

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П. КОРОЛЕВА»

Д.Л. ГОЛОВАШКИН, Н.Л. КАЗАНСКИЙ

**РАЗНОСТНЫЙ МЕТОД
РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ
МАКСВЕЛЛА**

*Утверждено Редакционно-издательским советом университета
в качестве методических указаний*

САМАРА
Издательство СГАУ
2007

УДК 535.42
ББК 22.343
Г61



**Инновационная образовательная программа
"Развитие центра компетенции и подготовка
специалистов мирового уровня в области аэрокос-
мических и геoinформационных технологий"**

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук, профессор В.В. Ивахник,
д-р физ.-мат. наук, профессор И.П. Завершинский

Г61 **Головашкин Д.Л.**
Разностный метод решения уравнений Максвелла: учеб. пособие
/ Д.Л. Головашкин, Н.Л. Казанский. – Самара: Изд-во Самар. гос. аэро-
косм. ун-та, 2007. – 160 с.: 65 ил.

ISBN 978-5-7883-0593-6

В пособии представлены сведения, необходимые для ознакомления с разностным методом решения уравнений Максвелла. В частности, сформулированы явные разностные схемы Y_{ee} , способы наложения поглощающих слоев и задания падающей волны. Многочисленные примеры использования метода для решения задач дифракционной оптики иллюстрируют разностный подход к решению уравнений Максвелла.

Настоящее учебное пособие предназначено для студентов, обучающихся по специальности 511600 – «Прикладные математика и физика». Может быть полезно и для студентов смежных специальностей. Разработано на кафедре технической кибернетики.

УДК 535.42
ББК 22.343

ISBN 978-5-7883-0593-6

© Головашкин Д.Л., Казанский Н.Л., 2007
© Самарский государственный
аэрокосмический университет, 2007

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
1. Разностное решение уравнений Максвелла в задачах микрооптики.....	9
1.1. Уравнения Максвелла в дифракционной микрооптике	9
1.1.1. Уравнения Максвелла.....	10
1.1.2. Граничные условия	13
1.1.3. Начальные условия	20
1.2. Разностные схемы для уравнений Максвелла.....	21
1.2.1. Одномерный случай.....	22
1.2.2. Двумерный случай	26
1.3. Переход к комплексной амплитуде.....	33
1.4. Наложение поглощающих слоев.....	36
1.4.1. Постановка поглощающих граничных условий и наложение.....	37
поглощающих слоев	37
1.4.2. Разностная аппроксимация уравнений Максвелла	41
в поглощающих слоях	41
1.4.3. Объединение поглощающих слоев при векторизации.....	42
вычислений.....	42
1.4.4. Универсальные сеточные области.....	46
1.5. Формирование падающей волны.....	52
1.5.1. Метод «жесткого» источника.....	53
1.5.2. Метод результирующего поля	57
1.5.3. Метод разделенного поля.....	61
1.5.3.1. Одномерный случай	61
1.5.3.2. Двумерный случай.....	66
1.5.4. Сравнение методов формирования падающей волны.....	71
2. Распространение электромагнитного излучения через субволновые.....	74
дифракционные решетки на торце оптического волновода	74
2.1. Тестирование модели, основанной на разностном решении уравнений.....	74
Максвелла, на примере субволновых дифракционных решеток	74
2.1.1. Дифракция H -волны на идеально проводящих решетках	75
2.1.2. Дифракция H -волны на диэлектрической бинарной решетке....	81
2.1.3. Дифракция H -волны на алмазной антиотражающей	84
периодической структуре.....	84
2.2. Исследование бинарной дифракционной решетки на торце	89
галогенидного ИК-волновода	89
2.2.1. Влияние недотрава, перетрава и клина травления	92
2.2.2. Влияние прогиба решетки	94

3. Распространение электромагнитного излучения через дифракционные микролинзы	97
3.1. Тестирование модели, основанной на разностном решении уравнений Максвелла, на примере диэлектрического цилиндра круглого сечения.....	97
3.2. Моделирование прохождения света через дифракционные микролинзы с высокой числовой апертурой	100
3.3. Распространение электромагнитного излучения через алмазную дифракционную микролинзу с технологическими искажениями расчетного микрорельефа	108
3.3.1. Распространение электромагнитного излучения через локальные фрагменты ДОЭ с технологическими погрешностями изготовления.....	110
3.3.2. Распространение электромагнитного излучения через алмазную четырехуровневую дифракционную микролинзу	114
4. Декомпозиция сеточной области при разностном решении уравнений Максвелла	119
4.1. Декомпозиция одномерной сеточной области	120
4.1.1. Декомпозиция на две подобласти в свободном пространстве.....	121
4.1.2. Декомпозиция на две подобласти в случае неоднородной диэлектрической среды	123
4.1.3. Декомпозиция на произвольное количество подобластей в случае неоднородной диэлектрической среды.....	126
4.2. Декомпозиция двумерной сеточной области	128
4.2.1. Одномерная декомпозиция для двумерной дифракционной решетки	128
4.2.2. Декомпозиция при однородных диэлектрических включениях	130
Заключение.....	153
Контрольные вопросы.....	154
Список терминов	155
Список литературы.....	156

ВВЕДЕНИЕ

Дифракционная компьютерная оптика развивается более 25 лет, начиная с основополагающих работ А.М. Прохорова, И.Н. Сисакяна и В.А. Сойфера [21-24]. За прошедшие годы решены фундаментальные задачи фокусировки и селекции мод лазерного излучения, формирования бездифракционных пучков и т.п. Созданные ДОЭ нашли широкое применение в лазерных технологических установках, оптических приборах и устройствах хранения и поиска информации. Количество публикаций по данной тематике отечественных и зарубежных авторов к настоящему времени весьма велико и продолжает бурно расти.

Необходимо отметить тенденции к миниатюризации ДОЭ и их интеграции с другими оптическими или электронными компонентами различных устройств. Кроме улучшения массогабаритных характеристик, миниатюризация позволяет использовать для изготовления ДОЭ материалы, применение которых при производстве элементов рефракционной оптики либо невозможно, либо связано со значительными техническими трудностями и финансовыми затратами. Миниатюризация приводит к уменьшению линейных размеров зон Френеля на ДОЭ и выдвигает соответствующее требование субволнового разрешения технологических установок, применяемых для их создания. При этом методы расчета, основанные на геометрическом и скалярном приближениях, становятся неадекватными, что приводит к постановке задачи решения уравнений Максвелла в векторной форме и обуславливает актуальность основного направления данной работы – расчета дифракции лазерного излучения в рамках строгой электромагнитной теории, в частности, дифракции на алмазных поликристаллических пленках с нанесенным субволновым микрорельефом.

Интеграция элементов микрооптики открывает широкие возможности для создания гибридных оптических структур, сочетающих достоинства ДОЭ и элементов традиционной оптики. Примером тому может служить формирование фокусатора в прямоугольник на торце кварцевого волновода. С развитием исследований в данном направлении связано нанесение светоделительной дифракционной решетки на торец галогенидного ИК-волновода. Совмещение ДОЭ и волновода позволяет снизить потери на френелевское отражение (показатель преломления материала волновода $n=2,15$) и избежать юстировки объединенной оптической системы. Следовательно, актуально изучение распространения света через дифракционную решетку, сформированную на торце галогенидного ИК-волновода – также требующее применения строгой теории дифракции в силу субволнового профиля решетки.

Методы расчета дифракционной картины на элементах микрооптики в рамках геометрической и скалярной теории света, разработанные Сойфером

В.А., Голубом М.А., Казанским Н.Л., Котляром В.В. и Досколовичем Л.Л., представленные в работе [27], теряют адекватность при переходе в субволновую область, в силу чего не подлежат дальнейшему рассмотрению.

Аналитическое решение задачи дифракции на оптическом элементе в рамках строгой теории света возможно лишь для весьма ограниченного набора случаев [4]: дифракция на бесконечном цилиндре (идеально проводящем либо диэлектрическом) круглого сечения, шаре и клине.

Численные методы исследования дифракции электромагнитных волн на оптических элементах в рамках строгой теории развиваются в течение последних 10 лет. При этом численные методы решения основных уравнений электродинамики известны достаточно давно и успешно применялись в других областях, в частности, в теории антенн, в силу меньшей вычислительной сложности задач технической электродинамики. Примером может служить популярный сборник Р. Митры 1973 года выпуска [28] по вычислительной электродинамике.

Касаясь задач, более близких к оптике, необходимо отметить фундаментальную работу 1980 года (R. Petit) [42] по электромагнитной теории решеток, широко цитируемую в современной литературе, и работу Досколовича Л.Л. [27], взявшего на себя труд по численной реализации методов расчета электромагнитного поля за бесконечными периодическими структурами из [42]. Воспользуемся классификацией автора [42], разделив такие методы на модовый, интегральные и дифференциальные.

Первый метод применим для анализа дифракции на идеально проводящих решетках ступенчатого профиля и заключается в поиске решения уравнения Гельмгольца в виде мод волновода с идеально проводящими стенками. Обобщенный вариант модового метода, представленный в работе Досколовича Л.Л. [27], численно устойчив, однако характеризуется узкой областью применения.

Интегральные методы, основанные на численном решении интегральных уравнений Фредгольма, описывающих дифракцию электромагнитной волны на идеально отражающей решетке произвольного профиля, связаны с решением систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), не всегда хорошо обусловленных, и характеризуются повышенной вычислительной сложностью [5,32].

Дифференциальный [42] метод решения задачи дифракции на диэлектрических и проводящих решетках основан на послойном разложении в ряд Фурье функции диэлектрической проницаемости профиля решетки и разложении Релея поля в профиле и вне его с последующей подстановкой таких разложений в уравнение Гельмгольца. Численная реализация метода, предложенная Досколовичем Л.Л. [27], не характеризуется сходимостью в силу неустойчивости процедуры обращения плохо обусловленной матрицы. Впрочем, в недавних работах (Moharam M.G., Grann E.B., Pommet D.A., Gaylord) приведены устойчивые численные реализации метода (его современное название *rigorous cou-*

pled-wave analysis), однако его вычислительная сложность для трехмерного случая ограничивает применение дифференциального подхода.

Методы исследования дифракции на неперiodических оптических элементах можно классифицировать аналогичным образом. К интегральным следует отнести подходы, основанные на численном решении интегральных уравнений Фредгольма второго рода, представленные как в работах по вычислительной электродинамике: Неганова В.А., Раевского С.Б., Ярового Г.П., В.В. Панасюка, М.П. Саврука, З.Т. Назарчука, Е.Н. Васильева; так и по оптике: Котляра В.В., Налимова А.Г., Скиданова Р.В.

Применение численных методов электродинамики не всегда возможно в оптических приложениях. Действительно, для расчета элементов с субволновыми неоднородностями необходима строгая теория дифракции. Однако размеры оптических элементов с субволновыми неоднородностями составляют сотни и тысячи длин волн (в отличие от технической электродинамики, где линейные размеры антенн сравнимы с длиной излучаемых ими волн). Для моделирования дифракции на их поверхности вычислительная сложность классических численных методов электродинамики чрезмерна. Метод, разработанный Котляром В.В., Налимовым А.Г. и Скидановым Р.В., является итерационным, в силу чего отличается малым числом арифметических операций, но неустойчив при исследовании элементов, размеры которых превышают несколько длин волн.

К дифференциальным методам решения задачи дифракции на ограниченных элементах отнесем подходы, основанные на решении уравнений Гельмгольца, Даламбера и Максвелла. В недавней работе М. Mirotznik, D. Prather и J. Maït предложили гибридный метод конечных и граничных элементов решения уравнения Гельмгольца к исследованию дифракции на бинарной микролинзе. Данный метод совершенствовался Котляром В.В., Нестеренко Д.В., Личмановым М.А. Однако, в силу высокой вычислительной сложности, область его применения распространяется на элементы с апертурой в несколько длин волн. К тому же предложенный подход не позволяет перейти к трехмерному случаю. Аналогичным недостатком характеризуется метод разностного решения уравнения Даламбера, представленный А. Repaut. Решая волновое уравнение, можно изучить поведение электромагнитной волны только одного типа (H или E). Если дифракция на трехмерном оптическом элементе приведет к появлению волны другого типа, то полученное решение окажется неверным. Приведенных недостатков лишен разностный метод решения уравнений Максвелла, наиболее полно представленный в монографии А. Taflové, S. Hagness [50], выдержавшей к настоящему моменту три издания.

Появившись в середине прошлого века [40] (G. Stog, 1944 год), численный метод решения уравнений Максвелла прошел несколько стадий развития. Ранее всего (S.K. Yee 1966 год) [56] были записаны разностные уравнения, обладающие высокими порядками аппроксимации исходной дифференциальной

задачи по времени и пространству. Неявные разностные схемы, характеризующиеся абсолютной устойчивостью, были представлены в 1997 году Головашкиным Д.Л., Дегтяревым А.А. и Соифером В.И., в 1998 году теми же авторами был повышен порядок аппроксимации по времени для неявных схем, а в 2000 году [50] и по пространству (Zheng, Chen, Zhang).

В 1994 году J.-P. Berenger [38] удовлетворительно решил проблему численного описания поглощения излучения, покидающего границы вычислительной области. Однако расположение поглощающих слоев в вычислительной области и традиционные граничные условия препятствуют успешной векторизации вычислений по методу.

Задача моделирования работы источника падающей волны, поставленная еще еще в работе, решается с разной степенью точности во многих работах вплоть до настоящего времени. Первый способ задания падающей волны, позволяющий ограничить вычислительную область исследуемым объектом и его ближайшей окрестностью, был сформулирован в работе [51] (Taflove A., Brodwin M., 1975 год). Более точный метод опубликован в 1980 году [53] (Taflove A.) в рамках TF/SF методики (Total-Field/Scattering-Field technique). С повышением точности данного подхода в области, заключенной в оболочку из однородной среды, связана работа 1999 года [47] (D.W. Prather and S. Shi), авторы которой предпочли задавать излучающие условия численно, вместо аналитической формы, как это ранее предлагалось в [53]. Однако при моделировании работы дифракционных оптических элементов конструирование такой оболочки приводит к многократному росту вычислительной сложности алгоритма, так как в расчетную область приходится помещать весь оптический элемент.

Снижению вычислительной сложности способствует наложение подвижной сеточной области, предложенное в [43] (B. Fidel, E. Heyman, R. Kastner and R.W. Ziolkowski). Указанный прием хорошо зарекомендовал себя при изучении распространения короткого импульса в однородной среде. Однако его применение затруднительно для оптического элемента с многочисленными границами раздела сред и невозможно в случае монохроматической волны.

В предлагаемой работе развиваются указанные методики и подходы для исследования дифракционных оптических элементов, обладающих рядом особенностей как по сравнению с объектами изучения технической электродинамики (для которых изначально разрабатывался разностный метод решения уравнений Максвелла), так и в сравнении с классическими элементами рефракционной оптики.

1. РАЗНОСТНОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В ЗАДАЧАХ МИКРООПТИКИ

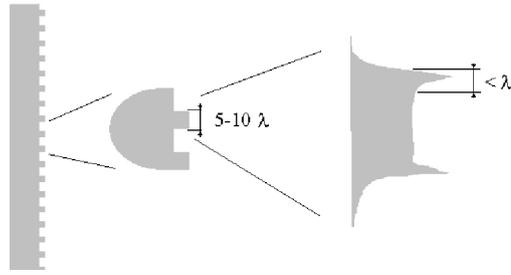
1.1. Уравнения Максвелла в дифракционной микрооптике

До недавнего времени, при моделировании распространения света через оптические элементы, исследователи ограничивались преимущественно геометрическим приближением [26]. Геометрическая оптика основывается на представлении световой волны как совокупности лучей (лучевых трубок), по которым и распространяется энергия. При этом не берется в расчет ни векторная природа поля и связанные с ней поляризационные состояния, ни дифракционные эффекты внутри лучевых трубок. Математической основой геометрической оптики являются уравнения переноса и эйконала.

Достижения технологии производства оптических элементов привели к такой степени их миниатюризации, что приближение геометрической оптики утратило адекватность. Дифракция на неоднородностях оптической поверхности с характеристическими размерами в несколько длин волн описывается в рамках скалярного приближения (рис. 1.1) [27]. Представляя поле в виде комплексной амплитуды и фазы без разделения на лучи, скалярная оптика оперирует преобразованиями Кирхгоффа, Френеля и Фурье. Однако зависимость дифракционной картины от векторной природы электромагнитного поля, распределение поля в ближней зоне оптического элемента остаются за рамками данного представления.

Переход к субволновым размерам характеристических неоднородностей оптических элементов (рис. 1.1) побуждает обращаться непосредственно к уравнениям Максвелла, как к основе волновой оптики [1,3]. С развитием вычислительной техники появилась возможность численного решения этих уравнений для исследования оптических процессов.

К сожалению, высокая вычислительная сложность методов решения уравнений Максвелла ограничивает их применение областями с линейными размерами в несколько десятков длин волн для двумерного случая и десятком для трехмерного. Впрочем, небольшие размеры микрооптических элементов позволяют проводить вычислительные эксперименты с реально существующими образцами.



области действия скалярной и векторной теории

Рис. 1.1. Переход от приближения скалярной оптики к векторной теории. Погрешности изготовления бинарной дифракционной решетки имеют субволновые размеры и могут оказывать существенное влияние на дифракционную картину

1.1.1. Уравнения Максвелла

Строгая математическая модель, описывающая распространение электромагнитного поля, основывается на уравнениях Максвелла, которые в системе единиц СИ и дифференциальной форме выглядят следующим образом [30]:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j}; \quad (1.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \quad (1.2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho; \quad (1.3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (1.4)$$

где t – время, с; \mathbf{H} – напряженность магнитного поля, А/м; \mathbf{E} – напряженность электрического поля, В/м; \mathbf{D} – электрическая индукция, Кл/м²; \mathbf{B} – магнитная индукция, Т; \mathbf{j} – плотность тока, А/м²; ρ – плотность заряда, Кл/м³.

Взаимное влияние поля и среды (в которой поле распространяется) принято выражать материальными уравнениями: $\mathbf{D}=\mathbf{D}(\mathbf{E})$, $\mathbf{B}=\mathbf{B}(\mathbf{H})$, $\mathbf{j}=\mathbf{j}(\mathbf{E})$. Рамки настоящей работы определяют процессы в среде как локальные и безынерционные: в каждой точке состояние не зависит от окружающей среды, а в каждый момент времени – от “предыстории”. Тогда материальные уравнения запишутся как:

$$\mathbf{D}=\varepsilon_0\varepsilon\mathbf{E}; \quad (1.5)$$

$$\mathbf{B}=\mu_0\mu\mathbf{H}; \quad (1.6)$$

$$\mathbf{j}=\sigma\mathbf{E}, \quad (1.7)$$

где ε и μ - относительная диэлектрическая и магнитная проницаемости, ε_0 [Ф/м] и μ_0 [Гн/м] - электрическая и магнитная постоянные, σ [См/м] - удельная электрическая проводимость.

Изучая распространение света в диэлектриках без заряда, положим равными нулю плотность тока в (1.1) и плотность заряда в (1.3).

После взятия дивергенции от обеих частей уравнений (1.1) и (1.2) получим уравнения (1.3) и (1.4), которые вследствие этого можно исключить из рассмотрения.

Основной характеристикой среды в оптике является показатель преломления n , который в рассматриваемом случае вычисляется как $n = \sqrt{\varepsilon\mu}$. Далее, полагая среду немагнитной ($\mu=1$), примем $n = \sqrt{\varepsilon}$.

Моделируя распространение света через большинство дифракционных оптических элементов, удобно выбирать декартову систему координат (X, Y, Z) для записи уравнений Максвелла. Квантованный ступенчатый микрорельеф ДОО наиболее естественно описывается именно в этой системе.

Принимая $\mathbf{E}=(E_x, E_y, E_z)$, $\mathbf{H}=(H_x, H_y, H_z)$, учитывая (1.5), (1.6) и вышепринятые допущения, представим (1.1), (1.2) в виде

$$\varepsilon_0\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}; \quad (1.8)$$

$$\varepsilon_0\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}; \quad (1.9)$$

$$\varepsilon_0\varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}; \quad (1.10)$$

$$-\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}; \quad (1.11)$$

$$-\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}; \quad (1.12)$$

$$-\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}, \quad (1.13)$$

где относительная электрическая проницаемость является функцией координат: $\varepsilon=\varepsilon(x,y,z)$.

Рассматривая далее одномерный случай, положим компоненты E_x, H_y отличными от нуля, $\varepsilon=\varepsilon(z)$, задав Z направлением распространения волны:

$$\varepsilon_0\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{\partial H_y}{\partial z};$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{\partial E_x}{\partial z}. \quad (1.14)$$

В отечественной литературе такое поле называется T -волной [30], в иностранной ТЕМ-волной [1]. Далее будет использоваться отечественная терминология.

Система (1.14) описывает распространение света в слоистых средах и одномерных фотонных кристаллах. В настоящей работе численное решение (1.14) окажется полезно при задании падающей волны для повышения точности вычислений (этой теме посвящен параграф 1.5).

Моделируя распространение излучения в цилиндрических средах ($\varepsilon = \varepsilon(y, z)$), обращают в нуль производные по X в (1.9), (1.10), (1.12) и (1.13), если напряженности электрического и магнитного полей падающей волны постоянны в данном направлении. Получаем две независимые системы уравнений: для H -волны:

$$\begin{aligned} \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} &= -\frac{\partial E_x}{\partial z}; \\ \mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{\partial E_x}{\partial y}; \\ \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

и E -волны:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{\partial H_x}{\partial z}; \\ \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} &= -\frac{\partial H_x}{\partial y}; \\ -\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}. \end{aligned}$$

Физически это соответствует возможности независимого распространения в цилиндрической среде двух разных типов волн.

Далее ограничимся рассмотрением уравнений (1.15) для H -волны, записывая разностные схемы по ним (параграф 1.2). Разностные схемы для случая E -волны аналогичны вплоть до переобозначения проекций и переноса диэлектрических проницаемостей и констант из одних уравнений в другие.

Цилиндрические оптические элементы находят широкое применение в оптике и изучение распространения света через них посредством численного

решения уравнений (1.15) является актуальной задачей. Большая часть вычислительных экспериментов в настоящей работе (главы 2,3) посвящены моделированию именно цилиндрических элементов.

1.1.2. Граничные условия

Проблема постановки граничных условий для уравнений (1.14), (1.15) занимает видное место при разностном решении уравнений Максвелла.

В электродинамике и оптике под граничными условиями принято понимать соотношения, связывающие поля на границе раздела двух сред [30]. Однако использование данных выражений не всегда упрощает заключение вычислительной области D в границу Γ . Более того, обязательная постановка граничных условий в данном понимании при разностном решении (1.14) или (1.15) представляется излишней. Такие условия в их традиционной электродинамической и оптической интерпретации выводятся из уравнений Максвелла, которые в рамках настоящей работы решаются численно. То есть полученное решение заведомо будет им удовлетворять, разумеется, в пределах допустимой погрешности.

При планировании вычислительного эксперимента иногда важна постановка граничных условий не на границе раздела сред, а там, где они будут способствовать сокращению длительности вычислений при сохранении адекватности модели физической реальности. Разумеется, поставленные граничные условия должны допускать ясную физическую интерпретацию, но это не означает, что их непременно следует помещать на границе раздела сред. Что, впрочем, не исключает возможности такого расположения, как будет показано ниже.

В качестве первого примера граничных условий рассмотрим случай заключения области вычислительного эксперимента в идеально проводящую оболочку (рис.1.2).

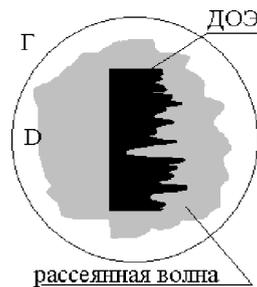


Рис. 1.2. Вычислительная область D , заключенная в идеально проводящую оболочку Γ . Рассеянная волна еще не отразилась от оболочки

Такая оболочка соответствует электрической стенке [30], на которой тангенциальные проекции электрического поля и нормальные проекции магнитного (E_{\parallel} и H_{\perp}) равны нулю, а нормальные проекции электрического и тангенциальные магнитного полей (E_{\perp} и H_{\parallel}) непрерывны.

В одномерном случае (рис. 1.3) на границах D^1 , в точках A и B верны выражения

$$E_x|_A = 0, E_x|_B = 0; \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z}\bigg|_A = 0, \frac{\partial H_y}{\partial z}\bigg|_B = 0, \quad (1.17)$$

соответствующие условию Дирихле (краевое условие первого рода) для электрического поля и условию Неймана для магнитного. При составлении разностных схем разумнее использовать (1.6), как более простое.



Рис. 1.3. Вычислительная область D^1 , заключенная между идеально проводящими средами (заштрихованы), A и B – координаты электрических стенок

Для двумерного случая (рис. 1.4) на верхней и нижней границах прямоугольной области D^2 - отрезках \overline{AB} , \overline{CE} верны выражения

$$E_x|_{\overline{AB}} = 0, E_x|_{\overline{CE}} = 0; \quad (1.18)$$

$$H_y|_{\overline{AB}} = 0, H_y|_{\overline{CE}} = 0; \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y}\bigg|_{\overline{AB}} = 0, \frac{\partial H_z}{\partial y}\bigg|_{\overline{CE}} = 0, \quad (1.20)$$

и

$$E_x|_{\overline{BC}} = 0, E_x|_{\overline{EA}} = 0; \quad (1.21)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z}\bigg|_{\overline{BC}} = 0, \frac{\partial H_y}{\partial z}\bigg|_{\overline{EA}} = 0; \quad (1.22)$$

$$H_z|_{\overline{BC}} = 0, H_z|_{\overline{EA}} = 0, \quad (1.23)$$

на левой и правой границах прямоугольной области D^2 - отрезках \overline{BC} , \overline{EA} .

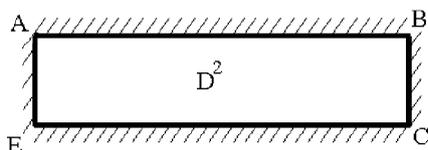


Рис. 1.4. Вычислительная область D^2 , заключенная в идеально проводящую среду с оболочкой \overline{AB} , \overline{BC} , \overline{CE} , \overline{EA}

Выражения (1.18), (1.19), (1.21), (1.23) соответствуют условию Дирихле, (1.20), (1.22) - условию Неймана. При записи разностных схем достаточно ограничиться условиями (1.18), (1.21).

В части приложений излучение действительно распространяется в планарном волноводе с идеально проводящими стенками, рассеивается на металлическом объекте (который принимается за идеальный проводник) либо дифрагирует на отражающей решетке. Тогда применение электрической стенки в качестве краевого условия соответствует физике задачи.

Для других приложений можно расположить электрическую стенку на некотором расстоянии от изучаемого оптического элемента, настолько большом, что за время вычислительного эксперимента рассеянная от объекта волна не успеет достигнуть границы вычислительной области. Несмотря на высокую вычислительную сложность такого приема, он находит применение в силу хорошей точности результата.

В работе [44] предлагается допустить отражение рассеянной волны от границы, но прервать вычисления до того, как отраженная волна достигнет подобласти, в которой формируется интересующее исследователя поле (рис. 1.5).

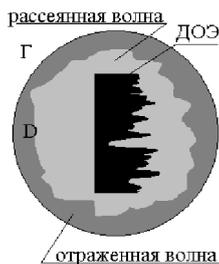


Рис. 1.5. Вычислительная область D , заключенная в идеально проводящую оболочку Γ . Рассеянная волна отразилась от оболочки, но еще не достигла области регистрации результата вычислительного эксперимента

Такой прием позволяет несколько уменьшить вычислительную область и сократить длительность эксперимента.

При исследовании монохроматического излучения длительность эксперимента выбирается с учетом того, что поле в интересующей исследователя подобласти должно устояться. В зависимости от конфигурации оптического элемента указанная длительность может варьироваться в широких пределах. Иногда требуется прохождение цуга из нескольких десятков длин волн через подобласть регистрации. Следовательно, исследователь вынужден увеличивать размеры D , прослеживая поле вдали от интересующей его подобласти, куда отправится начало цуга.

Таким образом, применение электрической стенки в качестве граничного условия для области, не содержащей хороший проводник, связано с существенным ростом вычислительных затрат.

Особого рассмотрения заслуживает случай наложения поглощающих слоев на электрическую стенку (ему посвящен параграф 1.4). Такие слои не являются частью краевых условий, но позволяют устанавливать на границе области электрическую стенку без существенного увеличения вычислительной сложности метода расчета. Отразившееся от границы области поле не покидает поглощающих слоев и не оказывает влияние на результат эксперимента.

Другой вариант постановки граничных условий применяют при исследовании симметричных оптических элементов (рис. 1.6).

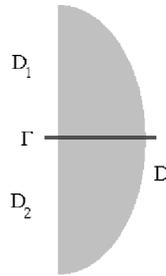


Рис. 1.6. Вычислительная область D , разделенная на две подобласти D_1, D_2 магнитной стенкой, совпадающей с главной оптической осью симметричного элемента

Ось симметрии может не являться физической границей раздела сред. Тем не менее постановка магнитной стенки на этой оси иногда позволяет исключить из рассмотрения половину вычислительной области D , ограничившись изучением процессов в подобласти D_1 либо D_2 . Например, если на элемент падает плоская однородная волна, фронт которой перпендикулярен оси симметрии оптического элемента, то поле в D_2 будет зеркальным отражением поля в D_1 .

Более того, наложение поглощающих слоев на некоторые участки границы вычислительной области позволяет в большинстве случаев использовать только магнитную стенку для конструирования оболочки области D . Исключением

является случай симметричного идеально проводящего элемента, когда изменение электрической стенки неизбежно.

Как известно [30], на магнитной стенке тангенциальные проекции электрического поля и нормальные проекции магнитного (E_{\parallel} и H_{\perp}) непрерывны, а нормальные проекции электрического и тангенциальные магнитного полей (E_{\perp} и H_{\parallel}) равны нулю.

В одномерном случае на границах D^1 , в точках A и B верны выражения

$$\left. \frac{\partial E_x}{\partial z} \right|_A = 0, \quad \left. \frac{\partial E_x}{\partial z} \right|_B = 0; \quad (1.24)$$

$$H_y|_A = 0, \quad H_y|_B = 0, \quad (1.25)$$

соответствующие условию Дирихле (краевое условие первого рода) для магнитного поля и условию Неймана для электрического. При составлении разностных схем разумнее использовать (1.25), как более простое.

Для двумерного случая на верхней и нижней границах прямоугольной области D^2 - отрезках \overline{AB} , \overline{CE} верны выражения

$$\left. \frac{\partial E_x}{\partial y} \right|_{\overline{AB}} = 0, \quad \left. \frac{\partial E_x}{\partial y} \right|_{\overline{CE}} = 0; \quad (1.26)$$

$$\left. \frac{\partial H_y}{\partial y} \right|_{\overline{AB}} = 0, \quad \left. \frac{\partial H_y}{\partial y} \right|_{\overline{CE}} = 0; \quad (1.27)$$

$$H_z|_{\overline{AB}} = 0, \quad H_z|_{\overline{CE}} = 0, \quad (1.28)$$

и

$$\left. \frac{\partial E_x}{\partial y} \right|_{\overline{BC}} = 0, \quad \left. \frac{\partial E_x}{\partial y} \right|_{\overline{EA}} = 0; \quad (1.29)$$

$$H_y|_{\overline{BC}} = 0, \quad H_y|_{\overline{EA}} = 0; \quad (1.30)$$

$$\left. \frac{\partial H_z}{\partial z} \right|_{\overline{BC}} = 0, \quad \left. \frac{\partial H_z}{\partial z} \right|_{\overline{EA}} = 0, \quad (1.31)$$

на левой и правой границах прямоугольной области D^2 - отрезках \overline{BC} , \overline{EA} .

Выражения (1.28), (1.30) соответствуют условию Дирихле, (1.26), (1.27), (1.29), (1.31) - условию Неймана. При записи разностных схем достаточно ограничиться условиями (1.28), (1.31).

Моделирование дифракции на бесконечных периодических элементах производится с использованием циклических граничных условий (рис. 1.7).

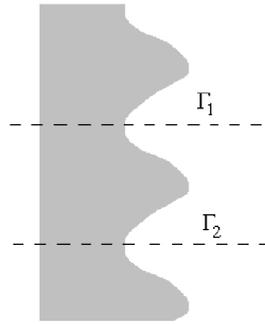


Рис. 1.7. Наложение циклических граничных условий Γ_1, Γ_2 на бесконечный периодический элемент

Как и в предыдущем случае, циклические граничные условия могут не соответствовать границе раздела двух сред. Данными условиями выделяется периодический фрагмент оптического элемента, многократное дублирование которого позволит восстановить элемент целиком. В силу этого особенностью наложения циклических граничных условий является парность циклических границ (например, Γ_1 и Γ_2 на рис. 1.8).

Наложение поглощающих слоев позволяет применять циклические условия, не комбинируя их с электрической стенкой, если область D бесконечна и периодична только вдоль одного направления. При этом распространение излучения по другим направлениям также ограничивается циклическими условиями, но с расположенными около них поглощающими слоями.

Очевидно, что любые компоненты полей при переходе от одной циклической границе к другой не изменяются, если эти границы составляют одну пару и замыкают период оптического элемента.

Так, в одномерном случае на границах D^1 , в точках A и B верны выражения

$$E_x|_A = E_x|_B; \quad (1.32)$$

$$H_y|_A = H_y|_B. \quad (1.33)$$

Для двумерного случая на верхней и нижней границах прямоугольной области D^2 - отрезках \overline{AB} , \overline{CE} верны выражения

$$E_x|_{\overline{AB}} = E_x|_{\overline{CE}}; \quad (1.34)$$

$$H_y|_{\overline{AB}} = H_y|_{\overline{CE}}; \quad (1.35)$$

$$H_z|_{\overline{AB}} = H_z|_{\overline{CE}}, \quad (1.36)$$

и

$$E_x|_{\overline{BC}} = E_x|_{\overline{EA}}; \quad (1.37)$$

$$H_y|_{\overline{BC}} = H_y|_{\overline{EA}}; \quad (1.38)$$

$$H_z|_{\overline{BC}} = H_z|_{\overline{EA}}, \quad (1.39)$$

на левой и правой границах прямоугольной области D^2 - отрезках \overline{BC} , \overline{EA} .

В случае, когда элемент характеризуется конечным числом периодов, имеет смысл провести моделирование с разными граничными условиями. Затем, сравнивая результаты, сделать вывод о допустимости рассмотрения такого элемента как бесконечного периодического. Как правило, дифракционную решетку с 10-15 периодами уже можно моделировать с помощью периодических граничных условий, считая ее бесконечной. Указанный прием позволяет многократно сократить вычислительные затраты, поместив в область D только один период, а не весь элемент целиком.

Отдельному рассмотрению подлежит случай бесконечных периодических симметричных элементов, каждый период которых симметричен относительно некоторой оси (рис. 1.8).

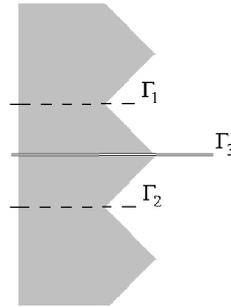


Рис. 1.8. Пример бесконечного периодического элемента.
Границы Γ_1 , Γ_2 выделяют один период, Γ_3 - ось симметрии

Очевидна достаточность рассмотрения процесса дифракции на одной половине периода: между циклической границей Γ_1 и осью симметрии Γ_3 (или границей Γ_2 и осью симметрии Γ_3). Однако наложение одной циклической границы без ее пары (Γ_1 без Γ_2 или Γ_2 без Γ_1) невозможно. Выражения (1.32) - (1.39) связывают компоненты поля на паре границ, и никак иначе.

С другой стороны, периодический симметричный элемент на каждом периоде характеризуется тремя осями симметрии, две из которых совпадают с циклическими границами. В силу этого Γ_1 и Γ_2 , являясь еще и осями симметрии, пригодны для установки магнитных стенок. Таким образом, исследователь может ограничиться подобластью, заключенной между Γ_1 и Γ_3 (Γ_2 или Γ_3), расположив на указанных границах только магнитные стенки. Рассматривает-

мая результирующая подобласть не содержит периодических граничных условий, хотя исследованию подлежит периодический оптический элемент.

Подводя итог описанию граничных условий, отметим, что в наиболее распространенных случаях довольно постановки граничных условий одного типа: циклических условий, электрической либо магнитной стенки, комбинируя их с поглощающими слоями. Исключение составляют случаи исследования идеально проводящих объектов, обладающих симметрией или периодичностью. Тогда необходимо сочетание нескольких типов условий.

1.1.3. Начальные условия

При изучении распространения цуга электромагнитной волны заданной длительности посредством решения уравнений (1.1), (1.2) принято формулировать начальные условия, как впрочем, и при решении любой нестационарной задачи.

Наиболее простым вариантом задания начального условия является предположение об отсутствии электромагнитного поля в области D к моменту начала вычислительного эксперимента. Если даже какое-либо стороннее поле в D присутствует, тем не менее учитывать его при численном решении (1.1), (1.2) не обязательно. Достаточно сложить известное стороннее поле с полученным в результате вычислений, воспользовавшись принципом суперпозиции.

Интересен случай, когда взаимное расположение источника излучения и оптического элемента позволяет сделать предположение о распределении величин, характеризующих поле в течение некоторого временного интервала. Например, излучение точечного источника, удаленного на расстояние L от оптического элемента, до момента времени $t=L/c$ (c – скорость света в вакууме) не успеет достигнуть элемента (рис. 1.9). Для любого момента $t_0 < t$ параметры сферической волны, излучаемой источником, можно рассчитать аналитически. В силу этого возможно использование такого заведомо известного поля в качестве начального условия, без предварительных вычислений по моделированию распространения хорошо изученной волны в вакууме.

Автор настоящей работы считает этот прием не всегда уместным. Во-первых, если распределение падающего поля непосредственно перед входной плоскостью оптического элемента известно, то уместнее реализовывать это распределение через формирование падающей волны (этому посвящен параграф 1.5 настоящей работы), а не начального условия. Такой подход не только позволит сократить длительность эксперимента, но и приведет к вычислениям на меньшей области D , вынося источник за границу Γ . Впрочем, как будет показано в параграфе 1.5, некоторым методам формирования падающей волны свойственна существенная погрешность, препятствующая их широкому применению.

Во-вторых, использование аналитического решения задачи дифракции в комбинации с численным не всегда приводит к повышению точности последне-

го. Как будет показано в параграфе 1.5, дополнительное аналитическое задание компонентов поля обуславливает существенный рост погрешности решения. Указанный эффект связан с взаимной компенсацией численных погрешностей, не происходящей при комбинированном численно-аналитическом решении.

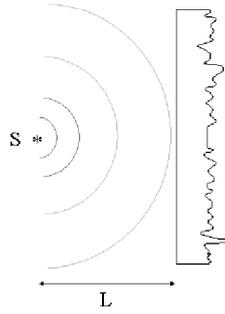


Рис. 1.9. При нахождении точечного источника S на расстоянии L от оптического элемента за начальное условие можно принять аналитически рассчитанное распределение поля при $0 < kL/c$

В общем случае при решении одномерной задачи (1.14) в качестве начального условия примем:

$$E_x(z)|_{t=0} = \Phi_1(z); \quad (1.40)$$

$$H_y(z)|_{t=0} = \Omega_1(z). \quad (1.41)$$

Для двумерной задачи (1.15) верны следующие выражения:

$$E_x(y, z)|_{t=0} = \Phi_2(y, z); \quad (1.42)$$

$$H_y(y, z)|_{t=0} = \Omega_2(y, z). \quad (1.43)$$

Разностные схемы, записанные на перекрывающихся сеточных областях, нуждаются в постановке только (1.40), (1.42).

1.2. Разностные схемы для уравнений Максвелла

Математической основой FDTD метода являются разностные уравнения и сеточные аппроксимации граничных и начальных условий [33,35], соответствующие краевым задачам из параграфа 1.1. Традиционно такие уравнения принято делить на явные и неявные по способу выражения сеточных функций. Классические схемы Yee [56] (с которых берет начало FDTD метод) допуска-

ют выражение каждой сеточной функции через значения функций на предыдущих временных слоях в явном виде. Основная особенность этих схем состоит в раздельном расположении узлов сеточной области для каждой проекции напряженностей поля. Как показано в [50], такой прием повышает порядок аппроксимации разностной схемой исходной краевой задачи.

1.2.1. Одномерный случай

В одномерном случае, при краевых условиях (1.16), на область вычислительного эксперимента D^1 ($0 < t \leq T$, $0 \leq z \leq L_z$) традиционно [50] накладывается сеточная область D_h^1 , в узлах которой $\{(t_m, z_k): t_m = mh_t, m=0, 1, \dots, M=T/h_t, z_k = kh_z, k=0, \dots, K=L_z/h_z\}$ определена сеточная проекция электрического поля на ось X - $E_{x_k}^m$. Сеточная проекция магнитного поля на ось Y - $H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5}$ определена в узлах $\{(t_{m+0,5}, z_{k+0,5}): t_{m+0,5} = (m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, z_{k+0,5} = (k+0,5)h_z, k=0, \dots, K-1\}$. При этом индекс k меняется в пределах D_h^1 , обозначая узлы по пространству, m - по времени. Расстояния между узлами задаются пространственным (h_z) и временным (h_t) шагами сетки. Сеточное значение диэлектрической проницаемости (ϵ_k) характеризует изучаемый оптический элемент. На рис. 1.10 представлено расположение узлов D_h^1 в пространстве, без учета временной координаты.

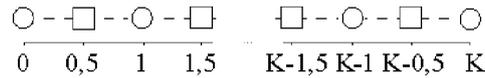


Рис. 1.10. Сеточная область D_h^1 без учета дискретизации по времени. Окружностям соответствуют проекции $E_{x_k}^m$, квадратам - $H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5}$

Тогда для системы (1.14) принято записывать следующий разностный аналог:

$$\mu_0 \frac{H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{k+0,5}}^{m-0,5}}{h_t} = - \frac{E_{x_{k+1}}^m - E_{x_k}^m}{h_z}; \quad (1.44)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_k \frac{E_{x_k}^{m+1} - E_{x_k}^m}{h_t} = - \frac{H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{k-0,5}}^{m+0,5}}{h_z}. \quad (1.45)$$

На рис. 1.11 представлен дифференциальный шаблон, соответствующий (1.44), (1.45).

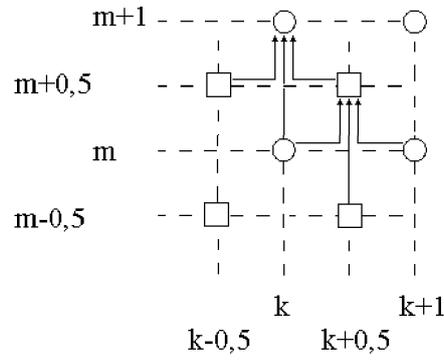


Рис. 1.11. Дифференциальный шаблон для построения (1.44)-(1.45). Окружностям соответствуют проекции электрического поля $E_{x_k}^m$, квадратам – магнитного $H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5}$

Задавая на D_h^1 граничные условия Дирихле (1.16), положим

$$E_{x_0}^m = 0 \text{ и } E_{x_K}^m = 0 \text{ при } 0 \leq m \leq M. \quad (1.46)$$

Начальное условие (1.40), (1.41) на D_h^1 записывается как

$$E_{x_k}^0 = \Phi_1(kh_z) \quad (1 \leq k \leq K-1). \quad (1.47)$$

Сеточная проекция магнитного поля не участвует в формировании граничных и начальных условий (1.16), (1.40), (1.41) в силу структуры области D_h^1 , не предусматривающей расположение узлов $(t_{m+0,5}, z_{k+0,5})$ на любой своей границе.

При задании граничного условия (1.25) необходимо наложить на D^1 сеточную область \bar{D}_h^1 , в узлах которой $\{(t_m, z_{k+0,5}): t_m = mh_t, m=0, 1, \dots, M=T/h_t, z_{k+0,5} = (k+0,5)h_z, k=1, \dots, K=L_z/h_z\}$ определена сеточная проекция электрического поля на ось X - $E_{x_{k+0,5}}^m$. Сеточная проекция магнитного поля на ось Y - $H_{y_k}^{m+0,5}$ определена в узлах $\{(t_{m+0,5}, z_k): t_{m+0,5} = (m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, z_k = kh_z, k=0, \dots, K\}$. На рис. 1.12 представлено расположение узлов \bar{D}_h^1 в пространстве, без учета временной координаты.



Рис. 1.12. Сеточная область \bar{D}_h^1 без учета дискретизации по времени. Окружностям соответствуют проекции $E_{x_{k+0,5}}^m$, квадратам – $H_{y_k}^{m+0,5}$

Переопределение сеточной области связано с наложением на границы $z=0$ и $z=L_z$ узлов магнитного поля

$$H_{y_0}^{m+0,5} = 0 \text{ и } H_{y_z}^{m+0,5} = 0 \quad (0 \leq m \leq M-1), \quad (1.48)$$

в отличие от условия (1.46), которое подразумевало наложение на границы узлов электрического поля. Начальное условие (1.40), (1.41) на \bar{D}_h^1 записывается как

$$E_{x_{k+0,5}}^0 = \Phi_1((k+0,5)h_z) \quad (0 \leq k \leq K-1). \quad (1.49)$$

В данном случае при записи краевых условий не используется сеточная напряженность электрического поля, а в записи начального условия не участвует магнитное поле.

Тогда для системы (1.14) с краевыми условиями (1.25) разностный аналог примет вид

$$\mu_0 \frac{H_{y_k}^{m+0,5} - H_{y_k}^{m-0,5}}{h_t} = - \frac{E_{x_{k+0,5}}^m - E_{x_{k-0,5}}^m}{h_z}; \quad (1.50)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{k+0,5} \frac{E_{x_{k+0,5}}^{m+1} - E_{x_{k+0,5}}^m}{h_t} = - \frac{H_{y_{k+1}}^{m+0,5} - H_{y_k}^{m+0,5}}{h_z}. \quad (1.51)$$

На рис. 1.13 представлен дифференциальный шаблон, соответствующий (1.50), (1.51).

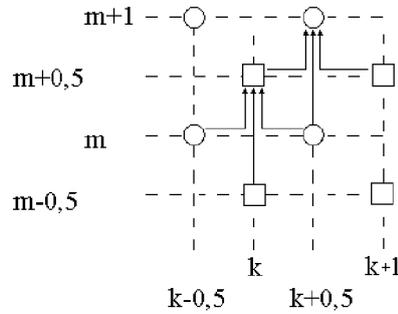


Рис. 1.13. Дифференциальный шаблон для построения (1.50)-(1.51). Окружностям соответствуют проекции электрического поля $E_{x_{k+0,5}}^m$, квадратам – магнитного $H_{y_k}^{m+0,5}$

Реализация циклического граничного условия (1.32), (1.33) требует наложения на D^1 сеточной области \bar{D}_h^1 (рис. 1.14), в узлах которой $\{(t_m, z_k): t_m = mh_t, m=0, 1, \dots, M=T/h_t, z_k = kh_z, k=0, \dots, K-1 (K=L_z/h_z)\}$ определена сеточная проекция электрического поля на ось X - $E_{x_k}^m$. Сеточная проекция магнитного поля на

ось Y - $H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5}$ определяется в узлах $\{(t_{m+0,5}, z_{k+0,5}): t_{m+0,5}=(m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, z_{k+0,5}=(k+0,5)h_z, k=0, \dots, K-1\}$.

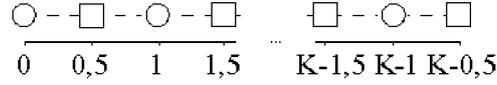


Рис. 1.14. Сеточная область \tilde{D}_h^1 без учета дискретизации по времени.

Окружностям соответствуют проекции $E_{x_k}^m$, квадратам - $H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5}$

В отличие от D_h^1 , область \tilde{D}_h^1 не содержит узла для $E_{x_k}^m$ в силу его избыточности, ведь циклическое условие подразумевает равенство напряженностей полей на $z=0$ и $z=L_z$. Запись разностных уравнений при реализации (1.32), (1.33) совпадает с (1.44), (1.45), кроме узла $k=0$ (при определении электрического поля) и $k=K-1$ (при определении магнитного). Для них верно:

$$\mu_0 \frac{H_{y_{K-0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{K-0,5}}^{m-0,5}}{h_t} = - \frac{E_{x_0}^m - E_{x_{K-1}}^m}{h_z}; \quad (1.52)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_k \frac{E_{x_0}^{m+1} - E_{x_0}^m}{h_t} = - \frac{H_{y_{0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{K-0,5}}^{m+0,5}}{h_z}. \quad (1.53)$$

Начальное условие (1.40), (1.41) на \tilde{D}_h^1 записывается как $E_{x_k}^0 = \Phi_1(kh_z)$ ($0 \leq k \leq K-1$).

Вычислительные процедуры, связанные с предложенными схемами, основываются на чередовании временных слоев: сеточные функции на следующем временном слое выражаются исключительно через функции на предыдущих двух слоях (по свойству явных разностных схем). Так, уравнения (1.44)-(1.11) удобно решать в виде

$$H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5} = H_{y_{k+0,5}}^{m-0,5} - \frac{h_t}{\mu_0 h_z} (E_{x_{k+1}}^m - E_{x_k}^m); \quad (1.54)$$

$$E_{x_k}^{m+1} = E_{x_k}^m - \frac{h_t}{\varepsilon_0 \varepsilon_k h_z} (H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{k-0,5}}^{m+0,5}), \quad (1.55)$$

а (1.50)-(1.51) переписав как

$$H_{y_k}^{m+0,5} = H_{y_k}^{m-0,5} - \frac{h_t}{\mu_0 h_z} (E_{x_{k+0,5}}^m - E_{x_{k-0,5}}^m); \quad (1.56)$$

$$E_{x_{k+0,5}}^{m+1} = E_{x_{k+0,5}}^m - \frac{h_t}{\varepsilon_0 \varepsilon_{k+0,5} h_z} (H_{y_{k+1}}^{m+0,5} - H_{y_k}^{m+0,5}). \quad (1.57)$$

Соответственно (1.52) и (1.53) примут вид

$$H_{y_{k-0,5}}^{m+0,5} = H_{y_{k-0,5}}^{m-0,5} - \frac{h_t}{\mu_0 h_z} (E_{x_0}^m - E_{x_{k-1}}^m); \quad (1.58)$$

$$E_{x_0}^{m+1} = E_{x_0}^m - \frac{h_t}{\varepsilon_0 \varepsilon_k h_z} (H_{y_{0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{k-0,5}}^{m+0,5}). \quad (1.59)$$

Достоинством алгоритмов решения (1.54)-(1.57) является возможность их векторизации. Вычисления на одном временном слое по (1.54),(1.56) выражаются через одну операцию сложения векторов электрического поля и одну операцию скаляр [20] (триаду [31]) со скаляром $-\frac{h_t}{\mu_0 h_z}$. Для (1.55), (1.57) после

сложения векторов магнитного поля и перед скаляр с $-\frac{h_t}{\varepsilon_0 h_z}$ добавляется операция покомпонентного деления результата сложения на вектор значений ε_k , где $1 \leq k \leq K-1$ при (1.55) или $\varepsilon_{k+0,5}$, где $0 \leq k \leq K-1$ при (1.57).

Известно, что разностная схема (1.44)-(1.47) аппроксимирует исходную дифференциальную задачу (1.14) с порядком $O(h_t^2, h_z^2)$ и устойчива при условии

$\frac{h_t}{h_z} \leq \frac{1}{c}$ [50] (c – скорость света в рассматриваемой среде). Очевидно, что две другие схемы: (1.48)-(1.51) и (1.44), (1.45), (1.47), (1.52), (1.53) характеризуются тем же порядком аппроксимации и условием устойчивости, как полученные на основе (1.44)-(1.47) модификациями сеточной области. Сместив в шаблоне на рис. 1.13 подпись под вертикальными пунктирными линиями на одну позицию вправо, получим шаблон на рис. 1.11.

1.2.2 Двумерный случай

На двумерную область вычислительного эксперимента D^2 ($0 < t \leq T$, $0 \leq y \leq L_y$, $0 \leq z \leq L_z$) традиционно накладывается сеточная область D_h^2 , в узлах которой $\{(t_m, y_j, z_k): t_m = mh_t, m=0, 1, \dots, M=T/h_t, y_j = jh_y, j=0, \dots, J=L_y/h_y, z_k = kh_z, k=0, \dots, K=L_z/h_z\}$ определена сеточная проекция электрического поля на ось X - $E_{x_{j,k}}^m$.

Сеточная проекция магнитного поля на ось Z - $H_{z_{j+0,5,k}}^{m+0,5}$ определена в узлах $\{(t_{m+0,5}, y_{j+0,5}, z_k): t_{m+0,5} = (m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, y_{j+0,5} = (j+0,5)h_y, j=0, \dots, J-1, z_k = kh_z, k=1, \dots, K-1\}$ и проекция магнитного поля на Y - $H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$ в узлах $\{(t_{m+0,5},$

$y_j, z_{k+0,5}$: $t_{m+0,5}=(m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, y_j=jh_y, j=1, \dots, J-1, z_{k+0,5}=(k+0,5)h_z, k=0, \dots, K-1$. На рис. 1.15 представлено расположение узлов D_h^2 в пространстве, без учета временной координаты.

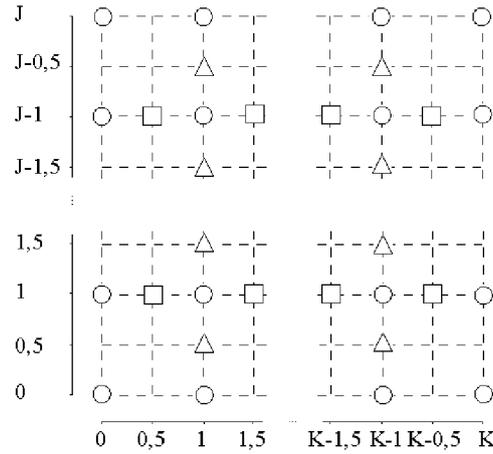


Рис. 1.15. Сеточная область D_h^2 без учета дискретизации по времени. Окружностям соответствуют проекции $E_{x_j,k}^m$, треугольникам - $H_{z_{j+0,5},k}^{m+0,5}$, квадратам - $H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$

В предложенной области индексы j, k обозначают узлы по пространству (направления Y и Z), m – по времени. Расстояния между узлами задаются пространственными (h_y и h_z) и временным (h_t) шагами сетки. Сеточное значение диэлектрической проницаемости ($\epsilon_{j,k}$) характеризует изучаемый оптический элемент.

Тогда для системы (1.15) принято записывать следующий разностный аналог:

$$\mu_0 \frac{H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,k+0,5}}^{m-0,5}}{h_t} = - \frac{E_{x_{j,k+1}}^m - E_{x_{j,k}}^m}{h_z}; \quad (1.60)$$

$$\mu_0 \frac{H_{z_{j+0,5},k}^{m+0,5} - H_{z_{j+0,5},k}^{m-0,5}}{h_t} = \frac{E_{x_{j+1},k}^m - E_{x_{j,k}}^m}{h_y}; \quad (1.61)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_{j,k} \frac{E_{x_{j,k}}^{m+1} - E_{x_{j,k}}^m}{h_t} = \frac{H_{z_{j+0,5},k}^{m+0,5} - H_{z_{j-0,5},k}^{m+0,5}}{h_y} - \frac{H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,k-0,5}}^{m+0,5}}{h_z}. \quad (1.62)$$

Задавая на D_h^2 граничные условия Дирихле (1.18), (1.21), положим

$$\begin{aligned} E_{x_0,k}^m = 0 \text{ и } E_{x_j,k}^m = 0 \text{ при } 0 \leq m \leq M \text{ и } 0 \leq k \leq K; \\ E_{x_j,0}^m = 0 \text{ и } E_{x_j,K}^m = 0 \text{ при } 0 \leq m \leq M \text{ и } 0 \leq j \leq J. \end{aligned} \quad (1.63)$$

Начальное условие (1.42) на D_h^2 записывается как

$$E_{x_j,k}^0 = \Phi_2(jh_y, kh_z) \quad (1 \leq j \leq J-1, 1 \leq k \leq K-1). \quad (1.64)$$

Сеточные проекции магнитного поля не участвуют в формировании граничных и начальных условий (1.18), (1.21), (1.42)-(1.42) в силу структуры области D_h^2 , не предусматривающей расположение узлов $(t_{m+0,5}, y_j, z_{k+0,5})$ и $(t_{m+0,5}, y_{j+0,5}, z_k)$ на любой своей границе (рис. 1.12).

При задании граничного условия (1.28), (1.31) необходимо наложить на D^2 сеточную область \bar{D}_h^2 (рис. 1.16), в узлах которой $\{(t_m, y_{j+0,5}, z_{k+0,5}): t_m = mh_t, m=0, 1, \dots, M=T/h_t, y_{j+0,5}=(j+0,5)h_y, j=0, \dots, J-1 (J=L_y/h_y), z_{k+0,5}=(k+0,5)h_z, k=0, \dots, K-1 (K=L_z/h_z)\}$ определена сеточная проекция электрического поля на ось X - $E_{x_{j+0,5},k+0,5}^m$. Сеточная проекция магнитного поля на ось Z - $H_{z_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$ определена в узлах $\{(t_{m+0,5}, y_j, z_{k+0,5}): t_{m+0,5}=(m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, y_j=jh_y, j=0, \dots, J, z_{k+0,5}=(k+0,5)h_z, k=0, \dots, K-1\}$ и проекция магнитного поля на Y - $H_{y_{j+0,5},k}^{m+0,5}$ в узлах $\{(t_{m+0,5}, y_{j+0,5}, z_k): t_{m+0,5}=(m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, y_{j+0,5}=(j+0,5)h_y, j=0, \dots, J-1, z_k=kh_z, k=0, \dots, K\}$.

Переопределение сеточной области связано с наложением на границы $z=0$ и $z=L_z$ узлов для $H_{y_{j+0,5},k}^{m+0,5}$, а на $y=0$ и $y=L_y$ узлов для $H_{z_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$:

$$\begin{aligned} H_{y_{j+0,5},0}^{m+0,5} = 0 \text{ и } H_{y_{j+0,5},K}^{m+0,5} = 0 \text{ при } 0 \leq m \leq M-1 \text{ и } 0 \leq j \leq J-1; \\ H_{z_0,k+0,5}^{m+0,5} = 0 \text{ и } H_{z_{J,k+0,5}}^{m+0,5} = 0 \text{ при } 0 \leq m \leq M-1 \text{ и } 0 \leq k \leq K-1, \end{aligned} \quad (1.65)$$

в отличие от условия (1.63), которое подразумевало наложение на границы узлов электрического поля. Начальное условие (1.42)-(1.43) на \bar{D}_h^2 записывается как

$$E_{x_{j+0,5},k+0,5}^0 = \Phi_2((j+0,5)h_y, (k+0,5)h_z) \quad (0 \leq j \leq J-1, 0 \leq k \leq K-1). \quad (1.66)$$

В данном случае при записи краевых условий не используется сеточная напряженность электрического поля, а в записи начального условия не участвует магнитное поле.

Тогда для системы (1.15) принято записывать следующий разностный аналог:

$$\mu_0 \frac{H_{y_{j+0,5},k}^{m+0,5} - H_{y_{j+0,5},k}^{m-0,5}}{h_t} = - \frac{E_{x_{j+0,5},k+0,5}^m - E_{x_{j+0,5},k-0,5}^m}{h_z}; \quad (1.67)$$

$$\mu_0 \frac{H_{z_j, k+0,5}^{m+0,5} - H_{z_j, k+0,5}^{m-0,5}}{h_t} = \frac{E_{x_{j+0,5}, k+0,5}^m - E_{x_{j-0,5}, k+0,5}^m}{h_y}; \quad (1.68)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{j+0,5, k+0,5} \frac{E_{x_{j+0,5}, k+0,5}^{m+1} - E_{x_{j+0,5}, k+0,5}^m}{h_t} = \frac{H_{z_{j+1}, k+0,5}^{m+0,5} - H_{z_j, k+0,5}^{m+0,5}}{h_y} - \frac{H_{y_{j+0,5}, k+1}^{m+0,5} - H_{y_{j+0,5}, k}^{m+0,5}}{h_z}. \quad (1.69)$$

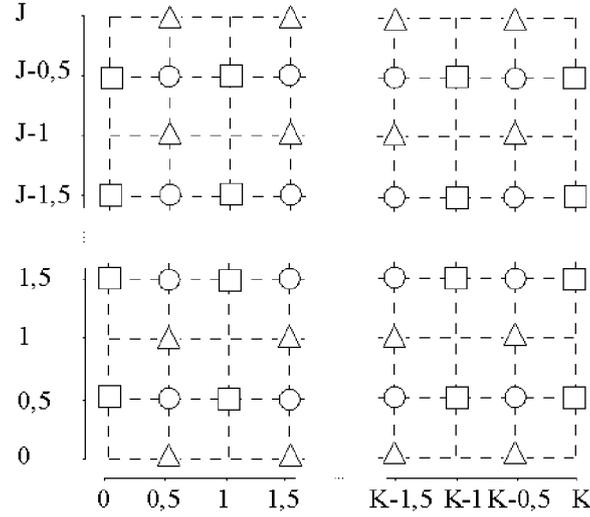


Рис. 1.16. Сеточная область \bar{D}_h^2 без учета дискретизации по времени. Окружностям соответствуют проекции $E_{x_{j+0,5}, k+0,5}^m$, треугольникам - $H_{z_j, k+0,5}^{m+0,5}$, квадратам - $H_{y_{j+0,5}, k}^{m+0,5}$.

Реализация циклического граничного условия (1.34)-(1.39) требует наложения на D^2 сеточной области \bar{D}_h^2 (рис. 1.17), в узлах которой $\{(t_m, y_j, z_k): t_m = mh_t, m=0, 1, \dots, M=T/h_t, y_j = jh_y, j=0, \dots, J-1 (J=L_y/h_y), z_k = kh_z, k=0, \dots, K-1 (K=L_z/h_z)\}$ определена сеточная проекция электрического поля на ось X - $E_{x_j, k}^m$.

Сеточная проекция магнитного поля на ось Z - $H_{z_{j+0,5}, k}^{m+0,5}$ определена в узлах $\{(t_{m+0,5}, y_{j+0,5}, z_k): t_{m+0,5} = (m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, y_{j+0,5} = (j+0,5)h_y, j=0, \dots, J-1, z_k = kh_z, k=0, \dots, K-1\}$ и проекция магнитного поля на Y - $H_{y_j, k+0,5}^{m+0,5}$ в узлах $\{(t_{m+0,5}, y_j, z_{k+0,5}): t_{m+0,5} = (m+0,5)h_t, m=0, 1, \dots, M-1, y_j = jh_y, j=0, \dots, J-1, z_{k+0,5} = (k+0,5)h_z, k=0, \dots, K-1\}$.

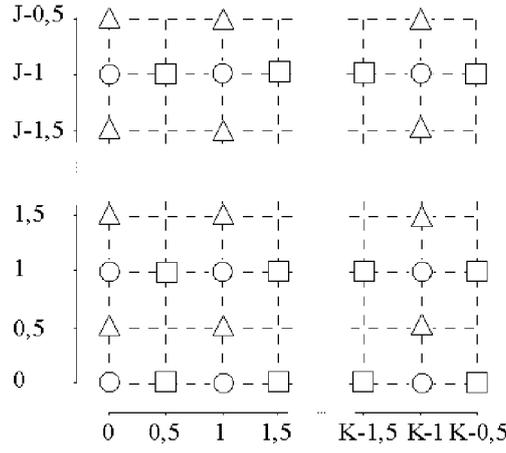


Рис. 1.17. Сеточная область \tilde{D}_h^2 без учета дискретизации по времени. Окружностям соответствуют проекции $E_{x_j,k}^m$, треугольникам – $H_{z_{j+0,5,k}}^{m+0,5}$, квадратам – $H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$

В отличие от D_h^2 , область \tilde{D}_h^2 не содержит узлов для $E_{x_j,k}^m$ ($0 \leq j \leq J$) и $E_{x_j,k}^m$ ($0 \leq k \leq K$) в силу их избыточности, ведь циклическое условие подразумевает равенство напряженностей полей на противоположных границах. Кроме того, на \tilde{D}_h^2 появились дополнительные узлы для $H_{z_{j+0,5,0}}^{m+0,5}$ ($0 \leq j \leq J-1$) и $H_{y_{0,k+0,5}}^{m+0,5}$ ($0 \leq k \leq K-1$), участвующие в определении электрического поля, ранее задающего электрическую стенку на D_h^2 .

Запись разностных уравнений при циклических краевых условиях совпадает с (1.60)-(1.62) со следующими исключениями. Вместо (1.60) для $0 \leq j \leq J-1$ имеет место

$$\mu_0 \frac{H_{y_{j,K-0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,K-0,5}}^{m-0,5}}{h_t} = - \frac{E_{x_{j,0}}^m - E_{x_{j,K-1}}^m}{h_z}. \quad (1.70)$$

Далее, (1.61) при $0 \leq k \leq K-1$ принимает вид

$$\mu_0 \frac{H_{z_{j-0,5,k}}^{m+0,5} - H_{z_{j-0,5,k}}^{m-0,5}}{h_t} = \frac{E_{x_{0,k}}^m - E_{x_{j-1,k}}^m}{h_y}. \quad (1.71)$$

Для (1.62) при $1 \leq j \leq J-1$ справедливо

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{j,0} \frac{E_{x_{j,0}}^{m+1} - E_{x_{j,0}}^m}{h_t} = \frac{H_{z_{j+0,5,0}}^{m+0,5} - H_{z_{j-0,5,0}}^{m+0,5}}{h_y} - \frac{H_{y_{j,0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,K-0,5}}^{m+0,5}}{h_z}, \quad (1.72)$$

при $1 \leq k \leq K-1$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{0,k} \frac{E_{x_{0,k}}^{m+1} - E_{x_{0,k}}^m}{h_t} = \frac{H_{z_{0,5,k}}^{m+0,5} - H_{z_{j-0,5,k}}^{m+0,5}}{h_y} - \frac{H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,k-0,5}}^{m+0,5}}{h_z} \quad (1.73)$$

и для узла $j=0, k=0$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{0,0} \frac{E_{x_{0,0}}^{m+1} - E_{x_{0,0}}^m}{h_t} = \frac{H_{z_{0,5,0}}^{m+0,5} - H_{z_{j-0,5,0}}^{m+0,5}}{h_y} - \frac{H_{y_{0,0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{0,j-0,5}}^{m+0,5}}{h_z}. \quad (1.74)$$

Начальное условие для \tilde{D}_h^2 формируется как $E_{x_{j,k}}^0 = \Phi_2(jh_y, kh_z)$ ($0 \leq j \leq J-1, 0 \leq k \leq K-1$).

Перенос в правую часть выражений (1.60)-(1.62), (1.67)-(1.69) и (1.70)-(1.74) все сеточные функции, заданные на предыдущих временных слоях, получаем вычислительные процедуры для расчета полей по трем представленным схемам.

Векторизация таких процедур связана с записью строчно либо столбцово ориентированных алгоритмов [20] (в зависимости от способа хранения матриц в памяти вычислительной машины), что сокращает длительность обращения к памяти ЭВМ. Запись векторных алгоритмов в двумерном случае представляется весьма актуальной в силу высокой вычислительной сложности приводимых процедур. Условимся записывать поля в память ЭВМ в виде матриц (двумерных массивов), первый индекс которых указывает на строку, второй на столбец. Для определенности положим первым индексом j (соответствует направлению Y в сеточных областях), вторым k (направление Z).

При хранении полей вышеуказанным способом по столбцам (например, при использовании языка Fortran) вычисления по (1.60) и (1.67) сопровождаются операциями по вычислению K и $K-1$ векторов $H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$ ($1 \leq j \leq J-1$) и $H_{y_{j+0,5,k}}^{m+0,5}$ ($0 \leq j \leq J-1$) соответственно. Каждая операция по вычислению значений одного такого вектора состоит из векторного сложения с последующим *сахру*. При этом скаляр в *сахру* равен $-\frac{h_t}{h_z \mu_0}$, а длина результирующих векторов составляет $J-1$ при вычислениях по (1.60) и J при (1.67).

Реализация вычислений по (1.61) и (1.68) сопряжена с выполнением операций по вычислению $K-1$ и K векторов $H_{z_{j+0,5,k}}^{m+0,5}$ ($0 \leq j \leq J-1$) и $H_{z_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$ ($1 \leq j \leq J-1$) соответственно. Также как и в предыдущем случае, каждая операция по вычислению значений одного такого вектора состоит из векторного сложения с последующим *сахру*. Скаляр в *сахру* равен $\frac{h_t}{h_y \mu_0}$, а длина результирующих векторов составляет J при вычислениях по (1.61) и $J-1$ при (1.68).

Аналогично, говоря о вычислениях по (1.62) и (1.69), следует иметь в виду вычисление $K-1$ и K векторов $E_{x_{j,k}}^{m+1}$ ($1 \leq j \leq J-1$) и $E_{x_{j+0,5,k+0,5}}^{m+1}$ ($0 \leq j \leq J-1$) длины $J-1$ и J . При этом для формирования каждого вектора необходимо выполнить два векторных сложения сеточных компонент магнитного поля H_y и H_z (складываются вектора одной проекции), два покомпонентных деления результатов этих сложений на значение вектора $\varepsilon_{j,k}$ ($1 \leq j \leq J-1$) для (1.62) и $\varepsilon_{k+0,5,j+0,5}$ ($0 \leq j \leq J-1$) для (1.69), два умножения результирующих векторов на скаляры $\frac{h_x}{\varepsilon_0 h_y}$ и $-\frac{h_x}{\varepsilon_0 h_z}$.

После чего получившиеся вектора складывают между собой и с вектором $E_{x_{j,k}}^m$ ($1 \leq j \leq J-1$) при вычислениях по (1.62) и $E_{x_{j+0,5,k+0,5}}^m$ ($0 \leq j \leq J-1$) при вычислениях по (1.69).

В случае, когда $J < K$, строчно ориентированные алгоритмы считаются предпочтительнее столбцово ориентированных, как допускающие операции с векторами большей длины, обеспечивающими лучшую загрузку конвейера.

При хранении полей в двумерных массивах по строкам (например, при использовании языка С) вычисления по (1.60) и (1.67) сопровождаются операциями по вычислению $J-1$ и J векторов $H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$ ($0 \leq k \leq K-1$) и $H_{y_{j+0,5,k}}^{m+0,5}$ ($1 \leq k \leq K-1$) соответственно. Каждая операция по вычислению значений одного такого вектора состоит из векторного сложения с последующим *сахру*. При этом скаляр в *сахру* равен $-\frac{h_x}{h_z \mu_0}$, а длина результирующих векторов составляет K при вычислениях по (1.60) и $K-1$ при (1.67).

Реализация вычислений по (1.61) и (1.68) сопряжена с выполнением операций по вычислению J и $J-1$ векторов $H_{z_{j+0,5,k}}^{m+0,5}$ ($1 \leq k \leq K-1$) и $H_{z_{j,k+0,5}}^{m+0,5}$ ($0 \leq k \leq K-1$) соответственно. Также как и в предыдущем случае, каждая операция по вычислению значений одного такого вектора состоит из векторного сложения с последующим *сахру*. Скаляр в *сахру* равен $\frac{h_x}{h_y \mu_0}$, а длина результирующих векторов составляет $K-1$ при вычислениях по (1.61) и K при (1.68).

Аналогично, говоря о вычислениях по (1.62) и (1.69), следует иметь в виду вычисление $J-1$ и J векторов $E_{x_{j,k}}^{m+1}$ ($1 \leq k \leq K-1$) и $E_{x_{j+0,5,k+0,5}}^{m+1}$ ($0 \leq k \leq K-1$) длины $K-1$ и K . При этом для формирования каждого вектора необходимо выполнить два векторных сложения сеточных компонент магнитного поля H_y и H_z (складываются вектора одной проекции), два покомпонентных деления результатов этих сложений на значение вектора $\varepsilon_{j,k}$ ($1 \leq k \leq K-1$) для (1.62) и $\varepsilon_{k+0,5,j+0,5}$ ($0 \leq k \leq K-1$)

для (1.69), два умножения результирующих векторов на скаляры $\frac{h_t}{\varepsilon_0 h_y}$ и $-\frac{h_t}{\varepsilon_0 h_z}$. После чего получившиеся вектора складывают между собой и с вектором $E_{x_j, k}^m$ ($1 \leq k \leq K-1$) при вычислениях по (1.62) и $E_{x_{j+0.5, k+0.5}}^m$ ($0 \leq k \leq K-1$) при вычислениях по (1.69).

Не следует полагать, что форма исследуемого оптического элемента императивно определяет выбор алгоритмического языка программирования. То есть при исследовании прохождения излучения через ДОЭ, вытянутого вдоль оси Y , уместна реализация исключительно столбцово ориентированных алгоритмов. И в противоположность, при исследовании оптических элементов, вытянутых вдоль оси Z , разумно использовать только строчно ориентированные методы. На самом деле исследователь волен использовать любую форму записи (строчно либо столбцово ориентированную), меняя направления осей и переписывая при необходимости разностные уравнения в новой координатной системе.

Отдельный интерес представляют блочные алгоритмы, наиболее рациональным образом оперирующие с кэш памятью вычислительной машины. Их реализация связана с хранением полей в двумерных массивах по блокам, что требует разработки алгоритмов записи (и чтения) значений сеточных функций в память ЭВМ, отличных от стандартных строчно или столбцово ориентированных.

Известно, что разностная схема (1.60)-(1.64) аппроксимирует исходную дифференциальную задачу (1.15) с порядком $O(h_t^2, h_y^2, h_z^2)$ и устойчива при условии $h_t \sqrt{\frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2}} \leq \frac{1}{c}$ [50]. Очевидно, что две другие схемы: (1.65)-(1.69) и (1.60)-(1.62), (1.70)-(1.75), (1.64) характеризуются тем же порядком аппроксимации и условием устойчивости, как полученные на основе (1.60)-(1.62) модификациями сеточной области.

1.3. Переход к комплексной амплитуде

Изучая распространение монохроматического света через дифракционные оптические элементы, исследователь, как правило, ожидает результаты моделирования в виде комплексной амплитуды напряженности электрического поля. Строго говоря, в вычислительном эксперименте не порождается монохроматическая волна, так как до начала эксперимента излучение в области могло

отсутствовать, но к выбранному моменту T поле в интересующей нас части области можно с высокой точностью считать монохроматическим. В вычислительной практике известны несколько способов перехода от временной области к частотной при реализации разностного метода решения уравнений Максвелла.

В работе [51], одной из первых, касающихся рассматриваемого вопроса, интенсивность результирующего электрического поля находилась сложением интенсивностей на разных временных слоях, выбранных на определенном промежутке, с последующим усреднением. Указанный прием аналогичен принципу действия интегральных датчиков интенсивности, применяемых при постановке натуральных оптических экспериментов, и характеризуется простотой реализации. Однако такой подход не позволяет получить информацию о фазе комплексной амплитуды электрического поля и связан с большим количеством дополнительных арифметических операций. Исследователю придется задавать усреднение интенсивностей на временном интервале, равном как минимум одному периоду колебания электрического поля в устоявшемся режиме.

Использование преобразования Фурье для перехода в частотную область [44] позволяет получить информацию не только о модуле комплексной амплитуды напряженности электрического поля, но и о фазе. При этом необходимо учитывать значения сеточной функции напряженности на всех временных сечениях, связанных с периодом колебания поля в устоявшемся режиме. Таким образом, второй способ перехода в частотную область требует еще больших вычислительных затрат, отличаясь от первого необходимостью применения преобразования Фурье. Указанная особенность является серьезным препятствием для построения эффективных векторных и параллельных процедур реализации разностного решения в силу сложности векторизации и параллелизации быстрого преобразования Фурье.

Идея третьего способа перехода в частотную область известна достаточно давно [47], однако не была реализована в доступной литературе как алгоритм. Это делается в данной работе.

Следуя [9], представим поле в виде комплексной амплитуды $\dot{E}_x = \dot{E}_{x_{re}} + i\dot{E}_{x_{im}}$, полагая

$$E_x = \operatorname{Re}\{\dot{E}_x \exp(-i\omega t)\}, \quad (1.75)$$

где ω - циклическая частота. Тогда

$$E_x = \dot{E}_{x_{re}} \operatorname{Cos} \omega t + \dot{E}_{x_{im}} \operatorname{Sin} \omega t.$$

Определить интенсивность поля возможно посредством двух замеров E_x в разные моменты времени, решая уравнения

$$E_{x1} = \dot{E}_{x_{re}} \text{Cos } \omega t_1 + \dot{E}_{x_{im}} \text{Sin } \omega t_1 \quad (1.76)$$

$$E_{x2} = \dot{E}_{x_{re}} \text{Cos } \omega t_2 + \dot{E}_{x_{im}} \text{Sin } \omega t_2 \quad (1.77)$$

Условимся брать t_1 и $t_2 = T$ такими, что

$$\omega t_2 = \omega t_1 + \pi/2.$$

Учитывая, что при этом $\text{Cos } \omega t_1 = \text{Sin } \omega t_2$ и $\text{Sin } \omega t_1 = -\text{Cos } \omega t_2$, вместо (1.76) и (1.77) получим

$$E_{x1} = \dot{E}_{x_{re}} \text{Sin } \omega t_2 - \dot{E}_{x_{im}} \text{Cos } \omega t_2,$$

$$E_{x2} = \dot{E}_{x_{re}} \text{Cos } \omega t_2 + \dot{E}_{x_{im}} \text{Sin } \omega t_2.$$

Возведя в квадрат оба последних уравнения, сложим их:

$$(E_{x1})^2 + (E_{x2})^2 = (\dot{E}_{x_{re}})^2 + (\dot{E}_{x_{im}})^2 = I, \quad (1.78)$$

где I – искомая величина, пропорциональная интенсивности света.

Для монохроматической волны начало отсчета, от которого откладывается t_2 , можно выбирать произвольно. В дальнейшем удобно брать $\omega t_2 = \pi/2 + 2\pi l$, где $l \in N_0$, при котором $\text{Cos } \omega t_2 = 0$, $\text{Sin } \omega t_2 = 1$. Тогда

$$\dot{E}_{x_{re}} = E_{x1}, \quad \dot{E}_{x_{im}} = E_{x2}.$$

Изложенное описывает переход в частотную область, от E_x к I , при котором можно ограничиться выбором двух временных слоев E_{x1} и E_{x2} , не используя БПФ на последних слоях по времени с дальнейшим усреднением результата. Такой подход существенно упрощает реализацию алгоритма и сокращает длительность вычислений по нему.

Развитие предложенного метода перехода [10] связано с заменой (1.75) на

$$E_x = \text{Re} \left\{ \dot{E}_x \exp(-i(\omega t - \pi/2)) \right\}, \quad (1.79)$$

что позволяет использовать (1.79) при задании падающей волны, согласуя такое задание с наиболее распространенным вариантом начального условия - отсутствием поля в области D до начала вычислительного эксперимента. Действительно, полагая в (1.75) $t=0$ получаем $E_x=0$ при $\dot{E}_x=1$.

Вместо (1.76), (1.77) запишем

$$E_x(t_1) = \dot{E}_{x_{re}} \text{Sin } \omega t_1 - \dot{E}_{x_{im}} \text{Cos } \omega t_1, \quad (1.80)$$

$$E_x(t_2) = \dot{E}_{x_{re}} \text{Sin } \omega t_2 - \dot{E}_{x_{im}} \text{Cos } \omega t_2. \quad (1.81)$$

Примем далее t_1 и $t_2 = T$ такими, что $\omega t_2 = \omega t_1 + \pi/2$. Подставляя последнее выражение в (1.80), (1.81), получим

$$E_x(t_1) = -\dot{E}_{x_{re}} \text{Cos } \omega T - \dot{E}_{x_{im}} \text{Sin } \omega T,$$

$$E_x(t_2) = \dot{E}_{x_e} \text{Sin } \omega T - \dot{E}_{x_m} \text{Cos } \omega T.$$

Решая эту систему относительно \dot{E}_x найдем

$$\dot{E}_{x_e} = E_x(t_2) \text{Sin } \omega T - E_x(t_1) \text{Cos } \omega T,$$

$$\dot{E}_{x_m} = -E_x(t_1) \text{Sin } \omega T - E_x(t_2) \text{Cos } \omega T.$$

В отличие от способа, изложенного в [9], данный подход позволяет учитывать фазу комплексной амплитуды падающей волны, если такая волна определяется представлением (1.79). Такой учет особенно важен при декомпозиции вычислительной области (о которой пойдет речь в четвертой главе), невозможной при других вариантах перехода в частотную область.

1.4. Наложение поглощающих слоев

Задача ограничения вычислительной области занимает важное место при разностном решении уравнений Максвелла. В большинстве случаев исследователю необходимо представить оптический элемент либо в окружении однородной среды (например, свободного пространства), либо расположенным на границе раздела двух полубесконечных сред. Это связано с общей тенденцией физики к редукционизму, когда изучаемые явления стремятся выделить из окружающего мира и рассмотреть отдельно от внешних воздействий. Такой подход в большинстве случаев представляется наиболее целесообразным.

Исследователь вынужден представлять за вычислительной областью бесконечное однородное пространство, простирающееся в любом выбранном направлении, или границу раздела двух таких пространств. В противном случае, процессы, происходящие за областью, окажут воздействие на процессы внутри. Например, покидающая область волна отразится от внешнего объекта и вернется обратно.

Вместе с тем, проводя моделирование на вычислительной технике, характеризующейся заданным быстродействием, выделенной областью памяти и располагая ограниченными запасом времени, исследователь не может решать разностную задачу на бесконечном пространстве.

К счастью, этого и не требуется, если интересующая область (распределение поля в которой принимается за решение задачи) конечна, а процессы в такой области протекают на заданном временном интервале.

В этом случае достаточно проследить распространение рассеянного поля в однородном бесконечном пространстве за границами интересующей области лишь там, куда оно успеет распространиться за время эксперимента.

Понятно желание исследователя вовсе не заботиться о судьбе излучения, покидающего окрестности изучаемого оптического элемента. Возможно ли

наложение граничных условий либо соответствующее структурирование прилегающей к границе подобласти, позволяющее покидающему D излучению не возвращаться обратно?

Ни одно из краевых условий, записанных в параграфе 1.1, не обеспечивает такого эффекта. Более того, любое из этих условий не позволяет рассеянному излучению покинуть область эксперимента, что приводит к неизбежному искажению результата. Далее рассматриваются подходы, позволяющие избежать такого искажения.

1.4.1. Постановка поглощающих граничных условий и наложение поглощающих слоев

Первый эффективный подход к решению поставленной задачи основывается на факторизации волнового оператора. В двумерном случае, записывая оператор Даламбера в виде

$$G \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \equiv D_x^2 + D_z^2 - \frac{1}{c^2} D_t^2,$$

ищут его представление как

$$G \equiv G^+ G^-,$$

где

$$G^+ \equiv D_z + \frac{D_t}{c} \sqrt{1 - S^2}$$

соответствует распространению волны внутрь двумерной вычислительной области от границы АЕ (рис. 1.4), а

$$G^- \equiv D_z - \frac{D_t}{c} \sqrt{1 - S^2} \tag{1.82}$$

соответствует распространению за область. При этом $S \equiv \frac{D_y}{D_t/c}$.

Авторы [41,50] показали, что решение на выбранной границе уравнения $G^-U = 0$, где функция U характеризует электромагнитное поле, эквивалентно граничному условию, поглощающему волны, стремящиеся покинуть D через АЕ (рис. 1.4). При этом поглощаются все плоские волны, падающие на границу под любыми углами. Для границы ВС (рис. 1.4) поглощающим условием будет уравнение $G^+U = 0$. Аналогично ищется факторизация оператора Даламбера при постановке поглощающих условий на АВ и ЕС (рис. 1.4)

Практическая реализация развиваемого подхода связана с разложением радикала из (1.82) в ряд. Например, приняв

$$\sqrt{1-S^2} \cong 1 - \frac{1}{2}S^2, \quad (1.83)$$

записывают

$$G^- \cong D_z - \frac{D_t}{c} + \frac{cD_y^2}{2D_t}.$$

Тогда поглощающие краевые условия примут вид

$$\frac{\partial^2 U}{\partial z \partial t} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \frac{c}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0; \text{ на АЕ,} \quad (1.84)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial z \partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{c}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0; \text{ на ВС,} \quad (1.85)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial y \partial t} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \frac{c}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0; \text{ на АВ,} \quad (1.86)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial y \partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{c}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0. \text{ на СЕ.} \quad (1.87)$$

Разностную аппроксимацию (1.84)-(1.87) для решения уравнений Максвелла связывают с именем Мура (Mur) [45], поглощающими граничными условиями Мура также нередко называют и весь подход в целом.

«Узким местом» метода является разложение (1.83), многократно уточнявшееся [50] и все же остающееся источником погрешности.

Более совершенный подход не предполагает постановки граничных условий, отличных от приведенных в параграфе 1.1. Поглощение покидающего вычислительную область поля достигается за счет расположения у границ Γ особой среды, не пропускающей электромагнитное излучение и не отражающей его.

Один из методов конструирования подобной среды связан с представлением уравнений Максвелла в виде [38]

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j}; \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{j}^*, \end{aligned} \quad (1.88)$$

где \mathbf{j}^* есть плотность магнитного тока, равная $\sigma^* \mathbf{H}$, σ^* - магнитная проводимость среды. При соблюдении условия

$$\sigma/\epsilon_0 = \sigma^*/\mu_0 \quad (1.89)$$

волновой импеданс в такой среде для $\epsilon=\mu=1$ равен волновому импедансу в вакууме, следовательно, отражения от поглощающего слоя (при падении на него

плоской волны под произвольным углом) не будет. В самом слое энергия волны перетечет в энергию токов и поле затухнет.

В одномерном случае уравнения (1.88) запишутся как

$$\begin{aligned}\varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x &= -\frac{\partial H_y}{\partial z}; \\ \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} + \sigma^* H_y &= -\frac{\partial E_x}{\partial z}.\end{aligned}\quad (1.90)$$

Двумерный вариант выглядит аналогично:

$$\begin{aligned}\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} + \sigma^* H_y &= -\frac{\partial E_x}{\partial z}; \\ \mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma^* H_z &= \frac{\partial E_x}{\partial y}; \\ \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x &= \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}.\end{aligned}$$

Представляя распространение и затухание поля вдоль разных направлений отдельными уравнениями, производят расщепление электрической компоненты и проводимостей, записывая [38]:

$$\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} + \sigma_z^* H_y = -\frac{\partial (E_{xy} + E_{xz})}{\partial z}; \quad (1.91)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma_y^* H_z = \frac{\partial (E_{xy} + E_{xz})}{\partial y}; \quad (1.92)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial H_z}{\partial y}; \quad (1.93)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = -\frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad (1.94)$$

где $E_x = E_{xy} + E_{xz}$, а условие (1.89) должно соблюдаться для соответствующих проекций проводимостей.

Тогда затухание по направлению Z обеспечат отличные от нуля проводимости σ_z^* , σ_z при решении (1.91), (1.94). По направлению Y - σ_y^* , σ_y при решении (1.92), (1.93).

Расположение поглощающих слоев в одномерном случае (рис. 1.18) соответствует помещению области в оболочку.

В вычислительной практике принято задавать проводимости, определяя их значения в поглощающих слоях по правилу

$$\sigma = \sigma_{\max} \left(\frac{L - L_z + z}{L} \right)^q, \text{ для правого слоя } (L_z - L \leq z \leq L_z),$$

$$\sigma = \sigma_{\max} \left(\frac{L - z}{L} \right)^q, \text{ для левого слоя } (0 \leq z \leq L),$$

где $q \in R$. Таким образом, проводимость в слое возрастает по направлению к границе области и достигает на ней максимального значения. Магнитная проводимость σ^* определяется через σ по (1.89).



Рис. 1.18. Расположение поглощающих слоев в одномерном случае.
Слой заштрихованы, L_z – длина вычислительной области,
 L – толщина поглощающих слоев

Двумерному случаю соответствует размещение поглощающих слоев, представленное на рис 1.19 [38,50].

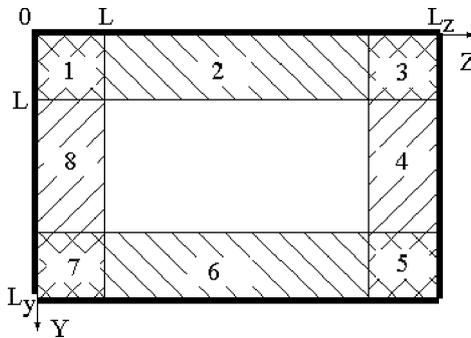


Рис. 1.19. Расположение поглощающих слоев в двумерном случае.
Слой заштрихованы, L_z – длина вычислительной области по направлению Z ,
 L_y – длина вычислительной области по направлению Y ,
 L – толщина поглощающих слоев

В подобластях 2 и 6 (рис. 1.19) отличны от нуля компоненты σ_y и σ_y^* . В подобластях 4 и 8 компоненты σ_z и σ_z^* , в 1,3,5,7 обе проекции σ и σ^* отличны от нуля (обеспечивается затухание волны, распространяющейся по любому направлению).

Тогда

$$\sigma_y = \sigma_{\max} \left(\frac{L-y}{L} \right)^q, \text{ при } 0 \leq y \leq L \text{ в подобластях } 1,2,3,$$

$$\sigma_y = \sigma_{\max} \left(\frac{L-L_y+y}{L} \right)^q, \text{ при } L_y-L \leq y \leq L_y \text{ в подобластях } 5,6,7,$$

$$\sigma_z = \sigma_{\max} \left(\frac{L-z}{L} \right)^q, \text{ при } 0 \leq z \leq L \text{ в подобластях } 1,8,7,$$

$$\sigma_z = \sigma_{\max} \left(\frac{L-L_z+z}{L} \right)^q, \text{ при } L_z-L \leq z \leq L_z \text{ в подобластях } 3,4,5.$$

Любая проекция магнитной проводимости определяется через соответствующую проекцию электрической проводимости по (1.89).

1.4.2. Разностная аппроксимация уравнений Максвелла в поглощающих слоях

Расположение у границ вычислительной области поглощающих слоев позволяет устанавливать любые краевые условия из 1.1. Традиционно принято задавать электрическую стенку.

Тогда в одномерном случае для решения (1.90) записывают на D_h^1 явную разностную схему Y_{ee} в области поглощения:

$$\begin{aligned} \mu_0 \frac{H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{k+0,5}}^{m-0,5}}{h_t} + \sigma_{k+0,5}^* H_{y_{k+0,5}}^{m-0,5} &= - \frac{E_{x_{k+1}}^m - E_{x_k}^m}{h_z}; \\ \varepsilon_0 \varepsilon_k \frac{E_{x_k}^{m+1} - E_{x_k}^m}{h_t} + \sigma_k E_{x_k}^m &= - \frac{H_{y_{k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{k-0,5}}^{m+0,5}}{h_z}, \end{aligned} \quad (1.95)$$

где индексы $1 \leq k \leq L/h_z$ соответствуют левому поглощающему слою для электрического поля и $0 \leq k \leq L/h_z - 1$ для магнитного, а $K-L/h_z \leq k \leq K-1$ - правому слою для электрического поля и $K-L/h_z \leq k \leq K-1$ для магнитного (рис. 1.10, 1.18).

В двумерном случае для (1.91)-(1.94) на D_h^2 в области поглощения записывают явную разностную схему Y_{ee} :

$$\begin{aligned} \mu_0 \frac{H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,k+0,5}}^{m-0,5}}{h_t} + \sigma_{z_{j,k+0,5}}^* H_{y_{j,k+0,5}}^{m-0,5} &= \\ = - \frac{E_{xy_{j,k+1}}^m + E_{xz_{j,k+1}}^m - E_{xy_{j,k}}^m - E_{xz_{j,k}}^m}{h_z}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mu_0 \frac{H_{z_{j+0,5,k}}^{m+0,5} - H_{z_{j+0,5,k}}^{m-0,5}}{h_t} + \sigma_{z_{j+0,5,k}}^* H_{z_{j+0,5,k}}^{m-0,5} = \\
& = \frac{E_{xy_{j+1,k}}^m + E_{xy_{j+1,k}}^m - E_{xz_{j,k}}^m - E_{xz_{j,k}}^m}{h_y}, \\
& \varepsilon_0 \varepsilon_{j,k} \frac{E_{xy_{j,k}}^{m+1} - E_{xy_{j,k}}^m}{h_t} + \sigma_{y_{j,k}} E_{xy_{j,k}}^m = \frac{H_{z_{j+0,5,k}}^{m+0,5} - H_{z_{j-0,5,k}}^{m+0,5}}{h_y}, \\
& \varepsilon_0 \varepsilon_{j,k} \frac{E_{xz_{j,k}}^{m+1} - E_{xz_{j,k}}^m}{h_t} + \sigma_{z_{j,k}} E_{xz_{j,k}}^m = - \frac{H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,k-0,5}}^{m+0,5}}{h_z}.
\end{aligned} \tag{1.96}$$

Ограничим сеточную подобласть 1 (рис. 1.15, 1.19) индексами $1 \leq j \leq L/h_y$ и $1 \leq k \leq L/h_z$ - для E_x (обоих компонент расщепления), $1 \leq j \leq L/h_y$ и $0 \leq k \leq L/h_z - 1$ - для H_y , $0 \leq j \leq L/h_y - 1$ и $1 \leq k \leq L/h_z$ - для H_z ; подобласть 2 индексами $1 \leq j \leq L/h_y$ и $L/h_z + 1 \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для E_x , $1 \leq j \leq L/h_y$ и $L/h_z \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для H_y , $0 \leq j \leq L/h_y - 1$ и $L/h_z + 1 \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для H_z ; подобласть 3 индексами $1 \leq j \leq L/h_y$ и $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для E_x , $1 \leq j \leq L/h_y$ и $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для H_y , $0 \leq j \leq L/h_y - 1$ и $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для H_z ; подобласть 4 индексами $L/h_y + 1 \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для E_x , $L/h_y + 1 \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для H_y , $L/h_y \leq j \leq J - L/h_y - 1$, $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для H_z ; подобласть 5 индексами $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для E_x , $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для H_y , $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$, $K - L/h_z \leq k \leq K - 1$ - для H_z ; подобласть 6 индексами $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $L/h_z + 1 \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для E_x , $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $L/h_z \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для H_y , $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $L/h_z + 1 \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для H_z ; подобласть 7 индексами $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $1 \leq k \leq L/h_z$ - для E_x , $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $0 \leq k \leq L/h_z - 1$ - для H_y , $J - L/h_y \leq j \leq J - 1$ и $1 \leq k \leq L/h_z$ - для H_z ; подобласть 8 индексами $L/h_y + 1 \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $1 \leq k \leq L/h_z$ - для E_x , $L/h_y + 1 \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $0 \leq k \leq L/h_z - 1$ - для H_y , $L/h_y \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $1 \leq k \leq L/h_z$ - для H_z . Тогда сеточная подобласть без поглощения расположится в интервале $L/h_y + 1 \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $L/h_z + 1 \leq k \leq K - L/h_z - 1$ для E_x , $L/h_y + 1 \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $L/h_z \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для H_y , $L/h_y \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $L/h_z + 1 \leq k \leq K - L/h_z - 1$ - для H_z . Толщина поглощающих слоев L подбирается кратной шагам дискретизации (с тем, чтобы результаты всех делений были целыми числами).

Неявные разностные схемы записывают аналогично, слагаемые с проводимостями помещаются на главную диагональ матриц сеточных СЛАУ.

1.4.3. Объединение поглощающих слоев при векторизации вычислений

Векторные алгоритмы, обсуждавшиеся в 1.2.1.1 и 1.2.1.2, применимы и при решении (1.95), (1.96) со следующими дополнениями.

В одномерном случае алгоритм решения уравнений (1.44), (1.45) оперировал вектором сеточной функции напряженности электрического поля длины

$K-1$ и вектором сеточной функции напряженности магнитного поля длины K . С наложением поглощающих слоев длина векторов сократится, а их количество увеличится в силу необходимости раздельного решения уравнений (1.90) в поглощающих слоях и (1.44), (1.45) в подобласти без поглощения. А именно, положив $w=L/h_z$ за число узлов сеточной области, приходящееся на поглощающие слои, далее будем оперировать двумя векторами длины w и одним длины $K-1-2w$ при вычислении электрического поля и двумя векторами длины w и одним длины $K-2w$ при вычислении магнитного поля.

Уменьшение длины векторов, как правило, приводит к увеличению длительности вычислений [20] (даже при неизменной вычислительной сложности алгоритма), усложняет запись и отладку программ.

Стремясь сохранить прежнюю длину векторов, можно записать уравнения (1.90) не только в поглощающих слоях, но и на всей сеточной области D_h^1 , положив в непоглощающей среде значения проводимостей равными нулю. Однако указанный прием характеризуется необходимостью выделения дополнительной памяти для хранения введенных значений проводимостей (хоть они и равны нулю) и увеличением числа арифметических операций (даже если это операции с участием нулей).

Другой подход [8] хотя и не сводит количество векторов к одному для каждой компоненты поля, но позволяет снизить его с трех до двух.

Запишем для границы вычислительной области циклическое краевое условие вместо постановки электрической стенки и будем решать уравнения (1.95) на \tilde{D}_h^1 вместо D_h^1 .

Такой прием позволителен в силу свойства поглощающих слоев не пропускать электромагнитное излучение. До краев области поле все равно не дойдет, следовательно, какое из трех граничных условий там расположено - не важно для точности вычислений.

Кроме того, указанная замена позволяет взглянуть на вычислительную область несколько иначе: за точку $z=0$ можно выбрать любой узел \tilde{D}_h^1 , ведь круговая область не имеет краев. Сместив начало координат на L вправо (рис. 1.18), придем к области на рис. 1.20, которая тоже соответствует \tilde{D}_h^1 .



Рис. 1.20. Расположение поглощающих слоев в одномерном случае при постановке циклических граничных условий и смещении начала координат, $2L$ – толщина объединенных поглощающих слоев

В результате два поглощающих слоя длины L объединяются в один, длины $2L$, для которого

$$\sigma = \sigma_{\max} \left(\frac{2L - L_z + z}{L} \right)^q, \text{ для левой части слоя } (L_z - 2L \leq z \leq L_z - L),$$

$$\sigma = \sigma_{\max} \left(\frac{L_z - z}{L} \right)^q, \text{ для правой части слоя } (L_z - L \leq z \leq L_z).$$

Тогда, при решении (1.44), (1.45) в непоглощающей подобласти и (1.90) в объединенном поглощающем слое, будем оперировать двумя векторами сеточной функции напряженности электрического поля длины $K-1-2w$, $2w$ и двумя векторами сеточной функции напряженности магнитного поля длины $K-2w$, $2w$.

Переходя к двумерному случаю, заметим, что после наложения поглощающих слоев вектора электрического поля и обоих компонент магнитного разбиваются на три подвектора, независимо от способа хранения: строчно- либо столбцово-ориентированного. При строчно-ориентированном способе разбиение производится вдоль направления Z , при столбцовом вдоль Y .

В отличие от одномерного случая, увеличение объема выделяемой памяти ЭВМ при организации вычислений будет связано не только с необходимостью хранения значений проводимостей (которых в схеме (1.60)-(1.62) не было), но и с размещением в памяти расщепленного на две компоненты (в поглощающих слоях) электрического поля. Следовательно, при реализации решения оставить прежнюю длину векторов посредством хранения и арифметических операций с дополнительными нулевыми компонентами придется размещать в памяти значения проницаемостей и расщепленные компоненты электрического поля в непоглощающей подобласти.

В поисках компромиссного варианта запишем (1.96) на \tilde{D}_h^2 вместо D_h^2 , заменив электрические стенки на границе циклическими условиями. В одномерном случае такая замена соответствовала переходу от отрезка к кольцу, в двумерном происходит переход от прямоугольника к тору.

Сместив начало координат на L вправо и вниз (рис. 1.19), придем к области на рис. 1.21, которая тоже соответствует \tilde{D}_h^2 .

В слой A (рис. 1.21) объединятся слои 8,4 (рис. 1.19); в слой B объединятся слои 1,3,5,7; в C – 2,6. Для проекции электрической проводимости на ось Y верны равенства:

$$\sigma_y = \sigma_{\max} \left(\frac{2L - L_y + y}{L} \right)^q \text{ в верхней части слоев } C, B \text{ } (L_y - 2L \leq y \leq L_y - L),$$

$$\sigma_y = \sigma_{\max} \left(\frac{L_y - y}{L} \right)^q \text{ в нижней части слоев } C, B \text{ } (L_y - L \leq y \leq L_y).$$

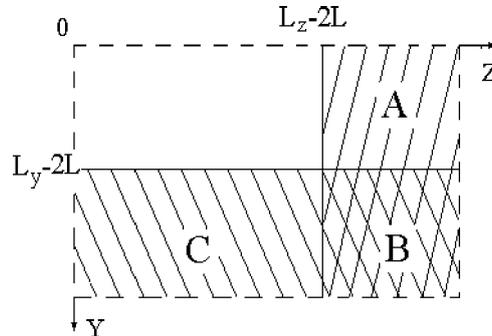


Рис. 1.21. Расположение поглощающих слоев в двумерном случае при постановке циклических граничных условий и смещении начала координат, $2L$ – толщина объединенных поглощающих слоев

Проекция электрической проводимости на Z удовлетворяет выражениям

$$\sigma_z = \sigma_{\max} \left(\frac{2L - L_z + z}{L} \right)^q ; \text{ в левой части слоев } A, B \text{ } (L_z - 2L \leq z \leq L_z - L),$$

$$\sigma_z = \sigma_{\max} \left(\frac{L_z - z}{L} \right)^q , \text{ в правой части слоев } A, B \text{ } (L_z - L \leq z \leq L_z) .$$

Тогда, при решении (1.60)-(1.62) в непоглощающей подобласти и (1.96) в поглощающих слоях, будем оперировать двумя векторами при задании значений сеточных функций двух проекций магнитного поля. Электрическое поле в непоглощающей подобласти задается одним вектором и двумя векторами расщепленных компонент в поглощающих слоях.

Предложенная компоновка поглощающих слоев в сеточных областях \tilde{D}_h^1 и \tilde{D}_h^2 позволяет не только сократить длительность вычислений, но и существенно упростить написание и отладку программного кода. Ранее, при моделировании процесса дифракции в двумерной области, требовалось записать разностные уравнения в восьми поглощающих слоях и одной непоглощающей

подобласти, также согласовать решения на всех двенадцати границах слоев и подобласти.

Например, при переходе из слоя 8 (рис. 1.19) в центральную подобласть по направлению Z сеточная проекция магнитного поля на ось Y требует определения не по формулам (1.96) для поглощающего слоя и не по (1.60)-(1.62) для непоглощающей подобласти, а нуждается в записи разностного уравнения, содержащего электрическое поле центральной подобласти и расщепленные компоненты из слоя 8:

$$\mu_0 \frac{H_{y_{j,k+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{j,k+0,5}}^{m-0,5}}{h_t} = - \frac{E_{x_{j,k+1}}^m - E_{xy_{j,k}}^m - E_{xz_{j,k}}^m}{h_z},$$

где $L/h_y + 1 \leq j \leq J - L/h_y - 1$ и $k = L/h_z$.

После объединения слоев решение производится в трех поглощающих слоях и одной непоглощающей подобласти с согласованием полей на восьми границах (рис. 1.21). Число подобластей снизилось более чем вдвое, границ – на треть; примерно вдвое сократится программный код, записанный на языках Fortran 90 и Matlab, допускающих организацию векторных вычислений.

1.4.4. Универсальные сеточные области

Кроме простоты, представленные компоновки областей \tilde{D}_h^1 и \tilde{D}_h^2 характеризуются высокой гибкостью. Одномерную или двумерную разностную схему Уее на пересекающихся прямоугольных сеточных областях с любыми граничными условиями из параграфа 1.1 можно свести к записи уравнений на \tilde{D}_h^1 либо \tilde{D}_h^2 . Подтверждая это, рассмотрим ряд примеров, наиболее часто встречающихся при моделировании дифракции лазерного излучения на элементах микрооптики. При этом упомянутые сеточные области с произведенным объединением поглощающих слоев будем называть универсальными.

Пример 1.1. Ограниченный цилиндрический элемент

Один из наиболее распространенных случаев – исследование конечного цилиндрического оптического элемента, полностью помещенного в D^2 . Предположим, что параметры поглощающих слоев (значения проводимостей и величина показателя степени q) были подобраны ранее для идеально проводящей оболочки, стандартно применяющейся при решении такой задачи. Действительно, замена электрических стенок на циклические условия приведет к некоторому (пусть и небольшому) падению точности.

На практике, уменьшая толщину поглощающих слоев, их параметры подбирают таким образом, чтобы ослабленная рассеянная волна доходила до электрической стенки, отражалась от нее и окончательно поглощалась на обратном пути через слой. Замена циклическим условием электрической стенки приведет к смене фазы обратно распространяющейся волны, которая теперь не отразилась от идеального проводника, а пришла из противоположного края вычислительной области (особенности тороидальной структуры сеточной области \tilde{D}_h^2). Волна с новой фазой поглотится в слое, рассчитанном на иное поле, менее полно.

Если новый подбор параметров поглощающих слоев для достижения прежней точности представляется исследователю утомительным или он предпочитает пользоваться стандартными величинами, то следующее небольшое дополнение к алгоритму расчета исправит ситуацию.

Поместим электрическую стенку не на границы области (там уже поставлено циклическое условие), а в поглощающие слои. Для этого представим, что трансформации в тор с объединением поглощающих слоев подвергается не область \tilde{D}_h^2 , а D_h^2 . Объединим электрические стенки на границах $z=0, z=L_z$ ($0 \leq y \leq L_y$), получив цилиндрическую поверхность; затем объединим электрические стенки на границах $y=0, y=L_y$ ($0 \leq z \leq L_z$), получив тор; после чего сместим начало координат на L вправо и вниз (рис. 1.21). В результате получена универсальная сеточная область (рис. 1.21) с расположенными на отрезках $y=L_y-L, 0 \leq z \leq L_z$ и $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$ электрическими стенками (рис. 1.22).

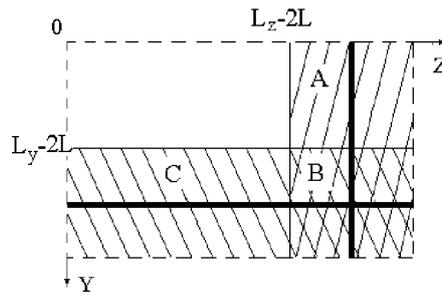


Рис. 1.22. Расположение электрических стенок на универсальной сеточной области при исследовании изолированного цилиндрического оптического элемента.
Электрические стенки обозначены толстыми отрезками

Производя вычисления на такой области, не следует использовать электрические и магнитные стенки как краевые условия, записывая в их окрестно-

стях разностные уравнения, отличные от (1.96); тем более, что это повысит длительность вычислений, нивелировав достигнутый за счет более удачной векторизации выигрыш.

Разумно после перехода на следующий временной слой обнулить значения сеточных функций электрического поля на указанных отрезках. Для этого достаточно умножить два соответствующих вектора на скаляр (элементарная векторная операция, производится аппаратно), равный нулю. Результаты моделирования на универсальной сеточной области после предложенной модификации алгоритма в точности совпадут с результатами моделирования на D_h^2 .

Пример 1.2. Бесконечная двумерная дифракционная решетка

Предположим, что исследуемый элемент периодичен вдоль оси Y . Тогда в универсальной сеточной области достаточно принять σ_y и σ_y^* равными нулю, чтобы слой C (рис. 1.21) не поглощал излучение, распространяющееся в направлениях Y и $-Y$, а слой B поглощал только по направлениям Z и $-Z$. При этом C фактически войдет в непоглощающую подобласть; слои A и B можно принять за один поглощающий слой. Аналогично производится модификация универсальной области при исследовании бесконечного элемента, периодичного вдоль оси Z .

Согласуя решения на традиционной сеточной области, сочетающей электрические стенки на границах $z=0, 0 \leq y \leq L_y$ и $z=L_z, 0 \leq y \leq L_y$ с циклическими краевыми условиями при $y=0, 0 \leq z \leq L_z$ и $y=L_y, 0 \leq z \leq L_z$ (рис. 1.23), и универсальной сеточной области, расположим в объединенном поглощающем слое A электрическую стенку на отрезке $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$ (рис. 1.24).

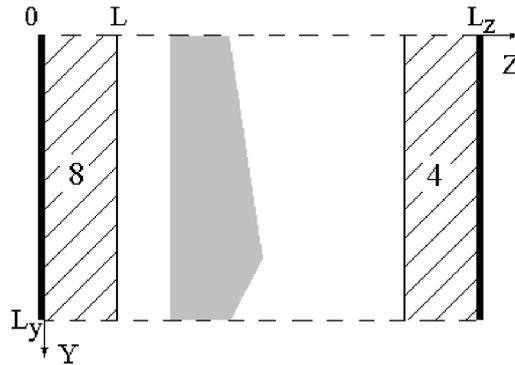


Рис. 1.23. Традиционная компоновка вычислительной области при моделировании бесконечного периодического оптического элемента (сочетание электрических стенок и циклических условий)

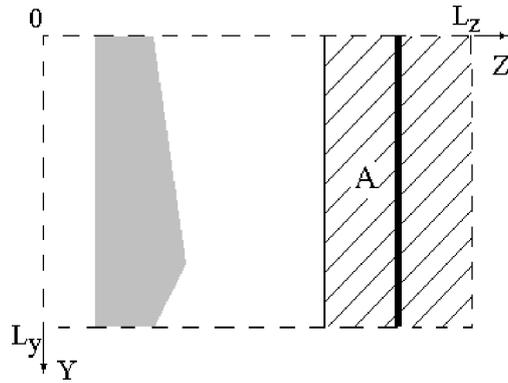


Рис. 1.24. Расположение электрических стенок на универсальной сеточной области при исследовании изолированного цилиндрического оптического элемента

Тогда два решения на указанных сетках совпадут.

Пример 1.3. Ограниченный симметричный цилиндрический элемент

При исследовании распространения излучения через ограниченный симметричный цилиндрический элемент на оси симметрии располагают магнитную стенку (параграф 1.1). Сеточная область \bar{D}_h^2 включает в себе половину такого элемента и в варианте без объединения поглощающих слоев представлена на рис. 1.25.

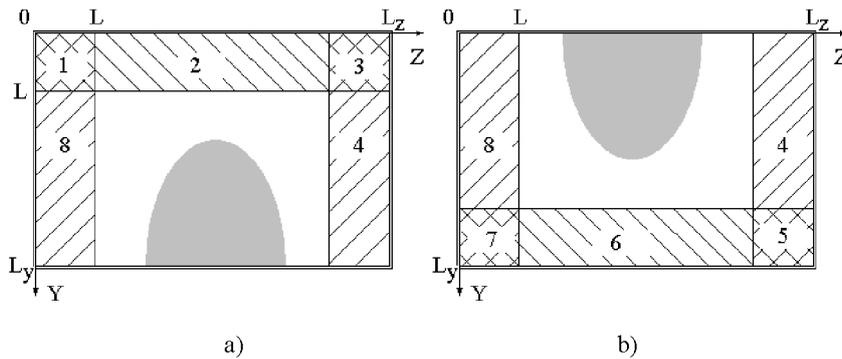


Рис. 1.25. Расположение поглощающих слоев в области \bar{D}_h^2 без их объединения. Случай (а) соответствует помещению в область верхней половины симметричного элемента, случай (б) - нижней

После объединения слоев 4 и 8 (рис. 1.25) и перехода к \bar{D}_h^2 , область вычислительного эксперимента примет вид, представленный на рис. 1.26.

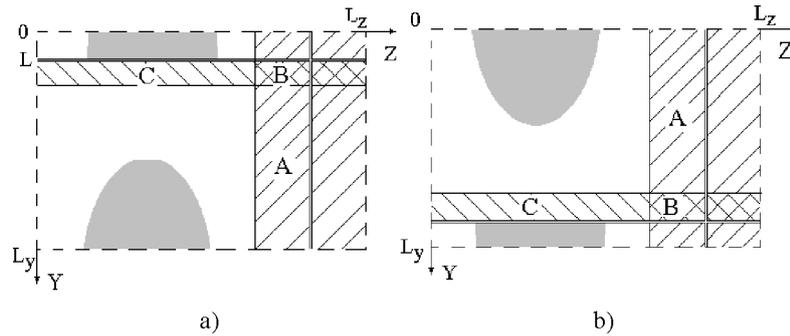


Рис. 1.26. Расположение поглощающих слоев и магнитных стенок (двойные линии) на универсальной сеточной области при моделировании симметричного элемента.

Случай (а) соответствует помещению в область верхней половины симметричного элемента, случай (б) - нижней

При этом слой 2 на рис. 1.25а переходит в слой С на рис. 1.26а, слои 1,3 после объединения переходят в В, слои 4,8 - в А. Слой 6 на рис. 1.25б переходит в слой С на рис. 1.26б, слои 5,7 после объединения переходят в В, слои 4,8 - в А.

Четыре магнитные стенки на границах \bar{D}_h^2 переходят в две стенки в области \bar{D}_h^2 , расположенные на отрезках $y=L, 0 \leq z \leq L_z$ и $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$ (для случая на рис. 1.25а) и на отрезках $y=L_y-L, 0 \leq z \leq L_z$ и $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$ (для случая на рис. 1.26б).

Как и в *Примере 1.1*, на универсальной области не следует обращаться с магнитными стенками как с граничными условиями, записывая в их окрестности новые разностные уравнения. Достаточно перед переходом к следующему слою по времени обнулить сеточные компоненты вектора проекции магнитного поля на ось Z при $y=L, 0 \leq z \leq L_z$ и $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$ (рис. 1.26а) или $y=L_y-L, 0 \leq z \leq L_z$ (рис. 1.26б); также обнулить сеточные компоненты вектора проекции магнитного поля на ось Y при $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$ (рис. 1.26а) или $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$ (рис. 1.26б).

Магнитную стенку в слоях А и В (рис. 1.26) располагать не обязательно. Окруженная с обеих сторон поглощающей средой, она не окажет определяющего влияния на результат вычислительного эксперимента. И все же ее отсутствие приведет незначительному (как правило, в третьем знаке для достаточно густых сеток) несовпадению значений напряженностей полей при решении на областях \bar{D}_h^2 и \bar{D}_h^2 . Причиной тому, как и в *Примере 1.1*, является настройка

параметров поглощающего слоя на взаимодействие рассеянной волны с магнитной стенкой. Без таковой поглощение при данных параметрах будет менее эффективным. Следует либо установить стенку, либо подобрать новые параметры слоев (поглощающих излучение, распространяющегося по направлению Z), обеспечивающие приемлемую точность. Последний вариант подразумевает разные настройки поглощения по направлениям Y (где осталась магнитная стенка) и Z (где стенка удалена).

Пример 1.4. Бесконечный периодический симметричный элемент

При рассмотрении в параграфе 1.1 граничных условий, применяемых для моделирования распространения электромагнитной волны через бесконечный периодический симметричный элемент, было сделано заключение о достаточности установки магнитных стенок на всех границах вычислительной области. Приняв за направление периодичности ось Y , расположим поглощающие слои на \bar{D}_h^2 указанным на рис. 1.27 образом.

Переход к универсальной сеточной области связан с принятием проводимостей σ_y и σ_y^* равными нулю (как в *Примере 1.2*) и размещением магнитных стенок на отрезках $y=L, 0 \leq z \leq L_z$ и $z=L_z-L, 0 \leq y \leq L_y$. Тогда вычислительная область примет вид, представленный на рис. 1.28.

Как и в предыдущих примерах, магнитную стенку в слое A (рис. 1.28) можно не устанавливать, подобрав параметры поглощающих слоев для случая без стенки.

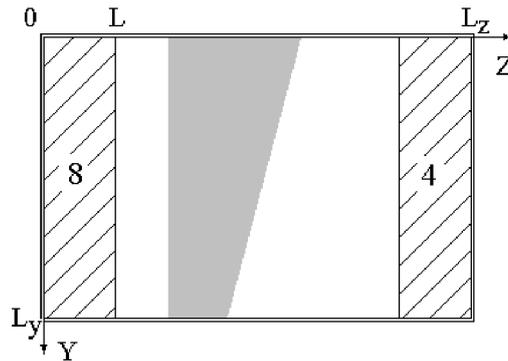


Рис. 1.27. Расположение поглощающих слоев в области \bar{D}_h^2 без их объединения в случае исследования периодического симметричного элемента

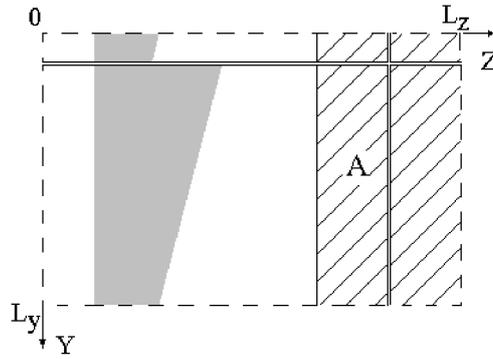


Рис. 1.28. Компонировка универсальной сеточной области в случае исследования периодического симметричного элемента

Как видно из четырех приведенных примеров, варьируя значения компонент векторов проводимостей σ , σ^* и располагая электрические либо магнитные стенки внутри \tilde{D}_h^2 , для исследования наиболее распространенных оптических элементов достаточно использовать универсальную сеточную область. Более того, один раз подобрав оптимальные параметры поглощающих слоев внутри областей A , B , C (рис. 1.21), исследователь волен вовсе не размещать на \tilde{D}_h^2 электрические стенки и размещать магнитные только в случае, когда они не находятся внутри поглощающих слоев (горизонтально расположенные магнитные стенки на рис. 1.25, 1.28). Указанная оптимизация избавит от необходимости обнуления перед переходом на новый временной слой соответствующих компонент векторов электромагнитного поля.

1.5. Формирование падающей волны

Постановка вычислительного эксперимента по моделированию распространения излучения через оптический элемент кроме наложения сеточной области и записи на ней разностных уравнений включает в себя задание приходящего извне поля, падающего на элемент.

Действительно, результат эксперимента будет зависеть не только от геометрии изучаемого оптического элемента и материала, из которого он изготовлен, но и от вида падающей электромагнитной волны - распределения комплексных амплитуд проекций ее векторов в пространстве и времени.

В отдельную задачу следует выделить согласование методики задания падающего поля, крайних условий, способа наложения поглощающих слоев и рельефа исследуемого элемента. Некоторые методики формирования падающей волны по-разному применяются при исследовании элементов, работаю-

ших на пропускание и отражение, периодических и непериодических, нанесенных на подложку либо без таковой, расположенные в свободном пространстве или сформированные на торце оптического волновода.

Выбор способа формирования падающей волны определит особенности реализации вычислений по разностным схемам. От него зависят и точность и длительность вычислительного эксперимента. Векторные и параллельные алгоритмы записываются различным образом для разных технологий задания падающего поля.

Ограничивая предметную область рамками оптики, исключим из рассмотрения методы возбуждения электромагнитного поля посредством токов, характерные для задач электродинамики в целом и теории антенн в частности [28]. Более того, абстрагируемся на время от физической природы источника излучения и связанных с этим способов задания поля.

Оставив в стороне задачу распространения импульсов, не будем касаться и проблемы их формирования и ввода в вычислительную область, хотя все приведенные ниже методики легко адаптируются для решения и этой задачи.

В современной литературе различают три основных подхода к заданию гармонического падающего поля при исследовании дифракции на оптических структурах посредством разностного решения уравнений Максвелла. Проследим их в развитии, уделяя особое внимание модификациям, применяемым при исследовании элементов микрооптики, в частности дифракционных оптических элементов.

1.5.1. Метод «жесткого» источника

Первая работа по разностному решению уравнений Максвелла в дифференциальной форме [56], вышедшая в 1966 году за авторством Yee, содержала описание способа ввода излучения в вычислительную область, впоследствии названного [50] методом «жесткого» источника (hard source).

Суть метода состоит в задании на выделенной области пространства значений векторов электромагнитного поля через аналитическое представление вида

$$G(\mathbf{x}_0) = \text{Re}[A(\mathbf{x}_0)\exp(-i(\omega t + \varphi_0))], \quad (1.97)$$

где \mathbf{x}_0 – координаты точки из выделенной области; $G(\mathbf{x}_0)$ – формируемое значение выбранной проекции напряженности компоненты электромагнитного поля в \mathbf{x}_0 перед переходом на следующий временной слой; $A(\mathbf{x}_0)$ – задаваемая комплексная амплитуда падающего поля для данной проекции; степень при экспоненте определяет фазу волны (не фазу комплексной амплитуды) с начальной фазой φ_0 , а сам множитель с экспонентой задает гармоничность падающего монохроматического поля; ω – циклическая частота; t – время; $\text{Re}[\dots]$ – операция выделения действительной части от выражения в квадратных скобках.

В одномерном случае, организуя вычисления по схемам Yee, за G достаточно принять либо электрическое поле, либо магнитное. Остановимся на первом варианте, задавая «жесткий» источник в узле k универсальной сеточной области \tilde{D}_h^1 с объединенными поглощающими слоями и разностной аппроксимацией выражения (1.75):

$$E_{x_c}^m = \operatorname{Re} \left[\exp \left(-i \left(\frac{2\pi h_i c}{\lambda} m - \pi/2 \right) \right) \right]. \quad (1.98)$$

Геометрические размеры вычислительной области и объектов на ней условимся измерять в длинах волн (если не оговорено иначе), полагая в (1.98) $\lambda=1$. Параметры дискретизации сеточной области зададим в виде пары чисел (Q, Q_t) . Первое число соответствует количеству узлов сеточной области по пространству, приходящееся на длину волны, второе – количеству узлов по времени, приходящееся на временной интервал, за который плоский волновой фронт в вакууме пройдет расстояние в одну длину волны.

Организуя постановку вычислительного эксперимента в свободном пространстве [13], примем $L_z=4\lambda$, $L=\lambda$, источник расположим в крайнем левом узле \tilde{D}_h^1 ($k=0$). За время $T=20\lambda/c$ поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим.

Выбрав в \tilde{D}_h^1 дискретизацию $(Q, Q_t)=(10, 20)$, рассмотрим распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля на области вычислительного эксперимента (рис. 1.29)

В подобласти расположения поглощающих слоев ($2 \leq z \leq 4$) поле затухает, в свободном пространстве ($0 \leq z \leq 2$) распространяется плоская однородная T -волна (рис. 1.29). Полного затухания до нулевого значения модуля комплексной амплитуды на рис. 1.29 не происходит, так как слой поглощает по всей своей длине, а рассеянное излучение проникает в слой с обеих сторон.

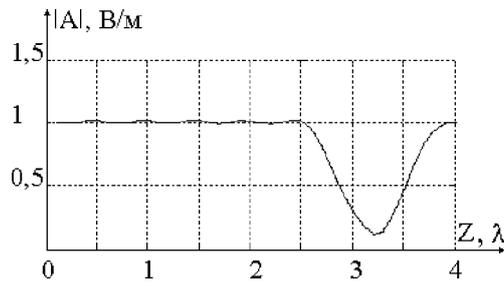


Рис. 1.29. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля $|A|$ на \tilde{D}_h^1 от «жесткого» источника

Изучая зависимость погрешностей разностного решения от параметров дискретизации (таблица 1.1), отметим сходимость разностного метода решения уравнений Максвелла к аналитическому решению для выбранных параметров вычислительного эксперимента.

Таблица 1.1. Зависимости погрешностей вычислительных экспериментов для вакуума от дискретизации сеточной области (Q, Q_t) и параметров поглощающих слоев σ_{\max} и q при «жестком» источнике

(Q, Q_t)	Параметры поглощающих слоев		Значения погрешностей
	σ_{\max} , СМ/М	Q	ε , %
(10,20)	0,018	1,5	1,3948
(20,40)	0,024	2	0,10228
(50,100)	0,032	2,5	0,03688
(100,200)	0,037	2,7	0,010405

В таблице 1.1 приведены значения равномерной погрешности

$$\varepsilon = \max_k \frac{\left| |B_k| - |A_k| \right|}{|B_k|}, \quad (1.99)$$

где $(1 \leq k \leq 2Q)$, характеризующей максимальное отклонение от аналитического решения. В выражении (1.99) величина $|B_k|$ – модуль комплексной амплитуды электрического поля при аналитическом решении ($|B_k| = 1$ В/м при (1.99)).

В двумерном случае для получения плоской однородной волны в универсальной сеточной области, зададим «жесткий» источник на отрезке $k=0$; $0 \leq j \leq J-1$

$$E_{x,y,k}^m = \operatorname{Re} \left[\exp \left(-i \left(\frac{2\pi h_y c}{\lambda} m - \pi/2 \right) \right) \right]. \quad (1.100)$$

Сохранив параметры предыдущего эксперимента, придадим области D^2 квадратную форму ($L_y=L_x$).

Результаты вычислительного эксперимента совпадут с результатами для одномерной области, так как волна распространяется вдоль направления Z .

Отметим, что в области D_h^2 задание плоской однородной волны посредством «жесткого» источника невозможно в силу разрывности напряженности электрического поля на краях D_h^2 .

На рис. 1.30 представлено распределение поля от точечного «жесткого» источника (в (1.100) $j=k=Q$) в свободном пространстве, задающего волну с цилиндрическим фронтом при параметрах дискретизации $(Q, Q_d)=(20, 40)$.

В местах расположения поглощающих слоев на универсальной сеточной области ($0 \leq y \leq 2$, $2 \leq z \leq 4$ – слой *A*; $2 \leq y \leq 4$, $2 \leq z \leq 4$ – слой *B* и $2 \leq y \leq 4$, $0 \leq z \leq 2$ – слой *C* на рис. 1.21) наблюдается ослабление поля.

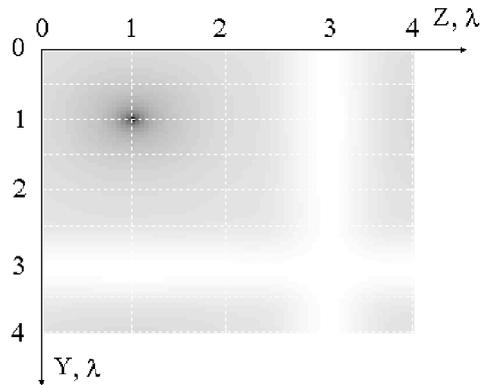


Рис 1.30. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля $|A|$ на \tilde{D}_h^2 от точечного источника

Характеризуясь простотой задания и высокой точностью, «жесткий» источник находит ограниченное применение в вычислительной практике. Задание падающей волны выражением (1.97) не позволяет отраженной от изучаемого оптического объекта волне пройти через «жесткий» источник и достигнуть поглощающего слоя.

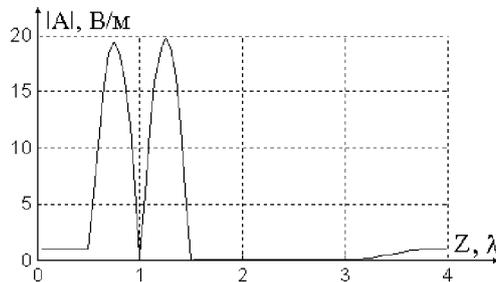


Рис. 1.31. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля $|A|$ на \tilde{D}_h^1 при переотражении волны между «жестким» источником и электрической стенкой

Подтверждая это, поставим вычислительный эксперимент, отличающийся от первого расположением источника излучения (теперь $k=Q/2$, $z=0,5$) и дискретизацией сеточной области.

На рис. 1.31 представлен результат моделирования при установленной в узле $3Q/2$ ($z=1,5$) электрической стенке, которая отражает падающую на нее волну обратно в сторону источника излучения.

Рассматривая поле в подобласти $0 \leq z \leq 0,5$, отметим присутствие однородной волны, излучаемой в направлении $-Z$ «жестким» источником, который светит в обоих направлениях. В поглощающем слое $2 \leq z \leq 4$ затухает упомянутая волна, причем затухает почти полностью. Непосредственно за электрической стенкой $z=1,5$ поле отсутствует. Поле, отраженное от стенки, не проходит за источник, а, переотражаясь от него и стенки, интерферирует с падающим по направлению Z полем.

Следовательно, при использовании «жесткого» источника он должен находиться на достаточном удалении от области регистрации результирующего поля, чтобы переотражившаяся от него волна не вернулась к оптическому элементу, исказив дифракционную картину. Использование такого приема влечет многократное увеличение вычислительной области и длительности эксперимента, что в ряде случаев делает численное моделирование невозможным. «Жесткий» источник находит применение при решении вспомогательных задач (тестирование модели, построение «прозрачного» источника).

1.5.2. Метод результирующего поля

Очевидно, что для учета отраженной от исследуемого объекта волны ее следует каким-то образом находить. В [51] предлагается принимать за отраженное поле в узле расположения источника результат расчета по разностной схеме до задания падающей волны перед переходом на следующий временной слой. Затем складывать отраженное поле с падающим, задавая таким образом результирующее в расположении источника. Вычисления по такому алгоритму можно представить в следующем виде:

- Шаг 1.** Расчет поля по разностной схеме на всей области для слоя m .
- Шаг 2.** Определение отраженного поля как результата вычислений по шагу 1 в узле расположения источника.
- Шаг 3.** Расчет результирующего поля в узле расположения источника сложением отраженного поля и аналитически рассчитанного падающего, переход на следующий временной слой.

Позже, в работе [53] представленный алгоритм получил название «метод результирующего поля (total field formulation)».

Повторяя последний эксперимент с новым источником, получим распределение комплексной амплитуды, представленное на рис. 1.32.

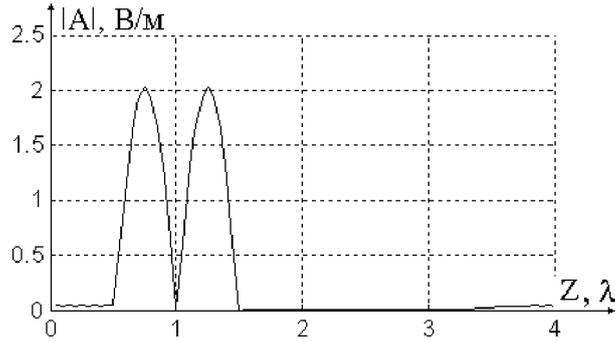


Рис. 1.32. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля $|A|$ на \tilde{D}_h^1 при использовании метода результирующего поля для задания падающей волны

Отраженная от электрической стенки волна интерферирует с падающей волной по направлению Z (на $0,5 \leq z \leq 1,5$), проходит через источник и поглощается на $2 \leq z \leq 4$ (рис. 1.32). В подобласти $0 \leq z \leq 0,5$ наблюдаем результат наложения излучаемой источником в направлении $-Z$ волны и волны, отраженной от электрической стенки, прошедшей через источник и удаляющейся в направлении $-Z$. При аналитическом решении осцилляций на указанном отрезке не появится, на рис. 1.32 колебания модуля комплексной амплитуды при $0 \leq z \leq 0,5$ объясняются погрешностью, вносимой в решение источником.

Изучая погрешность метода результирующего поля, обратимся к рассмотрению распространения плоской однородной волны в свободной среде, повторив с новым источником эксперименты для «жесткого» источника, результаты которых приведены в таблице 1.1.

Таблица 1.2. Зависимости погрешностей вычислительных экспериментов для вакуума от дискретизации сеточной области (Q, Q_t) при использовании метода общего поля

(Q, Q_t)	(10,20)	(20,40)	(50,100)	(100,200)
$\varepsilon, \%$	8,4609	2,2177	0,37411	0,10187

Сравнение результатов экспериментов для свободного пространства с «жестким» источником (таблица 1.1) и с источником, задаваемым методом ре-

зультирующего поля (таблица 1.2), свидетельствуют не в пользу последнего. Погрешность результатов выросла на порядок при всех дискретизациях.

Причиной тому является ошибка при задании отраженной волны. Развивая метод общего поля, необходимо определять отраженную волну не как сеточное поле после перехода на следующий временной слой, а полагая ее разностью такого поля и поля в другой сеточной области, лишенной оптического элемента и, следовательно, свободного от отраженной волны. Такой источник в [8,12] назван «прозрачным».

Сформулируем алгоритм задания «прозрачного» источника.

- Шаг 1.** Расчет поля по разностной схеме для слоя m на области с оптическим элементом.
- Шаг 2.** Расчет поля по разностной схеме для слоя m на вспомогательной области без оптического элемента.
- Шаг 3.** Определение отраженного поля в подобласти задания источника как разности полей в этой подобласти, найденных на первых двух шагах.
- Шаг 4.** Задание результирующей волны в подобласти источника как суммы аналитически заданного падающего поля и найденного на предыдущем шаге отраженного. Переход на временной слой $m+1$.

Результаты расчета в свободном пространстве с использованием «прозрачного» источника совпали с данными из таблицы 1.1: новый источник не вносит дополнительной погрешности в разностное решение.

Изучая поле в эксперименте с электрической стенкой, наблюдаем интерференционное погашение волны в подобласти $0 \leq z \leq 0,5$ (рис. 1.33).

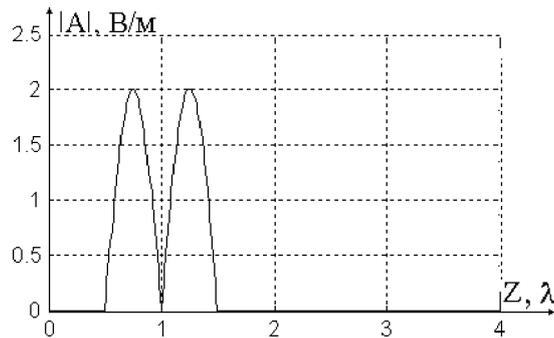


Рис. 1.33. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля $|A|$ на \tilde{D}_h^1 при использовании «прозрачного» источника для задания падающей волны

Отраженная от стенки волна вернулась к источнику в противофазе. Столь точное соответствие аналитическому решению свидетельствует об отсутствии погрешности, вносимой источником излучения в разностное решение.

Обратим внимание на формирование поля во вспомогательной задаче. Оно производится в полном соответствии с 1.5.1, когда «жесткий» источник применяется для задания плоской однородной волны в свободном пространстве. При формировании «прозрачного» источника важно выбрать сеточные области вспомогательной и основной задачи полностью идентичными. Отличия двух задач должны заключаться только в распределении показателя преломления. Основная задача содержит оптический элемент, от которого к источнику приходит отраженная волна, вспомогательная задача такого элемента не содержит и отраженной волны в ней не возникает. Если удалить рассеиватель и из основной задачи, то комплексная амплитуда отраженной волны, определяемая при задании «прозрачного» источника, обратится в нуль в силу идентичности задач. Этим объясняется полное совпадение (во всех знаках) результатов расчета в свободном пространстве с использованием «жесткого» и «прозрачного» источников.

При исследовании дифракционных оптических элементов удобнее располагать источник не в вакууме, а в подложке элемента, вплотную к микрорельефу с целью сокращения площади (в трехмерном случае - объема) вычислительной области и длительности моделирования. В этом случае вспомогательная задача должна содержать однородную среду с показателем преломления подложки, то есть среду основной задачи, в которой располагается источник.

Вышеизложенная методика задания «прозрачного» источника верна и в случае двумерной вычислительной области. Если в такой области необходимо задать в качестве падающей плоскую однородную волну, то для этой цели достаточно одномерной вспомогательной задачи, такую волну описывающей. Двумерной будет только основная задача, содержащая двумерный оптический элемент.

Важно производить подобные вычисления на универсальной сеточной области, так как для области с электрическими стенками на границах невозможно формирование плоской однородной падающей волны посредством «прозрачного» источника. Краевые условия, задаваемые электрическими стенками, не соответствуют однородному фронту плоской волны. По той же причине неуместна установка горизонтальной электрической стенки в подобластях B и C универсальной сеточной области (рис. 1.21). Что, впрочем, никоим образом не ограничивает исследователя в выборе оптических элементов для моделирования, как это уже отмечалось в параграфах 1.1 и 1.4. Магнитные стенки совместимы с распространением плоской однородной падающей волны; следовательно, симметричные оптические элементы могут исследоваться посредством «прозрачного» источника.

При задании других типов падающих волн необходимо пользоваться двумерной вспомогательной задачей, в которой моделируется дифракция той или иной волны в однородном пространстве посредством «жесткого» двумерного источника. Получение произвольной падающей волны достигается соответствующим подбором функции комплексной амплитуды падающей волны в (1.97) и варьированием формы подобласти задания источника («жесткого» во вспомогательной задаче и «прозрачного» в основной).

Методика формирования падающей волны от ограниченного источника допускает совместное использование «прозрачного» источника и произвольно ориентированных электрических стенок на границе сеточной области.

1.5.3. Метод разделенного поля

Идея задания падающей волны через разделение результирующего и рассеянного полей (total field/scattered field – TF/SF) появилась позже [53] первой публикации, посвященной методу результирующего поля [51]; оказалась более плодотворной и популярной [50] вплоть до разработки метода «прозрачного» источника.

Суть метода заключается в ограничении подобласти результирующего поля (падающего и рассеянного) оболочкой, отличной от границы вычислительной области и находящейся внутри такой границы. Указанная оболочка не является частью поглощающих слоев, располагаясь между слоями и оптическим элементом. За оболочкой распространяется только рассеянное поле. Выражения, применяемые для разделения полей, содержат слагаемые с аналитически заданным падающим полем; таким образом, происходит ввод падающей волны в подобласть результирующего поля. Остальная подобласть вычислительной области падающей волны не содержит.

1.5.3.1. Одномерный случай

Для одномерной сеточной области разделение производится в узлах k_L и k_R (рис. 1.34 из [50]).

Сеточные функции при $k_L \leq k \leq k_R$ относятся к результирующему полю, остальные – к рассеянному. Разностные уравнения схемы Yee [56] в указанных узлах имеют вид [50]

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{kL} \frac{E_{x_{kL}}^{m+1} - E_{x_{kL}}^m}{h_t} = \frac{H_{y_{kL+0,5}}^{m+0,5} - \left(H_{y_{kL-0,5}}^{m+0,5} + \tilde{H}_{y_{kL-0,5}}^{m+0,5} \right)}{h_x}; \quad (1.101)$$

$$\mu_0 \frac{H_{y_{kL-0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{kL-0,5}}^{m-0,5}}{h_t} = \frac{\left(E_{y_{kL}}^m - \tilde{E}_{y_{kL}}^m \right) - E_{y_{kL-1}}^m}{h_x}, \quad (1.102)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{k_R} \frac{E_{x_{k_R}}^{m+1} - E_{x_{k_R}}^{m+1}}{h_t} = \frac{(H_{y_{k_R+0,5}}^{m+0,5} + \tilde{H}_{y_{k_R+0,5}}^{m+0,5}) - H_{y_{k_R-0,5}}^{m+0,5}}{h_x}; \quad (1.103)$$

$$\mu_0 \frac{H_{y_{k_R+0,5}}^{m+0,5} - H_{y_{k_R+0,5}}^{m-0,5}}{h_t} = \frac{E_{x_{k_R+1}}^m - (E_{x_{k_R}}^m - \tilde{E}_{x_{k_R}}^m)}{h_x}, \quad (1.104)$$

где сеточные функции под тильдой соответствуют аналитически заданному падающему полю.

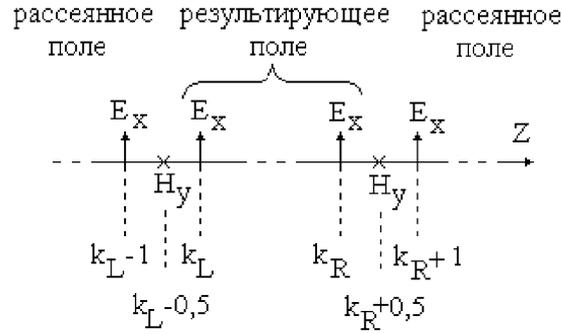


Рис. 1.34. Фрагмент одномерной сеточной области [50] с узлами разделения результирующего и рассеянного полей

Выражение (1.101) определяет электрическую компоненту в крайнем левом узле области результирующего поля (рис. 1.34). Для этого необходимо вычесть друг из друга напряженности магнитного поля в соседних узлах. Очевидно, что вычитанию подлежат напряженности полей одной природы, в данном случае напряженности результирующего поля, так как в (1.101) вычисляется именно результирующее поле. Но при разностном решении в узле $k_{L-0,5}$ вычисляется только рассеянное поле. Поэтому в правой части (1.101) к сеточной функции $H_{y_{k_L-0,5}}^{m+0,5}$ прибавляется значение $\tilde{H}_{y_{k_L-0,5}}^{m+0,5}$ падающего поля, которое традиционно задается аналитически.

Аналогично, в (1.102) рассеянное магнитное поле в узле $k_{L-0,5}$ вычисляется с использованием падающего электрического поля $\tilde{E}_{y_{k_L}}^m$ в k_L ; результирующее электрическое поле в $k_{R-0,5}$ вычисляется по (1.103) через падающее магнитное $\tilde{H}_{y_{k_R+0,5}}^{m+0,5}$ в соседнем правом узле, а рассеянное магнитное в $k_{R+0,5}$ находится посредством падающего электрического $\tilde{E}_{x_{k_R}}^m$ в (1.104).

Далее, задавая параметры вычислительных экспериментов, примем $k_L=1$, $k_R=2Q$ на универсальной одномерной сеточной области, вычисляя погрешности распространения плоской однородной электромагнитной волны в вакууме между этими узлами (таблица 1.3).

Таблица 1.3. Зависимости погрешностей вычислительных экспериментов для вакуума от дискретизации сеточной области (Q, Q_t) с формированием падающей волны по аналитической методике TF/SF в одномерном случае

(Q, Q_t)	(10,20)	(20,40)	(50,100)	(100,200)
$\varepsilon, \%$	2,2289	0,74774	0,20736	0,066696

Сравнение результатов из таблиц 1.1, 1.2, 1.3 показывает, что аналитическое задание падающего поля в методике TF/SF предпочтительнее первого варианта методики общего поля, но уступает по точности варианту с «прозрачным» источником.

Изучая методику разделенного поля, временно откажемся от использования поглощающих слоев, задав длину вычислительной области в 40λ и разместив подобласть общего поля посередине, оставив остальные параметры предыдущего эксперимента неизменными. Результат расчетов для дискретизации (100,200) представлен на рис. 1.35.

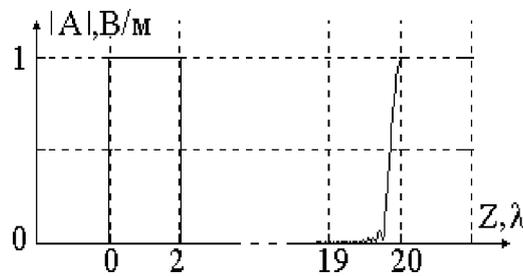


Рис. 1.35. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля при аналитическом задании падающего поля по методике TF/SF без наложения поглощающих слоев

Отсутствие поглощающих слоев позволило [13] наблюдать всплеск значений модуля комплексной напряженности электрического поля в правом конце сеточной области (рис. 1.35). Этот эффект объясняется временной задержкой, необходимой излученной в узле k_L волне для достижения узла k_R . В течение этой задержки излучаемая в k_R волна распространяется по направлению Z . Далее волны из этих узлов интерферируют и взаимно гасят друг друга справа от k_R . Замеченный всплеск позволяет сделать вывод о несоответствии выражений (1.101) - (1.104) методике TF/SF на начальном этапе вычислений в данном случае.

Численное задание падающего поля в (1.101) - (1.104) позволяет не только повысить точность вычислений, сократить их длительность в двумерном и трехмерном случаях, но и избежать отмеченного выше эффекта.

Аналогично действиям при записи выражений для «прозрачного» источника будем рассматривать две задачи: основную и вспомогательную, различающиеся методикой задания падающей волны («жесткий» источник для вспомогательной задачи). Найденные во второй задаче значения электрического и магнитного полей в узлах $k_L-0,5$, k_L , k_R и $k_L+0,5$ подставим в уравнения (1.101) - (1.104) первой задачи в качестве падающей волны. Как отмечается в [47], это приводит к автоматической компенсации численных погрешностей. Погрешности задания фазового сдвига между компонентами падающего поля компенсируются [13] в соседних узлах ($k_L-0,5$ и k_L ; k_R и $k_L+0,5$), ведь аналитическое задание амплитуды (1.98) в экспериментах с «жестким» источником (таблица 1.1) связано с меньшими значениями погрешностей.

Действительно, вычислительные эксперименты подтверждают высокую точность разностного решения, полученного на основе предложенного в [47] подхода. Полученные погрешности для выбранных параметров дискретизации совпали с результатами из таблицы 1.1. Следовательно, численное задание падающей волны в (1.101) - (1.104) не внесло никаких дополнительных искажений в разностное решение.

Более того, в силу исчезновения временного интервала между началом излучения волны в узле k_R и приходом туда волны из k_L , всплеска в правой части области (рис. 1.36) не наблюдается.

Приведенный прием успешен при заключении области в оболочку из однородного материала. При моделировании работы ДОЭ это условие не выполняется. Положим, что начиная с узла $(k_R - k_L)/2$ левую часть области занимает однородное диэлектрическое полупространство (подложка ДОЭ) с показателем преломления $n=1,5$. Погрешность прошедшей волны будем оценивать на отрезке от границы раздела сред до k_R (в зоне результирующего поля). Как в этом случае формировать падающую волну в уравнениях (1.101) - (1.104)?

Аналитическое задание падающей волны в этих выражениях приводит к значительному росту погрешностей (таблица 1.4, столбец а) по сравнению с экспериментами в свободном пространстве (таблица 1.3) еще и за счет несоблюдения начального условия (1.40), (1.41) при новой разности фаз падающей волны между k_L и k_R . Перемещая узел k_R влево до исчезновения указанной разности фаз, можно добиться некоторого повышения точности [13]. Однако при исследовании оптического элемента информация о сдвиге фаз будет недоступной – она является частью решения задачи дифракции на ДОЭ.

Таблица 1.4. Зависимости равномерных погрешностей вычислительных экспериментов для области с границей раздела диэлектрик ($n=1,5$)/вакуум от дискретизации сеточной области (Q, Q_t) с формированием падающей волны по различным вариантам методики TF/SF (a – аналитический, b - численный) в одномерном случае

(Q, Q_t)	Серия экспериментов	
	a	b
(10,20)	7,9612	4,387
(20,40)	3,9482	0,9745
(50,100)	3,7263	0,1515
(100,200)	1,5870	0,0383

Комбинирование численного задания падающей волны (в узлах $k_L-0,5$ и k_L ; вспомогательная задача решается для среды – однородного диэлектрика) с аналитическим заданием (в узлах k_R и $k_R+0,5$) не приводит к стабильному снижению погрешностей в силу влияния аналитического задания в правых узлах на всю вычислительную область.

Разность фаз между узлами k_L и k_R может учитываться принятием за падающую волну значений полей второй задачи не в k_R и $k_R+0,5$, а в узлах, отстоящих от данных на соответствующее расстояние левее (скорость волны в вакууме выше скорости в диэлектрике). Однако такое представление не учитывает разность фазового сдвига в вакууме (основная задача) и диэлектрике (вспомогательная задача) между i_R и $i_R+0,5$, что обуславливает еще большее снижение точности. Внесение аналитической поправки в фазовый сдвиг соответствует случаю аналитического задания падающей волны в правых узлах (i_R и $i_R+0,5$), рассмотренному выше.

Предлагая решение указанной проблемы, в настоящей работе изучается распространение поля в вакууме с источником (1.98), решая эту третью задачу одновременно с двумя приведенными. Таким образом, значение падающей волны для основной задачи (падение на границу раздела диэлектрик/вакуум) подставляется в уравнения (1.101), (1.102) из второй задачи (описывающей распространение в однородном диэлектрике), а в уравнения (1.103), (1.104) - из третьей задачи (распространение в свободном пространстве). При этом, для учета расстояния, которое волна в первой задаче пробегает до границы раздела сред, значения падающего поля выбираются из третьей задачи не в узлах k_R и $k_R+0,5$, а с соответствующим сдвигом вправо.

В результате численно, а не аналитически, учитывается разность фаз волны между k_L и k_R , $k_L-0,5$ и k_L , k_R и $k_R+0,5$, что влечет повышение точности вычислительных экспериментов (таблица 1.4, столбец b).

Предлагаемый метод не только характеризуется решениями, свободными от всплеска значений модуля комплексной амплитуды в правой части вычислительной области, но и не ограничивает исследователя в выборе расположения узла k_R . Начальное условие при численной постановке излучающих условий выполняется всегда в силу его соблюдения в обеих вспомогательных задачах (второй и третьей).

К недостатку развиваемого подхода следует отнести увеличение вычислительной сложности за счет добавления дополнительной одномерной задачи. При исследовании дифракции плоской равномерной электромагнитной волны на двумерных и трехмерных объектах указанное увеличение не окажет сколько-нибудь значимого влияния на длительность вычислений в силу одномерности добавленной задачи.

1.5.3.2. Двумерный случай

Двумерный случай характеризуется появлением двух новых границ разделения, параллельных оси Z (рис. 1.36 из [50]).



Рис. 1.36. Двумерная сеточная область [50] с узлами разделения результирующего и рассеянного полей

Сеточная подобласть результирующего поля заключается в пространстве между отрезками $j_T \leq j \leq j_B$, $k \leq k_L$ (левая граница), $j_T \leq j \leq j_B$, $k \leq k_R$ (правая граница), $j \leq j_T$, $k_L \leq k \leq k_R$ (верхняя граница), $j \leq j_B$, $k_L \leq k \leq k_R$ (нижняя граница), составляющими ее границы.

Для разделения результирующего и рассеянного полей необходимо после перехода на следующий временной слой (например, по формулам (1.60)-(1.62)) произвести вычисления:

$$H_{y_j, k_L - 0,5}^{m+0,5} = H_{y_j, k_L - 0,5}^{m+0,5} + \frac{h_t}{\mu_0 h_z} \tilde{E}_{x_j, k_L}^m ; \quad (1.105)$$

$$H_{y_j, k_R + 0,5}^{m+0,5} = H_{y_j, k_R + 0,5}^{m+0,5} - \frac{h_t}{\mu_0 h_z} \tilde{E}_{x_j, k_R}^m ; \quad (1.106)$$

$$E_{x_j, k_L}^{m+1} = E_{x_j, k_L}^{m+1} + \frac{h_t}{\varepsilon_0 \varepsilon_{j, k_L} h_z} \tilde{H}_{y_j, k_L - 0,5}^{m+0,5} ; \quad (1.107)$$

$$E_{x_j, k_R}^{m+1} = E_{x_j, k_R}^{m+1} - \frac{h_t}{\varepsilon_0 \varepsilon_{j, k_R} h_z} \tilde{H}_{y_j, k_R + 0,5}^{m+0,5} ; \quad (1.108)$$

$$H_{z_{jT} - 0,5, k}^{m+0,5} = H_{z_{jT} - 0,5, k}^{m+0,5} - \frac{h_t}{\mu_0 h_y} \tilde{E}_{x_{jT}, k}^m ; \quad (1.109)$$

$$H_{z_{jB} + 0,5, k}^{m+0,5} = H_{z_{jB} + 0,5, k}^{m+0,5} + \frac{h_t}{\mu_0 h_y} \tilde{E}_{x_{jB}, k}^m ; \quad (1.110)$$

$$E_{x_{jT}, k}^{m+1} = E_{x_{jT}, k}^{m+1} - \frac{h_t}{\varepsilon_0 \varepsilon_{j, k} h_z} \tilde{H}_{y_{jT} - 0,5, k}^{m+0,5} ; \quad (1.111)$$

$$E_{x_{jB}, k}^{m+1} = E_{x_{jB}, k}^{m+1} + \frac{h_t}{\varepsilon_0 \varepsilon_{j, k} h_z} \tilde{H}_{y_{jB} + 0,5, k}^{m+0,5} ; \quad (1.112)$$

где под тильдой находятся электрическая и магнитная напряженности падающего поля, которые традиционно задаются аналитически; для уравнений (1.105)-(1.108) $j_T \leq j \leq j_B$, для (1.109)-(1.112) - $k_L \leq k \leq k_R$. Отметим, что выражения (1.101)-(1.104) допускают аналогичное представление для одномерного случая.

Исследуя разностное решение с участием (1.105)-(1.112) обратимся прежде всего к задаче распространения плоской однородной волны в вакууме, положив $L_y = L_z = 4\lambda$ и приняв в (1.105)-(1.112) $j_T = k_L = 1, j_B = k_R = 2Q$.

Таблица 1.5. Зависимости погрешностей вычислительных экспериментов для вакуума от дискретизации сеточной области (Q, Q_t) с формированием падающей волны по аналитической методике TF/SF в двумерном случае

(Q, Q_t)	(10,20)	(20,40)	(50,100)	(100,200)
$\varepsilon, \%$	5,1930	1,5156	1,3372	1,3246

Сравнение результатов из таблиц 1.3, 1.5 показывает рост погрешности аналитического задания падающей волны в вакууме по методике TF/SF при переходе от одномерного случая к двумерному, что объясняется внесением дополнительных искажений в решение от новых границ разделения результирующего и рассеянного полей.

Как и в одномерном случае, разностное решение характеризуется присутствием падающего поля в области рассеянного поля на протяжении некоторого момента времени от начала распространения. Причиной тому, как и в одномерном случае, является временная задержка, требующаяся волне, излученной на левой границе раздела полей, для достижения правой границы. В течение этой задержки излучаемая правой границей волна распространяется по направлению Z . Далее волны от границ раздела интерферируют и взаимно гасят друг друга справа от отрезка $k=k_R, j_T \leq j \leq j_B$. Следовательно, классическая постановка (1.105)-(1.112) из [50] не соответствует методике TF/SF, для реализации которой эти уравнения записывались.

Решением указанной проблемы нельзя считать задание временной задержки искусственно. Если в подобласти результирующего поля находится оптический элемент, аналитический расчет временной задержки затруднителен. По сути, результат такого расчета является частью решения задачи дифракции на рассеивателе.

Совершенствуя методику формирования падающей волны, авторы работы [47] обращаются к численному заданию такой волны. Одновременно с двумерной задачей решают одномерную, характеризующуюся «жестким» источником. После вычислений по схеме Yee в (1.105)-(1.112) подставляются не аналитически рассчитанные, а найденные численно во вспомогательной одномерной задаче компоненты падающего электромагнитного поля. Как и в одномерном случае, это приводит к компенсации численных погрешностей.

Более того, в одномерной задаче излучение появляется в области исключительно из узла k_L-1 , достигая k_R через определенный временной интервал. В силу этого, справа от k_R в двумерной задаче будет формироваться только рассеянное поле, как это и предусмотрено методикой TF/SF.

Погрешности моделирования, с численным заданием падающей волны, в двумерном случае точно совпадут с результатами одномерного случая и результатами для «жесткого» источника (таблица 1.1).

Особый интерес представляет моделирование работы оптического элемента, сформированного на границе раздела сред. В этом случае заключение подобласти результирующего поля в однородную оболочку невозможно. Следовательно, лишено смысла численное задание падающей волны из [47], предполагающее наличие однородной среды вокруг рассеивателя. В работе [13] для одномерного случая эффективным оказался прием задания падающей волны посредством двух вспомогательных одномерных задач: первой в однородном пространстве, заполненном средой, находящейся перед оптическим элементом; и второй, тоже в однородном пространстве, но заполненном средой за оптическим элементом.

Распространяя предложенную методику на двумерный случай, будем говорить об одной основной двумерной задаче и двух вспомогательных одномерных. Первой, для среды перед оптическим элементом (пусть с показателем

преломления $n=1,5$) с «жестким» источником в узле k_L-1 и второй, для среды после элемента (например, для свободного пространства), с источником в $k_L-1-\lambda(n-1)$, если граница раздела сред делит D пополам. Слагаемое $\lambda(n-1)$ обеспечивает набег фазы на границе раздела сред с учетом того, что расстояние от левой границы раздела полей до границы раздела сред положено равным λ . Численно найденные в первой задаче значения напряженностей полей падающей волны подставляются в формулы (1.105), (1.107); во второй задаче – в формулы (1.106), (1.108). Второе слагаемое в правых частях (1.109)-(1.112) формируется посредством обеих вспомогательных задач: до границы раздела сред - первой задачей, далее – второй.

Сравнивая результаты моделирования распространения плоской однородной волны через границу раздела среда($n=1,5$)/вакуум с помощью аналитического задания падающей волны (таблица 1.6, колонка а) и посредством численного задания (таблица 1.6, колонка б) по методике из [13], убедимся в преимуществе предложенного здесь метода формирования падающей волны.

Таблица 1.6. Зависимости равномерных погрешностей вычислительных экспериментов для области с границей раздела диэлектрик ($n=1,5$)/вакуум от дискретизации сеточной области (Q, Q_i) с формированием падающей волны по различным вариантам методики TF/SF (а – аналитический, б – численный из [13]) в двумерном случае

(Q, Q_i)	Серия экспериментов	
	а	б
(10,20)	13,9267	12,3299
(20,40)	4,3193	3,8751
(50,100)	1,4352	1,3202
(100,200)	1,2614	1,1947

Вместе с тем обе серии экспериментов характеризуются высокими значениями погрешностей по сравнению с одномерным случаем (таблица 1.4). Это объясняется аналитическим расчетом разности фаз на границе раздела сред (слагаемое $\lambda(n-1)$), что делает предложенный выше метод не вполне численным. Автоматической компенсации погрешности определения разности фаз между узлами сеточной области на границе раздела сред не происходит.

Совершенствуя задание падающей волны, целесообразно обратиться к методике TF/RF (total field/reflected field), ранее использовавшейся для исследования волноводов. Применение TF/RF основано на разделении отраженного и результирующего полей одной плоскостью и в отличие от TF/SF не предусматривает заключения оптического элемента в оболочку. В представлении (1.105)-

(1.112) сохраняются выражения (1.105) и (1.107), в которых теперь $1 \leq j \leq J-1$; остальные преобразования излишни. Разделяющая плоскость перпендикулярна OYZ и проходит через отрезок, соединяющий узлы k_L , $0 \leq j \leq J-1$ универсальной сеточной области. Результирующее поле окажется справа от этого отрезка (включая сам отрезок), отраженное – слева. Следовательно, для численного задания падающей волны в рамках методики TF/RF довольно одной вспомогательной одномерной задачи.

В традиционной постановке TF/RF [50] предполагается равенство нулю напряженностей компонент падающего электромагнитного поля на верхней и нижней границе D при $k=k_L$ (канализуемые моды волновода), что позволяет соответствовать граничному условию для сеточной функции D_n^2 . Однако, переходя к общему случаю, когда исследованию подлежат не только волноводы и требуется предусмотреть падение на оптический элемент плоской однородной волны, необходимо обращаться к универсальной сеточной области.

Тогда, при падении T -волны на плоскую границу раздела сред, результаты экспериментов с применением численного задания падающей волны на основе методики TF/RF превзойдут результаты из таблицы 1.6 и совпадут с данными для одномерного случая из таблицы 1.4, колонка b. Погрешность вычислительных экспериментов снизится в три раза на грубой сетке и на два порядка для самой густой сеточной области.

Методика TF/RF при исследовании оптических элементов на универсальной сеточной области, заключенных в однородную оболочку, позволяет получить результаты, не уступающие по точности методике TF/SF, и превосходящие ее для случая неоднородной оболочки. В отличие от TF/SF, использование TF/RF не предусматривает задания падающего поля (численно или аналитически) непосредственно на границе раздела сред, и, следовательно, не характеризуется погрешностями, связанными с этим заданием.

При задании других типов падающих волн, отличных от плоской однородной, их напряженности рассчитываются аналитически либо интерполяцией результатов вычислений по одномерной вспомогательной задаче [50]. Оба варианта приводят к снижению точности вычислений по сравнению со случаем исследования дифракции на оптическом элементе посредством численного задания падающей плоской однородной волны в методике TF/RF.

Отдельный интерес представляет случай падения на оптический элемент ограниченной в пространстве волны, когда аналитическое задание падающей волны на всей границе раздела полей по методике TF/SF требует решения задачи дифракции на щели в рамках математической теории дифракции. Задание «прозрачного» источника либо реализация методики TF/RF не нуждаются в упомянутом решении.

1.5.4 Сравнение методов формирования падающей волны

Применение методов результирующего и разделенного полей в лице своих лучших модификаций («прозрачного» источника и методики TF/RF) приводит к результатам, незначительно отличающимся по точности, либо совпадающим.

Действительно, как постановка «прозрачного» источника, так и численная реализация методики TF/RF нуждаются в одинаковых сеточных областях и дополнительной одномерной задаче с «жестким» источником. Синхронизация вычислений с общей одномерной вспомогательной задачей и приводит к результатам одной точности.

Вместе с тем реализация двух упомянутых подходов и их различных модификаций характеризуется следующими различиями.

1. Методика результирующего поля не приводит к разделению полей на результирующее и рассеянное, как это свойственно методике разделенного поля. В монографии [50] такая сепарация в случае TF/SF полагается преимуществом, позволяющим уменьшить толщину поглощающих слоев (и сократить длительность вычислений) в силу меньшей интенсивности рассеянного поля, достигающего до подобласти расположения поглощающих слоев.

В настоящей работе приведенное мнение не разделяется. Как уже указывалось в пунктах 1.5.3.1, 1.5.3.2, аналитическое задание падающей волны при реализации TF/SF не соответствует этой концепции вовсе, даже при изучении распространения плоской волны в вакууме. Волна, распространяющаяся от правой части границы разделения полей, в течение некоторого времени излучается как падающая, а не рассеянная.

Переход к численному заданию падающей волны приводит метод TF/SF в соответствие с концепцией разделения полей только для случая распространения плоской однородной волны в свободном пространстве.

Методика TF/RF и вовсе не согласуется с правилом разделения в области, правее отрезка ввода падающего поля. Но ведь и в этой области располагаются поглощающие слои.

Более того, возвращаясь к утверждению авторов [50] о малой интенсивности рассеянного поля по сравнению с результирующим, отметим, что интенсивность рассеянного поля (даже правильно разделенного) не всегда меньше интенсивности результирующего. Примером может служить поле от металлического оптического элемента, фокусирующего отраженную волну.

Таким образом, ни теоретически, ни экспериментально подтвержденного превосходства метода разделенного поля над методом поля результирующего не найдено.

2. Общая вспомогательная задача служит в двух сравниваемых подходах несколько разным, хоть и связанным целям. В методе общего поля посредством вспомогательной задачи всегда определяется отраженное поле, то есть поле, рассеянное оптическим элементом в направлении, обратном распростране-

нию падающего поля. При этом для формирования «прозрачного» источника довольно значения одной сеточной функции электрической компоненты в узле задания «жесткого» источника вспомогательной задачи.

Метод разделенного поля в варианте TF/SF с численным заданием падающей волны нуждается в четырех (одномерный случай) или k_R-k_L (двумерный случай) электрических и магнитных компонентах поля вспомогательной задачи. При численном задании падающей волны по методу TF/RF достаточно двух компонент, которые выбираются в узлах, соседствующих с местом расположения «жесткого» источника [50]. Чем дальше позиция таких узлов от источника, тем меньше точность решения. Одномерная вспомогательная задача тоже характеризуется погрешностью, возрастающей по мере удаления от «жесткого» источника.

3. Применение разных способов задания излучающих условий и сеточных областей приводит не только к варьированию точности вычислительных экспериментов, но и к изменению их длительности.

Предположим, что, решая задачу синтеза оптического элемента (например, посредством стохастической оптимизации), исследователь поставил 1000 вычислительных экспериментов на двумерной области с параметрами $L_y=L_z=4\lambda$, $L=\lambda$, $T=20\lambda/c$ и дискретизацией (100,200). Их совокупная длительность составила 30,33 минуты и 27,48 минуты для экспериментов с аналитически заданной падающей волной в методике TF/SF и с «прозрачным» источником соответственно (на сеточной области D_h^2 без объединения поглощающих слоев). На универсальной сеточной области длительности были найдены равными 25,56 минуты и 20,54 минуты для экспериментов с TF/SF (аналитическое задание падающей волны) и «прозрачным» источником. Вычисления производились на процессоре AMD Opteron 244 по программе на языке MatLab 7.0.

Применение методики TF/SF подразумевает формирование падающей волны по всему периметру подобласти регистрации, в то время как использование «прозрачного» источника позволяет ограничиться отрезком области. В силу этого, несмотря на присутствие дополнительной одномерной задачи, использование «прозрачного» источника привело к сокращению длительности вычислений на 9,37% и 19,64% по сравнению с классической концепцией TF/SF, при разных компоновках поглощающих слоев. Особенно существенными различия будут на вытянутых вдоль Z областях, когда большая часть вычислений при задании падающей волны придется на верхний и нижний отрезки оболочки, разделяющей результирующее и рассеянное поля. При задании «прозрачного» источника в такой оболочке нет необходимости.

Как отмечалось в параграфе 1.4, объединение поглощающих слоев должно привести к снижению длительности вычислений при векторизации алгоритма с последующей его реализацией на языках, допускающих векторные вычисления (например, MatLab, Fortran 90 или Fortran 95). Действительно, указанное

объединение при реализации методики TF/SF (с аналитическим заданием падающей волны) приводит к сокращению длительности расчетов на 15,73% и при использовании «прозрачного» источника - на 25,26%.

Вычислительные сложности реализации «прозрачного» источника и методики TF/RF с численным заданием падающей волны отличаются следующим образом. Оба метода включают расчет по двум задачам. Вспомогательная задача может считаться общей (вычисления по ней полностью идентичны и состоят из 4 операций ga_{xru} [20]).

Для TF/RF в основной задаче через ga_{xru} выражаются вычисления по (1.105) и (1.107) (итого еще две операции ga_{xru}). Задание прозрачного источника несколько проще. Совмещая вычисление результирующего поля и отраженного в одном выражении, можно ограничиться одной скалярной операцией (вычитание аналитически заданного падающего поля и одной сеточной функции из одномерной задачи) и одной векторной – ga_{xru} (формирование результирующего поля как суммы поля основной задачи в области источника и результата предыдущей скалярной операции, помноженного на единичный вектор).

Пренебрегая скалярными операциями и считая все векторные равноценными, признаем, что «прозрачный» источник задается проще, для его формирования достаточно 5 операций против 6 для TF/RF с численным заданием падающей волны. Однако на фоне общей вычислительной сложности разностного решения такие отличия не существенны.

2. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЧЕРЕЗ СУБВОЛНОВЫЕ ДИФРАКЦИОННЫЕ РЕШЕТКИ НА ТОРЦЕ ОПТИЧЕСКОГО ВОЛНОВОДА

2.1. Тестирование модели, основанной на разностном решении уравнений Максвелла, на примере субволновых дифракционных решеток

Совершенствование методов изготовления оптических структур открывает широкие возможности по управлению световыми полями как в волноводах, так и в свободном пространстве. Наряду с недавно появившимися оптическими структурами (фотонные кристаллы, волноводные структуры и др.) не теряют актуальности и бинарные дифракционные решетки. Кроме традиционных областей применения, такие решетки интересны в качестве тестовых структур при апробировании различных технологических процессов изготовления микрорельефа. Отличаясь простотой, бинарные решетки позволяют в наиболее явном виде выявлять несовершенства изготовления микрорельефов. Например, для развития технологии формирования дифракционного микрорельефа на торце галогенидного ИК-волновода [2,7] выбралась бинарная решетка в качестве основной тестовой структуры. Результаты натурных экспериментов, приведенные в [7], демонстрируют необходимость совершенствования используемой технологии и побуждают к исследованию формируемого микрорельефа и моделированию его работы, чему и посвящена предлагаемая глава.

Основные исследования предваряются тестированием разностного решения уравнений Максвелла для задач распространения электромагнитного излучения через дифракционные решетки, отличающиеся материалом изготовления и назначением.

В дифракционной оптике принято классифицировать решетки по проводимости (диэлектрические, проводящие, идеально проводящие), способу задания разности фаз между фрагментами одного периода (фазовые, амплитудные) и направлению распространения рабочих порядков (пропускающие, отражающие). Одна и та же решетка может характеризоваться по всем трем признакам. Например, бинарная антиотражающая решетка, сформированная на поверхности алмазной пластины [11], состоит из диэлектрического материала (алмаз), обладает бинарным профилем (является фазовой) и служит для пропускания всего падающего на нее поля (антиотражающая).

Сообразно с приведенной классификацией различаются и методы моделирования распространения электромагнитного излучения через различные решетки. Касаясь исключительно методов исследования субволновых решеток и руководствуясь фундаментальными работами [42,48], выделим три подхода: модовый (для исследования идеально проводящих отражающих решеток

с бинарным профилем), дифференциальный (диэлектрические пропускающие решетки произвольного профиля) и теорию эффективных сред (антиотражающие решетки).

Отдельно классифицируются решетки по размерности. Интересно, что в дифракционной оптике [27] величина размерности задается не по физической размерности исследуемой области, а соотносясь с размерностью структур данных, которыми оперирует численный метод исследования дифракции на решетке в скалярном приближении. Например, применяя методы скалярной оптики, к одномерным решеткам относят двумерные пространственные структуры, так как профиль решетки задается функцией одной переменной. При этом скалярный подход оперирует именно функцией профиля, не нуждаясь в иных пространственных параметрах. За двумерную решетку принимают трехмерную структуру, поверхность которой описывается функцией двух переменных.

В настоящей работе применение указанной классификации затруднительно. Неизбежны противоречия в описании исследуемой оптической структуры и вычислительной области, в которую такая структура помещается. Ведь размерность вычислительной области задается размерностью уравнений Максвелла, которая не соответствует традиционной классификации, принятой в дифракционной оптике. Переход от скалярного приближения к строгой электромагнитной теории сопровождается увеличением размерности.

Более того, как только исследованию подлежит оптический объект целиком (а не только его поверхность), оказывается противоречивой и сама традиционная классификация. Например, дифракция на решетке, на одном периоде которой располагается бесконечный цилиндр круглого сечения - есть классическая задача электродинамики о дифракции на двумерном, а не одномерном объекте. Другой пример - слоистые среды. Соответствующие им фотонные кристаллы называют в теории фотонных кристаллов одномерными, а не нульмерными структурами, как этого требует дифракционная оптика.

Достоинством развиваемого в настоящей работе разностного метода решения уравнений Максвелла является его универсальность (в отличие от упомянутых во введении подходов), которая применительно к исследованию дифракционных решеток выражается в возможности исследования произвольных периодических структур. Подтверждая это, проведем сравнение результатов для тестовых примеров, полученных модовым методом, методом связанных волн и с помощью теории эффективных сред с разностным решением.

2.1.1. Дифракция H-волны на идеально проводящих решетках

В работе [42] дифракция на бинарной идеально проводящей решетке исследуется посредством модового метода. В основе модового подхода лежит разложение поля внутри прямоугольной канавки идеально проводящей решетки на моды прямоугольного волновода с идеально проводящими стенками. Для

области вне профиля решетки записывается разложение Релея по плоским волнам [3]. Согласование двух разложений приводит к нахождению коэффициентов разложения и выражению поля внутри и вне исследуемой решетки. С вычислительной точки зрения задача сводится к решению СЛАУ и численному интегрированию.

Выбирая параметры профиля тестовой бесконечной идеально проводящей бинарной решетки, за период профиля примем величину $d=2,5\lambda$, за ширину канавки $a=1,25\lambda$ и глубину канавки $h=\lambda$ (рис. 2.1).

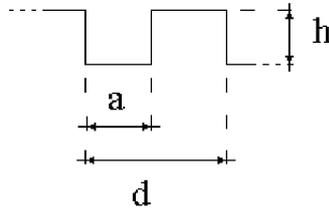


Рис. 2.1. Профиль бинарной решетки

Пусть на решетку по нормали падает T -волна (вектор электрического поля параллелен канавкам решетки) с длиной $\lambda=1$ мкм.

Согласно формуле решетки

$$\sin \varphi = g \frac{\lambda}{d} \quad (2.1)$$

в исследуемом случае следует говорить о трех отраженных порядках, интенсивности которых, рассчитанные модовым методом, представлены в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Зависимость интенсивностей отраженных порядков для вычислительного эксперимента с идеально проводящей решеткой (модовый метод) от N - числа мод, участвующих в разложении

Интенсивности	$N=4$	$N=8$	$N=12$	$N=14$
J_0	0,6655	0,6730	0,6748	0,6753
$J_1=J_{-1}$	0,1099	0,1095	0,1094	0,1093
$J_2=J_{-2}$	0,0573	0,054	0,0532	0,053

Под интенсивностями в таблице 2.1 понимались безразмерные величины, равные отношению интенсивности падающей волны к интенсивностям соответствующих отраженных порядков.

Отметим хорошую сходимость модового решения и высокое соответствие решения закону сохранения энергии (сумма интенсивностей отраженных порядков равна интенсивности падающей волны). Однако при $N>14$ метод становится неустойчивым при выбранных параметрах.

Решая ту же задачу разностным методом [12], зададим вычислительную область (рис. 2.2) с поглощающим слоем, рассчитанным для поглощения падающих по направлению $-Z$ волн. Действительно, поле, распространяющееся в направлении $+Z$, отразившись от профиля решетки, дойдет до поглощающего слоя как распространяющееся в противоположном направлении.

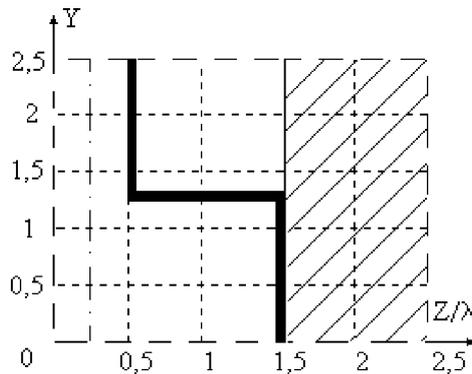


Рис. 2.2. Вычислительная область для разностного решения задачи дифракции на бинарной идеально проводящей решетке. Штрихпунктирной линией обозначено расположение «прозрачного» источника

В универсальной сеточной области проводимости в поглощающем по направлению Y и $-Y$ слое C (рис. 1.27) обнуляются, также обнуляется проводимость в левой части слоя A (рис. 1.27), на месте которой задается профиль решетки (рис. 2.2).

Формируя идеально проводящий профиль, будем обнулять соответствующую отрезку $0 \leq y \leq a$, $z=1,5$ (рис. 2.2) проекцию вектора напряженности электрического поля в конце вычислений по очередному слою времени. При этом расчет поля в подобласти $a \leq y \leq 2,5$, $0,5 \leq z \leq 1,5$ излишен. Допущение такого расчета (из соображений лучшей векторизации вычислений) приведет, во-первых, к лишним вычислениям (поля за идеально проводящей решеткой быть не должно) и, во-вторых, к искажению решения (полю там быть нельзя, хотя при выбранной компоновке вычислительной области оно может появиться от отрезка $0,5 \leq z \leq 1,5$, $y=0$ благодаря постановке циклических условий на краях вычислительной области).

Зададим падающее поле методом «прозрачного» источника, решая вспомогательную задачу в вакууме и регистрируя комплексную амплитуду отраженного электрического поля (R) на отрезке $0 \leq y \leq 2,5$, $z=0,25$ (рис.2.2), как это принято в указанном методе.

Известно, что за периодическим оптическим элементом комплексную амплитуду, как периодическую функцию, всегда можно разложить в ряд Фурье (разложение по плоским волнам) [3]:

$$R(y) = \sum_{g=-\infty}^{+\infty} C_g \exp\left(ig \frac{2\pi}{d} y\right), \quad (2.2)$$

где

$$C_g = \frac{1}{d} \int_0^d R(y) \exp\left(-ig \frac{2\pi}{d} y\right) dy. \quad (2.3)$$

При этом интенсивности отраженных распространяющихся порядков вычисляются как

$$J_g = |C_g|^2 \cos\varphi. \quad (2.4)$$

Угол φ для порядка g удовлетворяет формуле решетки (2.1)

Распространяющимися считаются только те порядки, для которых $\left|g \frac{\lambda}{d}\right| < 1$, иначе выражение (2.1) теряет смысл. Остальные коэффициенты ряда (2.2) соответствуют стоячим волнам, которые энергии не переносят.

Получив в результате эксперимента $R(y)$, по (2.3) вычисляют C_g , затем по (2.4) находят J_g .

Организуя постановку вычислительного эксперимента, примем $L_y=L_z=2,5$, $L=1$ (рис. 2.2), источник расположим на отрезке $0 \leq y \leq 2,5$, $z=0,25$. За время $T=30\lambda/c$ (где c - скорость плоской электромагнитной волны в вакууме) поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим.

Таблица 2.2. Зависимость интенсивностей отраженных порядков для вычислительного эксперимента с идеально проводящей решеткой (разностный метод) от параметров дискретизации сеточной области (Q, Q_t)

(Q, Q_t)	Значения интенсивностей для отраженных порядков и сумма интенсивностей всех порядков (последний столбец)			
	J_0	$J_1=J_{-1}$	$J_2=J_{-2}$	$\sum J$
(10,20)	0,7429	0,06081	0,06389	0,99233
(20,40)	0,7026	0,09566	0,05205	0,99805
(50,100)	0,689	0,101688	0,05341	0,9992
(100,200)	0,6824	0,1064	0,05205	0,99928

Анализируя результаты вычислительных экспериментов с различными параметрами дискретизации сеточной области (таблица 2.2), отметим сходимость разностного решения. Расхождение с результатами модового метода (таблица 2.1) незначительно: для дискретизации $N=14$ и $(Q, Q_z)=(100, 200)$ различие нулевого порядка составляет 1,05%, первого и минус первого порядков – 2,65%, второго и минус второго – 1,7%. Укажем также на высокую точность соблюдения закона сохранения энергии (последний столбец таблицы 2.2). Равенство противоположных порядков (первого и минус первого, второго и минус второго) объясняется симметрией профиля решетки на одном периоде.

Таким образом, разностный метод решения уравнений Максвелла пригоден для исследования дифракции электромагнитного излучения на идеально проводящих решетках.

Признав удовлетворительными результаты вычислительных экспериментов с тестовой решеткой, обратимся к исследованию отражающих решеток, профиль которых отличен от бинарного. Для этого невозможно использование модового метода, а интегральные методы, приведенные в [5,32], обладают численной неустойчивостью, затрудняющей расчеты по ним. Покажем на примере пилообразной отражающей решетки из идеально проводящего материала возможность применения развиваемой модели для отражающих решеток с профилем, отличным от бинарного.

Используя параметры тестового эксперимента, для пилообразной решетки (рис. 2.3) получим значения $J_0=0,15867$; $J_1=0,10343$; $J_{-1}=0,164815$; $J_2=0,113547$; $J_{-2}=0,47153$, при которых закон сохранения энергии соблюдается с точностью $\eta=1,19\%$.

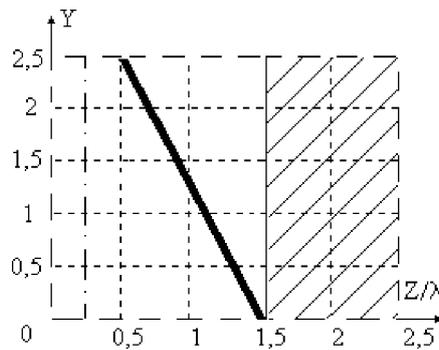


Рис. 2.3. Вычислительная область для разностного решения задачи дифракции на пилообразной идеальной проводящей решетке

Такую решетку нельзя считать симметричной, поэтому для нее интенсивности положительных и отрицательных порядков различаются.

Интересно сравнить работу изучаемой решетки с отражающей пилообразной, покрытой слоем диэлектрика ($n=1,5$), расположенного в области $0,5\lambda \leq z \leq 1,5\lambda$ перед профилем решетки. В этом случае интенсивности отраженных порядков найдены равными: $J_0=0,47886$; $J_1=0,00915$; $J_{-1}=0,0818$; $J_2=0,13342$; $J_{-2}=0,29146$; $\eta=0,53\%$.

Покрывание решетки диэлектриком существенно повлияло на ее работу. Решетка без диэлектрика направляла половину энергии в «-2» порядок, остальную энергию распределяла между порядками примерно поровну. Решетка, покрытая диэлектриком, направляет половину энергии в нулевой порядок, оставшаяся распределяется не поровну.

Другой интересной областью применения представленной модели является изучение амплитудных дифракционных решеток, работающих как на отражение, так и на пропускание. Продолжая работу с решетками треугольного профиля, рассмотрим амплитудную решетку (рис. 2.4), на одном периоде которой находится треугольник из идеально проводящего материала.

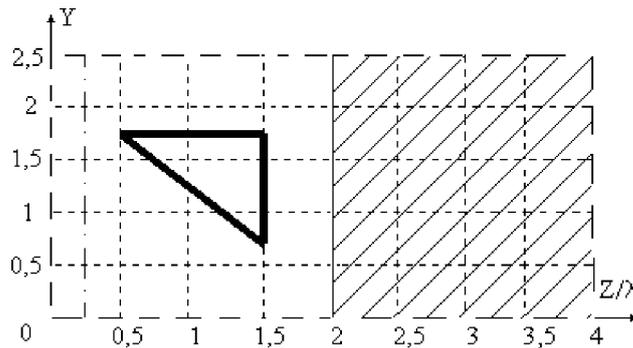


Рис. 2.4. Вычислительная область для разностного решения задачи дифракции на амплитудной идеально проводящей решетке

Учитывая, что часть падающей волны пройдет за решетку по направлению Z , увеличим L_z до 4λ , добавив в вычислительную область левую часть объединенного поглощающего слоя A (рис. 1.27), и расположим подобласть регистрации прошедшей волны на отрезке $0 \leq y \leq 2,5$, $z=1,75$ (рис. 2.4).

В результате вычислительного эксперимента интенсивности прошедших порядков найдем равными: $I_0=0,29238$; $I_1=0,18917$; $I_{-1}=0,08188$; $I_2=0,02904$; $I_{-2}=0,10492$, отраженных порядков: $J_0=0,02318$; $J_1=0,05319$; $J_{-1}=0,011843$; $J_2=0,13874$; $J_{-2}=0,08896$, $\eta=1,33\%$.

Выражение (2.2) верно в равной степени и для комплексной амплитуды электрического поля отраженной волны $R(y)$, и для прошедшей $T(y)$. То же касается и интенсивности g -го отраженного порядка J_g и g -го прошедшего порядка I_g в (2.4).

Исследуя влияние слоя диэлектрика ($n=1,5$) на работу изучаемой решетки, разместим такой слой в области $0,5\lambda \leq z \leq 1,5\lambda$, вне идеально проводящего треугольника (рис. 2.4). Тогда, оставив без изменения остальные параметры вычислительного эксперимента, приходим к результату: для прошедшей волны $I_0=0,27336$; $I_1=0,12074$; $I_2=0,14434$; $I_3=0,02348$; $I_4=0,007428$, для отраженной волны $J_0=0,17209$; $J_1=0,09297$; $J_2=0,13616$; $J_3=0,02882$; $J_4=0,021755$, $\eta=2,12\%$.

Как видим, добавление слоя диэлектрика, в отличие от экспериментов с отражающей решеткой, не привело к существенному распределению энергии между порядками разложения.

2.1.2. Дифракция H -волны на диэлектрической бинарной решетке

Рассматривая методы расчета дифракции света на диэлектрических решетках, выделим «дифференциальный» (differential method) [42] подход, заслуживший широкое признание и известный в виде многих модификаций.

Упомянутый метод основан на разложении поля в ряд Релея внутри и вне профиля решетки. Функция диэлектрической проницаемости, описывающая профиль, подлежит разложению в ряд Фурье. Оба разложения подставляются в уравнение Гельмгольца, в результате чего, для случая падения H -волны, записывается система обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Наложение соответствующих граничных условий на поверхность решетки позволяет выбрать конкретное решение задачи из класса возможных решений.

Рассматриваемый подход обладает двумя недостатками. Во-первых, он не гарантирует сходимость решения. При формировании системы обыкновенных дифференциальных уравнений приходится ограничиваться определенным числом элементов ряда разложения диэлектрической проницаемости на периоде решетки, иначе система получилась бы бесконечной. Вместе с тем число обусловленности матрицы системы линейных алгебраических уравнений, к которой сводится решение упомянутой системы дифференциальных уравнений, будет зависеть от периода решетки, а не от формы рельефа. Следовательно, если на периоде рельеф представим в виде быстро осциллирующей функции (например, при исследовании субволновых технологических погрешностей формирования профиля [18]), то, выбирая малое число элементов ряда разложения диэлектрической проницаемости, получим решение задачи для сглаженного профиля, лишь отдаленно напоминающего профиль исследуемой решетки. А при учете всех необходимых элементов ряда будем иметь дело с плохо обусловленной матрицей системы линейных алгебраических уравнений. Точность псевдорешения такой СЛАУ при разных параметрах дискретизации зависит от выбранного метода регуляризации, при этом сходимость решения исходной задачи в общем случае не гарантируется.

Второй недостаток «дифференциального» подхода связан с большими вычислительными затратами при его реализации в случае исследования трехмерного оптического элемента. Количество арифметических операций, характеризующих вычисления по данному методу, составляет для одномерного случая $O(N^3)$ и $O(N^5)$ для двумерной решетки (где N - число неизвестных в системе дифференциальных уравнений), что не позволяет отнести метод к разряду экономичных. Тем не менее для исследования одномерной дифракционной решетки с апертурой в несколько сотен длин волн и проверкой точности на тестовой задаче «дифференциальный» метод в большинстве случаев оказывается полезным.

Задавая параметры решетки, примем их из предыдущей задачи (рис. 2.1), заменив материал с идеального проводника на оптическое стекло (показатель преломления $n=1,5$). Пусть плоская однородная волна падает на рельеф решетки из бесконечного диэлектрического полупространства по нормали к границе раздела диэлектрик/вакуум. Результаты моделирования распространения такой волны через заданную решетку посредством «дифференциального» метода (реализованного по рекомендациям в работе [27]) представлены в таблице 2.3

Таблица 2.3. Зависимость интенсивностей прошедших порядков для вычислительного эксперимента с диэлектрической решеткой («дифференциальный» метод) от N - числа плоских волн, участвующих в разложении

Интенсивности	$N=2$	$N=3$	$N=5$	$N=7$
I_0	0,0405	0,0549	0,0548	0,0552
$I_1=I_{-1}$	0,3781	0,3558	0,3503	0,3498
$I_2=I_{-2}$	0,086	0,0736	0,0753	0,0756

Заданная решетка является светоделительной, распределяя большую часть энергии падающей волны в первый и минус первый прошедшие порядки (таблица 2.3). Для большего значения числа элементов разложения в ряд ($N>7$ из таблицы 2.3) выбранная реализация «дифференциального» метода приводит к решению СЛАУ с плохо обусловленной матрицей.

Применение скалярной теории дифракции к той же задаче (поле за решеткой формируется добавлением к полю до профиля решетки фазового набега в рельефе) приводит к величинам $I_0=0$, $I_1=I_{-1}=0,3711$, $I_2=I_{-2}=0$. Скалярная теория не учитывает дифракции внутри профиля, влияющей на формирование поля за решеткой. Чем меньше отношение периода решетки к длине волны, тем менее

достоверными становятся результаты, полученные этим методом. Предлагаемый разностный метод свободен от этого недостатка.

При решении задачи дифракции H -волны на изучаемой решетке разностным методом, зададим вычислительную область (рис. 2.5) с объединенным поглощающим слоем A и без слоев B, C (рис. 1.27), поглощающих излучение, распространяющееся по направлениям Y и $-Y$.

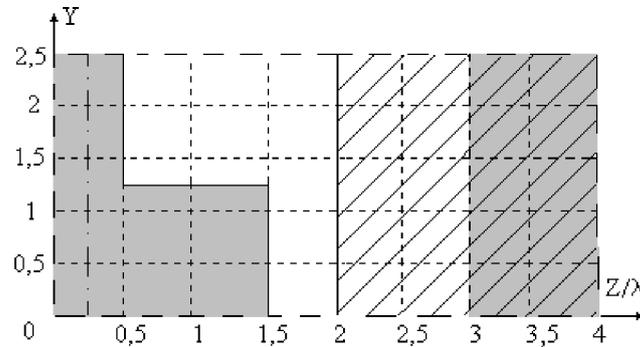


Рис. 2.5. Вычислительная область для разностного решения задачи дифракции на бинарной диэлектрической решетке. Подобласть с показателем преломления $n=1,5$ закрашена серым, свободное пространство – белое

В вычислительной области зададим две границы раздела среда ($n=1,5$)/вакуум и вакуум/среда (рис. 2.5): левая формирует профиль решетки, правая расположена в середине поглощающего слоя и не оказывает влияние на дифракционную картину. Ошибочным было бы расположение второй границы раздела на отрезке $0 \leq y \leq 2,5, z=0$ (рис. 2.5), характерное для решетки конечной толщины.

Как и в предыдущем примере, поместим «прозрачный» источник на отрезок $0 \leq y \leq 2,5, z=0,25$, регистрируя прошедшее поле в подобласти $0 \leq y \leq 2,5, z=1,75$ (рис. 2.5).

Организуя постановку вычислительного эксперимента, примем $L_y=2,5\lambda$, $L_z=4\lambda$, $L=\lambda$ (рис. 2.5), источник расположим на отрезке $0 \leq y \leq 2,5, z=0,25$. За время $T=30\lambda/c$ поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим.

Таблица 2.4. Зависимость интенсивностей прошедших порядков для вычислительного эксперимента с диэлектрической решеткой (разностный метод) от параметров дискретизации сеточной области (Q, Q_t)

(Q, Q_t)	Значения интенсивностей для прошедших порядков		
	I_0	$I_1=I_{-1}$	$I_2=I_{-2}$
(10,20)	0,06099	0,31579	0,063265
(20,40)	0,05367	0,3633	0,07371
(50,100)	0,05835	0,36539	0,075045
(100,200)	0,05577	0,36845	0,07484

Сравнение результатов «дифференциального» метода (для $N=7$, таблица 2.3) и разностного (при $(Q, Q_t)=(100,200)$, таблица 2.4) свидетельствует о различии определения интенсивности нулевого порядка прошедшей волны в 1,03%, первого и минус первого порядков в 5,33%, второго и минус второго в 1,01%. Интересно, что разница между результатами применения скалярной теории и разностного метода решения уравнений Максвелла при определении интенсивностей первого и минус первого порядков составит всего 0,71%.

Интенсивности распространяющихся порядков отраженной волны при дискретизации $(Q, Q_t)=(100,200)$ были найдены равными: $J_0=0,02678$, $J_1=J_{-1}=0,003442$, $J_2=J_{-2}=0,003112$, $J_3=J_{-3}=0,009585$. Погрешность соответствия закону сохранения энергии при данной дискретизации составляет $\eta=0,14\%$. Определяя количество распространяющихся порядков по формуле (2.1), следует помнить об изменении длины волны в среде по сравнению со свободным пространством.

Основываясь на представленных результатах, делаем вывод о целесообразности применения разностного метода для моделирования распространения электромагнитного излучения через диэлектрические решетки. В качестве интересного примера такой решетки рассмотрим алмазную антиотражающую структуру.

2.1.3. Дифракция Н-волны на алмазной антиотражающей периодической структуре

Рассмотрим задачу дифракции на периодическом оптическом элементе с целью исследования его антиотражающих свойств. Дифракционные решетки с таким функциональным назначением формируют на оптических поверхностях для уменьшения потерь на френелевское отражение.

Например, от плоской границы раздела сред алмаз ($n=2,4$)/воздух отражается при нормальном падении 16,96% энергии падающей волны [4]. Нанесение пленочного антиотражающего покрытия не всегда возможно либо в силу сложности доступа к конкретному участку поверхности оптического элемента (если это многоуровневый ДОЭ), либо вследствие низкой термической стойкости материала такого покрытия (алмазные поликристаллические пленки выдерживают излучение мощных CO_2 лазеров [6]).

Традиционно антиотражающий рельеф (рассчитанный на нормальное падение освещающего пучка) формируется на поверхности алмазной пластины в виде бинарной решетки с периодом

$$d < \frac{\lambda}{n} \text{ и высотой} \quad (2.5)$$

$$h = \frac{\lambda}{4\sqrt{n}}. \quad (2.6)$$

Соблюдение условий (2.5), (2.6) позволяет рассчитывать на проявление сформированной решеткой антиотражающих свойств.

Теория эффективных сред [48], привлекаемая для расчета параметров антиотражающего рельефа, ставит в соответствие бинарному микрорельефу тонкую диэлектрическую пленку с «эффективной» диэлектрической проницаемостью и высотой h , вычисляемой по (2.6). В рамках теории эффективных сред нулевого порядка искомую диэлектрическую проницаемость линейно выражают через диэлектрические проницаемости окружающих пленку сред и коэффициент заполнения решетки (fill factor), равный отношению ширины ступеньки бинарной решетки к периоду: $q=(d-a)/d$ (рис. 2.1). В более общей теории эффективных сред второго порядка учитывается отношение упомянутых проницаемостей и квадрат такого отношения, вместе с квадратом от коэффициента заполнения.

Выбирая для алмазной ($n=2,4$) бинарной субволновой решетки период $d=\lambda/4$, задавая длину волны CO_2 лазера $\lambda=10,6$ мкм и варьируя коэффициент заполнения, получим интенсивности отраженных волн, представленные в таблице 2.5.

При разностном решении зададим параметры вычислительной области (отличающейся от области на рис. 2.5 только размерами) величинами: $L_y=\lambda/4$,

$$L_z=2,5\lambda+h, \quad (2.7)$$

где высота рельефа h определяется из (2.6), объединенный поглощающий слой выбирается толщиной 2λ , полосы шириной в $0,25\lambda$ окаймляют рельеф (в левой полосе располагается «прозрачный» источник); длительность процесса дифракции определим как $T=10\lambda/c$. Тогда для дискретизации (100,200) получим результаты, представленные в таблице 2.6 .

Таблица 2.5. Исследование антиотражающих свойств алмазной субволновой бинарной решетки с помощью теории эффективных сред (нулевого и второго порядков).
 Отношение интенсивности отраженной волны к падающей обозначены « p »

Коэффициент заполнения	$p, \%$	
	нулевого порядка	второго порядка
0,1	7,08	5,96
0,2	1,5	0,91
0,3	0,005	0,13
0,4	1,37	2,11
0,5	4,23	5,49
0,6	7,56	8,83
0,7	10,71	11,96
0,8	13,39	14,48
0,9	15,47	16,43

Таблица 2.6. Исследование антиотражающих свойств алмазной субволновой бинарной решетки с помощью разностного решения. Отношение интенсивности отраженной волны к падающей обозначены « p ». Отклонение разностного решения от решений, полученных с помощью теории эффективных сред нулевого и второго порядков, обозначены как ε_0 и ε_2

Коэффициент заполнения	$p, \%$	$\varepsilon_0, \%$	$\varepsilon_2, \%$
0,1	6,57	7,76	9,29
0,2	0,85	76,47	7,06
0,3	0,3	98,33	56,67
0,4	2,82	51,41	25,18
0,5	6,25	32,32	12,16
0,6	9,49	20,33	6,96
0,7	11,98	10,6	0,17
0,8	13,96	4,08	3,73
0,9	15,55	0,52	5,67

Различия в результатах (таблица 2.6) существенны преимущественно для малых интенсивностей отраженных волн, когда сравнению подлежат близкие к нулю значения. В этом диапазоне разница между решениями, полученными посредством двух вариантов теории эффективных сред, также ощутима (таблица 2.5). Значения абсолютных отклонений трех решений друг от друга на всем диапазоне изменения коэффициента заполнения незначительны (рис. 2.6).

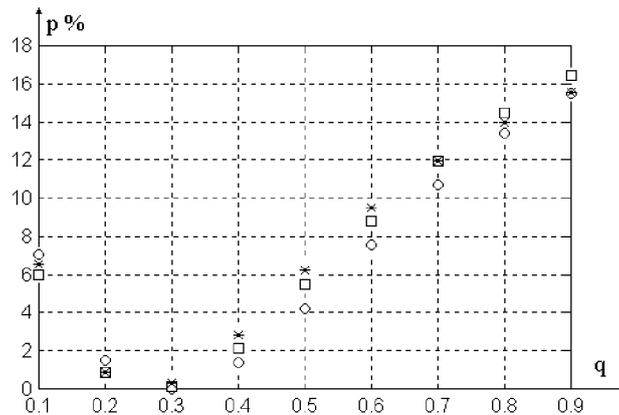


Рис. 2.6. Зависимость отношения интенсивности отраженной волны к падающей (p) от коэффициента заполнения q для теории эффективных сред нулевого (окружности), второго (квадраты) порядков и разностного решения (звездочки)

Различные варианты теории эффективных сред являются приближениями к точному решению, оценка погрешностей таких приближений в известной литературе отсутствует. Следовательно, использование разностного метода решения уравнений Максвелла для исследования антиотражающих свойств дифракционных решеток более предпочтительно. Кроме того, этот метод позволяет получить информацию о структуре поля в ближней зоне, на что не рассчитана теория эффективных сред.

Существенное отличие бинарной антиотражающей решетки – ее субволновый период. Точное изготовление решетки с требуемым профилем не всегда возможно в силу несовершенства технологии. Например, абляция поверхности поликристаллической алмазной пленки [14] позволяет успешно формировать треугольный субволновый профиль (рис. 2.7 из [27]) и не уместна при изготовлении субволновых бинарных элементов. Это связано с особенностями теплопереноса в поликристаллическом материале.

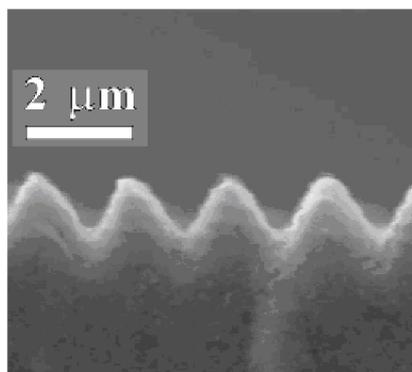


Рис. 2.7. Антиотражающий рельеф треугольного профиля

Результаты разностного моделирования прохождения электромагнитной H -волны через различные треугольные структуры представлены в таблице 2.7.

Таблица 2.7. Зависимость энергии p отраженной волны (выраженной в процентах от падающей) от параметров треугольного антиотражающего покрытия

Покрывтие треугольной формы		p , %
базис треугольника, мкм	высота треугольника, мкм	
4	2,5	6,92
3	2,4	4,77
3	3	4,29
3	2	6,14
3	1,8	6,97
2	2,5	3,68
1,5	2,5	3,4

Треугольник при этом принимался равнобедренным, период решетки (L_y) определялся по его базису. Протяженность вычислительной области по Z задавалась высотой треугольника h по (2.7), остальные параметры вычислительного эксперимента не изменялись по сравнению с предыдущим случаем.

Уменьшение базиса треугольника и, как следствие, сокращение периода дифракционной решетки позволяют снизить потери на френелевское отражение

с 16,96 % (в случае плоской границы раздела сред) до 3,4 % для решетки треугольного профиля (таблица 2.7).

Завершив верификацию разностного решения задачи дифракции на бесконечных периодических решетках, обратимся к исследованию периодической структуры на торце галогенидного ИК-волновода.

2.2. Исследование бинарной дифракционной решетки на торце галогенидного ИК-волновода

Технология горячей штамповки дифракционного микрорельефа на торце волновода заключается в изготовлении матрицы решетки методом фотолитографии и собственно штамповке микрорельефа [2, 7] (рис. 2.8).

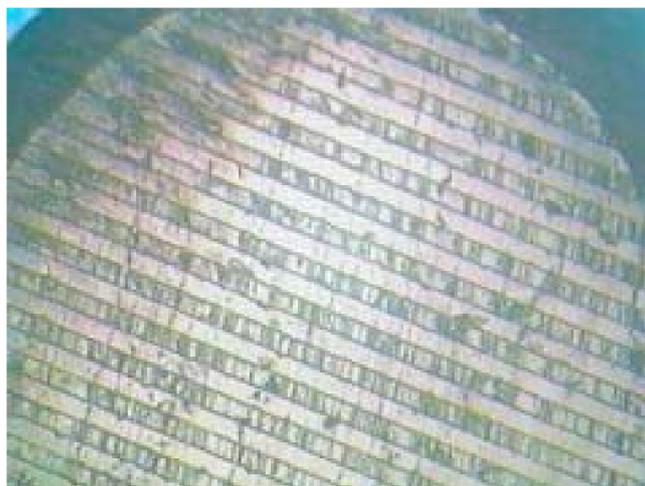


Рис. 2.8. Светоделительная решетка на торце галогенидного ИК-волновода

Указанный процесс обладает недостатками, присущими, с одной стороны, химическому травлению (изотропия процесса и связанный с ней клин травления) и, с другой стороны, штамповке на галогенидном материале (термическая и механическая деформации матрицы, усадка материала).

Технологические погрешности формирования микрорельефа удобно разделить на «локальные» и «глобальную» [7]. К «локальным» отнесем ошибки, заметные при исследовании одного периода решетки (рис. 2.9): в получении заданной высоты микрорельефа (недотрав или перетрав) и наличие клинов травления по обе стороны ступеньки формируемой бинарной решетки.

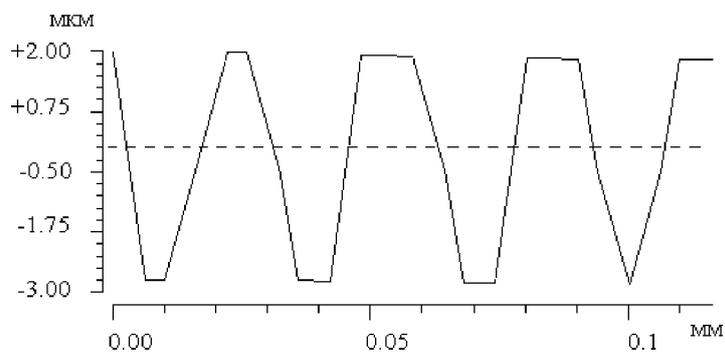


Рис. 2.9. Профилограмма участка решетки, полученная с помощью интерферометра «Zygo Newview 5000». Ось абсцисс направлена поперек штрихов решетки, по оси ординат откладывается высота профиля. Пунктирная линия соответствует нулевой отметке высоты микрорельефа

«Глобальной» технологической погрешностью, выявленной при изучении профилограммы всей решетки (рис. 2.10), является прогиб профиля.

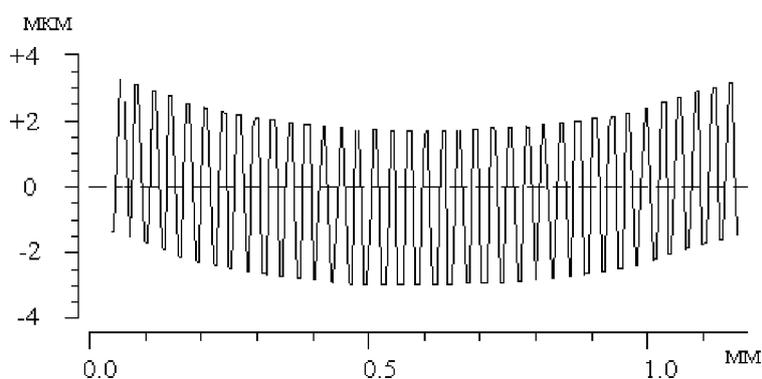


Рис. 2.10. Профилограмма всей решетки, полученная с помощью интерферометра «Zygo Newview 5000». Ось абсцисс направлена поперек штрихов решетки, по оси ординат откладывается высота профиля

Отклонения высоты профиля решетки от расчетной связаны с ошибками в определении длительности травления матрицы. При недостаточном времени травления высота оказывалась ниже расчетной (недотрав), при избыточном – выше (перетрав). При расчетной высоте h профиля в 4,6 мкм высота формируемого рельефа варьировалась от 4,0 до 5,2 мкм.

Образование клина травления объясняется изотропией химических процессов и аморфностью подложки. Острый угол между плоскостью торца и

подъемом клина (характеризующий клин травления) для представленной технологии варьировался в интервале $36-44^\circ$.

Прогиб профиля решетки происходит прежде всего из-за различия в структуре материалов сердечника и оболочки волновода и деформации матрицы. Величина прогиба в экспериментах сильно зависела от температурного режима штамповки и оказываемого на торец давления. Для настоящей технологии она варьировалась от 0,3 до 2 мкм в центре волновода.

Таким образом, выбор режимов в представленной технологической цепочке определяется не только характеристиками используемых материалов, но и приемлемостью величин отклонения профиля решетки от прямоугольного. Оценка влияния выявленных технологических погрешностей на формирование распределения интенсивностей дифракционных порядков проводилось методом вычислительного эксперимента.

При моделировании прохождения излучения через дифракционную решетку с технологическими погрешностями микрорельефа применяется широкий спектр методов. Так, традиционно используется метод определения интенсивностей дифракционных порядков, основанный на скалярной теории света. Исследуя решетки с субволновыми неоднородностями, применяют более строгие подходы, основанные на электромагнитной теории.

В настоящей работе моделирование распространения электромагнитного излучения через дифракционные решетки с различными технологическими погрешностями микрорельефа проводилось посредством разностного решения уравнений Максвелла в силу ограниченности подходов, представленных в параграфе 2.1.

При изучении «локальных» технологических погрешностей за основу выбиралась область вычислительного эксперимента, изображенная на рис. 2.5. Период решетки $L_y=30$ мкм (рис. 2.9), ширина ступеньки $a=d/2$, протяженность вычислительной области по Z варьировалась в зависимости от высоты профиля решетки h и задавалась по формуле (2.7). Сравнение разностных решений для одного периода и всей решетки целиком (а она ограничена диаметром волновода) подтверждает уместность моделирования процесса дифракции лишь на одном периоде. Показатель преломления материала галогенидного волновода $n=2,15$. Длина волны падающего излучения $\lambda=10,6$ мкм. Дискретизация сеточной области выбиралась равной (100,200); длительность процесса дифракции определялась как $T=30\lambda/c$.

Исследование влияния прогиба профиля решетки нуждается в наложении универсальной сеточной области на весь профиль. О бесконечном периодическом элементе речь уже не идет: решетка периодична, но ограничена диаметром сердечника волновода (840 мкм). В этом случае $L_y=(28*d+2+4)\lambda$, где 28 – число периодов решетки на торце волновода, d – длина одного периода в λ , второе слагаемое соответствует толщине поглощающего по направлению Y

объединенного слоя (слой B на рис. 1.27), свободное пространство в две длины волны с обеих сторон волновода формирует третье слагаемое. Длина вычислительной области вдоль направления Z вычислялась по (2.7) с добавлением к найденному значению глубины прогиба профиля. Дискретизация выбиралась равной (50,100); длительность процесса дифракции определялась как $T=200\lambda/c$.

Результатами моделирования (при изучении и «локальных» и «глобальных» технологических погрешностей) считались значения интенсивностей прошедших пяти дифракционных порядков: $I_0, I_1, I_{-1}, I_2, I_{-2}$ (нулевого, первого, минус первого, второго, минус второго).

При вычислении интенсивностей дифракционных порядков поля за ограниченным оптическим элементом будем использовать

$$T(y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{L_y} t(u) \exp(iuy) du ;$$

$$t(u) = \int_0^{L_y} T(y) \exp(-iuy) dy ,$$

соответствующие разложению по плоским волнам ограниченного поля.

Для верификации полученных результатов проверим соответствие закону сохранения энергии. В связи с этим дополнительно рассчитывались интенсивности отраженных порядков и все интенсивности складывались вместе. В представленных ниже вычислительных экспериментах погрешность отклонения от закона сохранения энергии составляла менее одного процента.

2.2.1. Влияние недотрава, перетрава и клина травления

Отдельно изучая влияние недотрава и перетрава ступеньки бинарной решетки, рассмотрим результаты моделирования, представленные в табл. 2.8.

Для решетки, лишенной указанных недостатков ($h_0=4,6$), в первый и минус первый прошедший порядок направляется 69% энергии падающего пучка, в нулевой, второй и минус второго порядки – по 1,63%. Можно говорить о хороших светоделительных показателях идеально изготовленной решетки. Исследуя случаи недотрава ($h < h_0$) и перетрава ($h > h_0$), по табл. 2.8 можно сделать вывод о предпочтительности перетрава над недотравом, характеризующимся не только меньшей суммарной энергией первого и минус первого порядков (0,65% для $h=4,0$ по сравнению с 0,67% для $h=5,2$), но и существенно большим количеством энергии, направляющейся в нулевой порядок (7,16% по сравнению с 2,67%). Таким образом, хотя суммарная энергия рабочих порядков (первого и минус первого) снижается несущественно (на 4% от общей энергии падающей волны), при максимальном недотраве становится заметным влияние нулевого порядка (возрастает с 1,63% до 7,16%).

Таблица 2.8. Распределение энергии прошедшей волны по дифракционным порядкам в зависимости от высоты профиля прямоугольной решетки

Высота профиля h (мкм)	Интенсивности дифракционных порядков		
	I_0	$I_1=I_{-1}$	$I_2=I_{-2}$
4,0	0,0716	0,3244	0,0111
4,2	0,046	0,3349	0,0126
4,4	0,0275	0,3417	0,0143
4,6	0,0163	0,345	0,0163
4,8	0,0125	0,3448	0,0184
5,0	0,016	0,341	0,0208
5,2	0,0267	0,3339	0,0234

Таблица 2.9. Распределения энергии прошедшей волны по дифракционным порядкам в зависимости от высоты профиля прямоугольной решетки с клином травления

Высота профиля h (мкм)	Интенсивности дифракционных порядков		
	I_0	$I_1=I_{-1}$	$I_2=I_{-2}$
4,0	0,1728	0,2324	0,02796
4,2	0,1453	0,236	0,02827
4,4	0,13	0,2317	0,02896
4,6	0,1196	0,2241	0,02874
4,8	0,1141	0,2134	0,02778
5,0	0,1142	0,2	0,02601
5,2	0,1177	0,1858	0,02433

К рассмотренной технологической погрешности добавим клин травления, приняв характеризующий его угол равным 40° . Результаты моделирования, представленные в табл. 2.9, свидетельствуют о существенном влиянии клина травления на распределение интенсивностей. Так, в случае точно выдержанной высоты профиля ($h_0=4,6$) добавление клина уводит из рабочих порядков четверть энергии падающей волны, а в нулевом порядке появляются лишние десять процентов такой энергии. Максимальный недотрав не ухудшает

распределение энергии по первому и минус первому порядкам, но доводит долю энергии в нулевом порядке до 17,28%, что уже не позволяет говорить о такой решетке, как о светоделительной. При предельном перетраве доля энергии, ушедшей в нулевой порядок, не увеличивается, однако, сокращается до 37% суммарная энергия рабочих порядков (при h_0 она составляла 45%), что опять не позволяет считать светоделительное свойство решетки удовлетворительным.

Таким образом, при необходимости сократить энергетические потери в первом и минус первом дифракционном порядках от клина травления предпочтительнее допустить недотрав матрицы. Перетрав же характеризуется меньшим значением интенсивности нулевого порядка.

2.2.2. Влияние прогиба решетки

Хорошо отлаженная технология изготовления матрицы позволит избежать как появления клина травления, так и погрешностей задания высоты микро-рельефа. Однако, получив в распоряжение даже точно выполненную матрицу, исследователь будет наблюдать “глобальную” технологическую погрешность – прогиб профиля решетки, возникающий при штамповке рельефа на торце волновода.

Основываясь на результатах численного моделирования работы решетки, изготовленной с идеальной матрицы (табл. 2.10), сделаем заключение о небольшом влиянии прогиба профиля на распределение интенсивностей прошедших порядков. Даже в случае предельной величины прогиба ($g=2,0$) суммарные энергетические потери в первом и минус первом порядках составили всего 12%, что вдвое меньше потерь от появления клина травления при точно выдержанной высоте профиля и отсутствии прогиба. Решетка продолжает демонстрировать хорошие светоделительные характеристики: интенсивности нулевого, второго и минус второго порядков не меняются (табл. 2.10) при выбранных значениях g .

Добавление клина травления и варьирование высоты профиля при максимальном прогибе (табл. 2.11) существенно сказываются на распределении энергии по порядкам по сравнению с предыдущей серией экспериментов (табл. 2.10). Однако, оценивая влияние именно прогиба и сравнивая с результатами аналогичной серии вычислительных экспериментов с решеткой без прогиба (табл. 2.9), отметим, что из рабочих порядков потеряно не более десяти процентов энергии (независимо от высоты профиля). При этом поведение значений интенсивностей нулевого порядка (табл. 4) по сравнению с результатами из табл. 2.10 не ухудшилось.

Таблица 2.10. Распределение энергии прошедшей волны по дифракционным порядкам в зависимости от глубины прогиба профиля решетки, изготовленной с идеальной матрицы

Глубина прогиба g (мкм)	Интенсивности дифракционных порядков		
	I_0	$I_1=I_{-1}$	$I_2=I_{-2}$
0,2	0,0142	0,3487	0,0164
0,4	0,0142	0,347	0,0163
0,6	0,0141	0,3435	0,0162
0,8	0,014	0,34	0,016
1,0	0,0138	0,3328	0,0156
1,2	0,0136	0,326	0,0152
1,4	0,0134	0,3183	0,0147
1,6	0,0131	0,3082	0,0142
1,8	0,0127	0,2993	0,0136
2,0	0,0123	0,2859	0,0128

Таблица 2.11. Распределение энергии прошедшей волны по дифракционным порядкам в зависимости от высоты профиля прямоугольной решетки с клином травления и предельной глубиной прогиба

Высота профиля h (мкм)	Интенсивности дифракционных порядков		
	I_0	$I_1=I_{-1}$	$I_2=I_{-2}$
4,0	0,1295	0,1921	0,0211
4,2	0,1116	0,1912	0,0206
4,4	0,1025	0,1844	0,0204
4,6	0,0974	0,175	0,0197
4,8	0,0969	0,1631	0,0186
5,0	0,0996	0,1506	0,0176
5,2	0,1048	0,1384	0,0169

Исследованная в данном параграфе решетка, сочетающая «глобальную» и «локальные» погрешности изготовления, обладает низкими светоделительными характеристиками. Особенно это относится к случаю предельного перетравива, когда прошедшая энергия почти равномерно распределяется между нулевым, первым и минус первым порядками (10,48%, 13,84% и 13,84%). Более того, от такого профиля отражается 58,46% падающей энергии.

Следует признать решающий вклад в искажение распределения интенсивностей за клином травления. Дальнейшие усилия по совершенствованию технологического процесса необходимо сосредоточить на недопущении появления указанного клина, или, по крайней мере, увеличении значения угла, характеризующего клин, что, возможно, например, при использовании технологии плазмохимического травления для изготовления матрицы.

3. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЧЕРЕЗ ДИФРАКЦИОННЫЕ МИКРОЛИНЗЫ

3.1. Тестирование модели, основанной на разностном решении уравнений Максвелла, на примере диэлектрического цилиндра круглого сечения

Развитие технологий современной оптики ставит задачи моделирования не только дифракционных решеток, но и ограниченных в пространстве дифракционных оптических элементов (ДОЭ), с субволновыми размерами характеристических неоднородностей. Математические модели, основанные на приближениях геометрической и скалярной оптики, становятся несостоятельными в субволновой области, в силу чего актуальна разработка моделей, основанных на основных уравнениях электродинамики.

Распространены методы, основанные на решении таких уравнений, записанных в интегральной форме [5,32]. Характеризуясь достаточной степенью разработанности, они отличаются большой вычислительной сложностью и невысокой универсальностью каждого отдельно взятого алгоритма, что затрудняет их широкое применение в инженерной практике.

Другой класс моделей связан с решением уравнений Максвелла в дифференциальной форме. В рамках этого подхода применяют методы конечных разностей [50] и конечных элементов [29]. Наиболее перспективным среди них (в смысле универсальности и вычислительной сложности) является конечно-разностный подход к решению уравнений Максвелла.

Предваряя применение конечно-разностного подхода к решению конкретной оптической задачи, проведем тестирование метода на хорошо изученном примере.

Большинство задач дифракции на различных элементах микрооптики, встречающиеся в практике вычислительного эксперимента, либо не имеют аналитического решения, либо трудности реализации такого решения превосходят сложность применения численного метода расчета той же задачи. К хорошо изученным и решенным аналитически относят задачи дифракции на бесконечном цилиндре круглого сечения, шаре и клине [4].

Исследуя распространение электромагнитного излучения разностным решением двумерных по пространству уравнений (1.15), выберем задачу дифракции на диэлектрическом цилиндре как тестовую. Ее аналитическое решение известно в виде разложения в ряд по цилиндрическим функциям: функциям Бесселя внутри цилиндра и функциям Ханкеля вне цилиндра [4]. Решение таким методом задач дифракции на цилиндрических объектах с диаметром, значительно превышающим длину волны, затруднительно в силу медленной

сходимости рядов. В этом случае предпочтительнее воспользоваться численным методом решения (например, разностным).

При разностном решении на круглое сечение (радиуса $r=0,5\lambda$) диэлектрического (показатель преломления $n=1,5$) цилиндра наложим универсальную сеточную область (рис. 1.27). Организуя постановку вычислительного эксперимента, примем $L_y=L_z=4\lambda$, $L=\lambda$. За время $T=20\lambda/c$ поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим. Центр кругового сечения цилиндра расположим в точке $y=\lambda$, $z=\lambda$ (рис. 1.27), соответствующей центру квадратной непоглощающей подобласти со сторонами $2\lambda \times 2\lambda$. Пусть на объект падает плоская монохроматическая ($\lambda=1$ мкм) T -волна, вектор напряженности электрического поля которой параллелен оси цилиндра (рассеянное поле будет волной типа H).

В параграфе 1.5 проводилось сравнение разностных решений, полученных посредством аналитического и численного задания падающего поля в случаях распространения T -волны в свободном пространстве и через плоскую границу раздела среда ($n=1,5$)/диэлектрик. В настоящем параграфе уместно провести аналогичное сравнение для случая дифракции H -волны на рассматриваемом диэлектрическом цилиндре, как на двумерном объекте с ограниченной апертурой.

Действительно, погрешность формирования падающей волны может оказаться столь незначительной, что не окажет влияния на результат моделирования распространения света через диэлектрический объект. Неточность результата моделирования, возникающая от наложения прямоугольной сеточной области на круглое сечение цилиндра, может многократно превзойти погрешность задания падающей волны, в силу чего разница между результатами применения методик формирования такой волны нивелируется. Ожидаемый эффект может оказаться особенно заметным на грубых стеках – областях с крупными шагами дискретизации, когда круглое сечение больше напоминает прямоугольное.

Задавая падающую волну аналитически по методике TF/SF, в соответствии с рекомендациями пункта 1.5.3.2 по (1.105)-(1.112) ограничим подобласть результирующего поля (рис. 1.42) в вычислительной области следующими отрезками (на рис. 1.27): $0 \leq y \leq 2\lambda$, $z=0$; $0 \leq y \leq 2\lambda$, $z=2\lambda$; $0 \leq z \leq 2\lambda$, $y=0$; $0 \leq z \leq 2\lambda$, $y=2\lambda$.

Численное задание падающего поля произведем по методу результирующего поля, воспользовавшись «прозрачным» источником (пункт 1.5.2), размещенным на отрезке $0 \leq y \leq 4\lambda$, $z=0$ (рис. 1.27).

Изучая результаты вычислительных экспериментов [8], кроме равномерной погрешности ϵ (определяющейся по (1.99) и характеризующей максимальное отклонение разностного решения от аналитического), будем искать величину

$$\delta = \sqrt{\frac{\sum_{j,k} (B_{j,k} - A_{j,k})^2}{\sum_{j,k} (B_{j,k})^2}}, \quad (3.1)$$

представляющую усредненное отклонение от аналитического решения, соответствующее среднеквадратичному отклонению. В выражении (3.1) функция $B_{j,k}$ – комплексная амплитуда электрического поля при аналитическом решении задачи дифракции на цилиндре.

Вычисление погрешностей ϵ и δ производилось на отрезке $0 \leq z \leq 2\lambda$, $y = \lambda$ подобласти без поглощения (рис. 1.27) универсальной сеточной области, который в данном случае соответствует участку главной оптической оси изучаемого элемента. Начинается указанный отрезок в свободном пространстве перед цилиндром ($0 \leq z \leq 0,5\lambda$, $y = \lambda$), проходит через центр цилиндра ($0,5\lambda \leq z \leq 1,5\lambda$, $y = \lambda$) и заканчивается опять в свободном пространстве за цилиндром ($1,5\lambda \leq z \leq 2\lambda$, $y = \lambda$). Приведенное расположение области регистрации комплексной амплитуды сеточной проекции электрического поля ($A_{j,k}$ при $j=Q$, $1 \leq k \leq 2Q$) позволяет оценить погрешности вычисления поля вне и внутри исследуемого объекта.

Таблица 3.1. Зависимости погрешностей вычислительных экспериментов при исследовании дифракции на диэлектрическом цилиндре круглого сечения от дискретизации сеточной области (Q, Q_i) для «прозрачного» источника (колонки А) и аналитически задаваемой падающей волны в методе TF/SF (колонки В)

(Q, Q_i)	А		В	
	$\epsilon, \%$	$\delta, \%$	$\epsilon, \%$	$\delta, \%$
(10,20)	16,0924	6,7265	19,056	7,0968
(20,40)	6,2121	1,3273	6,903	1,5286
(50,100)	2,1102	0,5124	2,7825	0,5593
(100,200)	0,8674	0,2598	1,4456	0,4243

Результаты моделирования дифракции H -волны на диэлектрическом цилиндре круглого сечения, представленные в таблице 3.1, позволяют говорить о сходимости разностного метода исследования указанной задачи к аналитическому решению при сгущении сеточной области. Дискретизацию (20,40) универсальной сеточной области следует считать достаточной, учитывая, что значение погрешности натурального эксперимента обычно превышает 5%.

Сравнивая значения погрешностей из колонок А и В, отметим превосходство численного метода формирования падающей волны над аналитическим. На самой густой сеточной области (рис. 3.1, строка (100,200)) разница в результатах составляет почти два раза. Для более разреженных областей разница присутствует для всех дискретизаций и любого критерия оценки погрешности вычислительного эксперимента (рис. 3.1).

Обратимся к сопоставлению данных в таблицах 1.4 (соответствует результатам применения аналитического и численного методов задания падающей волны для границы раздела двух сред) и 3.1 (аналитическое и численное задание падающей волны при исследовании диэлектрического цилиндра). В первом случае граница раздела диэлектрик/среда задавалась точно, во втором наложение прямоугольной сеточной области на круглый объект рождало неточность задания такого объекта.

Сравнивая результаты, соответствующие аналитическим способам ввода излучения, отметим, что на грубых сеточных областях ((10,20) и (20,40)) неточности аппроксимации круга на прямоугольной сетке вызвали большие погрешности разностного решения, чем неточности формирования падающей волны. По мере сгущения сеточных областей (до (50,100) и (100,200)) аппроксимация круга становится все более удовлетворительной, что приводит к преобладанию вклада в формирование общей погрешности метода задания падающей волны. На границе раздела сред такой метод характеризуется большей погрешностью (даже в одномерном случае), чем в вакууме, и результаты из таблицы 3.1 оказались точнее, чем из таблицы 1.4.

Численный способ задания падающей волны не вносит дополнительной погрешности в разностное решение, поэтому для него результаты из таблицы 1.4 лучше, чем из таблицы 3.1 при любой дискретизации сеточной области. Исходя из этого, можно в первом приближении принять разность между соответствующими результатами таблиц 3.1 и 1.1 (источник располагается в вакууме) за погрешность решения, вызванную наложением сеточной области на круглый диэлектрический объект.

Таким образом, задание падающей волны численно (в рамках концепций результирующего поля и разделенного поля) приводит к снижению погрешности разностного решения для широкого диапазона параметров дискретизации сеточной области при исследовании оптических элементов различной формы.

3.2. Моделирование прохождения света через дифракционные микролинзы с высокой числовой апертурой

Развитие технологической базы и миниатюризация оптических элементов делает актуальной задачу исследования прохождения электромагнитного

излучения через дифракционные микролинзы с апертурой от единиц до нескольких десятков длин волн.

Такие микролинзы находят применение при вводе излучения в оптическое волокно. Их расчет в рамках геометрической или скалярной оптики неточен в силу субволновых размеров неоднородностей микрорельефа – ступенек квантования. Поэтому актуальной задачей является исследование прохождения электромагнитного излучения через микролинзы с небольшой апертурой посредством разностного решения уравнений Максвелла.

Выберем для исследования две цилиндрические микролинзы с апертурами 8λ и 16λ , радиусами кривизны 10λ и 5λ и показателем преломления $n=2$, для выбранной длины волны в 1 мкм соответствующим хлориду серебра $n_{AgCl}=2,02239$ [37].

Рассчитаем бинарные и четырехуровневые дифракционные линзы выделением на соответствующих рефракционных микролинзах зон Френеля и квантованием полутоновых рельефов. При этом фазовый набег волны для соседних зон Френеля отличается на число, кратное 2π , а квантование производится делением перепада высоты рельефа рефракционной линзы в пределах одной зоны на равные части [27].

На рефракционной микролинзе с апертурой 8λ выделим три зоны Френеля шириной 1λ , 6λ и 1λ ; отличим фазовый набег между зонами на 4π (волна в диэлектрике проходит путь в две своих длины) (рис. 3.1).

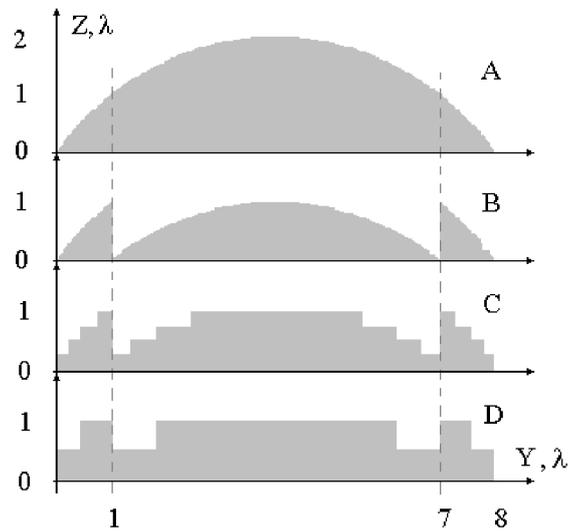


Рис. 3.1. Соответствие рефракционной (А), полутоновой (В), четырехуровневой (С) и бинарной (D) микролинз. Пунктирной линией обозначены границы зон Френеля

Фактически переход от рефракционной (рис. 3.1А) к дифракционной полутонковой микролинзе (рис. 3.1В) соответствует удалению из рефракционной микролинзы прямоугольника, ограниченного сторонами $y=\lambda$, $0 \leq z \leq \lambda$; $y=7\lambda$, $0 \leq z \leq \lambda$; $z=0$, $\lambda \leq y \leq 7\lambda$ и $z=\lambda$; $\lambda \leq y \leq 7\lambda$, при прохождении которого волна приобретает фазовый набег равный 4π , вследствие чего на формирование поля за линзой влияния не оказывает.

Далее, для получения бинарной дифракционной микролинзы (рис. 3.1Д) из полутонковой (рис. 3.1В), рельеф последней квантуется двумя ступеньками равной высоты. Подобное квантование соответствует интерполяции на одной зоне непрерывной функции рельефа полутонковой линзы двухступенчатой (бинарной) функцией рельефа бинарной дифракционной микролинзы. При этом на два равных интервала разбивается перепад высоты микрорельефа и находится координата по Y , разделяющая две ступеньки внутри одной зоны Френеля.

Построение четырехуровневой микролинзы (рис. 3.1Д) сопровождается интерполяцией на одной зоне непрерывной функции рельефа полутонковой линзы четырехступенчатой функцией. Перепад высот микрорельефа полутонковой линзы внутри одной зоны Френеля разбивается на четыре равных интервала.

Аналогично производится квантование линзы с апертурой в 16λ , сопровождающееся выделением семи зон Френеля.

Организуя вычислительный эксперимент для линз с апертурой в 8λ , положим в универсальной сеточной области (рис. 1.27) $L_y=10\lambda$ (8λ апертура микролинзы и 2λ – толщина объединенного поглощающего слоя по направлению Y), $L_z=12\lambda$ (10λ на подобласть с микролинзой и 2λ – толщина объединенного поглощающего слоя по направлению Z), выберем дискретизацию равной $(50,100)$. За время $T=50\lambda/c$ поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим. «Прозрачный» источник, излучающий плоскую однородную волну, расположим на отрезке $z=0$, $0 \leq y \leq 10\lambda$ (рис. 3.2).

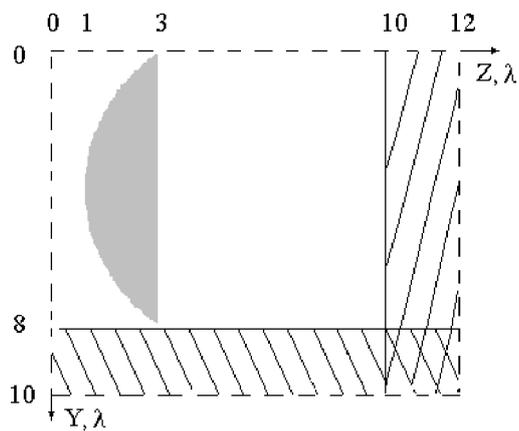


Рис. 3.2. Вычислительная область для разностного решения задачи дифракции на микролинзах с апертурой 8λ

Микролинзы установим правым полюсом на отрезок $z=3\lambda$, $0 \leq y \leq 8\lambda$, повернув рельефом навстречу падающей волне (рис. 3.2). Тогда расстояние от левого полюса до левого края вычислительной области для рефракционной микролинзы составит λ , для дифракционных - 2λ . За линзами останется пространство в 7λ на 8λ до поглощающих по Z и Y слоев.

На рис. 3.3-3.5 представлены результаты моделирования распространения излучения через рассчитанные микролинзы [4].

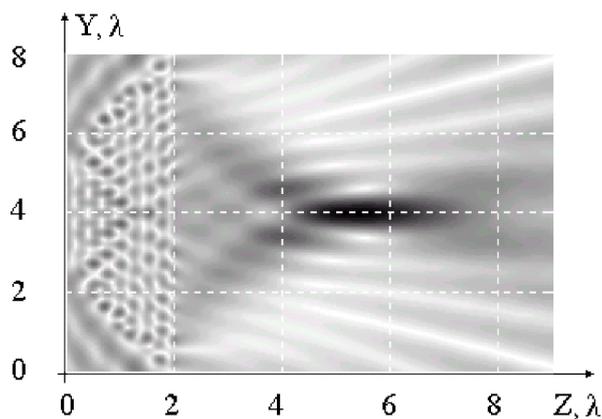


Рис. 3.3. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля в рефракционной микролинзе с апертурой 8λ и за ней

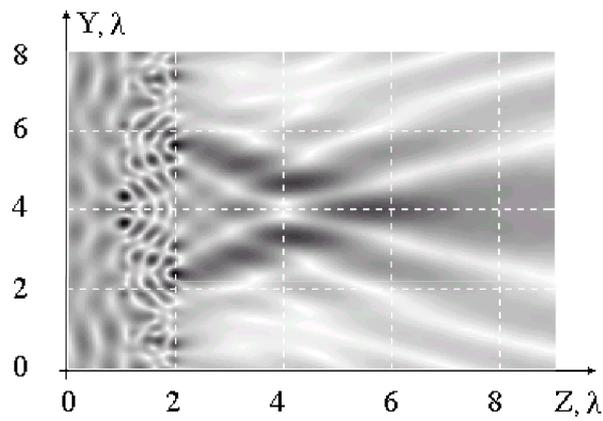


Рис. 3.4. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля в бинарной дифракционной микролинзе с апертурой 8λ и за ней

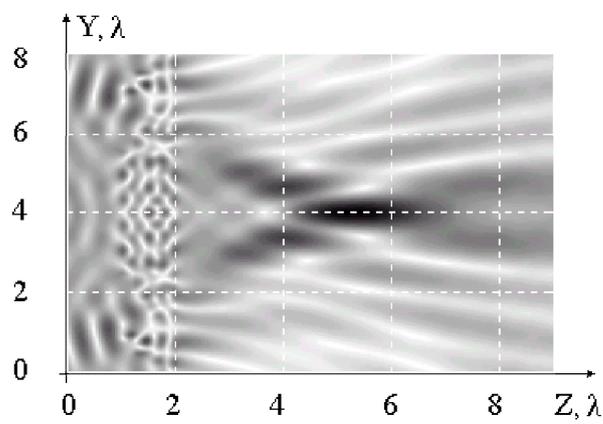


Рис. 3.5. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля в четырехуровневой дифракционной микролинзе с апертурой 8λ и за ней

Отметим, что результаты моделирования распространения излучения через дифракционные микролинзы методом разностного решения уравнений Максвелла впервые были представлены в [16]. Как видно из рис. 3.3-3.4, разностное решение позволяет изучать распределение поля внутри оптического элемента (где непосредственный замер параметров поля методом натурального эксперимента невозможен) и в ближней зоне (где проведение натуральных измерений не всегда просто).

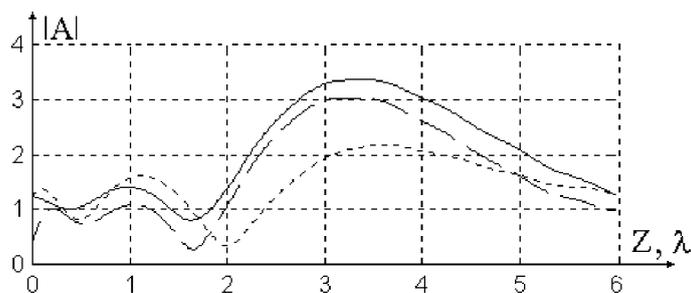


Рис. 3.6. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля на главной оптической оси рефракционной (сплошная кривая), четырехуровневой (пунктирная кривая) и бинарной дифракционной микролинзы с апертурой 8λ . Начало отсчета совпадает с правым полюсом линз

Сравнивая распределения модулей комплексных амплитуд напряженностей электрических полей на главной оптической оси за рефракционной и дифракционной линзами (рис. 3.6), отметим увеличение значения максимума рассматриваемой величины с ростом числа уровней квантования ДОЭ, что согласуется с натурными наблюдениями [27].

Кроме того, положение максимумов модулей комплексных амплитуд отличается от рассчитанного в рамках геометрической оптики (рис. 3.6), согласно которой фокусировка должна произойти на расстоянии 4λ от правого полюса. Эта теория действительно теряет свою адекватность при характеристических неоднородностях микрорельефа, сравнимых с длиной волны.

Организуя вычислительный эксперимент для линз с апертурой в 16λ , положим в универсальной сеточной области (рис. 1.27) $L_y=18\lambda$ (16λ апертура микролинзы и 2λ – толщина объединенного поглощающего слоя по направлению Y), $L_z=18\lambda$ (16λ на подобласть с микролинзой и 2λ – толщина объединенного поглощающего слоя по направлению Z), выберем дискретизацию равной $(50,100)$. За время $T=75\lambda/c$ поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим. «Прозрачный» источник, излучающий плоскую однородную волну, расположим на отрезке $z=0$, $0 \leq y \leq 18\lambda$.

В традиционной дифракционной оптике при сравнении результатов моделирования распространения излучения через рефракционные и дифракционные микролинзы проблема взаимного расположения микролинз не рассматривается [27]. Подразумевается, что дифракционная микролинза устанавливается «на место» рефракционной, хотя разница в толщине сравниваемых линз может достигать порядка и определение «места» становится весьма расплывчатым.

Изучая влияние взаимного расположения микролинз, в новой серии вычислительных экспериментов расположим правый полюс дифракционной микролинзы на отрезке $z=5\lambda$, $0 \leq y \leq 16\lambda$ вычислительной области, а правые полюса дифракционных микролинз левее, на $z=3\lambda$, $0 \leq y \leq 16\lambda$. При этом толщина рефракционной микролинзы для выбранного радиуса кривизны составляет 4λ , толщина дифракционных – λ . Все линзы обращены рельефом навстречу падающей волне.

На рис. 3.7-3.10 представлены результаты моделирования для микролинз с апертурой 16λ .

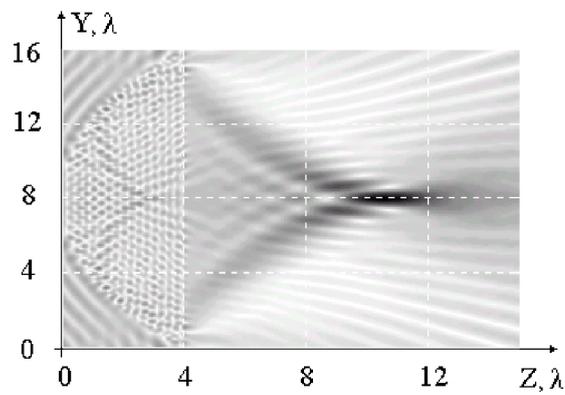


Рис. 3.7. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля в рефракционной микролинзе с апертурой 16λ и за ней

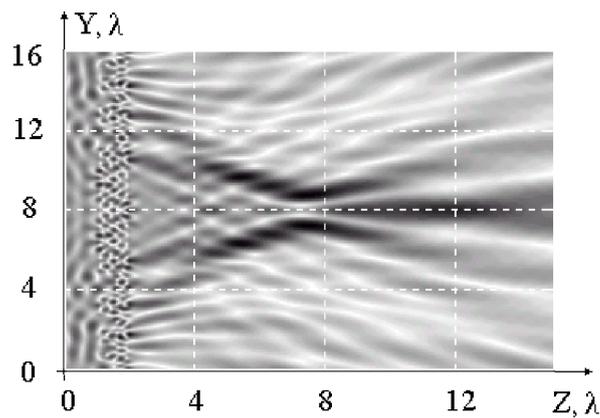


Рис. 3.8. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля в бинарной дифракционной микролинзе с апертурой 16λ и за ней

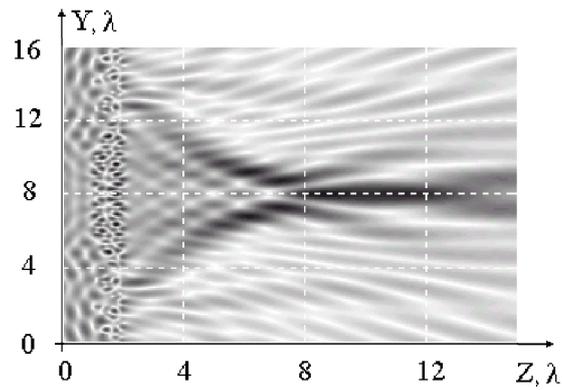


Рис. 3.9. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля в четырехуровневой дифракционной микролинзе с апертурой 16λ и за ней

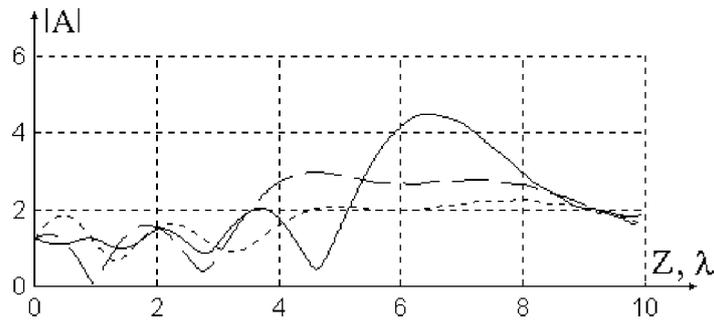


Рис. 3.10. Распределение модуля комплексной амплитуды электрического поля на главной оптической оси рефракционной (сплошная кривая), четырехуровневой (пунктирная кривая) и бинарной дифракционной микролинзы с апертурой 16λ . Начало отсчета совпадает с правым полюсом рефракционной линзы

Как и для предыдущей серии вычислительных экспериментов (рис. 3.6), отметим увеличение значения максимума модулей комплексных амплитуд напряженностей электрических полей на главной оптической оси за рефракционной и дифракционной линзами (рис. 3.10) с ростом числа уровней квантования ДОО, что согласуется с натурными наблюдениями [27].

Также отличаются от рассчитанных в рамках геометрической оптики положения максимумов модулей комплексных амплитуд, согласно геометрическому представлению фокусировка должна произойти на расстоянии 8λ от правого полюса микролинз.

Более того, позиция дифракционной линзы относительно рефракционной играет значительную роль. Сдвинув правый полюс четырехуровневой дифракционной микролинзы на 2λ влево относительно правого полюса рефракционной микролинзы, мы наблюдаем смещение примерно на эту же величину положения максимума модуля комплексной амплитуды на главной оптической оси относительно аналогичной характеристики рефракционной микролинзы.

Сравнивая распределение модуля комплексной амплитуды на главных оптических осях рефракционных микролинз с апертурами 8λ (рис. 3.6) и 16λ (рис. 3.10), отметим рост изучаемой величины с увеличением апертуры. Неудивительно, что микролинза, освещаемая большим участком фронта плоской однородной волны, собирает больше энергии.

Однако для разноапертурных дифракционных микролинз подобный эффект не наблюдается (рис. 3.6, 3.10). Максимумы модулей комплексных амплитуд на главных оптических осях не увеличиваются с ростом апертуры что для четырехуровневых, что для бинарных микролинз.

Между тем, наблюдая дифракционную картину за линзами с апертурой 16λ (рис. 3.8, 3.9), убедимся, что значительного рассеивания энергии не происходит, она концентрируется на главной оптической оси, как и в случае линз меньшей апертуры. С ростом апертуры дифракционных линз наблюдается удлинение зоны фокусировки по направлению Z , когда вместо ярко выраженного максимума наблюдается фокусировка в продольные отрезки (рис. 3.10). Для четырехуровневой микролинзы значение модуля комплексной амплитуды несколько спадает от начала отрезка к концу, для бинарной незначительно возрастает, но координаты начала и конца отрезков фокусировки выражены вполне определенно.

Вышесказанное нельзя отнести к микролинзам с апертурой 8λ , для которых максимумы модулей комплексной амплитуды на главной оптической оси точно выражены и не являются отрезками.

3.3 Распространение электромагнитного излучения через алмазную дифракционную микролинзу с технологическими искажениями расчетного микрорельефа

Использование в промышленности мощных CO_2 -лазеров ($\lambda=10,6$ мкм) определяет интерес к алмазным дифракционным элементам, предназначенным для фокусировки лазерного излучения в области различной конфигурации. В частности, в [15,17,19,25] исследовались дифракционные оптические элементы - фокусаторы и линзы, изготовленные прямым лазерным травлением поверхности алмазной пленки ($n=2,4$) путем селективной абляции с помощью эксимерного УФ-лазера. Данный метод не позволяет формировать расчетный ступенчатый профиль дифракционного микрорельефа в силу особенностей технологии, что влечет за собой отклонения в работе ДОЭ от расчетных характеристик.

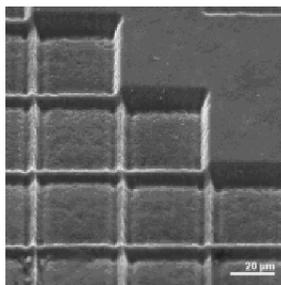


Рис. 3.11. Технологические погрешности в виде «бортиков» на стыке элементарных областей микроструктурирования

Систематические локальные искажения микрорельефа («бортики») возникают на границах элементарных областей структурирования - областей, каждая из которых соответствует одному отсчету фазовой функции ДОЭ (рис. 3.11, 3.12а,б).

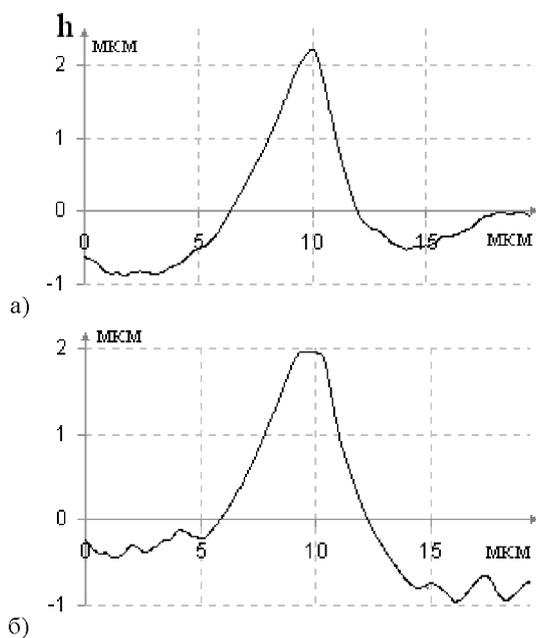


Рис.3.12. Вид локального искажения микрорельефа на стыке двух элементарных областей структурирования: с одинаковыми глубинами травления (а); с разными глубинами травления (б)

Субволновый характер погрешностей не позволяет использовать скалярное приближение для анализа их влияния.

Изучая вклад, вносимый в формирование дифракционной картины за оптическим элементом представленными технологическими погрешностями, отдельно рассмотрим влияние «бортиков» на локальную дифракционную картину непосредственно за ними [17,18], затем оценим величину воздействия технологических погрешностей на поле за всей дифракционной линзой [15].

3.3.1. Распространение электромагнитного излучения через локальные фрагменты ДОЭ с технологическими погрешностями изготовления

В качестве модельного примера было выбрано [17,18] исследование распространения излучения через соседние элементарные области восьмиуровневой алмазной микролинзы с одинаковой расчетной глубиной структурирования (т.е. с одинаковой расчетной высотой микрорельефа) и через соседние области, находящиеся на разных глубинах структурирования и отличающиеся на высоту одной ступеньки квантованной фазовой функции (0,9464 мкм).

При исследовании влияния технологических погрешностей их профиль аппроксимировался равнобедренными треугольниками. Приведенная в таблице 3.2 зависимость параметров технологических погрешностей от уровня квантования была получена с помощью натуральных измерений методами микроскопии.

Таблица 3.2. Зависимость параметров технологических погрешностей от уровня квантования

Параметры технологических погрешностей	Уровни квантования фазовой функции							
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Высота h (мкм)	0	1	1,5	2	3	3,5	4	4,5
Базис (мкм)	0	5	7	6	7,5	8	10	10

Технологические погрешности отсутствуют на первой ступеньке фазовой функции, так как при формировании этой области не применяется травление. С возрастанием уровня квантования увеличивается глубина травления, следовательно, возрастают высота и базис треугольника, присутствие которого свидетельствует о несовершенстве технологического процесса.

Вне «бортиков» поверхность области структурирования полагалась плоской. Линейный размер элементарной области выбирался равным шагу дискретизации лазерного структурирования - 40 мкм, что составляет приблизительно 4 длины волны излучения CO_2 – лазера ($\lambda=10,6$ мкм). В рамках данной

работы предполагалось, что на границу раздела воздух/алмаз ($\epsilon=5,76$) нормально падает Н - волна.

В случае отсутствия «бортиков» вся энергия волны, падающей на плоскую границу раздела, переходит в нулевой отраженный и нулевой прошедший порядки, причем интенсивность нулевого прошедшего порядка, отнесенная к интенсивности падающей волны, есть величина $I=0,8305$. Для ступенчатого профиля, в отсутствии «бортиков» при высоте ступеньки в $0,9464$ мкм, интенсивность нулевого прошедшего порядка, отнесенная к интенсивности падающей волны, есть величина $I=0,667$, на порядок и более превышающая аналогичные величины для остальных прошедших порядков.

Таким образом, в обоих случаях (плоский и ступенчатый профиль исследуемого фрагмента ДОЭ) будем характеризовать влияние субволновой погрешности изготовления величиной $\delta=(I-I_0)/I$, которая показывает долю энергии, ушедшей из нулевого порядка при прохождении рельефа с «бортиком» (I_0 - интенсивность нулевого прошедшего порядка при наличии «бортиков», I - без таковых).

Приступая к численному исследованию влияния технологических погрешностей, рассмотрим прохождение Н - волны через дифракционную решетку с периодом, равным линейному размеру элементарной области структурирования, и областью модуляции, эквивалентной профилю исследуемого участка ДОЭ. Зададим при этом следующие параметры вычислительной области (рис. 3.13): $L_y=3,77\lambda$ (40 мкм без поглощения по направлению Y), $L_z=3\lambda$ (2λ - толщина объединенного поглощающего слоя по направлению Z), выберем дискретизацию равной (100,200). За время $T=30\lambda/c$ поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим.

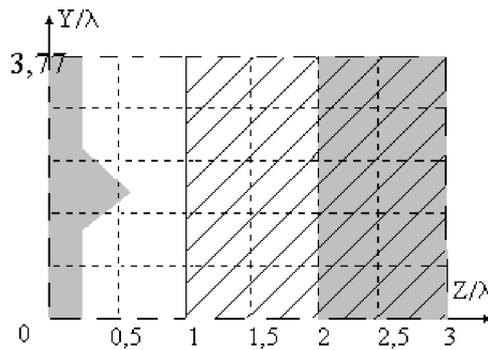


Рис. 3.13. Вычислительная область для разностного решения задачи дифракции на алмазной решетке с технологической погрешностью изготовления рельефа. Подобласть с показателем преломления $n=2,4$ (алмаз) закрашена серым, свободное пространство – белое

«Прозрачный» источник, излучающий плоскую однородную волну, расположим на отрезке $z=0$, $0 \leq y \leq L_y$. Прошедшую волну будем регистрировать на отрезке $z=0,75\lambda$, $0 \leq y \leq L_y$. Подобласть $0 \leq z \leq 0,25$, $0 \leq y \leq L_y$ всегда заполняется диэлектриком, рельеф решетки формируется в прямоугольнике $0,25 \leq z \leq 0,75$, $0 \leq y \leq L_y$, за которым вплоть до области поглощения находится свободное пространство.

Моделируя прохождение электромагнитного излучения через разноуровневые фрагменты рельефа, отнесем к такой решетке технологическую погрешность (из таблицы 3.2), характерную для более глубокого уровня травления, расположив соответствующий треугольник на границе двух уровней. Относительно площадки структурирования с менее глубоким уровнем высота треугольника уменьшится на разность высот между уровнями, соответственно сократится и базис. Интересно, что высота треугольной погрешности изготовления для второго уровня квантования почти соответствует перепаду высот между соседними уровнями. Как следствие, переход от первого уровня ко второму имеет пологую, не треугольную форму. Действительно, если поверхность первого уровня не подвергается структурированию, то и искажения профиля на исследуемом стыке со стороны первого уровня быть не должно.

Изучая зависимость параметра δ от уровня квантования (таб. 3.3, 3.4), можно отметить, что для линейного участка фазовой функции наличие технологических погрешностей, начиная с III уровня квантования, заметно влияет ($\delta > 5\%$) на работу этого участка. Работа ступенчатого участка заметно нарушается при переходе с IV на V уровень и глубже.

Таблица 3.3. Оценка влияния технологических погрешностей, возникающих на одном уровне квантования

	Уровни квантования фазовой функции						
	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
$\delta, \%$	3,39	9,54	15,21	31,12	38,64	50,45	55,37

Таблица 3.4. Оценка влияния технологических погрешностей, возникающих между уровнями квантования

	Уровни квантования фазовой функции						
	I-II	II-III	III-IV	IV-V	V-VI	VI-VII	VII-VIII
$\delta, \%$	0,32	1,48	5,81	22,81	31,65	42	49,11

Влияние технологических погрешностей более сказывается на работе линейных участков профиля, нежели на работе ступенчатых. Появление

треугольной технологической погрешности уводит энергию из нулевого порядка, то же происходит и на ступенчатом рельефе без искажения. Возможно, поэтому ступенчатый рельеф менее чувствителен к треугольным искажениям.

Очевидно стремление ослабить влияние технологических погрешностей изготовления на работу ДОЭ. Технология травления позволяет заменить погрешности в виде выступов над рельефом на углубления в нем, при этом сохраняется треугольная форма технологических погрешностей [25].

Таблица 3.5. Оценка влияния технологических погрешностей (в виде углублений, возникающих на одном уровне квантования)

	Уровни квантования фазовой функции						
	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
$\delta, \%$	2,59	8,37	10,43	22,22	28,57	40,69	42,05

Сравнивая результаты, представленные в таблицах 3.3, 3.5, можно отметить некоторое ослабление влияния технологических погрешностей на работу фрагментов II и III уровней ДОЭ и существенное улучшение работы (уменьшение погрешности в 1,46, 1,4, 1,35, 1,24 и 1,32 раза) фрагментов нижерасположенных уровней. Следовательно, технология травления, оставляющая погрешности в виде углублений, предпочтительнее существующей технологии.

Другой подход к ослаблению влияния технологических погрешностей состоит в увеличении линейного размера элементарной области травления [18]. Таблицы 3.6 и 3.7 содержат результаты моделирования при линейном размере элементарной области травления в 60 мкм.

Таблица 3.6. Оценка влияния технологических погрешностей, возникающих на одном уровне квантования при линейном размере элементарной области травления в 60 мкм

Положение треугольной погрешности на рельефе	Уровни квантования фазовой функции						
	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
в виде выступа над рельефом ($\delta, \%$)	2,55	6,93	10,94	22,1	27,75	36,35	39,78
в виде выемки в рельефе ($\delta, \%$)	1,97	5,98	7,54	15,65	19,96	28,9	29,66

В этом случае те же технологические погрешности влияют на работу участков ДОЭ в среднем на 30% меньше, чем при линейном размере элементарной области травления в 40 мкм. Отметим, однако, что увеличение размера элементарной области травления ведет к снижению точности аппроксимации расчетной непрерывной фазовой функции линзы ее дискретным аналогом.

Таблица 3.7. Оценка влияния технологических погрешностей, возникающих между уровнями квантования при линейном размере элементарной области травления в 60 мкм

	Уровни квантования фазовой функции						
	I-II	II-III	III-IV	IV-V	V-VI	VI-VII	VII-VIII
$\delta, \%$	0,24	1,03	4,27	16,25	22,56	30,4	35,19

Подводя итог проведенным исследованиям, отметим, что технологические погрешности оказывают существенное влияние на работу ДОО при больших глубинах травления. Ослабить это влияние можно, заменив погрешности в виде выступов над рельефом на углубления в нем или (и) увеличивая линейный размер элементарной области травления.

3.3.2. Распространение электромагнитного излучения через алмазную четырехуровневую дифракционную микролинзу

Изучая влияние технологических погрешностей изготовления на работу оптического элемента в целом, поставим четыре вычислительных эксперимента [15], в которых исследуется полутонкая, четырехуровневая дифракционная линза, четырехуровневая линза с областями микроструктурирования и четырехуровневая линза с областями микроструктурирования и присущими им технологическими неоднородностями. Фокусное расстояние исходной рефракционной линзы примем $f=6,625$ мм (625λ , $\lambda=10,6$ мкм), апертуру положим равной 1,06 мм (100λ).

При разностном решении на рельеф микролинзы наложим универсальную сеточную область с учетом симметрии профиля относительно главной оптической оси (рис. 1.32а), установив на ней магнитную стенку. Организуя постановку вычислительного эксперимента, примем $L_y=54\lambda$ (50λ – половина апертуры линзы, λ – толщина поглощающего слоя и 3λ – дистанция между краем линзы и поглощающим слоем), $L_z=3\lambda$ (2λ – совокупная толщина поглощающих слоев и $0,7143\lambda$ – высота рельефа линзы, $0,1\lambda$ – толщина прилегающего к рельефу участка подложки, $0,1857\lambda$ – длина прилегающего к рельефу участка свободного пространства). За время $T=100\lambda/c$ поле в изучаемой области устоится и может считаться монохроматическим. Дискретизацию по пространству положим равной (50,100). Пусть на линзу падает плоская однородная волна.

Целью первого эксперимента было получение распределения квадрата модуля комплексной амплитуды напряженности электрического поля в плоскости за полутонкой линзой (рис. 3.14), соответствующей исследуемой рефракционной и насчитывающей три зоны Френеля. Радиус центральной зоны Френеля согласно [27] составил $35,3553\lambda$.

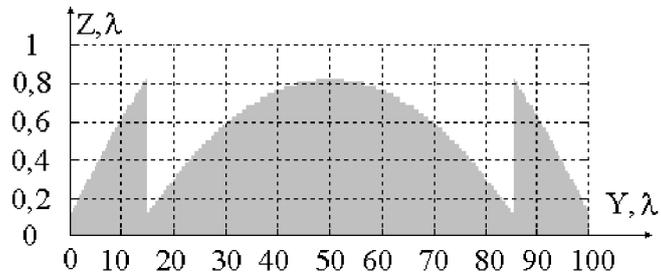


Рис. 3.14. Профиль алмазной полутоновой линзы с тремя зонами Френеля

Регистрируя комплексную амплитуду (полученную в результате разностного решения уравнений Максвелла) за выходной плоскостью линзы, ищем нормированное распределение квадрата модуля комплексной амплитуды на главной оптической оси за линзой (рис. 3.15, 3.16) с помощью интеграла Кирхгофа [36].

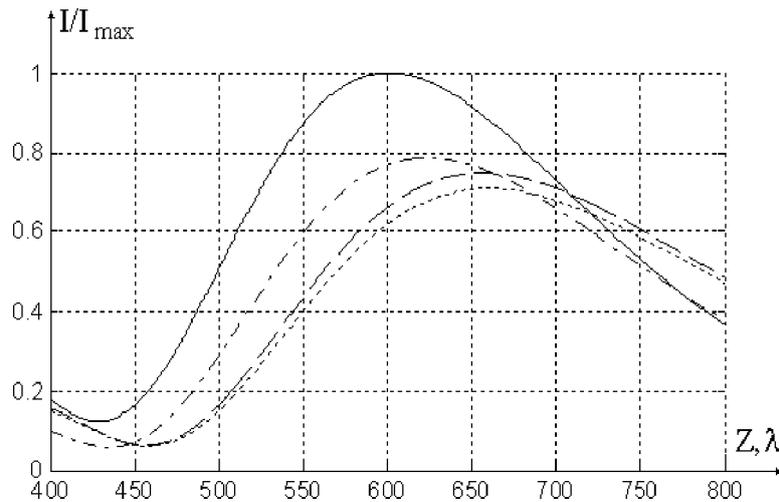


Рис. 3.15. Распределение нормированного квадрата модуля комплексной амплитуды на главной оптической оси полутоновой линзы (непрерывная линия), четырехуровневой дифракционной линзы (штрихпунктирная линия), четырехуровневой дифракционной линзы со структурированным микрорельефом (пунктирная линия) и четырехуровневой дифракционной линзы со структурированным микрорельефом и технологическими неоднородностями (двойной пунктир) на расстоянии Z от правого полюса линзы

Нормировка производится на значение I_{\max} , взятое на расстоянии $z_1 = 601,2\lambda$ от правого полюса линзы. Фокусное расстояние при этом оказалось короче на $23,8\lambda$ по сравнению с теоретически рассчитанным.

Нормированное распределение квадрата модуля комплексной амплитуды вдоль оси Y на расстоянии z_1 от правого полюса линзы представлено на рис. 3.16. При этом ось Y пересекает главную оптическую ось в точке $y = 50\lambda$.

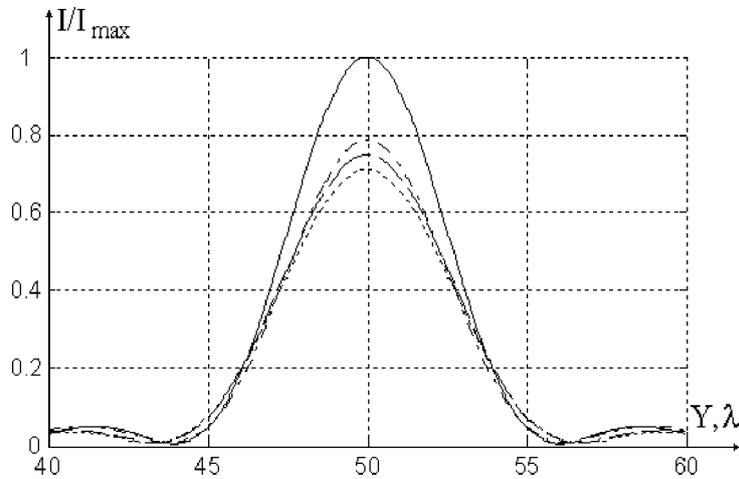


Рис. 3.16. Распределение нормированного квадрата модуля комплексной амплитуды вдоль оси Y при максимальных значениях I на главной оптической оси (в точке z_1) полутонной линзы (непрерывная линия), четырехуровневой дифракционной линзы (штрихпунктирная линия), четырехуровневой дифракционной линзы со структурированным микрорельефом (пунктирная линия) и четырехуровневой дифракционной линзы со структурированным микрорельефом и технологическими неоднородностями (двойной пунктир) на расстоянии Z от правого полюса линзы

Второй вычислительный эксперимент проводился с четырехуровневой линзой (рис. 3.17), полученной квантованием полутонной линзы, представленной на рис. 3.14. Согласно [27], границы между ступеньками микрорельефа для правой части линзы располагаются в точках $y_1 = 67,6777\lambda$, $y_2 = 75\lambda$, $y_3 = 80,6186\lambda$, $y_4 = 85,3553\lambda$, $y_5 = 89,5285\lambda$, $y_6 = 93,3013\lambda$, $y_7 = 96,7707\lambda$ и $y_8 = 100\lambda$ (рис. 3.17).

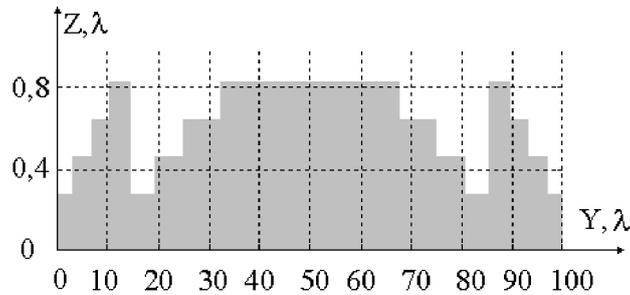


Рис. 3.17. Профиль алмазной четырехуровневой дифракционной линзы с тремя зонами Френеля

Примем за эффективность дифракционной линзы отношение максимальной интенсивности на главной оптической оси к аналогичному параметру полутонковой линзы. В результате вычислительного эксперимента эффективность изучаемого ДОЭ была найдена равной 78,685% (рис. 3.16). Фокусное расстояние составило $z_1=623,9\lambda$ и оказалось меньше теоретически рассчитанного на $1,1\lambda$ (рис. 3.15). Падение эффективности четырехуровневой линзы, очевидно, связано с квантованием полутонкового микрорельефа.

Как отмечалось ранее (в пункте 3.3.1), технология абляции поверхности алмазной поликристаллической пластины накладывает ограничение на профиль ДОЭ, связанное с фиксированным линейным размером элементарной области структурирования. Принимая указанный параметр равным 4λ , произведем перерасчет четырехуровневой дифракционной линзы, стремясь к наименьшим искажениям профиля по сравнению с неструктурированным ДОЭ на рис. 3.17.

Апертура структурированной дифракционной линзы увеличится на 4λ (по сравнению с неструктурированной) и составит 104λ . При этом границы между ступеньками микрорельефа для правой части новой линзы расположатся в точках $y_1=68\lambda$, $y_2=76\lambda$, $y_3=84\lambda$, $y_4=88\lambda$, $y_5=92\lambda$, $y_6=96\lambda$, $y_7=100\lambda$ и $y_8=104\lambda$, а центр линзы сместится в позицию $y=52\lambda$.

Эффективность рассчитанного таким образом ДОЭ, найденная в результате третьего вычислительного эксперимента, составила 74,7323% (рис. 3.16), фокусное расстояние оказалось равным $z_1=656,6\lambda$, что больше теоретически рассчитанного на $31,6\lambda$ (рис. 3.15). Таким образом, учет линейного размера элементарной области структурирования привел к снижению эффективности на 3,9527%.

В четвертом вычислительном эксперименте оценивалось влияние технологических неоднородностей, возникающих на границах элементарных областей

микроструктурирования. Неоднородности выбирались в виде выступов над профилем ДОЭ и задавались параметрами из таблицы 3.2.

В результате эффективность структурированной линзы с технологическими неоднородностями составила 70,88% (рис. 3.16), а фокусное расстояние $z_1=660,2\lambda$, что больше теоретически рассчитанного на $35,2\lambda$ (рис. 3.15). Учет влияния технологических неоднородностей привел к снижению эффективности линзы еще на 3,8523%.

Совокупное влияние технологических особенностей (структурирования и неоднородностей на стыке элементарных областей травления) характеризуется снижением эффективности с 78,685% (для четырехуровневой дифракционной линзы) до 70,88% (на 7,805%) и смещению области фокусировки на $27,3\lambda$.

4. СОКРАЩЕНИЕ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ РАЗНОСТНОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА

4.1. Декомпозиция сеточной области при разностном решении уравнений Максвелла

Математическое моделирование распространения электромагнитных волн, основанное на разностном решении уравнений Максвелла, находит все большее применение в вычислительной практике. С одной стороны, это объясняется универсальностью модели, содержащей основные уравнения электродинамики и строго описывающей волновые процессы в оптике, радиофизике, теории фотонных кристаллов и в других приложениях. С другой стороны, популярность данной модели связана с простотой ее реализации, когда после задания характеристик исследуемого объекта (форма, проводимость, диэлектрическая и магнитная проницаемости) производятся вычисления по явной разностной схеме.

Высокие требования к быстродействию и объему оперативной памяти вычислительной системы являются платой за простоту и универсальность модели. Поэтому, несмотря на то, что интерес к решению уравнений Максвелла сеточными методами появился еще в середине 20-го века [40] и не ослабевал далее [56], практическое применение такая модель получила лишь в конце века [50] с развитием вычислительной техники. Задача снижения вычислительных затрат становится более актуальной с распространением рассматриваемой модели в дифракционную и рефракционную оптику, особенно в оптику волноводов (где размеры вычислительной области характеризуются не единицами, а десятками и сотнями длин волн).

Традиционно, решение такой задачи находят в организации параллельных вычислений [46], чему благоприятствует простота и эффективность параллельных алгоритмов для явной разностной схемы Yee. Построению параллельных алгоритмов для вычислений по неявным схемам для уравнений Максвелла будет посвящен второй параграф настоящей главы. Признавая ценность такого подхода, отметим, что его применение в вычислительной практике используется в случаях, когда исчерпаны остальные приемы снижения длительности вычислений.

Другой распространенный метод основан на наложении неравномерной сеточной области на исследуемый объект [49]. Этот подход особенно эффективен при работе с дифракционными оптическими элементами, характеризующимися ступенчатым рельефом. Оставляя неизменной сеточную область по контуру оптического элемента и разреживая ее в однородных областях, можно добиться значительного снижения вычислительных затрат при сохранении точности.

Решение разностных уравнений на подвижной сеточной области при исследовании распространения электромагнитного импульса [43] позволяет производить вычисления исключительно в месте локализации импульса. При дифракции на границе раздела сред предлагается задание двух подвижных сеточных областей: для прошедшей и отраженной частей импульса.

Отметим, что три представленных подхода не исключают, а дополняют друг друга и могут применяться совместно.

Настоящая глава посвящена развитию второго и третьего методов в случае дифракции монохроматической волны на оптическом объекте.

При исследовании многократных переотражений внутри оптического элемента (или системы элементов) применение подвижной сеточной области становится затруднительным в силу многочисленности переотраженных волн (следуя работе [43], пришлось бы для каждой такой волны задавать отдельную сеточную область). К тому же, рассматривая распространение монохроматической волны в однородном пространстве, представляется разумным использовать разложение на плоские волны вместо разностного решения, пусть даже и на разреженной сеточной области, как это предлагается в [49]. Поэтому уместна декомпозиция сеточной области – разбиение на подобласти, в каждой из которых ищется разностное решение с последующим согласованием на границах подобластей [34]. Указанный прием позволяет исключить из рассмотрения однородные участки оптического элемента (на них сеточная область не налагается) и изучать процесс дифракции отдельно в каждой подобласти. При этом достигается существенное сокращение длительности вычислений без использования параллельной вычислительной системы.

В качестве оптического элемента рассмотрена прозрачная диэлектрическая дифракционная решетка. Этот выбор, во-первых, связан с широким использованием таких решеток в оптике; во-вторых, с повышенным интересом к слоистым дифракционным элементам [39], для моделирования работы которых развиваемая идея декомпозиции представляется весьма естественной.

4.1.1. Декомпозиция одномерной сеточной области

Проиллюстрируем основные приемы декомпозиции на примере одномерной по пространству сеточной области (рис. 1.24) [10]. Для наглядности объединение поглощающих производим не будем. Такая область может быть наложена на слоистую среду при исследовании задачи нормального падения T -волны. Далее, говоря о декомпозиции сеточной области, будем иметь в виду область, на которой определено электрическое поле – рассуждения для области, относящейся к магнитному полю, аналогичны. Ввод излучения в область осуществляется с помощью “прозрачного” источника.

4.1.1.1. Декомпозиция на две подобласти в свободном пространстве

Приступая к рассмотрению декомпозиции сеточной области на две подобласти, остановимся на случае распространения плоской однородной волны в свободном пространстве, как на примере, раскрывающем характерные особенности метода.

Очевидно, что излишне производить расчет поля в тех частях сеточной области, где излучение уже устоялось или куда еще не дошло. Эти соображения и положим в основу использования декомпозиции как в настоящем пункте, так и в следующих.

Проводя декомпозицию, выделим из сеточной области $Q=K+1-2R$ центральных узлов, не относящихся к поглощающим слоям, где R – число узлов области, отведенных под один такой слой. Пусть первая подобласть содержит первые $[Q/2]$ узлов ($[..]$ – округление до ближайшего большего целого), вторая – $Q-[Q/2]+1$ (к последним $Q-[Q/2]$ узлам исходной области добавлен один узел слева для перекрытия подобластей). К каждой получившейся подобласти слева и справа добавляются узлы, относящиеся к поглощающему слою (рис. 4.1).

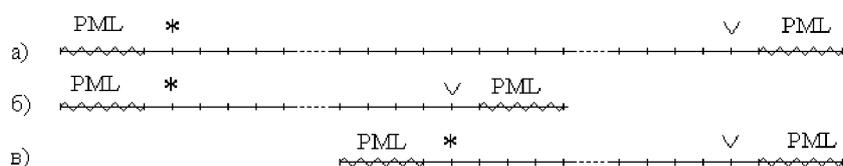


Рис. 4.1. Декомпозиция сеточной области (а) на две подобласти (б и в) и соответствующие шаги алгоритма для случая распространения излучения в свободном пространстве. Звездочкой обозначено расположение излучающего условия, «верхней» галочкой – узел, в котором производится регистрация прошедшего излучения, PML (Perfectly Matched Layer) – поглощающий слой

Пусть в первом узле выделенного центрального фрагмента исходной сеточной области формируется падающая волна, в последнем узле регистрируется прошедшая (рис. 4.1а). Тогда в каждой полученной подобласти формирование падающей волны и регистрацию прошедшей также отнесем к первому и последнему узлам центральных фрагментов (рис. 4.1б,в). При этом найденное в результате вычислительного эксперимента в первой подобласти значение напряженности электрической составляющей поля в узле регистрации используется в качестве падающей волны во второй подобласти. Указанное правило задает очередность вычислительных экспериментов: после расчета $M/2$ временных слоев в первой подобласти осуществляется переход во вторую, где количество слоев по времени также составляет половину от этого параметра для

исходной сеточной области. Для такого временного интервала поле в обеих подобластях можно считать устоявшимся, если оно окажется устоявшимся за время T в эксперименте на исходной сеточной области. Длительность T волнового процесса определяется до вычислительного эксперимента из физических соображений. К настоящему времени она подобрана [52,54,55] для наиболее распространенных типов рассеивающих объектов в задачах электродинамики и микрооптики.

Производя тестовые эксперименты, в качестве параметров выберем: длину падающей волны $\lambda=1$ мкм; протяженность исходной области $L_z=4\lambda$ (тогда для обеих подобластей $L'_z=3\lambda$ с учетом ширины поглощающего слоя $L=\lambda$); дискретизацию по пространству в 100 узлов на длину волны; шаг по времени таким, чтобы за $\tau=200$ отсчетов (по времени) фронт плоской волны в вакууме прошел расстояние в одну длину волны; в область вводится 20 длин волн. Поглощение на периферии областей здесь и далее обеспечивается слоями с максимальной удельной электрической проводимостью $\sigma_z^{\max}=0,0033$ см/м у края

области, при зависимости $\sigma_z = \sigma_z^{\max} \left(1 - \frac{q}{L}\right)^2$ для левого слоя и $\sigma_z = \sigma_z^{\max} \left(\frac{q}{L}\right)^2$

для правого, где $0 < q < L$. Тогда при относительной погрешности значения напряженности электрического поля в узле регистрации исходной области в 0,002%, аналогичная величина в узле регистрации второй подобласти составит 0,004%. Следовательно, можно говорить о декомпозиции сеточной области, как о приеме, не меняющем физической сущности задачи.

Выигрыш от применения декомпозиции имеет две стороны, связанные с уменьшением длительности вычислений: экономию памяти вычислительной системы и сокращение числа арифметических операций. При исследовании протяженных областей ($L_z \gg L$), когда для хранения значений сеточных функций оказывается недостаточно объема «быстродействующей» памяти вычислительной системы (будь то «кэш» память по сравнению с оперативной памятью или оперативная память по сравнению с дисковой), декомпозиция позволяет не задействовать «медленно» работающее запоминающее устройство.

Кроме того, количество арифметических операций снижается с $C \times K \times M$ (где C – число операций при вычислении двух сеточных функций E_{xk}^{m+1} и $H_{yk+0,5}^{m+0,5}$ в двух узлах по уравнениям (1.44), (1.45)) в случае без декомпозиции, до $2C \times (2R+Q/2) \times M/2$ в случае с декомпозицией на две подобласти. Так, при $L_z \gg L$ можно говорить о сокращении объема арифметических операций вдвое. Декомпозиция на D подобластей (в случае свободного пространства) связана с производством $D \times C \times (2R+Q/D) \times M/D$ операций и при $L_z \gg L$ обеспечивает сокращение числа арифметических операций в D раз.

Отметим, что изложенный подход может с успехом применяться для изучения дифракции не только в свободном пространстве, но и в средах, не вызывающих появления сколько-нибудь значимой отраженной волны: бездефектных волноводах, фоторефрактивных кристаллах и др.

4.1.1.2. Декомпозиция на две подобласти в случае неоднородной диэлектрической среды

Большой интерес представляет случай неоднородной среды, когда характеризующая ее функция $\epsilon(z)$ терпит разрывы. Математическая модель процесса распространения излучения в такой среде должна учитывать многочисленные переотражения от границ диэлектрических слоев. Для этого дополним алгоритм из 4.1.1.1 циклической частью, в которой такой учет производится, причем количество итераций цикла G будет соответствовать числу переотражений из второй подобласти в первую и обратно.

Возможность проведения декомпозиции обоснуем на примере области с двумя оптическими элементами (A и B), расположенными один за другим (B за A) по направлению распространения падающей волны. Развиваясь во времени, процесс распространения падающей волны доходит сначала до элемента A , достигая затем B . На определенном этапе этого процесса волна, отраженная от B , следует обратно к A и дифрагирует на нем. Часть этой волны переотражается к B , но в течение рассматриваемого временного промежутка еще не достигает его. Одновременно продолжается дифракция на B , до которой еще не дошла переотраженная от A волна. Заметим, что на данном этапе искомая комплексная амплитуда поля за B не меняется. Следовательно, расчет поля, дифрагирующего на B , от момента появления отраженной от B волны до ее переотражения от A обратно к B , излишен. Избежать его позволяет декомпозиция области.

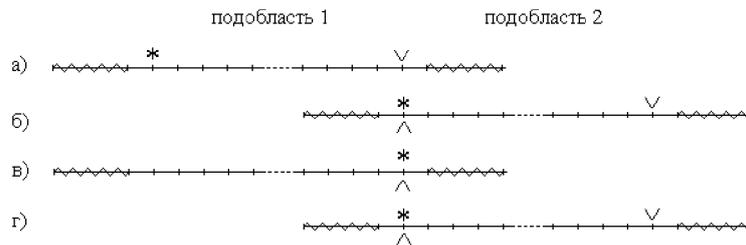


Рис. 4.2. Вычисления по алгоритму при декомпозиции на две подобласти в случае неоднородной среды; а, б, в, г – 1, 2, 3 и 4-й шаги алгоритма соответственно.

«Нижней» галочкой обозначен узел, в котором производится регистрация отраженного излучения

На первом шаге искомого алгоритма (рис. 4.2а) производится ввод излучения в первую подобласть; при этом источник располагается у левого края, регистрация производится у правого (аналогично рис. 4.1б). Второй шаг характеризуется работой со второй подобластью (рис. 4.2б), у левого края которой излучается волна, зарегистрированная на предыдущем шаге. В отличие от аналогичного шага пункта 1.2 (рис. 4.1в) регистрация производится не только у правого края подобласти (прошедшее излучение), но и с левого края (отраженная волна) – в том же узле подобласти, в котором задано излучающее условие. Совмещение областей излучения и регистрации в одном узле возможно благодаря постановке «прозрачного» источника, традиционная методика TF/SF этого не позволяет. Отметим, что возможна и регистрация отраженного излучения у левого края первой подобласти (первый шаг алгоритма), однако такая волна не вернется в исследуемую область и не окажет влияния на поле за пропускающим оптическим элементом.

Следующие два шага (рис. 4.2в-г) выполняются в цикле G раз и предназначены для учета влияния переотраженных волн на поле, формирующееся у правого края второй подобласти – на выходе из оптического элемента (искомое поле). Возвращение в первую подобласть волны, отраженной обратно из второй подобласти, производится на третьем шаге алгоритма (рис. 4.2в), когда с правого края первой подобласти вводится волна, зарегистрированная у левого края второй подобласти на предыдущем шаге. Регистрации на третьем шаге подлежит отраженная в первой подобласти волна (у правого края), влияющая на искомое поле, а прошедшая через подобласть волна покинет область эксперимента в направлении $-Z$ и не регистрируется. На четвертом шаге (рис. 4.2г) к ранее прошедшей через оптическую систему волне добавляется новая, переотраженная ранее из второй подобласти (шаг 2) в первую (шаг 3) и прошедшая на текущем шаге до правого края второй подобласти. Такое добавление осуществляется арифметическим сложением соответствующих комплексных амплитуд, согласно принципу суперпозиции [3]. Отраженная же вторично во второй подобласти часть падающей волны вернется в первую подобласть на следующей итерации цикла (шаг 3).

Проведем проверку адекватности модели на примере прохождения T -волны через плоскопараллельную пластинку. При толщине пластинки в 1 мкм и показателе преломления материала $n=2$ модуль комплексной амплитуды напряженности электрического поля прошедшей волны должен быть равен модулю комплексной амплитуды напряженности соответствующей компоненты падающей волны [3]. Действительно, разместив в центре сеточной области (рис. 4.1а) исследуемую пластинку и приняв остальные параметры дискретизации эксперимента из 4.1.1.1 без изменения, при значении модуля комплексной амплитуды падающей волны в 1 В/м (далее рассматриваем относительное значение модуля, как результат деления на модуль комплексной амплитуды

падающей волны) получим результат, с высокой точностью соответствующий теоретически ожидаемому (табл. 4.1).

Таблица 4.1. Зависимость значения модуля комплексной амплитуды электрического поля ($|A|$) от числа переотражений в случае декомпозиции на две подобласти при исследовании прохождения T -волны через плоскопараллельную пластинку

G	$ A $
0	0,8883
1	0,9853
2	0,9955

Отметим, что значение $|A|$, полученное при $G=0$, соответствует величине 0, (8), рассчитанной по формулам Френеля без учета переотражений.

Если в предыдущем эксперименте (пункт 4.1.1.1) корректность передачи фазы комплексной амплитуды при переходе от первой подобласти ко второй не требовалась, то в данном случае пропускающее свойство пластинки основывается на этой корректности (иначе набег фазы внутри пластинки не составил бы нужной величины). Следовательно, результаты из табл. 4.1 подтверждают адекватность метода перехода в частотную область, приведенного в пункте 1.3.

При декомпозиции на произвольное число подобластей D объем занимаемой памяти вычислительной системы не зависит от показателя преломления исследуемой среды и останется таким же, что и в пункте 4.1.1.1. Число арифметических операций алгоритма с разбиением на две подобласти составляет

$$C \times (2R + Q/2) \frac{M}{2} (2 + 2G) = C \times (2R + Q/2) M (1 + G) \quad (4.1)$$

в предположении, что на любой подобласти поле устоится за $M/2$ шагов. Таким образом, если в (4.1) положить $G=1$ (одно переотражение), то вычислительная сложность алгоритма с декомпозицией будет равна сложности алгоритма без таковой (при $L_z \gg L$). В этом случае выигрыш в скорости вычислений будет обеспечиваться только экономией памяти. С увеличением G значение выражения (4.1) возрастает, что приводит к потере преимущества алгоритма с декомпозицией.

Применение декомпозиции обязывает организовывать переотражения и следить за тем, чтобы поле в каждой подобласти (на момент перехода к другой подобласти) устоялось. Гарантируя последнее требование, положим количество временных слоев в каждой подобласти равным $M/2$. Это довольно жесткое условие, часто являющееся избыточным. Ведь величина M в исходной области

выбирается с учетом всех переотражений, а $M/2$ принимается для одного прохода волны по одной подобласти. Однако выбор количества временных слоев для одной подобласти из других соображений сопряжен с риском получить неустоявшееся поле в подобласти, целиком содержащей оптический элемент сложной конфигурации. Впрочем, как будет показано далее, увеличение числа подобластей ведет к снижению вычислительной сложности и при соблюдении указанного жесткого условия.

4.1.1.3. Декомпозиция на произвольное количество подобластей в случае неоднородной диэлектрической среды

Случай разбиения сеточной области на D частей имеет свои особенности. Действия по искомому алгоритму в первой и последней подобластях производятся в соответствии с правилами предыдущего пункта. Для центральных подобластей формирование прошедших и отраженных волн происходит иначе. Каждое переотражение в таких подобластях связано с двумя этапами распространения волны: сначала справа налево - с предпоследней подобласти до первой; затем слева направо - от второй подобласти до последней. При этом согласно сформулированному ниже правилу в каждой центральной подобласти учитывается значение отраженной волны, полученное при проходе в противоположном направлении.

Пусть падающая в такую подобласть волна распространяется справа налево. После производства вычислений по схеме (1.44),(1.45) к комплексной амплитуде найденной прошедшей волны (левый край подобласти) добавляется амплитуда отраженной волны, зарегистрированной в этом же узле при распространении слева направо (на предыдущем этапе алгоритма). Найденная же отраженная волна (правый край подобласти) будет сложена на следующем этапе алгоритма (при распространении слева направо) с зарегистрированной тогда прошедшей волной.

В свою очередь, при распространении в обратном направлении, слева направо, после производства вычислений по схеме (1.44),(1.45) к комплексной амплитуде найденной прошедшей волны (правый край подобласти) добавляется амплитуда отраженной волны, зарегистрированной в этом же узле при распространении справа налево (на предыдущем этапе алгоритма). Найденная же отраженная волна (левый край подобласти) будет сложена на следующем этапе алгоритма (при распространении справа налево) с зарегистрированной тогда прошедшей волной.

Подтверждая адекватность модели, рассмотрим прохождение T -волны через слоистую среду, состоящую из крон ($n=1,5$) и флинт ($n=1,7$) стекол. Положим при этом толщину каждого слоя в 1 мкм. Значение модуля комплексной амплитуды электрического поля, рассчитанное с помощью метода матриц переноса [3] и равное 0,8841, будем считать точным решением. В табл. 4.2

приведены результаты для декомпозиции на три подобласти, при которой каждая подобласть характеризуется длиной 1 мкм (за вычетом поглощающих слоев). Посередине первой подобласти проходит граница раздела вакуум/крон стекло, посередине второй – крон стекло/флинт стекло и третьей – флинт стекло/вакуум.

Таблица 4.2. Зависимость значения $|A|$ и погрешности вычислительного эксперимента ε от числа переотражений в случае декомпозиции на три подобласти при исследовании прохождения T -волны через слоистую среду вакуум/крон стекло/флинт стекло/вакуум

G	$ A $	ε %
0	0,9447	6,85
1	0,8734	1,21
2	0,8781	0,71

Вычислительная сложность алгоритма с разбиением на D подобластей есть

$$\begin{aligned}
 C \times (2R + Q/2) \frac{M}{D} (D + (2 + 2(D-2))G) = \\
 = C \times (2R + Q/D) \frac{M}{D} (D + 2(D-1)G),
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

в предположении, что на любой подобласти поле устоится за M/D шагов. По аналогии с теорией параллельных вычислений оценим преимущество такого алгоритма величиной его ускорения [20] – отношением числа арифметических операций алгоритма без декомпозиции к выражению (4.2). Тогда, при допущении $L_z \gg L$, ускорение алгоритма с декомпозицией на D подобластей составит

$$S = \frac{D^2}{D + 2(D-1)G}.
 \tag{4.3}$$

От этой величины будем отличать ускорение вычислительного процесса S' , порожденного алгоритмом, и равное отношению длительности процесса без декомпозиции к длительности с таковой. На значение S' будут оказывать влияние не только параметры, входящие в (4.3), но и характеристики конкретной вычислительной системы, что объясняет частое несовпадение ускорений записанного алгоритма и реализованного по нему вычислительного процесса. Пример такого несовпадения будет рассмотрен далее, в разделе 4.1.2.

Отдельной задачей при декомпозиции сеточной области является выбор числа переотражений. С одной стороны, чем больше это число, тем точнее определяется результирующее поле. Однако рост G вызывает падение ускорения алгоритма (4.3) при фиксированном D . Поэтому необходимо из физических

соображений выбирать G заранее, определяя затем величины D , при которых ускорение теоретически может быть достигнуто. Пренебрегая зависимостью числа переотражений от конфигурации оптического элемента (что требует отдельного рассмотрения в каждом конкретном случае), примем $G=0$ при исследовании фоторефрактивных кристаллов и бездефектных волноводов (отраженная волна отсутствует), $G=1$ для элементов из оптических стекол (отражается до 20% энергии падающей волны) и $G=2$ для более плотных оптических сред с $n>2$ (например, алмазные пленки). Зависимости ускорений от числа подобластей в этих распространенных случаях приведены в табл. 4.3, 4.4.

Таблица 4.3. Зависимость величины ускорения алгоритма S от числа подобластей D при $G=1$

D	2	3	4	5	6	7	8	16	32	64	128
S	1	1,29	1,6	1,92	2,25	2,58	2,91	5,57	10,89	21,56	42,67

Таблица 4.4. Зависимость величины ускорения алгоритма S от числа подобластей D при $G=2$

D	2	3	4	5	6	7	8	16	32	64	128
S	0,67	0,82	1	1,19	1,39	1,58	1,78	3,37	6,48	12,88	25,68

Полученные высокие значения ускорений позволяют говорить о декомпозиции сеточной области, как о приеме, существенно снижающем длительность вычислений при разностном решении уравнений Максвелла.

4.1.2. Декомпозиция двумерной сеточной области

Если одномерный случай удобен своей наглядностью, то двумерный (цилиндрические оптические элементы) обладает еще и большой практической важностью. Дифракционные решетки, цилиндрические микролинзы и фокусаторы находят применение в голографии, телекоммуникациях и многих других областях [27].

4.1.2.1. Одномерная декомпозиция для двумерной дифракционной решетки

Увеличение размерности вызывает появление дополнительной проекции магнитного поля (в случае H -волны), когда вместо двух разностных уравнений решаются три. Постановка граничных и начальных условий, наложение поглощающих слоев для такой разностной схемы сходны с рассмотренным в параграфе 1.2 случаем сеточной области D_h^2 и стандартным методом наложения слоев (рис. 1.29) из параграфа 1.4.

Выбирая способ задания падающей волны, предпочтительней остановиться на «прозрачном» источнике, по сравнению с технологией TF/SF. Применение «прозрачного» источника не связано с дополнительными вычислениями по периметру сеточной подобласти (как в TF/SF) и освобождает от разложения падающего поля на плоские волны (необходимого при постановке TF/SF) при переходе из одной подобласти в другую.

Одномерная декомпозиция двумерной сеточной области не приводит к изменению алгоритмов из 4.1.1.1-4.1.1.3, так как по новой координатной оси разбиение на подобласти не производится и их ускорение остается прежним. Рассматривая рис. 4.1, 4.2, будем считать, что в настоящем случае поперечные штрихи на оси обозначают не один узел сеточной области (как в случае одномерном), а столбцы из таких узлов, расположенные вдоль новой координатной оси.

Тестируя развиваемый подход, приведем пример декомпозиции сеточной области, наложенной на дифракционную решетку ($n=1,5$), с разбиением на две подобласти. Период решетки зададим равным 2,5 мкм, толщину подложки – 3 мкм. С обеих сторон на подложку нанесен микрорельеф в виде выпуклых цилиндрических линз с радиусом кривизны 1,28 мкм (так, чтобы высота микрорельефа составила одну длину волны). Тогда длина вычислительной области составит 5 мкм (без учета поглощающих слоев), длина подобластей – 2,5 мкм. При дискретизации по пространству в 50 узлов на длину волны, принимая $\tau=100$ и вводя в область цуг из 200 длин волн (в подобласти из 100 длин волн), получим результаты, приведенные в табл. 4.5.

Таблица 4.5. Интенсивности прошедших порядков для вычислительных экспериментов с двумерной дифракционной решеткой

Интенсивности прошедших порядков	без декомпозиции	с декомпозицией на две подобласти		с декомпозицией на две неперекрывающиеся подобласти и разложением на плоские волны между подобластями	
		$G=0$	$G=1$	$G=0$	$G=1$
I_0	0,6861	0,6769	0,6806	0,657	0,6781
$I_1=I_{-1}$	0,07138	0,0875	0,07165	0,08837	0,07239
$I_2=I_{-2}$	0,03896	0,02848	0,03861	0,02835	0,03833

Близость результатов, полученных с применением декомпозиции и при ее отсутствии, говорит об адекватности математической модели с одномерной декомпозицией двумерной по пространству сеточной области и о достаточности учета одного переотражения, если материал элемента - оптическое стекло.

Второй вычислительный эксперимент ставился на области протяженностью 256 мкм с целью исследования зависимости ускорения вычислительного процесса от числа подобластей (табл. 4.6).

Таблица 4.6. Зависимость величины ускорения вычислительного процесса S' от числа подобластей D при $G=1$ во втором вычислительном эксперименте из параграфа 4.1.2.1

D	2	4	8	16	32	64	128
S	1,45	2,34	5,59	10,1	18,06	28,64	39,87

Период решетки и параметры дискретизации не менялись по сравнению с предыдущим экспериментом. Предполагалось, что для удовлетворительного моделирования работы произвольной исследуемой структуры из оптического стекла достаточно учитывать одно переотражение. Вычислительные эксперименты производились на процессоре Pentium 4, 2400 МГц с использованием среды Matlab 5.2.

При $2 \leq D \leq 64$ ускорение вычислительных процессов превышает ускорение алгоритмов (табл. 4.3, 4.6), что объясняется сокращением занимаемой памяти вычислительной системы при реализации декомпозиции. Так, уже для двух подобластей ускорение вычислительного процесса достигло значения 1,45, хотя выигрыш в количестве арифметических операций отсутствует. С увеличением D растет влияние поглощающих слоев. При $D=128$ суммарная длина таких слоев $2L$ составляет уже половину общей длины подобласти, в связи с чем ускорение процесса становится меньше ускорения алгоритма (табл. 4.3, 4.6).

4.1.2.2. Декомпозиция при однородных диэлектрических включениях

Особый интерес представляет случай диэлектрических включений, когда дифракционный микрорельеф, нанесенный на обе стороны оптического элемента, разделен однородным слоем диэлектрика (подложкой). При этом толщина слоя, как правило, многократно превосходит высоту дифракционного микрорельефа.

Представляется обоснованным не вычислять поле внутри подложки, решая разностные уравнения (как это предлагается в [49]), а использовать там модель столь же строгую, но обладающую меньшей вычислительной сложностью. В случае дифракционной решетки такой моделью будет разложение по плоским волнам. Разностное решение при этом применяется для отыскания поля только в областях неоднородностей (микрорельеф оптического элемента).

В табл. 4,5 представлены результаты вычислительного эксперимента для решетки из тестового примера пункта 4.1.2.1. При этом длина подобластей

(без учета поглощающих слоев) составила 1 мкм – высоту микрорельефа. Сами подобласти разделены расстоянием в 3 мкм, толщиной подложки, на котором распространение волны слева - направо и справа - налево моделируется разложением на плоские волны.

Необходимо отметить, что при разложении на плоские волны в подложке дифракционная картина внутри оптического элемента и на небольшом расстоянии перед и за ним будет отличаться от таковой без разложения. Это происходит в силу потери информации о стоячих волнах, игнорируемых при используемом разложении. Впрочем, энергии такие волны не переносят и большого интереса не представляют.

В случае оптической системы, состоящей из P дифракционных поверхностей (например, слоистые дифракционные элементы [39]), имеет смысл проводить декомпозицию на P неперекрывающихся подобластей, заключающих в себе только дифракционные рельефы, разделенные однородными диэлектрическими включениями. Внутри подобластей ищется разностное решение, поле между подобластями определяется разложением на плоские волны. Сокращение вычислительной сложности алгоритма при таком подходе очевидно и превышает ускорение (4.3) при декомпозиции на соприкасающиеся подобласти.

Предложенный способ организации вычислений при разностном решении уравнений Максвелла позволяет существенно снизить требования к объему оперативной памяти вычислительной системы и сократить количество арифметических операций за счет учета локально устоявшегося поля и использования принципа суперпозиции, основанного на линейности решаемых уравнений. Применение представленной декомпозиции сеточной области может быть использовано не только при решении задач дифракционной оптики, но и в других близких приложениях.

4.2. Параллельные алгоритмы решения трехдиагональных сеточных уравнений неявных разностных схем

Моделирование физических процессов посредством численного решения дифференциальных уравнений находит все более широкое применение в различных отраслях науки. Этому способствует развитие вычислительной техники и численных методов, ориентированных на решение таких уравнений. Наиболее распространенные методы (разностные и проекционные) сводят дифференциальную задачу к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида $Ax=b$, где матрица A - ленточная. К таким СЛАУ относятся и неявные разностные, которые помимо схем Y_{ee} широко применяются для решения задач дифракции на оптических элементах [50].

С появлением многопроцессорных вычислительных комплексов связано создание параллельных алгоритмов решения таких систем, основанных как на ранее известных последовательных алгоритмах (методы прогонки, циклической редукции), так и алгоритмов, изначально создававшихся как параллельные (декомпозиции области (далее, отличая его от метода из предыдущего параграфа, будем использовать название «метод декомпозиции ленточной матрицы») и мелкозернистый локально-параллельный). Кроме того, известны векторно-конвейерные алгоритмы решения данной задачи, которые остаются за рамками настоящей работы, ориентированной на многопроцессорные системы с распределенной памятью, как на наиболее распространенные. В данном случае уместна классификация, разделяющая параллельные алгоритмы на алгоритмы с функциональной декомпозицией и с декомпозицией данных.

Традиционно используются в вычислительной практике алгоритмы, основанные на декомпозиции данных, при которой производится распределение матрицы системы между процессорами вычислительного комплекса, позволяющее каждому процессору решать свою подсистему. К недостаткам такого подхода следует отнести низкую эффективность параллельных алгоритмов (33% для алгоритма декомпозиции области или высокие коммуникационные затраты (пропорциональные логарифму от количества уравнений системы для алгоритма циклической редукции).

Функциональная декомпозиция основывается на особенностях разностной или проекционной задачи, приводящей к изучаемой СЛАУ. Известен подход, при котором процессоры вычислительного комплекса одновременно решают разные СЛАУ, относительно значений искомой сеточной функции на разных слоях сеточной области по времени. Однако при этом алгоритм характеризуется длительными простоями большинства процессоров.

Другой подход в рамках функциональной декомпозиции связан с рассмотрением разностного решения двумерного эллиптического уравнения на прямоугольной области. Автор этого подхода отказался от идеи одновременного решения одной СЛАУ несколькими процессорами. Все процессоры реализуют прямой или обратный проходы скалярной прогонки для своих участков различных СЛАУ. Недостатками функциональной декомпозиции для алгоритма скалярной прогонки являются простои процессоров при линейном разбиении области данных и большая длительность коммуникаций при циклическом разбиении.

Существует подход, основывающийся на применении метода встречных прогонок для решения исследуемой задачи. Однако использование двумерного разбиения сеточной области в таком подходе ведет к появлению простоев.

Материал настоящего параграфа является развитием метода встречных прогонок. При этом вдвое сокращается длительность простоев параллельного алгоритма в случае линейного разбиения и вдвое уменьшаются коммуникационные затраты для циклического разбиения.

4.2.1. Алгоритм для одномерной сеточной области

При разностном решении дифференциального уравнения на одномерной сеточной области G_n^1 (далее для удобства переобозначим как ω_1) или \bar{G}_n^1 следует говорить об одной СЛАУ трехдиагонального вида. В этом случае наиболее уместны параллельные алгоритмы с декомпозицией данных, но для иллюстрации основной идеи предлагаемой работы построим параллельный алгоритм с функциональной декомпозицией.

Функциональная декомпозиция задается спецификой метода встречных прогонок, в котором прогоночные коэффициенты (α , β и η , ζ) вычисляются с двух сторон по направлению к центру матрицы A . В последовательном алгоритме этот прием используется, когда желают ограничиться нахождением не всего вектора x , а лишь его части. Так как вычисления двух пар коэффициентов прогонки независимы (информационно, логически и конкурентно), то их можно находить параллельно. Произведем разбиение одномерной сеточной области ω_1 на ω_1^1 и ω_1^2 (рис. 4.3).

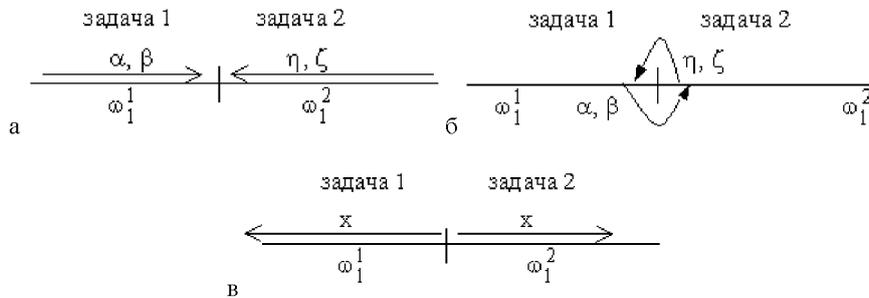


Рис. 4.3. Этапы вычислений по двухзадачному параллельному алгоритму, реализующему метод встречных прогонок на одномерной сеточной области: прямой ход прогонок (а); обмен данными между задачами (б); обратный ход прогонок (в). Верхний индекс при ω есть номер задачи, нижний – размерность области

Вычисления разделим на три шага, соответствующие прямому (рис. 4.3а), обратному ходу (рис. 4.3в) встречных прогонок и обмену данными между задачами (рис. 4.3б).

В течение прямого хода прогонок первая задача находит прогоночные коэффициенты α , β , вторая задача - η , ζ . Далее, первая задача передает второй пару чисел α , β , необходимых для запуска обратного хода прогонки во второй задаче, которая в это время производит аналогичную передачу, необходимую первой задаче. На третьем шаге обе задачи одновременно реализуют обратный ход прогонки, находя решение СЛАУ. Ускорение такого алгоритма можно оценить как

$$S = \frac{C_1 M \tau_a}{\frac{1}{2} C_1 M \tau_a + 2 \tau_k},$$

где M - размерность СЛАУ, $C_1 M \tau_a$ - длительность расчета по последовательному алгоритму, если τ_a - время производства одной арифметической операции с плавающей точкой, $\tau_k = \tau_y + \tau_n$ есть длительность одной коммуникации между задачами алгоритма (τ_y - время установки на обмен, τ_n - время передачи или приема (считаем их равными) одного пакета по сети). При пакетной модели передачи данных время передачи разного объема информации остается константой до тех пор, пока объем передаваемого массива не превысит размер пакета. Здесь это условие соблюдается (передается всего пара чисел), в дальнейшем также будем полагать его верным. К сожалению, этот подход нельзя развить для большего количества задач (алгоритм не масштабируемый), если сеточная область ω одномерна (здесь он приведен исключительно для иллюстрации дальнейшего изложения).

Состоятельность приведенного двухзадачного алгоритма подтверждается результатами вычислительных экспериментов, представленных на рис. 4.4.

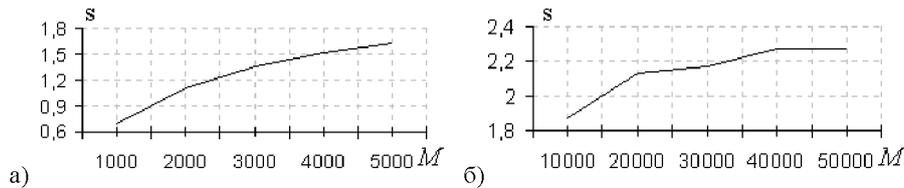


Рис. 4.4. Зависимость ускорения параллельных вычислительных процессов (ПВП), порожденных алгоритмом из пункта 4.2.1, от размерности сеточной области, для разных диапазонов M

Все вычислительные эксперименты проводились на кластере Самарского научного центра РАН (СНЦ РАН), состоящем из двухпроцессорных ЭМВ Pentium III (600 МГц), связанных сетью Fast Ethernet.

Для исследуемого алгоритма ускорение, согласно закону Амдала, не должно превышать 2. Однако, как следует из рис. 4.4б, при $M=20000$, $S>2$. Для изучения этого эффекта обратимся к табл. 4.7.

Таблица 4.7. Зависимость объема оперативной памяти, занимаемой последовательным вычислительным процессом, от размерности ω_1

	Размерность сеточной области ($M/1000$)									
	1	2	3	4	5	10	20	30	40	50
Объем занимаемой оперативной памяти (кБ)	23,3	46,8	70,1	93,5	117,9	234,7	468,5	703,2	937,5	1171,7

Начиная с размерности $M=2000$ (именно с нее ускорение превышает 2), объем памяти, занимаемый последовательным вычислительным процессом, превышает кэш процессора (256 кБ). Следовательно, последовательный и параллельный процессы оперируют областями памяти, характеризующимися разными скоростями доступа к данным. Область памяти, занимаемая последовательным процессом при $M=50000$, выходит за размеры кэша на 915,87 кБ, а для параллельного вычислительного процесса (ПВП) этот показатель равен 329,93 кБ и сравним с объемом кэша. Логично предположить, что как только объем памяти, занимаемой вычислительным процессом (не важно каким именно: последовательным или параллельным), превысит кэш на несколько порядков, ускорение опять подчинится закону Амдала. Действительно, при $M=2000000$ и занимаемой памяти 45,78 МБ, $S=1,9969$.

4.2.2. Алгоритм для двумерной сеточной области, линейное разбиение

Для двумерной области ω_2 ограничение на масштабируемость снимается. Применительно к ней будем говорить о прогонках по строкам (продольных прогонках) и столбцам (поперечных прогонках) сеточной области, как это принято в методах расщепления и переменных направлений.

Если алгоритм состоит из двух задач, то модификации, по сравнению с предыдущим алгоритмом, не требуется, каждая СЛАУ в продольном направлении решается одновременно двумя задачами. Вычисления в поперечном направлении являются независимыми и не сопровождаются коммуникациями. Пусть размер сеточной области ω_2 - $N \times M$ узлов (линейное разбиение производится по M), тогда ускорение такого алгоритма составит

$$S_2^L = \frac{2C_1MN\tau_a}{C_1MN\tau_a + 2N\tau_k}.$$

Числитель есть сумма длительности продольных $NC_1M\tau_a$ и поперечных $MC_1N\tau_a$ прогонок. Первое слагаемое знаменателя также сформировано как

сумма длительностей продольных $NC_1M/2\tau_a$ и поперечных $M/2C_1N\tau_a$ прогонок, реализуемых одной задачей алгоритма на половине сеточной области. Длительность коммуникаций линейно зависит от N - количества узлов сеточной области, располагающихся на границе подобластей. Двухзадачный алгоритм, основанный на методе встречных прогонок, свободен от задержек вычислений, связанных с ожиданиями.

Для алгоритма из четырех задач производится следующее линейное разбиение сеточной области (рис. 4.5).

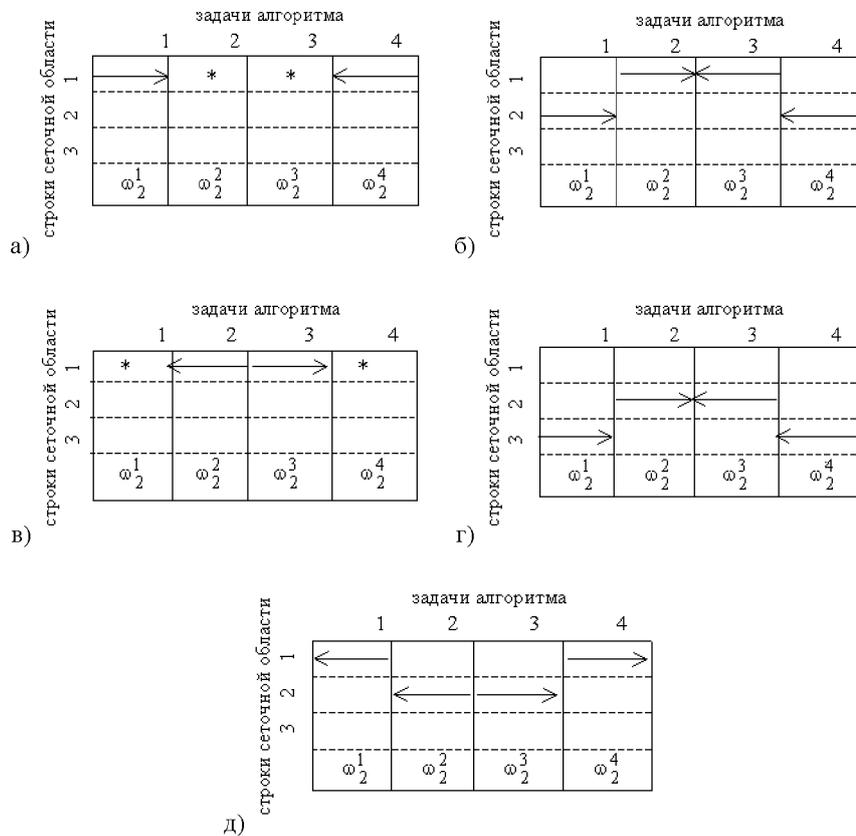


Рис. 4.5. Этапы вычислений по четырехзадачному параллельному алгоритму из пункта 2: прямые ходы прогонок (а, б, г); обратные ходы (в, д). Задачи, помеченные символом «*», простаивают

На рис. 4.5 представлены начальные шаги вычислений по алгоритму (его первый этап). Задачи 1, 4 (рис. 4.5а) начинают прямой ход прогонок

для строки 1 и передают прогоночные коэффициенты задачам 2, 3, которые на первом шаге простаивают.

Далее не будем специально говорить об обмене данными между задачами, подразумевая, что перед прямым ходом они принимают прогоночные коэффициенты, после прямого хода передают их. Перед обратным ходом принимают значение сеточной функции, после - передают его. Первая и последняя задачи начинают прямой ход без принятия прогоночных коэффициентов, а задачи под номерами $p/2$ и $p/2+1$ (p - общее число задач, в данном алгоритме $p = 4$) начинают обратный ход принятием прогоночных коэффициентов (друг от друга).

На втором шаге (рис. 4.5б) задачи 2, 3 продолжают прямой ход для строки 1, задачи 1, 4 начинают прямой ход для строки 2. Третий шаг (рис. 4.5в) характеризуется простоем задач 1, 4 и началом обратного хода прогонки для строки 1 задачами 2, 3. Четвертый шаг (рис. 4.5г) - прямой ход, задачи 1, 4 осуществляют его для строки 3, задачи 2, 3 для строки 2. Пятый (рис. 4.5д) - обратный ход, задачи 1, 4 производят его для строки 1, задачи 2, 3 - для строки 2. Далее прямой и обратный ходы чередуются (второй этап алгоритма), пока задачи 2, 3 не произведут прямой ход прогонки для последней строки. На следующем этапе (заключительном) в течение первого шага задачи 1, 4 будут простаивать, задачи 2, 3 начнут обратный ход. Второй шаг характеризуется простоем задач 2, 3, в то время как задачи 1, 4 завершат обратный ход прогонки для последней строки сеточной области.

Ускорение данного алгоритма оценивается величиной

$$S_4^L = \frac{2C_1MN\tau_a}{\frac{1}{2}C_1MN\tau_a + 4N\tau_k + C_1\frac{M}{4}\tau_a},$$

где последнее слагаемое знаменателя есть время ожидания в разработанном алгоритме, связанное с простоями задач на начальной и заключительной стадиях вычислений.

Распространим данный подход на произвольное число задач p . На начальном этапе такого алгоритма в течение первых $p/2$ шагов производится только прямой ход прогонки. Задача l (пусть $l \leq p/2$) простаивает $l-1$ шаг, затем производит прямой ход прогонки для строк 1, 2, ..., $p/2-1$. После этого происходит чередование прямого и обратного хода, причем задача l простаивает $p/2-l$ шагов, связанных с обратным ходом. Далее продолжается чередование без простоев. Если в течение прямого хода задача 1 производит ход прогонки для строки i , то задача l производит прямой ход для строки $i-l+1$. Когда первая задача начинает обратный ход для строки i , задача l начинает обратный ход для $i+l-1$. Последние шаги алгоритма опять связаны с простоями, когда во время прямого хода простаивают задачи (для $l \leq p/2$) с меньшими номерами, во время

обратного – с большими номерами. Аналогично проводятся рассуждения для $l > p/2$.

Ускорение и эффективность такого алгоритма составят:

$$S_p^L = \frac{2C_1MN\tau_a}{2C_1MN\tau_a + 4N\tau_k + \frac{p-2}{2p}C_1M\tau_a + (p-4)\tau_k} \quad \text{и}$$

$$E_p^L = \frac{2C_1MN\tau_a}{2C_1MN\tau_a + 4pN\tau_k + \frac{p-2}{2}C_1M\tau_a + p(p-4)\tau_k}.$$

Простой любой задачи связаны не только с ожиданием при производстве арифметических вычислений, но и с ожиданием коммуникаций между другими задачами алгоритма. Суммарное время простоев любой задачи одинаково.

В таблице 4.8 и на рис. 4.6 представлены результаты вычислительных экспериментов, подтверждающие работоспособность алгоритма на квадратной сеточной области.

Таблица 4.8. Зависимость ускорения вычислительного процесса от числа процессоров и размерности квадратной сеточной области

Размерность сеточной области (N)	Число процессоров (p)			
	2	4	6	8
1000	1,005392	0,944551	0,535323	0,520246
2000	1,085413	1,385219	1,790679	1,239702
5000	1,509048	2,208691	2,856274	2,791851
10000	1,680401	3,459153	4,353058	4,215099
15000	1,828832	3,811183	5,600946	6,691857

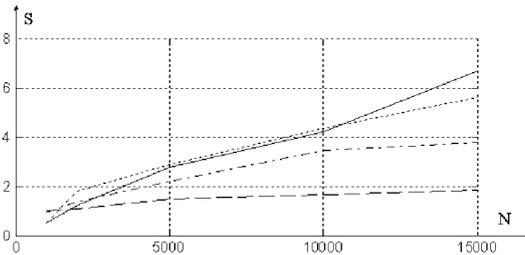


Рис. 4.6. Зависимости ускорений параллельных вычислительных процессов от размерности вычислительной области при реализации на двух (штриховая кривая), четырех (штрихпунктирная кривая), шести (двойной пунктир) и восьми (сплошная кривая) процессорной вычислительной системе

При увеличении размерности вычислительной области ускорение всех исследуемых параллельных вычислительных процессов возрастает до величин, близких к предельным по закону Амдала (рис. 4.6). Действительно, длительность коммуникаций при решении СЛАУ, соответствующей одной строке сеточной области, остается постоянной, а размерность такой СЛАУ увеличивается. Следовательно, увеличивается и длительность исполнения распараллеливаемых арифметических операций.

С другой стороны, решение систем малых размерностей ($N=1000$) вовсе не сопровождается ускорением вычислений по сравнению с последовательным вычислительным процессом (таблица 4.8). Причем чем больше процессоров задействовано в реализации таких вычислений, тем меньшего ускорения удастся добиться. Наблюдаемый эффект связан с ростом коммуникационных издержек при увеличении числа процессоров. Для размерности $N=1000$ длительность арифметических операций на одном процессоре совпадает с длительностью коммуникаций между двумя процессорами. В итоге ускорение двухзадачного вычислительного процесса составляет единицу (таблица 4.8). Для большего количества процессоров длительность коммуникаций увеличивается, время арифметических операций сокращается, в итоге ускорение снижается.

Повышению ускорения параллельных алгоритмов метода встречных прогонок с линейной декомпозицией сеточной области будет способствовать такая организация вычислений, при которой процессоры обмениваются не парой прогоночных коэффициентов и одним значением сеточной функции, а векторами, составленными из соответствующих параметров. Для этого можно организовывать коммуникации не сразу после прямого или обратного хода по одной строке (столбцу) сеточной области, а после накопления пересылаемых данных, завершив прямой (обратный) ходы для некоторого количества строк (столбцов) - блоков.

Однако такой прием ведет к увеличению объема памяти для хранения прогоночных коэффициентов, с которой оперирует вычислительный процесс, что может, с учетом иерархичности структуры кэш и оперативной памяти, негативно сказаться на скорости вычислений. Для разных типов вычислительных систем применение предложенного варианта может по-разному повлиять на ускорение, поэтому в настоящей работе рассматривается лишь численный вариант выбора параметров модифицированного алгоритма. При анализе ускорения параллельных алгоритмов сложно аналитически учесть все особенности конкретной вычислительной системы (работа с памятью, сетью и т.д.).

Для блочного варианта объём простоев, связанных с вычислениями, станет больше, зато уменьшится объём простоев, связанных с коммуникациями. Этот вариант особенно выгодно использовать в тех случаях, когда большая часть времени уходит на коммуникации, а не на арифметические операции – то есть при малых размерностях сеточных областей.

В соответствии с последней рекомендацией примем размерность сеточной области $N=1000$. В результате серии вычислительных экспериментов подберем такое количество строк в блоке (вектор которого и передается по сети между процессорами), при котором ускорение окажется максимальным.

В таблице 4.9 и на рис. 4.7 представлены результаты вычислительных экспериментов, подтверждающие работоспособность предложенной блочной модификации алгоритма.

Таблица 4.9а. Характеристики блочных процессов при вычислениях по сеточной области размерности $N=1000$ узлов. Зависимость ускорения от размера блока и числа процессоров

Ширина блока n (в строках)	Число процессоров (p)		
	4	6	8
20	0,945781	0,641238	0,712346
40	1,000246	0,556889	0,664579
60	0,995633	0,934515	0,99785
80	1,512378	1,25488	1,23456
100	1,14567	1,512379	1,542346
120	1,207892	1,215954	1,523469

Таблица 4.9б. Характеристики блочных процессов при вычислениях по сеточной области размерности $N=1000$ узлов. Зависимость отношения ускорений блочного/неблочного вариантов от размера блока и числа процессоров

Ширина блока n (в строках)	Число процессоров (p)		
	4	6	8
20	1,001303	1,197852	1,369248
40	1,058965	1,040285	1,277432
60	1,054081	1,745702	1,918034
80	1,601161	2,344154	2,37303
100	1,212926	2,825170	2,964645
120	1,278801	2,271439	2,928361

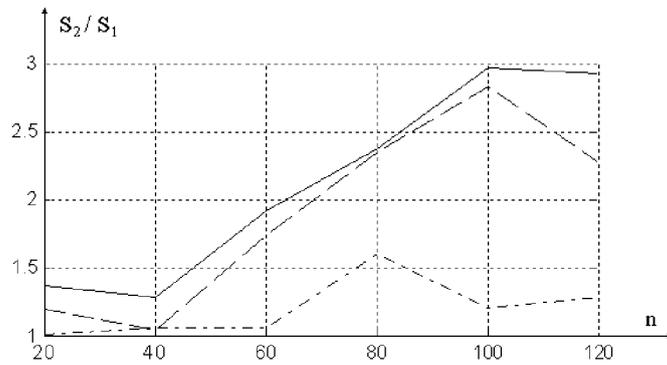


Рис. 4.7. Зависимость отношения ускорений блочного/неблочного вариантов (S_2/S_1) от размера блока (n) и числа процессоров (для $p=8$ сплошная кривая, для $p=6$ пунктирная кривая, для $p=4$ штрихпунктирная кривая) при $N=1000$ для линейного разбиения сеточной области

Действительно, применение блочной модификации позволяет до трех раз (в случае восьми процессоров) повысить ускорение параллельного вычислительного процесса.

4.2.3. Алгоритм для двумерной сеточной области, циклическое разбиение

Осуществим двумерное разбиение сеточной области ω_2 для построения параллельного алгоритма метода встречных прогонок. Очевидный вариант такого разбиения на четыре подобласти и этапы алгоритма представлены на рис. 4.8, его ускорение

$$S_4^c = \frac{2C_1MN\tau_a}{\frac{1}{2}C_1MN\tau_a + (N+M)\tau_k}.$$

На первом этапе алгоритма (рис. 4.8а, 4.8б) задачи 1, 3 и 2, 4 производят встречные прогоны для строк $1, \dots, N/2$ и $N/2+1, \dots, N$, обмениваясь между собой прогоночными коэффициентами (1-й с 3-м, 2-й с 4-м). На втором, заключительном, этапе (рис. 4.8в, 4.8г) задачи 1, 2 и 3, 4 производят встречные прогоны для столбцов $1, \dots, M/2$ и $M/2+1, \dots, M$, обмениваясь между собой прогоночными коэффициентами (1-й со 2-м, 3-й с 4-м). Отсутствие простоев связано с тем, что при таком разбиении все задачи имеют возможность одновременно начать и завершить действия по алгоритму.

Циклическое разбиение области и действия по алгоритму из восьми задач иллюстрируются на рис. 4.9.

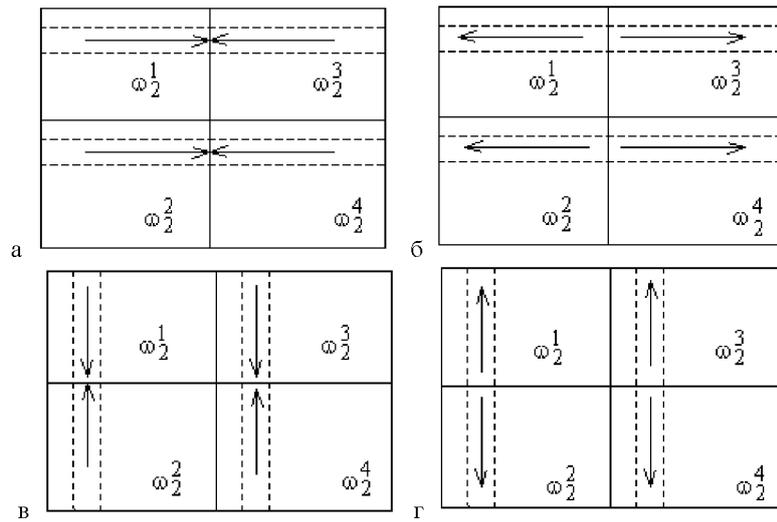


Рис. 4.8. Этапы вычислений по четырехзадачному параллельному алгоритму из пункта 4.2.3: прямой ход прогонок по строкам (а), обратный ход прогонок по строкам (б), прямой ход по столбцам (в), обратный ход по столбцам (г)

Особенность распределения ω_2 между задачами состоит в принадлежности одной задаче двух прямоугольных подобластей (циклическое разбиение). Их взаимное расположение в шахматном порядке позволяет распараллеливать вычисления прогонок как по строкам, так и по столбцам области, избегая простоев.

На первом этапе алгоритма (рис. 4.9а) производится прямой ход прогонок по строкам в левой и правой четвертях ω_2 . Так, задачи 1, 5 работают со строками $1, \dots, N/4$; задачи 2, 6 - со строками $N/4+1, \dots, N/2$; задачи 3, 7 - со строками $N/2+1, \dots, 3N/4$ и задачи 4, 8 - со строками $3N/4+1, \dots, N$. Причем первые четыре задачи оперируют частями своих строк с 1 по $M/4$ столбец, последние четыре задачи - с $3M/4+1$ по M столбец. В конце этапа пары задач 1, 2; 3, 4; 5, 6 и 7, 8 обмениваются прогоночными коэффициентами.

На втором этапе (рис. 4.9б) прямой ход прогонок по строкам заканчивается, вычисления из левой четверти переносятся на одну подобласть вправо, из правой четверти - на одну подобласть влево. Задачи 1, 5 работают со строками $N/4+1, \dots, N/2$; задачи 2, 6 со строками $1, \dots, N/4$; задачи 3, 7 - со строками $3N/4+1, \dots, N$, и задачи 4, 8 со строками $N/2+1, \dots, 3N/4$. Причем первые четыре задачи оперируют частями своих строк с $M/4+1$ по $M/2$ столбец, последние четыре задачи - с $M/2+1$ по $3M/4$ столбец. В конце этапа пары задачи 1, 5; 2, 6; 3, 7 и 4, 8 обмениваются прогоночными коэффициентами.

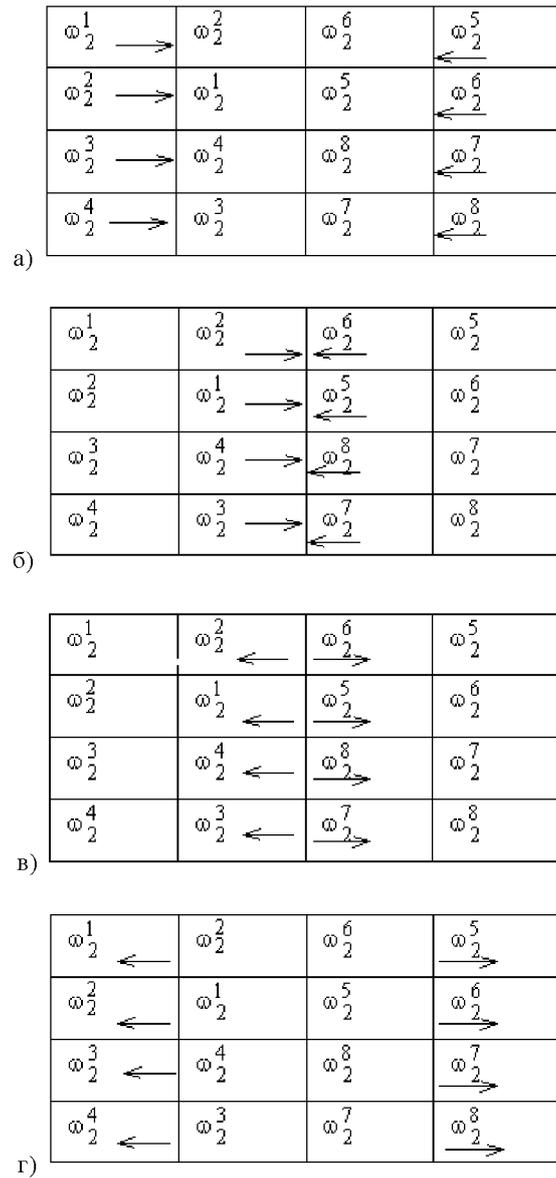


Рис. 4.9. Этапы вычислений по восьмизадачному параллельному алгоритму из пункта 4.2.3: прямой ход прогонки по строкам (а,б), обратный ход прогонки по строкам (в,г)

Третий и четвертый этапы алгоритма (рис. 4.9з,д) - обратный ход прогонки по строкам. Аналогично производится прогонки по столбцам. Ускорение такого алгоритма

$$S_8^c = \frac{2C_1MN\tau_a}{\frac{C_1MN\tau_a}{4} + \frac{3}{2}(N+M)\tau_k}.$$

Циклическое разбиение ω_2 при $p=2^q$ и $q>3$ производится аналогично разбиению на рис.4.9. Каждой задаче будут принадлежать $p/4$ подобластей ω_2 и соседствовать $\log_2 p$ другим задачам. При этом части сеточной области, принадлежащие задачам с 1-й по $(p/4)$ -ю, располагаются в четверти с координатами $1 \leq i \leq N/2, 1 \leq j \leq M/2$; с $(p/4+1)$ -й по $(p/2)$ -ю - в четверти с координатами $N/2+1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq M/2$; с $(p/2+1)$ -й по $(3p/4)$ -ю - в четверти с координатами $1 \leq i \leq N/2, M/2+1 \leq j \leq M$; с $(3p/4+1)$ -й по p -ю - в четверти с координатами $N/2+1 \leq i \leq N, M/2+1 \leq j \leq M$. При выбранном «шахматном» порядке расположения никакие две подобласти, принадлежащие одной задаче, не содержат одну и ту же строку или столбец сеточной области.

При этом ускорение и эффективность разработанного алгоритма составят

$$S_p^c = \frac{2C_1MN\tau_a}{\frac{2C_1MN\tau_a}{p} + 2\left(1 - \frac{2}{p}\right)(N+M)\tau_k} \text{ и}$$

$$E_p^c = \frac{2C_1MN\tau_a}{2C_1MN\tau_a + 2p\left(1 - \frac{2}{p}\right)(N+M)\tau_k}.$$

Начиная постановку вычислительных экспериментов для сформулированного алгоритма, исследуем поведение реализации сформулированного в пункте 4.2.3 алгоритма для сеточных областей малых размерностей (табл. 4.10, рис. 4.10).

Таблица 4.10. Ускорения параллельных вычислительных процессов по алгоритму с циклическим разбиением сеточной области для N от 100 до 1000

P	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	0,64	0,72	0,72	0,70	2,67	2,88	2,89	3,04	2,99	2,99
8	0,14	0,28	0,34	1,67	2,73	2,98	3,35	3,95	5,10	5,14

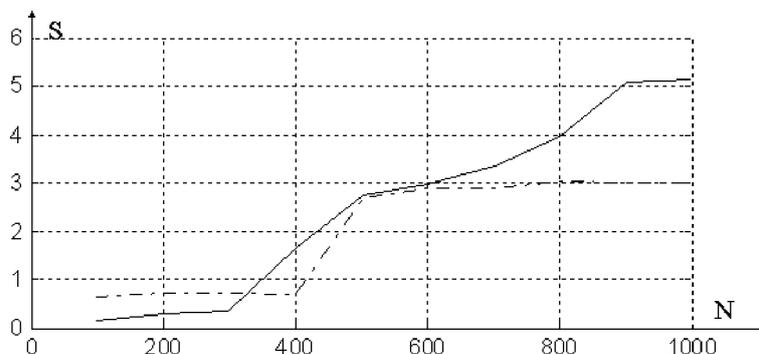


Рис. 4.10. Зависимости ускорений параллельных вычислительных процессов от размерности сеточной области (в диапазоне 100-1000), непрерывная кривая соответствует восьми процессорам, штрихпунктирная - четырем

Сравнивая результаты на рис. 4.6 и 4.10 для $N=1000$ отметим большую эффективность алгоритма с циклическим разбиением сеточной области. В последней серии экспериментов ускорение достигается для областей размером 300-400 узлов, в то время как при линейном разбиении для области размером 1000 узлов ни один вычислительный процесс не характеризуется ускорением. Причиной тому служит отсутствие простоев и меньший объем коммуникаций алгоритма с циклическим разбиением сеточной области.

Продолжая постановку вычислительных экспериментов, исследуем поведение алгоритма на сеточных областях с большей размерностью (таблица 4.11, рис. 4.11).

Таблица 4.11. Ускорения параллельных вычислительных процессов по алгоритму с циклическим разбиением сеточной области для N от 1000 до 10000

p	N									
	1000	2000	3000	4000	5000	6000	7000	8000	9000	10000
4	2,99	2,93	2,90	2,97	3,10	3,09	3,11	3,18	3,66	3,69
8	5,14	5,23	6,67	6,74	6,74	6,75	6,81	6,87	7,12	7,66

Почти достигнув предельных показателей, значения ускорений незначительно изменяются при увеличении размерностей сеточных областей. При $N=1000$ только для $p=8$ параллельный вычислительный процесс метода встречных прогонок с циклической декомпозицией существенно превосходит по ускорению процесс метода с линейной декомпозицией. Требование

соответствия закону Амдала уравнивает различные варианты метода встречных прогонок на густых сеточных областях.

Проведем исследования эффективности блочного варианта метода, аналогичные предложенным в 4.2.2. В таблицах 4.12-4.15 представлены ускорения для блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, при размерах блока 20, 40, 60 и 80 соответственно.

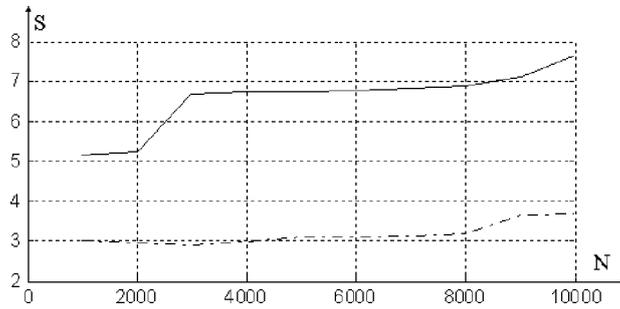


Рис. 4.11. Зависимости ускорений параллельных вычислительных процессов от размерности сеточной области (в диапазоне 1000-10000), непрерывная кривая соответствует восьми процессорам, штрихпунктирная - четырем

Таблица 4.12а. Ускорение вычислительного процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 20 строк области

P	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	0,842	0,923	0,944	1,013	3,329	3,736	3,591	3,793	3,790	3,791
8	0,306	0,608	0,782	2,033	3,014	3,778	3,793	3,985	5,523	5,526

Таблица 4.12б. Отношение ускорений блочного/неблочного вариантов для процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 20 строк области

P	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	1,32	1,28	1,31	1,45	1,25	1,3	1,24	1,25	1,27	1,27
8	2,19	2,17	2,3	1,2	1,1	1,27	1,13	1,01	1,09	1,02

Таблица 4.13а. Ускорение вычислительного процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 40 строк области

p	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	0,946	1,013	1,013	1,020	3,380	3,780	3,749	3,796	3,797	3,797
8	0,381	0,580	0,819	2,126	3,056	3,796	3,809	3,994	5,560	5,530

Таблица 4.13б. Отношение ускорений блочного/неблочного вариантов для процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 40 строк области

p	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	1,48	1,41	1,41	1,46	1,27	1,31	1,3	1,25	1,27	1,27
8	2,72	2,07	2,41	1,27	1,12	1,27	1,14	1,01	1,09	1,08

Таблица 4.14а. Ускорение вычислительного процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 60 строк области

p	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	1,065	1,197	1,249	1,250	3,543	3,871	3,783	3,798	3,801	3,813
8	0,639	0,692	0,829	2,193	3,099	3,842	3,843	4,111	5,737	5,890

Таблица 4.14б. Отношение ускорений блочного/неблочного вариантов для процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 60 строк области

p	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	1,66	1,66	1,74	1,79	1,33	1,34	1,31	1,25	1,27	1,28
8	4,56	2,47	2,44	1,31	1,1	1,3	1,15	1,04	1,13	1,15

Таблица 4.15а. Ускорение вычислительного процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 80 строк области

p	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	1,162	1,296	1,320	1,273	3,601	3,892	3,789	3,877	3,862	3,895
8	0,767	0,760	0,831	2,265	3,143	3,846	3,907	4,141	5,783	5,894

Таблица 4.15б. Отношение ускорений блочного/неблочного вариантов для процесса по блочной модификации алгоритма встречных прогонок с циклическим разбиением сеточной области, размер блока 80 строк области

p	N									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
4	1,82	1,8	1,83	1,82	1,35	1,35	1,31	1,28	1,29	1,3
8	5,48	2,71	2,44	1,36	1,15	1,29	1,17	1,05	1,13	1,15

На рисунках 4.12 представлено сравнение блочного и неблочного вариантов алгоритмов для $N=1000$.

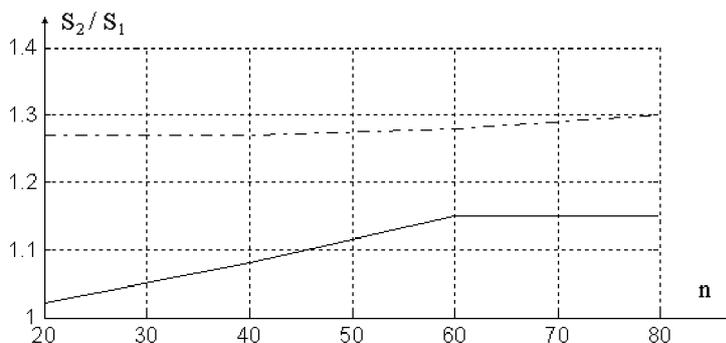


Рис. 4.12. Зависимость отношения ускорений блочного/неблочного вариантов (S_2/S_1) от размера блока (n) и числа процессоров (для $p = 8$ - сплошная кривая, для $p = 4$ - пунктирная кривая) при $N=1000$ для циклического разбиения сеточной области

Так же, как и в случае линейного разбиения сеточной области (рис. 4.7), для варианта с циклическим разбиением (рис. 4.12) блочная модификация позволяет существенно улучшить результаты вычислительных экспериментов.

С увеличением размерности сеточной области разница между блочным и неблочным вариантами сокращается. Это связано с увеличением объема памяти для хранения прогоночных коэффициентов одной строки сеточной области. Для определенной размерности указанный объем займет всю кэш память, в связи с чем разбиение области на блоки теряет смысл.

4.2.4. Сравнение известных и предложенных алгоритмов

Произведем сравнение четырех подходов к записи алгоритмов для двумерной области: двух, основанных на декомпозиции данных:

- а) декомпозиции ленточной матрицы и
- б) циклической редукции;

и двух, записанных с применением функциональной декомпозиции:

- в) основанного на методе правой прогонки и

г) на методе встречных прогонок из настоящей работы. При этом будем различать алгоритмы, использующие одномерное (1D) и двумерное (2D) или циклическое (C) разбиение сеточной области. В табл. 4.16 приведены основные характеристики восьми рассмотренных алгоритмов.

Очевидно, на вытянутых прямоугольных областях ($M \gg N$) предпочтение следует отдавать алгоритмам с одномерным (линейным) разбиением, характеризующимся в этом случае меньшим объемом пересылаемых данных, а для квадратных областей выгоднее алгоритмы с двумерным или циклическим разбиением. Следовательно, уместно сравнивать алгоритмы внутри данной классификации.

Среди четырех алгоритмов, характеризующихся одномерным разбиением, наибольшим ускорением и эффективностью обладает алгоритм, сформулированный в пункте 2 настоящей работы. По сравнению с алгоритмом декомпозиции ленточной матрицы он содержит в 2,3 меньше ($C_2/C_1 \sim 1,2$) арифметических операций и пересылает в $\frac{1}{2} \log_2 p$ меньше данных. По сравнению с алгоритмом циклической редукции он, подразумевая в 1,5 раза меньший объем вычислений, пересылает данных в $\frac{1}{2} \log_2 M$ раз меньше. Будучи равен по объему вычислений и количеству пересылаемых данных с алгоритмом, использующим правую прогонку, он характеризуется вдвое меньшей длительностью простоев. К недостаткам обсуждаемого алгоритма можно отнести наличие простоев (впрочем, не играющее существенной роли в приведенном сравнении в силу их кратковременности по сравнению с длительностью арифметических операций и коммуникаций) и требование на четность к числу процессоров вычислительной системы (также несущественное, учитывая, что современные кластеры, как правило, состояются из двухпроцессорных ЭВМ).

Таблица 4.16. Сравнение характеристик параллельных алгоритмов

Алгоритм	Объем				Сетевая топология
	вычислений	коммуникаций	простоев, связанных с		
			вычислениями	коммуникациями	
a1D	$\frac{C_1MN}{p} + N\left(3C_2\frac{M}{p} + 2C_1p\right)$	$2N \log_2 p$			Бинарное дерево
a2D	$M\left(3C_2\frac{N}{p} + 2C_1\right) + N\left(3C_2\frac{M}{p} + 2C_1\right)$	$2\log_2\sqrt{p}\left(\frac{N}{\sqrt{p}} + \frac{M}{\sqrt{p}}\right)$			Нестандартная топология
б1D	$\frac{4C_1MN}{p}$	$2N \log_2 M$			Линия
б2D	$\frac{4C_1MN}{p}$	$2\frac{N}{\sqrt{p}}\log_2 M + 2\frac{M}{\sqrt{p}}\log_2 N$			Нестандартная топология
в1D	$\frac{2C_1MN}{p}$	$4N$	$\frac{p-1}{p}C_1M$	$2(p-2)$	Линия
вС	$\frac{2C_1MN}{p}$	$4\left(1-\frac{2}{p}\right)(N+M)$			Кольцо
г1D	$\frac{2C_1MN}{p}$	$4N$	$\frac{p-2}{2p}C_1M$	$p-4$	Линия
гС	$\frac{2C_1MN}{p}$	$2\left(1-\frac{2}{p}\right)(N+M)$			Гиперкуб

Проводя изучение алгоритмов с двумерным и циклическим разбиением, для простоты положим $M=N$. Тогда по сравнению с алгоритмом де-

композиции ленточной матрицы разработанный алгоритм из пункта 4.2.3 настоящего параграфа содержит в 3,6 раз меньше арифметических операций, а отношение объема пересылаемых данных первого сравниваемого алгоритма ко второму составляет $(\log_2 \sqrt{p}) / \left(\sqrt{p} - \frac{2}{\sqrt{p}} \right)$. Например, для

вычислительных систем с 4 и 16 процессорами это отношение равно 1 и 0,57 соответственно. Таким образом, с ростом количества процессоров или замедлением скорости передачи данных по сети преимущество разработанного алгоритма сокращается. Однако, учитывая существенный выигрыш в количестве арифметических операций (в 3,6 раза) и тот факт, что вычислительные системы с большим количеством процессоров соединяют, как правило, быстродействующими сетями, разработанный алгоритм следует признать более предпочтительным при возможности одновременной организации вычислений и коммуникаций (современные процессоры это позволяют). Такая модификация алгоритма осуществляется путем оперирования во время прямого (обратного) хода не одной строкой (столбцом) сеточной области, а парой строк. В то время, когда передаются и принимаются коэффициенты прогонки (значение сеточной функции) для первой строки, производится ход прогонки для второй.

По сравнению с алгоритмом циклической редукции разработанный алгоритм, подразумевающий вдвое меньший объем вычислений, пересылает данных в $(\log_2 M) / \sqrt{p}$ раз меньше (например, при $M = 1000$ и $p = 16$ указанное отношение равно 2,5). Будучи равным по объему вычислений с алгоритмом, использующим правую прогонку, разработанный алгоритм характеризуется вдвое меньшей длительностью коммуникаций. Недостатками синтезированного алгоритма также следует признать ограничение на количество требуемых процессоров (степень двойки) и высокое требование к топологии коммуникаций вычислительной системы (гиперкуб). Однако большинство современных кластеров такому требованию удовлетворяют, в то время как алгоритмы декомпозиции области и циклической редукции не всегда могут быть реализованы на стандартных топологиях (корень от количества процессоров должен быть целым числом, если сеточная область квадратная).

Применение функциональной декомпозиции к синтезу параллельных алгоритмов, основанных на методе встречных прогонок для решения се-

точных уравнений трехдиагонального вида, оправдано и приводит при указанных условиях к алгоритмам, обладающим большим ускорением и эффективностью по сравнению с известными алгоритмами для двумерных сеточных областей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучается задача дифракции лазерного излучения на оптическом микрорельефе с использованием разностных схем для уравнений Максвелла и декомпозиции сеточной области; на этой основе исследованы алмазные поликристаллические ДОЭ и дифракционные решетки на торце волновода.

При этом представлен комплекс методов и алгоритмов, позволяющих проводить вычислительные эксперименты для исследования широкого класса элементов микрооптики.

Исследованы технологические погрешности формирования дифракционной решетки на торце галогенидного ИК-волновода и их влияние на светоделительные свойства решетки. Показано, что решающее значение на искажение дифракционной картины оказывает клин травления, уводя из рабочих порядков до четверти энергии падающей волны. Прогиб профиля решетки до величины 1,4 мкм при радиусе сердечника волокна в 420 мкм оказывает меньшее влияние на дифракционную картину (из рабочих порядков уходит до 6% энергии падающей волны), так же как и перетрав (неотрав) профиля решетки, равный 10% глубины канавки (из рабочих порядков уходит до 4% энергии падающей волны).

Изучено влияние технологических погрешностей изготовления на работу алмазных дифракционных микроструктур. Показано, что погрешности в виде впадин на микрорельефе алмазных ДОЭ связаны с меньшими (в среднем на 25%) энергетическими потерями, чем погрешности в виде выступов. Увеличение линейного размера элементарной области травления приводит к относительному снижению дифракционных потерь данного типа (в среднем на 30% при полуторном увеличении линейного размера).

Для расчета дифракции на ДОЭ посредством разностного решения уравнений Максвелла представлен метод декомпозиции сеточной области. Метод позволяет сочетать разностное решение на микрорельефе ДОЭ и разложение по плоским волнам в подложке, что сокращает длительность моделирования (ускорение вычислений пропорционально отношению толщины ДОЭ к высоте рельефа).

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Как уравнения Максвелла связаны с распространением лазерного излучения через дифракционные оптические элементы?
2. Почему явные разностные схемы Yee обладают повышенным порядком аппроксимации по времени и пространству?
3. Поясните разницу между понятием “краевые условия” в электродинамике и теории разностных схем.
4. Почему при исследовании дифракции монохроматического излучения необходим переход от временного решения уравнений Максвелла к частотному?
5. На каком физическом явлении основано построение поглощающих слоев, расположенных у границ вычислительной области?
6. В силу чего объединение поглощающих слоев влечет сокращение длительности вычислений?
7. Наложение каких краевых условий позволяет произвести указанное объединение?
8. Перечислите способы задания падающей волны при разностном решении уравнений Максвелла и укажите на их различия.
9. В силу чего разностный подход к решению уравнений Максвелла позволяет моделировать распространение электромагнитного излучения через произвольные дифракционные оптические элементы: диэлектрические и идеально проводящие, с квантованным и непрерывным профилем, с бесконечной и ограниченной апертурой?
10. Перечислите виды технологических погрешностей при производстве различных ДОЭ, свойственные технологиям абляции и штамповки.

СПИСОК ТЕРМИНОВ

1. Уравнения Максвелла
2. Граничные условия
3. Начальные условия
4. Разностная схема Yee
5. Переход к комплексной амплитуде
6. Поглощающие слои
7. Задание падающей волны
8. Антиотражающая алмазная структура
9. Дифракционная решетка на торце волновода
10. Дифракционная алмазная микролинза

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Борн, М.** Основы оптики: пер. с англ./ М. Борн, Вольф Э.- М.:Наука, 1973.- 720 с.
2. **Бородин, С.А.** Формирование и исследование дифракционного микрорельефа на торце галогенидного ИК волновода / С.А.Бородин [и др.] // Компьютерная оптика, 2005.- №27.- С. 45-49.
3. **Бутиков, Е.И.** Оптика: учеб. пособие для студентов физических специальностей вузов / Е.И.Бутиков - СПб.:Невский Диалект, 2003.-480 с.
4. **Ваганов, Р.Б.** Основы теории дифракции / Р.Б. Ваганов, Б.З.Каценеленбаум – М.:Наука, 1982.- 272 с.
5. **Васильев, Е.Н.** Алгоритмизация задач дифракции на основе интегральных уравнений / Е.Н.Васильев - Сб. науч.-метод. ст. по прикл. электродинамике, 1977.- Вып. 1. С. 94-128.
6. **Велихов, Е.П.** Мощные газоразрядные CO₂ - лазеры и их применение в технологии / Е.П. Велихов [и др.] - М.: Наука, 1984.-105 с.
7. **Волков, А.В.** Исследование погрешностей формирования дифракционной решетки на торце галогенидного ИК-волновода / А.В. Волков [и др.] // Известия СНЦ РАН, 2006.- Т. 8, № 4.-С.1211-1217.
8. **Головашкин, Д.Л.** Постановка излучающего условия при моделировании работы цилиндрических дифракционных оптических элементов методом разностного решения уравнений Максвелла / Д.Л. Головашкин // Математическое моделирование, 2007.- Т. 19, № 3.- С. 3-14.
9. **Головашкин, Д.Л.** Дифракция Н-волны на двумерной диэлектрической решетке методом разностного решения уравнений Максвелла / Д.Л. Головашкин // Математическое моделирование, 2004.- Т. 16, № 9.- С. 83-91.
10. **Головашкин, Д.Л.** Декомпозиция сеточной области при разностном решении уравнений Максвелла / Д.Л. Головашкин, Н.Л.Казанский // Математическое моделирование, 2007.- Т. 19, №2.- С. 48-58.
11. **Головашкин, Д.Л.** Численный анализ прохождения света через антиотражающую алмазную структуру в рамках электромагнитной теории / Д.Л. Головашкин, В.С. Павельев, В.А. Сойфер // Компьютерная оптика, 1999. - № 19. - С. 44-46.
12. **Головашкин, Д.Л.** Дифракция Н-волны на двумерной идеально проводящей решетке методом разностного решения уравнений Максвелла / Д.Л. Головашкин // Математическое моделирование, 2005.- Т. 17, № 4. - С. 53-61.
13. **Головашкин, Д.Л.** Методика формирования падающей волны при разностном решении уравнений Максвелла (одномерный случай) / Д.Л. Головашкин, Н.Л. Казанский // Автометрия, 2006.- Т. 42, № 6. - С. 78-85.
14. **Головашкин, Д.Л.** Моделирование прохождения электромагнитной волны через алмазную антиотражающую структуру / Д.Л. Головашкин, В.С. Павельев, В.А. Сойфер // Известия СНЦ РАН, 1999.- № 1.- С. 95-98.

15. **Головашкин, Д.Л.** Моделирование прохождения ИК-излучения через алмазную дифракционную линзу с субволновыми технологическими погрешностями микрорельефа / Д.Л. Головашкин [и др.] // Компьютерная оптика, 2001.- № 21. - С. 131-133.
16. **Головашкин, Д.Л.** Анализ прохождения электромагнитного излучения через дифракционную линзу / Д.Л. Головашкин, В.А.Сойфер // Автометрия, 1999.- Т. 35, № 6. - С. 119-121.
17. **Головашкин, Д.Л.** Анализ распространения излучения через одноуровневые фрагменты ДОО с технологическими погрешностями / Д.Л. Головашкин [и др.] // Компьютерная оптика, 2001.- № 22. - С. 62-64.
18. **Головашкин, Д.Л.** Анализ распространения излучения через фрагменты ДОО с технологическими погрешностями микрорельефа / Д.Л. Головашкин // Известия СНЦ РАН, 2002.- Т. 4, № 1. - С. 68-72.
19. **Головашкин, Д.Л.** Выбор параметров микрорельефа алмазного ДОО на основе численного анализа локальных технологических погрешностей / Д.Л. Головашкин [и др.] // Компьютерная оптика, 2002.- № 24. - С. 81-83.
20. **Голуб, Дж.** Матричные вычисления / Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун - М.:Мир, 1999.- 548 с.
21. **Голуб, М.А.** Фокусировка излучения в заданную область пространства с помощью синтезированных на ЭВМ голограмм / М.А. Голуб [и др.] // Письма в ЖТФ, 1981.- Т. 7. - Вып. 10. - С. 618-623.
22. **Голуб, М.А.** Вычислительный эксперимент с элементами плоской оптики / М.А. Голуб [и др.] // Автометрия, 1988. - №1.- С.70-82
23. **Голуб, М.А.** Математическая модель фокусировки лазерного излучения элементами компьютерной оптики / М.А. Голуб, Н.Л. Казанский, В.А. Сойфер // Научное приборостроение, 1993.- Т.3, №1. - С. 8-28.
24. **Голуб, М.А.** Машинный синтез фокусирующих элементов для CO₂-лазера / М.А. Голуб [и др.] // Письма в ЖТФ, 1982.- Т. 8. – Вып. 13. - С. 449-451.
25. **Конonenko, В.В.** Алмазная дифракционная оптика для мощных CO₂-лазеров / В.В. Кононенко [и др.] // Квантовая электроника, 1999.- Т. 26, №1. - С. 9-10.
26. **Кравцов, Ю.А.** Границы применимости метода геометрической оптики и смежные вопросы / Ю.А. Кравцов, Ю.И. Орлов // Успехи физических наук, 1980. – Т. 132, №3. - С. 475-496.
27. Методы компьютерной оптики (Издание второе, исправленное) / под ред. Сойфера В.А.- М.: Физматлит, 2003. - 688 с.
28. **Митра, Р.** Вычислительные методы в электродинамике: пер. с англ. (Бурштейн Э.Л.) / Р.М. Митра - М.: Мир, 1977. - 485 с.
29. **Нестеренко, Д.В.** Объединенный метод конечных элементов Галеркина и граничных элементов для анализа дифракции ТМ-поляризованной плоской волны на цилиндрических оптических элементах / Д.В. Нестеренко, В.В. Котляр // Компьютерная оптика, 2002. - №24. - С. 17-25.
30. **Никольский, В.В.** Электродинамика и распространение радиоволн / В.В. Никольский, Т.И. Никольская. - М.: Наука, 1999.- 544 с.

31. **Ортега, Джеймс М.** Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем: пер. с англ. Х.Д. Икрамова, И.Е. Капорина; под ред. Х.Д. Икрамова / Джеймс М Ортега - М.: Мир, 1991.-364 с.
32. **Панасюк, В.В.** Метод сингулярных интегральных уравнений в двумерных задачах дифракции. / В.В. Панасюк, М.П. Саврук, З.Т. Назарчук – Киев: Наук. Думка, 1984. - 344 с.
33. **Самарский, А.А.** Теория разностных схем / А.А. Самарский - М.: Наука, 1989. - 614 с.
34. **Самарский, А.А.** Вычислительная теплопередача / А.А. Самарский, П.Н. Вабишевич - М.: Едиториал УРСС, 2003. -784 с.
35. **Самарский, А.А.** Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. - М.:Наука, 1978. - 561 с.
36. **Солимено, С.** Дифракция и волноводное распространение оптического излучения / С. Солимено, Б. Крозиньяни, П.Ди Порто.- М.: Мир, 1989. - 64 с.
37. **Физические величины: справочник** / под редакцией И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова.- М.: Энергоатомиздат, 1991.- 1232с.
38. **Berenger, Jean-Pierre** A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves / Jean-Pierre Berenger // Journal of computational physics, 1994.- № 114.- p.185-200.
39. **Borgsmuller, S.** Computer-generated stratified diffractive optical elements / S. Borgsmuller [and other] // Applied Optics, 2003.- vol. 42, № 26.- p. 5274-5283.
40. **Cron, G.** Equivalent circuit of the field equations of Maxwell – I / G. Cron // Proc. IRE, 1944.- vol. 32.- p. 289-299.
41. **Engquist, B.** Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves / B. Engquist, A. Majda - Mathematics of Computation, 1977.- vol. 31.- p. 629-651.
42. **Electromagnetic Theory on Gratings: Ed. by R. Petit.- Berlin; Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1980.- 284p.**
43. **Fidel, B.** Hybrid ray-FDTD moving window approach to pulse propagation / Fidel B. [and other] // Journal of Computational Physics, 1997.- vol. 138, Issue 2.- p.480-500.
44. **Hiroiyuki, Ichikawa** Electromagnetic analysis of diffraction gratings by the finite-difference time-domain method / Ichikawa Hiroiyuki // J. Opt. Soc. Am, 1998.- vol. 15, № 1.- p. 152-157.
45. **Mur, G.** Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations / G. Mur // IEEE Trans. Electromagnetic Compability, 1981.- vol. 23.- p. 377-382.
46. **Perlik, A.T.** Predicting scattering of electromagnetic fields using FD-TD on a connection machine / A.T. Perlik // IEEE Transactions on magnetics, Vol.25, N 4, 1989, p. 2910-2912.
47. **Prather, D.W.** Formulation and application of the finite-difference time-domain method for the analysis of axially symmetric diffractive optical elements / D.W. Prather and S. Shi // J. Opt. Soc. Am. A., 1999. - vol. 16, № 5. - p. 1131-1142.
48. **Raguin, D.H.** Antireflection structured surfaces for the infrared spectral region / D.H. Raguin, G.M. Morris // Applied Optics, 1993. - vol.32, №7. - p. 1154-1167.

49. **Shi, S.** Analysis of diffractive optical elements using a nonuniform finite-difference time-domain method / S Shi [and other] // *Optical Engineering*, 2001.-vol. 40, № 4.- p.503-510.
50. **Taflove, A.** *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*: 3rd. ed. / A. Taflove, S. Hagness – Boston:Artech House Publishers, 2005.- 852 p.
51. **Taflove, A.** Numerical solution of steady-state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equations / A.Taflove, M. Brodwin // *IEEE Transactions of microwave theory and techniques*, 1975.- vol. mtt-23, №.8, p. 623–630.
52. **Taflove, A.** Review of FD-TD numerical modeling of electromagnetic wave scattering and radar cross section / A. Taflove, K.R. Umashankar // *Proc. IEEE*, 1989.-vol. 77, № 5.- p. 682-699.
53. **Taflove, A.** Application of the finite-difference time-domain method to sinusoidal steady-state electromagnetic-penetration problems / A. Taflove // *IEEE Transactions of microwave theory and techniques*, 1980.- vol. mtt-22, № 3.- p. 191–202.
54. **Taflove, A.** Radar cross-section of general three-dimensional structures / A. Taflove, K.R. Umashankar // *IEEE Trans. Electromagn. Compat.*, 1983.- vol. 25, № 4.- p. 433-440.
55. **Umashankar, K.** A novel method to analyze electromagnetic scattering of complex objects / K. Umashankar, A. Taflove // *IEEE Trans. Electromagn. Compat.* EMC-24, 1982.- p. 397–405.
56. **Yee, K.S.** Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media / K.S. Yee // *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 1966.- AP-14.- p. 302-307.

Учебное издание

*Голованкин Дмитрий Львович
Казанский Николай Львович*

**РАЗНОСТНЫЙ МЕТОД
РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ
МАКСВЕЛЛА**

Учебное пособие

Компьютерная вёрстка С.В. Смагин,
Я.Е. Тахтаров, М.А. Вахе
Редакторская обработка Т.К. Кретицина
Доверстка Т.Г. Половнева

Подписано в печать . Формат 60x84 1/16.

Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 10.

Тираж 120 экз. Заказ . ИП-81/2007

Самарский государственный
аэрокосмический университет.
443086 Самара, Московское шоссе, 34.

Изд-во Самарского государственного
аэрокосмического университета.
443086 Самара, Московское шоссе, 34.