



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ
ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Η Επίλυση των Εξισώσεων του Maxwell
στο Πεδίο της Συχνότητας και η
Εφαρμογή της Alternating Direction
Implicit Επαναληπτικής Μεθόδου

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Θεόδωρος Θ. Κουτσερίμπας

Επιβλέπων : Ηλίας Ν. Γλύτσας
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Φεβρουάριος 2017



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

**Η Επίλυση των Εξισώσεων του Maxwell
στο Πεδίο της Συχνότητας και η Εφαρμογή της
Alternating Direction Implicit Επαναληπτικής
Μεθόδου**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Θεόδωρος Θ. Κουτσερίμπας

Επιβλέπων : Ηλίας Ν. Γλύτσος
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την ...^η Φεβρουαρίου 2017.

.....
Ηλίας Γλύτσος
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Ιωάννης Ρουμेलιώτης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Γεώργιος Φικιώρης
Αναπληρωτής Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Φεβρουάριος 2017

.....

Θεόδωρος Θ. Κουτσερίμπας

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Θεόδωρος Θ. Κουτσερίμπας 2017.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ο στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη του δισδιάστατου μοντέλου πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο της συχνότητας (FDFD) για ηλεκτρομαγνητικά και προβλήματα σκέδασης, και η χρήση της Alternating Direction Implicit μεθόδου για τον υπολογισμό των πεδίων (E_t για TE ρυθμούς, H_t για TM ρυθμούς). Παρέχεται η βασική ηλεκτρομαγνητική ανάλυση και το μαθηματικό υπόβαθρο για την εφαρμογή της FDFD μεθόδου μέσω της γενικής κυματικής εξίσωσης (εξίσωση Helmholtz), την ενσωμάτωση των πηγών στο σύστημα (ρεύματα, δεσμευμένα σημεία, Ολικό Πεδίο/Σκεδαζόμενο Πεδίο) και την ελαχιστοποίηση των φαινομένων των άκρων του πλέγματος, μέσω της χρήσης absorbers ή PMLs (Perfect Matching Layers). Επιπλέον παρουσιάζεται ένας συστηματικός τρόπος, βασισμένος στο μοντέλο Ολικού Πεδίου/Σκεδαζόμενου Πεδίο FDFD, για τον υπολογισμό των ηλεκτρομαγνητικών πεδίων σε τυχαίες γεωμετρίας σκεδαστών κοντά σε ημιάπειρες επίπεδες επιφάνειες ή/και πολυστρωματικές διατάξεις.

Όπως περιγράφεται ο υπολογισμός των πεδίων εν γένει καταλήγει στην επίλυση του γραμμικού συστήματος $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$. Δεδομένου ότι οι διαστάσεις των πινάκων, που προκύπτουν από διατάξεις πρακτικού ενδιαφέροντος, είναι αρκετά μεγάλες, προτείνεται η χρήση ενός επαναληπτικού σχήματος Alternating-Direction-Implicit. Στο τελευταίο κεφάλαιο της διπλωματικής εργασίας, ερευνούμε την εφαρμοσιμότητα αυτής της επαναληπτικής μεθόδου, δοκιμάζουμε τις ημι-βέλτιστες επιταχυντικές παραμέτρους του Hadley, και βελτιστοποιούμε αυτές περισσότερο χρησιμοποιώντας το Simulated Annealing αλγόριθμο.

Λέξεις Κλειδιά: FDFD, ADI, σκέδαση ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων, Simulated Annealing, υπολογιστικός ηλεκτρομαγνητισμός.

ABSTRACT

The purpose of this thesis is the study of the 2-D Finite Difference Frequency Domain (FDFD) Model for electromagnetic and scattering problems, and the use of the Alternating Direction Implicit iterative method for the computation of the fields (E_t for TE mode, H_t for TM mode). This thesis provides the basic electromagnetic analysis and mathematical background for the implementation of the FDFD method via the general wave equation (Helmholtz equation), the incorporation of the model's sources (currents, fixed points, Total Field/Scattered Field) and the minimization of the edge phenomena of the grid, via the use of absorbers or PMLs (Perfect Matching Layers). It also presents a systematic method based on the TF/SF FDFD model for computing the electromagnetic fields from arbitrary shaped scatterers near plane semi-infinite regions or multilayer-dielectric structures.

As it is described, the computation of the fields generally comes down to the solution of the linear system $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$. Since the dimensions of the matrices, provided by practical models and structures, tend to be large, it is suggested the use of an Alternating-Direction-Implicit iterative scheme. In the last chapter of the thesis, we investigate the applicability of this iterative method, we test the semi-optimum acceleration parameters suggested by Hadley and we further optimize them using the Simulated Annealing algorithm.

Key Words: FDFD, ADI, electromagnetic scattering, Simulated Annealing, computational electromagnetics.

Η παρούσα εργασία αποτελεί μια προσπάθεια πρώτης ερευνητικής μελέτης μου πάνω στο γνωστικό αντικείμενο του Υπολογιστικού Ηλεκτρομαγνητισμού. Στο σημείο αυτό θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή μου κύριο Ηλία Γλύτση για την καθοδήγησή, υποστήριξή και αρωγή του, καθώς και τον διδάκτορα Αριστείδη Παπαδόπουλο.

Επιπλέον θα ήθελα να ευχαριστήσω τους καθηγητές του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, που ενίσχυσαν με τον τρόπο τους το ενδιαφέρον μου για το ευρύτερο αντικείμενο του Εφαρμοσμένου Ηλεκτρομαγνητισμού, τον κύριο Ρουμελιώτη, τον κύριο Φικιώρη, που αποτελούν μέλη της εξεταστικής επιτροπής, καθώς και τον κύριο Τσαλαμέγκα.

Θεόδωρος Κουτσερίμπας

Αθήνα, Δεκέμβριος 2016.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1^ο:

Η Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών στο Πεδίο της Συχνότητας	01
1.1 Η FDFD μέσω της κυματικής εξίσωσης	02
1.2 Ο Πίνακας Laplace και το γινόμενο Kronecker	05
1.3 Η Κυματική Εξίσωση στον Δισδιάστατο Χώρο	08
1.4 Η ενσωμάτωση του προσπίπτοντος πεδίου στο γραμμικό σύστημα	10
1.5 Η αντιμετώπιση των φαινομένων στα άκρα του πλέγματος (absorbers, U-PML, SC-PML).....	14
1.5.1 Ανισοτροπικά PML (U-PML).....	15
1.5.2 Stretched Coordinate PML.....	20
1.5.3 Η εξίσωση Helmholtz με τα PML.....	21
1.6 Η υλοποίηση του FDFD μοντέλου	23
1.6.1 Τα μονοδιάστατα και δισδιάστατα Συστήματα	25
1.6.2 Η Κυματική Εξίσωση – Η Μορφοποίηση του $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0}$	26
1.7 Μοντέλο για Σκεδαστές πλησίον Ημιάπειρων ή Πολυστρωματικών Επίπεδων Διατάξεων.....	27

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2^ο:

Η Εφαρμογή της ADI Μεθόδου στην επίλυση του FDFD Μοντέλου	33
2.1 Η Μέθοδος ADI (Peaceman and Rachford).....	33
2.2 Η Σύγκλιση της ADI – Το minmax Πρόβλημα.....	36
2.3 Η Χρήση Μιας Επιταχυντικής Παραμέτρου ω_1	38
2.4 Η Χρήση Διανύσματος Επιταχυντικών Παραμέτρων $\bar{\omega}_n$	44
2.4.1 Ο Αλγόριθμος της Simulated Annealing Μεθόδου.....	45
2.4.2 Εφαρμογή της Simulated Annealing – Βελτιστοποίηση των Επιταχυντικών Παραμέτρων.....	52

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β:

Ο Υπολογισμός των Ιδιοτιμών των Τριδιαγώνιων Πινάκων $(\mathbf{H}_1, \mathbf{V}_1)$	69
---	-----------

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	73
---------------------------	-----------

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1°:

Η Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών στο Πεδίο της Συχνότητας

Η Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών στο Πεδίο της Συχνότητας (Finite Difference Frequency Domain, FDFD) αποτελεί ένα σχετικά απλό μοντέλο επίλυσης ενός Ηλεκτρομαγνητικού προβλήματος. Χρησιμοποιεί τις εξισώσεις του Maxwell, όπως παρουσιάζονται στο πεδίο της συχνότητας, και τις μετατρέπει σε ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων [1]. Ενσωματώνει την πηγή (είτε ως ενεργό στοιχείο όπως το ρεύμα [2], είτε ως προσπίπτον πεδίο [3-5], με δυνατότητα αλλαγής της γωνίας πρόσπτωσης) και επιλύεται το πρόβλημα με αντιστροφή της μήτρας. Αποτελεί μια πλήρως αριθμητική μέθοδο, που ενδείκνυται για οπτικοποίηση του πεδίου (field visualization) και μοντελοποίηση συσκευών πολύπλοκης γεωμετρίας ή διατάξεων πεπερασμένου μεγέθους, καθώς σε αυτές τις περιπτώσεις αδυνατούμε να βρούμε αναλυτικές λύσεις [6-8]. Για δεδομένη συχνότητα έχει καλύτερη συμπεριφορά σε σχέση με μεθόδους στο πεδίο του χρόνου.

Παρά την αποτελεσματικότητα και την απλή υλοποίηση της μεθόδου, η βιβλιογραφία που υπάρχει είναι σχετικά περιορισμένη. Εν τούτοις οι βασικές αρχές από την Μέθοδο Πεπερασμένων Διαφορών στο Πεδίο του Χρόνου (FDTD) μπορούν ευθέως να εφαρμοστούν στην FDFD.

Δεδομένης της ισοδυναμίας και της δυνατότητας που δίνεται στην απλοποίηση των εξισώσεων, των οποίων απαιτείται η επίλυση, εφαρμόζεται και λύνεται η κυματική εξίσωση (εξίσωση Helmholtz) για το εγκάρσιο ηλεκτρικό πεδίο (TE) και το εγκάρσιο μαγνητικό (TM). Η FDFD επιλύει το ηλεκτρομαγνητικό πρόβλημα σε μία συχνότητα, δηλαδή έχουμε steady-state λύση. Τέτοιες λύσεις απαιτούνται σε πολλά προβλήματα στα οποία έχουμε quasi-steady state πεδία. Ενώ

σε προβλήματα που θέλουμε μεγαλύτερο εύρος συχνοτήτων γίνεται η επίλυση της FDFD για την αντιπροσωπευτική ομάδα συχνοτήτων, που απαιτείται.

1.1 Η FDFD μέσω της κυματικής εξίσωσης

Ο απλούστερος τρόπος μιας FDFD προσομοίωσης είναι μέσω της κυματικής εξίσωσης, που επιβάλλουν οι εξισώσεις του Maxwell, καθώς δεν απαιτείται η λύση συζευγμένων εξισώσεων, ούτε η χρήση του Yee cell [9], ενώ όλα τα πεδία (\vec{E} , \vec{H} και \vec{J}) μπορούν να βρίσκονται στις ίδιες θέσεις του πλέγματος.

Η κυματική εξίσωση δίδεται στην γενική μορφή της ως:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{\mathcal{E}} &= \nabla \times \vec{\mathcal{M}} + \mu \frac{\partial \vec{\mathcal{J}}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \bar{\rho}_e + \mu \sigma \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} + \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial t^2} \\ \nabla^2 \vec{\mathcal{H}} &= -\nabla \times \vec{\mathcal{J}} + \varepsilon \frac{\partial \vec{\mathcal{M}}}{\partial t} + \frac{1}{\mu} \nabla \bar{\rho}_m + \mu \sigma \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t} + \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{H}}}{\partial t^2}\end{aligned}\quad (1.1.1)$$

Στο σύστημα εξισώσεων (1.1.1) έχουμε θεωρήσει και τις ηλεκτρικές (πραγματικές) και τις μαγνητικές πηγές του γενικευμένου ηλεκτρομαγνητικού προβλήματος ($\vec{\mathcal{J}}$, $\vec{\mathcal{M}}$, $\bar{\rho}_e$ και $\bar{\rho}_m$). Δεδομένου ότι η υλοποίηση πραγματοποιείται στο πεδίο της συχνότητας αντικαθιστούμε στις γενικευμένες εξισώσεις (1.1.1) τα πεδία με τους αντίστοιχους φασιθέτες και $\partial_t = j\omega$. Τότε προκύπτει:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{E} &= \nabla \times \vec{M} + j\omega\mu\vec{J} + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \rho_e + j\omega\mu\sigma\vec{E} - \omega^2\mu\varepsilon\vec{E} \\ \nabla^2 \vec{H} &= -\nabla \times \vec{J} + j\omega\varepsilon\vec{M} + \frac{1}{\mu} \nabla \rho_m + j\omega\mu\sigma\vec{H} - \omega^2\mu\varepsilon\vec{H}\end{aligned}\quad (1.1.2)$$

Σε χώρο εκτός των πηγών όπου έχουμε $\vec{J} = \vec{M} = \rho_e = \rho_m = 0$ προκύπτουν οι εξής απλούστερες εξισώσεις:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{E} &= j\omega\mu\sigma \vec{E} - \omega^2\mu\varepsilon \vec{E} = \gamma^2 \vec{E} \\ \nabla^2 \vec{H} &= j\omega\mu\sigma \vec{H} - \omega^2\mu\varepsilon \vec{H} = \gamma^2 \vec{H}\end{aligned}\quad (1.1.3)$$

Όπου το γ είναι η σταθερά διάδοσης:

$$\gamma^2 = j\omega\mu\sigma - \omega^2\mu\varepsilon = j\omega\mu(\sigma + j\omega\varepsilon)$$

Η σταθερά διάδοσης τις περισσότερες φορές ορίζεται $\gamma = \alpha + j\beta$, όπου το α είναι η σταθερά εξασθένησης (np/m) και το β είναι η σταθερά της φάσης (rad/m). Στην περίπτωση ανισοτροπικών υλικών το γ είναι ταυιστής (tensor).

Θεωρώντας το μονοδιάστατο πρόβλημα της κυματικής εξίσωσης του ηλεκτρικού πεδίου με πηγή J_z , προκύπτει:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} - \gamma^2 E_z = j\omega\mu J_z \quad (1.1.4)$$

Εφόσον η εξίσωση έχει φτάσει στην απλούστερη μορφή της, γίνεται η διακριτοποίησή της. Δεδομένου ότι λόγω υπόθεσης το υλικό είναι απλό, τα μεγέθη της διηλεκτρικής επιτρεπτότητας και της μαγνητικής διαπερατότητας είναι βαθμωτά, ενώ η σταθερά διάδοσης είναι απλώς μία μιγαδική τιμή, σταθερή σε όλη την εξεταζόμενη περιοχή, αφού η συχνότητα παραμένει σταθερή. Εφαρμόζοντας κεντρική διαφύριση δευτέρου βαθμού (second-order centered difference) προκύπτει:

$$\left(\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} \Big|_i \approx \frac{E_z|_{i+1} - 2E_z|_i + E_z|_{i-1}}{(\Delta x)^2} \right) - \gamma^2 E_z|_i = j\omega\mu J_z|_i \quad (1.1.5)$$

Πολλαπλασιάζοντας με $(\Delta x)^2$ έχουμε:

$$E_z|_{i+1} - [2 + \gamma^2(\Delta x)^2] E_z|_i + E_z|_{i-1} = j\omega\mu(\Delta x)^2 J_z|_i \quad (1.1.6)$$

Από την (1.1.6) θα προκύψει το γραμμικό σύστημα ενός τριδιαγώνιου πίνακα:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} A & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & A & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & A & 1 & \dots \\ \vdots & & & & \\ \dots & 0 & 1 & A & 1 \\ \dots & 0 & 0 & 1 & A \end{bmatrix}}_{[M]} \underbrace{\begin{bmatrix} E_z|_{i=0} \\ E_z|_1 \\ E_z|_2 \\ \vdots \\ E_z|_{m-1} \\ E_z|_m \end{bmatrix}}_{[E_z]} = j\omega\mu(\Delta x)^2 \underbrace{\begin{bmatrix} J_z|_{i=0} \\ J_z|_1 \\ J_z|_2 \\ \vdots \\ J_z|_{m-1} \\ J_z|_m \end{bmatrix}}_{[J_z]} \quad (1.1.7)$$

Όπου $A = -[2 + \gamma^2(\Delta x)^2]$. Ενώ θεωρούμε μονοδιάστατο πλέγμα με $m + 1$ στοιχεία. Η επίλυση του δεδομένου προβλήματος (ευθέως) είναι:

$$[E_z] = [M]^{-1} j\omega\mu(\Delta x)^2 [J_z]$$

Στην περίπτωση όπου $\sigma(\omega, x)$, $\mu(\omega, x)$ και $\varepsilon(\omega, x)$ διακριτοποιούνται και αυτά τα μεγέθη. Και η (1.1.7) γίνεται:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} A_{i=0} & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & A_1 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & A_2 & 1 & \dots \\ \vdots & & & & \\ \dots & 0 & 1 & A_{m-1} & 1 \\ \dots & 0 & 0 & 1 & A_m \end{bmatrix}}_{[M]} \underbrace{\begin{bmatrix} E_z|_{i=0} \\ E_z|_1 \\ E_z|_2 \\ \vdots \\ E_z|_{m-1} \\ E_z|_m \end{bmatrix}}_{[E_z]} = j\omega(\Delta x)^2 \underbrace{\begin{bmatrix} \mu_{i=0} J_z|_{i=0} \\ \mu_1 J_z|_1 \\ \mu_2 J_z|_2 \\ \vdots \\ \mu_{m-1} J_z|_{m-1} \\ \mu_m J_z|_m \end{bmatrix}}_{[J_z]} \quad (1.1.8)$$

Η διακριτοποίηση των παραμέτρων του υλικού οδηγούν σε διαφορετικές τιμές σ_i , μ_i και ε_i , συνακολούθως αντιστοιχίζονται οι τιμές A_i . Επιπλέον παρατηρείται ότι στο δεξιό μέρος η μαγνητική διαπερατότητα μπαίνει μέσα στον πίνακα ώστε να αντιστοιχεί στο ρεύμα του i -οστού στοιχείου.

Στην περίπτωση μονοδιάστατου προβλήματος, οι λύσεις λαμβάνονται εύκολα αντιστρέφοντας τον πίνακα \mathbf{M} , καθώς ο αντίστροφος πίνακας ενός τριδιαγώνιου μπορεί να υπολογιστεί πολύ απλά. Στην περίπτωση όμως περισσότερων διαστάσεων, απαιτείται η χρήση προχωρημένων τεχνικών γραμμικής άλγεβρας καθώς ο πίνακας \mathbf{M} γίνεται μεγαλύτερος. Για παράδειγμα ορίζοντας ένα διδιάστατο πρόβλημα με πλέγμα 100×100 το πεδιακό διάνυσμα θα έχει 10000 στοιχεία και ο πίνακας \mathbf{M} θα έχει διαστάσεις 10000×10000 . Βέβαια αυτός ο πίνακας θα είναι αραιός (sparse).

Στην διεθνή βιβλιογραφία έχουν χρησιμοποιηθεί αρκετές μέθοδοι για την επίλυση αυτού του γραμμικού προβλήματος, στο επόμενο κεφάλαιο της παρούσας εργασίας θα επιχειρηθεί η εφαρμογή της Alternating Direction Implicit μεθόδου. Όπως θα δούμε χρησιμοποιώντας μία επαναληπτική διαδικασία για την επίλυση απαιτούνται οι απαραίτητες συνθήκες προκειμένου η μέθοδος να συγκλίνει.

1.2 Ο Πίνακας Laplace και το γινόμενο Kronecker

Προκειμένου να οριστεί ο πίνακας Laplace θα πάρουμε την εξίσωση (1.1.7) ως εξής:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & \vdots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & \vdots \\ \vdots & & & & & \\ \dots & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{L}} [E_z] - \gamma^2 (\Delta x)^2 [E_z] = j\omega\mu(\Delta x)^2 [J_z] \quad (1.2.1)$$

Ο πίνακας \mathbf{L} είναι ο πίνακας Laplace, και ονομάζεται έτσι καθώς εμφανίζεται συχνά στην αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Laplace. Έτσι η (1.2.1) γίνεται:

$$(\mathbf{L} - \gamma^2 (\Delta x)^2 \mathbf{I}) [E_z] = j\omega(\Delta x)^2 [\mu J_z] \quad (1.2.2)$$

Συνεπώς προκύπτει η λύση:

$$[E_z] = j\omega(\Delta x)^2 (\mathbf{L} - \gamma^2 (\Delta x)^2 \mathbf{I})^{-1} [\mu J_z] \quad (1.2.3)$$

Όπως έχει ήδη ειπωθεί στην περίπτωση δισδιάστατων ή και τρισδιάστατων πλεγμάτων οι πίνακες γίνονται πολύ μεγάλοι, ένα πλέγμα 100×100 θα παράξει ένα πίνακα \mathbf{A} ή \mathbf{L} διαστάσεων 10000×10000 . Και αυτό διότι αυτός ο πίνακας θα παραχθεί ως το γινόμενο Kronecker δύο πινάκων 100×100 . Εν γένει αν έχουμε ένα πίνακα \mathbf{A} $m \times n$ και έναν πίνακα \mathbf{B} $p \times q$ τότε το γινόμενο Kronecker $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ είναι ένας πίνακας $(mp) \times (nq)$, ο οποίος ορίζεται ως:

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11} \mathbf{B} & a_{12} \mathbf{B} & \cdots & a_{1n} \mathbf{B} \\ a_{21} \mathbf{B} & a_{22} \mathbf{B} & \cdots & a_{2n} \mathbf{B} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{m1} \mathbf{B} & a_{m2} \mathbf{B} & \cdots & a_{mn} \mathbf{B} \end{bmatrix}$$

Όπου τα a_{ij} είναι τα στοιχεία του πίνακα \mathbf{A} .

Για να δούμε πως ακριβώς προκύπτει το γινόμενο Kronecker, θα λύσουμε την εξίσωση Poisson του ηλεκτρικού δυναμικού με ρ πυκνότητα χωρικού φορτίου και ομογενή περιοχή, με διηλεκτρική επιτρεπτότητα ε .

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon} \quad (1.2.4)$$

Στην περίπτωση που θεωρήσουμε πλέγμα διαστάσεων $n_x \times n_y$ και έχουμε αρίθμηση κατά στήλη τότε δημιουργούμε το διάνυσμα $\tilde{\phi}$:

$$\tilde{\phi} = \left[\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} \phi_{1,1} \\ \phi_{2,1} \\ \vdots \\ \phi_{n_x,1} \end{array} \right) \\ \left(\begin{array}{c} \phi_{1,2} \\ \phi_{2,2} \\ \vdots \\ \phi_{n_x,2} \end{array} \right) \\ \dots \\ \left(\begin{array}{c} \phi_{1,n_y} \\ \phi_{2,n_y} \\ \vdots \\ \phi_{n_x,n_y} \end{array} \right) \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \phi_{1,1} \\ \phi_{2,1} \\ \vdots \\ \phi_{n_x,1} \\ \hline \phi_{1,2} \\ \phi_{2,2} \\ \vdots \\ \phi_{n_x,2} \\ \hline \vdots \\ \hline \phi_{1,n_y} \\ \phi_{2,n_y} \\ \vdots \\ \phi_{n_x,n_y} \end{array} \right] \quad (1.2.5)$$

Με αυτόν ακριβώς τον τρόπο γίνεται η διανυσματοποίηση (vectorization) της οντότητας που θέλουμε να επιλύσουμε. Η δεύτερη παράγωγος του δυναμικού θα προσεγγιστεί από την κεντρική διαφορά δευτέρου βαθμού (second-order centered difference), έτσι έχουμε:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \approx \frac{\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{(\Delta x)^2} \quad (1.2.6)$$

Δεδομένου ότι το $\tilde{\phi}$ είναι αριθμημένο κατά στήλες, φαίνεται ότι μεταβάλλοντας τις συντεταγμένες κατά ένα Δx τα αντίστοιχα στοιχεία του δυναμικού βρίσκονται σε γειτονικές θέσεις (εκτός από τα στοιχεία $\phi_{n_x,y}$).

Συνεπώς ο πίνακας διαφύρισης που θα μας δώσει την δεύτερη παράγωγο του δυναμικού ως προς x είναι:

$$\mathbf{L}_{x,2D} = \begin{bmatrix} \mathbf{L} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{L} & \mathbf{0} & \dots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L} & \mathbf{0} & \vdots & \vdots \\ & & & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{L} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L} \end{bmatrix} \quad (1.2.7)$$

Όπου \mathbf{L} πίνακας Laplace $n_x \times n_x$ ενώ $\mathbf{0}$ ο μηδενικός πίνακας $n_x \times n_x$. Ο πίνακας διαφύρισης $\mathbf{L}_{x,2D}$ είναι $(n_x n_y) \times (n_x n_y)$ και προκύπτει ως το γινόμενο Kronecker:

$$\mathbf{L}_{x,2D} = \mathbf{I}_{n_y} \otimes \mathbf{L}_{n_x} \quad (1.2.8)$$

Όπου \mathbf{I}_{n_y} ο μοναδιαίος πίνακας $n_y \times n_y$ και \mathbf{L}_{n_x} ο πίνακας Laplace $n_x \times n_x$.

Αντίστοιχα για την δεύτερη παράγωγο του y έχουμε:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \approx \frac{\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}}{(\Delta y)^2} \quad (1.2.9)$$

Σε αυτή την περίπτωση τα κοντινά στοιχεία κατά Δy απέχουν μεταξύ τους n_x στον (αριθμημένο κατά στήλη) πίνακα $\tilde{\phi}$. Συνεπώς θα προκύψει κατά αναλογία:

$$\mathbf{L}_{y,2D} = \begin{bmatrix} -2\mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \vdots \\ \mathbf{I} & -2\mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & -2\mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & -2\mathbf{I} & \mathbf{I} & \dots & \vdots \\ & & & & \ddots & & \\ \vdots & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & -2\mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \vdots & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & -2\mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (1.2.10)$$

Όπου το \mathbf{I} είναι ο μοναδιαίος πίνακας $n_x \times n_x$.

Ο πίνακας διαφορίσης $\mathbf{L}_{y,2D}$ είναι $(n_x n_y) \times (n_x n_y)$ και προκύπτει ως το γινόμενο Kronecker:

$$\mathbf{L}_{y,2D} = \mathbf{L}_{n_y} \otimes \mathbf{I}_{n_x} \quad (1.2.11)$$

Όπου \mathbf{L}_{n_y} ο πίνακας Laplace $n_y \times n_y$ και \mathbf{I}_{n_x} ο μοναδιαίος πίνακας $n_x \times n_x$.

Έτσι προκύπτει το γραμμικό σύστημα επίλυσης του δυναμικού:

$$\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} \mathbf{L}_{x,2D} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \mathbf{L}_{y,2D} \right) \cdot \tilde{\phi} = -\frac{\tilde{\rho}}{\varepsilon} \quad (1.2.12)$$

1.3 Η Κυματική Εξίσωση στον Δισδιάστατο Χώρο

Στην περίπτωση που θεωρήσουμε το δισδιάστατο επίπεδο να είναι το $x - y$ επίπεδο, χωρίζουμε τις εξισώσεις του ηλεκτρικού πεδίου σε δύο ανεξάρτητα σύνολα.

Τον ΤΕ ρυθμό:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} - \gamma^2 E_z = j\omega\mu J_z \quad (1.3.1)$$

Τον TM ρυθμό:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} - \gamma^2 E_x &= j\omega\mu J_x \\ \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y^2} - \gamma^2 E_y &= j\omega\mu J_y\end{aligned}\quad (1.3.2)$$

Αν αναλογιστούμε τον TM ρυθμό από τις (1.2.8) και (1.2.11) θα προκύψει:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} \mathbf{L}_{x,2D} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \mathbf{L}_{y,2D} - \gamma^2 \mathbf{I} \right) \mathbf{E}_x = j\omega\mu \mathbf{J}_x \\ \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} \mathbf{L}_{x,2D} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \mathbf{L}_{y,2D} - \gamma^2 \mathbf{I} \right) \mathbf{E}_y = j\omega\mu \mathbf{J}_y \end{cases}\quad (1.3.3)$$

Εδώ παρατηρείται ένα παράδοξο [2]. Όπως φαίνεται στις εξισώσεις (1.3.3) σε περίπτωση που έχουμε ένα απειροελάχιστο δίπολο με ρεύμα στην y κατεύθυνση J_y σε ένα χωρικό σημείο, τότε δεν θα δημιουργήσει ηλεκτρικό πεδίο στην x συνιστώσα (E_x), καθώς οι δύο εξισώσεις της (1.3.3) είναι ασύζευκτες. Αυτό το περιεργό αποτέλεσμα οφείλεται στην παραδοχή ότι η απόκλιση του ηλεκτρικού πεδίου είναι μηδέν ($\nabla \cdot \vec{\mathcal{E}} = 0$). Κάτι τέτοιο φυσικά δεν ευσταθεί στις περιοχές που έχουμε πηγές, όπως γνωρίζουμε από τον νόμο του Gauss.

$$\begin{aligned}\nabla \times (\nabla \times \vec{\mathcal{E}}) &= -\nabla^2 \vec{\mathcal{E}} + \nabla \cdot (\nabla \cdot \vec{\mathcal{E}}) = -\nabla^2 \vec{\mathcal{E}} \\ \nabla \times (\nabla \times \vec{\mathcal{H}}) &= -\nabla^2 \vec{\mathcal{H}} + \nabla \cdot (\nabla \cdot \vec{\mathcal{H}}) = -\nabla^2 \vec{\mathcal{H}}\end{aligned}\quad (1.3.4)$$

Προκειμένου να ξεπεραστεί αυτό το πρόβλημα θα χρησιμοποιήσουμε το μαγνητικό πεδίο μιας και η απόκλιση του μαγνητικού πεδίου είναι πάντοτε μηδενική (για πραγματικές πηγές).

Έτσι για TM ρυθμό πέρα από την (1.3.3) έχουμε:

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2} - \gamma^2 H_z = - \underbrace{(\partial_x J_y - \partial_y J_x)}_{(\nabla \times \vec{J})_z}\quad (1.3.5)$$

Με την υπόθεση ότι έχουμε ρεύμα σε κάποιο σημείο (i, j) της μορφής $J_y|_{i,j}$ τότε θα προκύψει (για centered differences):

$$\begin{aligned}
(\nabla \times \vec{J})_z \Big|_{i+1,j} &\approx \frac{J_y \Big|_{i+2,j} - J_y \Big|_{i,j}}{2\Delta x} = -\frac{J_y \Big|_{i,j}}{2\Delta x} \\
(\nabla \times \vec{J})_z \Big|_{i,j} &\approx \frac{J_y \Big|_{i+1,j} - J_y \Big|_{i-1,j}}{2\Delta x} = 0 \\
(\nabla \times \vec{J})_z \Big|_{i-1,j} &\approx \frac{J_y \Big|_{i,j} - J_y \Big|_{i-2,j}}{2\Delta x} = \frac{J_y \Big|_{i,j}}{2\Delta x}
\end{aligned} \tag{1.3.6}$$

Έτσι ξεπερνάμε το πρόβλημα βρίσκοντας το H_z . Με γνωστό το μαγνητικό πεδίο εφαρμόζοντας τις εξισώσεις του Maxwell εύκολα προκύπτουν τα E_x και E_y .

1.4 Η ενσωμάτωση του προσπίπτοντος πεδίου στο γραμμικό σύστημα

Από την FDFD προκύπτει ένα γραμμικό σύστημα της μορφής $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$. Η τοποθέτηση πηγών μέσω των ρευμάτων φάνηκε άμεσα από τις προηγούμενες ενότητες, στην περίπτωση όμως που θέλουμε να εξετάσουμε την απόκριση του συστήματος ενώ προσπίπτει σε αυτό κύμα (με δεδομένα χαρακτηριστικά) το σύστημα γίνεται πιο σύνθετο.

Ένας τρόπος ενσωμάτωσης του προσπίπτοντος πεδίου είναι να δεσμεύσουμε τις τιμές του πεδίου σε μια συγκεκριμένη περιοχή [3]. Αυτά τα σημεία βέβαια επηρεάζουν το πρόβλημα σκέδασης καθώς αλληλεπιδρούν με την διάταξη (όπως θα αλληλεπιδρούσε και μία κεραία), για αυτό αυτά τα δεσμευμένα σημεία επιλέγονται κατάλληλα ώστε να βρίσκονται εκτός της περιοχής ενδιαφέροντος (συνήθως δίπλα στην περιοχή των PML ή των absorbers).

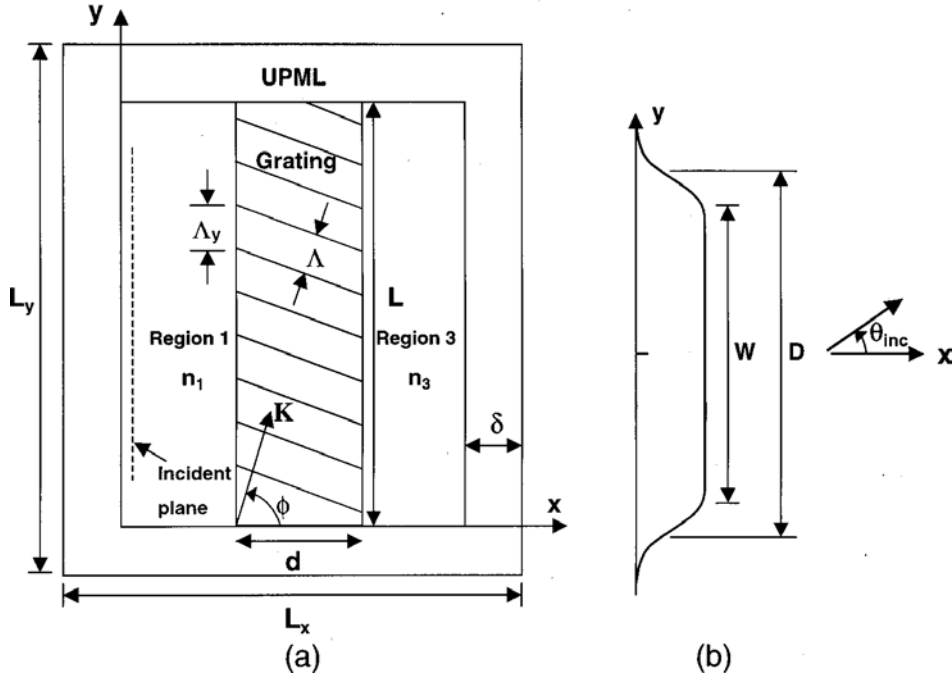
Αξίζει να σημειωθεί ότι οι περισσότερες τεχνικές μείωσης της επίδρασης των δεσμευμένων σημείων στην FDTD [10], δεν εφαρμόζονται στην FDFD αφού δεν μας δίνεται η δυνατότητα, να αφαιρέσουμε την δέσμευση μετά από κάποιον χρόνο ή να χρησιμοποιήσουμε κάποιο παλμικό ηλεκτρομαγνητικό κύμα, και αυτό διότι στην FDFD δουλεύουμε στο πεδίο της συχνότητας για steady-state πεδία.

Μπορεί κανείς να δεσμεύσει κάποια γραμμή ή στήλη και να έχει γκαουσιανή πεδιακή κατανομή, ή όποια άλλη μορφή θέλει. Στην περίπτωση επίπεδου κύματος αραιές φορές γίνεται προσέγγιση με την κατανομή flat cosine-squared προκειμένου να μειωθούν τα αθέμιτα φαινόμενα στα άκρα του πλέγματος.

Μία τέτοια κατανομή έχει την εξής μορφή:

$$g(y) = \begin{cases} 1, & 0 \leq |y| \leq \frac{W}{2} \\ \cos^2 \left[\frac{(|y| - W/2)\pi}{2(D - W)} \right], & \frac{W}{2} \leq |y| \leq D - \frac{W}{2} \\ 0, & D - \frac{W}{2} \leq |y| \leq \infty \end{cases} \quad (1.4.1)$$

Όπου W είναι το εύρος στο οποίο η κατανομή είναι επίπεδη ενώ το $2D - W$ είναι το ολικό πλάτος της δέσμης (όπως φαίνεται στο σχήμα 1.1).



Σχήμα 1.1: (a) Σχηματική απεικόνιση ενός μοντέλου FDFD και της δεσμευμένης περιοχής για το προσπίπτον κύμα, (b) σχηματική απεικόνιση της flat cosine-squared κατανομής [3].

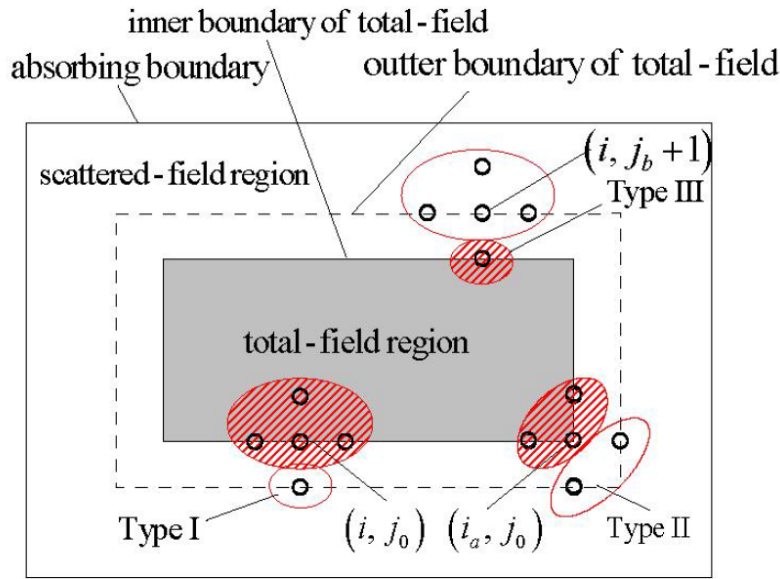
Επιλέγοντας την κατανομή της (1.4.1) και για κάποια γωνία πρόσπτωσης θ_{inc} θα προκύψει το προσπίπτον πεδίο:

$$\vec{U}_{inc} = g(y) \exp(-j\vec{k}_{inc} \cdot \vec{r}) \hat{z} \quad (1.4.2)$$

Όπου $\vec{U}_{inc} = \vec{E}_{inc}$ αν εξετάζουμε TE ρυθμούς, ή αντίστοιχα $\vec{U}_{inc} = \vec{H}_{inc}$ αν εξετάζουμε TM ρυθμούς. Ενώ $\vec{k}_{inc} = k_0 n_1 (\hat{x} \cos \theta_{inc} + \hat{y} \sin \theta_{inc})$, $k_0 = 2\pi / \lambda_0$, δηλαδή το αντίστοιχο \vec{k}_{inc} που ορίζεται από την γωνία πρόσπτωσης και την περιοχή δέσμησης των σημείων.

Εν γένει, το προφίλ της προσπίπτουσας δέσμης μπορεί να είναι ο οποιοσδήποτε τύπος δέσμης με πεπερασμένο άνοιγμα, όπως για παράδειγμα Gaussian ή Hermite-Gaussian, επιλέγοντας κατάλληλα την $g(y)$.

Αυτή η μέθοδος περιορίζει την μοντελοποίηση προβλημάτων, καθώς η δέσμη πρέπει να έχει πεπερασμένο άνοιγμα και εμφανίζει σφάλματα κοντά στην δεσμευμένη περιοχή. Για να ξεπεραστούν αυτά τα προβλήματα μπορούμε να εφαρμόσουμε μία μέθοδο ολικού πεδίου και πεδίου σκεδάσεως (TF/SF) [11],[12],[13] (σχήμα 1.2).



Σχήμα 1.2: Σχηματική Αναπαράσταση του Πλέγματος με τις περιοχές TF & SF [13].

Στην μέθοδο TF/SF διαχωρίζουμε τον χώρο σε δύο περιοχές. Η μία περιοχή είναι αυτή του ολικού πεδίου, σε αυτήν υπάρχουν το προσπίπτον (πηγαίο) πεδίο (source field) καθώς και το πεδίο που προκύπτει από την σκέδαση. Η δεύτερη περιοχή περιέχει μόνο το πεδίο σκεδάσεως. Ευθέως κανείς μπορεί να προσθέσει το πηγαιό πεδίο, στην περιοχή SF προκειμένου να βρει συνολικά στον χώρο το ολικό πεδίο ή να αφαιρέσει το πηγαιό πεδίο στην περιοχή TF προκειμένου να βρει το συνολικό σκεδαζόμενο πεδίο. Επιλέγοντας τις περιοχές TF & SF και κάνοντας αυτές τις προσθαφαιρέσεις δημιουργείται το δεξιό περιεχόμενο της εξίσωσης του γραμμικού συστήματος της μορφής $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Αναλυτικά για τον υπολογισμό του πίνακα \mathbf{b} , πρέπει καταρχάς να κατασκευαστεί το πηγαιό πεδίο f_{src} με τα απαιτούμενα κυματικά χαρακτηριστικά του υλικού από το οποίο έρχεται. Καθώς κατασκευάζεται το f_{src} στο πλέγμα του

μοντέλου, το οποίο θεωρούμε $n_x \times n_y$ έπειτα όπως ακριβώς έγινε στην ενότητα 1.2 για το ϕ (1.2.5), έτσι ανακατανέμεται και το πηγαίο πεδίο και δημιουργείται το \tilde{f}_{src} . Το επόμενο βήμα είναι η κατηγοριοποίηση του χώρου στις δύο περιοχές, αυτό γίνεται μέσω του διαγώνιου πίνακα \mathbf{Q} [11]. Τα διαγώνια στοιχεία του τοποθετημένα με την ίδια σειρά όπως του \tilde{f}_{src} ορίζονται ως εξής:

$$q_{ij} = \begin{cases} 1, & (i, j) \in \text{SF} \\ 0, & (i, j) \in \text{TF} \end{cases} \quad (1.4.3)$$

Όπου (i, j) τα σημεία του πλέγματος του μοντέλου $n_x \times n_y$.

Δεδομένου ότι έχουμε ορίσει το πηγαίο πεδίο (προσπίπτον) \tilde{f}_{src} μας δίνεται η δυνατότητα να το απομονώσουμε στις δύο περιοχές TF & SF μέσω του πίνακα \mathbf{Q} . Έτσι προκύπτει:

$$\tilde{f}_{SF|src} = \mathbf{Q} \cdot \tilde{f}_{src} \quad (1.4.4)$$

$$\tilde{f}_{TF|src} = (\mathbf{I} - \mathbf{Q}) \cdot \tilde{f}_{src} \quad (1.4.5)$$

Έτσι όπως αναφέρθηκε και προηγουμένους πρέπει να αφαιρεθεί η επίδραση του $\tilde{f}_{TF|src}$ από το γραμμικό σύστημα, αλλά μόνο για την SF περιοχή.

Αντίστοιχα θα πρέπει να προσθέσουμε την επίδραση του $\tilde{f}_{SF|src}$ πάνω στο γραμμικό σύστημα, μόνο όμως για την TF περιοχή.

Άρα:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{Q} \cdot \mathbf{A} \cdot \tilde{f}_{TF|src} + (\mathbf{I} - \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{A} \cdot \tilde{f}_{SF|src} = 0 \quad (1.4.6)$$

Από τις εξισώσεις (1.4.4-6):

$$\mathbf{b} = (\mathbf{Q} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{Q}) \cdot \tilde{f}_{src} \quad (1.4.7)$$

Δηλαδή προκύπτει το γραμμικό σύστημα που επιδέχεται λύση:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{Q} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{Q}) \cdot \tilde{f}_{src} \quad (1.4.8)$$

Αυτό που αξίζει να σημειωθεί είναι ότι ο πίνακας \mathbf{b} δεν παίζει κανέναν ρόλο στις συνθήκες που χρειάζονται για την σύγκλιση της επίλυσης του γραμμικού συστήματος με επαναληπτικές μεθόδους όπως είναι η ADI.

1.5 Η αντιμετώπιση των φαινομένων στα άκρα του πλέγματος (absorbers, U-PML, SC-PML)

Στα άκρα του πλέγματος του μοντέλου, στα σημεία δηλαδή που τελειώνει το πλέγμα, έχουμε ουσιαστικά δεσμευμένα σημεία με μηδενική τιμή του πεδίου U_z ($U_z = E_z$ για TE ρυθμό και $U_z = H_z$ για TM ρυθμό), αυτό αυτομάτως επηρεάζει άμεσα την επίδοση του μοντέλου, καθώς προκύπτουν ανεπιθύμητες ανακλάσεις, ειδικά όταν εξετάζονται χώροι χωρίς (ή με μικρές) απώλειες.

Η βασική ιδέα αντιμετώπισης αυτού του προβλήματος είναι η τοποθέτηση ενός τεχνητού (για τις ανάγκες του μοντέλου) υλικού στην περιφέρεια του πλέγματος, το οποίο θα έχει προσαρμογή ($|\Gamma| = 0$) και δεν θα επιστρέφει καθόλου (ιδανικά) ανακλώμενο πεδίο.

Όπως είναι προφανές απλά υλικά μπορούν να πετύχουν προσαρμογή (absorbers), με εκθετική αύξηση των απωλειών του υλικού όμως για συγκεκριμένες γωνίες πρόσπτωσης θ_{inc} .

Συνεπώς σε απλά absorbers έχουμε:

$$\tilde{n} = n - jk$$

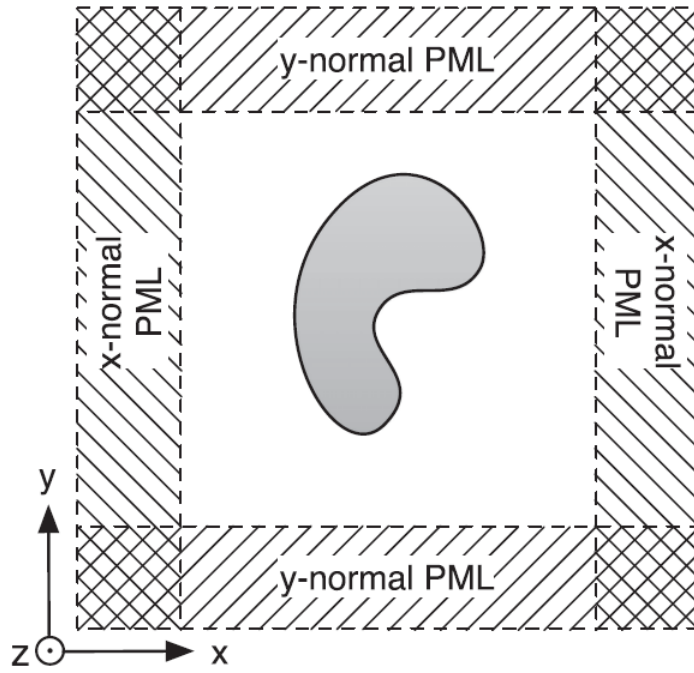
Όπου για το k στα άκρα του πλέγματος ορίζουμε εκθετική ή πολυωνυμική αύξηση της τιμής του αρχίζοντας από την τιμή απωλειών του προβλήματος και καταλήγοντας σε μία μεγαλύτερη.

Πρώτος ο J. P. Besenger το 1994 [14] μελέτησε και δημιούργησε τα πρώτα αποτελεσματικά PML (Perfect Matching Layers). Τέτοια υλικά μπορούν να προσφέρουν προσαρμογή υπό την οποιανδήποτε γωνία πρόσπτωσης θ_{inc} είτε προσδίδοντας ανισοτροπικότητα στο υλικό (U-PML) είτε μεταβάλλοντας τις συντεταγμένες του συστήματος (SC-PML) [15].

Όπως θα δούμε, η τοποθέτηση αυτών των υλικών μεταβάλλει την εξίσωση Helmholtz, και δυσχεραίνει την επίλυση του γραμμικού προβλήματος.

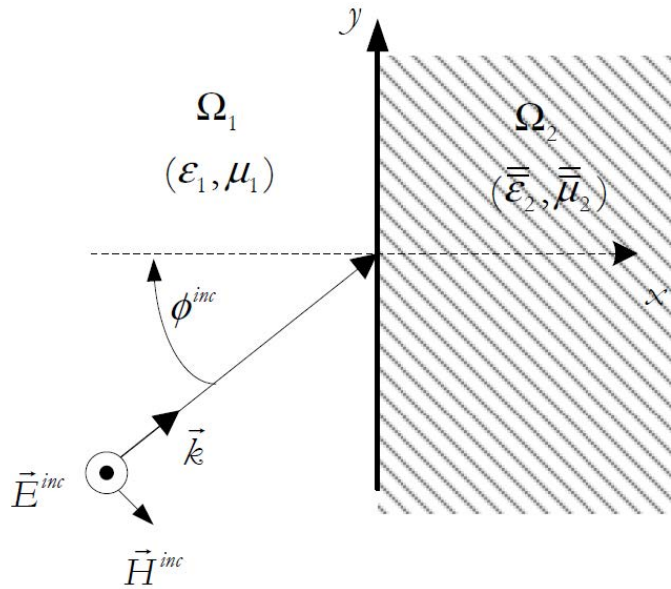
Κάτι που διαπιστώνεται και ποιοτικά καθώς τα PML αλλάζουν την περιοχή και προσδίδουν περιεργές χωρικές ιδιότητες στα άκρα.

Εν αντιθέσει τα απλά absorbers προσδίδουν απώλειες στην περίμετρο του πλέγματος και αλλοιώνουν λιγότερο την υπό εξέταση περιοχή, χωρίς όμως να έχουν τόσο καλή προσαρμογή.



Σχήμα 1.3: Σχηματική απεικόνιση ενός πλέγματος που στην περιφέρεια του έχει προστεθεί PML [39].

1.5.1 Ανισοτροπικά PML (U-PML)



Σχήμα 1.4: Προσπίπτον κύμα υπό γωνία από τον χώρο Ω_1 στον Ω_2 , όπου x κάθετο στην διαχωριστική επιφάνεια [16].

Θεωρούμε προσπίπτον μονοχρωματικό κύμα τυχαίας πόλωσης, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.4, που διαδίδεται σε ιστροπικό ημιχώρο Ω_1 ($x < 0$) και υποθέτουμε ότι έχει την μορφή:

$$\vec{H}^{inc} = \vec{H}_0 e^{-jk_{1x}x - jk_{1y}y} \quad (1.5.1)$$

Ενώ ισχύει:

$$\vec{k} = \hat{x}k_{1x} + \hat{y}k_{1y} = \hat{x}k_1 \cos \phi^{inc} + \hat{y}k_1 \sin \phi^{inc} \quad (1.5.2)$$

Όπου $k_1 = \omega \sqrt{\varepsilon_1 \mu_1}$.

Ενώ θεωρούμε τον χώρο στον οποίο προσπίπτει Ω_2 ($x > 0$) ότι έχει παραμέτρους της μορφής μονοαξονικού ανιστροπικού μέσου (uniaxial):

$$\bar{\bar{\varepsilon}}_2 = \varepsilon_2 \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix}, \quad \bar{\bar{\mu}}_2 = \mu_2 \begin{bmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix} \quad (1.5.3)$$

Για τον χώρο Ω_2 πρέπει να ισχύουν οι εξισώσεις Maxwell:

$$-j\omega \bar{\bar{\mu}}_2 \vec{H} = \nabla \times \vec{E}, \quad j\omega \bar{\bar{\varepsilon}}_2 \vec{E} = \nabla \times \vec{H} \quad (1.5.4)$$

Καθώς θεωρούμε επίπεδα κύματα τότε η (1.5.4) απλοποιείται ως εξής:

$$\omega \bar{\bar{\mu}}_2 \vec{H} = \vec{k}_2 \times \vec{E}, \quad \omega \bar{\bar{\varepsilon}}_2 \vec{E} = -\vec{k}_2 \times \vec{H} \quad (1.5.5)$$

Η (1.5.5) μας οδηγεί στην κυματική εξίσωση της μορφής:

$$\vec{k}_2 \times \bar{\bar{\varepsilon}}_2^{-1} \vec{k}_2 \times \vec{H} + \omega^2 \bar{\bar{\mu}}_2 \vec{H} = 0 \quad (1.5.6)$$

Από τις (1.5.3) και (1.5.6) έχουμε:

$$\left(\begin{array}{cc|c} k_2^2 - (k_{2y})^2 b^{-1} & k_{2x} k_{2y} b^{-1} & 0 \\ k_{2x} k_{2y} b^{-1} & k_2^2 d - (k_{2x})^2 b^{-1} & 0 \\ \hline 0 & 0 & k_2^2 d - (k_{2x})^2 b^{-1} - (k_{2y})^2 a^{-1} \end{array} \right) \begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} = 0 \quad (1.5.7)$$

Όπου $k_2 = \omega \sqrt{\varepsilon_2 \mu_2}$. Η εξίσωση (1.5.7) οδηγεί στην εξίσωση διασποράς μηδενίζοντας την οριζούσα του πίνακα. Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι από τον πίνακα

φαίνεται η ανεξαρτησία των TE ($E_z, H_x, H_y, H_z = 0$), TM ($H_z, E_x, E_y, E_z = 0$) ρυθμών. Έτσι η οριζουσα του πάνω αριστερά υποπίνακα 2×2 της (1.5.7) αντιστοιχεί στον TE ρυθμό, ενώ ο υποπίνακας κάτω δεξιά 1×1 αντιστοιχεί στον TM ρυθμό. Άρα:

$$k_2^2 - k_{2x}^2 b^{-1} d^{-1} - k_{2y}^2 b^{-1} c^{-1} = 0, \quad \text{TE} \quad (H_z = 0) \quad (1.5.8)$$

$$k_2^2 - k_{2x}^2 b^{-1} d^{-1} - k_{2y}^2 a^{-1} d^{-1} = 0, \quad \text{TM} \quad (E_z = 0) \quad (1.5.9)$$

Στην περίπτωση TM ρυθμού θα έχουμε το ολικό πεδίο για τον Ω_1 [17]:

$$\begin{aligned} \vec{H}_1 &= \hat{z} H_0 \left(1 + \Gamma e^{2jk_{1x}x}\right) e^{-jk_{1x}x - jk_{1y}y} \\ \vec{E}_1 &= \left[-\hat{x} \frac{k_{1y}}{\omega \varepsilon_1} \left(1 + \Gamma e^{2jk_{1x}x}\right) + \hat{y} \frac{k_{1x}}{\omega \varepsilon_1} \left(1 - \Gamma e^{2jk_{1x}x}\right) \right] H_0 e^{-jk_{1x}x - jk_{1y}y} \end{aligned} \quad (1.5.10)$$

Ενώ για τον Ω_2 :

$$\begin{aligned} \vec{H}_2 &= \hat{z} H_0 \tau e^{-jk_{2x}x - jk_{2y}y} \\ \vec{E}_2 &= \left[-\hat{x} \frac{k_{2y}}{\omega \varepsilon_2 a} + \hat{y} \frac{k_{2x}}{\omega \varepsilon_2 b} \right] H_0 \tau e^{-jk_{2x}x - jk_{2y}y} \end{aligned} \quad (1.5.11)$$

Για να βρεθούν ο συντελεστής ανάκλασης Γ και ο συντελεστής διάδοσης τ θα χρησιμοποιηθούν οι οριακές συνθήκες των εφαπτομενικών πεδίων στο $x = 0$. Από τις οποίες προκύπτουν:

Για την συνέχεια όλων των τιμών του y θα πρέπει να ισχύει:

$$k_{1y} = k_{2y} \quad (1.5.12)$$

Ενώ:

$$\Gamma = \frac{\frac{k_{1x}}{\varepsilon_1} - \frac{k_{2x}}{\varepsilon_2 b}}{\frac{k_{1x}}{\varepsilon_1} + \frac{k_{2x}}{\varepsilon_2 b}}, \quad \tau = 1 + \Gamma = \frac{2 \frac{k_{1x}}{\varepsilon_1}}{\frac{k_{1x}}{\varepsilon_1} + \frac{k_{2x}}{\varepsilon_2 b}} \quad (1.5.13)$$

Από τις εξισώσεις (1.5.9) και (1.5.12) προκύπτει:

$$k_{2x} = \sqrt{k_2^2 b d - (k_{1y})^2 a^{-1} b} \quad (1.5.14)$$

Επιλέγοντας $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\mu_1 = \mu_2$ τότε $k_1 = k_2$. Και $d = b$ και $a^{-1} = b$ προκύπτει από την (1.5.14):

$$k_{2x} = \sqrt{k_1^2 b^2 - (k_{1y})^2 b^2} = b \sqrt{k_1^2 - (k_{1y})^2} = b k_{1x} \quad (1.5.15)$$

Αντικαθιστώντας την (1.5.15) στην (1.5.13) έχουμε $\Gamma = 0, \tau = 1$ για το οποιοδήποτε k_{1x} .

Κατά αντιστοιχία για τον TE ρυθμό δουλεύοντας με τον ίδιο τρόπο θα προκύψει $\Gamma = 0, \tau = 1$ για $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\mu_1 = \mu_2$, $d = b$ και $c^{-1} = d$.

Συνεπώς στην γενική περίπτωση αν θεωρήσουμε $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\mu_1 = \mu_2$, $d = b = a^{-1} = c^{-1}$, θα έχουμε $\Gamma = 0$. Έτσι δεν θα ανακλαστεί καθόλου το κύμα και θα διαδοθεί στο Ω_2 με κυματοδιάνυσμα $\vec{k}_2 = \hat{x} b k_{1x} + \hat{y} k_{1y}$.

Αυτό το αποτέλεσμα είναι ανεξάρτητο από την γωνία πρόσπτωσης, την συχνότητα, την πόλωση του κύματος και τα ε_1, μ_1 .

Στην περίπτωση (όπως στο σχήμα 1.3) που το x είναι κάθετο στην διαχωριστική επιφάνεια του PML, τότε συμβολίζουμε $b = s_x$. Συνεπώς θα προκύψει:

$$\bar{\varepsilon}_2 = \varepsilon_1 \bar{s}, \quad \bar{\mu}_2 = \mu_1 \bar{s} \quad (1.5.16)$$

Όπου:

$$\bar{s} = \bar{s}_x = \begin{bmatrix} s_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s_x & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{bmatrix} \quad (1.5.17)$$

Δεδομένου ότι ισχύει η (1.5.15) βρίσκεται ότι εντός του PML ο παράγοντας του x έχει την μορφή:

$$\exp(-j k_{1x} s_x x) \quad (1.5.18)$$

Συνεπώς όπως φαίνεται η μορφή του s_x παίζει σημαντικό ρόλο, καθώς από αυτήν την παράμετρο εξαρτώνται οι ιδιότητες της διάδοσης στο PML. Ο Berenger πρότεινε [14-15]:

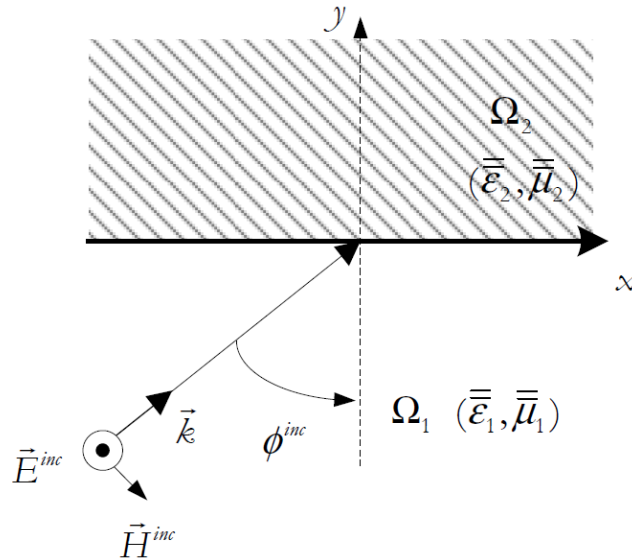
$$s_x = \kappa_x + \frac{\sigma_x}{j\omega\varepsilon_0} \quad (1.5.19)$$

Από την (1.5.18) και (1.5.19) έχουμε:

$$\exp(-jk_{1x}s_x x) = \exp(-jk_{1x}\kappa_x x) \exp(-\sqrt{\varepsilon_{r1}\mu_{r1}n_0\sigma_x \cos\phi^{inc}x}) \quad (1.5.20)$$

$$\text{Όπου } k_{1x} = \omega\sqrt{\varepsilon_1\mu_1} \cos\phi^{inc} \text{ και } n_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}.$$

Έτσι επιλέγεται $\sigma_x \geq 1$, και $\kappa_x \geq 1$. Το φανταστικό μέρος του s_x οδηγεί σε απόσβεση το κύμα. Ενώ ο ρυθμός της απόσβεσης είναι ανεξάρτητος της συχνότητας. Για αυτό τον λόγο η απόσβεση είναι ουσιαστικά μία συνάρτηση της φυσικής απόστασης που διανύει το κύμα, και όχι του μήκους κύματος. Επίσης το κ_x είναι το αντιστρόφως ανάλογο της φασικής ταχύτητας του κύματος εντός του μέσου.



Σχήμα 1.5: Προσιπτον κύμα υπό γωνία από τον χώρο Ω_1 στον Ω_2 , όπου y κάθετο στην διαχωριστική επιφάνεια [16].

Κατά αντιστοιχία με τα (1.5.16) (1.5.17) όταν η διαχωριστική επιφάνεια είναι στην διεύθυνση του y ή του z , τότε θα έχουμε:

$$\bar{\bar{s}} = \bar{\bar{s}}_y = \begin{bmatrix} s_y & 0 & 0 \\ 0 & s_y^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & s_y \end{bmatrix}, \quad \bar{\bar{s}} = \bar{\bar{s}}_z = \begin{bmatrix} s_z & 0 & 0 \\ 0 & s_z & 0 \\ 0 & 0 & s_z^{-1} \end{bmatrix} \quad (1.5.21)$$

Έτσι για το συνολικό πλέγμα το οποίο έχει παραμέτρους ε_h, μ_h θα έχουμε:

$$\bar{\bar{\epsilon}} = \bar{s} \epsilon_h, \quad \bar{\bar{\mu}} = \bar{s} \mu_h \quad (1.5.22)$$

Όπου ο πίνακας \bar{s} συμπεριλαμβάνει όλες τις διαχωριστικές επιφάνειες και γίνεται:

$$\bar{s} = \bar{s}_x \cdot \bar{s}_y \cdot \bar{s}_z = \begin{bmatrix} \frac{s_y s_z}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_x s_z}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{s_x s_y}{s_z} \end{bmatrix} \quad (1.5.23)$$

Έτσι για περιπτώσεις εκτός περιοχής PML $\kappa_k = 1$ και $\sigma_k = 0$ δηλαδή $s_k = 1$, όπου $k = x, y, z$.

1.5.2 Stretched Coordinate PML

Οι Chew & Weedon [18] έδειξαν ότι αντί το PML να εισαχθεί μέσω των υλικών παραμέτρων, είναι δυνατό να εισαχθεί μέσω των παραγώγων στο χώρο.

Οι μερικές παράγωγοι σε ένα stretched σύστημα συντεταγμένων εκφράζονται ως:

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} = \frac{1}{s_x} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} = \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} = \frac{1}{s_z} \frac{\partial}{\partial z} \quad (1.5.24)$$

Έτσι οι εξισώσεις του Maxwell γίνονται:

$$-j\omega\mu\vec{H} = \nabla \times \vec{E} = \hat{x} \left(\frac{1}{s_y} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{1}{s_z} \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) + \hat{y} \left(\frac{1}{s_z} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{1}{s_x} \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) + \hat{z} \left(\frac{1}{s_x} \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{1}{s_y} \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \quad (1.5.25)$$

$$j\omega\epsilon\vec{E} = \nabla \times \vec{H} = \hat{x} \left(\frac{1}{s_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{s_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) + \hat{y} \left(\frac{1}{s_z} \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{1}{s_x} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \hat{z} \left(\frac{1}{s_x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{s_y} \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (1.5.26)$$

Έτσι αν κάνει κανείς την ίδια ανάλυση τότε προκύπτουν τα ίδια αποτελέσματα με αυτά του U-PML. Οι δύο μέθοδοι θεωρούνται ισοδύναμες.

1.5.3 Η εξίσωση Helmholtz με τα PML

Όπως είναι προφανές, εισάγοντας ανισοτροπικότητα (για τα U-PML) ή stretched συστήματα συντεταγμένων (για τα SC-PML), η εξίσωση Helmholtz επηρεάζεται.

Ο διαφορικός τελεστής που προκύπτει [3],[13],[39]:

Για ομογενές υλικό χωρίς PML:

$$\mathbf{T}_0^r(\mathbf{E}) = \nabla \times \mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E} - \omega^2 \epsilon \mathbf{E} \quad (1.5.27)$$

Για U-PML:

$$\mathbf{T}_0^u(\mathbf{E}) = \nabla \times (\bar{\bar{\mu}}_s)^{-1} \nabla \times \mathbf{E} - \omega^2 \bar{\bar{\epsilon}}_s \mathbf{E} \quad (1.5.28)$$

Για SC-PML:

$$\mathbf{T}_0^{sc}(\mathbf{E}) = \nabla_s \times \mu^{-1} \nabla_s \times \mathbf{E} - \omega^2 \epsilon \mathbf{E} \quad (1.5.29)$$

Όπου:

$$\nabla_s = \hat{x} \frac{1}{s_x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{1}{s_z} \frac{\partial}{\partial z}$$

Συγκρίνοντας τους τελεστές (1.5.27), (1.5.28), (1.5.29) προκύπτει άμεσα ότι έχουμε χειροτέρευση του condition number του πίνακα \mathbf{A} της γραμμικής εξίσωσης $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ που προκύπτει [39].

Πιο συγκεκριμένα παρατηρείται ότι το SC-PML έχει καλύτερη απόδοση σε επαναληπτικές μεθόδους σε σχέση με το U-PML [39], δηλαδή παρόλο που από φυσικής σημασίας είναι ισοδύναμα, διαφέρουν ως προς το condition number αισθητά.

Επειδή όμως αρκετές φορές συνηθίζεται η μοντελοποίηση σε U-PML (π.χ. στην FEM εφαρμόζεται ευκολότερα το U-PML καθώς περιγράφεται από τις ίδιες εξισώσεις πεπερασμένων στοιχείων όπως σε ένα σύστημα που δεν έχει καθόλου PML), ενδείκνυται ένα diagonal preconditioning το οποίο φέρνει το σύστημα σε παρόμοια συμπεριφορά με το SC-PML, χωρίς να χρειάζεται να ξαναστήσουμε το μοντέλο από την αρχή. Αυτό το τέχνασμα ονομάζεται Scale-Factor Preconditioning Scheme και προέκυψε από τον Shin το 2012 [39]. Πιο συγκεκριμένα:

Οι σχέσεις που συνδέουν το ηλεκτρικό πεδίο και την πηγή στις εξισώσεις με U-PML και SC-PML είναι:

$$\mathbf{E}^u = \begin{pmatrix} s_x & 0 & 0 \\ 0 & s_y & 0 \\ 0 & 0 & s_z \end{pmatrix} \mathbf{E}^{sc}, \quad \mathbf{J}^u = \begin{pmatrix} s_y s_z & 0 & 0 \\ 0 & s_x s_z & 0 \\ 0 & 0 & s_y s_x \end{pmatrix} \mathbf{J}^{sc} \quad (1.5.30)$$

Στην περίπτωση που λύνουμε ως προς κάποια συνιστώσα θα προκύψει δεδομένου της (1.5.30):

$$\mathbf{e}^u = \mathbf{S}_1 \mathbf{e}^{sc}, \quad \mathbf{j}^u = \mathbf{S}_a \mathbf{j}^{sc} \quad (1.5.31)$$

Συνεπώς έχουμε:

$$\mathbf{A}^u \mathbf{e}^u = -i\omega \mathbf{j}^u \quad (1.5.32)$$

$$\mathbf{A}^{sc} \mathbf{e}^{sc} = -i\omega \mathbf{j}^{sc} \quad (1.5.33)$$

Από τις (1.5.31),(1.5.32),(1.5.33) προκύπτει:

$$\mathbf{A}^{sc} = \mathbf{S}_a^{-1} \mathbf{A}^u \mathbf{S}_1 \quad (1.5.34)$$

Συνεπώς αν έχουμε το σύστημα: $\mathbf{A}^u \mathbf{x} = \mathbf{b}$ τότε θα εφαρμόσουμε το Scale-Factor Preconditioning:

$$\mathbf{A}^{sp} \mathbf{y} = \mathbf{S}_a^{-1} \mathbf{b} \quad (1.5.35)$$

Όπου:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^{\text{sp}} &= \mathbf{S}_a^{-1} \mathbf{A}^u \mathbf{S}_1 \\ \mathbf{x} &= \mathbf{S}_1 \mathbf{y}\end{aligned}\tag{1.5.36}$$

Για την λεπτομερή εξέταση των μέγιστων και ελαχίστων ιδιοτιμών και κατά συνέπεια του condition number των διαφορικών τελεστών $(\mathbf{T}_0^r(\mathbf{E}), \mathbf{T}_0^u(\mathbf{E}), \mathbf{T}_0^{\text{sc}}(\mathbf{E}))$ παραπέμπεται ο αναγνώστης στην βιβλιογραφία [39],[40].

1.6 Η υλοποίηση του FDFD μοντέλου

Δεδομένου των αλλαγών στο γραμμικό σύστημα που επιφέρουν τα PML οι πίνακες του συστήματος απαιτούν κάποιες τροποποιήσεις, συνεπώς είναι πλέον αδύνατο να χρησιμοποιηθούν οι πίνακες (1.2.7) και (1.2.10). Αυτό οφείλεται από μαθηματικής άποψης στο γεγονός ότι πλέον δεν ισχύει η γνωστή εξίσωση Helmholtz αλλά έχει τροποποιηθεί όπως φαίνεται στην ενότητα 1.5.3 από κάποια πιο γενικευμένη κυματική εξίσωση. Όπως θα φανεί οι τελικοί πίνακες έχουν λίγες διαφορές σε σχέση με τους (1.2.7) (1.2.10) όμως επηρεάζουν την απόδοση των επαναληπτικών μεθόδων επίλυσης και το matrix conditioning.

Είναι πολλές φορές προτιμητέο, στα υπολογιστικά μοντέλα, να γίνονται κανονικοποιήσεις, ώστε να αποφεύγονται αριθμητικά σφάλματα και να εξοικονομείται μνήμη. Επιπλέον επιλέγεται κανονικοποίηση στις συντεταγμένες του προβλήματος $x' = k_0 x$, $y' = k_0 y$ και $z' = k_0 z$, ενώ κανονικοποιείται και το μαγνητικό πεδίο για λόγους απλούστευσης των εξισώσεων του Maxwell:

$$\vec{H} = -j \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \vec{H}\tag{1.6.1}$$

Έτσι οι εξισώσεις του Maxwell γίνονται:

$$\nabla \times \vec{E} = k_0 \mu_r \vec{H}\tag{1.6.2}$$

$$\nabla \times \vec{H} = k_0 \epsilon_r \vec{E}\tag{1.6.3}$$

Εισάγοντας τα PML εντάσσεται ο πίνακας $\bar{\bar{\mathbf{S}}}$ στα ε_r, μ_r (U-PML) [19],[20], ή εντάσσουμε τα SC-PML στις παραγώγους όπως θα εξηγηθεί παρακάτω. Αναλύοντας τις (1.6.2), (1.6.3) ανά συντεταγμένη.

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}_{y'}^E \mathbf{E}_z - \mathbf{D}_{z'}^E \mathbf{E}_y &= \mu_x \tilde{\mathbf{H}}_x \\
\mathbf{D}_{z'}^E \mathbf{E}_x - \mathbf{D}_{x'}^E \mathbf{E}_z &= \mu_y \tilde{\mathbf{H}}_y \\
\mathbf{D}_{x'}^E \mathbf{E}_y - \mathbf{D}_{y'}^E \mathbf{E}_x &= \mu_z \tilde{\mathbf{H}}_z \\
\mathbf{D}_{y'}^H \tilde{\mathbf{H}}_z - \mathbf{D}_{z'}^H \tilde{\mathbf{H}}_y &= \varepsilon_x \mathbf{E}_x \\
\mathbf{D}_{z'}^H \tilde{\mathbf{H}}_x - \mathbf{D}_{x'}^H \tilde{\mathbf{H}}_z &= \varepsilon_y \mathbf{E}_y \\
\mathbf{D}_{x'}^H \tilde{\mathbf{H}}_y - \mathbf{D}_{y'}^H \tilde{\mathbf{H}}_x &= \varepsilon_z \mathbf{E}_z
\end{aligned} \tag{1.6.4}$$

Τα $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z, \tilde{\mathbf{H}}_x, \tilde{\mathbf{H}}_y, \tilde{\mathbf{H}}_z$ είναι τα διανύσματα (με αρίθμηση κατά στήλη) των αντίστοιχων πεδίων. Τα $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z, \mu_x, \mu_y, \mu_z$ είναι οι διαγώνιοι πίνακες όπως έχουν διαμορφωθεί από το μοντέλο.

Ενώ οι πίνακες \mathbf{D} είναι εκείνοι που εκπροσωπούν τις χωρικές παραγώγους στο σύστημα.

Δεδομένου της κλιμακωτής μορφής των Yee cells [9] έχουμε:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{D}_{x'}^E \mathbf{E})_{i,j,k} &= \frac{E^{i+1,j,k} - E^{i,j,k}}{\Delta x'} \\
(\mathbf{D}_{y'}^E \mathbf{E})_{i,j,k} &= \frac{E^{i,j+1,k} - E^{i,j,k}}{\Delta y'} \\
(\mathbf{D}_{z'}^E \mathbf{E})_{i,j,k} &= \frac{E^{i,j,k+1} - E^{i,j,k}}{\Delta z'} \\
(\mathbf{D}_{x'}^H \tilde{\mathbf{H}})_{i,j,k} &= \frac{\tilde{H}^{i,j,k} - \tilde{H}^{i-1,j,k}}{\Delta x'} \\
(\mathbf{D}_{y'}^H \tilde{\mathbf{H}})_{i,j,k} &= \frac{\tilde{H}^{i,j,k} - \tilde{H}^{i,j-1,k}}{\Delta y'} \\
(\mathbf{D}_{z'}^H \tilde{\mathbf{H}})_{i,j,k} &= \frac{\tilde{H}^{i,j,k} - \tilde{H}^{i,j,k-1}}{\Delta z'}
\end{aligned} \tag{1.6.5}$$

Έτσι όπως παρατηρείται οι πίνακες \mathbf{D} από μαθηματικής άποψης είναι απλοί πίνακες διαφοράσης (difference matrices).

Στην περίπτωση που έχουμε SC-PML αντικαθιστούμε: $\mathbf{D}_k \rightarrow s_k^{-1} \mathbf{D}_k$, όπως ακριβώς περιγράψαμε στην Ενότητα 1.5.

Εδώ αξίζει να σημειώσουμε ότι με την κυκλική διαφόριση και τροποποιώντας τους πίνακες \mathbf{D} μπορούν να μελετηθούν περιοδικές διατάξεις. Ασφαλώς σε αυτήν την περίπτωση για τα αντίστοιχα άκρα του πλέγματος που έχουμε περιοδικότητα δεν απαιτούνται PML.

1.6.1 Τα μονοδιάστατα και δισδιάστατα Συστήματα

Το σύστημα εξισώσεων (1.6.4) περιγράφει το σύστημα και στις τρεις διαστάσεις του. Στην περίπτωση μονοδιάστατων ή δισδιάστατων προβλημάτων το σύστημα απλοποιείται.

Για δισδιάστατα συστήματα, έστω στο επίπεδο $x-y$ θα έχουμε $\mathbf{D}_z^E = \mathbf{D}_z^H = \mathbf{0}$. Έτσι οι εξισώσεις που προκύπτουν χωρίζονται σε δύο ανεξάρτητα συστήματα:

TE ρυθμοί:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{x'}^H \tilde{\mathbf{H}}_y - \mathbf{D}_{y'}^H \tilde{\mathbf{H}}_x &= \varepsilon_z \mathbf{E}_z \\ \mathbf{D}_{y'}^E \mathbf{E}_z &= \mu_x \tilde{\mathbf{H}}_x \\ -\mathbf{D}_{x'}^E \mathbf{E}_z &= \mu_y \tilde{\mathbf{H}}_y \end{aligned} \quad (1.6.6)$$

TM ρυθμοί:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{x'}^E \mathbf{E}_y - \mathbf{D}_{y'}^E \mathbf{E}_x &= \mu_z \tilde{\mathbf{H}}_z \\ \mathbf{D}_{y'}^H \tilde{\mathbf{H}}_z &= \varepsilon_x \mathbf{E}_x \\ -\mathbf{D}_{x'}^H \tilde{\mathbf{H}}_z &= \varepsilon_y \mathbf{E}_y \end{aligned} \quad (1.6.7)$$

Για μονοδιάστατα προβλήματα θεωρούμε $\mathbf{D}_x^E = \mathbf{D}_x^H = \mathbf{D}_y^E = \mathbf{D}_y^H = \mathbf{0}$, τότε θα προκύψουν πάλι δύο ανεξάρτητα συστήματα εξισώσεων:

\mathbf{E}_x ρυθμοί:

$$\begin{aligned} -\mathbf{D}_{z'}^H \tilde{\mathbf{H}}_y &= \varepsilon_x \mathbf{E}_x \\ \mathbf{D}_{z'}^E \mathbf{E}_x &= \mu_y \tilde{\mathbf{H}}_y \end{aligned} \quad (1.6.8)$$

\mathbf{E}_y ρυθμοί:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{z'}^H \tilde{\mathbf{H}}_x &= \varepsilon_y \mathbf{E}_y \\ -\mathbf{D}_{z'}^E \mathbf{E}_y &= \mu_x \tilde{\mathbf{H}}_x \end{aligned} \quad (1.6.9)$$

Ενώ οι διαμήκεις συνιστώσες είναι μηδενικές:

$$\mathbf{E}_z = \tilde{\mathbf{H}}_z = \mathbf{0} \quad (1.6.10)$$

1.6.2 Η Κυματική Εξίσωση – Η Μορφοποίηση του $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0}$

Δεδομένων των αποτελεσμάτων της Ενότητας (1.6.1) προκύπτει ευθέως η απαλοιφή των μαγνητικών πεδίων στους ΤΕ ρυθμούς και των ηλεκτρικών πεδίων στους ΤΜ ρυθμούς έτσι θα έχουμε:

ΤΕ ρυθμός:

$$(\mathbf{D}_{x'}^H \mu_y^{-1} \mathbf{D}_{x'}^E + \mathbf{D}_{y'}^H \mu_x^{-1} \mathbf{D}_{y'}^E + \varepsilon_z) \mathbf{E}_z = \mathbf{0} \quad (1.6.11)$$

Ενώ τα μαγνητικά πεδία προκύπτουν αφού βρεθεί το \mathbf{E}_z :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{H}}_x &= \mu_x^{-1} \mathbf{D}_{y'}^E \mathbf{E}_z \\ \tilde{\mathbf{H}}_y &= -\mu_y^{-1} \mathbf{D}_{x'}^E \mathbf{E}_z \end{aligned} \quad (1.6.12)$$

ΤΜ ρυθμός:

$$(\mathbf{D}_{x'}^E \varepsilon_y^{-1} \mathbf{D}_{x'}^H + \mathbf{D}_{y'}^E \varepsilon_x^{-1} \mathbf{D}_{y'}^H + \mu_z) \tilde{\mathbf{H}}_z = \mathbf{0} \quad (1.6.13)$$

Ενώ τα ηλεκτρικά πεδία προκύπτουν αφού βρεθεί το $\tilde{\mathbf{H}}_z$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_x &= \varepsilon_x^{-1} \mathbf{D}_{y'}^H \tilde{\mathbf{H}}_z \\ \mathbf{E}_y &= -\varepsilon_y^{-1} \mathbf{D}_{x'}^H \tilde{\mathbf{H}}_z \end{aligned} \quad (1.6.14)$$

1.7 Μοντέλο για Σκεδαστές πλησίον Ημιάπειρων ή Πολυστρωματικών Επίπεδων Διατάξεων

Στην περίπτωση όπου έχουμε ένα μοντέλο ημιαπειρών περιοχών ή πολλαπλών στρωμάτων με διαφορετικό δείκτη διάθλασης ως προς μία μόνο κατεύθυνση, πρέπει να τροποποιηθεί η μέθοδος της Ενότητας 1.4, καθώς το προσπίπτον πεδίο (όταν δεν έχουμε περιοδικές διατάξεις) δεν μπορεί να «δει» την συνεισφορά του ημιαπειρου χώρου.

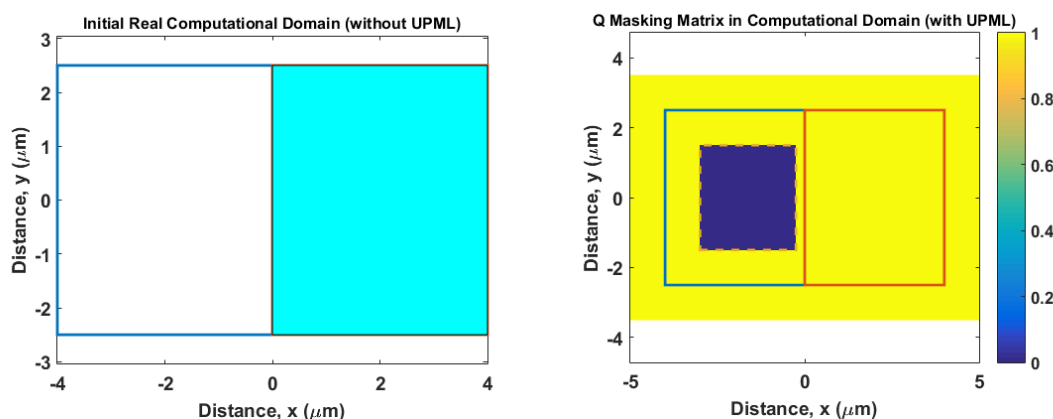
Παρατηρήθηκε η σωστή ανταπόκριση του μοντέλου όταν θεωρήσαμε ως πηγαιό πεδίο το πεδίο που προκύπτει λαμβάνοντας υπόψη τους ημιάπειρους χώρους, (δηλαδή απαιτείται η εν μέρει γνώση της πεδιακής κατανομής).

Όπως θα δούμε στο τέλος στην γενική περίπτωση καταλήγει κανείς στην επίλυση δύο γραμμικών συστημάτων (όταν βεβαίως δεν γίνεται να υπολογιστεί θεωρητικά το πρώτο στάδιο της λύσης).

Αξίζει να σημειώσουμε ότι δεν χρειάζεται καμία τροποποίηση των PML καθώς μπορούν να ανταπεξέλθουν σε ασυνέχειες στα σημεία τους λόγω της γενικευμένης μορφής που έχουν.

Καθώς το πρόβλημα είναι καθαρά υπολογιστικό παραθέτουμε ένα αντιπροσωπευτικό παράδειγμα.

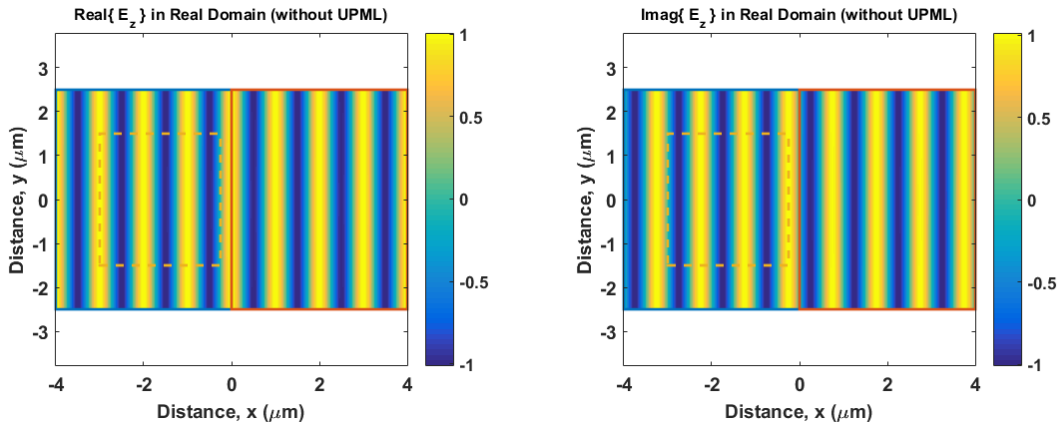
Ας υποθέσουμε δύο ημιάπειρους χώρους απέραντους ως προς τον άξονα yy' και έστω το πρώτο μισό είναι αέρας ($n = 1$), ενώ το δεύτερο μισό είναι γυαλί ($n = 1.5$), το μήκος κύματος το ορίζουμε ως $\lambda_0 = 1\mu m$, τότε καταστρώνουμε το μοντέλο με βάσει των ενοτήτων που προηγήθηκαν (όπως φαίνεται στο σχήμα 1.6):



Σχήμα 1.6: Σχηματική Απεικόνιση των δύο Ημιάπειρων Περιοχών, καθώς και του πίνακα Q .

Η άσπρη περιοχή (στο σχήμα 1.6) έχει $n = 1$, γαλάζια περιοχή έχει $n = 1.5$ ενώ με την βοήθεια του πίνακα \mathbf{Q} ορίζουμε τα σημεία των TF/SF (μπλε περιοχή TF, κίτρινη περιοχή SF).

Αν σε αυτό το πρόβλημα θεωρήσουμε προσπίπτον πεδίο το $\vec{E} = \hat{z} \cdot E_0 \exp(-jk_0 x)$ (TE πόλωση) και το εφαρμόσουμε στην \tilde{f}_{src} τότε θα προκύψει το ολικό ηλεκτρικό πεδίο που φαίνεται στο σχήμα 1.7:



Σχήμα 1.7: Σχηματική Αναπαράσταση του Ολικού Ηλεκτρικού Πεδίου στις δυο περιοχές, όπως είναι φανερό το μοντέλο δεν βλέπει την δεύτερη περιοχή με $n=1,5$.

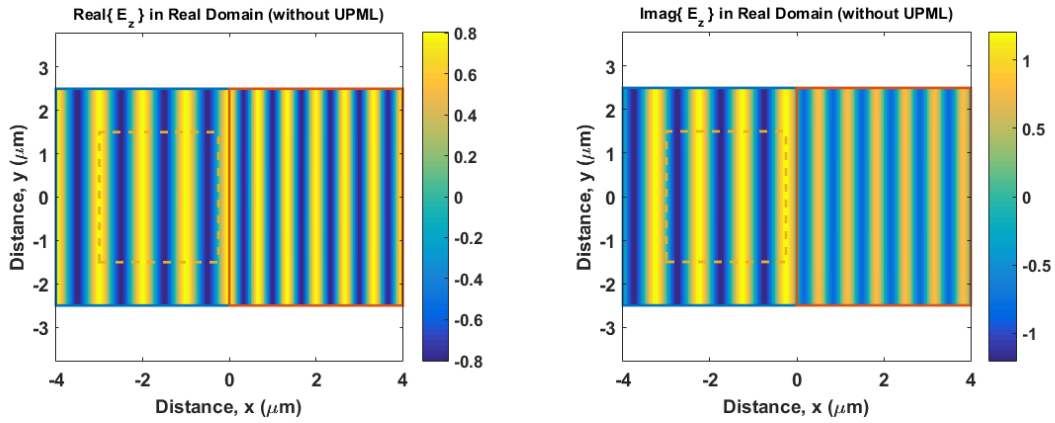
Είναι προφανές ότι το μοντέλο υπολογίζει λανθασμένα το πεδίο καθώς δεν μεταβάλλεται το μήκος κύματος στην δεύτερη περιοχή.

Για να ξεπεραστεί αυτό το πρόβλημα θεωρούμε το πεδίο:

$$\vec{E} = \begin{cases} \hat{z} \cdot E_0 \exp(-jk_0 x) + \hat{z} \cdot r \cdot E_0 \exp(+jk_0 x), & x \leq 0 \\ \hat{z} \cdot t \cdot E_0 \exp(-jk_0 n x), & x \geq 0 \end{cases}$$

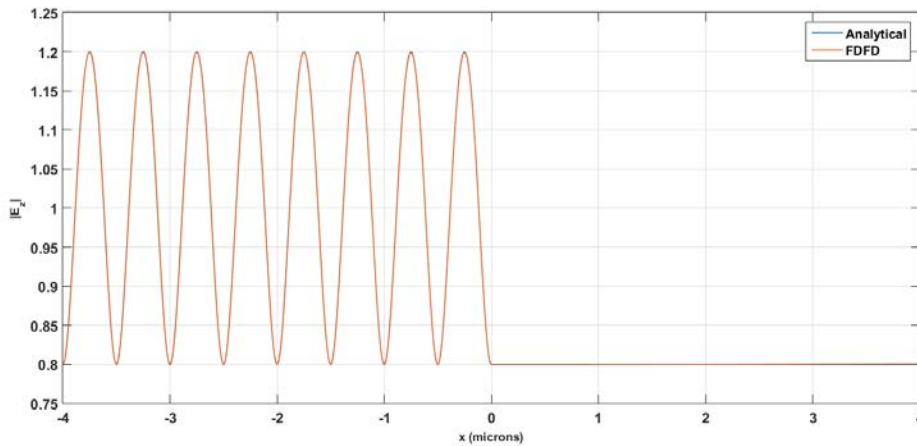
Όπου r, t οι συντελεστές Fresnel (ανάκλασης και διάθλασης).

Το οποίο εφαρμόζουμε στην \tilde{f}_{src} , τότε θα προκύψει το ολικό ηλεκτρικό πεδίο όπως θεωρητικά περιμένουμε (σχήμα 1.8):



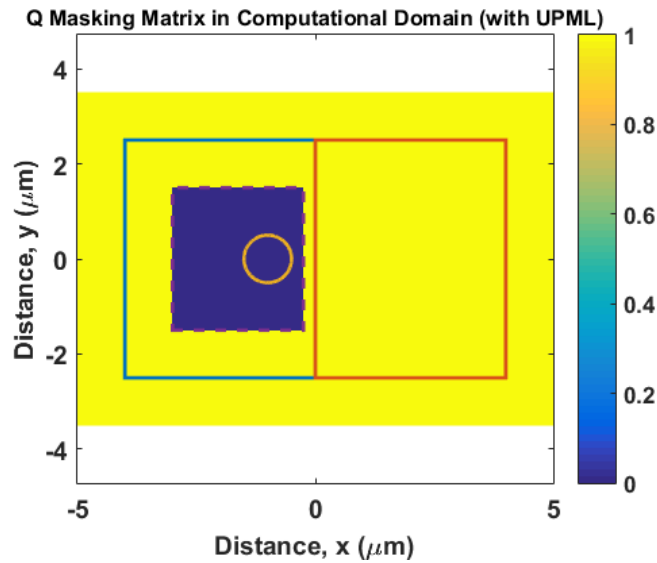
Σχήμα 1.8: Σχηματική Αναπαράσταση του Ολικού Ηλεκτρικού Πεδίου στις δυο περιοχές με την τροποποιημένη \tilde{f}_{src} , όπως είναι φανερό το μοντέλο βλέπει την δεύτερη περιοχή με $n=1,5$.

Επιπλέον διαπιστώνεται μικρό σφάλμα σε σύγκριση με την αναλυτική λύση (όπως προκύπτει και στο σχήμα 1.9):



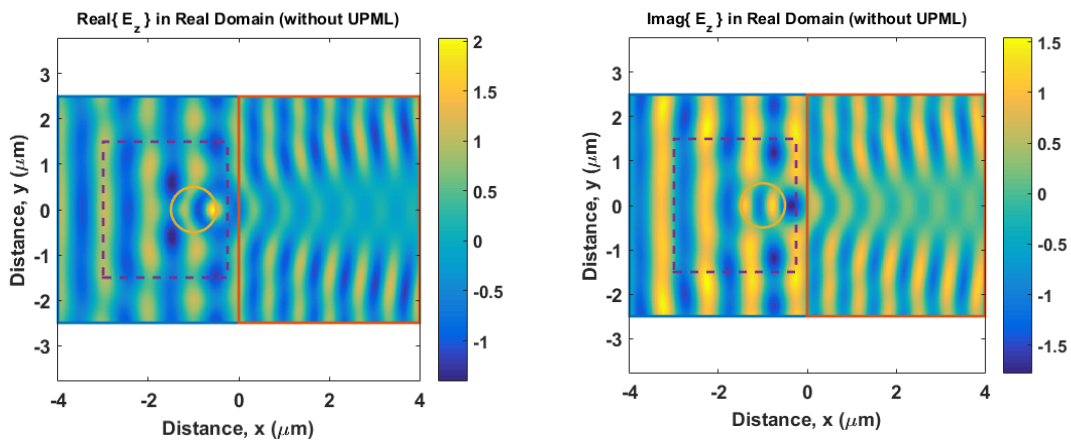
Σχήμα 1.9: Γραφική παράσταση του πλάτους του ηλεκτρικού πεδίου, για $\Delta x = \Delta y = \lambda_{min}/40$ της αναλυτικής και της πεδιακής κατανομής που προκύπτει από την FDTD.

Στο σημείο αυτό θεωρώντας το προαναφερθέν \tilde{f}_{src} είμαστε σε θέση να τοποθετήσουμε οποιονδήποτε σκεδαστή θέλουμε, παραδείγματος χάριν μπορούμε να τοποθετήσουμε έναν κύλινδρο ακτίνας $0.5\mu m$ και $n = 3$ στην περιοχή του αέρα (σχήμα 1.10):



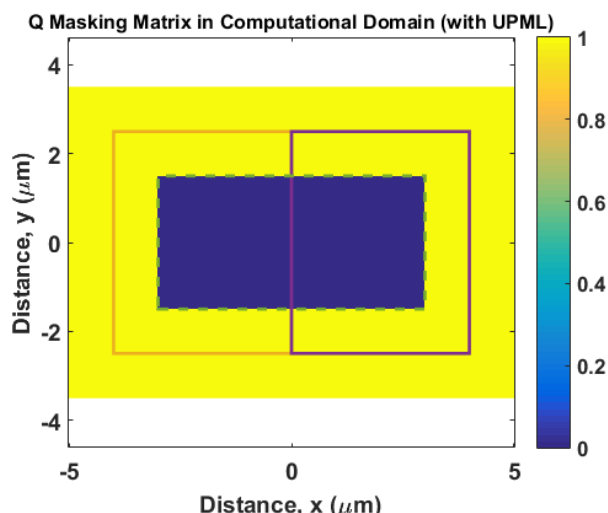
Σχήμα 1.10: Σχηματική Απεικόνιση του Κυλίνδρου εντός της περιοχής ολικού πεδίου.

Στην περίπτωση αυτή θα προκύψει το σωστό πεδίο όπως φαίνεται στο σχήμα 1.11 (αναλυτική λύση του προβλήματος και παρόμοιων προβλημάτων μπορεί να βρεθεί, ο αναγνώστης παραπέμπεται στην αντίστοιχη βιβλιογραφία [41-45]):



Σχήμα 1.11: Η Απεικόνιση του Ηλεκτρικού Πεδίου της Διάταξης των δύο Ημιχώρων και της τοποθέτησης του κυλίνδρου.

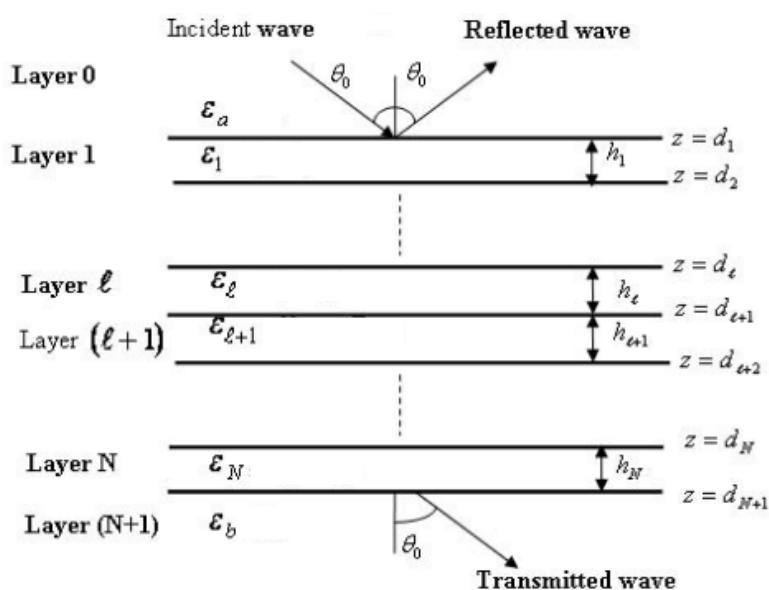
Αξίζει να τονίσουμε ότι σε περίπτωση που ορίσουμε το ολικό πεδίο συμπεριλαμβανομένου της δεύτερης περιοχής (σχήμα 1.12), δηλαδή έτσι ώστε μέρος της διαχωριστικής γραμμής να βρίσκεται στο ολικό πεδίο, τότε πάλι παρατηρούμε σωστά αποτελέσματα αλλά με περισσότερα λάθη από ότι απομονώνοντας το ολικό πεδίο στην μία περιοχή.



Σχήμα 1.12: Απεικόνιση του ολικού πεδίου (μπλε) όταν ορίζεται και στις δύο περιοχές.

Για να γενικεύσουμε την λύση θα πρέπει για κάθε περίπτωση να γνωρίζουμε την πεδιακή κατανομή που οφείλεται αρχικώς από τα πολλαπλά στρώματα (σχήμα 1.13).

Αυτό μπορούμε να το βρούμε αναλυτικά από τις συνοριακές συνθήκες σε κάθε διαχωριστική γραμμή. Παρόλα αυτά μπορούμε να λύσουμε το αντίστοιχο πρόβλημα γενικεύοντας για $n(x)$ εφαρμόζοντας το FDFD μοντέλο για τις αντίστοιχες περιοδικές διατάξεις και μετά να χρησιμοποιήσουμε το αποτέλεσμα στο \tilde{f}_{src} προσθέτοντας στο σύστημα τους σκεδαστές που θέλουμε να μελετήσουμε.



Σχήμα 1.13: Διάταξη πολλαπλών στρωμάτων [46].

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2^ο:

Η Εφαρμογή της ADI Μεθόδου στην επίλυση του FDFD Μοντέλου

Η εξελισσόμενη τεχνολογία της φωτονικής, συνεχίζει να εισάγει νέες δομές και διατάξεις, ώστε να εξυπηρετούνται πιο αποτελεσματικά οπτικά κυκλώματα. Η ανάπτυξη αριθμητικών μοντέλων είναι κρίσιμη από μεριάς κόστους αλλά και βελτιστοποίησης του σχεδιασμού αυτών των διατάξεων. Η ανάγκη για γρήγορη επίλυση αυτών των μοντέλων στο πεδίο της συχνότητας, αποτέλεσε το εφαλτήριο της παρούσας εργασίας, καθώς γίνεται η προσπάθεια της εφαρμογής ενός σχήματος ADI με απώτερο στόχο την γρήγορη επίλυση του FDFD μοντέλου.

Η βιβλιογραφία είναι περιορισμένη, πιο συγκεκριμένα υπάρχουν μόνο δύο δημοσιεύσεις του Hadley το 1994 και 1995 [21],[22] εφαρμογής της ADI σε ηλεκτρομαγνητικά προβλήματα (σκεδάσεως και κυματοδηγήσεως), ενώ δεν υπάρχει το απαιτούμενο μαθηματικό υπόβαθρο, το οποίο θα βελτιστοποιήσει και θα εξετάσει την γενικευμένη εφαρμοσιμότητα της μεθόδου σε ηλεκτρομαγνητικά προβλήματα στην FDFD [23].

Στο Κεφάλαιο 2 παρουσιάζονται συνοπτικά τα εισαγωγικά μαθηματικά που απαιτούνται και το βασικό σχήμα που χρησιμοποιείται στην ADI. Αρχικά βελτιστοποιούνται οι επιταχυντικές παράμετροι σε σύγκριση με εκείνες που προτάθηκαν από τον Hadley για μοντέλα με απλά absorbers, και έπειτα ελέγχεται η εφαρμογή της σε μοντέλα στα οποία έχουμε PMLs.

2.1 Η Μέθοδος ADI (Peaceman and Rachford)

Στην απλή περίπτωση απαιτείται η επίλυση του δισδιάστατου προβλήματος με εξίσωση $\nabla^2 U + k_0^2 \varepsilon(x, z)U = 0$, με $k_0 = 2\pi / \lambda_0$. Όπου το U είναι το κάθετο ηλεκτρικό πεδίο της διάταξης (TE πόλωση) ή το U είναι το κάθετο μαγνητικό πεδίο της διάταξης (TM πόλωση) [21].

Δεδομένου ότι κανονικοποιούμε τις συντεταγμένες του συστήματος όπως δείξαμε στο πρώτο Κεφάλαιο έχουμε:

$$\bar{x} = x \cdot k_0 = 2\pi(x / \lambda_0), \quad \bar{z} = z \cdot k_0 = 2\pi(z / \lambda_0) \quad (2.1.1)$$

Άρα προκύπτει:

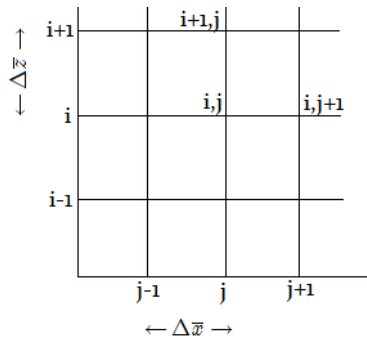
$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial x} &= \frac{\partial U}{\partial \bar{x}} k_0, & \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 U}{\partial \bar{x}^2} k_0^2 \\ \frac{\partial U}{\partial z} &= \frac{\partial U}{\partial \bar{z}} k_0, & \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} &= \frac{\partial^2 U}{\partial \bar{z}^2} k_0^2 \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Έτσι η εξίσωση απλοποιείται ως εξής:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial \bar{z}^2} + \varepsilon(\bar{x}, \bar{z})U = 0 \quad (2.1.3)$$

Όπως έχουμε ήδη δει στο πρώτο Κεφάλαιο μπορούμε να χρησιμοποιούμε την κεντρική διαφόριση δευτέρου βαθμού, η οποία θα δώσει (με την βοήθεια του σχήματος 2.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U}{\partial \bar{x}^2} &= \frac{U(\bar{x} + \Delta \bar{x}, \bar{z}) - 2U(\bar{x}, \bar{z}) + U(\bar{x} - \Delta \bar{x}, \bar{z})}{\Delta \bar{x}^2} \\ \frac{\partial^2 U}{\partial \bar{z}^2} &= \frac{U(\bar{x}, \bar{z} + \Delta \bar{z}) - 2U(\bar{x}, \bar{z}) + U(\bar{x}, \bar{z} - \Delta \bar{z})}{\Delta \bar{z}^2} \end{aligned} \quad (2.1.4)$$



Σχήμα 2.1: Ορθογώνιο πλέγμα επιπέδου $x - z$ με κανονικοποιημένες συντεταγμένες \bar{x}, \bar{z} και η διακριτοποίησή του σε σημεία (i, j) .

Έτσι μπορούμε τον πίνακα \mathbf{A} , του γενικού γραμμικού συστήματος που προκύπτει $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0}$, να τον σπάσουμε σε αθροίσματα. Δηλαδή:

$$\begin{aligned}\mathbf{H} \cdot \mathbf{U}\Big|_{i,j} &= \frac{1}{\Delta \bar{x}^2} (U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}), \quad (\text{horizontal diff.}) \\ \mathbf{V} \cdot \mathbf{U}\Big|_{i,j} &= \frac{1}{\Delta \bar{z}^2} (U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}), \quad (\text{vertical diff.})\end{aligned}\tag{2.1.5}$$

Έτσι έχουμε την εξίσωση Helmholtz στην μορφή:

$$(\mathbf{H} + \mathbf{V} + \varepsilon)\mathbf{U} = \mathbf{0}\tag{2.1.6}$$

Επιδιώκεται η επίλυση της (2.1.6) με το σχήμα της ADI που προτάθηκε από τους Peaceman και Rachford το 1955 [37]:

$$\begin{aligned}(\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{V} + \varepsilon / 2)\mathbf{U}^{(n+1/2)} &= (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H} - \varepsilon / 2)\mathbf{U}^{(n)} \\ (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H} + \varepsilon / 2)\mathbf{U}^{(n+1)} &= (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{V} - \varepsilon / 2)\mathbf{U}^{(n+1/2)}\end{aligned}\tag{2.1.7}$$

Παρατηρείται ότι η πρώτη εξίσωση της (2.1.7) λύνει την εξίσωση ως προς την κάθετη κατεύθυνση (κατά στήλη), ενώ η δεύτερη ως προς την οριζόντια κατεύθυνση (κατά γραμμή). Το πρόβλημα, όπως εύκολα φαίνεται, ανάγεται στην βέλτιστη επιλογή της επιταχυντικής παραμέτρου ω_n , έτσι ώστε αφενός η μέθοδος να συγκλίνει, αφετέρου να συγκλίνει γρήγορα.

Επιδιώκοντας δε να διατηρηθούν οι πίνακες \mathbf{H}, \mathbf{V} τριδιαγώνιοι (ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί κάποιος εύχρηστος τρόπος, όπως ο αλγόριθμος Thomas, για τις ιδιοτιμές [28]) και ενσωματώνοντας το δεξιό μέρος της γραμμικής εξίσωσης προκύπτει:

$$\begin{aligned}(\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{V}_1)\mathbf{v}^{(n+1/2)} &= \mathbf{P}_v (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{b}_v \\ (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)\mathbf{u}^{(n+1)} &= \mathbf{P}_u (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{V}_1)\mathbf{v}^{(n+1/2)} + \mathbf{b}_u\end{aligned}\tag{2.1.8}$$

Όπου $\mathbf{V}_1 = \mathbf{V} + \varepsilon / 2$ και $\mathbf{H}_1 = \mathbf{H} + \varepsilon / 2$, \mathbf{v} το διάνυσμα του πεδίου αριθμημένο καθέτως (κατά στήλη), \mathbf{u} το διάνυσμα του πεδίου αριθμημένο οριζοντίως (κατά γραμμή). Ενώ τα $\mathbf{b}_v, \mathbf{b}_u$ είναι το δεξιό μέρος του γραμμικού συστήματος $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ αριθμημένο κατά στήλη και κατά γραμμή αντίστοιχα.

Οι πίνακες $\mathbf{P}_v, \mathbf{P}_u$ είναι οι πίνακες μετάθεσης (permutation matrices), οι οποίοι αντιστοιχούν τους πίνακες που έχουν μεταξύ τους διαφορετική αριθμηση.

Παρατηρούμε από την (2.1.8) ότι η ενδιαμέση τιμή $\mathbf{v}^{(n+1/2)}$ δεν απαιτεί αποθήκευση, απαιτείται τοπικά για την μέθοδο. Εν γένει όπως φαίνεται η υλοποίηση αυτής της επαναληπτικής μεθόδου είναι εύκολη, όμως η δυσκολία έγκειται στην επιλογή του κατάλληλου ω_n και αυτό διότι όπως θα δούμε παρακάτω, στην γενική περίπτωση οι πίνακες δεν είναι θετικά ή αρνητικά ορισμένοι. Επιπλέον η ADI μας δίνει την δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε, αντί μίας επιταχυντικής παραμέτρου, ένα διάνυσμα από διαφορετικές τιμές. Σε περιπτώσεις μη συμμετρικών και ημι-θετικώς ορισμένων πινάκων, έχουν βρεθεί τα διανύσματα των βέλτιστων επιταχυντικών παραμέτρων ω_n [26-27]. Στις περισσότερες φορές όμως είναι υπολογιστικά πιο βαρύ και πολύπλοκο ο υπολογισμός των ω_n παρά η απευθείας επίλυση του γραμμικού προβλήματος.

2.2 Η Σύγκλιση της ADI – Το minmax Πρόβλημα

Από την (2.1.8) προκύπτει μετά από στοιχειώδεις πράξεις:

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{T}_{\omega_n} \mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{g}_{\omega_n} \quad (2.2.1)$$

Ενώ:

$$\mathbf{T}_{\omega_n} = (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1} \mathbf{P}_u (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{V}_1) (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{V}_1)^{-1} \mathbf{P}_v (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}_1) \quad (2.2.2)$$

$$\mathbf{g}_{\omega_n} = (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1} \mathbf{P}_u (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{V}_1) (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{V}_1)^{-1} \mathbf{b}_v + \mathbf{b}_u \quad (2.2.3)$$

Ορίζουμε:

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\omega_n} = (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1) \mathbf{T}_{\omega_n} (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1} \quad (2.2.4)$$

Δεδομένου ότι οι πίνακες $\mathbf{T}_{\omega_n}, \tilde{\mathbf{T}}_{\omega_n}$ συνδέονται μεταξύ τους μέσω ενός παρόμοιου μετασχηματισμού έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές. Έτσι προκύπτει:

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\omega_n} = \mathbf{P}_u (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{V}_1) (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{V}_1)^{-1} \mathbf{P}_v (\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}_1) (\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1} \quad (2.2.5)$$

Έτσι μπορούμε να ορίσουμε το σφάλμα της ADI ως εξής:

$$\mathbf{e}^{(n)} = \mathbf{u}^{(n)} - \mathbf{u} \quad (2.2.6)$$

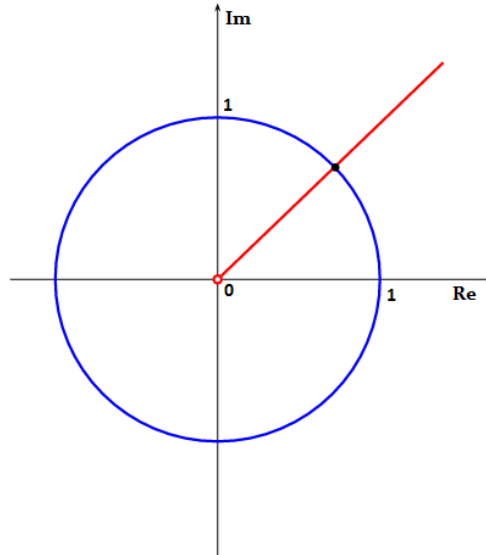
Από την (2.2.6) άμεσα προκύπτει ότι:

$$\mathbf{e}^{(n+1)} = \mathbf{T}_{\omega_n} \mathbf{e}^{(n)} \quad (2.2.7)$$

Δεδομένου δε ότι θα πρέπει να έχουμε σύγκλιση, το σφάλμα θα πρέπει να προσεγγίζει το μηδέν καθώς αυξάνονται οι επαναλήψεις. Έτσι:

$$\rho(\mathbf{T}_{\omega_n}) = \rho(\tilde{\mathbf{T}}_{\omega_n}) \leq \|\tilde{\mathbf{T}}_{\omega_n}\| \leq \|(\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{V}_1)(\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{V}_1)^{-1}\| \cdot \|(\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)(\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1}\| \quad (2.2.8)$$

Συνεπώς θα πρέπει οι ιδιοτιμές των $(\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{V}_1)(\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{V}_1)^{-1}$ και των $(\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)(\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1}$ να βρίσκονται εντός του μοναδιαίου κύκλου στον μιγαδικό χώρο \mathbb{C} (σχήμα 2.2).



Σχήμα 2.2: Απεικόνιση του μοναδιαίου κύκλου στο μιγαδικό επίπεδο

Αν υποθέσουμε ότι λ είναι μία ιδιοτιμή του \mathbf{H}_1 τότε γνωρίζουμε από την γραμμική άλγεβρα ότι: $\mathbf{H}_1 \tilde{v} = \lambda \tilde{v}$, όπου \tilde{v} είναι το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα. Τότε:

$$(\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)(\omega \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1} \tilde{v} = \mu \tilde{v} \quad \Rightarrow \quad (\omega \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1} \tilde{v} = \mu (\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)^{-1} \tilde{v}$$

$$\text{Όμως: } (\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_1) \tilde{v} = (\omega - \lambda) \tilde{v} \quad \Rightarrow \quad \tilde{v} = (\omega - \lambda)(\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)^{-1} \tilde{v}$$

Έτσι προκύπτει:

$$(\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)^{-1} \tilde{v} = (\omega - \lambda)^{-1} \tilde{v}$$

Ενώ παρομοίως:

$$(\omega \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1} \tilde{v} = (\omega + \lambda)^{-1} \tilde{v}$$

Αντικαθιστώντας προκύπτει ότι η ιδιοτιμή του $(\omega \mathbf{I} - \mathbf{H}_1)(\omega \mathbf{I} + \mathbf{H}_1)^{-1}$ είναι:

$$\mu = \frac{\omega - \lambda}{\omega + \lambda} \quad (2.2.9)$$

Δεδομένου ότι θεωρούμε ομοιόμορφο πλέγμα $\Delta x = \Delta z$ τότε οι πίνακες \mathbf{H}_1 και \mathbf{V}_1 έχουν τα ίδια μέγιστα και ελάχιστα στις ιδιοτιμές τους, ενώ σε συμμετρικούς χώρους έχουν ακριβώς τις ίδιες ιδιοτιμές [23] (βλ. Παράρτημα Β). Τότε το πρόβλημα σύγκλισης ανάγεται σε ένα πρόβλημα minmax:

$$\min_{\omega} \left\{ \max_k \left(\left| \frac{\omega - \lambda_k}{\omega + \lambda_k} \right| \right) \right\} < 1 \quad (2.2.10)$$

Όπου λ_k οι ιδιοτιμές του \mathbf{H}_1 ή του \mathbf{V}_1 .

Στις περισσότερες μαθηματικές εργασίες μελετούνται προβλήματα βελτιστοποίησης των επιταχυντικών παραμέτρων για τριδιαγωνίους πίνακες στους οποίους τουλάχιστον το πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών τους διατηρούνται θετικοί ή αρνητικοί (εν γένει ομόσημοι). Για την λεπτομερή μαθηματική ανάλυση παραπέμπουμε στην βιβλιογραφία [23-27],[29-37].

2.3 Η Χρήση μιας Επιταχυντικής Παραμέτρου ω_1

Χρησιμοποιώντας μία μόνο επιταχυντική παράμετρο και υποθέτοντας ότι αυτή είναι φανταστική, δηλαδή: $\omega_1 = j\omega_i$ είναι προφανές ότι το άνω φράγμα του $\rho(\mathbf{T}_{\omega_1})$ θα τίθεται αυτομάτως μικρότερο του ενός, όπως υποδεικνύεται από την (2.2.10) και τα αποτελέσματα του παραρτήματος Β (Β.6), δεδομένου ότι επιλέγεται ω_i ομόσημο του φανταστικού μέρους της διηλεκτρικής επιτρεπτότητας ϵ_i του υπό εξέταση χώρου. Αυτό φυσικά σημαίνει ότι στο μοντέλο μας αφενός έχουμε κάποιο στόχο στον οποίο υπάρχουν απώλειες (ή κέρδος) και αφετέρου το φανταστικό μέρος των ιδιοτιμών των τριδιαγωνίων πινάκων παραμένει ομόσημο (κάτι που πρακτικά μας

εμποδίζει να γενικεύσουμε την μέθοδο καθώς οι ιδιοτιμές επηρεάζονται κάθε φορά από τις υπό εξέταση διατάξεις). Γενικά αυτό που παρατηρήθηκε είναι ότι δεν αποτελεί η επιλογή $\omega_1 = j\omega_{i_1}$ την καλύτερη λύση καθώς για τις βέλτιστες λύσεις δηλαδή για τα βέλτιστα ω_1 το $\rho(\mathbf{T}_{\omega_n})$ ναί μεν είναι μικρότερο του 1, όταν φυσικά πληρούνται οι απαραίτητες συνθήκες, αλλά βρίσκεται κοντά του, συνεπώς απαιτούνται πολλές επαναλήψεις για να βρεθεί αξιόπιστο αποτέλεσμα.

Η αδυναμία γενίκευσης κάποιας μεθοδολογίας για $\omega_1 = j\omega_{i_1}$ οδήγησε στην εξέταση της περίπτωσης $\omega_1 = \omega_{r_1}$.

Ας εξετάσουμε, τώρα την περίπτωση στην οποία επιλέγουμε $\omega_1 = \omega_{r_1}$. Δεδομένου ότι απαιτείται η σύγκλιση της μεθόδου θα πρέπει να διασφαλίζουμε ότι όλες οι ιδιοτιμές των τριδιαγωνίων πινάκων βρίσκονται στον αριστερό ημιεπίπεδο του μιγαδικού χώρου \mathbb{C} . Έχουμε $\omega = \omega_r < 0$ ώστε:

$$\frac{(\omega_r - \lambda_r)^2 + \lambda_i^2}{(\omega_r + \lambda_r)^2 + \lambda_i^2} < 1$$

Συνεπώς με μία πρώτη εκτίμηση από (B.2) θα έχουμε από την συνθήκη $\lambda_r < 0$:

$$\sqrt{\varepsilon_r} \bar{\Delta} < \sqrt{2} \approx 1.414 \quad (2.3.1)$$

Όπου $\bar{\Delta}$ είναι είτε το $\Delta\bar{x}$, είτε το $\Delta\bar{z}$.

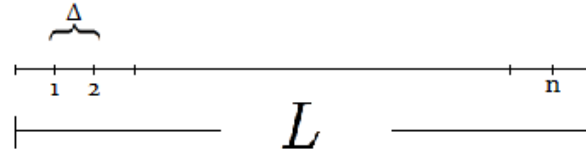
Στην πραγματικότητα απαιτούμε αριετά σημεία ανά μήκος κύματος. Ο Hadley προτείνει [21]:

$$\sqrt{\varepsilon_r} \bar{\Delta} < 0.4 \quad (2.3.2)$$

Ενώ το $\bar{\Delta}$ είναι κανονικοποιημένο συνεπώς έχουμε:

$$\frac{\lambda_0}{\Delta} > \frac{2\pi\sqrt{\varepsilon_r}}{0.4} \quad (2.3.3)$$

Αναλυτικότερα από την (B.6) και δεδομένου ότι L είναι το μήκος είτε στην κατεύθυνση x είτε στην z του μοντέλου και n τα αντίστοιχα σημεία.



Σχήμα 2.3: Σχηματική Απεικόνιση της διακριτοποίησης σε μία από τις δύο διαστάσεις.

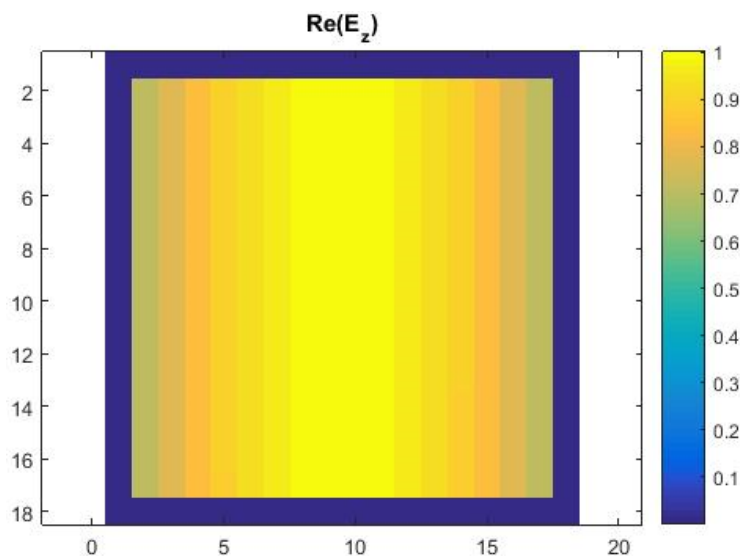
Τότε από την συνθήκη $\lambda_r < 0$ προκύπτει:

$$\frac{\lambda_0}{L} > \left(\frac{\pi}{n+1} \right) \frac{1}{\sin \left(\frac{\pi}{2(n+1)} \right)} \sqrt{\frac{\epsilon_r}{2}} \quad (2.3.4)$$

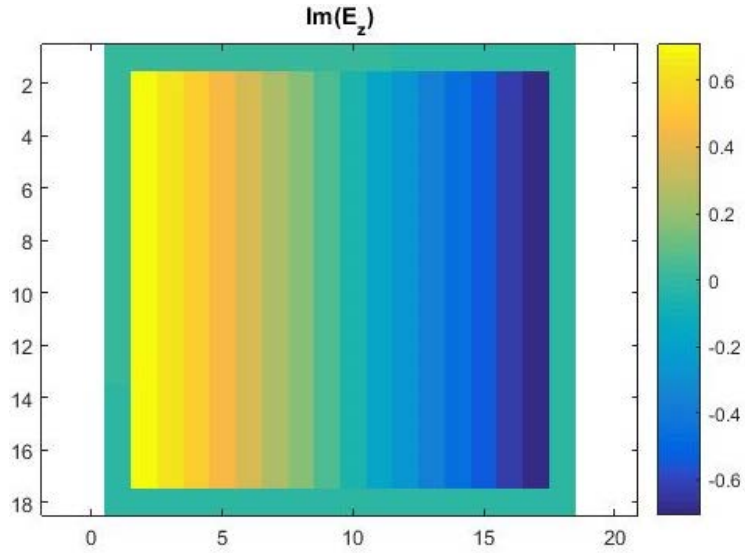
Συνεπώς για σχετικά μεγάλο n έχουμε τον περιορισμό:

$$L < \left(\frac{\lambda_0}{2} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_r/2}} \right) \quad (2.3.5)$$

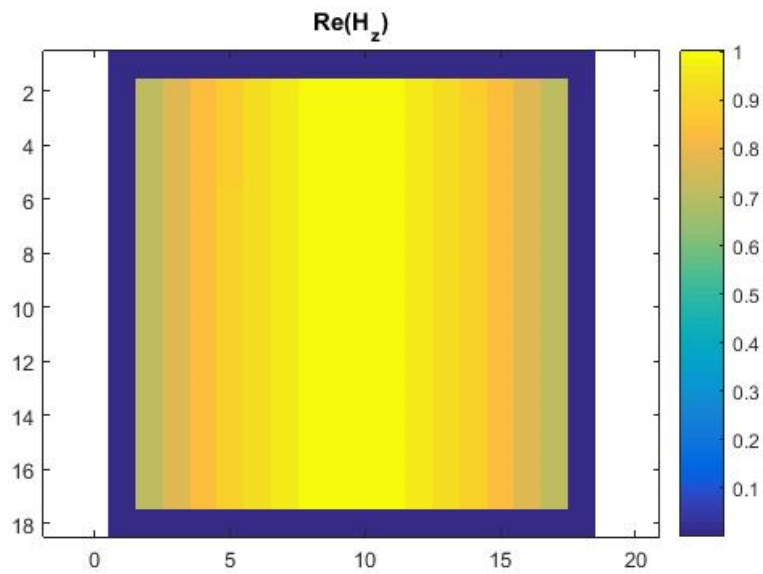
Σαφέστατα φαίνεται ο περιορισμός του μοντέλου για τον οποίο ενδείκνυται η επιλογή επιταχυντικής παραμέτρου $\omega = \omega_r$. Είναι προφανές επίσης ότι με τον περιορισμό που υποδεικνύει η (2.3.5) δεν μπορούν να μελετηθούν πρακτικά προβλήματα για μικρά L . Το βέλτιστο ω για αυτούς τους πίνακες βρίσκεται ευθέως μιας και οι πίνακες που προκύπτουν είναι μικροί (όπως προκύπτει στα σχήματα 2.8 και 2.9).



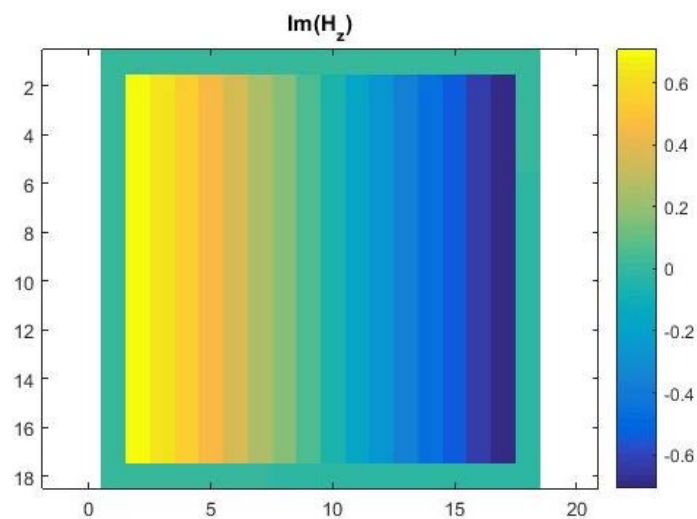
Σχήμα 2.4: Η απεικόνιση του πραγματικού μέρους του TE πεδίου για $\lambda_0 = 1\mu m$ $\epsilon_r = 3, \mu_r = 1$
 και $L_x = L_y = 0.1876\mu m$



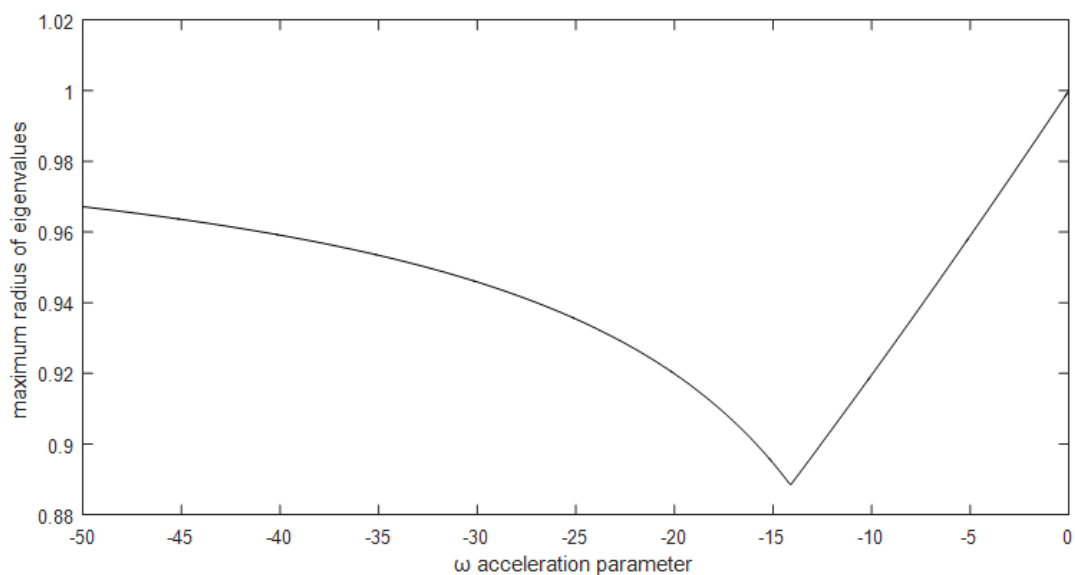
Σχήμα 2.5: Η απεικόνιση του φανταστικού μέρους του TE πεδίου για $\lambda_0 = 1\mu m$ $\epsilon_r = 3, \mu_r = 1$
 και $L_x = L_y = 0.1876\mu m$



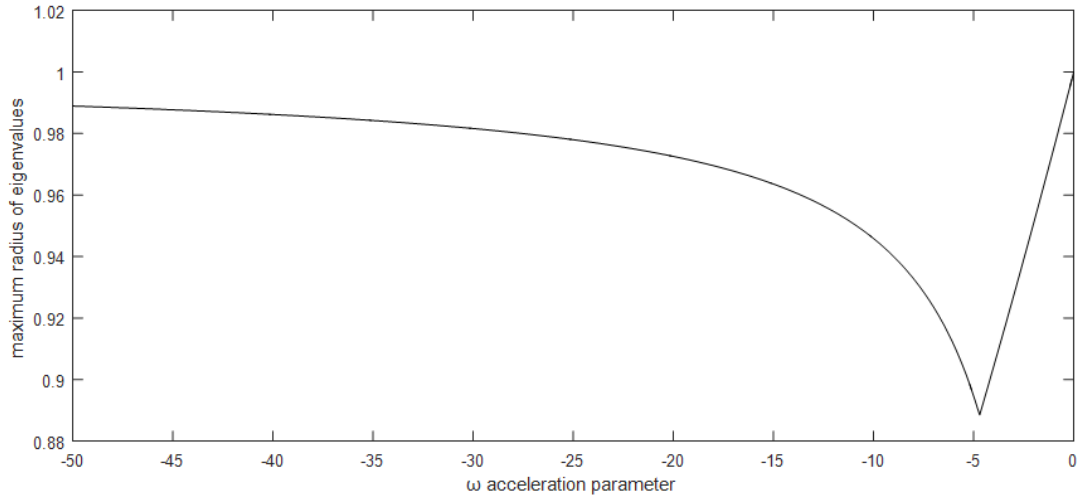
Σχήμα 2.6: Η απεικόνιση του πραγματικού μέρους του TM πεδίου για $\lambda_0 = 1\mu m$ $\epsilon_r = 3, \mu_r = 1$
 και $L_x = L_y = 0.1876\mu m$



Σχήμα 2.7: Η απεικόνιση του φανταστικού μέρους του ΤΜ πεδίου για $\lambda_0 = 1\mu m$, $\epsilon_r = 3$, $\mu_r = 1$ και $L_x = L_y = 0.1876\mu m$



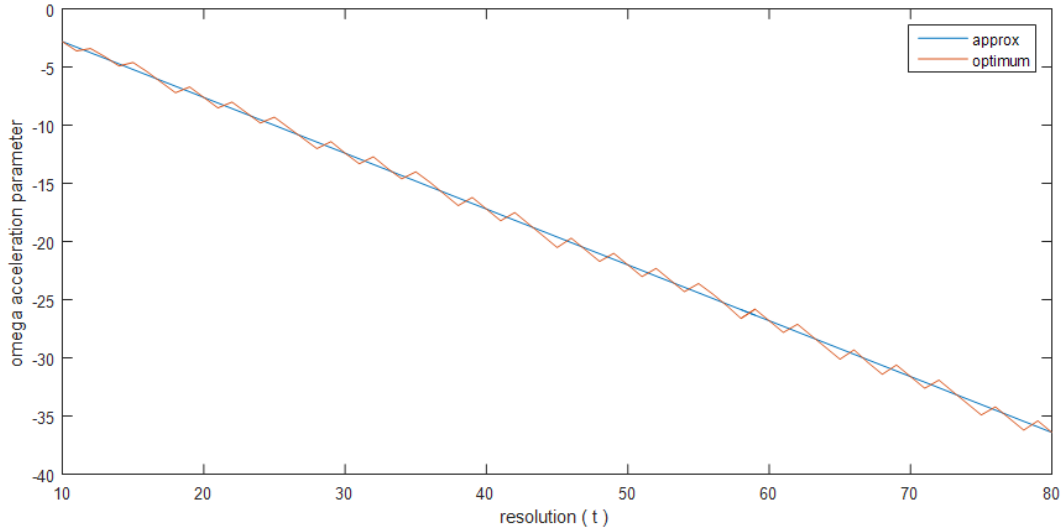
Σχήμα 2.8: Γραφική παράσταση μέγιστου μέτρου ιδιοτιμής, συναρτήσει του ω , για επίλυση ΤΕ ρυθμού $\lambda_0 = 1\mu m$ ενώ $\epsilon_r = 3$, $\mu_r = 1$ και $L_x = L_y = 0.1876\mu m$, με $\omega_{opt} = -14.1$ και $eigV_{opt} = 0.8885$.



Σχήμα 2.9: Γραφική παράσταση μέγιστου μέτρου ιδιοτιμής, συναρτήσει του ω , για επίλυση TM ρυθμού $\lambda_0 = 1\mu m$ ενώ $\epsilon_r = 3, \mu_r = 1$ και $L_x = L_y = 0.1876\mu m$, με $\omega_{opt} = -4.7$ και $eigV_{opt} = 0.8885$.

Αξίζει να σημειωθεί, χωρίς βέβαια να έχει ιδιαίτερη πρακτική σημασία, ότι για τους πίνακες που επιδέχονται βελτιστοποίηση μέσω του $\omega_1 = \omega_{r_1}$ προκύπτει προσεγγιστικά ότι $\omega_{TE_{opt}} = \epsilon_r \cdot \omega_{TM_{opt}}$ (κάτι που φαίνεται και στα σχήματα 2.8 και 2.9)

Μεταβάλλοντας δε το resolution του μοντέλου, δηλαδή τον λόγο $t_{x|y} = \min(\lambda_i) / \Delta_{x|y}$, μπορούμε να βρούμε γραμμική προσέγγιση του ω_{opt} μέσω κάποιου fitting (όπως την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων), χρησιμοποιώντας λιγότες ω_{opt} για πολύ μικρά resolution, που είναι υπολογιστικά γρήγορο να βρεθούν (σχήμα 2.10). Αυτή η προσέγγιση ενδείκνυται σε περιπτώσεις μεγάλου resolution, στις οποίες οι πίνακες μεγαλώνουν αισθητά.



Σχήμα 2.10: Αναπαράσταση της γραμμικής προσέγγισης της επιταχυντικής παραμέτρου για μοντέλο στα $\lambda_0 = 1\mu m$ με $\varepsilon_r = \mu_r = 1$ και $L_x = L_y = 0.3\mu m$ καθώς αυξάνεται το resolution.

2.4 Η Χρήση Διανύσματος Επιταχυντικών Παραμέτρων $\bar{\omega}_n$

Λόγω του περιορισμού της (2.3.5) ψάχνουμε το κατάλληλο διάνυσμα $\bar{\omega}_n$ το οποίο θα δώσει μέγιστη ιδιοτιμή μικρότερη του 1. Ο Hadley πρότεινε, βασιζόμενος στην εμπειρία, το διάνυσμα [21]:

$$\bar{\omega}_2 = [-200, 0.05b - j1.1b] \quad (2.4.1)$$

Όπου $b = \text{Re}(\varepsilon/2)$, με ε κάποια αντιπροσωπευτική τιμή της διηλεκτρικής σταθεράς της υπό εξέταση διάταξης.

Εφαρμόζοντας την (2.4.1) σε αρκετά προβλήματα παρατηρήθηκε ότι **δεν** προκύπτει $\rho(\mathbf{T}_{\bar{\omega}}) < 1$:

- Όταν κάνουμε χρήση U-PML στα άκρα του πλέγματος.

Συμπεράναμε λοιπόν ότι είναι δυνατόν να εφαρμοστούν μόνο σε μοντέλα που χρησιμοποιούν απλά absorbers ή SC-PML. Ένα επιπλέον μειονέκτημα του επιταχυντικού διανύσματος του Hadley είναι ότι, όταν εφαρμόζεται, η τιμή του $\rho(\mathbf{T}_{\bar{\omega}})$ παρότι μικρότερη του 1, είναι αρκετά κοντά του, της τάξεως του 0.9^+ , με αποτέλεσμα να έχει αργή σύγκλιση.

Παρατηρήσαμε, ακόμα, ότι ο Hadley χρησιμοποιεί το ίδιο επιταχυντικό διάνυσμα παραμέτρων για τον TE ρυθμό αλλά και για τον TM ρυθμό. Συνεπώς προέκυψε το εξής πρόβλημα: Η εύρεση μιας μεθοδολογίας που θα εύρισκε καλύτερες επιταχυντικές παραμέτρους για μοντέλα με απλά absorbers και SC-PML, και η εξέταση της εφαρμογής σε μοντέλα με U-PML.

Στην παρούσα εργασία κάναμε χρήση της Simulated Annealing μεθόδου τριών μεταβλητών $(\omega_1, \omega_{r_2}, \omega_{i_2})$ για να βρούμε το κατάλληλο επιταχυντικό διάνυσμα της μορφής: $\bar{\omega}_2 = [\omega_1, \omega_{r_2} + j\omega_{i_2}]$ το οποίο θα ελαχιστοποιήσει την συνάρτηση $\rho(\mathbf{T}_{\bar{\omega}})$. Για την εύρεση των μέγιστων ιδιοτιμών χρησιμοποιούμε τους τριδιαγώνιους πίνακες $\mathbf{H}_1, \mathbf{V}_1$, με την βοήθεια των πινάκων $\mathbf{P}_u, \mathbf{P}_v$ έτσι αφενός μεν οι ιδιοτιμές των τριδιαγώνιων πινάκων στρίβουν εκείνες του πραγματικού προβλήματος στο μιγαδικό επίπεδο \mathbb{C} αλλά το μέτρο των ιδιοτιμών δεν αλλάζει, αφετέρου δε οι τριδιαγώνιοι πίνακες είναι πιο διαχειρίσιμοι υπολογιστικά.

Η συνάρτηση μεγίστου ιδιοτιμής μπορεί να βρεθεί αναλυτικά για το απλό μοντέλο ενός ομοιογενούς χώρου (βλ. Παράρτημα Β και εξίσωση (2.2.10)), παρόλα αυτά η γενίκευση για πιο περίπλοκες διατάξεις απαιτεί την χρήση των πινάκων $\mathbf{H}_1, \mathbf{V}_1$ που προκύπτουν κάθε φορά.

2.4.1 Ο Αλγόριθμος της Simulated Annealing Μεθόδου

Ο αλγόριθμος SA είναι ουσιαστικά μία επαναληπτική τυχαία διαδικασία αναζήτησης, η οποία προσαρμόζει τις κινήσεις της αναζήτησής της στις διευθύνσεις των συντεταγμένων της. Χρησιμοποιεί πιθανοτικά κριτήρια προκειμένου να μην εγκλωβίζεται σε τοπικά ελάχιστα. Η εφαρμογή της μεθόδου δίνει καλά αποτελέσματα σε πληθώρα εφαρμογών, ενώ το κόστος υπολογισμού μπορεί να μειωθεί αισθητά με την κατάλληλη επιλογή του αρχικού σημείου αναζήτησης.

Παρότι αρχικά ο αλγόριθμος εφαρμοζόταν σε διακριτές συναρτήσεις [48-50], μπορεί να εφαρμοστεί και για συνεχείς [47].

Ας υποθέσουμε \mathbf{x} είναι ένα διάνυσμα στο \mathbb{R}^n και (x_1, x_2, \dots, x_n) είναι οι συνιστώσες του. Ενώ έχουμε $f(\mathbf{x})$ την συνάρτηση, για την οποία θέλουμε την θέση του ολικού ελαχίστου. Φράζουμε τις συνιστώσες του \mathbf{x} , $a_1 < x_1 < b_1, \dots, a_n < x_n < b_n$.

Η μέθοδος αρχίζει δοθέντος του σημείου εκκίνησης \mathbf{x}_0 και παράγει μία σειρά σημείων $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$ η οποία συγκλίνει στο ολικό ελάχιστο της συνάρτησης κόστους. Το υποψήφιο νέο σημείο είναι κοντά στο παρόν \mathbf{x}_i εφαρμόζοντας τυχαίες κινήσεις γύρω του. Οι νέες τιμές της συντεταγμένης διανέμονται ομοιόμορφα σε κεντραρισμένα διαστήματα γύρω από το \mathbf{x}_i . Το μισό μέγεθος αυτών των διαστημάτων καταγράφεται στο βηματικό διάνυσμα \mathbf{v} . Αν ένα σημείο πέσει εκτός του πεδίου ορισμού της f , τότε ένα νέο σημείο θα επιλεγεί τυχαία έως ότου ανήκει στο πεδίο ορισμού. Ένα υποψήφιο σημείο \mathbf{x}' γίνεται αποδεκτό ή απορριπτό βάσει του κριτηρίου Metropolis [51]:

- Αν $\Delta f \leq 0$ τότε αποδέχεται το νέο σημείο: $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}'$, αλλιώς αποδέχεται το νέο σημείο με πιθανότητα: $p(\Delta f) = \exp(-\Delta f / T)$, όπου $\Delta f = f(\mathbf{x}') - f(\mathbf{x}_i)$ και T είναι μία παράμετρος που ονομάζεται θερμοκρασία.

Για ένα δεδομένο T η σειρά των σημείων $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$ δεν είναι φθίνουσα, εκτός από την περίπτωση $T = 0$.

Για μεγάλες τιμές του T συγκριτικά με την μέση τιμή του $|f(\mathbf{x}_h) - f(\mathbf{x}_k)|$ (\mathbf{x}_h και \mathbf{x}_k είναι σημεία, τυχαία επιλεγμένα, εντός του πεδίου ορισμού) σχεδόν όλα τα νέα σημεία γίνονται δεκτά και η σειρά των σημείων είναι μία τυχαία δειγματοληψία του f .

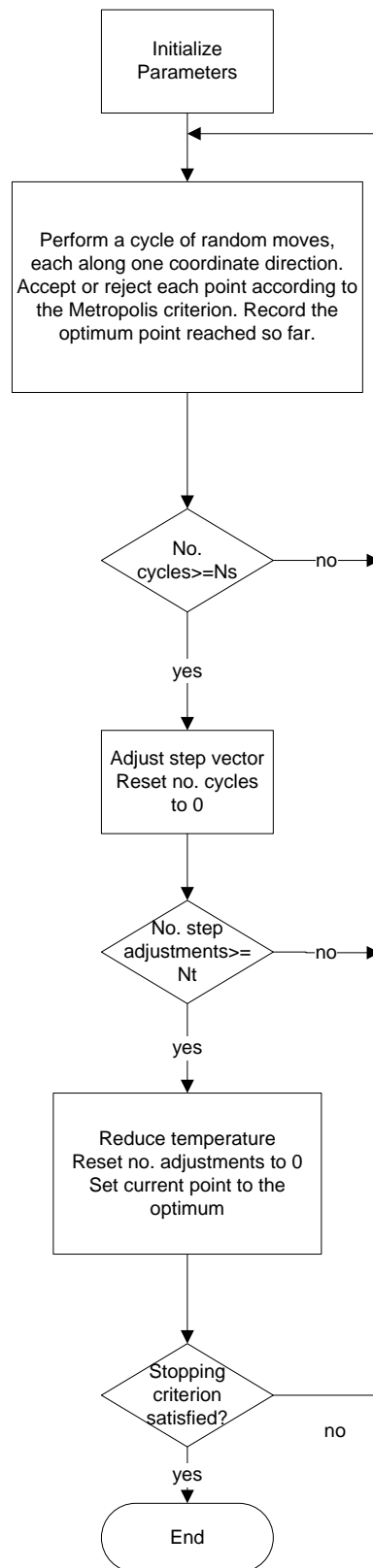
Ο SA αλγόριθμος αρχίζει από μία μεγάλη θερμοκρασία T_0 η οποία δίνεται από τον χρήστη. Μία σειρά σημείων παράγεται μέχρις ότου το σύστημα έρθει σε ισορροπία, για αυτή τη σειρά σημείων \mathbf{x}_i η μέση τιμή του f σταθεροποιείται καθώς αυξάνονται τα i σημεία. Σε αυτή την φάση του αλγορίθμου το βηματικό διάνυσμα \mathbf{v}_m προσαρμόζεται περιοδικά ώστε να ακολουθεί καλύτερα την συμπεριφορά της συνάρτησης. Το καλύτερο σημείο που βρίσκεται καταγράφεται ως \mathbf{x}_{opt} .

Αφού φτάσουμε σε αυτήν την θερμική ισορροπία, η θερμοκρασία T μειώνεται και αρχίζουν από την αρχή μία σειρά κινήσεων, όμως τώρα γύρω από το \mathbf{x}_{opt} , μέχρι να ξαναφτάσει το σύστημα σε θερμική ισορροπία.

Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να φτάσουμε σε αρκετά χαμηλή θερμοκρασία.

Ο SA αλγόριθμος είναι ανάλογος με την φυσική διαδικασία στην οποία ένα υλικό αλλάζει την κατάστασή του καθώς ελαχιστοποιεί την ενέργειά του [48,50].

Simulated Annealing Algorithm



Σχήμα 2.11: Flowchart του SA αλγόριθμου

Step 0 (Initialization)

Choose:

A starting point \mathbf{x}_0

A starting step vector \mathbf{v}_0

A starting temperature T_0

A terminating criterion ε and a number of successive temperature reductions to test for termination N_ε .

A test for step variation N_S and a varying criterion c .

A test for temperature reduction N_T and a reduction coefficient r_T

Set i, j, m, k to 0. i is the index denoting successive points, j denotes successive cycles along every direction, m describes successive step adjustments and k covers successive temperature reductions.

Set h to 1. h is the index denoting the direction along which the trial point is generated, starting from the last accepted point

Compute: $f_0 = f(\mathbf{x}_0)$

Set: $\mathbf{x}_{\text{opt}} = \mathbf{x}_0, \quad f_{\text{opt}} = f_0$

Set: $n_u = 0, \quad u = 1, \dots, n$

Set: $f_u^* = f_0, \quad u = 0, -1, \dots, -N_\varepsilon + 1$

Step 1

Starting from the point \mathbf{x}_i , generate a random point \mathbf{x}' along the direction h :

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x}_i + ru_{m_h} \mathbf{e}_h$$

Where r is a random number generated in the range $[-1, 1]$ by a pseudorandom number generator; \mathbf{e}_h is the vector of the h -th coordinate direction; and u_{m_h} is the component of the step vector \mathbf{v}_m along the same direction.

Step 2

If the h -th coordinate of \mathbf{x}' lies outside the definition domain of f , that is, if $x'_h < a_h$ or $x'_h > b_h$, then return to *step 1*

Step 3

Compute $f' = f(\mathbf{x}')$

If $f \leq f_i$ then accept the new point:

Set $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}'$

Set $f_{i+1} = f'$

Add 1 to i

Add 1 to n_h

If $f' < f_{\text{opt}}$ then set:

$\mathbf{x}_{\text{opt}} = \mathbf{x}'$

$f_{\text{opt}} = f'$

Endif;

Else ($f' > f_i$) accept or reject the point with acceptance probability

p :

$$p = \exp\left(\frac{f_i - f'}{T_k}\right)$$

In practice, a pseudorandom number p' is generated in the range $[0, 1]$ and is compared with p . If $p' < p$ the point is accepted, otherwise it is rejected

In the case of acceptance:

Set $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}'$

Set $f_{i+1} = f'$

Add 1 to i

Add 1 to n_h

Step 4

Add 1 to h

If $h \leq n$ then goto *step 1*

Else set h to 1 and add 1 to j

Step 5

If $j < N_s$ then goto *step 1*

Else update the step vector \mathbf{v}_m :

For each direction u the new step vector component \mathbf{v}'_u is:

$$v'_u = v_{m_u} \left(1 + c_u \frac{n_u / N_S - 0.6}{0.4} \right), \quad n_u > 0.6N_S$$

$$v'_u = \frac{v_{m_u}}{1 + c_u \left(\frac{0.4 - n_u / N_S}{0.4} \right)}, \quad n_u < 0.4N_S$$

$$v'_u = v_{m_u} \quad \text{otherwise}$$

Set $\mathbf{v}_{m+1} = \mathbf{v}'$

Set j to 0

Set n_u to 0, $u = 1, \dots, n$

Add 1 to m

The aim of these variations in step length is to maintain the average percentage of accepted moves at about one-half of the total number of moves. The c_u parameter controls the step variation along each u -th direction.

Step 6

If $m < N_T$ then goto *step 1*

Else, reduce T_k :

Set $T_{k+1} = r_T \cdot T_k$

Set $f_k^* = f_i$

Add 1 to k

Set m to 0

Step 7

If:

$$\left| f_k^* - f_{k-u}^* \right| \leq \varepsilon, \quad u = 1, \dots, N_e$$

$$f_k^* - f_{\text{opt}} \leq \varepsilon$$

Then stop the search

else

Add 1 to i

Set $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{\text{opt}}$

Set $f_i = f_{\text{opt}}$

Goto *step 1*

2.4.2 Εφαρμογή της Simulated Annealing – Βελτιστοποίηση των Επιταχυντικών Παραμέτρων.

Όπως προαναφέραμε δοκιμάσαμε την εφαρμογή της SA για τρεις μεταβλητές $[\omega_{r_1}, \omega_{r_2}, \omega_{i_2}]$ όπου σχηματίζουν το διάνυσμα: $\bar{\omega}_2 = [\omega_{r_1}, \omega_{r_2} + j\omega_{i_2}]$ και το συγκρίναμε με τις παραμέτρους του Hadley, ενώ εφαρμόσαμε την ADI και για την επίλυση του TM ρυθμού. Επιπλέον, αφού θεωρούμε απλά absorbers, η μαγνητική διαπερατότητα μ είναι παντού σταθερή καθώς έχουμε μη μαγνητικά υλικά, και η μεταβολή της διηλεκτρικής επιτρεπτότητας ε στα άκρα μεταβάλλεται σταδιακή και χωρίς ακραίες μεταβολές, έτσι δοκιμάσαμε και την σχέση που προέκυψε για την χρήση μίας μόνο παραμέτρου: $\omega_{TE} = \varepsilon \cdot \omega_{TM}$.

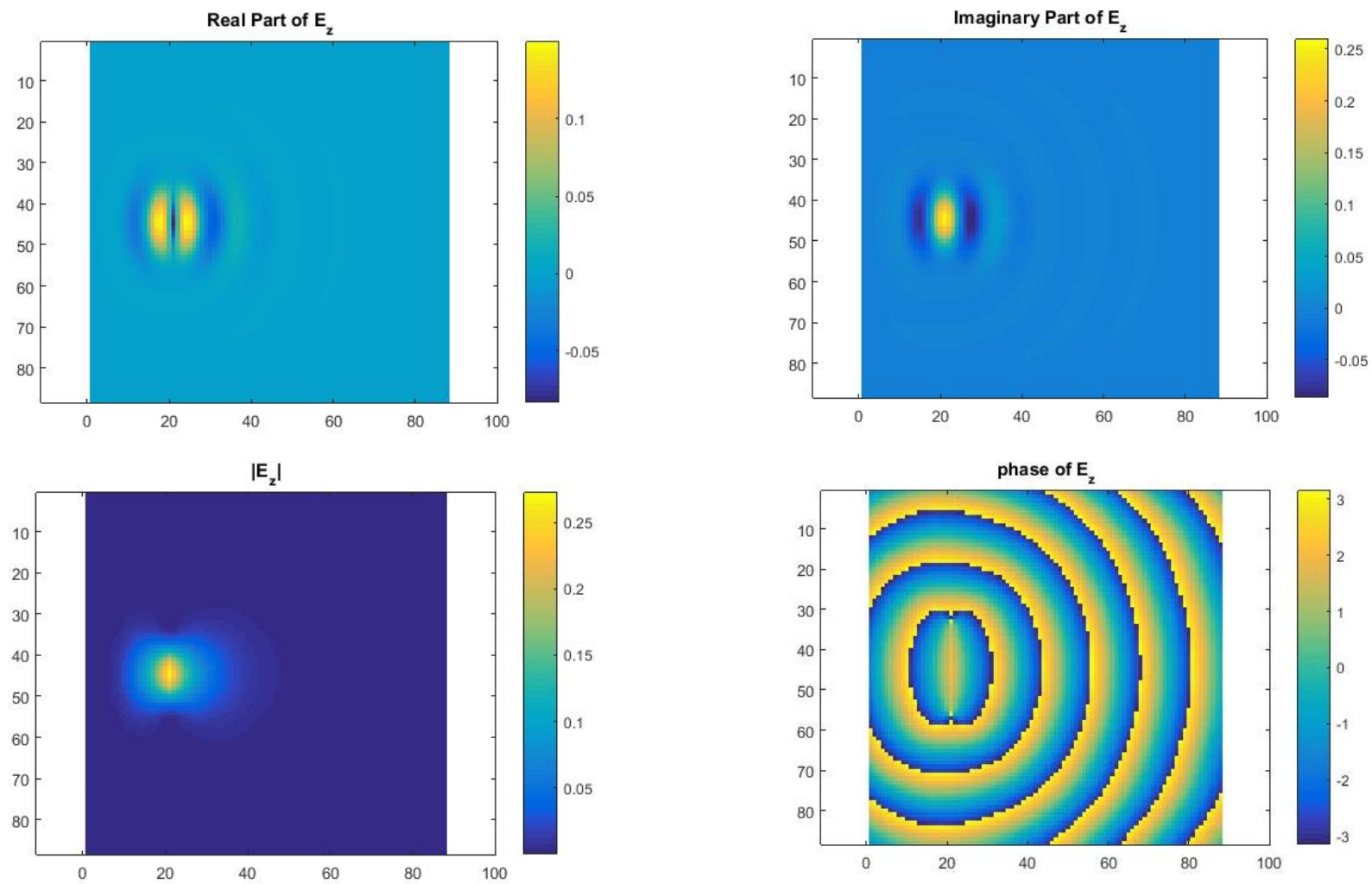
Οι δοκιμές έγιναν σε μοντέλα στα οποία διαδίδεται μία γκαουσιανή δέσμη, σε ομοιογενές μέσο, ενώ η τοποθέτηση της πηγής έγινε με την δέσμευση περιοχής δίπλα από το στρώμα των absorbers, όπως ακριβώς περιγράφεται στο πρώτο Κεφάλαιο στην ενότητα (1.4). Όπως θα παρατηρήσουμε τα αποτελέσματα βελτιστοποιούν αρκετά τις εμπειρικές παραμέτρους του Hadley και στις περισσότερες των περιπτώσεων απαιτούνται λίγες επαναλήψεις προκειμένου οι λύσεις να συγκλίνουν.

Για τον υπολογισμό της μέγιστης ιδιοτιμής χρησιμοποιήθηκε προσέγγιση βασισμένη στον αλγόριθμο της Power Iterative Method.

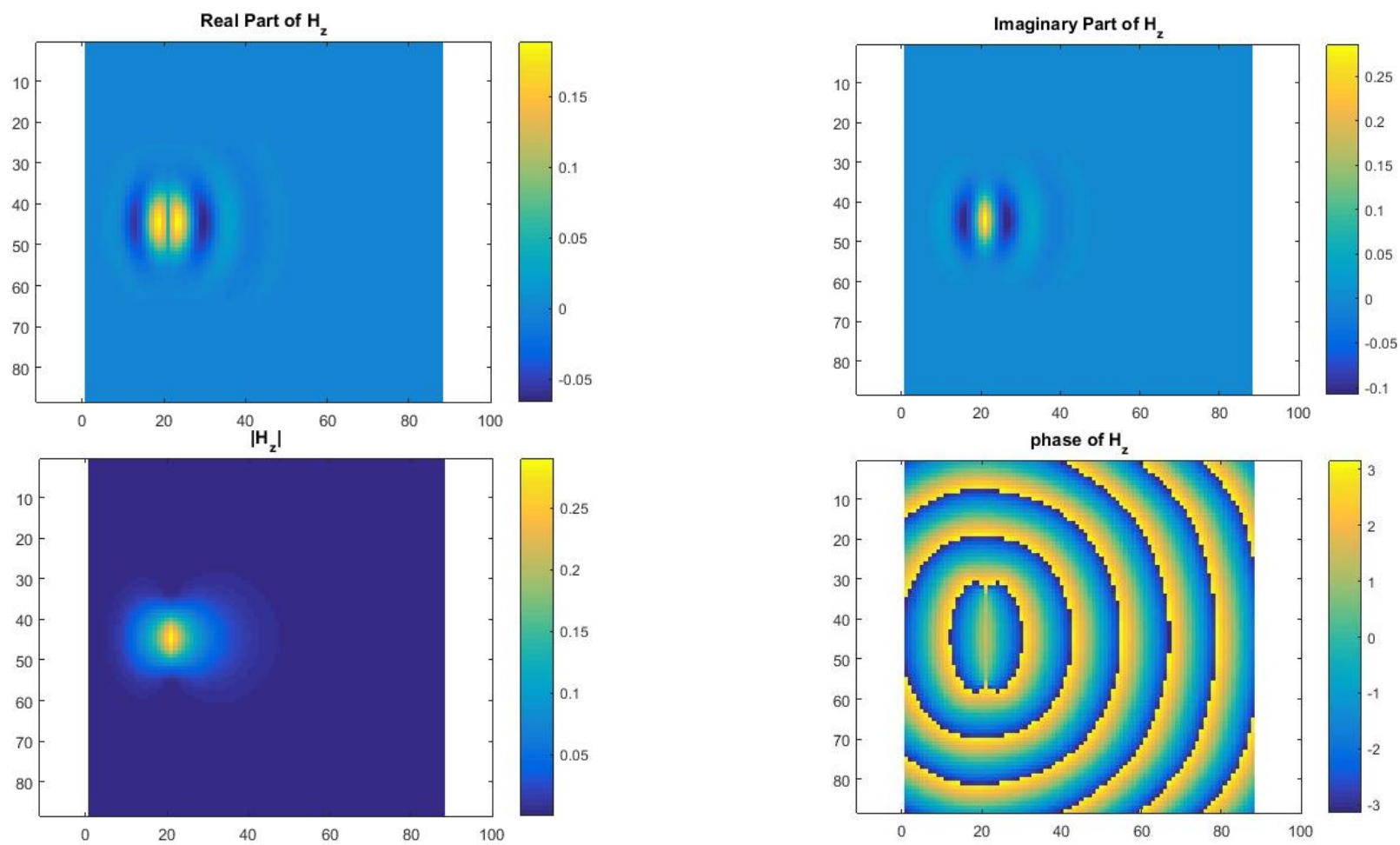
Εφαρμογή 1^η:

Μοντέλο ομοιογενούς χώρου με $\varepsilon_r = 0.9375 - j0.5$ (υλικό με απώλειες), περιοχή ενδιαφέροντος $L_x = L_y = 4\mu m$, ενώ σε κάθε πλευρά έχουμε επιπλέον $L_{abs} = 1.632\mu m$. Θεωρούμε $\lambda_0 = 1\mu m$, και $\Delta_{(x|y)} = \lambda / 12$ (πεδιακή κατανομή φαίνεται στα σχήματα 2.12 και 2.13).

Σχήμα 2.12: Σχηματική Απεικόνιση του Μοντέλου της 1ης Εφαρμογής για TE ρυθμό:



Σχήμα 2.13: Σχηματική Απεικόνιση του Μοντέλου της 1ης Εφαρμογής για ΤΜ ρυθμό:



Αποτελέσματα:

Για το TE μοντέλο:

	SA	Hadley	$\omega_{\text{TE}} = \varepsilon_r \omega_{\text{TM}_{\text{SA}}}$
ω_1	-8.53268877	-200	$-9.8285 + j5.2419$
ω_{r_2}	0.0126733791	0.0234375	0.4871
ω_{i_2}	-0.625158774	-0.515625	-1.6166
$\rho(\mathbf{T})$	0.4267	0.9160	0.8346
# Iterations for conv.	23	158	51

Για το TM μοντέλο:

	SA	$\omega_{\text{TM}} = \omega_{\text{TE}_{\text{Hadley}}} / \varepsilon_r$	$\omega_{\text{TM}} = \omega_{\text{TE}_{\text{SA}}} / \varepsilon_r$
ω_1	-10.4837	$-166.0900 - j88.5813$	$-7.0860 - j3.7792$
ω_{r_2}	1.1205	0.2478	0.2874
ω_{i_2}	-1.1268	-0.4178	-0.5135
$\rho(\mathbf{T})$	0.6979	0.8973	0.6158
# Iterations for conv.	47	74	37

Και στις δύο περιπτώσεις θεωρήσαμε κριτήριο σύγκλισης:

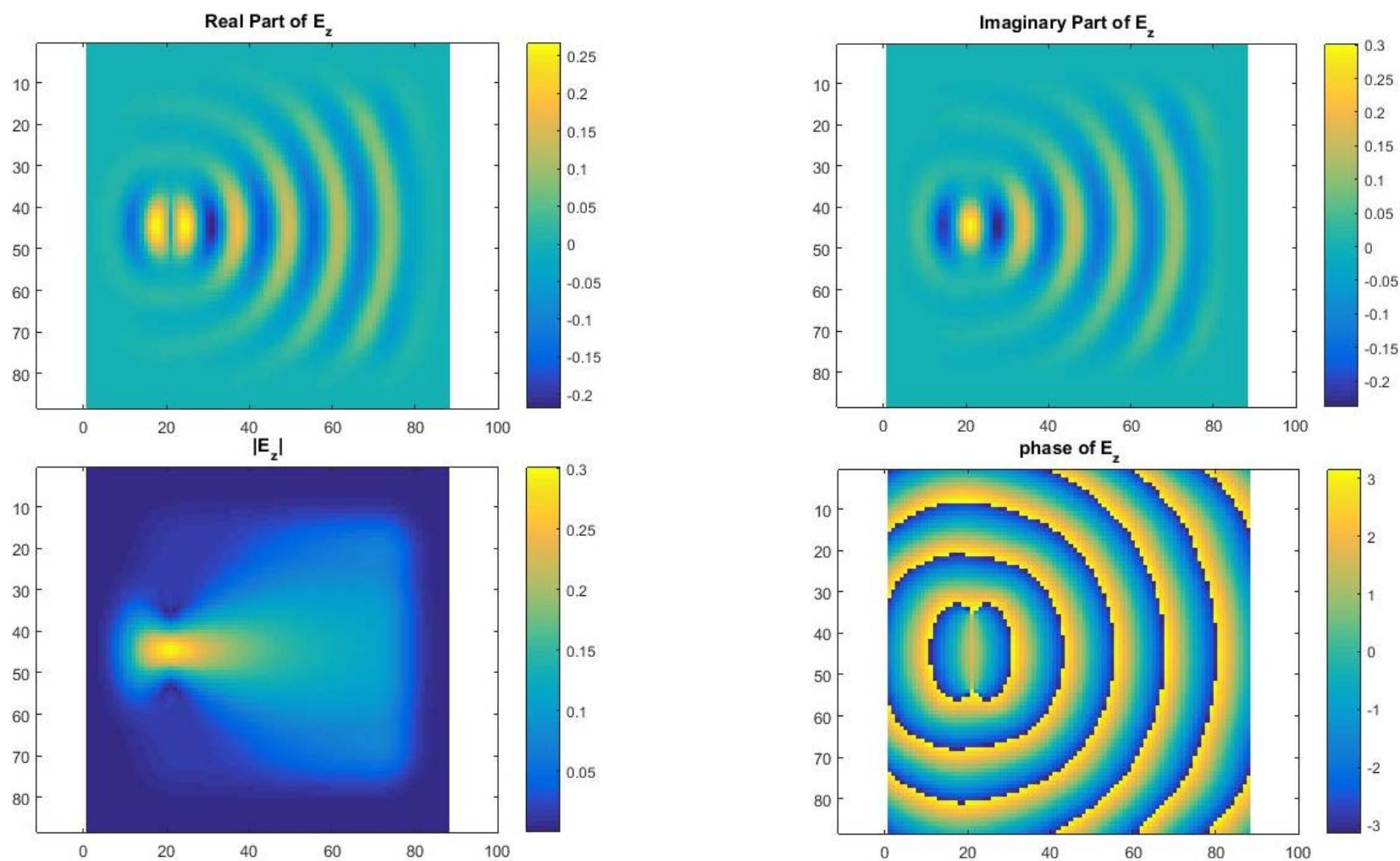
$$\max \left| \frac{\mathbf{F}^n - \mathbf{F}^{n-1}}{\mathbf{F}^n} \right| < 10^{-6}$$

Ενώ ψάξαμε λύσεις στα διαστήματα $\omega_{r_1} \in [-20, 20]$, $\omega_{r_2} \in [-20, 20]$, και $\omega_{i_2} \in [-20, 20]$.

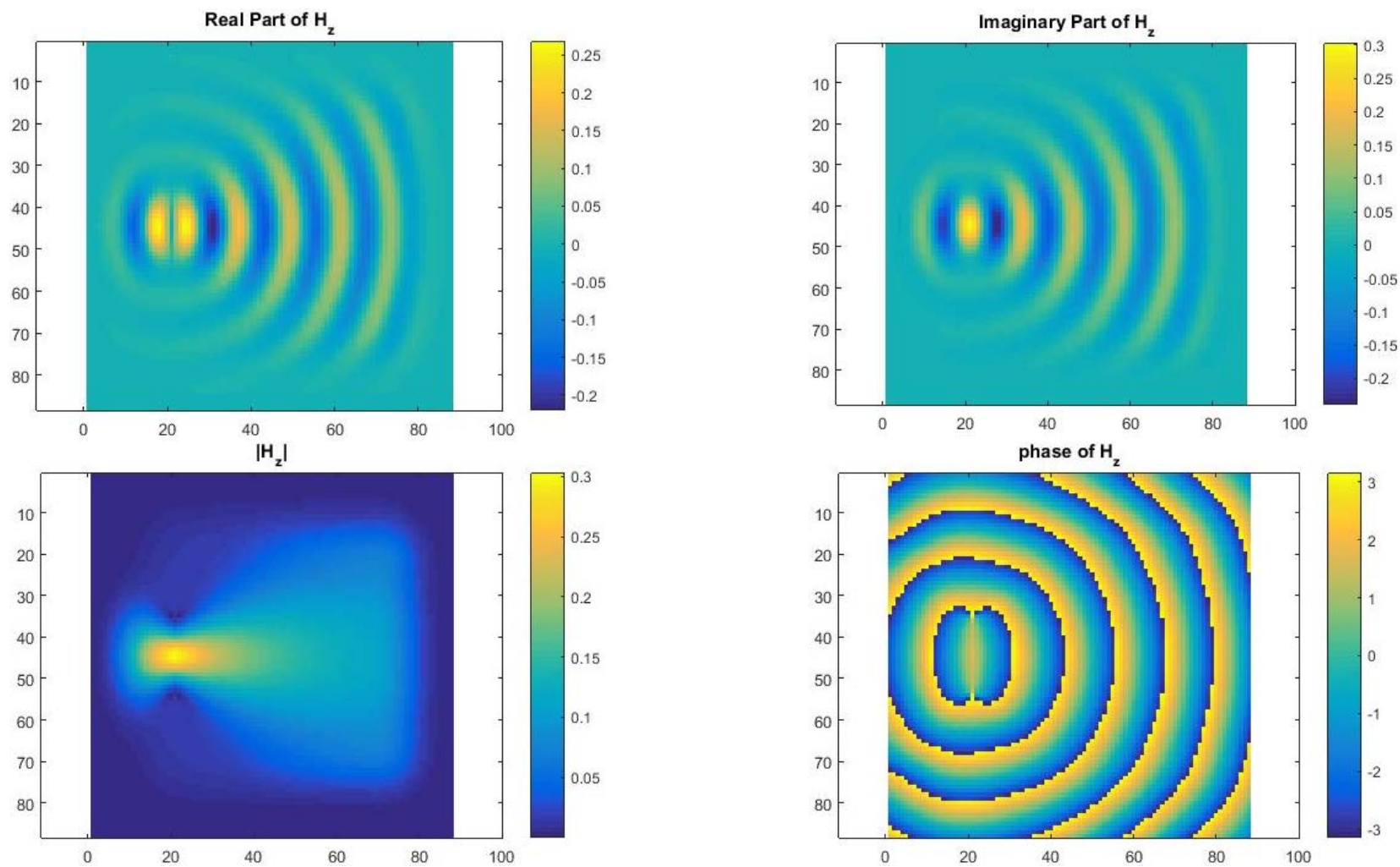
Εφαρμογή 2^η:

Μοντέλο ομοιογενούς χώρου με $\epsilon_r = 1$ (υλικό χωρίς απώλειες - αέρας), περιοχή ενδιαφέροντος $L_x = L_y = 4\mu m$, ενώ σε κάθε πλευρά έχουμε επιπλέον $L_{\text{abs}} = 1.632\mu m$. Θεωρούμε $\lambda_0 = 1\mu m$, και $\Delta_{(x|y)} = \lambda / 12$ (πεδική κατανομή σχήματα 2.14 και 2.15).

Σχήμα 2.14: Σχηματική Απεικόνιση του Μοντέλου της 2^{ης} Εφαρμογής για TE ρυθμό:



Σχήμα 2.15: Σχηματική Απεικόνιση του Μοντέλου της 2^{ης} Εφαρμογής για ΤΜ ρυθμό:



Αποτελέσματα:

Για το TE μοντέλο:

	SA	Hadley	$\omega_{\text{TE}} = \varepsilon_r \omega_{\text{TM}_{\text{SA}}}$
ω_1	-73.4909	-200	-125.5778
ω_{r_2}	0.0621	0.025	0.0618
ω_{i_2}	-0.6537	-0.55	-0.7995
$\rho(\mathbf{T})$	0.8503	0.9161	0.9121
# Iterations for conv.	93	156	120

Για το TM μοντέλο:

	SA	$\omega_{\text{TM}} = \omega_{\text{TE}_{\text{Hadley}}} / \varepsilon_r$	$\omega_{\text{TM}} = \omega_{\text{TE}_{\text{SA}}} / \varepsilon_r$
ω_1	-215.5778	-200	-73.4909
ω_{r_2}	0.0618	0.025	0.0621
ω_{i_2}	-0.7995	-0.55	-0.6537
$\rho(\mathbf{T})$	0.8837	0.9218	0.8551
# Iterations for conv.	205	311	163

Και στις δύο περιπτώσεις θεωρήσαμε κριτήριο σύγκλισης:

$$\max \left| \frac{\mathbf{F}^n - \mathbf{F}^{n-1}}{\mathbf{F}^n} \right| < 10^{-6}$$

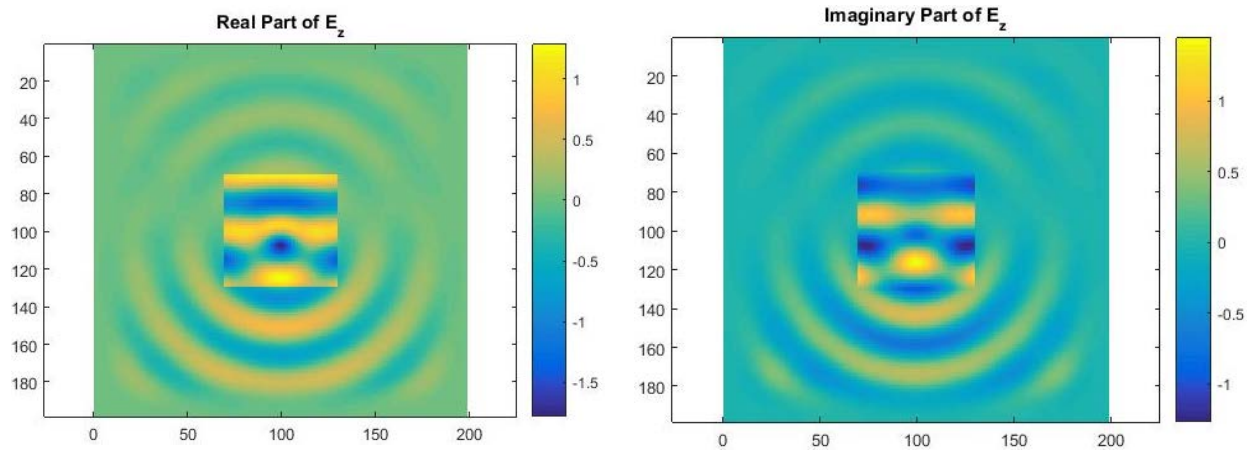
Ψάξαμε λύσεις στα διαστήματα: $\omega_{r_1} \in [-300, -60]$, $\omega_{r_2} \in [0, 5]$, και $\omega_{i_2} \in [-5, 0]$. Παρατηρούμε ότι για να βρεθεί καλύτερο ω θα πρέπει να αλλάξουν τα διαστήματα των υπό εξέταση μεταβλητών. Π.χ. μπορούμε να δοκιμαστεί να

αυξηθεί το αρνητικό διάστημα του ω_{r_1} , φυσικά αυτό αυξάνει τους χρόνους υπολογισμού.

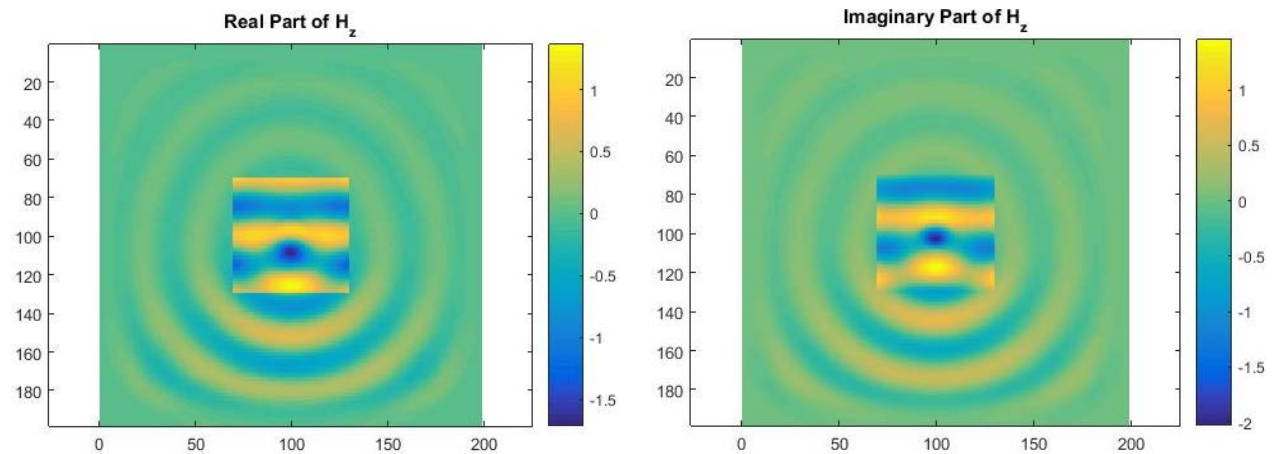
Εφαρμογή 3η:

Πρόσπτωση επίπεδου κύματος σε κύλινδρο $\varepsilon_2 = 2.25$ (γυαλί) ακτίνας $r = 0.15\mu m$ εντός αέρα $\lambda_0 = 1\mu m$ ενώ $\Delta_{(x|y)} = \lambda_2 / 10$. Όπου περιοχή ενδιαφέροντος $L_x = L_y = 3 \cdot \lambda_0 + 2 \cdot r$ και πάχος absorber για κάθε πλευρά $L_{\text{abs}} = \lambda_0$ (πεδιακή κατανομή σχήματα 2.16 και 2.17).

Σχήμα 2.16: Σχηματική Απεικόνιση του Μοντέλου της 3ης Εφαρμογής για TE ρυθμό:



Σχήμα 2.17: Σχηματική Απεικόνιση του Μοντέλου της 3ης Εφαρμογής για TM ρυθμό:



Αποτελέσματα:

Για το TE μοντέλο:

	SA	Hadley	$\omega_{\text{TE}} = \varepsilon_{\text{eff}} \omega_{\text{TM}_{\text{SA}}}$
ω_1	-77.6537	-200	-77.7360
ω_{r_2}	0.0600	0.02542	0.2047
ω_{i_2}	-0.4987	-0.55924	-0.9719
$\rho(\mathbf{T})$	0.8639	0.9776	0.9619
# Iterations for conv.	93	152	137

Για το TM μοντέλο:

	SA	$\omega_{\text{TM}} = \omega_{\text{TE}_{\text{Hadley}}} / \varepsilon_{\text{eff}}$	$\omega_{\text{TM}} = \omega_{\text{TE}_{\text{SA}}} / \varepsilon_{\text{eff}}$
ω_1	-77.1103	-198.3903	-77.0287
ω_{r_2}	0.2031	0.0250	0.0596
ω_{i_2}	-0.9641	-0.5000	-0.4947
$\rho(\mathbf{T})$	0.7270	0.9103	0.9133
# Iterations for conv.	67	204	206

Και στις δύο περιπτώσεις θεωρήσαμε κριτήριο σύγκλισης:

$$\max \left| \frac{\mathbf{F}^n - \mathbf{F}^{n-1}}{\mathbf{F}^n} \right| < 10^{-6}$$

Ψάξαμε λύσεις στα διαστήματα: $\omega_{r_1} \in [-300, -60]$, $\omega_{r_2} \in [0, 5]$, και $\omega_{i_2} \in [-5, 0]$. Ενώ θεωρήσαμε αντιπροσωπευτική τιμή του ε ως την ποσοστιαία:

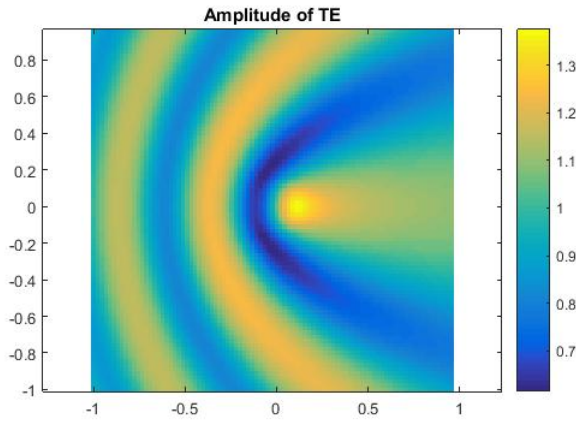
$$\varepsilon_{\text{eff}} = (1 - \mathbf{P}) \cdot \varepsilon_1 + \mathbf{P} \cdot \varepsilon_2$$

$$\text{Όπου } \mathbf{P} = \frac{\pi r^2}{L_x \cdot L_y}$$

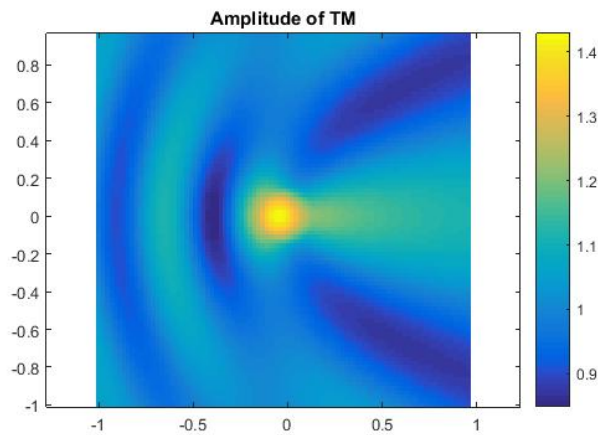
Για την δεδομένη εφαρμογή: $\mathbf{P} = 0.0065$ και $\varepsilon_{eff} = 1.0081$.

Εφαρμογή 4η:

Πρόσπτωση επίπεδου κύματος σε κύλινδρο $\varepsilon_2 = 2.25$ (γυαλί) ακτίνας $r = 0.15\mu m$ εντός αέρα $\lambda_0 = 1\mu m$ ενώ $\Delta_{(x|y)} = \lambda_2 / 10$. Όπου περιοχή ενδιαφέροντος $L_x = L_y = 2 \cdot \lambda_0$ και πάχος absorber ή PML για κάθε πλευρά $L_{abs|pml} = \lambda_0$. Παρατίθενται οι σχηματικές απεικονίσεις που προέκυψαν από την επίλυση του μοντέλου:



Σχήμα 2.18: Κατανομή του πλάτους του ηλεκτρικού πεδίου TE ρυθμού της 4ης εφαρμογής



Σχήμα 2.19: Κατανομή του πλάτους του μαγνητικού πεδίου TM ρυθμού της 4ης εφαρμογής

Αποτελέσματα για SC-PML

Για το TE μοντέλο:

	Hadley	SA
ω_1	-200	-71.3498
ω_{r_2}	0.02556	0.0881
ω_{i_2}	-0.5621	-0.6265
$\rho(\mathbf{T})$	0.9295	0.7911
# Iterations for conv.	120	56

Για το TM μοντέλο:

	Hadley	SA
ω_1	-200	-76.5990
ω_{r_2}	0.02556	0.1675
ω_{i_2}	-0.5621	-1.0744
$\rho(\mathbf{T})$	0.9224	0.8106
# Iterations for conv.	179	78

Θεωρήσαμε κριτήριο σύγκλισης:

$$\max \left| \frac{\mathbf{F}^n - \mathbf{F}^{n-1}}{\mathbf{F}^n} \right| < 10^{-6}$$

Ψάξαμε λύσεις στα διαστήματα: $\omega_{r_1} \in [-300, -60]$, $\omega_{r_2} \in [0, 5]$, και $\omega_{i_2} \in [-5, 0]$.

Αποτελέσματα για Absorbers

Για το TE μοντέλο:

	Hadley	SA
ω_1	-200	-71.3569
ω_{r_2}	0.02556	0.0849
ω_{i_2}	-0.5621	-0.6699
$\rho(\mathbf{T})$	0.9293	0.8921
# Iterations for conv.	109	71

Για το TM μοντέλο:

	Hadley	SA
ω_1	-200	-85.7558
ω_{r_2}	0.02556	0.2307
ω_{i_2}	-0.5621	-1.1611
$\rho(\mathbf{T})$	0.9200	0.7708
# Iterations for conv.	176	61

Θεωρήσαμε κριτήριο σύγκλισης:

$$\max \left| \frac{\mathbf{F}^n - \mathbf{F}^{n-1}}{\mathbf{F}^n} \right| < 10^{-6}$$

Ψάξαμε λύσεις στα διαστήματα: $\omega_{r_1} \in [-300, -60]$, $\omega_{r_2} \in [0, 5]$, και $\omega_{i_2} \in [-5, 0]$. Αξίζει να αναφέρουμε στο σημείο αυτό ότι αρκετές φορές ο αριθμητικός υπολογισμός της μέγιστης ιδιοτιμής γίνεται αρκετά δύσκολος και γίνεται μία προσέγγιση η οποία υπερεκτιμά την ιδιοτιμή.

Αποτελέσματα για U-PML

Για το TE μοντέλο:

	Hadley	SA
ω_1	-200	-175.1670
ω_{r_2}	0.02556	0.0025
ω_{i_2}	-0.5621	-0.0316
$\rho(\mathbf{T})$	2.5023	1.0304
# Iterations for conv.	∞	572

Για το TM μοντέλο:

	Hadley	SA
ω_1	-200	-142.1015
ω_{r_2}	0.02556	0.00002
ω_{i_2}	-0.5621	-0.0477
$\rho(\mathbf{T})$	2.5023	1.0318
# Iterations for conv.	∞	2283

Θεωρήσαμε κριτήριο σύγκλισης:

$$\max \left| \frac{\mathbf{F}^n - \mathbf{F}^{n-1}}{\mathbf{F}^n} \right| < 10^{-6}$$

Ψάξαμε λύσεις στα διαστήματα: $\omega_{r_1} \in [-300, -60]$, $\omega_{r_2} \in [0, 5]$, και $\omega_{i_2} \in [-5, 0]$.

Προφανώς οι ιδιοτιμές που βρίσκονται από το SA είναι μικρότερες από το 1 (για αυτό και συγκλίνει η μέθοδος), όμως υπολογιστικά γίνεται μία υπερεκτίμηση του υπολογισμού της ιδιοτιμής.

Παρατηρήσεις Αποτελεσμάτων

Φαίνεται από τα αποτελέσματα ότι η ADI μπορεί να εφαρμοστεί με σχετική ευκολία σε πληθώρα ηλεκτρομαγνητικών προβλημάτων. Σαφώς όμως οι επιταχυντικοί παράμετροι επηρεάζονται από τις εκάστοτε διατάξεις και το είδος των τεχνητών υλικών στα άκρα.

Προεκτάσεις της παρούσας μελέτης είναι η επιλογή κατάλληλων επιταχυντικών διανυσμάτων ανάλογα την επικρατούσα τιμή της διηλεκτρικής επιτρεπτότητας της διάταξης και της θέσης των σιεδαστών πάνω στο πλέγμα.

Παράρτημα Β:

Ο Υπολογισμός των Ιδιοτιμών των Τριδιαγωνίων Πινάκων ($\mathbf{H}_1, \mathbf{V}_1$)

Οι ιδιοτιμές των τριδιαγωνίων πινάκων $\mathbf{H}_1, \mathbf{V}_1$ παίζουν μεγάλη σημασία στην σύγκλιση της ADI. Οι διαφορές όταν εξετάζουμε έναν ομογενή χώρο των $\mathbf{H}_1, \mathbf{V}_1$ είναι στην διακριτοποίηση ($\Delta x, \Delta z$). Για λόγους απλοποίησης θα υποθέσουμε τον τριδιαγώνιο πίνακα \mathbf{Y} στον οποίο έχουμε διακριτοποίηση Δ .

Στο μικρότερο δυνατό πλέγμα το \mathbf{Y} παίρνει την μορφή:

$$\mathbf{Y} = \left[\begin{array}{cc|cc} -\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} & \frac{1}{\Delta^2} & & \\ \frac{1}{\Delta^2} & -\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} & & \\ \hline & & \mathbf{0} & \\ & & & \mathbf{0} \end{array} \right] \quad (\text{B.1})$$

Συνεπώς προκύπτει:

$$\det \begin{bmatrix} \lambda - \left(-\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} \right) & \frac{1}{\Delta^2} \\ \frac{1}{\Delta^2} & \lambda - \left(-\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} \right) \end{bmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{vmatrix} \lambda - A & -B \\ -B & \lambda - A \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{Άρα:} \quad \lambda = A \pm B = -\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} \pm \frac{1}{\Delta^2}$$

Δεδομένου ότι εν γένει $\varepsilon = \varepsilon_r + j\varepsilon_i$ όπου το φανταστικό μέρος υποδηλώνει απώλειες (ή κέρδος), τότε:

$$\lambda_1 = \frac{\varepsilon}{2} - \frac{1}{\Delta^2} = \left(\frac{\varepsilon_r}{2} - \frac{1}{\Delta^2} \right) + j \frac{\varepsilon_i}{2} = \lambda_{r_1} + j\lambda_{i_1} \quad (\text{B.2})$$

$$\lambda_2 = \frac{\varepsilon}{2} - \frac{3}{\Delta^2} = \left(\frac{\varepsilon_r}{2} - \frac{3}{\Delta^2} \right) + j \frac{\varepsilon_i}{2} = \lambda_{r_2} + j\lambda_{i_2} \quad (\text{B.3})$$

Στην γενική μορφή του \mathbf{Y} έχουμε:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \underbrace{\begin{matrix} a & \frac{1}{\Delta^2} \\ \frac{1}{\Delta^2} & \ddots & \frac{1}{\Delta^2} \\ & \frac{1}{\Delta^2} & a \end{matrix}}_n & & \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \dots & \mathbf{S} \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

Όπου: $a = -\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2}$ και n ο αριθμός των γραμμών για τον \mathbf{V}_1 ή ο αριθμός των στηλών του πλέγματος για τον \mathbf{H}_1 .

Ο υπολογισμός ανάγεται στον υπολογισμό των ιδιοτιμών του τριδιαγώνιου υποπίνακος \mathbf{S} διαστάσεων $n \times n$.

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} & \frac{1}{\Delta^2} & & & \\ \frac{1}{\Delta^2} & -\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \frac{1}{\Delta^2} & \\ & & & \frac{1}{\Delta^2} & -\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{\Delta^2} \underbrace{\begin{bmatrix} -2 + \frac{\varepsilon}{2}\Delta^2 & 1 & & & \\ 1 & -2 + \frac{\varepsilon}{2}\Delta^2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & -2 + \frac{\varepsilon}{2}\Delta^2 \end{bmatrix}}_{\hat{\mathbf{S}}} \quad (\text{B.5})$$

Αν το \tilde{t} είναι το ιδιοδιάνυσμα του \mathbf{S} τότε:

$$(\mathbf{S} - \lambda\mathbf{I}) \cdot \tilde{t} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad [\hat{\mathbf{S}} - (\lambda\Delta^2)\mathbf{I}] \cdot \tilde{t} = \mathbf{0}$$

Άρα: $[\hat{\mathbf{S}} - \hat{\lambda}\mathbf{I}] \cdot \tilde{t} = \mathbf{0}$ δηλαδή τα $\mathbf{S}, \hat{\mathbf{S}}$ έχουν τα ίδια ιδιοδιανύσματα. Ενώ για τις ιδιοτιμές ισχύει: $\lambda \cdot \Delta^2 = \hat{\lambda}$.

Ας υπολογίσουμε τώρα τις ιδιοτιμές $\hat{\lambda}$.

Για την k -οστή ιδιοτιμή ισχύει:

$$[\hat{\mathbf{S}} - \hat{\lambda}_k\mathbf{I}] \cdot \tilde{t}^k = \mathbf{0}$$

Συνεπώς έχουμε:

$$t_{i-1}^{(k)} + \left[\Delta^2 \left(-\frac{2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon}{2} \right) - \hat{\lambda}_k \right] t_i^{(k)} + t_{i+1}^{(k)} = 0$$

$$t_{i-1}^{(k)} + \left[A - \hat{\lambda}_k \right] t_i^{(k)} + t_{i+1}^{(k)} = 0$$

Κάνοντας χρήση του μετασχηματισμού Z έχουμε:

$$z^2 + (A - \hat{\lambda}_k) \cdot z + 1 = 0$$

Το οποίο θα δώσει λύσεις της μορφής:

$$\rho = \frac{-(A - \hat{\lambda}_k) \pm [(A - \hat{\lambda}_k)^2 - 4]^{1/2}}{2} = -\frac{(A - \hat{\lambda}_k)}{2} \pm \left[\left(\frac{A - \hat{\lambda}_k}{2} \right)^2 - 1 \right]^{1/2}$$

Δεδομένου ότι ψάχνουμε λύσεις επί του μοναδιαίου κύκλου στο μιγαδικό χώρο.

$$\left(\frac{A - \hat{\lambda}_k}{2} \right)^2 - 1 < 0$$

Συνεπώς έχουμε:

$$\rho = \cos \phi_k \pm j \sin \phi_k = e^{j\phi_k}$$

Όπου $\cos \phi_k = \frac{\hat{\lambda}_k - A}{2}$, έτσι συνεπάγεται:

$$t_i^{(k)} = A_k e^{j i \phi_k} + B_k e^{-j i \phi_k} \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

Δεδομένου ότι εξετάζουμε προβλήματα με οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet- Dirichlet, έχουμε:

$$\left. \begin{array}{l} t_0^{(k)} = 0 \\ t_{n+1}^{(k)} = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ e^{j(n+1)\phi_k} & e^{-j(n+1)\phi_k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_k \\ B_k \end{bmatrix} = 0$$

Μηδενίζοντας την διακρίνουσα του πίνακα προκύπτει:

$$\sin[(n+1)\phi_k] = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_k = \frac{\pi k}{n+1}, \quad k = 1, 2, \dots, n$$

Συνεπώς έχουμε:

$$\hat{\lambda}_k = A + 2 \cos \phi_k$$

$$\lambda_k = \frac{\varepsilon}{2} - \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \left(\frac{\pi k}{2(n+1)} \right) = \left[\frac{\varepsilon_r}{2} - \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \left(\frac{\pi k}{2(n+1)} \right) \right] + j \frac{\varepsilon_i}{2} = \lambda_{k_r} + j \lambda_{k_i} \quad (\text{B.6})$$

ⁱ Στην περίπτωση που το $\varepsilon = \varepsilon(x, y)$, δηλαδή μεταβάλλεται στο χώρο τότε διακριτοποιείται σε διάνυσμα ε_{ij} και κατά αντιστοιχία διακριτοποιείται και το a σε διάνυσμα a_{ij} .

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] M. N. O. Sadiku, *Numerical Techniques in Electromagnetics*. USA, CRC Press, 2001.
- [2] U. S. Inan, R. A. Marshall, *Numerical Electromagnetics: The FDTD Method*. USA, Cambridge University Press, 2001.
- [3] S.-D. Wu, E. Glytsis, "Finite-number-of-periods holographic gratings with finite-width incident beams: analysis using the finite-difference frequency-domain method," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 19, pp. 2018-2029, 2002.
- [4] S.-D. Wu, E. Glytsis, "Volume holographic grating couplers: rigorous analysis by use of the finite-difference frequency-domain method," *Appl. Opt.*, vol. 43, pp. 1009-1023, 2004.
- [5] M. A. Sharkawy, V. Demir, and A. Z. Elsherbeni, "Iterative multiregion technique for large-scale electromagnetic scattering problems: Two-dimensional case," *Radio Science*, vol. 40, RS5002, pp. 1-10, 2005.
- [6] F. Santosa, I. Stakgold, *Analytical and Computational Methods in Scattering and Applied Mathematics*. USA, Chapman & Hall/CRC 2000.
- [7] Δ. Π. Χρυσουλιδης, *Εισαγωγή στη Σκέδαση Ηλεκτρομαγνητικών Κυμάτων*. Θεσσαλονίκη, Εκδόσεις Τζιόλα, 2004.
- [8] R. L. Rowell, R. S. Stein, *Electromagnetic Scattering*, USA, Gordon and Brech, 1967.
- [9] K. S. Yee, "Numerical solution of the initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 14, pp. 302-307, 1966.
- [10] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method, 2nd Edition*. USA, Artech House, Inc., 2000.
- [11] R. C. Rumpf, "Design and optimization of nano-optical elements by coupling fabrication to optical behavior," Ph.D. dissertation, University of Central Florida, 2006.
- [12] K. R. Umashankar, A. Taflove, "A novel method to analyze electromagnetic scattering of complex objects," *IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility*, vol. 24, pp. 397-405, 1982.
- [13] H. Xiao-Juan, G. De-Biao, "2-D FDFD Analysis of Electromagnetic Scattering by Complex Targets," *IEEE 7th International Symposium on Antennas, Propagation and EM Theory*, pp. 1-4, 2006.
- [14] J. P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *Journal of Computational Physics*, vol. 114, pp. 195-200, 1994.
- [15] J. P. Berenger, *Perfect Matched Layer (PML) for Computational Electromagnetics*. Morgan and Claypool Publishers, 2007.

- [16] S. D. Gedney, *Introduction to the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Method for Electromagnetics*. Morgan and Claypool Publishers, 2010.
- [17] C. A. Balanis, *Advanced Engineering Electromagnetics*. USA, Wiley, 1989.
- [18] W. C. Chew, W. H. Weedon, "A 3D Perfectly Matched Medium from Modified Maxwell's Equations with Stretched Coordinates, " *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 7, pp. 599–604, 1994.
- [19] E. A. Marengo, C. M. Rappaport, and E. L. Miller, "Optimum PML ABC Conductivity Profile in FDFD," *IEEE Trans. Magnetics*, vol. 35, pp. 1506-1509, 1999.
- [20] C. M. Rappaport, M. Kilmer, and E. Miller, "Accuracy considerations in using the PML ABC with FDFD Helmholtz equation computation, " *Int. J. Numer. Model.*, vol. 13, pp. 471–482, 2000.
- [21] G. R. Hadley, "Numerical simulation of reflecting structures by solution of the two-dimensional Helmholtz equation, " *Optics Letters*, vol. 19, pp. 84-86, 1994.
- [22] G. R. Hadley, R. E. Smith "Full-Vector Waveguide Modeling Using an Iterative Finite-Difference Method with Transparent Boundary Conditions, " *Journal of Lightwave Technology*, vol. 13, pp 465-469, 1995.
- [23] E. Wachpress, *The ADI Model Problem*. USA, Springer, 2013.
- [24] R. S. Varga, *Matrix Iterative Analysis*. USA, Prentice-Hall, Inc. 1963.
- [25] G. Birkhoff ,R. S. Varga, D. M. Young "Alternating direction implicit methods". *Advances in computers*, vol 3. Academic, New York, pp 189–273, 1962.
- [26] M. P. Istace, J. P. Thiran "On the third and fourth Zolotarev Problems in the Complex Plane, " *SIAM Journal of Numerical Analysis*, vol. 32, pp. 249-259, 1995.
- [27] G. Starke "Optimal Alternating Direction Implicit Parameters for nonsymmetric systems of linear equations, " *SIAM Journal of Numerical Analysis*, vol. 28, pp. 1431-1445, 1991.
- [28] L. H. Thomas, "Elliptic Problems in Linear Differential Equations over a Network, " *Watson Science Computer Laboratory Report*; Columbia University: New York, NY, USA, 1949.
- [29] J. Stoer, R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*. USA, Springer, 1993.
- [30] A. I. Stepanets, *Methods of approximation theory*. Netherlands, Brill Academic Publishers, 2005.
- [31] A. G. Sukharev, *Minimax Models in the Theory of Numerical Methods*. Russia, Kluwer Academic Publishers, 1992.
- [32] D. M. Young, *Iterative Solution of Large Linear Systems*. USA, Academic Press, Inc. 1971.
- [33] D. R. Kincaid, L. J. Hayes, *Iterative Methods for Large Linear Systems*. USA, Academic Press, Inc. 1990.

- [34] E. Polak, J. E. Higgins, D. Q. Mayne, "A barrier function method for minimax problems, " *Mathematical Programming*, vol. 54, pp. 155-176, 1992.
- [35] A. Ralston, H. S. Wilf, *Mathematical Methods for Digital Computers, volume II*. USA, Wiley, 1967.
- [36] P. Benner, H. Mena, J. Saak, "On the Parameter Selection Problem in the Newton-ADI Iteration for large-scale Riccati Equations, " *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, vol. 29, pp. 136-149, 2008.
- [37] D. W. Peaceman, H. H. Rachford Jr. "The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations, " *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 3, pp. 28-41, 1955.
- [38] F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, C. W. Clark, NIST *Handbook of Mathematical Functions*. USA, Cambridge University Press, 2010.
- [39] W. Shin, S. Fan, "Choice of the perfect matching layer boundary condition for frequency-domain Maxwell's equations solvers," *Journal of Computational Physics*, vol. 231, pp. 3406-3431, 2012.
- [40] W. Shin, "3D Finite-Difference Frequency-Domain Method for Plasmonics and Nanophotonics," Ph.D. dissertation, Stanford University, 2013.
- [41] R. Borghi, M. Santarsiero, F. Frezza, G. Schettini, "Plane-Wave scattering by a dielectric circular cylinder parallel to a general reflecting flat surface, " *Journal of Optical Society of America A*, vol.14, pp. 1500-1504, 1997.
- [42] M. A. Taubenblatt, "Light scattering from cylindrical structures on surfaces, " *Optics Letters*, vol. 15, pp. 255-257, 1990.
- [43] R. Borghi, F. Frezza, P. Oliverio, M. Santarsiero, G. Schettini, "Scattering of a generic two-dimensional field by cylindrical structures in the presence of a plane interface, " *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, vol. 21, pp. 806-827, 2000.
- [44] M. Paulus, O. J. F. Martin, "Scattering with a diving cylinder, " *Optics Express*, vol. 9, pp. 303-311, 2001.
- [45] M. Di Vico, F. Frezza, L. Pajewski, G. Schettini, "Scattering by buried dielectric cylindrical structures, " *Radio Science*, vol. 40, RS6S18, 2005.
- [46] H. Oraizi, M. Afsahi, "Analysis of planar dielectric multilayers as FSS by transmission line transfer matrix method (TLTMM), " *Progress In Electromagnetics Research*, PIER 74, 217-240, 2007.
- [47] A. Corana, M. Marchesi, C. Martini, S. Ridella, "Minimizing multimodal Functions of continuous variables with the Simulated Annealing algorithm, " *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 13, pp. 262-280, 1987.
- [48] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt Jr., M.P. Vecchi, "Optimization by simulated annealing, " *Science*, vol. 220, pp. 671-680, 1983.

- [49] F. Romeo, A. Sangiovanni Vincentelli, C. Sechen, "Research on simulated annealing at Berkeley, " In *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Design, ICCD 84*, pp. 652-657, 1984.
- [50] S.R. White, "Concepts of scale in simulated annealing, " In *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Design, ICCD 84*, pp. 652-657, 1984.
- [51] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines, " *Journal of Chemical Physics*, vol.21, pp. 1087-1090, 1953.

