



Закиров А.В., [Левченко В.Д.](#)

Эффективный алгоритм для
трехмерного моделирования
распространения
электромагнитных волн в
фотонных кристаллах

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Закиров А.В., Левченко В.Д. Эффективный алгоритм для трехмерного моделирования распространения электромагнитных волн в фотонных кристаллах // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2008. № 21. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2008-21>

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

А.В. Закиров, В.Д. Левченко

**Эффективный алгоритм для
трехмерного моделирования
распространения электромагнитных
волн в фотонных кристаллах**

Москва
2008

Работа поддержана грантом РФФИ 06-01-00569.

УДК 519.688

А.В. Закиров, В.Д. Левченко

Email: zakirovandrey@gmail.com, lev@keldysh.ru

Эффективный алгоритм для трехмерного моделирования распространения электромагнитных волн в фотонных кристаллах

АННОТАЦИЯ

В работе проанализированы основные проблемы моделирования трёхмерных фотонных кристаллов и рассмотрены способы их решения. В качестве основного алгоритма численного моделирования был реализован и оптимизирован локально-рекурсивный нелокально-асинхронный (LRnLA) метод для решения уравнений Максвелла с использованием специальных поглощающих условий PML (Perfectly Matched Layer). Показана высокая эффективность данного алгоритма. Приведен пример расчета, иллюстрирующий различную степень прохождения электромагнитных волн через трёхмерный фотонный кристалл.

Стр. 20, рис. 5, библиограф. 10 назв.

Ключевые слова: уравнения Максвелла, метод FDTD, локально-рекурсивный нелокально-асинхронный алгоритм, поглощающие граничные условия, PML, эффективные алгоритмы.

A.V. Zakirov, V.D. Levchenko

The effective algorithm for 3D modeling of electromagnetic waves' propagation through photonic crystals.

ABSTRACT

In this work the main problems of 3D photonic crystal modeling have been analysed and the ways for solving them have been considered. As main algorithm of computational modeling local-recursive nonlocal-anisochronous (LRnLA) method for Maxwell equations have been realised and optimized using special absorbing conditions PML (Perfectly Matched Layer). The high effectiveness of this algorithm have been shown. An example of computation have given, different degree of electromagnetic waves' passing through photonic crystal have been illustrated.

Keywords: Maxwell equations, Finite-difference time-domain method, Local-recursive nonlocal-anisochronous algorithm, absorbing boundary conditions, Perfectly matched layer, effective algorithms.

Содержание

1	Введение	4
2	Применяемые методы	5
2.1	FDTD-метод	5
2.2	Граничные условия	8
2.3	Алгоритм LRnLA для обхода ячеек	13
2.4	Оптимизация	15
2.5	Анализ эффективности программы	16
3	Тестовый расчет	17
4	Основные результаты	19

1 Введение

Фотонными кристаллами принято называть такие оптические структуры, в которых показатель преломления периодически меняется в пространстве. При попадании света на такую структуру может происходить его полное отражение, либо поглощение, в зависимости от частоты света. Длина волны света в этом случае должна быть соизмерима с периодом изменения показателя преломления в фотонном кристалле. Для электромагнитных волн в фотонном кристалле могут существовать разрешенные и запрещенные зоны спектра, аналогично разрешенным и запрещенным зонам для электронов в полупроводниках. На основе этих свойств можно с помощью фотонных кристаллов конструировать различные фильтры, волноводы и т.д. [1]

На конкретный вид фотонной зонной структуры и ее свойства влияют различные параметры фотонного кристалла. Аналитическое их исследование возможно только в очень простых случаях [2]. Для сложных структур исследование возможно только с использованием численного моделирования распространения электромагнитных волн в фотонных кристаллах. Но и здесь возникают различные трудности, связанные с большим количеством обрабатываемой информации. Это приводит к необходимости использования сетки с большим числом узлов. Во-первых сетка должна быть трёхмерной. Наиболее универсальным является трёхмерный фотонный кристалл, т.е. такой кристалл, в котором показатель преломления меняется периодически по всем трём направлениям. Этот тип фотонных кристаллов наиболее интересен потому, что запрещенные зоны в нем существуют для произвольного направления волнового вектора, в отличие от одно- и двумерных фотонных кристаллов, в которых свет может не распространяться только в направлениях, вдоль которых происходит изменение показателя преломления [3]. Во-вторых, легко понять, что размеры сетки по одной координате определяются произведением числа периодов изменения показателя преломления фотонного кристалла на количество узлов сетки, приходящееся на один такой период. Как уже было сказано выше, длина волны света должна быть примерно равна периоду фотонного кристалла. Поскольку для обеспечения точности фазовой скорости волнового пакета в 1% на одну длину волны света необходимо минимум 20 узлов сетки [4], а в фотонном кристалле должно быть несколько десятков узлов с измененным показателем преломления, то размеры сетки по одной координате должны быть порядка 10^3 узлов. Кроме этого необходимы еще свободные области вокруг кристалла, в которых задаётся падающая волна, исследуется и анализируется отраженный и прошедший свет. Размеры этих областей определяются уже конкретной задачей. В итоге минимальный размер сетки оказывается не менее $10^9 - 10^{10}$ узлов.

Таким образом видно, что моделирование подобной задачи требовательно к эффективности алгоритма. Целью данной работы и являлась реализация данного алгоритма на основе существующих достижений в этой области.

2 Применяемые методы

2.1 FDTD-метод

Для решения нестационарных задач электродинамики в качестве разностной схемы используется метод конечных разностей во временной области FDTD (Finite-Difference Time-Domain), который является самым популярным численным методом. Метод FDTD является явной разностной схемой, позволяющей явно выразить значения компонент электромагнитного поля на следующем временном слое через значения на текущем слое. Рассмотрим его подробно.

Запишем Уравнения Максвелла в дифференциальной форме в отсутствие токов и свободных зарядов:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot}(\mathbf{H}) &= \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot}(\mathbf{E}) &= -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (1)$$

Или:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad \frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad \frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), \quad \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right). \quad (4)$$

Обезразмеривание скорости проводилось таким образом, чтобы скорость света была равна 1. Размерности остальных величин выбраны следующим образом:

$$\begin{aligned} [x] &= d, & [t] &= 1/d, \\ [E] &= E_0, & [H] &= H_0. \end{aligned}$$

Здесь d - период фотонного кристалла, E_0 и H_0 - начальные амплитуды, соответственно, электрических и магнитных компонент волны.

Рассмотрим трехмерную область V :

$V = \{(x, y, z) : 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq c\}$. Вся эта пространственная и времен-

ная область разбивается на прямоугольную сетку 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 $\frac{F_{i,j,k}^s - F_{i,j,k}^{s-1}}{\tau}$ запишем как $\Delta_t F_{i,j,k}^s$. Аналогично будем считать $\Delta_x F_{i,j,k}^s = \frac{F_{i,j,k}^s - F_{i-1,j,k}^s}{h_x}$, $\Delta_y F_{i,j,k}^s = \frac{F_{i,j,k}^s - F_{i,j-1,k}^s}{h_y}$, $\Delta_z F_{i,j,k}^s = \frac{F_{i,j,k}^s - F_{i,j,k-1}^s}{h_z}$

Суть FDTD-метода состоит в использовании решётки Йее (Yee lattice)[6]. Ниже приводится изображение этой решетки для трехмерного случая.

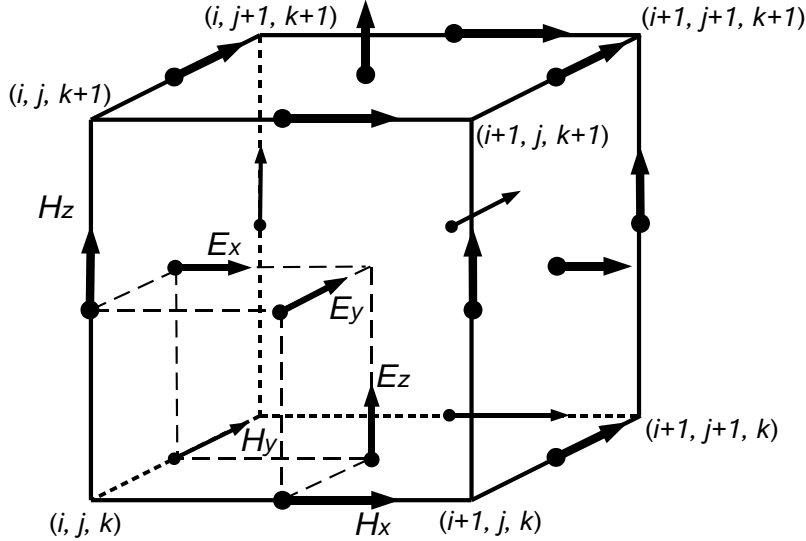


Рис. 1: Yee lattice

Эта решетка представляет собой одну ячейку сетки, используемой в методе FDTD. Все компоненты электромагнитного поля $E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z$ берутся в разных точках. Компоненты электрического поля E находятся в центрах граней, а компоненты магнитного поля H - посередине ребер. В другой вариации FDTD-метода, наоборот, компоненты электрического поля берутся в центрах граней, а магнитного - в серединах ребер. Такое определение вполне возможно ввиду того, что уравнения Максвелла в некотором роде симметричны относительно электрического и магнитного полей. Кроме этого, компоненты электрического поля E рассматриваются в моменты времени $s - 0.5$, а магнитного H - в моменты s .

Запишем, используя схематичную запись рис. 1, разностный аналог, например, дифференциальных уравнений (2), который будет выглядеть следующим образом:

$$\Delta_t(Hx)_{i+0.5,j,k}^{s+1} = -\frac{\Delta_y(Ez)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s+0.5}}{\mu_{i+0.5,j,k}} + \frac{\Delta_z(Ey)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s+0.5}}{\mu_{i+0.5,j,k}}, \quad (5)$$

$$\Delta_t(Ex)_{i,j+0.5,k+0.5}^{s+0.5} = \frac{\Delta_y(Hz)_{i,j+1,k+0.5}^s}{\varepsilon_{i,j+0.5,k+0.5}} - \frac{\Delta_z(Hy)_{i,j+0.5,k+1}^s}{\varepsilon_{i,j+0.5,k+0.5}}. \quad (6)$$

Для остальных уравнений серии (2) - (4) разностные формулы записываются аналогично.

Полученные уравнения позволяют выразить явно значения E и H на следующем временном слое через имеющиеся значения на текущем слое. Сначала вычисляются значения E на слое $s + 0.5$ через имеющиеся значения E на слое $s - 0.5$ и значения H на слое s . Затем вычисляются значения H на слое $s + 1$ через имеющиеся значения H на слое s и уже вычисленные значения E на слое $s + 0.5$. Затем алгоритм повторяется. Таким образом разностный аналог уравнений Максвелла в явном виде записывается так:

$$(Ex)_{i,j+0.5,k+0.5}^{s+0.5} = (Ex)_{i,j+0.5,k+0.5}^{s-0.5} + \frac{\Delta_y(Hz)_{i,j+1,k+0.5}^s}{\varepsilon_{i,j+0.5,k+0.5}}\tau - \frac{\Delta_z(Hy)_{i,j+0.5,k+1}^s}{\varepsilon_{i,j+0.5,k+0.5}}\tau, \quad (7)$$

$$(Ey)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s+0.5} = (Ey)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s-0.5} + \frac{\Delta_z(Hx)_{i+0.5,j,k+1}^s}{\varepsilon_{i+0.5,j,k+0.5}}\tau - \frac{\Delta_x(Hz)_{i+1,j,k+0.5}^s}{\varepsilon_{i+0.5,j,k+0.5}}\tau, \quad (8)$$

$$(Ez)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s+0.5} = (Ez)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s-0.5} + \frac{\Delta_x(Hy)_{i+1,j+0.5,k}^s}{\varepsilon_{i+0.5,j+0.5,k}}\tau - \frac{\Delta_y(Hx)_{i+0.5,j+1,k}^s}{\varepsilon_{i+0.5,j+0.5,k}}\tau, \quad (9)$$

$$(Hx)_{i+0.5,j,k}^{s+1} = (Hx)_{i+0.5,j,k}^s - \frac{\Delta_y(Ez)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s+0.5}}{\mu_{i+0.5,j,k}}\tau + \frac{\Delta_z(Ey)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s+0.5}}{\mu_{i+0.5,j,k}}\tau, \quad (10)$$

$$(Hy)_{i,j+0.5,k}^{s+1} = (Hy)_{i,j+0.5,k}^s - \frac{\Delta_z(Ex)_{i,j+0.5,k+0.5}^{s+0.5}}{\mu_{i,j+0.5,k}}\tau + \frac{\Delta_x(Ez)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s+0.5}}{\mu_{i,j+0.5,k}}\tau, \quad (11)$$

$$(H_z)_{i,j,k+0.5}^{s+1} = (H_z)_{i,j,k+0.5}^s - \frac{\Delta x (E_y)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s+0.5}}{\mu_{i,j,k+0.5}} \tau + \frac{\Delta y (E_x)_{i,j+0.5,k+0.5}^{s+0.5}}{\mu_{i,j,k+0.5}} \tau. \quad (12)$$

Такая разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству.

Рассмотрим уравнение (5). В нем $\Delta_t (H_x)_{i+0.5,j,k}^{s+1}$ аппроксимирует производную $\frac{\partial H_x}{\partial t}$ в точке четырехмерного пространства, соответствующей узлу сетки $(i+0.5, j, k, s+0.5)$ с точностью $O(\tau^2)$. Также можно написать равенства:

$$\left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) = \frac{\Delta y (E_z)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s+0.5}}{\mu_{i+0.5,j,k}} + O(h_y^2), \quad (13)$$

$$\left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) = \frac{\Delta z (E_y)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s+0.5}}{\mu_{i+0.5,j,k}} + O(h_z^2). \quad (14)$$

Здесь производные $\left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial y} \right)$ и $\left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_y}{\partial z} \right)$ берутся в точке $((i+0.5)h_x, jh_y, kh_z, (s+0.5)\tau)$. Это означает, что уравнение (7) аппроксимирует уравнение $\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right)$ с точностью $O(\tau^2 + h_y^2 + h_z^2)$ в точке $((i+0.5)h_x, jh_y, kh_z, (s+0.5)\tau)$. Аналогичным образом показывается что уравнения (8) - (12) также аппроксимируют уравнения Максвелла с точностью $O(\tau^2 + h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)$ в соответствующих точках. Следовательно, полученная разностная схема (7) - (12) имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству и сходится при условии:

$$c\tau \sqrt{\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2}} \leq 1. \quad (15)$$

2.2 Граничные условия

При численном моделировании открытых систем, для которых решается волновое уравнение, встает задача постановки правильных граничных условий. Ввиду того, что решение строится на ограниченной области, необходимо задавать специальные условия для E и H на границе этой области для того, чтобы можно было построить решение в любой момент времени.

Рассмотрим некоторые виды граничных условий.

Периодические условия Эти граничные условия являются самыми простыми в плане реализации в написанной программе. Как ясно из названия, смысл этих условий в том, что при отсутствии какого-либо необходимого

значения электромагнитного поля за границей (т. е. оно находится уже за пределами счетной области), берется значение на противоположной границе. Таким образом просто "сшиваются" две противоположные границы и получается, что волна, падающая на границу, появляется с противоположной стороны.

Отражающие условия Эти граничные условия строятся на известном из физики методе отражений. Состоят они в том, что неизвестные значения E и H за пределами границ полагаются равным известным значениям соответствующих компонент перед границей. Таким способом моделируется обычное отражение электромагнитных волн от границы.

Условия поглощения Основной недостаток периодических и отражающих условий в том, что волны, попадающие на границу в итоге не уходят из области. Это приводит к тому, что использовать эти условия не рационально, если необходимо исследовать структуру электромагнитного поля в ограниченных системах спустя большие моменты времени.

Условия ABC Рассмотрим сначала простые условия поглощения ABC (Absorption Boundary Conditions). Среди них самые распространенные - это условия поглощения Мура. Коэффициент отражения в этих условиях как правило не более одного процента при падении волны перпендикулярно, но при падении под большим углом они существенны и могут достигать 100% при касательном падении. Для этого приходится отодвигать границу счетной области далеко от объекта, что соответственно увеличивает расчетную область и уменьшает скорость вычислений. Поэтому эти условия не так выгодны, как условия поглощения PML (см. далее). Все поглощающие условия ABC основаны на том, что вычисления приграничного поля основано не только на значениях в текущий момент времени, а также в предыдущие моменты.

Ниже приведены различные условия ABC для одномерного случая.

Условия Мура 1го порядка:

$$E_i^{s+1} = E_{i-1}^s + \frac{1-K}{1+K} (E_i^s - E_{i-1}^{s-1}), \quad (16)$$

где E_i^s - значение поля в точке i на правой границе в момент времени s , K - число Куранта, $K = \frac{\tau c}{h}$, τ - шаг по времени, h - шаг по пространству, c - скорость света.

Условия Лиао 3го порядка:

$$E_i^{s+1} = E_{i-3}^{s-2} + 3 (E_{i-1}^s - E_{i-2}^{s-1}). \quad (17)$$

Условия RT (Retarded Time):

$$E_i^{s+1} = E_{i-1}^{s-1} + 0.5 \left(E_i^{s-1} - E_{i-2}^{s-1} \right) + \left(E_{i-1}^s - E_{i-1}^{s-2} \right). \quad (18)$$

Условия PML Условия PML (Perfectly Matched Layer, идеально согласованный слой) для трёхмерного случая были впервые описаны в [7]. Основное достоинство PML-метода перед условиями ABC состоит в том, что он обладает очень маленьким коэффициентом отражения, который практически не зависит от угла падения. Суть PML-метода состоит в том, что граница расчетной области окружается дополнительно еще несколькими ячейками, образуя область, называемую PML-слоем. Благодаря специальным свойствам этого слоя, волна, попадая на границу, практически полностью поглощается в нём.

В соответствии с PML-методом в PML-слое каждая компонента электрического и магнитного поля разделяется на 2 подкомпоненты:

$$\begin{aligned} E_x &= E_{xy} + E_{xz}, & H_x &= H_{xy} + H_{xz}, \\ E_y &= E_{yz} + E_{yx}, & H_y &= H_{yz} + H_{yx}, \\ E_z &= E_{zx} + E_{zy}, & H_z &= H_{zx} + H_{zy}. \end{aligned} \quad (19)$$

Уравнения Максвелла заменяются следующими 12ю уравнениями:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial H_{xy}}{\partial t} + \sigma_y H_{xy} &= -\frac{\partial E_z}{\partial y}, & \varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y^* E_{xy} &= \frac{\partial H_z}{\partial y}, \\ \mu \frac{\partial H_{xz}}{\partial t} + \sigma_z H_{xz} &= \frac{\partial E_y}{\partial z}, & \varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z^* E_{xz} &= -\frac{\partial H_y}{\partial z}, \\ \mu \frac{\partial H_{yz}}{\partial t} + \sigma_z H_{yz} &= -\frac{\partial E_x}{\partial z}, & \varepsilon \frac{\partial E_{yz}}{\partial t} + \sigma_z^* E_{yz} &= \frac{\partial H_x}{\partial z}, \\ \mu \frac{\partial H_{yx}}{\partial t} + \sigma_x H_{yx} &= \frac{\partial E_z}{\partial x}, & \varepsilon \frac{\partial E_{yx}}{\partial t} + \sigma_x^* E_{yx} &= -\frac{\partial H_z}{\partial x}, \\ \mu \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x H_{zx} &= -\frac{\partial E_y}{\partial x}, & \varepsilon \frac{\partial E_{zx}}{\partial t} + \sigma_x^* E_{zx} &= \frac{\partial H_y}{\partial x}, \\ \mu \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y H_{zy} &= \frac{\partial E_x}{\partial y}, & \varepsilon \frac{\partial E_{zy}}{\partial t} + \sigma_y^* E_{zy} &= -\frac{\partial H_x}{\partial y}. \end{aligned} \quad (20)$$

В этих уравнениях σ имеет смысл параметра затухания. Этот параметр не зависит от времени. Если все значения σ равны нулю, то эти уравнения переходят в уравнения (2) - (4). Как показано в [7] аналитическое решение этих уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_0 e^{i\omega(t - (x \cos \eta_x + y \cos \eta_y + z \cos \eta_z)/c)} \times \\ &\times e^{-(\sigma_x \cos \eta_x / \varepsilon c)x} e^{-(\sigma_y \cos \eta_y / \varepsilon c)y} e^{-(\sigma_z \cos \eta_z / \varepsilon c)z}. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь Ψ - это какая-либо из 12ти копонент H либо E , ω - частота, η_x, η_y, η_z - углы между направлением распространения волны и соответствующими

координатными осями. $c = (\varepsilon\mu)^{-1/2}$ - скорость распространения волны. Как видно из (21), в РМЛ-слое изменяется только амплитуда волны, причем экспоненциально по мере проникновения в слой, за что отвечают последние три множителя. Это означает, что внутри РМЛ-слоя волна должна постепенно затухать.

Рассмотрим два РМЛ-слоя, граница между которыми является плоскостью. Тогда при падении волны из одного слоя в другой, часть волны может отразиться от этой границы. В [7] показано, что коэффициент отражения зависит от параметров σ этих двух слоёв. В частности можно подобрать такие параметры σ , что коэффициент отражения будет равен 0 для любого типа падающей волны, независимо от угла падения и частоты. Например, если оси направить так, чтобы ось X располагалась перпендикулярно границе РМЛ-слоёв, то отражения не будет в том случае, если $\sigma_y, \sigma_y^*, \sigma_z, \sigma_z^*$ будут равны в обоих слоях, а σ_x и σ_x^* будут удовлетворять соотношению

$$\sigma_x^* = \frac{\varepsilon}{\mu}\sigma_x. \quad (22)$$

Поскольку вакуум, либо реальная среда с диэлектрической и магнитной проницаемостью ε и μ являются частным случаем РМЛ-слоя, в котором все параметры затухания равны 0, то для того, чтобы произвольная волна не отражалась при падении из вакуума, либо какой-либо среды, на РМЛ-слой, граница которого представляет собой плоскость, перпендикулярную оси X , необходимо, чтобы в этом РМЛ-слое $\sigma_y, \sigma_y^*, \sigma_z, \sigma_z^*$ были равны 0, а для σ_x и σ_x^* выполнялось соотношение (22). Аналогично в случае, если граница между РМЛ-слоем и обычной средой перпендикулярна оси Y , для отсутствия отражения необходимо, чтобы $\sigma_x = \sigma_x^* = \sigma_z = \sigma_z^* = 0$ и $\sigma_y^* = \frac{\varepsilon}{\mu}\sigma_y$, и, если граница перпендикулярна Z , то $\sigma_x = \sigma_x^* = \sigma_y = \sigma_y^* = 0$ и $\sigma_z^* = \frac{\varepsilon}{\mu}\sigma_z$.

Таким образом, для моделирования полного поглощения волны на границах, необходимо за соответствующими границами дополнить основную счетную область РМЛ-слоем с соответствующими параметрами, для устранения отражения. На гранях и углах счетной области также создаются РМЛ-слои, с параметрами, показанными на рис. (2).

Для непрерывных уравнений (20) как уже было сказано выше, при правильно подобранных параметрах, отражение будет отсутствовать. При численных же расчетах из-за дискретизации РМЛ-уравнений происходит небольшое отражение. Для того, чтобы уменьшить это отражение, можно увеличивать параметр σ от малых значений в области РМЛ-слоя, ближайшей к основной счетной области, до максимального значения по мере удаления от нее. То есть это означает, что, например σ_z и σ_z^* зависят от координаты z . При такой зависимости σ можно подсчитать коэффициент отражения волны от РМЛ-слоя в том случае, если после основной области и РМЛ-слоя

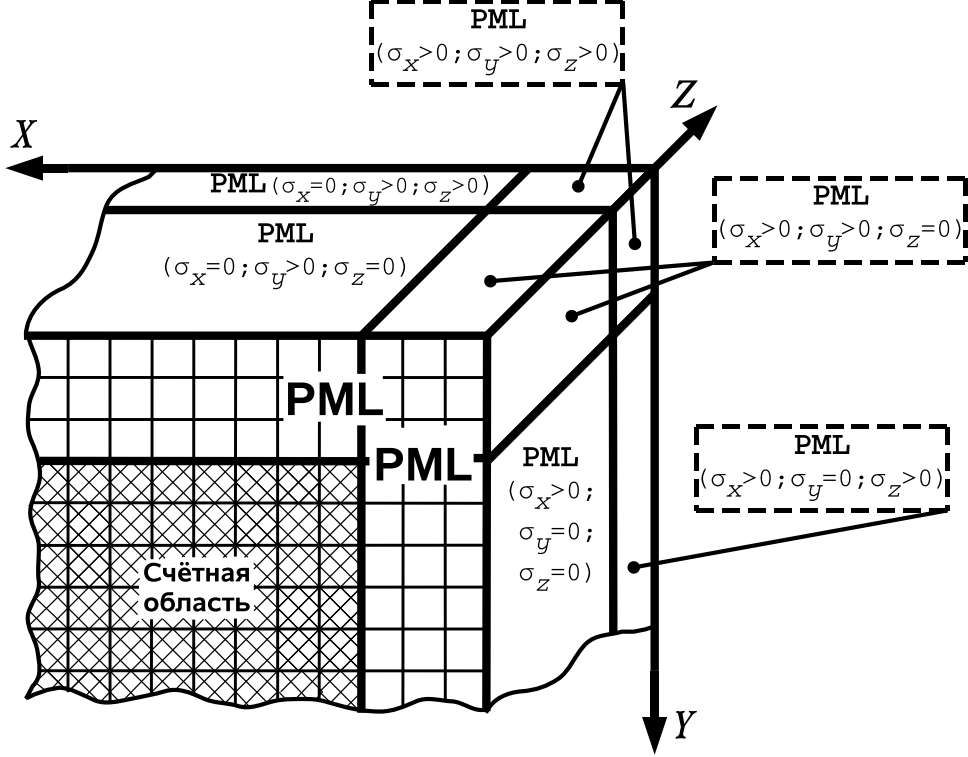


Рис. 2: Часть границы счетной области, окруженная PML-слоем

стоит отражающая граница. При толщине слоя δ с параметром затухания $\sigma(\rho)$, зависящим от расстояния ρ и угле падения волны θ этот коэффициент имеет вид:

$$R(\theta) = [R(0)]^{\cos \theta}, \quad (23)$$

$$R(0) = \exp \left[-\frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_0^\delta \sigma(\rho) d\rho \right]. \quad (24)$$

Разностный аналог модифицированных дифференциальных урав. (20) запишем только для первых двух, для остальных они записываются аналогично:

$$\begin{aligned} (H_{xy})_{i+\frac{1}{2},j,k}^{s+1} &= \frac{2\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tau(\sigma_y)_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} + \tau(\sigma_y)_{i+\frac{1}{2},j,k}} (H_{xy})_{i+\frac{1}{2},j,k}^s + \\ &+ \frac{(E_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{s+\frac{1}{2}} - (E_z)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{s+\frac{1}{2}}}{\left(\tau^{-1}\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{1}{2}(\sigma_y)_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) h_y}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$(E_{xy})_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{s+\frac{1}{2}} = \frac{\left[\frac{2\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} - \tau(\sigma_y^*)_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}{2\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + \tau(\sigma_y^*)_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}} \right] (E_{xy})_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{s-\frac{1}{2}} - \frac{(H_z)_{i,j+1,k\frac{1}{2}}^s - (H_z)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^s}{\left(\tau^{-1}\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}(\sigma_y^*)_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right) h_y}. \quad (26)$$

Конкретный вид зависимости σ от координаты внутри PML-слоя бывает различным. Как уже было сказано, в общем случае σ растет по мере удаления от центра расчетной области начиная с нуля в том месте, где начинается PML-слой. Рост σ бывает как правило логарифмическим, параболическим, степенным и тд. В программе применялся параболический вид. В самом конце PML-слоя, там, где волна уже должна практически полностью исчезнуть, ставились отражающие условия, хотя ввиду того, что значения E и H на этих границах практически равны 0, вид граничных условий там уже не важен.

2.3 Алгоритм LRnLA для обхода ячеек

Предположим, что размеры счетной области $N_x \times N_y \times N_z$ ячеек. Счетную область при использовании метода FDTD можно представить в виде двумерного клеточного автомата с четырьмя типами ячеек. Положим, для определенности, что этот клеточный автомат расположен в плоскости YZ. Если в этом случае спроектировать всю счетную область, состоящую исключительно из ячеек Yee, вдоль оси X, то каждая клетка будет содержать в себе один, либо 2 массива значений. Конкретно будет 4 вида клеток (Mesh, SideY, SideZ, Cell):

1. Массив размера N_x из значений H_x – тип Mesh.
2. Массив размера N_x из значений E_y и массив размера $N_x + 1$ из значений H_z – тип SideY.
3. Массив размера N_x из значений E_z и массив размера $N_x + 1$ из значений H_y – тип SideZ.
4. Массив размера $N_x + 1$ из значений E_x – тип Cell.

Полученный таким путем клеточный автомат обладает свойством локальности, поскольку для перехода на следующий момент времени любой клетке необходимы данные не более чем четырех соседних клеток. В целом, за исключением граничных клеток, этот автомат будет однородным и рост по времени у одного типа клеток происходит одинаково. Эти свойства позволяют использовать алгоритм LRnLA (Локально-Рекурсивный Нелокально-Асинхронный метод)[9] для полученного двумерного клеточного автомата,

то есть для двумерной декомпозиции пространства. Рассмотрим этот алгоритм для одномерной декомпозиции. В этом случае останутся лишь 2 типа клеток - Mesh (M) и Cell (C). На рис. 3 изображен граф зависимостей в этом случае.

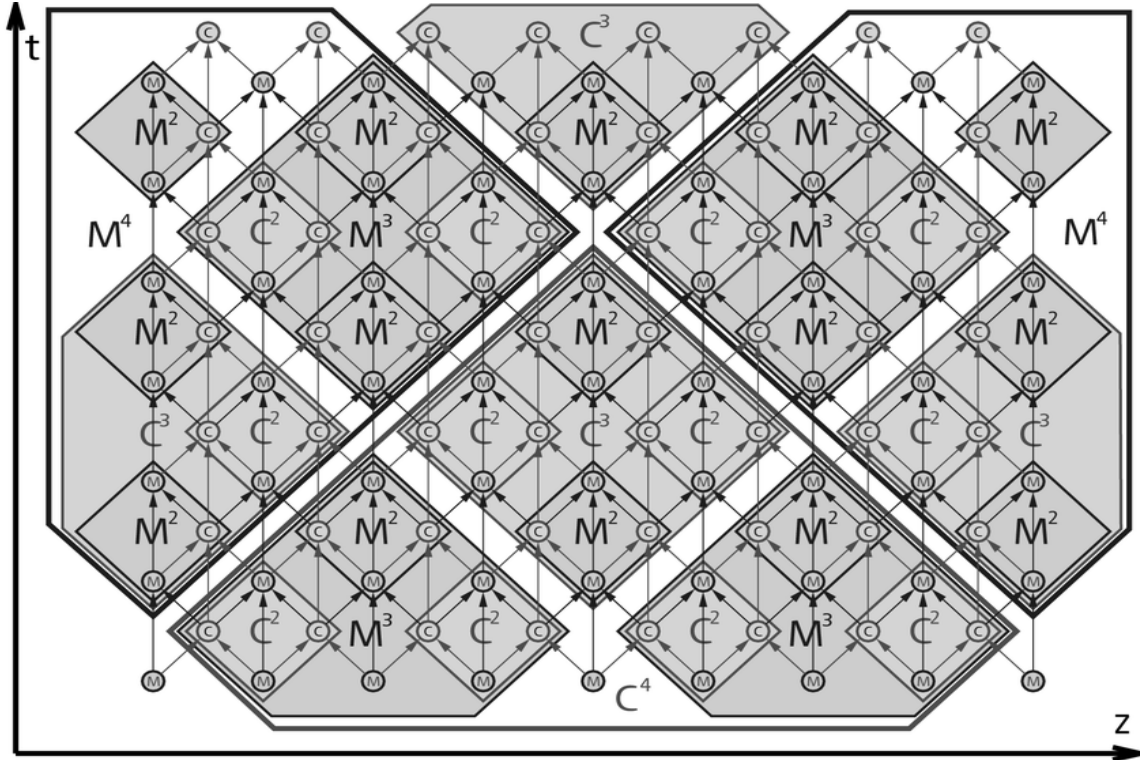


Рис. 3: Рекурсивный обход графа зависимостей

При использовании алгоритма LRnLA рост по времени происходит рекурсивно в несколько уровней как показано на рисунке. Самый маленький уровень - это простое элементарное вычисление значений в клетках M, либо C, для которых необходимы значения только соседних 2х клеток и одного значения самой клетки в предыдущий момент времени. На рисунке эта операция обозначена в виде маленького кружочка. Следующий уровень представляет из себя объединение 4х соседних этапов роста как показано на рисунке. Он обозначен как C^2 или M^2 . И так далее аналогично. На рисунке изображено 4 таких этапа. Поскольку каждый уровень представляет собой увеличенную копию предыдущего, то весь рост по времени за несколько шагов по времени можно выполнять рекурсивно. Для двумерного клеточного автомата алгоритм строится аналогичным образом, поскольку граф зависимости принципиально не отличается от одномерного. Такой обход графа зависимостей позволяет добиться большой эффективности программы. Обход же ячеек по оси X происходит последовательно, за исключением случая с векторизацией, о котором будет сказано ниже.

Для использования граничных условий PML потребовалось небольшое расширения метода для границ счетной области, заключающегося в создании специального класса для доступа к данным за пределами основной области. Данные в области PML-слоя хранятся в виде массивов классов таких же типов, которые используются для хранения данных в основной области, т.е. в виде массивов классов Mesh, SideY, SideZ и Cell. В программе для доступа к соседним классам Mesh, SideY, SideZ и Cell используется класс с указателями на них. На границах же помимо него существует еще один специально созданный класс, с помощью которого можно получить доступ к данным в PML-слое.

2.4 Оптимизация

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 числа, описывающих среду (σ и ε). Т.е. одна ячейка занимает 32, либо 64 байта в зависимости от типа используемых данных. Для области же PML-слоя кол-во данных в одной ячейке становится еще больше из-за разбиения компонент векторов E и H на 2 части и появления параметра σ . 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 σ и ε), а всего лишь одно число-индекс среды (4 байта вместо 2х значений по 4 или 8 байт в зависимости от типа данных для σ и ε). Например, для вакуума можно использовать индекс 0, а для неоднородностей фотонного кристалла - индекс 1. Сами же значения, характеризующие среду, хранятся в отдельном классе Media. Т. е. для среды с индексом 0 - один объект класса Media, с индексом 1 - другой, и т. д. 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. То есть, к примеру, уравнение (25) можно записать в виде:

$$(H_{xy})_{i+\frac{1}{2},j,k}^{s+1} = k_1 (H_{xy})_{i+\frac{1}{2},j,k}^s + k_2 \left[(E_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{s+\frac{1}{2}} - (E_z)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{s+\frac{1}{2}} \right], \quad (27)$$

где

$$k_1 = \frac{2\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tau(\sigma_y)_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} + \tau(\sigma_y)_{i+\frac{1}{2},j,k}},$$

$$k_2 = \left[\left(\tau^{-1}\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{1}{2}(\sigma_y)_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) h_y \right]^{-1}$$

- коэффициенты, зависящие только от пространства и типа среды. Тогда можно заранее вычислить k_1 и k_2 , сохранив их в отдельном классе. Соответственно уменьшится число операций в основном расчете.

Векторизация Для ускорения работы программы используются инструкции процессоров из набора SSE[10], 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. Делается это следующим образом. Изначально набор данных вдоль оси X хранится в виде массива значений длиной N_x . Для векторизации этот массив делится на 4 равные части. Затем элементы i , $i + \frac{N_x}{4}$, $i + \frac{N_x}{2}$ и $i + \frac{3N_x}{4}$ объединяются в один элемент векторного массива. Таким образом весь массив обычных данных заменяется массивом векторных данных длины $\frac{N_x}{4}$. Поскольку операции с векторными числами занимает столько же времени, сколько занимает аналогичная операции с обычными числами, расчеты ускоряются в 4 раза. В некоторых случаях время выполнения действий над векторными числами в 2 раза больше времени выполнения аналогичных действий над обычными числами. Тогда, очевидно, расчеты ускоряются в 2 раза. На практике эти оценки оказались очень точными.

2.5 Анализ эффективности программы

Под эффективностью программы будем понимать отношение реально потраченного времени на выполнение конкретной задачи к теоретической оценке этого времени исходя из тактовой частоты процессора и количества операций с плавающей точкой в алгоритме. На эффективность влияют многие параметры: тип процессора, размер его кеша, размер оперативной памяти и т.д. Ниже приведен график зависимости эффективности от размеров требуемой памяти. В данной задаче при двумерной декомпозиции интересно увеличивать размер памяти двумя способами. Первый способ - увеличение размеров сетки вдоль той оси, по которой декомпозиция не проводилась (ось X), оставляя размер сетки вдоль других осей неизменным. Вторым - увеличение размеров сетки по осям Y и Z при фиксированном числе узлов по оси X. Размер данных во всех расчетах меньше объема оперативной памяти и

в задаче стоят периодические граничные условия. Расчеты проводились на процессоре AMD Athlon64 5200+ 2600МГц, объем оперативной памяти 6ГБ.

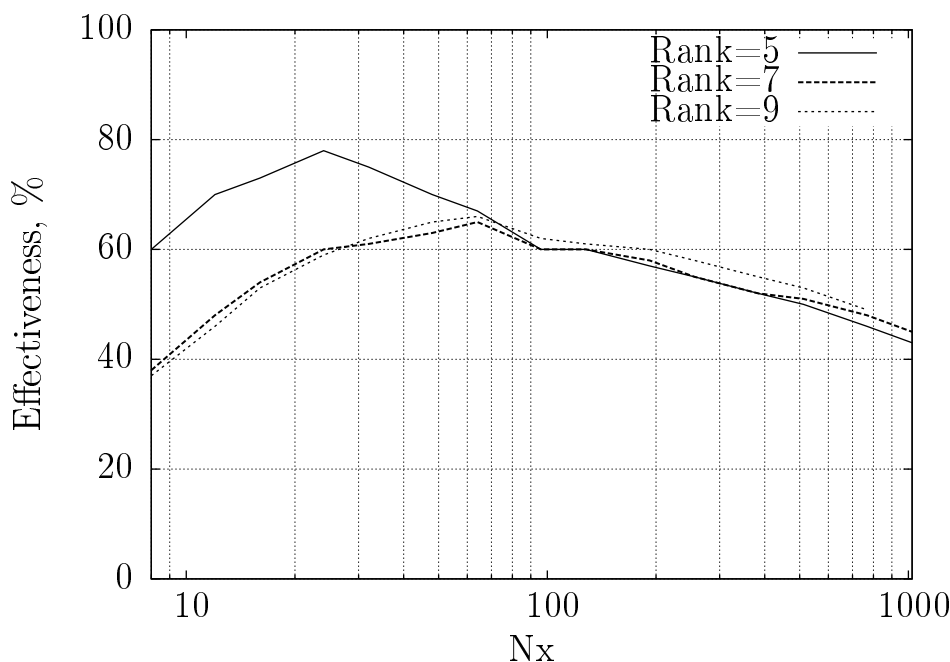


Рис. 4: Эффективность

На графике показана зависимость эффективности от размеров сетки по оси X (N_x - количество узлов сетки по этой оси) для трех максимальных уровней декомпозиции по остальным осям. На рисунке Rank - это максимальный уровень декомпозиции, то есть максимальная степень рекурсии. Таким образом Rank=5 соответствует размерам области по YZ 32x32 узла, Rank=7 - это 128x128 узлов, а Rank 9 соответственно 512x512. По оси X график имеет логарифмический масштаб. Наибольший практический интерес представляет область не очень малых значений N_x . Как видно из графика, при увеличении размеров области по осям, вдоль которых производится декомпозиция, как и ожидалось эффективность практически не меняется при $N_x > 50$ во всем диапазоне до размеров оперативной памяти. При увеличении же по N_x эффективность падает, но слабо, оставаясь более 40% даже при $N_x = 1000$.

3 Тестовый расчет

Приведем пример конкретного расчета взаимодействия световой волны и фотонного кристалла. Фотонный кристалл состоит из 2х материалов - арсенида галлия GaAs (показатель преломления $n = 3.53$) и среды с показателем

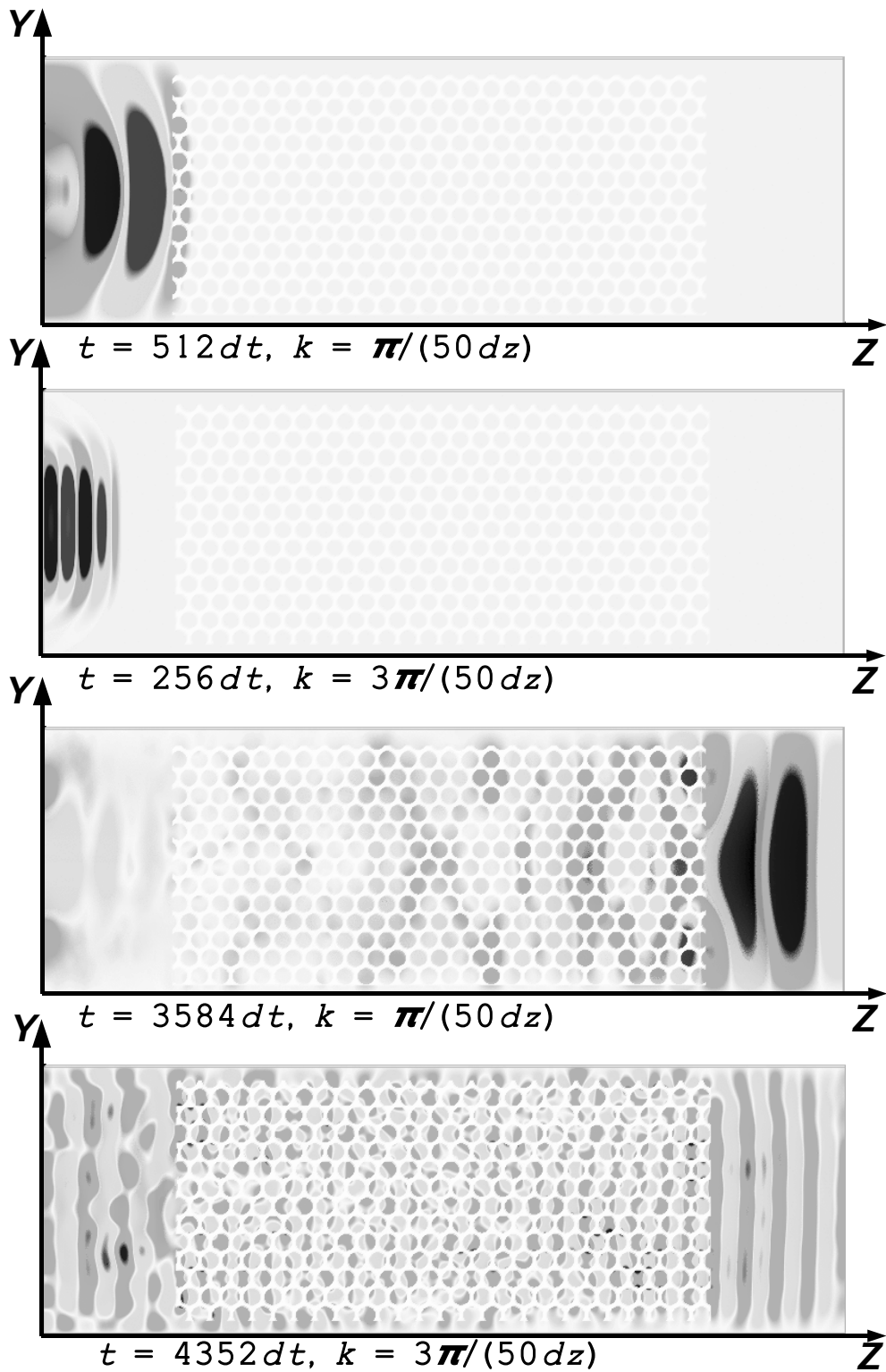


Рис. 5: Распределение одной из компонент магнитного поля для двух длин волн в различные моменты времени

преломления $n = 1$. Кристалл получен путем образования отверстий в основном материале GaAs. Эти отверстия имеют цилиндрическую форму и упорядочены в гексагональной решетке. Отношение диаметра отверстия к периоду решетки d равно 0.4. Рассматриваются 2 вида волновых пакетов, отличающихся только длиной волны: $10d$ и $d/0.3$. В расчете на левой границе задан источник волн, генерирующий соответствующие частоты и стоят отражающие условия. На верхней и нижней границе вдоль оси Y стоят отражающие условия. На всех остальных границах - PML. На рисунке представлены трёхмерные распределения электромагнитного поля до падения волны и после ее прохождения в проекции на ось X . Как видно, в первом случае интенсивность прошедшей волны заметно меньше падающей (амплитуда уменьшилась примерно в 6.5 раз). Во втором случае волна прошла сквозь кристалл, практически не изменившись (амплитуда уменьшилась в 2 раза в основном из-за расплывания волнового пакета). То есть можно утверждать, что волны с длиной $d/0.3$ попадают в запрещенную зону данного фотонного кристалла, а с длиной $10d$ - нет.

Величины на рисунке: $dt = 1$ - шаг сетки по времени, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ - волновое число, λ - длина волны, $dz = 1$ - шаг сетки по оси Z . Источник на левой границе генерирует волновой пакет, ограниченный половиной периода синусоиды, скорость распространения волны в вакууме при таких единицах измерения равна 1.

4 Основные результаты

Локально-рекурсивный нелокально-асинхронный алгоритм и эффективные поглощающие граничные условия позволяют преодолеть существенные трудности, возникающие при трехмерном численном моделировании прохождения электромагнитных волн в фотонных кристаллах.

Полноценное трехмерное моделирование распределения электромагнитного поля в фотонных кристаллах и его окрестностях в произвольный момент времени является вполне адекватным способом исследования оптических свойств такого кристалла и, соответственно, позволяет быстро подбирать необходимые параметры для построения желаемых устройств.

Работа поддержана грантом РФФИ 06-01-00569.

Список литературы

- [1] E. Yablonovitch. Phys. Rev. Lett., 58, 2059 (1987)
- [2] K. Bush, S. John. Phys. Rev. Lett, 83, 967 (1999)

- [3] Георгий Жувикин. Лабиринты фотонных кристаллов. // "Компьютерра" №30 от 13 августа 2001 года.
- [4] Allen Taflove. *Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, 1998.
- [5] А.Н. Боголюбов, И.А. Буткарев, Ю.С. Дементьева. Численное моделирование двумерных фотонных кристаллов. // "ЖУРНАЛ РАДИО-ЭЛЕКТРОНИКИ" N 11, 2006
- [6] Kane Yee. "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media".// *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on* 14: 302–307
- [7] Berenger J.-P. Three-Dimensional Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves // *Journal of Computational Physics*, 127, P.363-379 (1996).
- [8] А. Зеленин. Решение уравнений Максвелла методом FDTD. // По материалам сайта <http://zfdtd.narod.ru>
- [9] Левченко В.Д. // Информационные технологии и вычислительные системы. 2005. №1. с.68
- [10] Intel Corporation. *Intel Architecture Optimization Reference Manual*, 1999