

文章编号:1001-5078(2010)08-0887-05

· 光学材料器件与薄膜 ·

二维光子晶体 TM 波初边值问题的 MATLAB 矩阵分解算法

王忆锋, 唐利斌, 岳清
(昆明物理研究所, 云南 昆明 650223)

摘要:介绍了求解二维光子晶体 TM 波初边值问题的一种 MATLAB 矩阵分解算法, 该算法首先利用绝对稳定的古典隐格式差分将 TM 波表示为矩阵模型, 再借助蛙跳采样分离出有关磁场分量和电场分量的矩阵方程, 其求解可以通过调用 MATLAB 矩阵左除命令完成。该方法具有概念简单、使用方便、实用性强等特点。

关键词:光子晶体; TM 波; 麦克斯韦方程; 矩阵分解; MATLAB

中图分类号:O471.1 文献标识码:A

MATLAB matrix decomposition algorithm for initial/boundary value problem of two-dimensional photonic crystal

WANG Yi-feng, TANG Li-bin, YUE Qing
(Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China)

Abstract: A MATLAB matrix decomposition algorithm for solving initial/boundary value problem of TM wave in two-dimensional photonic crystal is presented. Firstly, the TM wave is expressed as a matrix model by a classic implicit format difference scheme that is absolutely stable. Secondly, the matrix equations about the magnetic field components and the electric field components can be separated by leap-frogging sampling and their solutions can be obtained with matrix left division command in MATLAB. The algorithm is concise in concept, convenient in operation, universal in application and easy in programming.

Key words: photonic crystal; TM wave; Maxwell equation; matrix decomposition; MATLAB

1 引言

光子晶体(photon crystal)是一种人造周期性结构, 它与一般晶体的差异在于介电常数在空间以波长量级周期性排列^[1], 可用于制备红外探测器、激光器等光电子器件^[2-3]。光子晶体的维数由其晶格维数定义, 有一维、二维和三维光子晶体之分, 其中二维光子晶体是目前的研究热点^[2]。

光子晶体满足的基本方程是偏微分形式的麦克斯韦方程(组), 为了完全确定其解, 需要给出包括初始条件和边界条件在内的适当定解条件。偏微分方程与定解条件一起构成定解问题。既有初始条件又有边界条件的定解问题称为初边值问题^[4], 其中对于可以直接变为有限差分方程的边界条件^[1], 不

管它是否与时间相关, 均可归结为差分后各边界节点值已知的初边值问题。本文介绍了用 MATLAB 矩阵求解此类问题的一种算法, 该算法首先利用绝对稳定的古典隐格式差分^[5]将 TM 波表示为矩阵模型, 再借助“蛙跳格式采样”^[1,6-7]分离出有关磁场分量和电场分量的矩阵方程, 其求解可以通过调用一条 MATLAB 矩阵除法命令完成。

2 无损耗介质中的麦克斯韦方程

在三维直角坐标系中, 向量 \mathbf{A} 记为:

$$\mathbf{A} = A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} + A_z \mathbf{k} \quad (1)$$

作者简介: 王忆锋(1963-), 男, 工学士, 高级工程师, 目前主要从事器件仿真研究。E-mail: wangyifeng63@sina.com
收稿日期: 2010-03-31

式中, A_x, A_y, A_z 称为 \mathbf{A} 在 x, y, z 方向的直角分量; $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ 分别为直角单位向量。

∇ 算子定义为:

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (2)$$

其中, $\nabla \times \mathbf{A}$ 称为向量 \mathbf{A} 的旋度, 又称为向量叉积; $\nabla \cdot \mathbf{A}$ 称为向量 \mathbf{A} 的散度, 亦称为向量点积。旋度和散度的计算容易利用 MATLAB 提供的两个命令 `dot()` 和 `cross()` 完成。例如, 利用叉积命令 `cross()` 计算容易得到:

$$\nabla \times \mathbf{A} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \mathbf{k} \quad (3)$$

介质内的麦克斯韦方程(组)可以写为:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{D} = q \\ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \end{cases}, \quad \begin{cases} \mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \\ \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \\ \mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \end{cases} \quad (4)$$

式中, \mathbf{D} 为电位移向量; q 为电荷量; \mathbf{E} 为电场强度向量; \mathbf{H} 为磁场强度向量; \mathbf{J} 为传导电流密度向量; \mathbf{B} 为磁感应强度向量; ϵ 为介质的介电常数, 或称为相对介电常数。另外, μ 为磁导率; σ 为电导率。

假设组成光子晶体的介质材料无损耗, 则有 $\sigma=0$ 。光子晶体理论计算的焦点问题之一就是如何由已知的介电常数 ϵ 的分布求解如下形式的麦克斯韦方程组:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H} = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{cases} \quad (5)$$

由式(3)、式(4)和式(5), 可以写出:

$$\text{TM 波: } \begin{cases} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = -\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = \epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} \end{cases} \quad (6)$$

$$\text{TE 波: } \begin{cases} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = \epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} \end{cases}$$

对于二维问题, 假设所有物理量均与 z 坐标无关, 即 $\partial/\partial z=0$, 于是有:

$$\begin{aligned} \text{TM 波: } & \begin{cases} \frac{\partial E_z}{\partial y} = -\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} \\ \frac{\partial E_z}{\partial x} = \mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = \epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} \end{cases} \\ \text{TE 波: } & \begin{cases} \frac{\partial H_z}{\partial y} = \epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} \\ \frac{\partial H_z}{\partial x} = -\epsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

3 以古典隐格式差分表示的 TM 波矩阵模型

有限差分法是求解麦克斯韦方程的常用方法之一。该方法的第一步是将求解区域网格化。如图 1 所示, 在 x 轴方向以 Δx 为间距、在 y 轴方向以 Δy 为间距, 将求解区域等间距划分为 $M \times N$ 个矩形网格, 计有 $(M+1) \times (N+1)$ 个节点, 其中待求节点 $(M-1) \times (N-1)$ 个, 边界节点 $2(M+N)$ 个。设 k 为时间坐标, 将时间坐标上的计算区域划分为 T 个等份, 共有 $(T+1)$ 时间节点, 从一个时间节点到下一个时间节点的间隔 Δt 称为时间步长。以电场分量 E_z 为例, 引入时间步长后的节点坐标记为 $E_z(m\Delta x, n\Delta y, k\Delta t)$, 省略各步长项后可写为 $E_z(m, n, k)$, 或者进一步简记为 $E_z^{(k)}(m, n)$; 其余依此类推。

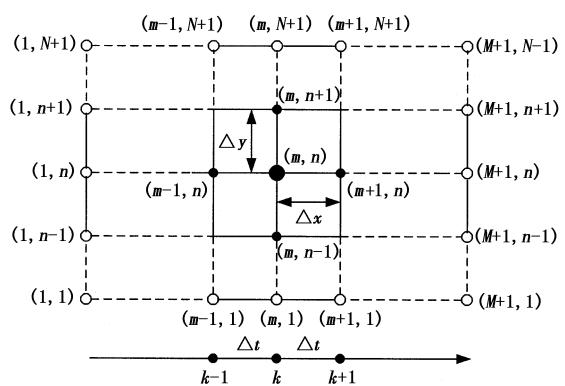


图 1 数值求解二维麦克斯韦方程所用的网格节点

Fig. 1 nodals for numerical solution of two-dimensional maxwell equations

差分法的基本思想是在各网格节点对函数做泰勒级数展开并取近似, 用差商代替导数, 将偏微分方程转化为一个线性方程组形式的差分方程, 通过求解线性方程组得到微分方程的近似解。差分有不同

的格式。简单地说,设有函数 $f(x, t)$,在 $(m, k+1)$ 处,其对坐标 x 的一阶偏导数可以用 $(k+1)$ 时刻的中心差分近似为:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f^{(k+1)}(m+1) - f^{(k+1)}(m-1)}{2\Delta x} \quad (8)$$

在 $(k+1)$ 时刻对时间偏导数的向后差分近似为:

$$\begin{cases} E_z^{(k+1)}(m, n+1) - E_z^{(k+1)}(m, n-1) + c_1\mu(m, n)H_x^{(k+1)}(m, n) = c_1\mu(m, n)H_x^{(k)}(m, n) \\ E_z^{(k+1)}(m+1, n) - E_z^{(k+1)}(m-1, n) - c_2\mu(m, n)H_y^{(k+1)}(m, n) = -c_2\mu(m, n)H_y^{(k)}(m, n) \\ c_2H_y^{(k+1)}(m+1, n) - c_2H_y^{(k+1)}(m-1, n) - c_1H_x^{(k+1)}(m, n+1) + c_1H_x^{(k+1)}(m, n-1) - \\ \varepsilon(m, n)E_z^{(k+1)}(m, n) = -\varepsilon(m, n)E_z^{(k)}(m, n) \end{cases} \quad (10)$$

其中:

$$c_1 = \frac{2\Delta y}{\Delta t}, c_3 = \frac{1}{c_1}; c_2 = \frac{2\Delta x}{\Delta t}, c_4 = \frac{1}{c_2} \quad (11)$$

将式(10)中的三个等式相加,则有:

$$f_{Hx}^{(k+1)}(m, n) + f_{Hy}^{(k+1)}(m, n) + f_{Ez}^{(k+1)}(m, n) = \zeta^{(k)}(m, n) \quad (12)$$

其中:

$$\begin{cases} f_{Hx}^{(k+1)}(m, n) = c_1H_x^{(k+1)}(m, n-1) + c_1\mu(m, n)H_x^{(k+1)}(m, n) - c_1H_x^{(k+1)}(m, n+1) \\ f_{Hy}^{(k+1)}(m, n) = -c_2H_y^{(k+1)}(m-1, n) - c_2\mu(m, n)H_y^{(k+1)}(m, n) + c_2H_y^{(k+1)}(m+1, n) \\ f_{Ez}^{(k+1)}(m, n) = -E_z^{(k+1)}(m-1, n) - E_z^{(k+1)}(m, n-1) + E_z^{(k+1)}(m, n+1) + \\ E_z^{(k+1)}(m+1, n) - \varepsilon(m, n)E_z^{(k+1)}(m, n) \end{cases} \quad (13)$$

$$\zeta^{(k)}(m, n) = \begin{bmatrix} c_1\mu(m, n) & 0 & 0 \\ 0 & -c_2\mu(m, n) & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon(m, n) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} H_x^{(k)}(m, n) \\ H_y^{(k)}(m, n) \\ E_z^{(k)}(m, n) \end{bmatrix} \quad (14)$$

在式(12)中,遍历 (m, n) 的所有取值,例如,从 $m=2, \dots, N$;一直取到 $m=M, n=2, \dots, N$;整理后可以 $m=2$ 开始,取 $n=2, \dots, N$;再从 $m=3$ 开始,取 $n=2, \dots, N$;一直取到 $m=M, n=2, \dots, N$;整理后可以写出下列矩阵形式:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} c_1\mathbf{M}_{Hx} & \mathbf{Z} & \mathbf{Z} \\ \mathbf{Z} & -c_2\mathbf{M}_{Hy} & \mathbf{Z} \\ \mathbf{Z} & \mathbf{Z} & -\mathbf{M}_{Ez} \end{bmatrix}}_{3 \cdot (M-1) \cdot (N-1) \times 3 \cdot (M-1) \cdot (N-1) \text{ 阶矩阵}} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{H}_x^{(k+1)} \\ \mathbf{H}_y^{(k+1)} \\ \mathbf{E}_z^{(k+1)} \end{bmatrix}}_{3 \cdot (M-1) \cdot (N-1) \times 1 \text{ 阶矩阵}} \Rightarrow \overbrace{\Gamma^{(k)} + \mathbf{H}_{x,b}^{(k+1)} + \mathbf{H}_{y,b}^{(k+1)} + \mathbf{E}_{z,b,1}^{(k+1)} + \mathbf{E}_{z,b,2}^{(k+1)}}^{(M-1) \cdot (N-1) \times 1 \text{ 阶矩阵}} \quad (15)$$

式中, \mathbf{Z} 为 $(M-1) \times (N-1) \times (M-1) \times (N-1)$ 阶零矩阵; $\mathbf{M}_{Hx}, \mathbf{M}_{Hy}$ 和 \mathbf{M}_{Ez} 均为 $(M-1) \times (N-1) \times (M-1) \times (N-1)$ 阶的对角系数矩阵, 对角矩阵可用 MATLAB 的 diag() 命令产生^[8], 其定义如下:

$$\begin{cases} \mathbf{M}_{Hx} = \text{diag}[\mathbf{C}_{Hx}(2), \dots, \mathbf{C}_{Hx}(M)] \\ \mathbf{C}_{Hx}(m) = \text{diag}[\mu(m, 2) + 1, \mu(m, 3), \dots, \mu(m, N-1), \\ \mu(m, N) - 1], m = 2, 3, \dots, M \end{cases} \quad (16)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f^{(k+1)}(m) - f^{(k)}(m)}{\Delta t} \quad (9)$$

以式(7)中所示的 TM 波方程为例,设已知 (m, n, k) 的值。在 $(m, n, k+1)$ 处,时间用向后差商近似,空间用中心差商近似,可得古典隐格式的差分格式。古典隐格式是绝对稳定的^[5]。

式(7)中的 TM 波方程可以化为:

$$c_1H_x^{(k+1)}(m, n) = c_1\mu(m, n)H_x^{(k)}(m, n)$$

$$-c_2H_y^{(k+1)}(m, n) = -c_2\mu(m, n)H_y^{(k)}(m, n)$$

$$c_1H_x^{(k+1)}(m, n) - c_2H_y^{(k+1)}(m, n) - c_1H_x^{(k+1)}(m, n+1) + c_1H_x^{(k+1)}(m, n-1) -$$

$$-\varepsilon(m, n)E_z^{(k+1)}(m, n) = -\varepsilon(m, n)E_z^{(k)}(m, n)$$

$$\varepsilon(m, n)E_z^{(k+1)}(m, n) = -\varepsilon(m, n)E_z^{(k)}(m, n) \quad (10)$$

$$c_1 = \frac{2\Delta y}{\Delta t}, c_3 = \frac{1}{c_1}; c_2 = \frac{2\Delta x}{\Delta t}, c_4 = \frac{1}{c_2} \quad (11)$$

$$f_{Hx}^{(k+1)}(m, n) + f_{Hy}^{(k+1)}(m, n) + f_{Ez}^{(k+1)}(m, n) = \zeta^{(k)}(m, n) \quad (12)$$

$$\zeta^{(k)}(m, n) = \begin{bmatrix} c_1\mu(m, n) & 0 & 0 \\ 0 & -c_2\mu(m, n) & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon(m, n) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} H_x^{(k)}(m, n) \\ H_y^{(k)}(m, n) \\ E_z^{(k)}(m, n) \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\mathbf{M}_{Hy} = \text{diag}[\mathbf{C}_{Hy}(3), \dots, \mathbf{C}_{Hy}(M-1), \mathbf{C}_{Hy}^M] \quad (17)$$

$$\mathbf{C}_{Hy}^2 = \text{diag}[\mu(2, 2) + 1, \mu(2, 3) + 1, \dots, \mu(2, N-1) + 1, \mu(2, N) + 1] \quad (17)$$

$$\mathbf{C}_{Hy}(m) = \text{diag}[\mu(m, 2), \dots, \mu(m, N)], \quad m = 3, 4, \dots, M-1 \quad (17)$$

$$\mathbf{C}_{Hy}^M = \text{diag}[\mu(M, 2) + 1, \mu(M, 3) + 1, \dots, \mu(M, N-1) + 1, \mu(M, N) + 1] \quad (17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{M}_{Ez} = \text{diag}[\mathbf{C}_{Ez}^2, \mathbf{C}_{Ez}(3), \dots, \mathbf{C}_{Ez}(M-1), \mathbf{C}_{Ez}^M] \\ \mathbf{C}_{Ez}^2 = \text{diag}[\varepsilon(2,2) + 2, \varepsilon(2,3) + 1, \dots, \varepsilon(2,N-1) + 1, \varepsilon(2,N) + 2] \\ \mathbf{C}_{Ez}(m) = \text{diag}[\varepsilon(m,2) + 1, \varepsilon(m,3), \dots, \varepsilon(m,N-1), \varepsilon(m,N) - 1], m = 3, 4, \dots, M-1 \\ \mathbf{C}_{Ez}^M = \text{diag}[\varepsilon(M,2), \varepsilon(M,3) - 1, \dots, \varepsilon(M,N-1) - 1, \varepsilon(M,N)] \end{array} \right. \quad (18)$$

式中的各 \mathbf{C} 矩阵分量均为 $(N-1) \times (N-1)$ 阶矩阵。

在式(15)的左端, $\mathbf{H}_x^{(k+1)}$, $\mathbf{H}_y^{(k+1)}$ 和 $\mathbf{E}_z^{(k+1)}$ 均为 $(M-1) \cdot (N-1) \times 1$ 阶矩阵, 其中各元素分别为待求的磁场分量和电场分量, 并有:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}_x^{(k+1)} = [\mathbf{V}_{H_x}^{(k+1)}(2); \dots; \mathbf{V}_{H_x}^{(k+1)}(M)] \\ \mathbf{V}_{H_x}^{(k+1)}(m) = [H_x^{(k+1)}(m,2), \dots, H_x^{(k+1)}(m,N)]', m = 2, 3, \dots, M \end{array} \right. \quad (19)$$

式中, $(')$ 表示矩阵的转置; 另外, 其中的 $(,)$ 和 $(;)$ 已沿用 MATLAB 句法^[8]。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}_y^{(k+1)} = [\mathbf{V}_{H_y}^{(k+1)}(2); \dots; \mathbf{V}_{H_y}^{(k+1)}(M)] \\ \mathbf{V}_{H_y}^{(k+1)}(m) = [H_y^{(k+1)}(m,2), \dots, H_y^{(k+1)}(m,N)]', m = 2, 3, \dots, M \end{array} \right. \quad (20)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E}_z^{(k+1)} = [\mathbf{V}_{E_z}^{(k+1)}(2); \dots; \mathbf{V}_{E_z}^{(k+1)}(M)] \\ \mathbf{V}_{E_z}^{(k+1)}(m) = [E_z^{(k+1)}(m,2), \dots, E_z^{(k+1)}(m,N)]', m = 2, 3, \dots, M \end{array} \right. \quad (21)$$

式(15)右端的矩阵为由初始值或前一时刻节点值以及边界值等构成的已知量, 并有:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{I}^{(k)} = [\mathbf{V}_r^{(k)}(2); \dots; \mathbf{V}_r^{(k)}(M)] \\ \mathbf{V}_r^{(k)}(m) = [\zeta^{(k)}(m,2), \dots, \zeta^{(k)}(m,N)]', m = 2, 3, \dots, M \end{array} \right. \quad (22)$$

各场量的边界值分别为:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}_{x,b}^{(k)} = [\mathbf{V}_{H_{x,b}}^{(k)}(2); \dots; \mathbf{V}_{H_{x,b}}^{(k)}(M)] \\ \mathbf{V}_{H_{x,b}}^{(k)}(m) = c_1 [-H_x^{(k)}(m,1), 0, \dots, 0, H_x^{(k)}(m,N+1)]', m = 2, 3, \dots, M \end{array} \right. \quad (23)$$

其中, 下标 b 表示边界值。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}_{y,b}^{(k)} = [\mathbf{V}_{H_{y,b}}^{(k),1}; \mathbf{O}_1; \dots; \mathbf{O}_1; \mathbf{V}_{H_{y,b}}^{(k),M}] \\ \mathbf{O}_1 = [0, 0, \dots, 0]' \\ \mathbf{V}_{H_{y,b}}^{(k),1} = c_2 [H_y^{(k)}(1,2), \dots, H_y^{(k)}(1,N)]' \\ \mathbf{V}_{H_{y,b}}^{(k),M} = -c_2 [H_y^{(k)}(M+1,2), \dots, H_y^{(k)}(M+1,N)]' \end{array} \right. \quad (24)$$

式中, \mathbf{O}_1 为 $(N-1) \times 1$ 阶零矩阵, 可调用 MATLAB 的 zeros($N-1, 1$) 命令生成^[8]。此外:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E}_{z,b,1}^{(k)} = [\mathbf{V}_{E_{z,b,1}}^{(k),1}; \mathbf{O}_1; \dots; \mathbf{O}_1; \mathbf{V}_{E_{z,b,1}}^{(k),M}] \\ \mathbf{V}_{E_{z,b,1}}^{(k),1} = [E_z^{(k)}(1,2), \dots, E_z^{(k)}(1,N)]' \\ \mathbf{V}_{E_{z,b,1}}^{(k),M} = -[E_z^{(k)}(M,2), \dots, E_z^{(k)}(M,N)]' \end{array} \right. \quad (25)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E}_{z,b,2}^{(k)} = [\mathbf{V}_{E_{z,b,2}}^{(k),2}; \dots; \mathbf{V}_{E_{z,b,2}}^{(k),M}] \\ \mathbf{V}_{E_{z,b,2}}^{(k),m} = [E_z^{(k)}(m,1), 0, \dots, 0, -E_z^{(k)}(m,N+1)]', m = 2, 3, \dots, M \end{array} \right. \quad (26)$$

4 TM 波矩阵模型的分解

从式(15)可以看到, 其左端为 $3 \cdot (M-1) \cdot (N-1) \times 1$ 阶矩阵, 即有 $3 \cdot (M-1) \cdot (N-1)$ 个待求未知量; 而右端为 $(M-1) \cdot (N-1) \times 1$ 阶矩阵, 即 $(M-1) \cdot (N-1)$ 个已知量。从计算的角度看, 除非从中去掉 $2 \cdot (M-1) \cdot (N-1)$ 个未知量, 否则它是不可求解的。解决此矛盾的一种基本思路是通过将时间及空间步长缩小一半来加密网格、然后错位采样, 这就是电磁场理论中的“蛙跳格式采样”概念^[1,6-7]。

在前述分析过程中, 时间步长为 $0, \Delta\tau, 2\Delta\tau, 3\Delta\tau, \dots$; 现将时间步长加密为 $0, 1/2\Delta\tau, \Delta\tau, (1+1/2)\Delta\tau, 2\Delta\tau, (2+1/2)\Delta\tau, \dots$ 等等。这里沿用 Yee 单元网格空间中电磁场的量化关系^[1,7], 即先计算磁场分量 \mathbf{H}_x 和 \mathbf{H}_y , 后计算电场分量 \mathbf{E}_z ; 换言之, \mathbf{H}_x 和 \mathbf{H}_y 取 $(k+1/2)\Delta\tau$ 时刻的值, \mathbf{E}_z 取 $k\Delta\tau$ 时刻的值。另外, 每个场分量自身相距一个空间步长; 电场与磁场相距半个空间步长。

考虑到 TM 波的两个磁场分量 \mathbf{H}_x 和 \mathbf{H}_y 同时出现, 即其时间步长必须相同, 可以通过在空间步长上的错位将 \mathbf{H}_x 和 \mathbf{H}_y 分离开来。例如, 一种处理方法是, $\mathbf{H}_x(m, n+1/2, k+1/2)$, $\mathbf{H}_y(m+1/2, n, k+1/2)$; 而电场分量则取为空间坐标相同, 时间坐标不同, 即 $\mathbf{E}_z(m, n, k)$ 。于是在任一时空坐标下, 式(15)中与右侧相关的量只有 $(M-1) \cdot (N-1)$ 个, 从而构成阶数相等的矩阵方程, 即:

$$c_1 \mathbf{M}_{Hx} \cdot \mathbf{H}_x^{(k+1/2)} (m, n + 1/2) = \mathbf{I}^{(k-1/2)} + \mathbf{H}_{x,b}^{(k-1/2)} + \mathbf{H}_{y,b}^{(k-1/2)} + \mathbf{E}_{z,b,1}^{(k-1/2)} + \mathbf{E}_{z,b,2}^{(k-1/2)} \quad (27)$$

$$- c_2 \mathbf{M}_{Hy} \cdot \mathbf{H}_y^{(k+1/2)} (m + 1/2, n) = \mathbf{I}^{(k-1/2)} + \mathbf{H}_{x,b}^{(k-1/2)} + \mathbf{H}_{y,b}^{(k-1/2)} + \mathbf{E}_{z,b,1}^{(k-1/2)} + \mathbf{E}_{z,b,2}^{(k-1/2)} \quad (28)$$

$$-\mathbf{M}_{Ez} \cdot \mathbf{E}_z^{(k)} (m, n) = \mathbf{I}^{(k-1)} + \mathbf{H}_{x,b}^{(k-1)} + \mathbf{H}_{y,b}^{(k-1)} + \mathbf{E}_{z,b,1}^{(k-1)} + \mathbf{E}_{z,b,2}^{(k-1)} \quad (29)$$

在上述三个矩阵方程的左端, \mathbf{M}_{Hx} , \mathbf{M}_{Hy} 和 \mathbf{M}_{Ez} 为已知量, \mathbf{H}_x , \mathbf{H}_y 和 \mathbf{E}_z 为待求的未知量; 因此若能构造出右端不同时空坐标下的相应矩阵, 则调用一条 MATLAB 矩阵除法命令即可完成各场量的计算。

5 TM 波矩阵模型计算的 MATLAB 实现

至此, 上述算法过程可以通过下述步骤完成:

① $k=0$, 为已知的初始条件和边界条件;

② $k=1/2$, 计算磁场分量。根据式(14)写出 $\zeta^{(1/2)}(m, n + 1/2)$ 和 $\zeta^{(1/2)}(m + 1/2, n)$, 可以看到两者均为由初始条件和边界条件构成的已知量, 于是根据式(27), 可以求出 $\mathbf{H}_x^{(1/2)}(m, n + 1/2)$ 的值; 根据式(28), 可以求出 $\mathbf{H}_y^{(1/2)}(m + 1/2, n)$ 的值;

③ $k=1$, 计算电场分量。此时的 $\zeta^{(0)}(m, n)$ 仍为已知量, 故可以根据式(29)求出 $\mathbf{E}_z^{(1)}(m, n)$ 的值。随后利用均值近似求出下一个时间步长计算磁场分量所需要的电场值, 即前半个时间步长上的电场值;

$$\mathbf{E}_z^{(1/2)}(m, n) = \frac{\mathbf{E}_z^{(0)}(m, n) + \mathbf{E}_z^{(1)}(m, n)}{2}$$

以及半个空间步长上的电场值:

$$\mathbf{E}_z^{(1/2)}(m, n + 1/2) = \frac{\mathbf{E}_z^{(1/2)}(m, n + 1) + \mathbf{E}_z^{(1/2)}(m, n)}{2}$$

$$\mathbf{E}_z^{(1/2)}(m + 1/2, n) = \frac{\mathbf{E}_z^{(1/2)}(m + 1, n) + \mathbf{E}_z^{(1/2)}(m, n)}{2}$$

④ $k=3/2$, 计算磁场分量。在前面第②步和第③步的基础上, 即可根据式(27)、式(28)求出 $\mathbf{H}_x^{(3/2)}(m, n + 1/2)$ 和 $\mathbf{H}_y^{(3/2)}(m + 1/2, n)$ 的值; 进而得到下一时间步长计算电场分量 \mathbf{E}_z 所需要的磁场分量值, 即:

$$\mathbf{H}_x^{(1)}(m, n + 1/2) = \frac{\mathbf{H}_x^{(0.5)}(m, n + 1/2) + \mathbf{H}_x^{(1.5)}(m, n + 1/2)}{2}$$

$$\mathbf{H}_x^{(1)}(m, n) = \frac{\mathbf{H}_x^{(1)}(m, n - 1/2) + \mathbf{H}_x^{(1)}(m, n + 1/2)}{2}$$

$$\mathbf{H}_y^{(1)}(m + 1/2, n) = \frac{\mathbf{H}_y^{(0.5)}(m + 1/2, n) + \mathbf{H}_y^{(1.5)}(m - 1/2, n)}{2}$$

$$\mathbf{H}_y^{(1)}(m, n) = \frac{\mathbf{H}_y^{(1)}(m - 1/2, n) + \mathbf{H}_y^{(1)}(m + 1/2, n)}{2}$$

注意到在第③步中已经求出 $\mathbf{E}_z^{(1)}(m, n)$, 加上这里求出的 $\mathbf{H}_x^{(1)}(m, n)$ 和 $\mathbf{H}_y^{(1)}(m, n)$, 至此已获得整数时空坐标点处的电场分量和磁场分量的数值;

⑤ $k=2$, 计算电场分量, 与第③步类似;

⑥ $k=5/2$, 计算磁场分量, 与第④步类似; 如此循环, 直到遍历全部时间步长。

由于上述计算过程中所需要的矩阵已先行给出或定义, 故相应的程序实现比较简单, 限于篇幅, 此处不再介绍。有关技巧可见诸参考文献[5], [8]等。

6 结束语

有限差分有显格式和隐格式之分。显格式对时间步长和空间步长有一定的限制, 否则会发生稳定性问题, 出现不合理的结果^[1,9]。隐格式则对步长没有限制, 不会出现解的振荡现象^[9]。本文介绍的方法将古典隐格式差分的稳定性^[5]与 MATLAB 强大的矩阵/向量计算功能结合在一起, 物理概念清晰, 推导过程简捷, 程序编调工作量较小, 还可以推广到用于解决二维光子晶体 TE 波的初边值问题。

参考文献:

- [1] 吕英华. 计算电磁学的数值方法[M]. 北京: 清华大学出版社, 2006, 6.
- [2] 温熙森. 光子/声子晶体理论与技术[M]. 北京: 科学出版社, 2006, 6.
- [3] 傅英, 陆卫. 半导体量子器件物理[M]. 北京: 科学出版社, 2005, 1.
- [4] 张文生. 科学计算中的偏微分方程有限差分法[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006, 6.
- [5] 陆君安, 尚涛, 谢进, 等. 偏微分方程的 MATLAB 解法[M]. 武汉: 武汉大学出版社, 2001, 8.
- [6] 邵福球. 等离子体粒子模拟[M]. 北京: 科学出版社, 2002, 2.
- [7] 葛德彪, 阎玉波. 电磁波时域有限差分方法[M]. 第 2 版. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005, 5.
- [8] E B Magrab, S Azarm, B Balachandran, 等. MATLAB 原理与工程应用[M]. 高会生, 李新叶, 胡智奇, 等译. 北京: 电子工业出版社, 2002.
- [9] 杨世铭, 陶文铨. 传热学[M]. 第 3 版. 北京: 高等教育出版社, 2003, 8.