

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова.

Факультет вычислительной математики и кибернетики

На правах рукописи

Семенов Алексей Николаевич

**Разработка комплекса программ решения
электродинамических задач с использованием
массивно-параллельных вычислительных
систем**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена на кафедре автоматизации научных исследований факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель: *к.ф.-м.н., доцент кафедры автоматизации научных исследований факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова,
Смирнов Александр Павлович*

Официальные оппоненты: *д.ф.-м.н., профессор кафедры математической физики факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова,
Ильинский Анатолий Серафимович;
д.т.н., профессор кафедры 406 факультета РЛА МАИ,
Гринев Александр Юрьевич*

Ведущая организация: *Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики*

Защита состоится 25 декабря 2013 г. в 15 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.001.43 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, расположенном по адресу: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ, 2-й учебный корпус, факультет вычислительной математики и кибернетики, ауд. 685.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке МГУ имени М.В.Ломоносова.

Автореферат разослан «_____» _____ 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,

доктор физико-математических наук, профессор

Захаров Е.В.

Общая характеристика работы

Актуальность работы. При моделировании распространения электромагнитных волн в радиотехнике [10],[11],[5], микроэлектронике [15],[14], задачах нанооптики [16],[17], [7] и биодиагностики [12], [13], требуется решение полной трёхмерной системы уравнений Максвелла на сетках больших размеров. При реализации на вычислительной системе размер таких сеток составляет порядка терабайта и более. Большие сетки необходимы для описания неоднородностей, характерный размер которых значительно меньше длины волны, а общий размер исследуемой системы имеет размер равный десяткам длин волн. Для решения таких задач необходимы вычислительные системы с большим объёмом памяти и высокой производительностью: суперкомпьютеры с массивно-параллельной архитектурой. Для их использования требуются специализированные комплексы программ, способные эффективно использовать терабайтные объёмы оперативной памяти и более чем тысячи процессоров вычислительной системы. При реализации комплекса программ необходимо также учитывать специфику архитектуры конкретной вычислительной системы. Комплекс должен быть многофункциональным и рассчитанным на решение задач как в ограниченной, так и в не ограниченной области.

Определение электромагнитных полей в произвольной, неоднородной диэлектрической среде – это важный практический предмет исследования волновых эффектов, в том числе и на микро и нано уровне. Аналитические решения получены, как правило, для объектов простой формы. Для объектов сложной структуры необходимо прибегнуть к численному моделированию задачи. Численное решение полной системы уравнений Максвелла позволяет получить значения компонент электромагнитного поля для последующего исследования и анализа электромагнитных свойств моделируемых структур.

Одним из наиболее распространённых способов численного решения пол-

ной системы уравнений Максвелла является явный метод конечных разностей во временной области, в иностранной литературе finite-difference time-domain (FDTD) [1]. Метод основан на использовании сетки Йи [3], в узлах которой располагаются компоненты электромагнитного поля. Основываясь на уравнениях Максвелла в интегральной форме, можно построить их конечно-разностную аппроксимацию. Поскольку FDTD-метод решает задачу во временной области, он позволяет решать импульсные и негармонические задачи и получить результат для широкого спектра длин волн за один расчёт. Это необходимо при решении задач, в которых неизвестны резонансные частоты, или в случае моделирования широкополосных сигналов. Также FDTD-метод позволяет проследить временную эволюцию распространения волны в моделируемом объёме, что может быть необходимо для детального исследования процесса формирования устойчивой картины распределения электромагнитных волн. Метод позволяет непосредственно моделировать краевые эффекты и эффекты экранирования и удобен при задании анизотропных, дисперсных и нелинейных сред.

При численном решении FDTD-методом задач в неограниченном пространстве на границах расчётной области чаще всего используется искусственный поглощающий слой PML (Perfectly matched layer) [8], [6]. Рассеянная волна, уходя на бесконечность, поглощается анизотропным слоем на границе и, при правильном выборе параметров поглощающего слоя и разностной сетки, отражение от PML слоя минимально [4],[2].

Величина шага дискретизации по пространству должна быть значительно меньше исследуемых длин волн и размера исследуемой структуры. Это может потребовать сеток с маленьким шагом по пространству, что означает большие затраты памяти и возросшее время расчёта. При моделировании дисперсных и анизотропных сред также растут необходимые вычислительные ресурсы. Актуальной становится задача создания программного комплекса

на высокопроизводительных массивно-параллельных вычислительных системах с большим объёмом оперативной памяти, который позволит эффективно решать класс электродинамических задач, описываемых полной системой уравнений Максвелла.

Существует ряд комплексов, реализующих параллельный FDTD-метод на кластерных вычислительных системах ([18], [19]). Однако, использование таких комплексов, как правило, рассчитано на массивно-параллельные вычислительные системы общей архитектуры, что делает невозможным эффективно использовать их на специализированных суперкомпьютерах и полностью задействовать их вычислительные мощности. На факультете ВМК Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова установлен суперкомпьютер IBM BlueGene/P, имеющий 8192 процессоров и 4 терабайта оперативной памяти. Разработанный в диссертации программный комплекс был эффективно реализован для этого суперкомпьютера и вычислительных систем схожей архитектуры.

Цель диссертационной работы. Разработка параллельных алгоритмов и комплекса программ для численного решения полной системы трёхмерных уравнений Максвелла на современных многопроцессорных вычислительных системах и суперкомпьютерах для моделирования электродинамических задач радиотехники, микроэлектроники, нанооптики и биодиагностики, требующих для их описания и расчёта терабайтных данных.

Научная новизна. Разработан программный алгоритм для решения крупномасштабных электродинамических задач, который с помощью гибридной технологии MPI и OpenMP может эффективно выполняться на современных массивно-параллельных вычислительных системах. На основе предложенного алгоритма создан программный комплекс на многоядерных вычислительных системах и суперкомпьютерах серии IBM Blue Gene/P. Показано, что комплекс имеет хорошую масштабируемость и может эффективно

выполняться на массивно-параллельных системах. С помощью созданного комплекса исследована зависимость субволновой разрешающей способности идеальной линзы из метаматериала от её физических параметров. Найдены значения параметров, при которых возможно получить субволновую разрешающую способность. Получено значение коэффициента прохождения основной моды бесконечного прямоугольного волновода с неоднородной вставкой.

Практическая значимость. Созданный комплекс программ может быть использован для моделирования широкого круга электродинамических задач, требующих больших вычислительных ресурсов. Обладая высокой эффективностью и масштабируемостью, комплекс позволяет проводить моделирование актуальных ресурсоемких задач, решение которых ранее было невозможно.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

- Разработан программный алгоритм для решения электродинамических задач, использующий гибридные технологии MPI и OpenMP. Создан многофункциональный комплекс программ на многоядерных вычислительных системах и суперкомпьютере IBM BlueGene/P, позволяющий решать широкий круг электродинамических задач. Показано, что созданный комплекс имеет хорошую масштабируемость и может эффективно выполняться на массивно-параллельных системах, оперируя с терабайтами вычислительных данных.
- С помощью созданного комплекса, исследована зависимость субволновой разрешающей способности идеальной линзы из метаматериала от её физических параметров. Найдены значения параметров, при которых возможно получить субволновую разрешающую способность.
- С помощью комплекса впервые решена задача вычисления добротности

открытого резонатора Фабри-Перо со вставкой из метаматериала, ранее проводившегося только для не субволновых размеров резонатора.

- С помощью разработанного программного комплекса получено численное решение временной задачи рассеяния основной моды бесконечного прямоугольного волновода с неоднородной вставкой. Получена зависимость коэффициента прохождения волны в волноводе от диэлектрической проницаемости вставки и положения неоднородности внутри вставки. Результаты могут быть использованы при решении обратной задачи определения свойств диэлектрической среды вставки.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на:

- Международной конференции "Progress in Electromagnetics Research Symposium" (Stockholm, Sweden, 2013 год)
- Международной конференции "Progress in Electromagnetics Research Symposium" (Moscow, Russia, 2012 год)
- Международном научном семинаре "Inverse Problems and Large-Scale Modeling with Applications in Electromagnetics" (Karlstad, Sweden, 2012 год)
- VI Всероссийской конференции "Радиолокация и радиосвязь" Российской академия наук Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова (Москва, 2012 год)
- Объединенном Фельдовском семинаре по электродинамике и антеннам. (Москва, 2012 год) Российская академия наук Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова

- XIII Всероссийской школы-семинара "Физика и применение микроволн" (Звенигород, МГУ им. М.В. Ломоносова, 2011 год)
- Международной суперкомпьютерной конференции "Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее" (Новороссийск, 2011 год)
- Научной конференции "Ломоносовские чтения" (Москва, МГУ им. М.В. Ломоносова, 2011 год)

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 9 печатных работах, из них 6 статей в журналах списка ВАК ([1]-[6]) и 3 тезиса докладов ([7]-[9]).

Структура и объем диссертации Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 100 страниц, из них 89 страниц текста, включая 23 рисунка. Библиография включает 60 наименований на 7 страницах.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе диссертации описываются численные методы, используемые при создании комплекса программ численного моделирования уравнений Максвелла EMWSolver3D. Описываются разработанные параллельные алгоритмы численного решения, используемые в комплексе. Представлены результаты эффективности распараллеливания алгоритма.

В §1.1 рассматривается постановка задачи для класса решаемых электромагнитных задач. При разработке комплекса программ EMWSolver3D ис-

ходной постановкой задачи было найти решение системы уравнений Максвелла в оптической задаче в отсутствии внешних зарядов:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathit{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{J}_M - \sigma_H\mathbf{B} \\ \mathit{rot}\mathbf{H} = \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J} - \sigma_E\mathbf{D} \\ \mathit{div}\mathbf{B} = 0 \\ \mathit{div}\mathbf{D} = 0 \\ \mathbf{B} = \mu\mathbf{H} \\ \mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E} \end{array} \right. , \quad (1)$$

где $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$, $\mu = \mu(\mathbf{r}, \omega)$ — диэлектрическая и магнитная проницаемости, зависящие от частоты с электрическими потерями, а \vec{J} и \vec{J}_M — плотность электрического тока и плотность тока магнитного заряда соответственно. Так же будем считать что, материалы могут иметь магнитные и электрические потери энергии, определяемые не зависящими от частоты значениями электрической и магнитной проводимостей σ_E и σ_H .

Комплекс позволяет рассматривать постановки задач, где граничные условия и параметры среды могут иметь вид представленный в Таблице 1. Реализуемая функциональность комплекса программ позволяет моделировать широкий круг задач, таких как рассеивание света на нанобъектах в открытой области, распространение электромагнитных волн в волноводе с диэлектрическими вставками, рассеивание света на фотонных кристаллах и задач, связанных с материалами, имеющими отрицательный коэффициент преломления. Например, задачу моделирование рассеивания волн в открытых микрорезонаторах на основе слоистых метаматериалов [1], а также задача прохождения электромагнитной волны через идеальную линзу.

Граничные условия	Начальные условия	Модели сред
Условия первого рода. Любая компонента электромагнитного поля равняется заданной функции $\vec{E}(x, y, z, t) = \vec{f}(x, y, z, t); \quad \vec{r} \in G$ $\vec{H}(x, y, z, t) = \vec{g}(x, y, z, t); \quad \text{где } G - \text{граница области}$	Задание начального профиля электрического и магнитного поля. $\vec{E}(x, y, z, t = 0) = \vec{f}(x, y, z);$ $\vec{H}(x, y, z, t = 0) = \vec{g}(x, y, z);$	$\varepsilon = \varepsilon(\vec{r}), \mu = \mu(\vec{r})$
Периодические условия.	Метод полного/рассеянного поля. Решение задачи может искажаться в виде суммы Еполное = Епадающее + Ерассеянное, что позволяет моделировать падение из бесконечности плоскопараллельной волны под произвольным заданным углом.	$\varepsilon = \varepsilon(\vec{r}, \omega), \mu = \mu(\vec{r}, \omega)$ Дисперсная модель Друде. Позволяет моделировать метаматериалы.
Поглощающий слой UPML поглощающий слой, позволяющий решать задачи в неограниченной области.		

Таблица 1. Функциональность комплекса программ EMWSolver3D

В §1.2 рассматриваются модели диэлектрической среды для моделирования метаматериалов. Для описания дисперсных сред и метаматериалов предложено использовать модель Друде для $\varepsilon(\omega)$ и $\mu(\omega)$, имеющую вид [9]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega) &= \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2 - i\omega\gamma_e} \right) \\ \mu(\omega) &= \mu_0 \left(1 - \frac{\omega_{pm}^2}{\omega^2 - i\omega\gamma_m} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

где ω_{pe}, ω_{pm} — электрическая и магнитная плазменные частоты, а γ_e, γ_m — частоты столкновений частиц, характеризующие электромагнитные потери в материале.

В §1.3 рассматриваются различные способы описания граничных условий для нестационарных задач электродинамики в ограниченной и неограниченной областях. Для задач в неограниченной области рассматриваются различные формулировки поглощающего слоя PML.

В §1.4 рассматриваются возможные методы задания источника электромагнитных волн при численном решении полной системы уравнений Максвелла с помощью FDTD-метода.

В §1.5 описан метод конечных разностей во временной области численного решения полной системы уравнений Максвелла. Приводится описание расположения электромагнитных полей и контуров в ячейке \mathbb{Y} и. Используемая аппроксимация не требует специальных условий сшивки на границах раздела, поскольку выполнение этих условий следует из уравнений Максвелла в интегральной форме. Разностная дивергенция роторов полей E и H сохраняется точно. Для описанного метода получена явная FDTD-схема, которая была использована при создании комплекса программ численного решения трёхмерной системы уравнений Максвелла EMWSolver3D.

В §1.6 исследуются основные свойства и параметры UPML слоя, влияющие на эффективность поглощения. С помощью комплекса программ EMWSolver3D проведен анализ параметров UPML слоя. Показано, что для класса решаемых задач, для обеспечения требуемой точности, вполне достаточно UPML слоя размера $p = 20$ ячеек при параметрах функции профиля затухания $\sigma_x^{PML}(x) = ((x - l)/d)^m \sigma_{x,\max}^{PML}$, $\sigma_{x,\max}^{PML} = -\frac{(m+1)\ln[R(0)]}{2\eta d}$ при $m = 4$, $\ln(R(0)) = 16$ и отдалённости слоя от объектов рассеивания на расстояние порядка длины волны.

В §1.7 приводится описание метода полного/рассеянного поля, используемого в разрабатываемом комплексе программ для задания падающей волны. Данный метод состоит в разделении расчётной области на две подобласти: область полного поля и область рассеянного поля. На границах подобластей ставятся специальные условия сшивки.

В §1.8 приведена численная реализация модели Друде для метаматериалов в FDTD-схеме с учётом разрывных диэлектрической и магнитной проницаемостей. Для реализации дисперсного случая в FDTD-методе используется схема с введением дополнительного уравнения, которая приводится в работе [9].

В §1.9 предложен подход для разработки параллельного алгоритма чис-

ленного решения уравнений Максвелла FDTD-методом, основанный на декомпозиции данных. Параллельный алгоритм для FDTD-метода разработан для суперкомпьютеров с топологией коммуникационной сети 3D-тор или 3D-mesh (в частности IBM BlueGene /P) и основан на параллелизме по данным. Подход заключается в том, что одна операция выполняется сразу над всеми элементами массива данных. Различные фрагменты такого массива обрабатываются на разных узлах параллельной вычислительной системы. FDTD-метод имеет высокий потенциал к распараллеливанию при декомпозиции расчётного объёма между вычислительными узлами системы, обусловленный сильной локальностью производимых вычислений [20], и позволяет оперировать терабайтными данными. Исследованы различные способы декомпозиции данных, и проанализирована их эффективность. Рассмотрены возможные варианты балансировки между вычислениями и пересылками данных между узлами вычислительной системы.

В §1.10 рассматриваются технологии программирования при гибридном подходе к программной реализации параллельного алгоритма. В качестве технологии параллельного программирования был применен гибридный подход MPI/OpenMP.

В §1.11 предложен параллельный FDTD алгоритм при 1D декомпозиции для трехмерных задач с протяженной областью. Преимуществом такой схемы является достаточная эффективность и масштабируемость алгоритма без привязки к конкретной топологии коммуникационной сети массивно-параллельного вычислительного комплекса. Однако, такое разбиение возможно применить только к областям протяженным вдоль оси z , иначе на один узел вычислительной системы будет приходиться подобласть, размер которой по z менее 3-х двумерных слоев, и задача сведется к пересылке граничных значений.

В §1.12 предложен параллельный FDTD алгоритм при 3D декомпози-

ции для произвольных трехмерных задач. Главным преимуществом такой схемы является лучшая по сравнению с 1D декомпозицией эффективность и масштабируемость алгоритма на массивно-параллельных вычислительных системах, имеющих топологию коммуникационной сети 3D-тор или 3D-Mesh. Тем не менее, увеличение количества пересылок и уменьшение объема пересылаемых данных влечет за собой усложнение задачи балансировки между вычислениями и асинхронными пересылками. Если производимый в параллельных OpenMP циклах расчет занимает время большее, чем пересылка и прием данных с граничных подобластей, то параллельный FDTD алгоритм выполняется эффективно.

В §1.13 рассматриваются особенности целевой архитектуры вычислительной системы IBM Blue Gene /P, влияющие на эффективность параллельного FDTD алгоритма.

В §1.14 показаны результаты эффективности распараллеливания разработанных алгоритмов численного решения. Разработанные параллельные алгоритмы использовались в комплексе программ EMWSolver3D. Исходный код, а также инструкция по использованию расположены в открытом репозитории

по адресу <https://github.com/AlexeySemenov/EMWSolver3D>.

В §1.14.1 исследуется эффективность распараллеливания гибридной OpenMP части. Полученный график ускорения — линейный, и при увеличении числа нитей ускорение максимально. В §1.14.2 исследуется ускорение алгоритма. Характеристикой эффективности распараллеливания кода при решении задачи фиксированного размера является ускорение, которое отражает масштабируемость в так называемом сильном смысле S и может быть определено как [23]:

$$S = \frac{T(N_{проц.}^{баз.}, M)}{T(N_{проц.}, M)}, \quad (3)$$

где $T(N_{проц.}^{баз.}, M)$ — время решения задачи фиксированного размера с вычислительными затратами M на некотором числе процессоров $N_{проц.}^{баз.}$, которое принято за базовое, а $T(N_{проц.}, M)$ — время решения той же задачи на $N_{проц.}$ процессорах. Исследовано, во сколько раз можно ускорить решение задачи с помощью FDTD алгоритма при увеличении числа используемых процессорных узлов от 1 до 512 для 1D декомпозиции и от 32 до 2048 для 3D декомпозиции. Для 1D декомпозиции расчет проводился для задачи с сеткой $128 \times 128 \times 1024$. С таким объемом данных задача может полностью поместиться на одном вычислительном узле с 2Gb оперативной памяти. Начиная с 64 узлов ускорение начинает уменьшаться по сравнению с линейным. Однако, при переходе с 256 на 512 узлов ускорение относительно 256 узлов снова линейно. Падение ускорения вызвано тем, что из-за небольшого исходного размера задачи, при разбиении задачи по узлам, нагрузка на каждый вычислительный узел становится крайне мала. Для задачи с сеткой $1024 \times 1024 \times 4096$ ускорение при переходе с 64 на 128 и с 128 на 256 - линейно. Исследована сильная масштабируемость для 3D декомпозиции. Ускорение при двукратном увеличении числа узлов варьируется в пределах 1.6–1.8 раз (см. Рис. 1(а)). В §1.14.3 исследована слабая масштабируемость алгоритма. Найден максимальный размер задач, которые можно решать на доступных процессорных мощностях, и получена оценка эффективности использования вычислительных ресурсов при увеличении размера задачи. На Рис. 1(б) представлены графики меры слабой масштабируемости для серии расчётов задач с разностной сеткой: $1024 \times 1024 \times 2048$ и $1024 \times 1024 \times 8196$.

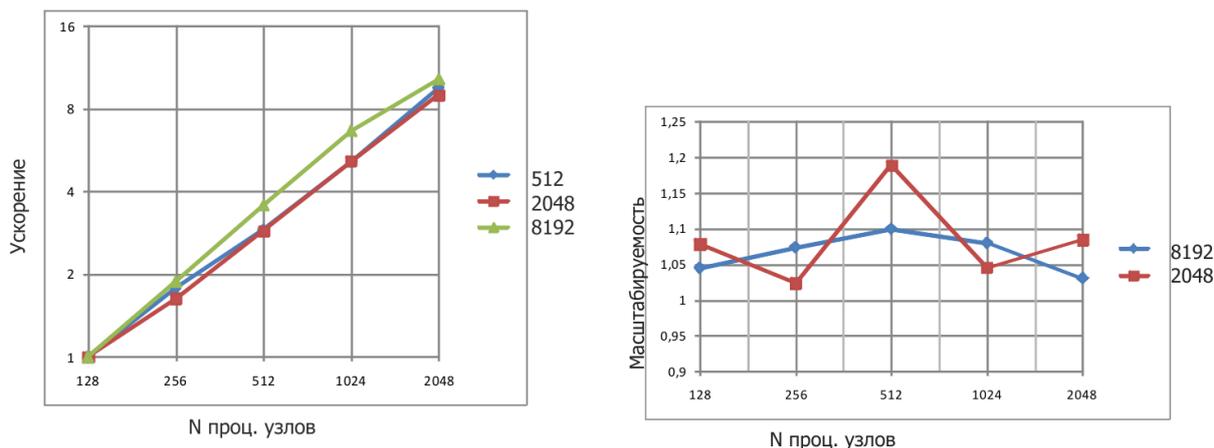


Рис. 1(а). Ускорение FDTD-алгоритма при различном числе узлов на сетке $1024 \times 1024 \times 4096$ в случае 3D декомпозиции

Рис. 1(б) Масштабируемость FDTD-алгоритма на различных размерах сеток в случае 3D декомпозиции

Как видно из графика на Рис. 1(б), параллельный алгоритм при использовании 3D декомпозиции хорошо масштабируется и может быть использован для решения электродинамических задач на очень больших сетках.

Результаты первой главы опубликованы в работах [2, 4, 7, 9].

Во второй главе диссертации рассматривается применение комплекса программ для решения задач электродинамики с использованием метаматериалов.

В §2.1 рассматриваются примеры численного решения задач, позволяющие верифицировать правильность работы компонент программного комплекса. В §2.1.1 рассматривается задача с точечным источником. Точное решение задачи о точечном источнике для H_z компоненты представляет из себя функцию Ханкеля и имеет следующий вид:

$$H_{z\omega}(x, y) = -I_m \frac{\beta^2}{4\omega\mu} H_0^{(2)}(\beta\rho)$$

где I_m - постоянный ток, $\beta = \omega\sqrt{\mu\varepsilon}$, ρ - расстояние до источника. Решение двухмерной численной задачи для TE-моды рассчитывалось на сетке 10λ

$x = 10\lambda$ при $\Delta x = \Delta y = \lambda/10$. Источник с частотой 5GHz располагался в центре расчетной области $x = 5\lambda$, $y = 5\lambda$. Было вычислено 200τ периодов по времени, чтобы добиться установившегося состояния. При рассмотрении нормированного решения погрешность вычислений на всей рассматриваемой области не превышала 0,00004, что соответствует $O(h^2 + \tau^2)$. Как следствие поглощения рассеянной волны слоем UPML, видно отсутствие отраженных от границы волн. В §2.1.2 проводилось моделирование прохождения плоской волны через плоскопараллельный слой метаматериала. Проведено сравнение с аналитическими результатами. Значения коэффициента преломления сред, полученные численного решения, отличаются от теоретического значения не более чем на 0.000032.

Параграф §2.2 посвящён исследованию свойств открытого микрорезонатора Фабри-Перо, содержащего слой метаматериала с отрицательным показателем преломления. В §2.2.1 представлена численная модель микрорезонатора. На основе разработанного комплекса программ проведено численное моделирование открытого резонатора с метаматериалом при помощи разностной FDTD схемы с учетом частотной дисперсии и поглощающих граничных условий UPML. Аналогичный резонатор рассматривался ранее, однако его размеры существенно превышали длину волны, поэтому представлялось интересным проверить, обладают ли микрорезонаторы теми же уникальными свойствами, что и описанные в работах [21], [22]. В §2.2.2 описываются электромагнитные свойства резонатора с метаматериалом. Численный эксперимент подтверждает предположение о том, что использование метаматериалов позволяет увеличить добротность микрорезонатора на несколько порядков.

В §2.3 рассматривается пример численного моделирования идеальной линзы [9] с помощью программного комплекса EMWSolver3D. Исследована зависимость субволновой разрешающей способности идеальной линзы из метаматериала от её физических параметров. Найдены значения параметров,

при которых возможно получить субволновую разрешающую способность.

Результаты второй главы опубликованы в работах [1–3].

В третьей главе диссертации рассматривается применение программного комплекса для решения задачи нахождения коэффициента прохождения внутри прямоугольного волновода.

В §3.1 рассматривается постановка задачи рассеивания электромагнитной волны на диэлектрическом объекте в волноводе. Требуется найти значение коэффициента прохождения F электромагнитных волн для различных положений неоднородности, значений диэлектрической проницаемости вставки и значений неоднородности $\varepsilon(x)$. Коэффициент F находится как отношение комплекснозначных амплитуд волновой моды Н10 до прохождения вставки и после. Для этого рассмотрена задача нахождения амплитуды ведущей волновой моды Н10 из полноволнового FDTD решения, полученного в ходе численного эксперимента с помощью комплекса программ EMWSolver3D.

В §3.2 рассматриваются методы нахождения коэффициента прохождения F из численного полноволнового решения. Получены уравнения для аналитического решения разностной задачи в случае распространения волновой моды, необходимые для нахождения амплитуды Н10 волновой моды.

В §3.3 произведён расчёт коэффициента прохождения для однородной вставки. Рассмотрена задача для вставки толщины 0.2λ и $\varepsilon = 1.9$. В соответствии с уравнением, представленным в §3.2 для коэффициента F в случае однородной вставки, аналитическое значение $Re F = 0.904$, а значение, полученное с помощью предложенного метода составляет $Re \tilde{F} = 0.902$. Для той же задачи при $\varepsilon = 2.9$ аналитическое значение коэффициента распространения $Re F = 0.631$, в то время как полученное численно значение $Re \tilde{F} = 0.675$.

В §3.4 исследована зависимость коэффициента прохождения от физических параметров неоднородности внутри вставки. Рассматривается задача, где диэлектрическая проницаемость ε в областях Q и Q_1 различна (см. Рис.

2). Толщина диэлектрического слоя Q равна λ .

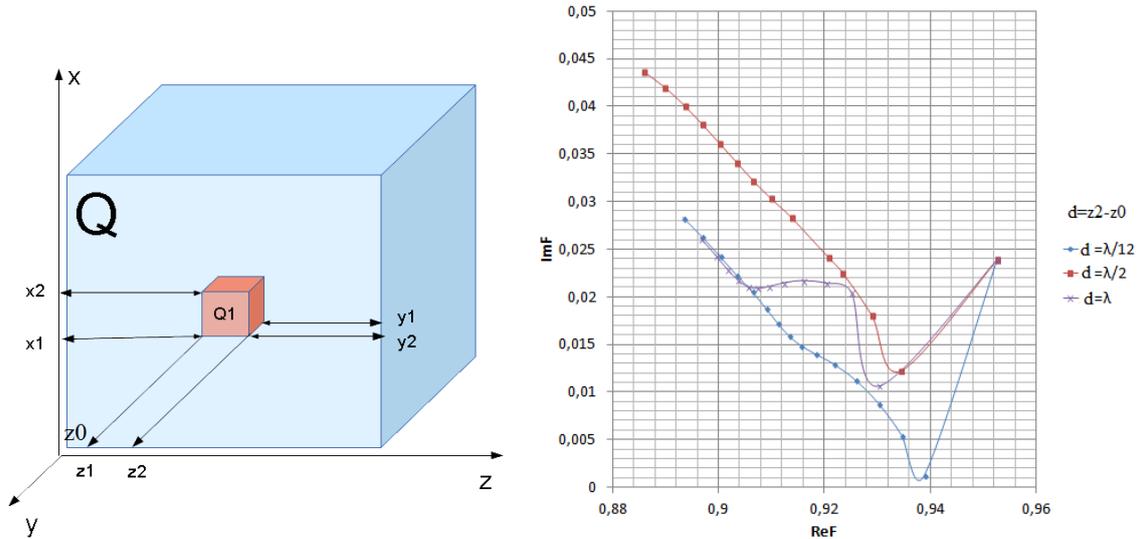


Рис. 2: Геометрия и расположение неоднородности Q_1 внутри диэлектрической вставки Q .

Рис. 3: График коэффициента F на комплексной плоскости для трёх положений $d = z_2 - z_0 = \lambda/12, \lambda/2, \lambda$ неоднородности Q_1 относительно оси z при $\varepsilon_2 = 1.9..15.9$ с шагом 1

Размеры неоднородности $x_2 - x_1 = y_2 - y_1 = z_2 - z_1 = \lambda/10$. Расчёты проводились для трёх положений $d = z_2 - z_0 = \lambda/12, \lambda/2, \lambda$ неоднородности Q_1 относительно оси z . Значение диэлектрической проницаемости для вставки Q было выбрано следующим: $\varepsilon_1 = 1,9$, а значение диэлектрической проницаемости ε_2 для неоднородности менялось в каждом расчёте от 1.9 до 15.9 с шагом 1. Для каждого расчёта был посчитан коэффициент F . На Рис. 3 представлен график коэффициента F на комплексной плоскости. Каждая точка графиков на комплексной плоскости - полученное численное значение F для фиксированных параметров неоднородности d и ε_2 . Кривая образуется из точек для фиксированного положения неоднородности d и последовательно увеличивающегося значения параметра ε_2 , меняющегося в пределах от 1.9 до 15.9 с шагом 1. Отсутствие самопересечений кривых на графике говорит о возможности однозначного определения диэлектрической проницаемости

ε_2 по коэффициенту прохождения F . Полученные значения коэффициента F можно использовать при решении обратной задачи определения диэлектрической проницаемости, если необходимо многократное решение прямой задачи нахождения F .

Результаты третьей главы опубликованы в работах [5, 6, 8].

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

Основные результаты

- Разработан программный алгоритм для решения электродинамических задач, использующий гибридные технологии MPI и OpenMP. Создан многофункциональный комплекс программ на многоядерных вычислительных системах и суперкомпьютере IBM BlueGene/P, позволяющий решать широкий круг электродинамических задач. Показано, что созданный комплекс имеет хорошую масштабируемость и может эффективно выполняться на массивно-параллельных системах, оперируя с терабайтами вычислительных данных.
- С помощью созданного комплекса, исследована зависимость субволновой разрешающей способности идеальной линзы из метаматериала от её физических параметров. Найдены значения параметров, при которых возможно получить субволновую разрешающую способность.
- С помощью комплекса впервые решена задача вычисления добротности открытого резонатора Фабри-Перо со вставкой из метаматериала, ранее проводившегося только для не субволновых размеров резонатора.
- С помощью разработанного программного комплекса получено численное решение временной задачи рассеяния основной моды бесконечного

прямоугольного волновода с неоднородной вставкой. Получена зависимость коэффициента прохождения волны в волноводе от диэлектрической проницаемости вставки и положения неоднородности внутри вставки. Результаты могут быть использованы при решении обратной задачи определения свойств диэлектрической среды вставки.

Список публикаций

1. Семенов А. Н., Смирнов А.П., Игнатьева Д. О., Сухоруков А.П. Математическое моделирование открытого микрорезонатора со слоем метаматериала // Известия РАН. Серия физическая 75(12), 2011, с. 1637-1640
2. Семенов А.Н., Смирнов А.П. Численное моделирование уравнений Максвелла с дисперсными материалами // Математическое моделирование, 2013, том 25, номер 12, с. 19-32
3. Smirnov A.P., Semenov A.N., Ignatyeva, D.O., Sukhorukov. A.P. Full-wave modeling of open subwavelength resonator with metamaterial // Progress in Electromagnetics Research Symposium, Moscow, 2012, pp. 1254-1258
4. Smirnov, A.P., Semenov, A.N. Full wave Maxwell's equations solver EMWSolver3D // Progress in Electromagnetics Research Symposium, Moscow, 2012, pp. 252-255
5. Smirnov A. P., Semenov A.N., Shestopalov Y. Modeling of Electromagnetic Wave Propagation in Guides with Inhomogeneous Dielectric Inclusions // Inverse problems and large-scale computations/ Eds. Larisa Beilina, Yury V. Shestopalov, Springer
6. Smirnov A.P., Semenov A.N., Shestopalov Y. FDTD Simulation of Waveguide

with Non-uniform Dielectric Slab // Progress in Electromagnetics Research Symposium , Stockholm, 2013, pp. 76-78

7. Семенов А. Н. Параллельная реализация численного решения уравнений Максвелла Fdtd методом для больших задач // Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее: Труды Международной суперкомпьютерной конференции М.: Изд-во МГУ, 2011. с.530-533
8. Smirnov A.P., Semenov A.N., Shestopalov Y. Modeling of electromagnetic wave propagation in guides with inhomogeneous dielectric inclusions // The Workshop proceedings (tentative title "Inverse Problems and Large-Scale Modeling with Applications in Electromagnetics. Proceedings of conferences supported by the Visby Program"), Karlstad, Sweden, 2012, pp. 13-14
9. Семенов А.Н., Смирнов А.П. Комплекс программ численного решения уравнений Максвелла EMWSOLVER3D // VI Всероссийская конференция “Радиолокация и радиосвязь” , JRE (Журнал Радиоэлектроники) – ИРЭ им. В.А.Котельникова РАН Москва, 19-22 ноября 2012 г, с. 146-150

Цитированная литература

1. A.Taflove and S.C.Hagness, Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method // Norwood, MA:Artech, 2000.
2. Z.S.Sacks, D.M.Kingsland, R.Lee, and J.F.Lee, A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition // IEEE Trans.Antennas and Propagation, 1995, vol.43 ,no.12, pp.1460-1463.
3. Kane Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media // Antennas and Propagation, 1966, IEEE Transactions on 14, pp. 302-307

4. S.D. Gedney, An anisotropic perfectly matched layer absorbing media for the truncation of FDTD lattices // Antennas and Propagation, 1996, IEEE Transactions on 44, pp.1630-1639.
5. A. Taflove, J. Dabkowski, and M. Genge, Mitigation of buried pipeline voltages due to 60 Hz ac inductive coupling. Part I: Design of joint rights of way; Part II: Pipeline grounding methods // IEEE Trans. Power Apparatus Systems, 1979, vol. 98, pp. 1806-1823.
6. А. Зеленин, Решение уравнений Максвелла методом FDTD // По материалам сайта <http://zfdtd.narod.ru>
7. А.Н. Боголюбов, И.А. Буткарев, Ю.С. Дементьева Численное моделирование двумерных фотонных кристаллов // "ЖУРНАЛ РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ" N 11,2006
8. David M. Hockanson Perfectly Matched Layers Used as Absorbing Boundaries in a Three-dimensional FDTD Code
9. Yang Hao, Raj Mittra FDTD Modeling of Metamaterials Theory and Applications // Artech House Publishers, 2009.
10. Simpson. I I . and A Taflove Three-dimensional FDTD modeling of impulsive ELF propagation about the Earth-sphere // IEEE Trans. Antennas Propagat, Vol. 52, 2004. pp. 443-451
11. Simpson. J J. and A. Taflove Efficient modeling of impulsive ELF antipodal propagation about the Earth-sphere using an optimized two-dimensional geodesic FDTD grid // IEEE Antennas Wireless Propagat Leu.. Vol. 3. 2004. pp. 215-218.

12. Hagness, S. C. A. Taflove, and J. E. Bridges. Three-dimensional FDTD analysis of a pulsed microwave confocal system for breast cancer detection design of an antenna-array element // IEEE Trans Antennas Propagation Vol 47. 1999. pp. 783-791.
13. Bond, E. J. X. Li, S. C. Hagness, and B. D. Van Veen. Microwave imaging via space time beamforming for early detection of breast cancer // IEEE Trans Antennas Propagation. Vol 51. 2003. pp 1690-1705
14. Simpson, J. J., A. Taflove, A. Mu, and H. Heck. Computational and experimental study of a microwave electromagnetic bandgap structure with waveguiding defect for potential use as a bandpass wireless interconnect // IEEE Microwave Wireless Components Lett. Vol 14. 2001. pp 345-345
15. Simpson, J. J., A. Taflove, J. A. Mix, and H. Heck. Advances in hyperspectral digital interconnects using electromagnetic bandgap technology: Measured low-loss 43-GHz passband centered at 50 GHz // Proc IEEE Antennas Propagation Soc Int'l Symp. Washington, D.C, 2005
16. Park, H.C., S.H. Kim, S.H. Kwon, Y.O. Ju, J.K. Yang, J.H. Back, S.B. Kim, and Y.-H. Lee. Electrically driven single-cell photonic crystal laser // Science, Vol 305. 2004. pp. 1444-1447
17. Yanik, M. F., S. Fan, M. Soljagic, and J. D. Joannopoulos. All-optical transistor action with bistable switching in a photonic crystal cross-waveguide geometry // Optics Lett., Vol. 28. 2003. pp 2506-2508.
18. Ardavan F. Oskooi, David Roundy, Mihai Ibanescu, Peter Bermel, J. D. Joannopoulos, and Steven G. Johnson. MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method // Computer Physics Communications 181, 2010, pp.687-702 .

19. A. V. Zakirov, V. D. Levchenko CFmaxwell — The Program Code for FDTD Modelling of Very Large Size Problems // in *Progress in Electromagnetics Research Symposium*, Stockholm, Sweden, August 2013
20. Wenhua Yu, Raj Mittra, Tao Su, Yongjun Liu, Xiaoling Yang Parallel Finite-Difference Time-Domain Method // Artech House; 1 edition, 2006
21. Д. О. Сапарина, А. П. Сухоруков // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2009, Т. 17, по3. С. 3-16
22. Saparina, D. O.; Sukhorukov, A. P. // Laser Physics. 2009. Vol. 19. No. 5. pp.1125-1130
23. P. Chatelain et al. Billion vortex particle direct numerical simulations of aircraft wakes» // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 2008, Vol.197, pp. 1296-1304.