

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ

Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого

Республиканский конкурс научных работ студентов
высших учебных заведений Республики Беларусь

**Моделирование распределения электромагнитного поля в ближней зоне
металлической частицы**

*Математика. Методы и алгоритмы вычислительной математики
математического моделирования для решения задач экономики, техники и
природоведения*

Кухаренко Андрей Александрович
магистрант 1-ого курса

Курочка Константин Сергеевич
зав. каф. “Информационные технологии”,
к. т. н., доцент

Гомель 2012

РЕФЕРАТ

Работа: 56 страниц, 17 рисунков, 3 таблицы, 54 источника, 2 приложения.

Ключевые слова: рассеяние света, однородная сфера, компьютерное моделирование, метод конечных элементов (МКЭ), нанокompозитные материалы, наночастицы, электромагнитные поля, программное обеспечение, математическое моделирование, уравнения Максвелла.

Объектом исследования является однородная металлическая сфера, имеющая размер меньший, чем длина электромагнитной волны.

Цель работы: разработка математической модели и программного продукта для компьютерного моделирования распределения электромагнитного поля вблизи наночастиц.

В процессе выполнения работы проведен анализ существующих методов исследования распределения электромагнитных полей, построена математическая модель на основе векторного метода конечных элементов, разработана программа для компьютерного моделирования (EMFFM) и определена спецификация входного мета-языка для нее (Input API).

Основными преимуществами (достоинствами) разработанного ПО являются:

- унифицированный и стандартизированный формат ввода данных;
- возможность задания автоматического сценария выполнения программы;
- реализация компьютерного моделирования с использованием векторного метода конечных элементов;
- возможность визуализации исследуемой геометрии.

Элементами научной новизны является применение векторного метода конечных элементов для компьютерного моделирования распределения электромагнитного поля.

Областью возможного практического применения является синтез наноматериалов с заданными свойствами.

СОДЕРЖАНИЕ

Обозначения и сокращения.....	4
Определения.....	4
Введение.....	5
1 Моделирование распределения электромагнитного поля в ближней зоне частиц.....	7
1.1 Рассеяние света малыми частицами.....	7
1.2 Моделирование процессов и явлений.....	8
1.3 Моделирование электромагнитных полей в наноструктурах.....	11
1.4 Существующее ПО для компьютерного моделирования распределения электромагнитного поля.....	13
1.5 Компьютерное моделирование рассеяния света малыми частицами.....	16
2 Конечноэлементное моделирование распределения электромагнитного поля.....	17
2.1 Конечноэлементный анализ векторных полей.....	17
2.2 Векторные конечные элементы.....	23
3 Программный комплекс EMFFM.....	27
3.1 Выбор средств для разработки программного обеспечения.....	27
3.2 Описание.....	29
3.3 Структура.....	30
3.4 Особенности реализации.....	31
4 Опытная эксплуатация и верификация разработанного программного обеспечения.....	34
4.1 Эксплуатация разработанного ПО.....	34
4.2 Верификация программного обеспечения.....	39
Заключение.....	41
Список использованных источников.....	42
Приложение А Численные методы решения уравнений Максвелла.....	46
Приложение Б L-координаты.....	55

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

ВМКЭ – векторный метод конечных элементов.

МКЭ – метод конечных элементов.

МКР – метод конечных разностей.

ООП – объектно-ориентированное программирование.

ММ – математическая модель.

ООП – объектно-ориентированное программирование.

ОС – операционная система.

ПК – персональный компьютер.

ПО – программное обеспечение.

ПП – программный продукт.

СЛАУ – система линейных алгебраических уравнений.

ЭМП – электромагнитное поле.

ABC (Absorbing Boundary Conditions) – поглощающие граничные условия.

CAE (Computer-Aided Engineering) – общее название для программ, предназначенных для решения различных инженерных задач: расчётов, анализа и симуляции физических процессов.

CDA (Coupled Dipole Approximation) – приближение взаимодействующих диполей.

DDA (Discrete Dipole Approximation) – приближение дискретных диполей.

FDTD (Finite-Difference Time-Domain) – метод конечных разностей во временной области.

FEM (Finite Element Method) – метод конечных элементов (МКЭ).

PML (Perfectly Matched Layer) – идеально согласованный слой.

VFEM (Vector Finite Element Method) – векторный метод конечных элементов (ВМКЭ).

ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Нанооптика – наука, занимающаяся исследованием оптических эффектов в наноструктурных объектах.

Наноплазмоника – раздел нанооптики, предметами которого являются оптические свойства металлических частиц и наноструктур, которые обусловлены колебаниями электронов проводимости относительно кристаллической решетки.

Нанотехнология – это совокупность методов и приемов структурирования вещества на атомном и молекулярном уровнях с целью производства конечных продуктов с заранее заданной атомной структурой.

ВВЕДЕНИЕ

Современное развитие науки и техники приводит ко все большему использованию нанокompозитов с частицами металлов.

В настоящее время они используются в качестве:

- оптических сенсоров элементов для селективного детектирования газообразных и (или) жидких веществ;
- спектральных фильтров покрытия;
- преобразователей и усилителей излучений;
- управляющих оптических и (или) оптоэлектронных элементов;
- приборов для регистрации оптических сигналов;
- и других.

Основным конструктивным элементом в нанотехнологии является металлическая частица сферической формы. Поэтому для получения новых материалов целесообразно изучить распределение электромагнитного поля на элементарных объектах. Это позволяет виртуально получать материалы с заданными свойствами, до проведения физических экспериментов, что в свою очередь позволит сэкономить значительные средства, время и деньги на синтез сложных нанокompозитов.

Основным предметом исследования наноструктурных объектов является электромагнитное поле (ЭМП), которое позволяет исследовать оптические и физические эффекты, возникающие при воздействии света.

Среди типовых задач моделирования распределения ЭМП можно выделить следующие:

- расчет распределения ЭМП оптического диапазона в 2D и 3D в ближней зоне металлической наночастицы;
- расчет распределения ЭМП в 2D и 3D в ближней зоне наноконцентраторов полей – ансамблей близкорасположенных наночастиц одинакового или разного состава, имеющих различную форму;
- расчет эффективных характеристик в 2D и 3D в объемах, содержащих большое количество наночастиц, распределенных по известному закону и имеющих различную форму;
- расчет распределения ЭМП, созданного одним или несколькими точечными источниками (диполями), вблизи металлических наночастиц.

В настоящее время не существует унифицированного метода и программного обеспечения (ПО), позволяющего решать все данные классы задач, что требует от исследователя не только

знаний в области физики и нанотехнологии, но и умение ориентироваться в современном ПО и быстро обучаться работе с ним.

Согласно вышеизложенного можно отметить следующее:

- существует необходимость в создании математической модели, позволяющей адекватно описать нанокompозиты с частицами металлов;
- необходимо выбрать наиболее универсальный метод, позволяющий решать задачи определенных классов;
- необходимо разработать программное обеспечение, которое будет реализовывать построенную модель.

1 МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В БЛИЖНЕЙ ЗОНЕ ЧАСТИЦ

1.1 Рассеяние света малыми частицами

Видимый свет порождает множество явлений и цветов, которые можно наблюдать. Изучение этих явлений и поисков ответов на вопросы о том, почему виден тот или иной цвет привело к тому, что были открыты законы геометрической оптики и квантовой физики. Вряд ли когда-нибудь свет наблюдается непосредственно от источника. В большинстве случаев он доходит до наших глаз различными путями. В таком случае говорят о рассеянии света. Оно часто может сопровождаться поглощением. Этим обусловлены многие видимые цвета, когда один из них наиболее эффективно отражается, а остальные поглощаются.

Рассеяние и поглощение изымают энергию из проходящего сквозь среду света, в следствие чего световой пучок затухает. Это явления носит название ослабления или экстинкции. При рассмотрении различных явлений и задач часто принимают величину ослабления как сумму рассеяния и поглощения.

При прохождении света через однородную среду он не рассеивается, только неоднородности вызывают рассеяние. В действительности всякая материальная среда содержит неоднородности, поскольку она состоит из молекул. Эффективность рассеивания зависит от их взаимного расположения. В особых случаях, когда молекулы расположены регулярно, рассеяния не происходит, а только уменьшение скорости распространения.

Рассеяние множеством частиц представляет собой сложную задачу. Поэтому, обычно рассматривают задачи, в которых частицы расположены на достаточном расстоянии, чтобы не влиять друг на друга. В таком случае можно рассматривать рассеяние одной частицей безотносительно к присутствию других.

Природа света была предметом гипотез и исследований достаточно долгое время, XIX век был полон открытий, связанных с оптикой и электромагнетизмом. Общее представление сводилось к тому, что свет есть нечто в эфире, подобное звуку в воздухе. Значимые шаги сделали Френель и Юнг, которые изучали явление дифракции и интерференции, в итоге чего Юнг (Young) дал объяснение поляризации. В те же времена Малюс (Malus) сделал открытие, говорящее о том, что при отражении света происходит его поляризация, а Брюстер (Brewster) измерил интенсивности поляризованных компонентов при различных углах падения. После этих открытий, Френель, на основании идеи Юнга о поперечных волнах смог вывести эти интенсивности теоретически из простого граничного условия, что тангенциальный компонент амплитуды колебаний должен быть непрерывен.

В конце XIX века Максвелл (Maxwell) вывел свою электромагнитную теорию, которая связала между собой электрические и оптические явления. Новая форма граничных условий требует непрерывности тангенциальной составляющей электрического поля. Многие задачи рассеяния, включая поляризационные эффекты, можно сформулировать как в терминологии Френеля (Fresnel), так и на современном языке посредством электрического и магнитного поля.

Типичной проблемой для того времени было рассеяние света однородным шаром, что подробно обсуждается в [1]. Она оказалась одной из весьма трудных проблем. Даже несмотря на то, что многие частные случаи были рассмотрены, полное решение было сформулировано Ми (Mie) только в 1908 г¹.

Период окончился появлением квантовой механики, при этом Дебай (Debye) был, возможно, последним, кто изучал проблемы рассеяния такого типа. После этого, большинство материалов и теорий появлялось в квантовой механике и других актуальных областях.

Таким образом, изучение оптических явлений привело к тому, что свет стал рассматриваться как электромагнитная волна. Для распространения света были установлены принципы Гюйгенса, Френеля. Позже Максвелл связал электромагнитные явления с оптическими, что привело к появлению методов, позволяющих численно решать полученные соотношения – уравнения Максвелла.

Исследование процессов и явлений, протекающих при воздействии электромагнитной (ЭМ) волны довольно затруднительно и в большинстве случаев нет возможности создать экспериментальные модели. Для решения подобных проблем применяют математическое и компьютерное моделирование, которое позволяет сократить расходы, создавать различные модели, определять необходимые параметры и проводить огромное число экспериментов, которые не могли бы быть произведены натурно. Моделирование часто используют при синтезе новых материалов [2].

1.2 Моделирование процессов и явлений

Моделирование – процесс исследования моделей, которые представляют собой абстрактные объекты, заменяющие реальные. Выделяют следующие виды моделирования:

- математическое;
- имитационное
- компьютерное.

¹ В действительности полное решение было получено на 9 лет ранее Лявом (A. E. Love, Proc. Lond. Math. Soc., 30, 308, 1899).

Выделяют предмет, объект и средства моделирования. Объект представляет собой изучаемую систему, которую описывают в виде модели. Предметом является некоторое явление или процесс, воздействие которого на объект является целью проведения моделирования. Средства представляют собой конкретные методы, которые могут быть применены для моделирования. Кроме того, присутствует и субъект или исследователь, который проводит выполнение всех этапов и проводит анализ результатов.

Моделирование всегда предполагает принятие допущений той или иной степени важности. При этом должны удовлетворяться следующие требования к моделям:

- *адекватность*, то есть соответствие модели исходной реальной системе и учет, прежде всего, наиболее важных качеств, связей и характеристик. Оценить адекватность выбранной модели, особенно, например, на начальной стадии проектирования, когда вид создаваемой системы ещё неизвестен, очень сложно. В такой ситуации часто полагаются на опыт предшествующих разработок или применяют определенные методы, например, метод последовательных приближений;

- *точность*, то есть степень совпадения полученных в процессе моделирования результатов с заранее установленными, желаемыми. Здесь важной задачей является оценка с требуемой точностью результатов и имеющейся точности исходных данных, согласование их как между собой, так и с точностью используемой модели;

- *универсальность*, то есть применимость модели к анализу ряда однотипных систем в одном или нескольких режимах функционирования, что позволяет расширить область применимости модели для решения большего круга задач;

- *целесообразная экономичность*, то есть точность получаемых результатов и общность решения задачи должны увязываться с затратами на моделирование. Удачный выбор модели, как показывает практика – результат компромисса между отпущенными ресурсами и особенностями используемой модели;

- *расширяемость*, которая предусматривает возможность модификации модели и введение в нее новых параметров и свойств.

В зависимости от сложности и степени теоретического обоснования используются следующие модели: “белый ящик”, “черный ящик”, “серый ящик” [2].

Если физические процессы, протекающие на рассматриваемых объектах, описываются множеством нелинейных уравнений, когда теоретическая основа для расчетных моделей является прозрачной, построенной на известных физических и химических законах и свойствах, то такая модель может быть представлена как “белый ящик” [2].

Модели ”черный ящик” основаны на наличии экспериментальных данных и не требуют никакой априорной информации. Они достаточно хорошо изучены и просты для работы в реальном масштабе времени. В то же время такие модели должны регулярно обновляться с появлением новых экспериментальных данных.

Моделирование на основе “черного ящика” иногда используется как синоним понятия идентификации системы. Иными словами, идентификация системы – это теория разработки математических моделей динамических систем по результатам измерений.

Модель “серый ящик” является сбалансированной системой, которая по своей сущности не что иное, как компромисс между сложностью модели “белый ящик” и возможностями модели “черный ящик” по прогнозированию процессов.

Одним из существенных понятий в модели “серый ящик” являются так называемые базисные элементы, включающие имеющуюся информацию о поведении системы в виде простых аналитических функций и выражений. Вид этих элементарных функций увязывается с ее поведением. Базисные элементы могут иметь в модели системы разнообразные формы и подвергаться изменениям (мутациям).

Важно обратить внимание на то, что выбор методов моделирования очень сильно зависит от типа исследуемой системы и задачи, для которой эта модель создается. Непрерывные системы лучше всего моделируются дифференциальными уравнениями, в случае необходимости дополненными алгебраическими связями.

1.1.1 Для моделирования сложных систем и объектов сегодня применяют компьютерное моделирование, которое позволяет значительно сократить расходы на проведение исследований и уменьшить время получения результата. Оно построено на основе алгоритмического представления моделей, что обусловлено необходимостью хранения информации в дискретном виде, воспроизводимом на компьютере.

Большинство применяемых аналитических средств, таких как дифференциальное исчисление, больше всего подходят для исследования линейных задач. Формально это уравнения, в которые переменные входят только в первой степени; реально они описывают процессы, которые протекают одинаково при разных воздействиях. Область применения линейных уравнений необычайно широка. Она охватывает классическую и квантовую механику, электродинамику и теорию волн. Для их решения разработано достаточно методов, которые обладают высокой эффективностью.

Однако множество природных процессов – нелинейны, так что малые изменения одной величины могут привести к неожиданно большим изменениям в другой и будет иметь место

качественно иное поведение системы. Поскольку нелинейные задачи удается решать аналитическими методами только в редких случаях, то появляется необходимость в численных методах, позволяющих исследовать нелинейные явления.

1.3 Моделирование электромагнитных полей в наноструктурах

Исследования наноструктурных систем показали, что для их изучения можно применять электромагнитное поле, которое описывается уравнениями классической электродинамики. В частности, при рассмотрении оптических свойств они также могут использоваться. К этому обстоятельству приводит и тот факт, что распространение света можно описать как электромагнитную волну, с той лишь разницей, что элементарными частицами для света принимаются фотоны, а для электродинамики электроны.

При исследовании наночастиц необходимо учитывать их особые свойства [3, раздел 3], для которых были выявлены аналитические зависимости. Здесь находят свое применение теории Друде-Зоммерфельда [3], Друде-Лоренца [4], которые описывают влияние частоты волны на электрическую постоянную $\varepsilon(\omega)$. По мере увеличения частоты света поглощение увеличивается, и в оптической области это приближение оказывается не вполне адекватным. В ультрафиолетовой области некоторые металлы оказываются прозрачными (Na), в то время как другие (Ag, Au) из-за межзонных переходов являются сильно поглощающими. Физической причиной столь сильной зависимости диэлектрической проницаемости от частоты является изменение в фазе индуцированных в металле токов относительно фазы падающего света в области частот, близких к так называемой плазмонной частоте. Такие эффекты рассматриваются в наноплазмонике [3].

Классическая электродинамика [5, 6], основанная на уравнениях Максвелла, лежит в основе многочисленных приложений электро- и радиотехники, СВЧ и оптики. До настоящего времени не было обнаружено ни одного эффекта, который потребовал бы видоизменения уравнений. Они оказываются применимы и в квантовой механике, когда рассматривается движение, например, заряженных частиц во внешних электромагнитных полях. Поэтому уравнения Максвелла [3] являются основой микроскопического описания электромагнитных свойств вещества.

В дифференциальной форме уравнения Максвелла можно записать в виде:

- теорема о циркуляции магнитного поля

$$\frac{d}{dt} D(x, t) + J(x, t) = \nabla \times H(x, t), \quad (1.1)$$

- закон индукции Фарадея

$$\frac{d}{dt} B(x, t) = \nabla \times E(x, t), \quad (1.2)$$

– закон Гаусса

$$\nabla \cdot D(x,t) = \rho, \quad (1.3)$$

– закон Гаусса для магнитного поля

$$\nabla \cdot B(x,t) = 0, \quad (1.4)$$

где $E(x,t)$ – электрическое поле;

$H(x,t)$ – вспомогательное магнитное поле (часто его называют просто магнитным полем);

$D(x,t)$ – электрическая индукция;

$J(x,t)$ – плотность электрического тока (плотность тока проводимости);

ρ – плотность стороннего электрического заряда.

В среде сторонние электрические и магнитные поля вызывают поляризацию и намагничивание вещества, которые макроскопически описываются соответственно вектором поляризации P и вектором намагниченности M вещества, и вызваны появлением связанных зарядов ρ_b и токов j_b . В результате поле в среде оказывается суммой внешних полей и полей, вызванных связанными зарядами и токами:

$$\rho_b = -\nabla \cdot P, \quad (1.5)$$

$$j_b = \nabla \times M + \frac{\partial P}{\partial t}. \quad (1.6)$$

Поляризация P и намагниченность вещества M связаны с векторами напряжённости и индукции электрического и магнитного поля следующими соотношениями:

$$D = \varepsilon_0 E + P, \quad (1.7)$$

$$B = \mu_0 (H + M), \quad (1.8)$$

где ε_0 – диэлектрическая проницаемость в вакууме (электрическая постоянная); μ_0 – магнитная постоянная.

Уравнения Максвелла содержат в себе законы сохранения заряда и энергии электромагнитного поля. Источники полей (ρ, J) не могут быть заданы произвольным образом. Уравнение непрерывности для зарядов и токов может быть записано в виде:

$$\nabla \cdot J + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (1.9)$$

На практике в материальных уравнениях обычно используются экспериментально определяемые коэффициенты (зависящие в общем случае от частоты электромагнитного поля), которые собраны в различных справочниках физических величин.

В слабых электромагнитных полях, сравнительно медленно меняющихся в пространстве и во времени, в случае изотропных, неферромагнитных и несегнетоэлектрических сред справедливо приближение, в котором поляризуемость и намагниченность линейно зависят от приложенных полей:

$$P = \varepsilon_0 \chi_e E, \quad (1.10)$$

$$M = \chi_m H, \quad (1.11)$$

где введены безразмерные константы: χ_e – диэлектрическая восприимчивость и χ_m – магнитная восприимчивость вещества (в системе единиц СИ эти константы в 4π раз больше, чем в гауссовой системе СГС). Соответственно, материальные уравнения для электрической и магнитной индукций записываются в следующем виде:

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon E = \varepsilon_0 (1 + \chi_e) E, \quad (1.12)$$

$$B = \mu_0 \mu H = \mu_0 (1 + \chi_m) H, \quad (1.13)$$

где ε – относительная диэлектрическая проницаемость; μ – относительная магнитная проницаемость.

Размерные величины $\varepsilon_0 \varepsilon$ (в единицах СИ – Ф/м) и $\mu_0 \mu$ (в единицах СИ – Гн/м), возникающие в системе СИ, называются абсолютная диэлектрическая проницаемость и абсолютная магнитная проницаемость соответственно.

Рассмотренные выше уравнения относятся к “классическим” материальным уравнениям. В настоящее время активно развиваются технологии изготовления искусственных, наноструктурных материалов, которые получили название – метаматериалы [5, 8]. В них материальные соотношения могут иметь более сложный, чем представленный в выражениях (1.12) и (1.13) вид. Такие материалы еще до конца не исследованы, но исследования ведутся почти во всех странах мира.

Для решения уравнений Максвелла было разработано достаточно методов, но основной популярностью среди них пользуются FDTD, DDA, Т-матрицы. Эти методы позволяют проводить моделирование распределения ЭМП и позволяют проводить процесс на компьютере. Применение методов описано в [4, 8 – 41]. Краткое описание методов приведено в приложении А.

1.4 Существующее ПО для компьютерного моделирования распределения электромагнитного поля

Для решения задач о распределении ЭМП существует целый ряд программных комплексов, которые используются в производстве и исследованиях. Среди них выделяются как свободные, так

и коммерческие продукты. Существующее ПО построено на основе численных методов, рассмотренных в приложении А. В таблице 1.1 представлены некоторые из популярных продуктов.

Таблица 1.1 – Популярное ПО для решения задач о распределении ЭМП

Название	Метод	Язык реализации	Тип ПО
MEEP [42]	FDTD	C, C++	GPL v.2
EMAP [43]	FEM, VFEM, VFEM / MOM	C	Open Source
ELCUT [44]	FEM	C++	Commercial, Academic
A-DDA [45]	DDA	Fortran 90, C99	GPL v.3
DDSCAT	DDA	Fortran 90	GPL
Elmer [46]	FEM	C++, Fortran 90, C	GPL
Ansys Maxwell	FEM	C++	Commercial
Femlab	FEM	C++	Commercial

1.4.1 Среди существующего ПО имеется достаточное количество коммерческих продуктов. Среди крупных пакетов можно отметить следующие: Ansys Maxwell, Vector Field Opera, Ansys Emag, Ansys Multiphysics, COMSOL Multiphysics Femlab, Abaqus Unified FEA, мелких и учебных – ELCUT и др. Коммерческие продукты обладают большим количеством возможностей, являются довольно универсальными, имеют развитые средства для визуализации и проведения моделирования. Такие пакеты основаны на хорошо зарекомендовавших себя методах (приложение А). Компании разработчики имеют возможность привлекать высококвалифицированных сотрудников для написания алгоритмов и проверки их надежности, что дает в результате высококачественный продукт.

Стоимость подобных пакетов начинается от нескольких тысяч долларов. Самые многофункциональные могут стоить десятки и сотни тысяч. Программы обладают возможностью интеграции в производственный процесс, что также требует денежных и временных затрат. Масштабируемость позволяет использовать их на различных этапах производства и для решения разнообразных задач.

Для разработки таких комплексов используются математические модели, которые хорошо изучены. Проведение моделирования основано на известных закономерностях и зависимостях, хорошо изученных и апробированных на различных задачах. Это означает то, что при решении определенного класса задач, которые имеют специфичные (уникальные) особенности, а также содержат неизученные объекты, результаты нельзя интерпретировать адекватно. Так как коды программ не предоставляются и вносить изменения в модели невозможно, то это сразу

ограничивает спектр применимости такого ПО. Именно поэтому коммерческие продукты не используются при исследованиях и в моделировании новых материалов и структур.

Наибольшее применение в таких системах нашел МКЭ, которые представлены в модулях конечноэлементного моделирования (CAE). Этот метод является наиболее популярным для моделирования различных процессов в различных областях.

Кроме приведенных недостатков можно добавить:

- большие денежные и временные затраты на интеграцию и изучение продукта, а также подготовку сотрудников и обслуживающего персонала;
- большие затраты времени на подготовку задачи;
- иногда, требуются сторонние коммерческие проекты (например, для рисования геометрии задачи в САD пакете).

При выборе продукта необходимо исходить из требований и типа задач, которые должен решать продукт. С этой целью необходимо производить маркетинговые исследования, позволяющие выявить наиболее эффективный и подходящий комплекс, обеспечивающий наилучшие показатели по необходимым критериям.

1.4.2 Для проведения научных исследований наибольшее применение нашли свободно распространяемые продукты. Эти продукты предоставляют возможность модификации исходных кодов, их использование в своих приложениях, а также поддержку со стороны разработчиков. Причем в виде свободного ПО есть достаточное количество библиотек, которые предоставляют возможность использования их для разработки полноценного программного комплекса. Среди наиболее применяемых методов выделяются FDTD и DDA.

Большинство разработанных программ явились результатами научно-исследовательской деятельности, разработка велась в достаточно большой команде, включающей в себя не только программистов, но и ученых, дающих ценные данные для разработки.

Здесь можно отметить следующие программы: MEER [42], EMAP [43], Elmer [46], ADDA [45]. Одним из наиболее популярных является MEER, разработанный в Массачусетском технологическом институте (MIT) на основе наработок с проектом MBP (MIT Photonic Bands) [47]). Данные продукты продолжают развиваться и в них добавляются новые функции и функционал. Основной особенностью всех пакетов является то, что в основном они проектируются с учетом возможности использования в кластерах, т.к. решение задач электродинамики довольно ресурсоемкий процесс.

1.5 Компьютерное моделирование рассеяния света малыми частицами

Для исследования рассеяния света и других процессов, происходящих с электромагнитными волнами в средах применяют компьютерное моделирование. Для этого были разработаны достаточное количество программных пакетов (п.1.4). Многие из этих пакетов предназначены для решения задач, которые имеют практическое применение и уже хорошо изучены. Другие пакеты, позволяют производить решение с целью получения опытных данных для проверки гипотез и новых теорий. Так, задача о рассеянии света на сфере, решенная Ми [48] является актуальной и сегодня, только с учетом того, что акценты сместились в сторону уменьшения масштабов – микро- и нанометровые размеры исследуемых объектов. В связи с этим возникает много новых проблем, которые необходимо решить. Среди них можно выделить проблему поиска оптимального и эффективного метода решения для одной частицы и множества частиц, размещенных в некотором материале и имеющего сложную структуру, в том числе и неоднородную. Это требует от ученых и исследователей применения знаний из различных областей и их комбинации. Работа на стыке наук и методик требует применения новых средств и технологий.

Сегодня говорят о нанотехнологиях, которые представляют собой будущее в развитии техники, электроники, оптики и других дисциплин. Одна из предметных областей является нанооптика, которая занимается изучением оптических явлений в нанометровых масштабных объектах. Эффекты, которые возникают при взаимодействии света с малыми частицами сегодня выделяют в области наноплазмоники [2].

Решение задачи начинается с определения рассматриваемой системы в пространстве и времени. Далее, производится составление системы уравнений Максвелла и записывается волновое уравнение (уравнение Гельмгольца), устанавливаются граничные условия. В качестве волны используют монохроматическую плоскополяризованную волну с плоским фронтом (в рассматриваемом приближении). В зависимости от выбранного метода решения выполняется поиск напряженности электрического и магнитного поля в ближней области вокруг частицы. Теоретические аспекты освещены в книге [1].

Решение задачи о рассеянии света на сфере является отправной точкой для всех методик и исследований, т.к. имея точное решение можно верифицировать получаемые результаты и говорить о правильности новой гипотезы. Среди задач, которые стоят сегодня можно выделить поиск методики решения с использованием ВМКЭ. Стоит задача разработки математической модели задачи и реализации программного обеспечения на ее основе.

2 КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Из рассмотренных методов [4, 9 – 41] (приложение А) для построения модели выбран векторный метод конечных элементов (ВМКЭ), который позволяет более точно и просто описывать природу электромагнитного поля, нежели “классический” узловый метод. Он позволяет описывать характер поля в виде векторов, за которые принимаются ребра элементов, а далее находить по ним поле в произвольной точке элемента. В отличие от других методов, ему не нужна очень мелкая сетка. Алгоритм решения хорошо алгоритмируется.

Моделирование на основе МКЭ состоит из следующих основных этапов:

- a) построение математической модели системы,
- b) получение конечноэлементных формулировок для уравнений (преобразование уравнений Максвелла и граничных условий в матричную форму записи),
- c) выполнение решения системы уравнений,
- d) анализ полученных результатов и их интерпретация.

Таким образом, решение начинается с формулирования математической модели, после чего она будет преобразована в компьютерную модель с помощью МКЭ (для реализации ее на компьютере).

Построение математической модели включает в себя:

- постановку краевой задачи для области решения в виде уравнений Максвелла и волнового уравнения;
- конечноэлементная формулировка – иначе говоря, переход к вариационной постановке;
- преобразование полученных уравнений к дискретному виду для записи в виде основного уравнения МКЭ.

Для решения задачи также необходимо:

- выполнять учет условий на границах исследуемых объектов;
- рассчитывать параметры воздействий на основе различных типов источников, испускающих электромагнитные волны.

2.1 Конечноэлементный анализ векторных полей

2.1.1 Напряженность электрического поля, создаваемого источником с плотностью зарядов J_{imp} в области Ω , характеризуемой электрической ε и магнитной μ постоянными может быть описана с помощью уравнений Максвелла (раздел 1.3). Исследуемая область может быть как

двухмерной, так и трехмерной. Для определения напряженности электрического поля E необходимо решить уравнения Максвелла [39] с учетом граничных условий.

За счет исключения напряженности магнитного поля H в (1.1) и преобразования (1.2) можно получить волновое уравнение, называемое уравнением Гельмгольца:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) - k_0^2 \varepsilon_r E = -jk_0 Z_0 J_{imp} \text{ на } \Omega, \quad (2.1)$$

где $\mu_r = \mu/\mu_0$ и $\varepsilon_r = \varepsilon/\varepsilon_0$ – относительные магнитная и электрическая постоянные; $k_0 = \omega\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}$ и $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ – волновое число и волновое сопротивление (импеданс вакуума).

Типовые граничные условия для электрических полей включают однородные условия Дирихле на идеально проводящей поверхности, а также смешанные на границе поверхности, обладающей волновым сопротивлением. Формулировку этих граничных условия можно записать в виде:

$$\vec{n} \times E = P, \quad (2.2)$$

$$\vec{n} \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) + \frac{jk_0}{\eta_r} \vec{n} \times (\vec{n} \times E) = K_n, \quad (2.3)$$

где P – установленные значения для тангенциальных компонент поля на Γ_D ;

η_r – нормальный импеданс поверхности на Γ_N ;

K_n – известные функции, описанные на границе источника.

2.1.2 Для приближенного численного решения краевых задач используются методы Галеркина и Ритца [39]. Так называемая вариационная постановка представляет собой использование одного из них для разложения функционала задачи по базису.

Используя метод Галеркина [41], умножим выражение (2.1) на весовую функцию W_i и проинтегрируем по области решения Ω , что даст:

$$\int_{\Omega} W_i \cdot \left[\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) - k_0^2 \varepsilon_r E \right] d\Omega = -jk_0 Z_0 \int_{\Omega} W_i \cdot J_{imp} d\Omega. \quad (2.4)$$

Применяя свойства векторного произведения [60]

$$\nabla \cdot \left[W_i \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) \right] = \frac{1}{\mu_r} \cdot (\nabla \times W_i) \cdot (\nabla \times E) - W_i \cdot \left[\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) \right], \quad (2.5)$$

и векторную теорему Гаусса [60]

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \left[W_i \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) \right] d\Omega = \oint_{\Gamma} \vec{n} \cdot \nabla \cdot \left[W_i \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) \right] d\Gamma, \quad (2.6)$$

а также применяя граничные условия (2.3), получим вариационную форму волнового уравнения:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times W_i) \cdot (\nabla \times E) - k_0^2 \varepsilon_r W_i \cdot E \right] d\Omega = \int_{\Gamma_D} \frac{1}{\mu_r} (\vec{n} \times W_i) (\nabla \times E) d\Gamma - \\ - \int_{\Gamma_N} \left[\frac{jk_0}{\eta_r} (\vec{n} \times W_i) (\nabla \times E) + W_i \cdot K_N \right] d\Gamma - jk_0 Z_0 \int_{\Omega} W_i \cdot J_{imp} d\Omega. \end{aligned} \quad (2.7)$$

2.1.3 Для нахождения численного решения уравнения (2.7) методом конечных элементов (МКЭ) внутри рассматриваемой области Ω , вначале нужно разделить область на малые части, которые называют конечными элементами (КЭ). Среди таких элементов можно отметить треугольники для двумерной области и тетраэдры для трехмерной. На каждом КЭ поле E можно интерполировать используя дискретные значения. Один из подходов заключается в присвоении значения поля в нескольких узлах элемента и затем интерполяция на всем элементе с помощью скалярных функций. Этот подход называется узловым МКЭ и применяется для скалярных полей, но является весьма проблематичным из-за ряда трудностей, связанных с применением требуемых граничных условий. Лучшим подходом является присвоение тангенциальной компоненты поля E для каждого ребра элемента и затем интерполяция на элементе, используя векторные базисные функции. Например, поле на треугольном элементе можно описать в следующем виде:

$$E^e(x, y) = N_{12}^e(x, y)E_{12}^e + N_{13}^e(x, y)E_{13}^e + N_{23}^e(x, y)E_{23}^e, \quad (2.8)$$

а поле на тетраэдральном элементе может быть интерполировано как

$$\begin{aligned} E^e(x, y, z) = N_{12}^e(x, y, z)E_{12}^e + N_{13}^e(x, y, z)E_{13}^e + N_{14}^e(x, y, z)E_{14}^e + \\ + N_{23}^e(x, y, z)E_{23}^e + N_{24}^e(x, y, z)E_{24}^e + N_{34}^e(x, y, z)E_{34}^e, \end{aligned} \quad (2.9)$$

где E_{lk}^e обозначает тангенциальную компоненту поля E на ребре, соединяющем узлы l и k элемента e , а N_{lk}^e соответствующую интерполируемую базисную функцию. Обозначая линейную скалярную интерполяцию функции ассоциированную с узлами l и k для треугольного или тетраэдрального элемента как N_l^e и N_k^e соответственно, векторная базисная функция в (2.12) и (2.13) может быть записана в виде:

$$N_{lk}^e(r) = \left[N_l^e \nabla N_k^e - N_k^e \nabla N_l^e \right] \cdot l_{lk}^e, \quad (2.10)$$

где l_{lk}^e – длина ребра, соединяющего узлы l и k , с условием что $l < k$.

В соответствии с (2.7), базисные функции определенные как (2.10) являются векторными функциями, а соответствующие элементы называются векторными (vector) или реберными (edge) (рисунок 2.1). Очевидно, что такие базисные функции имеют тангенциальную компоненту только вдоль ассоциированного ребра, таким образом обеспечивая непрерывность тангенциального интерполированного поля, при этом позволяя нормальной составляющей быть прерывистой, что позволяет использовать их для точного решения векторного поля E .

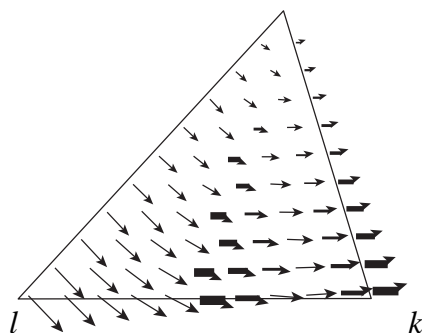


Рисунок 2.1 – Векторная базисная функция N_{lk}^e для линейного треугольного элемента

Когда электрическое поле интерполируется для каждого элемента сетки, используя тангенциальные значения на ребрах элементов, поле E в области Ω может быть найдено по формуле:

$$E = \sum_{i=1}^{N_{edge}} N_i E_i + \sum_{i=1}^{N_D} N_i^D E_i^D, \quad (2.11)$$

где N_{edge} – число уникальных ребер элементов в дискретизованной области, исключая те ребра, которые расположены на Γ_D ;

E_i – тангенциальная компонента поля на i -ом ребре;

N_i – векторная базисная функция для соответствующего i -ого ребра;

N_D – количество ребер на Γ_D ;

N_i^D и E_i^D – векторная базисная функция и тангенциальное значение поля соответственно.

Очевидно, что для ребер внутри области Ω , N_j насчитывается несколько соседних элементов. На рисунке 2.2 показана векторная базисная функция для внутреннего ребра в треугольной сетке. Также отметим, что со вторым слагаемым уравнения (2.11), интерполированное поле удовлетворяет необходимым условиям на границе в соответствии с условием (2.2).

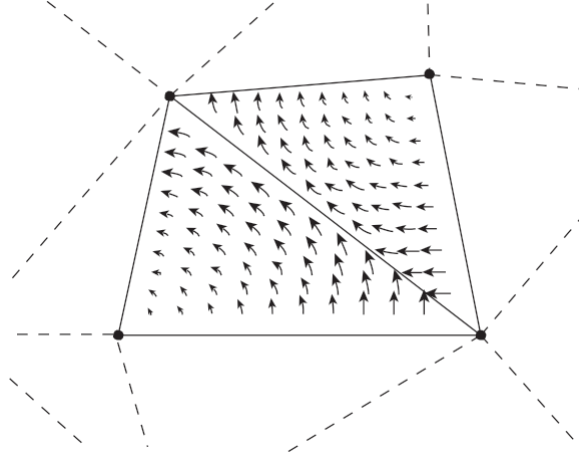


Рисунок 2.2 – Векторная базисная функция N_i для линейных треугольных элементов

Подставив (2.11) в (2.7), где в качестве W_i использована векторная базисная функция N_i для ребер элементов, получим:

$$\sum_{j=0}^{N_{edge}} K_{ij} E_j = b_i, \quad i = 1, 2, \dots, N_{edge}, \quad (2.12)$$

где

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times N_i) \cdot (\nabla \times N_j) - k_0^2 \varepsilon_r \cdot N_i \cdot N_j \right] d\Omega + jk_0 \int_{\Gamma_N} \frac{1}{\eta_r} (\vec{n} \times N_i) (\nabla \times N_j) d\Gamma, \quad (2.13)$$

$$b_i = -jk_0 Z_0 \int_{\Omega} N_i \cdot J_{imp} d\Omega - \int_{\Gamma_N} N_i \cdot K_N d\Gamma - \sum E_j^D \int_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times N_i) \cdot (\nabla \times N_j^D) - k_0^2 \varepsilon_r \cdot N_i \cdot N_j^D \right] d\Omega. \quad (2.14)$$

Заметим, что интеграл по Γ_D в уравнении (2.7) исчезает из-за условия $\hat{n} \times N_i = 0$ на Γ_D .

В матричном виде уравнение (2.12) можно записать как

$$[K]\{E\} = \{b\}, \quad (2.15)$$

решая которое может быть получен вектор $\{E\}$. В нем будут находиться сведения о локальных компонентах поля, собранных на ребрах элементов.

2.1.4 Связь локального и глобального представлений поля.

В представлении в виде (2.11) вектор поля задается 6-ю скалярными компонентами, каждая из которых определяет вклад одной из базисных функций N_i . Найденные коэффициенты вектора неизвестных равны норме вектора, направленного вдоль одного из ребер элемента, образующего дискретизацию расчетной области. Однако для интерпретации и графического отображения полученных результатов необходимо представление поля не в виде (2.11), а в обычном виде

$$E = E_x i + E_y j + E_z k, \quad (2.16)$$

который называют глобальным представлением поля.

Возникает задача нахождения зависимости, позволяющей осуществить переход от $(E_1, E_2, E_3, E_4, E_5, E_6)^T$ к $(E_x, E_y, E_z)^T$. Для этого необходимо воспользоваться формулой:

$$\begin{aligned} E = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} &= W_{12} l_{12} E_{12} + W_{13} l_{13} E_{13} + W_{14} l_{14} E_{14} + W_{23} l_{23} E_{23} + \\ &+ W_{42} l_{42} E_{42} + W_{34} l_{34} E_{34} = \\ &= [W_{12} \quad W_{13} \quad W_{14} \quad W_{23} \quad W_{42} \quad W_{34}] \times \\ &\times [l_{12} E_{12} \quad l_{13} E_{13} \quad l_{14} E_{14} \quad l_{23} E_{23} \quad l_{42} E_{42} \quad l_{34} E_{34}]^T. \end{aligned} \quad (2.17)$$

В формуле (2.17) приведенные обозначения соответствуют векторному конечному элементу тетраэдр, имеющему 4 узла в вершинах и 6 ребер (раздел 2.1.1).

Для решения (2.17) необходимо выразить векторные базисные функции W_{ij} в декартовой системе (x, y, z) . В зависимости от типа элемента, они могут отличаться. В трехмерном случае, для L -координат решение зачастую не описывается, но его можно получить. Оно довольно громоздко, поэтому целесообразно использовать для его получения математические пакеты, позволяющие работать в символьном виде. В приложении Б представлена программа для аналитического вычисления объемных L -координат для тетраэдрального элемента.

2.1.5 Во многих задачах можно предположить, что временная зависимость E и B от источников ведет себя таким образом, что ее можно представить в виде конечной суммы из N временных спектральных компонент (Фурье-компонент) [49], или, другими словами, в виде временной серии Фурье. В таком случае достаточно изучить свойства одного произвольного члена из набора спектральных компонент $\{\omega_n : n = 0, 1, 2, \dots, N-1\}$, т.е.

$$E(x, t) = E_n \cos(\omega_n t) = E_n(x) \operatorname{Re}\{e^{-i\omega_n t}\} \equiv E_n(x) e^{-i\omega_n t}, \quad (2.18)$$

$$B(x,t)=B_n \cos(\omega_n t) = B_n(x) \operatorname{Re}\{e^{-i\omega_n t}\} \equiv B_n(x)e^{-i\omega_n t}.$$

(2.19)

Такая запись возможна из того факта, что уравнение Максвелла-Лоренца является линейным, подразумевая что общее решение может быть получено с помощью линейной суперпозиции (суммирования) результата для каждой спектральной компоненты, где вес каждого спектрального получается из амплитуд Фурье, $E_n(x)$ и $B_n(x)$ соответственно.

В физической системе, временная спектральная компонента точно определяется по круговой частоте ω_n . Волна, содержащая только конечное число таких компонент, называется гармонически изменяемой во времени (time-harmonic wave). Когда число компонент ограничено одной, говорят о монохроматической волне, которой в реальности не существует.

Если подставить (2.16) в выражение для волнового уравнения (2.1) [49] и решать его, то полученный результат необходимо умножить на $e^{-i\omega_n t}$ и просуммировать для всех Фурье (спектральных) компонент с частотами ω_n , на которых работает источник.

2.2 Векторные конечные элементы

2.2.1 Тетраэдр.

Среди наиболее используемых элементов для анализа трехмерных объектов можно выделить тетраэдр (рисунок 2.3) [39]. Простой тетраэдр описывается с помощью 4 узлов и 6 ребер, соединяющих узлы.

Как и треугольный элемент, тетраэдр удобно записывать через так называемые L -координаты (приложение Б), которые ассоциируются с 4-мя узлами элемента. Тогда векторную функцию для ребра (1,2) можно записать:

$$W_{12} = L_1^e \nabla L_2^e - L_2^e \nabla L_1^e. \quad (2.20)$$

Во-первых, просто показать что

$$\nabla \cdot W_{12} = 0, \quad \nabla \times W_{12} = 2 \nabla L_1^e \times \nabla L_2^e. \quad (2.21)$$

Во-вторых, e_1 является единичным вектором из узла 1 в узел 2. Так как L_1^e является линейной функцией, которая варьируется в значениях от 1 в узле 1 до нуля в узле 2 и L_2^e – аналогично, от 1 в узле 2 до 0 в узле 1, $e_1 \cdot \nabla L_1^e = -1/l_1^e$ и $e_1 \cdot \nabla L_2^e = -1/l_1^e$, где l_1^e – длина ребра, соединяющего узлы 1 и 2.

Поэтому получается выражение

$$e_1 \cdot W_{12} = (L_1^e + L_2^e)/l_1^e = 1/l_1^e, \quad (2.22)$$

которое означает, что W_{12} имеет постоянную тангенциальную компоненту вдоль ребра (1,2). Далее, так как L_1^e исчезает вдоль ребер (2,3), (2,4) и (3,4) и L_2^e – вдоль (1,3), (1,4) и (3,4), W_{12} не имеет тангенциальных компонент вдоль этих пяти ребер. Кроме того, поскольку L_1^e исчезает на плоскости элемента (2,3,4), а L_2^e на плоскости (1,3,4), W_{12} не имеет тангенциальных компонент на любой из этих поверхностей. Эти тангенциальные компоненты появятся только на поверхностях, которые содержат ребро (1,2): (1,2,3) и (1,2,4). Таким образом, W_{12} обладает всеми необходимыми свойствами присущими векторной базисной функции для описания поля на ребре (1,2). Если определить его с номером 1, то получим:

$$N_1^e = W_{12}l_1^e = (L_1^e \nabla L_2^e - L_2^e \nabla L_1^e)_1^e. \quad (2.23)$$

Аналогично получаются векторные базисные функции для остальных ребер тетраэдрального элемента:

$$N_i^e = W_{i1,i2}l_i^e = (L_{i1}^e \nabla L_{i2}^e - L_{i2}^e \nabla L_{i1}^e)_i^e. \quad (2.24)$$

Вид векторного элемента в виде тетраэдра представлен на рисунке 2.3, а нумерация его узлов и ребер – в таблице 2.1.

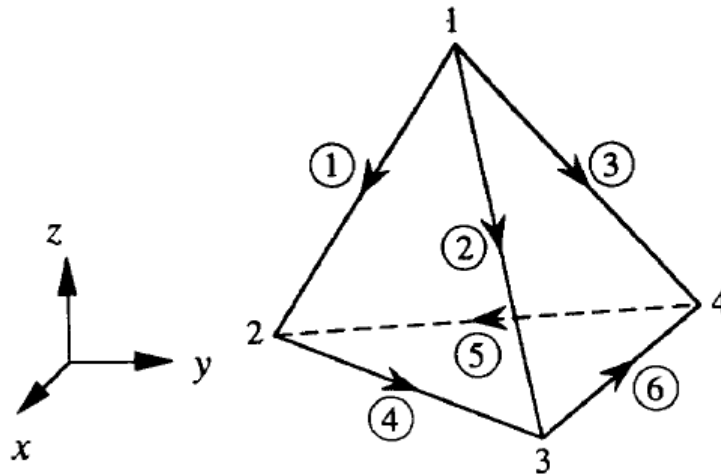


Рисунок 2.3 – Тетраэдр с 4-мя узлами и 6-ю ребрами

Таблица 2.1 – Нумерация узлов и ребер тетраэдра

Номер ребра i	Номер узла i_1	Номер узла i_2
1	1	2
2	1	3
3	1	4
4	2	3

5	4	2
6	3	4

2.2.2 Вычисление локальных матриц элемента.

Результирующие матрицы для элементов имеют вид:

$$E_{ij}^e = \iiint_V (\nabla \times N_i^e) \cdot (\nabla \times N_j^e) dV, \quad (2.25)$$

$$F_{ij}^e = \iiint_V N_i^e \cdot N_j^e dV. \quad (2.26)$$

Эти интегралы могут быть аналитически определены для тетраэдра и треугольника.

$$\nabla \times N_i^e = 2l_i^e \nabla L_{i1}^e \times \nabla L_{i2}^e = \frac{l_i^e}{(6V^e)^2} [p_1 + p_2 + p_3] \quad (2.27)$$

где

$$p_1 = (c_{i1}^e d_{i2}^e - d_{i1}^e c_{i2}^e)(c_{j1}^e d_{j2}^e - d_{j1}^e c_{j2}^e), \quad p_2 = (d_{i1}^e b_{i2}^e - b_{i1}^e d_{i2}^e)(d_{j1}^e b_{j2}^e - b_{j1}^e d_{j2}^e),$$

$$p_3 = (b_{i1}^e c_{i2}^e - c_{i1}^e b_{i2}^e)(b_{j1}^e c_{j2}^e - c_{j1}^e b_{j2}^e).$$

Теперь можно записать для элементов из (2.25):

$$E_{ij}^e = \frac{l_i^e l_j^e V^e}{(6V^e)^4} [p_1 + p_2 + p_3] \quad (2.28)$$

Для определения (2.21):

$$N_i^e \cdot N_j^e = \frac{l_i^e l_j^e}{(6V^e)^2} [L_{i1}^e L_{j1}^e f_{i2,j2}^e - L_{i1}^e L_{j2}^e f_{i2,j1}^e - L_{i2}^e L_{j1}^e f_{i1,j2}^e + L_{i2}^e L_{j2}^e f_{i1,j1}^e], \quad (2.29)$$

где $f_{ij} = b_i^e b_j^e + c_i^e c_j^e + d_i^e d_j^e$. Подстановка выражения (2.29) в (2.26) дает следующий результат:

$$F_{11}^e = \frac{(l_1)^2}{360 \cdot V^e} (f_{22} - 2f_{12+f_{11}}),$$

и так далее (остальные формулы приведены в [39]).

После вычисления аналитических матриц, можно составить полную матрицу для единичного элемента (локальную матрицу жесткости):

$$[K]^e = \frac{1}{\mu_r} [E]^e - k^2 \varepsilon_r [F]^e. \quad (2.30)$$

На основе рассмотренной математической модели и МКЭ можно сформулировать требования к разработке программного комплекса:

- наличие универсального алгоритма для построения сеток, т. е. алгоритма дискретизации области на КЭ;

- возможность задания произвольной геометрии и материалов для всех объектов задачи;
- возможность задания различных параметров источников электромагнитного излучения (источников воздействующих волн);
- реализация построения матриц, в соответствии с МКЭ;
- реализация метода для решения СЛАУ, получаемого в результате реализации математической модели по МКЭ;
- возможность как единичного решения, так и многократного решения задачи с пересчетом параметров;
- интерпретация результатов и предоставление их в удобном для дальнейшей обработки виде.

3 ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС “EMFFM”

Для компьютерного моделирования распределения электромагнитных полей (ЭМП) необходимо сформулировать требования, предъявляемые к программному продукту:

- возможность точного описания модели системы, наиболее близко описывающей ее реальную структуру;
- адекватность результатов расчетов по модели с реальной системой;
- универсальный язык описания моделей (метаязык);
- возможность поддержки программного кода, а также внесение изменений в используемые модели – расширяемость и гибкость;
- экономическая эффективность, т. е. стоимость разработки и использования вычислительных ресурсов должны быть оправданы (целесообразны).

Процесс решения задачи, построенной на основе математической модели из раздела 2, можно описать в виде схемы на рисунке 3.1.

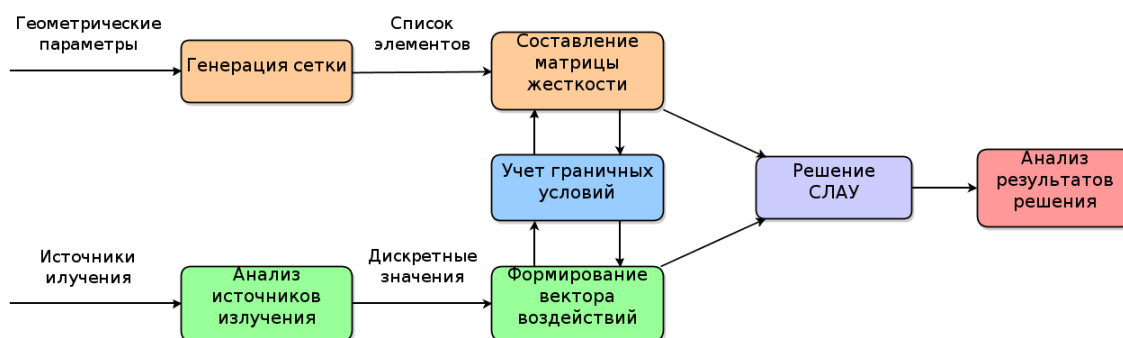


Рисунок 3.1 – Процесс выполнения функций

3.1 Выбор средств для разработки программного обеспечения

3.1.1 Для решения задачи о генерации сетки было принято решение использовать стороннюю программу, которая хорошо решает задачу и проста в обращении, умеет работать с двух- и трехмерной геометрией. Таким выбором стала программа *Netgen* [51], позволяющая генерировать конечноэлементные сетки для двух- и трехмерных задач. Программа распространяется по лицензии GPL. Это позволяет использовать не только саму программу, но и исходные коды. Программа генерирует сетки из треугольников и тетраэдров, а также поддерживает экспорт в различные форматы для других программ КЭ анализа. Описание работы с программой и примеры использования приведены в [54, приложение Г].

3.1.2 При разработке программы были использованы сторонние библиотеки, предоставляющие возможность логирования работы программы, а также мощную математическую библиотеку, необходимую для реализации некоторых алгоритмов линейной алгебры.

В качестве библиотеки для работы с логами был выбран пакет *NLog 2* [52], который свободно распространяется и имеет расширенные возможности по созданию и ведению логов. С помощью него можно организовать ведение логов в файл, в БД, отправку логов по почте и прочее. Среди преимуществ можно отметить простоту использования и возможность гибко управлять правилами вывода лога. Распространяется по лицензии BSD .

В качестве библиотеки для математических операций и алгоритмов была выбрана библиотека *Math.NET Numerics* [53], которая содержит большое число качественных математических алгоритмов. *Numerics* стал результатом объединения *dnAnalytics* с *Math.NET Iridium* и предназначен для замены обоих. Изначально, разработан под .NET 4.0, существует реализация для Mono, а также поддерживает некоторую аппаратную оптимизацию. Открытый исходный код позволяет вносить изменения, создавать и дополнять свои более эффективные алгоритмы. Проект постоянно развивается. Распространяется по лицензии MIT.

3.1.3 При выполнении разработки проекта применяли следующие программы:

- *Microsoft Visual Studio 2012 Ultimate* – интегрированная среда разработки (IDE), предоставляющая современные средства и инструменты для разработки высокопроизводительных, качественных программ на различных языках и платформах (VC C++, C#, HTML, .NET, ASP.NET, IronRuby, IronPython) [50], средства для моделирования архитектуры ПО, проведения тестирования разрабатываемых продуктов и т.д. Используется в качестве основного инструмента для разработки программы на языке C#. Предоставляется по программе Dreamspark.

- *Sublime Text 2* – лучший текстовый редактор на сегодня, который предоставляет обширнейшие возможности по редактированию файлов различных форматов, поддержку сборки и компиляции проектов, подсветку синтаксиса, поддержку плагинов и многое другое. Редактор написан на Python, имеет гибкую систему настроек, позволяющую подстроить редактор под себя. Расширения придают редактору множество возможностей, которые предоставляют далеко не все IDE.

- *Diagramly* – расширение для браузера Google Chrome, позволяющее рисовать различные типы диаграмм (блок-схемы, UML диаграммы, организационную структуру, Workflow т.д.), и поддерживает работу с Google Drive (облачным хранилищем). Расширения применялось для рисования схем, описывающих разработанную программу.

– *Microsoft Word 2013 Preview* – многофункциональный текстовый редактор, который позволяет создавать документы различной сложности, имея расширенные возможности по редактированию. Является лучшим редактором на платформе Windows и Mac OS X. Использовался для пояснительной записки.

Таким образом, на основании предъявляемых требований и функций (рисунок 3.1) выбираются средства, с помощью которых будет производиться разработка ПО для компьютерного моделирования распределения ЭМП. Среди выбранных средств можно выделить:

- язык C# 4 и платформа .NET [50];
- программа Netgen;
- формат XML для описания входных данных (условий и параметров решаемой задачи).

3.2 Описание

ПО представляет собой консольное приложение, которое может быть использовано для расчета распределения ЭМП с помощью ВМКЭ. Комплекс имеет встроенный входной формат описания исходных данных, на основании которых производится обработка условия задачи и ее решение. Формат получил именование как Input API и построен на основе открытого стандарта XML 1.0. Это позволяет использовать его не только в данном ПО, но и в других комплексах подобного рода как универсальный язык описания (изначально цель разработки его была именно в универсальности, гибкости и простоте, которую и удалось получить).

Структура разработанного комплекса приведена далее в разделе 3.3.

Из основных возможностей и особенностей стоит отметить следующие:

- работа с комплексными и скалярными числами;
- универсальный модуль для работы с сеткой, взаимодействующий с программой Netgen, реализованный в виде библиотеки, взаимодействующей с ней;
- модуль анализа сетки, описанной в виде текстовых файлов, что позволяет использовать различные генераторы сеток для геометрии и, если необходимо, дополнительно интегрировать их в комплекс;
- универсальный входной формат для исходных данных в виде XML файлов с определенной структурой;
- модуль для выполнения анализа и решения с помощью ВМКЭ;
- консольное приложение для объединения модулей комплекса и работы с ним, позволяющее использовать его и как отдельное приложение, работающее в фоновом режиме (в случае использования интерфейсного приложения, в котором задавать исходные данные и условия задачи).

Более подробное описание отдельных частей дано в [54], где в приложениях приведены дополнительные описания модулей, формата входных файлов и прочее.

3.3 Структура

Программный комплекс имеет модельную структуру и состоит из нескольких частей, основная из которых является библиотекой для возможности совместного использования. На рисунке 3.2 представлена архитектура комплекса, а в таблице 3.1 дано краткое описание его компонентов.

Структура построена с помощью проектирования архитектуры слоев и имеет валидные связи и закономерности. Связи между ее элементами односторонние.

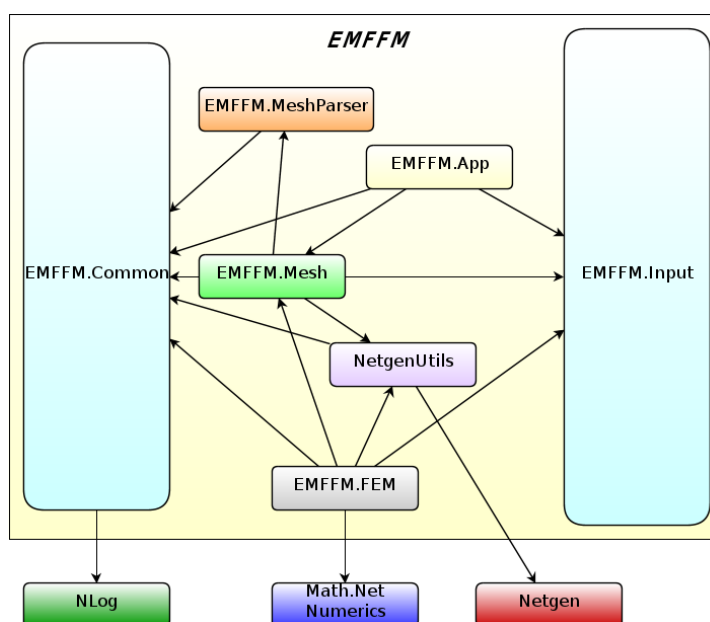


Рисунок 3.2 – Архитектура ПО EMFFM

Таблица 3.1 – Описание компонентов ПО EMFFM

Название	Тип	Описание
EMFFM.App	Консольное приложение	Главное приложение для запуска программного комплекса
EMFFM.MeshParser	Библиотека	Библиотека для работы с файлами сеток, производимыми Netgen
EMFFM.Common	Библиотека	Общая библиотека приложения, содержит общие классы, методы, перечисления
EMFFM.Input	Библиотека	Реализация и структура Input API

Продолжение таблицы 3.1

Название	Тип	Описание
EMFFM.Mesh	Библиотека	Реализация алгоритмов работы с сеткой, а также общих структур данных для их описания
EMFFM.FEM	Библиотека	Библиотека для реализации МКЭ (ВМКЭ), решения СЛАУ и анализа результатов
NetgenUtils	Библиотека	Библиотека, содержащая средства для работы с программой Netgen, в частности для препроцессинга исходной задачи (генерации конечноэлементной сетки)

3.3.1 При разработке программы в соответствии с требованием к простоте задания начальных данных и параметров, необходимых для решения задачи и ее описания, спроектирован специальный стандарт для входных файлов, который получил название Input API. Этот стандартный интерфейс предназначен для работы с входными файлами в формате XML и описания в них условий задачи для передачи ее программе на выполнение. Разработка Input API и структуры входных файлов представляет собой целую задачу, целью которой является создание унифицированного формата для описания решаемых задач, позволяющего ввести общеупотребимые форматы файлов, которые могут быть использованы в других программах. Его еще можно назвать – метаязык.

Разработанный в виде Input API, формат применяется в программе в качестве входного по умолчанию. Статус проекта – в разработке. Описание и спецификации стандарта приведены в [54, приложении E].

Главная особенность формата заключается в том, что он подразумевает полное описание задачи, включая сценарий ее выполнения. Это позволяет полностью избавиться от необходимости ввода каких-либо дополнительных данных в процессе выполнения, а также исключить визуальный интерфейс.

3.4 Особенности реализации

При разработке структуры ПО особое внимание было уделено построению объектно-ориентированного (ОО) программного кода, который как можно лучше бы описывал предметную область и ее сущности. Среди таких сущностей можно отметить: ребро (Edge), узел (Node), вектор (Vector) и другие. Они определяют реальные объекты, которыми приходится манипулировать при решении.

Для удобства работы с некоторыми из них, например, которые нужно сортировать и сравнивать между собой предусмотрены интерфейсы IComparable<> и IEquatable<>. Первый

помогает реализовать сортировку объектов класса. Для этого реализуется метод CompareTo(), который возвращает значение целого типа (только -1, 0 и 1). Второй реализует выполнение структурного сравнения объектов путем описания метода Equals(). Кроме того, для реализации полного набора методов для сортировки и поиска уникальных значений выполняется перегрузка метода GetHashCode(), который используется при сравнении объектов путем сравнения их хэш-значений.

Код программы имеет встроенную документацию, построенную на основе комментариев С#. Текст документации представлен на русском языке. Причем, данная документация позволяет использовать функции программы с описанием их содержания и аргументов, а также возвращаемых результатов. Документация может быть также сгенерирована в виде отдельных файлов с помощью специальных утилит (VsDocman, Sandcastle).

Кроме того, для уменьшения повторов однотипного кода используются возможности языка С#, такие как обобщения [50]. Это позволяет написать одну функцию для одного класса объектов, например, для обработки типов элементов, которые наследуются от класса Element, и не только. Обобщения позволяют указать произвольный тип, что позволяет создавать универсальные функции, принимающие в виде аргумента множество типов, но выполняющие одинаковые функции. Они применяются в программе как к классам, так и к методам. Некоторые классы и методы имеют более одного обобщенного типа параметра (например, класс TMesh<TType, TType2>).

Для хранения данных широко применяются коллекции, в которых хранятся объекты собственных типов, реализованных в программе. Это позволяет применять обработку списков с помощью LINQ [50], синтаксис которого упрощает код и делает его более понятным. По скорости работы он не уступает обычным циклам. Использование PLINQ позволяет выполнять некоторые запросы гораздо быстрее, используя параллельные библиотеки (TPL). Применение LINQ тесно связано с лямбда-выражениями, которые позволяют записывать задания в простом виде без необходимости написания дополнительных операторов сравнения. При работе с LINQ используются расширяющие методы, позволяющие записывать необходимые действия в одну строку. При выполнении запросов для списков (IEnumerable<>), данные для них приходят сразу, т.к. списки не поддерживают отложенное выполнение LINQ запросов.

При реализации обработки действий в программе используются делегаты. В данном случае используется обобщенный делегат Action<T> [50], который принимает функции, возвращающие значение void. Это упрощает обработку действий до того, что в зависимости от ассоциации с методом, они будут выполнены автоматически. Ассоциации действий с методами, которые их

реализуют, основано на использовании словарей (Dictionary<TKey,TValue>), в которых ключами выступают название действия (ActionTypes), а значениями – метод реализации (Action<InputData>).

Кроме применения делегата Action<T>, применяется делегат Func<Tin, Tout> [50], который, в отличие от Action, возвращает значение указанного типа. Это дает возможность задавать через него функции, которые имеют однотипное описание, но при этом возвращают значения заданного типа и имеют разное содержание.

Главное консольное приложение использует конфигурационный файл для хранения общих параметров и установок приложения. Это файл App.config, который в формате XML предлагает простую и стандартную возможность, предоставляемую .NET. Это позволяет просто описывать и изменять параметры работы приложения без необходимости изменения кода программы.

Решение, созданное в Visual Studio 2012, состоит из нескольких проектов, которые следуют принципу модульности. Это позволяет редактировать коды отдельных модулей, тестировать и проверять их работу по отдельности. При этом зависимость модулей от основной программы отсутствует.

Разработанная программа получила название ElectroMagnetic Field FEM Modeler (EMFFM).

4 ОПЫТНАЯ ЭКСПЛУАТАЦИЯ И ВЕРИФИКАЦИЯ РАЗРАБОТАННОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

4.1 Эксплуатация разработанного ПО

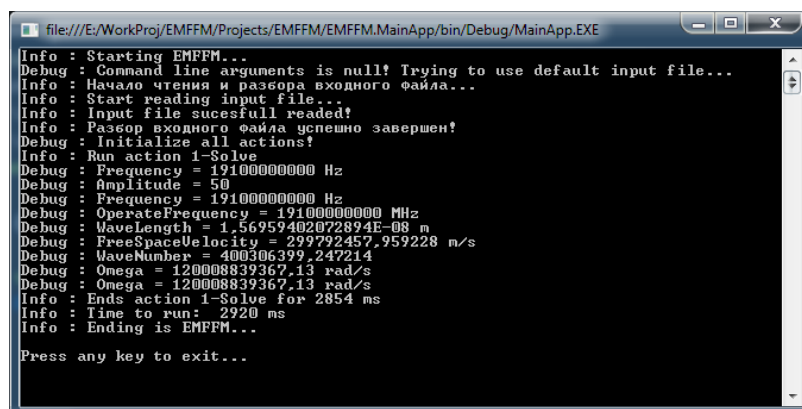
Программа представляет собой консольное приложение. Для его запуска необходимо в командной строке выполнить:

```
dir> app.exe -in input.xml
```

где *app.exe* – название исполняемого файла программы (App.exe), *-in input.xml* – входной файл с данными задачи с ключом *-in*.

Если входной файл не указан, будет открыт файл по умолчанию, который указан в параметрах приложения (файле App.config).

После запуска приложения начнется его выполнение в соответствии с описанным сценарием во входном файле, если он будет безошибочно прочитан. В процессе выполнения программы на экран будут выводиться сообщения (рисунок 4.1). Эти сообщения реализуются с помощью библиотеки NLog [52]. Причем они дублируются в файлах с логами, которые, в случае необходимости, можно изучить подробнее (ведется два лога: полный, в который пишутся все сообщения, и отладочный (debug)).



```
file:///E:/WorkProj/EMFFM/Projects/EMFFM/EMFFM.MainApp/bin/Debug/MainApp.EXE
Info : Starting EMFFM...
Debug : Command line arguments is null! Trying to use default input file...
Info : Начало чтения и разбора входного файла...
Info : Start reading input file...
Info : Input file sucesfull readed!
Info : Разбор входного файла успешно завершен!
Debug : Initialize all actions!
Info : Run action 1-Solve
Debug : Frequency = 19100000000 Hz
Debug : Amplitude = 50
Debug : Frequency = 19100000000 Hz
Debug : OperateFrequency = 19100000000 MHz
Debug : WaveLength = 1.56959402022894E-08 m
Debug : FreeSpaceVelocity = 299792457.959228 m/s
Debug : WaveNumber = 400306399.247214
Debug : Omega = 120008839367.13 rad/s
Debug : Omega = 120008839367.13 rad/s
Info : Ends action 1-Solve for 2854 ms
Info : Time to run: 2920 ms
Info : Ending is EMFFM...
Press any key to exit...
```

Рисунок 4.1 – Вид окна приложения

Выполняемые действия соответствуют сценарию, описанному во входном файле. Порядок выполнения и сами операции будут определяться после обработки входного файла.

Запуск программы сопровождается открытием окна приложения Netgen, консольного окна, в котором будут выводиться сведения о процессе генерации сетки. Netgen завершится автоматически после выполнения построения ее и вывода результата в заданный файл.

В конце работы приложения программа произведет несколько файлов, которые будут содержать сведения о конечноэлементной модели, а также результаты решения СЛАУ. Основные данные будут содержаться в файле `field-full.txt`, в котором содержатся сведения по каждому элементу, о полях на его ребрах и значение полного поля в центре элемента. Поле представлено в точке в виде полных его компонент по каждому направлению (X , Y , Z).

Если указаны параметры для пробных областей, то будут файлы, которые содержат сведения о полях для элементов, расположенных в указанной области.

4.1.1 Порядок выполнения действий по подготовке задачи к решению.

Для решения задачи необходимо:

- сформировать полные сведения о решаемой задаче (определить значения переменных, выбрать источники излучения и их параметры и т.д.);
- выполнить построение геометрии и сформировать в виде специального файла [54, приложение Д];
- создать входной файл на основе `Input API Specification` с данными о задаче [54, приложение З];
- указать параметры решения задачи, в том числе выполняемые действия;
- запустить программу с созданными файлами на выполнение.

Если программа успешно выполнит все операции и не возникнет никаких ошибок, то получатся несколько файлов с результатами. Если при указании параметров задачи была включена опция вывода, то в папке с результатами будут файлы сетки и другие файлы.

4.1.2 Для анализа полученных результатов необходимы:

- файлы с результатами (один итоговый файл с полями по элементам);
- файл сетки, в котором перечислены координаты узлов и список ее элементов.

Результирующие поля на элементах определяются в их центре, поэтому в зависимости от размера элемента и положения его центра, значения могут несколько отличаться между собой.

При необходимости нахождения поля в точке, необходимо произвести поиск элемента, в котором располагается искомая точка. Далее, в результирующих файлах найти нужный элемент и принять значение в его центре.

Проведение анализа и его интерпретация является сложной задачей. При наличии множества элементов анализ затруднителен. Программа приводит лишь значения в центре элемента. Однако, при наличии сетки, формул для получения представления поля на элементе (раздел 2.1), набора

точек, в которых ищутся поля, а также значения полей на ребрах элементов можно выполнить необходимый анализ.

4.1.3 Построение файла с геометрией.

После определения размеров и формы объектов задачи, необходимо сформировать рассматриваемую область таким образом, чтобы можно было построить конечноэлементную сетку. Для создания файла геометрии есть два пути:

- написание XML файла с последующим его преобразованием в *.geo файл, необходимый программе Netgen;
- написание файла геометрии *.geo.

В не зависимости от выбранного способа, они оба поддерживаются в программе. Для обработки XML файла разработана специальная библиотека NetgenUtils [54, приложение Д], позволяющая выполнять необходимые преобразования.

Для иллюстрации примера создания геометрии, на рисунке 4.2 приведен файл XML, который является более универсальным средством описания, а также рисунок 4.3, который является результатом автоматической генерации на основе XML файла из рисунка 4.2.

```
<?xml version="1.0" encoding="utf-8"?>
<geometrydata>
  <points>
    <point name="p1" x="0" y="0" z="0"/>
    <point name="p2" x="490" y="490" z="490"/>
    <point name="p3" x="245" y="245" z="245"/>
  </points>
  <solids>
    <orthobrick name="cube1" p1="p1" p2="p2" boundary="1"/>
    <sphere name="sp" p="p3" radius="40" boundary="2"/>
    <complex name="main" data="cube1 and not sp"/>
  </solids>
  <colors>
    <color name="col1" r="0" g="0" b="1"/>
    <color name="col2" r="0" g="1" b="0"/>
  </colors>
  <output>
    <tlo name="main" transparent="true" color="col1"/>
    <tlo name="sp" transparent="false" color="col2"/>
  </output>
</geometrydata>
```

Рисунок 4.2 – Пример XML файла с геометрией geom1.xml

Здесь видно, что формат XML позволяет существенно упростить описание геометрии, путем описания ее по частям, где каждая из них логически связана с другими. При этом, каждый тип объектов помещен в свою секцию (точки, вектора, тела, цвета, объекты для отрисовки). Для правильного формирования файла геометрии имеется XML Schema [54, приложение E].

```
#  
# Geometry file generated by NetgenUtils at 9:03  
#  
algebraic3d  
solid cube1 = orthobrick (0, 0, 0; 490, 490, 490) -bc=1;  
solid sp = sphere (245, 245, 245; 40) -bc=2;  
solid main = cube1 and not sp;  
tlo main -transparent -col=[0,0,1];  
tlo sp -col=[0,1,0];  
# End of file
```

Рисунок 4.3 – Пример файла геометрии geom1.geo

При использовании первого варианта, XML, во входном файле необходимо указать параметр о генерации файла геометрии (IsGenerateGeomFile=true). В таком случае, перед генерацией самой сетки и вызовом программы Netgen произойдет обработка XML файла и формирование на его основе *.geo файла, который уже в свою очередь будет передан в Netgen.

4.1.4 Результаты работы программы.

После выполнения всех действий, программа сгенерирует следующие файлы:

- файлы сетки (geom1.neu, geom1.xml, mesh.xml);
- файл с результатами (field-full-0.txt, field-full-domain-2-0.txt);
- файл с вектором воздействий (field-vector-0.txt);
- файл с результатом решения СЛАУ (field-result-0.txt).

Эти файлы появляются в случае, если вывод результатов активен в параметрах приложения. При решении с различными параметрами, которые меняются в процессе решения, т.е. итерационно, для каждой итерации результаты будут свои и могут быть в виде большого числа файлов.

Файлы сеток важны при обработке результатов. Если необходимо взять построенную сетку для другой программы, то можно воспользоваться XML файлом, обработать который очень просто. Самый полный вариант сетки представлен в файле mesh.xml.

```

<?xml version="1.0" encoding="utf-8" ?>
<mesh>
<elements count="2445">
<element number="1">
<nodes>
<node number="71" x="254.562312" y="223.933526" z="277.63075" />
<node number="82" x="241.167404" y="233.239388" z="283.039443" />
<node number="397" x="238.189663" y="211.915086" z="290.480389" />
<node number="85" x="238.748204" y="215.916427" z="271.740622" />
</nodes>
<edges>
<edge number="773" vetr1="71" vert2="82" isBoundary="true" boundary="2" />
<edge number="1" vetr1="71" vert2="397" />
<edge number="2" vetr1="71" vert2="85" isBoundary="true" boundary="2" />
<edge number="2337" vetr1="82" vert2="397" />
<edge number="2712" vetr1="85" vert2="82" isBoundary="true" boundary="2" />
<edge number="1930" vetr1="397" vert2="85" />
</edges>
<center x="243.16689574999998" y="221.25110675" z="280.722801" />
</element>
<!-- перечисление остальных элементов сетки -->
</elements>
</mesh>

```

Рисунок 4.4 – Файл mesh.xml

Кроме сетки, важными являются файлы с результатами вычислений поля на элементах. Вместе с данными об элементах, можно определить величины поля в различных точках области.

# Element	FieldX	FieldY	FieldZ
1	1,351718042429E-06	6,16414780658398E-07	-2,92471423408298E-06
2	-5,78280228934E-09	2,02670958697583E-08	1,22146823206513E-08
3	-1,772143919371E-09	-1,010562615660E-09	-5,606104478339E-10
4	2,613954058788E-10	-1,51146564373541E-11	-3,56737678003309E-10

Рисунок 4.5 – Файл с полными полями на элементах

На рисунке 4.5 приведена малая часть файла с результатами. Для элементов приведены только полные поля, значения на ребрах не выводились (указана опция WithEdgeFields = false во входном файле). Если включена опция вывода полей на ребрах, то для каждого элемента также будут выведены значения тангенциальных компонент на каждом ребре.

4.2 Верификация программного обеспечения

В качестве тестовой задачи воспользуемся задачей о рассеянии падающей плоской монохроматической волны идеально проводящей сферической частицей. Материалом частицы является серебро (Ag).

Размер области выбирается так, чтобы от сферы в центре граница была равноудалена на расстоянии 1λ (λ – длина волны).

Геометрия области решения задачи показана на рисунке 4.6. Для ее определения используется XML файл [54, приложение Н]. При этом в геометрию вводится специальный объект, который будет представлять собой небольшую область, в которой будет определяться ближнее поле вокруг частицы (эта область достаточно мала по сравнению с основной областью). Этой областью является куб со сторонами равноудаленными от поверхности шара на $0,375D$ (D – диаметр сферической частицы).

Построенная сетка имеет вид, представленный на рисунке 4.7, где в центре отмечена частица и ее ближняя область. Ближней областью также считается вся область задачи в целом, но в целях уменьшения рассматриваемых результатов, введение дополнительных объектов сокращает количество изучаемых элементов сетки.

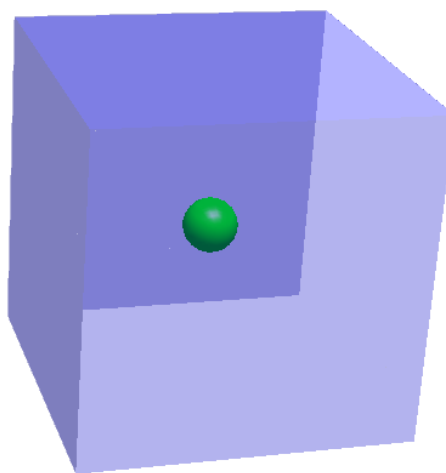


Рисунок 4.6 – Вид геометрии рассматриваемой области

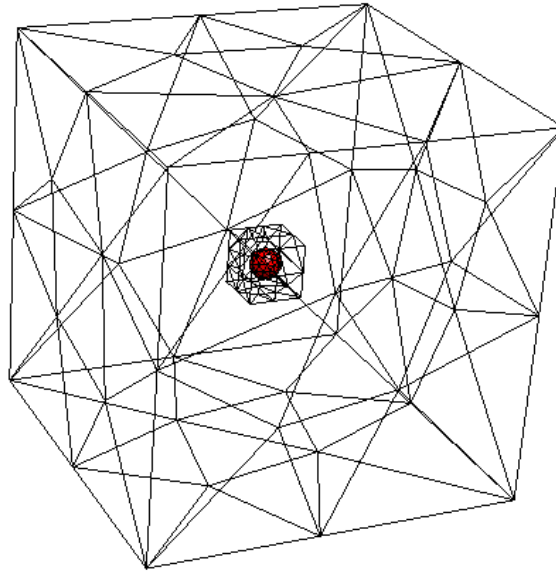


Рисунок 4.7 – Поверхностная сетка

Для описания входных данных задачи использовался XML файл, созданный в соответствии с Input API [54, приложение H].

Частица рассматривается как плазмон, поэтому к ней применяется закон дисперсии, по которому определяется зависимость диэлектрической проводимости от частоты работы источника ($\varepsilon(\omega)$).

Решение данного класса задач имеет и аналитический вид, который получен Ми [48] и описано во многих книгах [1, 4, 5] и др.

Полученные с помощью разработанной программы результаты дают сведения о ближней области вокруг частицы, а также во всей рассматриваемой области. Расхождение решений составляет не более 15-25%.

Разработанное ПО показывает результаты с достаточной точностью и степенью адекватности. На сегодня в программе реализован анализ в частотном диапазоне. Для решения более сложных задач будет производиться совершенствование математической модели, добавление в нее законов дисперсии, создание модели для решения задач во временной области и многое другое.

Дальнейшее развитие будет включать: разработку пользовательского интерфейса, создание базы материалов и их свойств, развитие модуля анализа результатов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе проделанной работы была предложена математическая модель и создано программное обеспечение по исследованию распределения электромагнитного поля в ближней зоне однородных сферических наночастиц. Проведена верификация ПО на примере исследования ряда задач, для которых известно точное решение, что позволяет использовать его для решения задач синтеза новых метаматериалов с заданными свойствами.

Достоинствами разработанного ПО являются:

- универсальный мета-язык описания исходных данных (Input API), построенный на основе формата XML;
- модуль взаимодействия с программой Netgen для генерации конечноэлементной сетки;
- векторный метод конечных элементов (ВКМЭ) для скалярных и комплексных полей;
- модульная архитектура приложения.

Продукт разработан на платформе .NET Framework 4 на языке C# 4.0 и состоит из нескольких модулей (библиотек). Программа получила название ElectroMagnetics Field FEM Modeler (EMFFM).

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Хюлст ван де Г. Рассеяние света малыми частицами. / Г. ван де Хюлст. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961. – 537 с.
2. Ковшов А. Н. Основы нанотехнологии в технике.: Учебное пособие / А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров, И. М. Ибрагимов. – М.: Издательство МГОУ, 2006. – 244 с.: ил.
3. Ибрагимов И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем: Учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. – СПб.: Издательство “Лань”, 2010. – 384 с.: ил.
4. Климов В. В. Наноплазмоника / В. В. Климов. – М.: Физматлит, 2009. – 480 с.
5. Виноградов А. П. Электродинамика композитных материалов / А. П. Виноградов – М.: УРСС Едиториал, 2004. – 505 с.
6. Jackson J. D. Classical electrodynamics / J. D. Jackson – New York: Wiley, 1998. – 808 p.
7. Ландау Л. Д. Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц – М.: Наука, 1982. – 656 с.
8. Smith D. R. Metamaterials and negative reflection index. / Smith D. R., Pendry J. B., Wiltshire M. C. K. // Science. – 2004. – 205. – P.788-792.
9. Purcell E. M. Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains / E. M. Purcell, C. R. Pennypacker // Astrophysical Journal. – 1973 – 186. – P. 705-714.
10. Collinge M.J. Discrete dipole approximation with polarizabilities that account for both finite wavelength and target geometry / Collinge M.J., Draine B. T. // arXiv: astro-ph/0311304 – Vol 1. – 2003.
11. Draine B. T. Discrete dipole approximation for scattering calculations. / Draine B.T., Flatau P.J. //J. Opt. Soc. Am. – 2004. – A 11 (4). – P.1491–1499.
12. Draine B. T. Beyond Clausius-Mossotti: wavy propagation on a polarizable point lattice and discrete dipole approximation / Draine B. T. and Goodman I. // Astrophys. J. – 1994. – 405. – P. 685-697.
13. Yang W.-H. Discrete dipole approximation for calculating extinction and Raman intensities for small particles with arbitrary shapes / Yang W.-H., George C. Schatz, and Richard P. Van Duyne // J. Chem. Phys. – 1995. – 103. – P. 869-875.
14. Jensen T. R. Electrodynamics of noble metal nanoparticles and nanoparticle clusters. / Jensen T. R., Kelly K. L., Lazarides A, Schatz G. C. // J. Cluster Sci. – 1999. – 10. – P. 295–317.
15. Cristensen D. A. Analysis of near field tip pattern including object interaction using finite-difference time-domain calculations / Cristensen D. A. // Ultramicroscopy. – 1995. – 57. – P.189-195.
16. Kann J.L. Linear behavior of a near-field optical scanning system / Kann J.L., Milster T.D., Froehlich F.F., Ziolkowski R.W., and Judkins J. B.Y. // J. Opt. Soc. Am. A. – 1995. – 12. – P. 1677-1682.

17. Furukawa H. Near-field optical microscope images of a dielectric flat substrate with subwavelength strips / Furukawa H., Kawata S.Y. // *Opt. Commun.* – 2001. – 196. – P. 93-102.
18. Furukawa H. Analysis of image formation in a near-field scanning optical microscope: Effects of multiple scattering. / Furukawa H., Kawata S. Y. // *Opt. Commun.* – 1996. – 132. – P. 170-178.
19. Kane Yee Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media / Kane Yee // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* – 1966. – 14 (3). – P. 302–307.
20. Taflove A. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, 3rd ed. / Taflove A., and Hagnes S.C. – Artech House Publishers, ISBN 1-58053-832-0. – 2005.
21. Sadiku M.N.O. *Numerical Techniques in Electromagnetics, Second Edition* / Sadiku M.N.O. – CRC Press, London, 2003.
22. Berenger J.P. An Effective PML for the Absorption of Evanescent Waves in Waveguides / Berenger J.P. // *IEEE Microwave and guided wave letters.* – 1988. – 8. – P. 188-190.
23. Young J.L. A summary and systematic analysis of FDTD algorithms for linearly dispersive media/ Young J.L., Nelson R.O. // *IEEE Antennas Propagation Mag.*, 2001. – 43 (1). – P. 61-77.
24. Quinten E. M. Absorption and elastic scattering of light by particles aggregates / Quinten E. M., Kreibig U. // *Appl, Opt.* – 1993. – 32. – P. 6173-6182.
25. Zhao L.L. The extinction spectra of silver nanoparticle arrays: Influence of array structure on plasmon resonance wavelength and width / Zhao L.L., Kelly K.L., Schatz G.C. // *J. Phys. Chem. B.* – 2003. – 107. – P.7343-7350.
26. Waterman P. C. Matrix formulation of electromagnetic scattering / Waterman, P. C. // *Proc. IEEE.* – 1965. – Vol. 53. – P. 805–812.
27. Waterman P. C. Symmetry, unitarity, and geometry in electromagnetic scattering / P. C. Waterman // *Physical Review.* – 1973. – D 3(4). – P. 825–839.
28. Mishchenko M. I. T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: A review / M. I. Mishchenko, L. D. Travis, D. W. Mackowski // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 1996. – 55. – P. 535-575.
29. Calculation of total cross section of multiple –sphere clusters / Mackowski D. W. // *J. Opt. Soc, Am. A.* – 1994. – 11. – P. 2851-2861.
30. Mishchenko M. I. *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles* / M. I. Mishchenko, L. D. Travis, A. A. Lacis. – Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
31. Courant, R. L. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibration / R. L. Courant // *Bull. Amer. Math. Soc.* – 49 (1): 1 – 23. – 1943.

32. Silvester P. P. Finite element solution of homogeneous waveguide problems / P. P. Silvester // *Alta Freq.* – 1969. – 38. – P. 313 – 317.
33. Mei K. K. Unimoment method of solving antenna and scattering problems / K. K. Mei // *IEEE Trans. Antennas Propagat.* – 1974. – 22 (6). – P. 760 – 766.
34. Marin S. P. Computing scattering amplitudes for arbitrary cylinders under incident plane waves / Marin S. P. // *IEEE Trans. Antennas Propagat.* – 1982. – 30 (6). P. 1045 – 1049.
35. Nedelec J. C. Mixed finite elements in R^3 / Nedelec J. C. // *Numer. Math.* – 1980. – 35. – P. 315 – 341.
36. Bossavit A. A mixed FEM – BIEM method to solve 3 - D eddy current problems / A. Bossavit, J. C. Verite // *IEEE Trans. Magn.* – 1982. – 18 (2) – P. 431 – 435.
37. Batron M. L. New vector finite elements for three - dimensional magnetic field computation / M. L. Barton and Z. J. Cendes // *J. Appl. Phys.* – 1987. – 61. – P. 3919 – 3921.
38. Silvester P.P. Finite Elements for Electrical Engineers. 3rd edition. / P. P. Silvester and R. L. Ferrari. – Cambridge, UK : Cambridge University Press, 1996.
39. Jianming, J. The Finite Element Method in Electromagnetics. 2nd edition. / J. - M. Jin – New York : Wiley, 2002. – 780 p.
40. Jianming, J. Finite element analysis of antenna and arrays / J. Jianming – John Wiley & Sons, 2008. – 452 p.
41. Jianming, J. Theory And Computation Of Electromagnetic Fields / J. Jianming – John Wiley & Sons, 2010. – 616 p.
42. МЕЕР [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep> – Дата доступа: 20.05.2012.
43. The EMAP Finite Element Modeling Codes (EMAP) [Электронный ресурс]. – Режим доступа <http://www.cvel.clemson.edu/modeling/EMAG/EMAP/>.
44. ELCUT программа моделирования электромагнитных, тепловых и механических задач [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://elcut.ru/>. – Дата доступа: 20.05.2012.
45. A-DDA [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://code.google.com/p/a-dda/>. Дата доступа: 28.05.2012.
46. Elmer. Open Source Finite Element Software for Multiphysical Problems [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.csc.fi/english/pages/elmer>. Дата доступа: 21.05.2012.
47. MIT Photonic Bands (MPB) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/MIT_Photonic_Bands. – Дата доступа: 20.05.2012.
48. Mie G., 1908, Beitrage zur Optik truber Medien, Speziell killoidaler Metallosungen, *Ann. d. Physik IV*, 25, 377.

49. Bo Thidé Electromagnetic Field Theory. Second Edition [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: http://www.plasma.uu.se/CED/Book/EMFT_Book.pdf.
50. Нейгел К. С# 4.0 и платформа .NET 4 для профессионалов. / Пер. с англ. / Нейгел К., Ивсен Б., Глинн Д., Уотсон К., Скиннер М. – М.: Диалектика, 2011. – 1440 стр.: ил.
51. Netgen Mesher [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://sourceforge.net/projects/netgen-mesher/>. Дата доступа: 11.06.2012.
52. Nlog Project [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://nlog-project.org/>. Дата доступа: 12.06.2012.
53. Math.NET Numerics is an opensource numerical library for .Net, Silverlight and Mono [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://numerics.mathdotnet.com/>. Дата доступа: 12.06.2012.
54. Кухаренко А. А. Моделирование распространения электромагнитных волн в тонких стеклянных пластинах с включениями частиц восстановленных металлов: Дипломная работа / А. А. Кухаренко. – 2012. – 199 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Численные методы решения уравнений Максвелла

На сегодня разработан ряд эффективных методов, позволяющих решать уравнения Максвелла в различных постановках. В частности, методы позволяют решать задачи в присутствии наночастиц и наноструктур. Методы позволяют найти отраженное и рассеянное поля, плазмонные резонансы, или определить функцию Грина, а также характеристики самих наночастиц и молекул вблизи них [3].

Методы нашли свое широкое применение для задач электродинамики, электростатики, нанооптики, наноплазмонике, а также применяются при проектировании и расчете электрических схем.

К основным методам можно отнести:

- приближение дискретных диполей (discrete dipole approximation (DDA));
- метод Т-матриц;
- метод конечных разностей во временной области (finite difference time domain (FDTD) method).

Методы имеют свои преимущества и недостатки. Их применение всегда обусловлено решаемой задачей. Так, изначально методы DDA и Т-матриц разрабатывались первоначально для решения задач рассеяния. При этом оказывается, что эти методы не очень хорошо описывают поле вблизи границ раздела.

Сегодня находит свое широкое применение в исследовании электромагнитных полей метод конечных элементов (МКЭ).

1 Метод DDA

Приближение дискретными диполями является одним из методов расчета рассеяния электромагнитного излучения в телах произвольной формы или в периодических структурах. Для заданной геометрии метод стремится вычислить собственные параметры рассеяния и поглощения. Точные решения уравнений Максвелла известны лишь для основных геометрических объектов, таких как сферы, сфероиды, поэтому требуются приближенные методы, которые позволяют решить задачу для нерегулярных форм объектов.

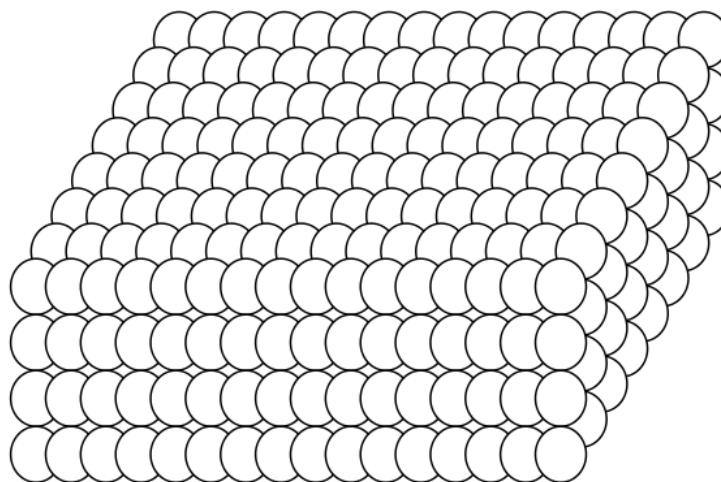


Рисунок А.1 – Вид большого объема, представленного в виде дискретных диполей

Метод DDA – это численный метод, в котором изучаемый объект представляется кубической решеткой с периодом d из N точек (рисунок А.1), которые обладают свойством поляризуемости [9]. Иногда это метод называют CDA (приближение взаимодействующих диполей – coupled dipole

approximation) методом. В рамках этого метода нет ограничений на то, занят ли узел ячейки диполем или нет. Это означает, что в принципе метод может быть использован для приближенного описания тел любой формы и состава. Предполагается, что i -ый элемент расположен в точке с радиусом-вектором r_i и обладает дипольной поляризуемостью a_i . Поляризуемости более высоких порядков (квадрупольная и т.д.) считаются равными нулю. Дипольный момент каждого элемента возникает в результате воздействия на него локального поля E_{loc} , которое предполагается монохроматическим ($e^{-i\omega t}$):

$$P_i = a_i E_{loc}(r_i). \quad (A.1)$$

В свою очередь, E_{loc} является суммой падающего и обусловленных всеми остальными диполями полей:

$$E_{loc}(r_i) = E_{loc,i} = E_{in,i} + E_{dip,i} = E_0 \exp(ik \cdot r_i) - \sum_{j \neq i} A_{ij} P_j, \quad (A.2)$$

где E_0 и k – амплитуда и волновой вектор падающей волны (которая предполагается плоской, но может, в общем случае, быть любой), а матрица взаимодействия A имеет следующую форму (для $j \neq i$):

$$A_{ij} P_j = \frac{\exp(ikr_{ij})}{r_{ij}^3} \times \left\{ k^2 r_{ij} \times (r_{ij} \times P_j) + \frac{1 - ikr_{ij}}{r_{ij}^2} [r_{ij}^2 \cdot P_j - 3r_{ij} \cdot (r_{ij} \cdot P_j)] \right\}, \quad (A.3)$$

где $k = \omega/c$.

Фактически матрица A – это функция Грина уравнений Максвелла с дипольным источником в свободном пространстве.

Важно иметь в виду, что диэлектрическая проницаемость металлической частицы и окружающей среды входят в виде отношения $\varepsilon_i/\varepsilon_0$, которое содержится в выражении для поляризуемости. Кроме того, волновой вектор должен быть домножен на $\sqrt{\varepsilon_0}$ если частица находится не в вакууме. Явные выражения для поляризуемости a_i были разработаны [9,11,12] так, чтобы бесконечная решетка диполей точно описывала диэлектрические свойства сплошного тела

$$a_m^{CM} = \frac{3}{n} \frac{\varepsilon(r_m) - 1}{\varepsilon(r_m) + 2}, \quad (A.4)$$

где $n = 1/d^3$ – концентрация диполей, а $\varepsilon(r_m)$ – значение диэлектрической проницаемости в месте расположения m -го диполя. Еще лучшие результаты дает выражение, которое учитывает радиационные поправки [9].

$$a_m = \frac{a_m^{CM}}{1 + \frac{a_m^{CM}}{d^3} \left[(b_1 + b_2 \cdot \varepsilon(r_m) + b_3 \cdot S \cdot \varepsilon(r_m)) \cdot (kd)^2 - \frac{2}{3} i(kd)^3 \right]}. \quad (A.5)$$

В (A.5) $b_1 = -1,8915316$, $b_2 = 0,1648469$ и $b_3 = -1,7700004$, а S – функция направления плоской волны a и ее поляризации e :

$$S = \sum_{j=1}^3 (e_j a_j)^2. \quad (A.6)$$

Применение такой процедуры для наночастиц является приближенным и на практике спектры экстинкции металлических наночастиц обычно отличаются на 10% от точного результата независимо от формы, состава и размера моделируемых частиц.

Подставляя уравнения (A.3) и (A.2) в (A.1), после простых преобразований приходим к матричному уравнению,

$$\sum_{j\beta} [A']_{ia,j\beta} \cdot P_{ia} = [E]_{in,ia}, \quad (\text{A.7})$$

где матрица A' получается из матрицы A в (A.3) и греческие индексы обозначают декартовы координаты. Для системы из N диполей E и P в (A.7) являются векторами размерности $3N$, а матрица A' является $3N \times 3N$ матрицей. Решая систему $3N$ комплексных линейных уравнений, можно найти вектор дипольных моментов и полный дипольный момент системы и другие оптические свойства. В частности, сечение экстинкции и сечение поглощения выражаются через вектор поляризация и имеют

$$C_{ext} = \frac{4\pi k}{|E_0|^2} \sum_{j=1}^N \text{Im}(E_{j,in} \cdot p_j), \quad (\text{A.8})$$

$$C_{abs} = \frac{4\pi k}{|E_0|^2} \sum_{j=1}^N \left\{ \text{Im} \left(p_j \cdot \begin{pmatrix} \overline{a_j}^{-1} \\ \vdots \\ a_j \end{pmatrix} \cdot p_j \right) - \frac{2}{3} k^3 |p_j|^2 \right\}.$$

На практике вычисления существенно ускоряются, если при суммировании в (A.2) использовать быстрое преобразование Фурье и решать уравнение (A.7) методом комплексно сопряженных градиентов. Все эти упрощения реализованы в работах [9,11,12]. Дальнейшие детали вычислений и примеры можно найти, например, в работах [13,14], а также [3, гл. 9].

При вычислении спектров экстинкции и рассеяния на наночастицах различной формы удобно их нормировать на эффективное геометрическое сечение A :

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{A}; Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{A}; Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{A}, \quad (\text{A.9})$$

которое определяется как $A = \pi a_{eff}^2$, где эффективный радиус определяется из равенства объема частицы объему сферы с радиусом a_{eff} .

2 Метод FDTD

В последние несколько лет этот численный метод был успешно применен к решению различных проблем в нанонауке [15 – 18]. В рамках этого метода непосредственно уравнения Максвелла во временной области решаются методом конечных разностей. Говоря точнее, применение этого метода начинается с выписывания уравнений Ампера и Фарадея. Например, если рассматривать наносистему с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(x, y, z)$, эти два закона имеют вид:

$$\text{rot}E(x, y, z, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial B(x, y, z, t)}{\partial t}, \quad (\text{A.10})$$

и

$$\text{rot}H(x, y, z, t) = \frac{\varepsilon(x, y, z, t)}{c} \frac{\partial E(x, y, z, t)}{\partial t}, \quad (\text{A.11})$$

соответственно.

Если эти векторные уравнения аппроксимировать с помощью конечных разностей во временной и пространственной областях, то мы получим 6 скалярных конечно-разностных уравнений:

$$\frac{E_z(x, y + \Delta y, z, t) - E_z(x, y - \Delta y, z, t)}{2\Delta y} - \frac{E_y(x, y, z + \Delta z, t) - E_y(x, y, z - \Delta z, t)}{2\Delta z} =$$

$$- \frac{B_x(x, y, z, t + \Delta t) - B_x(x, y, z, t)}{c\Delta t}, \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{E_x(x, y, z + \Delta z, t) - E_x(x, y, z - \Delta z, t)}{2\Delta z} - \frac{E_z(x + \Delta x, y, z, t) - E_z(x - \Delta x, y, z, t)}{2\Delta x} =$$

$$- \frac{B_y(x, y, z, t + \Delta t) - B_y(x, y, z, t)}{c\Delta t}, \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{E_y(x+\Delta x, y, z, t) - E_y(x-\Delta x, y, z, t)}{2\Delta x} - \frac{E_x(x, y+\Delta y, z, t) - E_x(x, y-\Delta y, z, t)}{2\Delta y} =$$

$$-\frac{B_z(x, y, z, t+\Delta t) - B_z(x, y, z, t)}{c\Delta t}, \quad (\text{A.14})$$

и

$$\frac{H_x(x, y+\Delta y, z, t) - H_x(x, y-\Delta y, z, t)}{2\Delta y} - \frac{H_y(x, y, z+\Delta z, t) - H_y(x, y, z-\Delta z, t)}{2\Delta z} =$$

$$\varepsilon(x, y, z) \left(\frac{E_x(x, y, z, t+\Delta t) - E_x(x, y, z, t)}{c\Delta t} \right), \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{H_y(x+\Delta x, y, z, t) - H_y(x-\Delta x, y, z, t)}{2\Delta x} - \frac{H_x(x, y+\Delta y, z, t) - H_x(x, y-\Delta y, z, t)}{2\Delta y} =$$

$$\varepsilon(x, y, z) \left(\frac{E_z(x, y, z, t+\Delta t) - E_z(x, y, z, t)}{c\Delta t} \right), \quad (\text{1.16})$$

$$\frac{H_x(x, y, z+\Delta z, t) - H_x(x, y, z-\Delta z, t)}{2\Delta z} - \frac{H_z(x+\Delta x, y, z, t) - H_z(x-\Delta x, y, z, t)}{2\Delta x} =$$

$$\varepsilon(x, y, z) \left(\frac{E_y(x, y, z, t+\Delta t) - E_y(x, y, z, t)}{c\Delta t} \right). \quad (\text{A.17})$$

Из этих уравнений, зная значения полей в дискретных точках пространственной сетки, можно найти значения этих полей в этих же точках пространства в момент времени $t + \Delta t$.

Приведенная выше численная схема имеет лишь первый порядок точности по Δt и $\Delta x, \Delta y, \Delta z$, и для достижения требуемой точности необходимо брать очень мелкие сетки как по времени, так и по пространству, что, в свою очередь, приводит к недопустимо большим размерностям матриц.

В современных реализациях метода FDTD используется явная схема второго порядка точности по Δt и $\Delta x, \Delta y, \Delta z$, предложенная Йи [19]. В рамках этого подхода используется специальная пространственная сетка, так называемая сетка Йи, где каждая E -компонента окружена 4-мя H -компонентами и наоборот (рисунок А.2). Второй порядок точности временных производных достигается простой симметричной разностью.

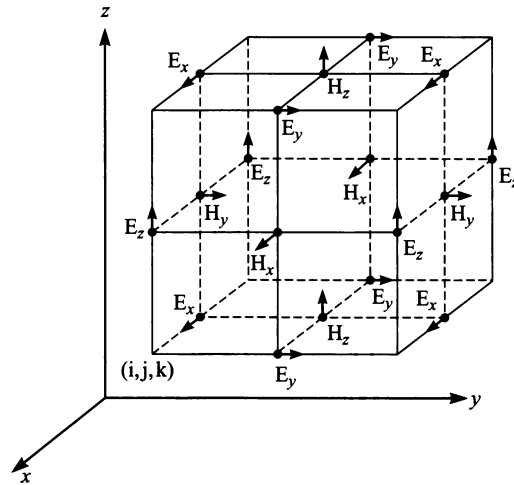


Рисунок А.2 – Расположение полевых компонент в единой ячейке Йи

В результате такого выбора пространственно-временной сетки дискретный вариант, например, x -компоненты уравнения (А.10) примет вид

$$H_x \Big|_{i,j,k}^{n+1/2} = H_x \Big|_{i,j,k}^{n+1/2} + c\Delta t \times \left[\frac{E_y \Big|_{i,j,k+1/2}^n - E_y \Big|_{i,j,k-1/2}^n}{\Delta z} - \frac{E_x \Big|_{i,j+1/2,k}^n - E_x \Big|_{i,j-1/2,k}^n}{\Delta y} \right]. \quad (\text{A.18})$$

где верхний индекс соответствует временной сетке, а нижние 3 индекса соответствуют пространственной сетке вдоль x -, y - и z - направлений соответственно. Из этого уравнения видно, что как временные, так и пространственные производные аппроксимированы центральными производными, и поэтому эта аппроксимация имеет второй порядок точности. Аналогичные уравнения имеют место и для других компонент уравнений (A.10) и (A.11). Таким образом, весь метод конечных разностей во временной области в формулировке Йи [19] является методом второго порядка в областях с однородными значениями диэлектрической и магнитной проницаемости.

При конкретных вычислениях необходимо также учитывать, что для стабильности между значением шага во временной области и значением шага пространственной решетки должно выполняться так называемое условие Куранта-Фридрихса-Леви [20]:

$$\Delta t \leq \frac{1}{v\sqrt{1/\Delta x^2 + 1/\Delta y^2 + 1/\Delta z^2}}, \quad (\text{A.19})$$

где $v = \frac{c}{\sqrt{\epsilon\mu}}$ – скорость света в среде.

При выполнении этого условия метод конечных разностей во временной области (FDTD) становится очень надежной вычислительной схемой. Важной особенностью применения метода (FDTD) является наличие информации о состоянии поля во все времена моделирования, что позволяет легко визуализировать процесс распространения импульсов в наночастицах и наноструктурах, перед тем как установится стационарный монохроматический режим.

Важной особенностью метода FDTD является необходимость знать значения полей не только в области наночастиц и наноструктур, но и во всем пространстве, что, конечно, невозможно по чисто техническим причинам. Для того чтобы ограничить вычисления конечными объемами и конечными сетками, в методе FDTD используются так называемые граничные условия поглощения (ABC – absorbing boundary conditions, рисунок A.3). Наложение этих условий позволяет избежать возникновения волн, отраженных от границы рассматриваемой области пространства, которая содержит в себе рассматриваемые наночастицы и наноструктуры. Поэтому можно рассматривать изучаемую систему расположенной в неограниченном пространстве.

Детальная классификация различных типов граничных условий поглощения приведена в книге [20]. Более детальное объяснение того, почему нужны граничные условия поглощения, приводится в книге [21].

Большинство граничных условий поглощения может быть разбито на две категории. Одна категория ABC выводится из самих дифференциальных уравнений. Другая категория ABC связана с введением в систему гипотетических материальных поглотителей.

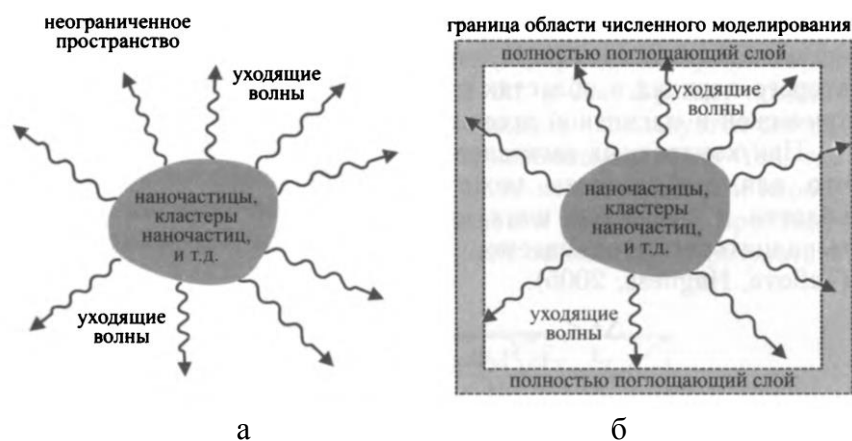


Рисунок А.3 – Иллюстрация метода граничного условия полного поглощения на примере идеально поглощающего слоя: а – неограниченная область, б – область, ограниченная слоем PML

В настоящее время при моделировании методом FDTD наиболее часто используется граничное условие идеально согласованного слоя (PML), которое основано на введении поглотителя и было впервые предложено в работе [22].

Граничное условие поглощения PML реализуется путем окружения области вычисления слоем поглощающего материала, который ослабляет уходящие волны. При соответствующим образом подобранных параметрах поглощающего слоя падающие на этот слой волны не испытывают отражения при любых углах падения и быстро затухают при распространении внутри этого поглощающего слоя.

Коэффициент отражения равен нулю, если параметры поглощающего слоя связаны соотношением

$$\frac{\sigma_e}{\varepsilon} = \frac{\sigma_m}{\mu}, \quad (\text{A.20})$$

где σ_e , σ_m – электрическая и магнитная проводимости, а ε, μ – электрическая и магнитная проницаемости поглощающего слоя, которые, вообще говоря, являются анизотропными тензорами.

Внешняя граница поглощающего слоя считается идеально проводящей, т.е. она отражает все волны внутрь поглощающего слоя. Заметим, что условие (A.20) является схематичным и применяется лишь для определенных компонент соответствующих тензоров, различных для разных сторон поглощающего слоя (рисунок А.3).

Одним из наиболее важных моментов при использовании метода FDTD для описания плазмонных наночастиц и наноструктур является корректное описание законов дисперсии в металлах. В отличие от методов в частотной области, включение законов дисперсии в метод FDTD возможно только при использовании той или иной аналитической модели закона дисперсии в металле, например, при использовании модели Друде или модели Друде-Лоренца [3, гл. 3, разд. 3.2]. Наиболее часто при моделировании наночастиц с дисперсией методом FDTD используется метод дополнительного дифференциального уравнения (auxiliary differential equation (ADE) method) [23]. В частотной области соотношение между индукцией и напряженностью электрического поля имеет вид:

$$D = \varepsilon(\omega)E. \quad (\text{A.21})$$

Метод ADE основан на переводе соотношения (A.21) во временную область и использовании его вместе с остальными дифференциальными уравнениями Максвелла во временной области. Если взять дисперсионную зависимость в простейшей форме Друде-Лоренца

$$\varepsilon(\omega) = \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_0}, \quad (\text{A.22})$$

подставить ее в (A.21) и выполнить обратное преобразование Фурье, то получится дифференциальное уравнение, которое связывает D и E

$$\omega_0^2 D + \gamma_0 \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial^2 D}{\partial t^2} = \omega_0^2 E. \quad (\text{A.23})$$

Затем это уравнение дискретизируется с использованием центральных разностей так, чтобы получить аппроксимацию второго порядка точности.

При использовании метода вспомогательного уравнения электрическое поле вычисляется в два этапа. На первом этапе вектор индукции получается из дискретизированной версии уравнения

$$\text{rot}H = \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t}, \quad (\text{A.24})$$

которая, например, для x -компоненты индукции имеет вид

$$D_x \Big|_{i,j,k}^{n+1} = D_x \Big|_{i,j,k}^n + c\Delta t \times \left[\frac{H_y \Big|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_y \Big|_{i,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{H_x \Big|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - H_x \Big|_{i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} \right]. \quad (\text{A.25})$$

Для остальных компонент имеем аналогичные уравнения.

На втором этапе электрическое поле получается решением дискретизированной формы уравнения (A.23). При этом для нахождения поля в момент времени $t = (n+1)\Delta t, (E^{n+1})$ необходимо знать индукцию как в момент времени $t = (n+1)\Delta t, (D^{n+1})$, так и в 2 предшествующих момента времени $t = (n-1)\Delta t, t = (n-2)\Delta t, (D^{n-1}, D^{n-2})$.

3 Метод Т-матриц

Метод Т-матриц часто применяется для описания кластеров сферически наночастиц, в принципе является точным и базируется на теории Ми для каждой частицы и теореме о сложении для векторных сферических гармоник [24, 25].

Этот метод был разработан Waterman в 1965 году [26] и дополнен в 1971 [27] и значительно улучшен далее Mishchenko, Travis, Mackowski [28]. Процедура аналитического вычисления Т-матрицы для кластера из сфер была описана в деталях в [29]. Подробная библиография метода описана в [30].

Краткое изложение метода основано на работе [25]. Рассмотрим кластер произвольной формы из N частиц произвольной формы, на который падает плоская электромагнитная волна. Поле, рассеянное этим кластером, является суперпозицией полей, рассеянных отдельными частицами кластера:

$$E_s = \sum_{i=1}^{N_s} E_{s,i}, \quad (\text{A.26})$$

где поле каждой частицы $E_{s,i}$ в свою очередь может быть разложено по векторным сферическим гармоникам связанным с центрами соответствующих частиц:

$$E_{s,i} = \sum_{n=lm=-n}^{\infty} \sum_{p=1}^2 a_{mnp}^i h_{mnp}(r_i). \quad (\text{A.27})$$

Здесь, h обозначает расходящуюся сферическую волну степени n и порядка m , a^i – коэффициенты разложения и p означает поляризацию поля, $p=1$ и 2 обозначают ТМ- и ТЕ-поляризации соответственно.

Так как все сферы взаимодействуют друг с другом, то поле рассеянное i -ой сферой, обусловлено как непосредственно падающим полем, так и полями, рассеянными другими сферами.

Используя теорему сложения для векторных гармоник, все поля можно преобразовать в ряды специфических гармоник с центром в рассматриваемой i -ой сфере. Обрывая суммирование по n в (A.27) на $n = N_{O,i}$, получаем систему линейных уравнений типа

$$a_{nmp}^i + a_{np}^{-i} \sum_{j=1, j \neq i}^{N_s} \sum_{l=1}^{N_{0,j}} \sum_{k=-1}^l \sum_{q=1}^2 H_{mnpklq}^{ij} a_{klq}^j = \bar{a}_{klq}^{-i} p_{mnp}^i, \quad (\text{A.28})$$

где матрица H_{ij} формируется из коэффициентов входящих в теорему сложения для сферических гармоник (на основе уравнения Ханкеля) и зависит только от расстояния и направления вектора, соединяющего центры j -ой и i -ой сфер, \bar{a}^{-i} – коэффициенты рассеяния сферических волн различной мультипольности i -ой сферой, которые даются теорией Ми, и, наконец, p^i – коэффициенты разложения падающей плоской волны по сферическим гармоникам с центром в центре i -ой сферы. Формальное обращение этой системы уравнений дает Т-матрицу кластера

$$a_{nmp}^i = \sum_{j=1}^{N_s} \sum_{l=1}^{N_{0,j}} \sum_{k=-1}^l \sum_{q=1}^2 T_{mnpklq}^{ij} p_{klq}^j, \quad (\text{A.29})$$

где матрица $T^{i,j}$ связана с центром i -ой сферы. Ее можно преобразовать к Т-матрице, связанной с центром кластера.

$$T_{nl} = \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \sum_{n'=1}^{N_{0,j}} \sum_{l'=1}^{N_{0,i}} J_{nn'}^{0i} T_{n'l''}^{ij} J_{l'l'}^{j0}, \quad (\text{A.30})$$

где J^{0i} и J^{0j} – матрицы, сформированные из коэффициентов теоремы сложения для сферических функций Бесселя, и индексы nn' и $l'l'$ обозначают тройной индекс, характеризующий сферическую волну. Знание Т-матрицы позволяет найти все интересующие оптические свойства кластера наночастиц. Например, для сечения экстинкции выражение имеет вид

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \text{Re} \left(\sum_{nmp} T_{mnpmp} \right). \quad (\text{A.31})$$

Метод Т-матрицы может быть также применен и к несферическим частицам. В этом случае он становится приближенным, но весьма эффективным для не очень вытянутых частиц.

4 Метод конечных элементов

Как и метод конечных разностей (FDTD), метод конечных элементов (МКЭ) является численным методом, в котором производится преобразование уравнений в частных производных к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для получения приближенных решений на границе – краевых задач математической физики. Вместо аппроксимации дифференциальных операторов, метод конечных элементов сводится к решению уравнения в частных производных. Поскольку метод был впервые предложен в 1943 году Курант для решения вариационных задач в теории потенциалов [31], то он был хорошо разработан и широко применяется для решения проблем структурного анализа и в других областях. В настоящее время метод конечных элементов признается в качестве выдающегося метода, применимого для широкого круга инженерных и математических задач, в том числе и в СВЧ-технике и электромагнетизме.

Первое применение метода конечных элементов для СВЧ-техники и в электромагнетизме появилось в 1969 году, когда Silvester использовал его для анализа волн в полой волноводе [32]. Значимость метода быстро признали, после чего получили и успешно применили его для анализа различных электростатических, магнитостатических проблем в волноводе, а также в заполненном диэлектриком волноводе. В 1974 году Ми разработал технику, которая в сочетании МКЭ с собственным расширением, имела дело с открытой областью электромагнитных задач, таких как антенны и анализ рассеяния и [33]. В 1982 году Marin разработал альтернативный метод, который

в сочетании МКЭ и метода граничных интегральных уравнений был применен для решения открытой проблемы региона рассеяния [34].

Важным прорывом в конечноэлементном анализе векторных задач электромагнитного поля стало появление в 1980-ых годах так называемых векторных элементов, основанных на ребрах (edge based elements) [35 – 37]. Эти новые элементы позволили точно моделировать характер электрических и магнитных полей и устранить многие проблемы, связанные с традиционными узловыми скалярными элементами. Это было особо примечательно тем, что сам по себе характер и свойства электромагнитных полей являлись до этого момента преградой для их изучения. С развитием векторных элементов, МКЭ стал очень мощным численным методом для решения задач электромагнетизма. Сегодня этот метод используется в качестве основного инструмента для разработки антенн и СВЧ устройств. Его основные принципы и различные приложения были описаны во многих книгах, таких, как Silvester и Ferrari [38] и Jin [39 – 41].

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

L-координаты

Нерегулярные сетки, содержащие ячейки переменной формы и размера, а также ячейки с различным числом узлов, строятся обычно без использования отображений сразу в пространстве образа (в актуальной области решения). Для нерегулярных сеток применяется кусочно-полиномиальная (конечно-элементная) интерполяция. Для этого на простейших одномерных (отрезок), двумерных (треугольник) или трехмерных (тетраэдр) конечных элементах используются так называемые L -координаты.

Четыре относительных координаты определяют как отношения расстояний от выбранной точки внутри тетраэдра до одной из его граней к длине высоты, опущенной на эту грань из противоположной вершины. Связь трехмерных L -координат можно записать в виде системы уравнений вида:

$$\begin{aligned} x &= L_1 X_1 + L_2 X_2 + L_3 X_3 + L_4 X_4, \\ y &= L_1 Y_1 + L_2 Y_2 + L_3 Y_3 + L_4 Y_4, \\ z &= L_1 Z_1 + L_2 Z_2 + L_3 Z_3 + L_4 Z_4, \\ 1 &= L_1 + L_2 + L_3 + L_4. \end{aligned}$$

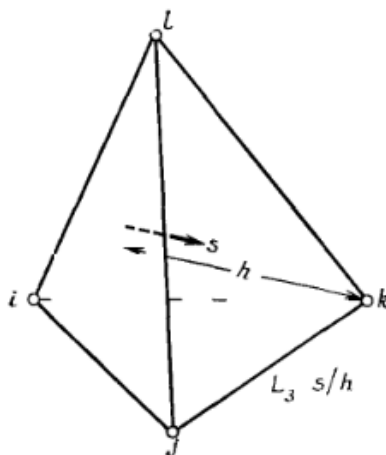


Рисунок Б.1 – Объемные L -координаты тетраэдра

В трехмерном случае L -координаты применяют для нахождения объемных интегралов вида:

$$\int_V L_1^a L_2^b L_3^c L_4^d dV = \frac{a!b!c!d!}{(a+b+c+d)!} 6V, \quad (\text{Б.1})$$

где V – объем тетраэдра.

$$V = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}. \quad (\text{Б.2})$$

Вычисление трехмерных (объемных) L -координат довольно сложно в аналитическом виде. Двухмерные координаты вычислены аналитически и часто приведены в книгах по конечно-

элементному моделированию. Для аналитического получения координат в трехмерном случае была разработана программа в Matlab (рисунок Б.1).

```
function TatraLCords()
    syms x y z x1 x2 x3 x4 y1 y2 y3 y4 z1 z2 z3 z4 L1 L2 L3 L4;

    % built system of equation and solve system - get all L's
    [L1, L2, L3, L4] = solve('1=L1+L2+L3+L4',...
        'x=x1*L1+x2*L2+x3*L3+x4*L4',...
        'y=y1*L1+y2*L2+y3*L3+y4*L4',...
        'z=z1*L1+z2*L2+z3*L3+z4*L4', L1, L2, L3, L4);

    % calculate determinant
    DMat=[1,x1,y1,z1;
        1,x2,y2,z2;
        1,x3,y3,z3;
        1,x4,y4,z4];
    D = det(DMat);

    L1=L1*D;
    L2=L2*D;
    L3=L3*D;
    L4=L4*D;

    % calculates differentials
    [L1x] = diff(L1,'x')*D;
    [L1y] = diff(L1,'y')*D;
    [L1z] = diff(L1,'z')*D;

    [L2x] = diff(L2,'x')*D;
    [L2y] = diff(L2,'y')*D;
    [L2z] = diff(L2,'z')*D;

    [L3x] = diff(L3,'x')*D;
    [L3y] = diff(L3,'y')*D;
    [L3z] = diff(L3,'z')*D;

    [L4x] = diff(L4,'x')*D;
    [L4y] = diff(L4,'y')*D;
    [L4z] = diff(L4,'z')*D;

    % built vector function
    W12=L1*[L2x;L2y;L2z]-L2*[L1x;L1y;L1z];
    W13=L1*[L3x;L3y;L3z]-L3*[L1x;L1y;L1z];
    W14=L1*[L4x;L4y;L4z]-L4*[L1x;L1y;L1z];
    W23=L2*[L3x;L3y;L3z]-L3*[L2x;L2y;L2z];
    W42=L4*[L2x;L2y;L2z]-L2*[L4x;L4y;L4z];
    W34=L3*[L4x;L4y;L4z]-L4*[L3x;L3y;L3z];
end
```

Рисунок Б.1 – Программа для вычисления трехмерных L -координат

Программа вычисляет:

- аналитический вид определителя матрицы;
- аналитические значения L координат;
- векторные базисные функции для тетраэдра.