

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ СРЕДАМИ МЕТОДОМ FDTD

А.В. Горшков^{1,2}, А.В. Линев¹, А.В. Пикулин^{1,2}

¹*Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского*

²*Институт прикладной физики РАН*

Кратко описан метод конечных разностей во временной области для моделирования нелинейного взаимодействия лазерного излучения с наноструктурированными средами. Дана оценка эффективности и масштабируемости параллельной версии алгоритма для систем с общей и распределенной памятью. Описаны результаты переноса и подходы к оптимизации алгоритма для графических процессоров. Выполнено сравнение версий алгоритма для различных архитектур с точки зрения времени его работы.

Введение

В последнее время огромный интерес вызывают исследования искусственных сред, обладающих необычными электродинамическими свойствами [1-3]. Наиболее известный пример подобных сред – это вещества с отрицательным показателем преломления или среды Веселаго [4]. Современные нанотехнологии позволяют создавать композиционные материалы, содержащие включения разных масштабов и свойств, которые обладают заданными электродинамическими характеристиками (диэлектрическими и магнитными проницаемостями), коренным образом отличающимися от характеристик компонент [4].

Подобные искусственные среды или метаматериалы в настоящее время широко используются для создания безотражательных покрытий и различных оптических элементов (адаптивных линз, перестраиваемых зеркал, конвертеров и т.д.) [5-7].

Разработка эффективных методов генерации когерентного терагерцового излучения и манипуляции его характеристиками – одна из наиболее «горячих» проблем современной физики. Острая потребность в решении этой проблемы обусловлена перспективами широких практических приложений терагерцового излучения, среди которых важное место занимают спектроскопия и сенсорика биологических конститuentов, детектирование взрывчатых и ядовитых веществ по их терагерцовым «отпечаткам пальцев», неразрушающий контроль фармацевтических продуктов, ближнепольная терагерцовая микроскопия микрочипов и других объектов. Несмотря на взрывной характер роста числа работ по метаматериалам, лишь небольшое число групп в мире может реально изготавливать метаматериалы, тем более для такого коротковолнового диапазона, как терагерцовый. Как правило, для этого используется сложный литографический процесс. Очевидно, что ввиду большого числа технологических параметров, такие процессы требуют предварительного выполнения обширных и затратных численных расчетов.

Современные технологии позволяют также создавать искусственные полупроводниковые наноразмерные кристаллы – квантовые точки, составляющие элементную базу квантовой электроники и оптоэлектроники [1-3]. В последнее время активно разрабатываются методы легирования нанокристаллов, методы соединения их с омическими

контактами, развита технология встраивания нанокристаллов в диэлектрические матрицы, метод упаковки нанокристаллов в одно-, двух- и трехмерные структуры. Такие среды не только представляют огромный интерес для бурно развивающейся наноэлектроники, но и имеют более широкую область применимости. Например, кремниевые квантовые точки можно вводить в различные биологические объекты (протеины, мембраны, клетки и т.д.) для локальной диагностики и модификации их свойств.

Несмотря на имеющийся прогресс в проектировании и создании наноструктур для оптоэлектронных приложений существует большой круг проблем, которые еще ждут своего решения. Чтобы создать наноматериалы с заданными электрическими и оптическими свойствами, необходимо продолжить развитие теоретических методов моделирования нанообъектов, разработку методов симуляции реальных технологических процессов, конструирование наноструктур нового типа. Решение подобных задач возможно только при использовании суперкомпьютерных технологий, позволяющих осуществить численные эксперименты с огромными массивами атомов. Исходя из вышесказанного, наиболее важной и актуальной на данный момент является разработка методов, алгоритмов и комплекса программных средств для суперкомпьютерного моделирования, в частности моделирования нелинейных эффектов (многофотонное поглощение, пробой и др.), имеющих место при взаимодействии мощного лазерного излучения с микро- и наноструктурированными средами.

1. Метод конечных разностей во временной области

Одним из методов, широко используемых для моделирования нелинейного взаимодействия лазерного излучения с наноструктурированными средами, является метод конечных разностей во временной области (FDTD, Finite-Difference Time-Domain) [8]. В рамках данного проекта на основе метода FDTD были разработаны, теоретически и экспериментально исследованы алгоритмы суперкомпьютерного моделирования нелинейного взаимодействия лазерного излучения с наноструктурированными средами, учитывающие эффекты ионизации, двухфотонного поглощения и самофокусировки на нановключениях с керровской нелинейностью.

Метод FDTD позволяет проводить численное интегрирование уравнений Максвелла в средах с практически произвольной геометрией, благодаря чему используется для решения широкого класса электродинамических задач.

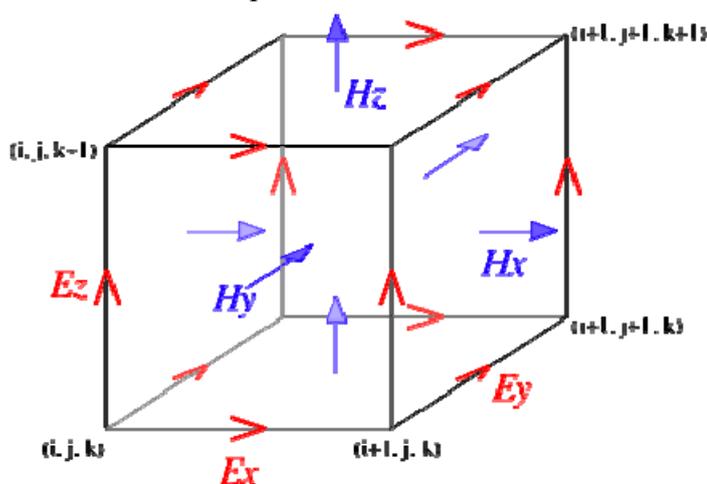


Рис. 1. Поля в ячейке сетки, используемой для расчетов методом конечных разностей во временной области

В уравнениях Максвелла изменение электрического поля E (частная производная) зависит от распределения в пространстве магнитного поля H (ротор). Аналогично, изменение поля H зависит от распределения в пространстве поля E .

На этом наблюдении основан алгоритм Йи (Yee) [9]. Сетки для полей E и H смещены по отношению друг к другу на половину шага дискретизации времени и по каждой из пространственных переменных. Конечно-разностные уравнения позволяют определить поля E и H на данном временном шаге на основании известных значений полей на предыдущем.

При заданных начальных условиях алгоритм Йи дает эволюционное решение во времени от начала отсчета с заданным временным шагом.

Для избегания краевых эффектов в конечной области симуляции (в т.ч. отражений волн от стенок) границы изолируются с помощью согласованных поглощающих слоев (PML, Perfectly Matched Layer) [10]. Используемый здесь PML представляет собой слой неизотропной среды с временной дисперсией, параметры которого подобраны так, чтобы одновременно обеспечить согласованность слоя с внутренним пространством и затухание волн при распространении их в таком слое.

2. Параллельный алгоритм для систем с общей памятью

Основная идея метода FDTD с вычислительной точки зрения состоит в следующем. Задается равномерная трехмерная сетка, узлы которой содержат некоторые начальные значения. На каждом шаге по времени происходит пересчет значения в каждом из узлов сетки на основании значений в соседних узлах, полученных на предыдущем временном шаге. Поскольку для вычисления значений на текущем шаге используются данные только предыдущего шага, каждый узел сетки может быть обработан независимо и параллельно.

На основании данной идеи был разработан параллельный алгоритм моделирования для многоядерных процессоров. Были проведены эксперименты по оценке производительности полученного алгоритма с целью оценки эффективности распараллеливания (рис. 2). Сравнивался последовательный и параллельный алгоритм, работающий на 4 ядрах процессора.

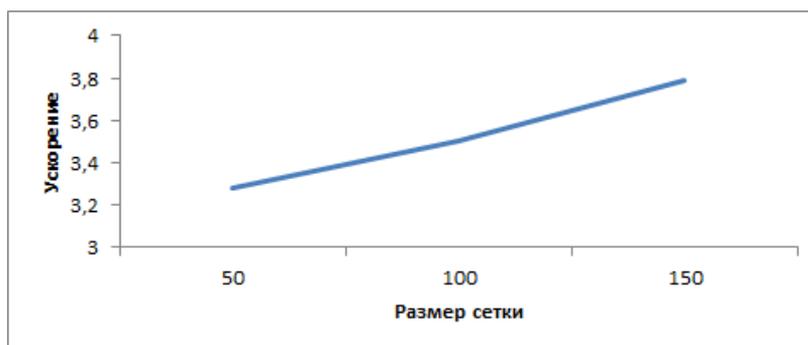


Рис. 2. Ускорение параллельного алгоритма моделирования методом FDTD (Intel Xeon L5630 (4 ядра), 24 ГБ RAM) 100 шагов по времени

Результаты проведенных экспериментов показывают, что эффективность распараллеливания в данной задаче существенно зависит от размеров сетки и при увеличении размера эффективность растет. Такой рост ускорения объясняется тем, что распараллеливание производится в рамках одного шага по времени и при увеличении размеров задачи растет время одного шага, а значит, уменьшается доля накладных расходов на распараллеливание.

Следующий шаг ускорения процесса моделирования – перенос алгоритма на графические процессоры. Рассматриваемая задача имеет достаточно большую степень па-

раллелизма, что позволяет эффективно задействовать все вычислительные ресурсы GPU. Обратить внимание следует только на работу с памятью. В качестве графического процессора для переноса использовались GPU от NVidia с архитектурой Fermi. Данная архитектура поддерживает автоматическое кеширование данных из глобальной памяти, поэтому основной идеей оптимизации в данном случае было размещение данных и порядок обхода узлов, при которых обеспечивается максимально эффективное использование кеш-памяти GPU. Результаты численных экспериментов приведены на рис. 3.

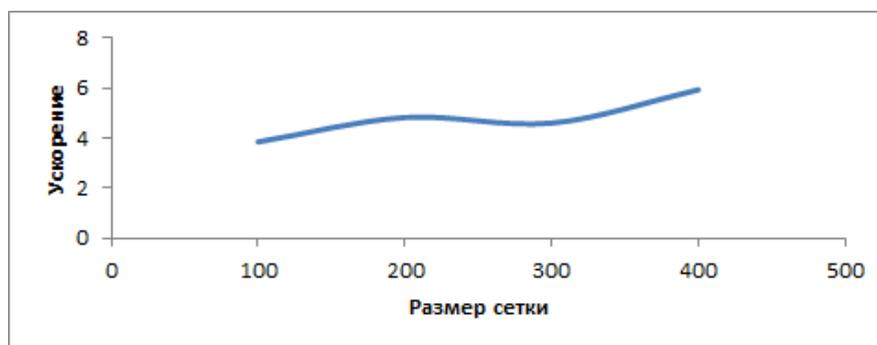


Рис. 3. Ускорение алгоритма моделирования на GPU относительно 4-ядерного процессора (Intel Xeon L5630 (4 ядра), NVidia Tesla M2070, 24 Гб RAM), 80 шагов по времени

3. Параллельный алгоритм для систем с распределенной памятью

Основная идея распараллеливания при работе на системах с распределенной памятью в данной задаче состоит в следующем. Трехмерная сетка разбивается на области по двум направлениям, каждая область хранится в рамках отдельного процесса. В дополнение к основной области расчета каждый процесс использует граничные узлы, которые необходимы для получения состояния системы в следующий момент времени.

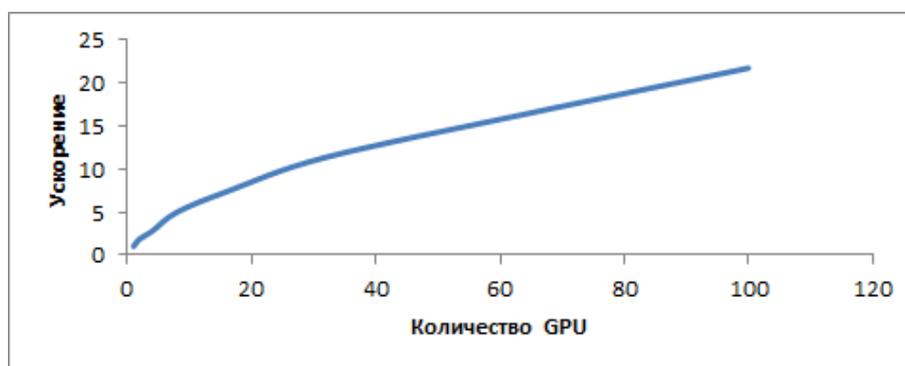


Рис. 4. Ускорение алгоритма моделирования на системах с распределенной памятью (2 процессора Intel Xeon X5570 (4 ядра), 24 Гб RAM, NVidia X2070), 100 шагов по времени, размер сетки 1000 элементов по каждому направлению

Алгоритм моделирования в данном случае состоит из следующего набора шагов для каждого момента времени:

- каждый процесс вычисляет новые значения узлов сетки в хранимой на нем части области;
- каждый процесс посылает часть значений своих узлов соседнему процессу в качестве граничных;
- каждый процесс принимает дополнительные граничные значения узлов от соседнего процесса; эти дополнительные значения используются только на следующем шаге для вычисления нового состояния системы, после чего удаляются.

Для обеспечения эффективных обменов данными необходимо использовать такую структуру хранения узлов сетки, чтобы для обмена границами по одному из направлений можно было брать данные, лежащие в едином блоке памяти, а по второму – лежащие в виде набора блоков. Это позволяет как существенно сократить количество операций обмена данными между процессами, так и уменьшить объем накладных расходов при копировании данных на GPU.

Результаты численных экспериментов, демонстрирующих эффективность и масштабируемость предложенного решения, приведены на рис. 4.

Заключение

В данной работе приведены результаты оценки производительности параллельных алгоритмов для моделирования нелинейного взаимодействия лазерного излучения с наноструктурированными средами. Показано, что эффективность рассматриваемого алгоритма на многоядерных процессорах приближается к максимальной при увеличении размера сетки. Показана применимость графических процессоров и систем с распределенной памятью для ускорения вычисления в данной задаче. Продемонстрирована линейная масштабируемость на гетерогенных кластерах с графическими процессорами на узлах.

Работа выполнена при организационной поддержке Лаборатории информационных технологий ННГУ.

Литература

1. Agranovich V.M. Linear and nonlinear wave propagation in negative refraction metamaterials / V.M. Agranovich, Y.R. Shen, R.H. Baughman, and A.A. Zakhidov // *Phys. Rev. B.* –2004. –Vol. 69. – P. 165112.
2. Zharov A. A. Nonlinear Properties of Left-Handed Metamaterials / A.A. Zharov, I.V. Shadrivov, and Yu. S. Kivshar // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – Vol. 91.– P. 037401.
3. Shvets G. Photonic approach to making a material with a negative index of refraction / G. Shvets // *Phys. Rev. B.* – 2003- Vol. 67. – P. 035109-1 – 035109-8.
4. Veselago V. G. Electrodynamics of materials with negative index of refraction / V. G. Veselago // *Phys. Usp.*- 2003. - Vol. 46. – No. 7. – P. 764.
5. Zhang S. Demonstration of metal-dielectric negative-index metamaterials with improved performance at optical frequencies / S. Zhang, W. Fan, K. J. Malloy, S. R. J. Brueck, N. C. Panoiu and R. M. Osgood // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2006. – Vol. 23. – P. 434.
6. Ziolkowski R. W. Ultrathin, metamaterial-based laser cavities / R.W. Ziolkowski // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2006. –Vol. 23. – P.451.
7. Korobkin D. Enhanced near-field resolution in midinfrared using metamaterials / D. Korobkin, Ya. Urzhumov, and G. Shvets // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2006. – Vol. 23. – P.468.
8. Taflove A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method / A. Taflove, S. C. Hagness. – 2nd ed. – Boston, London: Artech House, 2000.
9. Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* -1966. –Vol. 14, No. 3. – P. 302–307.
10. Berenger J. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // *Journal of Computational Physics.* -1994. –Vol. 114, No. 2. – P. 185–200.