

УДК 519.6

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

Т. З. Исмагилов¹, А. И. Горбачёв¹

Предлагается конечно-объемный метод для численного решения трехмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на призматических сетках. Метод позволяет проводить расчеты для разрыва диэлектрической проницаемости, проходящего по произвольному гладкому цилиндру. Численный алгоритм допускает параллельную реализацию для использования на многопроцессорных ЭВМ. Приведенные результаты тестовых расчетов говорят о втором порядке сходимости предлагаемого метода и высокой эффективности параллельной реализации. Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии” (ПАВТ–2011; <http://agora.guru.ru/pavt2011>).

Ключевые слова: уравнения Максвелла, метод конечных объемов, призматическая сетка, схема Годунова, разрывная диэлектрическая проницаемость.

1. Введение. Численная аппроксимация дифференциальных уравнений Максвелла с помощью конечно-разностных схем [1] используется для решения задач, связанных с распространением электромагнитных волн и их взаимодействием с зарядами и токами. Одной из первых работ, посвященных использованию конечно-разностных схем для численного решения уравнений Максвелла, является публикация [2]. В этой работе автор предложил схему второго порядка аппроксимации по времени и пространству, основанную на введении смещенных сеток. Из других публикаций, непосредственно примыкающих к тематике настоящей статьи, укажем [3–5]. Для многих задач со сложной геометрией оказалось предпочтительнее использовать конечно-объемные схемы. Такие схемы позволяют проводить аппроксимацию на неструктурированных сетках и, таким образом, более точно представлять границы расчетной области, а также границы между подобластями с различными свойствами среды внутри расчетной области. Было предложено несколько конечно-объемных схем для решения уравнений Максвелла. В схемах, предложенных в работе [6], электрические и магнитные поля аппроксимируются на смещенных сетках, как и в работе [2]. В алгоритмах, рассмотренных в работах [7–10], все компоненты электромагнитного поля аппроксимируются в центрах ячеек.

Одной из основных трудностей при построении схем второго порядка для уравнений Максвелла остается случай наличия разрывных свойств среды. В работе [3] рассматривались различные способы сглаживания разрывной диэлектрической проницаемости. Однако ни один из них не позволял сохранять порядок аппроксимации исходной схемы. Для решения этой проблемы в работе [10] была предложена конечно-объемная схема для решения двумерных уравнений Максвелла на треугольных сетках. Тестовые расчеты показывали близкий ко второму порядку аппроксимации для случая разрывной диэлектрической проницаемости. К сожалению, эта схема может использоваться только тогда, когда разрыв диэлектрической проницаемости проходит по координатной линии.

Более универсальная схема была предложена в [11, 12]. Эта схема позволяет проводить расчеты для трехмерных уравнений Максвелла на тетраэдральных сетках в областях с разрывной диэлектрической проницаемостью, в которых разрыв может проходить по произвольной гладкой поверхности. Алгоритм допускает эффективную параллельную реализацию для использования на многопроцессорных ЭВМ.

Для трехмерных задач, в которых вычислительная область имеет вид правильного цилиндра, а свойства среды не меняются при сдвиге, осуществляемом параллельно образующим цилиндра, в использовании тетраэдральной сетки нет необходимости. Для таких задач лучше применять призматические сетки, которые легко построить с помощью сдвигов треугольной сетки для основания цилиндра [13, 14]. Использование призматических сеток позволяет легко проводить декомпозицию расчетной области и добиваться равномерного распределения нагрузки между процессами при разработке параллельной реализации.

¹ Новосибирский государственный университет, факультеты информационных технологий и механико-математический, ул. Пирогова, 2, 630090, Новосибирск; Т.З. Исмагилов, ст. препод., e-mail: ismagilov@academ.org, А. И. Горбачёв, студент, e-mail: gorbachev.andrey.math@gmail.com

В настоящей статье предлагается конечно-объемная схема численного решения трехмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на призматических сетках. Для повышения порядка аппроксимации используется вычисление градиентов специально выбираемых компонент с помощью метода наименьших квадратов. Предлагаемая схема допускает эффективную параллельную реализацию с помощью метода геометрической декомпозиции. В статье приводятся результаты расчетов на многопроцессорных ЭВМ, которые показывают второй порядок точности предлагаемой схемы и высокую эффективность параллельной реализации.

2. Уравнения Максвелла. В отсутствие зарядов и токов система уравнений Максвелла в безразмерных переменных имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \operatorname{rot} \mathbf{H} = 0, \quad \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \operatorname{rot} \mathbf{E} = 0, \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \tag{2}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \tag{3}$$

где \mathbf{E} — электрическое поле, \mathbf{H} — магнитное поле, \mathbf{D} — электрическая индукция, \mathbf{B} — магнитная индукция, ε — диэлектрическая проницаемость и μ — магнитная проницаемость. Далее везде полагаем, что $\mu = 1$. Уравнения (3) не являются независимыми, а могут быть получены из (1) и (2). Система уравнений (1) и (2) может быть представлена в векторной консервативной форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{F}_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{F}_2 + \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{F}_3 = 0, \tag{4}$$

где \mathbf{U} — вектор консервативных переменных, \mathbf{F}_1 , \mathbf{F}_2 и \mathbf{F}_3 — векторы потоков:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ H_3 \\ -H_2 \\ 0 \\ -E_3 \\ E_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_2 = \begin{pmatrix} -H_3 \\ 0 \\ H_1 \\ E_3 \\ 0 \\ -E_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_3 = \begin{pmatrix} H_2 \\ -H_1 \\ 0 \\ -E_2 \\ E_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Проинтегрировав уравнение (4) по объему Ω с границей $\partial\Omega$, можно получить эквивалентную интегральную форму

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{U} d\Omega + \int_{\partial\Omega} (n_1 \mathbf{F}_1 + n_2 \mathbf{F}_2 + n_3 \mathbf{F}_3) dS = 0, \tag{5}$$

где $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ — внешняя нормаль. Систему (4) можно также записать в недивергентной форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{V} + A_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{V} + A_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{V} + A_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{V} = 0, \tag{6}$$

где \mathbf{V} — вектор потоковых переменных, связанный с вектором консервативных переменных матрицей перехода Θ : $\mathbf{V} = \Theta \mathbf{U}$,

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

а матрицы A_1 , A_2 , A_3 записываются в виде

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1/\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

3. Разностная схема. Рассмотрим расчетную область в трехмерном пространстве. Будем считать, что в ней построена сетка из призм Δ . Если две различные ячейки сетки соприкасаются, то они имеют общую грань, общее ребро или общую вершину. Для каждой ячейки Δ определим объем Ω_Δ и барицентр \mathbf{X}_Δ^B как $\Omega_\Delta = \int_\Delta d\Omega$ и $\mathbf{X}_\Delta^B = \frac{1}{\Omega_\Delta} \int_\Delta \mathbf{X} d\Omega$. Для каждой грани Γ определим площадь S_Γ и центр \mathbf{X}_Γ^C по формулам $S_\Gamma = \int_\Gamma dS$ и $\mathbf{X}_\Gamma^C = \frac{1}{S_\Gamma} \int_\Gamma \mathbf{X} dS$.

Для приближенного решения уравнения (5) рассмотрим разностную схему

$$\Omega_{\Delta_i} \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\tau} + \sum_{k=1}^m \int_{\Gamma_k} (n_1 \mathbf{F}_1 + n_2 \mathbf{F}_2 + n_3 \mathbf{F}_3) d\Gamma = 0, \quad (7)$$

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

Для того чтобы в (7) найти U_i^{n+1} (т.е. значение U на новом временном слое), надо вычислить интегралы по граням Γ_k ячейки Δ_i , которые представляют собой потоки искомого величин через грани. Предполагаем, что в ячейке искомые функции изменяются линейно, по значениям этих функций в барицентре ячейки и по вычисленным градиентам функций находим значения функций в центре грани со стороны i -й ячейки в момент времени $n\tau + \tau/2$. Аналогичным образом находим значения функций в центре грани со стороны ячейки, находящейся по другую сторону грани. По значениям функций по разные стороны грани, вообще говоря различным, находим потоки в центре грани в момент времени $n\tau + \tau/2$. Тогда интегралы в (7) приближенно вычисляем по формуле прямоугольников

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\tau}{\Omega_{\Delta_i}} \sum_{k=1}^m s_{\Delta_i}^k \mathbf{F}_i^k,$$

где $s_{\Delta_i}^k$ — площадь k -й грани и \mathbf{F}_i^k — поток через k -ю грань.

3.1. Нахождение потоков через границу ячейки. Пусть $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ — вектор нормали к общей грани ячеек Δ_L и Δ_R в точке \mathbf{X}^C . Если предположить, что производные компонент электромагнитных полей по касательной к грани равны нулю, то система в недивергентной форме (6) принимает

вид $\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{V} + A \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \mathbf{V} = 0$, где $A = A_1 n_1 + A_2 n_2 + A_3 n_3$.

Для этой системы можно рассмотреть одномерную задачу Римана, где в качестве начальных значений принять аппроксимацию компонент электромагнитных полей в центре грани со стороны ячеек Δ_L и Δ_R : $\mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C)$ и $\mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C)$. Решение этой задачи [9, 10] будем использовать для вычисления потока через границу ячейки.

Пусть $D = R^{-1}AR$, где D — диагональная матрица из собственных значений матрицы A и R — матрица, столбцы которой являются правыми собственными векторами матрицы A . Пусть D^\pm — диагональные матрицы, полученные из D заменой всех отрицательных (положительных) собственных значений нулями. Тогда $A = RDR^{-1} = RD^+R^{-1} + RD^-R^{-1} = A^+ + A^-$. Поскольку $\mathbf{V} = \Theta \mathbf{U}$, для вычисления потоков через грань в (6) будем использовать $\mathbf{F} = \Theta^{-1} (A^+ \mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C) + A^- \mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C))$ или

$$\mathbf{F} = C^+ \mathbf{V}_L(\mathbf{X}^C) + C^- \mathbf{V}_R(\mathbf{X}^C). \quad (8)$$

3.2 Нахождение значений компонент электромагнитных полей на границе ячейки. Рассмотрим исходную систему уравнений в недивергентной форме (6). Пусть \mathbf{X}^B — барицентр ячейки, а \mathbf{X}^C — центр грани. Тогда $\mathbf{V}(\mathbf{X}^C)$ может быть найдена по следующей формуле со вторым порядком по времени и пространству:

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

Таким образом, значения электромагнитных полей на грани ячейки сетки в (8) имеют вид

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

3.3 Вычисление градиентов компонент электромагнитных полей в ячейке. Вычисление градиентов проведем с использованием вектора непрерывных переменных. На границе разрыва диэлектрической проницаемости такими переменными будут нормальная компонента вектора электрической индукции, касательные компоненты вектора электрического поля и декартовы компоненты вектора магнитного поля. В каждой ячейке сетки введем свой вектор переменных \mathbf{W} . Будем считать, что образующие цилиндра поверхности разрыва диэлектрической проницаемости параллельны оси x_3 . В ячейках, имеющих общую грань с поверхностью разрыва диэлектрической проницаемости, выберем

$$\mathbf{W} = \Xi(\phi, \varepsilon) \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \varepsilon \cos(\phi) & \varepsilon \sin(\phi) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{V},$$

где ϕ — угол вектора нормали к поверхности разрыва в полярной системе координат в плоскости (x_1, x_2) , а ε — диэлектрическая проницаемость в ячейке. В остальных ячейках выберем $\mathbf{W} = \mathbf{V}$. В узлах сетки введем угол ϕ . В узлах на поверхности разрыва диэлектрической проницаемости выберем его как угол вектора нормали к поверхности разрыва в полярной системе координат в плоскости (x_1, x_2) . В остальных узлах углы можно выбрать произвольно.

Сначала найдем градиенты \mathbf{W} в ячейках с помощью метода наименьших квадратов. Для этого воспользуемся значениями \mathbf{V} в барицентре самой ячейки и барицентрах соседних ячеек. Может получиться так, что у ячейки отсутствуют несколько соседних ячеек. В таком случае вместо значений в их барицентрах возьмем значения в барицентрах ячеек, соседних для одной из присутствующих соседних ячеек. Таким образом, в методе наименьших квадратов будем использовать $\left\{ (\mathbf{X}^{B_j}, \Xi(\phi_i, \varepsilon_j) \mathbf{V}_j) \right\}$, где j пробегает индексы ячеек, которые используются для вычисления градиентов в ячейке i . После нахождения градиентов в i -й ячейке сетки по найденным градиентам вычислим значения $\mathbf{W}_i(\mathbf{X}^P) = \mathbf{W}_i^P$ в ее узлах $\mathbf{X}^P = \{x_l^P\}$

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^P) &= \Xi(\phi^P, \varepsilon_i) \Xi^{-1}(\phi_i, \varepsilon_i) \left(\mathbf{W}_i + \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j})(x_1^P - x_1^{B_j}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j})(x_2^P - x_2^{B_j}) + \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{W}_i(\mathbf{X}^{B_j})(x_3^P - x_3^{B_j}) \right), \end{aligned}$$

где ϕ^P — значение углов в узле P . В одном узле \mathbf{X}^P получаем несколько различных значений $\mathbf{W}_i(\mathbf{X}^P)$ по числу соседних ячеек, за итоговое значение $\mathbf{W}^P = \mathbf{W}(\mathbf{X}^P)$ принимаем их среднее арифметическое.

Теперь в каждой ячейке найдем градиенты \mathbf{V} с помощью метода наименьших квадратов. Для этого будем использовать значения \mathbf{V} в вершинах ячейки. Таким образом, в методе наименьших квадратов для вычисления градиентов \mathbf{V} в ячейке i возьмем $\left\{ (\mathbf{X}^{P^k}, \Xi^{-1}(\phi^{P^k}, \varepsilon_i) \mathbf{W}^{P^k}) \right\}$, где $P^k, k = 1, 2, \dots$, — номера вершин ячейки i .

4. Параллельная реализация. Параллельная реализация алгоритма основана на геометрической декомпозиции расчетной области, при которой N слоев призматической сетки в расчетной области делятся между s процессами так, чтобы процессам с более высокими номерами соответствовали слои с более высокими номерами и разница между количеством слоев у различных процессов была не больше единицы. Если N слоев сетки пронумерованы от 1 до N , то один из вариантов такой декомпозиции — это когда процессу с номером r соответствуют все слои в интервале $\left[\frac{Nr}{s} + 1, \frac{N(r+1)}{s} \right]$. Все процессы, кроме $r = 0$, имеют дополнительный “нижний” слой фиктивных ячеек для получения данных из последнего слоя процесса с номером $r - 1$. Аналогично все процессы кроме $r = s - 1$ имеют дополнительный “верхний” слой фиктивных ячеек для получения данных из первого слоя процесса с номером $r + 1$.

Алгоритм требует обмена данными в вершинах сетки, в центрах призм и на сторонах граней. Обмен данными в вершинах сетки используется для получения суммы величин, хранящихся в одной и той же вершине сетки в разных процессах; с его помощью вычисляются средние значения компонент электромагнитных полей в вершинах. Обмен данными в призмах используется для передачи величин в фиктивные ячейки. Передаваемые величины включают в себя компоненты электромагнитных полей и координаты центров призм. Обмен данными на сторонах граней используется для вычисления потоков. Таким образом, последовательность действий в параллельной программе на каждом шаге по времени состоит из следующих этапов:

- 1) передача значений электромагнитных полей в ячейках;
- 2) вычисление предварительных градиентов и частичных сумм значений электромагнитных полей в вершинах;
- 3) передача частичных сумм и получение окончательных значений электромагнитных полей в вершинах;
- 4) вычисление окончательных градиентов;
- 5) вычисление значений на гранях;
- 6) передача значений на гранях;
- 7) вычисление значений в ячейках на новом временном слое.

Особо отметим, что алгоритм не требует передачи градиентов между процессами.

5. Результаты тестовых расчетов. Для проверки свойств предложенной схемы были проведены тестовые расчеты. Призматические сетки строились с помощью сдвигов двумерных треугольных сеток. Точность численного алгоритма оценивалась путем сравнения с аналитическими решениями. Ошибка численного решения в момент времени $t^n = n\tau$ вычислялась по формуле

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

где P — общее количество призм в вычислительной области, $V_k^n(\mathbf{X}^{B_i})$ и $V_k^{\text{exact}}(\mathbf{X}^{B_i}, t^n)$ — вычисленные и точные значения электромагнитных полей в центре ячейки i соответственно.

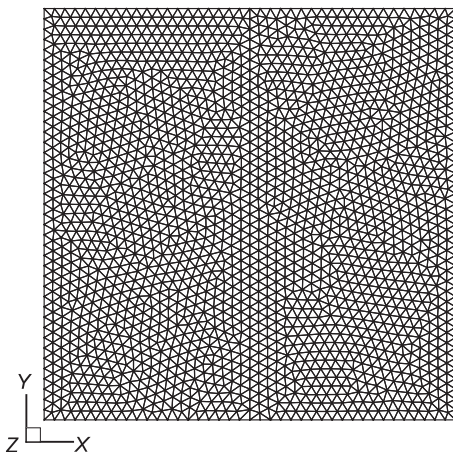


Рис. 1. Двумерная сетка

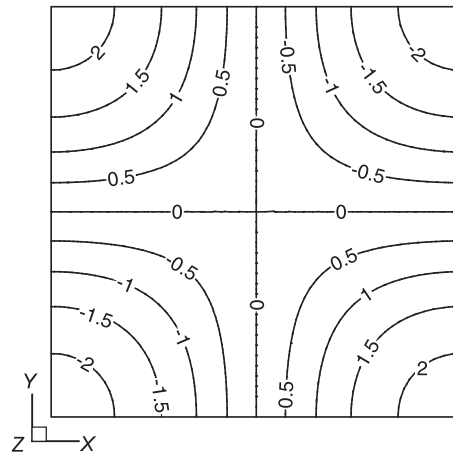


Рис. 2. Распределение E_1

5.1. Тест 1. Рассмотрим распространение электромагнитной волны в среде с постоянным коэффициентом диэлектрической проницаемости. В этом случае одно из точных решений системы уравнений

Максвелла имеет вид

$$\begin{aligned} E_1 &= 3 \cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3} \pi t), & H_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3} \pi t), \\ E_2 &= \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3} \pi t), & H_2 &= -\frac{4}{\sqrt{3}} \cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \cos(\pi x_3 - \sqrt{3} \pi t), \\ E_3 &= 2 \sin(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \sin(\pi x_3 - \sqrt{3} \pi t), & H_3 &= -\frac{5}{\sqrt{3}} \sin(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \sin(\pi x_3 - \sqrt{3} \pi t). \end{aligned}$$

Область, в которой проводились расчеты, представляла собой единичный куб. Расчеты проводились на последовательности сеток, состоящих из 2400, 6552, 18 960, 52 136 и 151 360 призм. Шаги по времени в расчетах брались пропорционально линейным размерам призм. На рис. 1 показан пример сетки, состоящей из 3784 треугольников, которая использовалась для построения сетки из 151 360 призм. На рис. 2 показано вычисленное распределение E_1 в момент времени $T = 4.77$ в сечении $x_3 = 0.5$, полученное на сетке из 151 360 призм. Эволюция ошибки δ_2 в норме L_2 для различных сеток показана на рис. 3. В табл. 1 приводятся максимальные значения ошибки в норме L_2 для последовательности сеток. Поведение ошибки соответствует второму порядку точности.

5.2. Тест 2. Рассмотрим распространение гибридной электромагнитной волны в световоде со ступенчатым профилем диэлектрической проницаемости. Разрыв диэлектрической проницаемости ε проходит

$$\text{по криволинейной поверхности } r \equiv \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = a: \quad \varepsilon = \varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_1 = n_1^2, & \text{где } 0 \leq r \leq a, \\ \varepsilon_2 = n_2^2, & \text{где } r > a. \end{cases}$$

В этом случае система уравнений Максвелла имеет аналитическое решение [15], которое в цилиндрических координатах записывается в виде

$$\begin{aligned} 0 \leq r \leq a: \quad E_r &= \beta \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} J_0\left(\frac{u}{a} r\right) - \frac{1+s}{2} J_2\left(\frac{u}{a} r\right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ E_\theta &= -\beta \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} J_0\left(\frac{u}{a} r\right) + \frac{1+s}{2} J_2\left(\frac{u}{a} r\right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ E_z &= J_1\left(\frac{u}{a} r\right) \cos(\theta) \cos(kt - \beta z), \\ H_r &= kn_1^2 \frac{a}{u} \left[\frac{1-s_1}{2} J_0\left(\frac{u}{a} r\right) + \frac{1+s_1}{2} J_2\left(\frac{u}{a} r\right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ H_\theta &= kn_1^2 \frac{a}{u} \left[\frac{1-s_1}{2} J_0\left(\frac{u}{a} r\right) - \frac{1+s_1}{2} J_2\left(\frac{u}{a} r\right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ H_z &= -\frac{\beta}{k} s J_1\left(\frac{u}{a} r\right) \sin(\theta) \cos(kt - \beta z), \\ r > a: \quad E_r &= \beta \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} K_0\left(\frac{w}{a} r\right) - \frac{1+s}{2} K_2\left(\frac{w}{a} r\right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ E_\theta &= -\beta \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} K_0\left(\frac{w}{a} r\right) + \frac{1+s}{2} K_2\left(\frac{w}{a} r\right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ E_z &= \frac{J_1(u)}{K_1(w)} K_1\left(\frac{w}{a} r\right) \cos(\theta) \cos(kt - \beta z), \\ H_r &= kn_0^2 \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s_0}{2} K_0\left(\frac{w}{a} r\right) + \frac{1+s_0}{2} K_2\left(\frac{w}{a} r\right) \right] \sin(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ H_\theta &= kn_0^2 \frac{a}{w} \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \left[\frac{1-s_0}{2} K_0\left(\frac{w}{a} r\right) - \frac{1+s_0}{2} K_2\left(\frac{w}{a} r\right) \right] \cos(\theta) \sin(kt - \beta z), \\ H_z &= -\frac{\beta}{k} s \frac{J_1(u)}{K_1(w)} K_1\left(\frac{w}{a} r\right) \sin(\theta) \cos(kt - \beta z), \end{aligned}$$

где J_0 и J_1 — функции Бесселя первого рода, K_0 и K_1 — функции Бесселя второго рода, $s_0 = \frac{s\beta^2}{k^2} n_0^2$, $s_1 = \frac{s\beta^2}{k^2} n_1^2$, $u = a\sqrt{k^2 n_1^2 - \beta^2}$, $w = a\sqrt{k^2 n_2^2 - \beta^2}$,

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

а β находится из дисперсионного соотношения. Тестовые константы: $\varepsilon_1 = 2.25$, $\varepsilon_2 = 1.0$, $k = 6.0$, $a = 0.64$, $\beta = 8.402440923258$, $u = 2.063837416842$, $w = 3.764648073438$.

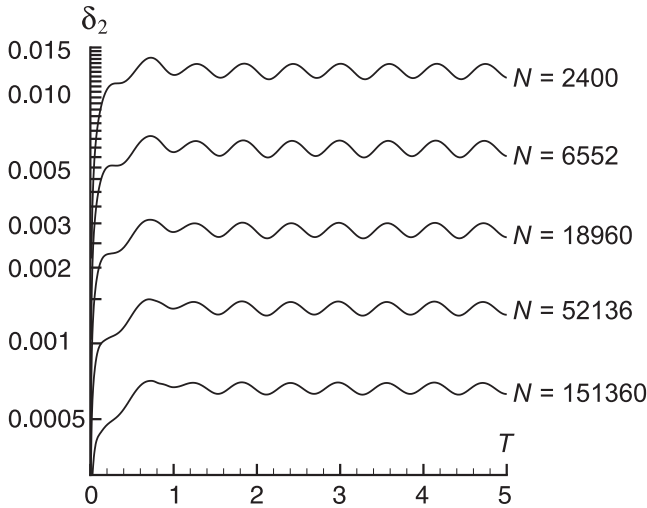


Рис. 3. Поведение ошибки

Таблица 1
Максимальная ошибка и порядок аппроксимации

Число призм	δ_2	Порядок аппроксимации
2400	0.013659	
6552	0.006670	2.14
18960	0.003100	2.15
52136	0.001497	2.15
151360	0.000709	2.14

В качестве расчетной области был выбран цилиндр радиуса 1.28 и высотой 0.6. Расчеты проводились на последовательности сеток, состоящих из 9352, 27080, 75964, 217000 и 609000 призм. Сетка строилась таким образом, чтобы разрыв диэлектрической проницаемости проходил по граням призм. Шаг по времени брался пропорциональным линейным размерам призм. На рис. 4 показан пример двумерной треугольной сетки, состоящей из 2708 треугольников, которая использовалась для построения сетки из 27080 призм. На рис. 5 показано распределение третьей компоненты магнитного поля H_3 в момент времени $T = 4.73$ в сечении $x_3 = 0.3$, полученное на сетке из 27080 призм. На рис. 6 показана эволюция ошибки δ_2 в норме L_2 на последовательности из пяти сеток. В табл. 2 приводятся максимальные значения ошибки в норме L_2 . Поведение ошибки соответствует второму порядку точности.

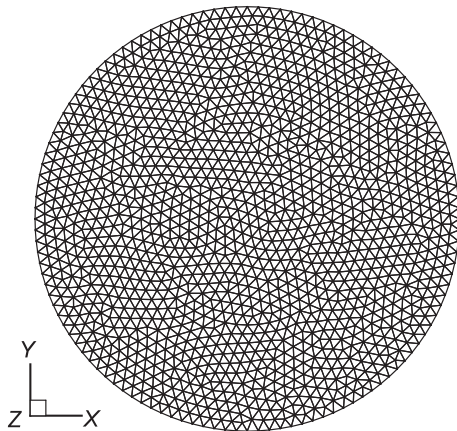


Рис. 4. Двумерная сетка

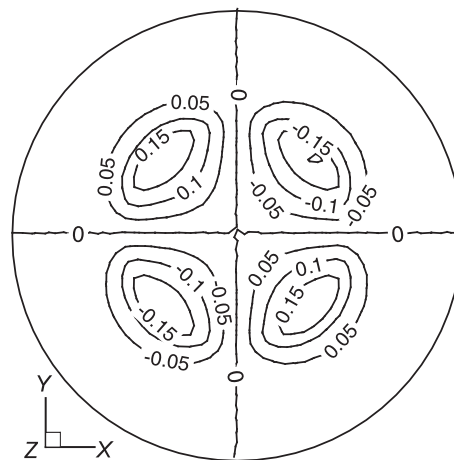


Рис. 5. Распределение H_3

5.3. Масштабируемость. Для проверки свойств масштабируемости параллельной реализации были проведены расчеты с использованием последовательной и параллельной реализаций предложенного

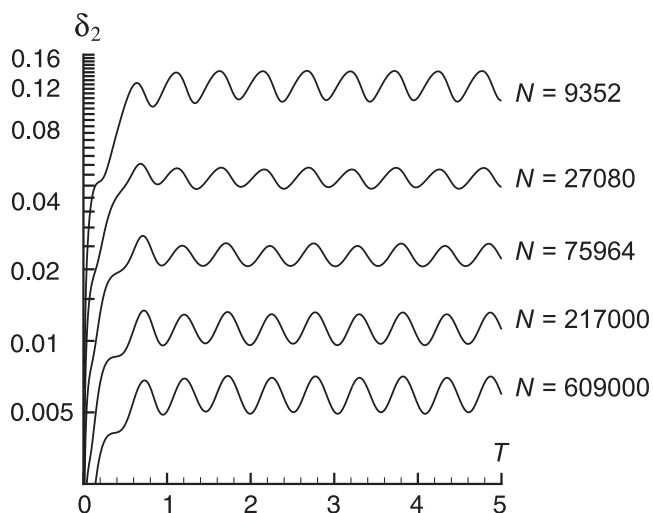


Рис. 6. Поведение ошибки

Таблица 2
Максимальная ошибка и порядок аппроксимации

Число призм	δ_2	Порядок аппроксимации
9352	0.136843	
27080	0.055602	2.54
75964	0.027663	2.29
217000	0.013417	2.21
609000	0.007118	2.12

алгоритма. Расчеты проводились на кластере Новосибирского государственного университета. Кластер построен на базе двойных блэйд-серверов HP BL2x220c, имеющих по 32 Гб оперативной памяти и по четыре четырехъядерных процессора Xeon E5540 (2.53 ГГц). В качестве коммуникационной среды использовался InfiniBand. Результаты всех расчетов с применением параллельной версии и последовательной версии совпали. Время счета было различным. В табл. 3 приводятся затраты времени на проведение расчета в зависимости от числа процессов для сетки, состоящей из 3 472 000 призм (320 слоев по 10 850 призм). Видно, что до момента, когда процесс проводит расчет лишь на 10 слоях, достигается ускорение, близкое к линейному, что говорит о высокой эффективности и хорошей масштабируемости параллельной реализации.

Таблица 3
Масштабируемость параллельной программы

Число процессов	1	2	4	8	16	32	64	128
Время счета, сек	29871	14602	7379	3836	1912	973	518	325

6. Заключение. В статье предложен метод конечных объемов для решения нестационарных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на призматических сетках. Для использования этого метода на высокопроизводительных ЭВМ с распределенной памятью была предложена параллельная реализация вычислительного алгоритма с помощью интерфейса передачи сообщений MPI. Для проверки свойств метода и параллельной реализации были проведены тестовые расчеты. Поведение ошибки для задачи о распространении гибридной электромагнитной волны в световоде со ступенчатым профилем диэлектрической проницаемости соответствует второму порядку аппроксимации. Время расчета демонстрирует практически обратную зависимость для широкого диапазона изменения числа процессов, что свидетельствует о высокой эффективности и хорошей масштабируемости параллельной реализации.

Авторы выражают глубокую благодарность А. С. Лебедеву, О. В. Штыриной и М. П. Федоруку за содействие в работе и обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Годунов С.К., Рябенский В.С. Разностные схемы. Введение в теорию. М.: Наука, 1977.
2. Yee K.S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Trans. Antennas Propagat. 1966. 14. 585–589.
3. Taflov A. Advances in computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. Boston: Artech House, 1998.
4. Taflov A., Hagness S.C. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. Boston: Artech House, 2000.

5. *Sullivan D.M.* Electromagnetic simulation using the finite-difference time-domain method. New York: IEEE, 2000.
6. *Hermeline F.* Two coupled particle-finite volume methods using Dalaunay–Voronoi meshes for approximation of Vlasov–Poisson and Vlasov–Maxwell equations // *J. Comput. Phys.* 1993. **106**. 1–18.
7. *Cioni J.-P., Fezoui L., Steve H.* A parallel time-domain Maxwell solver using upwind schemes and triangular meshes // *IMPACT Comput. Sci. Eng.* 1994. **5**. 215–247.
8. *Cioni J.-P., Fezoui L., Issautier D.* Higher order upwind schemes for solving time domain Maxwell equations // *La Recherche Aérospatiale*. 1994. N 5. 319–328.
9. *Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В.* Решение нестационарных уравнений Максвелла для сред с неоднородными свойствами методом конечных объемов // *Вычисл. технологии*. 2005. **10**, № 2. 60–73.
10. *Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В.* Конечно-объемный алгоритм решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // *Журн. вычисл. матем. и матем. физики*. 2006. **47**, № 7. 1286–1301.
11. *Исмагилов Т.З.* Параллельный алгоритм для решения трехмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью // *Тр. Междунар. научн. конф. ПаВТ–2010*. Уфа: УГАТУ, 2010.
12. *Исмагилов Т.З.* Параллельный алгоритм для решения трехмерных уравнений Максвелла с разрывной диэлектрической проницаемостью на тетраэдральных сетках // *Вестн. УГАТУ*. 2010. **14**, № 4. 152–159.
13. *Geuzaine C., Remacle J.-F.* Gmsh: a three-dimensional finite-element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities // *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 2009. **3**. 1–24.
14. *Schoberl J.* NETGEN — an advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules // *Comput. Visual. Sci.* 1997. **1**. 41–52.
15. *Okamoto K.* Fundamentals of optical waveguides. London: Academic Press, 2000.

Поступила в редакцию
08.03.2011
