УДК 519.688

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В НАНОКОМПОЗИТНЫХ СРЕДАХ

Л. Ю. Прокопьева[1], **М. П. Федорук**[1], **А. С. Лебедев**[1]

Предлагается параллельный алгоритм метода конечных объемов для трехмерного моделирования распространения электромагнитных волн в искусственных нанокомпозитных материалах. Параллельный алгоритм реализован на основе метода декомпозиции областей и модифицирован для адекватного моделирования сложных нанокомпозитных сред, таких как метаматериалы. Для демонстрации возможностей алгоритма приводятся результаты двумерного моделирования цилиндрических гиперлинз — анизотропных метаматериалов, которые позволяют преодолеть дифракционный предел обычных оптических приборов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 06–01–00210).

Ключевые слова: уравнения Максвелла, математическое моделирование, метод конечных объемов, параллельные алгоритмы, метаматериалы.

Введение. В настоящей статье предлагается параллельный численный алгоритм, основанный на методе конечных объемов на неструктурированных сетках для расчета нестационарных уравнений Максвелла в нанокомпозитных средах.

В последние годы создание эффективных и гибких параллельных численных алгоритмов становится особенно актуальным в связи с развитием экспериментальных исследований в области метаматериалов — искусственных сред с необычными электромагнитными свойствами, которые достигаются с помощью сложной наноструктуры материала. Можно обозначить три основных направления, привлекающих наибольшее внимание исследователей, работающих в области метаматериалов. Во-первых, это метаматериалы с отрицательным показателем преломления, теоретически предсказанные российским ученым В. Г. Веселаго еще в 1967 г. [1] и далее спустя десятки лет полученные экспериментально [2–9]. Другим примером метаматериалов служит изобретение под названием гиперлинза — оптический прибор, позволяющий разрешать и увеличивать предметы с размером менее половины длины волны падающего света (дифракционный предел). В настоящее время разработаны модели гиперлинз из немагнитных материалов со сложной анизотропной пространственной зависимостью диэлектрической проницаемости [10–14]. И наконец, третьим примером новых технологий на основе метаматериалов, требующих непосредственного применения методов численного моделирования, является создание маскирующих наноструктурированных сред, способных преломлять свет таким образом, чтобы избегать отражения от маскируемого объекта и тем самым скрывать его от стороннего наблюдателя [15–20].

В следующем разделе статьи представлен алгоритм метода конечных объемов для решения трехмерных нестационарных уравнений Максвелла в средах с разрывными значениями диэлектрической и магнитной проницаемостей, позволяющий эффективно моделировать распространение электромагнитного излучения в сложных наноструктурированных материалах. Далее приводится параллельная версия алгоритма и результаты расчета ускорения программы для двумерного и одномерного случаев. Эффективность предложенного алгоритма продемонстрирована на примере расчета цилиндрической гиперлинзы. В “Заключении” подводятся итоги работы.

1. Метод конечных объемов для уравнений Максвелла. Распространение электромагнитных волн описывается системой нестационарных уравнений Максвелла. Для определенности далее будем рассматривать изотропную оптическую немагнитную среду $\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r$, $\mu = \mu_0$ и предполагать отсутствие свободных зарядов $\operatorname{div}\mathbf{D} = 0$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \operatorname{rot}\mathbf{H} = 0, \quad \text{где} \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0\varepsilon_r\mathbf{E}, \quad \operatorname{div}\mathbf{D} = 0; \\ &\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \operatorname{rot}\mathbf{E} = 0, \quad \text{где} \quad \mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}, \qquad \operatorname{div}\mathbf{B} = 0. \end{aligned} \tag{1}$$

[1] Институт вычислительных технологий СО РАН, просп. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; Л. Ю. Прокопьева, аспирант, e-mail: ludmila.prokopeva@ict.nsc.ru; М. П. Федорук, зам. директора, e-mail: mife@ict.nsc.ru; А. С. Лебедев, ст. научн. сотрудник, e-mail: sasa@ict.nsc.ru

Здесь $\mathbf{D}$ — вектор электрической индукции, $\mathbf{B}$ — вектор магнитной индукции, $\mathbf{H}$ — вектор напряженности магнитного поля, ε — диэлектрическая проницаемость среды, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, ε_r — относительная диэлектрическая проницаемость среды, μ — магнитная проницаемость среды и μ_0 — магнитная проницаемость вакуума.

В трехмерном случае в декартовых координатах уравнения (1) в матричной форме принимают вид

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} A_1 \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial y} A_2 \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial z} A_3 \mathbf{U} = 0, \quad \text{где} \tag{2}$$

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\mu_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1/\mu_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/\varepsilon_0\varepsilon_r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\varepsilon_0\varepsilon_r & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/\mu_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/\mu_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\varepsilon_0\varepsilon_r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1/\varepsilon_0\varepsilon_r & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\mu_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/\mu_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/\varepsilon_0\varepsilon_r & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/\varepsilon_0\varepsilon_r & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{U} = \Big(D_x,\, D_y,\, D_z,\, B_x,\, B_y,\, B_z\Big)^{\mathrm{T}}.$$

Далее в расчетной области строится неструктурированная тераэдральная сетка, учитывающая геометрию среды. Например, на рис. 1 приведен пример такой сетки для моделирования брэгговской решетки в волоконном световоде.

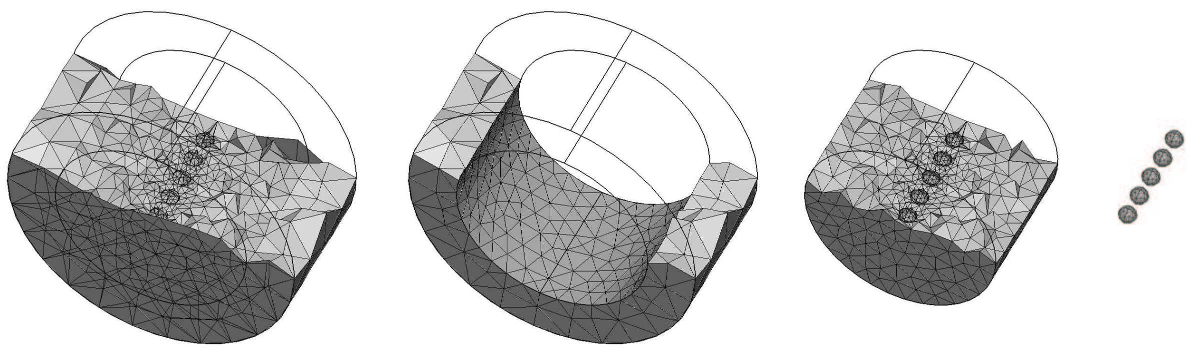


Рис. 1. Тетраэдральная сетка, учитывающая геометрию брэгговской решетки в волоконном световоде. Соответствие граней границам сред существенно влияет на погрешность вычислений

По каждому конечному объему Δ_i уравнения (2) интегрируются и преобразуются к контурному интегралу по формуле Гаусса–Остроградского:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint\limits_{\Delta_i} \mathbf{U}\, dV + \sum_{k=1}^{4} \oint\!\!\!\oint\limits_{S_i^k} A\mathbf{U}\, dS = 0. \tag{3}$$

Здесь S_i^k — грани объема Δ_i $(k = \overline{1,4}\,)$, $\mathbf{n} = (n_1,\, n_2,\, n_3)$ — внешняя нормаль к грани S_i^k, а матрица A вычисляется по формуле $A = n_1 A_1 + n_2 A_2 + n_3 A_3$.

Наконец, аппроксимируя уравнение (3), получаем расчетную схему

$$v_i\, \frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\tau} + \sum_{k=1}^{4} s_{i,k}\, \mathbf{F}_{i,k}^{n+1/2} = 0,$$

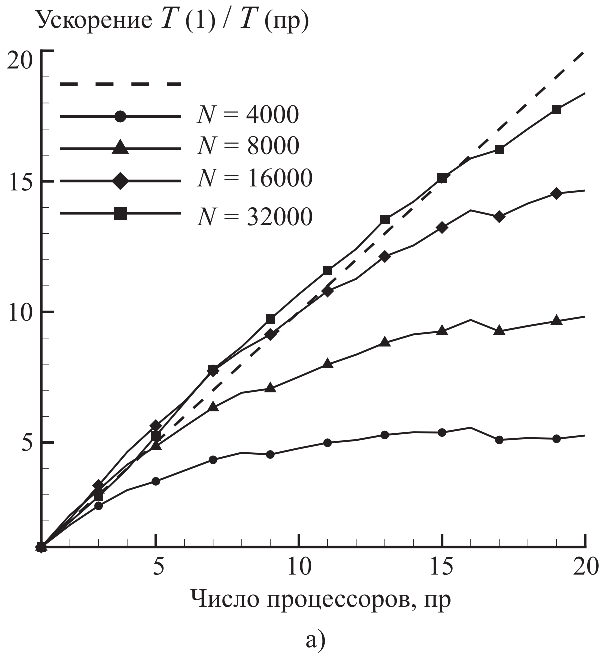
где $\mathbf{U}_i^n$ — значения поля в барицентре $\mathbf{x}_i^b$ тетраэдра Δ_i в момент времени $t_n = n\tau$, τ — шаг по времени, $\mathbf{F}_{i,k}$ — значение потока AU в центре k-й грани i-го тетраэдра, $s_{i,k}$ — площадь грани и v_i — объем i-го тетраэдра.

Отдельного внимания здесь требует вычисление потоков $\mathbf{F}_{i,k}$. Поток $\mathbf{F}_{i,k}$ предлагается вычислять как решение задачи Римана, являющейся одномерной относительно нормали к k-й грани i-го тетраэдра и имеющей следующий вид в дивергентных переменных: $\dfrac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + A\,\dfrac{\partial \mathbf{U}}{\partial n}\mathbf{U} = 0$; следовательно, этот поток определяется по формуле $\mathbf{F}_{i,k} = A^+\mathbf{U}_L + A^-\mathbf{U}_R$, где $A^{\pm} = S\,\mathrm{diag}\left\{\dfrac{1}{2}\bigl(\lambda_k \pm |\lambda_k|\bigr)\right\}S^{-1}$, S — матрица, столбцы которой являются правыми собственными векторами матрицы A, λ_k — собственные значения матрицы A и $\mathbf{U}_{L,R}$ — значения поля $\mathbf{U}$, аппроксимированные в центр грани из левого и правого примыкающих тетраэдров по формуле Тейлора, при этом значения дискретных градиентов по пространству вычисляются специальным образом, подробно описанным в [21] для двумерного случая и имеющим естественное обобщение на трехмерный случай.

Для решения трехмерных уравнений Максвелла в изотропной немагнитной среде матрицы $A^{\pm}$ принимают вид

$$A^+ = \frac{c}{2\sqrt{\varepsilon_r}}\begin{pmatrix} 1-n_1^2 & -n_1n_2 & -n_1n_3 & 0 & \eta^{-1}n_3 & -\eta^{-1}n_2 \\ -n_1n_2 & 1-n_2^2 & -n_2n_3 & -\eta^{-1}n_3 & 0 & \eta^{-1}n_1 \\ -n_1n_3 & -n_2n_3 & 1-n_3^2 & \eta^{-1}n_2 & -\eta^{-1}n_1 & 0 \\ 0 & -\eta n_3 & \eta n_2 & 1-n_1^2 & -n_1n_2 & -n_1n_3 \\ \eta n_3 & 0 & -\eta n_1 & -n_1n_2 & 1-n_2^2 & -n_2n_3 \\ -\eta n_2 & \eta n_1 & 0 & -n_1n_3 & -n_2n_3 & 1-n_3^2 \end{pmatrix},$$

$$A^- = \frac{c}{2\sqrt{\varepsilon_r}}\begin{pmatrix} n_1^2-1 & n_1n_2 & n_1n_3 & 0 & \eta^{-1}n_3 & -\eta^{-1}n_2 \\ n_1n_2 & n_2^2-1 & n_2n_3 & -\eta^{-1}n_3 & 0 & \eta^{-1}n_1 \\ n_1n_3 & n_2n_3 & n_3^2-1 & \eta^{-1}n_2 & -\eta^{-1}n_1 & 0 \\ 0 & -\eta n_3 & \eta n_2 & n_1^2-1 & n_1n_2 & n_1n_3 \\ \eta n_3 & 0 & -\eta n_1 & n_1n_2 & n_2^2-1 & n_2n_3 \\ -\eta n_2 & \eta n_1 & 0 & n_1n_3 & n_2n_3 & n_3^2-1 \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \eta = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0\varepsilon_r}}.$$



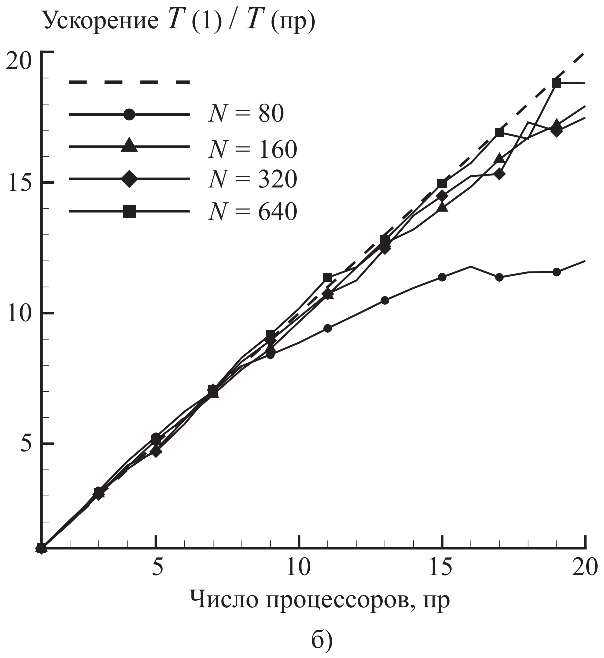


Рис. 2. Ускорение параллельной версии конечнообъемного алгоритма в одномерном и двумерном случаях: а) для одномерной задачи N — число вычислительных узлов сетки; б) для двумерной задачи расчет проводился в квадратной вычислительной области и число N — это число вычислительных ребер на стороне квадрата

2. Параллельный алгоритм метода конечных объемов. Для реализации расчетов с помощью современных многопроцессорных вычислительных систем разработан параллельный алгоритм метода конечных объемов [22]. Для этого вычислительная область делится на подобласти, после чего в каждой подобласти расчет поля выполняется одним процессором. Значения поля с соседних подобластей, необходимые для расчетов поля в граничных ячейках, пересылаются между процессорами посредством интерфейса MPI.

Расчеты ускорения конечнообъемного метода для решения нестационарных уравнений Максвелла проводились в двумерном и одномерном случаях. При условии сбалансированной загрузки процессоров — т.е. при примерно одинаковом количестве расчетных ячеек в каждой подобласти — ускорение для тестируемого числа процессоров (до двадцати) при достаточно большой размерности задачи является практически линейным. Естественным является "выпрямление" кривой до линейной зависимости с ростом размерности, что объясняется уменьшением доли времени на межпроцессорные обмены по отношению ко времени вычислений (рис. 2).

Вычисления производились на кластере, построенном на процессорах Intel Xeon (3.2 GHz) с интерконнектом Infiniband ("Cacau" cluster, HLRS, Штутгарт, Германия). На каждом двухпроцессорном узле запускалось по одному MPI процессу.

3. Численные результаты — моделирование гиперлинзы. В качестве численных результатов здесь приводится пример расчета распространения электромагнитного излучения в анизотропной немагнитной среде, имеющей осевую симметрию, что позволяет свести постановку к двумерной модели. Такая задача возникает в связи с одной из последних разработок в области метаматериалов под названием *гиперлинза*. Прибор основан на использовании анизотропных метаматериалов и способен разрешать предметы менее половины длины волны видимого света (дифракционный предел) и проецировать изображение в дальнее поле, где с помощью стандартной оптики изображение может быть увеличено далее до нужных размеров. Оригинальная идея гиперлинзы выдвинута в [10–11], последовавшие экспериментальные подтверждения работы прибора можно найти, например, в [12–13].

Позднее в [14] были разработаны новые модели так называемых "внутренней" и "внешней" гиперлинз, которые строятся на условии равенства импедансов $\eta = \sqrt{\dfrac{\mu}{\varepsilon}}$ на внешней и внутренней границах прибора соответственно и при этом являются немагнитными средами. Отметим, что изготовление метаматериалов, имеющих магнитный отклик на оптических частотах, представляет собой отдельную сложную экспериментальную задачу.

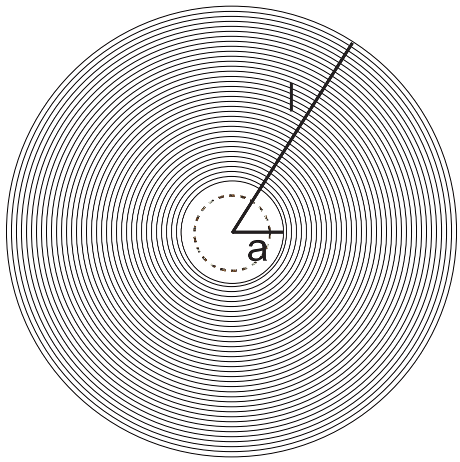


Рис. 3. Гиперлинза. Внутренний радиус $a = 600$ нм, внешний радиус $l = 3$ мкм. На окружность, отмеченную пунктиром, помещены источники

В модели цилиндрическая гиперлинза находится в вакууме ($\varepsilon_r = 1$) и представляет собой бесконечный в направлении оси z цилиндр с выколотой сердцевиной, изображенный в сечении на рис. 3.

Аналитическое выражение для диэлектрической проницаемости гиперлинз получено в [14]. Для внутренней гиперлинзы условие равенства импедансов при $\rho = a$ приводит к соотношениям (4), а для внешней гиперлинзы из условия равенства импедансов при $\rho = l$ эти соотношения принимают вид (5):

$$\varepsilon_\rho(\rho) = \frac{r\tau}{\rho}\,, \quad \varepsilon_\phi(\rho) = \frac{\rho}{r}\,, \quad a \leqslant \rho \leqslant b, \tag{4}$$

$$\varepsilon_\rho(\rho) = \frac{r\tau}{\rho}\,, \quad \varepsilon_\phi(\rho) = \frac{\rho/r}{b/l}\,, \quad b \leqslant \rho \leqslant l. \tag{5}$$

Здесь ε_ρ, ε_ϕ — ненулевые компоненты тензора диэлектрической проницаемости в цилиндрических координатах: $\varepsilon_r = \begin{pmatrix} \varepsilon_\rho & 0 \\ 0 & \varepsilon_\phi \end{pmatrix}$, $(D_\rho, D_\phi)^{\mathrm{T}} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \, (E_\rho, E_\phi)^{\mathrm{T}}$; $r(\rho) = \tau^{-1}(\rho - l) + b$ — выбранное линейное преобразование координат, которое взаимно-однозначно отображает кольцо $\{a \leqslant \rho \leqslant l\}$ на кольцо $\{a \leqslant r \leqslant b\}$, причем $r(a) = a$, $r(l) = b$; $\tau = \dfrac{l-a}{b-a}$; параметры линзы $a = 600$ нм, $b = 610$ нм, $l = 3$ мкм (рис. 3).

Далее, на дугу окружности $\left\{(\rho,\phi)\ \middle|\ \rho = a - 30 \text{ нм},\ \dfrac{3\pi}{4} \leqslant \phi \leqslant \dfrac{5\pi}{4}\right\}$ помещаются пять жестких когерентных монохроматических источников света с длиной волны $\lambda = 632$ нм и амплитудой, равной

$$A(\phi) = \begin{cases} 1, & \phi \in \bigcup\limits_{k=0}^{4} \left[\dfrac{3\pi}{4} + \dfrac{2k\pi}{18};\ \dfrac{3\pi}{4} + \dfrac{(2k+1)\pi}{18}\right], \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \qquad (6)$$

Теоретически такая конструкция должна точно проецировать пять источников с интерфейса $\rho = a$ на $\rho = l$, при этом, поскольку импеданс не терпит скачка только на одной границе (внутренней либо внешней границе гиперлинзы), следует ожидать, что часть энергии светового излучения отразится от другой границы (внешней либо внутренней, соответственно).

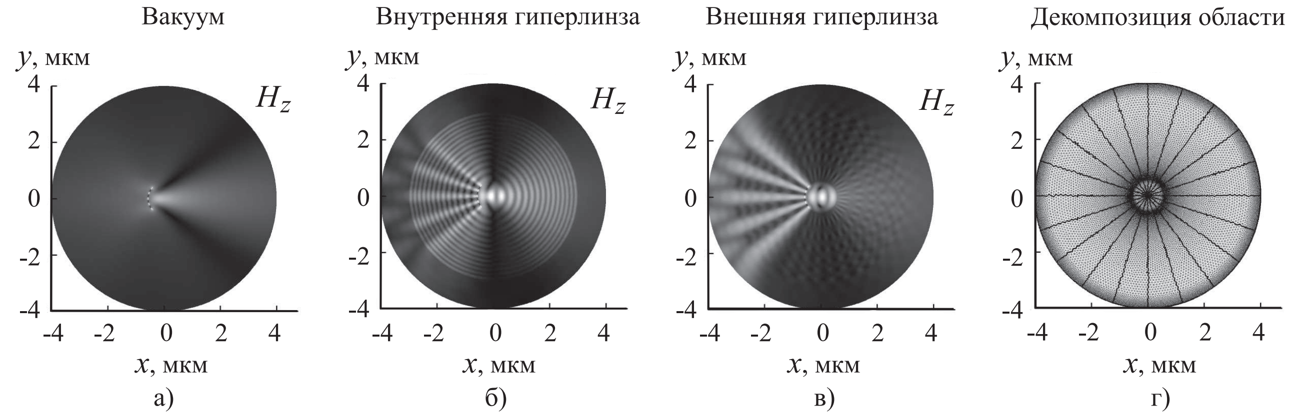


Рис. 4. Источники в вакууме, амплитуда поля H_z (а); внутренняя линза, амплитуда поля H_z (б); внешняя линза, амплитуда поля H_z (в); декомпозиция неструктурированной треугольной сетки для проведения параллельных расчетов (г)

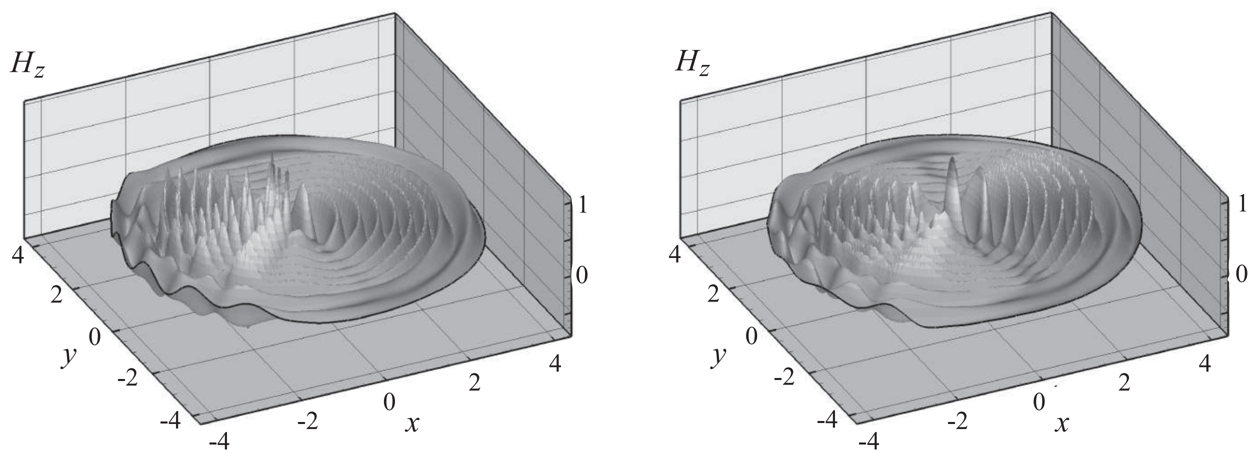


Рис. 5. Фрагменты распространения излучения во внутренней линзе для двух выбранных моментов времени

Поскольку в данном случае нас интересует отклик среды на определенной длине волны, удобно пользоваться представлением в виде амплитуды поля, переход к которому осуществляется с помощью преобразования Фурье на интересующей нас длине волны. Для проведения параллельных расчетов декомпозиция области выполнялась радиально, что, с учетом симметрии задачи, обеспечивает сбалансированную загрузку процессоров (рис. 4г).

На рис. 4а представлены результаты моделирования источников (6) в вакууме. Видно, что сигнал в результате интерференции когерентных источников фокусируется, а затем рассеивается. Теперь добавим внутреннюю линзу (4) и внешнюю (5) (рис. 4б и 4в). Как и ожидалась, изображение пяти источников из ближней зоны точно проецируется с увеличением в дальнюю зону, преодолевая тем самым дифракционный предел для $\lambda = 632$ нм. Видно появление отраженных от границ цилиндрических мод.

Результаты расчета внутренней гиперлинзы (рис. 4б) во временно́й области изображены на рис. 5. Помимо основного сигнала в полной анимации наблюдаются стоячие волны, отразившиеся от внешней границы внутренней гиперлинзы.

Заключение. Проведенные на данный момент расчеты по большей части являются демонстрационными и тестовыми для метода конечных объемов в различных одномерных и двумерных постановках, имеющих сложную пространственную зависимость электромагнитных характеристик. Например, приведенные результаты расчетов гиперлинзы повторяют оригинальные расчеты с помощью коммерческого программного обеспечения из [14]. С другой стороны, полученные результаты демонстрируют эффективность параллельного метода конечных объемов для решения нестационарных уравнений Максвелла в метаматериалах, который планируется в дальнейшем интенсивно применять уже в существенно трехмерных постановках, требующих применения высокопроизводительных вычислений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Веселаго В.Г.* Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ε и μ // Успехи физ. наук. 1967. **92**, № 3. 517–526.
2. *Pendry J.B.* Negative refraction makes a perfect lens // Phys. Rev. Lett. 2000. **85**, N 18. 3966–3969.
3. *Smith D.R., Padilla W.J., Vier D.C., et al.* Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity // Phys. Rev. Lett. 2000. **84**, N 18. 4184–4187.
4. *Shelby R.A., Smith D.R., Schultz S.* Experimental verification of a negative index of refraction // Science. 2001. **292**. 77–79.
5. *Parazzoli C.G., Greegor R.B., Nielsen J.A.* Performance of a negative index of refraction lens // Appl. Phys. Lett. 2004. **84**, N 17. 3232–3234.
6. *Shalaev V.M., Cai W., Chettiar U.K., Yuan H.-K., Sarychev A.K., Drachev V.P., Kildishev A.V.* Negative index of refraction in optical metamaterials // Opt. Lett. 2005. **30**. 3356–3358.
7. *Zhang S., Fan W., Panoiu N.C., et al.* Experimental demonstration of near-infrared negative-index metamaterials // Phys. Rev. Lett. 2005. **95**. Id. 137404.
8. *Kildishev A.V., Cai W., Chettiar U.K., Yuan H.-K., Sarychev A.K., Drachev V.P., Shalaev V.M.* Negative refractive index in optics of metal-dielectric composites // J. Opt. Soc. Am. B. 2006. **23**. 423–433.
9. *Zhang S., Fan W., Malloy K.J., Brueck S.R.J., Panoiu N.C., and Osgood R.M.* // Demonstration of metal-dielectric negative-index metamaterials with improved performance at optical frequencies // J. Opt. Soc. Am. B. 2006. **23**. 434–438.
10. *Jacob Z., Alekseyev L.V., Narimanov E.* Optical hyperlens: far-field imaging beyond the diffraction limit // Opt. Express. 2006. **14**. 8247–8256.
11. *Salandrino A., Engheta N.* Far-field subdiffraction optical microscopy using metamaterial crystals: theory and simulations // Phys. Rev. B. 2006. **74**. Id. 075103.
12. *Liu Z., Lee H., Xiong Y., Sun C., Zhang X.* Optical hyperlens magnifying sub-diffraction-limited objects // Science. 2007. **315**. 1686.
13. *Smolyaninov I., Hung Y., Davis C.* Magnifying superlens in the visible frequency range // Science. 2007. **315**. 5819.
14. *Kildishev A.V., Narimanov E.E.* Impedance-matched hyperlens // Opt. Lett. 2007. **32**, N 23. 3432–3434.
15. *Greenleaf A., Lassas M., and Uhlmann G.* Anisotropic conductivities that cannot be detected by EIT // Physiol. Meas. 2003. **24**. 413–419.
16. *Pendry J.B., Schurig D., Smith D.R.* Controlling electromagnetic fields // Science. 2006. **312**. 1780.
17. *Schurig D., Mock J.J., Justice B.J., Cummer S.A., Pendry J.B., Starr A.F., Smith D.R.* Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies // Science. 2006. **314**. 977–980.
18. *Zhang B., Chen H., Wu B.-I., Luo Y., Ran L., Kong J.A.* Response of a cylindrical invisibility cloak to electromagnetic waves // Phys. Rev. B. 2007. **76**. Id. 121101.
19. *Cai W., Chettiar U.K., Kildishev A.V., Shalaev V.M.* Optical cloaking with metamaterials // Nat. Photonics. 2007. **1**. 224–227.
20. *Cai W., Chettiar U.K., Kildishev A.V., Shalaev V.M.* Designs for optical cloaking with high-order transformations // Optics Express. 2008. **16**. 5444–5452.
21. *Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В.* Конечно-объемный алгоритм решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 2006. **47**, № 7. 1286–1301.
22. *Прокопьева Л.Ю., Шокин Ю.И., Лебедев А.С., Федорук М.П.* Параллельная реализация метода конечных объемов для решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // Вычисл. технологии. 2007. **12**. Спецвыпуск 4. 59–69.

Поступила в редакцию
24.11.2008