

КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

Кафедра оптики и нанофотоники

Алмаз Рашитович ГАЗИЗОВ

Мякзюм Халимулович САЛАХОВ

**ВВЕДЕНИЕ В ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ВО
ВРЕМЕННОЙ ОБЛАСТИ**

Учебно-методическое пособие

Казань – 2025

УДК 535.3
М2.ДВ6

*Принято на заседании учебно-методической комиссии
Института физики КФУ
Протокол №01 от 10 сентября 2025 года*

Рецензент

доктор физико-математических наук, профессор **Б.А. Тимеркаев**

Газизов, А.Р. Введение в численное моделирование методом конечных разностей во временной области / А.Р. Газизов, М.Х. Салахов — Казань: Казан. ун-т, 2025. — 52 с.

Учебно-методическое пособие освещает основы метода конечных разностей во временной области (FDTD), знакомит читателя с базовыми понятиями и показывает различные примеры моделирования рассеяния света в наноструктурах для самостоятельного развития практических навыков проведения расчетов. Пособие дает элементарное представление об алгоритмах численного метода, о способах моделирования сред с временной и пространственной дисперсией, поглощением, нелинейностью, и о численном представлении различных источников излучения. В нем разбираются некоторые элементарные задачи в фотонике, особое внимание уделяется тонкостям моделирования и воспитанию критического отношения к полученным результатам. Кратко описываются возможности популярных пакетов современного программного обеспечения для FDTD-моделирования. Пособие рекомендовано для студентов старших курсов и магистрантов Института физики.

©Газизов А.Р., Салахов М.Х., 2025
©Казанский университет, 2025

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 Основные понятия	6
1.1 Аппроксимация	8
1.2 Устойчивость	10
1.3 Сходимость	13
2 Дискретизация пространства и времени	14
3 Одномерная формулировка алгоритма FDTD	18
4 Моделирование материальных сред	22
4.1 Временная дисперсия	22
4.2 Использование импеданса и плотности тока	26
4.3 Пространственная дисперсия	27
5 Алгоритм FDTD для двумерной и трехмерной задачи	30
6 Идеально сочетающиеся слои	31
7 Моделирование источников световых волн	36
8 Обзор программного обеспечения для FDTD-моделирования	42
8.1 Lumerical FDTD	43
8.2 MEEP	45
Заключение	48
Список литературы	51

Введение

Метод FDTD (англ. *Finite-Difference Time-Domain* – «конечные разности во временнóй области») – вычислительный метод, решающий уравнения электродинамики путем дискретизации пространства и времени и выполняющий алгоритм для нахождения значений электрического и магнитного полей во времени. Наряду с другими методами решения дифференциальных уравнений, такими как метод множественных мультиполей (ММП), метод дискретно-дипольной аппроксимации (DDA), метод конечных элементов (FEM) и др., метод FDTD – один из самых популярных численных методов, используемых в современной фотонике. Он может быть с успехом применен для решения широкого спектра задач: от моделирования микроволн и радиосвязи (например, для расчёта характеристик антенн, разработки беспроводных устройств связи нового поколения, в том числе цифровых) до решения задач в оптическом диапазоне (фотонные интегральные схемы, волноводы, метаматериалы, плазмоника и т.д.).

Впервые алгоритм для этого метода был предложен К. Йи в 1966 г. [1]. Он построен таким образом, что из известного распределения полей в пространстве в текущий момент времени находятся неизвестные значения полей в будущие моменты времени. Такая вычислительная схема называется *явной*. Частные производные во времени и в пространстве в уравнениях Максвелла заменяются дискретно-разностными производными $\partial y / \partial x \approx (y_n - y_{n-1}) / \Delta x$. Из текущих значениях полей находятся значения пространственных производных (дискретное дифференцирование), а из текущих временных производных находятся значения полей в следующий шаг во времени (интегрирование). Метод нацелен на моделирование переходных процессов, однако он также позволяет находить стационарные решения граничных задач. Как правило, после численного решения уравнений Максвелла проводят пост-обработку полученных значений полей во времени, чтобы найти интересующие параметры объектов,

спектральные характеристики, оптические потери или другие физические величины.

В настоящее время метод FDTD является довольно устоявшимся и уже прочно вошел в арсенал исследователей, однако он продолжает развиваться. Это происходит и по линии улучшения точности алгоритма, реализации новых способов дискретизации, обобщения для нестандартных геометрий, создания новых вычислительных схем, реализации алгоритма для различных материальных сред, так и по линии оптимизации алгоритма, снижения требований к ресурсам, использование различных приближений, симметрий задачи и т.д.

В современной науке численное моделирование – неотъемлемый шаг в исследованиях. В частности, в оптике и физике наноструктур моделирование свойств излучателей света и других объектов практически превратилось в рутину. Моделирование используют как для теоретического предсказания новых эффектов и свойств новых материалов, так и для поиска оптимальных параметров задачи для проведения эксперимента. Метод FDTD фактически превратился в «золотой стандарт» для численного моделирования в задачах фотоники. Он может быть интегрирован в более широкое численное моделирование, как один из его этапов. Также метод FDTD удобен тем, что с его помощью можно обучить модели искусственного интеллекта в задачах обратного дизайна.

В этом пособии рассматриваются реализации данного метода в средах технического программирования Mathworks[®] MatLab, GNU Octave, и на языке Python. Использовались также алгоритмы, реализованные в проприетарном пакете Ansys Lumerical[®] FDTD версии 2020a и свободном пакете программ с открытым исходным кодом MEEP версии 1.17.1 разработки Массачусетского технологического института (MIT) для проверки корректности реализации метода и сравнения результатов.

1. Основные понятия

Для описания и классификации численного моделирования существует своя терминология. Важнейшим понятием, используемым в численном решении дифференциальных уравнений, является понятие разностной схемы.

Определение 1. *Разностная схема* – это конечная система алгебраических уравнений, поставленная в соответствие какой-либо дифференциальной задаче, содержащей дифференциальное уравнение и дополнительные условия, в число которых входят краевые условия и значения искомых функций в начальный момент времени.

В конечно-разностных методах дифференциальные уравнения, описывающие непрерывные функции, приводятся к системе алгебраических уравнений, численное решение которых принципиально возможно на вычислительных машинах. Алгебраические уравнения, поставленные в соответствие ДУ, получают применением разностного метода, в отличие от других численных методов решения дифференциальных задач (например проекционных методов, таких как метод Галёркина). Важными понятиями теории разностных схем являются понятия *сходимости*, *аппроксимации*, *устойчивости*, *консервативности*. Решение разностной схемы называется приближенным решением дифференциальной задачи. Так как интегрирование уравнения происходит во временной области, то под разностной схемой мы будем далее подразумевать временную схему (англ. *time-stepping scheme*). В ней нахождение искомых значений полей происходит каждый шаг во времени.

Различают *явные* (англ. *explicit*) и *неявные* (англ. *implicit*) разностные схемы. В *явных* схемах при нахождении функции в текущий момент используются значения производных и других функции в предыдущие моменты времени. То есть искомая величина выражается в схеме через известные величины явно. В таком случае интегрирование уравнения происходит в ходе алгоритма непосред-

ственно. В *неявных* схемах значение функции выражается через текущие же значения производных, поэтому получается система уравнений, которые связывают текущие значения функции и производных в разных точках пространства. Недостающие связи задаются граничными условиями. Интегрирование в этом случае происходит в ходе решения системы уравнений. Более того, существуют так называемые «полу неявные» схемы (англ. *semi-implicit*), в которых одно поле рассчитывается по явной, а другое — по неявной схеме. Особо выделяют схему, получившую название *неявной* *схемы с чередованием направления интегрирования во времени* (англ. *alternating-direction implicit, ADI-FDTD*) [2]. В ней значения одного поля выражаются через будущие значения производной другого поля, а его значения, в свою очередь, выражаются через прошлые значения производных первого поля. Неизвестные значения полей находятся решением получившейся системы уравнений.

Вместо непрерывных функций, заданных на отрезках или интервалах, численные разностные методы работают на так называемых сетках.

Определение 2. *Расчётная (вычислительная) сетка* (англ. *mesh*) – совокупность точек (сеточных узлов), заданных в области определения функции, входящей в заданные уравнения. Как правило, чем плотнее сетка, тем точнее численное решение задачи.

Процедуру построения расчётной сетки можно рассматривать как построение взаимно-однозначного отображения области определения функции (физической области) на некоторую *расчётную область* (англ. *working domain*), имеющую более простую форму. Так как в методе FDTD интегрирование происходит во временной области, рассмотрим сначала временную сетку. В ней параметром является величина Δt шага во времени. В алгоритме Йи используется регулярная временная сетка, в которой значения функции определены в моменты времени с одинаковым шагом. Временные сетки электрического и магнитного полей сдвинуты по отношению друг к другу. То есть возникает необходимость

в «половине» шага во времени. Разберемся почему. В уравнениях Максвелла временные производные магнитного поля связаны с пространственными производными электрического поля и наоборот. Если разделить поля, то мы придем к уравнениям в частных производных второго порядка, интегрирование во времени которых сложно. Значит за один шаг во времени нужно интегрировать с помощью разностной схемы оба поля. Из-за взаимозависимости обоих полей, при интегрировании одного поля приходится использовать значения функции другого поля. Это может быть организовано по методу «лягушки» (англ. *leapfrog scheme*) [3], если временные сетки электрического и магнитного поля смещены на полшага (*staggered*) и интегрирование полей происходит последовательно – каждого поля в соответствующей половине шага. Альтернативный способ организации разностной схемы – метод Рунге-Кутты, в нем электрические и магнитные поля вычисляются параллельно и временные сетки магнитного и электрического поля совмещены по времени (англ. *co-located in time*), хотя и смещены друг от друга в пространстве [4]. Оба метода интегрирования могут быть как в явной, так и неявной схеме.

Аппроксимация

Пусть u – одна из искомым функций задачи. Уравнения Максвелла содержат различные дифференциальные операторы, действующие на u , такие как роторы и дивергенции, обозначим их обобщенно $L(u)$. Говорят, что конечно-разностный оператор $R_h(u_k)$, $k \in \mathbb{Z}$, где h – шаг сетки, **аппроксимирует** дифференциальный оператор $L(u)$, если:

$$\|L(u) - R_h(u_h)\| \rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0 \quad (\text{для всех значений } u \text{ в рабочей области}). \quad (1.1)$$

Это выражение напоминает определение производной функции через предел отношения. В общем случае оператор разностной производной $R_h(u_k) = \sum a_k u_k$ – это некая линейная форма (англ. *stencil* «трафарет») по отношению к значе-

ниям функции u_k на сетке, получаемая из разложения функции в ряд Тейлора вблизи точки, где определены производные функции. Разностная производная может быть определена на той же сетке или в точках, которые смещены от сетки на расстояние $h/2$. Также эти формы отличаются по **порядку точности** (англ. *order of accuracy*), который зависит от количества оставляемых в разложении членов (рис. 1.1). В базовом алгоритме ИИ сетка значений функции смещена от сетки производных на полшага, и все разностные производные имеют 2-й порядок точности [3]. Покажем это. Разложим функцию в точках $x_{m\pm 1/2}$ около точки x_m :

$$u_{m\pm 1/2} = u_m \pm u'_m \frac{h}{2} + u''_m \frac{h^2}{8} + O((h/2)^3). \quad (1.2)$$

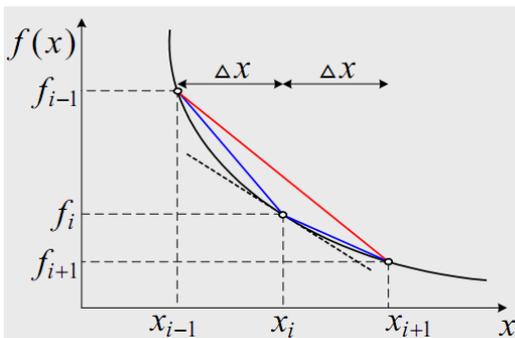


Рис. 1.1. Левая и правые конечно-разностные производные 1-го порядка и центральная производная 2-го порядка точности по Δx .

Отсюда легко выразить $u'_m = (u_{m+1/2} - u_{m-1/2})/h + O(h^2)$. Подобным способом выражаются формы конечно-разностных операторов производных высшего порядка и производных большего порядка точности. Последние используют в своем трафарете тем больше соседних точек, чем выше порядок точности.

Это связано с тем, что для нахождения производной k -го порядка точности необходимо удержать $k + 1$ членов в разложении Тейлора и решить систему уравнений на неизвестные коэффициенты, которые суть *аппроксимируемые* значения соответствующих производных функции до k -го порядка и требуемого порядка точности. В сети можно найти коэффициенты для трафарета каждой производной любого порядка точности [5].

На пространственной сетке и на временной сетке порядок точности аппроксимации производных может отличаться. Порядок точности разностной схемы принято обозначать двумя числами (n, m) , по времени и пространству

соответственно. В настоящее время помимо классической схемы Йи (2,2) также существуют алгоритмы (2,4), (4,4), а также «бесконечного» порядка, где производные высчитываются с помощью быстрого преобразования Фурье [6,7]. Отсылаем читателя к книгам [3, 8] за подробностями. Добавим только, что большой порядок точности в пространстве приводит к сложностям на границе сред [9,10], а большой порядок точности во времени приводит многократным затратам ресурсов на сохранение в памяти значений поля в нескольких предыдущих шагах во времени.

Устойчивость

В ходе вычислений неизбежно возникают ошибки из-за конечного формата представления чисел в памяти компьютера, округления и дискретизации задачи. Последнее влияет как на сами вычисления, так и на представление анализируемых сред и структур в рабочей области. Более того, в конечно-разностной схеме электромагнитные волны приобретают ненулевую дисперсию (зависимость частоты света от его волнового вектора) даже в вакууме.

Определение 3. *Вычислительная устойчивость* (англ. *numerical stability*) – это свойство разностной схемы сохранять ограниченность общей невязки между численным решением и решением исходного ДУ при наличии погрешностей алгоритма и флуктуации в данных. Противоположностью является ***неустойчивость***, когда решение конечно-разностной схемы отклоняется от решения ДУ, причем отклонение увеличивается с каждым шагом во времени.

Различают *условную* и *безусловную* устойчивость. В первом случае схема является устойчивой при выполнении определенных условий или соотношений между параметрами схемы, такими как плотность сетки, длительность шага, величины дисперсии, затухания или нелинейного усиления волн. В случае явных схем, это условие носит название ***критерия Куранта-Фридрихса-Леви*** (англ. *CFL condition*). Для разностных схем линейных ДУ гиперболического типа (к

которым относятся и уравнения Максвелла), условие CFL имеет вид [11]:

$$C = \sum_{i=1}^n \frac{v_i \Delta t}{\Delta x_i} \leq C_{\max}, \quad (1.3)$$

где Δx_i – размер шага пространственной сетки в направлении i , v_i – фазовая скорость в направлении i , n – пространственная размерность задачи, C_{\max} – некая безразмерная константа, которая зависит от вида ДУ, от вида разностной схемы, порядка точности. Для базового алгоритма Йи эта константа равна 1. Безразмерный параметр, который равен левой части уравнения (1.3), называется **числом Куранта** (англ. *Courant number*). Стоит отметить, что число Куранта может меняться от места к месту внутри рабочей области, например, если в ней присутствуют среды с различным показателем преломления. Подобное условие может быть записано и для явной разностной схемы уравнения теплопроводности. В случае неявных схем вычислительная неустойчивость может иметь место из-за близости к нулю определителя системы линейных уравнений разностной схемы.

Численная дисперсия (англ. *numerical dispersion*) – артефакт разностной схемы, искажение свойств представляемой численно однородной среды (например, вакуума), при котором волны, распространяющиеся в представляемой среде без дисперсии, испытывают зависимость скорости от частоты.

Нефизическая дисперсия моделируемых волн в вычислительной сетке проявляется даже для свободного пространства. Т.е. фазовая скорость может отличаться от c , в зависимости от длины волны, направления распространения в сетке и дискретизации. Можно интуитивно понять это явление, если представить, что пространственно-временная сетка создает разреженный «числовой эфир» – периодическую среду, имеющую свойства, очень близкие к вакууму, но отличные от него. Вследствие теоремы Котельникова, спектр сигнала становится ограничен сверху частотой Найквиста $\omega_N = \pi/\Delta t$. Умножение спектра на прямоугольное окно ($\omega \leq \omega_N$) равносильно свертке во временной области, что

и приводит к дисперсии. Этот «эфир» заставляет распространяющиеся волны накапливать фазовые ошибки, которые могут приводить, например, к расплыванию и ряби импульсных волновых форм, анизотропии. Численная дисперсия является важным фактором в моделировании FDTD, который необходимо учитывать для понимания его работы и пределов его точности.

Численная дисперсия волн в однородной среде определяется уравнением:

$$\frac{1}{v\Delta t} \sin^2 \frac{\omega\Delta t}{2} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\Delta x_i} \sin^2 \frac{k_i\Delta x_i}{2}. \quad (1.4)$$

Данное уравнение допускает решения с комплексными волновыми числами. Можно также показать, что (1.4) сводится к $\omega^2/v^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, если число Куранта и направление распространения волны выбраны соответствующим образом. Например, для плоской волны, распространяющейся вдоль главной диагонали кубической решетки ($k_x = k_y = k_z = k/\sqrt{3}$), дисперсия сводится к идеальной при $C = 1/\sqrt{3}$. Аналогично, идеальная дисперсия получается для плоской волны, распространяющейся вдоль диагонали квадратной сетки ($k_x = k_y = k/\sqrt{2}$), если $C = 1/\sqrt{2}$. Наконец, для одномерной сетки ур. (1.4) сводится к выражению:

$$\frac{1}{C} \sin \frac{\pi C \Delta x}{\lambda} = \sin \frac{k\Delta x}{2}, \quad (1.5)$$

идеальная дисперсия получается для любой волны при $C = 1$, данный временной шаг называется *магическим*. Эти сведения к идеальному случаю имеют небольшую практическую ценность для 2D и 3D моделирования, поскольку происходят исключительно для диагонального распространения, а не для более общего набора направлений. Однако сведение к идеальной дисперсии в одном измерении весьма интересно, поскольку оно подразумевает, что алгоритм Йи (основанный на конечно-разностных приближениях) может *точно* решить непрерывное одномерное волновое уравнение.

Сходимость

Определение 4. *Сходимость численного решения* (англ. *convergence*) – это свойство решения разностной схемы, при котором оно стремится к точному решению ДУ при стремлении шага сетки к нулю. Из условий аппроксимации и устойчивости разностной схемы следует свойство сходимости решения (теорема Филиппова-Рябенького, англ. «*Lax equivalence theorem*»).

Это определение рассказывает нам, что при задании все более точной сетки результат численного моделирования «теоретически» стремится к точному решению. Однако на практике это необходимо проверять в каждом случае. В ходе одной попытки моделирования неясно, насколько далеко от точного решения задачи находится результат моделирования. Поэтому профессиональное численное моделирование подразумевает серию запусков численной задачи со все более плотной сеткой или другим аналогичным параметром точности. В результате серии запусков строится *кривая сходимости*, которая отражает приближение целевой рассчитываемой величины к своему истинному значению, соответствующее решению точной дифференциальной задачи. Другими словами, определяется достоверность и точность численного моделирования при данных параметрах вычислительной сетки.

Свойство *консервативности* рассмотрено в следующем параграфе.

На заданной вычислительной сетке в рабочей области определяются источники и мониторы электромагнитного поля. Так как в начале запуска численной задачи электрическое и магнитное поля равны нулю, а уравнения разностной схемы однородны, то легко понять, что оба поля так и останутся равными нулю, если только в некоторой части рабочей области не ввести дополнительные условия. *Условия источника поля* (англ. *source condition*) по сути представляют собой готовое решение уравнений Максвелла в заданной ограниченной области. Эта область может быть одной ячейкой сетки, множеством ячеек, расположенных на линии или на плоскости, а также целой областью пространства. Соответ-

ственно этой размерности различают точечный источник, линейный источник и т.д. Физически эти источники описывают заданное распределение плотности тока \mathbf{J} в пространстве в каждый шаг во времени. Различают источники также по типу – электрические и магнитные. В зависимости от условий моделируемой задачи, задаются источники сферических, цилиндрических или плоских волн. Последнее реализуется с помощью особой техники деления рабочей области на *области полного и рассеянного поля* (англ. *Total field/Scattered field, TFSF*). Подробнее моделирование источников описывается в параграфе (7).

Подобно источникам поля задаются *мониторы* – множество узлов вычислительной сетки, из которых в каждый шаг времени значения электрического или магнитного полей сохраняются в памяти компьютера в результате запуска численной задачи. Обычно это некоторый файл на жестком диске. Мониторов может быть несколько, монитором может быть хоть вся рабочая область. Однако в последнем случае размер файла с результатами моделирования может оказаться чрезмерно большим. Более того, запись данных на диск является гораздо более медленной операцией, чем сами расчеты, поэтому большой объем сохраняемых данных существенно увеличивает время одного запуска численной задачи.

2. Дискретизация пространства и времени

При дискретизации пространство делится на ячейки таким образом, что каждая точка, в которой определена компонента электрического поля \mathbf{E} , имеет 4 соседние точки с компонентами магнитного поля \mathbf{H} и наоборот (см. рис. 2.1). В связи с этим уравнения Максвелла, записанные в дифференциальной форме, приобретают интегральный смысл. Роторы и дивергенции, которые фигурируют в уравнениях Максвелла, есть пределы отношений циркуляции или потока к площади контура или объему, ограниченному поверхностью, при стремлении

этих площадей и объемов к нулю [12]. Соответственно, выполняются все интегральные законы электродинамики в контурах, образованных ребрами ячейки, и объеме ограниченной поверхностью, образованной гранями ячейки. Также выполняется теорема Пойтинга. Подобное свойство разностной схемы носит название *консервативности*.

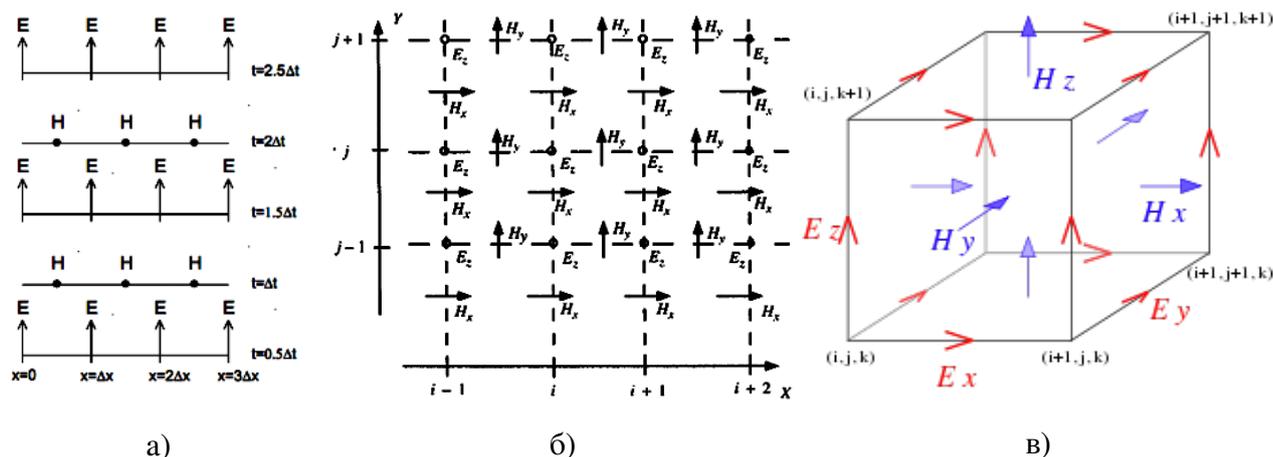


Рис. 2.1. Представлена дискретизация пространства при 1d (а), 2d (б) и 3d (в) FDTD.

Максимальный размер ячейки пространства условно принимают равной $1/10$ минимальной длины волны [13]. При больших размерах ошибка в значениях полей, полученных численным методом, превысит 4%. Ограничение размера имеет место для исключения рассеяния света на неоднородностях, полученных при неточном отображении поверхностей на вычислительную сетку (эффект «лестничного приближения»). Т.е. кроме погрешностей, связанных с округлением исходных уравнений, имеет место дополнительное несуществующее в природе рассеяние. На большом удалении от объектов пренебрежение этим оправдано, т.к. ближние поля быстро затухают с расстоянием. Однако в масштабах оптической антенны и наноструктур ближними полями пренебрегать нельзя.

Однако почти нигде в литературе не встречается указаний на минимальный размер ячейки. Понимая преимущество и простоту метода, можно использовать его для расчета полей ближней зоны (много меньше длины волны) вплоть до масштабов атома, но нельзя забывать о физическом смысле таких действий.

Размер ячейки ограничен снизу рядом причин:

1. Предел макроскопического описания, параметром является длина де-Бройлевской волны электрона в металле

$$\lambda = h/p_F. \quad (2.1)$$

Для благородных металлов он составляет 0,5 нм. Данный параметр показывает масштаб, при котором вещество перестаёт вести себя как сплошная среда, и становятся существенными законы квантовой механики. Классические уравнения Максвелла перестают быть справедливыми.

2. Предел квазинейтральности, параметром является радиус экранирования Томаса-Ферми в вырожденной плазме металла

$$L_F = \sqrt{\varepsilon_0 \hbar^2 / 4m e^2 k_F}. \quad (2.2)$$

Для благородных металлов он составляет 0,06 нм. Данный параметр показывает расстояние, на котором электрическое поле, возникшее в результате случайной флуктуации плотности объемного заряда, полностью экранируется. Это значение сравнимо с межатомным расстоянием – значит, модель свободных электронов достаточно хороша. На данном масштабе престаает быть корректным приближение средних макроскопических полей [12].

3. Предел размерного квантования, параметром является длина когерентности электрона в металле

$$L = \frac{\hbar}{\sqrt{mkT}}. \quad (2.3)$$

Для благородных металлов он составляет 2,4 нм [14]. Данный параметр показывает размер области локализации электрона или размер наночастицы, у которой разность между ближайшими уровнями энергии больше тепловой флуктуации энергии. Наночастица вследствие этого приобретает дискретный

набор уровней энергии, на таких масштабах диэлектрическая проницаемость существенно изменяется и становится неоднородной в пространстве. Данные ограничения являются по существу ограничениями на использование классических уравнений Максвелла для макроскопических полей, а не ограничениями метода. В масштабах микроволн, где численный метод чаще всего применяют, данное обстоятельство несущественно. Однако при моделировании электродинамики наноструктур и ближних полей важно соблюдать корректность, т.к. большая точность вычислений при меньших размерах ячейки дискретизации не имеет физического смысла на таких масштабах.

Кроме этого, имеются ограничения, связанные с возможностями вычислительной техники. Время расчета и потребляемые ресурсы зависят от количества ячеек как $\sim N^4$, где N – протяженность рабочей области в ячейках вдоль одного направления пространства. Четвертая степень появляется из-за того, что при меньших размерах ячейки также уменьшается и шаг во времени, следовательно, алгоритм должен выполняться большее число раз для того, чтобы электромагнитная волна, провзаимодействовавшая с объектом, удалилась к границам рабочей области.

Для того чтобы уменьшить затраты ресурсов компьютера, существует модификация этого метода, при которой дискретизация выполняется в виде неоднородной сетки (англ. *non-uniform meshing*). При этом размер ячейки Δ мал в непосредственной близости от объекта и плавно увеличивается вдали от него. Таким образом, достигается сгущение сетки в области, где необходимы большие точности, и разрежение сетки около границ, где есть только свободное пространство, при значительной экономии вычислительных ресурсов компьютера. Однако в этом пособии мы не будем рассматривать этот вид сетки, ввиду того, что алгоритм, реализующий его, громоздкий и его приведение здесь значительно увеличило бы объем работы. Реализация неоднородных сеток подробно рассмотрена в книге [3].

Помимо классического варианта декартовой сетки и ее модификации в

виде неоднородных сеток, можно построить сетку замощением плоскости или трехмерного пространства многоугольниками или многогранниками. Примером на плоскости в двумерной реализации метода служит гексагональная сетка – в ней точка, в которой определено значение электрического поля, окружена 6 точками с магнитным полем и наоборот. Существует также пространственный аналог этой сетки для трехмерной формулировки – тетрадекаэдральная/дуальная тетраэдральная сетка. Сетка строится замощением трехмерного пространства усеченными октаэдрами и дуальная к ней тетраэдральная сетка, в элементарной ячейке такой сетки 19 компонент поля. Главной мотивацией таких сеток является большая точность при отображении объектов, меньшие по сравнению с декартовой сеткой численные погрешности. Несмотря на эти преимущества, в настоящее время недекартовы сетки используются редко из-за громоздкости алгоритма и сложностей при генерации таких сеток [3]. Также алгоритм FDTD может быть сформулирован в криволинейных системах координат, например, цилиндрической. Примером программы, где успешно реализована цилиндрическая формулировка FDTD, является MEER.

3. Одномерная формулировка алгоритма FDTD

Классический алгоритм Йи использует явную разностную схему на смещенных сетках электрического и магнитного поля по методу «лягушки». Суть метода в дискретизации роторных уравнений Максвелла:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= [\nabla \times \mathbf{H}] ; \\ \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} [\nabla \times \mathbf{E}] . \end{aligned} \tag{3.1}$$

Рассмотрим случай одномерного моделирования, ось примем за направление распространения волны. Уравнения Максвелла запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{\partial D_x}{\partial t} &= -\frac{\partial H_y}{\partial z}, \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z}.\end{aligned}\tag{3.2}$$

В одномерном случае ячейки пространства размечаются, как показано на рис. 2.1а. Каждую точку, где определено значение электрического поля, окружают две точки, где определены значения магнитного поля. Заменяя бесконечно малые приращения функций и аргументов конечными разностями, получаем:

$$\begin{aligned}D_x^{n+1/2}(k) &= D_x^{n-1/2}(k) - \frac{\Delta t}{\Delta z} [H_y^n(k+1/2) - H_y^n(k-1/2)]; \\ H_y^{n+1}(k+1/2) &= H_y^n(k+1/2) - \frac{\Delta t}{\mu \Delta z} [E_x^{n+1/2}(k+1) - E_x^{n+1/2}(k)].\end{aligned}\tag{3.3}$$

Уравнения в системе (3.3) симметричны относительно напряженностей, но из-за того, что ϵ_0 и μ_0 отличаются на несколько порядков, E_x и H_y отличаются на несколько порядков. Это устраняется путем следующей замены переменных, эквивалентной переходу к системе единиц Гаусса:

$$\tilde{E} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E; \quad \tilde{D} = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}} D.\tag{3.4}$$

В дальнейшем мы будем подразумевать под E электрическое поле в системе единиц Гаусса, опуская тильду. Данная операция аналогична обезразмериванию физических величин. Система Гаусса удобна тем, что в ней напряженности электрического и магнитного полей, смещение и индукция имеют одинаковую размерность. Это приводит уравнения (3.3) к виду:

$$\begin{aligned}D_x^{n+1/2}(k) &= D_x^{n-1/2}(k) - \frac{c \Delta t}{\Delta z} [H_y^n(k+1/2) - H_y^n(k-1/2)]; \\ H_y^{n+1}(k+1/2) &= H_y^n(k+1/2) - \frac{c \Delta t}{\Delta z} [E_x^{n+1/2}(k+1) - E_x^{n+1/2}(k)].\end{aligned}\tag{3.5}$$

Таковы уравнения алгоритма, обновляющего значения полей во всей рабочей области с каждым шагом во времени.

Используя уравнения (3.3) и материальное уравнение $D_x = \varepsilon E_x$ и имея в виду, что в численных расчетах есть погрешности значений полей $E(k) = E_0(k) + \alpha_k$ и $H(k) = H_0(k) + \beta_k$, можно получить уравнения динамики погрешностей:

$$\frac{\alpha'_k}{\alpha_k} = 1 - \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta z} \frac{\beta_{k+} - \beta_{k-}}{\alpha_k}; \quad \frac{\beta'_{k+}}{\beta_{k+}} = 1 - \frac{\Delta t}{\mu \Delta z} \frac{\alpha_{k+1} - \alpha_k}{\beta_{k+}}. \quad (3.6)$$

Из условия, что погрешности не должны возрастать со временем, получаем условие устойчивости:

$$\frac{\Delta t^2}{\varepsilon \mu \Delta z^2} \leq 1. \quad (3.7)$$

Таким образом выводится описанное в предыдущем параграфе (1) CFL-условие для FDTD, и оно справедливо для любой разностной схемы гиперболического типа [11]. Выражение, стоящее в левой части условия Куранта, носит название числа Куранта. Оно показывает, сколько ячеек пространства проходит электромагнитная волна за шаг времени. В случае трехмерного алгоритма число Куранта записывается в виде:

$$\frac{\Delta t^2}{\varepsilon \mu} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) \leq 1. \quad (3.8)$$

Для начала моделирования необходимо также задать рабочую область и граничные условия. Уравнения (3.5) совместно с уравнениями, моделирующими материальные среды, определяют эволюцию значений полей во всей рабочей области. Однако они не применимы на ее границах. Для того, чтобы не возникало отражений поля от границ рабочей области (которые существуют лишь в воображении), необходимо, чтобы волна на границах полностью проходила через границы. Это соответствует граничному условию Неймана (II рода). Если принять число Куранта равное $1/m$, то волна будет преодолевать ячейку за m

шагов, поэтому значения поля на границе должны быть равны (пример левая граница):

$$E_x^n(0) = E_x^{n-m}(1). \quad (3.9)$$

Данное условие называется поглощающими граничными условиями (АВС). Условия АВС дают нулевое отражение, если скорость волны не зависит от частоты. При наличии у моделируемых сред дисперсии необходимо использовать в условиях АВС групповую скорость волны, при этом слабое отражение на границах все же будет возникать. Аналогично записываются граничные условия и для других границ, если скорость света на границах отличается в целое число раз.

Если на границах рабочей области разные среды, отношение показателей которых не является рациональным числом, то используют более сложное граничное условие, получаемое из приближения однонаправленного волнового уравнения [15]:

$$\frac{\partial E}{\partial z} \pm \frac{1}{v_g} \frac{\partial E}{\partial t} = 0, \quad (3.10)$$

где знак определяет направление распространения волны – знак «+» описывает волну, распространяющуюся по оси Z в положительном направлении и наоборот, v_g – групповая скорость волны. Для того чтобы дискретные уравнения имели второй поряд-

док точности, конечные разности записывают для средних значений поля на границе области (см. рис. 3.1). В результате получается дискретное граничное условие, называемое условием Мура (пример правой границы):

$$E_x^n(-1) = E_x^{n-1}(-2) - \frac{1-C}{1+C} (E_x^n(-2) - E_x^{n-1}(-1)), \quad (3.11)$$

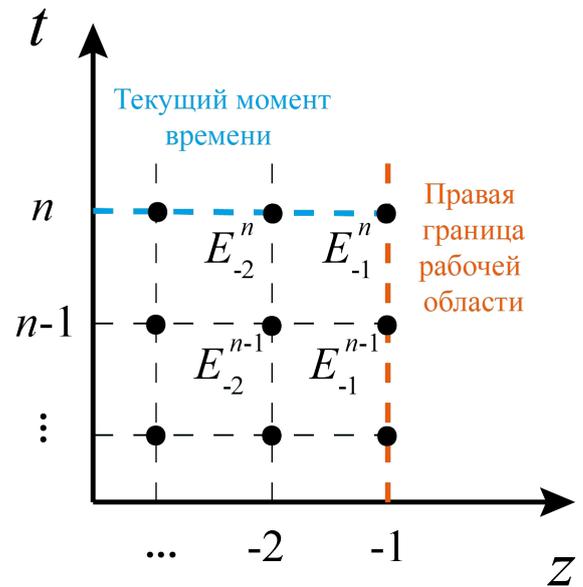


Рис. 3.1. Пространственно-временная сетка электрического поля вблизи правой границы рабочей области при одномерной формулировке FDTD.

где C – число Куранта, нумерация ячеек показана на рис. 3.1. Данное условие применимо и в случае, если граница соприкасается со средой произвольной проницаемости.

Кроме поглощающих условий известны условия PEC (англ. *perfect electric conductor*), PMC (англ. *perfect magnetic conductor*) – условия зеркального отражения с сохранением и инверсией фазы [3]. Они соответствуют граничным условиям, называемым условием Дирихле (I рода или «жестко закрепленные края») в теории дифференциальных уравнений. В первом случае на границе равно нулю значение электрического поля, во втором – магнитного, что и определило их название (на границе и внутри идеальных проводников поле равно нулю).

Симуляция происходит следующим образом. Вначале во всей рабочей области значения полей равны нулю. В точке, где находится источник, поле определяется уравнением источника – это может быть монохроматическая волна, волновой пакет или импульс формы функции Гаусса. Далее с каждым шагом значения полей обновляются во всей области – тем самым поле распространяется по рабочей области. При этом вначале вычисляются значения электрического поля, а затем магнитного, т.е. магнитные поля вычисляются в моменты времени, сдвинутые на $1/2$ шага от моментов времени, в которых определено электрическое поле (рис. 2.1а).

4. Моделирование материальных сред

Временная дисперсия

Обозначим мнимую единицу j , $j^2 = -1$, как принято в радиоэлектронике и обработке сигналов, при этом мы будем использовать соглашение зависимости от времени как $\propto e^{j\omega t}$, $j = -i$. Для моделирования поглощающей среды используют комплексную диэлектрическую проницаемость $\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_r + \sigma_0/(j\omega\epsilon_0)$,

где ε_r обозначает диэлектрический вклад от связанных электронов, σ_0 – проводимость постоянного тока, и переводят ее во временную область с помощью обратного преобразования Фурье:

$$\mathbf{D}(t) = \varepsilon_r \mathbf{E}(t) + \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0} \int_0^t \mathbf{E}(t') dt'. \quad (4.1)$$

После замены интеграла на сумму и выражая электрическое поле \mathbf{E} через электрическое смещение \mathbf{D} текущего момента и значений \mathbf{E} предыдущих моментов, получаем алгоритм, где \mathbf{I} играет роль интеграла в выражении (4.1). Уравнения (3.5) остаются без изменений.

$$\begin{aligned} E^n &= \frac{D^n - I^{n-1}}{\varepsilon_r + \frac{\sigma_0 \Delta t}{\varepsilon_0}}; \\ I^n &= I^{n-1} + \frac{\sigma_0 \Delta t}{\varepsilon_0} E^n. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Для моделирования среды с дисперсией существует несколько моделей [13]. Проводящая среда, в данном случае металл, хорошо описывается теорией Друде, и соответствующей моделью является модель Дебая-Друде. В ней диэлектрическая проницаемость представляется как

$$\tilde{\varepsilon}_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\sigma_0}{j\omega\varepsilon_0} + \frac{\chi_0}{1 + j\omega\tau}, \quad (4.3)$$

где τ – время релаксации, χ_0 – дебаевская восприимчивость, ε_∞ обозначает вклад от высокочастотных колебаний связанных электронов. Данная модель устойчива, если $\sigma_0 \geq -\frac{\chi_0 \varepsilon_0}{\tau}$ [16]. Особый случай $\chi_0 = -\omega_p^2 \tau^2$, $\sigma_0 = \omega_p^2 \tau \varepsilon_0$, где ω_p – плазменная частота материала, соответствует закону дисперсии Друде, которому подчиняются большинство металлов в видимой области спектра.

Используем обратное преобразование Фурье:

$$P(\omega) = \frac{\chi_0}{1 + j\omega\tau} E(\omega) \Rightarrow P(t) = \frac{\chi_0}{\tau} \int_0^t e^{-(t-t')/\tau} E(t') dt'. \quad (4.4)$$

После замены интеграла суммой получаются уравнения, аналогичные (4.2). В них **P** отвечает за дисперсию.

$$\begin{aligned} E^n &= \frac{D^n - I^{n-1} - e^{-\Delta t/\tau} P^{n-1}}{\varepsilon_\infty + \frac{\sigma_0 \Delta t}{\varepsilon_0} + \frac{\chi_0 \Delta t}{\tau}}; \\ I^n &= I^{n-1} + \frac{\sigma_0 \Delta t}{\varepsilon_0} E^n; \\ P^n &= e^{-\Delta t/\tau} P^{n-1} + \chi_0 \frac{\Delta t}{\tau} E^n. \end{aligned} \quad (4.5)$$

В описанном выше подходе разностные уравнения для вспомогательных величин **I** и **P** (4.5) выводятся с помощью обратного преобразования Фурье. Его своеобразным аналогом является z -преобразование, с помощью него эти уравнения можно получить непосредственно [17]. Приведенные выше разностные уравнения имеют первый порядок точности аппроксимации по Δt . Используя формализм z -преобразования, можно получить и второй порядок точности, например, используя трапецеидальную аппроксимацию оператора производной $j\omega \doteq \frac{2}{\Delta t} \frac{1-z^{-1}}{1+z^{-1}}$ вместо линейной.

Третьим распространенным видом дисперсии является дисперсия Лоренца. Это соответствует случаю, когда оптический отклик среды определяется колебаниями связанных электронов. Закон дисперсии запишем в виде:

$$\tilde{\varepsilon}_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\chi_1 \omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + 2j\omega\gamma + \gamma^2}, \quad (4.6)$$

где ω_0 – резонансная частота осциллятора, γ – коэффициент затухания, χ_1 – величина, аналогичная силе осциллятора. Поляризация среды $P(z)$, соответ-

ствующая вкладу осциллятора Лоренца, в области переменной z имеет вид [13]:

$$P(z) = \chi_1 E(z) \frac{\omega_0 \Delta t e^{-\gamma \Delta t} \sin(\omega_0 \Delta t)}{1 - z^{-1} 2e^{-\gamma \Delta t} \cos(\omega_0 \Delta t) + z^{-2} e^{-2\gamma \Delta t}}. \quad (4.7)$$

В результате разностные уравнения для дисперсии Лоренца записываются следующим образом:

$$E^n = \frac{D^n - P^{n-1}}{\varepsilon_\infty}; \quad (4.8)$$

$$P^n = 2e^{-\gamma \Delta t} \cos(\omega_0 \Delta t) P^{n-1} - e^{-2\gamma \Delta t} P^{n-2} + \omega_0 \Delta t e^{-\gamma \Delta t} \sin(\omega_0 \Delta t) \chi_1 E^n.$$

Видно, что в случае дисперсии Лоренца необходимо хранить в памяти значения поляризации двух последних шагов во времени P^{n-1} и P^{n-2} . Это связано с тем, что уравнение колебаний осциллятора имеет является ДУ второго порядка.

Другим подходом получения разностных является непосредственная дискретизация так называемых *вспомогательных дифференциальных уравнений* (англ. *auxiliary differential equation*, ADE). Например, ADE для среды Лоренца выглядит так (фактически это материальное уравнение):

$$\frac{d^2 P}{dt^2} + 2\gamma \frac{dP}{dt} + \omega_0^2 P = \omega_0^2 \chi_1 E. \quad (4.9)$$

А после аппроксимации производной конечными разностями во втором порядке точности по Δt получается уравнение:

$$\frac{P^n - 2P^{n-1} + P^{n-2}}{\Delta t^2} + 2\gamma \frac{P^n - P^{n-2}}{2\Delta t} + \omega_0^2 P^{n-1} = \omega_0^2 \chi_1 E^{n-1}. \quad (4.10)$$

Отсюда легко получить разностные уравнения для моделирования материальной среды, подобные уравнениям (4.8), но с другими коэффициентами.

Использование импеданса и плотности тока

Выше была описана формулировка FDTD, в которой материальные среды моделируются с использованием вектора \mathbf{D} плотности электрического потока. Существует альтернативная формулировка, в которой за свойства сред отвечает вектор плотности тока \mathbf{J} . В отличие от вектора \mathbf{D} временная сетка вектора плотности тока совпадает с сеткой магнитного поля. Полная плотность тока $\mathbf{J} = \text{rot } \mathbf{H}$ складывается из двух частей – тока смещения J_{dis} и тока зарядов J_{q} , последний отвечает за дисперсионные свойства среды.

Рассмотрим среду с дисперсией Друде. Ее материальное уравнение ADE имеет вид:

$$\tau \frac{dJ_{\text{D}}}{dt} + J_{\text{D}} = \sigma_0 E. \quad (4.11)$$

В частотной области это уравнение можно записать как $J_{\text{D}} Z_{\text{D}} = E$, где величина $Z_{\text{D}} = 1/\sigma_0 + j\omega\tau/\sigma_0$ называется удельным *сопротивлением* среды Друде. Нетрудно увидеть аналогию между удельным сопротивлением среды и сопротивлением цепи переменного тока (правая ветка на рис.4.1). В случае среды Друде сопротивление складывается из активной части $1/\sigma_0$ и реактивной части, которая играет роль индуктивного сопротивления X_L . Для тока смещения ADE выглядит следующим образом:

$$J_{\text{dis}} = \varepsilon_{\infty} \varepsilon_0 \frac{dE}{dt}, \quad (4.12)$$

поэтому сопротивление будет равно $X_C = 1/(j\omega\varepsilon_{\infty}\varepsilon_0)$, которое обладает характером емкостного. Так как полный ток складывается из двух токов, то удельный *импеданс* среды определяется выражением (эквивалентная схема приведена на

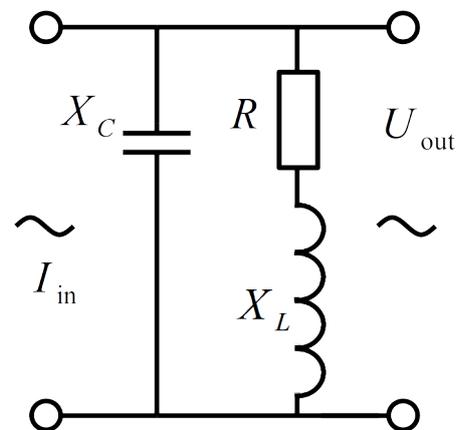


Рис. 4.1. Эквивалентная электрическая схема для расчета импеданса среды Друде.

рис.4.1):

$$\frac{1}{Z} = \frac{1}{X_C} + \frac{1}{R + X_L} = j\omega\varepsilon_\infty\varepsilon_0 + \left(\frac{1}{\sigma_0} + j\omega\lambda_D \right)^{-1}, \quad (4.13)$$

где $\lambda_D = \tau/\sigma_0 = \varepsilon_0/\omega_p^2$ – удельная «индуктивность» среды Друде.

Перейдем в область переменной z , используя билинейное преобразование $j\omega \doteq \frac{2}{\Delta t} \frac{1-z^{-1}}{1+z^{-1}}$ (что эквивалентно интегрированию по правилу трапеций), также учтем, что сетка поля \mathbf{E} смещена во времени на полшага от значений тока \mathbf{J} . Тогда для уравнений (4.11) и (4.12) получим:

$$\begin{aligned} E^{n+1/2} &= E^{n-1/2} + \frac{(J^n - J_D^n)\Delta t}{\varepsilon_\infty\varepsilon_0}; \\ J_D^{n+1} &= e^{-\Delta t/\tau} J_D^n + e^{-\Delta t/2\tau} \frac{\sigma_0\Delta t}{2\tau} E^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Таким образом, это полностью явная схема, в которой необходимо помнить только один вспомогательный массив J_D для каждого полюса диэлектрической проницаемости Друде-Дебая [3, с. 392]. Исходя из того, что известны (хранятся в памяти) значения J_D^n , H^n и $E^{n-1/2}$, вначале находятся компоненты электрического поля $E^{n+1/2}$ в текущий полушаг, используя первое из уравнений (4.14). Затем в схеме обновляются вспомогательные массивы J_D , используя только что найденные значения электрического поля. В конце цикла компонентны магнитного поля обновляются согласно обычной процедуре алгоритма Йи.

Пространственная дисперсия

Формулировка алгоритма с использованием вектора плотности тока делает удобным моделирование сред с пространственной дисперсией. Как известно, она является выражением нелокальной связи между поляризацией \mathbf{P} (или тока в среде \mathbf{J}) и электрическим полем \mathbf{E} при взаимодействии света с веществом. Эта нелокальность означает, что отклик среды $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ в данной точке \mathbf{r} определяется не только внешним воздействием в данной точке $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, а также воздействием в других точках $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ в некоторой окрестности. Математически

это выражается тем, что обобщенный тензор диэлектрическая проницаемости $\varepsilon_{il}(\omega, \mathbf{k})$ зависит от волнового вектора света, или что то же самое, отклик среды зависит от пространственных производных компонент поля \mathbf{E} . Эффекты пространственной дисперсии в большинстве материалов несущественны, поэтому тензор $\varepsilon_{il}(\omega, \mathbf{k})$ можно разложить по степеням \mathbf{k} . Особое значение имеют два случая – оптически активные среды и проводящие среды, в которых движение свободных носителей приводит к нелокальности на больших по сравнению с атомными расстояниями.

Рассмотрим вначале случай оптически активной среды. Если материал не имеет центра инверсии и зависимость от волнового вектора линейна, то это приводит к оптической активности [18]. Диэлектрическую проницаемость можно представить в виде:

$$\varepsilon_{il} = \varepsilon_{il}^{(0)} - j\gamma_{ilm}k_m, \quad (4.15)$$

где γ_{ilm} – некий антисимметричный тензор 3-го ранга, который отражает величину эффекта и направление оптической оси гирации.

Рассмотрим теперь случай проводящей среды с пространственной дисперсией. В работе [19] представлены типичные основные уравнения гидродинамической модели пространственной дисперсии в линеаризованном виде. Запишем эти уравнения в терминах объемной плотности тока проводимости:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= \text{rot } \mathbf{H} - \mathbf{J}; \\ \rho &= \text{div } \mathbf{D}; \\ \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \gamma \mathbf{J} &= \omega_p^2 \varepsilon_0 \mathbf{E} - \beta^2 \nabla \rho. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Здесь ρ обозначает индуцированную плотность заряда, ω_p – плазменная частота, γ – параметр частоты столкновений электронов с решеткой из модели Друде, учитывающий затухание в среде, $\beta^2 = 3/5v_F^2$ – коэффициент, появля-

ющийся в выражении для давления идеального ферми-газа. Уравнения (4.16) записаны в таком виде и порядке для удобства их дискретизации и встраивания в разностную схему FDTD. В разностной схеме FDTD каждый шаг во времени происходит поочередное обновление электрического и магнитного полей в каждой точке рабочей области. При этом значения электрического поля рассчитываются следующим образом: (i) вначале интегрируется во времени уравнение Максвелла для ротора магнитного поля, обновляется значение вектора \mathbf{D} электрического смещения; (ii) затем находится вектор \mathbf{E} , применяя разностную схему для материальных уравнений. В нашей схеме используем подход, в котором дисперсионный (т. е. зависящий от частоты) отклик среды полностью выражается через вектор \mathbf{J} плотности полного тока проводимости [3]. Так как производная плотности тока определяется значением самого электрического поля \mathbf{E} (а не производной) и, наоборот, производная вектора \mathbf{D} по времени определяется значением плотности тока – то в разностной схеме FDTD значения тока отстают на полшага по времени от значений \mathbf{E} подобно значениям магнитного поля \mathbf{H} . Таким образом, во втором порядке точности аппроксимации производных разностная схема приобретает вид (опуская дискретизацию полей в пространстве):

$$\begin{aligned}
 D^{n+1} &= D^n + \Delta t \left(\text{rot}_{\Delta} H^{n+1/2} - J^{n+1/2} \right); \\
 \rho^{n+1} &= \text{div}_{\Delta} D^{n+1}; \\
 J^{n+1/2} &= \frac{2 - \gamma \Delta t}{2 + \gamma \Delta t} J^{n-1/2} + \frac{2 \Delta t}{2 + \gamma \Delta t} \left(\omega_p^2 \varepsilon_0 E^n - \beta^2 \text{grad}_{\Delta} \rho^n \right),
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

где Δt – шаг по времени, верхними индексами указаны номера шагов, символами rot_{Δ} , div_{Δ} , grad_{Δ} обозначены пространственные конечно-разностные аппроксимации дифференциальных операторов ротора, дивергенции и градиента соответственно. Вектор \mathbf{D} в данной схеме содержит вклад только от связанных электронов. Так как данная модификация разностной схемы сопряжена с введением дополнительных пространственных производных (а именно градиента

плотности заряда), то реализовать ее в имеющихся пакетах для моделирования нет возможности. Поэтому алгоритм FDTD в двумерной ТМ-формулировке (с компонентами E_x , E_z , H_y) с применением данной разностной схемы для пространственной дисперсии был реализован самостоятельно [20].

5. Алгоритм FDTD для двумерной и трехмерной задачи

В случае трехмерного моделирования пространство разбивается на ячейки Y_i , изображенные на рис. 2.1в, и уравнения Максвелла (3.1) принимают вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_x}{\partial t} &= c \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right); & \frac{\partial H_x}{\partial t} &= c \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right); \\ \frac{\partial D_y}{\partial t} &= c \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right); & \frac{\partial H_y}{\partial t} &= c \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right); \\ \frac{\partial D_z}{\partial t} &= c \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right); & \frac{\partial H_z}{\partial t} &= c \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (5.1)$$

Конечные разности в трехмерной формулировке:

$$\begin{aligned} \frac{D_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k) - D_x^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k)}{c\Delta t} &= \frac{H_z^n(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^n(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^n(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^n(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z}, \\ \frac{D_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k) - D_y^{n-\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k)}{c\Delta t} &= \frac{H_x^n(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - H_x^n(i, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^n(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^n(i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta x}, \\ \frac{D_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k+\frac{1}{2}) - D_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k+\frac{1}{2})}{c\Delta t} &= \frac{H_y^n(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^n(i-\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta x} - \frac{H_x^n(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - H_x^n(i, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2})}{\Delta y}, \\ \frac{H_x^{n+1}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - H_x^n(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2})}{c\Delta t} &= \frac{E_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+1) - E_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta z} - \frac{E_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j+1, k+\frac{1}{2}) - E_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta y}, \\ \frac{H_y^{n+1}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^n(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})}{c\Delta t} &= \frac{E_z^{n+\frac{1}{2}}(i+1, j, k+\frac{1}{2}) - E_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta x} - \frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta z}, \\ \frac{H_z^{n+1}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^n(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)}{c\Delta t} &= \frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+1, k) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta y} - \frac{E_y^{n+\frac{1}{2}}(i+1, j+\frac{1}{2}, k) - E_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Моделирование среды осуществляется согласно уравнениям (4.5), которые показывают связь проекций напряженности электрического поля со значениями проекций электрического смещения. Для более точной аппроксимации зависимости диэлектрической проницаемости от частоты в выражение (4.3) добавляются несколько слагаемых типа Дебая-Друде или Лоренца, и это приводит

к усложнению алгоритма (4.5) путем введения в него новых вспомогательных величин, а также к увеличению необходимой памяти и времени расчета.

6. Идеально сочетающиеся слои

Для трехмерной области не существует идеально поглощающих граничных условий, т.к. электромагнитная волна может падать на границу под различными углами. Поэтому для того, чтобы уменьшить искажения картины распределения электрического поля вследствие отражения рассеянных электромагнитных волн от границ, используют PML (англ. *perfectly matched layer* – «идеально сочетающийся слой»). Данное граничное условие разработано Дж. Беренгером [21] и фактически является слабо отражающим и хорошо поглощающим веществом, нанесенным вдоль стенок рабочей области в количестве нескольких слоев.

Как известно, коэффициент отражения при распространении волны из среды А в среду В определяется внутренними импедансами обеих сред [13],

$$\Gamma = \frac{\eta_A - \eta_B}{\eta_A + \eta_B}, \quad (6.1)$$

которые определяются диэлектрической и магнитной проницаемостями сред

$$\eta = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}}. \quad (6.2)$$

Если μ меняется вместе с ε так, что импеданс остается постоянным, тогда коэффициент отражения по амплитуде будет равен нулю, и отражений от границы этих сред не возникнет [21]. Однако это не решает проблему, так как волна продолжает распространяться во второй среде. Что нам действительно нужно, это что вторая среда была также с потерями, поэтому волна поглотится прежде, чем она достигнет границы рабочей области. Это выполнится, если в выражении

(6.2) сделать и μ , и ε комплексными:

$$\begin{aligned}\varepsilon^*_{Fm} &= \varepsilon_{Fm} + \frac{\sigma_{Dm}}{i\omega\varepsilon_0}, & m = x, y, z; \\ \mu^*_{Fm} &= \mu_{Fm} + \frac{\sigma_{Hm}}{i\omega\mu_0}, & m = x, y, z.\end{aligned}\tag{6.3}$$

Таким образом, если ввести искусственную среду с электрическими и магнитными потерями, чтобы удовлетворялись выражения:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{Fm} &= \mu_{Fm} = 1, \\ \frac{\sigma_{Dm}}{\varepsilon_0} &= \frac{\sigma_{Hm}}{\mu_0} = \frac{\sigma_D}{\varepsilon_0},\end{aligned}\tag{6.4}$$

тогда импеданс этой среды будет равен 1, как у вакуума, и отражений от границ не возникнет. В действительности же при вычислении происходят ошибки вследствие округления или конечной разрядности чисел в памяти компьютера, поэтому малые отражения все же будут возникать. Поэтому стенки покрывают несколькими слоями PML так, чтобы параметры электрической и магнитной проводимости плавно возрастали по определенному закону.

Проницаемости ε_{Fm} и μ_{Fm} , специальные для каждого измерения в пространстве, были введены, чтобы разделить в алгоритме реальное поглощение в веществе и фиктивные поглощения на границах рабочей области в трех различных плоскостях.

Рассмотрим применение слоев PML. Пусть условия PML выполняются только у границ в направлении X. У других границ отражающие граничные условия. Уравнения Максвелла модифицируются следующим образом (для примера

взята одна проекция вихревых уравнений):

$$\begin{aligned}
i\omega D_z \cdot \varepsilon *_{Fz}(x) &= c \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right); \\
i\omega H_x \cdot \mu *_{Fx}(x) &= c \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right); \\
i\omega H_y \cdot \mu *_{Fy}(x) &= c \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right).
\end{aligned} \tag{6.5}$$

Как показано в статье [22], PML получаются анизотропными, если кроме (6.2) выполняется условие, что в направлении, перпендикулярном к границе, проницаемости слоев PML обратно пропорциональны к соответствующим проницаемостям в других направлениях, т.е.:

$$\begin{aligned}
\varepsilon *_{Fx} \varepsilon *_{Fy} &= 1; \\
\mu *_{Fx} \mu *_{Fy} &= 1.
\end{aligned} \tag{6.6}$$

Вследствие этого, а также уравнений (6.3) и (6.4), уравнения (6.5) запишутся в виде:

$$\begin{aligned}
i\omega D_z \cdot \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{i\omega\varepsilon_0} \right) &= c \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right); \\
i\omega H_x \cdot \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{i\omega\varepsilon_0} \right)^{-1} &= c \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right); \\
i\omega H_y \cdot \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{i\omega\varepsilon_0} \right) &= c \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right).
\end{aligned} \tag{6.7}$$

Преобразуем левую часть первого из этих уравнений. Переходя во временную область, запишем ее в конечных разностях:

$$\frac{\partial}{\partial t} D_z + \frac{\sigma_D(x)}{\varepsilon_0} D_z \cong \frac{D_z^{n+1/2} - D_z^{n-1/2}}{\Delta t} + \frac{\sigma_D(i)}{\varepsilon_0} \frac{D_z^{n+1/2} + D_z^{n-1/2}}{2}. \tag{6.8}$$

Приводя подобные члены и подставляя аппроксимацию пространственных про-

изводных конечными разностями, получаем:

$$D_z^{n+1/2} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) = gi_3(i) D_z^{n-1/2} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) + gi_2(i) c \Delta t \cdot Rot H_z, \quad (6.9)$$

где введены обозначения:

$$Rot H_z = \frac{H_y \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) - H_y \left(i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right)}{\Delta x} - \frac{H_x \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_x \left(i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right)}{\Delta y},$$

$$gi_2(i) = \frac{1}{1 + \sigma_D(i) \Delta t / 2 \varepsilon_0};$$

$$gi_3(i) = \frac{1 - \sigma_D(i) \Delta t / 2 \varepsilon_0}{1 + \sigma_D(i) \Delta t / 2 \varepsilon_0}.$$
(6.10)

Аналогичные действия приведут третье уравнение (6.7) к виду:

$$H_y^{n+1} \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) = fi_3(i+1/2) H_y^n \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) + fi_2(i+1/2) c \Delta t \cdot Rot E_y.$$
(6.11)

Второе уравнение (6.7) преобразуется по-другому, вследствие обратной степени выражения, стоящего в скобках. Поэтому там возникнет интегрирование, которое заменяется суммой. Приведем окончательные выражения:

$$H_x^{n+1} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) = H_x^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + c \Delta t \cdot \left(Rot E_x + 2fi_1(i) \cdot I_{H_x}^{n+1/2} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \right);$$

$$I_{H_x}^{n+1/2} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) = I_{H_x}^{n-1/2} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + Rot E_x,$$
(6.12)

где введен новый параметр:

$$fi_1(i) = \frac{\sigma_D(i) \Delta t}{2 \varepsilon_0}.$$
(6.13)

Параметр I_{H_x} играет роль интеграла во временной области, который аналогичен операции деления на $i\omega$ в частотной области. Таким образом, все параметры слоев PML выражаются через общий параметр:

$$xn(i) = \frac{\sigma_D(i) \Delta t}{2 \varepsilon_0},$$
(6.14)

который возрастает вглубь слоев PML. Теперь нет необходимости в значениях проводимости слоев. Параметры f и g вычисляются так:

$$\begin{aligned}
 xn(i) &= k \left(\frac{i}{N_{pml}} \right)^n; \\
 fi_1(i) &= xn(i); \\
 gi_2(i) &= \frac{1}{1 + xn(i)}; \\
 gi_3(i) &= \frac{1 - xn(i)}{1 + xn(i)}.
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

Параметры fi_2 и fi_3 вычисляются аналогично со сдвигом в половину ячейки в точках $i+1/2$. Степенную зависимость обычно выбирают кубической [3]. Коэффициент k , при котором алгоритм остается все еще стабильным, равен $1/3$ [13]. При других показателях степени и коэффициентах слои PML обладают медленным поглощением или становятся источником вычислительной неустойчивости.

Если условия PML применить к границам рабочей области во всех направлениях, то уравнение (6.7) переписется в виде:

$$i\omega D_z \cdot \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{i\omega\varepsilon_0} \right) \left(1 + \frac{\sigma_D(y)}{i\omega\varepsilon_0} \right) \left(1 + \frac{\sigma_D(z)}{i\omega\varepsilon_0} \right)^{-1} = c \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right). \tag{6.16}$$

После аналогичных преобразований оно в свою очередь примет вид:

$$\begin{aligned}
 D_z^{n+1/2} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) &= gi_3(i)gj_3(j)D_z^{n-1/2} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) + gi_2(i)gj_2(j)c\Delta t \cdot \left(RotH_z + 2gk_1(k)I_{Dz}^n \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) \right); \\
 I_{Dz}^n \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) &= I_{Dz}^{n-1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) + RotH_z.
 \end{aligned} \tag{6.17}$$

Другие проекции уравнений Максвелла преобразуются аналогично. Одномерные параметры f и g вычисляются по уравнениям (6.15).

Мы также упомянули ранее, что это "бесшовный" переход от главной рабочей области пространства в PML, но у него есть один главный недостаток: интегральный параметр I_{Dz} является дополнительным трехмерным массивом, что имеет протяженность по всей рабочей области, но используется только

в двух краях. Трехмерная реализация будет иметь в общей сложности шесть таких массивов, которые, безусловно, является пустой тратой ресурсов компьютера. По этой причине I_{Dz} разбивают на два меньших трехмерных массива: один, определенный при низких значениях k (I_{Dzlow}); и один, определенный при высоких значениях k (I_{Dzhigh}). Внутри рабочей области используется обычный трехмерный алгоритм FDTD.

7. Моделирование источников световых волн

Кроме вычислительного алгоритма и граничных условий, необходимо также задать источник возбуждения. Точечный источник света может быть задан как сторонняя плотность тока в некоторой ячейке. Особый интерес представляет возбуждение в виде плоской волны. Так как рабочая область не бесконечна, то плоская волна тоже становится с ограниченным фронтом. Чтобы обойти эту сложность, используют формулировку метода с разделением на полное и рассеянное поле (англ. *Total/Scattered field*, TFSF) [23]. В ней рабочая область разделяется на две области – полного поля и рассеянного поля. Есть две основные причины для этого: во-первых, распространяющаяся внутри области полного поля плоская волна не должна испытывать искажения фронта; во-вторых, нагрузка на поглощающие граничные условия должна быть минимизирована. Эти граничные условия не идеальны, то есть определенная часть падающей волны отражается обратно в рабочую область. Путем вычитания падающего поля на границе двух областей TFSF амплитуда электромагнитного поля, достигающего границы, сводится к минимуму, что уменьшает количество ошибок.

Для того чтобы продемонстрировать источник плоской волны, возьмем двумерную TE_z -формулировку FDTD (с компонентами H_x , H_y , D_z). Падающее поле рассчитывается в виде вспомогательного одномерного массива падающего поля (англ. *incident array*). Так как это одномерный массив, то легко генери-

ровать плоскую волну: выбирается точечный источник, и поле источника E_z суммируется к полю в данной точке вспомогательного массива. Тогда плоская волна распространяется оттуда в обоих направлениях. Так как это одномерный массив, граничные условия являются идеально поглощающими.

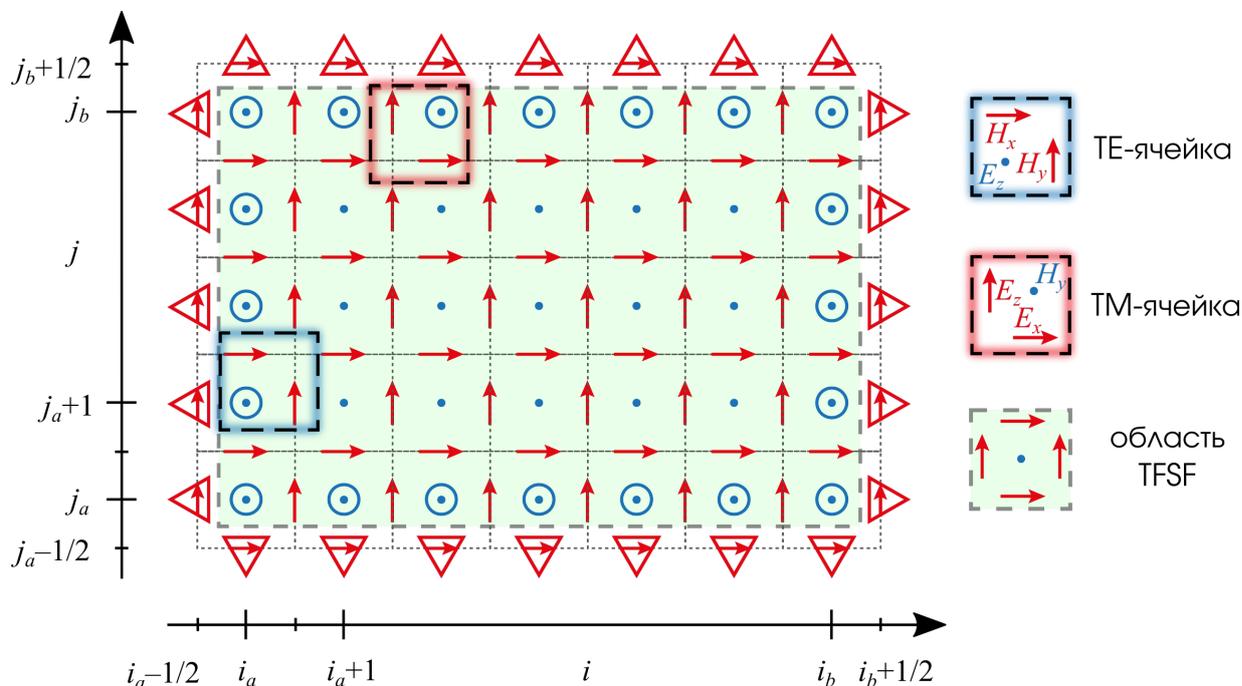


Рис. 7.1. Разделение рабочей области на Total field/Scattered field. Зеленоватая область соответствует полному полю. Узлы сетки с синей окружностью хранят значения полного поля. Узлы сетки с красным треугольником хранят значения рассеянного поля. Ячейки вычислительных сеток для TE- и TM-формулировки не совпадают.

Рисунок 7.1 показывает, как проходит граница двух областей. Каждый узел сетки находится однозначно либо в области полного поля, либо в области рассеянного поля. Возникает разрыв 1-рода: снаружи границы узлы содержат значения только рассеянного поля, а внутри – сумму падающего и рассеянного поля, хотя уравнения Максвелла справедливы либо для падающего и рассеянного поля в отдельности, либо для их суммы – полного поля. В узлах сетки, непосредственно примыкающих к границе двух областей, при вычислениях пространственных производных используются значения полей по другую сторону границы TFSF. Из-за этого конечно-разностная аппроксимация уравнений Максвелла содержит несогласованность, которую нужно компенсировать с помощью добавления или вычитания падающего поля на границе TFSF. Например,

если точка находится вблизи нижней границы (точка (i, j_a)) в области общего поля, но использует точки вовне ее при обновлении ее значения, то в уравнении к рассеянному полю снаружи должно быть добавлено падающее поле с тем же знаком проекции (рис. 7.1):

$$\begin{aligned}
 & \boxed{\frac{D_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j_a) - D_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j_a)}{c\Delta t}} = \\
 & \quad \text{производная по времени} \\
 & = \underbrace{\frac{H_y^n(i+\frac{1}{2}, j_a) - H_y^n(i-\frac{1}{2}, j_a)}{\Delta x}}_{\text{полное поле}} - \underbrace{\frac{H_x^n(i, j_a+\frac{1}{2}) - H_x^n(i, j_a-\frac{1}{2})}{\Delta y}}_{\text{полное поле}} + \underbrace{\frac{H_x^{\text{inc}}(i, j_a-\frac{1}{2})}{\Delta y}}_{\text{падающее поле}}. \\
 & \quad \text{конечно-разностная аппроксимация ротора} \qquad \text{поправка}
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

То же самое можно сказать и о точке, лежащей в непосредственно снаружи границы и использующей в вычислениях точки внутри области общего поля – падающее поле должно быть вычтено из полного поля. Например, в точке $(i, j_a - 1/2)$:

$$\begin{aligned}
 & \boxed{\frac{H_x^{n+1}(i, j_a-\frac{1}{2}) - H_x^n(i, j_a-\frac{1}{2})}{c\Delta t}} = \\
 & \quad \text{производная по времени} \\
 & = - \underbrace{\frac{E_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j_a) - E_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j_a - 1)}{\Delta x}}_{\text{полное поле}} + \underbrace{\frac{E_z^{\text{inc}}(i, j_a)}{\Delta x}}_{\text{падающее поле}}. \\
 & \quad \text{конечно-разностная аппроксимация ротора} \qquad \text{поправка}
 \end{aligned} \tag{7.2}$$

Эти поправки в уравнениях (7.1, 7.2) играют роль плотностей электрических и магнитных токов, которые согласованным образом инжектируют плоскую волну

внутри рабочей области. На практике же разностная схема FDTD не изменяется, вместо этого исправления вносятся другим образом:

- Проекция индукции \mathbf{D} и магнитного поля \mathbf{H} вычисляются, используя алгоритм Йи и немодифицированные уравнения Максвелла;
- Слагаемые падающего поля добавляются следом к самим значениям проекций индукции \mathbf{D} и магнитного поля \mathbf{H} .

Комбинация этих шагов равносильна вычислениям проекций поля согласно уравнениям (7.1, 7.2).

В трёхмерной формулировке FDTD есть четыре места, в которых проекции поля должны быть изменены (для плоской волны, распространяющейся в положительном направлении оси Y):

1. Значения D_z на границах по оси Y при $j = j_a, j = j_b$:

$$\begin{aligned} D_z \left(i, j_a, k + \frac{1}{2} \right) &:= D_z \left(i, j_a, k + \frac{1}{2} \right) + \frac{c\Delta t}{\Delta y} H_{x \text{ inc}} \left(j_a - \frac{1}{2} \right); \\ D_z \left(i, j_b, k + \frac{1}{2} \right) &:= D_z \left(i, j_b, k + \frac{1}{2} \right) - \frac{c\Delta t}{\Delta y} H_{x \text{ inc}} \left(j_b + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (7.3)$$

2. Значения H_x снаружи границ области падающего поля по оси Y при $j = j_a - 1/2, j = j_b + 1/2$:

$$\begin{aligned} H_x \left(i, j_a - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) &:= H_x \left(i, j_a - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + \frac{c\Delta t}{\Delta y} E_{z \text{ inc}} (j_a); \\ H_x \left(i, j_b + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) &:= H_x \left(i, j_b + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - \frac{c\Delta t}{\Delta y} E_{z \text{ inc}} (j_b). \end{aligned} \quad (7.4)$$

3. Значения H_y снаружи границ области падающего поля по оси X при $i =$

$i_a - 1/2, i = i_b + 1/2$:

$$\begin{aligned} H_y \left(i_a - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) &:= H_y \left(i_a - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - \frac{c\Delta t}{\Delta y} E_{z \text{ inc}}(j); \\ H_y \left(i_b + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) &:= H_y \left(i_b + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + \frac{c\Delta t}{\Delta y} E_{z \text{ inc}}(j). \end{aligned} \quad (7.5)$$

4. Значения D_y снаружи границ области падающего поля по оси Z при $k = k_a$, $k = k_b + 1$:

$$\begin{aligned} D_y(i, j + 1/2, k_a) &:= D_y(i, j + 1/2, k_a) + \frac{c\Delta t}{\Delta y} H_{x \text{ inc}}(j + 1/2); \\ D_y(i, j + 1/2, k_b + 1) &:= D_y(i, j + 1/2, k_b + 1) + \frac{c\Delta t}{\Delta y} H_{x \text{ inc}}(j + 1/2). \end{aligned} \quad (7.6)$$

Данные уравнения определяют плоскую волну, поляризованную вдоль оси Z и распространяющуюся вдоль оси Y . Массивы падающего поля $H_{x \text{ inc}}$ магнитного поля и $E_{z \text{ inc}}$ электрического поля изменяются во времени при каждом шаге по одномерному алгоритму FDTD (7.2).

Суть данных уравнений в том, что они воплощают плоскую волну на левой границе по оси Y и поглощают плоскую волну на правой границе по оси Y по направлению распространения волны. На границах области общего поля по осям X и Z эти уравнения препятствуют расплыванию волнового фронта, создавая искусственную антидифракцию. Таким образом, плоская волна, воплотившись на левой границе области полного поля, распространяется внутри этой области, оставаясь плоской волной, без деформаций волнового фронта при распространении, и поглощается на правой границе области (рис. 7.2).

Анализ взаимодействия падающего излучения с изучаемыми объектами происходит путем установки так называемых мониторов. Они представляются собой точки пространства, где происходит сбор и запись в память компьютера или файл значений поля. Существует несколько типов мониторов: они различаются по типу информации, записываемой в файл – электрические или магнитные

Если сигнал не ограничен во времени, и его частота не совпадает ни с одной из собственных частот временного окна, то преобразование Фурье в результате даст свертку спектра сигнала со спектром прямоугольной функции. Данная сложность устраняется большими временами моделирования или использованием гладких оконных функций аподизации. В современных работах для корректности преобразования Фурье часто используются функции внешнего возбуждения, локализованные во времени.

Также спектр сигнала должен быть локализован (в частотной области). В соответствии с теоремой Котельникова, если сигнал определен в точках, расположенных через равные интервалы времени, то сигнал можно восстановить, если частота спектра сигнала не превышает половину частоты дискретизации (частота Найквиста ω_N). Это означает, что в спектре сигнала не должно быть частот выше ω_N , а это, в свою очередь, накладывает ограничение на моделирование импульсных сигналов в качестве падающей волны.

Наилучшим вариантом сигнала внешнего возбуждения являются функции представляющие собой различные производные функции Гаусса. Они хорошо локализованы во времени, а их спектр локализован по частоте. На практике используются сигналы возбуждения с формой первой производной функции Гаусса и сигналы в виде волнового пакета, огибающая которого имеет форму функции Гаусса.

8. Обзор программного обеспечения для FDTD-моделирования

В данном пособии мы рассмотрим главным образом два популярных в научных исследованиях программных вычислительных пакетов для численного моделирования методом конечных разностей – Ansys Lumerical[®] FDTD (актуальная версия 2025 R1.1) и МЕЕР (актуальная версия v1.29.0). У каждого из этих программных продуктов есть свои особенности, раскрытию которых

посвящен данный параграф. Мы не ставим целью выявить лучший инструмент.

Lumerical FDTD

Ansys Lumerical FDTD – это проприетарная программа для численного моделирования электромагнитных полей, основанная на численном решении уравнений Максвелла методом конечных разностей во временной области. Эта программа широко используется в научных исследованиях в области фотоники, оптики, материаловедения и других областях, где необходимо анализировать взаимодействие электромагнитных волн с различными материалами, и в промышленности для проектирования и анализа нанофотонных устройств, метаматериалов, оптических волноводов, лазеров, фотодетекторов и других оптических систем. В программе реализован базовый алгоритм Яи на двумерной и трехмерной сетках, имеются встроенные модели материальных сред с дисперсией или оптической нелинейностью, поддерживаются различные варианты граничных условий и различные варианты субпиксельного сглаживания. Для повышения точности расчетов без увеличения вычислительных затрат программа использует алгоритмы адаптивной неоднородной сетки. Эти алгоритмы автоматически настраивают плотность сетки в областях, где это необходимо, что позволяет достичь высокой точности моделирования при минимальных затратах ресурсов.

Программа предлагает интуитивно понятный интерфейс, позволяющий пользователям создавать модели с помощью графического конструктора. Это значительно упрощает процесс моделирования, даже для сложных геометрий и материалов, включая диэлектрики, металлы и нелинейные среды. Lumerical FDTD включает обширную библиотеку материалов с дисперсионными свойствами, такими как золото, серебро, кремний, стекло и другие. Кроме того, пользователи могут добавлять собственные материалы или импортировать данные из внешних источников, что расширяет возможности моделирования. Среди

встроенных моделей в т.ч. имеются двухуровневые и четырехуровневые квантовые среды; магнитные среды, плазма; среды с квадратичной, керровской и рамановской нелинейностью; среда с оцифрованной зависимостью проницаемости или показателя преломления от длины волны. В последнем случае программа использует собственную мультикоэффициентную модель для аппроксимации данных и представлении дисперсионных свойств материала в разностной схеме. Сущность этой модели разработчиком не раскрывается.

Lumerical FDTD предоставляет возможности для задания различных граничных условий, таких как PML, PEC, PMC, периодические (блоховские) и симметричные границы. Это позволяет адаптировать моделирование под конкретные задачи. Программа также поддерживает различные типы источников излучения, включая монохроматические, импульсные, планарные, точечные диполи, гауссовы пучки и пользовательские источники. Также реализована возможность моделирования в формулировке общего поля и рассеянного поля.

Программа поддерживает использование сценариев на языке Lumerical Script (на основе Python), что позволяет автоматизировать и оптимизировать процессы моделирования. Это особенно полезно для задач, требующих многократного повторения расчетов с изменяющимися параметрами (англ. *sweep*). Кроме того, Lumerical FDTD предоставляет API для интеграции с другими инструментами, такими как MatLab/Octave, Python и C++. Это позволяет создавать сложные рабочие процессы, включая оптимизацию параметров и анализ больших объемов данных.

Lumerical FDTD предлагает инструменты для пост-обработки и визуализации результатов. Пользователи могут визуализировать поля, рассчитывать коэффициенты отражения и пропускания, плотность состояний, квантовый выход, сечения рассеяния и поглощения, проводить анализ мод, спектральный анализ и многое другое с помощью встроенных скриптов. Варианты визуализации данных, такие как 3D-графики и анимация, позволяют исследовать результаты моделирования в наглядной форме.

Lumerical FDTD обеспечивает легкую интеграцию с другими продуктами Ansys, такими как, например, Device (Charge, Heat) для электроники, Ansys Maxwell для электродвигателей и Ansys HFSS для дизайна высокочастотных антенн. Это позволяет использовать данные, полученные в FDTD, для дальнейшего анализа в других инструментах моделирования, что существенно расширяет возможности для комплексного анализа. Создана среда из решателей дифференциальных уравнений из различных разделов физики для моделирования сложных явлений.

Данная программа оптимизирована для работы на многоядерных процессорах и поддерживает алгоритмы параллельных вычислений под операционными системами Windows, MacOS, GNU Linux (некоторые виды), что позволяет значительно сократить время моделирования. Программа поддерживает многопроцессорные системы и GPU для ускорения расчетов, а также распределенные вычисления на HPC-кластерах, что еще больше увеличивает производительность и позволяет решать задачи, требующие значительных вычислительных ресурсов.

МЕЕР

МЕЕР (сокращение от англ. *MIT Electromagnetic Equation Propagation*) – это свободно распространяемая программа с открытым исходным кодом для численного моделирования электромагнитных полей, использующая метод конечных разностей во временной области (FDTD). Разработанная в Массачусетском технологическом институте (MIT), программа МЕЕР хорошо себя зарекомендовала в исследованиях, связанных с фотоникой, оптикой, а также в других областях науки и техники, включая разработки в области метаматериалов и солнечных элементов. В программе реализован алгоритм Yi на однородных двумерной и трехмерной, цилиндрической сетках, а также т.н. 2.5-мерная формулировка, в которой зависимость полей от координаты вдоль оси Z принимает-

ся известной как $e^{ik_z z}$. При этом сетка задается только на плоскости XY, однако необходимо проводить моделирование для некоторого множества значений k_z . Для повышения точности расчетов и борьбы с лестничным приближением объектов программа использует алгоритмы субпиксельного сглаживания, однако поддержки неоднородных сеток нет.

МЕЕР является открытым программным обеспечением (open-source), что позволяет пользователям свободно модифицировать и расширять функциональность программы. Основа программы – это создание моделей с использованием predefined объектов и написание скриптов на языках Scheme или Python. МЕЕР поддерживает различные типы граничных условий, включая поглощающие условия Мура, PML, периодические (блоховские) и симметричные границы. Это позволяет адаптировать моделирование под конкретные задачи, такие как моделирование бесконечных структур или ограниченных областей.

Одной из ключевых особенностей МЕЕР является его возможность работать с различными материалами и оптическими свойствами. Пользователи могут задать различные параметры для как линейных, так и нелинейных материалов, а также учитывать временную дисперсию. Имеется встроенная модель многоуровневого атома общего вида для моделирования лазерных сред и инверсии населенности, а также вынужденного комбинационного рассеяния, как заявляется разработчиком [24]. Пользователи могут использовать готовые материалы из библиотеки или добавлять собственные материалы и использовать данные из внешних источников. В отличие от Lumerical, МЕЕР использует при аппроксимации стандартные дисперсионные члены Друде и Лоренца. При необходимости пользователь может аппроксимировать экспериментальные данные самостоятельно, число членов дисперсионных слагаемых в диэлектрической функции неограничено.

Программа поддерживает различные стандартные типы источников, такие как точечные диполи, плоские волны, гауссовы пучки и пользовательские источники. Есть возможность моделирования как импульсных, так и непрерывных

сигналов. Также есть возможность предварительного расчета источника в виде волноводной моды с использованием другой программы MPB (MIT Photonic Bands) и импорта его в МЕЕР. Формулировка с разделением областей на общее и рассеяное поле не реализована. Однако возможность импорта источника любой волноводной моды (в т.ч. и плоской волны) и запуск программы с выключенными объектами полностью компенсирует это.

МЕЕР предоставляет инструменты для анализа и визуализации результатов моделирования, включая расчет коэффициентов отражения и пропускания, спектральный анализ и визуализацию полей. Стандартные графики электромагнитных полей, потоковой мощности, плотности состояний, добротности мод и других данных позволяют исследователям легко анализировать результаты и делать выводы о поведении моделируемой системы. Данные могут быть экспортированы в форматы, совместимые с Python, MatLab/Octave и GNUplot, что позволяет легко интегрировать МЕЕР в существующие рабочие процессы. МЕЕР может быть интегрирована с другими open-source инструментами, такими как MPB, для расчета зонной структуры фотонных кристаллов. Поддержка API на Python позволяет создавать сложные рабочие процессы, включая оптимизацию параметров и анализ данных. Кроме того, пользователи могут создавать свои собственные плагины и расширения, добавляя уникальные методы и функции, что делает МЕЕР очень гибким инструментом для научных исследований. Также программа имеет встроенный adjoint solver, позволяющий применять машинное обучение в задачах обратного дизайна.

Хотя производительность МЕЕР в значительной степени зависит от сложности рассматриваемой задачи и конфигурации используемого оборудования, программа демонстрирует хорошую скорость расчета благодаря эффективному распараллеливанию. Модели с высоким разрешением или сложными геометрическими формами могут потребовать значительных ресурсов и времени для решения, однако оптимизация кода и поддержка современных многопроцессорных систем позволят значительно сократить время моделирования. МЕЕР

оптимизирована для работы на многоядерных процессорах и поддерживает параллельные вычисления с использованием MPI (Message Passing Interface) под операционными системами GNU Linux и MacOS. Благодаря поддержке параллельных вычислений, МЕЕР может эффективно использовать возможности многопроцессорных систем и HPC-кластеров для ускорения моделирования крупных задач.

Заключение

Данное учебно-методическое пособие подводит итог рассмотрению одного из самых мощных и универсальных инструментов для исследования мира света – метода конечных разностей во временной области (FDTD). Основной целью работы было представить не просто набор теоретических выкладок, а целостную и логичную систему знаний, позволяющую решать актуальные научные и инженерные задачи. В результате изложения материал предстаёт не как совокупность разрозненных тем, а как единый методологический подход, ведущий от фундаментальных уравнений Максвелла до практического моделирования сложных оптических явлений.

Изложение начинается с самой сути метода – дискретизации пространства и времени. Введение в концепцию сетки Йи, этого элегантного и физически наглядного способа взаимного расположения компонент полей, закладывает фундамент для всего дальнейшего материала. Подробно разбирается, как непрерывные уравнения Максвелла преобразуются в итерационные шаговые уравнения, что позволяет численно моделировать эволюцию электромагнитной волны во времени. Ключевые понятия, такие как условие устойчивости Куранта, предстают не просто математическими ограничениями, а фундаментальными принципами, определяющими баланс между точностью и вычислительными ресурсами.

Однако теоретические основы – это лишь часть методологии. Настоящая сила FDTD раскрывается в его практическом применении, и этому уделяется особое внимание. Рассматривается, как с помощью численных схем можно корректно описывать взаимодействие света с различными средами: от простых диэлектриков до сред со сложной частотной и пространственной дисперсией, таких как плазмонные металлы, и анизотропных материалов. Осознание того, что корректный выбор модели диэлектрической проницаемости (например, модели Друде, Лоренца или их комбинаций) напрямую влияет на адекватность результатов, является одним из ключевых аспектов профессиональной работы исследователя-вычислителя.

Не менее важным этапом является освоение подходов к корректной постановке границ расчетной области. Демонстрируется, что без эффективных поглощающих граничных условий, таких как идеально согласованные слои (PML), моделирование систем в открытом пространстве было бы невозможно. Умение правильно настроить PML, а также применять периодические и симметричные граничные условия для оптимизации расчетов, является неотъемлемой частью грамотного моделирования. Также изучаются подходы к корректной постановке источников излучения – от плоских волн до точечных диполей – и размещению мониторов для сбора необходимой информации: спектров, распределения полей и мощности поглощения.

Обзор современного программного обеспечения, такого как Lumerical FDTD или MEEP, показывает, что сегодня исследователям доступны готовые и высокопроизводительные решения. Однако важно понимать, что программное обеспечение – это лишь инструмент. Эффективность его использования напрямую зависит от глубины понимания физических и численных принципов, заложенных в его основу. Знания, представленные в этом пособии, позволяют не слепо доверять результатам, а осознанно подходить к постановке задачи, выбору параметров сетки, анализу возможных артефактов и критической оценке полученных данных.

Именно на переднем крае науки, в бурно развивающейся области нанофотоники, метод FDTD демонстрирует всю свою мощь. Его способность напрямую рассчитывать динамику электромагнитных полей в сложных геометриях делает его незаменимым для решения самых актуальных задач. С его помощью можно заглянуть в «горячие точки» плазмонных наноантенн и понять механизмы гигантского усиления поля, лежащие в основе спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния. Становится возможным проектировать метаповерхности с уникальными оптическими свойствами для создания плоских линз, голограмм и оптических вихрей. FDTD позволяет моделировать распространение света в фотонных кристаллах и волноводах, оптимизировать резонаторы для усиления нелинейно-оптических эффектов и исследовать взаимодействие квантовых излучателей с их наноразмерным окружением. Таким образом, освоенные принципы являются основой для проведения передовых исследований, где теоретик-вычислитель становится полноценным соавтором экспериментальных открытий.

В заключение следует отметить, что данное пособие призвано служить не конечной точкой в обучении, а отправной для дальнейшей, более глубокой работы в области численной электродинамики. Перед исследователем открываются широкие возможности для анализа, проектирования и созидания. Это позволяет не только анализировать существующие нанофотонные устройства, но и предлагать новые, раздвигая границы возможного и внося вклад в создание технологий будущего. Путь от уравнений на бумаге до визуализации сложнейших волновых процессов – это мощный инструмент познания, который становится подвластен исследователю.

Список литературы

1. Yee, K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media / K. Yee // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 1966. – Vol. 14, № 3. – P. 302–307.
2. Garcia, S. G. On the accuracy of the ADI-FDTD method / S. G. Garcia, T.-W. Lee, S. C. Hagness // *IEEE Trans. Antennas Propag. Lett.* – 2002. – Vol. 1. – P. 31–34.
3. Taflove, A. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method / A. Taflove, S. C. Hagness. – Norwood, MA: Artech house, 2005. – 852 p.
4. Young, J. L. Toward the construction of a fourth-order difference scheme for transient EM wave simulation: Staggered grid approach / J. L. Young, D. Gaitonde, J. Shang // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 1997. – Vol. 45, № 11. – P. 1573–1580.
5. Finite difference coefficient // Wikipedia. – URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference_coefficient (accessed: 04.03.2022, available online).
6. Hesthaven, J. S. High-order accurate methods in time-domain computational electromagnetics: A review / J. S. Hesthaven // *Adv. Imag. Electron. Phys.* – 2003. – Vol. 127. – P. 59–123.
7. Turkel, E. Fourth order method for Maxwell equations on a staggered mesh / E. Turkel, A. Yefet // *IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium 1997. Digest / IEEE.* – Vol. 4. – 1997. – P. 2156–2159.
8. Turkel, E. High order methods / E. Turkel // *Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* / Ed. by A. Taflove. – Boston: Artech House, 1998. – P. 63–109.
9. Zhao, S. High-order FDTD methods via derivative matching for Maxwell's equations with material interfaces / S. Zhao, G. Wei // *J. Comput. Phys.* – 2004. – Vol. 200, № 1. – P. 60–103.
10. Nguyen, D. D. A new high order dispersive FDTD method for Drude material with complex interfaces / D. D. Nguyen, S. Zhao // *J. Comput. Appl. Math.* – 2015. – Vol. 285. – P. 1–14.
11. Курант, Р. О разностных уравнениях математической физики / Р. Курант, К. О. Фридрихс, Г. Леви // *УМН.* – 1941. – № 8. – С. 125–160.
12. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. Электричество: учебное пособие / Д. В. Сивухин. – 2-е испр. изд. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1983. – 688 с.
13. Sullivan, D. M. Electromagnetic simulation using the FDTD method / D. M. Sullivan. – NY: IEEE Press Series on RF and Microwave Technology, 2000. – 165 p.
14. Климов, В. В. Наноплазмоника / В. В. Климов. – М.: Физматлит, 2009. – 480 с.
15. Mur, G. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations / G. Mur // *IEEE transactions on Electromagnetic Compatibility.* – 1981. – № 4. – P. 377–382.
16. FDTD for plasmonics: Applications in enhanced Raman spectroscopy / Z.-L. Yang, Q.-H. Li, F.-X. Ruan [et al.] // *Chin. Sci. Bull.* – 2010. – Vol. 55, № 24. – P. 2635–2642.
17. Miron, D. B. z-Transform frameworks for FDTD / D. B. Miron // *IEEE Antennas Propag. Mag.* – 2012. – Vol. 54, № 5. – P. 131–144.
18. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т. Том VIII. Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц; Под ред. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – 2-е доп. и пер. изд. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1982. – С. 63–66.
19. Ciraci, S. Hydrodynamic model for plasmonics: a macroscopic approach to a microscopic

- problem / C. Ciraci, J. B. Pendry, D. R. Smith // *ChemPhysChem*. – 2013. – Vol. 14, № 6. – P. 1109–1116.
20. Газизов, А. Р. Гидродинамическое моделирование пространственной дисперсии и поверхностных мод тонких металлических пленок методом конечных разностей / А. Р. Газизов, Э. А. Избасарова // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. – 2024. – Т. 88, № 12. – С. 1940–1945.
 21. Berenger, J.-P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves / J.-P. Berenger // *J. Comput. Phys.* – 1994. – Vol. 114, № 2. – P. 185–200.
 22. A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition / Z. S. Sacks, D. M. Kingsland, R. Lee, J.-F. Lee // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 1995. – Vol. 43, № 12. – P. 1460–1463.
 23. Schneider, J. B. Understanding the finite-difference time-domain method / J. B. Schneider. – 2010. – 403 p. – URL: www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/ufdtd.pdf (accessed: 31.03.2018, available online).
 24. Frequently asked questions // MEEP Documentation. – URL: <https://meep.readthedocs.io/en/master/FAQ/> (accessed: 14.03.2025, available online).