

Параллельный алгоритм для решения трёхмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на призматических сетках

Т.З. Исмагилов, А.И. Горбачёв
Новосибирский Государственный Университет

Предлагается конечно-объёмный метод для численного решения трёхмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на призматических сетках. Метод позволяет проводить расчёты для разрыва диэлектрической проницаемости проходящего по произвольному гладкому цилиндру. Численный алгоритм допускает параллельную реализацию для использования на многопроцессорных ЭВМ. Приведённые результаты тестовых расчётов подтверждают второй порядок предлагаемого метода и высокую эффективность параллельной реализации.

1. Введение

Численная аппроксимация дифференциальных уравнений Максвелла с помощью конечно-разностных схем [1] используется для решения задач связанных с распространением электромагнитных волн и их взаимодействием с зарядами и токами. Начало широкому использованию конечно-разностных схем для численного решения уравнений Максвелла было положено в работе [2]. В этой работе автор предложил схему второго порядка аппроксимации по времени и пространству, основанную на введении смещённых сеток. В дальнейшем конечно-разностные алгоритмы применялись для решения различных задач [3–5].

Тем не менее, для многих задач со сложной геометрией предпочтительнее использовать конечно-объёмные схемы. Они позволяют проводить аппроксимацию на неструктурированных сетках и, таким образом, более точно представлять границы расчётной области, а также границы между подобластями с различными свойствами среды внутри расчётной области. Было предложено несколько конечно-объёмных схем для решения уравнений Максвелла. В схемах предложенных в работе [6] электрические и магнитные поля аппроксимируются на смещённых сетках как и в работе [2]. В алгоритмах рассмотренных в работах [7–10] все компоненты электромагнитного поля аппроксимируются в центрах ячеек.

Одной из основных трудностей при построении схем второго порядка для уравнений Максвелла остаётся случай разрывных свойств среды. В работе [3] 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 [10] была предложена конечно-объёмная схема для решения двумерных уравнений Максвелла на треугольных сетках. Тестовые расчёты показывали близкий ко второму порядку аппроксимации для случая разрывной диэлектрической проницаемости. К сожалению эта схема может использоваться только когда разрыв диэлектрической проницаемости проходит по координатной линии.

Более универсальная схема была предложена в [11, 12]. Эта схема позволяет проводить расчёты для трёхмерных уравнений Максвелла на тетраэдральных сетках в областях с разрывной диэлектрической проницаемостью где разрыв может проходить по произвольной гладкой поверхности. Алгоритм допускает эффективную параллельную реализацию для использования на многопроцессорных ЭВМ.

Для трёхмерных задач в которых вычислительная область имеет вид правильного цилиндра, а свойства среды не меняются при сдвиге параллельно образующим цилиндра, в использовании тетраэдральной сетки нет необходимости. Для таких задач лучше подойдет

призматические сетки. Такие сетки можно легко построить с помощью сдвигов треугольной сетки для основания цилиндра. Использование призматических сеток позволяет легко проводить декомпозицию расчётной области и добиваться равномерного распределения нагрузки между процессами при разработке параллельной реализации.

В данной работе предлагается конечно-объёмная схема для численного решения трёхмерных уравнений Максвелла на призматических сетках с разрывной диэлектрической проницаемостью. Для повышения порядка аппроксимации используется вычисление градиентов специально выбираемых компонент с помощью метода наименьших квадратов. Предлагаемая схема 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:

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ H_1 \\ H_2 \\ H_3 \end{pmatrix}, \quad \Theta = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

а матрицы A_1, A_2, A_3 записываются как

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

3. Разностная схема

Рассмотрим расчётную область в трёхмерном пространстве. Будем считать что в ней построена сетка из призм 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

$$\Omega_\Delta = \int_{\Delta} d\Omega, \quad \mathbf{X}_\Delta^B = \frac{1}{\Omega_\Delta} \int_{\Delta} \mathbf{X} d\Omega. \quad (11)$$

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

$$S_\Gamma = \int_\Gamma dS, \quad \mathbf{X}_\Gamma^C = \frac{1}{S_\Gamma} \int_\Gamma \mathbf{X} dS. \quad (12)$$

Для приближенного решения уравнения (6) рассмотрим разностную схему

$$\Omega_{\Delta_i} \frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\tau} + \sum_{k=1}^m \int_{\Gamma_k} (n_1 \mathbf{F}_1 + n_2 \mathbf{F}_2 + n_3 \mathbf{F}_3) d\Gamma = 0. \quad (13)$$

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 (13) 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 искомых 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 (13) приближенно вычисляем по формуле прямоугольников и получаем.

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\tau}{\Omega_{\Delta_i}} \sum_{k=1}^m s_{\Delta_i}^k \mathbf{F}_i^k, \quad (14)$$

$s_{\Delta_i}^k$ — 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

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{V} + A \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{V} = 0, \quad (15)$$

где $A = A_1 n_1 + A_2 n_2 + A_3 n_3$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} n_3 & -\frac{1}{\varepsilon} n_2 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} n_3 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} n_1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} n_2 & -\frac{1}{\varepsilon} n_1 & 0 \\ 0 & n_3 & n_2 & 0 & 0 & 0 \\ n_3 & 0 & -n_1 & 0 & 0 & 0 \\ -n_2 & n_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

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 Δ_R — $\mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C)$ и $\mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C)$. Решение этой задачи [9, 10] 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

$$\mathbf{F} = \Theta^{-1}(A^+\mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C) + A^-\mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C)) \quad (17)$$

или

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

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:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}(\mathbf{X}^C) = & \mathbf{V}(\mathbf{X}^B) + \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial\mathbf{x}}(\mathbf{X}^B)(\mathbf{X}^C - \mathbf{X}^B) - \\ & \frac{\tau}{2} \left(A_1 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_1}(\mathbf{X}^B) + A_2 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_2}(\mathbf{X}^B) + A_3 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_3}(\mathbf{X}^B) \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Таким образом значения электромагнитных полей на грани ячейки сетки в (18) выражаются следующим образом

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C) = & \mathbf{V}(\mathbf{X}_L^B) + \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial\mathbf{x}}(\mathbf{X}_L^B)(\mathbf{X}^C - \mathbf{X}_L^B) - \\ & \frac{\tau}{2} \left(A_1 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_1}(\mathbf{X}_L^B) + A_2 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_2}(\mathbf{X}_L^B) + A_3 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_3}(\mathbf{X}_L^B) \right), \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C) = & \mathbf{V}(\mathbf{X}_R^B) + \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial\mathbf{x}}(\mathbf{X}_R^B)(\mathbf{X}^C - \mathbf{X}_R^B) - \\ & \frac{\tau}{2} \left(A_1 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_1}(\mathbf{X}_R^B) + A_2 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_2}(\mathbf{X}_R^B) + A_3 \frac{\partial\mathbf{V}}{\partial x_3}(\mathbf{X}_R^B) \right). \end{aligned} \quad (21)$$

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. В каждой ячейке сетки введём свой вектор переменных \mathbf{W} . Будем считать что образующие цилиндра поверхности разрыва диэлектрической проницаемости параллельны оси x_3 , В ячейках имеющих общую грань с поверхностью разрыва диэлектрической проницаемости выберем

$$\mathbf{W} = \Xi(\phi, \varepsilon)\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \varepsilon\cos(\phi) & \varepsilon\sin(\phi) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{V}, \quad (22)$$

где ϕ — угол вектора нормали к поверхности разрыва в полярной системе координат в плоскости x_1, x_2 , а ε диэлектрическая проницаемость в ячейке. В остальных ячейках выберем $\mathbf{W} = \mathbf{V}$. В узлах сетки введём угол ϕ . В узлах на поверхности разрыва диэлектрической проницаемости выберем его как угол вектора нормали к поверхности разрыва в полярной системе координат в плоскости x_1, x_2 . 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 из присутствующих соседних ячеек. Таким образом в методе наименьших квадратов будем использовать

$$\left\{ (\mathbf{X}^{B_j}, \Xi(\phi_i, \varepsilon_j) \mathbf{V}_j) \right\}, \quad (23)$$

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 $\mathbf{X}^P = \{x_l^P\}$

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^P) = & \Xi(\phi^P, \varepsilon_i) \Xi^{-1}(\phi_i, \varepsilon_i) \left(\mathbf{W}_i + \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j}) (x_1^P - x_1^{B_i}) + \right. \\ & \left. \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j}) (x_2^P - x_2^{B_i}) + \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j}) (x_3^P - x_3^{B_i}) \right), \end{aligned} \quad (24)$$

где ϕ^P значение 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

$$\left\{ (\mathbf{X}^{P^k}, \Xi^{-1}(\phi^{P^k}, \varepsilon_i) \mathbf{W}^{P^k}) \right\}, \quad (25)$$

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

4. Параллельная реализация

Параллельная реализация алгоритма основана на геометрической декомпозиции расчётной области. N слоёв призматической сетки в расчётной области делятся между s процессами так чтобы процессам с более высокими номерами соответствовали слои с более высокими номерами и разница между числами слоёв у различных процессов была не больше единицы. Если N слоёв сетки пронумерованы с 1 по N один из вариантов такой декомпозиции это когда процессу с номером r соответствуют все слои в интервале

$$[Nr/s + 1, N(r + 1)/s]. \quad (26)$$

Все процессы кроме $r = 0$ имеют дополнительный "нижний" слой фиктивных ячеек для получения данных из последнего слоя процесса с номером $r - 1$. Аналогично все процессы кроме $r = s - 1$ где имеют дополнительный "верхний" слой фиктивных ячеек для получения данных из первого слоя процесса с номером $r + 1$.

Алгоритм требует обмена данных в вершинах сетки, в центрах призм 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 призмах используется для передачи величин в фиктивные ячейки. Передаваемые величины включают компоненты электромагнитных полей и координаты центров призм. Обмен данных на сторонах граней используется для вычисления потоков. Таким образом, последовательность действий в параллельной программе на каждом шаге по времени следующая: 1. Передача значений электромагнитных полей в ячейках. 2. Вычисление предварительных градиентов и частичных сумм значений электромагнитных полей в вершинах. 3. Передача частичных сумм и получение окончательных значений электромагнитных полей в вершинах. 4. Вычисление окончательных градиентов. 5. Вычисление значений на гранях. 6. Передача значений на гранях. 7. Вычисление значений в ячейках на новом временном слое. Особо отметим что алгоритм не требует передачи градиентов между процессами.

5. Результаты тестовых расчётов

Для проверки свойств предложенной схемы были проведены тестовые расчёты. Призматические сетки строились с помощью сдвигов двумерных треугольных сеток [13, 14]. Точность численного алгоритма оценивалась путём сравнения с аналитическими решениями. Ошибка численного решения в момент времени $t^n = n\tau$ вычислялась по формуле

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

где P — общее количество призм 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 центре ячейки i , соответственно.

5.1. Тест 1

Рассмотрим распространение электромагнитной волны в среде с постоянным коэффициентом диэлектрической проницаемости. В этом случае одним из точных решений системы уравнений Максвелла будет:

$$\begin{aligned} E_1 &= 3\cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3}\pi t), \\ E_2 &= \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3}\pi t), \\ E_3 &= 2\sin(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \sin(\pi x_3 - \sqrt{3}\pi t), \\ H_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3}\pi t), \\ H_2 &= -\frac{4}{\sqrt{3}}\cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3}\pi t), \\ H_3 &= -\frac{5}{\sqrt{3}}\sin(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \sin(\pi x_3 - \sqrt{3}\pi t). \end{aligned} \quad (28)$$

Область в которой проводились расчёты представляла из себя единичный куб. Расчёты проводились на последовательности сеток состоящих из 2400, 6552, 18960, 52136 и 151360 призм. Шаги по времени в расчётах брались пропорционально линейным размерам призм. На **Рис. 1** показан пример сетки состоящей из 3784 треугольников которая использовалась для построения сетки из 151360 призм. На **Рис. 2** показано вычисленное распределение

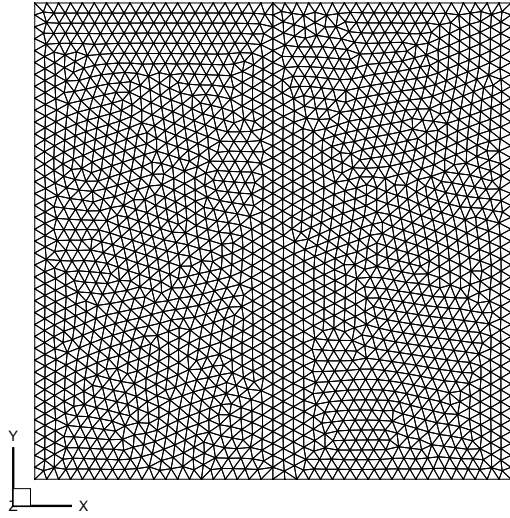


Рис. 1. Двумерная сетка

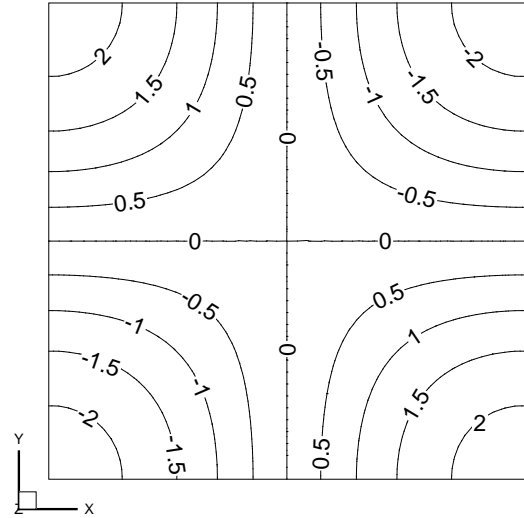


Рис. 2. Распределение E_1

E_1 в момент времени $T = 4.77$ в сечении $x_3 = 0.5$ полученное на сетке из 151360 призм. Эволюция ошибки δ_2 в норме L_2 для различных сеток показана на Рис. 3. В таблице 1 приводятся максимальные значения ошибки в норме L_2 для последовательности сеток. Поведение ошибки соответствует второму порядку точности.

Таблица 1. Максимальная ошибка и порядок аппроксимации

Число призм	δ_2	Порядок аппроксимации
2400	0.013659	
6552	0.006670	2.14
18960	0.003100	2.15
52136	0.001497	2.15
151360	0.000709	2.14

5.2. Тест 2

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

$$\varepsilon = \varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_1 = n_1^2, & \text{где } 0 \leq r \leq a, \\ \varepsilon_2 = n_2^2, & \text{где } r > a. \end{cases} \quad (29)$$

В этом случае система уравнений Максвелла имеет аналитическое решение [15] которое в цилиндрических координатах записывается в виде

$$\begin{aligned}
0 \leq r \leq a : \quad E_r &= \beta \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) - \frac{1+s}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_\theta &= -\beta \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) + \frac{1+s}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_z &= J_1 \left(\frac{u}{a} r \right) \cdot \cos(\theta) \cos(kt - \beta z), \\
H_r &= kn_1^2 \frac{a}{u} \left[\frac{1-s_1}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) + \frac{1+s_1}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z) \\
H_\theta &= kn_1^2 \frac{a}{u} \left[\frac{1-s_1}{2} J_0 \left(\frac{u}{a} r \right) - \frac{1+s_1}{2} J_2 \left(\frac{u}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
H_z &= -\frac{\beta}{k} s J_1 \left(\frac{u}{a} r \right) \cdot \sin(\theta) \cos(kt - \beta z),
\end{aligned} \tag{30}$$

$$\begin{aligned}
r > a : \quad E_r &= \beta \frac{a}{w} \frac{J_1(w)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) - \frac{1+s}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_\theta &= -\beta \frac{a}{w} \frac{J_1(w)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) + \frac{1+s}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
E_z &= \frac{J_1(w)}{K_1(w)} K_1 \left(\frac{w}{a} r \right) \cdot \cos(\theta) \cos(kt - \beta z), \\
H_r &= kn_0^2 \frac{a}{w} \frac{J_1(w)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s_0}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) + \frac{1+s_0}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z) \\
H_\theta &= kn_0^2 \frac{a}{w} \frac{J_1(w)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s_0}{2} K_0 \left(\frac{w}{a} r \right) - \frac{1+s_0}{2} K_2 \left(\frac{w}{a} r \right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\
H_z &= -\frac{\beta}{k} s \frac{J_1(w)}{K_1(w)} K_1 \left(\frac{w}{a} r \right) \cdot \sin(\theta) \cos(kt - \beta z),
\end{aligned} \tag{31}$$

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

$$s = 2 \left(\frac{1}{u^2} + \frac{1}{w^2} \right) \left[\frac{J_0(u) - J_2(u)}{uJ_1(u)} - \frac{K_0(w) - K_2(w)}{wK_1(w)} \right]^{-1}, \tag{32}$$

а β находится из дисперсионного соотношения. 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 1.28 и высотой 0.6. Расчёты проводились на последовательности сеток состоящих из 9352, 27080, 75964, 217000 и 609000 призм. Сетка строилась таким образом чтобы разрыв диэлектрической проницаемости проходил по граням призм. Шаг по времени брался пропорциональным линейным размерам призм. На **Рис. 4** показан пример двумерной треугольной сетки состоящей из 2708 треугольников, которая использовалась для построения сетки из 27080 призм. На **Рис. 5** показано распределение третьей компоненты магнитного поля H_z в момент времени $T = 4.73$ в сечении $x_3 = 0.3$ полученные на сетке из 27080 призм. На **Рис. 6** показана эволюция ошибки δ_2 в норме L_2 на последовательности из пяти сеток. В таблице 2 приводятся максимальные значения ошибки в норме L_2 . Поведение ошибки соответствует второму порядку точности.

5.3. Масштабируемость

Для проверки свойств масштабируемости параллельной реализации были проведены расчёты с использованием последовательной и параллельной реализаций предложенного алгоритма. Расчёты проводились на кластере Новосибирского Государственного Университета. Кластер построен на базе двойных блэйд-серверов HP BL2x220c, имеющих

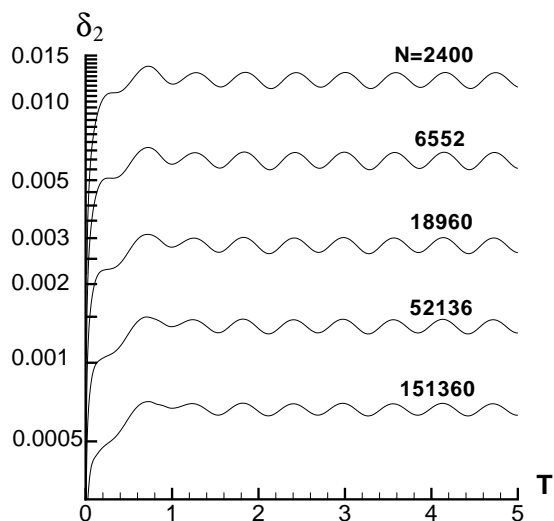


Рис. 3. Поведение ошибки

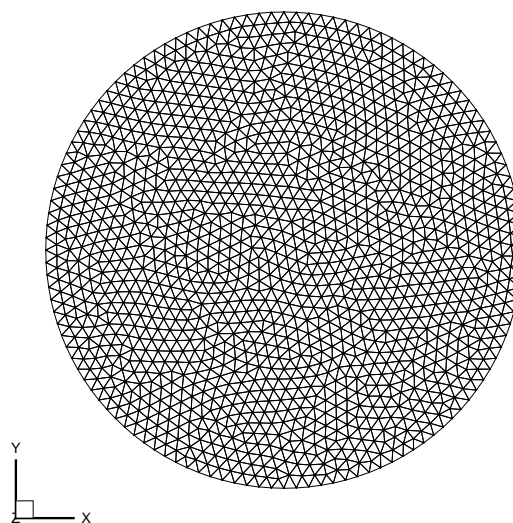


Рис. 4. Двумерная сетка

Таблица 2. Максимальная ошибка и порядок аппроксимации

Число призм	δ_2	Порядок аппроксимации
9352	0.136843	
27080	0.055602	2.54
75964	0.027663	2.29
217000	0.013417	2.21
609000	0.007118	2.12

по 32 ГБ оперативной памяти и по четыре 4x-ядерных процессора Xeon E5540 (2.53 ГГц). В качестве коммуникационной среды использовался InfiniBand. Результаты всех расчётов с использованием параллельной версии и расчёта последовательной версии совпадали. Время счёта было различным. В таблице 3 приводятся затраты времени на проведения расчёта в зависимости от числа процессов для сетки состоящей из 3472000 призм (320 слоёв по 10850 призм). Видно что до момента когда процесс проводит расчёт лишь на 10 слоях достигается ускорение близкое к линейному, что говорит о высокой эффективности и хорошей масштабируемости параллельной реализации.

6. Заключение

В статье был предложен метод конечных объёмов для решения нестационарных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на призматических сетках. Для использования предложенного метода на высокопроизводительных ЭВМ с распределённой памятью была предложена параллельная реализация вычислительного алгоритма с помощью интерфейса передачи сообщений MPI. Для проверки свойств метода и параллельной реализации были проведены тестовые расчёты. Поведение ошибки для задачи о распространении гибридной электромагнитной волны в световоде со ступенчатым

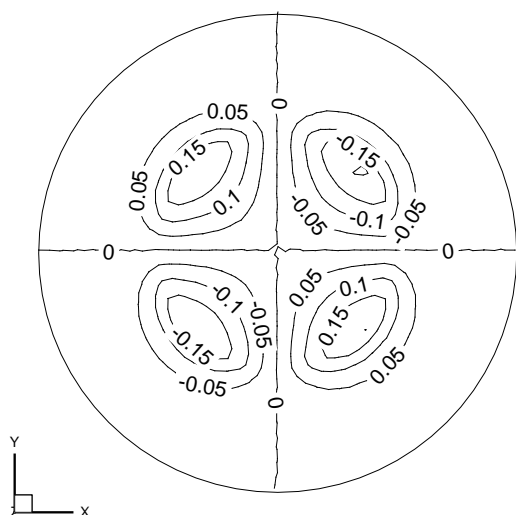


Рис. 5. Распределение H_3

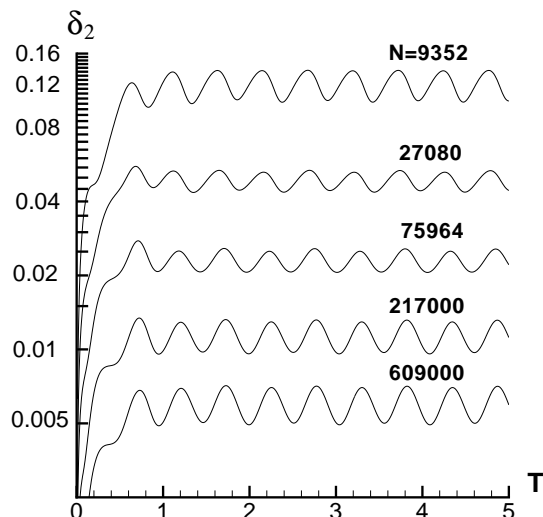


Рис. 6. Поведение ошибки

Таблица 3. Масштабируемость параллельной программы

Число процессов	Время счёта сек.
1	29871
2	14602
4	7379
8	3836
16	1912
32	973
64	518
128	325

профилем диэлектрической проницаемости соответствует второму порядку аппроксимации. Время расчёта демонстрирует практически обратную зависимость для широкого диапазона изменения числа процессов, что свидетельствует о высокой эффективности и хорошей масштабируемости параллельной реализации.

Литература

1. Годунов С.К., Рябенкий В.С. Разностные схемы. Введение в теорию. // Москва, Наука, 1977
2. Yee K.S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Trans. Antennas Propagat. 1966. -Vol. 14. -P. 585-589.

3. Taflove A. *Advances in Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method* // Boston, Artech House, 1998.
4. Taflove A. and Hagness S.C. *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method* // Boston, Artech House, 2000.
5. Sullivan D.M. *Electromagnetic Simulation Using the Finite-Difference Time-Domain Method* // New York, IEEE, 2000.
6. Hermeline F. Two coupled particle-finite volume methods using Dalaunay-Voronoi meshes for approximation of Vlasov–Poisson and Vlasov – Maxwell equations // *J. Comput. Phys.* 1993. -Vol. 106. -P. 1-18.
7. Cioni J.-P., Fezoui L., Issautier D. Higher order upwind schemes for solving time domain Maxwell equations // *La Recherche Aerospatiale* 1994. N. 5. -P. 319-328.
8. Cioni J.-P., Fezoui 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. -Vol. 5. -P. 215-247.
9. Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В. Решение нестационарных уравнений Максвелла для сред с неоднородными свойствами методом конечных объёмов // *Вычисл. технологии.* 2005. -Том 10, N 2. -С. 60-73.
10. Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В. Конечно-объёмный алгоритм решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // *ЖВМ и МФ.* 2006. -Том 47, N. 7. -С. 1286-1301.
11. Исмагилов Т.З. Параллельный алгоритм для решения трёхмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью // *Труды конференции, ПаВТ 2010, Уфа,* 2010.
12. Исмагилов Т.З. Параллельный алгоритм для решения трёхмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на тетраэдральных сетках // *Вестник УГАТУ,* 2010. -Том 14, N 4. -С. 152-159.
13. 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. -Vol. 3. -P. 1-24.
14. J. Schoberl. NETGEN - An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. // *Comput. Visual. Sci.* 1997. -Vol. 1. -P. 41-52.
15. Okamoto K. *Fundamentals of Optical Waveguides* // London, Academic Press, 2000.