

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

На правах рукописи



**Прокопьева Людмила Юрьевна**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ  
НАНОФОТОНИКИ НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННЫХ И  
АНАЛИТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ  
НЕСТАЦИОНАРНЫХ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА**

05.13.18 — Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Новосибирск — 2011

Работа выполнена в Институте вычислительных технологий  
Сибирского отделения РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
Михаил Петрович Федорук

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
доцент Леонид Лазаревич Фрумин

кандидат физико-математических наук  
Сергей Валерьевич Смирнов

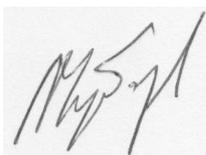
Ведущая организация: Институт вычислительной математики  
и математической геофизики СО РАН,  
г. Новосибирск.

Защита состоится 1 ноября 2011 года в 10<sup>00</sup> часов на заседании диссер-  
тационного совета ДМ 003.046.01 при Институте вычислительных тех-  
нологий СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, проспект академика  
М.А.Лаврентьева, 6, ИВТ СО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в специализированном читальном  
зале вычислительной математики и информатики ГПНТБ СО РАН (про-  
спект академика М.А.Лаврентьева, 6).

Автореферат разослан 22 сентября 2011 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор физико-математических наук,  
профессор



Л. Б. Чубаров

# Введение

## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** Одним из актуальных и интенсивно развивающихся современных разделов оптики является *нанофотоника*. Разработка наноструктур с нетривиальными свойствами для создания новых оптических устройств ведется во многих научно-исследовательских группах. В последнее время большое количество экспериментальных и теоретических работ посвящено исследованию ряда революционных устройств, например: оптических линз с разрешением, не ограниченным дифракционным пределом, всенаправленных оптических концентраторов, а также устройств, меняющих распределение электромагнитного поля вокруг объекта так, чтобы сделать его невидимым в заданном спектральном диапазоне (*optical cloaking*). Экспериментальное исследование искусственных материалов (метаматериалов) для этих и других устройств часто ограничено их сложной наноструктурой и, следовательно, высокой стоимостью изготовления опытных образцов. Поэтому для исследования, проектирования и оптимизации образцов материалов и оптических устройств на их основе возникает потребность в математическом моделировании распространения оптического сигнала в изучаемых структурах на основе аналитических и численных методов. При этом моделирование затруднено несоизмеримостью масштабов самих устройств (десятки микрон) и их структурных элементов (несколько нанометров), резкими изменениями электромагнитных свойств на границах элементов, а также наличием анизотропии и частотной дисперсии в используемых материалах. По этим причинам возникают следующие требования к применяемым численным методам: выбранный метод должен адекватно работать в средах со сложной геометрией разрыва диэлектрической проницаемости; для применяемых методов требуется разработка парал-

льных версий программ для ускорения расчетов; кроме того, требуется обобщение методов для сред с частотной дисперсией и анизотропией диэлектрической проницаемости.

**Цель работы** заключается в разработке инструментария для моделирования распространения электромагнитных волн в новых наноструктурированных материалах и устройствах нанофотоники на основе аналитических и численных методов решения нестационарных уравнений Максвелла, создании комплекса параллельных программ.

**На защиту выносятся** следующие результаты, соответствующие четырем пунктам паспорта специальности 05.13.18 — “математическое моделирование, численные методы и комплексы программ” по физико-математическим наукам.

*пункт 2 (развитие качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей):*

1. На основе теории Ми построено аналитическое решение уравнений Максвелла для цилиндрического устройства, состоящего из концентрических слоев с постоянной либо с обратной квадратичной радиальной зависимостью диэлектрической проницаемости, и падающего на устройство поля в виде плоской волны либо гауссова пучка ТЕ (Transverse Electric) и ТМ (Transverse Magnetic) поляризации.

*пункт 3 (разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий):*

2. Разработана и протестирована параллельная версия конечно-объемного алгоритма для решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированных сетках, в котором для достижения второго порядка точности по пространству и времени применяется схема MUSCL (Monotone Upstream-centered Scheme for Conservation Laws) и интерполяция полей на полшаг по времени с использованием формулы Тейлора и точных уравнений в недивергентной форме <sup>1</sup>; показано практически идеальное ускорение параллельной программы на многопроцессорных комплексах кластерной архитектуры при числе процессоров до 32 и достаточно большом количестве вычислительных ячеек.

---

<sup>1</sup>При последующих упоминаниях конечно-объемного алгоритма в тексте автореферата будет подразумеваться именно этот конечно-объемный алгоритм

3. Разработан и протестирован алгоритм, обобщающий на случай дисперсионных сред численные методы для решения нестационарных уравнений Максвелла: конечно-разностный метод Йи (Yee) и метод конечных объемов, в которых частотная зависимость диэлектрической проницаемости дается в виде аппроксимации Паде; а также разработано обобщение конечно-объемного алгоритма для сред с анизотропной диэлектрической проницаемостью в двумерном случае.

*пункт 4 (реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента):*

4. Создана программа PhotonicsCL, предназначенная для моделирования электромагнитных полей в цилиндрических устройствах, которая реализует алгоритм аналитического решения 1; создан пакет параллельных программ PhotonicsFVTD, предназначенный для расчета электромагнитных полей в композитных средах металл-диэлектрик произвольной двумерной геометрии и реализующий алгоритмы, перечисленные выше в 2, 3.

*пункт 5 (комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента):*

5. По результатам численного моделирования внешней и внутренней гиперлинз с помощью обобщенного на случай анизотропной диэлектрической проницаемости конечно-объемного алгоритма и программы PhotonicsFVTD показана уникальная способность гиперлинз увеличивать изображение объектов размером менее дифракционного предела.

6. С использованием созданных алгоритмов и программ выполнено моделирование нового оптического всенаправленного концентратора света (оптической “черной дыры”), получены теоретические и численные оценки эффективности поглощения идеального устройства и устройства, в котором радиальная зависимость диэлектрической проницаемости заменена однородными слоями.

Таким образом, в соответствии с формулой специальности 05.13.18 в работе присутствуют оригинальные результаты одновременно из трех областей: математического моделирования (1, 5, 6), численных методов (2, 3) и комплексов программ (4).

**Научная новизна** изложенных в диссертационной работе результатов заключается в следующем.

- Впервые предложена и реализована параллельная версия конечно-объемного алгоритма для решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированных сетках, и проведено тестирование ускорения параллельной версии алгоритма на вычислительных комплексах кластерной архитектуры.
- Впервые предложено обобщение методов конечных разностей  $\text{FEM}$  и конечных объемов для сред, частотная дисперсия диэлектрической проницаемости которых описывается аппроксимацией Паде, позволяющее единообразно, с помощью методов дополнительного дифференциального уравнения и рекурсивной свертки, моделировать среды с различной зависимостью диэлектрической проницаемости от частоты, характерной для диэлектрических и металлических сред. В частности, для модели критических точек впервые построены схемы рекурсивной свертки второго порядка и установлены численные погрешности предложенных методов.
- Впервые проведено обобщение конечно-объемного алгоритма для решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированных сетках для случая анизотропной диэлектрической проницаемости в двумерной постановке, с помощью которого выполнено моделирование цилиндрических гиперлинз.
- Впервые проведен подробный теоретический, основанный на теории Ми, анализ для цилиндрического случая “оптической черной дыры”, идеальной и выполненной из однородных слоев, а также впервые получена приближенная оценка эффективности поглощения прибора для ТМ случая и выполнено математическое моделирование устройства в рамках нестационарных уравнений Максвелла на основе численных методов: метода конечных разностей  $\text{FEM}$  и метода конечных объемов.

**Практическая значимость работы.** Разработанные аналитические и численные методы для решения нестационарных уравнений Максвелла в диэлектрических и металлических средах, а также реализующие их комплексы программ могут быть применены для проектирования, анализа и оптимизации современных оптических устройств, выполненных из метаматериалов и материалов нанофотоники.

Материалы диссертационной работы использовались при выполнении гранта РФФИ № 09-01-00352 и междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 113 (2009-2011гг).

**Обоснованность и достоверность** основных результатов, полу-

ченных в диссертации, основываются на проведении методических тестовых расчетов, сопоставлении результатов с аналитическими решениями, а также с численными результатами, полученными другими авторами и другими методами.

**Представление работы.** Результаты настоящего исследования были представлены на следующих научных конференциях: Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (Красноярск, 2006; Новосибирск, 2007); Russian-German Advanced Research Workshop (Novosibirsk, 2007); Совещание Российско-Казахстанской рабочей группы по вычислительным и информационным технологиям (Новосибирск, 2007); Международная научная конференция по параллельным вычислительным технологиям (Челябинск, 2007); Всероссийская конференция по вычислительной математике (Новосибирск, 2007, 2009); Conference on Applied Computational Electromagnetics (Niagara Falls, Canada, 2008); The Conference on Lasers and Electro-Optics and The Quantum Electronics and Laser Science Conference (San Jose, CA, USA, 2010); SIAM Conference on Mathematical Aspects of Material Science (Philadelphia, PA, USA, 2010); 14th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (Chicago, IL, USA, 2010).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 13 работ, в том числе (в скобках в числителе указан общий объем этого типа публикаций, в знаменателе — объем, принадлежащий лично автору) 3 статьи в изданиях, рекомендованных ВАК (2.0/1.2), 3 — в трудах международных и всероссийских конференций (1.9/1.2), 7 — в тезисах международных и всероссийских конференций (0.4/0.2).

**Личный вклад автора.** В публикациях [1,4-5,10,12] автору принадлежит разработка и реализация параллельных версий конечно-объемного алгоритма и метода конечных разностей  $\tilde{Y}$ и, а также проведение численных расчетов; в [6,9] автором предложены численные методы для учета дисперсии диэлектрической проницаемости в методах конечных разностей  $\tilde{Y}$ и и конечных объемов, проведен анализ дисперсионной погрешности и устойчивости, выполнены расчеты одномерных и двумерных задач; в [3,7-8] автору принадлежит вывод аналитического решения с помощью теории  $M$ и, создание комплекса компьютерных программ для моделирования волновых процессов на основе теории  $M$ и и численных методов решения нестационарных уравнений Максвелла, а также полученная приближенная оценка эффективности поглощения оптиче-

ской черной дыры для случая ТМ поляризации. Во всех публикациях автор принимала участие в постановке задач, интерпретации и анализе точности результатов, создании компьютерных программ и проведении численных экспериментов с использованием разработанных программ.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы из 110 наименований. Полный объем диссертации составляет 157 страниц, включая 30 рисунков и 5 таблиц.

Автор выражает глубокую и искреннюю благодарность научному руководителю доктору физ.-мат. наук М. П. Федоруку за всестороннюю поддержку и постоянное внимание в ходе выполнения работы. Отдельно хочется поблагодарить кандидата физ.-мат. наук А. В. Кильдишева за многочисленные обсуждения и консультации, которые во многом способствовали успешному выполнению работы, отраженной в главах 2-4, кандидата физ.-мат. наук А.С. Лебедева — за построение неструктурированных сеток для проведения расчетов электромагнитных полей методом конечных объемов, а также Д.Л. Чубарова — за техническую поддержку при проведении параллельных вычислений.

## Содержание диссертации

При изложении содержания диссертации используются следующие **обозначения и сокращения**:  $i$  — комплексная единица,  $\varepsilon_0$  — диэлектрическая постоянная,  $c$  — скорость света в вакууме,  $U(t)$  — функция Хевисайда,  $\tau$  — шаг дискретизации по времени, НУМ — нестационарные уравнения Максвелла, МКР — метод конечных разностей, МКО — метод конечных объемов, МКЭ — метод конечных элементов.

Во **введении** обосновывается актуальность темы исследования, формулируются основные цели и задачи диссертационной работы, приводится краткое содержание по главам. Формулируются основные положения, выносимые на защиту.

В **главе 1** представлены численные методы решения нестационарных уравнений Максвелла в изотропных средах без дисперсии, которые в последующих главах модифицируются для анизотропных и дисперсионных сред и применяются для моделирования оптических устройств. Предложены параллельные версии используемых алгоритмов для проведения расчетов на многопроцессорных вычислительных комплексах.

В §1.1 приведены нестационарные уравнения Максвелла, описывающие распространение электромагнитного поля в изотропной среде без дисперсии, а также соглашения о безразмерных величинах.

В §1.2 дается краткое описание стандартного конечно-разностного метода для решения НУМ, предложенного Йи (Yee) [1] и излагается конечно-объемный алгоритм на неструктурированных сетках [2].

Параграф 1.3 посвящен распараллеливанию МКР и МКО и тестированию ускорения на многопроцессорных вычислительных комплексах кластерной архитектуры. Параллельные версии основаны на декомпозиции вычислительной области и реализованы с помощью библиотеки MPI (Message Passing Interface). Приводятся блок-схемы параллельных программ. Тестовые расчеты показывают, что при достаточном количестве вычислительных узлов и тестируемом количестве процессоров (32) ускорение параллельной программы практически линейно.

**Глава 2** посвящена введению дисперсионного отклика металлов и диэлектриков в конечно-разностную и конечно-объемную модели численного решения НУМ.

В §2.1 вводится обобщенная модель дисперсии, в которой зависимость относительной диэлектрической проницаемости от частоты представляется в виде аппроксимации Паде с вещественными коэффициентами. В предположении об отсутствии кратных корней в знаменателе последняя раскладывается на сумму Паде-аппроксимант более низких степеней

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\sigma}{i\omega\varepsilon_0} + \sum_{i \in I_1} \frac{a_{0,i}}{b_{0,i} - i\omega} + \sum_{i \in I_2} \frac{a_{0,i} - i\omega a_{1,i}}{b_{0,i} - i\omega b_{1,i} - \omega^2}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_\infty$  — диэлектрическая проницаемость на высоких частотах,  $\sigma$  — проводимость,  $I_1 = \overline{1, i_1}$  и  $I_2 = \overline{1, (i_1 + i_2)} \setminus I_1$  — непересекающиеся множества индексов. В частности, в виде (1) представляются классические модели Дебая, Друде-Лоренца, Зельмейера, а также модель критических точек [3].

Если в уравнении (1) слагаемое в суммах с индексом  $i$  обозначить  $\chi_i$ , то соответствующая поляризация  $\mathbf{P}_i(\omega) = \mathbf{E}(\omega)\chi_i(\omega)$  во временной области определяется через интеграл свертки ( $I = I_1 \cup I_2$ )

$$\mathbf{P}_i(t) = \int_0^t \chi_i(\tau)\mathbf{E}(t - \tau)d\tau \quad \forall i \in I, \quad (2)$$

либо с помощью задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения (ОДУ) первого или второго порядка

$$\dot{\mathbf{P}}_i + b_{0,i}\mathbf{P}_i = a_{0,i}\mathbf{E}, \mathbf{P}_i(0) = 0 \quad \forall i \in I_1, \quad (3)$$

$$\ddot{\mathbf{P}}_i + b_{1,i}\dot{\mathbf{P}}_i + b_{0,i}\mathbf{P}_i = a_{1,i}\dot{\mathbf{E}} + a_{0,i}\mathbf{E}, \dot{\mathbf{P}}_i(0) = \mathbf{P}_i(0) = 0 \quad \forall i \in I_2. \quad (4)$$

В §2.2 для обобщенной модели (1) строятся численные схемы для нахождения локального отклика  $\mathbf{P}_i$ . При этом используется два классических подхода для дискретизации дисперсионного соотношения — метод дополнительного дифференциального уравнения (Auxiliary Differential Equation, ADE) и метод рекурсивной свертки (Recursive Convolution, RC). Эти методы с различным выбором конечно-разностной аппроксимации (для ADE) либо метода численного интегрирования (для RC) освещены в [4–9], однако выводятся отдельно для классических моделей Друде, Лоренца, Дебая, причем для каждого метода RC сопровождаются громоздкими вычислениями коэффициентов. В данном параграфе приводится универсальная параметризация для более общей модели дисперсии (1) для ADE и RC методов, которая унифицирует и минимизирует вычислительную сложность разных подходов, а также облегчает численный анализ схем.

В предлагаемом методе ADE для аппроксимации ОДУ 1-го порядка (3) используется схема Кранка-Николсон, а для ОДУ 2-го порядка (4) — билинейная схема. Выбор последней обусловлен тем, что схема не нарушает условие устойчивости при совместном решении со схемой Йи [1] для НУМ. Для модели Лоренца этот факт показан в [10], для предлагаемой обобщенной модели устойчивость исследована в §2.4.

Метод RC основан на вычислении интеграла свертки (2), которое выполняется рекурсивно для каждого слагаемого  $\mathbf{P}_i$  и для различных методов численного интегрирования согласно следующим леммам.

**Лемма 1** *Если для восприимчивости  $\chi(t) = \alpha e^{\beta t} U(t)$  метод RC аппроксимирует интеграл свертки (2) в виде  $\mathbf{P}^n = \sum_{j=0}^n \mathbf{E}^j \chi_{n-j}$ , причем коэффициенты аппроксимации  $\chi_j(\alpha, \beta, \tau)$  удовлетворяют рекурсивному соотношению  $\chi_{j+1} = e^{\beta\tau} \chi_j, j \geq 1$ , тогда интеграл свертки может быть вычислен рекурсивно*

$$\mathbf{P}^{n+1} = e^{\beta\tau} \mathbf{P}^n + \chi_0 \mathbf{E}^{n+1} + [\chi_1 - e^{\beta\tau} \chi_0] \mathbf{E}^n.$$

**Лемма 2** Пусть условия Леммы 1 выполнены, а восприимчивость дается суммой  $\chi(t) = \chi^+(t) - \chi^-(t)$ ,  $\chi^\pm = \alpha^\pm \exp(\beta^\pm t)U(t)$ , тогда рекурсивная формула для вычисления интеграла свертки имеет вид

$$\mathbf{P}^{n+1} = \beta_1 \mathbf{P}^n + \beta_0 \mathbf{P}^{n-1} + \alpha_2 \mathbf{E}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{E}^n + \alpha_0 \mathbf{E}^{n-1},$$

где  $\alpha_0 = e^{\beta^+ \tau} \chi_1^- - e^{\beta^- \tau} \chi_1^+ - \alpha_2 \beta_0$ ,  $\alpha_1 = \chi_1^+ - \chi_1^- - \alpha_2 \beta_1$ ,  $\alpha_2 = \chi_0^+ - \chi_0^-$ ,  $\beta_1 = 2e^{-\gamma \tau} \cos \delta \tau$ ,  $\beta_0 = -e^{-2\gamma \tau}$ ,  $\gamma = -(\beta^- + \beta^+)/2$ ,  $\delta = \iota(\beta^- - \beta^+)/2$ .

Например, условиям Леммы 1 удовлетворяют: метод прямоугольников (RRC) [5], метод трапеций (TRC) [6], кусочно-постоянный метод первого и второго порядка (PCRC, PCRC2) [7, 8], кусочно-линейный метод (PLRC) [9]. Для методов приводятся коэффициенты  $\chi_0(\alpha, \beta, \tau)$ ,  $\chi_1(\alpha, \beta, \tau)$ , необходимые для построения рекурсивной формулы.

В §2.3 численные уравнения для поляризации  $\mathbf{P}_i$ , полученные ранее методами ADE и RC, решаются совместно с МКО и МКР для НУМ. При этом, число выполняемых операций сокращается по сравнению с классическими работами [4–9] за счет использования следующей Леммы.

**Лемма 3** Пусть дисперсия диэлектрической проницаемости дается соотношением (1), и локальная поляризация вычисляется рекурсивно

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_i^{n+1} &= \beta_{1,i} \mathbf{P}_i^n + \alpha_{2,i} \mathbf{E}^{n+1} + \alpha_{1,i} \mathbf{E}^n & \forall i \in I_1, \\ \mathbf{P}_i^{n+1} &= \beta_{1,i} \mathbf{P}_i^n + \beta_{0,i} \mathbf{P}_i^{n-1} + \alpha_{2,i} \mathbf{E}^{n+1} + \alpha_{1,i} \mathbf{E}^n + \alpha_{0,i} \mathbf{E}^{n-1} & \forall i \in I_2, \end{aligned}$$

тогда схема Йи [1] с учетом дисперсии может быть записана в виде

$$\begin{cases} \mathbf{E}^{n+1} = & \xi_1^{-1} \{ \xi_0 \mathbf{E}^n + c\tau \nabla \times \mathbf{H}^{n+1/2} - \sum_{i \in I} \Psi_i^n \} \\ \Psi_i^{n+1} = \beta_{1,i} \Psi_i^n & + \{ (\beta_{1,i} - 1) \eta_{1,i} \} \mathbf{E}^n & \forall i \in I_1 \\ \Psi_i^{n+1} = \beta_{1,i} \Psi_i^n + \Phi_i^n & + \{ \eta_{0,i} + (\beta_{1,i} - 1) \eta_{1,i} \} \mathbf{E}^n & \forall i \in I_2 \\ \Phi_i^{n+1} = \beta_{0,i} \Psi_i^n & - \{ \eta_{0,i} - \beta_{0,i} \eta_{1,i} \} \mathbf{E}^n & \forall i \in I_2 \end{cases}, \quad (5)$$

где  $\xi_1 = \varepsilon_\infty + \frac{\sigma\tau}{2\varepsilon_0} + \sum_{i \in I} \alpha_{2,i}$ ,  $\xi_0 = \xi_1 - \frac{\sigma\tau}{\varepsilon_0} - \sum_{i \in I_1} \eta_{1,i}$ ,  $\eta_{0,i} = \alpha_{0,i} + \alpha_{2,i} \beta_{0,i}$ ,  $\eta_{1,i} = \alpha_{1,i} + \alpha_{2,i} \beta_{1,i}$ .

Аналогичным образом в этом параграфе дисперсия вводится в МКО.

В §2.4 исследованы дисперсионные ошибки и устойчивость предложенных численных схем для сред, дисперсия которых представляется в виде Паде аппроксимации порядка [1/2]. Для ADE метода выведено

достаточное условие на коэффициенты  $a_0 b_1 - a_1 b_0 \geq 0$  и  $\sin \phi \geq 0$  для того, чтобы учет дисперсии в схеме Йи не приводил к нарушению условия устойчивости. Для исследуемых ADE и RC методов анализируется относительная погрешность дисперсии в численном решении  $(\chi_{num} - \chi)/\chi$ . Анализ показывает, что наиболее точный локальный отклик среды получается при вычислении поляризации методом PCRC2.

В §2.5 приведены результаты численных экспериментов с помощью предложенных дисперсионных МКО, МКР, а также МКЭ (COMSOL Multiphysics). Дисперсия золота описывалась в рамках модели критических точек [3]. Проведены одномерные расчеты прохождения плоской волны через пленку из золота, подтверждающие второй порядок сходимости. Кроме того, для анализа точности разработанных методов выполнен расчет задачи о нормальном падении плоской волны света видимого диапазона ТЕ и ТМ поляризации на образец периодической наноструктуры из золота и двуокси кремния (рис. 1а). Для вычисления точного коэффициента пропускания и отражения структуры использована программа [11]. Результаты сравнения точности коэффициентов для ТМ поляризации показаны на рис. 1. Сравнение проводилось на прямоугольных сетках, с шагом по пространству равному  $h/4$  для МКО и  $h/2$  для МКР и МКЭ. В МКЭ порядок элемента брался первым, а в областях с дисперсией повышался до пятого. При этом время счета МКЭ оказалось на 2 порядка больше.

**Глава 3** посвящена моделированию цилиндрических линз: гиперлинз и линзы Луненберга. Для моделирования гиперлинзы разработана анизотропная модификация МКО.

В §3.1 описывается устройство гиперлинзы, предложенное в работе [12]. Такая линза может быть сделана из анизотропных немагнитных метаматериалов и обладает разрешающей способностью менее дифракционного предела. В отличие от идеальной гиперлинзы, материальные уравнения для которой могут быть выведены с использованием аппарата трансформационной оптики, ее немагнитные аналоги не имеют отражений лишь на одной — внутренней ( $\rho = a$ ) либо внешней ( $\rho = l$ ) границе цилиндрического прибора. Для внутренней и внешней гиперлинз компоненты тензора диэлектрической проницаемости в цилиндрических координатах  $\varepsilon = \text{diag} [\varepsilon_\rho, \varepsilon_\phi]$  задаются уравнениями (6) и (7) соответственно.

$$\varepsilon_\phi(\rho) = \rho/r, \quad \varepsilon_\rho(\rho) = r/(r'\rho) \quad a \leq \rho \leq l \quad (6)$$

$$\varepsilon_\phi(\rho) = l\rho/(br), \quad \varepsilon_\rho(\rho) = r/(r'\rho) \quad a \leq \rho \leq l \quad (7)$$

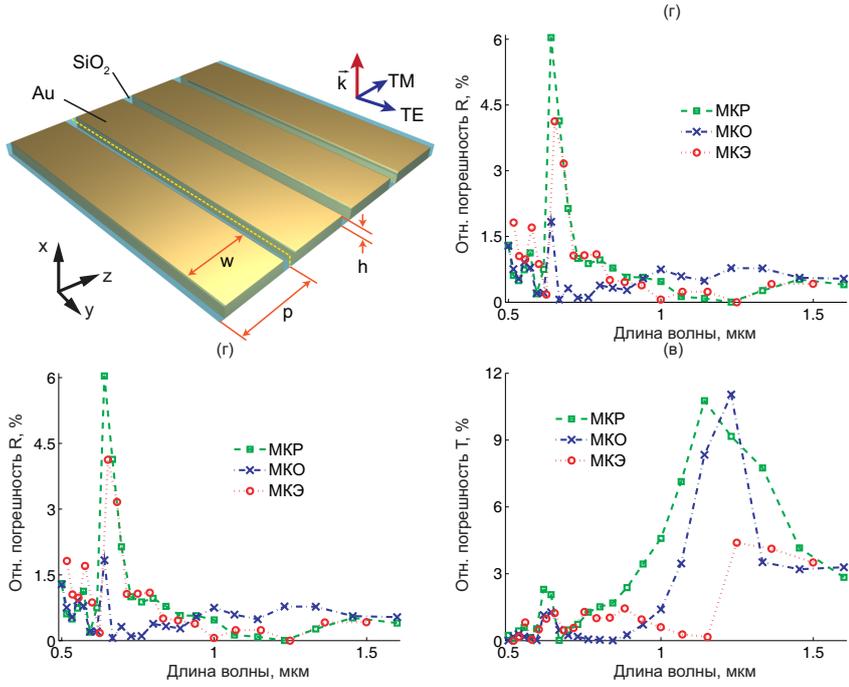


Рис. 1: а) Геометрия:  $h = 10\text{нм}$ ,  $w = 400\text{нм}$ ,  $p = 480\text{нм}$ ; б) отражение (R) и пропускание (T), точное (SHA) и численное; в-г) относительная ошибка R,T.

где  $r = r(\rho) = \tau^{-1}(\rho - l) + b$  – выбранное линейное преобразование, которое взаимно однозначно отображает кольцо  $\{a \leq \rho \leq l\}$  на кольцо  $\{a \leq r \leq b\}$ ,  $\tau = (l - a)/(b - a)$ ,  $a < b < l$  – параметры линзы.

В §3.2 строится модификация МКО для анизотропной среды с произвольным тензором диэлектрической проницаемости в декартовых координатах  $\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix}$ .

В §3.3 приводятся результаты моделирования внутренней и внешней гиперлинз, демонстрирующие увеличение изображения от 5 источников света с расстоянием менее дифракционного предела до размеров, которые могут разрешить стандартные оптические устройства. На рис.2а-б показаны расчеты амплитуды магнитного поля для гиперлинз.

В §3.4 с помощью МКО проводится моделирование внутренней лин-

зы Luneberg, выполненной из 10 однородных слоев. На рис.2в-е приводятся результаты расчета, из которых видно, что при падении плоской волны слоистая структура фокусирует поле подобно ее идеальному аналогу с непрерывным распределением диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(r) = (r_0^2 + r_1^2 - r^2)/r_1^2$ , где  $r_1$  — фокус линзы,  $r_0$  — радиус линзы.

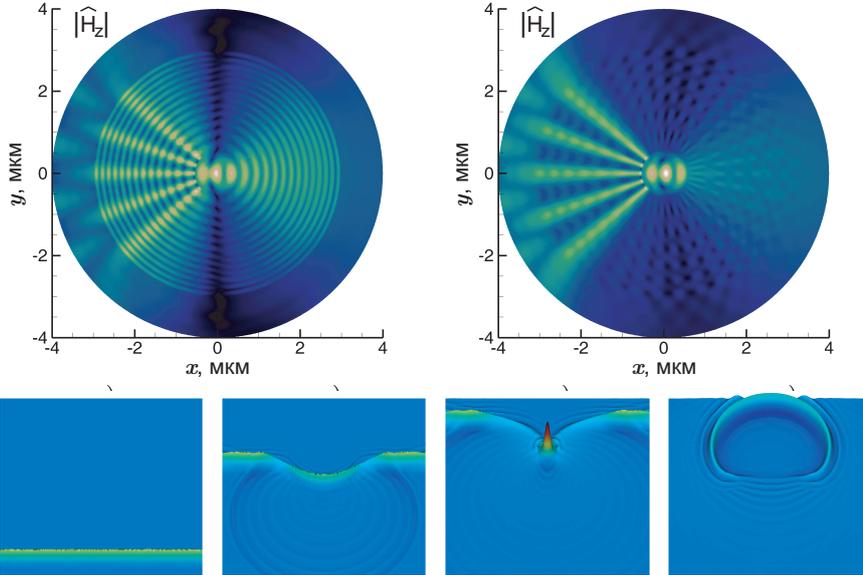


Рис. 2: а) и б) — амплитуда магнитного поля для внутренней и внешней гиперлинз; параметры линзы:  $a = 600\text{нм}$ ,  $b = 610\text{нм}$ ,  $l = 3\text{мкм}$ , длина волны  $\lambda = 732\text{нм}$ ; в)-е) — электрическое поле при падении плоской волны на внутреннюю линзу Luneberg с параметрами  $r_1 = 0.75\text{мкм}$ ,  $r_0 = 1\text{мкм}$ .

**Глава 4** посвящена исследованию идеально-поглощающего концентратора света, также называемого оптической черной дырой. Такое устройство было впервые предложено в работе [13] и вскоре было выполнено в эксперименте [14], однако не в оптическом, а в микроволновом диапазоне частот. В главе теоретический результат [13] обобщен для случая ТМ поляризации. Для моделирования, проектирования и оптимизации как идеального устройства, так и слоистого аналога, который может быть выполнен с использованием метаматериалов, предложены

аналитические и численные методы.

В §4.1 описывается устройство оптической черной дыры (ОЧД), представляющее собой поглощающее ядро радиуса  $r_c$  и оболочку с внешним радиусом  $r_s$ , обеспечивающую захват света. Диэлектрическая проницаемость системы дается формулой (8)

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_s, & r > r_s \\ \varepsilon_s(r_s/r)^p, & r_c < r \leq r_s, \\ \varepsilon_c + \nu\gamma_c & r \leq r_c \end{cases}, \quad (8)$$

где  $\varepsilon_s$  и  $(\varepsilon_c + \nu\gamma_c)$  — диэлектрическая проницаемость вне ОЧД и в ядре,  $r_c = r_s(\varepsilon_s/\varepsilon_c)^{1/p}$ ,  $p \geq 2$ . Предполагается осевая симметрия ОЧД и  $p = 2$ .

Параграф 4.2 посвящен аналитическому описанию работы устройства для монохроматического электромагнитного поля. Решение уравнений Максвелла строится с помощью теории Ми для произвольного цилиндрического устройства, состоящего из концентрических слоев. Каждый слой предполагается либо однородным, либо с обратной квадратичной зависимостью диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(r) = C/r^2$ . Падающее поле задается в виде плоской волны и гауссовых пучков, ТЕ и ТМ поляризации. Алгоритм реализован в программе PhotonicsCL [15].

В §4.3 с помощью полученного аналитического решения выводится теоретическая оценка эффективности поглощения для идеальной ОЧД. В частности, оценка показывает, что если внешний радиус оболочки много больше длины волны падающего света  $r_s \gg \lambda$ , то небольших потерь в ядре  $\gamma_c/\varepsilon_c \approx 5/(k_s r_s)$  уже достаточно для того, чтобы устройство поглощало 99% падающего света,  $k_s = 2\pi\lambda^{-1}\sqrt{\varepsilon_s}$ .

В §4.4 разработанная аналитическая теория применяется для моделирования ОЧД. На рис.3 представлены результаты расчета амплитуды поля при падении гауссова пучка под разными углами к идеальной ОЧД. Проведено моделирование ОЧД, состоящей из однородных слоев; показано, что 17 слоев достаточно для достижения 94% поглощения.

В §4.5 моделирование идеальной ОЧД проведено в рамках нестационарных уравнений Максвелла с помощью разработанного МКО и МКР, результаты расчетов согласуются с аналитической теорией. Такой численный инструмент позволяет моделировать устройство для произвольного падающего электромагнитного поля.

В **заключении** приводятся результаты диссертационной работы, которые в целом совпадают с основными положениями, выносимыми на защиту.

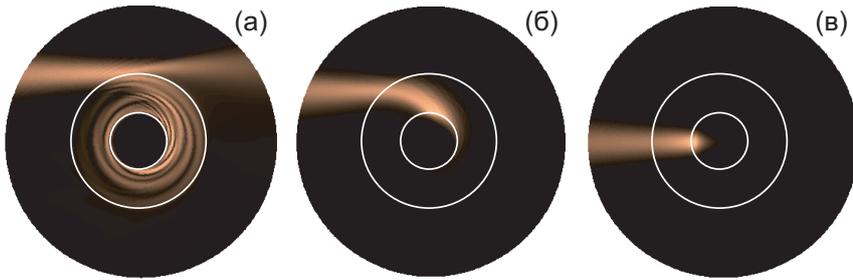


Рис. 3: Амплитуда магнитного поля (ТМ поляризация) при падении гауссова пучка шириной 3 мкм под углами а)  $90^\circ$ , б)  $60^\circ$ , в)  $0^\circ$  к идеальной ОЧД.  $\lambda = 1.5\text{мкм}$ ,  $r_s = 20\text{мкм}$ ,  $\varepsilon_s = 2.1$ ,  $\varepsilon_c = 12$ ,  $\gamma_c = 0.7$ , поглощение 99%.

### Список основных работ по теме диссертации

#### *Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК*

1. Прокопьева Л.Ю., Федорук М.П., Лебедев А.С. Параллельный алгоритм метода конечных объемов для решения трехмерных уравнений Максвелла в нанокomпозитных средах // Вычислительные методы и программирование. – 2009. – Т.10. – № 2. – С.28-33.
2. Прокопьева Л.Ю. Моделирование анизотропных метаматериалов с помощью параллельной реализации метода конечных объемов для решения нестационарных уравнений Максвелла // Вычислительные технологии. – 2009. – Т.14. – № 3. – С.58-68.
3. Kildishev A.V., Prokopeva L.J., Narimanov E.E. Cylinder light concentrator and absorber: theoretical description // Opt. Express. – 2010. – V.18. – P.16646-16662.

#### *Публикации в трудах международных и всероссийских конференций*

4. Прокопьева Л.Ю., Шокин Ю.И., Лебедев А.С., Федорук М.П. Параллельная реализация метода конечных объемов для решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // Вычислительные технологии. – 2007. – Т.12. – Вып: Спецвыпуск № 4. – С.59-69, по материалам V Российско-Казахстанской рабочей группы по вычислительным и информационным технологиям.

5. Prokopeva L.J., Lebedev A.S., Fedoruk M.P., Kildishev A.V. FVTD Simulations of Nano-structured Plasmonic Metamaterials // 24th Annual Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics, Niagara Falls, Canada.–2008.–P.562-566.
6. Prokopyeva L.Yu., Shokin Yu.I., Lebedev A.S., Shtyrina O.V., and Fedoruk M.P. Parallel numerical modeling of modern optics devices, chapter in “Computational Science and High Performance Computing III”. Eds: E.Krause et al. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.–2008.–V.101.–P.122-136, Proc. of the 3rd Russian-German Advanced Research Workshop.

*Публикации в тезисах международных и всероссийских конференций*

7. Prokopeva L.J., Borneman J., Kildishev A.V. Time-domain modeling of metal-dielectric nanostructures characterized by a set of single-pole dispersion terms // 14th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC), Chicago, IL, USA.–2010.–P.1-1
8. Kildishev A., Prokopeva L., Narimanov E. An Analysis and Performance Evaluation of the Optical Black Hole // SIAM Conference on Mathematical Aspects of Material Science, Philadelphia, PA, USA.–2010.–P.107.
9. Kildishev A.V., Prokopeva L.J., Shtyrina O.V., Fedoruk M.P., Narimanov E.E. Optical Black Hole: Design and Performance // The Conference on Lasers and Electro-Optics and The Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS-2010), San Jose, CA, USA.–2010. JWA10.
10. Prokopeva L.J., Borneman J., Kildishev A.V. Time-Domain Modeling of Metal-Dielectric Nanostructures // The Conference on Lasers and Electro-Optics and The Quantum Electronics and Laser Science Conference, San Jose, CA, USA.–2010. JWA14.
11. Прокопьева Л.Ю. Параллельные вычисления в некоторых задачах нелинейной волоконной оптики // Тезисы докладов международной научной конференции по параллельным вычислительным технологиям (ПаВТ), Челябинск.–2007.–С.286.
12. Маслова О.А., Прокопьева Л.Ю. Параллельные численные методы решения уравнений Максвелла: метод конечных объемов и метод конечных разностей // Тезисы докладов VIII Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям, Новосибирск.–2007.–С.60.
13. Прокопьева Л.Ю. Параллельная реализация метода конечных объемов для решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // Тезисы докладов VII Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям, Красноярск.–2006.–С.26-27.

## Список цитируемой литературы

- [1] K. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media IEEE Trans. Antennas Propag. Vol. 14, 1966, pp. 302-307.
- [2] Лебедев А.С., Федорук М.П., Штырина О.В. Конечно-объемный алгоритм решения нестационарных уравнений Максвелла на неструктурированной сетке // Журн. выч. мат. и мат. физики 47, №7, 2006, С. 1286–1301.
- [3] Etchegoin P.G., Le Ru E.C., Meyer M. An analytic model for the optical properties of gold // J. Chem. Phys, Vol. 125, 2006, pp. 164705-3.
- [4] Taflove A. and Hagness S.C. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 3rd ed. Artech House Publishers, 2005.
- [5] Hawkins R., Kallman J. Linear electronic dispersion and finite-difference time-domain calculations: a simple approach (integrated optics) // J. Lightwave Technol., Vol. 11, 1993, pp. 1872-1874.
- [6] Siushansian R., LoVetri J. A comparison of numerical techniques for modeling electromagnetic dispersive media // IEEE Microwave Guided Wave Lett., Vol. 5, 1995, pp. 426-428.
- [7] Luebbers R., Hunsberger F. FDTD for Nth-order dispersive media // IEEE Trans. Antennas Propag., Vol. 40, 1992, pp. 1297-1301.
- [8] Schuster J., Luebbers R. An accurate FDTD algorithm for dispersive media using a piecewise constant recursive convolution technique // IEEE Antennas and Propagation Soc. Internat. Symp. Digest, Vol. 4, 1998, pp. 2018-2021.
- [9] Kelley D. et al. Piecewise linear recursive convolution for dispersive media using FDTD // IEEE Trans. Antennas Propag., Vol. 44, 1996, pp. 792-797.
- [10] Knoesen A., Hulse C. Dispersive models for the finite-difference time-domain method: design, analysis, and implementation // J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 11, 1994, p. 1802.
- [11] Ni X. et al. Photonics sha-2d: Modeling of single-period multilayer optical gratings and metamaterials. DOI:10254/nanohub-r6977.6, 2009.
- [12] Kildishev A.V., Narimanov E.E. Impedance-matched hyperlens // Opt. Lett., Vol. 32, 2007, pp. 3432-3434.
- [13] Narimanov E.E., Kildishev A.V. Optical black hole: Broadband omnidirectional light absorber // Appl. Phys. Lett., Vol. 95, 2009, pp. 041106-3.
- [14] Cheng Q. et al. An omnidirectional electromagnetic absorber made of metamaterials // New Journal of Physics, Vol. 12, 2010, pp. 063006-10.
- [15] Ni X., Gu F., Prokopenko L.J., Kildishev A.V. PhotonicsCL: Photonic Cylindrical Multilayer Lenses. DOI: 10254/nanohub-r9914.1, 2010.

Прокопьева Людмила Юрьевна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ  
НАНОФОТОНИКИ НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННЫХ И  
АНАЛИТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ  
УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук