Simulation comparative Meep et Fullwave

ou le mésocentre pour les petits utilisateurs

Daniel Gourion

Projet

- Étudier la propagation des champs électromagnétiques dans des nano-antennes dans la zone dite de champ proche
- Comparer deux méthodes de simulation basées sur la FDTD, l’une gratuite :
  - Meep associé à Octave

l’autre payante :

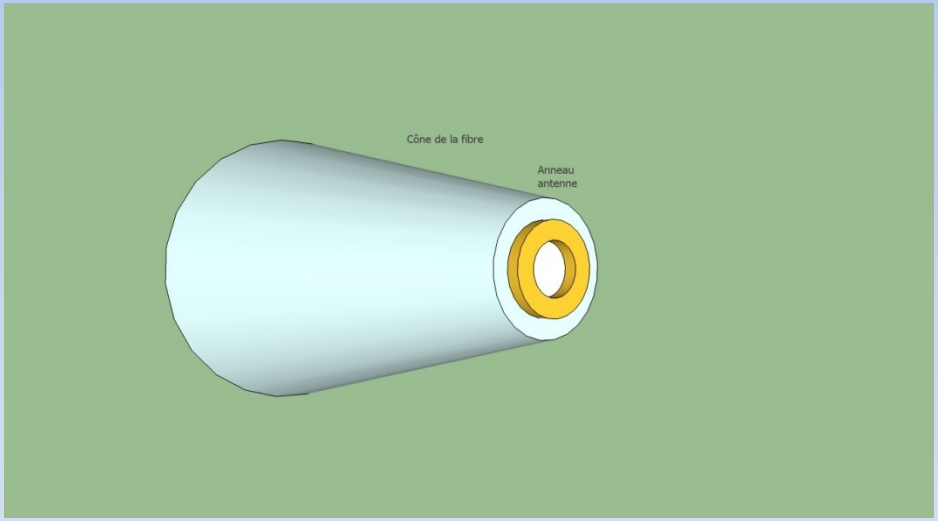
  - Fullwave associé à Matlab

Intérêt

- Scientifique
- Économique : Meep est libre, « installable» sur PC et disponible en version parallélisée sur le mésocentre.
- Pratique : Le mésocentre est-il utile aux utilisateurs à compétence numérique limitée ?

Aspect scientifique

- Étudier le comportement des champs électromagnétiques en interaction avec des nano-objets tels que :



Dimensions de l’anneau :
Diamètre extérieur 1 micron
Diamètre intérieur 0.4 micron
Épaisseur : 105 nm

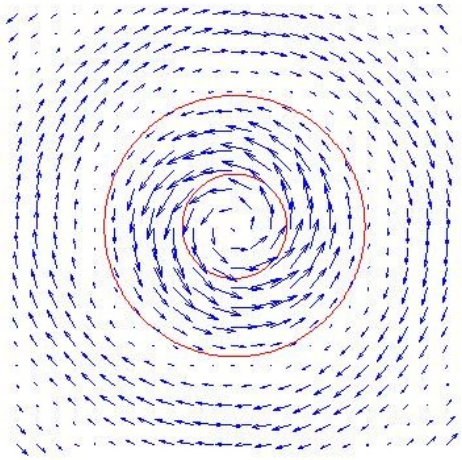
Polarisations azimuthale & radiale

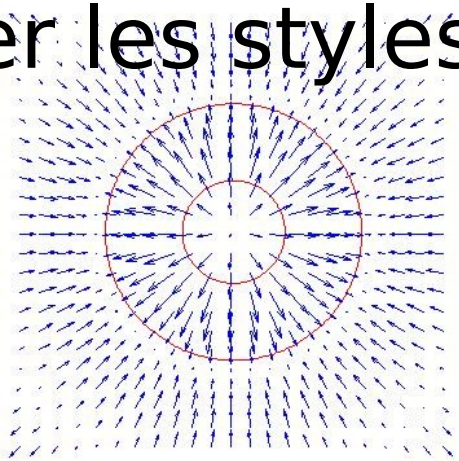
nodifier les styles du tex

eau

u

veau





Suivant le choix de la polarisation initiale, les champs électromagnétiques
peuvent plus ou moins interagir avec la structure métallique

Problématiques

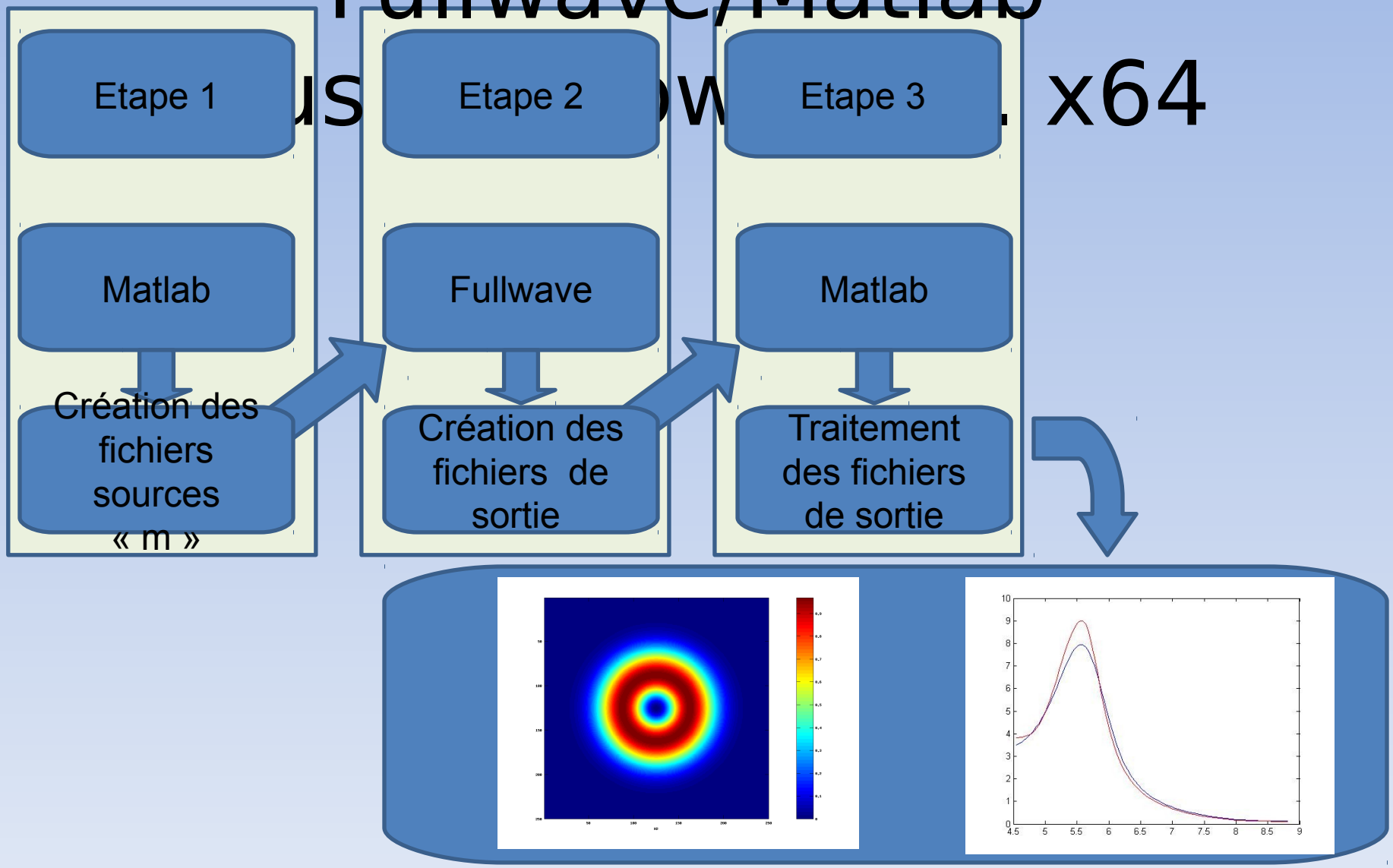
1. Choix d’un outil de simulation : la FDTD.
2. Comparaison de Fullwave/Matlab et de Meep/octave dans des situations similaires de simulation.
   - Est-ce que les conditions peuvent être strictement reproduites ?
   - Quelles sont les limites des deux procédures ?
   - Peut-on travailler avec meep sur un PC de base et sous quel environnement ?
3. Le mésocentre est-il accessible aux utilisateurs à compétence numérique limitée ?

Comparaison Fullwave et Meep

- **Configuration commerciale :**
  - Fullwave : disponible (en 32 bits) sous winXP professional x64 sur PC HP7800, Xeon 2.27GHz, 8 Go RAM
  - Matlab : disponible localement sous licence.
  - Visualisation plot de Matlab
- **Configuration libre :**
  - Meep : disponible en single processor ou parallélisé sur le mésocentre et sur machine locale
  - Octave : disponible sur machine locale.
  - Visualisation : plot d’Octave

Organigramme Fullwave/Matlab

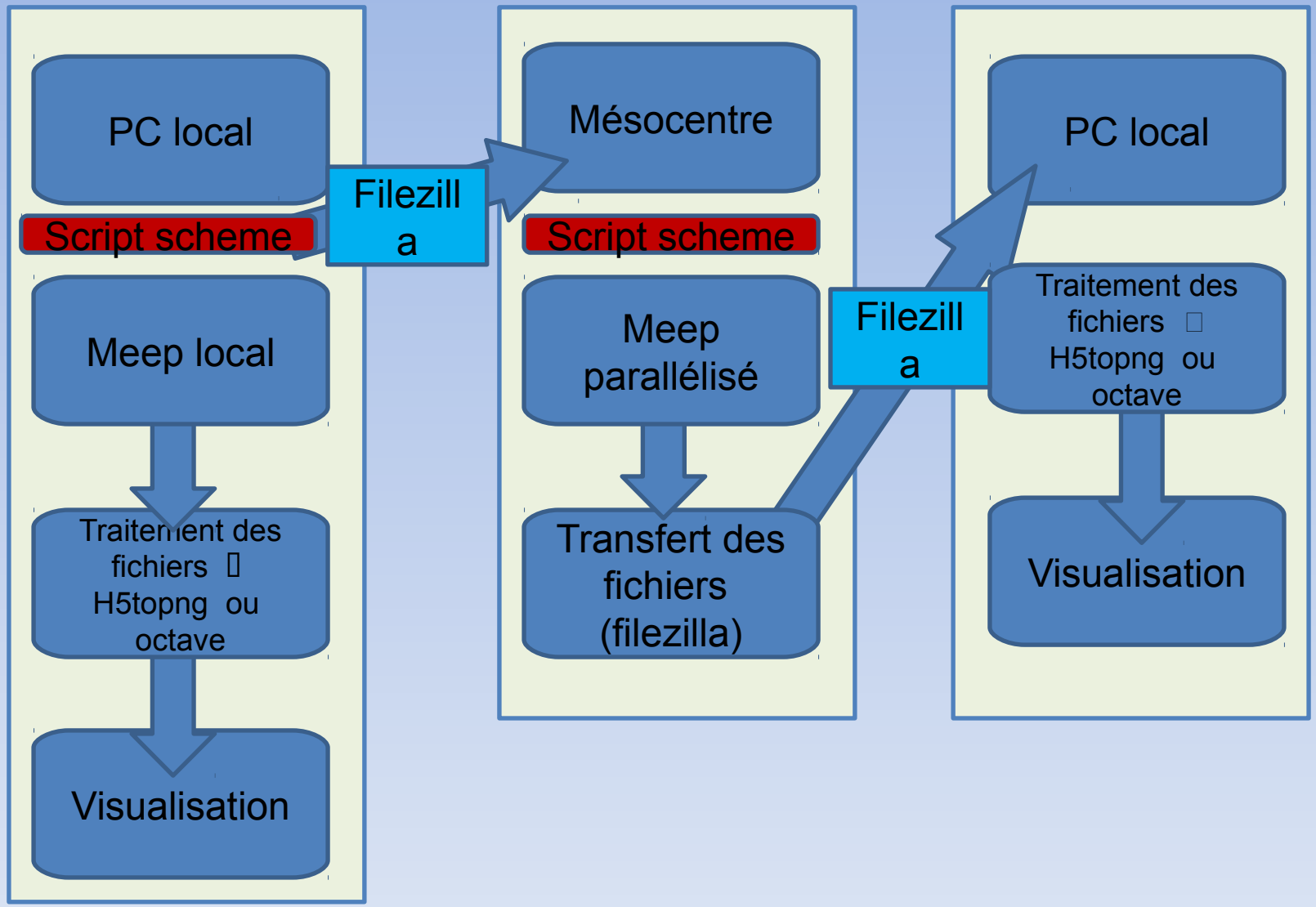
us … w … x64



Choix de Meep/octave sous linux-Fedora12-local/linux-mésocentre

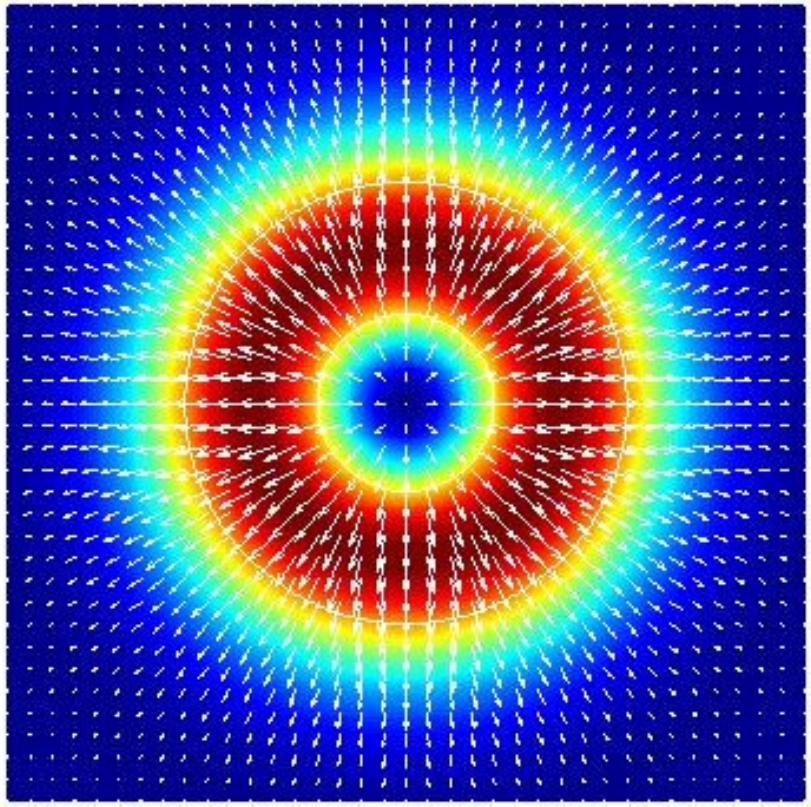
- Pourquoi linux virtualisé et non windows ?
- Pourquoi Fedora12 (tentative avec mandriva, centOS) ?
- Double approche : meep en local pour les essais à basse résolution et meep au mésocentre pour calcul haute précision.
- Procédure :
  - Installation de Meep (avec toutes ses bibliothèques) et des bibliothèques et convertisseurs HDF5 png sur PC HP7800 local
  - Installation d'octave localement
  - Utilisation de filezilla pour dialoguer entre le mésocentre et la machine locale (transfert de fichiers)
  - Traitement des données au moyen d'Octave.

Organigramme



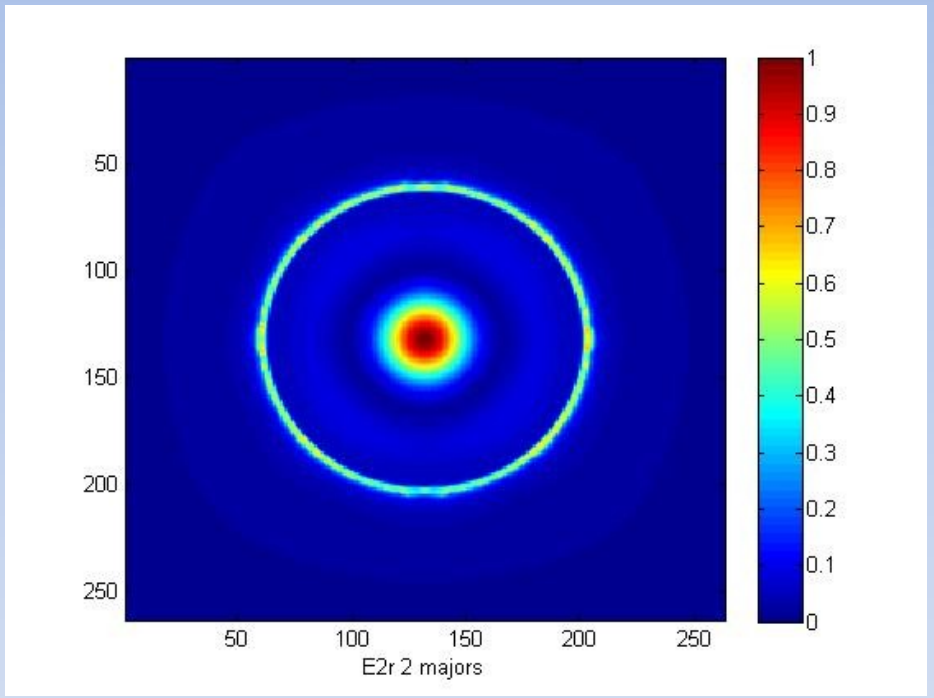
Quelques résultats

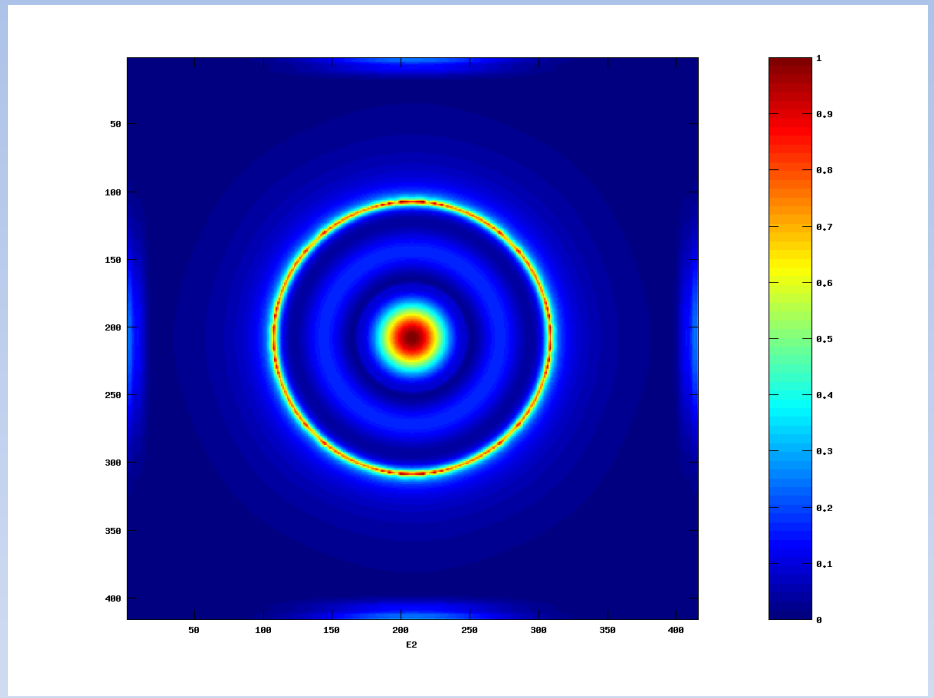
Exemple de champ incident initial en polarisation radiale

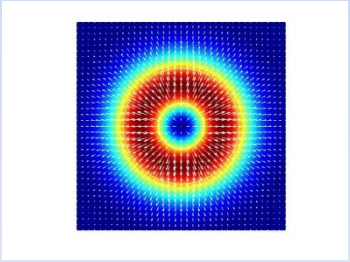


Quelques résultats

- Image en champ proche (100 nm du nano-anneau) du carré du champ électrique en polarisation radiale (Fullwave et Meep)

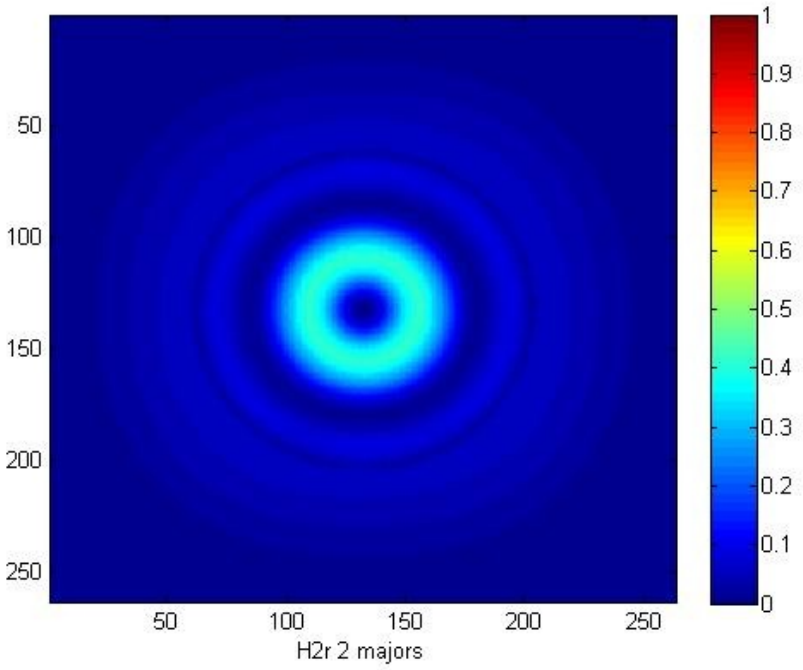


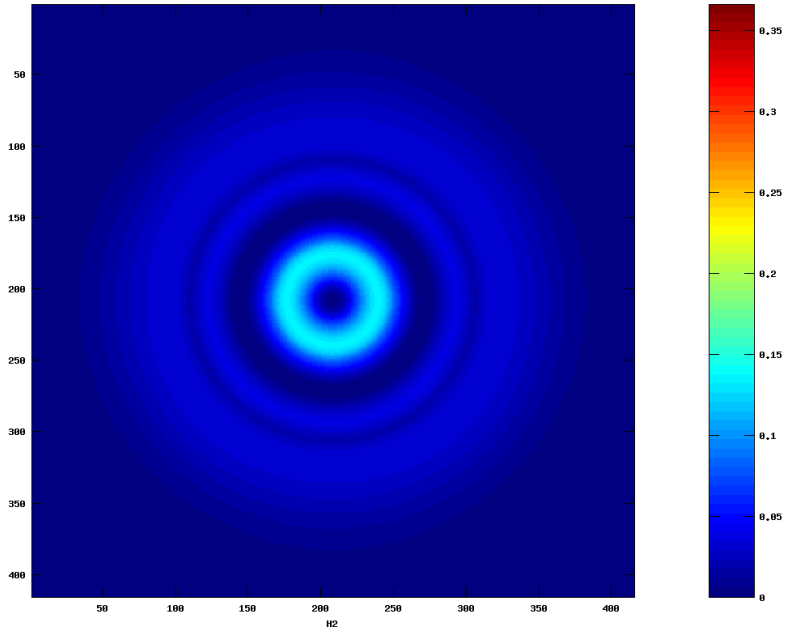




Quelques résultats

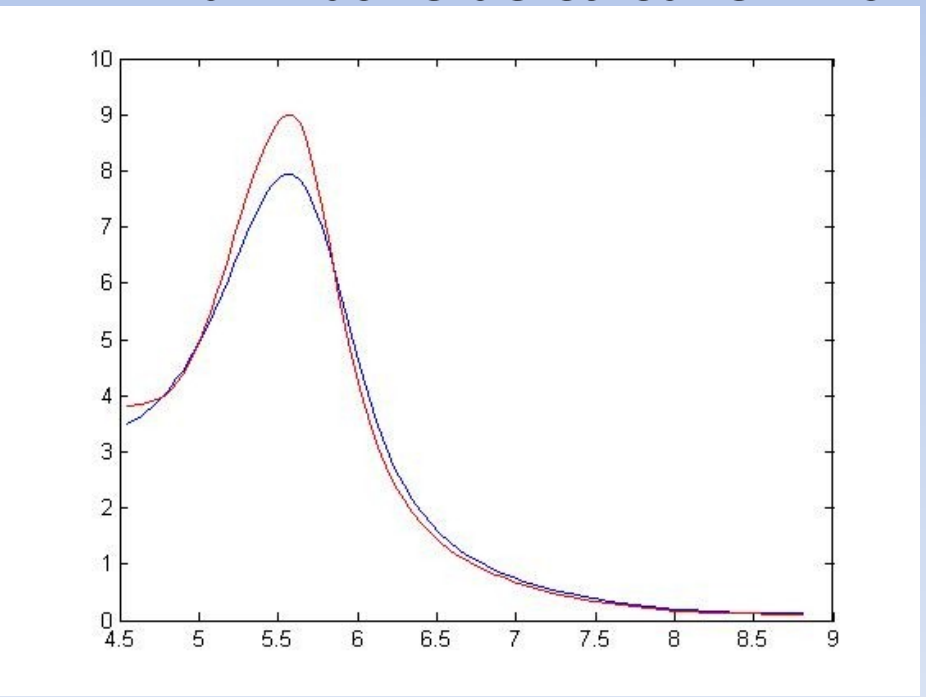
- Idem mais le carré du champ magnétique :

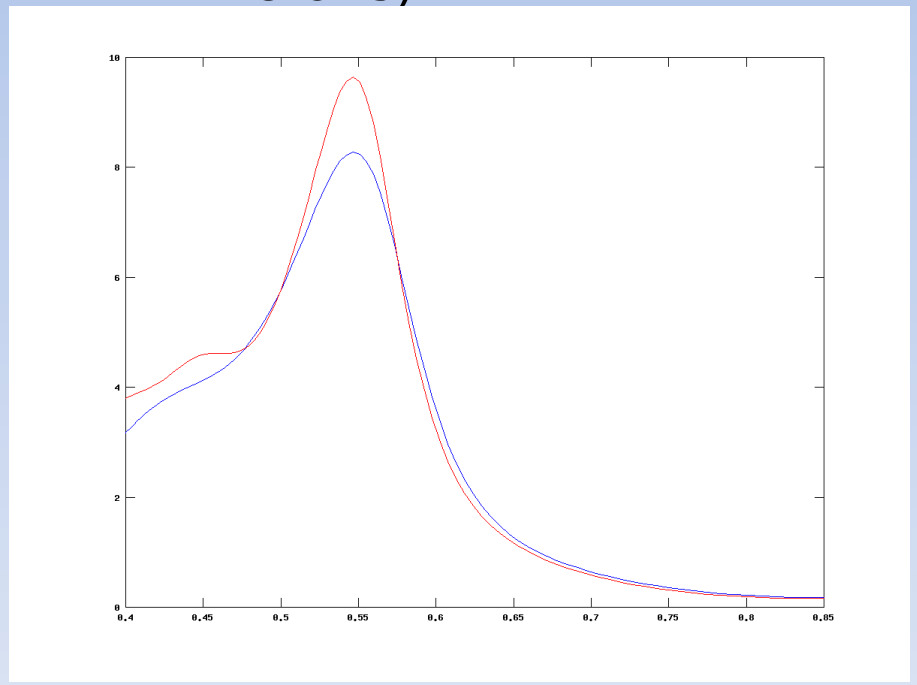




Quelques résultats

- Spectres normalisés d’un champ transmis, analysé en champ proche obtenus au moyen de Fullwave et de meep dans des conditions similaires. Les deux courbes correspondent à deux courbes de dispersion Drude/Lorentz légèrement différentes (pas d’échantillonnage 7x7x7 nm dim boîte de calcul environ 2x2x1 microns):





Résultat de la comparaison

- Encore en cours… mais
- Point +
  - Meep est totalement opérationnel, gère les milieux dispersifs, les objets de forme complexe, les champs multiples, les analyses spectrales (gère la FFT),
  - se compile sans souci sur machine locale,
  - existe en version parallélisée et opérationnelle sur le mésocentre.
- Point –
  - Meep n'accepte pas les données extérieures (sources à distribution non classique),
  - Meep ne gère pas les pas variables,
  - Meep utilise le langage « scheme » pour bâtir ses scripts (on peut toutefois utiliser Python et C++),
  - plus adapté à la propagation qu'au champ proche,
  - mises à jour peu nombreuses.

- ***Donc un excellent outil pour se faire la main et même du très bon travail pour les doctorants et les chercheurs confirmés.***

Meep sur le mésocentre

- Possibilité d’utiliser la version parallélisée de Meep.
- Au plan du temps de calcul : plus de 10 fois plus rapide et une disponibilité de mémoire inégalée : une partie des calculs est impossible sur PC local.
- Le mésocentre est (en principe) toujours actif. Ce n’est pas le cas du PC local.
- Possibilité de très haute résolution (3.5 nm)

Le mésocentre est-il utile pour les utilisateurs aux compétences numériques limitées ?

- Réponse sans ambigüité oui, mode d'utilisation simple, possibilité d'utiliser « comme les grands » les programmes parallélélisés.
- Interaction conviviale avec les responsables.
- ***Donc au bout d'une année de travail presque continu sur le mésocentre, le constat est tout à fait positif.***