

Лавриненко А.В. д.ф.-м.н., Датский технический университет

Лавриненко Ю.В. к.т.н., Одесский государственный экологический университет

ПОСТРОЕНИЕ АНИЗОТРОПНОГО ИДЕАЛЬНО СОГЛАСУЮЩЕГОСЯ ГРАНИЧНОГО СЛОЯ ВО ВРЕМЕННОЙ ОБЛАСТИ

Статья посвящена реализации модели одно- двух- и трехмерного анизотропного идеально согласующего слоя в численном алгоритме программы ONYX-2 с целью определения компонент электромагнитного поля при моделировании процессов в фотонно-кристаллических волноводах.

Ключевые слова: алгоритм, метод конечных разностей во временной области, сходимость, тензор, уравнения Максвелла, фотонно-кристаллический волновод.

Введение. Ранее, рассматривая процесс моделирования распространения электромагнитных волн в фотонно-кристаллических волноводах (ФКВ) [1], был обоснован выбор алгоритма численного решения уравнений Максвелла методом конечных разностей во временной области (FDTD — finite-difference time-domain). За основу компьютерной реализации FDTD алгоритма был выбран вариант, представленный в программном коде ONYX-2. Текст этой программы может быть непосредственно загружен с сайта журнала Computer Physics Communications: www.elsevier.nl/locate/cpc, а описание дается в статье [7]. Как было анонсировано авторами, программа ONYX-2 может быть использована для вычисления зонной структуры фотонных кристаллов, функции Грина и коэффициентов отражения-пропускания для участка волновода на основе фотонного кристалла. Более того, программа рассчитана на применение неортогональной системы координат, что может оказаться весьма существенным в некоторых частных случаях, когда пространственная симметрия расположения атомов ФК удобно описывается в такой системе.

Реализация алгоритма FDTD требует физически значимой процедуры ограничения вычислительного пространства. Для этого используются так называемые поглощающие граничные условия – ПГУ [2]. Наиболее эффективным вариантом ПГУ принято считать модель идеально согласованного слоя - ИСС (PML - perfectly matched layer).

В данной статье рассматривается способ эффективного построения идеально согласующегося граничного слоя во временной области с целью обеспечения численного моделирования процессов прохождения электромагнитных волн в ФКВ.

Основная часть. Рассмотрим реализацию модели анизотропного ИСС в рамках численного алгоритма FDTD программы ONYX-2. Если представить себе область интегрирования уравнений Максвелла как прямоугольный параллелепипед (в двумерном случае это будет прямоугольник), то ИСС представляют собой как бы оберточный слой, в который со всех сторон упакован параллелепипед, (рис.1).

Соответственно мы будем различать одномерные ИСС, находящиеся по граням области интегрирования. Их всего 6, две ориентированы перпендикулярно оси x , две – перпендикулярно оси y и 2 – оси z (в двумерном случае их 4). Двумерные ИСС расположены на ребрах параллелепипеда в местах пересечения двух граней. Их всего 12, четыре – в зоне xy пересечения, 4 – в xz и 4 – в yz пересечения (в двумерном случае их всего 4 – в зоне xz пересечений, см. Рис.1). Трехмерные ИСС находятся в углах параллелепипеда. Всего существует 8 зон, в которых пересекаются все три грани (xyz пересечения). Алгоритмы построения ИСС для каждого их отмеченных классов будут различаться.

В общем случае ИСС обладает пропорциональными тензорами магнитной $\tilde{\mu}$ и диэлектрической $\tilde{\varepsilon}$ проницаемостей

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon \tilde{\Lambda}, \quad \tilde{\mu} = \mu \tilde{\Lambda}, \quad (1)$$

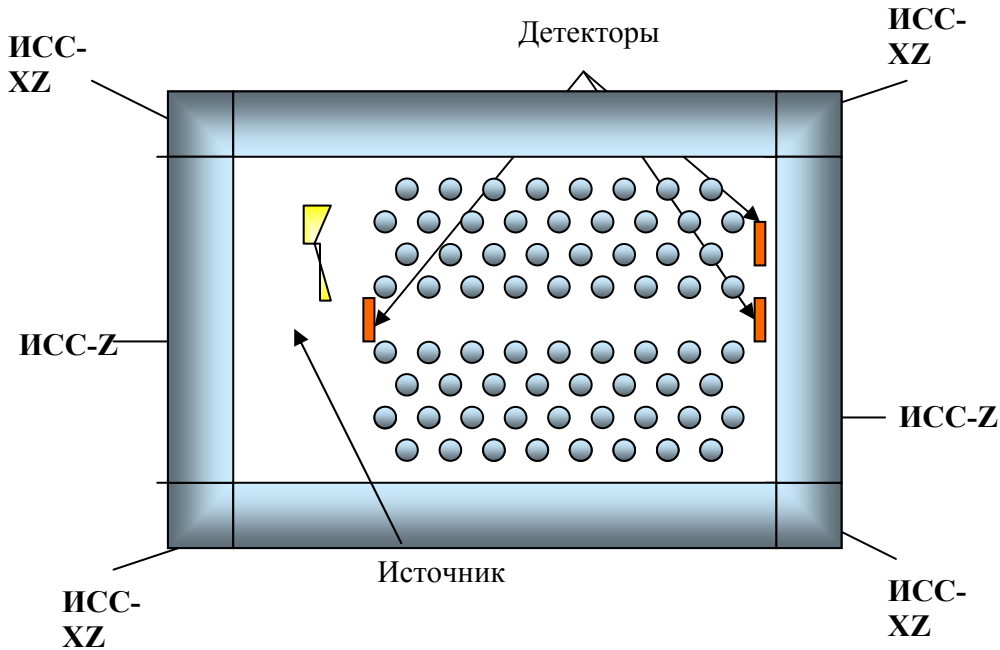


Рис.1 - Схематическое изображение двумерного вычислительного пространства. Фотонно-кристаллический волновод (отверстия в диэлектрической матрице указаны кружками), источник и детекторы находятся в области реального пространства. Его со всех сторон окружают ИСС различной ориентации.

где тензор $\tilde{\Lambda}$, приводимый к главным осям в системе координат x, y, z (система осей симметрии прямоугольного параллелепипеда), имеет вид [3,5]

$$\tilde{\Lambda} = \begin{pmatrix} \frac{s_y s_z}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_x s_z}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{s_x s_y}{s_z} \end{pmatrix} \quad (2)$$

и

$$s_\zeta(\zeta, \omega) = a_\zeta(\zeta) + i \frac{\sigma_\zeta(\zeta)}{\omega}, \quad \zeta = x, y, z. \quad (3)$$

Параметры $\sigma_\zeta(\zeta) \geq 0$ и обычно имеют вид степенной функции, например для ИСС-z толщиной $d - \sigma(z) = \sigma_{\max} \left(\frac{z}{d} \right)^n$, где $2 < n < 4$, чтобы обеспечить безотражательное поглощение волн падающих на ИСС. Параметры $a_\zeta(\zeta) \geq 1$, часто их полагают равными 1, однако, если требуется обеспечить дополнительное поглощение затухающих мод, то надо выбирать $a_\zeta(\zeta) > 1$.

Следуя ранее доказанному положению о соответствии уравнениям Максвелла в кристаллах уравнениям Максвелла в изотропных средах, но в растянутых координатах,

можно утверждать, что параметры $s_\zeta(\zeta)$ есть не что иное, как аналитическое продолжение этих координат в комплексную плоскость, т.е в нашем случае $s_\zeta(\zeta) = Q_\zeta(\zeta)$ (см. работы [1,2]).

Наиболее общее представление материальных свойств ИСС в виде (2) соответствуют пересечению трех простых ИСС в углах прямоугольного параллелепипеда.

Как видно из формулы (2) матрица $\tilde{\Lambda}$ описывает двухосный поглощающий кристалл. Ее можно представить в виде произведения трех отдельных матриц, выражающих растяжение (анизотропию) вдоль одной из координат

$$\tilde{\Lambda}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\Lambda}_x(x, \omega) \tilde{\Lambda}_y(y, \omega) \tilde{\Lambda}_z(z, \omega), \quad (4)$$

где

$$\tilde{\Lambda}_x = \begin{pmatrix} \frac{1}{s_x} & 0 & 0 \\ s_x & s_x & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{pmatrix} \quad (5)$$

Аналогичные выражения имеют две другие матрицы. Тензоры $\tilde{\Lambda}_\zeta(\zeta, \omega)$, где $\zeta = x, y, z$, описывают свойства одномерных ИСС на гранях вычислительного пространства в нерастянутом декартовом пространстве. Произведение (свертка) любых двух тензоров $\tilde{\Lambda}_\zeta(\zeta, \omega)$ описывает двумерные ИСС на ребрах параллелепипеда в таком пространстве. Вопросы динамической стабильности и причинной обусловленности анизотропных ИСС в различных системах координат были исследованы в статье [5]. Отметим, что выражения (1) – (5) для ИСС описывают систему, обладающую динамической стабильностью и удовлетворяющую соотношению Крамерса-Кронига для причинно обусловленной диэлектрической проницаемости. Поэтому мы не будем останавливаться на анализе устойчивости предложенной модели ИСС.

Одномерный идеально согласующийся слой

Выражения (1)-(5) представляют собой формулировку ИСС в частотном представлении. Для использования их в FDTD методе произведем преобразование формул (1) – (5) во временную область, опираясь на идею, примененную в [4]. Для начала, проиллюстрируем ее в случае одномерного ИСС.

Выберем грань параллелепипеда ортогонально оси z . Тогда внутри поглощающего слоя имеем расстояния между узлами сетки

$$Q_1 = a, Q_2 = b, Q_3 = c \left(1 + \frac{i\sigma_z(z)}{\omega^-} \right), \quad (6)$$

а вне

$$Q_1 = a, Q_2 = b, Q_3 = c.$$

В формуле (6) величина $\omega^- = \frac{1 - \exp(i\omega\delta t)}{-i\delta t}$ представляет собой аналог непрерывной переменной – угловой частоты при реализации в дискретном реальном пространстве – так называемая сеточная частота для магнитного поля [6]. В выражении (6) можно использовать и сеточную частоту $\omega^+ = \frac{\exp(-i\omega\delta t) - 1}{-i\delta t}$ для электрического поля. Переходя к компонентам переопределенных тензоров материальных констант можно записать для компонентов тензора диэлектрической проницаемости

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_{11} &= \varepsilon \frac{bc}{aQ_0} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right) = \varepsilon_{11} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right), \\ \tilde{\varepsilon}_{22} &= \varepsilon \frac{ac}{bQ_0} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right) = \varepsilon_{22} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right), \\ \tilde{\varepsilon}_{33} &= \varepsilon \frac{ab}{cQ_0} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right)^{-1} = \varepsilon_{33} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right)^{-1}.\end{aligned}\quad (7)$$

Аналогично могут быть получены формулы для компонентов тензора магнитной проницаемости. Поскольку тензоры $\tilde{\varepsilon}$ и $\tilde{\mu}$ приведены к главным осям, то их преобразование в частотную область достаточно тривиально.

Далее воспользуемся первым из уравнений Максвелла для обобщенных полей

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{E}}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\varepsilon}^{-1} \nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}, \quad \frac{\partial \tilde{\mathbf{H}}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \tilde{\mu}^{-1} \nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}, \quad (8)$$

и выразим временную конечную разность компоненты вектора электрического поля вдоль оси x :

$$\tilde{E}_1(t + \delta t) - \tilde{E}_1(t) = (\tilde{\varepsilon}^{-1})_{11} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1 = \frac{1}{\varepsilon_{11}} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right)^{-1} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1. \quad (9)$$

Отсюда, для x -компоненты оператора ротора имеем

$$[\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}']_1 = -i\delta t \varepsilon_{11} \omega^+ \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right) \tilde{E}_1. \quad (10)$$

С другой стороны, выразим искомую компоненту ротора магнитного поля на дискретной сетке из уравнения Максвелла в частотной области [7]

$$\frac{\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}}{Q_0} = -i\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} \omega^+ \tilde{\mathbf{E}} \Rightarrow \nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}' = -i\delta t \tilde{\varepsilon} \omega^+ \tilde{\mathbf{E}}.$$

Теперь не составляет труда вывести выражение для расчета обновленной (во времени) компоненты электрического поля. Проведем последовательно цепочку вычислений

$$\begin{aligned}\tilde{E}_1(t + \delta t) &= \tilde{E}_1(t) + \frac{1}{\varepsilon_{11}} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right)^{-1} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1 = \frac{1 + \sigma_z \delta t}{1 + \sigma_z \delta t} \tilde{E}_1(t) + \\ &+ \frac{1}{\varepsilon_{11}} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right)^{-1} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1 = \frac{1}{1 + \sigma_z \delta t} \tilde{E}_1(t) + \frac{\sigma_z \delta t}{1 + \sigma_z \delta t} \tilde{E}_1(t) + \\ &+ \frac{1}{\varepsilon_{11}} \frac{\omega^-}{\omega^- + i\sigma_z} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1 = \frac{1}{1 + \sigma_z \delta t} \tilde{E}_1(t) + \frac{[\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1}{\varepsilon_{11} (1 + \sigma_z \delta t)} \times \\ &\times \left[\frac{i\omega^- \sigma_z}{\omega^+ (\omega^- + i\sigma_z)} + \frac{\omega^- (1 + \sigma_z \delta t)}{\omega^- + i\sigma_z} \right] = \frac{1}{1 + \sigma_z \delta t} \left(\tilde{E}_1(t) + \frac{[\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1}{\varepsilon_{11}} \right).\end{aligned}\quad (11)$$

Аналогичный результат получается и для компоненты E_2 . Результат же для третьей компоненты вектора электрического поля будет заметно отличаться

$$\begin{aligned}
 \tilde{E}_3(t + \delta t) &= \tilde{E}_3(t) + \frac{1}{\varepsilon_{33}} \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-} \right) [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3 = \\
 &= \tilde{E}_3(t) + \frac{1}{\varepsilon_{33}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3 + \frac{i\sigma_z}{\varepsilon_{33}} \cdot \frac{-i\delta t}{1 - e^{i\omega\delta t}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3 = \\
 &= \tilde{E}_3(t) + \frac{1}{\varepsilon_{33}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3 + \frac{\sigma_z \delta t}{\varepsilon_{33}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} e^{in\omega\delta t} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3 = \\
 &= \tilde{E}_3(t) + \frac{1}{\varepsilon_{33}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3 + \frac{\sigma_z \delta t}{\varepsilon_{33}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t - n\delta t)]_3.
 \end{aligned} \tag{12}$$

При выводе мы учли формулу для суммы бесконечно убывающей геометрической прогрессии, а затем ввели соответствующие поправки во временную часть фазы волны.

Таким образом, формулы для эволюции векторов электрического и магнитного полей в одномерном ИСС, ориентированном ортогонально i -ому орту, выглядят так:

$$\begin{aligned}
 \tilde{E}_j(t + \delta t) &= \frac{1}{1 + \sigma_i \delta t} \left(\tilde{E}_j(t) + \frac{[\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_j}{\varepsilon_{jj}} \right), \\
 \tilde{E}_i(t + \delta t) &= \tilde{E}_i(t) + \frac{1}{\varepsilon_{ii}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_i + \frac{\sigma_i \delta t}{\varepsilon_{ii}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t - n\delta t)]_i, \\
 \tilde{H}_j(t) &= \frac{1}{1 + \sigma_i \delta t} \left(\tilde{H}_j(t - \delta t) - Q_H \frac{[\nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}'(t)]_j}{\mu_{jj}} \right), \\
 \tilde{H}'_i(t) &= \tilde{H}'_i(t - \delta t) - \frac{Q_H}{\mu_{ii}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}(t)]_i - \frac{\sigma_i \delta t}{\mu_{ii}} \cdot Q_H \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}(t - n\delta t)]_i.
 \end{aligned} \tag{13}$$

Здесь индекс j может принимать любое из двух оставшихся значений не равных i .

Как видно из набора формул (13), компоненты электромагнитных полей, лежащие в плоскости ИСС слоя, уменьшаются в одинаковой пропорции при распространении вглубь ПГУ. В то же время, компоненты, ортогональные плоскости слоев, возрастают. Поля в целом удовлетворяют уравнениям Максвелла в анизотропной поглощающей среде. При численной реализации бесконечные ряды должны заменяться на конечные суммы. В реальной ситуации эволюции полей FDTD методом это будет означать, что суммирование (накапливание) компонент ротора электрического и магнитного полей будет вестись на каждом шаге начиная от начального момента времени.

Двумерные идеально согласующиеся слои

Рассмотрим двумерные ИСС, отвечающие областям пересечения одномерных ИСС на ребрах прямоугольного параллелепипеда. Выберем в качестве примера пересечение y -ориентированного слоя ПГУ (перпендикулярного оси y) и x -ориентированного слоя (перпендикулярного оси x), дающие xy пересечение вдоль z ребра. Вместо повторения процедуры (6)-(7) для определения компонент тензоров материальных констант мы воспользуемся более формализованным представлением (1)-(5). Следуя этой схеме, для xy пересечения получаем

$$\tilde{\Lambda}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\Lambda}_x(x, \omega) \tilde{\Lambda}_y(y, \omega) = \begin{pmatrix} \frac{Q_2 Q_3}{Q_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{Q_1 Q_3}{Q_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{Q_1 Q_2}{Q_3} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где

$$Q_1 = a \left(1 + \frac{i\sigma_x(x)}{\omega^-} \right), \quad Q_2 = a \left(1 + \frac{i\sigma_y(y)}{\omega^-} \right), \quad Q_3 = c. \quad (15)$$

Матрица тензора $\tilde{\varepsilon}$ (1), (14) в главных осях имеет вид

$$\tilde{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-} & & \\ \varepsilon_{11} \frac{i\sigma_x}{1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-}} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} \frac{1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-}}{1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-}} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \left(1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-} \right) \left(1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-} \right) \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Матрица тензора $\tilde{\mu}$ отличается только повсеместной заменой коэффициентов ε_{ii} на μ_{ii} . Сами коэффициенты определяются согласно формулам (7).

Вместо уравнения (9) для временной конечной разности x проекции электрического поля из уравнения Максвелла теперь имеем

$$\tilde{E}_1(t + \delta t) - \tilde{E}_1(t) = (\tilde{\varepsilon}^{-1})_{11} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1 = \frac{1}{\varepsilon_{11}} \left(1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-} \right) \left(1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-} \right)^{-1} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1. \quad (17)$$

Преобразования (11) показывают, что наличие множителя $\left(1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-} \right)^{-1}$ в знаменателе приводит к умножению всех полевых компонент на множитель $\frac{1}{1 + \sigma_y \delta t}$.

Наличие же подобного множителя в числителе, согласно преобразованиям (12), приводит к появлению суммы значений соответствующей компоненты ротора за все предыдущие моменты времени. Эти действия в нашем случае независимы, что позволяет сразу записать результат

$$\tilde{E}_1(t + \delta t) = \frac{1}{1 + \sigma_y \delta t} \left\{ \tilde{E}_1(t) + \frac{1}{\varepsilon_{11}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_1 + \frac{\sigma_x \delta t}{\varepsilon_{11}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t - n\delta t)]_1 \right\}. \quad (18)$$

Аналогичный результат с соответствующей заменой коэффициентов получатся и для y -проекции вектора $\tilde{\mathbf{E}}$. Однако, для z -компоненты вектора $\tilde{\mathbf{E}}$ оба множителя, содержащие дискретную частоту оказываются в числителе

$$\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t) = (\tilde{\varepsilon}^{-1})_{33} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3 = \frac{1}{\varepsilon_{33}} \left(1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-} \right)^{-1} \left(1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-} \right)^{-1} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3.$$

Преобразования по каждому из множителей по отдельности теперь оказываются невозможными и надо найти другой способ представления схемы обновления компоненты E_3 . Начнем с перегруппировки выражений

$$\left(1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-}\right) \left(1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-}\right) (\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t)) = \left(1 + \frac{i(\sigma_x + \sigma_y)}{\omega^-} - \frac{\sigma_x \sigma_y}{(\omega^-)^2}\right) (\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t)).$$

Рассмотрим это выражение по частям. Сначала среднее выражение

$$\begin{aligned} \frac{i(\sigma_x + \sigma_y)}{\omega^-} (\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t)) &= i \frac{(\sigma_x + \sigma_y)(-i\delta t)}{1 - e^{i\omega\delta t}} (\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t)) = \\ &= (\sigma_x + \sigma_y) \delta t \sum_{k=0}^{\infty} e^{-ki\omega\delta t} (\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t)) = \\ &= (\sigma_x + \sigma_y) \delta t \left(\sum_{k=0}^{\infty} e^{-ki\omega\delta t} \tilde{E}_3(t + \delta t) - \sum_{k=0}^{\infty} e^{-ki\omega\delta t} \tilde{E}_3(t) \right) = \\ &= (\sigma_x + \sigma_y) \delta t \left(\sum_{k=0}^{\infty} \tilde{E}_3(t + \delta t - k\delta t) - \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{E}_3(t - k\delta t) \right) = (\sigma_x + \sigma_y) \delta t \tilde{E}_3(t + \delta t); \end{aligned}$$

теперь последняя из частей

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_x \sigma_y}{(\omega^-)^2} (\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t)) &= \frac{\sigma_x \sigma_y}{\omega^-} \frac{-i\delta t}{1 - e^{i\omega\delta t}} (\tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t)) = -i\delta t \frac{\sigma_x \sigma_y}{\omega^-} \tilde{E}_3(t + \delta t) = \\ &= \frac{(-i\delta t)^2 \sigma_x \sigma_y}{1 - e^{i\omega\delta t}} \tilde{E}_3(t + \delta t) = -\delta t^2 \sigma_x \sigma_y \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{E}_3(t + \delta t - k\delta t) = \\ &= -\delta t^2 \sigma_x \sigma_y \left(\tilde{E}_3(t + \delta t) + \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{E}_3(t - k\delta t) \right). \end{aligned}$$

Собирая все преобразованные части вместе, имеем

$$\begin{aligned} \tilde{E}_3(t + \delta t) - \tilde{E}_3(t) + \delta t(\sigma_x + \sigma_y) \tilde{E}_3(t + \delta t) + \delta t^2 \sigma_x \sigma_y \left(\tilde{E}_3(t + \delta t) + \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{E}_3(t - k\delta t) \right) &= \\ = \frac{1}{\varepsilon_{zz}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_3. \end{aligned}$$

Окончательно выражаем обновленную компоненту поля через все предыдущие

$$\tilde{E}_3(t + \delta t) = \frac{\tilde{E}_3(t) - \sigma_x \sigma_y \delta t^2 \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{E}_3(t - k\delta t) + \frac{1}{\varepsilon_{zz}} (\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}'(t))_3}{1 + (\sigma_x + \sigma_y) \delta t + \sigma_x \sigma_y \delta t^2}. \quad (19)$$

Остальные двумерные ИСС рассматриваются аналогичным образом. Поэтому можно немедленно записать окончательные выражения, используя только циклическую перестановку индексов: $x \rightarrow y$, $y \rightarrow z$, $z \rightarrow x$. Таким же образом выводятся уравнения для эволюционной схемы компонент магнитного поля.

Запишем теперь все формулы в общем виде. Будем считать, что область ПГУ образуется пересечением ИСС слоев, задаваемых i -ым и j -ым ортами. Тогда:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_i(t + \delta t) &= \frac{1}{1 + \sigma_j \delta t} \left\{ \tilde{E}_i(t) + \frac{1}{\varepsilon_{ii}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_i + \frac{\sigma_i \delta t}{\varepsilon_{ii}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t - n\delta t)]_i \right\}, \\ \tilde{E}_j(t + \delta t) &= \frac{1}{1 + \sigma_i \delta t} \left\{ \tilde{E}_j(t) + \frac{1}{\varepsilon_{jj}} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t)]_j + \frac{\sigma_j \delta t}{\varepsilon_{jj}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{H}}'(t - n\delta t)]_j \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\tilde{E}_k(t + \delta t) = \frac{\tilde{E}_k(t) - \sigma_i \sigma_j \delta t^2 \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{E}_k(t - n\delta t) + \frac{1}{\varepsilon_{kk}} (\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}'(t))_k}{1 + (\sigma_i + \sigma_j) \delta t + \sigma_i \sigma_j \delta t^2},$$

$$\tilde{H}'_i(t) = \frac{1}{1 + \sigma_j \delta t} \left\{ \tilde{H}'_i(t - \delta t) - \frac{1}{\mu_{ii}} Q_H [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}(t)]_i - \frac{\sigma_i \delta t}{\mu_{ii}} Q_H \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}(t - n\delta t)]_i \right\},$$

$$\tilde{H}'_j(t) = \frac{1}{1 + \sigma_i \delta t} \left\{ \tilde{H}'_j(t - \delta t) - \frac{1}{\mu_{jj}} Q_H [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}(t)]_j - \frac{\sigma_j \delta t}{\mu_{jj}} Q_H \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{\mathbf{E}}(t - n\delta t)]_j \right\} \quad (21)$$

$$\tilde{H}'_k(t) = \frac{\tilde{H}'_k(t - \delta t) - \sigma_i \sigma_j \delta t^2 \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{H}'_k(t - \delta t - n\delta t) - \frac{1}{\mu_{kk}} Q_H (\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(t))_k}{1 + (\sigma_i + \sigma_j) \delta t + \sigma_i \sigma_j \delta t^2}.$$

Следует отметить, что вместо процедуры преобразования выражений для ИСС (16) из частотной области во временную согласно формулам (19)-(21), мы могли использовать двумерные граничные условия в виде, обсуждаемом в работе [4], а именно

Это уравнение представляет собой непосредственную запись граничных условий во временной области. Принимая во внимание стандартные численные процедуры для вычисления интеграла по всем предыдущим моментам времени, легко установить полное соответствие этого соотношения с формулой (19). Мы считаем, что последняя форма граничных условий в виде выражения (22) позволяет получить искомым результат более быстрым путем чем следование преобразованиям данного подраздела. Однако, выбранный нами путь представляется более общим и более последовательным с точки зрения обобщения результатов на трехмерный случай.

Трехмерные идеально согласующиеся слои. Общий случай

Трехмерным ИСС соответствует матрица

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \frac{\left(1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-}\right) \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right)}{1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-}} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} \frac{\left(1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-}\right) \left(1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}\right)}{1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-}} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \frac{\left(1 + \frac{i\sigma_x}{\omega^-}\right) \left(1 + \frac{i\sigma_y}{\omega^-}\right)}{1 + \frac{i\sigma_z}{\omega^-}} \end{pmatrix} \quad (23)$$

Как видно из матрицы (23) действие трехмерного ИСС с учетом различного пространственного масштаба в принципе одинаково для всех компонент электромагнитного поля. Ряд громоздких преобразований, аналогичных действиям при выводе (18) и (20), приводит к окончательному результату:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_i(t + \delta t) = \\ = \frac{\tilde{E}_i(t) - \sigma_j \sigma_k \delta t^2 \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{E}_i(t - n\delta t) + \frac{1}{\varepsilon_{ii}} (\nabla \times \tilde{H}'(t))_i + \frac{\sigma_i \delta t}{\varepsilon_{ii}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{H}'(t - n\delta t)]_i}{1 + (\sigma_j + \sigma_k) \delta t + \sigma_j \sigma_k \delta t^2}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}'_i(t) = \frac{1}{1 + (\sigma_j + \sigma_k) \delta t + \sigma_j \sigma_k \delta t^2} \left\{ \tilde{H}'_i(t - \delta t) - \sigma_i \sigma_i \delta t^2 \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{H}'_i(t - \delta t - n\delta t) - \right. \\ \left. - \frac{1}{\mu_{ii}} Q_H (\nabla \times \tilde{E}(t))_i - \frac{\sigma_i \delta t}{\mu_{ii}} Q_H \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [\nabla_q \times \tilde{E}(t - n\delta t)]_i \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, формулы (13), (20), (21), (24), (25) решают поставленную задачу об эволюции полей в ПГУ, ограничивающих вычислительное пространство. Созданные искусственные среды обладают по сути дела анизотропией, свойственной двухосным кристаллам с дихроизмом. Именно наличие ИСС со всех сторон структуры, особенно в областях пересечения на ребрах и углах боковых границ делает FDTD метод устойчивым и стабильным. Из-за ограниченности места тестирующие и исследовательские примеры будут приведены в последующих публикациях.

Следует обратить внимание, что, вообще говоря, выражения (24) и (25) для трехмерных ИСС являются наиболее общими. Их можно использовать в общем случае для ИСС произвольной размерности, полагая соответствующие значения проводимости равными нулю. Например, для двумерного ИСС, лежащего на пересечении x и y -слоев, полагаем $\sigma_z = 0$. Тогда, при переборе всех компонент вектора \mathbf{E} немедленно следуют формулы (18) и (19).

Выводы. Для ограничения вычислительного пространства с одновременным сохранением открытости границ системы, что является принципиальным условием в численных задачах фотоники, были использованы специальные поглощающие граничные условия – анизотропные идеально согласованные слои. В одноосном случае слои представляют собой одноосные поглощающие материалы со специальным выбором главных значений тензора диэлектрической проницаемости.

Получены общие выражения для трехмерных ИСС во временной области в случаях, когда ПГУ принадлежат ребрам или углам численной области. В этих случаях анизотропия ИСС приобретает двuosных характер. Из общих формул для трехмерных ИСС вытекают, как частные случаи, формулы для двумерных и одномерных ИСС, ориентированных вдоль любой из декартовых осей координат. Важным достоинством полученных формул является их явный вид и отсутствие необходимости каких-либо искусственных операций над полями.

Список литературы

1. Лавриненко А.В., Лавриненко Ю.В., Черненко Д.С. Выбор численных методов для моделирования волноводов на фотонных кристаллах // Сб. трудов ОДЭКУ.2011.- Вып.11. – С.234-242 .
2. Лавриненко А.В., Лавриненко Ю.В., Выбор граничных условий для построения моделей фотонно-кристаллических волноводов // Сб. трудов ОДЭКУ. 2013.- Вып.16 – С.217-221.
3. Gedney S.D. An anisotropic perfectly matched layer – absorbing medium for the truncation of FDTD lattices//IEEE Trans.Ant.Prop.-1996.-V.44, No.12.-P.1630-1639.
4. Petropoulos P.G., Zhao Li, Cangellaris A.C. A reflectionless sponge layer absorbing boundary condition for the solution of Maxwell's equations with high-order staggered finite difference schemes//J.Comput.Phys.-1998.-V.139, No.1.-P.184-208.
5. Teixeira F.L., Chew W.C. On causality and dynamic stability of perfectly matched layers for FDTD simulations// IEEE Trans.Microw.Theory Techn.-1999.-V.47, No.6.- P.775-785.
6. Ward A.J., Pendry J.B. A program for calculating photonic band structures and Green's functions using a non-orthogonal FDTD method//Comp.Phys.Commun.-1998.- V.112, No.1.-P.23-41.
7. Ward A.J., Pendry J.B. A program for calculating photonic band structures, Green's functions and transmission/reflection coefficients using a non-orthogonal FDTD method//Comp.Phys.Commun.-2000.-V.128, No.7.-P.590-621.

Побудова анізотропного шару який ідеально узгоджується в часовій області.

Лавриненко А.В., Лавриненко Ю.В.

Стаття присвячена реалізації моделі одне- двох- і тривимірного анізотропного ідеально погодженого шару в чисельному алгоритмі методом кінцевих різностей у часовій області з метою обмеження обчислювальної області невідображаючими граничними умовами при моделюванні процесів поширення світла у фотонно-кристалічних хвилеводах.

Ключові слова: алгоритм, метод кінцевих різностей у часовій області, збіжність, тензор, рівняння Максвелла, фотонно-кристалічний хвилевід.

Creation of anisotropic perfectly matched layer in time-domain.

Lavrinenko A.V., Lavrinenko Y.V.

The paper describes realization of a model of the one-, two- and three-dimensional anisotropic perfectly matched layer in the numerical scheme of the finite-difference time-domain method for reflectionless truncation of a numerical domain in modeling of light propagation in photonic crystal waveguides.

Keywords: algorithm, finite-difference time-domain method, convergence, tensor, Maxwell's equation, photonic crystal waveguide.