



Закиров А.В., [Левченко В.Д.](#)

Реализация
высокоэффективного кода
для трехмерного
моделирования эволюции
электромагнитного поля в
актуальных задачах
электродинамики

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Закиров А.В., Левченко В.Д. Реализация высокоэффективного кода для трехмерного моделирования эволюции электромагнитного поля в актуальных задачах электродинамики // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2009. № 28. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2009-28>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. Келдыша
Российской академии наук

А.В. Закиров, В.Д. Левченко

**Реализация высокоэффективного кода
для трехмерного моделирования
эволюции электромагнитного поля в
актуальных задачах электродинамики**

Москва
2009

УДК 519.688

Эффективный алгоритм для трехмерного моделирования распространения электромагнитных волн в фотонных кристаллах

АННОТАЦИЯ

В работе представлено описание реализации алгоритма, основанного на численном моделировании уравнений Максвелла с помощью конечно - разностного метода временной области (FDTD) для расчета эволюции электромагнитного поля в ограниченной области с различным набором граничных условий, в том числе и поглощающих (идеально согласованного слоя, PML). Высокая скорость расчетов, не ограниченная объемом обрабатываемых данных, а также хорошее распараллеливание достигается с помощью локально-рекурсивного нелокально-асинхронного (LRnLA) алгоритма. Возможными для моделирования материалами являются бездисперсионные среды, материалы с дисперсией $\varepsilon(\omega, \mathbf{r})$ и $\mu(\omega, \mathbf{r})$, основанные на модели Друде, а также проводники и метаматериалы (материалы с отрицательным показателем преломления), представленные в виде следствия этой модели.

Ключевые слова: уравнения Максвелла, FDTD, локально-рекурсивный нелокально-асинхронный алгоритм, граничные условия PML, эффективные алгоритмы, дисперсионная модель Друде, метаматериалы, фотонные кристаллы, материалы с отрицательным показателем преломления

PACS numbers: 42.25.Bs, 42.70.Qs

A.V. Zakirov, V.D. Levchenko, zakirovandrey@gmail.com, vadimlevchenko@mail.ru
The code for effective 3D modeling of electormagnetic waves' evolution in actual electrodynamic problems

ABSTRACT

In the work the implementation of algorithm is offered for Maxwell's equations' numerical modeling with Finite-difference time-domain method in the bounded area with different types of boundary conditions includind Perfectly Matched Layer (PML). For method of cell rounding (sequence of calculations) the Local-recursive nonlocal-anisochronous algorithm (LRnLA) is used, which makes possible to reach the high rate of program's effectiveness and full parallelization. It is developed the methods for modeling of the following media: the simple undispersion materials, the media with dispersion described by Drude model. Conductors and the Negative Index Media (NIM, same as LHM) are under this model too.

Keywords: Maxwell equations, Finite-difference time-domain method, Local-recursive nonlocal-anisochronous algorithm, Perfectly matched layer, effective algorithms, Drude model, metamaterials, photonic crystals, Left-handed materials, Negative Index Media

Содержание

1	Введение	5
2	Постановка задачи в общем случае	6
2.1	Численная схема	6
2.2	Граничные условия	8
3	Алгоритм обхода графа зависимостей разностной схемы	9
4	Оптимизация расчетов	10
4.1	Индексация значений	11
4.2	Векторизация	11
5	Возможные модели сред	11
5.1	Модель бездисперсионного диэлектрика	11
5.2	Диэлектрики с дисперсией	12
5.2.1	Лорентцева поправка.	13
5.3	Идеальные проводники	13
5.4	Неидеальные диэлектрики и проводники	14
5.5	Метаматериалы	14
5.6	Реализация численного моделирования с учетом дисперсии . .	15
6	Примеры	15
6.1	Распределение электромагнитного поля после падения плоской волны на трехмерный фотонный кристалл	15
6.2	Прохождение волны через призму с отрицательным показателем преломления	19
7	Основные результаты	20

1 Введение

Современные искусственные оптические устройства и материалы, такие как фотонные кристаллы, метаматериалы, обтекаемые покрытия являются сложными структурами, состоящих из большого числа мелких объектов, размер которых сравним с длиной волны света. Особый интерес может представлять конструирование суперлинз на основе метаматериалов [3], для которых уже существует экспериментальные возможности исследования [4]. В этом случае аналитические расчеты распространения электромагнитных волн возможны лишь при существенных упрощающих предположениях. Для конструирования таких устройств необходимо предварительное теоретическое исследование, которое может оказаться чрезвычайно трудоемким. В полной мере эволюция электромагнитного поля может быть исследована лишь с использованием прямого численного моделирования, однако из-за существенных размеров счетной области это требует больших вычислительных ресурсов. В современных работах для численного моделирования того или иного эксперимента ввиду ограниченности счетных ресурсов делаются значительные упрощения (например, замена трехмерной задачи двумерной, пренебрежение неоднородностями исследуемого материала, дисперсионными потерями, использование периодических, либо отражающих граничных условий и т.д.), которые позволяют описывать результаты в лучшем случае только качественно [1], [2]. Для прикладного использования может понадобиться количественное исследование большого набора таких экспериментов, которые гораздо проще и дешевле производить численно. Тем не менее численный эксперимент, максимально приближенный к реальному должен учитывать множество различных факторов, которые, соответственно, зачастую могут уменьшать скорость расчетов.

Вследствие этого появляется необходимость в разработке эффективного алгоритма и реализации его для конкретных задач. Целью работы являлась реализация соответствующего программного кода, поскольку существующие системы (например [5], [6]) как правило не способны произвести эффективный трехмерный расчет даже при наличии достаточно быстрых процессоров. Основная потеря в эффективности в этом случае происходит из-за больших задержек при обращении к иерархии памяти. Эти задержки становятся тем более существенными, чем больше объем обрабатываемых данных. В итоге это приводит к большим накладным расчетам при размере данных порядка размера оперативной памяти и невозможности расчетов при превышении этого размера. Чтобы исключить такие потери в реализации программы и продвинуться в область более сложных задач, за основу в этом качестве был взят алгоритм LRnLA (Локально-Рекурсивный Нелокально-

Асинхронный алгоритм) [7], который с одной стороны имеет большой запас в масштабируемости относительно объема данных без существенного падения в производительности кода, а с другой стороны позволяет использовать современные параллельные вычислительные системы.

Для охвата наибольшего количества задач, решение которых может представлять большой интерес, важным фактором в реализации в этом случае встает адаптация алгоритма для моделирования различных типов сред, что проявляется в различных типах материальных уравнений. Еще одним важным условием должна быть возможность моделирования открытых систем при ограниченной в пространстве счетной области. Наиболее популярной реализацией такой возможности на данный момент является моделирование открытых систем с помощью специальных поглощающих граничных условий PML (Perfectly Matched Layer) [11].

2 Постановка задачи в общем случае

Производится полное трехмерное численное моделирование эволюции во времени электромагнитного поля, описываемого уравнениями Максвелла в ограниченной счетной области с различными граничными условиями. С помощью материальных уравнений задается соответствующая модель среды.

2.1 Численная схема

Электромагнитное поле в задаче описывается с помощью значений векторов электрического (\mathbf{E} , \mathbf{D}) и магнитного (\mathbf{B} , \mathbf{H}) полей, известных в определенные моменты времени. Изменение этих значений описывается с помощью явной разностной схемы, аппроксимирующей уравнения Максвелла вкуче с определенными материальными уравнениями.

В качестве явной разностной схемы используется метод FDTD (Finite-Difference Time-Domain) [8], позволяющий выразить значения компонент электромагнитного поля на следующем временном слое через значения на текущем слое. Ниже предоставлено его краткое описание для удобного использования в численных расчетах.

Для начала опишем его вариант для простейшей модели бездисперсионного диэлектрика. Будем описывать его с помощью материальных уравнений, представляющих линейную скалярную зависимость между напряженностью электрического поля и электрической индукции, а также между напряженностью магнитного поля и магнитной индукции, причем на эту зависимость влияют только пространственные координаты.

Запишем Уравнения Максвелла в дифференциальной форме:

$$\operatorname{rot}(\mathbf{H}) = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot}(\mathbf{E}) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (1)$$

Обезразмеривание скорости произведем на скорость света в вакууме. Размерности остальных величин выбраны следующим образом:

$$[x, t, E, H] = d, 1/d, E_0, H_0.$$

Здесь d — характерная длина в задаче, E_0 и H_0 — начальные амплитуды, соответственно, электрических и магнитных компонент волны в вакууме.

Моделирование происходит в трехмерной области V :

$V = \{(x, y, z) : 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq c\}$. В этой области вводится пространственная и временная сетка ω_h^s : $\omega_h^s = \{x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z, t_s = s\tau; i = 0, 1, \dots, N_x, j = 0, 1, \dots, N_y, k = 0, 1, \dots, N_z, s = 0, 1, \dots\}$.

Значение сеточной функции F в узле (x_i, y_j, z_k) в момент времени t_s обозначим как $F_{i,j,k}^s$. То есть $F_{i,j,k}^s = F(ih_x, jh_y, kh_z, s\tau)$. Конечную разность $(F_{i,j,k}^s - F_{i,j,k}^{s-1})/\tau$ запишем как $\Delta_t F_{i,j,k}^s$. Аналогично будем считать $\Delta_x F_{i,j,k}^s = (F_{i,j,k}^s - F_{i-1,j,k}^s)/h_x$, $\Delta_y F_{i,j,k}^s = (F_{i,j,k}^s - F_{i,j-1,k}^s)/h_y$, $\Delta_z F_{i,j,k}^s = (F_{i,j,k}^s - F_{i,j,k-1}^s)/h_z$.

Суть FDTD-метода состоит в использовании решетки Yee (Yee lattice)[9], образующей расчетную сетку. На рис. 1 приводится изображение одной ячейки этой решетки для трехмерного случая.

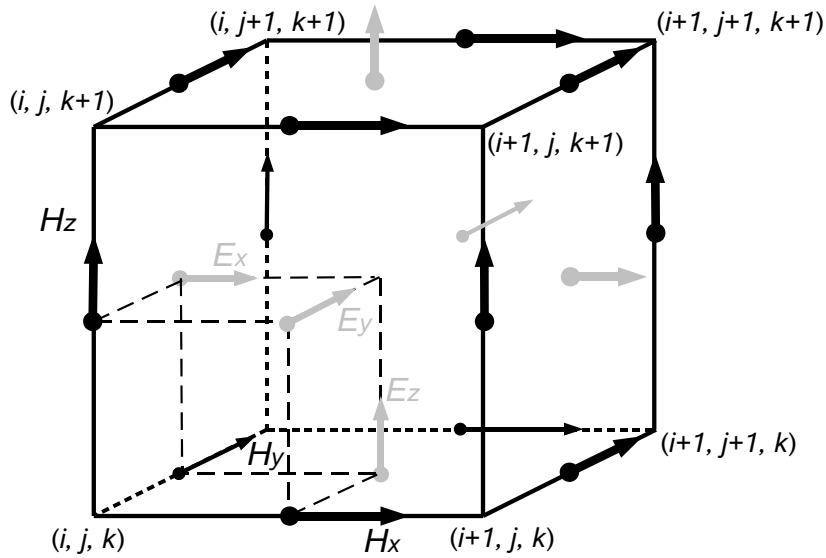


Рис. 1: Решетка Yee

Эта решетка представляет собой одну ячейку сетки, используемой в методе FDTD. Как видно из рисунка, все компоненты электромагнитного поля $E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z$ берутся в разных точках. Кроме этого, компоненты электрического поля \mathbf{E} рассматриваются в моменты времени $s - 0.5$, а магнитного \mathbf{H} - в моменты s . Компоненты вектора \mathbf{D} рассматриваются в тех же точках, что и соответствующие компоненты вектора \mathbf{E} . Аналогично для \mathbf{B} и \mathbf{H} . Делается это для обеспечения 2го порядка точности разностной схемы и выполнения условий $div\mathbf{B} = 0$ и $div\mathbf{D} = 0$.

Для примера рассмотрим два уравнения из шести (1). Используя схематичную запись рис. 1 запишем разностный аналог этих уравнений:

$$\Delta_t(D_x)_{i,j+0.5,k+0.5}^{s+0.5} = \Delta_y(H_z)_{i,j+1,k+0.5}^s - \Delta_z(H_y)_{i,j+0.5,k+1}^s,$$

$$\Delta_t(B_x)_{i+0.5,j,k}^{s+1} = \Delta_z(E_y)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s+0.5} - \Delta_y(E_z)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s+0.5}$$

Для остальных уравнений Максвелла (1) разностные формулы записываются аналогично.

Полученные уравнения позволяют построить следующим образом алгоритм решения:

1. Значения поля \mathbf{D} на временном слое $s+0.5$ находятся исходя из известных значений \mathbf{D} на слое $s - 0.5$ с использованием значений \mathbf{H} на слое s .
2. Затем с помощью материальных уравнений, описывающих связь между напряженностью электрического поля и электрической индукции находятся компоненты вектора \mathbf{E} на временном слое $s + 0.5$.
3. Теперь опять с помощью уравнений Максвелла находятся значения \mathbf{B} на слое $s + 1$ исходя из значений \mathbf{B} на слое s с использованием найденных на предыдущем шаге значений \mathbf{E} на слое $s + 0.5$.
4. Опять с помощью материальных уравнений, описывающих уже связь между напряженностью магнитного поля и магнитной индукции находятся компоненты вектора \mathbf{H} на временном слое $s + 1$.
5. Затем алгоритм повторяется.

2.2 Граничные условия

Особенности уравнений Максвелла, а, следовательно, и разностной схемы таковы, что тангенциальные значения компонент электромагнитного поля на границе счетной области невозможно определить однозначно и их необходимо доопределять граничными условиями. На данный момент реализованы следующие типы граничных условий на границе счетной области:

Периодические граничные условия. Компоненты электромагнитного поля на противоположных границах полагаются одинаковыми.

Отражающие граничные условия. Возможны 2 модели полного идеального отражения: отражение с нулевыми тангенциальными компонентами напряженности электрического поля (классическое идеальное отражение от проводящей поверхности), либо магнитного.

Предопределенные значения. Незвестные величины доопределяются заданными функциями координат и времени, возможен и тривиальный случай (доопределение нулем).

Смешанные условия. Комбинация двух предыдущих условий. Сейчас эти условия используются для моделирования источника волн на одной из границ.

Поглощающие граничные условия PML (Perfectly Matched Layer, Идеально согласованный слой) [11]. Задаются с помощью дополнения добавочными ячейками счетной области со стороны соответствующей границы, в которых моделируется экспоненциальное затухание электромагнитной волны. Коэффициент затухания зависит от удаленности от основной границы и увеличивается по мере продвижения вглубь PML-слоя. Эти поглощающие граничные условия позволяют моделировать распространение электромагнитного поля в ограниченной области с открытыми границами. Поскольку ограниченность ресурсов, а также особенности задачи приводят к тому, что необходимо исследование только ограниченной области, то такие граничные условия являются актуальными в большинстве случаев.

3 Алгоритм обхода графа зависимостей разностной схемы

Конкретная явная разностная схема с заданными начальными и граничными условиями может быть представлена в виде клеточного автомата. Значения во всех клетках изменяются одновременно за одну итерацию. Это означает, что порядок перебора клеток решетки, при совершении итерации не влияет на результат. Кроме того в случае локальности клеточного автомата возможно выполнение следующей итерации без завершения предыдущей на всех клетках, что также не будет влиять на результат. Тем не менее конкретный алгоритм перебора клеток влияет на скорость работы кода, что становится заметным уже при размере данных, превышающих размер кэша процессора, а при больших объемах обрабатываемых данных

становится определяющим. Уменьшение скорости происходит из-за того, что задержки при обращении к памяти существенно превышают один такт процессора. Таким образом наилучшим будет тот алгоритм, который позволит максимально снизить количество таких обращений. В некотором роде таким алгоритмом можно считать алгоритм LRnLA (Локально-Рекурсивный Нелокально-Асинхронный)[7]. Основной его идеей можно назвать применение рекурсивного обхода клеточного автомата как по пространству, так и по времени. Еще одним преимуществом этого алгоритма является отсутствие потерь в скорости при распараллеливании.

На рис. 2 приведены графики зависимости эффективности расчета (отношение теоретического времени исходя из количества тактов процессора, необходимого для одного расчета и его скорости к реально получившемуся времени счета) при различных параметрах алгоритма.

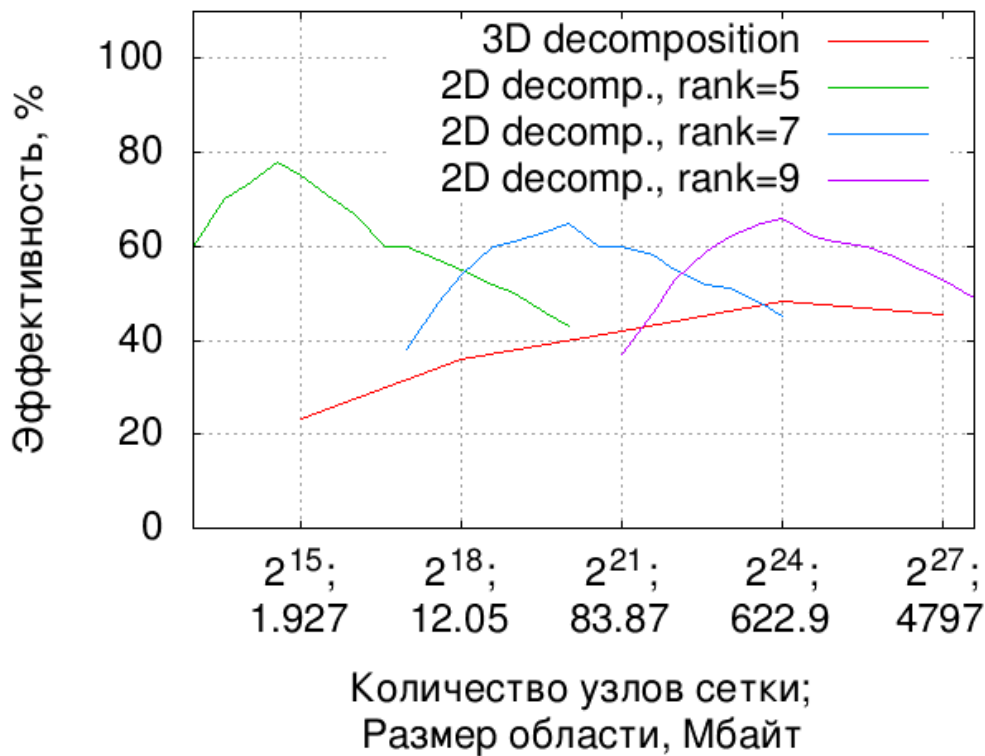


Рис. 2: Эффективность

4 Оптимизация расчетов

Для каждой конкретной задачи в некоторых случаях можно провести ту или иную оптимизацию. Но определенная оптимизация может быть проведена заранее для всех задач.

4.1 Индексация значений

В каждой ячейке необходимо хранить 6 чисел, описывающих электромагнитное поле $(E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z)$ и минимум 2 значения, описывающих среду (ε и μ). Т.е. одна ячейка занимает 32, либо 64 байта в зависимости от типа используемых данных (float или double). Для более сложных моделей сред количество данных в одной ячейке становится еще больше. Поскольку в программе используется такое большое количество данных, необходимо различными способами их минимизировать. Некоторые статические данные, например, характеристики среды (значения диэлектрической и магнитной проницаемости) могут принимать лишь небольшой набор значений. Учитывая это, можно уменьшить объем необходимой памяти. То есть в каждой конкретной ячейке хранится не набор значений, характеризующих среду (например значения ε и μ), а всего лишь одно число-индекс среды. Такой подход позволяет только уменьшить число хранимых данных. Для того, чтобы исключить повторение одинаковых операций, хранятся не сами значения, характеризующие среду, а некоторый минимально необходимый набор коэффициентов, которые нужны при расчете.

4.2 Векторизация

Для ускорения массовых расчетов можно использовать инструкции процессоров из набора SSE[12], позволяющие производить векторизацию данных и использовать 128-битные регистры процессора, что соответственно ускоряет расчеты до 2х, либо 4х раз в зависимости от типа используемых данных и вида процессора. Это имеет смысл при расчете сразу нескольких задач с разными параметрами. При одиночном расчете никакого ускорения не происходит.

5 Возможные модели сред

Различные среды можно моделировать соответствующими вариациями материальных уравнений, реализация которых пока априори считалась выполненной. Тем не менее именно они фактически определяют возможности применимости разработанного алгоритма. Рассмотрим теперь подробнее сами материальные уравнения.

5.1 Модель бездисперсионного диэлектрика

Для начала опишем материальные уравнения, представляющие линейную скалярную зависимость между \mathbf{E} и \mathbf{D} , а также \mathbf{H} и \mathbf{V} . В процессе работы

алгоритма на основе FDTD как было сказано выше материальные уравнения подразумевают поиск \mathbf{E} через \mathbf{D} и \mathbf{H} через \mathbf{B} . Запишем поэтому в простейшем случае материальные уравнения в следующем виде:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\mathbf{D}, \quad \mathbf{H} = \frac{1}{\mu(\mathbf{r})}\mathbf{B}. \quad (2)$$

Здесь функции $\varepsilon(\mathbf{r})$ и $\mu(\mathbf{r})$ зависят только от координаты точки. Запишем разностный аналог первого уравнения из (2) с сохранением условий второго порядка точности. Для этого проинтегрируем его по объему одной счетной ячейки с центром в той точке, в которой задается та или иная компонента электромагнитного поля согласно схеме Yee. Затем аппроксимируем полученные интегралы значениями функций E и D в центре. Подынтегральную функцию $1/\varepsilon(\mathbf{r})$ можно также аппроксимировать значением в центре в случае непрерывности этой характеристики среды[10]. Если же ε претерпевает разрыв в пределах счетной ячейки, то этого уже делать нельзя. Аналогичные рассуждения касаются \mathbf{H} и \mathbf{B} .

5.2 Диэлектрики с дисперсией

Моделирование таких сред производится основываясь на модели Друде [13]. Ее результат предсказывает следующий вид диэлектрической проницаемости среды $\varepsilon(\omega, \mathbf{r})$ в зависимости от частоты электромагнитной волны ω и координаты в пространстве, характеризуемой вектором \mathbf{r} :

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{r}) = 1 + \sum_k \frac{e_k^2 N_k(\mathbf{r})/m_k}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\gamma_k(\mathbf{r})\omega}, \quad (3)$$

где e_k, m_k, N_k, ω_k — заряд, масса, концентрация и собственная частота частицы среды. γ_k — модельный параметр затухания, значение которого определяет проводимость среды.

Недостаток этой формулы в том, что в нее явно входит значение частоты, что приводит к большим трудностям при моделировании немонахроматических волн. Поэтому для диэлектриков проще использовать следующий подход, который основывается на выводе формулы (3).

Материальное уравнение $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ заменяется на следующие эквивалентные уравнения:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad \mathbf{P} = \sum_n \mathbf{P}_n, \quad (4)$$

$$\frac{d^2\mathbf{P}_n}{dt^2} - \gamma_n \frac{d\mathbf{P}_n}{dt} + \omega_n^2 \mathbf{P}_n = \Delta\varepsilon_n \mathbf{E}.$$

Здесь $\Delta\varepsilon_n = \frac{e_n^2}{m_n} N_n$. \mathbf{P} — вектор поляризации диэлектрика, к нахождению которого через систему уравнений (4) фактически сводится учет дисперсии.

Учет дисперсии в таком виде накладывает ограничения на шаг из-за наличия собственных частот. Но если мы заранее знаем спектр исследуемых волн, то, очевидно, нет необходимости учитывать собственные частоты материала, находящиеся далеко за этим спектром. Правда в этом случае вместо уравнения $\mathbf{D} = \mathbf{E} + \mathbf{P}$ надо писать $\mathbf{D} = \varepsilon_m \mathbf{E} + \mathbf{P}$, где ε_m - предельная диэлектрическая проницаемость, если мы не учитываем собственные частоты ω_j для $j > m - 1$.

В целом алгоритм численного решения для компонент электрического поля тогда имеет вид:

1. Из уравнений Максвелла находятся компоненты величины \mathbf{D} в момент времени $s + 0.5$.
2. Из последней серии уравнений (4) можно найти значения векторов \mathbf{P}_n в момент времени $s + 0.5$. В этом случае предполагаются известными значения \mathbf{P}_n в моменты $s - 0.5$ и $s - 1.5$, а также \mathbf{E} в момент $s - 0.5$. Соответствующая разностная схема получится, если саппроксимировать все производные в точке $s - 0.5$ со 2м порядком точности.
3. Теперь можно посчитать \mathbf{E} в момент $s + 0.5$ как $\mathbf{E} = \mathbf{D} - \mathbf{P}$.

5.2.1 Лорентцева поправка.

Суть ее сводится к тому, что каждый заряд диполя может дополнительно воздействовать на соседние. В случае сферически симметричной кристаллической решетки поле, поляризующее один диполь на самом деле равно не \mathbf{E} , а $\mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3}$. Если рассуждать дальше, то можно получить, что учет такой поправки просто аналогичен замене квадрата резонансной частоты ω_n^2 на величину $\omega_n^2 - \frac{\Delta\varepsilon_n}{3}$, что не будет приводить к существенному усложнению модели. Здесь можно отметить то, что резонансная частота может оказаться при определенных параметрах равна нулю. Это означает, что диэлектрическая проницаемость при малых частотах стремится к бесконечности (получаем модель сегнетоэлектриков).

5.3 Идеальные проводники

Идеальные проводники можно описывать точно такими же уравнениями колебаний как и (4), если положить в них $\omega_n^2 \mathbf{P}_n$ равным нулю.

При малых частотах в этом случае как видно из формулы (3) физические свойства проводников определяются фактически мнимой частью ε . Диэлектрическая проницаемость будет иметь вид

$$\varepsilon = 1 - \frac{i\sigma_D}{\omega}, \quad \sigma_D = \frac{Ne^2}{m\gamma}.$$

Тогда уравнения Максвелла в вещественном виде следует писать с учетом электрической проводимости:

$$\operatorname{rot}(\mathbf{H}) = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \sigma_D \mathbf{D}, \quad \operatorname{rot}(\mathbf{E}) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}.$$

Если же, наоборот, пренебречь затуханием, то мы получаем формулу для диэлектрической проницаемости плазмы:

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \omega_p^2 = \sqrt{\frac{Ne^2}{m}}.$$

Здесь можно отметить тот факт, что для диэлектриков при достаточно больших ω дисперсия диэлектрической проницаемости имеет точно такой же вид, что можно объяснить тем что связанные заряды при таких больших частотах становятся свободными.

5.4 Неидеальные диэлектрики и проводники

До сих пор мы рассматривали лишь случай, если в кристалле есть только связанные заряды, либо только свободные. Можно предположить, что в металлах, и вообще в проводниках, существуют как свободные, так и связанные заряды. В таком случае необходимо рассматривать данный кристалл как диэлектрик, у которого одна из собственных частот равна нулю, т.е.:

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{r}) = 1 + \frac{e_k^2 N_k(\mathbf{r})/m_k}{-\omega^2 + i\gamma_k(\mathbf{r})\omega} + \sum_j \frac{e_j^2 N_j(\mathbf{r})/m_j}{\omega_j^2 - \omega^2 + i\gamma_j(\mathbf{r})\omega}.$$

5.5 Метаматериалы

Под метаматериалами будем называть материалы, имеющие отрицательную эффективные диэлектрическую и магнитную проницаемости [14]. При $\varepsilon < 0$ и $\mu < 0$ получается среда с левой тройкой векторов $\mathbf{E}, \mathbf{H}, \mathbf{k}$, что дает для такой среды показатель преломления $n < 0$. Это приводит к тому, что фазовая и групповая скорости направлены в разные стороны. Для таких сред вектор Пойнтинга \mathbf{S} и вектор \mathbf{k} направлены в разные стороны.

Можно показать [14], что в случае отрицательного показателя преломления должна быть частотная дисперсия ε и μ . Общий вид этой дисперсии:

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_e^2}{\omega^2}, \quad \mu = 1 - \frac{\omega_m^2}{\omega^2}. \quad (5)$$

Заметим, что в средах с поглощением и отрицательным показателем преломления меняется знак только при действительной части ε и μ . Знак мнимых частей не надо менять, иначе будут не потери, а, наоборот, усиления.

Используя приведенный выше характер зависимостей диэлектрической и магнитной проницаемостей от частоты (5) и используя модель Друде как для ϵ , так и для μ , можно также моделировать метаматериалы с помощью численного кода.

5.6 Реализация численного моделирования с учетом дисперсии

Учет дисперсии будет накладывать дополнительные ограничения на численные параметры задачи. В первую очередь увеличится количество хранимых значений. Помимо значений \mathbf{E} и \mathbf{H} в каждой точке счетной ячейки нужно хранить 2 значения поляризации в разные моменты. Кроме того, скорость вычислений будет ниже, так как нужно решать большее количество уравнений. Шаг сетки может уменьшиться из-за того, что на выбор его величины будут влиять кроме непосредственно длины волны в задаче также собственные частоты в модели диэлектрика или глубина скин-слоя в проводнике.

6 Примеры

6.1 Распределение электромагнитного поля после падения плоской волны на трехмерный фотонный кристалл

Расчетная область представляет из себя куб, размером $256 \times 256 \times 256$ счетных ячеек (размер одной ячейки, т.е. шаг сетки по пространству равен 1). На границах с 5ти сторон стоят поглощающие условия PML, а на 6й стороне, перпендикулярной оси Z стоят смешанные граничные условия (отражающие плюс генерация плоской волны). Внутри расчетной области расположен фотонный кристалл, ячейки которого представляют из себя кубы с показателями преломления $n_1 = \sqrt{2}$ и $n_2 = \sqrt{3}$, расположенные в трехмерном шахматном порядке как показано на рисунке. Период фотонного кристалла равен 20. По отношению к расчетной области в данном случае фотонный кристалл расположен асимметрично, поэтому в результатах (рис. 4) распределение поля также асимметрично.

На рис. 3 представлены проекции счетной области на три взаимно перпендикулярные грани куба (координатные оси X , Y , Z направлены вдоль ребер) а также для наглядности результирующая трехмерная картинка.

Падающая волна является волновым пакетом, ограниченным функцией $(1 + \cos\Omega t)$ по времени и аналогичной функцией по координатам X и Y с линейной поляризацией. Несущая частота равна 0.05, таким образом на одну длину волны в вакууме приходится около 20ти узлов сетки.

На рис. 4.а показаны две проекции компоненты электромагнитного поля E_x (интенсивность выражена цветом) вдоль осей Z и X в моменты времени $256\Delta t$, $768\Delta t$ и $1280\Delta t$ ($\Delta t = 0.25$) для случая, когда несущая частота падающей волны равна 0.05, на рис. 4.б несущая частота равна 0.033, а на рис. 4.с частота волны источника равна 0.033 для области в отсутствие фотонного кристалла. Рис. 4.д соответствует расчету, в котором фотонный кристалл полностью заменен диэлектриком с показателем преломления $n = 0.5(n_1 + n_2) = (\sqrt{2} + \sqrt{3})/2$.

На рис. 5 показаны графики зависимости от времени полной энергии, находящейся внутри расчетной области, для трех описанных выше экспериментов (рис. 4.а, б, д), вычисленной как разница энергии вошедшей и вышедшей через грани расчетного куба. На рис. 6 представлены графики отношения энергии, вышедшей через боковые (перпендикулярные к X и Y) грани к энергии, сгенерированной источником волн к данному моменту времени. Ось Z является нормалью к естественному направлению распространения волны как показано на рис. 4.

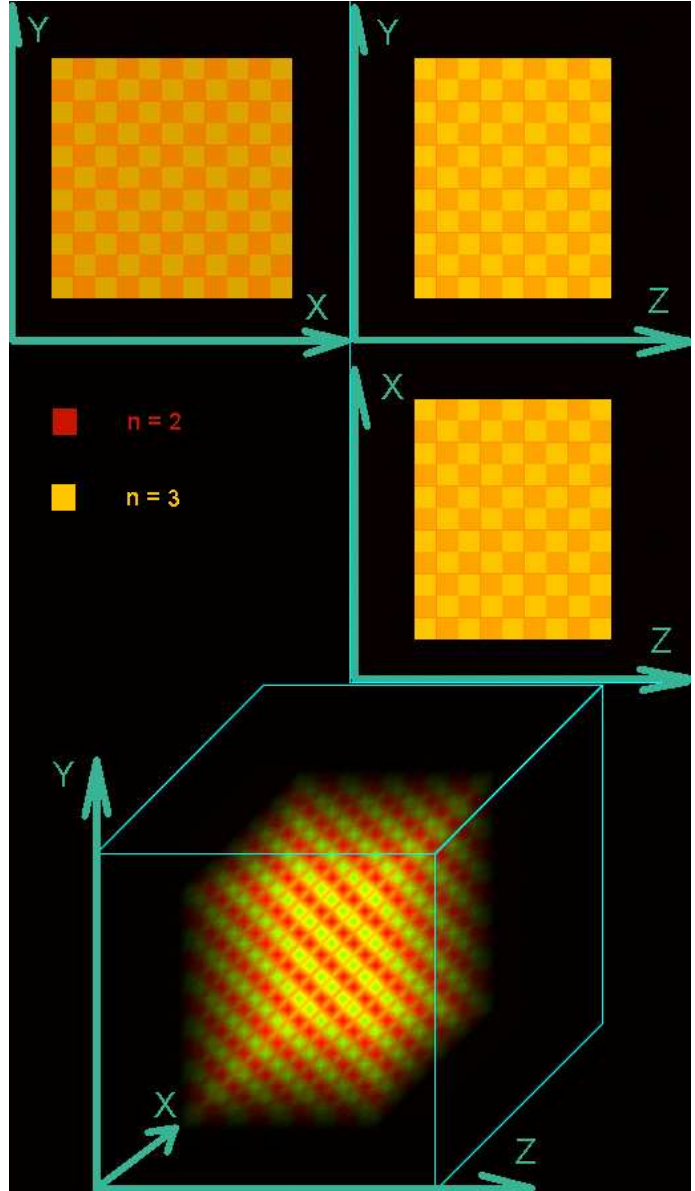


Рис. 3: Фотонный кристалл

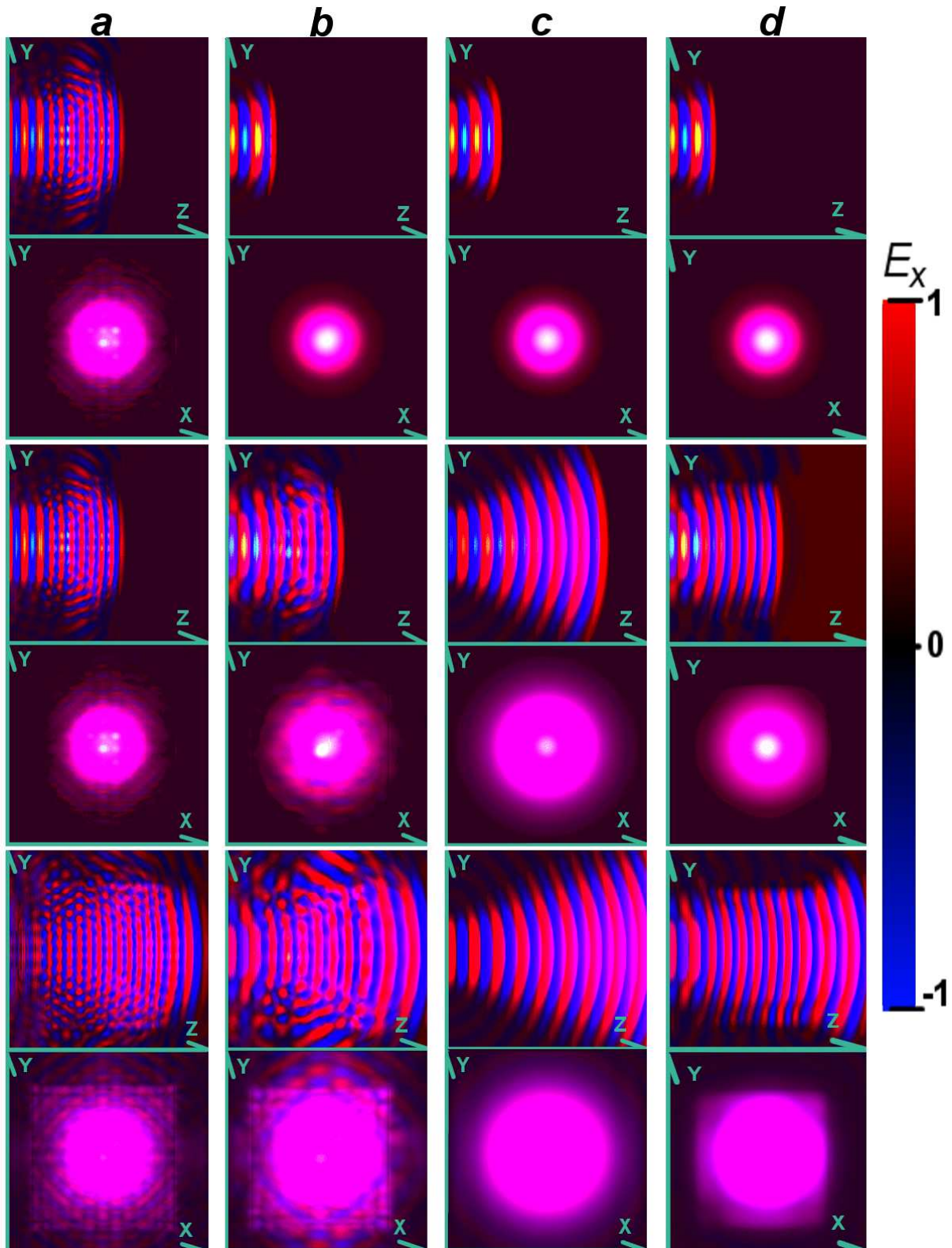


Рис. 4: Распределение компоненты поля E_x в различные моменты времени: а) для несущей частоты 0.05; б) для несущей частоты 0.033; в) для частоты 0.033 в вакууме; д) для частоты 0.033 при замене диэлектриком.

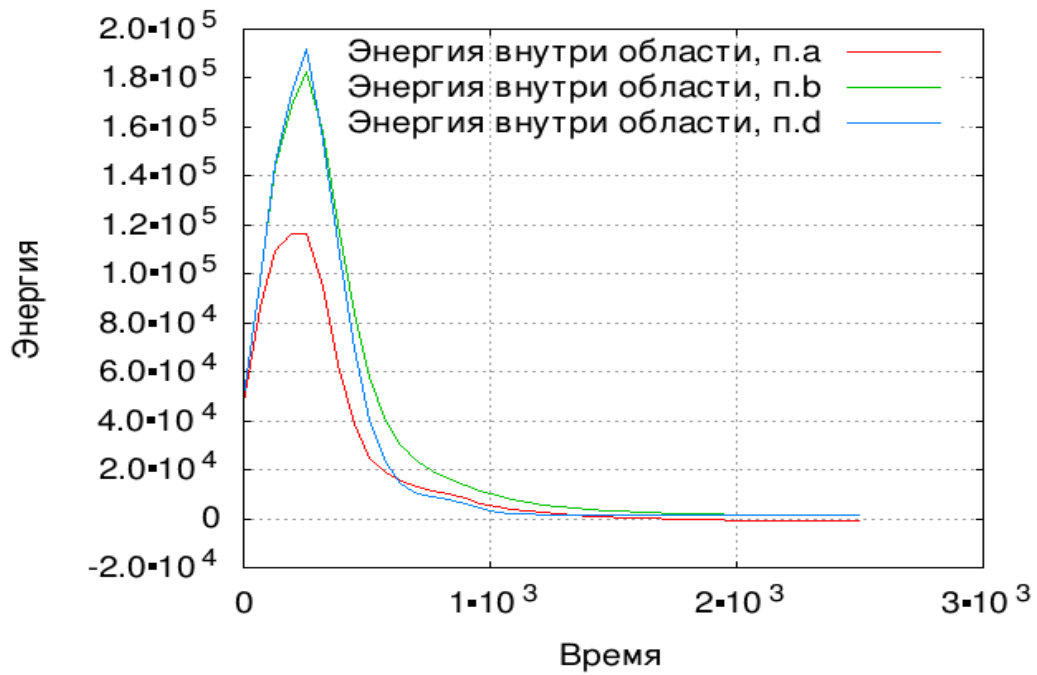


Рис. 5: Количество энергии, находящееся внутри счетного куба для случаев из рис. 4.а, b, d

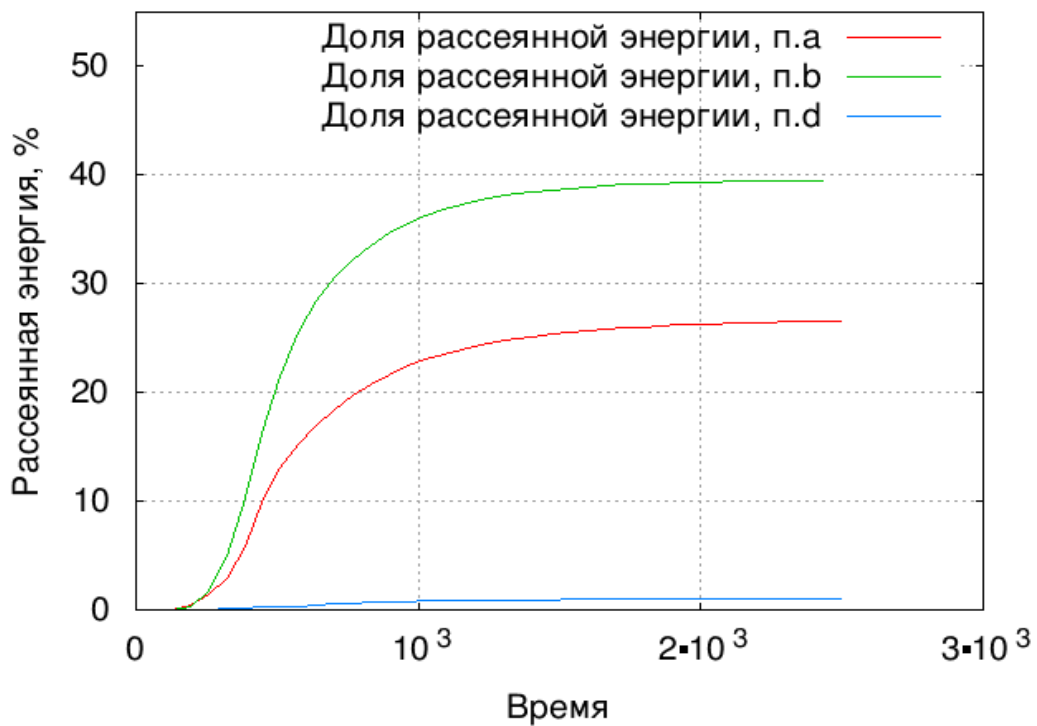


Рис. 6: Доля рассеянной энергии по отношению к вошедшей энергией для рис. 4.а, b, d

6.2 Прохождение волны через призму с отрицательным показателем преломления

Призма на рис. 7 является моделью метаматериала, описанной выше. Для несущей частоты падающего волнового пакета она имеет показатель преломления, равный -1 .

Падающая волна не является строго монохромной, тем не менее на рис. 8 хорошо заметен эффект отрицательного преломления. Параметры падающей волны здесь такие же как и на предыдущем примере.

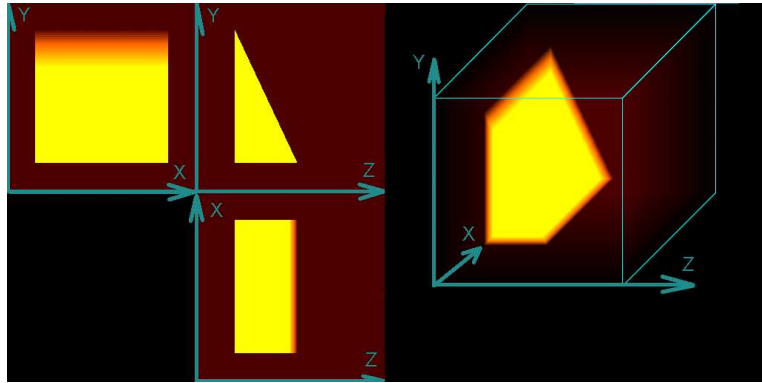


Рис. 7: Призма

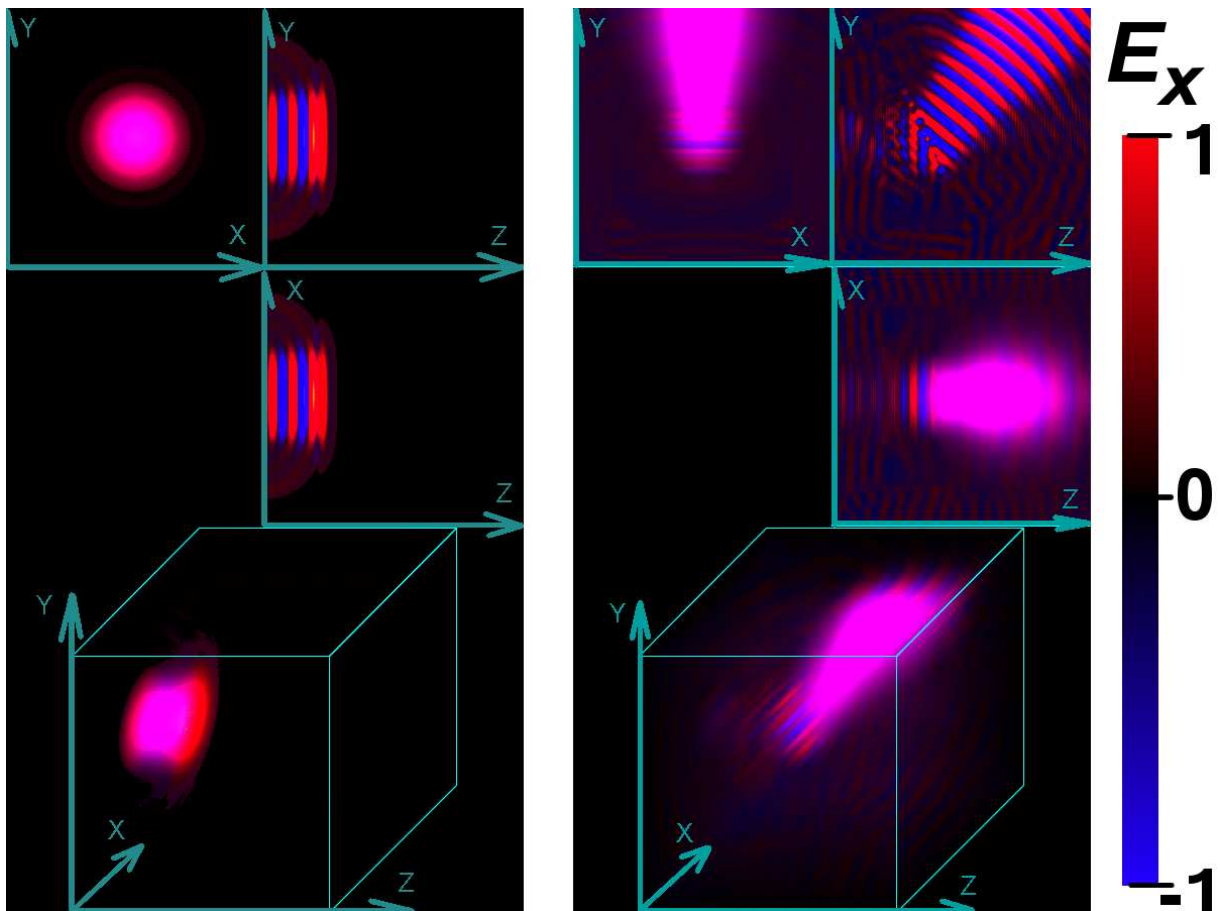


Рис. 8: Распределение компоненты поля E_x в различные моменты времени

7 Основные результаты

Реализован программный код, моделирующий эволюцию во времени электромагнитного поля в среде. Поскольку основной целью является реализация расчетов для задач, требующих больших вычислительных ресурсов, то при создании этого кода главной идеей, отличающей ее от существующих аналогов, можно считать использование эффективных алгоритмов (в частности алгоритма LRnLA). На данный момент программа развивается в сторону постепенно усложняющихся моделей среды с целью возможности ее применения на большом классе актуальных задач электродинамики, например реализация моделей анизотропных сред и сред с нелинейными материальными уравнениями.

Таким образом основным результатом сейчас является практическая возможность решения довольно большого класса сложных с вычислительной точки зрения задач в рамках описанных выше моделей.

Работа поддержана грантом РФФИ 06-01-00569.

Список литературы

- [1] Jason Valentine, Shuang Zhang, Thomas Zentgraf, Erick Ulin-Avila, Dentcho A. Genov¹, Guy Bartal¹, Xiang Zhang. "Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index"// Nature 455, 376-379 (2008)
- [2] D. Schurig, J. J. Mock, B. J. Justice, S. A. Cummer, J. B. Pendry, A. F. Starr, D. R. Smith. "Metamaterial Electromagnetic Cloak at Microwave Frequencies"// Science 10 November 2006, Vol. 314. no. 5801, pp. 977 - 980
- [3] J. B. Pendry. "Negative Refraction Makes a Perfect Lens"// Phys. Rev. Lett. 85, 3966 (2000).
- [4] Zhaowei Liu, Hyesog Lee, Yi Xiong, Cheng Sun, Xiang Zhang. "Far-Field Optical Hyperlens Magnifying Sub-Diffraction-Limited Objects"// Science 23 March 2007, Vol. 315. no. 5819, p. 1686
- [5] <http://www.cst.com/Content/Products/MWS/Overview.aspx>
- [6] <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep>
- [7] Левченко В.Д. // Информационные технологии и вычислительные системы. 2005. №1. с.68
- [8] Allen Taflove. Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 1998.

- [9] Kane Yee (1966). "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media". Antennas and Propagation, IEEE Transactions on 14: 302-307.
- [10] А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. Уравнения математической физики, 1972.
- [11] Berenger J.-P. Three-Dimensional Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves // Journal of Computational Physics, 127, P.363-379 (1996).
- [12] Intel Corporation. Intel Architecture Optimization Reference Manual, 1999.
- [13] Дж. Слэтер. Диэлектрики, полупроводники, металлы, 1969.
- [14] В.Г. Веселаго. "Электродинамика веществ содновременно отрицательными значениями ε и μ ". УФН, том 92, вып.3, с.517-526 (1967)