

Т. З. Исмагилов

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА С РАЗРЫВНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТЬЮ НА ТЕТРАЭДРАЛЬНЫХ СЕТКАХ

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. *Уравнения Максвелла; метод конечных объемов; схема Годунова; разрывная диэлектрическая проницаемость*

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 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 остается 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 проводить расчеты только для случая, когда разрыв диэлектрической проницаемости проходил по координатной линии.

Контактная информация: ismagilov@academ.org

Статья рекомендована к публикации программным комитетом международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии-2010».

Очевидно, что необходимы более универсальные алгоритмы, позволяющие проводить расчеты для трехмерных 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-объемная схема для численного решения трехмерных 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 расчеты на тетраэдральных сетках и допускает эффективную параллельную реализацию с помощью метода геометрической декомпозиции. В статье приводятся результаты расчетов 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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial t} - \operatorname{rot} H &= 0, \quad D = \varepsilon E, \\ \frac{\partial B}{\partial t} + \operatorname{rot} E &= 0, \quad B = \mu H, \\ \operatorname{div} D &= 0, \quad \operatorname{div} B = 0, \end{aligned}$$

где E – электрическое поле, H – магнитное поле, D – электрическая индукция, 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

$$\frac{\partial}{\partial t} U + \frac{\partial}{\partial x_1} F_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} F_2 + \frac{\partial}{\partial x_3} F_3 = 0, \quad (1)$$

где U – вектор консервативных переменных, F_1 , F_2 и F_3 – векторы потоков.

$$U = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad F_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ H_3 \\ -H_2 \\ 0 \\ -E_3 \\ E_2 \end{pmatrix}, \quad F_2 = \begin{pmatrix} -H_3 \\ 0 \\ H_1 \\ E_3 \\ 0 \\ -E_1 \end{pmatrix}, \quad F_3 = \begin{pmatrix} H_2 \\ -H_1 \\ 0 \\ -E_2 \\ E_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Проинтегрировав уравнение (1) по объему Ω с границей $\partial\Omega$, можно получить эквивалентную интегральную форму

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} U d\Omega + \int_{\partial\Omega} (n_1 F_1 + n_2 F_2 + n_3 F_3) dS = 0, \quad (2)$$

где $n = (n_1, n_2, n_3)$ – внешняя нормаль. Систему (1) также можно записать в недивергентной форме

$$\frac{\partial}{\partial t} V + A_1 \frac{\partial}{\partial x_1} V + A_2 \frac{\partial}{\partial x_2} V + A_3 \frac{\partial}{\partial x_3} V = 0, \quad (3)$$

где V – вектор потоковых переменных, связанных с вектором консервативных переменных матрицей перехода Θ : $V = \Theta U$

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

а матрицы A_1, A_2, A_3 записываются как

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

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

3. РАЗНОСТНАЯ СХЕМА

Рассмотрим расчетную область в трехмерном 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 объем Ω_Δ и барицентр X_Δ^B как

$$\Omega_\Delta = \int_\Delta d\Omega, \quad X_\Delta^B = \frac{1}{\Omega_\Delta} \int_\Delta X d\Omega.$$

Для каждой грани Γ определим площадь S_Γ и центр X_Γ^C как

$$S_\Gamma = \int_\Gamma dS, \quad X_\Gamma^C = \frac{1}{S_\Gamma} \int_\Gamma X dS.$$

Для приближенного решения уравнения (2) рассмотрим разностную схему

$$\Omega_{\Delta_i} \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\tau} + \sum_{k=1}^m \int_{\Gamma_k} (n_1 F_1 + n_2 F_2 + n_3 F_3) d\Gamma = 0, \quad (4)$$

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

Для того чтобы в (4) найти значение U на новом временном слое – 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 -й 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 (4) приближенно вычисляем по формуле прямоугольников и получаем

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\tau}{\Omega_{\Delta_i}} \sum_{k=1}^m s_{\Delta_i}^k F_i^k, \quad (5)$$

$s_{\Delta_i}^k$ – площадь k -й грани F_i^k – поток через k -ю грань.

3.1. Нахождение потоков через границу ячейки

Пусть $n = (n_1, n_2, n_3)$ – вектор нормали к общей грани ячеек Δ_L и Δ_R в точке X^C . Если предположить, что производные компонент электромагнитных полей по касательной к грани равны 0, то систему в недивергентной форме (3) можно переписать как

$$\frac{\partial}{\partial t} V + A \frac{\partial}{\partial n} V = 0,$$

где $A = A_1 n_1 + A_2 n_2 + A_3 n_3$. 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 – $V_L(X^C)$ и $V_R(X^C)$. 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 $V = \Theta U$, для вычисления потоков через грань в (5) будем использовать

$$F = \Theta^{-1}(A^+ V_L(X^C) + A^- V_R(X^C))$$

или

$$F = C^+ V_L(X^C) + C^- V_R(X^C). \quad (6)$$

Матрицы C^+ и C^- задаются по формулам

$$C^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}(E - n^t n) & -N \\ N & \varepsilon(n^t n - E) \end{pmatrix},$$

$$C^- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}(n^t n - E) & -N \\ N & \varepsilon(E - n^t n) \end{pmatrix},$$

где

$$\varepsilon = 2\varepsilon_L \varepsilon_R / (\varepsilon_L + \varepsilon_R),$$

$$N = \begin{pmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{pmatrix},$$

а E – единичная матрица 3 на 3.

3.2. Нахождение значений компонент электромагнитных полей на границе ячейки

Рассмотрим исходную систему уравнений в недивергентной форме (3). Пусть X^B – барицентр ячейки, а X^C – центр грани. Тогда $V(X^C)$ может быть найдена по следующей формуле со вторым порядком по времени и пространству:

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

Итак, значения электромагнитных полей на грани ячейки сетки в (6) выражаются следующим образом:

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

3.3. Нахождение градиентов компонент электромагнитных полей в ячейке

Вычисление градиентов проведем 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 вместо вектора электрического поля E введем свой вектор переменных W . В ячейках, имеющих общую грань с поверхностью разрыва диэлектрической проницаемости, выберем

$$W = \Xi(\theta, \phi, \varepsilon) \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix},$$

$$\Xi = \begin{pmatrix} \varepsilon \sin(\theta) \cos(\phi) & \varepsilon \sin(\theta) \sin(\phi) & \varepsilon \cos(\theta) \\ \cos(\theta) \cos(\phi) & \cos(\theta) \sin(\phi) & -\sin(\theta) \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \end{pmatrix},$$

где θ и ϕ – углы вектора нормали к поверхности разрыва в сферической системе координат, а ε – диэлектрическая проницаемость в ячейке. В остальных ячейках выберем $W = E$. В узлах сетки

введем 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 найдем градиенты W в ячейках с помощью метода наименьших квадратов. Для этого воспользуемся значениями E 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 возьмем значения в барицентрах ячеек соседних для одной из присутствующих соседних ячеек. Таким образом, в методе наименьших квадратов будем использовать

$$\left\{ X^{B_j}, \Xi(\theta_i, \phi_i, \varepsilon_j) E_j \right\}$$

где j пробегает индексы ячеек, которые используются для вычисления градиентов в ячейке i . После нахождения градиентов в i -й ячейке сетки по найденным градиентам вычислим значения $W_i(X^P) = W_i^P$ в ее узлах $X^P = \{x_i^P\}$

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

где θ^P и ϕ^P – значения углов в узле P . В одном узле X^P получаем несколько различных значений $W_i(X^P)$ по числу соседних ячеек, за итоговое значение $W^P = W(X^P)$ принимаем их среднее арифметическое. Теперь в каждой ячейке найдем градиенты E с помощью метода наименьших квадратов. Для этого будем использовать значения E в вершинах ячейки. Таким образом, в методе наименьших квадратов для вычисления градиентов E в ячейке i возьмем

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

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

Градиенты H вычисляются аналогично, только везде используются просто декартовы компоненты.

5. 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 расчеты на своем фрагменте. Для передачи данных между процессами используется интерфейс передачи сообщений MPI.

5.1. 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.

5.2. 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 используется для передачи величин в фиктивные ячейки. Передаваемые величины включают компоненты электромагнитных полей и координаты барицентров тетраэдров. Обмен данных на сторонах граней используется для вычисления потоков. Таким образом, последовательность действий в параллельной программе на каждом шаге по времени следующая:

- передача значений электромагнитных полей в ячейках;
- вычисление предварительных градиентов и частичных сумм значений электромагнитных полей в вершинах;
- передача частичных сумм и получение окончательных значений электромагнитных полей в вершинах;
- вычисление окончательных градиентов;
- вычисление значений на гранях;

- передача значений на гранях;
- вычисление значений в ячейках на новом временном слое.

Особо отметим, что алгоритм не требует обмена градиентами между процессами.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТОВЫХ РАСЧЕТОВ

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

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

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

6.1. Тест 1

Рассмотрим распространение гибридной электромагнитной волны в световоде со ступенчатым профилем диэлектрической проницаемости. Разрыв диэлектрической проницаемости ϵ проходит по криволинейной поверхности

$$r \equiv \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = a,$$

$$\epsilon = \epsilon(r) = \begin{cases} \epsilon_1 = n_1^2, & 0 \leq r \leq a, \\ \epsilon_2 = n_2^2, & r > a. \end{cases}$$

В этом случае система уравнений Максвелла имеет аналитическое решение [13], z – компоненты электромагнитных полей которого в цилиндрических координатах записываются в виде

$$E_z = J_1\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \cos(\theta)\cos(kt - \beta z),$$

$$H_z = -\frac{\beta}{k} s J_1\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \sin(\theta)\cos(kt - \beta z),$$

$$H_z = -\frac{\beta}{k} s J_1\left(\frac{u}{a} r\right) \cdot \sin(\theta) \cos(kt - \beta z),$$

при $r \leq a$, и

$$E_z = \frac{J_1(u)}{K_1(w)} K_1\left(\frac{w}{a} r\right) \cdot \cos(\theta) \cos(kt - \beta z),$$

$$H_z = -\frac{\beta}{k} s \frac{J_1(u)}{K_1(w)} K_1\left(\frac{w}{a} r\right) \cdot \sin(\theta) \cos(kt - \beta z),$$

при $r > a$, где J_0 и J_1 – функции Бесселя первого рода, K_0 и K_1 – функции Бесселя второго рода, $s_0 = s\beta^2/k^2n_0^2$,

$$s_1 = s\beta^2/k^2n_1^2,$$

$$u = a\sqrt{k^2n_1^2 - \beta^2},$$

$$w = a\sqrt{k^2n_2^2 - \beta^2},$$

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

а β находится из дисперсионного соотношения

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

Остальные компоненты электромагнитных полей могут быть выражены через z -компоненты с помощью уравнений Максвелла.

Тестовые константы $\epsilon_1 = 2,25$, $\epsilon_2 = 1,0$, $k = 6,0$, $a = 0,64$, $\beta = 8,402440923258$, $u = 2,063837416842$, $w = 3,764648073438$.

В качестве расчетной области был выбран цилиндр радиуса 1.0 и высотой 0.6:

$$\sqrt{x_1^2 + x_2^2} \leq 1,0, \quad 0 \leq x_3 \leq 0,6.$$

Расчеты 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 расчетной сетки, состоящей из 18845 тетраэдров. Не показаны тетраэдры, у которых первые две координаты барицентра меньше 0,5. Подобласть с более высокой диэлектрической проницаемостью $\epsilon_1 = 2,25$ обозначена темным цветом. На рис. 2 показаны изолинии распределения третьей компоненты

магнитного поля H_3 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 табл. 1 приводятся максимальные значения ошибки в норме L_2 . Как следует из результатов расчетов, алгоритм позволяет проводить расчеты со вторым порядком точности в областях с разрывной диэлектрической проницаемостью в случае, когда разрыв проходит по криволинейной поверхности.

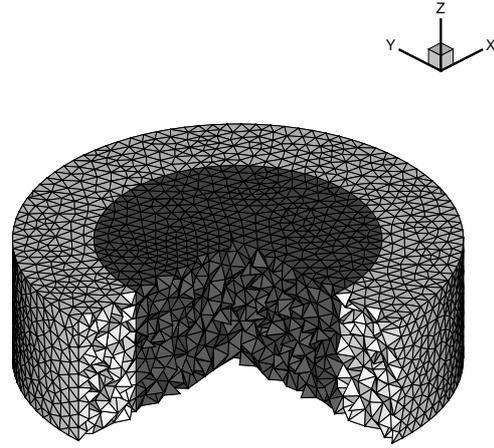


Рис. 1. Пример расчетной сетки

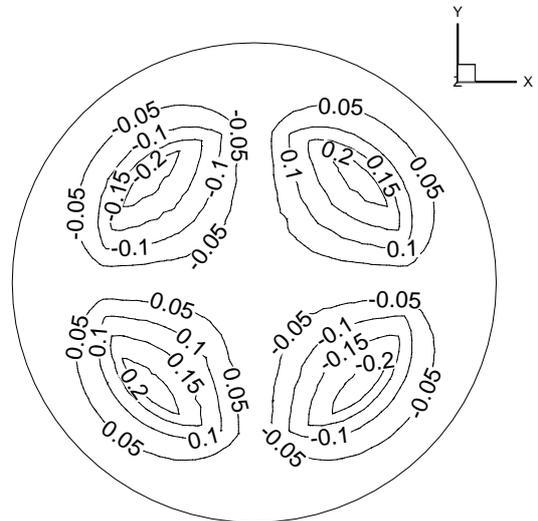


Рис. 2. Магнитное поле z -компонента

Таблица 1

Максимальная ошибка

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

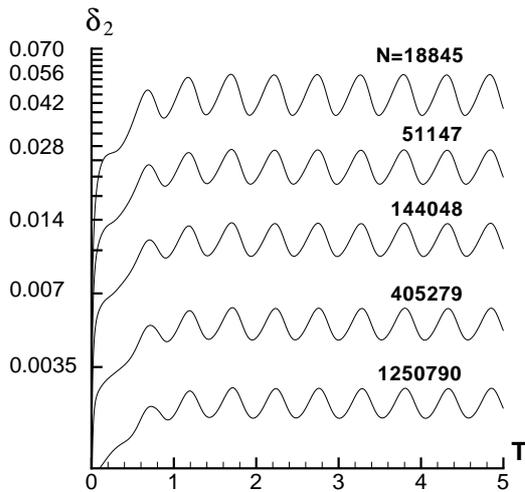


Рис. 3. Эволюция ошибки

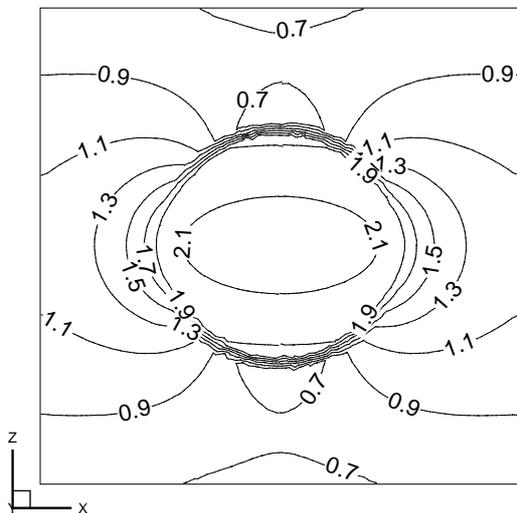


Рис. 4. Электрическое поле x компонента

6.1. Тест 2

В качестве второго теста рассмотрим задачу о взаимодействии плоской электромагнитной волны с диэлектрической сферой. Разрыв диэлектрической проницаемости ϵ проходит по криволинейной поверхности

$$r \equiv \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} = a,$$

$$\epsilon = \epsilon(r) = \begin{cases} \epsilon_1 = n_1^2, & 0 \leq r \leq a, \\ \epsilon_2 = n_2^2, & r > a. \end{cases}$$

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 расчетной области выбирался куб. Расчеты проводились на сетке, состоящей из 1426139 тетраэдров. Сетка была построена таким образом, чтобы разрыв диэлектрической проницаемости проходил по граням тетраэдров.

Расчеты проводились с использованием последовательной и параллельной реализации предложенного алгоритма на кластере Новосибирского государственного университета. Кластер построен на базе блэйд-серверов HP BL460c, имеющих по 16 ГБ оперативной памяти и по два 4-ядерных процессора Xeon 5355 (2,66 ГГц). В качестве коммуникационной среды использовался InfiniBand. В параллельной реализации использовалась декомпозиция расчетной области на 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128 частей. Результаты всех расчетов с использованием параллельной версии и расчета последовательной версии совпадали. На рис. 4 показаны изолинии распределения первой компоненты электрического поля E_1 в момент времени $T = 2,00$ в сечении $x_1 = 0,0$. Время счета было различным. В табл. 2 приводятся затраты времени на проведение расчета в зависимости от числа процессоров. Видно, что достигается ускорение близкое к линейному, что говорит о высокой эффективности параллельной реализации.

Таблица 2

Ускорение	
Число процессоров	Время счета, с
1	90179
2	48512
4	25100
8	15243
16	7052
32	3333
64	1715
128	939

ВЫВОДЫ

Проведенные тестовые расчеты подтверждают второй порядок аппроксимации по времени и пространству предлагаемой схемы, а также эффективность параллельной реализации для систем с разделенной памятью, с помощью интерфейса передачи сообщений MPI.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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 Delaunay-Voronoi meshes for approximation 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 объемов // *Вычисл. технологии*. 2005. Т. 10, № 2. С. 60–73.
8. **Лебедев А. С., Федорук М. П., Штырина О. В.** Конечно-объемный алгоритм решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // *ЖВМ и МФ*. 2006. Т. 47, №. 7. С. 1286–1301.
9. **Cioni J.-P., Fzoui L., Steve H.** 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. **Schoberl J.** 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., Huffman D. R.** *Absorption and scattering of light by small particles*, Wiley, 1998.

ОБ АВТОРЕ



Исмагилов Тимур Зинферович, ст. преп. Дипл. бакалавр по прикл. математике (НГУ, 1998). Дипл. магистр по математике (НГУ, 2000). Иссл. в обл. вычислительной математики, математического моделирования, параллельных численных методов.