., Mazur E.** Femtosecond laser micromachining in transparent materials. *Nature Photonics*. 2008; (2):219–225.
5. **Dostovalov A.V., Wolf A.A., Mezentsev V.K., Okhrimchuk A.G., Babin S.A.** Quantitative characterization of energy absorption in femtosecond laser micro-modification of fused silica. *Optics Express*. 2015; 23(25):32541–32547.
6. **Vogel A., Venugopalan V.** Mechanisms of pulsed laser ablation of biological tissues. *Chemical Reviews*. 2003; (103):577–644.
7. **Sugioka K., Hanada Y., Midorikawa K.** Three-dimensional femtosecond laser micromachining of photosensitive glass for biomicrochips. *Laser & Photonics Reviews*. 2010; (4):386–400.
8. **Arnold C.L., Heisterman A., Ertmer W., Lubatschowski H.** Computational model for nonlinear plasma formation in high NA micromachining of transparent materials and biological cells. *Optical Express*. 2007; 15(16):10303–10317.
9. **Zhukov V.P., Akturk S., Bulgakova N.M.** Asymmetric interactions induced by spatiotemporal couplings of femtosecond laser pulses in transparent media. *Journal of the Optical Society of America B*. 2019; 36(6):1556–1564.
10. **Zhukov V.P., Fedoruk M.P.** Numerically implemented impact of a femtosecond laser pulse on glass in the approximation of nonlinear Maxwell equations. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2020; 12(1):77–89.
11. **Zhukov V.P., Bulgakova N.M., Fedoruk M.P.** Nonlinear Maxwell’s and Schrödinger equations for describing the volumetric interaction of femtosecond laser pulses with transparent solid dielectrics: Effect of the boundary conditions. *Journal of Optical Technology*. 2017; 84(7):439–446.
12. **Stratton J.A., Chu L.J.** Diffraction theory of electromagnetic waves. *Physcall Review*. 1939; (56):99–107.