

ОГЛЯДОВА СТАТТЯ

УДК 530.1, 539, 535.015

DOI: <https://doi.org/10.30970/eli.11.1>

ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ МЕТОДИ У ПЛАЗМОНІЦІ. 3. МЕТОД СКІНЧЕННИХ РІЗНИЦЬ У ЧАСОВІЙ ОБЛАСТІ

І. Болеста, А. Демчук, О. Кушнір

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. ген. Тарнавського, 107, 79017 м. Львів, Україна
bolesta@lnu.edu.ua*

У статті представлена третя частина огляду обчислюваних методів, які активно використовуються у задачах плазмоніки, а саме – метод інтегрування рівнянь Максвелла у часовій області (FDTD). Цей метод дозволяє обраховувати оптичні відгуки плазмонних структур будь-якої складності та довільної форми. Однак, універсальність методу накладає високі вимоги до обчислювальної техніки, тому для реального моделювання необхідно проводити оптимізацію для підвищення ефективності обчислення. Показано, наскільки ефективним може бути розпаралелення для обрахунків у межах цієї моделі. Також у статті представлені результати моделювання оптичних спектрів та локального підсилення електро-магнітного поля хвилі світла, отримані авторами.

Ключові слова: моделювання, плазмоніка, апроксимація, метод скінченних різниць в часовій області, розпаралелення, локальні поля.

У попередніх частинах огляду розглядалися моделі, які дають точний розв'язок тільки за певних умов (квазістатичне наближення, теорія Мі) та метод дискретно-дипольної апроксимації, який дає наближені результати, але придатний для суттєво більшого діапазону структур. Основою наступного методу, який набув масового використання для задач плазмоніки у останні роки, є проста ідея розв'язку диференціальних рівнянь Максвелла у часовій області. Це – метод скінченних різниць у часовій області (Finite Difference Time Domain) або просто FDTD. Простота ідеї створює суттєві проблеми у реалізації методу: як правильно розбивати простір на комірки та у яких саме точках розраховувати вектори полів, як природньо ввести крайові умови (бо можливо обрахувати лише обмежений об'єм простору). Також великою проблемою є необхідна кількість ресурсів для моделювання: чим менша комірка для обчислення, тим точнішим буде результат, але й більше ресурсів необхідно для обчислення. Ситуацію може покращити більш раціональне використання ресурсів за допомогою розпаралелювання алгоритму обчислення. У огляді показані варіанти вирішення цих проблем та приклади проведених чисельних експериментів.

Метод скінченних різниць у часовій області – один з найбільш популярних методів чисельної електродинаміки, заснований на дискретизації рівнянь Максвелла, записаних в диференціальній формі.

FDTD відноситься до загального класу сіткових методів розв'язку диференціальних рівнянь. Базовий алгоритм методу був вперше запропонований Кейном в 1966 р [1].

Хід чисельного експерименту FDTD виглядає наступним чином:

1. Задається обчислювана область, роздільна здатність сітки і граничні умови. Граничні умови можуть бути поглинаючими або періодичними. Останні застосовуються для моделювання нормального падіння плоскої хвилі на періодичну структуру.
2. Всередині обчислюваної області поміщаються матеріальні тіла із заданими оптичними властивостями (діелектрична і магнітна проникності, провідність).
3. Задається джерело, яке генерує скінченну в часі електромагнітну хвилю, спектральний склад якої повинен покривати цікавий для нас діапазон частот. Далі, хвиля падає на тіла, розсіюється на них, і, при наявності поглинаючих граничних умов, через якийсь час виходить за межі обчислюваної області. Історія поширення хвилі зберігається.
4. За допомогою перетворення Фур'є записані значення полів переводяться в частотне подання. Далі, обробляючи їх (наприклад, інтегруючи потік енергії поля через будь-яку поверхню) можна отримати оптичні характеристики даної структури тіл.

Алгоритм Йі

У рівняннях Максвелла зміна електричного поля E (частинна похідна) залежить від розподілу в просторі магнітного поля H (ротор). Аналогічно, зміна поля H залежить від розподілу в просторі поля E .

На цьому спостереженні заснований алгоритм Йі. Сітки для полів E і H зміщені одна відносно одної на половину кроку дискретизації часу і по кожній з просторових змінних (рис. 1). Різницеві рівняння дають змогу визначити поля E і H на даному часовому кроці на підставі відомих значень полів на попередньому. При заданих початкових умовах алгоритм Йі дає ітераційний розв'язок в часі від початку відліку із заданим часовим кроком.

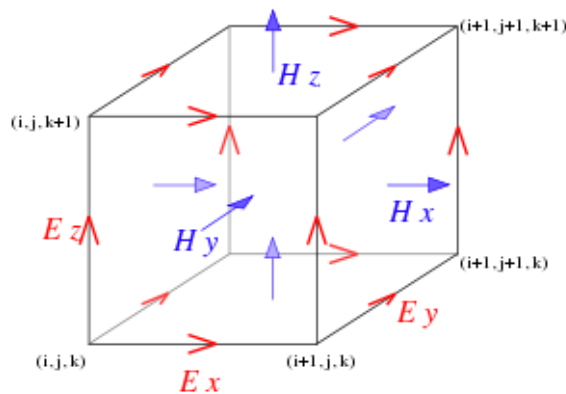


Рис. 1. Просторова сітка Йі.

З тим, як отримати рівняння для чисельного розрахунку полів з рівнянь Максвелла для поширення електромагнітної хвилі у вакуумі, де густина струму $\mathbf{j} = 0$ для випадку комірки Йі, можна ознайомитись у [2].

Як видно з рис. 1, використання індексів $k+1/2$ та $k-1/2$ пов'язане з тим, що електричне і магнітне поле у сітці Y_i зміщені один відносно одного, і кожен компонент поля \mathbf{E} оточений чотирма компонентами поля \mathbf{H} , і навпаки. Таке розташування компонент дає змогу апроксимувати частинні похідні за допомогою центральних скінченних різниць, що забезпечує другий порядок точності.

Значення полів в наступний момент часу визначається тільки зі значень в попередній момент часу, тобто це ітераційні рівняння для визначення значень компонент полів [2]. Це важливий висновок, який дозволяє розбивати процес моделювання на підзадачі для паралельних обчислень.

Ідеально узгоджені шари (PML)

Поглинаючі граничні умови допомагають позбутися відбивання поширеної хвилі від границь досліджуваної області. Одна з найбільш гнучких і ефективних реалізацій – це PML (Perfectly Matched Layers), розроблена Беренгером [3].

Основна ідея реалізації: якщо хвиля поширюється в середовищі A і стикається з середовищем B , то коефіцієнт відбивання має дорівнювати нулю, отже відбивання відсутнє. Хвиля буде продовжувати рух в новому середовищі, отже це середовище повинне бути таким, щоб імпульс повністю загасав до того часу, як він досягне межі досліджуваної області. З огляду на це потрібно зробити величини діелектричної та магнітної проникності ϵ та μ комплексними, оскільки уявна частина забезпечує ослаблення.

Таким чином на межі досліджуваної області потрібно задати шар уявного матеріалу, який буде мати діелектричну і магнітну проникність, які задовольняють вище описані умови.

Реалізація моделей дисперсних середовищ для методу FDTD

Так як метод FDTD розраховує значення електромагнітних полів в часовій області, а основні моделі матеріалів тіл, що поміщені в середовище, описані залежністю від частоти, необхідно провести перетворення, щоб розрахувати вплив матеріалу на випромінювання [4].

Розглянемо виведення виразів для методу FDTD для моделі Друде і Лоренца за допомогою Z-перетворення [5].

Діелектрична проникність середовища, описаного за допомогою моделі Друде, має вигляд:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (1)$$

Запишемо цей вираз у Z-області:

$$\epsilon(z) = \frac{1}{\Delta t} + \frac{\omega_p^2 / \gamma}{1 - z^{-1}} - \frac{\omega_p^2 / \gamma}{1 - e^{-\gamma\Delta t} z^{-1}} \quad (2)$$

Вираз для матеріального рівняння у Z-області матиме вигляд:

$$\mathbf{D}(z) = \epsilon(z) \cdot \mathbf{E}(z) \cdot \Delta t,$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}(z) &= \mathbf{E}(z) + \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma} \left[\frac{1}{1-z^{-1}} - \frac{1}{1-e^{-\gamma \Delta t} z^{-1}} \right] \mathbf{E}(z) = \\
&= \mathbf{E}(z) + \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma} \left[\frac{(1-e^{-\gamma \Delta t}) z^{-1}}{1-(1+e^{-\gamma \Delta t}) z^{-1} + e^{-\gamma \Delta t} z^{-2}} \right] \mathbf{E}(z).
\end{aligned} \tag{3}$$

Проведемо наступну заміну змінних:

$$\mathbf{S}(z) = \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma} \left[\frac{(1-e^{-\gamma \Delta t}) z^{-1}}{1-(1+e^{-\gamma \Delta t}) z^{-1} + e^{-\gamma \Delta t} z^{-2}} \right] \mathbf{E}(z). \tag{4}$$

Розв'язати це рівняння відносно $\mathbf{E}(z)$ можна так:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(z) &= \mathbf{D}(z) - z^{-1} \mathbf{S}(z), \\
\mathbf{S}(z) &= (1+e^{-\gamma \Delta t}) z^{-1} \mathbf{S}(z) - e^{-\gamma \Delta t} z^{-2} \mathbf{S}(z) + \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma} (1-e^{-\gamma \Delta t}) z^{-1} \mathbf{E}(z).
\end{aligned} \tag{5}$$

Перейдемо назад в часову область:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}^n &= \mathbf{D}^n - \mathbf{S}^{n-1}, \\
\mathbf{S}^n &= (1+e^{-\gamma \Delta t}) \mathbf{S}^{n-1} - e^{-\gamma \Delta t} \mathbf{S}^{n-2} + \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma} (1-e^{-\gamma \Delta t}) \mathbf{E}^{n-1}.
\end{aligned} \tag{6}$$

З отриманого виразу бачимо, що нам необхідно 2 додаткові змінні, щоб зберігати значення \mathbf{S} на попередніх часових кроках $n-1$ та $n-2$.

Розглянемо модель Лоренца, у якій діелектрична проникність визначається виразом:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\Delta \varepsilon_1 \omega_p^2}{\omega^2 - j\gamma_1 \omega - \omega_p^2}. \tag{7}$$

Останній доданок $S(\omega)$ в матеріальному рівнянні матиме вигляд:

$$\mathbf{S}(\omega) = - \frac{\Delta \varepsilon_1 \omega_p^2}{\omega^2 - j\gamma_1 \omega - \omega_p^2} \mathbf{E}(\omega) = \frac{\Delta \varepsilon_1 \omega_p^2}{\omega_p^2 + j\gamma_1 \omega - \omega^2} \mathbf{E}(\omega). \tag{8}$$

Згрупуємо доданки знаменника і запишемо вираз в іншій формі:

$$\mathbf{S}(\omega) = \frac{\gamma \beta}{(\alpha^2 + \beta^2) + j\omega 2\alpha + (j\omega)^2} \Delta \varepsilon_1 \mathbf{E}(\omega), \tag{9}$$

де

$$\alpha = \frac{\gamma_1}{2}, \quad \beta = \omega_p \sqrt{1 - \frac{\gamma_1^2}{4\omega_p^2}}, \quad \gamma = \omega_p / \sqrt{1 - \frac{\gamma_1^2}{4\omega_p^2}}. \tag{10}$$

Отриманий вираз можна записати в Z -області за допомогою таблиці Z -перетворення елементарних функцій:

$$\mathbf{S}(z) = \frac{e^{-\alpha \Delta t} \cdot \sin(\beta \Delta t) \cdot \gamma \cdot \Delta t \cdot z^{-1}}{1 - 2e^{-\alpha \Delta t} \cdot \cos(\beta \Delta t) z^{-1} + e^{-2\alpha \Delta t} z^{-2}} \Delta \varepsilon_1 \mathbf{E}(z). \tag{11}$$

Розв'яжемо це рівняння відносно $\mathbf{E}(z)$:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(z) &= \mathbf{D}(z) - z^{-1}\mathbf{S}(z), \\ (z) &= 2e^{-\alpha\Delta t} \cdot \cos(\beta\Delta t)z^{-1}\mathbf{S}(z) - e^{-2\alpha\Delta t}z^{-2}\mathbf{S}(z) + e^{-\alpha\Delta t} \sin(\beta\Delta t)\gamma\Delta t \cdot z^{-1}\mathbf{E}(z).\end{aligned}\quad (12)$$

У часовій області вираз матиме вигляд:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}^n &= \mathbf{D}^n - \mathbf{S}^{n-1}, \\ \mathbf{S}^n &= 2e^{-\alpha\Delta t} \cos(\beta\Delta t) \cdot \mathbf{S}^{n-1} - e^{-2\alpha\Delta t} \mathbf{S}^{n-2} + e^{-\alpha\Delta t} \sin(\beta\Delta t) \gamma\Delta t \cdot \mathbf{E}^{n-1}.\end{aligned}\quad (13)$$

Для реалізації моделі Друде-Лоренца з будь-якою кількістю членів, яка описується виразом:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \varepsilon_{Drude} + \sum_i \varepsilon_{Lorentz,i}, \quad (14)$$

потрібно записати матеріальне рівняння і виразити кожен доданок через окрему змінну \mathbf{S} , так як це описано вище. Оскільки Z-перетворення це лінійне перетворення, то і кінцевий вираз зводиться до звичайного сумування доданків:

$$\mathbf{E}^n = \mathbf{D}^n - \mathbf{S}_{Drude}^{n-1} - \sum_i \mathbf{S}_{Lorentz,i}^{n-1}. \quad (15)$$

Метод повного і розсіяного поля (Total/Scattered field)

Метод повного і розсіяного поля використовується для моделювання нескінченно віддаленого джерела плоскої хвилі. Метод заснований на лінійності рівнянь Максвелла і принципу суперпозиції. А саме, припускається, що повне поле \mathbf{E}_{total} і \mathbf{H}_{total} (те, яке вимірюється) зображується у вигляді суми [6]:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{total} &= \mathbf{E}_{inc} + \mathbf{E}_{scat}, \\ \mathbf{H}_{total} &= \mathbf{H}_{inc} + \mathbf{H}_{scat}.\end{aligned}\quad (16)$$

У формулі 24 \mathbf{E}_{inc} , \mathbf{H}_{inc} відповідають полю падаючої хвилі, яка є відомою у всіх точках простору в будь-який момент часу. Це та хвиля, яка поширювалася б в просторі, якби у ньому не існувало ніяких інших тіл. \mathbf{E}_{scat} та \mathbf{H}_{scat} відповідають розсіяній хвилі, що представляє собою результат взаємодії падаючої хвилі з тілами (рис. 2). Значення розсіяної хвилі заздалегідь невідомо.

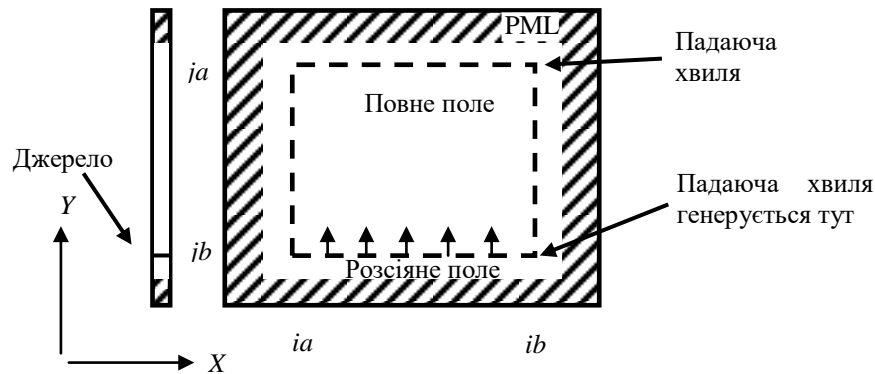


Рис. 2. Повне поле та розсіяне поле

Різницьові рівняння FDTD можуть незалежно застосовуватися як для повного поля, так і для падаючого або розсіяного полів. Це дає змогу розбити обчислювальну область

на дві підобласті: область повного поля, в якій розраховується повне поле, і область розсіяного поля, в якій розраховується розсіяне поле.

Розрахунок у частотній області

Досі, ми розглядали лише поширення електромагнітної хвилі в часі. Тепер потрібно знайти розподіл поля \mathbf{E} у кожній точці обчислюваної області за частотами.

Один з підходів – це поширити синусоїдальну хвилю певної частоти доки електромагнітне поле не досягне стаціонарного стану, та розрахувати амплітуду та фазу у кожній точці середовища. Згідно з таким підходом потрібно повторювати обчислення для всіх частот, що становлять інтерес, що є досить ресурсомістким процесом. Теорія систем стверджує, що можна отримати відклик на будь-яку частоту, якщо використати δ -імпульс як джерело електромагнітної хвилі. Таким імпульсом може бути гаусовий імпульс, який є хорошим наближенням, якщо він достатньо вузький.

Потрібно розрахувати поле аж доки імпульс не згасне (не покине обчислювальну область), і обчислити перетворення Фур'є поля \mathbf{E} . Маючи перетворення Фур'є в кожній точці обчислюваної області, можемо знайти амплітуду і фазу поля \mathbf{E} як результат взаємодії з джерелом будь-якої частоти [7].

Іншою проблемою є те, що значення поля \mathbf{E} в кожний момент часу для всієї обчислюваної області необхідно зберігати в пам'яті для того, щоб після закінчення ітерації розрахувати перетворення Фур'є. Щоб уникнути значних затрат пам'яті використовують алгоритм дискретного перетворення Фур'є. Збереження значень поля в пам'яті є в даному випадку оптимальним, оскільки тільки 2 значення (амплітуди і фази) ДПФ необхідно зберігати для кожної частоти в кожній точці обчислюваної області [8]:

$$\begin{aligned} E_{Re}(f) &= \sum_{n=0}^T E(n \cdot \Delta t) \cdot \cos(2\pi f \cdot \Delta t \cdot n), \\ E_{Im}(f) &= \sum_{n=0}^T E(n \cdot \Delta t) \cdot \sin(2\pi f \cdot \Delta t \cdot n). \end{aligned} \quad (17)$$

Так як для обчислення дійсної та уявної частини необхідно обчислити інтеграл (у випадку дискретного перетворення – суму) по часу, то можна використати тільки два масиви (буфери) для дійсної та уявної частини у кожній точці обчислюваної області, у які в кожен момент часу обчислення додавати новий доданок суми.

Алгоритм Ray-by-Ray Integration

У статті [9] FDTD метод, вперше розроблений для 2D задачі розсіювання, було продовжено до загальної тривимірної (3D) конфігурації для гексагональних кристалів льоду різної форми. Техніка FDTD вирішує рівняння Максвелла в часовій області за допомогою скінченних різниць і є гнучкою для розрахунку розсіювання світла на частинці неправильної форми. Для того, щоб ефективно обчислити поглинання, було розроблено алгоритм для обчислення ближнього поля і перетворення ближнього поля в далеке поле в 3D просторі.

Ближнє поле обчислюється за скінченно-різницеvim методом розв'язку рівнянь Максвелла в часовій області. Для того, щоб отримати частотну характеристику розсіювання частинки, необхідно перетворити поле з часової області в частотну область. Як зазначалося, можна ввести гаусовий імпульс в якості початкового збудження і застосовувати дискретне перетворення Фур'є для отримання частотного спектра сигналу, залежного від часу. Для того щоб уникнути чисельного згладжування і дисперсії, необхідно правильно

вибрати ширину імпульсу і належним чином враховувати доступний частотний спектр, наданий імпульсом [10].

Переріз розсіювання, поглинання і екстинкції визначаються розсіяним далеким полем. Тому потрібно перетворити частотну характеристику розсіювання частинки з ближнього поля в дальній зоні. Для досягнення цієї мети існує загальний підхід до застосування методу скінченних різниць – це інтегрування по поверхні на основі принципу еквівалентності, який включає тангенціальні компоненти електричного і магнітного полів на поверхні частинки.

Коли розсіювач поглинаючий, пряма дискретизація основних рівнянь Максвелла для обчислення ближньому полі буде вимагати складних обчислень у зв'язку з ненульовою уявною частиною діелектричної проникності (або показника заломлення) частинки.

Крім того, перетворення ближнього поля в дальній зоні при використанні поверхнево-інтеграційного рівняння має низку недоліків при поглинанні. Для того, щоб обійти ці недоліки, було розроблено ефективний алгоритм для обчислення ближнього поля і для перетворення ближнього поля в 3D просторі за наявності частинок, які поглинають світло.

Добре відомо, що перерізи поглинання (σ_a), розсіяння (σ_s) і екстинкції (σ_e) розсіювача мають задовольняти принцип збереження енергії:

$$\sigma_e = \sigma_s + \sigma_a. \quad (18)$$

Таким чином, тільки дві з трьох величин потрібні для оцінки повного спектру поглинання і розсіяння на частинці. Згідно з оптичною теоремою (або теоремою про екстинкцію) можна обчислити переріз екстинкції за допомогою значення матриці розсіяння в прямому напрямку. Якщо вибирають переріз розсіяння, а не переріз поглинання в якості другого незалежного параметра, як у способі на основі теореми еквівалентності, то глобальний розподіл розсіяної енергії має бути інтегрований по поверхні.

Для несферичної частинки з відносно великим розміром параметр інтенсивності розсіяння значно коливається в просторових напрямках. З цієї причини потрібно здійснювати інтеграцію розсіяної енергії з високою кутовою роздільною здатністю, який вимагає велику кількість обчислень, оскільки результати при зміні орієнтації частинок мають бути усереднені. З метою економії обчислювальних вимог, було розроблено метод оцінки розсіяного далекого поля і переріз поглинання на основі електромагнітного перетворення, яке пов'язане з інтегруванням за об'ємом всередині частинки.

Розглянемо розсіяння світла на частинках. Розсіяне поле може бути отримано на основі фундаментальної електромагнітної теорії, якщо електричне поле всередині частинки відоме. Розсіяне поле в далекій зоні пов'язане з внутрішнім полем наступним чином [11]:

$$\mathbf{E}^s(\mathbf{r})|_{kr \rightarrow \infty} = \frac{k^2 \exp(ikr)}{4\pi r} (\varepsilon - 1) \iiint_V \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}') - \hat{r} [\hat{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}')] \right\} e^{-ik\hat{r} \cdot \mathbf{r}'} d^3 r', \quad (19)$$

де \mathbf{E} – внутрішнє електричне поле всередині частинки. \mathbf{E}^s є розсіянням у далекому полі, ε – діелектрична проникність, k – хвильове число електромагнітної хвилі у вакуумі, і область інтегрування V є областю всередині частинки. Крім того, відповідно до принципу збереження енергії електромагнітного поля, переріз екстинкції і поглинання частинки можуть бути отримані, відповідно, за допомогою наступних рівнянь [11]:

$$\sigma_e = \text{Im} \left[\frac{k}{|\mathbf{E}_0|^2} (\varepsilon - 1) \iiint_V \mathbf{E}(\xi) \cdot \mathbf{E}_0^*(\xi) d^3\xi \right],$$

$$\sigma_a = \frac{k}{|\mathbf{E}_0|^2} \iiint_V \varepsilon_i(\xi) \mathbf{E}(\xi) \cdot \mathbf{E}^*(\xi) d^3\xi, \quad (20)$$

де $\mathbf{E}(\xi)$ – це повне електричне поле в точці визначеній вектором ξ , зірочка означає комплексно-спряжене число, а \mathbf{E}_0 – значення падаючого електричного поля, ε_i – уявна частина комплексної діелектричної проникності.

Рівняння забезпечують основу для вирішення розсіювальних властивостей несферичних частинок різними чисельно точними методами отримання ближнього поля.

Розпаралелення методу FDTD

Оскільки FDTD вимагає, щоб весь обчислювальний домен був дискретизований сіткою, дискретизація сітки повинна бути достатньо мілкою, щоб описувати як найменшу довжину електромагнітної хвилі, так і найменшу геометричну характеристику моделюваної структури. У результаті, як вже наголошувалось, симуляція FDTD вимагає значних обчислювальних ресурсів як з точки зору пам'яті і часу виконання. Технології паралельної обробки [12] широко застосовуються для FDTD для прискорення моделювання.

Метод FDTD легко розпаралелювати, оскільки схема Йі є явною. На кожному кроці для обрахунку полів у комірці Йі (див. рис. 1) потрібні значення компонентів поля цієї клітинки та сусідніх до неї клітинок на попередньому кроці. У більш загальних випадках, в яких використовується дискретизація більш високого порядку або нелінійні хвильові рівняння, обчислення може вимагати значень поля з кількох попередніх кроків по часу. Але, незалежно від складності хвильових рівнянь, FDTD гарантує, що значення у кожній клітинці не залежить від значень у сусідніх клітинках у поточний момент часу. Це робить розрахунки FDTD підходящими для розпаралелювання.

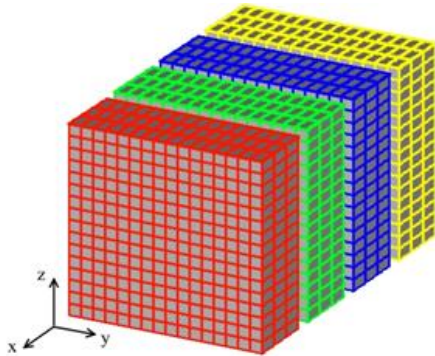


Рис. 3. Одновимірний приклад розкладання домену в напрямку X, використовуючи 4 процесори.

Паралельність алгоритму FDTD базується на розкладі сітки на суміжні субдомени, що не перекриваються. Обчислювальний простір можна розділити на частини по трьох напрямках, і кожен процесор в паралельній системі має справу з одним або декількома

субдоменами. Конфігурація, яка розподіляє всю обчислювальну сітку в напрямку x , показана на рис. 3.

Модель паралелізму

Модель паралелізму - це стратегія розподілу даних між процесорами та застосування операцій для зменшення взаємодії. Існує дві стратегії розподілу роботи між процесорами: паралельність даних та паралельність задач [13].

У паралельній моделі даних програма виконує одну і ту ж операцію для різних елементів набору даних одночасно. Набір даних, як правило, організовується як багатомірний масив. Основна характеристика задач паралельних моделей даних полягає в тому, що інтенсивність паралелізму даних зростає з величиною проблеми, що дає можливість використовувати більше процесорів для вирішення більших проблем.

Завдання паралелізму досягається, коли кожен процесор виконує іншу операцію з однаковими або різними даними. Процесори можуть виконувати той самий або інший код. У загальному випадку, різні процесори обробки спілкуються один з одним, як вони працюють. Зв'язок зазвичай відбувається шляхом передачі даних від одного процесора до іншого в рамках робочого процесу.

З опису алгоритму FDTD ми маємо справу з обчислювальним доменом, представленим у вигляді багатовимірних масивів даних. На кожному етапі ми повинні оновлювати поля на основі формули, тому найбільш підходящою паралельною моделлю для FDTD є паралельна модель даних.

Паралельні обчислення [14] також залежать від того, як процесори підключаються до пам'яті. Спосіб такого з'єднання можна класифікувати як системи зі спільною або розподіленою пам'яттю.

У системі спільної пам'яті існує єдиний адресний простір, в межах якого кожному місцю пам'яті надається унікальна адреса, а дані, що зберігаються в пам'яті, доступні для всіх процесорних ядер. Тому для забезпечення послідовності необхідно використовувати синхронізацію.

У системі розподіленої пам'яті кожен процесор має свою власну пам'ять і може отримати доступ лише до локальної пам'яті. Процесори пов'язані з іншими процесорами через високошвидкісні комунікаційні канали. Процесори спілкуються з іншими через передачу повідомлень за допомогою стандарту MPI (інтерфейс передавання повідомлень) [12].

Ефективність доступу до пам'яті є однією з ключових компонентів, що сприяють виконанню методу FDTD на високопродуктивних обчислювальних платформах. Дані, необхідні для процесу FDTD, постачаються як безпосередньо з пам'яті, так і від зв'язку з іншими потоками FDTD.

Алгоритм FDTD вимагає невеликого обсягу доступу до спільного доступу до пам'яті при паралельному застосуванні. На багатоядерній процесорній системі це повідомлення можна зробити дуже швидко, оскільки кожне ядро має прямий доступ до однієї і тієї ж пам'яті.

Виходячи з особливостей алгоритму FDTD, особливо того, що обчислювальний домен представляється як сукупність багатовимірних масивів і мале число операцій зменшення, використання класу Parallel з методом Parallel.For є ефективним [15].

Показники прискорення

Для аналізу паралельної продуктивності програми використовуються показники прискорення. Прискорення визначається як відношення часу, яке приймається послідовним алгоритмом до часу, який приймається за допомогою паралелізованої версії того самого алгоритму. Прискорення програми, що використовує декілька процесорів паралельних обчислень, також обмежується продуктивністю пам'яті, часом зв'язку між процесорами та часом, необхідним для послідовної фракції програми.

Закон Амдала служить способом визначення того, чи є алгоритм хорошим кандидатом для розпаралелювання. Він є наближенням максимальної теоретичної швидкості, яку паралелізована програма може досягти на багатопроцесорній системі. Прискорення вимірюється наступним чином. Передбачається, що алгоритм складається з двох компонентів: одного, який буде працювати в серійній формі, і той, який можна розпаралелювати. Навіть якщо паралельний компонент алгоритму міг би прискорити, щоб взагалі зовсім не скласти час, то для виконання програми все одно доведеться виконувати кінцевий послідовний компонент.

Відповідно до закону Амдала [16], оцінюваний приріст у покращеній послідовній програмі, де частина була пришвидшена до p разів (через обробку на p -ядрах) обмежується нерівністю:

$$S_{max} \leq \frac{p}{1 + f(p-1)}, \quad (21)$$

де f – частка часу, витраченого на виконання послідовної частини програми (частини, яку неможливо розпаралелювати) у загальному часу, витраченому на виконання непокращеної програми.

Оскільки кількість процесорних ядер, що використовуються в процесі розпаралелювання, зростає набагато більше, ніж один, формулювання Амдала вище вказує на те, що паралельний процес досягає дуже невеликого прискорення. Це відбивається біля горизонтальної складової кривої швидкості, показаної в теоретичному режимі обробки.

На практиці показники Амдала також обмежуються впливом обчислювальної техніки, що використовується для паралелізації алгоритму. Закон Амдала не охоплює два питання: він не враховує розмір проблеми та, як наслідок, розмір пам'яті; він ігнорує вартість операцій зв'язку / синхронізації, пов'язаних з введенням паралелізму в додаток.

Схема паралельного алгоритму з використанням FDTD TPL показана на рис. 4,а. Три паралельні цикли, представлені в алгоритмі розрахунку значень електричного поля на основі сусідніх магнітних полів, і навпаки. Кожна ітерація виконує щонайменше один електричний, а потім один магнітний розрахунок відповідно до вимог домену FDTD, але сусідні значення залишаються тими самими в межах паралельного циклу.

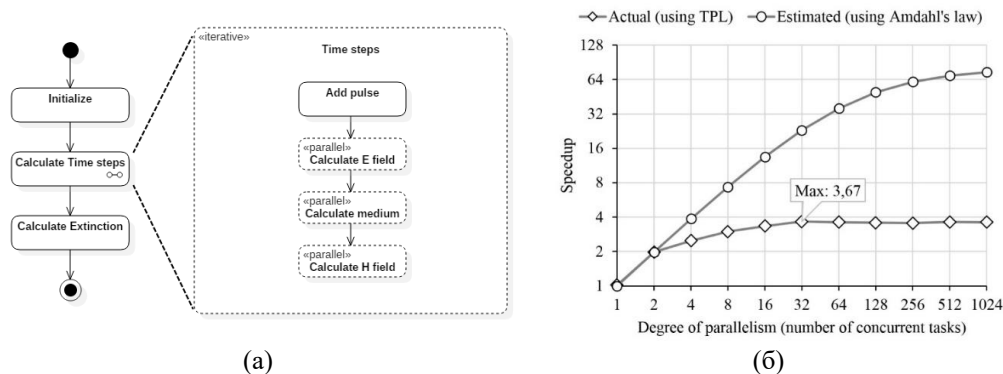


Рис. 4. Діаграма активності паралельного алгоритму FDTD (а) та порівняння обчисленого та фактичного його прискорення (б).

Недоліком такого обчислення є проміжки часу, коли потрібно дочекатися виконання всіх завдань, перш ніж перейти до наступного паралельного циклу, що може зайняти багато часу, особливо якщо домени розподілені неоднорідно, тобто час виконання завдання у доменах суттєво відрізняється.

Основною перевагою цієї версії паралельного алгоритму є відсутність необхідності використання примітивів синхронізації та очікування доступу до значень поля, так як використовується модель обчислень зі спільною пам'яттю.

На рис. 4, б показано оцінку прискорення, розраховане за законом Амдала, із серійною часткою f і фактичним прискоренням паралелізованого алгоритму FDTD за допомогою паралельної бібліотеки завдань. Розмір проблеми для моделювання FDTD включає кількість етапів часу (100), розмір обчислювального простору ($50 * 50 * 50$ клітинок) та кількість частот, що цікавлять (100). Експеримент проводився на процесорі Intel® Core™ i5-4590 з чотирма ядрами без використання технології HyperThreading.

Фактичне прискорення відповідає значенню оцінки при ступені паралелізму $S = 2$. Наступні прискорені темпи відрізняються від оцінок і продовжують збільшуватися до максимального значення 3,67 при $S = 32$ завдання. Подальше збільшення ступеня паралельності не призводить до збільшення швидкодії.

Різниця між оціночним та фактичним прискоренням може пояснюватися:

- обмеженнями закону Амдала, особливо часом на виконання операцій зв'язку та очікування;
- неоднорідним обчисленням в 3D-сітці – куля знаходилася всередині обчислювальної області, отже центральні комірки розраховувалися повільніше, ніж граничні;
- граничною кількістю ядер (4 ядра процесора для експерименту);
- продуктивністю пам'яті (наприклад, читанням і запису з загальних масивів, автоматичне збирання сміття) та ін.

Результати моделювання спектрів наночастинок

Основним результатом обчислень є значення електричного і магнітного полів у досліджуваній області при поширенні падаючої електромагнітної хвилі через область з різною діелектричною проникністю.

Для розрахунку перерізу поглинання срібної кулі використовувався об'ємно-базований метод RBRI – діелектрична проникність кожної кулі апроксимувалася моделлю Друде. З огляду на необхідну велику кількість кроків обчислення, ця модель є найбільш ощадливою щодо часу виконання і використання ресурсів комп'ютера. Як вже зазначалося у попередній частині огляду, модель Друде описується виразом (5). У ньому для срібла використовують наступні константи $\gamma = 0.048$ eV, $\omega_p = 9.01$ eV.

Розмір комірки обчислюваної області $\Delta z = \Delta x = \Delta y = 1$ нм.

Часовий крок $\Delta t = 0,167 \cdot 10^{-17}$ с.

Для кількісного опису розсіяння та поглинання світла частинкою необхідно розрахувати її реакцію на достатньо вузький гаусовий імпульс (ширина гаусового імпульсу $s = 7$ нм) за допомогою перетворення Фур'є.

За допомогою отриманих значення полів у частотній області отримаємо переріз екстинкції для срібної кулі. Розрахунок перетворення Фур'є і перерізу екстинкції проводився для довжин хвиль $\lambda = 200 \div 700$ нм з кроком 5 нм.

Панорамний вигляд спектру поглинання срібних кульок для різних радіусів представлено на рис. 5.

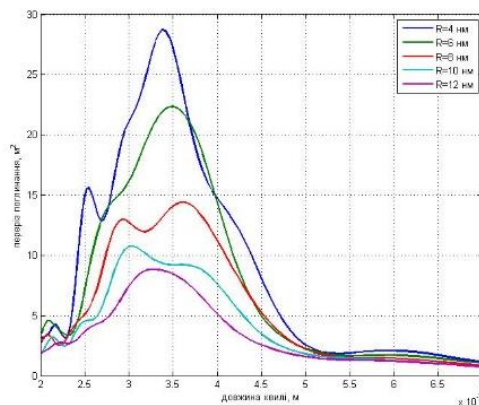


Рис. 5. Переріз поглинання срібної кульки для різних радіусів

З аналізу отриманих результатів випливає, що максимум смуги поверхневого плазмонного резонансу наночастинок срібла з радіусом 4 нм знаходиться в області 337 нм.

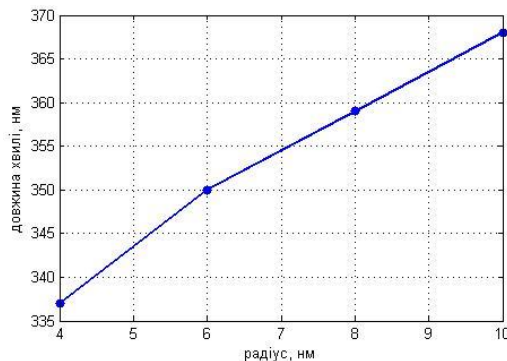


Рис. 6. Залежність положення піку поглинання від радіусу кульки

Зі збільшенням радіусу наночастинок максимум смуги зміщується в довгохвильову область (рис. 6) з коефіцієнтом $\frac{\partial \lambda}{\partial R} = 5,2$.

Спектральне положення максимуму смуги поверхневого плазмонного резонансу добре узгоджується з літературними даними [17].

Зі збільшенням радіусу частинок величина коефіцієнта поглинання зменшується. Така поведінка може бути пояснена тим, що в процесі взаємодії електромагнітної хвилі з наночастинок відбувається поглинання та розсіяння світла, сумарний ефект яких характеризується коефіцієнтом екстинкції. Його ріст з ростом радіуса частинок може бути зумовлений ефектом розсіяння світла.

З аналізу даних рис. 5 випливає існування структури. Для радіуса 4 нм існують вузькі максимуми при 215 нм, 254 нм, які виділяються чітко (крива 1 на рис. 5). Також у спектрі є додаткові піки, які виділялися методом похідної спектроскопії [18]. Мінімуми у другій похідній від спектру поглинання вказують на наявність піків у спектрі при певних довжинах хвиль (рис. 7).

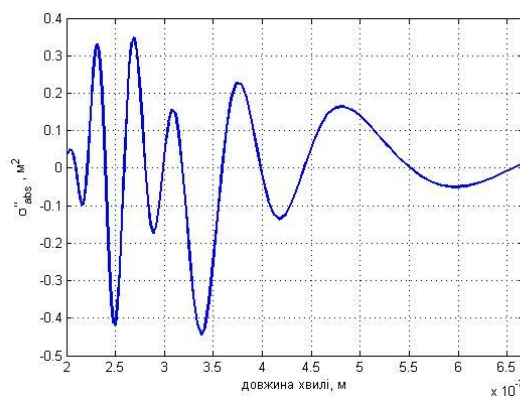


Рис. 7. Друга похідна від спектру поглинання для радіусу кульки 4 нм.

Природа додаткових короткохвильових смуг в спектрах поглинання може бути пов'язана із збудженням квадрупольних та інших вищих мод коливання газу вільних носіїв [17].

Інша причина виникнення цих смуг може бути пов'язана з інтерференцією падаючої електромагнітної хвилі та перевипромінених наночастиною хвиль, які відповідають власним модам частинки. Такий ефект досліджувався в роботі [19].

У методі FDTD використовуються граничні умови поглинання для обмеження обчислювального простору. Вони передбачають наявність шарів біля меж обчислювальної області, які повністю поглинають електромагнітну хвилю. На практиці при використанні таких шарів неможливо досягнути повного поглинання хвилі. Тому частина електромагнітної хвилі може відбиватися від межі обчислювальної області або від межі поглинаючого приграничного шару і повертатися назад в обчислювану область. Такі коливання можуть також бути причиною виникнення додаткових піків поглинання у короткохвильовій області.

На рис. 8 наведено переріз поглинання двох срібних кульок з радіусами 4 нм, які знаходяться на різній відстані D . Геометрія розрахунку показана на рис. 9,а.

Взаємодія між кульками приводить до появи додаткової смуги в області від 500 до 650 нм. Цей результат добре узгоджується з експериментальними даними [17] згідно яких взаємодія між наночастинками приводить до появи довгохвильової смуги поглинання (рис. 9,б).

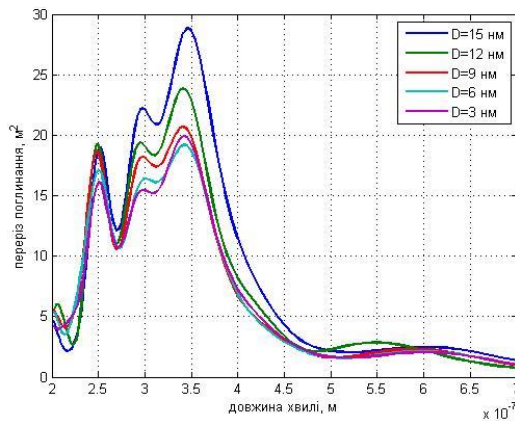
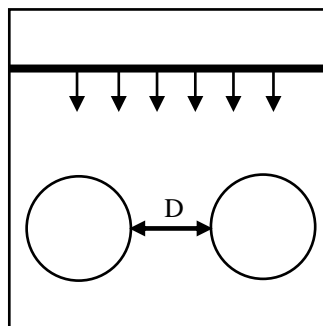
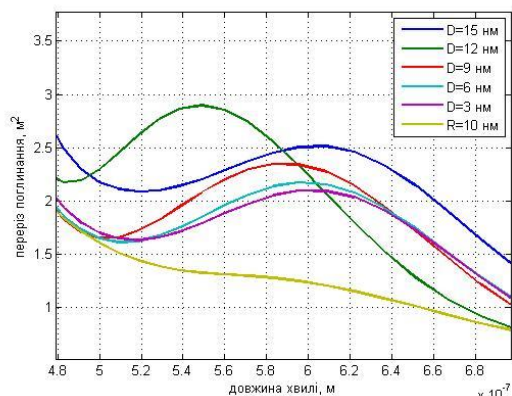


Рис. 8. Спектр поглинання двох срібних кульок для різних відстаней між ними.



(а)



(б)

Рис. 9. Розміщення двох металічних кульок в просторі на відстані D (а) та спектр поглинання двох срібних кульок для різних відстаней між ними (б).

Для порівняння на рисунку рис. 9,б також зображено також спектр поглинання однієї кульки радіусу 10 нм (крива б).

Розрахунок полів підсилення нанотонких плівок

Показано, що наноструктуровані плівки, одержані осадженням металу (наприклад, срібла або золота) на діелектричний субстрат, є чутливими структурами для моніторингу навколишнього середовища за рахунок поверхневого плазмонного резонансу [20, 21]. Наприклад, ці перспективні матеріали можуть бути використані для виявлення шкідли-

вих газів при навколишніх умовах. Але перед застосуванням слід вивчити багато чинників, що впливають на ефективність плівки. Комп'ютерне моделювання може бути важливим інструментом для пошуку оптимального параметра плівки. Зокрема, моделювання методом FDTD може допомогти зрозуміти взаємодію між вхідним світлом та надтонкою поверхнею плівок у присутності молекул газу.

Наноструктурована плівка зі срібла для комп'ютерних моделей, яка реалізується шляхом визначення тривимірного моделюючого простору, що містить порожні пікселі (вокселі) та поверхню підкладки. Ітераційний алгоритм Монте-Карло був реалізований для визначення вокселів, заповнених частинками срібла. 3D-розв'язувач FDTD був використаний для вивчення електромагнітних властивостей імітаційних плівок. Діелектрична проникність металу була змодельована за допомогою рівняння Друде з параметрами. Ми використовували граничні умови PML в методі FDTD для запобігання відбиття від меж обчислюваного простору при імітації плоских хвиль поширення.

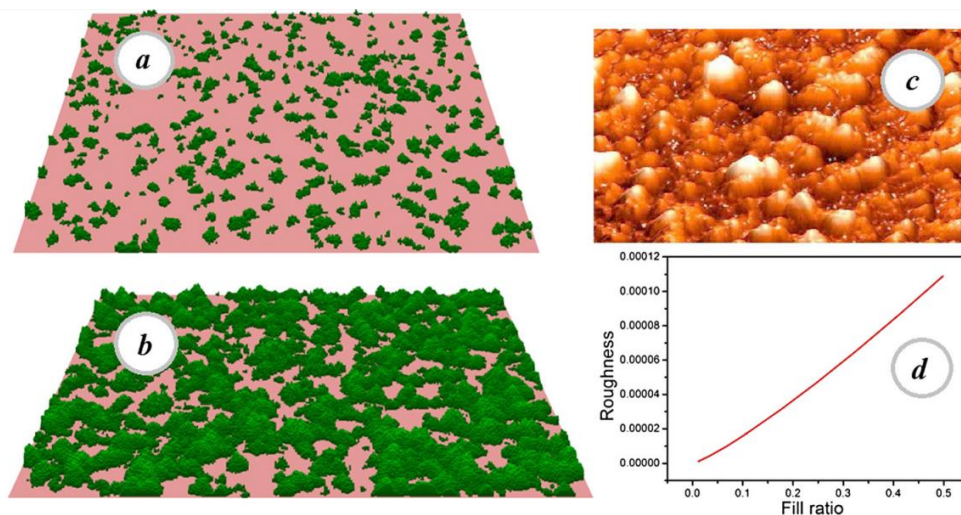


Рис. 10. 3D моделі морфології плівок коефіцієнт заповнення 0,15 (а) та 0,55 (б) і АСМ зображення реальної структури срібної плівки (с); імітація шорсткості плівки в залежності від співвідношення заповнення (d).

Для вивчення можливих підсилень інтенсивності локального поля в наноструктурованих плівках проведено розрахунки FDTD. Структурні особливості геометричних імітацій базувалися на вищенаведених моделях, створених комп'ютером. Товщина скляної підкладки становить 5 нм, розмір плівок, використовуваних у цих симуляціях, становив 200×200 нм. Розглянуто дві моделі з коефіцієнтом заповнення 0,15 та 0,55. Товщина плівки в симуляціях зростає з коефіцієнтом заповнення. У нашому випадку лінійний розмір елементарного блоку плівки становить 1 нм.

Отже, середня товщина імітаційних металевих острівців становить 2,5 нм для коефіцієнта заповнення 0,15 і 3,9 нм для коефіцієнта заповнення 0,55. Максимальна товщина плівки в симуляції може досягати до 5 нм і до 10 нм для 0,15 та 0,55 коефіцієнтів заповнення, відповідно.

Розраховані карти інтенсивності (рис. 11) вказують на те, що оптичні властивості плівок сильно залежать від їх локальної морфології. Є області локалізації сильно поси-
лених електромагнітних полів, які зазвичай називають "гарячими точками" (яскраві об-
ласті на рисунку **Помилка! Джерело посилання не знайдено.** відповідають точках, де
спостерігається сильне посилення).

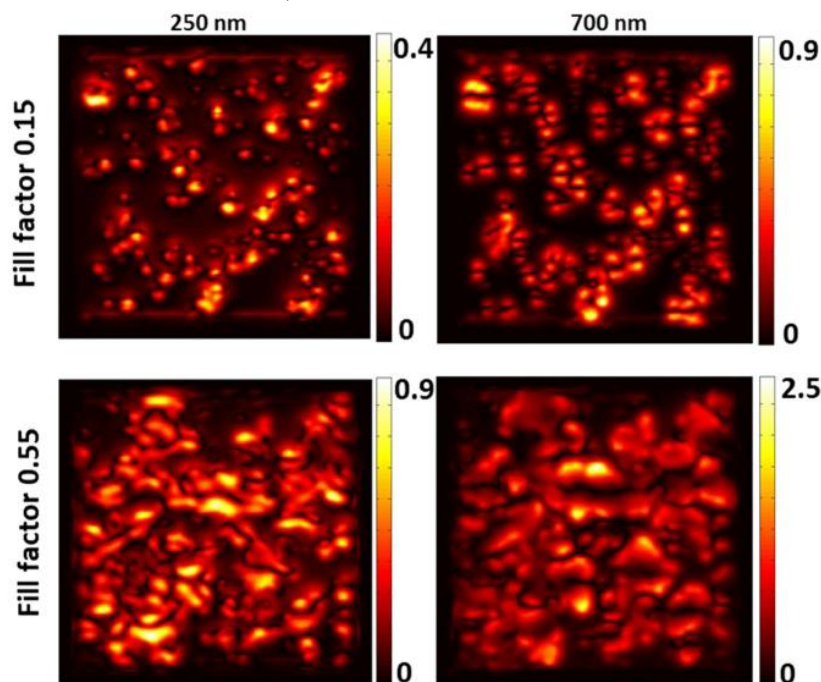


Рис. 11. Розрахована локальна інтенсивність, нормалізована щодо інтенсивності падіння на різних довжинах хвиль та при різних коефіцієнтах заповнення.

Слід зазначити, що в ультрафіолетовому світлі (250nm) спостерігається більша кі-
лькість інтенсивніших "гарячих точок", а при 700 nm інтенсивність розподіляється більш
рівномірно з меншим числом сильно посиленних регіонів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media / K. Yee // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. – 1996. – V. 14. – P. 302–307.
2. Hagness. S. Advances in Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method, 3rd ed. / S. Hagness, A. Taflov. – Boston: Artech House, 2005.
3. Berenger J. A. perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves / J. Berenger // Journal of Computational Physics. – 1994. – V. 114. – P. 185–200.
4. Huffman. D. Absorption and Scattering of Light by Small Particles / D. Huffman, C. Bohren. – NY: Wiley, 1998.
5. Leondes C. T. Digital control systems implementation and computational techniques / C. T. Leondes. – NY: Academic Press, 1996.

6. Венгер Є. Ф. Оптика малих частинок і дисперсних середовищ / Є. Ф. Венгер, А. В. Гончаренко, Л. М. Дмитрук. – Київ: Наукова думка, 1999.
7. Schneider J. B. Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method [Електронний ресурс] / J. B. Schneider. – 2010. – Режим доступу до ресурсу: <https://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/>.
8. Bracewell R. N. The Fourier Transform and Its Applications (3rd ed.) / R. N. Bracewell. – Boston: McGraw-Hill, 2000.
9. Sun W. Examination of Surface Roughness on Light Scattering by Long Ice Columns by Use of a Two-Dimensional Finite-Difference Time-Domain Algorithm / W. Sun, N.G. Loeb, Videen G., Q. Fu // Appl. Opt. – 2004. – V. 43. – P. 1957-1964.
10. Yang P. Finite-difference time domain method for light scattering by small ice crystals in three-dimensional space / P. Yang, K. N. Liou // J. Opt. Soc. Am. A. – 1996. – V. 13. – P. 2072-2085.
11. Goedecke G. Scattering by irregular inhomogeneous particles via the digitized Green's function algorithm / G. Goedecke, S. O'Brien // Appl. Opt. – 1988. – V. 27. – P. 2431-2438.
12. He Z. L. Study on High Performance of MPI-Based Parallel FDTD from WorkStation to Super Computer Platform / Z. L. He, K. Huang, Y. Zhang, Y. Yan, C. H. Liang // International Journal of Antennas and Propagation. – 2012. – V. 2012. – Article 659509.
13. Sen R. Developing Parallel Programs [Електронний ресурс] / R. Sen. – Режим доступу до ресурсу: <https://msdn.microsoft.com/en-us/library/cc983823.aspx>.
14. Barney B. Introduction to Parallel Computing. Retrieved from [Електронний ресурс] / B. Barney. – Режим доступу до ресурсу: https://computing.llnl.gov/tutorials/parallel_comp/.
15. Haseljić M. V. H. Comparison of speedups for computing π using .NET TPL and OpenMP parallelization technologies / M. V. H. Haseljić, A. Maksumić та N. Nosović // X International Symposium on Telecommunications (BIHTEL). – Sarajevo, Bosnia and Herzegovina, 27-29 Oct. 2014. – 14822913.
16. Amdahl G. M. Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large-Scale Computing Capabilities / G. M. Amdahl // AFIPS Conference Proceedings. – Atlantic City, New Jersey, USA, 18-20 April 1967. – P. 483-485.
17. Карпов С.В. Оптические и фотофизические свойства фрактально-структурированных золей металлов / С.В. Карпов, В.В. Слабко. – Новосибирск: СО РАН, 2003.
18. Дубровкин И.М. Производная спектрометрия. Теория, техника, применение / И.М. Дубровкин. – Ростов-на-Дону: Изд-во Рост. Ун-та, 1988.
19. Рыбин М.В. Каскады резонансов Фано в рассеянии Ми / М.В. Рыбин, И.С. Синев, К.Б. Самусев, М.Ф. Лимонов // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – С. 560-566.
20. Su S. Nanomaterials-based sensors for applications in environmental monitoring / S. Su, W. Wu, J. Gao, J. Lu, C. Fan // J Mater Chem. – 2012. – V. 22. – P. 18101 (10).
21. Fryxell G.E. Environmental applications of nanomaterials: synthesis, sorbents and sensors / G.E. Fryxell, G. Cao – London: Imperial College Press, 2007.

CALCULATION METHODS AT THE PLASMONIC. 3 FINITE DIFFERENCE TIME DOMAIN**I. Bolesta, A. Demchuk, O. Kushnir***Ivan Franko National University of Lviv,
Tarnavskogo Str. 107, UA – 79017 Lviv, Ukraine.
bolesta@lnu.edu.ua*

The article presents the third part of the review of computational methods that are actively used in the problems of plasmonics, namely, the method of integrating Maxwell's equations in the time domain (FDTD). The FDTD method is a direct implementation of time-dependent Maxwell equations for solving a temporary change in electromagnetic waves within a finite space containing an object of arbitrary geometry and composition. In practice, the space is discretized by a grid of the grid, and the existence of the scattering particle is determined by the proper assignment of the electromagnetic constants, including dielectric permittivity, permeability and conductivity over the grid points. Maxwell's Rolling Equations are subsequently discretized using convergence of approximation with a difference both in time and in space. The main advantages of this method lie in several aspects. First, the whole range-frequency band can only be obtained by one calculation in the time domain. Secondly, the simplicity of an explicit numerical FDTD scheme. The FDTD method can easily simulate complex objects. However, the universality of the method imposes high requirements for computing, so for real simulation it is necessary to optimize to improve the efficiency of the calculation. One of these optimization options is the parallelization of computations. It is shown that it is an efficient calculation within this model. To show the effectiveness of the application of FDTD in plasmonic problems, the original results of the authors of the simulation of the optical spectra of a metal ball and the pair of interacting metal balls of different sizes are presented. Also, the results of simulation of the local amplification of the electromagnetic field of light waves, obtained by the authors, are presented in the article. Both numerical experiments give results similar to those obtained on an experiment. The simulation of the interaction between particles can be used to solve the inverse problem, to determine the distance between metal particles from absorption spectra of plasmon material. The simulation shows the local amplification of the wave field of light, which was fixed by the authors and for real samples of metal films.

Key words: modeling, plasmonics, approximation, finite difference time domain method, paralleling, local fields.

*Стаття: надійшла до редакції 18.04.2019,
доопрацьована 06.05.2019,
прийнята до друку 08.05.2019.*