

Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова

Физический факультет МГУ

Кафедра математики

КУРСОВАЯ РАБОТА ПО ДИСЦИПЛИНЕ
"ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ"
Применение матричных методов для решения
нестационарных уравнений Максвелла
в многослойных средах

Курсовая работа студентки 217 группы
Черных Елены Алексеевны

Научный руководитель:
вед. программист Петухов А. А.

Москва 2020

Содержание

Введение	3
Цели и задачи	4
Глава 1. Электромагнитные волны в многослойных структурах	5
Глава 2. Построение математической модели	10
1 Постановка задачи	10
2 Общая схема математической модели	10
3 Программная реализация с применением технологий параллельного программирования.	11
Глава 3. Результаты работы программы.	13
1 Гауссов импульс в слоистой структуре.	13
2 Оценка эффективности параллельного алгоритма.	15
Выводы	18
Список литературы	19
Приложение. Быстрое преобразование Фурье	20

Введение

Многослойная структура представляет собой набор плоскопараллельных плёнок из различных материалов (диэлектриков) с малыми (порядка и менее длины волны излучения) толщинами. Такого рода объекты нашли широкое применение в оптических исследованиях и приборах, так как изменение характеристик слоёв и их взаимного расположения позволяют оказывать разного рода воздействие на световую волну. Например, с помощью многослойных структур можно увеличивать или, напротив, уменьшать отражение световых волн от поверхностей, фильтровать свет, оставляя только необходимые экспериментатору участки спектра. В интерферометрии такие структуры используются для разделения пучка на две части, а также они позволяют изменять его поляризацию.

Электромагнитная природа света позволяет рассматривать световые волны как распространяющиеся в пространстве возмущения электромагнитного поля, описываемые системой уравнений Максвелла. Однако, данные уравнения верны лишь для однородных сред с неизменными характеристиками, в противном случае компоненты поля претерпевают разрывы на границе разделов сред, и узнать характеристики световой волны становится достаточно сложной задачей. Для решения подобных задач существуют различные численные методы.

В данной работе для решения нестационарных уравнений Максвелла используется метод матриц переноса. Он является широко распространённым методом расчета оптических свойств слоистых структур. Задачи, связанные с распространением света в многослойной структуре, сводятся к перемножению матриц переноса, характеризующих каждый отдельный слой, из которых состоит структура.

Цели и задачи

Цель работы заключается в исследовании поведения электромагнитного импульса, проходящего через многослойную структуру с заведомо известными свойствами.

Основные задачи:

1. Изучить применяемый матричный метод, его особенности и возможности применения.
2. Составить математическую модель поставленной задачи и реализовать её в виде программного кода.
3. Представить результаты в виде анимированного графика зависимости интенсивности электромагнитного импульса от координаты в среде и проанализировать его.
4. Получить ускорение численного решения задачи путём использования технологий параллельного программирования.

Глава 1. Электромагнитные волны в многослойных структурах

Электромагнитное поле – возбуждённое состояние пространства, возникающее при наличии электрических зарядов. Его представляют векторами $\vec{B}$ – магнитной индукцией, и $\vec{E}$ – электрической напряжённостью.

Кроме этих двух векторов есть ещё три – плотность электрического тока $\vec{j}$, электрическое смещение $\vec{D}$ и магнитная напряжённость $\vec{H}$, которые описывают влияние поля на объекты. Все эти вектора связаны между собой системой уравнений Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \\ \operatorname{div} \vec{B} = 0 \\ \operatorname{div} \vec{D} = 4\pi\rho \end{cases} \quad (1)$$

где ρ – объёмная плотность сторонних электрических зарядов.

Далее будем считать, что токи и сторонние заряды отсутствуют, то есть $\rho = 0$ и $\vec{j} = 0$. В таком случае, для того, чтобы данная система (система 1) имела единственное решение, необходимо добавить ещё два уравнения, описывающих поведение веществ в поле:

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2)$$

Эти уравнения называются материальными, ε – диэлектрическая проницаемость, а μ – магнитная проницаемость. В этой работе не предусмотрено наличие магнитных материалов, поэтому примем $\mu = 1$.

Преобразуя уравнения Максвелла, можно получить дифференциальные уравнения для каждого из входящих в систему векторов. В частности, в однородной среде будут верны следующие соотношения:

$$\Delta \vec{E} = \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad \Delta \vec{H} = \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} \quad (3)$$

Полученные уравнения представляют собой уравнения волнового движения. Они означают, что в пространстве существуют электромагнитные волны.

Уравнения Максвелла верны для однородных областей пространства, где характеристики среды остаются постоянными. При резком же изменении свойств среды меняются и соответствующие векторы. Характер изменений описывается при помощи граничных условий на поверхности раздела:

$$\begin{aligned} (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) \times \vec{n} &= 0, & (\vec{H}_1 - \vec{H}_2) \times \vec{n} &= 0 \\ (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) \cdot \vec{n} &= 0, & (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) \cdot \vec{n} &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

То есть тангенциальные составляющие напряжённостей полей и нормальные составляющие магнитной и электрической индукций остаются непрерывными. Из этого следует, что при падении плоской волны на границу двух сред с разными характеристиками, она разделяется на две, предположительно плоские волны, одна из которых отражается в первоначальную среду, а другая проходит дальше. Таким образом, претерпевают изменения компоненты векторов поля, а энергия изначальной волны распределяется между отражённой и прошедшей (в случае, если поглощением энергии средой можно пренебречь).

Рассмотрим плоскую линейно поляризованную гармоническую электромагнитную волну, падающую нормально на многослойную диэлектрическую структуру, ограниченную двумя полубесконечными средами с показателями преломления $n_1 = 1$, n_m .

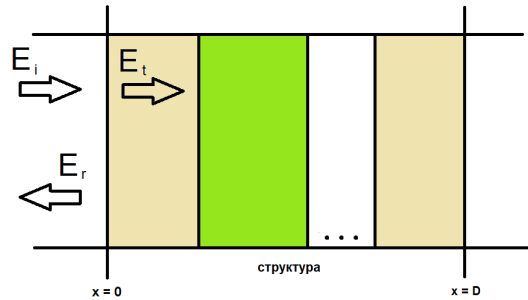


Рис. 1: Схематическое представление нормального падения луча на многослойную структуру.

Как сказано ранее, изначальная волна на границе сред разделяется на две, это значит, что выражения для электрического и магнитного полей в слое под номером j можно записать в виде суммы полученных волн, распространяющихся в противоположных направлениях:

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \vec{E}_{1j} \exp\left(-i\left(\omega t - \frac{2\pi n_j x}{\lambda} + \alpha_j\right)\right) + \vec{E}_{2j} \exp\left(-i\left(\omega t + \frac{2\pi n_j x}{\lambda} + \beta_j\right)\right) \\ \vec{H} &= \vec{H}_{1j} \exp\left(-i\left(\omega t - \frac{2\pi n_j x}{\lambda} + \alpha_j\right)\right) - \vec{H}_{2j} \exp\left(-i\left(\omega t + \frac{2\pi n_j x}{\lambda} + \beta_j\right)\right)\end{aligned}\quad (5)$$

где $n_j = \sqrt{\varepsilon_j}$ - показатель преломления среды j , λ - длина волны.

Будем считать, что все величины усреднены по времени и опустим временной множитель.

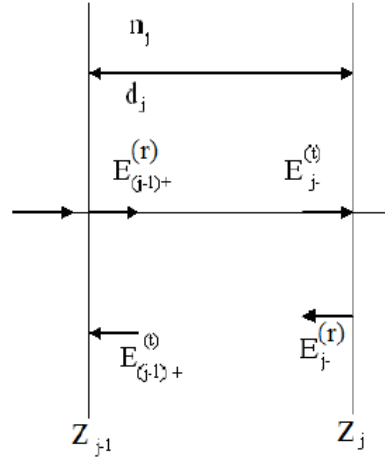


Рис. 2: Схематичное изображение волн в слое j

Тогда для каждой из волн можно записать следующие соотношения:

$$\begin{aligned}\vec{E}_j^t &= \vec{E}_{1j} \exp\left(-i\left(-\frac{2\pi n_j x_j}{\lambda} + \alpha_j\right)\right) \\ \vec{E}_{j-1}^t &= \vec{E}_{1j} \exp\left(-i\left(-\frac{2\pi n_j x_{j-1}}{\lambda} + \alpha_j\right)\right) \\ \vec{E}_j^r &= \vec{E}_{2j} \exp\left(-i\left(\frac{2\pi n_j x_j}{\lambda} + \beta_j\right)\right) \\ \vec{E}_{j-1}^r &= \vec{E}_{2j} \exp\left(-i\left(\frac{2\pi n_j x_{j-1}}{\lambda} + \beta_j\right)\right)\end{aligned}\quad (6)$$

Отсюда, с использованием граничных условий, можно получить следующие рекуррентные соотношения между напряжённостями на границах раздела:

$$\begin{aligned}\vec{E}_{j-1}^t &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \vec{E}_j^t \exp(-i\phi_j) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \vec{E}_j^r \exp(i\phi_j) \\ \vec{E}_{j-1}^r &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \vec{E}_j^t \exp(-i\phi_j) + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \vec{E}_j^r \exp(i\phi_j)\end{aligned}\quad (7)$$

где $\phi = \frac{2\pi n_j(x_j - x_{j-1})}{\lambda}$, или, используя матричную запись:

$$\begin{bmatrix} \vec{E}_{j-1}^t \\ \vec{H}_{j-1}^r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \exp(-i\phi_j) & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \exp(i\phi_j) \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \exp(-i\phi_j) & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_j}{n_{j-1}}\right) \exp(i\phi_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{E}_j^t \\ \vec{H}_j^r \end{bmatrix}\quad (8)$$

После совершения достаточно громоздких преобразований [2], получается матрица, связывающая компоненты электрического и магнитного векторов на границах j -го слоя. Она называется характеристической.

$$M = \begin{bmatrix} \cos(k_0 n_j x_j) & -\frac{i}{n_j} \sin(k_0 n_j x_j) \\ -i n_j \sin(k_0 n_j x_j) & \cos(k_0 n_j x_j) \end{bmatrix}\quad (9)$$

где $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ - волновое число.

Слоистая структура состоит из нескольких слоёв, каждый из которых однороден и обладает собственной характеристической матрицей, тогда характеристическую матрицу для всей структуры можно представить в виде:

$$M = \prod_{j=1}^N M_j\quad (10)$$

Где M_j – характеристическая матрица j – го слоя среды.

Она связывает между собой компоненты электромагнитного поля до и после прохождения через структуру следующим образом:

$$\begin{bmatrix} E_0 \\ H_0 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E \\ H \end{bmatrix} \quad (11)$$

Глава 2. Построение математической модели

1 Постановка задачи

Рассмотрим структуру, состоящую из нескольких слоёв, каждый из которых имеет такие заранее известные характеристики, как диэлектрическая проницаемость (далее обозначается ε) и толщина (далее обозначается как d). Каждый слой считается однородным и изотропным, а его магнитная проницаемость равна единице.

На данную структуру под углом 0 градусов падает одномерный электромагнитный гауссов импульс, напряженность электрического поля которого зависит от времени и координаты следующим образом:

$$E(x, t) = Ae^{i(\omega t - kx)}e^{-\frac{t^2}{\sigma^2}} \quad (12)$$

В начальный момент времени $t = 0$ электрическая компонента импульса обладает максимальной амплитудой, которая далее постепенно затухает с течением времени. Необходимо найти значения компонент векторов E и H данного импульса во всех точках структуры для различных моментов времени.

2 Общая схема математической модели

На многослойную структуру падает одномерный электромагнитный гауссов импульс (12), зависящий от времени и координаты, тогда модуль вектора напряженности магнитного поля в точке $x = 0$ рассчитывается по формуле:

$$H(0, t) = \varepsilon_0 A \frac{-(\omega + \frac{2ti}{\sigma^2})}{k} e^{i\omega t} e^{-\frac{t^2}{\sigma^2}} \quad (13)$$

В силу того, что известны значения E и H в точке $x = 0$ в любой момент времени, с помощью характеристических матриц многослойной структуры и отдельных её слоёв можно найти значения E и H для всех точек среды. Для этого осуществляется переход из временной области в частотную с помощью прямого преобразования Фурье (см. приложение), то есть находятся амплитудные спектры напряжённостей полей, а значит, и частоты их гармоник. Для каждой полученной гармонической волны с конкретными частотой и амплитудой применяется матричный метод. Чтобы получить решение нестационарных уравнений Максвелла, необходимо знать зависимость компонент векторов поля от времени, то есть полученные значения для гармоник первоначального сигнала следует перевести обратно во временную область, получив сигнал вида $E(x, t)$.

Таким образом, общая схема решения нестационарных уравнений Максвелла может быть представлена в виде:

$$\begin{bmatrix} E^j(t) \\ H^j(t) \end{bmatrix} = FT^{-1} \left(\left(\prod_{k=1}^j M^k \right)^{-1} FT \begin{bmatrix} E^0(t) \\ H^0(t) \end{bmatrix} \right) \quad (14)$$

Зная значения компонент электромагнитного поля в каждой точке среды, в этих же точках можно вычислить среднюю плотность потока энергии электромагнитного импульса по формуле:

$$W = \frac{|\vec{E} \times \vec{H}|}{2} \quad (15)$$

3 Программная реализация с применением технологий параллельного программирования.

Наиболее эффективным способом реализации численных методов является использование специализированных библиотек, которые оптимизированы для решения

конкретных задач. В данной работе с этой целью применяется FFTW – библиотека подпрограмм на языке С для вычисления дискретного преобразования Фурье. Эта библиотека поддерживает как одномерные, так и многомерные преобразования, а также работает с комплексными числами и с произвольным размером входных данных.

Особенностью FFTW является возможность использовать технологии параллельного программирования для ДПФ, причём как с помощью многопоточности (стандарт OpenMP), так и с помощью распределения памяти (интерфейс MPI). Основное отличие двух этих способов распараллелить программу – способ использования памяти. MPI распределяет данные между процессами, разбивая их «по частям», и производит там необходимые преобразования независимо от других процессов, в то время как в OpenMP «главный» поток создаёт набор подчинённых, между которыми распределяется задача, при этом память у них общая.

Для обработки гауссова импульса используется только одномерное комплексное преобразование Фурье. Так как MPI подразумевает распределение памяти по процессам, одномерный массив, содержащий значения исходного сигнала, разбивается на порции с помощью встроенной функции «`fftw_mpi_local_size`» и автоматически распределяется по процессам, после чего обработка сигнала происходит локально для каждой части массива. Стоит отметить, что для комплексного преобразования Фурье FFTW использует тип данных `<fftw_complex>`, однако, ввиду большого объёма дальнейших преобразований, после совершения преобразования все комплексные числа обрабатывались с помощью стандартной библиотеки языка C++ `<complex>`.

В связи с тем, что применение матричного метода является последовательным и достаточно ресурсоёмким процессом, особенно для большого числа слоёв в структуре, а также для экономии памяти, а именно предотвращения хранения на каждом процессе массива, содержащего значения напряжённостей полей в различных точках структуры, вычисления производились только на нулевом процессе. Для этого после преобразования все данные были собраны на нулевом процессе с помощью блокирующих пересылок `MPI_Send` и `MPI_Recv`, что сказалось на эффективности параллельной программы.

Глава 3. Результаты работы программы.

1 Гауссов импульс в слоистой структуре.

Численный анализ данных произведен с помощью языка программирования C++, для построения графиков были использованы пакеты программ Origin и MATLAB. Для выполнения преобразования Фурье использовалась упомянутая ранее библиотека FFTW.

Далее приведены графики для гауссова импульса со следующими характеристиками: $A = 1$, $\sigma = 1$ пс, $\omega = 200 \frac{\text{рад}}{\text{пс}}$

В точке $x = 0$ на временном промежутке $t \in [0, 2]$ пс изменение напряжённостей электрического и магнитного полей импульса имеет следующий вид:

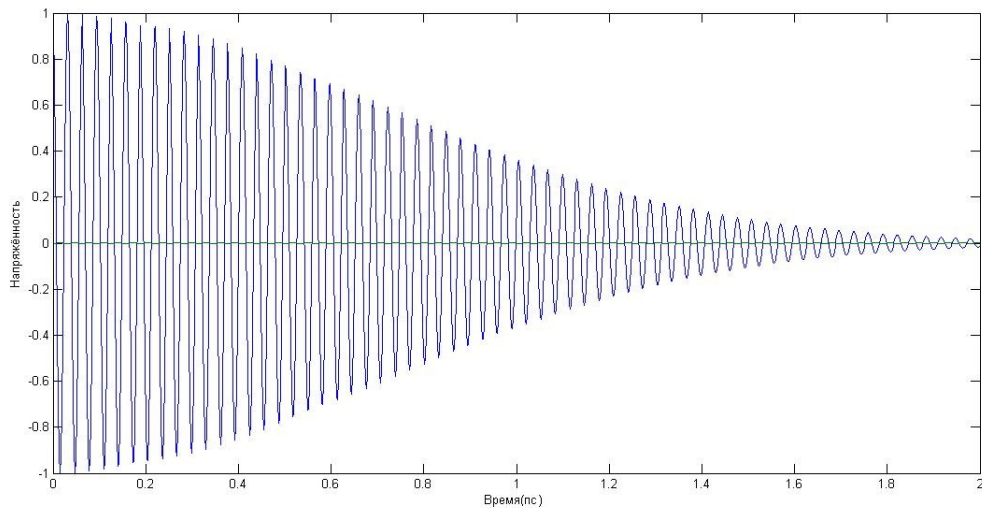


Рис. 3: График зависимости напряжённости электрического (синий) и магнитного (зелёный) полей от времени на промежутке $t \in [0, 2]$ пс для координаты $x = 0$.

Данный график, построенный согласно (12) и (13), наглядно демонстрирует, что интенсивность импульса уменьшается с течением времени. Используем это при дальнейшем анализе графиков интенсивности волны в структуре.

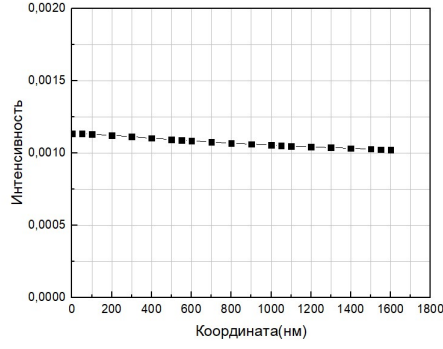


Рис. 4: График зависимости интенсивности поля от координаты в воздухе $\varepsilon = 1$

Слоистая среда в данной работе является периодической, слои имеют толщину $d_1 = 100$ и $d_2 = 200$ нанометров, диэлектрические проницаемости $\varepsilon_1 = 16$ и $\varepsilon_2 = 4$ соответственно. Всего 10 слоёв, магнитные проницаемости каждого слоя равны $\mu = 1$.

На том же временном промежутке внутри данной структуры были получены следующие графики зависимости интенсивности от координаты:

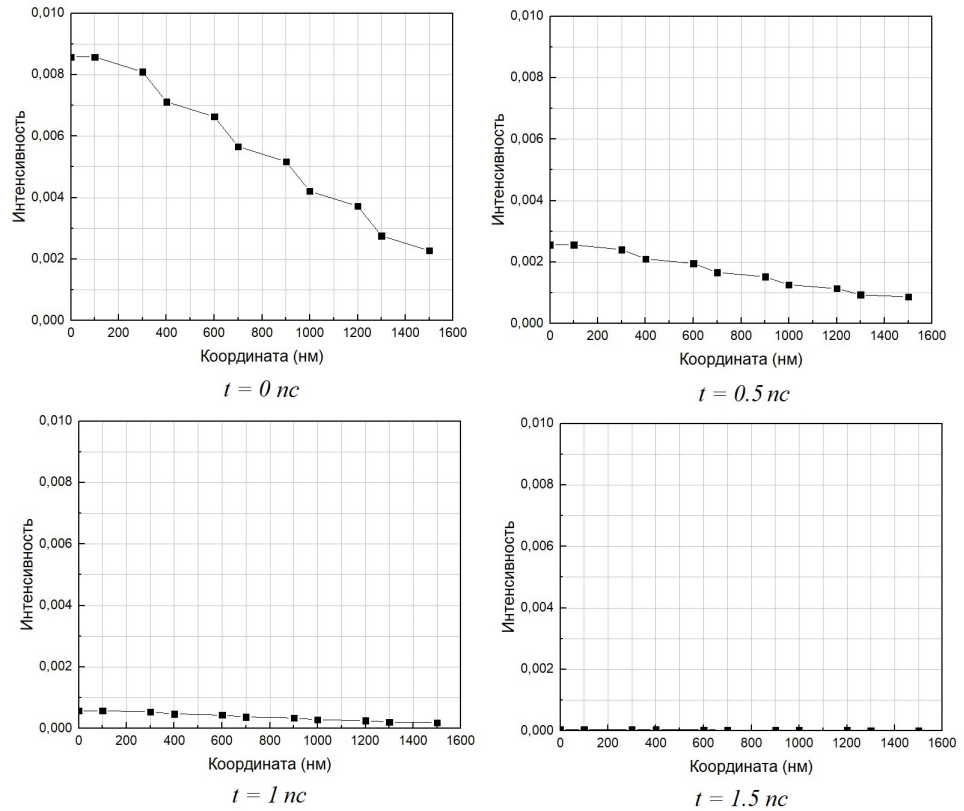


Рис. 5: График зависимости интенсивности поля от координаты в периодической многослойной структуре (в начальный момент времени $t = 0 \text{ пс}$, $t = 0.5 \text{ пс}$, $t = 1 \text{ пс}$, $t = 1.5 \text{ пс}$)

В силу того, что среда может состоять из слоёв с принципиально отличающимися свойствами, был рассмотрен другой вариант слоистой структуры с заменой в изначальной среде одного слоя на другой, обладающий иными характеристиками. На следующем графике приведены результаты, полученные при замене шестого слоя на слой шириной $d_3 = 300$ нанометров с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_3 = 20$.

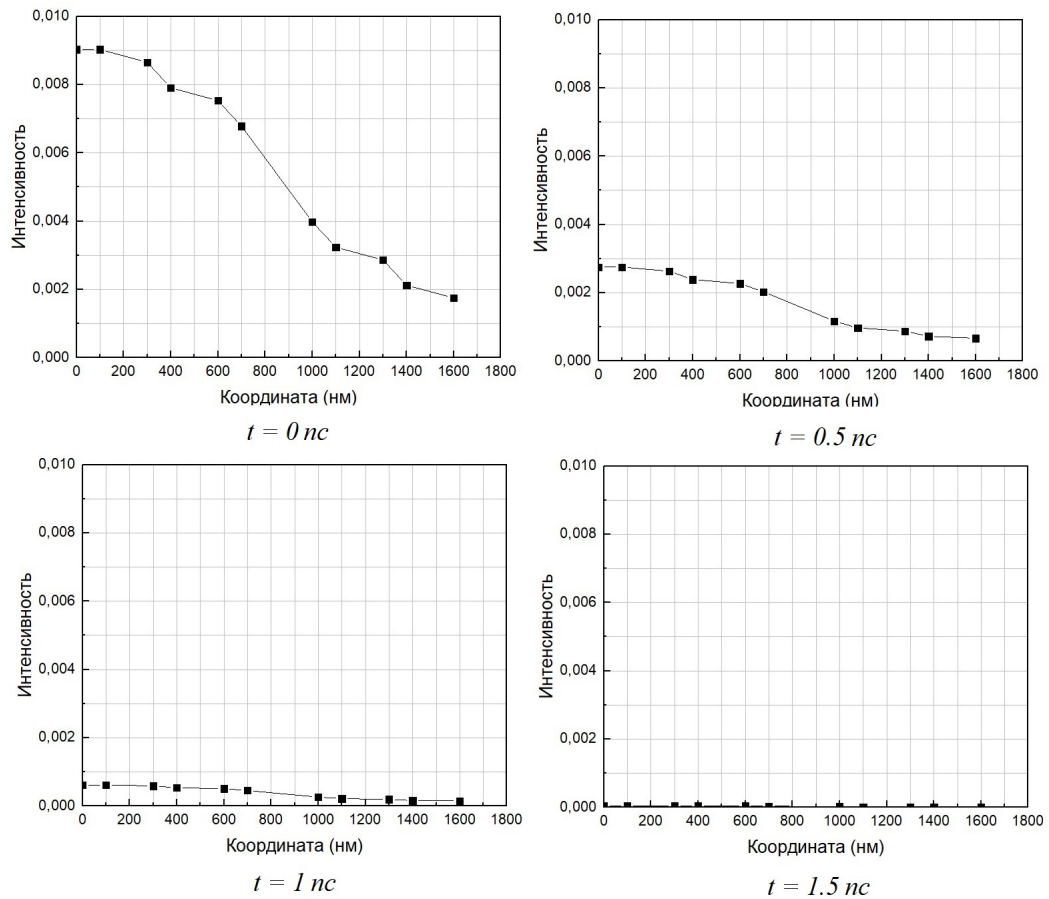


Рис. 6: График зависимости интенсивности поля от координаты в периодической многослойной структуре с одним изменённым слоем $\varepsilon = 20$, $d = 300$ нм (в начальный момент времени $t = 0$ пс, $t = 0.5$ пс, $t = 1$ пс, $t = 1.5$ пс)

2 Оценка эффективности параллельного алгоритма.

В этом разделе приведены результаты работы двух программ, использующих технологии параллельного программирования: многопоточной и с разделённой памятью.

Оценкой эффективности работы параллельной программы можно считать ускорение программы в зависимости от числа одновременно работающих потоков (для OpenMP) или процессов (для интерфейса MPI). Данную характеристику можно вычислить при помощи закона Амдала:

$$K = \frac{1}{S + \frac{P}{N}} \quad (16)$$

где S – доля последовательной части, P – доля параллельной части, N – число независимых ветвей/процессов.

Из-за необходимости расчёта значения интенсивности гауссова импульса в каждой точке структуры, матричный метод нельзя распределить и считать параллельно, поэтому программа имеет значительную долю последовательной части, которая заведомо негативно влияет на коэффициент ускорения выполняемой программы.

На рисунке 7 представлены графики зависимости ускорения программы от числа активных потоков или процессов для измерений, полученных на OpenMP сервере физического факультета. Ожидаемый результат представляет собой расчёты для закона Амдала, учитывающего невозможность распараллелить часть программы. Если рассматривать многослойную структуру, состоящую из 10 слоёв, то последовательная часть составляет 50% от всей программы, откуда следует, что максимальное ускорение, которого можно добиться, не превышает 2.

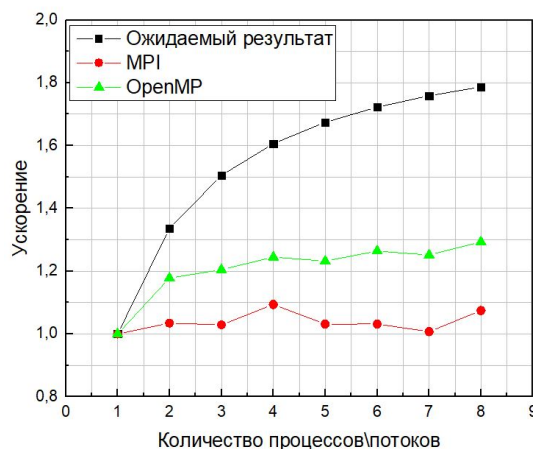


Рис. 7: График зависимости ускорения программы от числа активных потоков или процессов (OpenMP сервер).

Полученный результат для обеих программ не соответствует ожидаемому. При этом разделение между потоками (OpenMP) даёт большее ускорение, чем разделение памяти. Это является особенностью одномерного преобразования Фурье библиотеки FFTW с применением MPI, затраты которого на разбиение и распределение между процессами массива данных значительно влияют на эффективность программы. Это доказывают показатели ускорения непосредственно для выполнения преобразования Фурье.

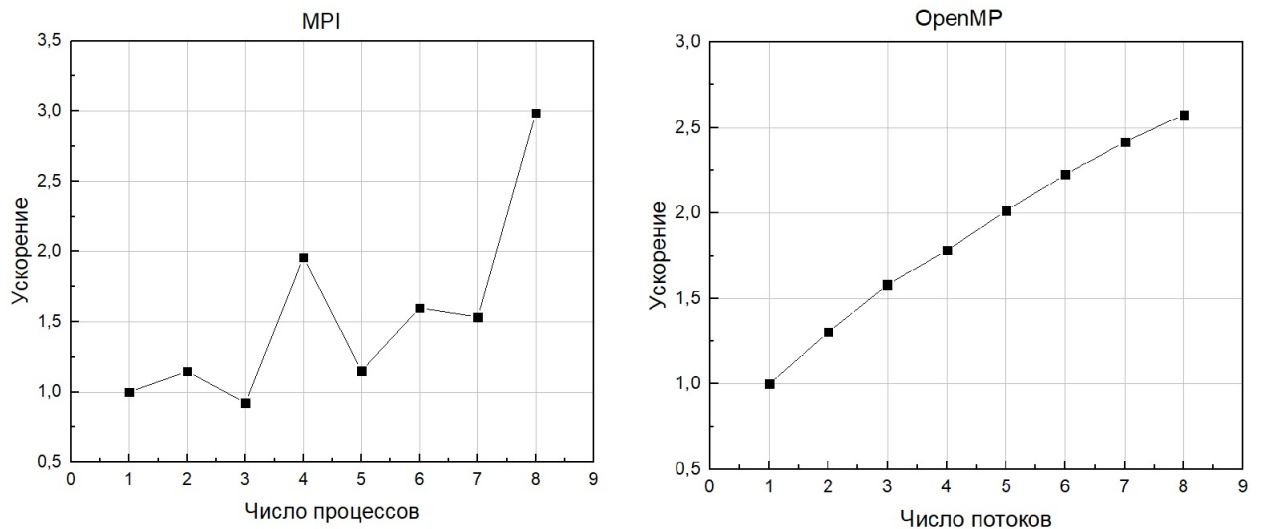


Рис. 8: График зависимости ускорения программы от числа активных потоков или процессов без учёта последовательной части (OpenMP сервер).

Графики на рисунке 8 наглядно демонстрируют, что одномерное преобразование Фурье не даёт большого ускорения при распараллеливании любым из методов. Также стоит отметить, что при числе процессов, не кратном двум, ускорение MPI программы резко падает. Это обусловлено тем, что частота дискретизации выбирается кратной степени двойки (см. приложение), и распределение между процессами, если их число тоже кратно степени двойки, происходит менее ресурсозатратно.

Таким образом, для реализации параллельной программы в данной задаче целесообразно отдать предпочтение многопоточной программе с общей памятью, потому что латентность для распределённой памяти слишком велика и не позволяет значительно увеличить эффективность MPI программы.

Выводы

С помощью метода матриц переноса были найдены значения интенсивности импульса во всех точках многослойной среды для наглядного представления решения нестационарных уравнений Максвелла.

Из анализа графиков можно сделать следующие выводы:

1. С распространением в структуре, по сравнению с распространением в воздухе, интенсивность импульса значительно уменьшается.
2. Характер изменения зависит от таких характеристик, как диэлектрическая проницаемость поля и его толщина.
3. Значения интенсивности уменьшается с течением времени, что согласуется с ожидаемыми результатами (см. рис. 3)

Данную задачу можно обобщить на случай падения импульса под углом, отличным от 0, а также рассмотреть не одномерный случай падающей волны.

Таким образом, метод матриц переноса является эффективным инструментом для анализа волновых процессов. Он достаточно прост в реализации и позволяет решать широкий спектр задач, связанных с неоднородностями среды.

Вследствие того, что большую часть программы составляют последовательно выполняемые операции, не подлежащие распараллеливанию, а также из-за низкой эффективности параллельного одномерного преобразования Фурье из библиотеки FFTW как в случае многопоточности, так и в случае распределённой памяти, не удалось получить значительного ускорения работы программы.

Список литературы

- [1] Борн М., Вольф Э. *Основы оптики*. М.: Наука, 1973, гл.1, стр. 54–81.
- [2] Путилин Э.С., *Оптические покрытия. Учебное пособие*. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2010, гл.1, стр. 21-32.
- [3] Sarrafi P. *Nonlinear periodic structures: from classical to quantum devices*. 2014. P. 11-19.

Приложение. Быстрое преобразование Фурье

Прямое и обратное преобразования Фурье для величин, зависящих от времени, выглядят следующим образом:

$$\hat{V}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} V(t) e^{-it\omega} dt \quad V(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{V}(\omega) e^{it\omega} d\omega \quad (17)$$

Однако при численном решении физических задач найти конечное выражение для данных интегралов или посчитать их с помощью численных методов на всей числовой прямой становится затруднительной и ресурсоёмкой задачей. Поэтому для реализации преобразования Фурье используется специальный численный метод – дискретное преобразование Фурье.

Дискретное преобразование Фурье (ДПФ) – это аналог непрерывного преобразования Фурье, но для дискретного сигнала, содержащего N отсчетов, то есть если исходный сигнал принимает значения x_n , $n = 0, \dots, N - 1$, тогда дискретное прямое преобразование Фурье имеет вид:

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-\frac{2\pi i}{N} kn}, k = 0, \dots, N - 1 \quad (18)$$

Таким образом, промежуток, на котором находится фурье-образ функции и вне которого функция считается равной нулю, разбивается на заранее указанное число промежутков, на концах которых находятся значения преобразуемой функции. К массиву из этих значений можно применять ДПФ.

В силу того, что ДПФ требует от вычислительной машины совершения большого числа математических операций (сложность данного алгоритма $O(N^2)$), на практике обычно используется рекуррентный алгоритм быстрого преобразования Фурье (БПФ). Он имеет сложность $O(N \log_2 N)$ и наиболее эффективен, если число отсчётов кратно 2. Два ДПФ четных и нечетных временных отсчетов входного сигнала можно объединить

в дискретное преобразование Фурье полной длины, этот факт позволяет значительно уменьшить количество вычислительных операций. Таким образом, с помощью повторных разбиений можно свести вычисления к нахождению простейшего двухточечного преобразования Фурье, тем самым сделав данный численный метод более эффективным.