Д.С. Бутюгин[1.2], В.П. Ильин[1.2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН*

[2]*Новосибирский государственный университет*

Параллельные методы и технологии моделирования электродинамических полей

В работе описываются вычислительные методы и технологии моделирования трехмерных электромагнитных полей в частотной области, ориентированные на проектирование и оптимизацию приборов СВЧ-электроники. Алгоритмы основаны на конечно-элементных аппроксимациях высокого порядка и параллельных алгебраических решателях, основанных на методах декомпозиции областей. Эффективность разработанных алгоритмов иллюстрируется результатами численных экспериментов.

Ключевые слова: моделирование, электромагнитное поле, частотная область, методы конечных элементов, предобусловленные итерационные алгоритмы, параллельная декомпозиция областей

1. Введение

Проблема адекватного моделирования трехмерных электромагнитных полей в областях и широком диапазоне частот является чрезвычайно актуальной, поскольку связана с проектированием и оптимизацией непрерывно развивающихся приборов СВЧ-электроники. Вопросам разработки численных методов и программного обеспечения по данной теме посвящено огромное количество работ [1]–[5]. Основные изучаемые аспекты здесь – сеточные алгоритмы дискретизации исходных функциональных постановок, методы решения возникающих при этом комплексных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с разреженными знаконеопределенными матрицами сверхбольших порядков и очень плохо обусловленных, а также современные технологические проблемы высокопроизводительных вычислений и масштабируемого распараллеливания алгоритмов на многопроцессорных компьютерных системах (МКС) с общей и распределенной памятью, см. [6]–[7].

В п. 2 мы рассматриваем классические и обобщенные постановки решаемых физических задач, в п. 3 – реализованные нами конечно-элементные методы аппроксимации различных порядков точности (от первого до четвертого), а также предобусловленные итерационные методы решения СЛАУ, и в п. 4 – технологические вопросы программирования, распараллеливания и результаты численных экспериментов.

2. Классические и обобщенные постановки задач

Электромагнитное поле с гармонической зависимостью от времени может быть описано следующей формой системы уравнений Максвелла:

$$\nabla\times\vec{E} = -i\omega\dot{\mu}\vec{H}, \qquad \nabla\cdot(\varepsilon_r\vec{E}) = \rho/\varepsilon_0, \tag{1}$$

$$\nabla\times\vec{H} = i\omega\dot{\varepsilon}\vec{E} + \vec{J}, \qquad \nabla\cdot(\mu_r\vec{H}) = 0,$$

где комплексные электрическая и магнитная проницаемости имеют вид

$$\dot{\varepsilon} = \varepsilon_0 \varepsilon_r - i\sigma^e / \omega, \qquad \dot{\mu} = \mu_0 \mu_r - i\sigma^m / \omega. \tag{2}$$

Здесь i – мнимая единица, $\vec{E}$ и $\vec{H}$ – векторы напряженности электрического и магнитного полей соответственно, ω – круговая частота решения, $\vec{J}$ и ρ – плотности внешнего тока и объемного заряда соответственно, ε_0 и μ_0 –диэлектрическая и магнитная проницаемости вакуума, ε_r и μ_r – относительная диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, а σ^e и σ^m – электрическая и магнитная проводимости.

Полагая линейность задачи, то есть отсутствие зависимости $\dot{\varepsilon}$ и $\dot{\mu}$ от полей $\vec{E}$ и $\vec{H}$, а также отсутствие внешнего заряда и магнитной проводимости $\rho = 0$ и $\sigma^m = 0$, уравнения (1) несложно привести к комплексному векторному уравнению Гельмгольца

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \vec{E} \right) - k_0^2 \dot{\varepsilon}_r \vec{E} = -ik_0 Z_0 \vec{J}, \tag{3}$$

с дополнительным условием $\nabla \cdot \left(\dot{\varepsilon}_r \vec{E} \right) = 0,$ являющимся следствием закона сохранения заряда. Здесь $k_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$, $Z_0 = \sqrt{\mu_0 / \varepsilon_0}$, $\dot{\varepsilon}_r = \dot{\varepsilon} / \varepsilon_0$. Мы будем предполагать, что $k_0^2 << 1$ и k_0 не является Максвелловским собственным числом, то есть рабочая частота ω не является резонансной. Стоит отметить, что если хотя бы в одной подобласти $\sigma^e > 0$, то рабочая частота может быть любой, поскольку в такой системе отсутствуют резонансы.

Будем искать решение в области Ω с границей $S = S_1 \cup S_2$, на каждой из частей которой поставлено одно из следующих граничных условий:

$$\vec{E} \times \vec{n} \,|_{S_1} = \vec{E}_0 \times \vec{n}, \qquad \vec{H} \times \vec{n} \,|_{S_2} = 0, \tag{4}$$

где $\vec{n}$ – внешняя нормаль к границе. При $\vec{E}_0 = 0$ условие (2.7) соответствует идеальному электрическому проводнику, при $\vec{E}_0 \neq 0$ – волновому входу, а условие (2.8) соответствует идеальному магнитному проводнику.

Полагая область Ω состоящей из подобластей $\Omega = \bigcup\limits_k \Omega_k$, в каждой из которых физические параметры среды являются константными, введём на каждой из внутренних границ Γ с нормалью $\vec{n}$ условия сопряжения:

$$\vec{n} \cdot (\dot{\varepsilon}_1 \vec{E}_1 - \dot{\varepsilon}_1 \vec{E}_2) = 0, \;\; \vec{n} \times (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) = 0, \;\; \vec{n} \cdot (\mu_1 \vec{H}_1 - \mu_2 \vec{H}_2) = 0, \;\; \vec{n} \times (\vec{H}_1 - \vec{H}_2) = 0.$$

Рассмотрим теперь вариационную постановку рассмотренной задачи, для чего вводим соболевские функциональные пространства H^1, H^{rot}, H_0^1, H_0^{rot}, см. например [5].

$$\int\limits_\Omega \mu_r^{-1} \left(\nabla \times \vec{E} \right) \cdot \left(\nabla \times \vec{\psi} \right) d\Omega - k_0^2 \int\limits_\Omega \dot{\varepsilon}_r \left(\vec{E} \cdot \vec{\psi} \right) d\Omega = -ik_0 Z_0 \int\limits_\Omega \left(\vec{J} \cdot \vec{\psi} \right) d\Omega, \quad \forall \vec{\psi} \in H_0^{rot}. \tag{3}$$

Будем предполагать, что данная задача имеет единственное решение, обладающее теми свойствами, которые необходимы для корректности рассматриваемых далее алгоритмов.

3. Аппроксимационные и алгебраические методы

В работе используются неструктурированные тетраэдральные сетки. Рассматривается соответствующее разбиение расчетной области Ω на непересекающиеся тетраэдральные элементы. В каждом из тетраэдров вводятся неделековские базисные функции, соответствующие его степеням свободы. Пусть W_l – конечномерное пространство базисных функций порядка не выше *l*, конформное H^{rot}. В работе рассматриваются иерархические базисные функции, предложенные в [4]:

$$W_l = \widetilde{W}_1 \oplus \ldots \oplus \widetilde{W}_l, \qquad \widetilde{W}_1 = \widetilde{A}_1, \qquad \widetilde{W}_l = \widetilde{A}_l \oplus \nabla \widetilde{V}_l,$$

где $\widetilde{W}_i$ – инкрементальное подпространство с базисными функциями порядка *i*, $\widetilde{V}_i$ – инкрементальное подпространство со скалярными базисными функциями, конформными H^1, а $\widetilde{A}_i$ – инкрементальное подпространство с роторными базисными функциями.

Подпространства $\widetilde{V}_{l,0}$ и $\widetilde{W}_{l,0}$ функций с нулевыми следами на границе вводятся естественным образом, а подмножество $\widetilde{W}_{l,S}$ – как множество функций, у который коэффициенты разложения u^S по базисным функциям с ненулевым следом на S_1 принимают фиксированные значения, соответствующие первому краевому условию в (4).

Приближенное решение будем искать в виде $\vec{E}^h = \sum_j u_j^S \vec{\psi}_j^S + \sum_i u_i \vec{\psi}_i^0$. Вводятся матрицы соответствующих билинейных форм:

$$M_{i,j} = \int_\Omega \dot{\varepsilon}_r \left(\vec{\psi}_j^0 \cdot \vec{\psi}_i^0\right) d\Omega, \quad S_{i,j} = \int_\Omega \mu_r^{-1} \left(\nabla \times \vec{\psi}_j^0\right) \cdot \left(\nabla \times \vec{\psi}_i^0\right) d\Omega,$$

где базисные функции $\vec{\psi}_j^0, \vec{\psi}_i^0 \in W_{l,0}$. Вектор правой части определяется как

$$f_i = -ik_0 Z_0 \int_\Omega \left(\vec{J} \cdot \vec{\psi}_i^0\right) d\Omega - \sum_j u_j^S \int_\Omega \left(\mu_r^{-1} \left(\nabla \times \vec{\psi}_j^0\right) \cdot \left(\nabla \times \vec{\psi}_i^0\right) - \dot{\varepsilon}_r \left(\vec{\psi}_j^0 \cdot \vec{\psi}_i^0\right)\right) d\Omega.,$$

Тогда итоговая система принимает вид $\left[S - k_0^2 M\right] u = f$.

Данная СЛАУ является комплексной, неэрмитовой и довольно плохо обусловленной. Решение ее проводится итерационными методами в подпространствах Крылова. В качестве одного из таких методов используется FGMRES, минимизирующий невязку в подпространствах Крылова и допускающий переменное (например, приближенное) предобуславливание [6]. На системах с общей памятью в качестве такого предобуславливателя используется алгебраический мультисеточный предобуславливатель (AMG), построенный на основе иерархического вида базисных функций. При этом для «огрубления» задачи используются аппроксимации более низких порядков, а в качестве оператора сглаживания выступает распараллеленная итерация симметричной последовательной верхней релаксации SSOR.

Для решения СЛАУ на кластерах с распределенной памятью широко используются методы Шварца. Для их использования требуется предварительно выделить подобласти в задаче и поставить соответствующие подзадачи в каждой из подобластей. В данной работе предлагается два подхода к разбиению задачи на подобласти.

Первый из подходов является геометрическим. Алгоритм разбивает тетраэдральную сетку на перекрывающиеся подобласти. Для этого алгоритм рекурсивно применяет следующую процедуру для каждой из уже построенных подобластей. Для каждой из трех осей *Ox*, *Oy* и *Oz* все тетраэдры сортируются и находится плоскость, перпендикулярная соответствующей оси, которая разбивает все тетраэдры приблизительно поровну. Те тетраэдры, которые пересекаются с плоскостью, попадают в пересечение подобластей. Из трех осей для текущего разбиения выбирается та, которая приводит к наименьшему по числу тетраэдров пересечению. Такой алгоритм строит разбиение на 2^K подобластей, близкое к оптимальному. Ясно также, что в алгоритме можно увеличивать толщину пересечения.

Второй подход – алгебраическая 1-D декомпозиция. Данный метод использует обход в ширину по графу матрицы для упорядочивания всех вершин – неизвестных системы – по расстоянию от некоторой выбранной вершины. Вершины на одинаковом расстоянии объединяются во «фронты», а затем фронты объединяются в подобласти. При объединении фронтов используется бинарный поиск для максимизации минимальной подобласти, а само объединение производится «жадным» алгоритмом. Такой способ позволяет получить подобласти как с пересечениями, так и без них. Можно отметить, что в результате работы алгоритма мы получаем блочно-трехдиагональную матрицу.

Итерации Шварца требуют решения задач в подобластях. Решение предлагается осуществлять либо прямыми решателями для разреженных систем, например, PARDISO из библиотеки Intel® MKL, либо методом FGMRES с предобуславливателем AMG.

Аддитивный метод Шварца может использоваться либо в качестве предобуславливателя, в этом случае достаточно решения СЛАУ в подобластях, либо непосредственно в качестве итерационного метода решения исходной СЛАУ. В последнем случае для решения проблем со сходимостью можно воспользоваться Крыловским «ускорением». Оно заключается в замене стационарного процесса $x_{n+1} = Tx_n + g,$ на решение эквивалентной СЛАУ $[I - T]x = g$ методами в подпространствах Крылова.

Для ускорения сходимости итераций при большом числе подобластей используется алгебраический метод коррекции на грубой сетке, использующий иерархические базисные функции. Этот метод можно считать аналогом метода AMG с предобуславливателем Шварца в качестве оператора сглаживания.

4. Технологии программирования и численные эксперименты

Реализация описанных алгоритмов требует решения ряда технологических проблем, касающихся трех главных аспектов. Первый связан с программированием конечно-элементных аппроксимаций высокого порядка, представляемых очень громоздкими формулами. Эта задача была решена путем создания специализированной системы аналитических выкладок, обеспечивающей гибкое построение локальных матриц жесткости и масс. Второй момент – это кодирование алгебраических решателей с матрицами, представляемых в универсальных сжатых форматах. Здесь высокая производительность была обеспечена эффективным применением вычислительных инстументариев Intel MKL. И наконец, распараллеливание методов декомпозиции областей выполнялось средствами гибридного программирования в системах MPI и OpenMP.

В заключение мы приведем результаты двух численных экспериментов, один из которых иллюстрирует точность конечно-элементных решений высоких порядков на различных сетках, а второй – эффективность распараллеливания алгебраических решателей. Расчетной областью в обоих случаях является волновод с линейными размерами a=72, b=34, c=200 мм. Параметры задачи: $\dot{\mu}_r = 1$, $\dot{\varepsilon}_r = 1 - 0.1i$, частота $\omega = 6\pi \cdot 10^9$ Гц. Граничные условия: на грани z=200 мм задавалась касательная компонента поля $\vec{E}_0 \times \vec{n} = \vec{e}_y \sin(\pi x/a) \times \vec{n}$, а на остальных гранях – условие металлической стенки ($\vec{E}_0 \times \vec{n} = 0$). Аналитическое решение в данном случае: $\vec{E} = \vec{e}_y \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\frac{\sin \gamma z}{\sin \gamma c}$.

В табл. 1 приводятся ошибки $\delta\vec{E}$ решений указанной задачи при различных размерностях сетки и порядках базисных функций. Из результатов видно, что $\delta\vec{E} = O(h^l)$ при аппроксимации базисными функциями порядка l, здесь h – шаг сетки. В табл. 2 даны результаты параллельного решения СЛАУ на сетке 29x14x80 при общем количестве неизвестных N=3524883 и используемом числе подобластей $P = 2,4,\ldots,512$ (и соответсвенно, MPI процессов). В каждой клетке таблицы приведены значения: n – число внешних итераций, n_c – общее число итераций на грубой сетке, n_A – максимальное число итераций FGMRES в подобластях, t – время работы решателя в секундах.

Таблица 1: Ошибки численных решений

Сетка	h	l=1	l=2	l=3	l=4
4x2x10	20	2.7e-01	3.1e-02	2.1e-03	1.4e-04
8x4x20	10	1.3e-01	7.3e-03	2.8e-04	8.9e-06
15x7x40	5	6.7e-02	2.1e-03	4.3e-05	–

Таблицба 2: Результаты распараллеливания метода 3D декомпозиции

P	2	4	8	16	32	64	128	256	512
n	6	6	8	9	9	11	11	12	13
n_c	43	87	168	218	244	301	345	439	506
n_A	20	19	24	27	28	34	33	36	39
t	3.7e2	1.6e2	8.7e1	4.9e1	2.9e1	2.5e1	2.3e1	1.8e1	8.0e0

Библиографический список

[1] Greif C., Schötzau D. Preconditioners for the discretized time-harmonic Maxwell equations in mixed form. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 14:281–297, 2007.

[2] Grigoriev D., Il'in V. P., Salimov R. V., Tikhonov R. I. An efficient vector finite element Method for full-wave electromagnetic field simulation. *Proc. 40-th Inern. Symp. of Microwave Power Institute*, pages 179–183, Boston, 2006.

[3] Il'in V. P., Petukhov A. V. On numerical solution of the complex Helmholtz equation. *Rus. J. Num. Anal. And Math. Modell.*, 22(1):19-37, 2007.

[4] Ingelstrom P. A new set of *H*(*curl*)-conforming hierarchical basis functions for tetrahedral meshes. *IEEE Trans. On Micr. Th. And Tech.*, 54(1):106-114, 2006.

[5] Monk P. Finite Eelement Methods for Maxwell's Equations. Oxford University Press, 2003.

[6] Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems, second edition. SIAM, 2003.

[7] Reintzinger S., Schöberl J. An algebraic multigrid method for finite element discretizations with edge elements. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 9:223–238, 2002.