

用三维并行时域有限差分算法研究光子晶体薄板 W3 波导传输特性*

朱志宏 叶卫民 季家镛 袁晓东 曾淳

(国防科技大学光电学院光子声子研究中心,长沙 410073)

摘要 构建了用于高性能并行计算的 PC 机群环境,将基于此机群环境的三维并行时域有限差分算法用于光子晶体薄板 W3 波导传输特性研究.性能分析表明:对于大规模问题,机群并行 FDTD 算法能够获得较理想的加速比.具体计算了 W3 波导的透射率频谱和光场分布.结果表明:光子晶体薄板 W3 波导能够实现光的三维约束,其导带中存在着微小禁带(mini-gap).

关键词 光子晶体;时域有限差分;并行计算;消息传递接口;W3 波导

中图分类号 O436

文献标识码 A

0 引言

光子晶体(photonic crystals)^[1,2]因其具有控制光子运动的能力而备受关注^[3,4].光子晶体是一种周期性电介质,在周期性电介质材料中,光的色散曲线存在类似于半导体禁带的“光子禁带”(photonic band gap)^[5~10];如果光的频率落在禁带范围内,则它不能在介质中传播.光子晶体的奇特的本领正是缘于这个禁带的存在.光在光子晶体中传播的特性,是光子晶体研究的一个重要方面.光子晶体传输特性理论研究的方法有很多种,如传输矩阵法和分层多次散射法^[12]等等.本文主要是应用时域有限差分方法(FDTD)^[13~15]来进行研究.FDTD 方法能够很直观地给出光在光子晶体中的传输行为,它能处理任意几何形状的光子晶体.它的另外一个优点是可以通过傅立叶变换,一次性计算出涵盖很宽频率范围的透射谱.然而对于目前普遍使用的单个 PC 机来说,三维 FDTD 算法在计算效率方面相当不足,需要较长的计算时间和较大的存储空间,这是应用此方法研究光子晶体传输特性的瓶颈.为了克服上述两个问题,高性能的并行计算技术是一个重要解决途径.本文是利用现成计算资源,将通过网卡互连的微机机群组织成为一个并行计算系统,用较少的投资实现了光子晶体三维并行时域有限差分计算^[16,17].由于三维光子晶体制作困难,而薄板光子晶体^[18]的制作相对容易并且保持了光子晶体的带隙特性(导模带隙),因而成为实现光子晶体多项应用的实际有效方案.光子晶体薄板 W1 单模波导存在着光被耦合进 W1 波导比较困难和对制作准确度要求高等缺点,因此本文以光子晶体薄板多模 W3 波导为研究对象.

1 并行计算平台构建

在实验室中的每台独立的微机上装上 100 兆快速以太网卡(其中某一台微机装两张网卡,其它微机装一张);通过网卡用 5 类非屏蔽双绞线制作的 RJ45 缆线和一个快速以太网交换机把独立的微机连接起来;为每台微机设立一个相应的 IP 地址;在每台微机上用相同的用户名和密码建立一个管理员级的帐号;在每台微机上安装 MPICH 软件;在每台微机上相同的位置建立一个文件夹(用来存放并行程序).

在 PC 机群系统上进行三维 FDTD 并行运算的基本原理是进行分块计算.将光子晶体薄板计算空间沿 X 轴分成 P 个子空间(如图 1 和图 2),一台微机一个进程对应一个子空间.每个进程负责自己子空间内六个场分量 $H_x, H_y, H_z, E_x, E_y, E_z$ 的运算和存储,按照 FDTD 算法的特点,因为相邻子空间界面场迭涉及相邻的两个子空间,所以相邻的微机需要通讯,以交换场量信息、保证整个场量的迭代同步进行.由于微机间通信量很大,为了解决阻塞、死锁问题,想办法减少相邻子空间交换边界场分量的个数和使用恰当的通讯顺利是必须的.在程序中,选取的激励源为高斯调制波: $E = e^{-(t-t_0)^2/T^2} \cdot \sin(2\pi f_0 t)$,通过适当的选取参量 T (脉冲宽度)和 f_0 (载波频率),可以方便的控制激励源的频谱,防止

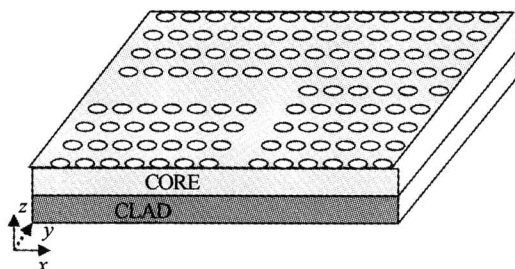


图 1 光子晶体薄板波导

Fig. 1 Photonic crystal slab waveguide structure

*973 国防安全重大基础研究项目资助

Tel:0731-4573737-5 Email:zzhwxc@163.com

收稿日期:2005-03-03

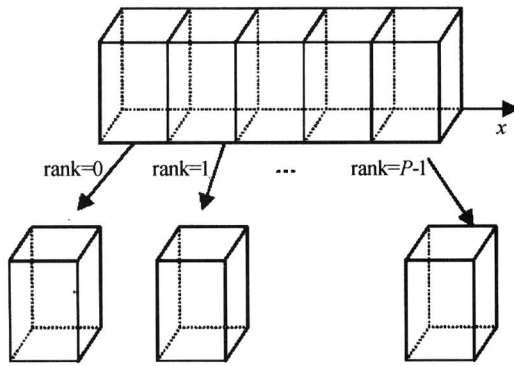


图2 计算域的空间分解

Fig. 2 Dividing three-dimensional volume into P -subspaces along the X-axis

过多的频率成分在光子晶体薄板中存在. 光子晶体薄板边界是用理想匹配层(PML)来截断的.

2 并行计算结果与分析

运行的底层硬件由 12 台微机组成的并行计算网络, 每台微机的配置不一样, 有 512M 字节主存的, 有 1G 字节主存的, 有 2.4GHz 主频 CPU 的, 有 1.5GHz 主频 CPU 的. 为了提高效率, 分配任务时候, 要考虑负载平衡问题.

采用的计算模型结构如图 1, 模型结构的尺寸是: 方格子光子晶体薄板的晶格常量为 a , 圆孔半径为 $0.28a$, 薄板厚度为 $0.5a$, 相对介电常量为 12.0; 无限厚衬底, 相对介电常量为 2.1. x 和 y 方向上的周期数分别为 10 和 10, 每个周期分为 16 个计算网格, 理想匹配层的厚度为 10 个网格. 总的网格模型的大小是 $196 \times 196 \times 56$. 分块是沿 x 方向进行的, 即以垂直于 x 轴的 $P-1$ 平面将网格空间分成 P 个子空间, 其中 P 是微机的台数.

2.1 正确性检验

为了检验并行运算的正确性, 先以 4 台微机做并行运算, 将电场分量的时域响应并行计算结果与串行计算结果进行对照.

图 3 是光子晶体薄板波导内一固定观察点处记

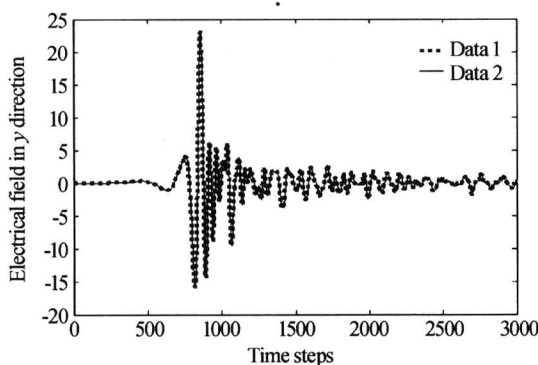
图3 电场分量 E_y 的时域响应

Fig. 3 Field amplitude distribution as a function of time step

录的电场分量 E_y 的时间序列, 其中实线是 4 台微机并行运算的结果, 而虚线是由串行程序得到的结果. 显而易见, 这两条线是完全重合的. 因此说明了并行运算结果的正确性.

2.2 并行程序性能的分析

采用固定加速比 S_f (Fixed Speedup), 来评价并行方案的优势. 所谓固定加速比, 指的是, 固定了问题规模, 随着并行运算的微机个数的增加所获得加速比的情况. 固定加速比 S_f 定义为: $S_f = T_1/T_n$, 其中 T_1 为单机运行所花费的平均时间, T_n 为 n 台微机并行运行所花费的时间.

由表 1 可见: 1) 对小规模问题, 四台微机并行计算和六台微机并行计算获得的加速比相差不大, 其原因是: 六台微机并行计算时的运算/通信比率太低, 极大的影响了并行运算性能的发挥. 说明并行计算对小规模的问题是体现不出其优越性的, 因为运算的时间少于通信的时间, 大部分时间花在不同微机的通信上了. 所以, 小规模的问题可以在单一微机上计算. 2) 随着问题规模的增大, 加速比相应的提高. 例如对第二个例子 ($200 \times 60 \times 200$ 网格规模) 这样大规模的问题, 四台微机并行计算获得 3.06 的加速比, 而六台微机并行计算可获得 4.94 加速比. 所以加速比与问题的规模密切相关.

表 1 不同数目微机并行时的计算时间和加速比

规模(网格数)	平均串行 时间/h	4 机时间 /加速比	6 机时间 /加速比
$100 \times 30 \times 100$	7.3	3.8/1.92	3.6/2.02
$200 \times 60 \times 200$	40.5	13.2/3.06	8.2/4.94

2.3 光子晶体薄板 W3 波导计算结果分析

对于如图 4 的光子晶体薄板 W3 波导参量如下: 三角格子光子晶体薄板的晶格常量为 a , 圆孔半径为 $0.31a$, 硅薄板厚度为 a , 相对介电常量为 12.0, 二氧化硅衬底无限厚, 相对介电常量为 2.1. x 方向上的周期数分别为 30, y 方向上的周期数分别为 15, 拿掉中间的 5 排孔形成 W3 波导. 当一个脉冲源从 W3 波导入射, 可以得到波导中的光场分布如图 5 右和图 6 右, 图 5 右是 XOY 平面上的截面图,

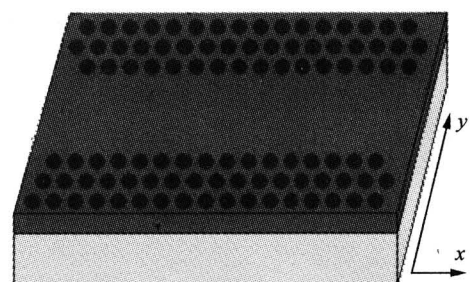
图4 光子晶体薄板 W3 波导 (30×15 周期)

Fig. 4 Photonic crystal slab W3 waveguide

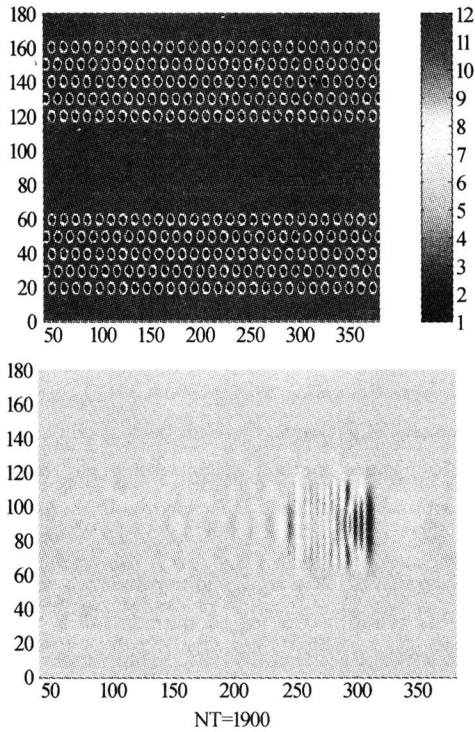


图 5 光子晶体薄板 W3 波导介电常量分布和 E_y 分量分布(俯视图)
 Fig. 5 Dielectric constant and E_y -field distribution of photonic crystal slab W3 waveguide(top view)

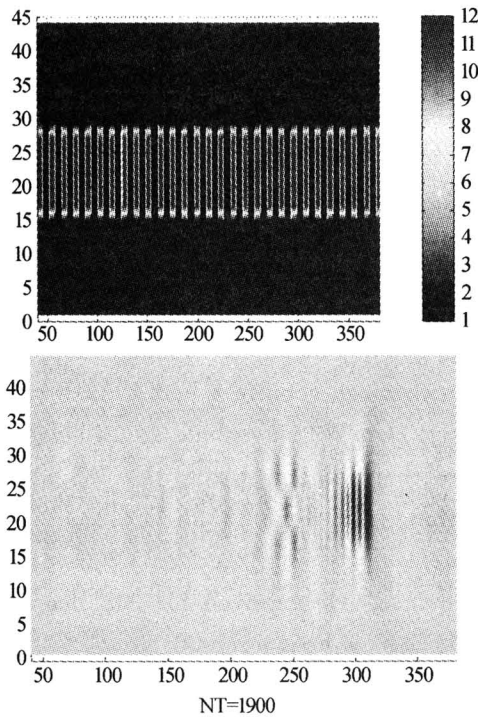


图 6 光子晶体薄板 W3 波导介电常量分布和 E_y 分量分布(侧视图)
 Fig. 6 Dielectric constant and E_y -field distribution of photonic crystal slab W3 waveguide(side view)

对应介电常量分布如图 5 左,图 6 右是 XOZ 平面上的截面图,对应介电常量分布如图 6 左. 从图中可以看出,光子晶体薄板波导可以实现光的三维约束,在 Z 方向通过高折射率来约束光的传播,而在 XOY

平面内,通过光子晶体的禁带来约束光的传播.

设光波在 W3 波导中传播时有着稳定的衰减,即有关系式: $I(\lambda) = I_0(\lambda) \cdot e^{-\alpha \cdot L}$, $I_0(\lambda)$ 是入射光的光谱, $I(\lambda)$ 是透射光的光谱, L 是 W3 波导的长度, α 是传输衰减系数. 依次取 W3 波导长度为归一化长度 $L=30, 60, 80$, 用线形拟合给出衰减系数 α 随归一化频率的变化曲线如图 7.

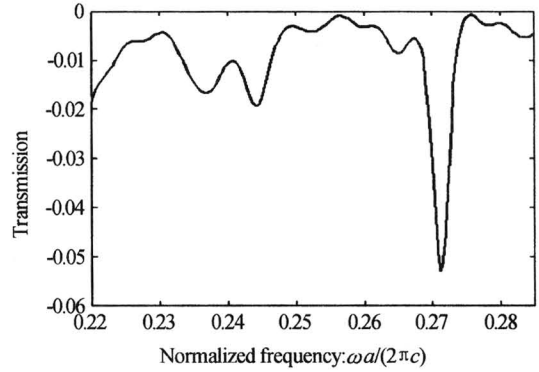


图 7 理论传输衰减系数 α 频率分布
 Fig. 7 Transmission spectra(theory)

从图中可以看出,这种波导在归一化频率 0.271 处损耗很大,这是一个微小禁带. 此微小禁带产生于 W3 波导的导带中,这是 W3 波导区别于 W1 波导的独特性质, W1 波导导带中不会有微小禁带存在.

3 结论

并行三维时域有限差分算法是实现实际光子晶体透射谱分析的一个重要有效方法. 由于这种基于 PC 机群的并行化方法几乎不需要任何额外的硬件投资(只要把已有的微机充分利用即可),具有简单, 廉价, 可靠, 易于维护, 易于扩展等特点, 所以是一种值得推荐的光子晶体数值计算方案. 理论结果表明:光子晶体薄板 W3 波导能实现光的三维控制,其导带中存在微小禁带.

参考文献

- 1 Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys Rev Lett*, 1987, **58** (20):2059~2062
- 2 John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(20):2486~2489
- 3 Joannopoulos J D, Meade R D, Winn J N. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. Princeton : Princeton University Press, 1995
- 4 Mekis A. High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides. *Phys Rev Lett*, 1996, **77** (18):3787~3790
- 5 Joannopoulos J D, Villeneuve P R, Fan S. Photonic Crystals: Putting a New Twist on Light. *Nature*, 1997,

- 386(6621):143~149
- 6 Abram I, Bourdon G. Photonic-well microcavities for spontaneous emission control. *Phys Rev (A)*, 1996, **54**(8):3476~3479
 - 7 Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys Rev Lett.*, 1990, **65**(25):3152~3155
 - 8 Sigalas M M, Chan C T, Ho K M, *et al.* Metallic photonic band-gap materials. *Phys Rev (B)*, 1995, **52**(10):11744~11751
 - 9 金崇君. 手征介质构成的面心立方光子晶体光子带结构计算. *物理学报*, 1997, **46**(12):2325~2329
Jin C J. *Acta Physica Sinica*, 1997, **46**(12):2325~2329
 - 10 秦柏. 微波光子晶体的实验研究. *光学学报*, 1999, **19**(2):239~243
Qin B. *Acta Optica Sinica*, 1999, **19**(2):239~244
 - 11 Pendry J B, MacKinnon A. Calculation of photon dispersion relations. *Phys Rev Lett*, 1992, **69**:2772~2775
 - 12 Ye W M. Calculation of guided modes and leaky modes in photonic crystal slabs. *Chinese Physics Letters*, 2004, **21**(8):1545~1548
 - 13 李岩. 一种类分形结构光子晶体的能带. *光子学报*, 2004, **33**(10):1218~1221
Li Y. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(10):1218~1221
 - 14 朱志宏, 叶卫民. 光子晶体滤波特性分析. *光子学报*, 2004, **33**(6):700~703
Zhu Z H, Ye W M, *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(6):700~703
 - 15 李岩. 准分形光子晶体多频带隙的特性及其应用. *光子学报*, 2004, **34**(2):310~314
Li Y. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **34**(2):310~314
 - 16 Buchanan W J, Gupta N K. A novel parallel processing synchronization method for observing electric fields in and around PCBs. *Int J Electronics*, 1997, **82**(1):61~76
 - 17 Varadarajan V, Mittra R. Finite-difference time-domain analysis using distributed computing. *IEEE Microwave Guided Wave Letters*, 1994, **4**(5):144~145
 - 18 Liguda C, Bottger G. Polymer photonic crystal slab waveguides. *Applied Physics Letters*, 2001, **78**(17):2434~2436

The Transmission Properties Research of Photonic Crystal Slab W3 Waveguide With The Use of The Parallel 3D FDTD Algorithm

Zhu Zhihong, Ye Weimin, Ji Jiarong, Yuan Xiaodong, Zeng Chun

Research Center of Photon and Phonon, National University of Defense Technology, Changsha 410073

Received date: 2005-03-03

Abstract High performance parallel computing platforms are built by interconnecting a group of PCs. The parallelized 3D FDTD code is achieved and is useful for the studies of the transmission properties of photonic crystal slab W3 waveguide. The analysis of the performance of parallel environment indicates that for a large-scale computation problem, the parallel FDTD algorithm can achieve a better fixed speedup. Transmission spectrum and field distribution of a photonic crystal slab W3 waveguide are calculated with the use of the presented technique, and the obtained results show that photonic crystal slab W3 waveguide can control the propagation of light in the three directions and there is mini-gap for the guides.

Keywords Photonic crystals; FDTD; Parallel computing; Mpi(Message Passing Interface); W3 waveguide



Zhu Zhihong was born in 1978 in Hubei Province. He received his MS degree from National University of Defence Technology in 2002. Now he is a candidate for Ph. D degree in National University of Defence Technology. His major research field is Photonic crystals.