

Параллельный алгоритм для решения трехмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью

Т.З. Исмагилов

Предлагается конечно-объемный метод для численного решения трехмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на неструктурированных сетках. Метод имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству для разрыва диэлектрической проницаемости проходящего по произвольной гладкой поверхности. Численный алгоритм допускает параллельную реализацию с помощью геометрической декомпозиции для использования на многопроцессорных ЭВМ. Приведенные результаты тестовых расчетов подтверждают второй порядок предлагаемого метода и высокую эффективность параллельной реализации.

1. Введение

Уравнения Максвелла описывают эволюцию электромагнитного поля и его взаимодействие с зарядами и токами. Необходимость решения уравнений Максвелла обусловлена широким спектром практических приложений в таких актуальных областях как нанотехнологии. К сожалению, для большинства практических задач аналитических решений не существует. Этот факт привел к появлению различных численных алгоритмов решения уравнений Максвелла. Наибольшее развитие из них к настоящему времени получили конечно-разностные методы.

Начало интенсивному развитию конечно-разностных методов для решения уравнений Максвелла было положено в работе [1], где была предложена схема второго порядка аппроксимации по времени и пространству, основанная на введении смещенных сеток. В дальнейшем различные конечно-разностные алгоритмы успешно применялись для решения различных задач [2–4].

Однако для многих практических задач в областях со сложной геометрией более эффективными могут оказаться конечно-объемные методы, которые позволяют использовать неструктурированные сетки. С их помощью можно более точно представить границы расчетной области, а также границы между подобластями с различными свойствами среды.

К настоящему времени было предложено несколько конечно-объемных алгоритмов для решения уравнений Максвелла. В алгоритмах предложенных в работе [5] электрические и магнитные поля аппроксимируются на смещенных сетках как и в работе [1]. В алгоритмах рассмотренных в работах [6–8] все компоненты электромагнитного поля аппроксимируются в центрах ячеек.

С точки зрения приложений, важным является возможность распараллеливания численных алгоритмов, что позволяет применять их на многопроцессорных ЭВМ. Конечно-объемные алгоритмы использующие неструктурированные сетки могут быть распараллелены с помощью геометрической декомпозиции. В работе [9] рассматривалась параллельная реализация конечно-объемного алгоритма для решения двумерных уравнений Максвелла.

Одной из основных трудностей при построении схем второго порядка для уравнений Максвелла остаётся случай разрывных свойств среды. В работе [2] рассматривались различные способы сглаживания разрывной диэлектрической проницаемости. Но ни один из них не позволял сохранять порядок аппроксимации исходной схемы.

Для решения этой проблемы в работе [8] была предложена конечно-объемная схема для решения двумерных уравнений Максвелла на треугольных сетках. Предложенная схема имела второй порядок аппроксимации и позволяла сохранить его даже для случая разрывной диэлектрической проницаемости. Однако, построенные алгоритмы позволяли прово-

диль расчёты только для случая, когда разрыв диэлектрической проницаемости проходил по координатной линии.

Очевидно, что необходимы более универсальные алгоритмы, позволяющие проводить расчёты для трёхмерных уравнений Максвелла в областях с разрывной диэлектрической проницаемостью где разрыв может проходить по произвольной гладкой поверхности. Такие алгоритмы должны допускать эффективную параллельную реализацию для использования на многопроцессорных ЭВМ.

В данной работе предлагается конечно-объёмная схема для численного решения трёхмерных уравнений Максвелла в областях с разрывной диэлектрической проницаемостью имеющая второй порядок аппроксимации по времени и пространству. Разрыв диэлектрической проницаемости может проходить по произвольной гладкой поверхности. Для получения второго порядка аппроксимации используется вычисление градиентов специально выбираемых компонент с помощью метода наименьших квадратов. Предлагаемая схема позволяет проводить расчёты на тетраэдральных сетках и допускает эффективную параллельную реализацию с помощью метода геометрической декомпозиции. В статье приводятся результаты расчётов на многопроцессорных ЭВМ которые подтверждают второй порядок точности предлагаемой схемы и высокую эффективность параллельной реализации.

2. Уравнения Максвелла

В отсутствие зарядов и токов система уравнений Максвелла в безразмерных переменных имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \mathbf{rot} \mathbf{H} = 0, \text{ где } \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \mathbf{rot} \mathbf{E} = 0, \text{ где } \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (2)$$

$$\mathbf{div} \mathbf{D} = 0, \quad \mathbf{div} \mathbf{B} = 0. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{E} — электрическое поле, \mathbf{H} — магнитное поле, \mathbf{D} — электрическая индукция, \mathbf{B} — магнитная индукция, ε — диэлектрическая проницаемость, μ — магнитная проницаемость. Далее везде полагаем, что магнитная проницаемость $\mu = 1$. Данная система может быть представлена в векторной консервативной форме

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{F}_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{F}_2 + \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{F}_3 = 0, \quad (4)$$

где \mathbf{U} — вектор консервативных переменных, \mathbf{F}_1 , \mathbf{F}_2 и \mathbf{F}_3 — векторы потоков

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ H_3 \\ -H_2 \\ 0 \\ -E_3 \\ E_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_2 = \begin{pmatrix} -H_3 \\ 0 \\ H_1 \\ E_3 \\ 0 \\ -E_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_3 = \begin{pmatrix} H_2 \\ -H_1 \\ 0 \\ -E_2 \\ E_1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Проинтегрировав уравнение (4) по объёму Ω с границей $\partial\Omega$ можно получить эквивалентную интегральную форму

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{U} d\Omega + \int_{\partial\Omega} (n_1 \mathbf{F}_1 + n_2 \mathbf{F}_2 + n_3 \mathbf{F}_3) dS = 0, \quad (6)$$

где $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ — внешняя нормаль. Систему (4) также можно записать в недивергентной форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{V} + A_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{V} + A_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{V} + A_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{V} = 0, \quad (7)$$

где \mathbf{V} вектор потоковых переменных

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ H_1 \\ H_2 \\ H_3 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

связанный с вектором консервативных переменных матрицей перехода Θ : $\mathbf{V} = \Theta \mathbf{U}$

$$\Theta = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

а матрицы A_1, A_2, A_3 записываются как

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

3. Разностная схема

Рассмотрим расчётную область в трёхмерном пространстве. Будем считать что в ней построена сетка из тетраэдров Δ . Если две различные ячейки сетки соприкасаются, то они имеют общую грань, общее ребро или общую вершину. Для каждой ячейки Δ определим объём Ω_Δ и барицентр \mathbf{X}_Δ^B как

$$\Omega_\Delta = \int_\Delta d\Omega, \quad \mathbf{X}_\Delta^B = \frac{1}{\Omega_\Delta} \int_\Delta \mathbf{X} d\Omega. \quad (12)$$

Для каждой грани Γ определим площадь S_Γ и центр \mathbf{X}_Γ^C как

$$S_\Gamma = \int_\Gamma dS, \quad \mathbf{X}_\Gamma^C = \frac{1}{S_\Gamma} \int_\Gamma \mathbf{X} dS. \quad (13)$$

Для приближенного решения уравнения (6) рассмотрим разностную схему

$$\Omega_{\Delta_i} \frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\tau} + \sum_{k=1}^m \int_{\Gamma_k} (n_1 \mathbf{F}_1 + n_2 \mathbf{F}_2 + n_3 \mathbf{F}_3) d\Gamma = 0. \quad (14)$$

где \mathbf{U}^n аппроксимация значения \mathbf{U} в барицентре i -ой ячейки \mathbf{X}^B в момент времени $t_n = n\tau$, τ — шаг по времени, а Ω_{Δ_i} объём i -ой ячейки.

Для того чтобы в (14) найти значение \mathbf{U} на новом временном слое — \mathbf{U}_i^{n+1} , надо вычислить интегралы по граням Γ_k ячейки Δ_i которые представляют собой потоки искомым величин через грани. Предполагаем, что в ячейке искомые функции изменяются линейно, по значениям этих функций в барицентре ячейки и по вычисленным градиентам функций находим значения функций в центре грани со стороны i -ой ячейки в момент времени $n\tau + \tau/2$. Аналогичным образом находим значения функций в центре грани со стороны ячейки, находящейся по другую сторону грани. По значениям функций по разные стороны грани, вообще говоря различным, находим потоки в центре грани в момент времени $n\tau + \tau/2$. Тогда интегралы в (14) приближенно вычисляем по формуле прямоугольников и получаем.

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\tau}{\Omega_{\Delta_i}} \sum_{k=1}^m s_{\Delta_i}^k \mathbf{F}_i^k, \quad (15)$$

$s_{\Delta_i}^k$ — площадь k -ой грани \mathbf{F}_i^k — поток через k -ую грань.

3.1. Нахождение потоков через границу ячейки

Пусть $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ — вектор нормали к общей грани ячеек Δ_L и Δ_R в точке \mathbf{X}^C . Если предположить что производные компонент электромагнитных полей по касательной

к грани равны 0, то систему в недивергентной форме (7) можно переписать как

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{V} + A \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{V} = 0, \quad (16)$$

где $A = A_1 n_1 + A_2 n_2 + A_3 n_3$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} n_3 & -\frac{1}{\varepsilon} n_2 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} n_3 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} n_1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} n_2 & -\frac{1}{\varepsilon} n_1 & 0 \\ 0 & n_3 & n_2 & 0 & 0 & 0 \\ n_3 & 0 & -n_1 & 0 & 0 & 0 \\ -n_2 & n_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Для этой системы можно рассмотреть одномерную задачу Римана где в качестве начальных значений принять аппроксимацию компонент электромагнитных полей в центре грани со стороны ячеек Δ_L и $\Delta_R - \mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C)$ и $\mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C)$. Решение этой задачи [7, 8] будем использовать для вычисления потока через границу ячейки.

Обозначим $D = R^{-1}AR$, здесь D — диагональная матрица из собственных значений матрицы A , D^\pm — диагональные матрицы, полученные из D заменой всех отрицательных (положительных) собственных чисел нулями, R — матрица, столбцы которой являются правыми собственными векторами матрицы A . Тогда $A = RDR^{-1} = RD^+R^{-1} + RD^-R^{-1} = A^+ + A^-$. Учитывая $\mathbf{V} = \Theta \mathbf{U}$ для вычисления потоков через грань в (7) будем использовать

$$\mathbf{F} = \Theta^{-1}(A^+ \mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C) + A^- \mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C)) \quad (18)$$

или

$$\mathbf{F} = C^+ \mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C) + C^- \mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C) \quad (19)$$

где используя обозначения $a = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$, $b = \sqrt{\varepsilon}$, $\varepsilon = 2\varepsilon_L \varepsilon_R / (\varepsilon_L + \varepsilon_R)$

$$C^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a(1 - n_1^2) & -an_1 n_2 & -an_1 n_3 & 0 & n_3 & -n_2 \\ -an_1 n_2 & a(1 - n_2^2) & -an_2 n_3 & -n_3 & 0 & n_1 \\ -an_1 n_3 & -an_2 n_3 & a(1 - n_3^2) & n_2 & -n_1 & 0 \\ 0 & -n_3 & n_2 & b(1 - n_1^2) & -bn_1 n_2 & -bn_1 n_3 \\ n_3 & 0 & -n_1 & -bn_1 n_2 & b(1 - n_2^2) & -bn_2 n_3 \\ -n_2 & n_1 & 0 & -bn_1 n_3 & -bn_2 n_3 & b(1 - n_3^2) \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$C^- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a(n_1^2 - 1) & an_1 n_2 & an_1 n_3 & 0 & n_3 & -n_2 \\ an_1 n_2 & a(n_2^2 - 1) & an_2 n_3 & -n_3 & 0 & n_1 \\ an_1 n_3 & an_2 n_3 & a(n_3^2 - 1) & n_2 & -n_1 & 0 \\ 0 & -n_3 & n_2 & b(n_1^2 - 1) & bn_1 n_2 & bn_1 n_3 \\ n_3 & 0 & -n_1 & bn_1 n_2 & b(n_2^2 - 1) & bn_2 n_3 \\ -n_2 & n_1 & 0 & bn_1 n_3 & bn_2 n_3 & b(n_3^2 - 1) \end{pmatrix}. \quad (21)$$

3.2. Нахождение значений компонент электромагнитных полей на границе ячейки

Рассмотрим исходную систему уравнений в недивергентной форме (7). Пусть \mathbf{X}^B — барицентр ячейки, а \mathbf{X}^C — центр грани. Тогда $\mathbf{V}(\mathbf{X}^C)$ может быть найдена по следующей формуле со вторым порядком по времени и пространству:

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}^C) = \mathbf{V}(\mathbf{X}^B) + \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{X}^B)(\mathbf{X}^C - \mathbf{X}^B) - \frac{\tau}{2} \left(A_1 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_1}(\mathbf{X}^B) + A_2 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_2}(\mathbf{X}^B) + A_3 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_3}(\mathbf{X}^B) \right). \quad (22)$$

Таким образом значения электромагнитных полей на грани ячейки сетки в (19) выражаются следующим образом

$$\mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C) = \mathbf{V}(\mathbf{X}_L^B) + \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{X}_L^B)(\mathbf{X}^C - \mathbf{X}_L^B) - \frac{\tau}{2} \left(A_1 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_1}(\mathbf{X}_L^B) + A_2 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_2}(\mathbf{X}_L^B) + A_3 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_3}(\mathbf{X}_L^B) \right),$$

$$\mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C) = \mathbf{V}(\mathbf{X}_R^B) + \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{X}_R^B)(\mathbf{X}^C - \mathbf{X}_R^B) - \frac{\tau}{2} \left(A_1 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_1}(\mathbf{X}_R^B) + A_2 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_2}(\mathbf{X}_R^B) + A_3 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_3}(\mathbf{X}_R^B) \right).$$

3.3. Нахождение градиентов компонент электромагнитных полей в ячейке

Вычисление градиентов проведём с использованием вектора непрерывных переменных. На границе разрыва диэлектрической проницаемости такими переменными будут нормальная компонента вектора электрической индукции, касательные компоненты вектора электрического поля и декартовы компоненты вектора магнитного поля. Будем считать что сетка построена таким образом что разрыв диэлектрической проницаемости проходит по граням ячеек. В каждой ячейке сетки введём свой вектор переменных \mathbf{W} . В ячейках имеющих общую грань с поверхностью разрыва диэлектрической проницаемости выберем

$$\mathbf{W} = \Xi(\theta, \phi, \varepsilon) \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \varepsilon \sin(\theta) \cos(\phi) & \varepsilon \sin(\theta) \sin(\phi) & \varepsilon \cos(\theta) & 0 & 0 & 0 \\ \cos(\theta) \cos(\phi) & \cos(\theta) \sin(\phi) & -\sin(\theta) & 0 & 0 & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{V}, \quad (23)$$

где θ и ϕ — углы вектора нормали к поверхности разрыва в сферической системе координат, а ε диэлектрическая проницаемость в ячейке. В остальных ячейках выберем $\mathbf{W} = \mathbf{V}$. В узлах сетки введём углы θ и ϕ . В узлах на поверхности разрыва диэлектрической проницаемости выберем их как углы вектора нормали к поверхности разрыва в сферической системе координат. В остальных узлах углы можно выбрать произвольно.

Сначала найдём градиенты \mathbf{W} в ячейках с помощью метода наименьших квадратов. Для этого воспользуемся значениями \mathbf{V} в барицентре самой ячейки и барицентрах соседних ячеек. Может получиться так, что у ячейки отсутствуют несколько соседних ячеек. В

таком случае вместо значений в их барицентрах возьмём значения в барицентрах ячеек соседних для одной их присутствующих соседних ячеек. Таким образом в методе наименьших квадратов будем использовать

$$\left\{ (\mathbf{X}^{B_j}, \Xi(\theta_i, \phi_i, \varepsilon_j) \mathbf{V}_j) \right\}, \quad (24)$$

где j пробегает индексы ячеек которые используются для вычисления градиентов в ячейке i . После нахождения градиентов в i -ой ячейке сетки по найденным градиентам вычислим значения $\mathbf{W}_i(\mathbf{X}^P) = \mathbf{W}_i^P$ в её узлах $\mathbf{X}^P = \{x_i^P\}$

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^P) = & \Xi(\theta^P, \phi^P, \varepsilon_i) \Xi^{-1}(\theta_i, \phi_i, \varepsilon_i) \left(\mathbf{W}_i + \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j}) (x_1^P - x_1^{B_i}) + \right. \\ & \left. \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j}) (x_2^P - x_2^{B_i}) + \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j}) (x_3^P - x_3^{B_i}) \right), \end{aligned} \quad (25)$$

где θ^P и ϕ^P значения углов в узле P . В одном узле \mathbf{X}^P получаем несколько различных значений $\mathbf{W}_i(\mathbf{X}^P)$ по числу соседних ячеек, за итоговое значение $\mathbf{W}^P = \mathbf{W}(\mathbf{X}^P)$ принимаем их среднее арифметическое.

Теперь в каждой ячейке найдём градиенты \mathbf{V} с помощью метода наименьших квадратов. Для этого будем использовать значения \mathbf{V} в вершинах ячейки. Таким образом в методе наименьших квадратов для вычисления градиентов \mathbf{V} в ячейке i возьмём

$$\left\{ (\mathbf{X}^{P^k}, \Xi^{-1}(\theta^{P^k}, \phi^{P^k}, \varepsilon_i) \mathbf{W}^{P^k}) \right\}, \quad (26)$$

где P^k , $k = 1, 2, \dots$ номера вершин ячейки i .

4. Параллельная реализация

Комплекс программ для параллельной реализации предложенного алгоритма с помощью геометрической декомпозиции включает программу для декомпозиции сеток и вычислительную параллельную программу. Программа для декомпозиции сеток позволяет разбивать на фрагменты сетки построенные с помощью Gmsh [10], TETGEN [11] и NETGEN [12]. Каждый процесс вычислительной программы проводит расчёты на своём фрагменте. Для передачи данных между процессами используется интерфейс передачи сообщений MPI.

4.1. Декомпозиция сетки

Для проведения декомпозиции сетки достаточно задать количество фрагментов и алгоритм по которому определяется к какому фрагменту тетраэдр принадлежит. Если у двух фрагментов есть хотя бы одна общая вершина то они будут участвовать в обмене данными и для них программа создаст списки общих вершин и общих граней. Для каждого фрагмента программа выдаст файл в котором помимо исчерпывающей информации о сетке будет список соседних фрагментов и для каждого соседнего фрагмента список общих вершин и список общих граней.

4.2. Вычислительная программа

Основное отличие параллельной программы реализующей предложенный алгоритм от последовательной это необходимость обмена данными между процессами. Алгоритм требует обмена данных в вершинах сетки, в барицентрах тетраэдров и на сторонах граней. Обмен данных в вершинах сетки используется для получения суммы величин хранящихся в одной и той же вершине сетки в разных процессах. С его помощью вычисляются средние значения компонент электромагнитных полей в вершинах. Обмен данных в тетраэдрах

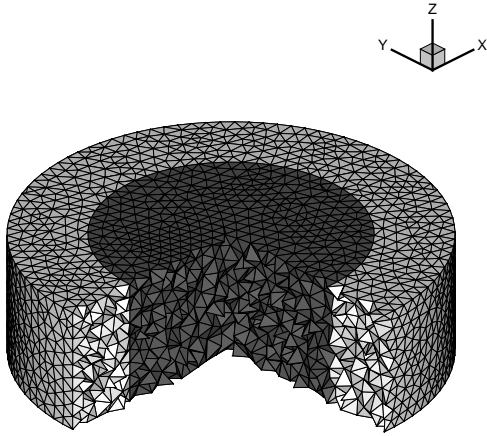


Рис. 1.

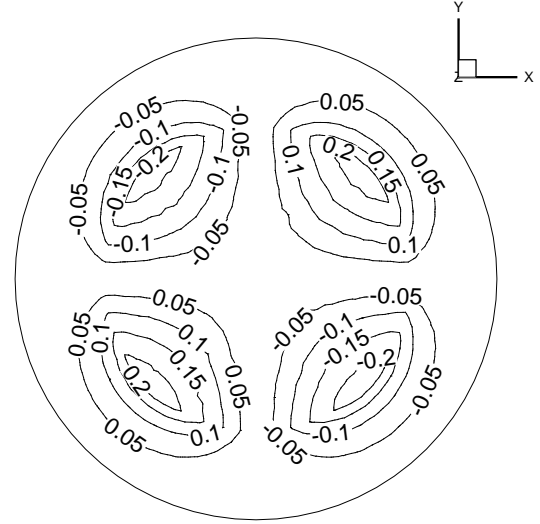


Рис. 2.

используется для передачи величин в фиктивные ячейки. Передаваемые величины включают компоненты электромагнитных полей и координаты барицентров тетраэдров. Обмен данными на сторонах граней используется для вычисления потоков. Особо отметим что алгоритм не требует передачи градиентов между процессами.

5. Результаты тестовых расчётов

Для проверки свойств предложенной схемы были проведены тестовые расчёты в которых использовались тетраэдральные сетки. Для построения тетраэдральных сеток использовался открытый программный продукт Gmsh [10]. Точность численного алгоритма оценивалась путём сравнения с аналитическими решениями. Ошибка численного решения в момент времени $t^n = n\tau$ вычислялась по формуле

$$\frac{\|\mathbf{V}^n(\mathbf{X}^B) - \mathbf{V}^{\text{exact}}(\mathbf{X}^B, t^n)\|_{L_2}}{\|\mathbf{V}^{\text{exact}}(\mathbf{X}^B, t^n)\|_{L_2}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^T \left[\sum_{k=1}^6 (\mathbf{V}_k^n(\mathbf{X}^{B_i}) - \mathbf{V}_k^{\text{exact}}(\mathbf{X}^{B_i}, t^n))^2 \right] \cdot S_{\Delta_i}}{\sum_{i=1}^T \left[\sum_{k=1}^6 (\mathbf{V}_k^{\text{exact}}(\mathbf{X}^{B_i}, t^n))^2 \right] \cdot S_{\Delta_i}}} \quad (27)$$

где T — общее количество тетраэдров в вычислительной области, $\mathbf{V}_k^n(\mathbf{X}^{B_i})$ и $\mathbf{V}_k^{\text{exact}}(\mathbf{X}^{B_i}, t^n)$ — вычисленные и точные значения электромагнитных полей в барицентре ячейки i , соответственно.

5.1. Тест 1

Рассмотрим распространение гибридной электромагнитной волны в световоде со ступенчатым профилем диэлектрической проницаемости. Разрыв диэлектрической проницаемости ε проходит по криволинейной поверхности $r \equiv \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = a$

$$\varepsilon = \varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_1 = n_1^2, & \text{где } 0 \leq r \leq a, \\ \varepsilon_2 = n_2^2, & \text{где } r > a. \end{cases} \quad (28)$$

В этом случае система уравнений Максвелла имеет аналитическое решение [13] которое в цилиндрических координатах записывается в виде

$$\begin{aligned}
0 \leq r \leq a : \quad E_r &= \beta \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) - \frac{1+s}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_\theta &= -\beta \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) + \frac{1+s}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_z &= J_1 \left(\frac{u}{a} r \right) \cdot \cos(\theta) \cos(kt - \beta z), \\
H_r &= kn_1^2 \frac{a}{u} \left[\frac{1-s_1}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) + \frac{1+s_1}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z) \\
H_\theta &= kn_1^2 \frac{a}{u} \left[\frac{1-s_1}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) - \frac{1+s_1}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
H_z &= -\frac{\beta}{k} s J_1 \left(\frac{u}{a} r \right) \cdot \sin(\theta) \cos(kt - \beta z),
\end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned}
r > a : \quad E_r &= \beta \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) - \frac{1+s}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_\theta &= -\beta \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) + \frac{1+s}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_z &= \frac{J_1(u)}{K_1(w)} K_1 \left(\frac{w}{a} r \right) \cdot \cos(\theta) \cos(kt - \beta z), \\
H_r &= kn_0^2 \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s_0}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) + \frac{1+s_0}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z) \\
H_\theta &= kn_0^2 \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s_0}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) - \frac{1+s_0}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
H_z &= -\frac{\beta}{k} s \frac{J_1(u)}{K_1(w)} K_1 \left(\frac{w}{a} r \right) \cdot \sin(\theta) \cos(kt - \beta z),
\end{aligned} \tag{30}$$

где J_0 и J_1 функции Бесселя первого рода, K_0 и K_1 функции Бесселя второго рода, $s_0 = s\beta^2/k^2n_0^2$, $s_1 = s\beta^2/k^2n_1^2$, $u = a\sqrt{k^2n_1^2 - \beta^2}$, $w = a\sqrt{k^2n_2^2 - \beta^2}$,

$$s = 2 \left(\frac{1}{u^2} + \frac{1}{w^2} \right) \left[\frac{J_0(u) - J_2(u)}{uJ_1(u)} - \frac{K_0(w) - K_2(w)}{wK_1(w)} \right]^{-1}, \tag{31}$$

а β находится из дисперсионного соотношения

$$\left[\frac{J_1'(u)}{uJ_1(u)} + \frac{K_1'(w)}{wK_1(w)} \right] \left[\frac{J_1'(u)}{uJ_1(u)} + \frac{n_0^2}{n_1^2} \frac{K_1'(w)}{wK_1(w)} \right] = \left(\frac{1}{u^2} + \frac{1}{w^2} \right) \left[\frac{1}{u^2} + \frac{n_0^2}{n_1^2} \frac{1}{w^2} \right]. \tag{32}$$

Тестовые константы $\varepsilon_1 = 2.25$, $\varepsilon_2 = 1.0$, $k = 6.0$, $a = 0.64$, $\beta = 8.402440923258$, $u = 2.063837416842$, $w = 3.764648073438$. В качестве расчётной области был выбран цилиндр радиуса 1.0 и высотой 0.6:

$$\sqrt{x_1^2 + x_2^2} \leq 1.0, \quad 0 \leq x_3 \leq 0.6. \tag{33}$$

Расчёты проводились на последовательности сеток состоящих из 18845, 51147, 144048, 405279 и 1250790 тетраэдров. Сетки строились таким образом, чтобы разрыв диэлектрической проницаемости проходил по граням тетраэдров. Шаг по времени выбирался пропорциональным линейным размерам тетраэдров. На **Рис. 1** показан пример расчётной сетки состоящей из 18845 тетраэдров. Не показаны тетраэдры у которых первые две координаты барицентра меньше 0.5. Подобласть с более высокой диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_1 = 2.25$ обозначена тёмным цветом. На **Рис. 2** показаны изолинии распределения третьей компоненты магнитного поля H_z в момент времени $T = 4.73$ в сечении $x_3 = 0.3$ полученные на сетке из 144048 тетраэдров. На **Рис. 3** показана эволюция ошибки δ_2 в норме L_2 на последовательности из пяти сеток. В таблице **1** приводятся максимальные значения ошибки в норме L_2 . Как следует из результатов расчётов, алгоритм позволяет проводить расчёты со вторым порядком точности в областях с разрывной диэлектрической проницаемостью в случае, когда разрыв проходит по криволинейной поверхности.

Таблица 1.

Число тетраэдров	δ_2	Порядок аппроксимации
18845	0.055064	
51147	0.027107	2.12
144048	0.013602	2.06
405279	0.006120	2.14
1250790	0.002880	2.11

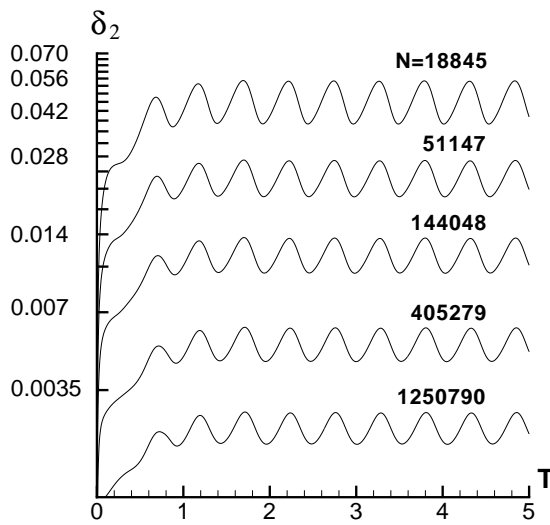


Рис. 3.

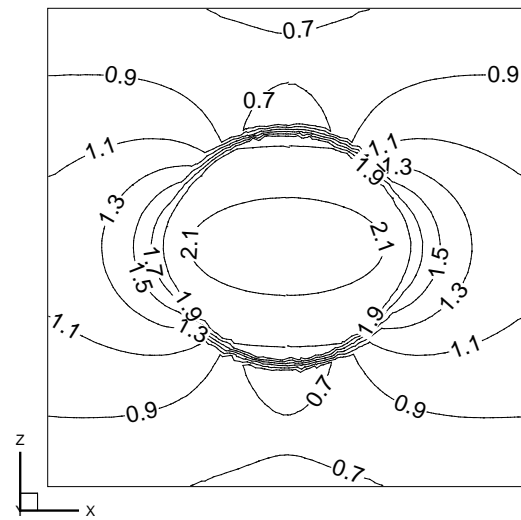


Рис. 4.

5.2. Тест 2

В качестве второго теста рассмотрим задачу о взаимодействии плоской электромагнитной волны с диэлектрической сферой. Разрыв диэлектрической проницаемости ε проходит по криволинейной поверхности $r \equiv \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} = a$.

$$\varepsilon = \varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_1 = n_1^2, & \text{где } 0 \leq r \leq a, \\ \varepsilon_2 = n_2^2, & \text{где } r > a. \end{cases} \quad (34)$$

Волна распространяется в направлении x_3 и имеет компоненты электромагнитных полей E_1 и H_2 . Для этой задачи система уравнений Максвелла имеет аналитическое решение [14] но в силу его громоздкости приводить его здесь не будем.

В качестве расчётной области выбирался куб. Расчёты проводились на сетке состоящей из 1426139 тетраэдров. Сетка была построена таким образом чтобы разрыв диэлектрической проницаемости проходил по граням тетраэдров.

Расчёты проводились с использованием последовательной и параллельной реализации предложенного алгоритма. Расчёты проводились на кластере Новосибирского Государственного Университета. Кластер построен на базе блэйд-серверов HP BL460c, имеющих

по 16 ГБ оперативной памяти и по два 4х-ядерных процессора Xeon 5355 (2.66 ГГц). В качестве коммуникационной среды использовался InfiniBand. В параллельной реализации использовалась декомпозиция расчётной области на 2,4,8,16,32,64,128 частей. Результаты всех расчётов с использованием параллельной версии и расчёта последовательной версии совпадали. На **Рис. 4** показаны изолинии распределения первой компоненты электрического поля E_z в момент времени $T = 2.00$ в сечении $x_1 = 0.0$. Время счёта было различным. В таблице **2** приводятся затраты времени на проведения расчёта в зависимости от числа процессов. Видно что достигается ускорение близкое к линейному, что говорит о высокой эффективности параллельной реализации.

Таблица 2.

Число процессов	Время счёта сек.
1	90179
2	48512
4	25100
8	15243
16	7052
32	3333
64	1715
128	939

6. Заключение

В статье был предложен метод конечных объёмов для решения нестационарных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на неструктурированных сетках. Проведённые тестовые расчёты подтверждают второй порядок аппроксимации по времени и пространству предлагаемой схемы а также эффективность параллельной реализации для систем с разделённой памятью с помощью интерфейса передачи сообщений MPI. В будущем планируется разработать параллельную реализацию для систем с общей памятью используя OpenMP. Необходимость в такой реализации возникнет всвязи с увеличением количества ядер в процессорах.

Литература

1. Yee K.S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Trans. Antennas Propagat. 1966. V. 14 P. 585—589.
2. Taflove A. Advances in Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method // Boston, Artech House, 1998.
3. Taflove A. and Hagness S.C. Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method // Boston, Artech House, 2000.

4. Sullivan D.M. Electromagnetic Simulation Using the Finite-Difference Time-Domain Method // New York, IEEE, 2000.
5. Hermeline F. Two coupled particle-finite volume methods using Dalaunay-Voronoi meshes for applorimation of Vlasov—Poisson and Vlasov — Maxwell equations // J. Comput. Phys. 1993. V. 106 P. 1—18.
6. Cioni J.-P., Fzoui L., Issautier D. Higher order upwind schemes for solving time domain Maxwell equations // La Recherche Aérospatiale 1994. №. 5 P. 319—328.
7. Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В. Решение нестационарных уравнений Максвелла для сред с неоднородными свойствами методом конечных объёмов // Вычисл. технологии. 2005. Т. 10, № 2. С. 60—73.
8. Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В. Конечно-объёмный алгоритм решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // ЖВМ и МФ. 2006. Т. 47 №. 7. С. 1286—1301.
9. Cioni J.-P., Fzoui L., H. Steve A parallel time-domain Maxwell solver using upwind schemes and triangular meshes // IMPACT Comput. Sci. Eng Academic Press, Orlando, FL, USA 1994. V. 5 P. 215—247.
10. Geuzaine C. and Remacle J.-F. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities// Int. J. Numer. Meth. Engng. 2009. V. 3 P. 1—24.
11. Hang Si Adaptive tetrahedral mesh generation by constrained Delaunay refinement // Internat. J. Numer. Methods Engrg. 2008. V. 75 P. 856—880.
12. J. Schoberl. NETGEN - An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. // Comput.Visual.Sci. 1997. V.1 P. 41—52.
13. Okamoto K. Fundamentals of Optical Waveguides // London, Academic Press, 2000.
14. Bohren C.F. and Huffman D.R. Absorption and scattering of light by small particles // Wiley, 1998.