УДК 621.385: 537.533

Модели, алгоритмы и технологии решения задач электромагнетизма

В. П. Ильин

Рассмотрены математические модели, вычислительные методы и технологии для решения многомерных задач электромагнетизма, описываемых системой уравнений Максвелла при гармонической зависимости полей от времени. Приведен сравнительный анализ методов конечных объемов и конечных элементов с векторными базисными функциями различных типов и порядков для аппроксимации различных постановок исходной проблемы, а также алгебраических подходов к эффективному решению получаемых больших систем линейных уравнений. Дано описание технологических современных принципов программной реализации и распараллеливания алгоритмов на многопроцессорных вычислительных системах. Приведены примеры численных экспериментов для характерных методических задач.

PACS: 02.60.–x; 02.70.–c

Ключевые слова: уравнения Максвелла, гармонические поля, методы конечных объемов и конечных элементов, вычислительные технологии.

Введение

Под задачами электромагнетизма традиционно понимаются те, которые описываются системой уравнений Максвелла [1—4]. В данной работе рассмотрим случаи, в которых электромагнитные поля $\vec{E},\vec{H}$ являются гармоническими во времени (например, $\vec{E}(\vec{r},t)=\mathrm{Re}[\dot{\vec{E}}(r)e^{i\omega t}]$), т. е. задачи "в частотной области". При этом математическая постановка для комплексных амплитуд $\vec{E},\vec{H}$ формулируется в следующем виде (точки над векторами далее опускаются):

$$\nabla\times\vec{E}=-i\omega\dot{\mu}\vec{H};\quad \nabla\times\vec{H}=-i\omega\dot{\varepsilon}\vec{E}+\vec{j};$$
$$\nabla\cdot\left(\varepsilon_r\vec{E}\right)=\rho/\varepsilon_0;\qquad \nabla\cdot\left(\mu_r\vec{H}\right)=0, \tag{1}$$

где ω — круговая частота;
ε_0 и ε_r — электрическая постоянная и относительная диэлектрическая проницаемость среды, соответственно;
μ_r — относительная магнитная проницаемость;
$\vec{j}$ и ρ — плотности электрического тока и объемного заряда, соответственно.

При этом материальные параметры

$$\dot{\varepsilon}=\varepsilon_0\dot{\varepsilon}_r,\quad \dot{\varepsilon}_r=\varepsilon_r-i\varepsilon'_r,\quad \dot{\mu}=\mu_0\left(\mu_r-i\mu'_r\right)$$

являются комплексными величинами (μ_0 — магнитная проницаемость вакуума; i — мнимая единица; $\varepsilon_0\varepsilon'_r=\sigma_e/\omega$; $\mu_0\mu'_r=\sigma_m/\omega$, где σ_e и σ_m — электрическая и магнитная проводимости, соответственно).

При отсутствии объемного заряда и магнитной проводимости ($\rho=0$ и $\sigma_m=0$) система (1) сводится к векторному уравнению для электрического поля

$$\nabla\times\left(\frac{1}{\mu_r}\nabla\times\vec{E}\right)-\kappa\vec{E}=-ik_0z_0\vec{j};$$
$$\kappa=k_0^2\dot{\varepsilon}_r;\quad k_0=\omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0};\quad z_0=\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}, \tag{2}$$

Ильин Валерий Павлович, главный научный сотрудник.
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.
Россия, 630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6.
Тел.: (383) 330-60-62. Факс: (383) 330-87-83.
E-mail: ilin@sscc.ru

Статья поступила в редакцию 18 ноября 2009 г.

где дополнительно предполагается условие “бездивергентности” поля $\mathrm{div}\vec{E} = 0$.

Аналогичное уравнение может быть выведено и для вектора $\vec{H}$ после исключения электрического поля $\vec{E}$ из системы (1).

Решение уравнений (1) или (2) ищем в замкнутой области $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$, на различных участках внешней границы $\Gamma = \bigcup_{k=1}^{4} \Gamma_k$ которой типичными краевыми условиями являются следующие:

$$\begin{aligned} &\Gamma_1 : \vec{n} \times \vec{E} = 0; \quad \Gamma_2 : \vec{n} \times \vec{H} = 0; \\ &\Gamma_3 : \vec{E}_\tau = \vec{E}_0; \quad \Gamma_4 : \vec{E}_\tau = z_0 \left(\vec{H} \times \vec{n} \right), \end{aligned} \tag{3}$$

где Γ_k, $k = 1, 2, 3, 4$ соответствуют идеальному электрическому и магнитному проводникам, излучающей поверхности и свободному пространству;

$E_\tau = -\vec{E} \times \vec{n} \times \vec{n}$ — касательная составляющая вектора электрического поля на границе с внешней нормалью $\vec{n}$.

Данные краевые задачи описывают электродинамические поля в широком круге устройств микроволновой техники: в мобильных телефонах, микроволновых печах, различных антенных и радарных установках.

В приборах сильноточной электроники необходимо дополнительно рассматривать уравнения переноса зарядов и их возможных взаимодействий [3], однако моделирование таких электрофизических процессов представляет самостоятельную проблему, на которой в данной работе мы не останавливаемся. Отметим также, что данные математические модели актуальны и для разнообразных технологий геоэлектроразведки [5], отличающихся формально только другими диапазонами используемых частот.

В характерных практических приложениях расчетная область $\bar{\Omega} = \cup \bar{\Omega}_i$ состоит из подобластей $\bar{\Omega}_i$ с различными материальными свойствами, на внутренних границах Γ_i раздела которых выполняются условия сопряжения, предполагающие отсутствие поверхностных токов и зарядов

$$\vec{n} \times \left(\vec{E}^+ - \vec{E}^- \right) = 0, \quad \vec{n} \cdot \left(\mu_r^+ \vec{H}^+ - \mu_r^- \vec{H}^- \right) = 0, \tag{4}$$

где знаки "+", "–" — предельные односторонние значения поля на поверхности.

В подобласти Ω_i с постоянными электрофизическими параметрами при $\vec{j} = 0$ равенство (2) сводится к векторному комплексному уравнению Гельмгольца

$$-\Delta \vec{E} + \mu_r \kappa \vec{E} = 0, \tag{5}$$

которое выводится с помощью векторного соотношения

$$\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\,\vec{E} = -\Delta \vec{E} + \mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\vec{E}$$

и учета бездивергентности электрического поля.

Для исследования и решения электродинамических задач чрезвычайно эффективным является введение векторного и скалярного потенциалов в соответствии с соотношениями

$$\vec{B} = \mu_r \vec{H} = \frac{i}{\omega} \nabla \times \vec{A}, \quad \vec{E} = \vec{A} + \nabla V,$$

в результате чего мы получаем аналогичное (2) уравнение

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \vec{A} \right) - k_0^2 \dot{\varepsilon}_r \left(\vec{A} + \nabla V \right) = -i k_0 z_0 \vec{j}.$$

Для потенциалов $\vec{A}$ и V из соотношений (3), (4) выводятся краевые условия на внешней и внутренних границах.

Теоретические вопросы существования и единственности решения рассматриваемых задач в общем случае являются открытыми. Будем предполагать отсутствие резонансных частот, и что искомое решение определено однозначно, является кусочно-гладким (допускаются особенности на границах раздела сред и в углах) и гарантирует обоснованное применение рассматриваемых далее математических методов.

Современные практические требования к точности расчетов многокомпонентных электродинамических систем обусловливают применение трехмерных моделей и адаптивных неструктурированных сеток с высоким разрешением, насчитывающих до миллиона узлов и более.

Для аппроксимации векторных краевых задач в настоящее время получили наиболее универсальные методы конечных элементов (МКЭ) с векторными и скалярными базисными функциями различных порядков [6—8]. Однако во многих случаях успешное применение находят и экономичные методы конечных объемов (МКО, [9—11]), основанные на хорошо распараллеливаемых поэлементных технологиях.

Получаемые в итоге дискретизации системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) являются в общем случае комплексными и сводятся к вещественным системам с несимметричными разреженными матрицами, имеющими знаконеопределенный спектр и специальную блочную структуру. Их решение традиционными итераци-

онными алгоритмами представляет собой трудоемкую вычислительную проблему, реализации которой посвящено большое число публикаций [12—14].

Вопросы компьютерной ресурсоемкости становятся особенно критическими при автоматизации проектирования или оптимизации режимов работы и эксплуатационных характеристик приборов или устройств, когда требуется решать обратные задачи синтеза с многократными прямыми расчетами параметризованных краевых задач. Главным средством обеспечения расчетов в реальном времени являются распараллеливание алгоритмов и их отображение на архитектуру многопроцессорных вычислительных систем (МВС), а также применение и развитие современных вычислительно-информационных технологий для разработки высокопроизводительного программного обеспечения.

Данная работа построена следующим образом. Сначала дается краткое изложение аппроксимационных и алгебраических методов численного решения рассматриваемых проблем. Дальнейшее изложение посвящается демонстрации результатов численных экспериментов на серии методических тестовых примеров. Обсуждаются вопросы вычислительно-информационных технологий, программных реализаций и распараллеливания алгоритмов на МВС при решении ресурсоемких задач многовариантного математического моделирования, проектирования и оптимизации сложных электрофизических устройств.

Аппроксимационные и алгебраические методы

Успех наукоемкого моделирования в значительной степени определяется уровнем математической проработки применяемых алгоритмов, среди которых в рассматриваемых приложениях ключевыми являются качественная аппроксимация векторных трехмерных краевых задач с кусочно-гладкими границами и физическими свойствами, а также быстрое решение симметричных и несимметричных СЛАУ высокого порядка (до десятков и сотен миллионов). Данные проблемы получили существенное развитие в последнее десятилетие, и именно этим вопросам посвящен настоящий раздел.

Сеточные алгоритмы аппроксимации

Последовательно остановимся на методах конечных элементов и конечных объемов, а также дадим их основные сравнительные характеристики с практической точки зрения.

Рассмотренным выше классическим постановкам краевых задач для дифференциальных уравнений соответствуют эквивалентные (в определенном смысле) вариационные формулировки для обобщенных решений. Для “электрической” задачи *вариационное уравнение имеет вид*

$$\int\limits_{\Omega}\frac{1}{\mu_r}\left(\nabla\times\vec{E}\right)\cdot\left(\nabla\times\vec{\psi}\right)d\,\Omega-\int\limits_{\Gamma}\left(\frac{1}{\mu_r}\left(\nabla\times\vec{E}\right)\times\vec{n}\right)\times$$
$$\times\vec{\psi}\,d\,S-\int\limits_{\Omega}\kappa\left(\vec{E}\cdot\vec{\psi}\right)d\,\Omega=\int\limits_{\Omega}\left(\vec{F}\cdot\vec{\psi}\right)d\,\Omega,\quad\forall\vec{\psi}\in H_0^{\mathrm{rot}}, \tag{6}$$

а в терминах потенциалов — вид

$$\int\limits_{\Omega}\frac{1}{\mu_r}\left(\nabla\times\vec{A}\right)\cdot\left(\nabla\times\vec{\psi}\right)d\,\Omega-\int\limits_{\Gamma}\left(\frac{1}{\mu_r}\left(\nabla\times\vec{A}\right)\times\vec{n}\right)\times$$
$$\times\vec{\psi}\,d\,S-\int\limits_{\Omega}\kappa\left(\vec{A}\cdot\vec{\psi}\right)d\,\Omega=\int\limits_{\Omega}\kappa\left(\nabla V\cdot\vec{\psi}\right)d\,\Omega=\int\limits_{\Omega}\left(\vec{F}\cdot\vec{\psi}\right)d\,\Omega. \tag{7}$$

В вариационных постановках (6), (7) предполагается, что обобщенные решения принадлежат классу $H^{\mathrm{rot}}(\Omega)$, т. е. $\vec{E}$ или $\vec{A}$ и V, а также $\mathrm{rot}\,\vec{E}$, $\mathrm{rot}\,\vec{A}$ принадлежат классу функций $L_2(\Omega)$, интегрируемых с квадратом в области Ω. Здесь же $\vec{\psi}$ обозначает любую векторную пробную функцию из $H_0^{\mathrm{rot}}(\Omega)$ (принадлежащую классу $H^{\mathrm{rot}}(\Omega)$ и удовлетворяющую дополнительному условию равенства нулю на границах Γ_1, Γ_2). В работах [4, 6] показано, что представленные вариационные постановки имеют единственное решение для основных задач электромагнетизма.

Для аппроксимации краевой задачи расчетная область дискретизируется путем построения адаптивной сетки, т. е. разбиения Ω на непересекающиеся конечные элементы или объемы, которые могут иметь различные конфигурации, но для единообразия мы будем предполагать их тетраэдрами. При этом необходимо, чтобы вершины, ребра и плоские поверхности границы Г также являлись узлами, ребрами и гранями сетки. При наличии криволинейных граничных поверхностей будем для простоты их аппроксимировать плоскими сегментами.

Пусть $\vec{r}_j$, $j=1,\ 2,\ 3,\ 4$ — суть вершины некоторого тетраэдра T, а $u(e)$ и $v(e)$ — начальная и концевые точки какого-то его ребра e. В каждом из тетраэдров введем линейные базисные функции L_i, $i=1,\ 2,\ 3,\ 4$ и векторные базисные функции $\vec{\psi}_e$, ассоциируемые с соответствующими вершинами и ребрами:

$$L_i\left(\vec{r}_j\right)=\delta_{i,j};\quad\vec{\psi}_e=L_{v(e)}\nabla L_{u(e)}-L_{u(e)}\nabla L_{v(e)}.$$

Неизвестные векторные и скалярные функции в каждом тетраэдре аппроксимируются выражениями

$$\vec{E}^h = \sum u_i^E \vec{\psi}_i; \quad \vec{A}^h = \sum u_i^A \vec{\psi}_i; \quad V^h = \sum u_i^V L_i,$$

где u_i^E, u_i^A и u_i^V — подлежащие определению числовые коэффициенты.

Таким образом, конечно-мерную аппроксимацию искомого решения ищем из вариационной постановки (6) или (7), где в качестве $\vec{\psi}$ перебираются все введенные базисные функции. Например, из (6) получаем

$$\sum_i u_i^E \left[\int_\Omega \frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \vec{\psi}_j \right) d\Omega - \int_S \left(\frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \vec{\psi}_i \right) \times \vec{n} \right) \times \right. \\ \left. \times \vec{\psi}_j dS - \int_\Omega \kappa \left(\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j \right) d\Omega \right] = \int_\Omega \left(\vec{F} \cdot \vec{\psi}_j \right) d\Omega. \quad (8)$$

После вычисления необходимых интегралов в (8) (при этом функция $\vec{F}$ также может быть аппроксимирована с помощью базисных функций) получаем СЛАУ

$$A^E u^E = f^E, \quad A^E = \left\{ A_{i,j}^E \right\}, \quad u^E = \left\{ u_i^E \right\}, \\ f^E = \left\{ f_i^E \right\},$$

где A^E, u^E и f^E — квадратная матрица и векторы размерности N_e, равной количеству сеточных ребер.

Аналогично строим алгебраическую систему для потенциалов, которая в блочном представлении имеет вид

$$A^{AV} u \equiv \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} \cdot \left[A^E \right] \cdot \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^A \\ u^V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} \cdot \left[f^E \right] \equiv f^{AV},$$

где единичная матрица I и подвектор u^A имеют порядок N_e, размерность подвектора u^V равна числу узлов сетки N_n, а $G = \left\{ g_{i,j} \right\} \in R^{N_e, N_n}$ есть "реберно-узловая" матрица инцидентности: $g_{i,j} = -1$ или 1, если j есть номер начального или конечного узла на i-м сеточном ребре, и $g_{i,j} = 0$ — в противном случае.

Методы конечных объемов основываются на интегральных законах сохранения, которые в применении к векторному уравнению Гельмгольца (5) имеют вид

$$\int_{S_j} \frac{\partial E_x}{\partial \vec{n}} dv + \int_{V_j} \mu_r \kappa E_x = 0, \quad (9)$$

где V_j и S_j — объем и поверхность ячейки Дирихле—Вороного, соответствующей j-у узлу сетки;

$\vec{n}$ — внешняя нормаль к S_j.

Аналогичные соотношения выписываются для y-й и z-й компонент вектора $\vec{E}$.

Применяя те или другие методы аппроксимации производных и интегралов в (9) (с учетом условий (3), (4) на внешних и внутренних границах расчетной области), получаем сеточные системы уравнений различной степени точности. Размерность получаемых СЛАУ при этом равна $3N_n$, т. е. утроенному числу узлов.

Методы решения разреженных СЛАУ

После дискретизации краевой задачи с помощью МКЭ или МКО мы приходим к СЛАУ, которую записываем в форме

$$Au = f, \quad A = D - L - U, \quad (10)$$

где A — квадратная матрица порядка N;

D — диагональная (или блочно-диагональная) матрица;

L и U — нижняя и верхняя треугольные матрицы, соответственно.

В общем случае A есть комплексная матрица, у которой вещественная часть спектра может быть разных знаков, а u и f — это "супервекторы", компоненты которых в рассматриваемых постановках соответствуют различному физическому содержанию.

Переходя от комплексных к вещественным величинам

$$A = A^{re} + iA^{im}, \quad u = u^{re} + iu^{im}, \quad f = f^{re} + if^{im},$$

можно записать эквивалентную (10) вещественную СЛАУ

$$\begin{bmatrix} A^{re} & -A^{im} \\ A^{im} & A^{re} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^{re} \\ u^{im} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f^{re} \\ f^{im} \end{bmatrix}.$$

Современные эффективные итерационные процессы — это предобусловленные методы в подпространствах Крылова. В качестве примера рассмотрим предобуславливающую матрицу обобщенного алгоритма симметричной последовательной верхней релаксации (SSOR), который является формально частным случаем метода неполной факторизации, или неполного треугольного разложения (ILU), в применении к несимметричной СЛАУ

$$B = (G - L) G^{-1} (G - U), \quad G = \theta^{-1} D, \quad (11)$$

где θ — релаксационный параметр, подбираемый по условию минимизации числа обусловленности матрицы $B^{-1}A$;

D — матрица, предполагаемая невырожденной.

Остановимся на экономичном двустороннем предобуславливании Айзенштата, основанном на факторизации предобуславливающей матрицы (11):

$$B = L_B U_B, \quad L_B = (G - L)G^{-1/2}, \quad U_B = G^{-1/2}(G - U).$$

С ее помощью система (10) сводится к эквивалентному виду

$$\bar{A}\bar{u} = L_B^{-1} A U_B^{-1} U_B u = L_B^{-1} f \equiv \bar{f}, \quad \bar{u} = U_B u, \qquad (12)$$

где введены обозначения

$$\bar{u} = (I - \bar{U})G^{-1/2}u; \quad \bar{f} = (I - \bar{L})^{-1} G^{1/2} f; \qquad (13)$$
$$\bar{L} = G^{-1/2} L G^{-1/2}.$$

Предобусловленная матрица $\bar{A}$ подобна матрице $B^{-1}A$ и может быть записана в форме

$$\bar{A} = (I - \bar{L})^{-1} + (I - \bar{U})^{-1} - (2 - \theta)(I - \bar{L})^{-1}(I - \bar{U})^{-1}.$$

Ее преимущество заключается в том, что умножение $\bar{A}$ на произвольный вектор u осуществляется по формуле

$$\bar{A}u = (I - \bar{L})^{-1}(u + (\theta - 2)v) + v; \quad v = (I + \bar{U})^{-1} u,$$

которая требует практически столько же арифметических операций, что и умножение вектора на исходную матрицу A.

Если используется какой-либо "исходный" сходящийся стационарный итерационный процесс, то его можно записать в виде

$$u^{n+1} = Tu^n + g, \quad u^n \to u, \qquad (14)$$

где матрица перехода T имеет спектральный радиус меньше единицы и может соответствовать, например, неявному методу переменных направлений, методу декомпозиции и т. д. Тогда алгоритм (14) можно рассматривать как решение некоторой предобусловленной системы

$$\bar{A}u \equiv (I - T)u = g = \bar{f}, \qquad (15)$$

и применять к нему ускорение с помощью методов в подпространствах Крылова.

- *Если матрица $\bar{A}$ симметрична*, то решение предобусловленной системы (12) экономично реализуется с помощью метода сопряженных градиентов (CG):

$$r^0 = \bar{f} - \bar{A}u^0; \quad p^0 = r^0; \quad n = 1,2,\ldots;$$
$$u^n = u^{n-1} + \alpha_n p^{n-1}; \quad \alpha_n = \frac{(r^{n-1}, r^{n-1})}{(Ap^{n-1}, p^{n-1})};$$
$$r^n = r^{n-1} - \alpha_n \bar{A}p^{n-1}; \quad p^n = r^{n-1} + \beta_n p^{n-1};$$
$$\beta_n = \frac{(r^n, r^n)}{(r^{n-1}, r^{n-1})}.$$

В качестве условия окончания итераций по заданной точности ε выбирается соотношение

$$(r^n, r^n) \le (\bar{f}, \bar{f})\varepsilon^2, \quad \varepsilon << 1,$$

после выполнения которого восстанавливается исходное решение по следующей из (13) формуле $u^n = G^{1/2}(I - \bar{U})^{-1}\bar{u}^n$.

Данный метод является оптимальным в том смысле, что он минимизирует функционал $\Phi_0(r^n) = (\bar{A}^{-1}r^n, r^n)$ в подпространстве Крылова

$$K_{n+1}(\bar{r}^0, \bar{A}) = \mathrm{span}\{p^0, p^1, \ldots, p^n\} = \qquad (16)$$
$$= \mathrm{span}\{p^0, \bar{A}p^0, \ldots, \bar{A}^n p^0\}.$$

- *Если матрица $\bar{A}$ несимметрична*, то для решения (12) эффективно применимы методы полусопряженных направлений:

$$\bar{r}^0 = \bar{f} - \bar{A}\bar{u}^0; \quad p^0 = \bar{r}^0; \quad n = 0,1,\ldots:$$
$$\alpha_n^{(s)} = (\bar{A}^s \bar{r}^n, \bar{r}^n) / (\bar{A}p^n, \bar{A}^s p^n);$$
$$\beta_n^{(s)} = (\bar{A}^s \bar{r}^{n+1}, \bar{r}^{n+1}) / (\bar{A}^s \bar{r}^n, \bar{r}^n); \qquad (17)$$
$$p^{n+1} = \bar{r}^{n+1} + \sum_{k=0}^{n} \beta_{n,k}^{(s)} p^{n+1,l} = p^{n+1,l} + \sum_{k=0}^{n} \beta_{n,k}^{(s)} p^k;$$
$$l \in [0,1,\ldots,n]; \quad p^{n+1,0} = \bar{r}^{n+1};$$
$$p^{n+1,l} = p^{n+1,l-1} + \beta_{n,l-1} p^{l-1}; \quad p^{n+1} = p^{n+1,n},$$

где $s = 0,1$ — метод полусопряженных градиентов (SCG) или метод полусопряженных невязок (SCR), соответственно.

Алгоритм с $s = 0$ несколько экономичнее, но при $s = 1$ — более надежен, так как он в подпространствах (16) минимизирует длину вектора невязки, т. е. функционал $\Phi_1(r^n) = (r^n, r^n)$. Это свойство справедливо и для знаконеопределенной матрицы $\bar{A}$, если только она невырождена.

Методы (17) при большом числе итераций требуют слишком много памяти для хранения координирующих векторов $p^0, p^1, \ldots, p^n$. В таких случаях применяются модификации или с ограниченной ортогонализацией, т. е. использование только заданного количества m последних векторов $p^n, p^{n+1}, \ldots, p^{n+m+1}$, или с периодическим проведением рестартов, когда на итерациях с номерами

m, $2m$, ... невязка вычисляется не из приведенных рекуррентных соотношений, а по исходному уравнению $\left(r^n = \bar{f} - \bar{A}\bar{u}\,,\, n = m, 2m, \ldots\right)$ [8].

Метод SCR эквивалентен по скорости сходимости итераций известному методу обобщенных минимальных невязок (GMRES), но проще в реализации, поскольку не требует решения вспомогательной алгебраической системы с матрицей Хессенберга.

Отметим, что при использовании методов Крылова для решения СЛАУ (15) явного представления матрицы T и вектора g не требуется, поскольку в силу соотношений

$$r^0 = \bar{f} - \bar{A}u^0 = Tu^0 + f - u^0\,, \quad \bar{A}p^n = p^n - Tp^n$$

на каждом шаге (17) фактически требуется реализация одной "исходной" итерации по формуле (14).

Численные эксперименты

Продемонстрируем эффективность рассмотренных алгоритмов на трех характерных примерах, имеющих аналитические решения (табл. 1—3). Расчетная область во всех случаях есть параллелепипед $0 < x < 72$, $0 < y < 34$, $0 < z < 200$, где размеры даны в сантиметрах, а частота равна $f = 6\pi$ ГГц.

Поверхность $z = 200$ есть волновой вход с граничным условием $\vec{E}_\tau = \vec{e}_y \sin\dfrac{\pi x}{72}$, а остальные границы представляют собой идеальный электрический проводник с условиями $\vec{n} \times \vec{E} = 0$.

Таблица 1

Ошибки численных решений

N_p	Тест 1		Тест 2		Тест 3	
	МКЭ	МКО	МКЭ	МКО	МКЭ	МКО
16^3	$7{,}10\cdot10^{-1}$	$1{,}6\cdot10^{0}$	$2{,}6\cdot10^{-1}$	$1{,}0\cdot10^{0}$	$6{,}7\cdot10^{-1}$	$1{,}7\cdot10^{-1}$
32^3	$2{,}7\cdot10^{-1}$	$2{,}8\cdot10^{-1}$	$1{,}4\cdot10^{-1}$	$5{,}5\cdot10^{-1}$	$3{,}1\cdot10^{-1}$	$4{,}1\cdot10^{-2}$
64^3	$1{,}1\cdot10^{-1}$	$6{,}4\cdot10^{-2}$	—	$7{,}9\cdot10^{-2}$	$1{,}6\cdot10^{-1}$	$1{,}0\cdot10^{-2}$

Таблица 2

Число итераций для разных методов

N_p	Тест 1		Тест 2		Тест 3	
	МКЭ	МКО	МКЭ	МКО	МКЭ	МКО
16^3	173	53	1169	225	242	112
32^3	402	96	2240	356	509	216
64^3	—	154	—	531	1544	395

Относительная магнитная проницаемость везде равна $\mu_r = 1$, а электрические проницаемости заданы следующие: для первого и третьего тестов среда однородная ($\varepsilon_r = 1$ и $\varepsilon_r = 1 - 0{,}1i$, т. е. вещественная и комплексная, соответственно), а для второго – кусочно-однородная ($\varepsilon_r = 5$ для $z < 100$ и $\varepsilon_r = 1$ — для $z > 100$).

Точное решение для теста 2 (см. табл. 1, 2), например, имеет вид

$$\vec{E}\begin{cases} \vec{e}_y \sin\dfrac{\pi x}{72}\left(A_1, \sin\gamma_1 z + B_1\cos\gamma_1 z\right), & z > 100, \\ \vec{e}_y \sin\dfrac{\pi x}{72}\ A_2 \sin\gamma_2 z, & z < 100, \end{cases}$$

где постоянные A_1, A_2, B_1 определяются из граничных условий и $\gamma_k = \sqrt{k_0^2 \varepsilon_r^{(k)} \mu_r - \left(\pi/72\right)}$.

Таблица 3

Тест 3: Вычислительные ресурсы решателей

Сетка	N	SCR				Pardiso		
		n	T_1, с	T_4, с	MemGB	T_1, с	T_4, с	MemGB
16^3	59582	216	15,4	13,4	0,28	15,6	6,7	0,44
32^3	50009	411	664	495	3,73	865	302	5,78
64^3	4096766	988	—	17844	47,6	—	—	>64

Обозначения в табл. 3: N — порядок решаемой СЛАУ (рассматривается аппроксимация МКЭ для потенциалов $\vec{A}, V$); n — число итераций метода SCR; T_1, T_4 — времена счета в одно- и четырехпотоковом параллельном режиме; MemGb — объем оперативной памяти в гигабайтах, требуемой для реализации алгоритмов.

Расчеты проводились на сервере с четырьмя процессорами Intel Itanium 2, частотой 1,5 ГГц и общей памятью 64 Гбайт, со стандартной двойной точностью и критерием окончания итераций $\varepsilon = 10^{-7}$.

Аппроксимации методами конечных элементов и конечных объемов проводились на трех равномерных сетках с количеством сеточных параллелепипедов 16^3, 32^3 и 64^3, каждый из которых затем разбивался на шесть тетраэдров.

В табл. 1 приведены величины максимальных по области ошибок $\Delta E = \left|E^a - E^h\right|$ сеточных значений электрического поля E^h, вычисленных для МКЭ и МКО в центрах тяжести тетраэдров.

В табл. 2 приведено число итераций для решения СЛАУ, полученных из МКО и МКЭ. В последнем случае рассматривается постановка в терминах потенциалов (для системы относительно электрической напряженности число итераций гораздо больше).

Из табл. 2 видно, что для рассмотренных примеров число итераций в МКО существенно меньше, чем в МКЭ. С уменьшением h число итераций везде растет примерно линейно.

Данные табл. 3 иллюстрируют на третьем примере сравнительную ресурсоемкость итерационного метода SCR и прямого метода гауссовского исключения, реализованного в известной программе PARDISO из библиотеки Intel MKL (Mathematical Kernel Library, [15]).

Вопросы высокопроизводительных вычислительных технологий

Эффективное применение математических моделей и вычислительных методов для исследования, оптимизации и проектирования технических устройств возможно только при доведении теоретических разработок до уровня высокопроизводительного прикладного программного обеспечения, методологические основы которого составляют самостоятельную научную дисциплину достаточно широкого профиля [16]. Реализация же промышленного программного продукта, ориентированного на широкое использование конечными пользователями на современных многопроцессорных вычислительных системах, составляет уже содержание наукоемких производств. Остановимся коротко на ключевых технологических проблемах, решение которых представляет значительную составляющую профессиональной деятельности прикладного математика и программиста:

- *Геометрическое и функциональное моделирование*. Данные вопросы очень содержательны при расчетах трехмерных устройств со сложной структурной конфигурацией: криволинейные многосвязные границы с углами и разномасштабными деталями, различные материальные свойства сред с разрывами и сильными отличиями свойств физических коэффициентов. В этих случаях необходимая точность аппроксимационных алгоритмов обеспечивается только при учете данных особенностей, которые должны быть однозначно определены во входном пользовательском интерфейсе. Это требует высокого уровня интеллектуальности описания геометрических и функциональных объектов, особенно в связи с необходимостью их возможных модификаций при многовариантном моделировании, а также с наглядной графической визуализацией рассчитываемых устройств.

Современные программные технологии для этих целей базируются на объектно-ориентированных средствах. Аналогичные вопросы решаются, но недостаточным для моделирования образом, в многочисленных системах автоматизации проектирования (САПР или CAD, CAE, PLM и т. д.). С точки зрения практических приложений важным требованием к наукоемкому программному обеспечению является совместимость (экспорт — импорт) геометрических структур данных (ГСД) с “сапровскими” промышленными продуктами, использующими типовые форматы конструкторских документов.

- Самостоятельной актуальной и до конца не решенной является *проблема “хорошей” дискретизации расчетной области*, т. е. построения адаптивной сетки, от качества которой во многом зависит успех всего численного моделирования.

Адаптивность к особенностям геометрии и искомого решения означает, что вершины, ребра и поверхности границы должны являться (в идеале) сеточными узлами, ребрами и гранями, а “плотность” расположения узлов — соответствовать дифференциальным свойствам самих рассчитываемых неизвестных функций.

Соответствующие генераторы сеток основаны на использовании априорных теоретических оценок или апостериорной информации с построением изначальных грубых дискретизаций и последующих их уточнений. Получаемые сетки являются неструктурированными (нерегулярными), а во многих нестационарных задачах — и динамическими, так что вопросы информационного отображения их топологии представляют нетривиальную задачу.

Очень важен и другой аспект – анализ качества получаемой сетки и удовлетворение многочисленным существующим критериям. “Сухим остатком” данного этапа моделирования является сеточная структура данных (ССД), представляющая всю информацию о сеточных элементах и их взаимосвязях. Программное обеспечение построителей двух- и трехмерных сеток на мировом коммерческом рынке и в свободном доступе имеется в достаточном количестве, но вопросы возможного их эффективного использования в конкретных разработках для моделирования нужного класса задач (или реализации специальных алгоритмов) требуют квалифицированного решения.

- После построения сетки и ССД на основе единообразных поэлементных технологий могут быть реализованы *аппроксимации краевых задач с помощью МКЭ или МКО*. Их общая идея заключается в том, что коэффициенты и правые части формируемых СЛАУ выражаются с помощью поверхностных и объемных интегралов, которые естественным образом разбиваются на суммы интегралов по сеточным конечным элементам (объемам) и граням. В алгебраической интерпретации это означает, что “глобальные” матрицы и векторы правых частей разбиваются на суммы локальных подматриц и подвекторов, компоненты которых могут быть вычислены независимо и, следовательно, параллельно. При этом и локальные матрицы разбиваются на суммы матриц жесткости, масс, баланса и т. д., каждая из которых “отвечает” за характерный член дифференциального уравнения с учетом того или другого типа граничного условия.

Такая модульная структура позволяет легко конструировать расширяемую библиотеку программ-аппроксиматоров. Конечным результатом данного этапа является алгебраическая структура данных (АСД), полностью отображающая специ-

фику исходной дифференциальной задачи в значениях матричных и векторных компонент.

• *Решение СЛАУ* — обычно самый ресурсоемкий этап математического моделирования, поскольку здесь объем вычислений нелинейно растет с увеличением количества неизвестных, которое с возрастанием практических требований к точности достигает десятков и сотен миллионов.

При решении сеточных систем с разреженными матрицами сверхвысоких порядков хранятся только ненулевые элементы, число которых на каждой строке составляет несколько десятков. Для этого используются специальные сжатые форматы, общепринятые в международной практике, которые намного экономят оперативную память, но неизбежно увеличивают время счета из-за усложненного доступа к вещественным данным.

Универсальные алгебраические решатели достаточно широко представлены на рынке программного обеспечения и в свободном доступе. Можно назвать представительные наборы алгоритмов в SPARSEKIT, TRILINOS, а также во всеобъемлющей библиотеке NETLIB. Однако учет специфики рассматриваемых нами векторных краевых задач может значительно повысить производительность вычислительного эксперимента.

Один из самых эффективных приемов — это алгебраизированная версия многосеточного метода, в котором первое приближение быстро рассчитывается на достаточно грубой сетке, а затем последовательно уточняется.

• *Распараллеливание алгоритмов и их отображение на архитектуру современных МВС* с десятками, сотнями и тысячами процессоров — непременный атрибут осуществления крупномасштабного вычислительного эксперимента. Этап геометрического и функционального моделирования является малоресурсным (количество объектов здесь, как правило, ограничивается десятками), и его проще всего выполнять в однопроцессорном варианте. Точнее говоря, во избежание лишних коммуникаций, программы реализации данного этапа и формирование ГСД совместно с ФСД целесообразно копировать на всех процессорах, не вникая во внутренние детали. Если же говорить о пользовательном интерфейсе, то многокрасочная и многоплановая визуализация результатов расчета может “съесть” львиную долю машинного времени (для борьбы с этим уже появились графические многоядерные видеокарты), но мы на этих вопросах не останавливаемся.

Алгоритмы дискретизации области и формирования ССД простираются от самых тривиальных (для регулярных сеток) до очень трудоемких, когда приходится решать специальные нелинейные дифференциальные уравнения. Проблему оптимизации сетки можно довести до абсурда, когда она потребует больше вычислений и памяти, чем все решения исходной задачи с помощью какого-то непритязательного метода.

Этап аппроксимации дискретизованной задачи с помощью поэлементных технологий МКО или МКЭ, как уже отмечалось, идеально распараллеливается и требует объема ресурсов, пропорционального числу узлов сетки, что обеспечивает линейное ускорение расчетов с увеличением числа процессоров.

“Узким горлышком” распараллеливания процесса моделирования оказывается решение СЛАУ (если решаемая задача нелинейна, то она после линеаризации все равно сводится к последовательности линейных систем). Современные итерационные алгоритмы, рассмотренные в разделе "Аппроксимационные и алгебраические методы", основываются на двух принципах: предобуславливание матриц и ускорение в подпространствах Крылова.

Если второй аспект трудностей для распараллеливания не вызывает, поскольку связан только с векторными операциями, то эффективное предобуславливание, наоборот, сталкивается зачастую с необходимостью межпроцессорных обменов, резко снижающих быстродействие. Можно сказать, наиболее примитивные алгоритмы лучше распараллеливаются, и наоборот.

Главным средством распараллеливания больших задач является декомпозиция расчетной области на подобласти, каждой из которой сопоставляется свой процессор.

Основной метод решения здесь — итерации по подобластям, на каждой из которых одновременно рассчитываются подзадачи, а затем происходят необходимые обмены информацией между процессорами. При всем многообразии существующих подходов количество вычислений в сеточной подобласти пропорционально ее “объему”, а размер межпроцессорных пересылок — суммарным “поверхностям”, измеряемым в соответствующих числах узлов.

Увеличение производительности алгоритмов и программ зависит в данном случае от многих факторов: ускорения сходимости двухуровневого итерационного процесса, возможного совмещения коммуникаций с вычислениями, квалифицированного использования средств распараллеливания систем MPI, OpenMP и гибридного программирования.

Существенного ускорения можно добиться за счет оптимизаций кода и опций компилятора, не связанных напрямую с распараллеливанием (развертка циклов, использование штатных библиотечных функций и т. д.). В целом результатив-

ность распараллеливания оцениваются коэффициентами ускорения и эффективности использования процессоров:

$$S_p = T_1 / T_p, \quad E_p = S_p / p,$$

где T_p — время выполнения алгоритма (или решения задачи) на p-процессорах.

Идеальными случаями являются $S_p = p$ и $E_p = 1$, хотя за счет неоднородности памяти может быть достигнуто и сверхлинейное ускорение.

Немаловажным фактором использования МВС является просто интеграция ресурсов, которая позволяет решить гораздо большую задачу, нереализуемую в принципе на одном процессоре.

Заключение

Проведено комплексное рассмотрение математических моделей, вычислительных методов и технологий для решения актуальных многомерных задач электромагнетизма, описываемых системой уравнений Максвелла для гармонических во времени полей. Приведен обзор классических и обобщенных постановок для смешанных краевых проблем с типовыми физическими граничными условиями, а также способов их аппроксимации на адаптивных неструктурированных сетках методами конечных объемов и конечных элементов с векторными и скалярными базисными функциями. Описаны предобусловленные итерационные алгоритмы в подпространствах Крылова для решения получаемых комплексных СЛАУ с блочными разреженными матрицами высоких порядков. Изложены современные технологические принципы программной реализации описанных методов, включая этапы геометрического и функционального моделирования, построения адаптивных неструктурированных сеток для расчетных областей со сложной конфигурацией границ, аппроксимации исходных краевых задач, решения различных типов алгебраических систем на основе согласованных структур данных, а также распараллеливания алгоритмов на многопроцессорных вычислительных системах с иерархической распределенной и общей памятью. Эффективность предлагаемых подходов продемонстрирована результатами методических экспериментов для характерных физических задач.

Работа поддержана грантом РФФИ 08-01-00526, а также грантом ОМН РАН № 1.3.4.

Литература

1. *Григорьев А. Д.* Электродинамика и микроволновая техника. — Санкт-Петербург: Изд-во "Лань", 2007. — 704 с.

2. *Bossavit A.* Computational electromagnetism: variational formulations, complementarity, edge elements// Academic Press. Boston, 1998. — 352 p.

3. *Ильин В. П.* Численные методы решения задач электрофизики. — М.: Наука, 1985. — 334 с.

4. *Hiptmair R.* Finite elements in computational electromagnetism// Acta Numerica. 2002. P. 237—339.

5. *Жданов М. С.* Теория обратных задач и регуляризации в геофизике. — М.: Научный мир, 2007. — 710 с.

6. *Monk H.* Finite element methods for Maxwell's equations// Oxford University Press: New York, 2003. — 450 p.

7. *Соловейчик Ю. Г., Рояк М. Э., Персова М. Г.* Метод конечных элементов для решения скалярных и векторных задач. — Новосибирск: НГТУ, 2007. — 896 с.

8. *Ильин В. П.* Методы и технологии конечных элементов. — Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2007. — 370 с.

9. *Ильин В. П.* Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. — Новосибирск: ИМ СО РАН, 2000.

10. *Haber E., Ascher U. M.* Fast finite volume solution of 3D electromagnetic problems with highly discontinuous coefficients// SIAM J. Sci. Comp. 2001. V. 22. No. 6. P. 1943—1961.

11. *Il'in V. P., Petukhov A. V.* On numerical solution of the complex Helmholtz equation// Rus. J. Num. Anal. and Math. Modell. 2007. V. 22. No. 1. P. 19—37.

12. *Dyczii-Eslinger R., Peng G., Lee J.-F.* A fast vector-potential method using tangentially continuous vector finite elements// IEEE Trans. On Microwave Theory and Tech. 1998. V. 46. No. 6. P. 863—867.

13. *Greif C., Schotzau D.* Preconditioners for the discretized time-harmonic Maxwell equations in mixed form. — Numer. Linear. Alg. Applic. 2007. V. 14. P. 281—297.

14. *Nechaev O. V., Shurina E. P., Botchev M. A.* Multilevel iterative solvers for the edge finite element solution of the 3D Maxwell equation// Computers and Mathematics with Applications. 2008. V. 55. P. 2346—2362.

15. http://www.mvs.icc.ru/documentation/mkl.

16. HFSS User guide — High Frequency Structure Simulator// Ansoft Corporation Publ., Pittsburgh, 2004.

The models, algorithms and technologies for solution of electromagnetism problems

V. P. Il'in
Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, SBRAS,
6, Ac. Lavrentiev ave, Novosibirsk, 630090, Russia
E-mail: ilin@sscc.ru

The mathematical models, computational methods and technologies are considered for solving the multidimensional problems of electromagnetism, which are described by Maxwell equations for

the harmonic in time fields. The comparative analysis of finite volume and finite element methods with vector basis functions of different types and orders for approximation of various statements of the original problems is made, as well as algebraic approaches for efficient solution of the obtained large systems of linear equations. The modern technological principles of program implementation and parallelezation of algorithms at the multiprocessor computational systems are described. The examples of numerical experiments are presented.

PACS: 02.60.–x; 02.70.–c

Keywords: Maxwell equations, harmonic fields, finite volume and finite element methods, computational technologies.

Bibliography — 16 references. *Received 18 November 2009*