

Немонотонность схемы FDTD при моделировании границ раздела между диэлектриками

Ж. О. Домбровская* А. Н. Боголюбов†

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Статья поступила 11.07.2017; Подписана в печать 11.07.2017)

Показано, что схема Йе метода FDTD является немонотонной. Продемонстрировано, что при моделировании диэлектрической слоистой среды фактический порядок точности вычислений понижается до первого. Для повышения точности предложено проводить расчеты на сгущающихся сетках по методу Ричардсона–Калиткина. В качестве тестовой задачи рассмотрено распространение гауссова импульса через кремниевую пластинку, помещенную в воздухе. Проведены вычисления с повышением порядка точности до четвертого.

PACS: 02.70.Bf УДК: 519.63

Ключевые слова: немонотонность, схема Йе, метод FDTD, метод сгущения сеток, высокий порядок точности, диэлектрические границы раздела, слоистые среды.

ВВЕДЕНИЕ

Метод конечных разностей во временной области (FDTD — finite-difference time-domain) [1, 2] до сих пор является одним из популярнейших численных алгоритмов для решения нестационарных задач фотоники [3, 4] и плазмоники [5]. Он основан на дискретизации вихревых уравнений Максвелла по конечно-разностной схеме Йе [6], теоретический порядок точности которой в случае однородной среды равен $p_{th} = 2$. Однако при моделировании сильно неоднородных и, особенно, слоистых сред, (например, диэлектрических границ раздела) точность расчетов сильно снижается. Порядок сходимости может уменьшаться до первого и ниже. Это неоднократно отмечалось в литературе (см., например, [7]).

Обычно для обеспечения аппроксимации разностной схемы границу раздела размывают, заменяя кусочно-постоянную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(x)$ некоторой гладкой функцией [8, 9]. Однако такой простой в реализации прием все равно не позволяет добиться теоретического порядка сходимости [10]. Более того, он может приводить к искажению электродинамических свойств изучаемой структуры.

В работе [11] второй порядок точности достигается с помощью переноса узла магнитного поля вблизи диэлектрической границы раздела. При этом точка разрыва попадает внутрь шаблона разностной схемы, что приводит к потере сходимости в норме C (имеет место лишь сходимость в норме L). Кроме того, при большом скачке ε шаг, примыкающий к границе раздела, становится настолько мелким, что аккуратное вычисление разностных производных требует повышенной разрядности [12]. Согласно исследованию [10], проведенному для границ раздела сред, у которых диэлектриче-

ские проницаемости имеют разные знаки, использование усредненной $\varepsilon_{eff}(x)$ приводит к огромным ошибкам, причем фактический порядок точности оказывается $p < 1$.

Авторами работы [10] было предложено разбивать область на две части (Domain-Decomposition Method). Этот метод заключается в добавлении слева и справа от границы раздела по дополнительному столбцу фиктивных ячеек. Расчеты производятся со значением ε_{left} вплоть до фиктивной ячейки, находящейся справа от границы раздела, после чего вычисления продолжают с ε_{right} , начиная с левой фиктивной ячейки. Значения поля в последней берутся по непрерывности, что приводит к необходимости дополнительного сшивания компонент поля.

Построенная схема обеспечивает второй порядок точности при моделировании слоистых сред из любых дисперсионных материалов с постоянной магнитной восприимчивостью. Этот метод имеет неоспоримые преимущества по сравнению с методом усреднения [8]. Но, во-первых, предложенная в [10] схема не является схемой сквозного счета (необходимо явно выделять границы раздела). Во-вторых, она пригодна только для нормального падения волны на плоскую границу. Отметим, что идея введения фиктивных узлов не является новой и широко применяется в газодинамике [13].

В данной статье показано, что причина снижения точности схемы Йе вблизи границы раздела заключается в немонотонности численного решения. Согласно фундаментальной теореме Годунова [14], этот недостаток обусловлен тем, что схема Йе для системы уравнений гиперболического типа имеет второй теоретический порядок точности $p_{th} = 2$. Поэтому в прикладных расчетах целесообразно либо использовать монотонные схемы [15], либо рекуррентно повышать порядок точности при расчетах на сгущающихся сетках методом Ричардсона–Калиткина [16–18].

Применение этого метода к расчетам по схеме Йе было впервые сделано в [19], подробно данная процедура описана в [20]. Однако в предыдущих рабо-

*E-mail: dombrovskaya@physics

†E-mail: bogan7@yandex

тах речь шла лишь о распространении гауссова импульса в свободном пространстве. В данной работе такой подход применен к расчетам слоистых сред. Он позволяет существенно повысить точность вычислений. В отличие от ранее предлагавшихся в литературе подходов, метод сгущения сеток не требует модификации исходных FDTD уравнений и обеспечивает не только $p = p_{th}$, но также $p = 3, 4$ и более высоких порядков и точность вплоть до ошибок компьютерного округления.

1. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИМПУЛЬСА ЧЕРЕЗ СЛОИСТУЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ СРЕДУ

1.1. Постановка задачи. Рассмотрим распространение электромагнитных колебаний в непоглощающей диэлектрической среде, проницаемость $\varepsilon(r)$ которой является кусочно-непрерывной функцией. Изменение компонент напряженностей электрического $E = E(r, t)$ и магнитного $H = H(r, t)$ полей описывается системой вихревых уравнений Максвелла

$$\text{rot}E = -\frac{\partial B}{\partial t}, \quad \text{rot}H = \frac{\partial D}{\partial t} + J, \quad (1)$$

где $D = D(r, t)$ и $B = B(r, t)$ — векторы электрической и магнитной индукции, плотность сторонних токов $J = J(t)$ считается заданной величиной в некоторой точке рассматриваемой области. В случае нормального падения z -поляризованной волны на структуру, состоящую из плоскопараллельных диэлектрических слоев, система векторных уравнений (1) упрощается до двух скалярных

$$\frac{\partial E_z}{\partial x} = -\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t}, \quad \frac{\partial H_y}{\partial x} = -\varepsilon(x)\varepsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} - J_z. \quad (2)$$

Здесь $(x, t) \in (0; a) \times (0; T]$, где $a > 0$ и $T > 0$, ε_0 и μ_0 — диэлектрическая проницаемость и магнитная восприимчивость вакуума. Для простоты начальные условия выберем нулевыми

$$E_z|_{t=0} = 0, \quad H_y|_{t=0} = 0, \quad x \in (0; a), \quad (3)$$

что соответствует изначально невозмущенной области. В качестве граничных выберем поглощающие условия

$$\left(\frac{\partial E_z}{\partial t} - v \frac{\partial E_z}{\partial x}\right)\Big|_{x=0} = 0, \quad \left(\frac{\partial E_z}{\partial t} + v \frac{\partial E_z}{\partial x}\right)\Big|_{x=a} = 0, \quad t \in (0; T], \quad (4)$$

где v — скорость распространения света в среде. Условия (4) имитируют неограниченность области, из которой может беспрепятственно уходить излучение. Система уравнений (2)–(4) является полной математической постановкой одномерной задачи о распределении электромагнитного поля как внутри, так и вне слоистой диэлектрической среды.

1.2 Схема. Конечно-разностная аппроксимация на равномерной прямоугольной сетке $\omega_N \times \omega_S = \{x_n, 1 \leq n \leq N+1\} \times \{t_s, 1 \leq s \leq S+1\}$ с шагом h по пространству и шагом τ по времени записывается стандартным образом [12]. Так как схема Яё явная, то компоненты электромагнитного поля на следующем временном слое выражаются через значения на текущем слое согласно шаблону с чередованием шагов (рис. 1).

$$\begin{aligned} H_y|_n^{s+1} &= H_y|_n^s - \frac{1}{\mu_0} \frac{\tau}{h} \left[E_z|_{n+1/2}^{s-1/2} - E_z|_{n-1/2}^{s-1/2} \right], \\ (n, s) &\in [1; N+1] \times [1; S+1], \\ E_z|_{n+1/2}^{s+1/2} &= E_z|_{n+1/2}^{s-1/2} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon|_{n+1/2}^{s-1/2}} \frac{\tau}{h} \left[H_y|_{n+1}^{s+1} - H_y|_n^{s+1} \right] - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon|_{n+1/2}^{s-1/2}} \tau J_z|_{n+1/2}^{s-1/2}, \\ (n, s) &\in [1; N] \times [1; S+1]. \end{aligned} \quad (5)$$

Разностная запись условий (3) и (4) производится аналогичным образом. Важно отметить, что они должны быть аппроксимированы с порядком не ниже, чем (2). В противном случае, теоретический порядок сходимости схемы понизится.

2. НЕМОНОТОННОСТЬ СХЕМЫ Яё

Одним из положительных свойств схемы Яё является консервативность. Схема представляет собой раз-

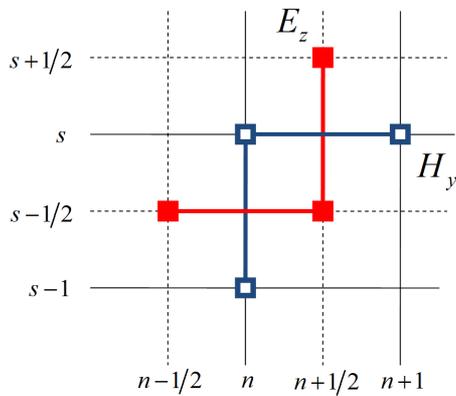


Рис. 1: Шаблон одномерной схемы Йе. Закрашенными маркерами помечены узлы, соответствующие E_z , незакрашенными — H_y

ностную реализацию физических законов сохранения (закона электромагнитной индукции Фарадея и теоремы о циркуляции магнитного поля), выполняющихся для каждой ячейки расчетной области [1]. В этом случае отсутствует ложная сходимость на обобщенных решениях.

Другое важное свойство, которым должна обладать надежная схема — это монотонность. По определению, однородные разностные схемы, сохраняющие монотонность профиля разностного решения, называются монотонными [21]. В работе [14] был впервые сформулирован критерий монотонности и доказано, что среди схем второго порядка точности для линейного однородного уравнения переноса с постоянной скоростью нет схем, удовлетворяющих условию монотонности.

В нашем случае в качестве «основного уравнения» выступает система уравнений Максвелла (1), которая представляет собой систему уравнений переноса (система уравнений гиперболического типа). Как следствие из [14], для нее справедлива следующая

Теорема 1 *Двухслойная линейная монотонная схема для системы уравнений гиперболического типа не может иметь порядок точности $p \geq 2$.*

Поэтому схема Йе, являющаяся двухслойной по каждой из переменных и обладающая вторым порядком аппроксимации, является немонотонной. При расчете неоднородных сред ее фактический порядок точности p оказывается меньше, чем $p_{th} = 2$. В следующем разделе проявление немонотонности показано на примере решения одномерной задачи о прохождении нормированного гауссова импульса через кремниевую пластинку.

3. ПРИМЕР ТЕСТОВОГО РАСЧЕТА

В качестве слоистой среды была выбрана структура «воздух–кремний (Si)–воздух». Вычисления проводят-

ся для видимого диапазона. Диэлектрическая проницаемость кремниевой пластинки равна $\epsilon = 11.56$. Геометрические параметры задачи подобраны так, чтобы толщина пластинки равнялась примерно $2\lambda_0$, где λ_0 — центральная длина волны. На рис. 2,а представлена зависимость z -компоненты вектора электрического поля E_z от координаты x в два момента времени, когда: 1) импульс еще не достиг границы раздела (пунктирная линия); 2) он уже вышел из пластинки (сплошные линии), причем отраженная волна уже успела уйти влево за пределы расчетной области. Границы раздела «воздух–Si» и «Si–воздух» изображены зелеными штриховыми линиями.

Вычисления производятся на 64-разрядном персональном компьютере с применением метода Ричардсона–Калиткина [17]. Он заключается в том, что расчеты проводятся на наборе последовательно сгущающихся сеток с числом шагов $N, 2N, 4N$ и т. д. По решениям на каждой паре сеток можно найти оценку погрешности. Она является асимптотически точной и относится к более подробной сетке. Вычитая ее из решения на этой сетке, уберем главный член погрешности. Тем самым, удастся существенно увеличить количественную точность и повысить ее порядок. Такая процедура проводится рекуррентно.

Из рис. 2,а видно, что на нескольких первых сетках вблизи границы раздела решение начинает сильно осциллировать, что свидетельствует о немонотонности, а на достаточно подробных сетках она не проявляется так явно. На рис. 2,б приведены нормы C погрешностей решения $\|R\|$ для второго момента времени в зависимости от числа шагов N в двойном логарифмическом масштабе. Регулярные участки кривых асимптотически выходят на прямые с углом наклона $\tan \alpha = -p$. Фактический порядок точности p указан около каждой из линий. При отсутствии рекуррентных уточнений (красная кривая) он равен $p = 1$. Видно, что применение метода сгущения сеток повышает точность вычислений (оранжевая, желтая и зеленая кривые).

По скорости убывания погрешности были найдены эффективные значения порядка точности

$$\bar{p}_k^m = \frac{\lg(R_k^m/R_{k+1}^m)}{\lg 2}, \tag{6}$$

где R_k и R_{k+1} — значения погрешностей для пары соседних сеток, k — номер сетки, m — номер уточнения. В случае однородной среды (табл. 1) при каждом сгущении сетки эффективный порядок точности \bar{p}_k^0 стремится к фактическому p , который совпадает с теоретическим $p_{th} = 2$. Заметим, что это стремление немонотонно (значение \bar{p}_k^0 может быть как больше, так и меньше p). По-видимому, это связано с немонотонностью схемы Йе при распространении импульса даже в воздухе.

Каждое рекуррентное уточнение повышает порядок точности на 2, так же как и в [20]. На достаточно подробных сетках погрешности решений, полученных в результате рекуррентных уточнений, выходят на фон

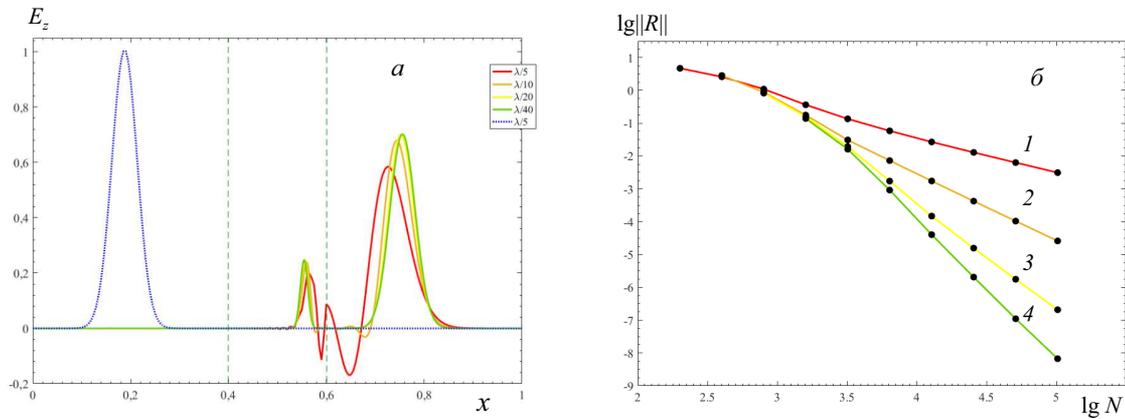


Рис. 2: Результаты вычислений. а — Зависимость электрической напряженности от координаты на сгущающихся сетках с учетом уточнения решения. б — Погрешности при сгущении сеток и рекуррентных уточнениях. Цифры около линий — порядок точности

Таблица I: Сравнение эффективных порядков точности для однородной среды (воздух) с их теоретическими значениями

k	h	N	\bar{p}_k^0	\bar{p}_k^1	\bar{p}_k^2	\bar{p}_k^3
1	$\lambda/5$	100	2.0739	—	—	—
2	$\lambda/10$	200	2.0197	4.1192	—	—
3	$\lambda/20$	400	2.0031	4.0295	6.1688	—
4	$\lambda/40$	800	1.9998	4.0062	6.0359	8.2052
5	$\lambda/80$	1600	2.0031	4.0029	6.0127	8.2716
6	$\lambda/160$	3200	1.9998	3.9996	5.8134	-0.1993
	p_{th}		2	4	6	8

Таблица II: Сравнение эффективных порядков точности для неоднородной среды (воздух–кремний–воздух) с их фактическими значениями

k	h	N	\bar{p}_k^0	\bar{p}_k^1	\bar{p}_k^2	\bar{p}_k^3
1	$\lambda/5$	100	0.8610	—	—	—
2	$\lambda/10$	200	1.2414	1.6935	—	—
3	$\lambda/20$	400	1.5866	2.3168	2.3834	—
4	$\lambda/40$	800	1.4244	2.5144	2.0230	3.1027
5	$\lambda/80$	1600	1.2128	2.0862	3.4880	4.1358
6	$\lambda/160$	3200	1.1228	2.0662	3.5445	4.5112
7	$\lambda/320$	6400	1.0564	2.0363	3.2356	4.2953
8	$\lambda/640$	12800	1.0298	2.0197	3.1525	4.2155
9	$\lambda/1280$	25600	1.0165	2.0098	3.0861	4.0395
	p		1	2	3	4

ошибок округления. Этот фон тем выше, чем больше N , поэтому избыточно подробные сетки выбирать не следует. Соответствующие значения \bar{p} , найденные по формуле (6), не являются достоверными. Из табл. 1 видно, что в данном примере целесообразно ограни-

читься шестым порядком точности.

При наличии кремниевой пластинки наблюдается как увеличение, так и уменьшение значений эффективного порядка точности \bar{p} от сетки к сетке (табл. 2). Напомним, что при теоретической сходимости \bar{p} должен стремиться к фактическому только снизу, либо только сверху и не должен «перескакивать» через значение p . Из табл. 2 видно, что на недостаточно подробных сетках наблюдается обратная картина. Эти участки кривой сходимости являются нерегулярными. Немонотонность схемы Йе порождает не только неправильное качественное поведение численного решения, но и очень большую ошибку. В результате это приводит к тому, что порядки точности $\bar{p}_k^0 \rightarrow 1$, тем самым $p \neq p_{th}$.

Видно, что при проведении рекуррентных уточнений, эффективные порядки точности стремятся не к теоретическому, а к фактическому значению, причем с каждым уточнением значение p повышается лишь на единицу. В данном примере не был достигнут фон ошибок округления, при необходимости порядок точности и саму точность вычислений можно еще повысить. Однако уже $p = 4$ вполне достаточно, чтобы проводить аккуратные расчеты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе показано, что схема Йе является немонотонной, что приводит к существенному падению точности при расчете сильно неоднородных диэлектрических сред. Порядок точности снижается до первого. Для преодоления этой проблемы предложено проводить расчёты на сгущающихся сетках и рекуррентно уточнять решение по методу Ричардсона–Калиткина.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 15-01-03524, 16-31-00418).

- [1] *Taflove A., Hagness S. C.* Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method. Artech House, 2005.
- [2] *Taflove A., Johnson S. G., Oskooi A.* Advances in FDTD Computational Electromagnetics: Photonics and Nanotechnology. Artech House, 2013.
- [3] *Боголюбов А. Н., Белокопытов Г. В., Домбровская Ж. О.* Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. 2013. № 5. С. 8. (*Bogolubov A. N., Belokopytov G. V., Dombrovskaya Z. O.* Mosc. Univ. Phys. Bull. 2013. **68**, N 5. P. 344.)
- [4] *Домбровская Ж. О., Белокопытов Г. В., Боголюбов А. Н.* Ученые записки физического ф-та Московского Ун-та. 2013. № 5. С. 135055.
- [5] *Lesina A. C., Vaccari A., Berini P., Ramunno L.* Optics Express. 2015. **23**, N 8. P. 10481.
- [6] *Yee K. S.* IEEE Trans. Antennas. Propag. 1966. **14**, N 3. P. 302.
- [7] *Cangellaris A. C., Wright D. B.* IEEE Trans. Antennas Propag. 1991. **39**. P. 1518.
- [8] *Hwang K. P., Cangellaris A. C.* IEEE Microw. Wireless Compon. Lett. 2001. **11**, N 4. P. 158.
- [9] *Hirono T., Shibata Y., Lui W. W. et al et al.* IEEE Microwave Guided Wave Lett. 2000. **10**. P. 359.
- [10] *Armenta R. B., Sarris C. D.* Proceedings of the IEEE MTT-S International. 2012. P. 978-1-4673-1088-8.
- [11] *Chu Q. X., Ding H.* Microwave Opt. Techn. Lett. 2007. **49**, N 12. P. 3007.
- [12] *Домбровская Ж. О.* Моделирование и анализ информационных систем. 2016. **23**, № 5. С. 539.
- [13] *Самарский А. А., Попов Ю. П.* Разностные методы решения задач газовой динамики. М., 2016.
- [14] *Годунов С. К.* Матем. сб. 1959. **47**, № 89. С. 271. (*Godunov S. K.* Math. Sbornik. 1959. **47**, P. 271. Translated US Joint Publ. Res. Service, JPRS 7226, 1969.)
- [15] *Кудрявцев А. Н., Трашкеев С. И.* Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2013. **53**, № 11. С. 1823. (*Kudryavtsev A. N., Trashkeev S. I.* Comp. Math. Math. Phys. 2013. **53**. P. 1653.)
- [16] *Richardson L. F.* Philos. T. Roy. Soc. A. 1927. **226**. P. 299.
- [17] *Калиткин Н. Н., Альшин А. Б., Альшина Е. А., Рогов Б. В.* Вычисления на квазиравномерных сетках. М., 2005.
- [18] *Калиткин Н. Н., Корякин П. В.* Численные методы. Кн. 1. М., 2013.
- [19] *Домбровская Ж. О., Боголюбов А. Н.* Ученые записки физического ф-та Московского Ун-та. 2016. № 3. С. 163112.
- [20] *Домбровская Ж. О., Боголюбов А. Н.* Изв. РАН. Сер. физ. 2017. **81**, № 1. С. 117. (*Dombrovskaya Zh. O., Bogolyubov A. N.* В. Russ. Acad. Sci.: Physics. 2017. **81**, N 1. P. 106.)
- [21] *Калиткин Н. Н., Корякин П. В.* Численные методы. Кн. 2. М., 2013.

Nonmonotonicity of FDTD scheme in modeling of dielectric interfaces

Zh. O. Dombrovskaya^a, A. N. Bogolyubov^b

Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

E-mail: ^adombrovskaya@physics.msu.ru, ^bbogan7@yandex.ru

It is shown that Yee's scheme of the FDTD method is nonmonotonous. It is demonstrated that for modeling of dielectric layered medium, the actual order of calculations accuracy is reduced to the first. To increase the accuracy, we suggest to carry out computations on thickening grids according to the Richardson-Kalitkin method. As a test problem, the propagation of a Gaussian pulse through a silicon plate placed in the air is considered. Computations are performed with increasing the order of accuracy up to the fourth.

PACS: 02.70.Bf.

Keywords: nonmonotonicity, Yee's scheme, FDTD method, mesh thickening method, high order of accuracy, dielectric interfaces, layered media.

Received 11 July 2017.

Сведения об авторах

1. Домбровская Жанна Олеговна — аспирант; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: dombrovskaya@physics.msu.ru.
2. Боголюбов Александр Николаевич — доктор физ.-мат. наук, заслуженный профессор, профессор; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: bogan7@yandex.ru.