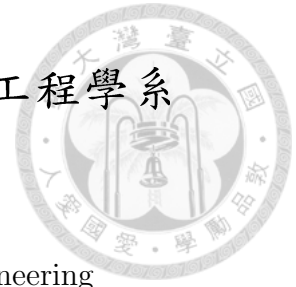


國立臺灣大學工學院工程科學及海洋工程學系

碩士論文



Department of Engineering Science and Ocean Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis

在三維色散介質中模擬電磁波的傳遞行為

*Prediction of electromagnetic wave propagation
in three-dimensional dispersive media*

王豫潔

Yu-Chieh Wang

指導教授：許文翰 博士

Advisor : Tony Wen-Hann Sheu, Ph.D.

中華民國 103 年七月

July, 2014

誌謝



一個懵懵懂懂的大學生，承蒙許文翰教授耐心的教導，細心指正每一個問題，才能在研究時間內，學到扎實的數值計算方法以及物理應用模擬，奠定良好的思考邏輯，非常感謝許老師的指導。在每一次光電組報告上，謝謝李佳翰教授給予物理觀念及研究經驗上的寶貴建議，讓我對計算電磁概念上更加了解。這一路上，感謝蔡順峰學長給予數值計算上的資料，提供思考空間，以及解救電腦上的問題。

實驗室深厚的研究基礎，在這資源豐富環境下學習成長，感謝學長前輩們的指導，謝謝邱柏雄學長、游景皓學長、高仕超學長、梁論語學長、張日陽學長以及袁聖宗學長的指教。感謝 Yannick 和 Maxim，在研究上給予不同的視野以及思考角度。來到台大從陌生到熟悉，感謝蔣承佑同學和林樂同學一同修課和砥礪。在光電知識上，感謝林尹白同學提供許多方向及資料。感謝楊耀宇同學、柳冠碩同學、薛向成學弟、王世哲學弟以及高千渝學妹的鼓勵。在研究的路上，每每遇到問題，張育璋學長總是不厭其煩地講解並給予研究方向，時常犧牲自己休息時間，和我一起討論，非常感謝你的打氣和指導。

在鑽研學術時，經常會遇到困難或是惱人的 bug，電話的另一頭，總是有聽我發牢騷、鼓勵我的書豪，謝謝你帶著我笑、陪著我做研究，告訴我要堅持，不要放棄。在最後，非常感謝拔拔和麻麻，讓我在衣食無缺的環境下長大，專心於研究上。還有在疲累時，可以一起聊聊天，抒發壓力的姐姐妹妹們。家，就像我的充電器，快沒電時，回到家就能補充滿滿的能量，再次出發。謝謝你們的支持，我好愛你們唷。

謝謝一路上支持我的朋友們。

中文摘要



本論文是在交錯網格上發展一三維時域有限差分法 (FDTD)，以求解馬克斯威爾方程。本文的方法是在時域內，在滿足電場和磁場的零散度條件（亦即高斯定律）的架構下求解法拉第定律和安培定律。所提出的數值方法於時間離散方面使用具辛結構 (Symplectic) 之二級二階之 Runge-Kutta 方法，在經過長時間模擬後，解仍得以保持馬克斯威爾方程的能量守恆性質；另透過法拉第及安培旋度方程空間微分項的推導，以期求得在色散關係上相當準確的解。

為了達到最佳數值色散性質，本文所提出的數值方法能在時間上和空間上保有相當好的收斂，且能有效地減少實解相速度與數值相速度的誤差，而得以顯著地降低了因時域有限差分所造成的明顯地數值色散誤差以及各向異性誤差。本研究證實了所提出的數值方法在具辛結構與色散關係上具有良好的保持性，尤其在針對經長時間馬克斯威爾方程的數值模擬後，其效果尤為顯著。本文亦在三種典型具代表性之色散介質 Debye、Lorentz、Drude 模型電磁波的模擬，透過計算，證明了文中所發展之數值方法於馬克斯威爾方程組在與頻率獨立和頻率相依上的有效性及在長時間模擬下的準確度。

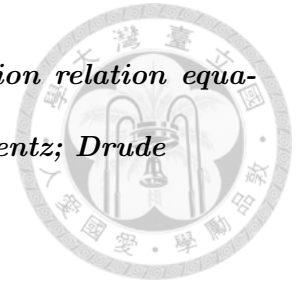
關鍵字：馬克斯威爾方程；交錯網格；色散關係；實解相速度和數值相速度；Debye 介質；Lorentz 介質；Drude 介質

Abstract



An explicit finite-difference scheme for solving the three-dimensional Maxwell's equations in staggered grids is presented in time domain. The aim of this thesis is to solve the Faraday's and Ampère's equations in time domain within the discrete zero-divergence context for the electric and magnetic fields (or Gauss's law). The local conservation laws in Maxwell's equations are also numerically preserved all the time using proposed the explicit second-order accurate symplectic partitioned Runge-Kutta temporal scheme. Following the method of lines, the spatial derivative terms in the semi-discretized Faraday's and Ampère's equations are then properly discretized to get a dispersively very accurate solution. To achieve the goal of getting the best dispersive characteristics, this centered scheme minimizes the difference between the exact and numerical phase velocities with good rates of convergence are demonstrated for the problem. The significant dispersion and anisotropy errors manifested normally in finite difference time domain methods are therefore much reduced. The dual-preserving (symplecticity and dispersion relation equation) wave solver is numerically demonstrated to be efficient for use to get in particular long-term accurate Maxwell's solutions. The emphasis of this study is also placed on the accurate modelling of EM waves in the dispersive media of the Debye, Lorentz and Drude types. Through the computational exercises, the proposed dual-preserving solver is computationally demonstrated to be efficient for use to predict the long-term accurate Maxwell's solutions for the media of frequency independent and dependent types.

KEY WORDS: *Maxwell's equations; staggered grids; dispersion relation equation; exact and numerical phase velocities; Debye; Lorentz; Drude*





符號說明

符號對照表

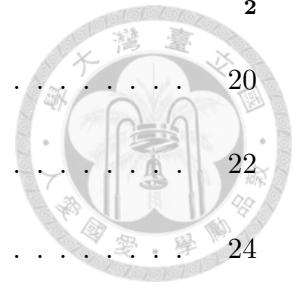
E	電場強度 (<i>Electric field intensity</i>)	<i>V/m</i>
D	電通密度 (<i>Electric flux density</i>)	<i>C/m²</i>
H	磁場強度 (<i>Magnetic field intensity</i>)	<i>A/m</i>
B	磁通密度 (<i>Magnetic flux density</i>)	<i>W/m²</i>
J	電流密度 (<i>Electric current density</i>)	<i>A/m²</i>
σ	電導率 (<i>Conductivity</i>)	<i>S/m</i>
ϵ_0	自由空間中的介電常數 (<i>Permittivity of free space</i>)	<i>F/m</i>
ϵ_r	相對介電常數 (<i>Relative permittivity</i>)	—
μ_0	自由空間中的磁導係數 (<i>Permeability of free space</i>)	<i>H/m</i>
μ_r	相對磁導係數 (<i>Relative permeability</i>)	—
λ	波長 (<i>Wavelength</i>)	<i>m</i>
c	光速 (<i>Speed of light in free space</i>)	<i>m/s</i>



目錄

誌謝	i
摘要	ii
Abstract	iii
符號說明	v
第一章 緒論	1
1.1 前言	1
1.2 文獻回顧	2
1.3 研究動機	3
1.4 研究目標	4
1.5 論文大綱	4
第二章 電磁波方程 -馬克斯威爾方程式	6
2.1 法拉第 / 安培 / 高斯方程組及其推導	6
2.2 法拉第 / 安培方程組之數學特性	7
2.3 色散介質	9
2.4 卷積完美匹配吸收層	10
第三章 數值方法	20

3.1	FDTD 之交錯網格系統	20
3.2	具辛結構之 PRK 時間離散	22
3.3	空間離散方程之推導	24
第四章 具色散關係保持性離散方法之分析		29
4.1	三維空間離散分析	29
4.1.1	積分域之影響	31
4.1.2	不同 Cr 數之影響	32
4.1.3	角度變化下之係數分佈	32
4.2	數值穩定性之分析	33
4.3	各向異性 (Anisotropy) 與數值色散 (Numerical dispersion) 之分析 .	35
4.3.1	數值色散關係式與實解色散關係式之一致性 (consistency) .	35
4.3.2	數值色散關係分析 (Numerical dispersion analysis)	36
4.3.3	數值相速度與群速度之分析 (Numerical phase velocity and group velocity analysis)	36
4.4	數值分析之結果與討論	38
第五章 數值模擬之結果		53
5.1	程式之驗證	54
5.2	色散介質中 CPML 吸收性的驗證	56
5.3	實際題目之求解	57
5.3.1	全場 / 散射場	58
5.3.2	等位函數法	58



5.3.3 實際題目模擬之結果 59

第六章 結論

6.1 研究成果與討論 93

6.2 未來工作與展望 94

參考文獻 79





圖示目錄

2.1	CPML 吸收邊界條件之示意圖。	14
2.2	求解電磁波在色散介質中傳遞，問題的方程及計算空間（以表示 之）之示意圖。	14
2.3	三種色散介質之相對介電係數的實部。	15
2.4	三種色散介質之相對介電係數的虛部。	15
2.5	以 17.5GHz 為中心頻率及頻帶範圍於 5GHz~30GHz 之高斯波源。 (a) 時域表示圖 ($x=400\Delta x$, $t=0\sim 450\Delta t$); (b) 頻域表示圖	16
2.6	在垂直邊界點 P、角落點 Q 以及角頂點 R 上三維 CPML 吸收邊界 之示意圖。	17
2.7	二維剖面，以垂直邊界點 P 及角落點 Q 作為觀察點，應用於色散 及非色散介質的示意圖。	17
2.8	三維 CPML 隨時間步變化吸收邊界反射的誤差。(a) 自由空間中； (b) Debye 介質中	18
2.9	三維 CPML 隨時間步變化吸收邊界反射的誤差。(a) Lorentz 介質 中；(b) Drude 介質中	19
3.1	(a) 交錯式之網格系統；(b) 在交錯網格系統中之內部節點示意圖 及其編號。	28

- 3.2 (a) 時間與空間座標系之示意圖；(b) 角頻率與波數座標系之示意圖 28
- 4.1 平面波在三維情況下傳遞時，定義出天頂角 (Zenith angle) θ ，方位角 (Azimuth angle) ϕ 。 42
- 4.2 固定 Cr 為 0.2 時，在不同積分範圍下之色散關係之實解與數值解的比較。 42
- 4.3 固定積分範圍 $\frac{-\pi}{2} \sim \frac{\pi}{2}$ 時，在不同 Cr 值情況下之色散關係之實解與數值解的比較。 43
- 4.4 係數 $a_1 \sim a_3$ 在不同天頂角 (Zenith angle) θ 的情況下，其值隨方位角 (Azimuth angle) ϕ 之變化。當天頂角 (Zenith angle) θ 為 0° 時，一維情況下的係數分佈並不隨方位角 (Azimuth angle) ϕ 而變化。 44
- 4.5 角頻率 (Angular frequencies) 對波數 (wavenumbers) k_x 和 k_y 之作圖，可觀察到因各向異性所造成的誤差。(a) 實解色散關係；(b) 本文所開發具色散關係保持的數值方法；(c) box scheme [26]；(d) symplectic scheme [26]；(e) Yee's scheme [26]. 45
- 4.6 實解與數值角頻率的誤差 $\frac{(\omega_{num} - \omega_{exact})}{\omega_{exact}} \times 100\%$ 對波數 (wavenumbers) k_x 和 k_y 之作圖，可觀察出本文所提出的數值方法在中、低波數 (也就是誤差小於 5% 區域) 較其他數值方法能更有效地降低因各向異性所造成的誤差。(a) 本文所開發具色散關係保持的數值方法；(b) box scheme [26]；(c) symplectic scheme [26]；(d) Yee's scheme [26]. 46

- 4.7 角頻率 (angular frequency) 分別對 k_x 軸、 k_y 軸以及 $\kappa = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 之剖面圖。在中、低波數 (wavenumber) 時，各數值方法皆能貼近實解色散關係，隨著波數增大，數值色散造成的誤差也隨之增大，比較其他的數值方法，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統對於減少因數值色散造成的誤差效果來的好，亦即提高了對波數保持的能力。 47
- 4.8 相速度與光速的比值 ($\frac{v_p}{c}$) 對方位角 (Azimuth angle) 之作圖。由圖中可看出各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在相同的 N_λ 情況下較其他的數值方法更能減少因各向異性 (anisotropy) 所帶來的誤差。(a) $N_\lambda = 3.1$; (b) $N_\lambda = 5$; (c) $N_\lambda = 10$; (d) $N_\lambda = 20$ 48
- 4.9 相速度與光速的比值 ($\frac{v_p}{c}$) 對波長內格點數 $N_\lambda = \frac{\lambda}{h}$ 之作圖，固定方位角 $\phi = \frac{\pi}{4}$ 。隨著 N_λ 越大，各個數值方法因離散所造成的數值色散誤差皆得到顯著的改善。本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在 N_λ 值很小時，即能有效地減小因數值色散所帶來的誤差，而達到較好的色散關係保持效果。 49
- 4.10 在三維情況下，考慮所有天頂角 ϕ 以及方位角 θ 時，實解與數值相速度之誤差對波長內格點數 $N_\lambda = \frac{\lambda}{h}$ 之作圖。隨著 N_λ 越大，各個數值方法因離散所造成的數值色散誤差皆獲得顯著的改善。本文所開發具色散關係保持性質的離散系統，即便在 N_λ 值很小時，亦能有效地減少因數值色散所帶來的誤差，而達到較好的色散關係保持效果。 50

- 4.11 數值群速度的夾角 γ 對方位角 (Azimuth angle) ϕ 之作圖。由圖中可看出各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在中、低數值波數下 kh 較其他的數值方法更能減少因各向異性 (anisotropy) 所帶來的誤差。(a) 本文所開發之數值方法；(b) $kh = \frac{\pi}{4}$ ；(c) $kh = \frac{\pi}{2}$ ；(d) $kh = \frac{3\pi}{4}$ 。 51
- 4.12 群速度的大小值對方位角 (Azimuth angle) ϕ 之作圖。由圖中可看出各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在中、低數值波數 kh 下較其他的數值方法更能夠減少因各向異性 (anisotropy) 所帶來的誤差。(a) 本文所開發之數值方法；(b) $kh = \frac{\pi}{4}$ ；(c) $kh = \frac{\pi}{2}$ ；(d) $kh = \frac{3\pi}{4}$ 。 52
- 5.1 在網格點 81×81 ，時間為 50 秒的情況，比較 TM 波所算出之電場 E_z 值的數值解和實解。 64
- 5.2 在時間 $T=50(s)$ 時，比較二維馬克斯威爾方程 (TM wave) 實解和數值解之能量密度 (Energy I) 隨時間變化之趨勢。 65
- 5.3 在時間 $T=50(s)$ 時，比較二維馬克斯威爾方程 (TM wave) 實解和數值解之能量密度 (Energy II) 隨時間變化之趨勢。 65
- 5.4 二維驗證中，Hamiltonian 隨時間變化之趨勢。 66
- 5.5 二維驗證中，高斯定律隨時間變化之趨勢。 66
- 5.6 在網格點 $81 \times 81 \times 81$ ，時間為 50 秒的情況下，比較三維馬克斯威爾方程，所算出之電場 E_z 值的數值解和實解，此為 $z = 0$ 之剖面圖。 67

5.7	在時間 $T=50(s)$ 時，比較三維馬克斯威爾方程實解和數值解之能量密度 (Energy I) 隨時間變化之趨勢。	68
5.8	在時間 $T=50(s)$ 時，比較三維馬克斯威爾方程實解和數值解之能量密度 (Energy II) 隨時間變化之趨勢。	68
5.9	三維驗證中，Hamiltonian 隨時間變化之趨勢。	69
5.10	在計算域包含真空 (1~250 網格) 與色散介質 (251~500 網格) 中，與參考文獻 [29] 之電場 E_z 數值解之比較。(a) 色散介質之相對介電常數隨頻率變化圖；(b) 計算域於真空與 Debye 介質中；(c) 計算域於真空與 Lorentz 介質中；(d) 計算域於真空與 Drude 介質中。	70
5.11	3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ 和 $200 \times 200 \times 200$ 的網格。在色散介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值並作一比較。	71
5.12	在 $44 \times 44 \times 44$ 和 $200 \times 200 \times 200$ 網格點的計算域于 $z = 0$ 之 2D 剖面示意圖。	71
5.13	3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ (present) 和 $200 \times 200 \times 200$ (reference) 網格點，在 Debye 介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值，以及相對誤差分析。(a) P 點 E_z 值之比較；(b) Q 點 E_z 值之比較；(c) R 點 E_z 值之比較；(d) P、Q 和 R 點之相對誤差分析。	72
5.14	3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ (present) 和 $200 \times 200 \times 200$ (reference) 網格點，在 Lorentz 介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值，以及相對誤差分析。(a) P 點 E_z 值之比較；(b) Q 點 E_z 值之比較；(c) R 點 E_z 值之比較；(d) P、Q 和 R 點之相對誤差分析。	73

5.15	3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ (present) 和 $200 \times 200 \times 200$ (reference) 網格點，在 Drude 介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值，以及相對誤差分析。(a) P 點 E_z 值之比較；(b) Q 點 E_z 值之比較；(c) R 點 E_z 值之比較；(d) P、Q 和 R 點之相對誤差分析。	74
5.16	全場、散射場及軸向完美匹配層之設置圖	75
5.17	一維入射波於無散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值 ($\Delta t = 2668.5 fs$)。 (a) 初始；(b) 時間步為 600；(c) 時間步為 850；(d) 時間步為 1200； (e) 時間步為 1350；(f) 時間步為 1600	76
5.18	不同材料常數之分佈圖	77
5.19	在等位函數平滑參數為 $\xi = 1, 2$ 時，交界面平滑度之比較圖	77
5.20	三維米氏散射問題之示意圖	78
5.21	一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值 ($\Delta t = 2668.5 fs$)。 (a) 時間步為 600；(b) 時間步為 850；(c) 時間步為 1200；(d) 時間步為 1350；(e) 時間步為 1600；(f) 時間步為 1900	79
5.22	二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 時之半解析解	80
5.23	二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 之數值解	80
5.24	二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 時半解析解與數值解等高線圖之比較圖	81
5.25	二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 半解析解與數值解剖面圖之比較。(a) $E_z(x, 0)$ ；(b) $E_z(0, y)$	82

- 5.26 二維米氏 (Mie scattering) 散射問題在不同材料性質係數情況下之半解析解與數值之比較圖。(a) ϵ_r 為 12 約為矽 (Silicon) 材料介電常數; (b) ϵ_r 為 20 約為丙酮 (Acetone) 材料介電常數; (c) ϵ_r 為 50 約為甘油 (Glycerin) 材料介電常數; (d) ϵ_r 為 100 約為二氧化鋇 (Barium binoxide) 材料介電常數, 資料取自 www.engineeringtoolbox.com 83
- 5.27 設置三個觀察面 (monitor plane) 以監測電場隨時間之變化 84
- 5.28 三維米氏散射模擬, 一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 1 (monitor plane 1) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs) 85
- 5.29 三維米氏散射模擬, 一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 2 (monitor plane 2) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs) 86
- 5.30 三維米氏散射模擬, 一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 3 (monitor plane 3) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs) 87
- 5.31 三維米氏散射模擬, 一維入射波於四根散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 1 (monitor plane 1) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs) 88
- 5.32 光子晶體通道之示意圖 89

- 5.33 當歸一頻率 (normalized frequency) 為 0.353 (c/a) 時，電場 E_z 之分布 ($\Delta t = 0.05337 fs$)。 (a) 時間步為 575; (b) 時間步為 1075; (c) 時間步為 1750; (d) 時間步為 2325 90
- 5.34 當時間步為 2325 時，比較歸一頻率 (normalized frequency) 為 0.353 (c/a) 與 0.206 (c/a) 之結果比較圖 ($\Delta t = 0.05337 fs$)。 (a) 0.353 (c/a); (b) 0.206 (c/a) 91
- 5.35 當時間步為 2325、歸一頻率 (normalized frequency) 為 0.353 (c/a) 時 ($\Delta t = 0.05337 fs$)，與文獻比較之結果 (a) Present method; (b) Mekis et al. [38] 92





表格目錄

4.1	計算經長時間 T 為 30(s) 的情況， $Cr = 0.2$ 及 $Cr = 0.05$ 之誤差以及所需花費的 CPU TIME(s) 比較。	39
4.2	在天頂角 (Zenith angle) θ 為 $0^\circ \& 90^\circ$ 、 $30^\circ \& 60^\circ$ 和 45° ，配合方位角 (Azimuth angle) ϕ 為 $0^\circ \& 90^\circ$ 、 $6^\circ \& 84^\circ$ 、 $9^\circ \& 81^\circ$ 、 $12^\circ \& 78^\circ$ 、 $22.5^\circ \& 67.5^\circ$ 、 $30^\circ \& 60^\circ$ 、 $36^\circ \& 54^\circ$ 、 $6^\circ \& 84^\circ$ 和、 45° 情況下所對應的係數 $a_1 \sim a_3$ 的分布情況。當天頂角 (Zenith angle) θ 為 90° 時，可得到二維情況下的係數；當天頂角 (Zenith angle) θ 為 90° 和方位角 (Azimuth angle) ϕ 為 0° 或 90° 時，可得到一維情況下的係數。	40
4.3	在三維情況下，本文所提出的 FDTD 數值方法與 Yee 方法在穩定性範圍的比較。	41
4.4	表列為四種數值方法的數值色散關係式。編號 1, 2, 3, 4 分別表示本文所提出的數值方法、box scheme [26]、symplectic method [26]、Yee schemes [26]	41
5.1	當模擬時間為 $T=5$ (s) 時，格點數為 51^2 、 61^2 、 71^2 和 81^2 時，利用離散方法與 Yee 的離散方法比較計算所得之 $L_2 - error\ norms$ 和 CPU 時間。	63



5.2 當模擬時間為 $T=5(s)$ 時，計算至相近之 $L_2 - error\ norms$ 時，比較利用離散方法與 Yee 的離散方法所需網格點數與花費之 CPU 的時間。 63

5.3 當模擬時間為 $T=5(s)$ 時，格點數為 51^3 、 61^3 、 71^3 和 81^3 時，比較利用離散方法與 Yee 的離散方法計算所得之 $L_2 - error\ norms$ 和 CPU 時間。 63

5.4 當模擬時間為 $T=5(s)$ 時，計算至相近之 $L_2 - error\ norms$ 時，比較利用離散方法與 Yee 的離散方法所需網格點數與花費之 CPU 的時間。 63



第一章

緒論

1.1 前言

1873年馬克斯威爾(Maxwell)建立電磁場基本方程以來，電磁波的理論與應用已有相當長的歷史。目前，電磁理論及電磁波與目標物之間相互作用的研究已深入到各個領域，其應用面亦非常的廣泛，如無線電波傳播、光纖通訊與移動通訊、雷達技術、微波、天線、目標隱身、地下電磁探測、電磁兼容等等。電磁波在實際環境中的傳播過程十分地複雜，如各種複雜目標物的散射，複雜結構天線的輻射，在波導和微帶結構中的傳播，實際通訊中城市環境、複雜地形及海面對電磁波傳播的影響，地下電磁探測地殼不均勻對電磁波的響應等，故深入地研究電磁波的特性有著十分重要的意義。由於環境的複雜性，往往需要透過數值模擬分析方能得到在實際環境下的電磁波特性。因此，計算電磁學(Computational Electromagnetics)結合科學計算、計算機硬體技術、和電磁理論等相關的科學知識，儼然已成為一門重要的學問，並正歷經著日新月異的發展。

科學計算(Scientific Computing)目前已經成為一門重要的學問，它被廣泛的應用於科學、工程、經濟、管理等各類領域，主要的做法是先以嚴謹的數學模型描述實際的物理現象，透過適當之數值方法至電腦上計算取得結果並進行分析；因此，數值方法可說是真實世界與科學計算之間重要的連接橋梁。對於電磁理論及其應用研究，係以電磁理論為基礎，透過高性能計算技術為手段，並運用數值分析所提供的各種方法，已經發展成一門新興的應用科學。根據計算域的不同，常用於計算電磁學的數值方法可分為頻域法與時域法兩大類。頻域

法主要有頻域有限差分 (Frequency Dependent Finite Difference, FDFD) 方法、矩量法 (Moment Method, MoM) 和有限元素法 (Finite Element Method, FEM) 等；而時域法主要有時域有限差分 (Finite Difference Time Domain, FDTD) 方法、時域有限體積 (Finite Volume Time Domain, FVTD) 法、和時域積分方程 (Time Domain Integral Equation, TDIE) 法。在這些方法中，時域有限差分 (FDTD) 方法是一種對馬克斯威爾方程組進行直接求解的數值方法，它既可以分析時諧場，又能計算寬頻帶的瞬態場，同時也能處理複雜外型目標的電磁散射或非均勻、各向異性色散介質的電磁問題，對電磁散射的分析有其獨到的優勢，已成為處理各類介質電磁散射問題的主要方法，預期未來在更進步電腦硬體環境下，有更廣闊的發展與應用前景。

1.2 文獻回顧

1966 年 Yee [1] 首次提出了時域有限差分 (Finite Difference Time Domain, FDTD) 方法，並應用於電磁波時域計算，此一方法得到非常迅速的發展與廣泛的應用。時域有限差分 (Finite Difference Time Domain, FDTD) 方法係直接由馬克斯威爾旋度方程出發，通過對電場 E 和磁場 H 的各分量在空間和時間上採取交替的離散方式，即每一個 E (或 H) 場分量周圍有四個 H (或 E) 場分量的環繞，此一電場與磁場交錯的方式被稱為 (Yee's cell)。應用這種離散方式，將含時間變量的馬克斯威爾旋度方程轉化為一組時域之離散差分方程，然後沿時間軸逐步推進地求解空間電磁場，此一方法清楚地顯示了電磁波傳遞的過程，亦便於分析與設計。在 1975 年 Taflove 等用 FDTD 計算非均勻介質在正弦波入射時的穩態時諧場電磁散射，並提出了數值穩定的分析方法。Taflove 于 1988 年詳細地研究了 Yee 算則的數值色散誤差。

當時由 Yee 所提出的 Yee's cell 僅用來模擬電磁波在空間上的傳遞；為了在有限計算區域模擬無限空間中的電磁問題，必須在計算區域的截斷邊界上設置吸收邊界條件，自從 FDTD 方法產生以來，對於吸收邊界的研究一直是個熱門的主題。吸收邊界方法從最初于 1969 年由 Taylor 所提出之插值方法的吸收邊界條件，後來並廣泛地被採用的 Mur 吸收邊界 (Absorbing Boundary Condition, ABC) [2]，及至於上世紀 90 年代所發展的完全匹配層 (Perfectly Matched Layer, PML) [3,4]，其吸收的效果越來越好。

近年來，人們以 FDTD 方法應用於色散介質，並已進行了大量的研究。目前，FDTD 適用於截斷色散介質的最常用和有效的吸收邊界條件稱為卷積完全

匹配層 (Convolutional Perfect Match Layer, CPML) [5]。

所謂色散介質，是指介質特性參量會隨頻率不同而有所不同的介質，它是眾多電磁介質中的一種。由於自然界的絕大部分物質，如雪、冰、水、土壤、植被、大氣層、生物體組織、等離子體、人工介質等，其電磁屬性與頻率有關，故都屬於色散介質。另有一些物質，在一定頻率的電磁波作用下，也能表現出色散的特性，如光波段的金屬等。近年來，人們研究和掌握色散介質的瞬態電磁特性的願意越來越強，需求已越來越迫切。這一方面是因為隨著電子技術的迅速發展，在許多領域中電磁信號越來越趨向於高頻化和寬帶化，介質的色散特性對電磁信號的傳播、散射、輻射等影響也越來越大。另一方面，隨著人們探索自然活動不斷地深入，領域不斷地擴大，因而遇到了許多新的問題，故提出了許多新的需求，如在空間探測中所遇到的大氣層和電離層、等離子體隱身、新材料科技技術等都涉及色散介質。因此，建立色散介質瞬時電磁特性的分析方法，對國防、空間探測、生物電子科學、通信、遙感、醫療技術、地質探測、材料科學等許多領域的發展及應用都有極深遠的重要意義。

此外，在 1982 年 Umashankar 和 Taflove 採用 FDTD 計算雷達散射截面 (RCS)，將計算區域劃分為總場 / 散射場區 (Total field / Scatter field, TF/SF) 的情況，是散射計算中入射波設置的一種簡便有效的方法。

1.3 研究動機

就物理意義而言，電磁波傳遞行為之時間與空間有一定的相關性，即角頻率 (Angular frequency) 與波數 (Wave number) 的關係；傳統的 FDTD 方法一般採用蛙跳格式 (即空間與時間離散階為二階準確之中央差分格式)，嚴格看來，其所使用的數值方法與物理意義上顯然並無實質的連結，為了彌補這些方法在物理意義上的不足，本文嘗試以電磁波之色散關係為方法設計的核心，將在時間與空間離散上取得直接的連結，並利用具守恆性質的時間離散，在空間上搭配具最佳色散關係保持之交錯網格的空間離散，以期電磁波傳遞行為在時間與空間有著更正確的緊密結合，旨在確保每一個模擬的時間步過程中，皆能得到具物理意義的最佳色散關係解。

自然界中絕大部分的物質，其相對介電常數 (Relative permittivity) 皆會隨頻率而變化，因無法由相對介電常數與頻率無關之自由空間馬克斯威爾方程組求解，故近年出現了大量處理色散介質 FDTD 方法，包括 Lubbers 等提出的 RC-FDTD 方法 [6]、Kelley 等採用電場的分段線性近似改善了 RC-FDTD 方法

計算精度的 PLRC-FDTD 方法 [7]、Siushansian 等採用離散的梯形遞歸卷積近似以改善 RC-FDTD 方法計算精度的 TRC-FDTD 方法 [8]、及本文所使用的輔助方程 ADE-FDTD 方法 [9]。

輔助方程 ADE-FDTD 的原理是將頻域下相對介電常數之函數做一傅立葉的變換，經整理後再轉回時域，以遞迴函數或附屬微分的形式來更新電場，再將馬克斯威爾方程中微分上形式的旋度方程作離散，再以電、磁場交替地計算，以便得到隨時間變化的整個空間內的電磁場值。

1.4 研究目標

目前時域有限差分法大多沿用 Yee 所提出之交錯式網格 (Yee's cell) 求解馬克斯威爾方程組，已能適當地模擬電磁波的行為。但大部的時域有限差分方法其時間離散與空間離散卻是彼此獨立，而在電磁波傳遞的物理行為上，時間與空間必須是相依關係的；換言之，角頻率與波數之間的關係（亦稱為色散關係 (Dispersion relation)）需要被考慮在近似的模擬過程中。

我們以理想的馬克斯威爾方程為核心的概念，使用具辛結構 (symplecticity) 的時間離散方法，以確保滿足方程中所當具有的守恆性質，並以能量守恆的觀點檢驗時間格式是否滿足守恆性質。往外延伸至色散介質中傳播的電磁波方程，進而處理色散介質所造成的極化電流項 (Polarization current density)。對於波傳遞之時間與空間的相依關係，我們以色散關係保持 (Dispersion relation preserving) 作為核心，引入平面波於方程式中，使得時間與空間在計算上取得聯結，藉此以發展一具最佳色散關係式之馬克斯威爾方程的離散方法，並針對各向異性之相速度、與色散關係保持上做一完整的分析，並進一步地將此一方法應用於色散介質相關的問題求解，最後，並應用於實際題目的求解。

1.5 論文大綱

本文本諸理想的馬克斯威爾方程與色散關係方程式的核心概念，發展出一具最佳數值色散關係式之交錯格式的空間離散方法。首先，於第一章中介紹計算電磁波的相關背景與發展之文獻回顧，以及本研究的動機與目標。本文第二章將描述馬克斯威爾方程組，並引用完美匹配層的觀念於無限域的問題模擬。第三章將根據馬克斯威爾方程組之物理性質，以物理 / 數學皆合宜之時間離散，推導出具色散關係保持之空間系統離散式。第四章針對具色散關係式

保持之離散式進行數值色散關係以及各向異性之分析；第五章將所開發出來之空間離散，進程式驗證以證明其可靠性與準確性。此外，將應用經驗證無誤的程式求解單向入射平面波之全場 / 散設場等實際問題。三種典型的色散介質 Debye、Lorentz、Drude 介質模型的電磁波模擬亦在本文的研究範疇內，最後，在第六章中將做一結論，並說明未來可能發展的遠景。



第二章

電磁波方程 - 馬克斯威爾方程式

2.1 法拉第 / 安培 / 高斯方程組及其推導

馬克斯威爾方程組係由法拉第定律、安培定律及高斯定律所組成。在時域下，它們可以分別表示成如下的安培定律、法拉第定律表示式，

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \vec{J}_m, \quad (2.1.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}, \quad (2.1.2)$$

以及高斯定律所組成的限制方程式

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.1.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho. \quad (2.1.4)$$

上述方程組中的 \vec{H} 、 \vec{E} 、 \vec{B} 和 \vec{D} 分別為磁場強度 (Magnetic field intensity)、電場強度 (Electrical field intensity)、磁位移 (Magnetic displacement) 和電位移 (Electrical displacement)。式 (2.1.2) 與 (2.1.1) 中之 \vec{J} 和 \vec{J}_m 分別代表電流密度 (Electric current density) 和磁流密度 (Equivalent magnetic current density)。于 (2.1.4) 之 ρ 代表電荷密度 (Electrical charge density)。在各向同性 (Isotropic) 的線性介質中需滿足如下的本構關係式

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \vec{H}, \quad \vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad \vec{J}_m = \sigma_m \vec{H}. \quad (2.1.5)$$

上式中， ϵ 和 μ 分別表示介電係數 (Electric permittivity) 和磁導係數 (Magnetic permeability)， σ 和 σ_m 分別為電導率 (Electric conductivity) 和磁導率 (Equivalent magnetic loss) (分別代表介質的損耗和磁損耗)。本文所推導的馬克斯威

爾方程之離散方法居于顯式的格式，這是用來模擬電磁波於簡單介質 (Simple medium) 中傳播的情況，所以代表材料性質係數的導磁係數 (Magnetic permeability, μ) 以及介電係數 (Electric conductivity, ϵ) 將視為常數。兩材料性質係數主要在描述材料之介電性質以及磁特性且皆為正。其中， $\epsilon = \epsilon_0 \cdot \epsilon_r$ 而 $\mu = \mu_0 \cdot \mu_r$ ；兩材料性質係數決定了波之傳播速度 c ($c \equiv 1/\sqrt{\epsilon\mu} (\approx 3.0 \times 10^8 m/s)$)

本論文，將在完美電導體 (Perfectly electric conducting) 的空間下求解上述的方程式，除了磁性材料外，相對磁導率 (Relative magnetic permeability) 亦假設為 $\mu_r = 1$ ；對於自由空間，相對介電係數 $\epsilon_r = 1$ ，對於不同材料之介質，其 ϵ_r 值滿足 $\epsilon_r \geq 1$ 。

上述之雙曲線型方程式 (Hyperbolic equations) 將於有限域內求解之，故需截斷物理空間。於截斷邊界 (truncated boundary) 上，吾人假設為完美導體 (perfectly conducting)

$$\vec{n} \times \vec{E} = 0, \quad (2.1.6)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{H} = 0, \quad (2.1.7)$$

其中 \vec{n} 代表向外的單位法向量 (unit outward normal vector)。

2.2 法拉第 / 安培方程組之數學特性

依上節所述之假設，在無源且均勻各向同性簡單介質下之馬克斯威爾方程組可以改寫為

$$\frac{1}{\mu}(\nabla \times \vec{E}) = -\frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad (2.2.1)$$

$$\frac{1}{\epsilon}(\nabla \times \vec{H}) = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (2.2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.2.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0. \quad (2.2.4)$$

式 (2.2.3-2.2.4) 以及式 (2.1.5) 並非嚴格地獨立於馬克斯威爾方程組 [10] 之外；即式 (2.2.3-2.2.4) 可視為馬克斯威爾方程組之限制條件。將式 (2.2.1) 及 (2.2.2) 兩端分別取散度算子 (divergence operator)，可得知出高斯定律係隱含於法拉第定律與安培定律之中。

在錯離網格系統中，吾人可直接求解雙曲線之系統方程 (2.2.1-2.2.2)，即可得到瞬時之電場與磁場。對於式 (2.2.3-2.2.4) 之無散度條件 (divergence-free constraint conditions) 之限制，吾人將於程式驗證中進行分析。

馬克斯威爾方程組可以利用漢彌爾頓動力系統 (Hamiltonian dynamical system) 表示之

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vec{H} \\ \vec{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{0} & -\underline{I} \\ \underline{I} & \underline{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{H} / \delta \vec{H} \\ \delta \mathbf{H} / \delta \vec{E} \end{pmatrix}, \quad (2.2.5)$$

其中，漢彌爾頓方程 (Hamiltonian function, \mathbf{H}) 可以下式表示之 [11]

$$\mathbf{H}(\vec{H}, \vec{E}) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon} \vec{H} \cdot \nabla \times \vec{H} + \frac{1}{\mu} \vec{E} \cdot \nabla \times \vec{E} \right) d\Omega. \quad (2.2.6)$$

根據 Kole 等人 [12] 之研究，式 (2.2.1-2.2.2) 可寫成 $\frac{\partial}{\partial t} \vec{\psi}(t) = \underline{G} \vec{\psi}(t)$ ，其中 $\vec{\psi}(t) \equiv (\vec{m}(t), \vec{n}(t))^T$ ($= \mu^{1/2} \vec{H}(t), \epsilon^{1/2} \vec{E}(t)$)^T。上述之 \underline{G} 矩陣可以下列之反對稱矩陣 (skew-symmetric matrix) 表式之 [12]

$$\underline{G} = \begin{pmatrix} 0 & -\mu^{-1/2} \nabla \times (\epsilon^{-1/2}) \\ \epsilon^{-1/2} \nabla \times (\mu^{-1/2}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.7)$$

馬克斯威爾方程組可由 $\partial \vec{\psi}(t) / \partial t = \underline{G} \vec{\psi}(t)$ 表示之，如此吾人可得該方程之通解 $\vec{\psi}(t) = \exp(t \underline{G}) \vec{\psi}(t=0)$ ，其中 $\exp(t \underline{G})$ 顯示了馬克斯威爾方程組之解係時間演進呈指數的變化。將向量 $\vec{\psi}$ 特徵化為 $\int_{\Omega} \epsilon \vec{E} \cdot \vec{E} + \mu \vec{H} \cdot \vec{H} d\Omega$ ，它與電磁場之能量密度 (energy density, $\mathbf{w}(t)$) 有直接之關聯，即

$$\mathbf{w}(t) = \int_{\Omega} \epsilon \vec{E} \cdot \vec{E} + \mu \vec{H} \cdot \vec{H} d\Omega. \quad (2.2.8)$$

式 (2.2.8) 之能量密度不會隨時間改變。對於式 (2.2.6) 及 (2.2.8) 隨時間皆不變之性質，吾人可將其作為程式驗證之用。



2.3 色散介質

常見的色散介質模型包括德拜模型 (Debye model)、洛倫茲模型 (Lorentz model) 和德魯模型 (Drude)，它們單極介電係數的表達式如下：

(1) Debye 介質

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + I\omega\tau} + \frac{\sigma}{I\omega\epsilon_0} \equiv \epsilon_\infty + \frac{\Delta\epsilon}{1 + I\omega\tau} + \frac{\sigma}{I\omega\epsilon_0} \quad (2.3.1)$$

(2) Lorentz 介質

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\Delta\omega_p^2}{\epsilon_p^2 + 2I\omega\delta_p - \omega^2} + \frac{\sigma}{I\omega\epsilon_0} \quad (2.3.2)$$

(3) Drude 介質

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{I\omega\gamma_p - \omega^2} + \frac{\sigma}{I\omega\epsilon_0} \quad (2.3.3)$$

其中， $\Delta\epsilon = \epsilon_s - \epsilon_\infty$ 。 ϵ_s 為靜態或零頻時的相對介電係數、 ϵ_∞ 為無窮大頻率時的相對介電係數、 δ_p 為阻尼係數、 ω_p 為媒質的諧振頻率 (Resonant frequency)、 τ 為極點鬆弛時間 (Relaxation time)、且 $\gamma_p = 1/\tau$ 為極點鬆弛時間的倒數。

考慮式 (2.3.1-2.3.3)，式 (2.1.2) 安培定律旋度方程均可表示為

$$\nabla \times \vec{H} = \epsilon_0\epsilon_\infty \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} + \vec{J}_d, \quad (2.3.4)$$

其中 \vec{J}_d 項為介質的色散極化所引起的極化電流項 (Polarization current density)，對於不同類型的色散介質，它們分別滿足如下的不同輔助偏微分方程

$$\vec{J}_d + \tau \frac{\partial \vec{J}_d}{\partial t} = \epsilon_0 \Delta \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (Debye) \quad (2.3.5)$$

$$\omega_p^2 \vec{J}_d + 2\delta_p \frac{\partial \vec{J}_d}{\partial t} + \frac{\partial^2 \vec{J}_d}{\partial t^2} = \epsilon_0 \Delta \epsilon \omega_p^2 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (Lorentz) \quad (2.3.6)$$

$$\gamma_p \frac{\partial \vec{J}_d}{\partial t} + \frac{\partial^2 \vec{J}_d}{\partial t^2} = \epsilon_0 \omega_p^2 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (Drude) \quad (2.3.7)$$

在色散介質的 FDTD 計算方面，如前章所述，有遞推卷積 (RC) 法、輔助方程 (ADE) 法、Z 變換法、分段線性遞推卷積 (PLRC) 等方法。本文在色散介質的研究將採用輔助方程 (ADE) 法，並針對上述的典型三種色散介質作一詳細推導之。



2.4 卷積完美匹配吸收層

在自然界中，大部分電磁波問題需要在無限域下模擬方能捕捉到其真實的物理本質，礙於電腦的記憶體限制，理論上不可能進行用無限制的計算及儲存大量的數據。當初 Yee 所提出的 FDTD 方法時，計算區域的人為截斷所導致的數值回波問題即已顯現，這也導致了 FDTD 在最初的十多年發展十分地緩慢，直到 1981 年荷蘭科學家 G.Mur 提出了 Mur 吸收邊界條件 [2]，1994 年 Berenger 提出了高吸收效能的完美匹配層 (Perfectly Matched Layer, PML) 邊界條件 [3]，才使得 FDTD 方法才煥發出新的生命力。目前為止，已發展出數種 PML 方法，即 Gedney 所提出的軸向完美匹配層 (uniaxial PML, UPML) [13]，Abarbanel 所提出的各向異性完美匹配層 (anisotropic PML, APML) [14] 等方法。本文使用的吸收邊界為卷積完美匹配層 (convolution PML, CPML) [5]，其優點為是它對於消逝波 (evanescent waves)，具有很好的吸收能力，此外尚能大幅度減少記憶體的占用。除了吸收效果好之外，且具普適性，CPML 吸收邊界完全獨立於 FDTD 計算域內的介質，可以不做任何修改地應用到各向同性、各向異性、吸收、色散或是非線性介質的計算中。因此，CPML 相對於 UPML 吸收邊界，更適用於非自由空間中目標散射特性的研究。在此，我們給出了其張量係數 (tensor coefficient) s_w 的形式 [15]

$$s_w = \kappa_w + \frac{\sigma_w}{a_w + j\omega\epsilon_0}; \quad w = x, y, z \quad (2.4.1)$$

式 2.4.1 所描述的是電參數沿某方向的一個空間函數，引入擴展座標 (stretched-coordinate) 轉換關係

$$\tilde{w} \rightarrow \int_0^w s_w(w') dw'; \quad w = x, y, z. \quad (2.4.2)$$

透過傅立葉轉換關係，取 \mathfrak{S}^{-1} 為傅立葉逆變換算子，定義

$$\begin{aligned} \bar{s}_w &= \mathfrak{S}^{-1} \left(\frac{1}{\kappa_w + \sigma_w} \right) \\ &= \frac{\delta(t)}{\kappa_w} - \frac{\sigma_w}{\epsilon_0 \kappa_w^2} \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 \kappa_w} + \frac{a_w}{\epsilon_w} \right) t \right] u(t) \equiv \frac{\delta t}{\kappa_w} + \zeta_w(t) \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

(其中 $u(t)$ 和 $\delta(t)$ 分別是單位步階函數 (Unit step function) 和脈衝函數 (Delta



function))，可得馬克斯威爾方程組的時域形式：

$$\begin{aligned}\frac{\partial D_x}{\partial t} &= \left(\frac{1}{k_x} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{k_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \zeta_y * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \zeta_z * \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \\ \frac{\partial D_y}{\partial t} &= \left(\frac{1}{k_z} \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{1}{k_x} \frac{\partial H_z}{\partial x} + \zeta_z * \frac{\partial H_x}{\partial z} - \zeta_x * \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial D_z}{\partial t} &= \left(\frac{1}{k_x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{k_y} \frac{\partial H_x}{\partial y} + \zeta_x * \frac{\partial H_y}{\partial x} - \zeta_y * \frac{\partial H_x}{\partial y} \right),\end{aligned}\quad (2.4.4)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial B_x}{\partial t} &= - \left(\frac{1}{k_x} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{1}{k_z} \frac{\partial E_y}{\partial z} + \zeta_y * \frac{\partial E_z}{\partial y} - \zeta_z * \frac{\partial E_y}{\partial z} \right), \\ \frac{\partial B_y}{\partial t} &= - \left(\frac{1}{k_z} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{1}{k_x} \frac{\partial E_z}{\partial x} + \zeta_z * \frac{\partial E_x}{\partial z} - \zeta_x * \frac{\partial E_z}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial B_z}{\partial t} &= - \left(\frac{1}{k_x} \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{1}{k_y} \frac{\partial E_x}{\partial y} + \zeta_x * \frac{\partial E_y}{\partial x} - \zeta_y * \frac{\partial E_x}{\partial y} \right).\end{aligned}\quad (2.4.5)$$

在 FDTD 中 CPML 吸收邊界內電磁場的迭代計算可透過 (2.4.4) 和 (2.4.5) 的離散來實現。計算主要的困難是離散卷積 $\zeta_w * (\partial_v / \partial w)$ 實現，因為直接進行卷積計算要消耗大量的記憶體和計算時間。透過 Luebbers 和 Hunsberger 所採用的遞推卷積 (RC) [6] 技術，可以有效的解決此一問題。

定義式 (2.4.3) 中脈衝 $\zeta(t)$ 的離散響應 $Z_w(m)$ 為

$$Z_w(m) = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \zeta_w(\tau) d\tau \approx -\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 \kappa_w^2} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \exp \left[-\left(\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 \kappa_w} + \frac{a_w}{\epsilon_0} \right) \tau \right] d\tau \quad (2.4.6)$$

$$= c_w \exp \left[-\left(\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 \kappa_w} + \frac{a_w}{\epsilon_0} \right) m\Delta t \right] \quad (2.4.7)$$

其中

$$c_w = \frac{\sigma_w}{\sigma_w \kappa_w + \kappa_w^2 a_w} \left[\exp \left(-\left(\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 \kappa_w} + \frac{a_w}{\epsilon_0} \right) \Delta t \right) - 1 \right] \quad (2.4.8)$$

式 (2.4.4) 中 ζ_w 和 $\partial H_v / \partial w$ 卷積離散形式可以近似成

$$\psi_{w,v}(n) = \zeta_w(t) * \frac{\partial}{\partial w} H_v(t) |_{t=n\Delta t} \approx \sum_{m=0}^{n-1} Z_w(m) \frac{\partial}{\partial w} H_v(n-m) \quad (2.4.9)$$

由式 (2.4.9) 可看出，計算 $n\Delta t$ 時刻的離散卷積 ψ 需經 n 次的乘法和加法，這在實際的計算中將嚴重地影響計算速度。Luebbers 和 Hunsberger 將式 (2.4.9) 寫為以下的遞推形式：

$$\psi_{w,v}(n) = b_w \psi_{w,v}(n-1) + c_w \frac{\partial}{\partial w} H_v(n) \quad (2.4.10)$$

其中， c_w 如式 (2.4.8)， b_w 為

$$b_w = \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 k_w} + \frac{a_w}{\epsilon_0} \right) \Delta t \right]. \quad (2.4.11)$$

如此一來，式 (2.4.10) 中的 $\psi_{w,v}$ 可以透過簡單的時間循環迭代來實現應用 CPML 吸收邊界之用。最後，我們將 ζ_w 和 $\partial H_v / \partial w$ 的卷積離散由 $\psi_{w,v}(n)$ 取而代之，並延伸至不同材料色散介質之特性應用，可得到如下具 CPML 吸收邊界層之馬克斯威爾方程組的時域形式：

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{1}{k_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{k_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} - J_{d,x} + \psi_{E_{x,y}} - \psi_{E_{x,z}} \right), \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{1}{k_z} \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{1}{k_x} \frac{\partial H_z}{\partial x} - J_{d,y} + \psi_{E_{y,z}} - \psi_{E_{y,x}} \right), \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{1}{k_x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{k_y} \frac{\partial H_x}{\partial y} - J_{d,z} + \psi_{E_{z,x}} - \psi_{E_{z,y}} \right), \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_x}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \left(\frac{1}{k_y} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{1}{k_z} \frac{\partial E_y}{\partial z} + \psi_{H_{x,y}} - \psi_{H_{x,z}} \right), \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \left(\frac{1}{k_z} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{1}{k_x} \frac{\partial E_z}{\partial x} + \psi_{H_{y,z}} - \psi_{H_{y,x}} \right), \\ \frac{\partial H_z}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \left(\frac{1}{k_x} \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{1}{k_y} \frac{\partial E_x}{\partial y} + \psi_{H_{z,x}} - \psi_{H_{z,y}} \right). \end{aligned} \quad (2.4.13)$$

其中

$$\begin{aligned} \psi_{E_{x,y}}^n &= b_y \cdot \psi_{E_{x,y}}^{n-1} + c_y \cdot \frac{\partial H_z^n}{\partial y}, & \psi_{E_{x,z}}^n &= b_z \cdot \psi_{E_{x,z}}^{n-1} + c_z \cdot \frac{\partial H_y^n}{\partial z}, \\ \psi_{E_{y,x}}^n &= b_x \cdot \psi_{E_{y,x}}^{n-1} + c_x \cdot \frac{\partial H_z^n}{\partial x}, & \psi_{E_{y,z}}^n &= b_z \cdot \psi_{E_{y,z}}^{n-1} + c_z \cdot \frac{\partial H_x^n}{\partial z}, \\ \psi_{E_{z,x}}^n &= b_x \cdot \psi_{E_{z,x}}^{n-1} + c_x \cdot \frac{\partial H_y^n}{\partial x}, & \psi_{E_{z,y}}^n &= b_y \cdot \psi_{E_{z,y}}^{n-1} + c_y \cdot \frac{\partial H_x^n}{\partial y}, \\ \psi_{H_{x,y}}^{n+\frac{1}{2}} &= b_y \cdot \psi_{H_{x,y}}^{n-\frac{1}{2}} + c_y \cdot \frac{\partial E_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y}, & \psi_{H_{x,z}}^{n+\frac{1}{2}} &= b_z \cdot \psi_{H_{x,z}}^{n-\frac{1}{2}} + c_z \cdot \frac{\partial E_y^{n+\frac{1}{2}}}{\partial z}, \\ \psi_{H_{y,x}}^{n+\frac{1}{2}} &= b_x \cdot \psi_{H_{y,x}}^{n-\frac{1}{2}} + c_x \cdot \frac{\partial E_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x}, & \psi_{H_{y,z}}^{n+\frac{1}{2}} &= b_z \cdot \psi_{H_{y,z}}^{n-\frac{1}{2}} + c_z \cdot \frac{\partial E_x^{n+\frac{1}{2}}}{\partial z}, \\ \psi_{H_{z,x}}^{n+\frac{1}{2}} &= b_x \cdot \psi_{H_{z,x}}^{n-\frac{1}{2}} + c_x \cdot \frac{\partial E_y^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x}, & \psi_{H_{z,y}}^{n+\frac{1}{2}} &= b_y \cdot \psi_{H_{z,y}}^{n-\frac{1}{2}} + c_y \cdot \frac{\partial E_x^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y}. \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

式 (2.4.14) 中所述之 b_w 及 c_w ($w = x$ or y)，可表示成：

$$b_w = e^{-\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 k_w} + \frac{a_w}{\epsilon_0} \Delta t}; c_w = \frac{\sigma_w}{\sigma_w k_w + k_w^2 a_w} \left(e^{-\frac{\sigma_w}{\epsilon_0 k_w} + \frac{a_w}{\epsilon_0} \Delta t} - 1 \right). \quad (2.4.15)$$



其中

$$\begin{aligned}\sigma_w &= \sigma_{w,max} \left(\frac{d-w}{d} \right)^m, \\ a_w &= a_{w,max} \left(\frac{d-w}{d} \right)^{m_a}; 0 \leq w \leq d, \\ k_w &= 1 + (k_{w,max} - 1) \cdot \left(\frac{d-w}{d} \right)^m.\end{aligned}\quad (2.4.16)$$

式 2.4.16 中的 d 代表 CPML 厚度，而 σ_{max} 之大小可以下式計算之

$$\sigma_{w,max} = \frac{0.8(m+1)}{\eta_0 \Delta \sqrt{\epsilon_r \mu_r}}, \quad (2.4.17)$$

其中 $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ 為真空中的波阻抗。

圖 2.1 為 CPML 之示意圖，利用圖 2.2 說明了以理想馬克斯威爾方程為核心概念，並延伸至不同材料色散介質特性應用 CPML 的概念圖。本文除了探討自由空間 ($\epsilon_r = 1$) 電磁波傳遞的問題外，特別針對三種典型色散介質材料之電磁波傳遞分析，故此時的 ϵ_r 由無窮大頻率時的相對介電係數 ϵ_∞ 給入，讓不同材料性質在進行特定頻帶範圍下電磁波傳遞時具不同的物理特性。根據 [16] 我們給出了三種色散介質之介電係數隨頻率變化之參數 (參閱圖 2.3-2.4 所示)，並在三維的情況下檢驗其吸收效果。

在 FDTD 計算中取空間離散間隔為 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 8.565E - 004$ ，即每個波長內具 20 個格點，時間之離散間隔 $\Delta t = \Delta x/5c$ 。設置如下之高斯波源

$$Gaussian\ pulse = \cos(2\pi ft) e^{-\frac{4\pi(t-t_0)^2}{d^2}} \quad (2.4.18)$$

其 $d=200\Delta t$ 與 $t_0 = 6/f$ 。該設定之高斯波源之中心頻率為 17.5GHz，且頻帶範圍於 5GHz~30GHz 之間，即三種色散介質作用之範圍，(如圖 2.5 所示)。計算空間 $90 \times 90 \times 90$ 為個網格，且波源置於中央，吸收邊界厚度為 $10\Delta x$ ，並針對平面邊界點 P、角落邊界點 Q 以及角頂邊界點 R 作為反射電場 E_z 的觀察點 (如圖 2.6-2.7 所示) 來檢驗吸收效果，如圖 2.8-2.9 包含了自由空間、Debye 介質、Lorentz 介質與 Drude 介質的吸收邊界的反射狀況。

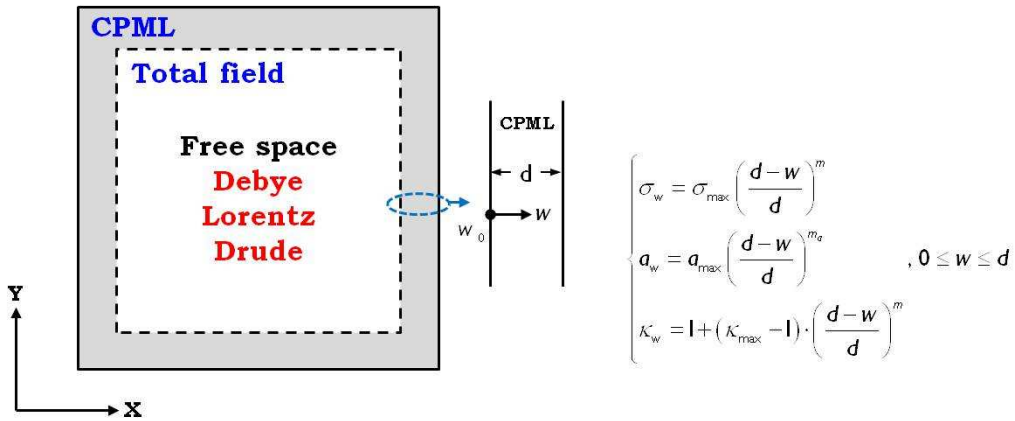


圖 2.1: CPML 吸收邊界條件之示意圖。

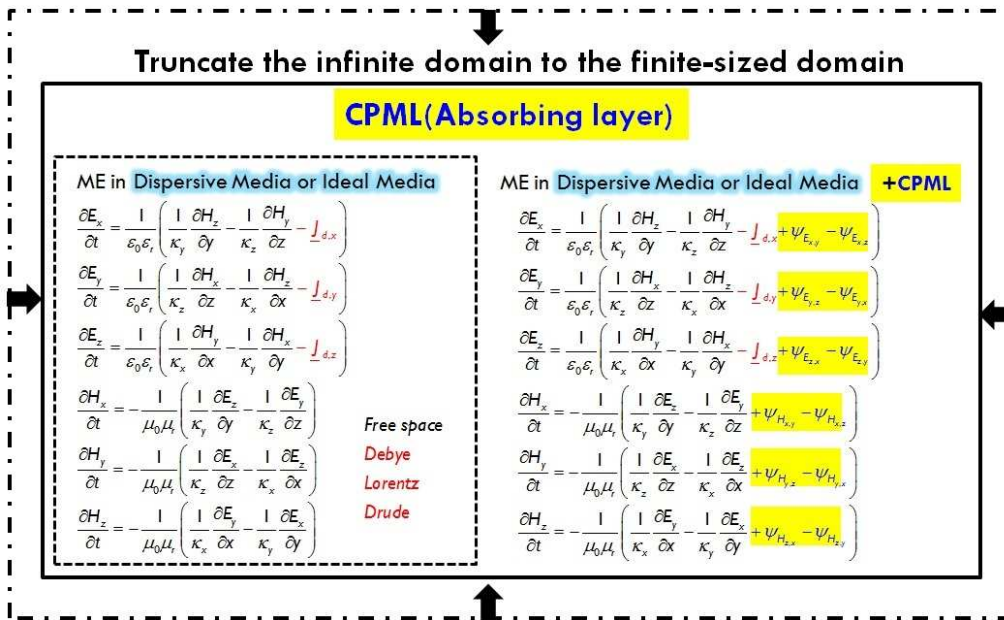


圖 2.2: 求解電磁波在色散介質中傳遞，問題的方程及計算空間 (以表示之) 之示意圖。

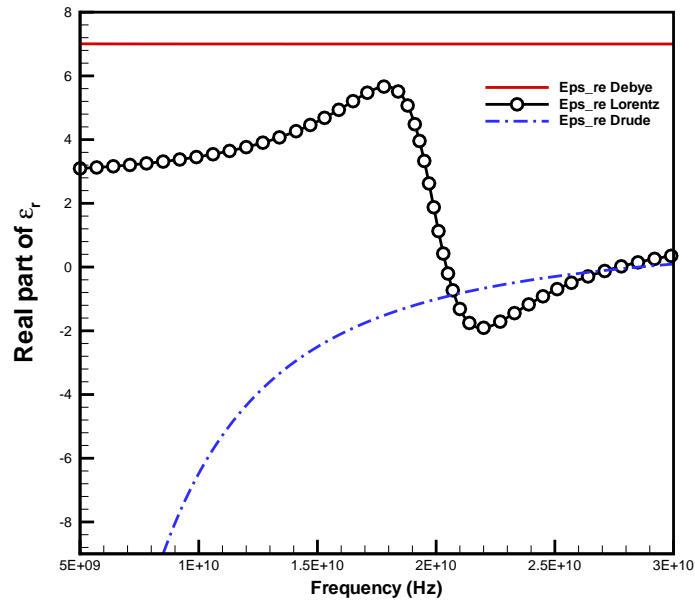


圖 2.3: 三種色散介質之相對介電係數的實部。

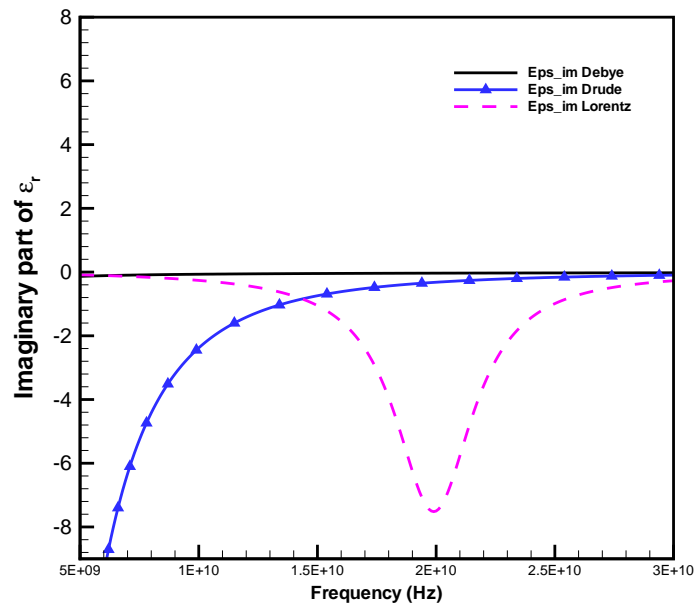
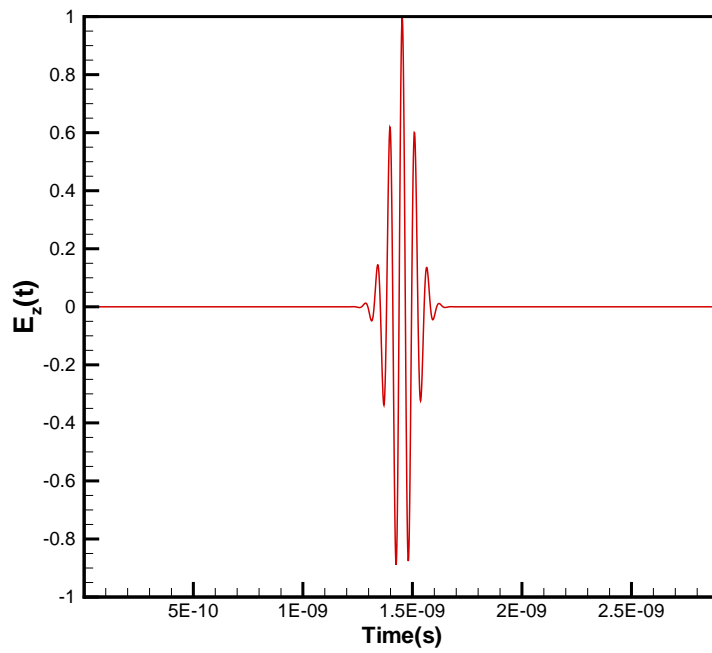
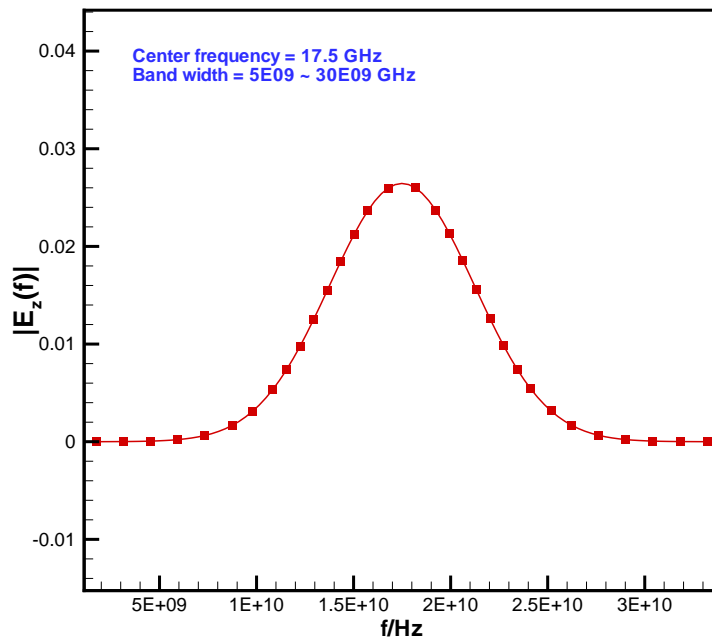


圖 2.4: 三種色散介質之相對介電係數的虛部。



(a)



(b)

圖 2.5: 以 17.5GHz 為中心頻率及頻帶範圍於 5GHz~30GHz 之高斯波源。(a) 時域表示圖 ($x=400\Delta x$, $t=0\sim 450\Delta t$); (b) 頻域表示圖

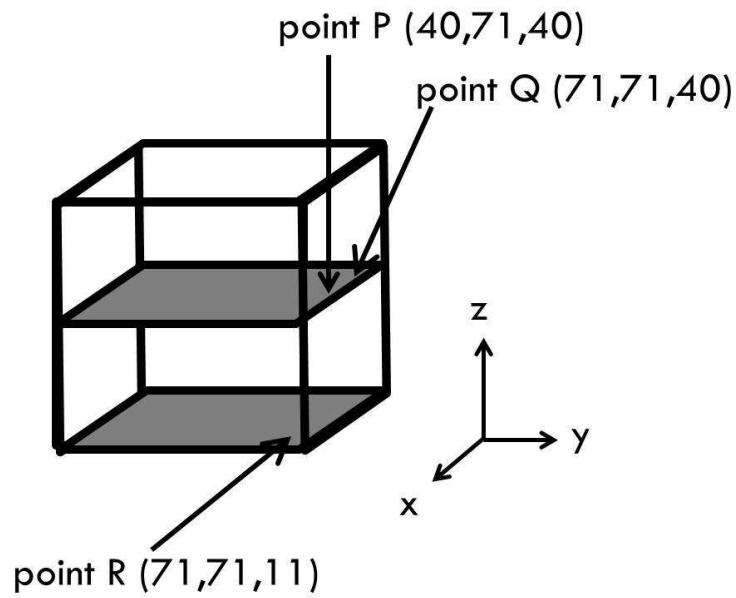
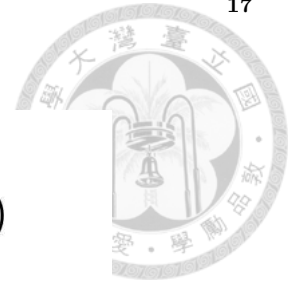


圖 2.6: 在垂直邊界點 P、角落點 Q 以及角頂點 R 上三維 CPML 吸收邊界之示意圖。

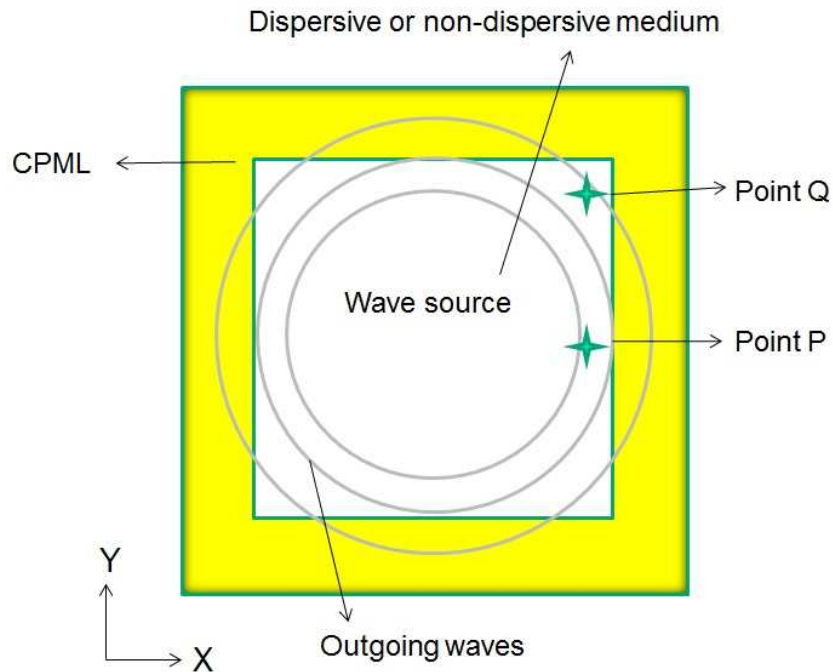
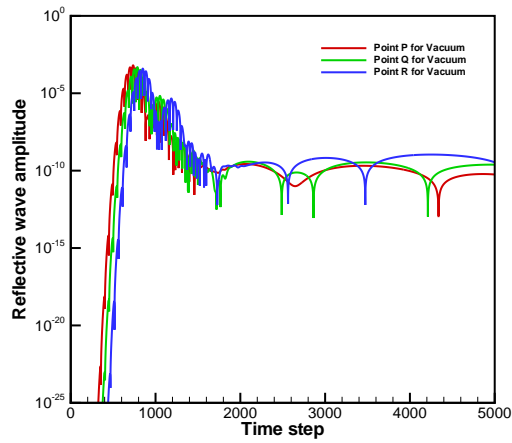
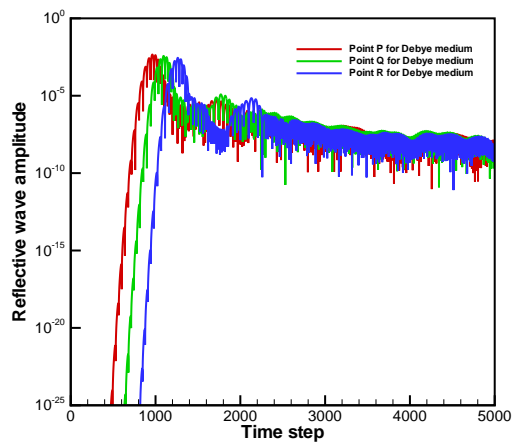


圖 2.7: 二維剖面，以垂直邊界點 P 及角落點 Q 作為觀察點，應用於色散及非色散介質的示意圖。

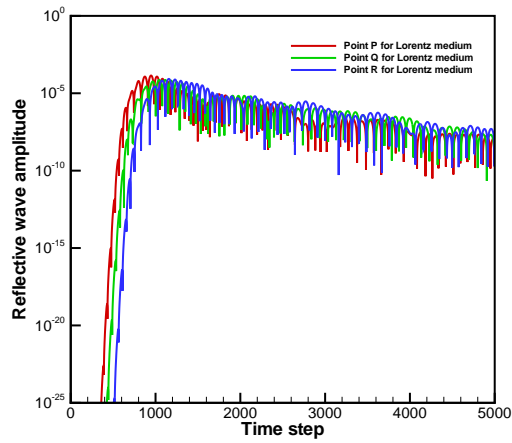


(a)

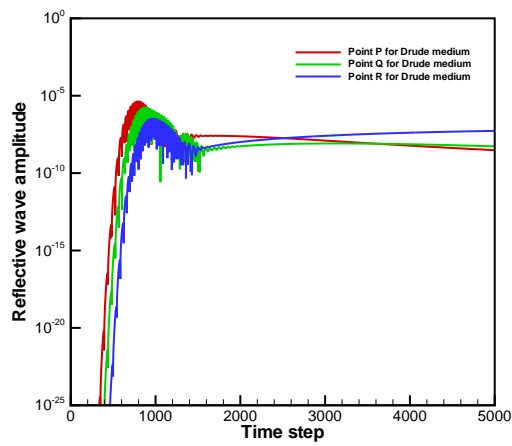


(b)

圖 2.8: 三維 CPML 隨時間步變化吸收邊界反射的誤差。(a) 自由空間中；(b) Debye 介質中



(a)



(b)

圖 2.9: 三維 CPML 隨時間步變化吸收邊界反射的誤差。(a) Lorentz 介質中 ; (b) Drude 介質中



第三章

數值方法

電磁波問題的數值方法主要可分為時域和頻域兩大類，頻域法包括有矩量法 (Moment method, MoM)、有限元素法 (Finite element method, FEM) 等；時域法包括有時域有限差分法 (Finite difference time domain, FDTD)、時域積分方程法 (Time domain integral equation, TDIE) 等。本論文根據差分理論 (difference theory)，利用泰勒級數展開式 (Taylor series) 描述波傳行為之微分方程轉換成差分方程。計算區域將劃分成有限個網格點，然後於網格點上對統御方程進行離散與計算。

3.1 FDTD 之交錯網格系統

FDTD (finite difference time domain) 主要將馬克斯威爾方程式的微分方程式，以有限差分 (finite difference) 的形式展開，然後在時間領域 (time domain) 中表示。為了引起不必要之非物理性的誤差 (奇偶次項震盪所造成的問題)，吾人引用交錯網格系統做計算。1966 年，K. S. Yee 首次發表以 FDTD 法解析空間中電磁場分布問題 [17]，提出 E、H 場分量取樣節點再空間和時間上採取交替分布，每一個 E (或 H) 場分量周圍有四個 H (或 E) 場分量環繞，圖 3.1 的圖 (a) 表示 Yee's cell 的交錯式網格系統，應用這種交錯離散方式，交互地計算電場和磁場。

在卡氏座標下，于理想介質的條件下，考慮無源之馬克斯威爾方程式 (2.2.1-



2.2.2)。吾人可將安培定律及法拉第定律之旋度方程展開成

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \\
 \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \\
 \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \\
 \frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \\
 \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \\
 \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right)
 \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

由式 (3.1.1) 可知，馬克斯威爾方程式可以區分為橫向電場極化 (transverse electric polarization, TE mode) 的類別，其方程由 (E_x, E_y, H_z) 所組成

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y} \\
 \frac{\partial E_y}{\partial t} &= -\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x} \\
 \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right)
 \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

同樣地，由 (3.1.1) 之方程組亦可得橫向磁場極化 (transverse magnetic polarization, TM mode) 的格式，其方程由 (H_x, H_y, E_z) 所組成

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial H_x}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial y} \\
 \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x} \\
 \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial x} \right)
 \end{aligned} \tag{3.1.3}$$



(3.1.1) 之馬克斯威爾方程組可以整理成向量方程的表示式 $\partial \vec{\phi} / \partial t = \vec{f}$ ，其中

$$\vec{\phi} = (E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z)^T \quad (3.1.4)$$

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \end{pmatrix} \quad (3.1.5)$$

為了提升數值之準確性，吾人引用參考點為 $H_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ 和 $H_x|_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ 左右各三點值的離散格式，其中 $a_1 \sim a_3$ 為待定之係數，利用調整 $a_1 \sim a_3$ 值的大小，去降低誤差，使其可以得到較好的控制 [18,19]。參閱圖 3.1 的圖 (b)， $\frac{\partial H_y}{\partial x}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ 和 $\frac{\partial H_x}{\partial y}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ 在網格大小 (mesh size) dx 、 dy 離散下，可近似成：

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_y}{\partial x}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{dx} \left[a_1 \left(H_y|_{i+\frac{5}{2},j,k+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{5}{2},j,k+\frac{1}{2}} \right) + a_2 \left(H_y|_{i+\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2}} \right) \right. \\ &\quad \left. + a_3 \left(H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_x}{\partial y}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{dy} \left[a_1 \left(H_x|_{i,j+\frac{5}{2},k+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{5}{2},k+\frac{1}{2}} \right) + a_2 \left(H_x|_{i,j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}} \right) \right. \\ &\quad \left. + a_3 \left(H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

為了使一次微分項之求解更符合物理意義，必須將電磁波傳遞過程中在時間與空間上取得聯結，故吾人將利用泰勒展開式，並透過第二類型之修正方程 (Modified equation of second kind) 以及色散關係保持 (Dispersion relation preserving, DRP) 的觀念，以期求得具最佳色散關係保持離散方程之係數。

3.2 具辛結構之 PRK 時間離散

馬克斯威爾方程敘述電磁波於空間和時間之傳播，它們必須滿足漢彌爾頓結構 (Hamiltonian structure) 的性質 [20,21]。於 [22,23] 等文章中，說明了那要得到具漢彌爾頓的性質，故需引入具辛結構 (symplectic) 之時間格式，方能比未引

入之時間格式得到較佳之理論守恆性質。本論文將使用具辛結構性質之時間離散格式。在時間離散得以保持辛結構性質時，吾人亦考慮引入配合保持空間離散之色散性質。

本論文在離散的過程中所採用的核心觀念，是盡可能地改善或減少數值色散關係方程與實解色散關係方程之間的誤差。換言之，於波數空間之下，將直接導出數值角頻率 ω_{num} 與 x 、 y 及 z 方向之波數關係，並使數值之色散關係式得以盡可能地貼近實解之色散關係式。

於卡氏座標上，于理想介質中之無源馬克斯威爾方程組 (2.2.1-2.2.2)，存在如下的漢彌爾頓關係式，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \underline{E}}{\partial t} &= \frac{\partial H}{\partial \underline{H}} \\ \frac{\partial \underline{H}}{\partial t} &= -\frac{\partial H}{\partial \underline{E}}\end{aligned}\quad (3.2.1)$$

其中，漢彌爾頓系統 H 可寫成如下的分離格式

$$\begin{aligned}H(p, q) &= T(p) + V(q) \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{V(q)}{dq} \\ \frac{dq}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{T(p)}{dp}\end{aligned}$$

為了保持在每一時間步演進過程中皆具最佳之色散關係，吾人使用顯式 (explicit) 之時間格式；對於具分離結構之漢彌爾頓系統之時間演進，可以使用顯式具辛結構的時間格式 (explicit symplectic time integrator) [24]。本文時間離散使用二級 (two-stage) 二階準確 (second-order accurate) 之顯式具辛結構之分離 Runge-Kutta 方法 (explicit symplectic partitioned Runge-Kutta method)，即

$$\begin{aligned}Q_0 &= q^n \\ P_1 &= p^n \\ Q_1 &= Q_0 + \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial T}{\partial p}(P_1) \\ P_2 &= P_1 - \Delta t \frac{\partial V}{\partial q}(Q_1, t_{n+\frac{1}{2}}) \\ Q_2 &= Q_1 + \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial T}{\partial p}(P_2) \\ q^{n+1} &= Q_2 \\ p^{n+1} &= P_2\end{aligned}$$

其中， p 、 q 代表實際之離散值，上標 n 及 $n+1$ 代表時間步； P 、 Q 代表暫存點之值，下標 1 及 2 代表級數。

在無源及簡單介質的假設下，三維馬克斯威爾方程組可表示成如下之半離散式 (semi-discretization)

$$\underline{H}^{n+1/2} = \underline{H}^n - \frac{dt}{2\mu} \nabla \times \underline{E}^n \quad (3.2.2a)$$

$$\underline{E}^{n+1} = \underline{E}^n + \frac{dt}{\epsilon} \nabla \times \underline{H}^{n+1/2} \quad (3.2.2b)$$

$$\underline{H}^{n+1} = \underline{H}^{n+1/2} - \frac{dt}{2\mu} \nabla \times \underline{E}^{n+1} \quad (3.2.2c)$$

本論文將以此為基礎，於章節 3.3 中推導三維馬克斯威爾之第二類修正方程式 (Modified equation of second kind)。

3.3 空間離散方程之推導

本章節將在空間離散格式 (3.1.6-3.1.7) 以及具辛結構之時間顯示離散格式 (explicit symplectic partitioned Runge-Kutta) 基礎下，利用第二類修正方程之分析 (Modified equation of second kind analysis) 以推導出空間離散之方程，

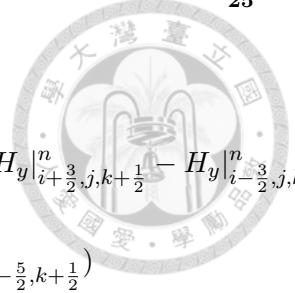
首先，將式 (3.2.2c)，回推一個時間步，可得 $\underline{H}^n = \underline{H}^{n-1/2} - \frac{dt}{2\mu} \nabla \times \underline{E}^n$ 。將上述方程代入式 (3.2.2a)，可得 $\underline{H}^{n+1/2} = \underline{H}^{n-1/2} - \frac{dt}{\mu} \nabla \times \underline{E}^n$ 。同樣地，將式 (3.2.2b) 回推半個時間步，可得 $\underline{E}^{n+1/2} = \underline{E}^{n-1/2} + \frac{dt}{\epsilon} \nabla \times \underline{H}^n$ 。因此，吾人可將安培定律在卡式座標下寫出如下的 z 、 x 和 y 三個分量表示式

$$E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} = E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n-1/2} + \frac{dt}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - \frac{\partial H_x}{\partial y}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right), \quad (3.3.1a)$$

$$E_x|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} = E_x|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n-1/2} + \frac{dt}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - \frac{\partial H_y}{\partial z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right), \quad (3.3.1b)$$

$$E_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} = E_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n-1/2} + \frac{dt}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - \frac{\partial H_z}{\partial x}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right). \quad (3.3.1c)$$

吾人取 z 方向之安培定律分量 (3.3.1a)，針對空間項次依 3.1 節所推導出之離散



格式操作於交錯網格式系統 (3.1.6-3.1.7) 中，可得

$$\begin{aligned}
 E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} &= E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n-1/2} + \frac{dt}{\epsilon} \frac{1}{dx} \left[a_1 (H_y|_{i+\frac{5}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n - H_y|_{i-\frac{5}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n) + a_2 (H_y|_{i+\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n - H_y|_{i-\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n) \right. \\
 &+ a_3 (H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n) \left. \right] - \frac{dt}{\epsilon} \frac{1}{dy} \left[a_1 (H_x|_{i,j+\frac{5}{2},k+\frac{1}{2}}^n - H_x|_{i,j-\frac{5}{2},k+\frac{1}{2}}^n) \right. \\
 &+ a_2 (H_x|_{i,j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^n - H_x|_{i,j-\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^n) + a_3 (H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^n - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^n) \left. \right]. \quad (3.3.2)
 \end{aligned}$$

利用泰勒級數 (Taylor series) 將式 (3.3.2) 中的項次 $E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n\pm 1/2}$ ， $H_y|_{i\pm\frac{5}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n$ ， $H_y|_{i\pm\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n$ ， $H_y|_{i\pm\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n$ ， $H_x|_{i,j\pm\frac{5}{2},k+\frac{1}{2}}^n$ ， $H_x|_{i,j\pm\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^n$ ， $H_x|_{i,j\pm\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^n$ 對時間 n 及空間 i, j, k 點展開之，可得

$$\begin{aligned}
 E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n\pm 1/2} &= E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial E_z}{\partial t} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{1}{8} \Delta t^2 \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{1}{48} \Delta t^3 \frac{\partial^3 E_z}{\partial t^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \\
 H_y|_{i\pm\frac{5}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n &= H_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{5}{2} \Delta x \frac{\partial H_y}{\partial x} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{25}{8} \Delta x^2 \frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{125}{48} \Delta x^3 \frac{\partial^3 H_y}{\partial x^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \\
 H_y|_{i\pm\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n &= H_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{3}{2} \Delta x \frac{\partial H_y}{\partial x} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{9}{8} \Delta x^2 \frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{9}{16} \Delta x^3 \frac{\partial^3 H_y}{\partial x^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \\
 H_y|_{i\pm\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n &= H_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{1}{2} \Delta x \frac{\partial H_y}{\partial x} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{1}{8} \Delta x^2 \frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{1}{48} \Delta x^3 \frac{\partial^3 H_y}{\partial x^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \\
 H_x|_{i,j\pm\frac{5}{2},k+\frac{1}{2}}^n &= H_x|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{5}{2} \Delta y \frac{\partial H_x}{\partial y} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{25}{8} \Delta y^2 \frac{\partial^2 H_x}{\partial y^2} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{125}{48} \Delta y^3 \frac{\partial^3 H_x}{\partial y^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \\
 H_x|_{i,j\pm\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^n &= H_x|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{3}{2} \Delta y \frac{\partial H_x}{\partial y} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{9}{8} \Delta y^2 \frac{\partial^2 H_x}{\partial y^2} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{9}{16} \Delta y^3 \frac{\partial^3 H_x}{\partial y^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \\
 H_x|_{i,j\pm\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^n &= H_x|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{1}{2} \Delta y \frac{\partial H_x}{\partial y} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{1}{8} \Delta y^2 \frac{\partial^2 H_x}{\partial y^2} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \pm \frac{1}{48} \Delta y^3 \frac{\partial^3 H_x}{\partial y^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots
 \end{aligned}$$

經由離散後，將以上的展開之泰勒級數代入式 (3.3.2)，經過整理後可得

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial E_z}{\partial t} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{dt^2}{24} \frac{\partial^3 E_z}{\partial t^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{dt^4}{1920} \frac{\partial^5 E_z}{\partial t^5} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{dt^6}{322560} \frac{\partial^7 E_z}{\partial t^7} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots = \\
 &\frac{1}{\epsilon} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial H_y}{\partial x} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dx^2 \frac{\partial^3 H_y}{\partial x^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\
 &+ \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dx^4 \frac{\partial^5 H_y}{\partial x^5} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{15625}{64512} a_1 + \frac{243}{35840} a_2 + \frac{1}{322560} a_3 \right) dx^6 \frac{\partial^7 H_y}{\partial x^7} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \\
 &+ \dots \left. \right] - \frac{1}{\epsilon} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial H_x}{\partial y} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dy^2 \frac{\partial^3 H_x}{\partial y^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\
 &+ \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dy^4 \frac{\partial^5 H_x}{\partial y^5} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{15625}{64512} a_1 + \frac{243}{35840} a_2 + \frac{1}{322560} a_3 \right) dx^6 \frac{\partial^7 H_x}{\partial x^7} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \\
 &+ \dots \left. \right]. \quad (3.3.3)
 \end{aligned}$$

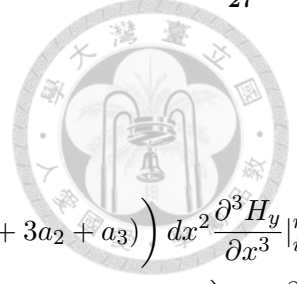
式 (3.3.3) 中之高階時間微分項 $\frac{\partial^3 E_z}{\partial t^3} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n$ ， $\frac{\partial^5 E_z}{\partial t^5} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n$ ， $\frac{\partial^7 E_z}{\partial t^7} |_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n$ ，經由馬克斯威爾方程組可推導出的電場或磁場的波動方程式 (wave equation)，利用泰

勒級數展開，可將上述之高階時間微分項轉換為空間微分項，為以下式子：

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^3 E_z}{\partial t^3} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = \\ & \frac{1}{\epsilon^2 \mu} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial^3 H_y}{\partial x^3} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dx^2 \frac{\partial^5 H_y}{\partial x^5} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\ & \left. + \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dx^4 \frac{\partial^7 H_y}{\partial x^7} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \right] \\ & - \frac{1}{\epsilon^2 \mu} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial^3 H_x}{\partial y^3} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dy^2 \frac{\partial^5 H_x}{\partial y^5} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\ & \left. + \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dy^4 \frac{\partial^7 H_x}{\partial y^7} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^5 E_z}{\partial t^5} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = \\ & \frac{1}{\epsilon^3 \mu^2} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial^5 H_y}{\partial x^5} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dx^2 \frac{\partial^7 H_y}{\partial x^7} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\ & \left. + \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dx^4 \frac{\partial^9 H_y}{\partial x^9} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \right] \\ & - \frac{1}{\epsilon^3 \mu^2} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial^5 H_x}{\partial y^5} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dy^2 \frac{\partial^7 H_x}{\partial y^7} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\ & \left. + \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dy^4 \frac{\partial^9 H_x}{\partial y^9} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^7 E_z}{\partial t^7} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = \\ & \frac{1}{\epsilon^4 \mu^3} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial^7 H_y}{\partial x^7} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dx^2 \frac{\partial^9 H_y}{\partial x^9} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\ & \left. + \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dx^4 \frac{\partial^{11} H_y}{\partial x^{11}} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \right] \\ & - \frac{1}{\epsilon^4 \mu^3} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial^7 H_x}{\partial y^7} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24} a_1 + \frac{9}{8} a_2 + \frac{1}{24} a_3 \right) dy^2 \frac{\partial^9 H_x}{\partial y^9} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\ & \left. + \left(\frac{625}{384} a_1 + \frac{81}{640} a_2 + \frac{1}{1920} a_3 \right) dy^4 \frac{\partial^{11} H_x}{\partial y^{11}} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \dots \right] \end{aligned}$$



所得的代換結果如下

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_z}{\partial t} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = & \frac{1}{\epsilon} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial H_y}{\partial x} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24}a_1 + \frac{9}{8}a_2 + \frac{1}{24}a_3 - \frac{Cr_x^2}{24} (5a_1 + 3a_2 + a_3) \right) dx^2 \frac{\partial^3 H_y}{\partial x^3} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\
& + \left(\frac{625}{384}a_1 + \frac{81}{640}a_2 + \frac{1}{1920}a_3 - \frac{Cr_x^2}{24} \left(\frac{125}{24}a_1 + \frac{9}{8}a_2 + \frac{1}{24}a_3 \right) - \frac{Cr_x^4}{1920} (5a_1 + 3a_2 + a_3) \right) dx^4 \frac{\partial^5 H_y}{\partial x^5} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \\
& + \dots \left. \right] \\
& - \frac{1}{\epsilon} \left[(5a_1 + 3a_2 + a_3) \frac{\partial H_x}{\partial y} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{125}{24}a_1 + \frac{9}{8}a_2 + \frac{1}{24}a_3 - \frac{Cr_y^2}{24} (5a_1 + 3a_2 + a_3) \right) dy^2 \frac{\partial^3 H_x}{\partial y^3} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right. \\
& + \left(\frac{625}{384}a_1 + \frac{81}{640}a_2 + \frac{1}{1920}a_3 - \frac{Cr_y^2}{24} \left(\frac{125}{24}a_1 + \frac{9}{8}a_2 + \frac{1}{24}a_3 \right) - \frac{Cr_y^4}{1920} (5a_1 + 3a_2 + a_3) \right) dy^4 \frac{\partial^5 H_x}{\partial y^5} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \\
& + \dots \left. \right]. \tag{3.3.4}
\end{aligned}$$

接著強迫式 (3.3.4) 滿足原方程 $\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right)$ ，如此即可推導出在三維情況下的兩條代數方程

$$5a_1 + 3a_2 + a_3 = 1 \tag{3.3.5}$$

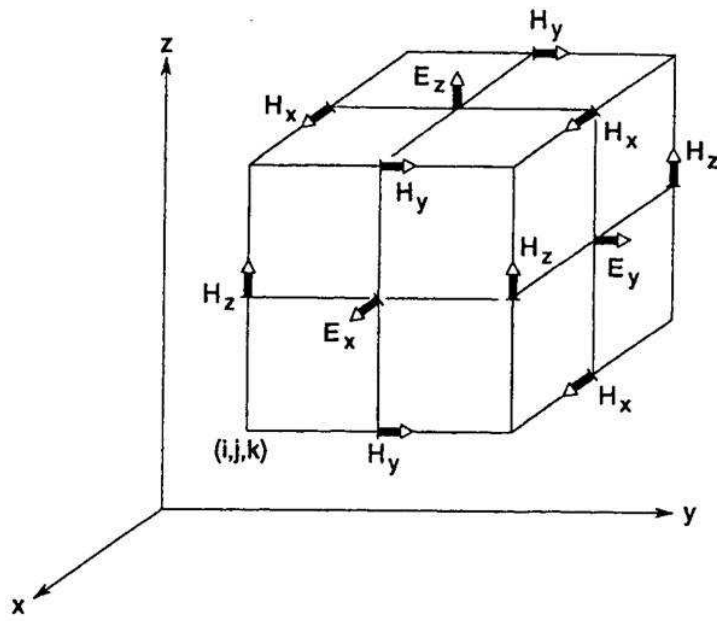
$$\frac{125}{24}a_1 + \frac{9}{8}a_2 + \frac{1}{24}a_3 - \frac{Cr_x^2}{24} (5a_1 + 3a_2 + a_3) = 0$$

or

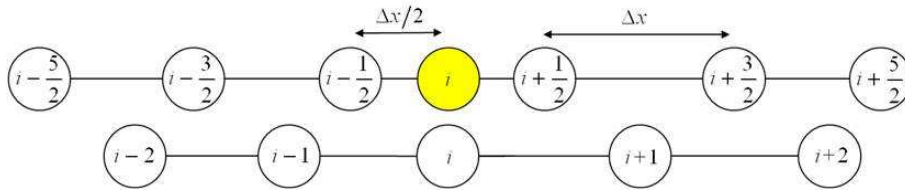
$$\frac{125}{24}a_1 + \frac{9}{8}a_2 + \frac{1}{24}a_3 - \frac{Cr_y^2}{24} (5a_1 + 3a_2 + a_3) = 0 \tag{3.3.6}$$

其中 $Cr_x \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x}$ ， $Cr_y \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta y}$ 為主導方程式之無因次參數。透過其他方向分量之安培定律式 ((3.3.1b)-(3.3.1c))，同樣地能推導出如上述之代數方程組。此時，仍缺少一條代數方程式，方得以求解三個未知數。

最後一條方程式的推導，係引入平面波的概念，以推導出數值色散關係方程式 (Dispersion relation equation)。將計算域的時間、空間同步地導入頻域中的角頻率與波數，以提高格式對波數的保持能力，參閱圖 3.2。關於波動方程離散式以及色散關係分析將於下一章節進行討論。

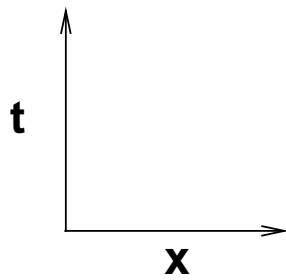


(a)

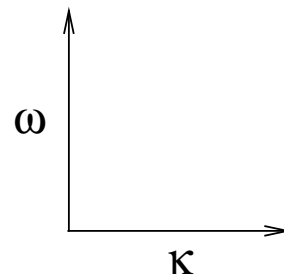


(b)

圖 3.1: (a) 交錯式之網格系統；(b) 在交錯網格系統中之內部節點示意圖及其編號。



(a)



(b)

圖 3.2: (a) 時間與空間座標系之示意圖；(b) 角頻率與波數座標系之示意圖



第四章

具色散關係保持性離散方法之分析

本文將在此章節中引入于第三章所推導之格式 (3.1.6-3.1.7)，針對波動方程式 (Wave equation) 整理出差分離散式。對於具色散關係的離散方程 (Dispersion relation equation, DRE)，引入平面波的概念，可將原本時間 (time) 對應空間 (space) 之座標系統轉換為角頻率 (Angular frequency) 對應波數 (Wavenumber) 的座標系統，使得時間與空間在計算上得以取得更緊密的聯結。為了避免數值色散誤差 (dispersion error) 的累積，本文將導入可以精確描述相速度的概念，進而求得具最佳色散關係保持的離散方程，以提高空間離散格式對波數的保持性，並且對差分方程所造成的穩定性、色散誤差以及各向異性做分析。

4.1 三維空間離散分析

透過無源且均勻各向同性簡單介質下之馬克斯威爾方程組 (2.2.1-2.2.2)，可推導出如下的二階微分形式的波動方程式

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \nabla^2 \phi \quad (4.1.1)$$

其中 c 為波之傳播速度。 ϕ 可任意代換為電場 \vec{E} 或磁場 \vec{H} 。考慮三維情況下之波動方程式，它在卡式座標下可展開為

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \quad (4.1.2)$$

代入平面波的解 $\phi = \phi_0 e^{-I(\omega t - k_x x - k_y y - k_z z)}$ 於式 (4.1.2)，可得實解的色散關係式

$$\omega_{exact}^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (4.1.3)$$

為了讓時間與空間取得更緊密的聯結，在離散過程中引入平面波的概念。將三維離散點之轉換式 $\phi_i^n = \phi_0 e^{-I(\omega_{num} n \Delta t - k_x i \Delta x - k_y j \Delta y - k_z i \Delta z)}$ ，代入本文所推導出的時間離散格式 $\frac{\partial \phi}{\partial t}|_i^n = \frac{\phi_i^{n+1/2} - \phi_i^{n-1/2}}{\Delta t}$ ，空間離散格式可寫成 $\frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i,j,k}^n = \frac{1}{\Delta x} \left[a_1 \left(\phi_{i+\frac{5}{2},j,k}^n - \phi_{i-\frac{5}{2},j,k}^n \right) + a_2 \left(\phi_{i+\frac{3}{2},j,k}^n - \phi_{i-\frac{3}{2},j,k}^n \right) + a_3 \left(\phi_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - \phi_{i-\frac{1}{2},j,k}^n \right) \right]$ 、 $\frac{\partial \phi}{\partial y}|_{i,j,k}^n = \frac{1}{\Delta y} \left[a_1 \left(\phi_{i,j+\frac{5}{2},k}^n - \phi_{i,j-\frac{5}{2},k}^n \right) + a_2 \left(\phi_{i,j+\frac{3}{2},k}^n - \phi_{i,j-\frac{3}{2},k}^n \right) + a_3 \left(\phi_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - \phi_{i,j-\frac{1}{2},k}^n \right) \right]$ 、 $\frac{\partial \phi}{\partial z}|_{i,j,k}^n = \frac{1}{\Delta z} \left[a_1 \left(\phi_{i,j,k+\frac{5}{2}}^n - \phi_{i,j,k-\frac{5}{2}}^n \right) + a_2 \left(\phi_{i,j,k+\frac{3}{2}}^n - \phi_{i,j,k-\frac{3}{2}}^n \right) + a_3 \left(\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \right) \right]$ 。如此，可得

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}|_{i,j,k}^n = -I \frac{2 \sin(\omega_{num} \Delta t / 2)}{\Delta t} \phi \quad (4.1.4a)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i,j,k}^n = 2I \frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_x \Delta x) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_x \Delta x) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_x \Delta x)}{\Delta x} \phi \quad (4.1.4b)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y}|_{i,j,k}^n = 2I \frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_y \Delta y) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_y \Delta y) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_y \Delta y)}{\Delta y} \phi \quad (4.1.4c)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z}|_{i,j,k}^n = 2I \frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_z \Delta z) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_z \Delta z) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_z \Delta z)}{\Delta z} \phi \quad (4.1.4d)$$

接著，可求得如下的二階微分項 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$ 、 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ 、 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}$ 、 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}|_{i,j,k}^n = 4 \left[\frac{\sin(\omega_{num} \Delta t / 2)}{\Delta t} \right]^2 \phi \quad (4.1.5a)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i,j,k}^n = -4 \left[\frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_x \Delta x) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_x \Delta x) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_x \Delta x)}{\Delta x} \right]^2 \phi \quad (4.1.5b)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}|_{i,j,k}^n = -4 \left[\frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_y \Delta y) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_y \Delta y) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_y \Delta y)}{\Delta y} \right]^2 \phi \quad (4.1.5c)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}|_{i,j,k}^n = -4 \left[\frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_z \Delta z) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_z \Delta z) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_z \Delta z)}{\Delta z} \right]^2 \phi \quad (4.1.5d)$$

將上述二階微分項 (4.1.5a-4.1.5d) 代入式 (4.1.2)，可得如下的三維數值色散關係式 (Dispersion relation equation)

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\sin^2(\omega_{num} \Delta t / 2)}{\Delta t^2} &= \left[\frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_x \Delta x) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_x \Delta x) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_x \Delta x)}{\Delta x} \right]^2 \\ &+ \left[\frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_y \Delta y) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_y \Delta y) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_y \Delta y)}{\Delta y} \right]^2 \\ &+ \left[\frac{a_1 \sin(\frac{5}{2} k_z \Delta z) + a_2 \sin(\frac{3}{2} k_z \Delta z) + a_3 \sin(\frac{1}{2} k_z \Delta z)}{\Delta z} \right]^2 \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

在模擬三維波傳問題時，吾人需定義出波數向量 (wavenumber vector) $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = |k|(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ ，以描述波行進的方向，其中 θ 為天頂角 (Zenith an-

gle)， ϕ 為方位角 (Azimuth angle)，參考圖 4.1。因此，式 (4.1.6) 經整理後可得

$$\begin{aligned} & \omega_{num}\Delta t \\ &= \sin^{-1} \left[\left(Cr_x^2 \left(a_1 \sin \left(\frac{5}{2} k \sin \theta \cos \phi \Delta x \right) + a_2 \sin \left(\frac{3}{2} k \sin \theta \cos \phi \Delta x \right) + a_3 \sin \left(\frac{1}{2} k \sin \theta \cos \phi \Delta x \right) \right)^2 \right. \right. \\ &+ Cr_y^2 \left(a_1 \sin \left(\frac{5}{2} k \sin \theta \sin \phi \Delta y \right) + a_2 \sin \left(\frac{3}{2} k \sin \theta \sin \phi \Delta y \right) + a_3 \sin \left(\frac{1}{2} k \sin \theta \sin \phi \Delta y \right) \right)^2 \\ &\left. + Cr_z^2 \left(a_1 \sin \left(\frac{5}{2} k \cos \theta \Delta z \right) + a_2 \sin \left(\frac{3}{2} k \cos \theta \Delta z \right) + a_3 \sin \left(\frac{1}{2} k \cos \theta \Delta z \right) \right)^2 \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

其中， $Cr_x \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x}$ ， $Cr_y \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta y}$ ， $Cr_z \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta z}$ ；在均勻網格 ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = h$) 的情況下， $Cr_x = Cr_y = Cr_z = Cr$ 。數值相速度可由式 (4.1.6) 代入定義式 ($|\frac{\omega_{num}}{k}|$) 而求出。

為了盡量提高並保持準確的色散關係，首先定義誤差方程 (Error function) 為 $\left[\left| \frac{\omega_{num}}{k} \right| - \left| \frac{\omega_{exact}}{k} \right| \right]^2$ 。誤差方程將盡量於 $0 \leq kh \leq \pi$ 區間內保持最小值。接著，在波數空間下，考慮所有的誤差值，即

$$E = \int_{-m\pi}^{m\pi} \left[\left| \frac{\omega_{num}}{k} \right| - \left| \frac{\omega_{exact}}{k} \right| \right]^2 W(kh) dkh \quad (4.1.8)$$

其中 $W(kh)$ 為權重函數。接下來，令 $\frac{\partial E(a_1, a_2, a_3, m, Cr, \theta, \phi)}{\partial a_3} = 0$ ，可求得所需的第三條代數方程。配合 (3.3.5) 及 (3.3.6)，即可求出具 DRP 性質之 a_1, a_2 和 a_3 的係數。所導出三維具 DRP 性質之 a_1, a_2 和 a_3 係數，積分域 m 、 Cr 、天頂角 (zenith angle) θ 與方位角 (azimuth angle) ϕ 之選取將影響最後的結果。如下，將針對它們作一系列的分析。

4.1.1 積分域之影響

在決定了誤差方程後，對於積分域的選擇，為了配合雙曲線方程於空間離散的特性 (求解之離散點為對稱展開之型式)，故誤差方程 (Error function) 的積分範圍必須配合雙曲線方程之特性，即將積分域設計為對稱之型式。積分過程中，常需伴隨著混疊誤差 (aliasing error)；為了能描述一完整波形，整個積分範圍盡量地保持或貼近 π 。圖 4.2 為固定 $Cr = 0.2$ 時，積分域 m 為 $\frac{1}{2}$ 、 $\frac{3}{7}$ 、 $\frac{2}{5}$ 、 $\frac{3}{8}$ ，以及 $\frac{1}{3}$ 與實解之色散關係之比較圖，橫軸及縱軸分別代表了修正的波數 (modified wavenumber) kh 和角頻率 (angular frequency)。

吾人的目標是儘可能地使數值的色散關係與實解的色散關係得以保持貼近，以提高波數的保持能力。當積分域越趨近完整波形 π 時，越能保持離散方程的色散關係。



4.1.2 不同 Cr 數之影響

$Cr \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x}$ 係數為一無因次項，它代表時間步長 Δt 與網格長度 h 之關係，對於顯式 (explicit) 時間離散方法，在選取滿足穩定性條件的 Cr 值的同時，需考慮 Cr 值對於數值色散關係之影響。

本文所提出具 DRP 性質之空間離散為一系統方程，隱含與穩定性有關之 Cr 係數；圖 4.3 為當積分域 m 為 $\frac{1}{2}$ 時， Cr 為 0.6、0.5、0.4、0.3、0.2 和 0.05 之色散關係實解與數值解之比較圖；當 Cr 值越小時，數值色散關係式與實解色散關係式越形貼近，它代表了系統方程之色散關係將越得以較佳地保持； Cr 值為 0.2 與 Cr 值為 0.05 比較，可知趨勢接近；當數值波數與角頻率和實解之趨勢接近至一定程度時，計算成本便需納入考慮，表 4.1 說明計算長時間 ($T = 30(s)$) 之驗證題目，當 Cr 值分別為 0.2 與 0.05， Cr 值為 0.2 所花費的計算時間 (CPU TIME) 僅為 Cr 值為 0.05 時之 25%。因此，同時考量數值色散關係保持程度以及計算時間之成本，本文建議所選擇使用之 Cr 值為 0.2。

4.1.3 角度變化下之係數分佈

對於空間的一階微分項以離散格式的方式 [18, 19] 展開，會有 $a_1 \sim a_3$ 的待定係數。由泰勒展開式代入離散式，並將時間微分項轉為空間微分項，經強迫低階微分項為零後，可得到 (3.3.5-3.3.6) 式的兩條修正方程。依波傳遞的觀點而言，若光制式地消去泰勒級數 (Taylor series) 中的低階誤差項次並不能將時域與頻域作一物理的聯結。因此，配合顯式具辛結構時間格式 (explicit symplectic time integrator) [24]，可推導出具色散關係之離散方程 (Dispersion relation equation, DRE)，以此方程再利用數值相速度與實解相速度之間誤差優化的觀念，可以求得具色散關係式保持的第三條方程，由此三條方程，可求解出具最佳色散關係保持之 $a_1 \sim a_3$ 係數。

在求得第三條色散關係保持方程的過程中，透過上述的討論，考量了積分域 m 以及 Cr 對整體數值色散關係表現之影響及計算成本，吾人選定了 $m = \frac{1}{2}$ 以及 $Cr = 0.2$ 。至此，可以整理出針對不同天頂角 (zenith angle) θ 與方位角 (azimuth angle) ϕ 皆具有最佳數值色散關係的係數 $a_1 \sim a_3$ 。

表 4.2 為選取天頂角 (Zenith angle) θ 為 $0^\circ \& 90^\circ$ 、 $30^\circ \& 60^\circ$ 和 45° ，配合方位角 (Azimuth angle) ϕ 為 $0^\circ \& 90^\circ$ 、 $6^\circ \& 84^\circ$ 、 $9^\circ \& 81^\circ$ 、 $12^\circ \& 78^\circ$ 、 $22.5^\circ \& 67.5^\circ$ 、 $30^\circ \& 60^\circ$ 、 $36^\circ \& 54^\circ$ 、 $6^\circ \& 84^\circ$ 和、 45° 所求得的係數 $a_1 \sim a_3$ 之情況。在方位角 (Azimuth angle) ϕ 為 $90^\circ \sim 360^\circ$ 時，廣義三角函數定義，可將式 (4.1.7) 恆等地轉換至 $0^\circ \sim 90^\circ$ 之區

間。而透過表 4.2 可看出，當天頂角 (Zenith angle) θ 為 90° 時，可得到簡化為二維情況下的係數；當天頂角 (Zenith angle) θ 為 0° 時，可得到簡化為一維情況下的係數。圖 4.4 為係數 $a_1 \sim a_3$ 在不同天頂角 (Zenith angle) θ 的情況下，其值隨方位角 (Azimuth angle) ϕ 之變化，由圖中可看出當天頂角 (Zenith angle) θ 為 0° 時，在一維的情況下係數之分布並不會隨方位角 (Azimuth angle) ϕ 而變化。

4.2 數值穩定性之分析

由於本文所採用的 PRK-DRP 數值方法為一顯示之差分格式，在計算過程中，時間步 Δt 和空間步 Δx 、 Δy 和 Δz 並非完全地獨立，它們的取值必須受到限制，以避免出現數值上的不穩定性。為了得到本文所採用數值方法的穩定性條件，首先考慮在自由介質中取電場轉換式 $\vec{E} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \vec{E}^*$ 或磁場轉換式 $\vec{H} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \vec{H}^*$ ，將式 (2.2.1-2.2.2) 以通式 $\vec{V} = \vec{H}^* + I\vec{E}^*$ 表示之。在正規化空間 (Normalized space)，可寫成如下的形式

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = I \nabla \times \vec{V} \quad (4.2.1)$$

其中 $I = \sqrt{-1}$ ， $c = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}}$ ，上式係成立於 $\epsilon = \mu = 1$ 的情況下。根據 Taflove 和 Brodwin [25] 的推導方法，將本文所使用顯示差分格式作如下的穩定性分析。將式 (4.2.1) 分離成兩個特徵值問題

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = \lambda \vec{V} \quad (4.2.2a)$$

$$Ic \nabla \times \vec{V} = \lambda \vec{V} \quad (4.2.2b)$$

將式 (4.2.2a) 的時間微分項次以于本文第三章所推導的時間離散格式展開，可得

$$\vec{V}^{n+1/2} - \vec{V}^{n-1/2} = \lambda \Delta t \vec{V}^n \quad (4.2.3)$$

定義放大因子 G 為 $\frac{\vec{V}^{n+1/2}}{\vec{V}^n}$ ，代入式 (4.2.3) 中，可求得放大因子 G ，它須滿足方程式 $G^2 - (\lambda \Delta t)G - 1 = 0$ ，其解為

$$G_{1,2} = \frac{\lambda \Delta t}{2} \pm \left[1 + \left(\frac{\lambda \Delta t}{2} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4.2.4)$$

根據 von Neumann 的穩定性分析，若要符合穩定性的條件，放大因子 $|G|$ 必須滿足 $|G| \leq 1$ ，因此可得到如下的條件式

$$\begin{aligned} \text{Re}(\lambda) &= 0 \\ |\text{Im}(\lambda)| &\leq \frac{2}{\Delta t} \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

式 (4.2.5) 說明了在滿足穩定條件下所有的特徵值需落在虛軸上，且值僅限定在區間 $[-\frac{2}{\Delta t}, \frac{2}{\Delta t}]$ 內。

對於式 (4.2.2b)，請其在卡式座標下展開成如下的三個方向分量表示式

$$\begin{aligned} c \left(\frac{\partial V_z}{\partial y} - \frac{\partial V_y}{\partial z} \right) &= \lambda V_x \\ c \left(\frac{\partial V_x}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial x} \right) &= \lambda V_y \\ c \left(\frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y} \right) &= \lambda V_z \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

針對空間微分項次，以 3.1 節所推導之緊緻格式於交錯網格式系統 (3.1.6-3.1.7) 下展開並引入平面波，可以整理成一矩陣系統方程式 $\underline{F}V = 0$ ，其係數矩陣 \underline{F} 如下

$$\underline{F} = \begin{pmatrix} -\lambda & -2c \frac{F_z}{\Delta z} & 2c \frac{F_y}{\Delta y} \\ c \frac{F_z}{\Delta z} & -\lambda & -2c \frac{F_x}{\Delta x} \\ -2c \frac{F_y}{\Delta y} & 2c \frac{F_x}{\Delta x} & -\lambda \end{pmatrix}. \quad (4.2.7)$$

其中

$$\begin{aligned} F_x &= a_1 \sin \left(\frac{5}{2} k_x \Delta x \right) + a_2 \sin \left(\frac{3}{2} k_x \Delta x \right) + a_3 \sin \left(\frac{1}{2} k_x \Delta x \right), \\ F_y &= a_1 \sin \left(\frac{5}{2} k_y \Delta y \right) + a_2 \sin \left(\frac{3}{2} k_y \Delta y \right) + a_3 \sin \left(\frac{1}{2} k_y \Delta y \right), \\ F_z &= a_1 \sin \left(\frac{5}{2} k_z \Delta z \right) + a_2 \sin \left(\frac{3}{2} k_z \Delta z \right) + a_3 \sin \left(\frac{1}{2} k_z \Delta z \right). \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

欲使上述之矩陣系統 $\underline{F}V = 0$ 有非零解，係數矩陣 \underline{F} 的行列式值必須為零，由此可得 $\lambda^2 = -4c^2 \left(\frac{F_x^2}{\Delta x^2} + \frac{F_y^2}{\Delta y^2} + \frac{F_z^2}{\Delta z^2} \right)$ 。對於所有可能的 k_x ， k_y 和 k_z ，均需滿足

$$|Im(\lambda)| \leq 2c \left(\frac{\max(F_x^2)}{\Delta x^2} + \frac{\max(F_y^2)}{\Delta y^2} + \frac{\max(F_z^2)}{\Delta z^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.2.9)$$

由式 (4.2.5) 和 (4.2.9) 可得所提出的顯示 FDTD 數值方法的穩定條件為 $\Delta t \leq \frac{1}{c} \left(\frac{\max(F_x^2)}{\Delta x^2} + \frac{\max(F_y^2)}{\Delta y^2} + \frac{\max(F_z^2)}{\Delta z^2} \right)^{-\frac{1}{2}}$ 。將其代入前述所推導出的係數，可得在三維情況下的穩定度條件為 $\Delta t \leq 0.499773 \frac{h}{c}$ 。如表 4.3 所示，本文所提出之顯示 FDTD 數值方法，在空間中由於引用參考點左右各三點的值，來提高數值上的準確性，因此在各個維度下，其穩定性範圍皆小於 Yee scheme。



4.3 各向異性 (Anisotropy) 與數值色散 (Numerical dispersion) 之分析

使用時域有限差分法 (FDTD) 求解電磁場時，若將波方程的解代入差分離散格式時，將出現非物理性的色散現象 (dispersion)，此一特性並非由介質的物理特性所引起，而是由數值計算中的差分近似所造成，因此也稱之為數值色散現象。上述之色散現象會導致數值色散誤差 (Numerical dispersion error) 的疊加、人為的各向異性 (Anisotropy)，從而將影響數值解的品質。本章節將討論數值色散關係式與實解色散關係式之一致性 (consistency)，並針對色散關係 (dispersion relation) 以及相速度 (phase velocity) 作一詳細的分析。

4.3.1 數值色散關係式與實解色散關係式之一致性 (consistency)

在無源且均勻各向同性簡單介質中，可用解析的方法得到平面波的實解色散關係式 (4.1.3)。對於無耗介質， ϵ 、 μ 與頻率無關，因此透過式 (4.1.3) 可以看出角頻率 (angular frequency) 與波數 (wavenumber) 之間為一簡單的線性關係，亦即無色散現象。

在 4.1 節所推導出的數值色散關係式 (4.1.6)，經過適當的整理後，可以表示成如下之式

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\omega^2}{4} \left(\frac{\sin(\omega\Delta t/2)}{\omega\Delta t} \right)^2 &= k_x^2 \left(\frac{5}{2}a_1 \frac{\sin(\frac{5}{2}k_x\Delta x)}{\frac{5}{2}k_x\Delta x} + \frac{3}{2}a_2 \frac{\sin(\frac{3}{2}k_x\Delta x)}{\frac{3}{2}k_x\Delta x} + \frac{1}{2}a_3 \frac{\sin(\frac{1}{2}k_x\Delta x)}{\frac{1}{2}k_x\Delta x} \right)^2 \\ &+ k_y^2 \left(\frac{5}{2}a_1 \frac{\sin(\frac{5}{2}k_y\Delta y)}{\frac{5}{2}k_y\Delta y} + \frac{3}{2}a_2 \frac{\sin(\frac{3}{2}k_y\Delta y)}{\frac{3}{2}k_y\Delta y} + \frac{1}{2}a_3 \frac{\sin(\frac{1}{2}k_y\Delta y)}{\frac{1}{2}k_y\Delta y} \right)^2 \\ &+ k_z^2 \left(\frac{5}{2}a_1 \frac{\sin(\frac{5}{2}k_z\Delta z)}{\frac{5}{2}k_z\Delta z} + \frac{3}{2}a_2 \frac{\sin(\frac{3}{2}k_z\Delta z)}{\frac{3}{2}k_z\Delta z} + \frac{1}{2}a_3 \frac{\sin(\frac{1}{2}k_z\Delta z)}{\frac{1}{2}k_z\Delta z} \right)^2. \end{aligned} \quad (4.3.1.1)$$

觀察式 (4.3.1.1)，可知波數 (wavenumber) 與角頻率 (angular frequency) 已經不再是如式 (4.1.3) 這般的簡單地呈線性的關係，而此一非線性關係必伴隨色散現象的出現，稱之為數值色散。當式 (4.3.1.1) 中的 Δt 、 Δx 、 Δy 、 Δz 都趨近於零，則數值色散關係式 (4.3.1.1) 可化簡為 $\frac{\omega^2}{4c^2} = (\frac{5}{2}a_1 + \frac{3}{2}a_2 + \frac{1}{2}a_3)^2 k_x^2 + (\frac{5}{2}a_1 + \frac{3}{2}a_2 + \frac{1}{2}a_3)^2 k_y^2 + (\frac{5}{2}a_1 + \frac{3}{2}a_2 + \frac{1}{2}a_3)^2 k_z^2$ 。可將第三章所導出的第一條修正代數方程 (3.3.5) 代入，化簡後的數值色散關係式回到實解色散關係式 (4.1.3)。此一致性 (consistency) 說明當差分近似的網格大小趨近於零時，吾人可完全去除可以因離散格式所引入的色散誤差。



4.3.2 數值色散關係分析 (Numerical dispersion analysis)

在 4.1 節已推導出含有傳波方向角度的數值色散關係式 (4.1.7)，為了便於圖示與討論，考慮二維情況下的實解色散關係式

$$\omega_{exact}^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2) \quad (4.3.2.1)$$

根據波數向量 (wavenumber vector) 的定義，令天頂角 (Zenith angle) θ 為 $\frac{\pi}{2}$ ，假設在均勻網格下 $\Delta x = \Delta y = h$ ，二維數值色散關係式可整理成下式

$$\begin{aligned} \sin^2(\omega_{num}\Delta t/2) = & Cr_x^2 \left(a_1 \sin\left(\frac{5}{2}k \cos \phi h\right) + a_2 \sin\left(\frac{3}{2}k \cos \phi h\right) + a_3 \sin\left(\frac{1}{2}k \cos \phi h\right) \right)^2 \\ & + Cr_y^2 \left(a_1 \sin\left(\frac{5}{2}k \sin \phi h\right) + a_2 \sin\left(\frac{3}{2}k \sin \phi h\right) + a_3 \sin\left(\frac{1}{2}k \sin \phi h\right) \right)^2 \end{aligned} \quad (4.3.2.2)$$

上式表明 FDTD 計算中波的行進速度與其傳播方向有關，這是離散過程中所引入的各向異性 (anisotropy)。

吾人比較的目標在於使數值色散關係式是否能更趨近於實解的色散關係式。在空間離散上，我們以 Box scheme [26]、Symplectic method [26] 和 Yee's method [26] 三種格式做一比較，如表 4.4 所示 [26]。假設時間步長 $\Delta t = 0.01$ ，空間步長 $h = 0.1$ ，以角頻率 (angular frequency) ω 對波數向量 (wavenumber vector) (k_x, k_y) 作圖。此處定義 $|k_x| = |k_y| = \frac{2\pi}{\lambda}$ ，當波長 λ 為 1 時， $|k_x| = |k_y| = 2\pi$ ，以此類推，波長 λ 為 0.5 時， $|k_x| = |k_y| = 4\pi$ ，由波長越小，則波數越大的概念，設置 k_x 和 k_y 計算範圍為 $[-30, 30]$ ，由圖 4.5 可觀察出各種空間離散格式的各向異性 (Anisotropy)。圖 4.6 是由各向異性所造成的誤差 $\frac{\omega_{num} - \omega_{exact}}{\omega_{exact}} \times 100\%$ 對波數向量 (wavenumber vector) (k_x, k_y) 作圖，可得知本文所提出的數值方法在中、低波數，也就是誤差小於 5% 的區域，較其他數值方法更能有效地降低因各向異性所造成的誤差。圖 4.7 是角頻率 (angular frequency) 分別對 k_x 軸、 k_y 軸以及 $\kappa = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 作圖。由圖可看出在中低波數 (wavenumber) 各個數值方法皆能貼近實解的色散關係，隨著波數增大，數值色散所造成的誤差也隨之增大，而吾人所開發之具色散關係保持性質的離散系統在消除因數值色散所造成的誤差較其他的數值方法，具更好的效果，亦即本文所發展的方法可大幅提高對波數保持的能力。

4.3.3 數值相速度與群速度之分析 (Numerical phase velocity and group velocity analysis)

本節將針對數值相速度與群速度，與其他數值方法作一分析與討論。首先考慮相速度，根據二維實解之色散關係式 (4.3.2.1)，可得波的相速度 (phase

velocity) v_p 為 $\frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}}$ ，在無耗介質中，相速度與頻率無關，亦即無色散現象。令 $Cr = c\frac{\Delta t}{h}$ ，波數 $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{2\pi}{\lambda}$ ，描述波長的格點數 $N_\lambda = \frac{\lambda}{h}$ [28]，整理二維數值色散關係式 (4.3.2.2)，可得

$$\begin{aligned} \frac{v_{p,num}}{c} &= \frac{\omega_{num}}{ck} \\ &= \frac{N_\lambda}{\pi Cr} \sin^{-1} \left\{ Cr^2 \left(a_1 \sin\left(5\frac{\pi}{N_\lambda} \cos\phi\right) + a_2 \sin\left(3\frac{\pi}{N_\lambda} \cos\phi\right) + a_3 \sin\left(\frac{\pi}{N_\lambda} \cos\phi\right) \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + Cr^2 \left(a_1 \sin\left(5\frac{\pi}{N_\lambda} \sin\phi\right) + a_2 \sin\left(3\frac{\pi}{N_\lambda} \sin\phi\right) + a_3 \sin\left(\frac{\pi}{N_\lambda} \sin\phi\right) \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.3.3.1)$$

式 (4.3.3.1) 表明了數值相速度與平面波傳遞方向有關。

接下來，固定 $Cr = 0.2$ 以討論各個數值方法的數值相速度、數值色散誤差 (numerical dispersion error) 以及各向異性 (anisotropy) 的特性。圖 4.8 為取不同格點 $N_\lambda = 3, 5, 10, 20$ 來描述波長，相速度與光速的比值 ($\frac{v_p}{c}$) 對方位角 (Azimuth angle) 作圖。由圖中可得知，各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，而本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在相同的 N_λ 下比起其他數值方法更能夠消除因各向異性 (Anisotropy) 所帶來的誤差。圖 4.9 為固定方位角 (Azimuth angle) $\phi = \frac{\pi}{4}$ 時，相速度與光速的比值 ($\frac{v_p}{c}$) 對描述波長的格點數 $N_\lambda = \frac{\lambda}{h}$ 作圖。由圖可知，隨著 N_λ 越大，描述波長的網格越小，各個數值方法因離散所造成的數值色散誤差得到顯著的改善。本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統較其他的方法即便在較低的 N_λ 值的情況下，亦能減少因數值色散所帶來誤差，並達到較好的色散關係保持效果。

接著，在考慮所有傳播角度的情況下分析三維之相速度因離散所造成的數值色散誤差。透過定義在所有可能傳播方向 $0 \leq \theta \leq \pi$ 以及 $0 \leq \phi \leq 2\pi$ 下所造成的數值相速度與實解相速度之間的誤差為 $1 - \frac{|u_p(\omega, \theta', \phi')|}{c_0 = (\mu\epsilon)^{1/2}}$ 。考慮在整個球座標下的表面積 $4\pi r^2$ ，其總誤差為

$$E_{3D}(\omega) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(1 - \frac{|u_p(\omega, \theta', \phi')|}{c_0 = (\mu\epsilon)^{1/2}} \right) \sin\theta d\theta d\phi. \quad (4.3.3.2)$$

圖 4.10 為本文之數值方法以及其他數值方法在 E_{3D} 定義下之比較，可以看出隨著波長的越小，各個數值方法因離散所造成的數值色散誤差皆得到改善，而本文所開發出之具色散關係保持性質的離散系統較其他的方法即便在較低 N_λ 值的情況下，仍能減小因數值色散所帶來的誤差。

接著考慮群速度，根據二維之實解色散關係式 (4.3.2.1)，可得波的群速度 (group velocity) v_g 為 $\frac{\partial\omega}{\partial k}$ ，在無耗介質中群速度等於光速且與頻率無關，亦即無色散現象。且透過定義 γ 為群速度在傳播時兩個方向的夾角，亦即 $v_g =$

$|v_g|(\cos\gamma, \sin\gamma)$ ，其中 $\gamma = \tan^{-1}\left(\frac{(v_g)_y}{(v_g)_x}\right)$ 。透過上述之定義，表明了群速度的夾角 γ 在無耗的介質中應滿足實解 $\gamma = \phi$ ，其中 ϕ 為 $\tan^{-1}\left(\frac{k_y}{k_x}\right)$ 。在二維狀況下，根據二維數值色散關係式 (4.1.7)，透過上述定義，可以得到數值群速度 v_g 的大小值 $|v_g|$ 以及夾角 γ 。圖 4.11 為在 $Cr = 0.2$ 的情況下，數值群速度的夾角 γ 對方位角 ϕ 作圖，由圖可知在不同的方位角 ϕ 下，各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，它隨著數值波數 (modified wavenumber) kh 越大，此因各向異性所造成的誤差更加地劇烈。比起其他數值方法，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統在中、低數值波數 (modified wavenumber) kh 可以有效減少此一誤差。圖 4.12 為 $Cr = 0.2$ 的情況下，數值群速度的大小值對方位角 ϕ 作圖。由圖可知，在不同的方位角 ϕ 下，各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，且隨著數值波數 (modified wavenumber) kh 越大，此由各向異性所造成的誤差更加地劇烈。比起其他數值方法，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統可較有效的減少此一誤差，並得到較好的群速度分析。

4.4 數值分析之結果與討論

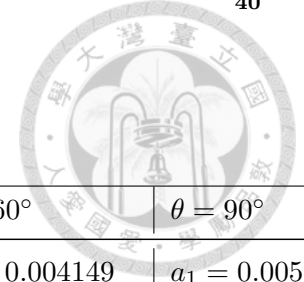
本文對於空間的一次微分項，在離散格式的架構下 [18, 19]，配合顯式具辛結構時間格式 (explicit symplectic time integrator) [24]，利用降低數值相速度與實解相速度之間誤差的理念，求得了具色散關係式保持性質的係數 $a_1 \sim a_3$ 。本文所開發的具色散關係保持性質之空間離散系統，特別針對在不同天頂角 (Zenith angle) 和方位角 (azimuth angle) 的情況下，開發各天頂角 (Zenith angle) 和方位角 (azimuth angle) 所對應的係數，以確保波在不同的傳播角度時皆能精確地得到色散關係保持之性質，以降低因各向異性 (anisotropy) 所造成的誤差。

對於因差分離散格式所引入的非物理性數值色散現象，透過前兩章節的分析，可知本文所發展之具色散關係保持性質的數值方法，對於因數值色散所引起的色散誤差以及各向異性皆具有良好的色散保持效果。針對不同傳播角度所求得相對應具色散關係保持的係數，能夠有效減少因各向異性所造成的誤差。



Cr	E_z L_2 -error norm	CPU TIME(s)
0.2	1.01785×10^{-4}	46.93
0.05	9.54572×10^{-5}	188.32

表 4.1: 計算經長時間 T 為 30(s) 的情況, $Cr = 0.2$ 及 $Cr = 0.05$ 之誤差以及所需花費的 CPU TIME(s) 比較。



ϕ	$\theta = 0^\circ$	$\theta = 30^\circ$	$\theta = 45^\circ$	$\theta = 60^\circ$	$\theta = 90^\circ$
0°	$a_1 = 0.005810$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$	$a_1 = 0.004149$ $a_2 = -0.060746$ $a_3 = 1.161493$	$a_1 = 0.002385$ $a_2 = -0.051924$ $a_3 = 1.143849$	$a_1 = 0.004149$ $a_2 = -0.060746$ $a_3 = 1.161493$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$
6°	$a_1 = 0.005781$ $a_2 = -0.068790$ $a_3 = 1.177581$	$a_1 = 0.004059$ $a_2 = -0.060291$ $a_3 = 1.160582$	$a_1 = 0.002309$ $a_2 = -0.051547$ $a_3 = 1.143095$	$a_1 = 0.004144$ $a_2 = -0.060719$ $a_3 = 1.161437$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$
9°	$a_1 = 0.005691$ $a_2 = -0.068454$ $a_3 = 1.176909$	$a_1 = 0.003941$ $a_2 = -0.059701$ $a_3 = 1.159411$	$a_1 = 0.002215$ $a_2 = -0.051076$ $a_3 = 1.142151$	$a_1 = 0.004137$ $a_2 = -0.060684$ $a_3 = 1.16137$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$
12°	$a_1 = 0.005594$ $a_2 = -0.067971$ $a_3 = 1.175942$	$a_1 = 0.003771$ $a_2 = -0.058855$ $a_3 = 1.15771$	$a_1 = 0.002083$ $a_2 = -0.050416$ $a_3 = 1.140832$	$a_1 = 0.004128$ $a_2 = -0.060640$ $a_3 = 1.161279$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$
22.5°	$a_1 = 0.004970$ $a_2 = -0.064850$ $a_3 = 1.169700$	$a_1 = 0.002639$ $a_2 = -0.053195$ $a_3 = 1.146390$	$a_1 = 0.001342$ $a_2 = -0.046708$ $a_3 = 1.133415$	$a_1 = 0.004084$ $a_2 = -0.060422$ $a_3 = 1.160843$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$
30°	$a_1 = 0.004149$ $a_2 = -0.060746$ $a_3 = 1.161493$	$a_1 = 0.001121$ $a_2 = -0.045605$ $a_3 = 1.131211$	$a_1 = 0.0006261$ $a_2 = -0.043131$ $a_3 = 1.126261$	$a_1 = 0.004051$ $a_2 = -0.060257$ $a_3 = 1.160513$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$
36°	$a_1 = 0.003262$ $a_2 = -0.056308$ $a_3 = 1.152616$	$a_1 = -0.000503$ $a_2 = -0.037483$ $a_3 = 1.114966$	$a_1 = 0.000085$ $a_2 = -0.040426$ $a_3 = 1.120852$	$a_1 = 0.004031$ $a_2 = -0.060154$ $a_3 = 1.160307$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$
45°	$a_1 = 0.002385$ $a_2 = -0.051925$ $a_3 = 1.143849$	$a_1 = -0.002069$ $a_2 = -0.029658$ $a_3 = 1.099315$	$a_1 = -0.000299$ $a_2 = -0.038507$ $a_3 = 1.117015$	$a_1 = 0.004018$ $a_2 = -0.06009$ $a_3 = 1.16018$	$a_1 = 0.005811$ $a_2 = -0.069054$ $a_3 = 1.178108$

表 4.2: 在天頂角 (Zenith angle) θ 為 0° & 90° 、 30° & 60° 和 45° ，配合方位角 (Azimuth angle) ϕ 為 0° & 90° 、 6° & 84° 、 9° & 81° 、 12° & 78° 、 22.5° & 67.5° 、 30° & 60° 、 36° & 54° 、 6° & 84° 和、 45° 情況下所對應的係數 $a_1 \sim a_3$ 的分布情況。當天頂角 (Zenith angle) θ 為 90° 時，可得到二維情況下的係數；當天頂角 (Zenith angle) θ 為 90° 和方位角 (Azimuth angle) ϕ 為 0° 或 90° 時，可得到一維情況下的係數。



	present	Yee's method
1D	$\Delta t \leq 0.798102 \frac{h}{c}$	$\Delta t \leq \frac{h}{c}$
2D	$\Delta t \leq 0.590161 \frac{h}{c}$	$\Delta t \leq 0.707107 \frac{h}{c}$
3D	$\Delta t \leq 0.499773 \frac{h}{c}$	$\Delta t \leq 0.57735 \frac{h}{c}$

表 4.3: 在三維情況下，本文所提出的 FDTD 數值方法與 Yee 方法在穩定性範圍的比較。

Dispersion relation equation	
1	$\frac{\omega^2}{4c^2} \left(\frac{\sin(\omega\Delta t/2)}{\omega\Delta t} \right)^2 = k_x^2 \left(\frac{5}{2}a_1 \frac{\sin(\frac{5}{2}k_x\Delta x)}{\frac{5}{2}k_x\Delta x} + \frac{3}{2}a_2 \frac{\sin(\frac{3}{2}k_x\Delta x)}{\frac{3}{2}k_x\Delta x} + \frac{1}{2}a_3 \frac{\sin(\frac{1}{2}k_x\Delta x)}{\frac{1}{2}k_x\Delta x} \right)^2$ $+ k_y^2 \left(\frac{5}{2}a_1 \frac{\sin(\frac{5}{2}k_y\Delta y)}{\frac{5}{2}k_y\Delta y} + \frac{3}{2}a_2 \frac{\sin(\frac{3}{2}k_y\Delta y)}{\frac{3}{2}k_y\Delta y} + \frac{1}{2}a_3 \frac{\sin(\frac{1}{2}k_y\Delta y)}{\frac{1}{2}k_y\Delta y} \right)$
2	$\frac{\tan^2(\frac{1}{2}\omega\Delta t)}{c^2\Delta t^2} = \frac{\tan^2(\frac{1}{2}k_x\Delta x)}{\Delta x^2} + \frac{\tan^2(\frac{1}{2}k_y\Delta y)}{\Delta y^2}$
3	$4 \frac{\tan^2(\frac{1}{2}\omega\Delta t)}{c^2\Delta t^2} = \frac{\sin^2(k_x\Delta x)}{\Delta x^2} + \frac{\sin^2(k_y\Delta y)}{\Delta y^2}$
4	$\frac{\sin^2(\frac{1}{2}\omega\Delta t)}{c^2\Delta t^2} = \frac{\sin^2(\frac{1}{2}k_x\Delta x)}{\Delta x^2} + \frac{\sin^2(\frac{1}{2}k_y\Delta y)}{\Delta y^2}$

表 4.4: 表列為四種數值方法的數值色散關係式。編號 1, 2, 3, 4 分別表示本文所提出的數值方法、box scheme [26]、symplectic method [26]、Yee schemes [26]。

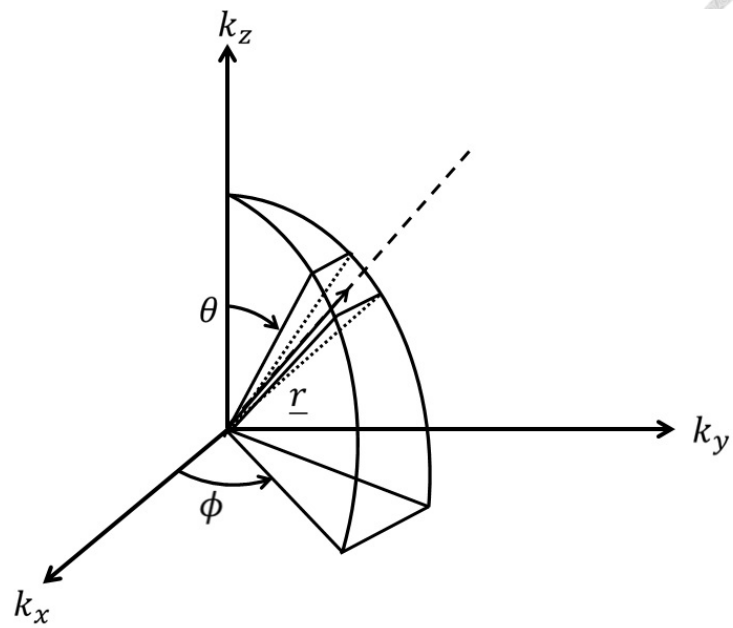


圖 4.1: 平面波在三維情況下傳遞時，定義出天頂角 (Zenith angle) θ ，方位角 (Azimuth angle) ϕ 。

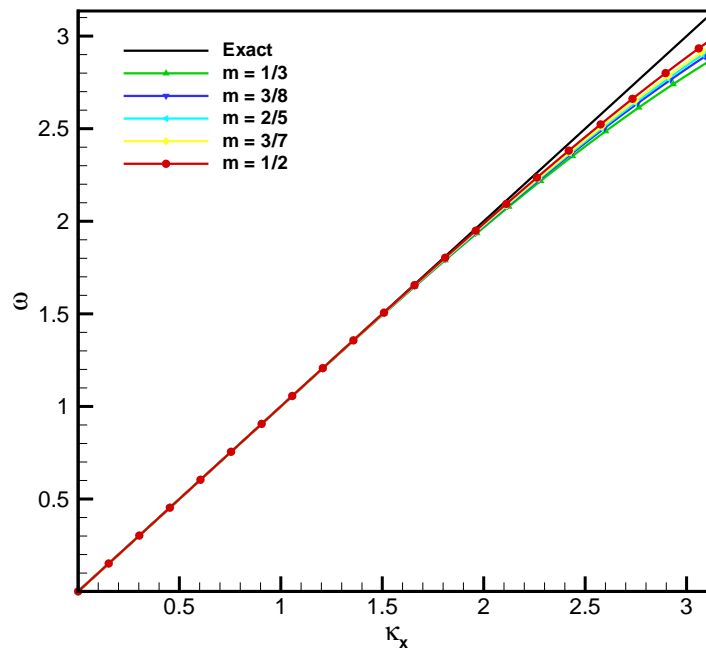


圖 4.2: 固定 Cr 為 0.2 時，在不同積分範圍下之色散關係之實解與數值解的比較。

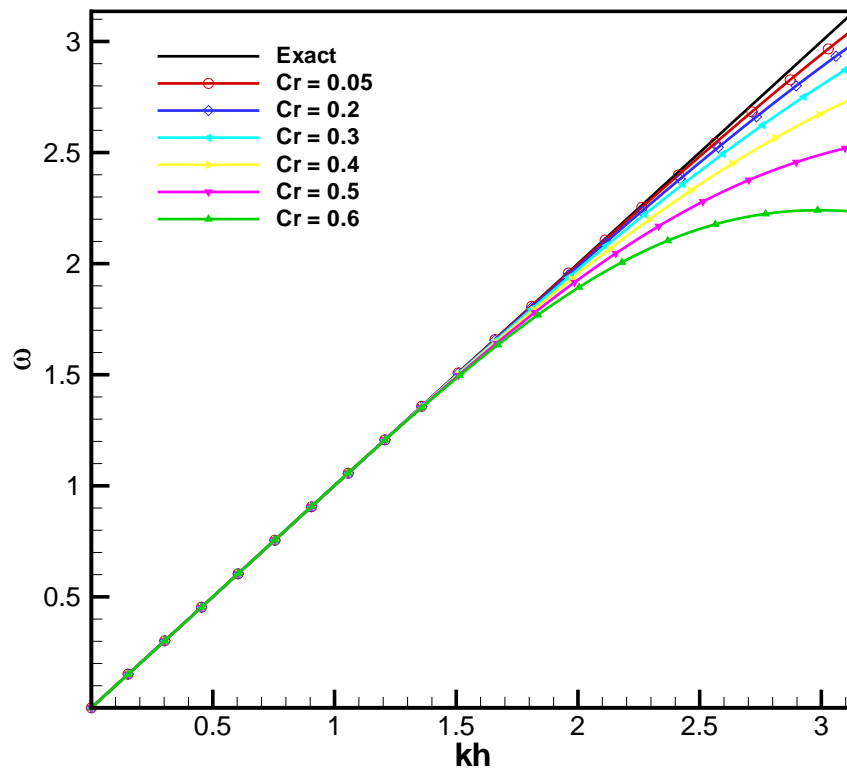


圖 4.3: 固定積分範圍 $\frac{-\pi}{2} \sim \frac{\pi}{2}$ 時，在不同 Cr 值情況下之色散關係之實解與數值解的比較。

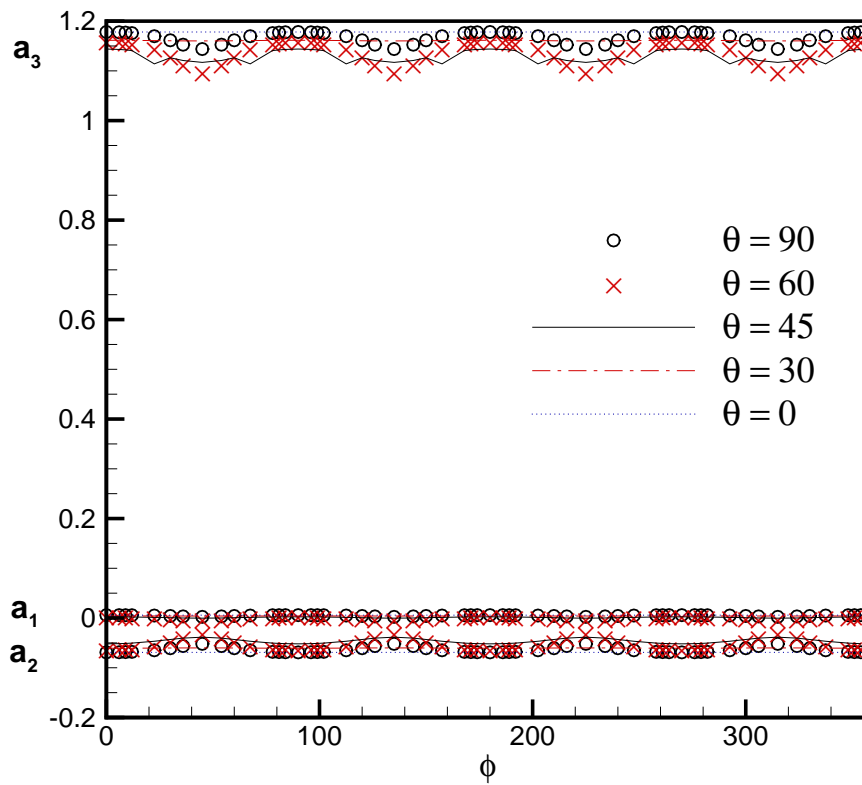
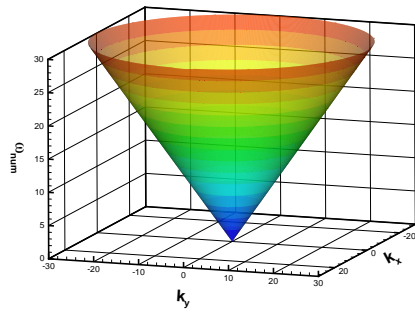
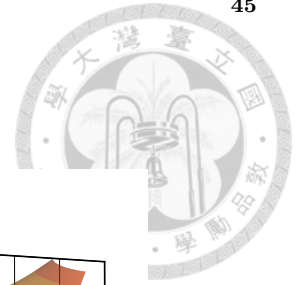
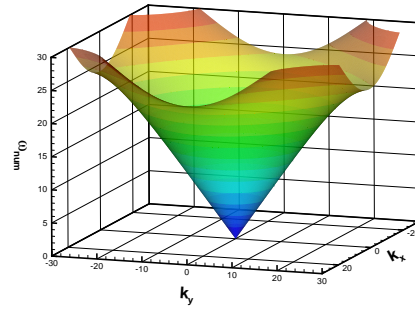


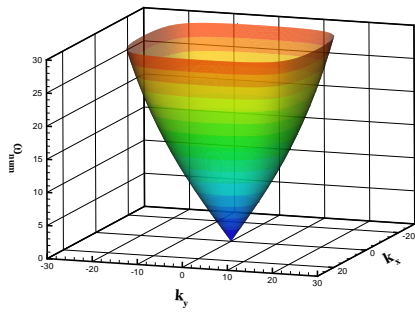
圖 4.4: 係數 $a_1 \sim a_3$ 在不同天頂角 (Zenith angle) θ 的情況下，其值隨方位角 (Azimuth angle) ϕ 之變化。當天頂角 (Zenith angle) θ 為 0° 時，一維情況下的係數分佈並不隨方位角 (Azimuth angle) ϕ 而變化。



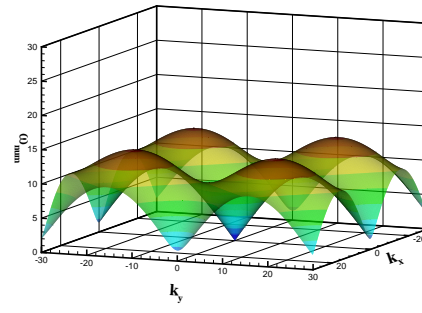
(a)



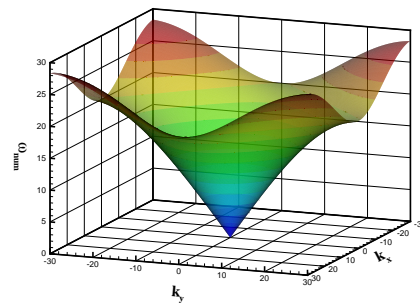
(b)



(c)



(d)



(e)

圖 4.5: 角頻率 (Angular frequencies) 對波數 (wavenumbers) k_x 和 k_y 之作圖，可觀察到因各向異性所造成的誤差。(a) 實解色散關係；(b) 本文所開發具色散關係保持的數值方法；(c) box scheme [26]；(d) symplectic scheme [26]；(e) Yee's scheme [26].

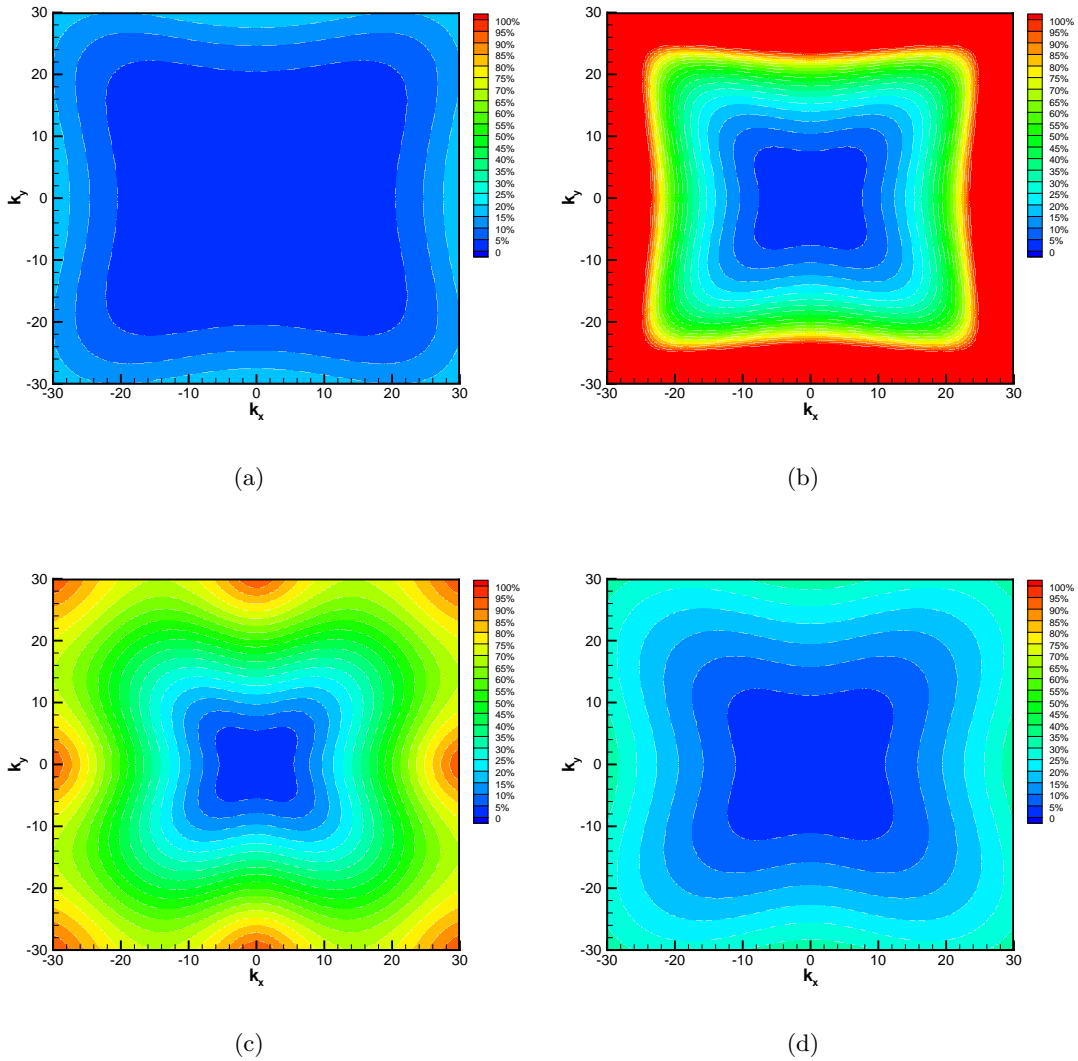
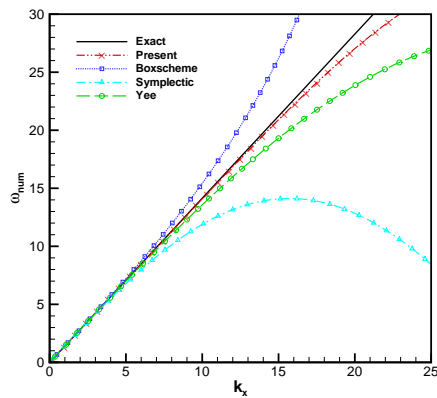
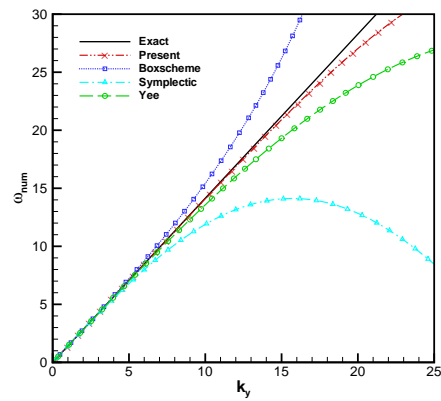


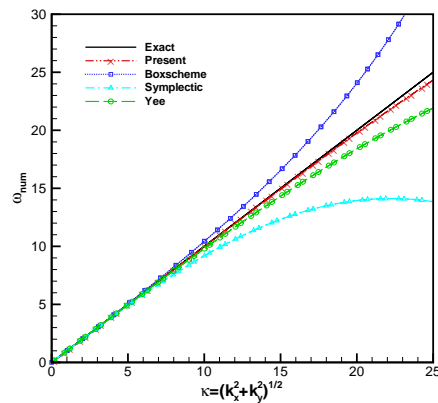
圖 4.6: 實解與數值角頻率的誤差 $\frac{(\omega_{num} - \omega_{exact})}{\omega_{exact}} \times 100\%$ 對波數 (wavenumbers) k_x 和 k_y 之作圖，可觀察出本文所提出的數值方法在中、低波數 (也就是誤差小於 5% 區域) 較其他數值方法能更有效地降低因各向異性所造成的誤差。(a) 本文所開發具色散關係保持的數值方法；(b) box scheme [26]；(c) symplectic scheme [26]；(d) Yee's scheme [26].



(a)



(b)



(c)

圖 4.7: 角頻率 (angular frequency) 分別對 k_x 軸、 k_y 軸以及 $\kappa = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 之剖面圖。在中、低波數 (wavenumber) 時，各數值方法皆能貼近實解色散關係，隨著波數增大，數值色散造成的誤差也隨之增大，比較其他的數值方法，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統對於減少因數值色散造成的誤差效果來的好的，亦即提高了對波數保持的能力。

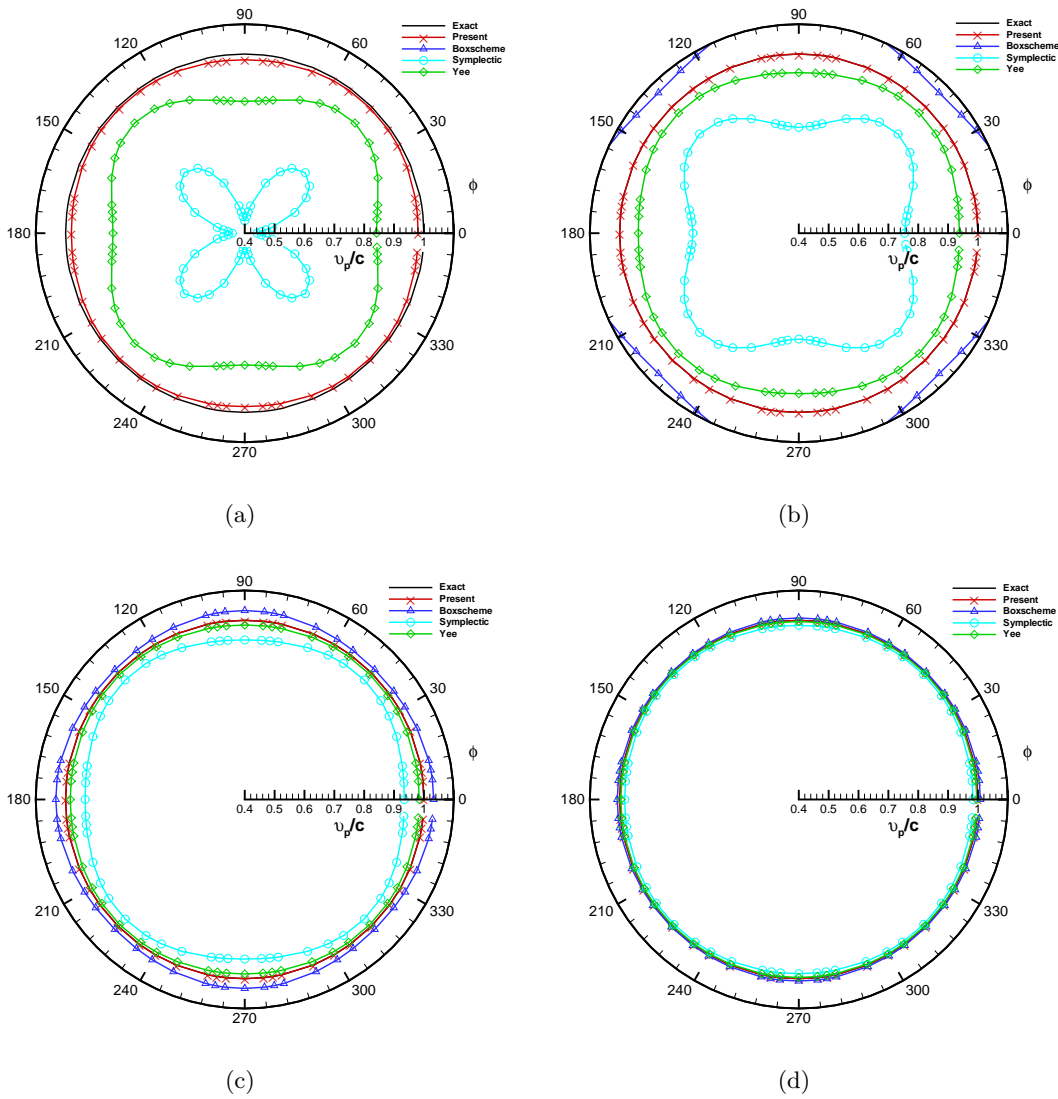


圖 4.8: 相速度與光速的比值 ($\frac{v_p}{c}$) 對方位角 (Azimuth angle) 之作圖。由圖中可看出各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在相同的 N_λ 情況下較其他的數值方法更能減少因各向異性 (anisotropy) 所帶來的誤差。(a) $N_\lambda = 3.1$; (b) $N_\lambda = 5$; (c) $N_\lambda = 10$; (d) $N_\lambda = 20$ 。

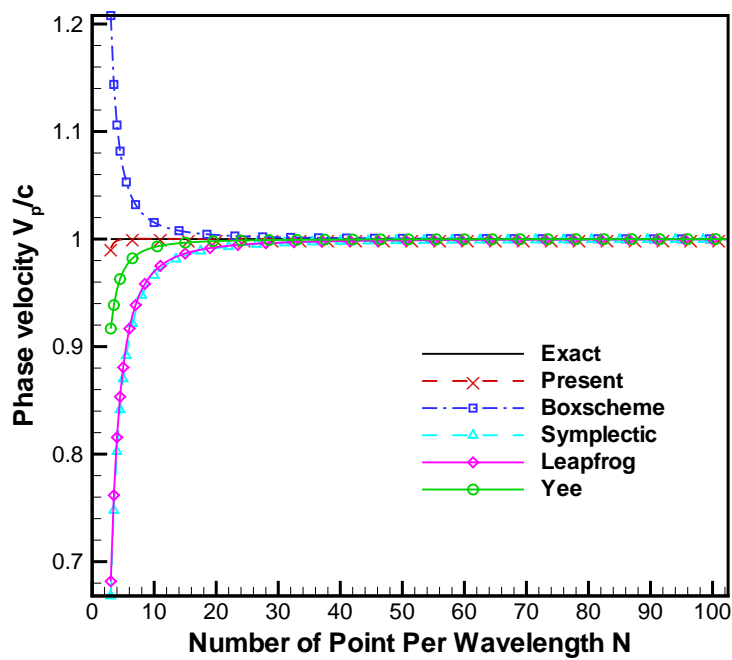


圖 4.9: 相速度與光速的比值 ($\frac{v_p}{c}$) 對波長內格點數 $N_\lambda = \frac{\lambda}{h}$ 之作圖，固定方位角 $\phi = \frac{\pi}{4}$ 。隨著 N_λ 越大，各個數值方法因離散所造成的數值色散誤差皆得到顯著的改善。本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在 N_λ 值很小時，即能有效地減小因數值色散所帶來的誤差，而達到較好的色散關係保持效果。

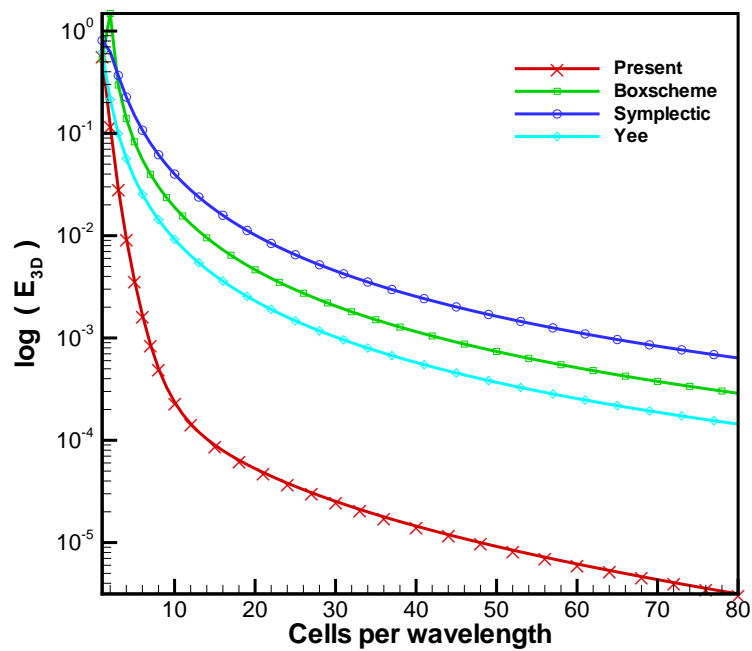


圖 4.10: 在三維情況下，考慮所有天頂角 ϕ 以及方位角 θ 時，實解與數值相速度之誤差對波長內格點數 $N_\lambda = \frac{\lambda}{h}$ 之作圖。隨著 N_λ 越大，各個數值方法因離散所造成的數值色散誤差皆獲得顯著的改善。本文所開發具色散關係保持性質的離散系統，即便在 N_λ 值很小時，亦能有效地減少因數值色散所帶來的誤差，而達到較好的色散關係保持效果。

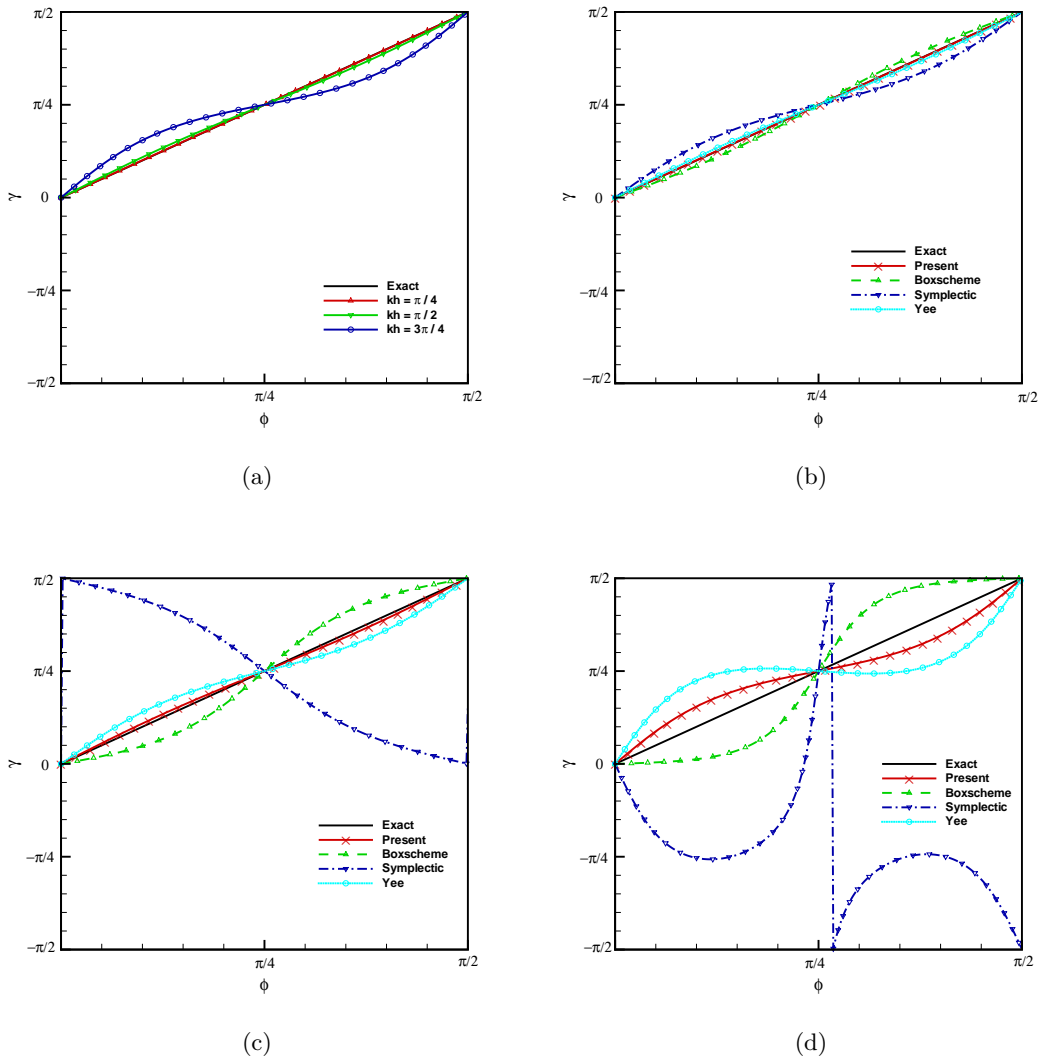
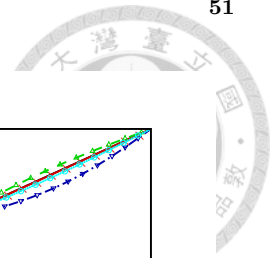
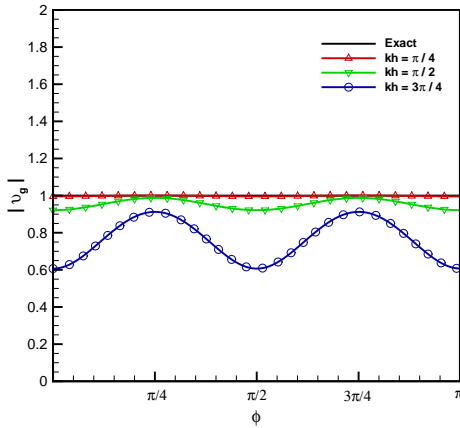
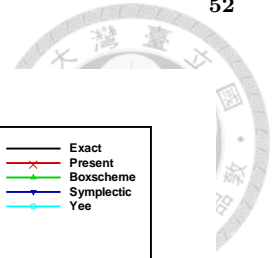
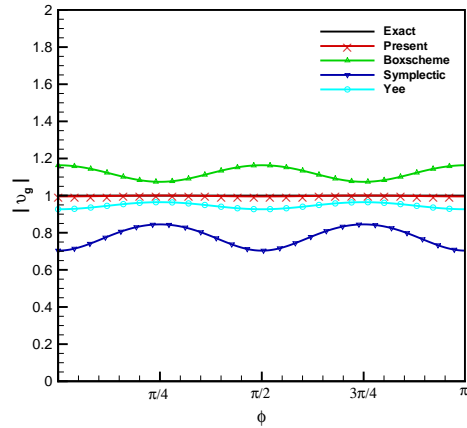


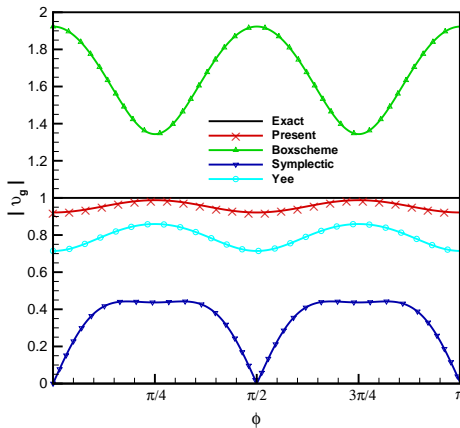
圖 4.11: 數值群速度的夾角 γ 對方位角 (Azimuth angle) ϕ 之作圖。由圖中可看出各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在中、低數值波數下 kh 較其他的數值方法更能減少因各向異性 (anisotropy) 所帶來的誤差。(a) 本文所開發之數值方法；(b) $kh = \frac{\pi}{4}$ ；(c) $kh = \frac{\pi}{2}$ ；(d) $kh = \frac{3\pi}{4}$ 。



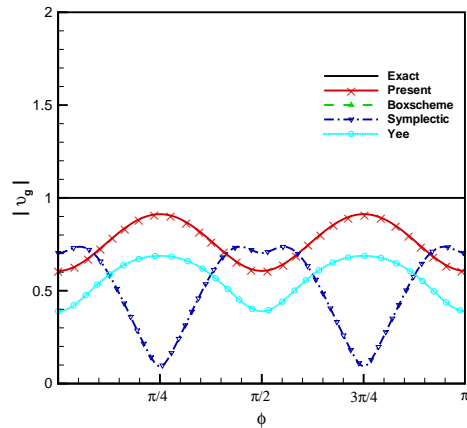
(a)



(b)



(c)



(d)

圖 4.12: 群速度的大小值對方位角 (Azimuth angle) ϕ 之作圖。由圖中可看出各個數值方法皆表現出因差分離散所造成的各向異性 (Anisotropy)，本文所開發之具色散關係保持性質的離散系統，在中、低數值波數 kh 下較其他的數值方法更能夠減少因各向異性 (anisotropy) 所帶來的誤差。(a) 本文所開發之數值方法；(b) $kh = \frac{\pi}{4}$ ；(c) $kh = \frac{\pi}{2}$ ；(d) $kh = \frac{3\pi}{4}$ 。



第五章

數值模擬之結果

在進行電磁波問題的模擬前，為了確保分析結果之正確性，必須先對數值程式作一驗證。在本章節，吾人將以具解析解之三維馬克斯威爾方程驗證顯式 (explicit) 具辛結構 (symplectic) 的時間離散與具 DRP 性質之空間離散的格式；並由能量的觀點，使用 Poynting theorem 求解具能量密度隨長時間計算得以保持性質之問題，以驗證程式具漢彌爾頓守恆性；因為本文是直接求解法拉第定律與安培定律得到電場與磁場，故需驗證高斯定律 ($\nabla \cdot \vec{H}$) 隨長時間計算是否仍得以保持。

程式驗證後，首先以驗證模擬無限域環境所使用的吸收邊界層 (CPML) 之有效性，並特別針對含有色散介質環境下的電磁波傳遞行為，作吸收效果的驗證分析，再將結果與 [29] 做比較，檢視是否達到驗證之目的。

進一步模擬電磁波的問題，介紹 FDTD 於全場與散射場之應用觀念，並以平面波的方式驗證全場與散射場的觀念。對於處理電磁波傳播空間中散射體的問題，我們引用等位函數 (Level set) 的觀念來處理材料性質常數於不連續界面的問題，實際模擬首先將使用米氏散射 (Mie scattering) 問題之半解析解 (semi-analytical solution) 與我們所開發之離散方法解作一驗證，並比較不同材料性質的模擬結果。最後，以所開發的離散方法，模擬一 L 型波導通道問題並觀察光波導的行為。



5.1 程式之驗證

吾人將以所開發出具 DRP 性質之顯式 FDTD 方法模擬，用以驗證本文所開發出具色散保持性質的數值方法是否符合漢彌爾頓的性質。首先，模擬二維 TM mode 馬克斯威爾方程，給定介電常數 $\epsilon = 1$ 及介磁常數 $\mu = 1$ ，模擬之範圍為 $-1 \leq x \leq 1$ 和 $-1 \leq y \leq 1$ ；所設定實解之初始條件 (initial condition) 為

$$\begin{aligned} E_z(x, y, 0) &= \sin(3\pi x)\sin(4\pi y) \\ H_x(x, y, 0) &= -\frac{4}{5}\cos(3\pi x)\cos(4\pi y) \\ H_y(x, y, 0) &= -\frac{3}{5}\cos(3\pi x)\cos(4\pi y) \end{aligned}$$

其隨時間改變的實解形式為

$$\begin{aligned} E_z(x, y, t) &= \sin(3\pi x - 5\pi t)\sin(4\pi y) \\ H_x(x, y, t) &= -\frac{4}{5}\cos(3\pi x - 5\pi t)\cos(4\pi y) \\ H_y(x, y, t) &= -\frac{3}{5}\cos(3\pi x - 5\pi t)\cos(4\pi y) \end{aligned} \quad (46)$$

首先，以網格點 81×81 ，空間長度 $\Delta x = \Delta y = 0.025$ ，時間長度為 $\Delta t = \Delta x / 5c$ ，在長時間 $t = 50$ (s) 的模擬下，並搭配本文所開發的方法，由圖 5.1 可知，在電場 E_z 的數值解與實解皆有一定的符合程度。

接下來，對於經離散後的馬克斯威爾方程，將觀察能量密度隨時間的變化，以檢驗程式是否具有漢彌爾頓守恆性質；依波因亭理論 (Poynting theorem) 定義能量密度 (Energy I 和 Energy II)

$$W_1(t) = \int_{\Omega} \epsilon |\underline{E}|^2 dx + \int_{\Omega} \mu |\underline{H}|^2 dx \equiv constant \quad (5.1.1)$$

$$W_2(t) = \int_{\Omega} \epsilon \left| \frac{\partial \underline{E}}{\partial t} \right|^2 dx + \int_{\Omega} \mu \left| \frac{\partial \underline{H}}{\partial t} \right|^2 dx \equiv constant \quad (5.1.2)$$

由圖 5.2 及圖 5.3 可以看出能量密度 W_1 及 W_2 並不會隨時間變化，此一結果表示以具辛結構時間離散來模擬長時間的問題時，由圖 5.4 顯示，確實能保持漢彌爾頓的守恆性質。

馬克斯威爾方程組係由法拉第定律、安培定律以及高斯定律所組成，一般求解電場與磁場之值時，只會使用到法拉第定律與安培定律，故我們以高斯定律作為再次驗證限制條件是否滿足。於直接求解法拉第定律與安培定律得到電場與磁場值之後，計算高斯定律之 $\nabla \cdot \vec{H}$ ，檢驗程式是否符合此一限制條件。由圖 5.5 可以看出程式隨時間計算滿足高斯定律 $\nabla \cdot \vec{H}$ 。

最後，本文將與傳統之 Yee's cell 離散格式作一比較。表 5.1 為當格點數皆為 51^2 、 61^2 、 71^2 和 81^2 時，固定模擬時間 T 為 5(s)， $L_2 - error norms$ 與 CPU time 的比較，由此表可知本文方法誤差值皆優於 Yee's cell 離散格式，計算成本卻稍微比 Yee's cell 離散格式大；但若是比較相近的 $L_2 - error norms$ 時，一樣固定模擬時間 T 為 5(s)，由表 5.2 可以看出本文的離散格式在使用少量格點數 51^2 、 61^2 和 71^2 即可達到與 Yee's cell 離散格式 (格點數為 198^2 、 254^2 和 346^2) 相近的 $L_2 - error norms$ 值，而且所花費之成本也比 Yee's cell 離散格式少。

進一步模擬三維馬克斯威爾方程，首先給定介電常數 $\epsilon = 1$ 及介磁常數 $\mu = 1$ ，模擬之範圍為 $-\pi \leq x \leq \pi$ 、 $-\pi \leq y \leq \pi$ 和 $-\pi \leq z \leq \pi$ ；所設定實解之初始條件 (initial condition) 為

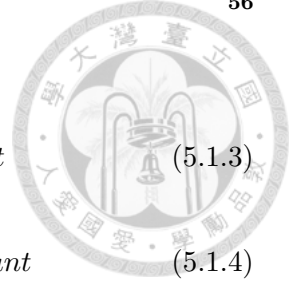
$$\begin{aligned} E_x(x, y, z, 0) &= 0 \\ E_y(x, y, z, 0) &= 0 \\ E_z(x, y, z, 0) &= 0 \\ H_x(x, y, z, 0) &= \cos(x + y + z) \\ H_y(x, y, z, 0) &= \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{3}) \cos(x + y + z) \\ H_z(x, y, z, 0) &= -\frac{1}{2}(1 + \sqrt{3}) \cos(x + y + z) \end{aligned}$$

其隨時間改變的實解形式為

$$\begin{aligned} E_x(x, y, z, t) &= \sin(\sqrt{3}t) \sin(x + y + z) \\ E_y(x, y, z, t) &= -\frac{1}{2}(1 + \sqrt{3}) \sin(\sqrt{3}t) \sin(x + y + z) \\ E_z(x, y, z, t) &= \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{3}) \sin(\sqrt{3}t) \sin(x + y + z) \\ H_x(x, y, z, t) &= \cos(\sqrt{3}t) \cos(x + y + z) \\ H_y(x, y, z, t) &= \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{3}) \cos(\sqrt{3}t) \cos(x + y + z) \\ H_z(x, y, z, t) &= -\frac{1}{2}(1 + \sqrt{3}) \cos(\sqrt{3}t) \cos(x + y + z) \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

首先，以網格點 $81 \times 81 \times 81$ ，空間長度 $\Delta x = \Delta y = \frac{\pi}{40}$ ，時間長度為 $\Delta t = \Delta x / 5c$ ，並在長時間 $t = 50$ (s) 的模擬下，並搭配本文所開發的方法，由圖 5.6 可知，在電場 E_z 的數值解與實解皆有一定的符合程度。

接下來，對於經離散後的馬克斯威爾方程，將觀察能量密度隨時間的變化，以檢驗程式是否具有漢彌爾頓的守恆性質；依波因亭理論 (Poynting theorem) 定



義能量密度 (Energy I 和 Energy II)

$$W_1(t) = \int_{\Omega} \epsilon |\underline{E}|^2 dx + \int_{\Omega} \mu |\underline{H}|^2 dx \equiv constant \quad (5.1.3)$$

$$W_2(t) = \int_{\Omega} \epsilon \left| \frac{\partial \underline{E}}{\partial t} \right|^2 dx + \int_{\Omega} \mu \left| \frac{\partial \underline{H}}{\partial t} \right|^2 dx \equiv constant \quad (5.1.4)$$

由圖 5.7 及圖 5.8 可以看出能量密度 W_1 及 W_2 並不會隨時間變化，此一結果表示以具辛結構時間離散來模擬長時間的問題時，由圖 5.9 顯示，確實能保持漢彌爾頓的守恆性質。

最後，本文將與傳統之 Yee's cell 離散格式作一比較，表 5.3 為當格點數皆為 51^3 、 61^3 、 71^3 和 81^3 時，固定模擬時間 T 為 5(s)， $L_2 - error norms$ 與 CPU time 的比較，由此表可知本文方法誤差值優於 Yee's cell 離散格式，計算成本卻稍微比 Yee's cell 離散格式大；但若是比較相近的 $L_2 - error norms$ 時，一樣固定模擬時間 T 為 5(s)，由表 5.4 可以看出本文的離散格式在使用少量格點數 51^3 、 61^3 和 71^3 即可達到與 Yee's cell 離散格式 (格點數為 111^3 、 149^3 和 172^3) 相近的 $L_2 - error norms$ 值，而且花費之成本也比 Yee's cell 離散格式少。

5.2 色散介質中 CPML 吸收性的驗證

為了檢驗卷積完美匹配吸收層 (Convolution PML, CPML) 於含有色散介質之計算空間中的有效性，並以圖 5.10-a 為本節所參考的三種色散介質 Debye、Lorentz 及 Drude 隨頻率變化之相對介電係數，透過這些材料參數，我們以一維含有色散介質空間的問題來驗證，並與參考文獻 [29] 比較。

以一維問題而言，計算域的分配，分別以 (1~250 網格) 為真空介質及 (251~500 網格) 為色散介質，而空間隔距為 $75E-6$ (m)，時間步長為 $0.125E-12$ (s)，並在計算域之左右兩端設置了 $10\Delta x$ 厚度的 CPML，以吸收不必要的反射波。對於波源，吾人設定為高斯波源

$$Gaussianpulse = exp \left[-\left(\frac{t-t_0}{d} \right)^2 \right] \quad (5.2.1)$$

其中 $d=40\Delta t$ 、 $t_0=3d$ ，並將波源設置於 $x=235\Delta$ 處。圖 5.10-b~d，分別為計算域於真空與 Debye 介質中、計算域於真空與 Lorentz 介質中及計算域於真空與 Drude 介質中，於吸收邊界前一為觀察點之結果，並與參考文獻 [29] 比較。

以三維問題而言，依參考文獻 [16]，空間隔距為 $5E-2$ (m)，時間步長為 $3.335641E-11$ 。探討問題包括兩個格點系統，分別為 $44 \times 44 \times 44$ ，另一為 $200 \times$



200 × 200，用來模擬無窮域的狀況。吾人設定一電偶極子源

$$P(t) = 10E^{-10} \exp \left[-\left(\frac{t-t_0}{\tau} \right)^2 \right] \quad (5.2.2)$$

其中 $\tau=2E-9$ 、 $t_0=3\tau$ 。於 $x(0,0,0)$ 處，設置三個參考點 $P(20,0,0)$ 、 $Q(20,20,0)$ 和 $R(20,20,20)$ 。在兩個計算域中，如圖 5.11 所示，分別在 Debye 介質 (圖 5.13-b~d)、Lorentz 介質 (圖 5.14-b~d) 和 Drdue 介質 (圖 5.15-b~d) 中，計算出電場 E_z 的值，並進一步比較電場 E_z 的值以及相對誤差

$$Relative\ error|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = \frac{|E|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - E_{ref}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n|}{|E_{refmax}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n|} \quad (5.2.3)$$

最後，經由含有色散介質空間的問題，透過文獻之比對，不論介質空間為真空介質、絕緣介質、色散介質亦或是多層介質，只要經正確地與 CPML 邊界匹配，CPML 皆能有效的吸收不必要的反射波，證明了 CPML 普遍的適用性。

5.3 實際題目之求解

實解驗證是在有限的範圍下，求解數值解並與實解驗證；不同於實解驗證的情況，本章節將以開發之離散方法模擬真實的題目，實際題目的模擬通常是無限域的問題，所以我們必須配合第二章所使用的卷積完美匹配層 (CPML) 技巧，將無限域問題轉換成有限的計算空間，前半部我們為了節省計算成本以及簡單化程式寫法，實際題目的入射波以外加波源項的方式進入觀察場，利用全場與散射場技巧，可觀察波經過散射體所產生的散射行為，並以一維平面波驗證全場與散射場的設置方法；對於觀察場內電磁波經過散射體的問題，當電磁波模擬遇到不連續交界面時，可能因材料性質常數的急遽變化，從而造成模擬誤差的遽增。為了處理因不連續交界面所導致的不良影響，本文將介紹等位函數 (Level set) 的觀念，並以等位函數 (Level set) 的方法，將不連續交界面的材料性質常數作一平滑化的處理，以使模擬誤差得以降低；最後，本文所模擬之實際問題分兩類：

- 一、米氏散射 (Mie scattering) 問題。
- 二、光波導問題。



5.3.1 全場 / 散射場

為了模擬無限域問題，通常利用全場 (total-fields)、散射場 (scattered-fields) 及最外層的卷積完美匹配層 (CPML)，如圖 (5.16) 所示，將有興趣之觀察範圍轉化為計算域。當平面波在全場要進入散射場前必須減掉入射場值，所以能減少吸收邊界與入射場所產生的誤差，僅有散射場得使用吸收邊界吸收，今日之 FDTD 軟體多半使用此一技術來解決散射場的問題。由物理的觀點視之，線性的馬克斯威爾方程之全場 (total-fields) 與散射場 (scattered-fields) 的關係可以下式表示之：

$$E_{total} = E_{inc} + E_{scat}, \quad (5.3.1)$$

$$H_{total} = H_{inc} + H_{scat}. \quad (5.3.2)$$

對於全場與散射場之驗證，本文將由物理的觀點出發，當散射物體離波源具一定距離時，散射物體相對於波源的波前將極小，此時入射波可視為一平面波，故驗證時利用平面波的方式做為入射波。本文以高斯波入射的方式來模擬平面波，當計算域 $\Omega[-380nm, 380nm]$ ，格點數為 $\Omega[191, 191]$ 及 $Cr = 0.2$ 時，入射波沿 x 方向傳遞到全場與散射場的交介面時，在沒有散射體的情況下，全場值進入散射場時，入射波場值會被截掉，散射場值為零，如圖 (5.17) 所示。

5.3.2 等位函數法

電磁波傳遞並不只是在真空中方能傳播，在自然界中，電磁波傳遞常是經過不同介質，例如當個人手機發出訊號傳給基地台，或是基地台發射訊號至個人手機時，訊號傳遞可能會由空氣經過不同的建築物體。以上的情況，可用馬克斯威爾方程配合不同材料性質以進行模擬。在此，我們將關注的問題縮小範圍，于線性 (linear)，非色散 (nondispersive) 且無方向性 (isotropic) 的介質中，圖 (5.18) 為示意圖，電磁波在觀察場 $\Omega[0, L]$ 由左至右傳遞，途中經過不同的材料，假設 $\mu = \mu_1 = \mu_2 = \mu_0$ ，則材料性質係數 ϵ_r 隨位置之函數為

$$\epsilon(x) = \begin{cases} \epsilon_1, & x < L_1, \\ \epsilon_2, & L_1 < x < L_2, \\ \epsilon_1, & x > L_2. \end{cases} \quad (5.3.3)$$

由式 (5.3.3) 可觀察到當 $x = L_1$ 和 $x = L_2$ 時，材料性質係數 ϵ_r 於交界面會產生不連續的狀況，在此我們引用等位函數法 (level set) [30] 的概念來處理材料性質係

數 ϵ_r 於界面不連續的狀況。在等位函數方法中，給定界面的位置，以界面為邊界，把整個區域分為兩個區域（外部區域與內部區域），以描述不同之介質。定義一等位函數 (Level set function) $\Phi(x)$ ，它的大小係表示在空間中之任意點到界面的最短距離

$$|\Phi(x)| = d(x) = \min_{x_I \in I} (x - x_I) \quad (5.3.4)$$

其中下標 I 代表界面，定義在界面內部點的距離為負值，外部點的距離正值，交界面上的點就是距離函數值為 0 的點；為了處理交界面上的不連續現象，本文引入 Heaviside function, H

$$H(\Phi) = 0, \Phi < 0 \quad (5.3.5)$$

$$H(\Phi) = 1, \Phi > 0 \quad (5.3.6)$$

使用有限差分法做近似散射體時，如果封閉曲線（或稱介質界面）的梯度變化很大時，誤差累積會增大，所以需要在適度的網格內，需經過平滑化 (smoothing) 的處理，以使等位函數 Φ 能始終地保持正負號距離函數的性質，以達到散射體的曲面平滑化目的 [31]。材料性質係數對於空間變化之表示式可以上述之等位函數取代之

$$\Phi = \frac{1}{[1 + e^{\phi(x,y,z)/(\xi\Delta)}]} \quad (5.3.7)$$

其中， Δ 代表網格長度， $\phi(x,y,z)$ 為位置函式， ξ 則為可以調整的平滑係數。以上的材料性質係數 ϵ_r 隨位置之函數為例，作一實際之測試，於交界面上的平滑處觀察材料性質係數變化，當範圍 $\Omega[-200, 200] \text{ nm}$ ，我們將界面分別設於 $(L_1, L_2) = (-63.28, 63.28) \text{ nm}$ ，材料性質係數分別為 $(\epsilon_1, \epsilon_2) = (1, 2)$ ，圖 (5.19) 表示在不同 ξ 值時，材料性質係數隨位置不同的平滑情況，最後選擇 $\xi = 0.3$ 當模擬時的係數。對於接下來所模擬之真實題目，遇到不同材料交介面時，皆以此一方法將材料性質係數於不連續的界面予以平滑化。

5.3.3 實際題目模擬之結果

一、米氏散射 (Mie scattering) 問題

本文模擬之問題為米氏散射 (Mie scattering) 問題。圖 5.20 為米氏散射 (Mie scattering) 問題示意圖，考慮一圓柱材質（半徑為 $a = \frac{\lambda}{10}$ ），置於空

氣中，設空氣與此材質之相對介電常數值比為 1 : 12.1104；入射波長為 $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ 。

為了模擬之驗證，首先考慮二維米氏的散射 (Mie scattering) 問題，計算域 $\Omega = [-380, 380] \text{ nm}$ ，網格點數為 $[191 \times 191]$ ， $Cr = 0.2$ 。當平面波沿 x 方向入射，圖 (5.21) 為一維方向的入射波，時間步為 600、850、1200、1350、1600 和 1900 時之模擬結果。接下來，以一維入射波的題目求得數值解並與半解析解 (semi-analytical) 比較之。當波長為 $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ ，頻率 f 便可由光速 c 求得，將原本電場值以傅立葉轉換 (Fourier transform) 的方式轉至頻域

$$E(f) = \int_0^{t_T} E(t) \cdot e^{-j2\pi ft} dt \quad (5.3.8)$$

式 5.3.8 可以寫成有限差分之格式

$$E(f) = \sum_{n=0}^T E(n \cdot \Delta t) \cdot e^{-j2\pi f n \cdot \Delta t} \quad (5.3.9)$$

其中 T 為所給定之時間步， Δt 為時間步長，即 $t_T = T \cdot \Delta t$ 。

式 5.3.9 可再以三角函數展開，分成實部與虛部的形式

$$E(f) = \sum_{n=0}^T E(n \cdot \Delta t) \cdot \cos(2\pi f \cdot n \cdot \Delta t) - j \sum_{n=0}^T E(n \cdot \Delta t) \cdot \sin(2\pi f \cdot n \cdot \Delta t) \quad (5.3.10)$$

利用式 5.3.10 即可求得固定頻率之相位和振幅 [32, 33]。

半解析解則可利用貝索函數展開 (Bessel function expansion) 的方式求得 [34]，以單頻平面波的方式求得最後的數值解。圖 (5.22) 為半解析解電場 E_z 圖；圖 (5.23) 為數值解電場 E_z 圖。圖 (5.24) 為半解析解與數值解電場 E_z 等高線圖。本文以剖面圖的方式觀察半解析解與數值解之情況，圖 (5.25a) 為電場 E_z 沿 x 方向 ($y = 0$) 之半解析解和數值解之比較圖；圖 (5.25b) 為電場 E_z 沿 y 方向 ($x = 0$) 之半解析解和數值解之比較圖。

最後，比較材料性質係數 ϵ_r 在不同情況下之解，由圖 (5.26) 可以看出，當材料性質係數 ϵ_r 變大時，數值解模擬結果的誤差也隨之增加，此一差異可能是因為模擬時，對於不同材料性質係數 ϵ_r 所求得之數值解皆以固定網格點數 $[191 \times 191]$ ，以及固定等位函數 (Level set) 參數 $\xi = 0.3$ 求解的原因。由此可知，以固定網格點為 $[191 \times 191]$ 及固定等位函數 (Level

set) 參數 $\xi = 0.3$ 時，只適合模擬材料性質係數為 $\epsilon_r \cong 12$ ，對於其他變化之材料性質係數 ϵ_r 則需重新選擇適當之網格點數及等位函數 (Level set) 參數 ξ 。

接下來模擬三維米氏散射 (Mie scattering) 問題，計算域 $\Omega = [-380, 380]nm$ ，網格點數為 $[121 \times 121 \times 121]$ ， $Cr = 0.2$ 。為了便於觀察和圖示，我們設置三個觀察面 (monitor planes) 來監測電場隨時間的變化，如圖 5.27。圖 5.28-5.30 為一維方向入射波，當時間步為 0、560、760、850、1160 和 1800 時，在三個不同觀測面上之模擬結果。可以看出觀察面 1 (monitor plane 1) 圖 5.28 與二維模擬情況趨勢一致，而觀察面 2 (monitor plane 2) 圖 5.29 受 CPML 的影響而有些微的變化。由觀察面 3 (monitor plane 3) 則可清楚看出平面波於交界面傳遞時場值之分布。圖 5.31 給出了四根散射柱散射之情況。

二、光波導模擬

光波導是指光波於光子晶體 (Photonic crystal) 內傳播的現象，而光子晶體一詞於 1987 年由 E. Yablonovitch [35] 和 S. John [36] 所提出；當介電材料週期性排列於傳播空間中，因為傳播空間與介電材料之介電常數的不同，使得介電材料之介電常數週期性排列於傳播空間中，若以特定方式造成介電常數週期性的排列，將出現光子頻率帶隙 (Photonic Band Gap, PBG)，落於此頻率帶間的光將無法於光子晶體陣列內傳播，我們將得以構成光子頻率帶隙之周期性介電結構稱作為光子晶體。光波導之應用由此觀念衍生，我們可以於光子晶體內設計通道 [37]，利用光無法傳至光子晶體結構之特性，於設計的通道內者能產生光波導之現象，便能隨意地控制光行走的方向；而光即是電磁波現象，利用光子晶體的方式，電磁波無法於光子晶體內產生其他傳播模態，故能量將僅能於設計的通道中聚集並傳播。但是設計的波導通道也必須注意轉彎的角度問題，若是通道轉角的曲率設計不良，光子晶體的特性將於通道轉角的部份造成能量的散失。為了保持良好的能量傳遞特性，通道轉角的曲率也是當前的熱門研究重點 [38]。

對於光波導的模擬結構，可參考 [38] 的設計方式於三維傳播空間 (空氣) 中，利用長度為 $a = 515nm$ 的正方晶格所排列成之光子晶體設計一個三維 L 型波導通道，其中，組成正方形晶格的元素是半徑為 $0.2a$ 之介電質圓柱 (介電常數 $\epsilon_r = 11.56$)。為了便於觀察與圖示，此實際題目亦設置了觀察面如圖 5.27(b)，其截面的結構示意圖如圖 (5.32)。圖 (5.33) 為

電場 E_z 於歸一化頻率 (normalized frequency) 為 $0.353 (c/a)$ 時，於觀察面下在彎曲的光子晶體通道傳播之現象。文獻 [38] 也說明了此一設定所保持的高能量傳遞效率。本文比較了其他無法產生波導現象之歸一化頻率情況，圖 (5.34) 顯示當歸一化頻率為 $0.206 (c/a)$ 時，並無法產生光波導現象。最後，圖 (5.35) 我們也與 Mekis 等人 [38] 的結果與模擬結果作一比較。

	L_2 -error norm		CPU time (seconds)	
	Present	Yee [1]	Present	Yee [1]
51×51	7.0023E-03	0.1131	0.8580	0.0468
61×61	4.3059E-03	6.3761E-02	1.4352	0.0936
71×71	2.3572E-03	4.0715E-02	2.2620	0.1560
81×81	1.3177E-03	2.8440E-02	3.6036	0.2340

表 5.1: 當模擬時間為 $T=5$ (s) 時，格點數為 51^2 、 61^2 、 71^2 和 81^2 時，利用離散方法與 Yee 的離散方法比較計算所得之 $L_2 - error norms$ 和 CPU 時間。

Present			Yee [1]		
L_2 -error norm	Grid	CPU time (s)	L_2 -error norm	Grid	CPU time (s)
7.0023E-03	51×51	0.8580	7.0534E-03	198×198	3.2760
4.3059E-03	61×61	1.4352	4.3346E-03	254×254	6.8640
2.3572E-03	71×71	2.2620	2.3627E-03	346×346	17.5813

表 5.2: 當模擬時間為 $T=5$ (s) 時，計算至相近之 $L_2 - error norms$ 時，比較利用離散方法與 Yee 的離散方法所需網格點數與花費之 CPU 的時間。

	L_2 -error norm		CPU time (seconds)	
	Present	Yee [1]	Present	Yee [1]
$51 \times 51 \times 51$	1.1311E-04	6.9636E-04	7.4880	3.5568
$61 \times 61 \times 61$	8.0305E-05	4.8682E-04	14.4144	7.3476
$71 \times 71 \times 71$	5.9525E-05	3.5937E-04	23.9305	13.6657
$81 \times 81 \times 81$	4.5102E-05	2.7428E-04	38.8598	23.0569

表 5.3: 當模擬時間為 $T=5$ (s) 時，格點數為 51^3 、 61^3 、 71^3 和 81^3 時，比較利用離散方法與 Yee 的離散方法計算所得之 $L_2 - error norms$ 和 CPU 時間。

Present			Yee [1]		
L_2 -error norm	Grid	CPU time (s)	L_2 -error norm	Grid	CPU time (s)
1.1311E-04	$51 \times 51 \times 51$	7.4880	1.1424E-04	$111 \times 111 \times 111$	81.3701
8.0305E-05	$61 \times 61 \times 61$	14.4144	8.1032E-05	$149 \times 149 \times 149$	261.5045
5.9525E-05	$71 \times 71 \times 71$	23.9305	6.0680E-05	$172 \times 172 \times 172$	277.4478

表 5.4: 當模擬時間為 $T=5$ (s) 時，計算至相近之 $L_2 - error norms$ 時，比較利用離散方法與 Yee 的離散方法所需網格點數與花費之 CPU 的時間。

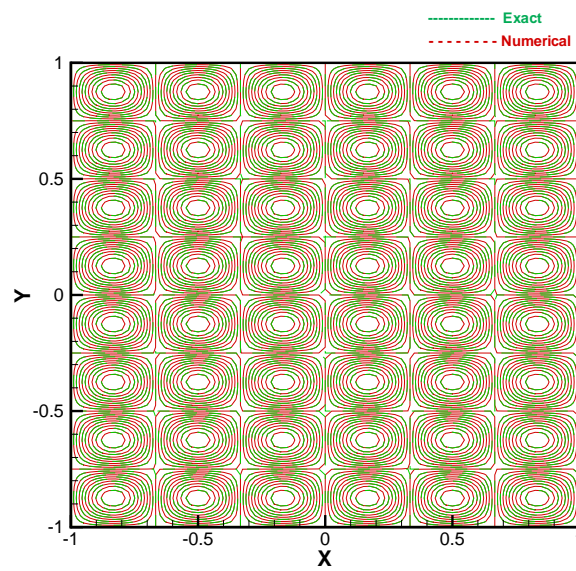


圖 5.1: 在網格點 81×81 ，時間為 50 秒的情況，比較 TM 波所算出之電場 E_z 值的數值解和實解。

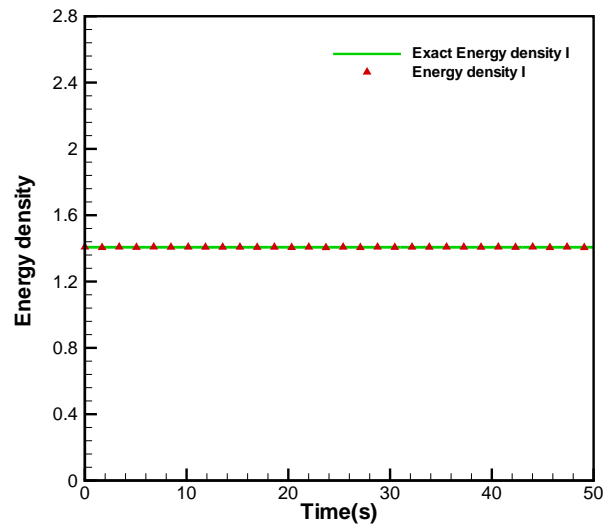


圖 5.2: 在時間 $T=50(s)$ 時，比較二維馬克斯威爾方程 (TM wave) 實解和數值解之能量密度 (Energy I) 隨時間變化之趨勢。

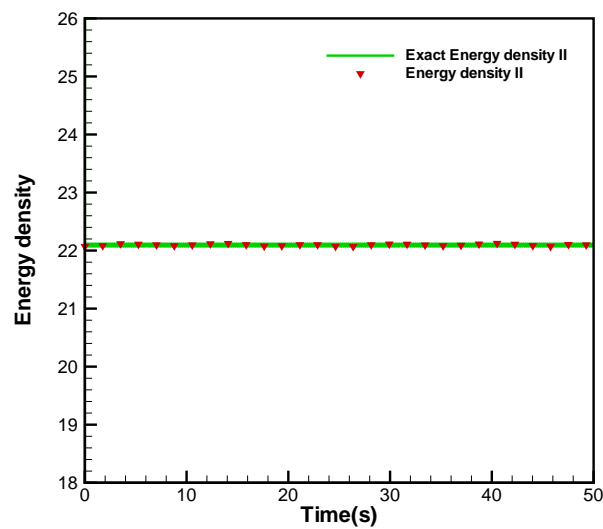


圖 5.3: 在時間 $T=50(s)$ 時，比較二維馬克斯威爾方程 (TM wave) 實解和數值解之能量密度 (Energy II) 隨時間變化之趨勢。

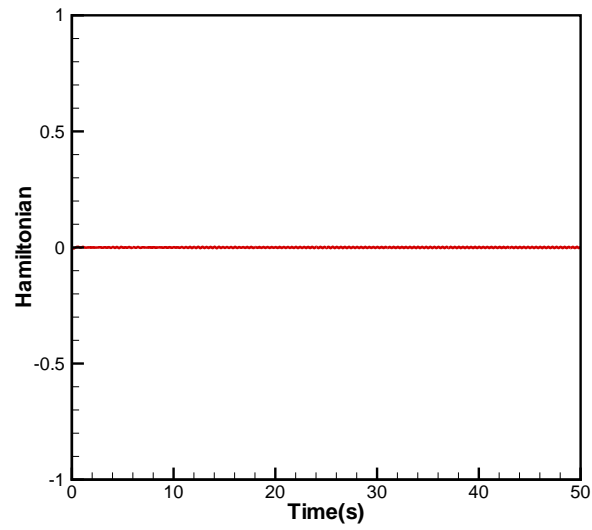


圖 5.4: 二維驗證中，Hamiltonian 隨時間變化之趨勢。

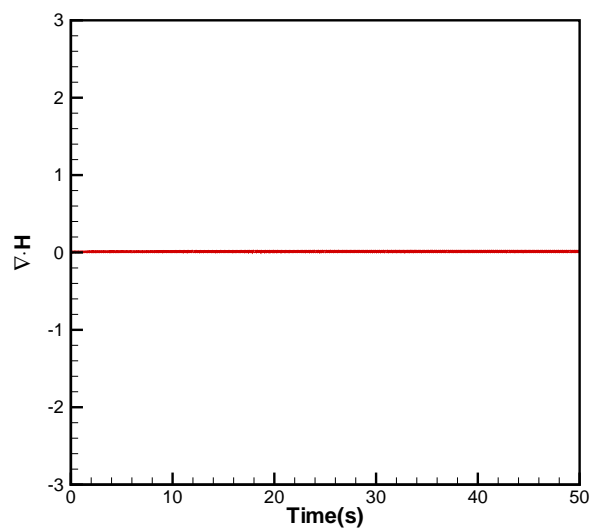


圖 5.5: 二維驗證中，高斯定律隨時間變化之趨勢。

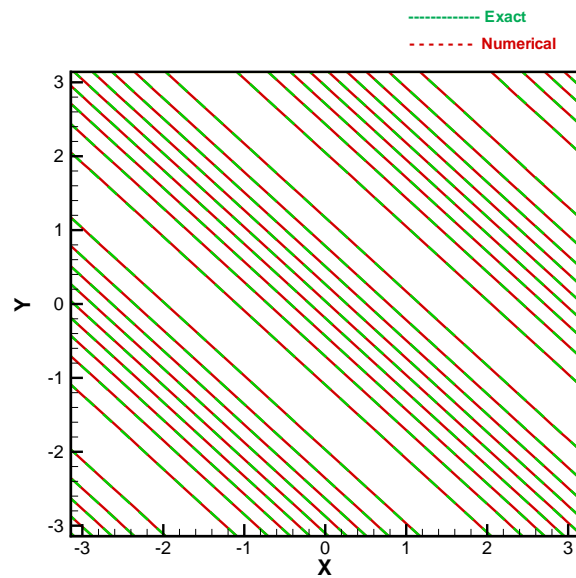


圖 5.6: 在網格點 $81 \times 81 \times 81$ ，時間為 50 秒的情況下，比較三維馬克斯威爾方程，所算出之電場 E_z 值的數值解和實解，此為 $z = 0$ 之剖面圖。

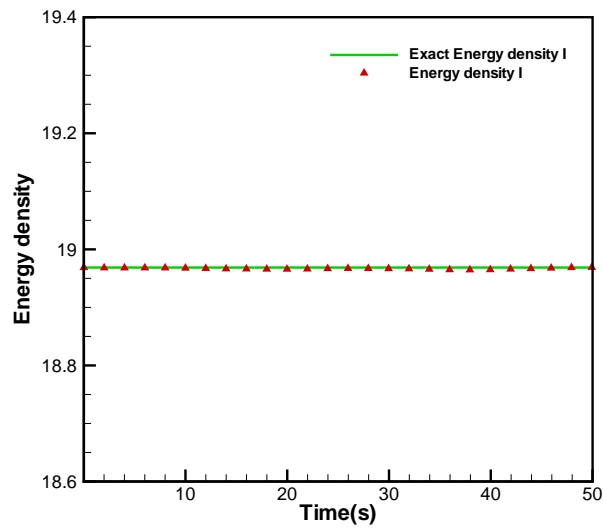


圖 5.7: 在時間 $T=50(s)$ 時，比較三維馬克斯威爾方程實解和數值解之能量密度 (Energy I) 隨時間變化之趨勢。

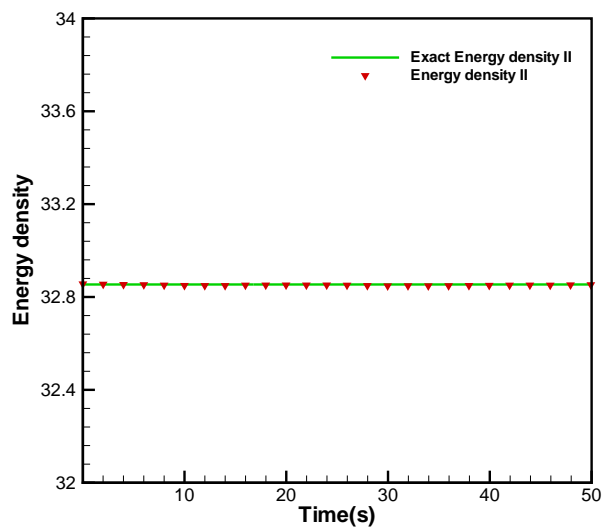


圖 5.8: 在時間 $T=50(s)$ 時，比較三維馬克斯威爾方程實解和數值解之能量密度 (Energy II) 隨時間變化之趨勢。

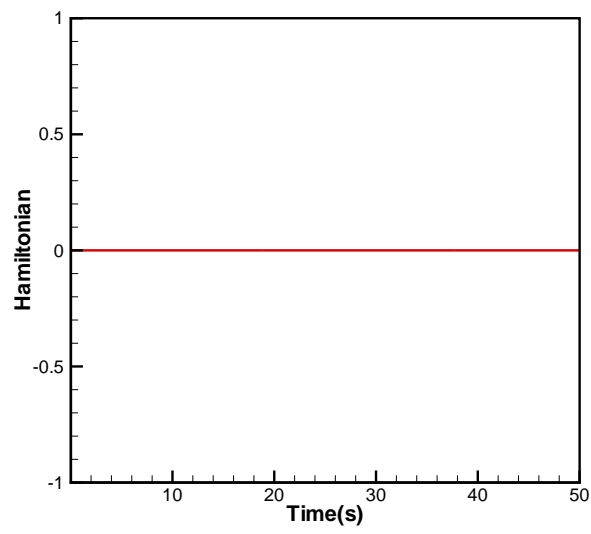
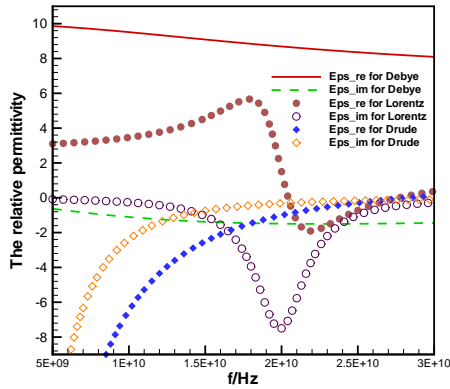
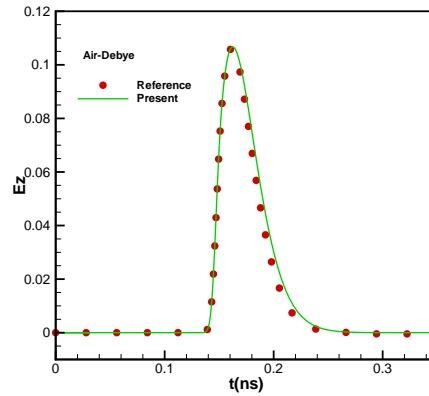


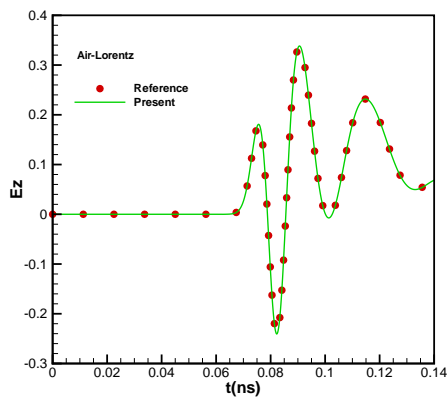
圖 5.9: 三維驗證中，Hamiltonian 隨時間變化之趨勢。



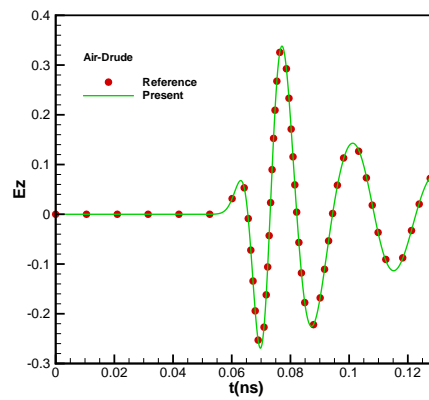
(a)



(b)



(c)



(d)

圖 5.10: 在計算域包含真空 (1~250 網格) 與色散介質 (251~500 網格) 中，與參考文獻 [29] 之電場 E_z 數值解之比較。(a) 色散介質之相對介電常數隨頻率變化圖；(b) 計算域於真空與 Debye 介質中；(c) 計算域於真空與 Lorentz 介質中；(d) 計算域於真空與 Drude 介質中。

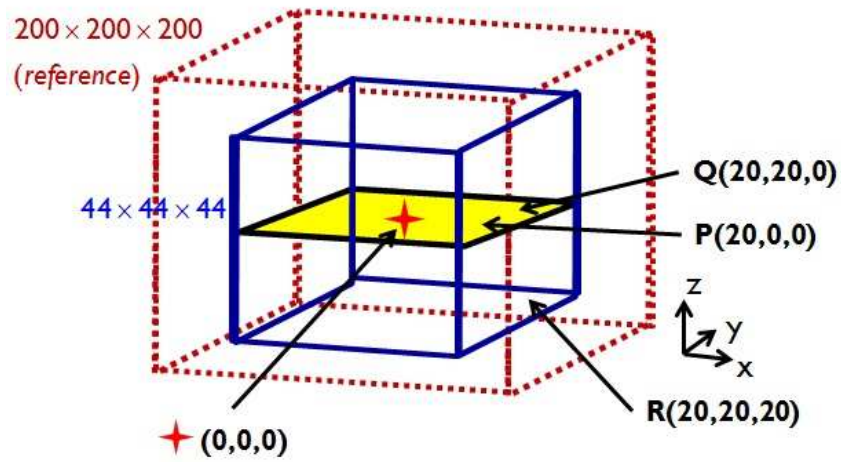


圖 5.11: 3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ 和 $200 \times 200 \times 200$ 的網格。在色散介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值並作一比較。

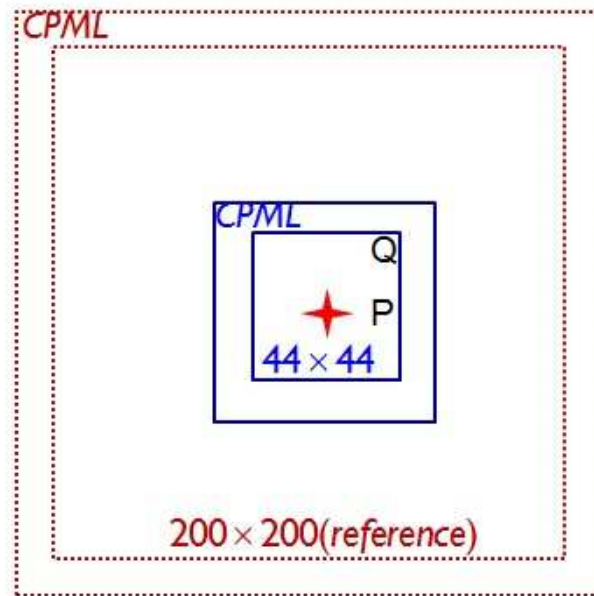
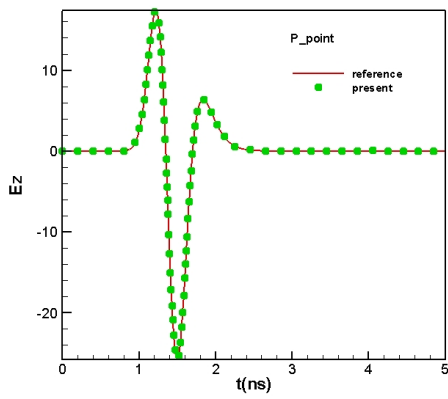
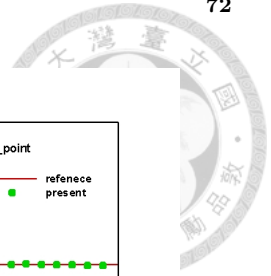
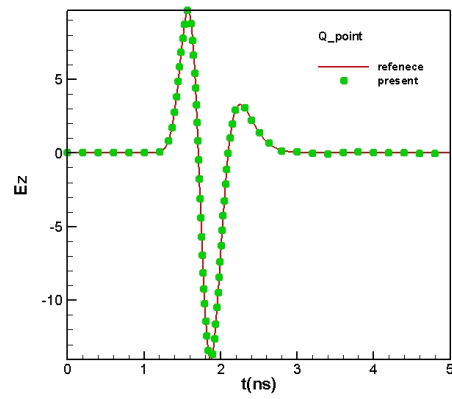


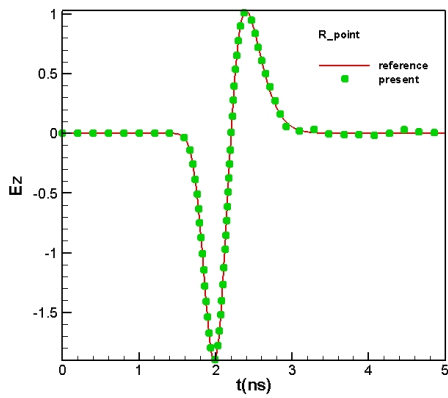
圖 5.12: 在 $44 \times 44 \times 44$ 和 $200 \times 200 \times 200$ 網格點的計算域于 $z=0$ 之 2D 剖面示意圖。



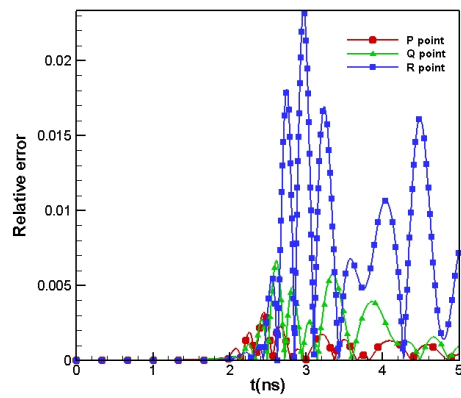
(a)



(b)

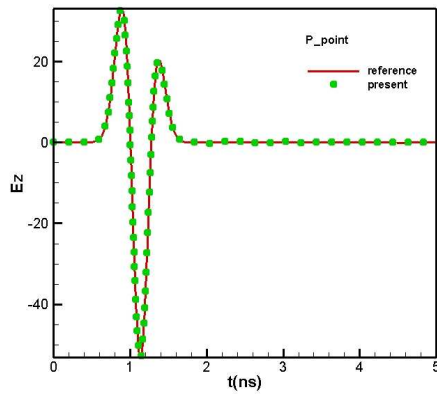


(c)

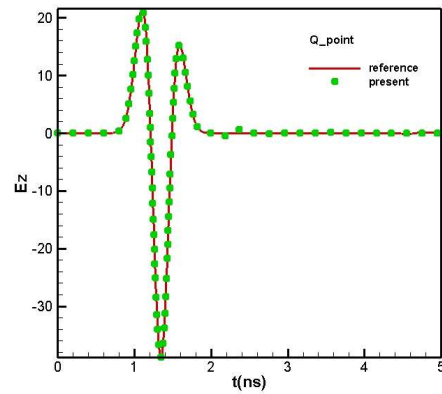


(d)

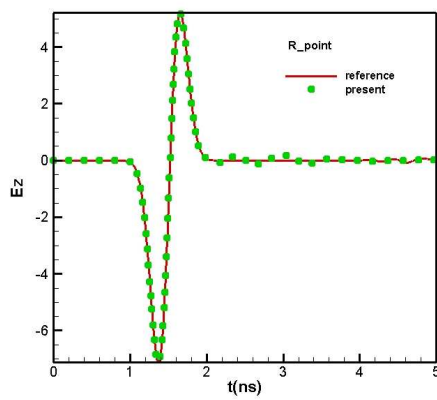
圖 5.13: 3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ (present) 和 $200 \times 200 \times 200$ (reference) 網格點，在 Debye 介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值，以及相對誤差分析。(a) P 點 E_z 值之比較；(b) Q 點 E_z 值之比較；(c) R 點 E_z 值之比較；(d) P、Q 和 R 點之相對誤差分析。



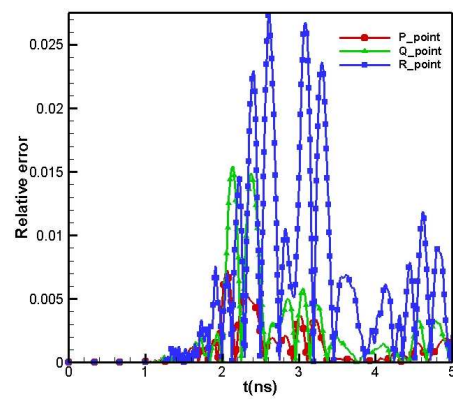
(a)



(b)

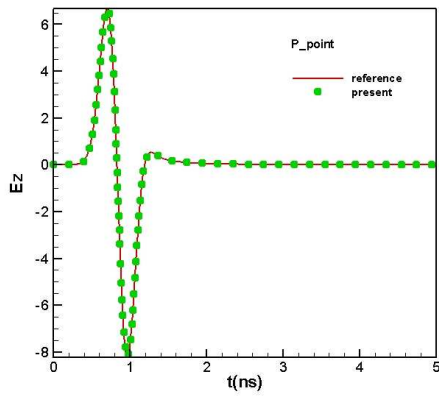


(c)

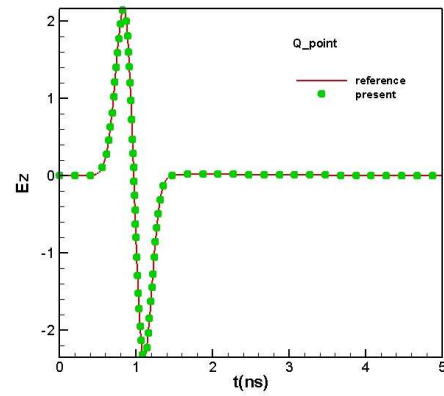


(d)

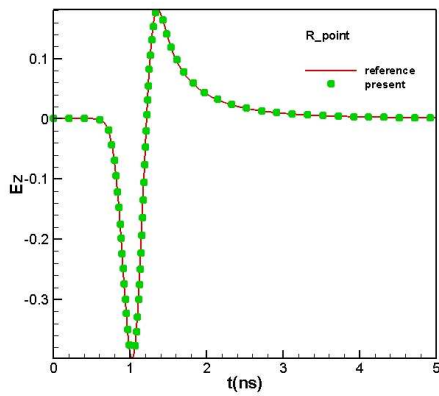
圖 5.14: 3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ (present) 和 $200 \times 200 \times 200$ (reference) 網格點，在 Lorentz 介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值，以及相對誤差分析。(a) P 點 E_z 值之比較；(b) Q 點 E_z 值之比較；(c) R 點 E_z 值之比較；(d) P、Q 和 R 點之相對誤差分析。



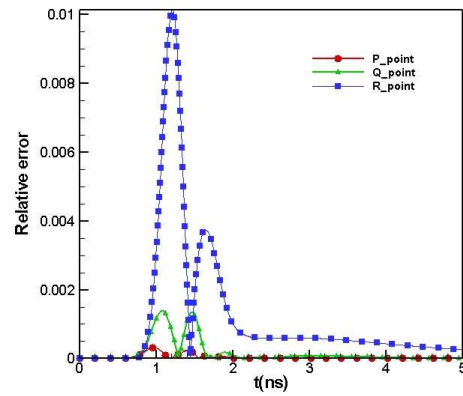
(a)



(b)



(c)



(d)

圖 5.15: 3D 計算域為 $44 \times 44 \times 44$ (present) 和 $200 \times 200 \times 200$ (reference) 網格點，在 Drude 介質中模擬電場 E_z 在 P、Q 和 R 點之值，以及相對誤差分析。(a) P 點 E_z 值之比較；(b) Q 點 E_z 值之比較；(c) R 點 E_z 值之比較；(d) P、Q 和 R 點之相對誤差分析。

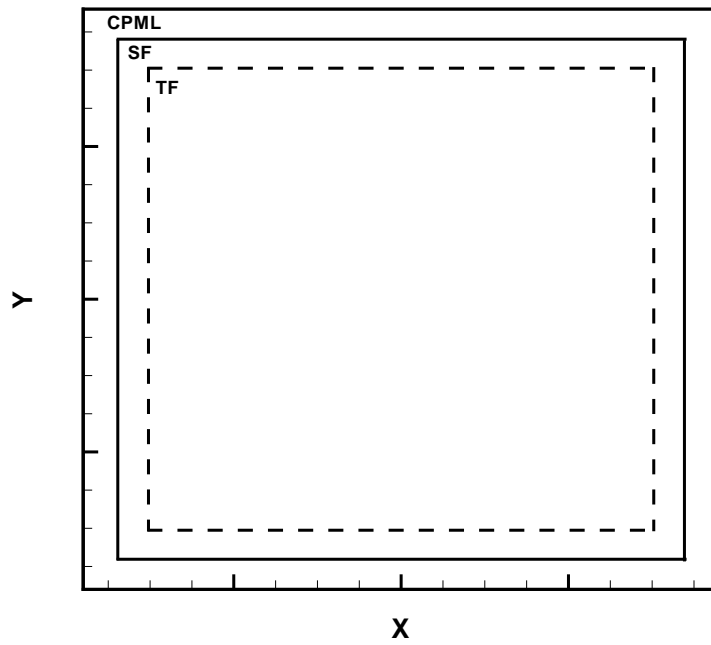
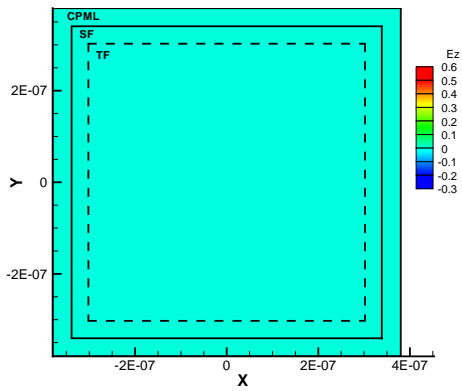
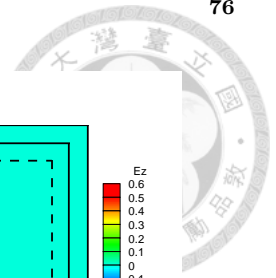
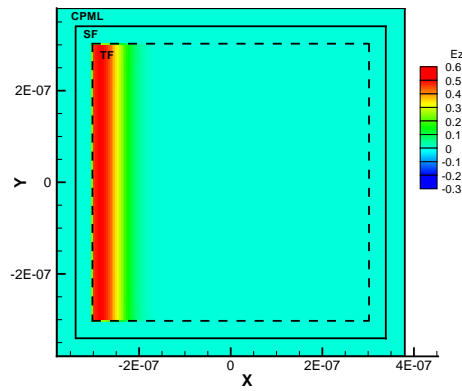


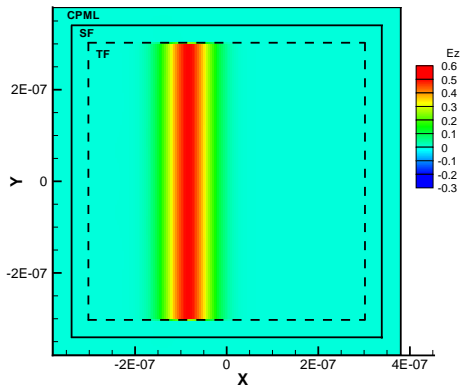
圖 5.16: 全場、散射場及軸向完美匹配層之設置圖



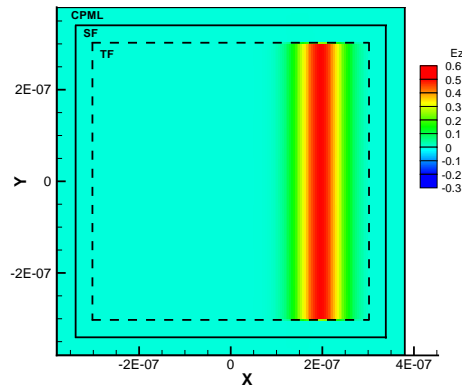
(a)



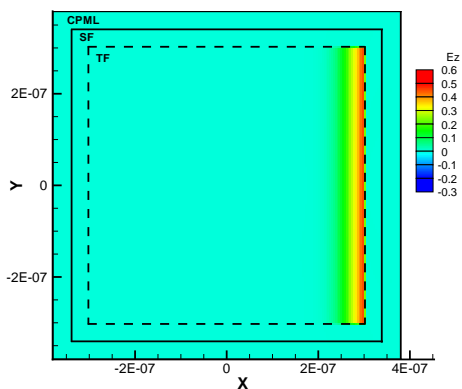
(b)



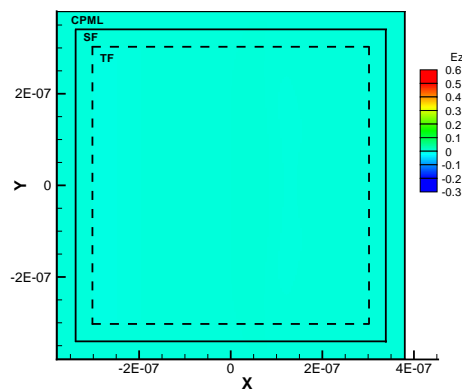
(c)



(d)



(e)



(f)

圖 5.17: 一維入射波於無散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值 ($\Delta t = 2668.5 fs$)。 (a) 初始; (b) 時間步為 600; (c) 時間步為 850; (d) 時間步為 1200; (e) 時間步為 1350; (f) 時間步為 1600

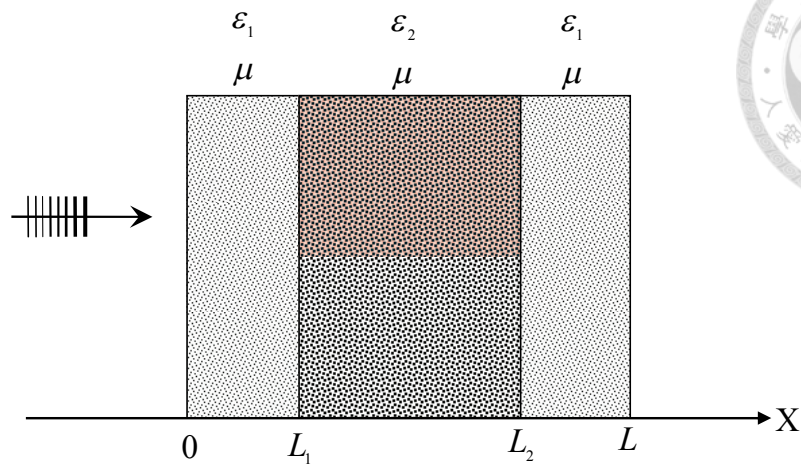


圖 5.18: 不同材料常數之分佈圖

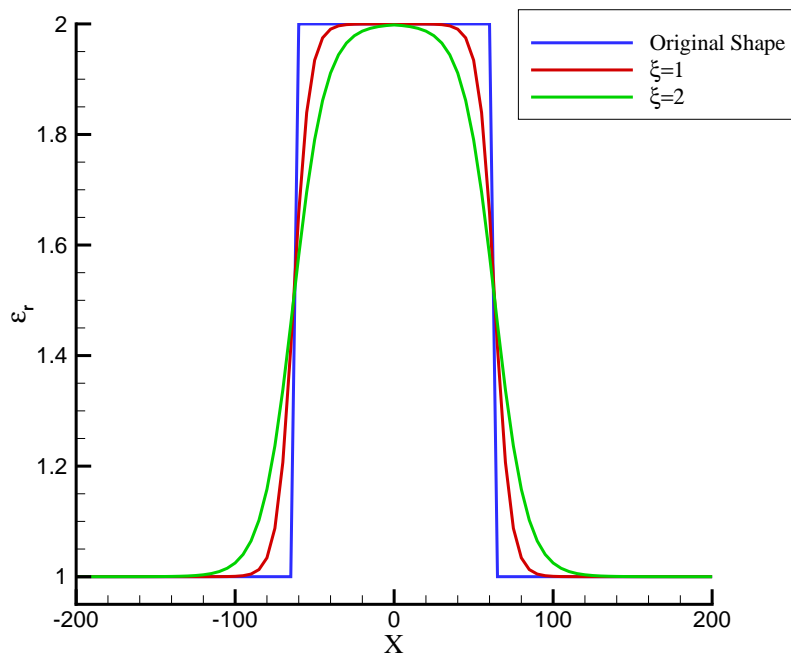


圖 5.19: 在等位函數平滑參數為 $\xi = 1, 2$ 時，交界面平滑度之比較圖

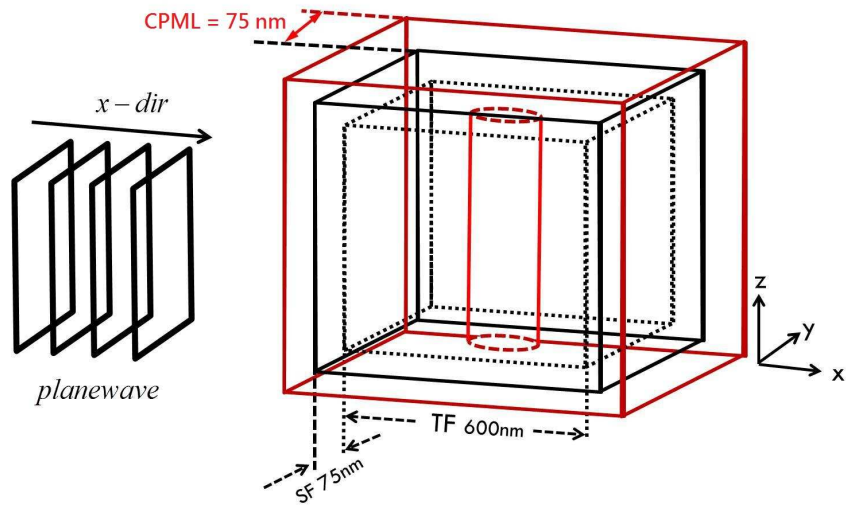
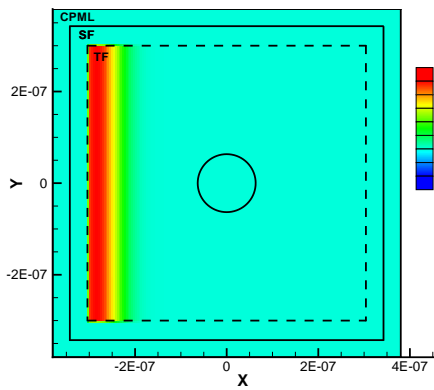
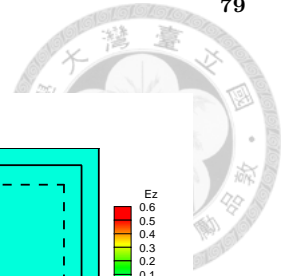
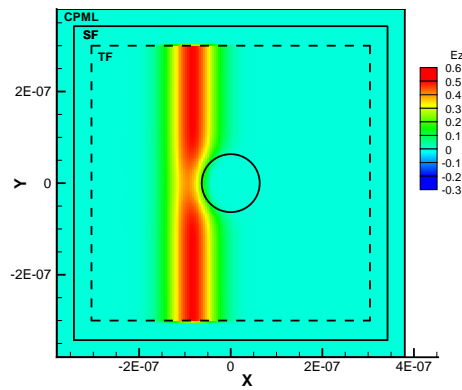


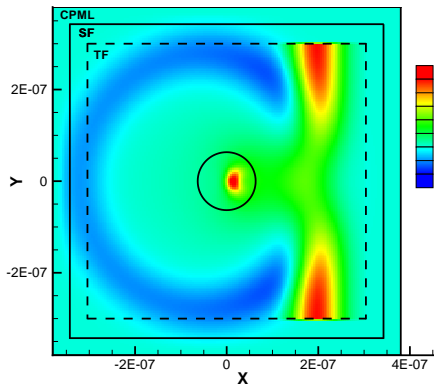
圖 5.20: 三維米氏散射問題之示意圖



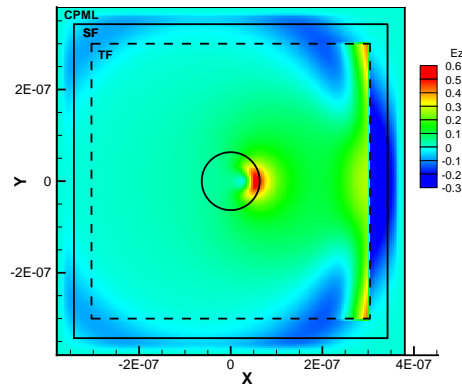
(a)



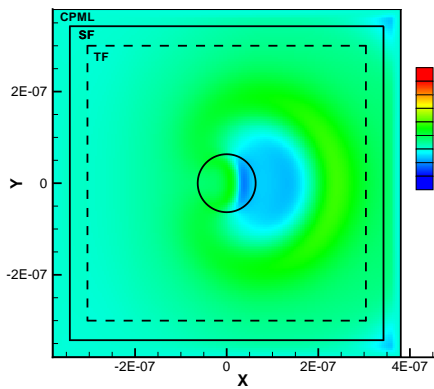
(b)



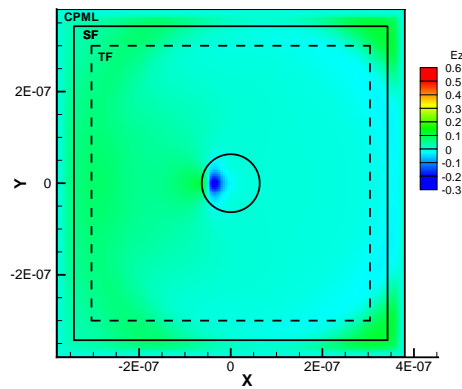
(c)



(d)



(e)



(f)

圖 5.21: 一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值 ($\Delta t = 2668.5 fs$)。 (a) 時間步為 600; (b) 時間步為 850; (c) 時間步為 1200; (d) 時間步為 1350; (e) 時間步為 1600; (f) 時間步為 1900

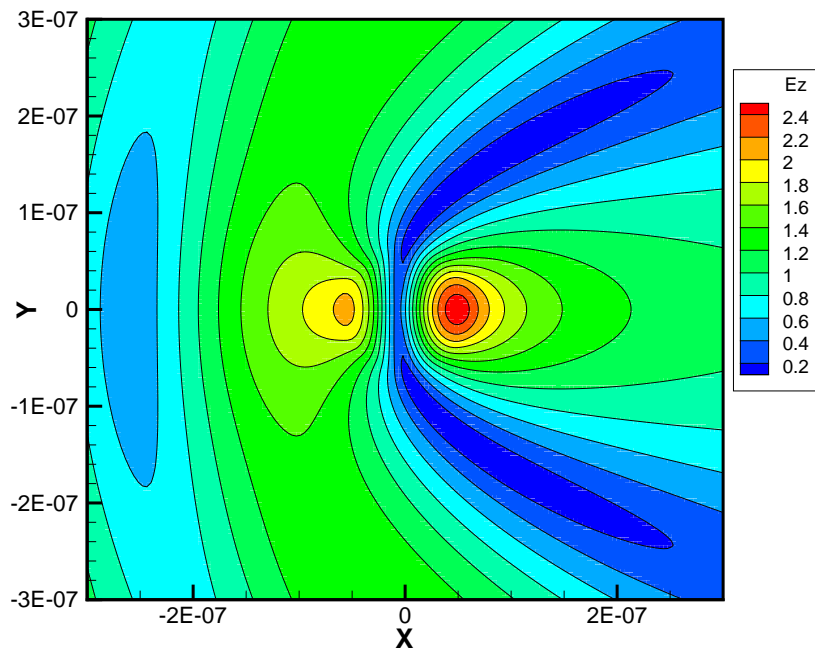
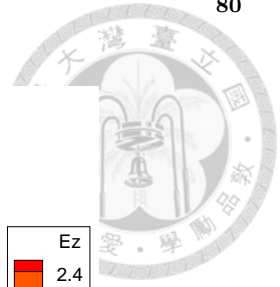


圖 5.22: 二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 時之半解析解

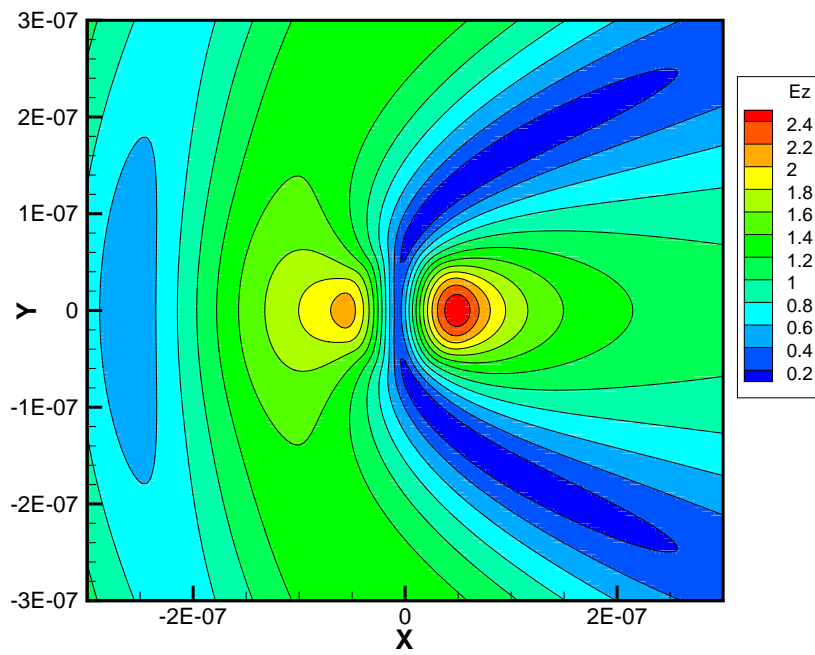


圖 5.23: 二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 之數值解

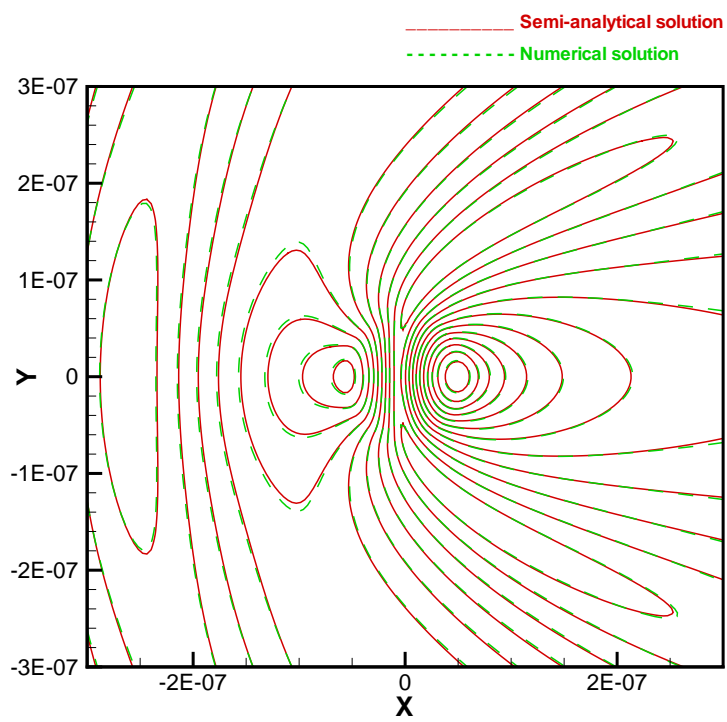
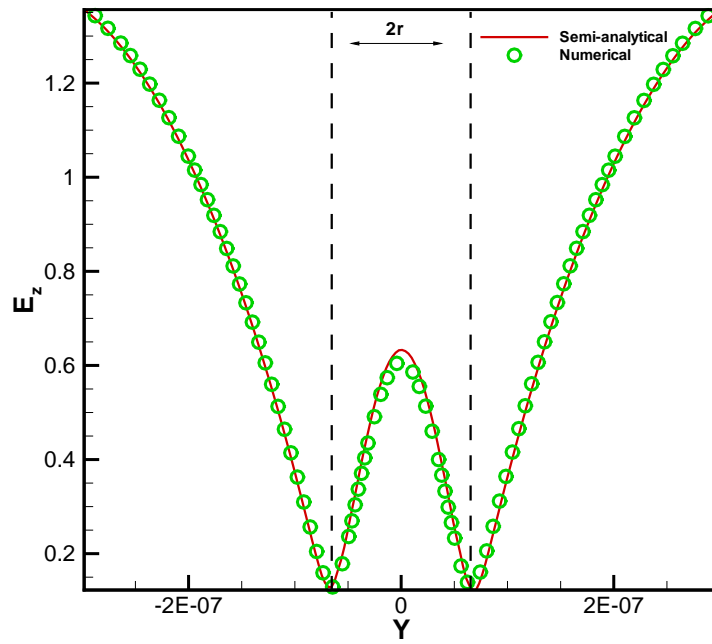
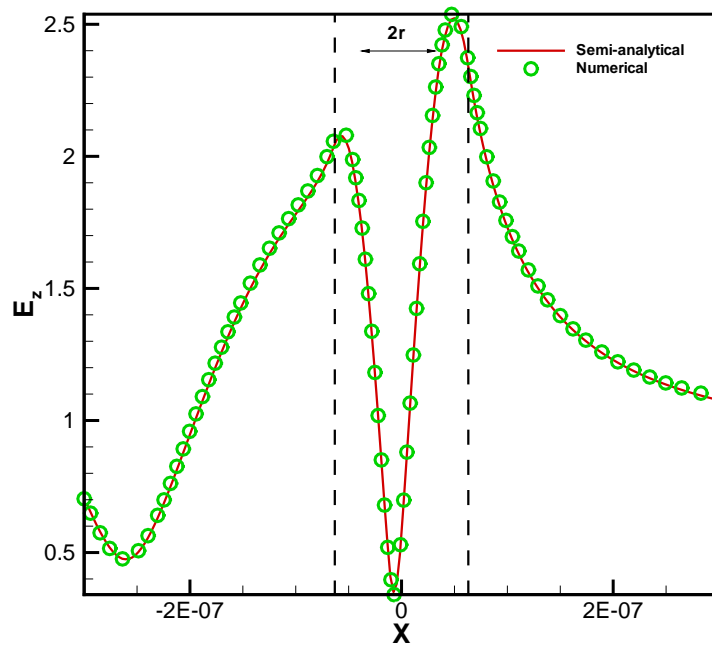


圖 5.24: 二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 時半解析解與數值解等高線圖之比較圖



(a)



(b)

圖 5.25: 二維米氏 (Mie scattering) 散射問題 ϵ_r 為 12 半解析解與數值解剖面圖之比較。
 (a) $E_z(x, 0)$; (b) $E_z(0, y)$

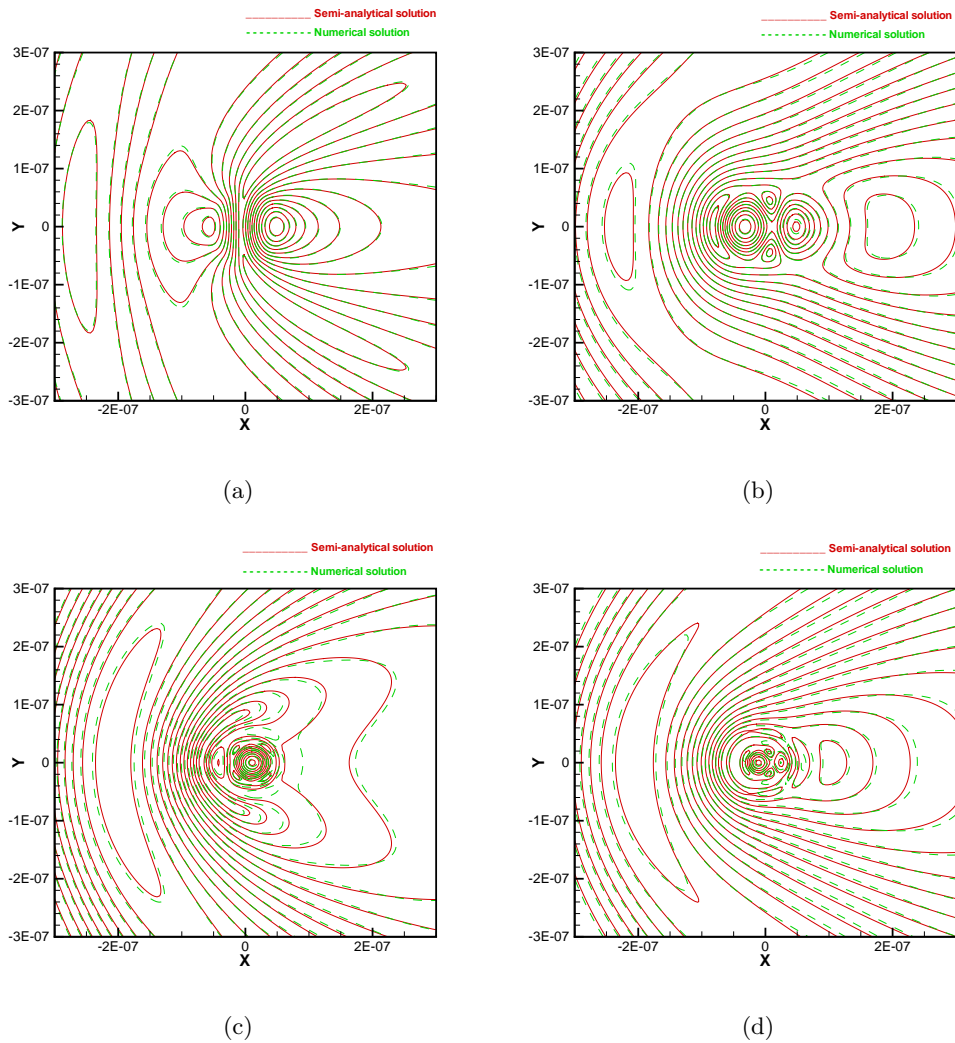
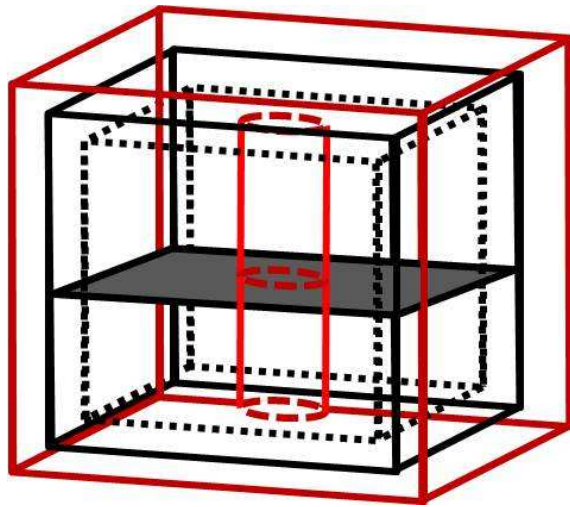
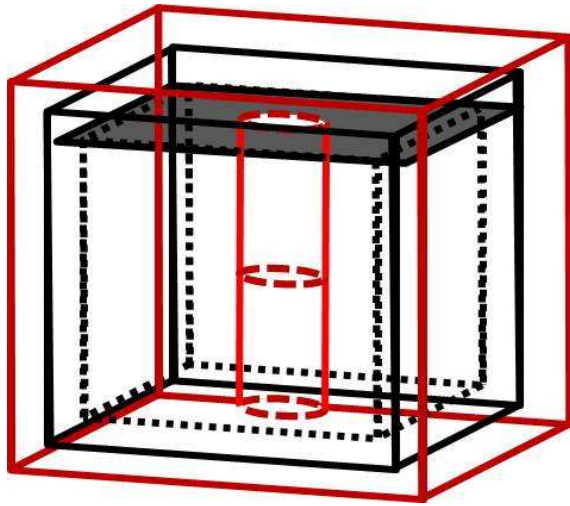


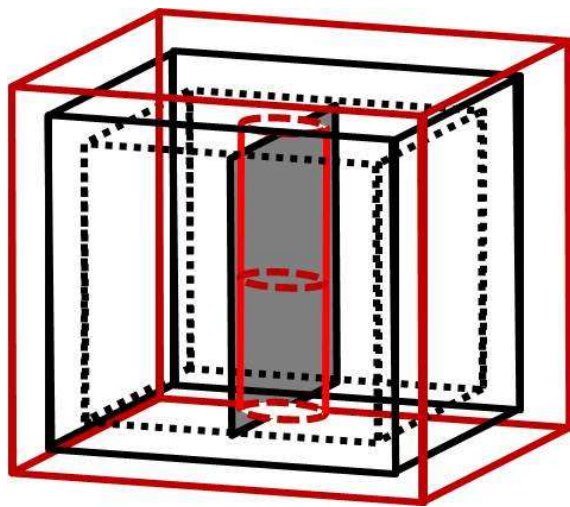
圖 5.26: 二維米氏 (Mie scattering) 散射問題在不同材料性質係數情況下之半解析解與數值之比較圖。(a) ϵ_r 為 12 約為矽 (Silicon) 材料介電常數; (b) ϵ_r 為 20 約為丙酮 (Acetone) 材料介電常數; (c) ϵ_r 為 50 約為甘油 (Glycerin) 材料介電常數; (d) ϵ_r 為 100 約為二氧化鈣 (Barium binoxide) 材料介電常數, 資料取自 www.engineeringtoolbox.com



(a)



(b)



(c)

圖 5.27: 設置三個觀察面 (monitor plane) 以監測電場隨時間之變化

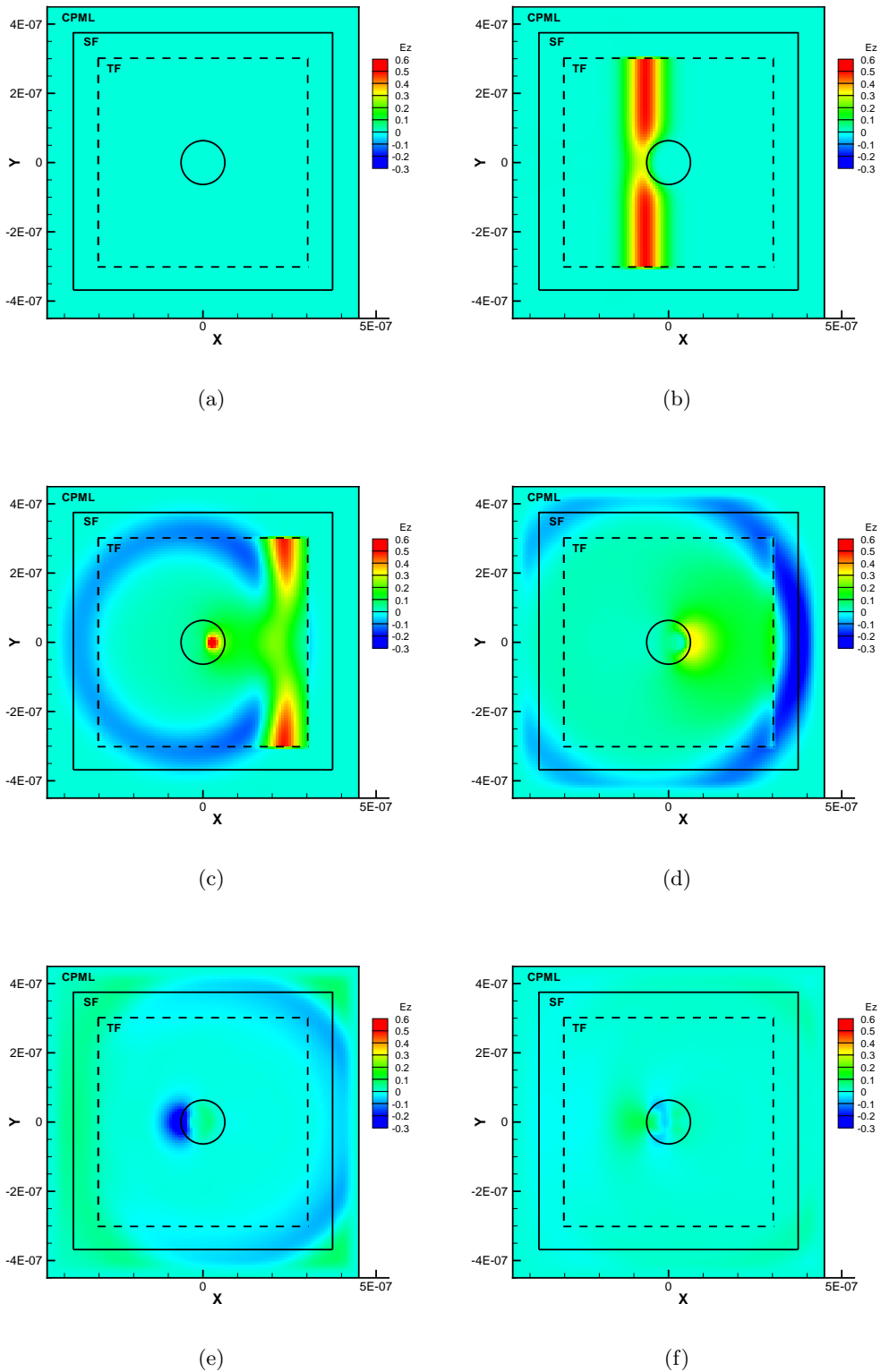
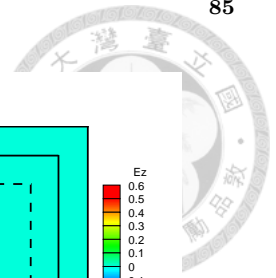


圖 5.28: 三維米氏散射模擬，一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 1 (monitor plane 1) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs)

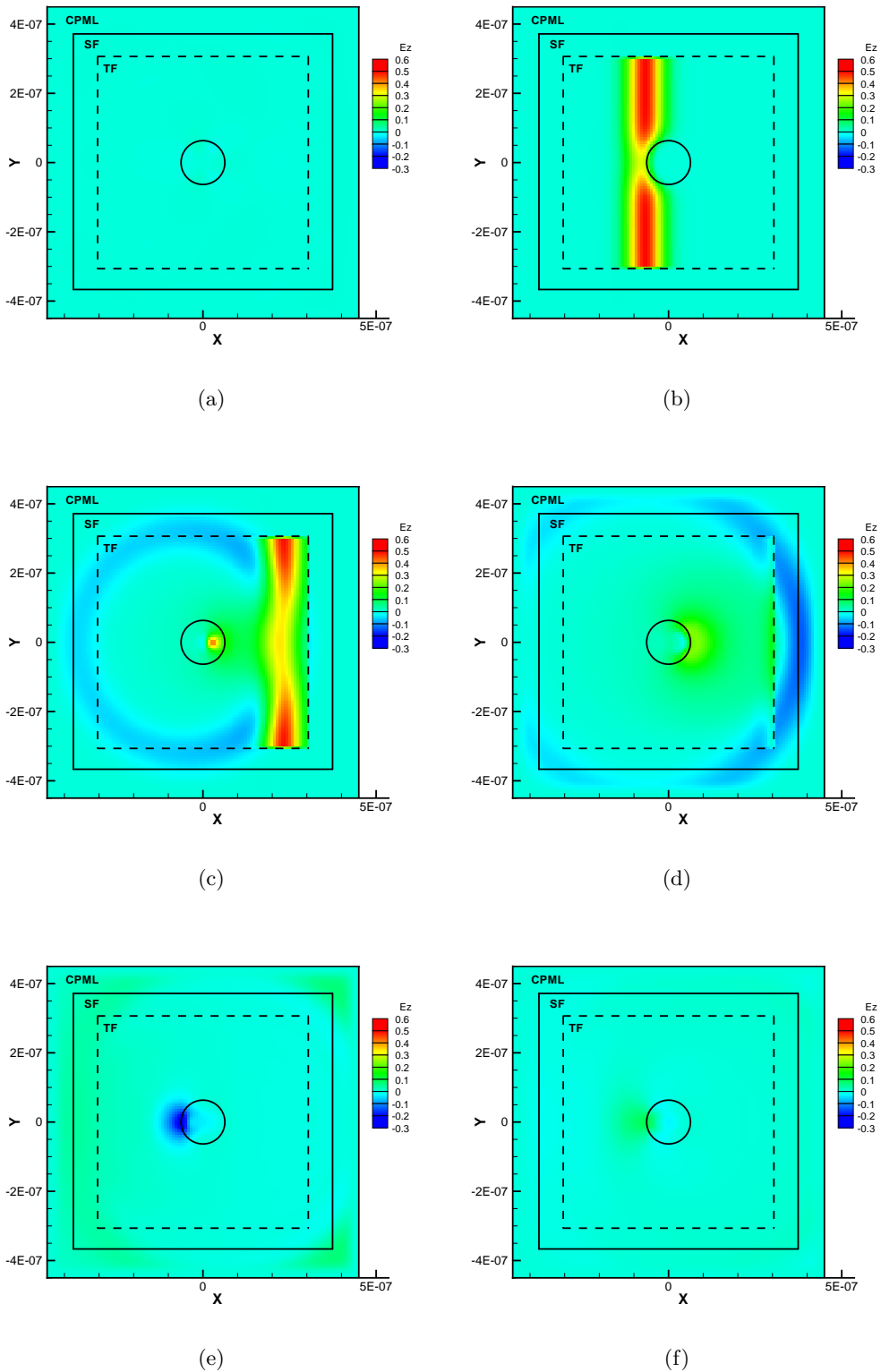
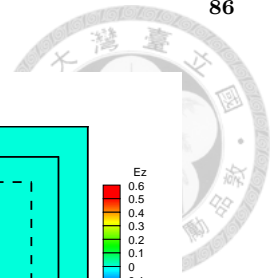


圖 5.29: 三維米氏散射模擬，一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 2 (monitor plane 2) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs)

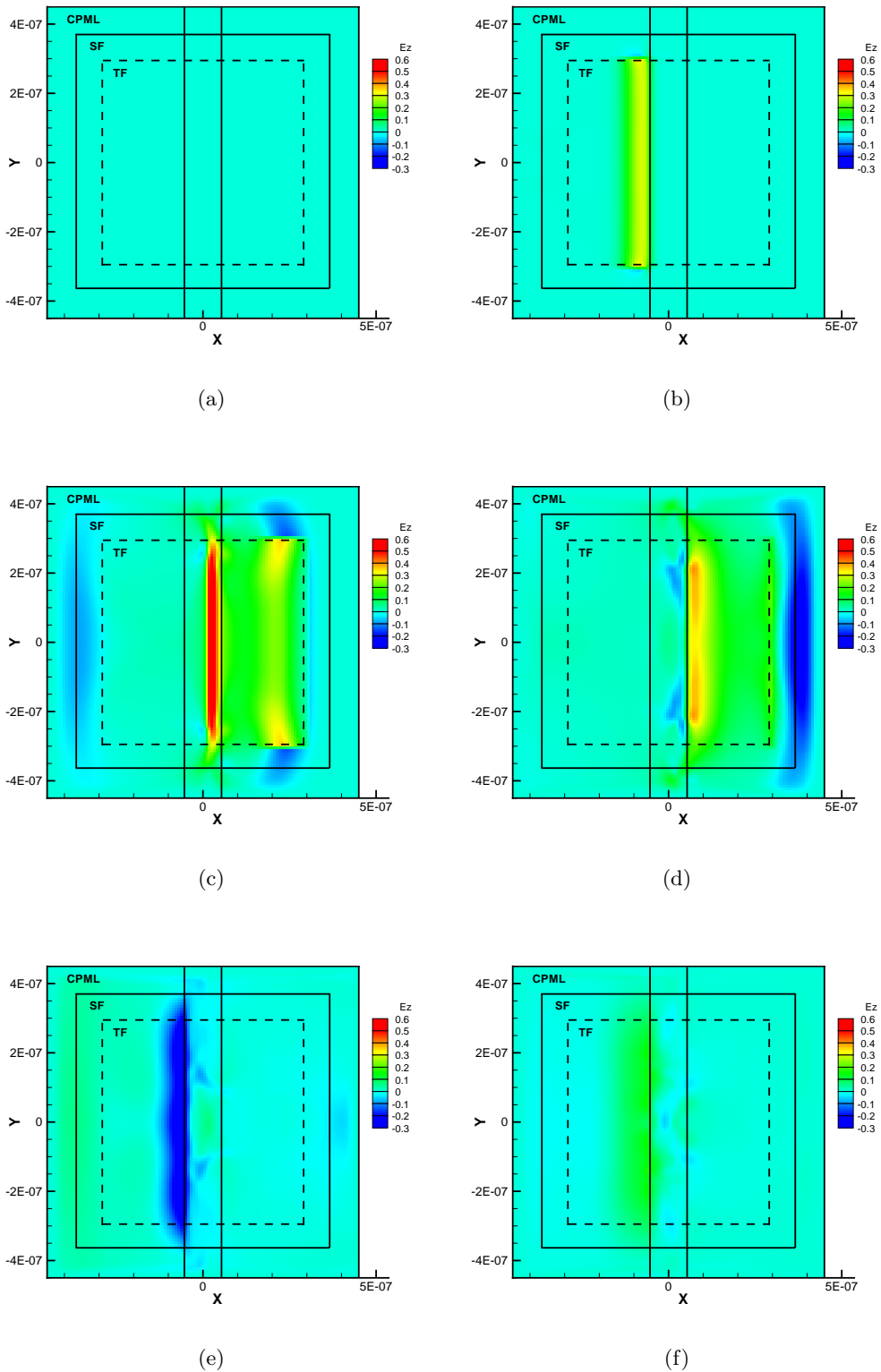
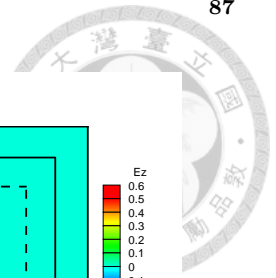


圖 5.30: 三維米氏散射模擬，一維入射波於散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 3 (monitor plane 3) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs)

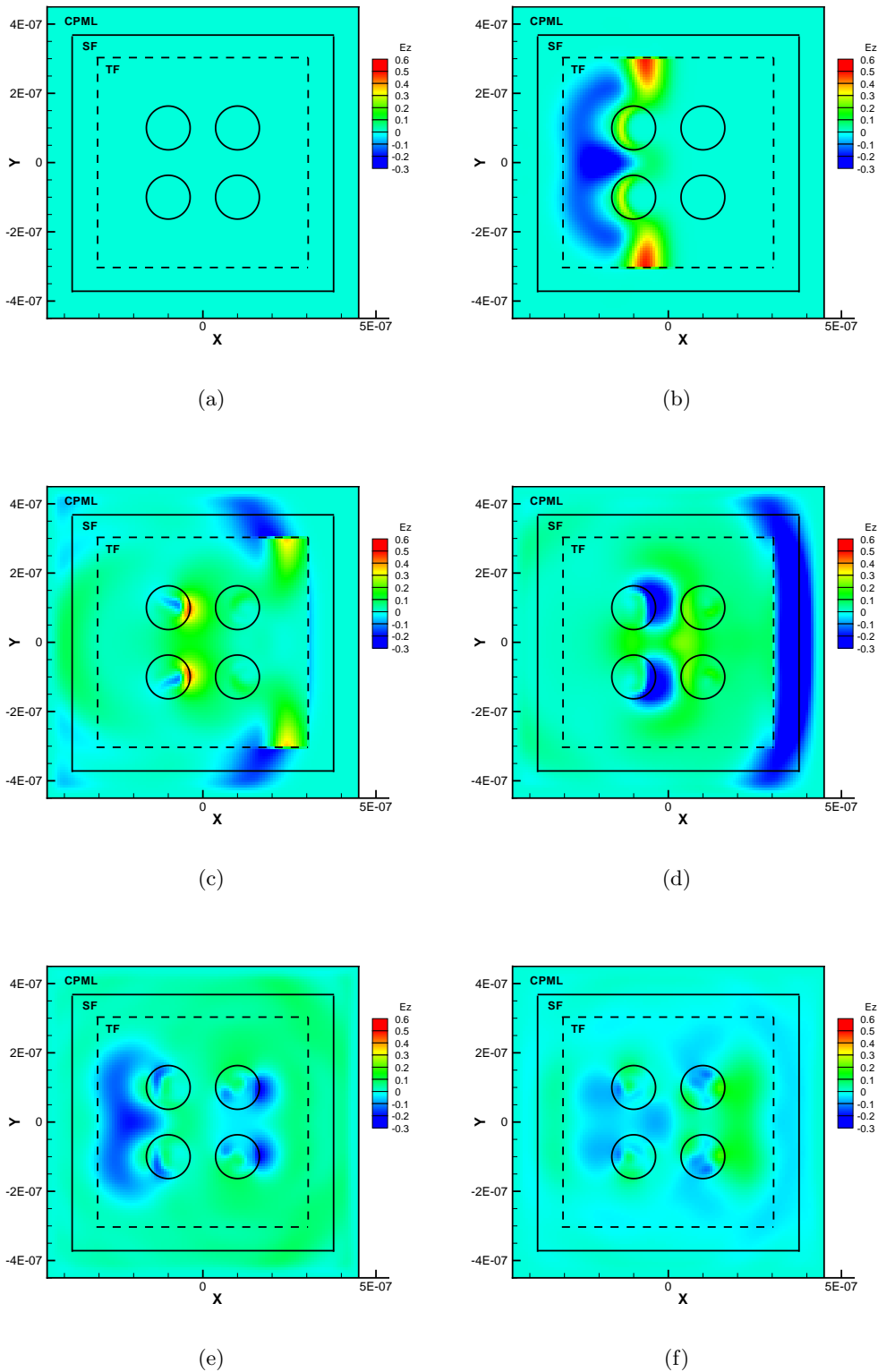
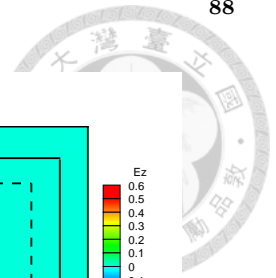


圖 5.31: 三維米氏散射模擬，一維入射波於四根散射體時之全場 / 散射場之電場 E_z 值於觀測面 1 (monitor plane 1) 隨時間之變化。(a) 時間步為 0(0 fs); (b) 時間步為 560(2.8 fs); (c) 時間步為 760(3.8 fs); (d) 時間步為 850(4.25 fs); (e) 時間步為 1160(5.8 fs); (f) 時間步為 1800(9 fs)

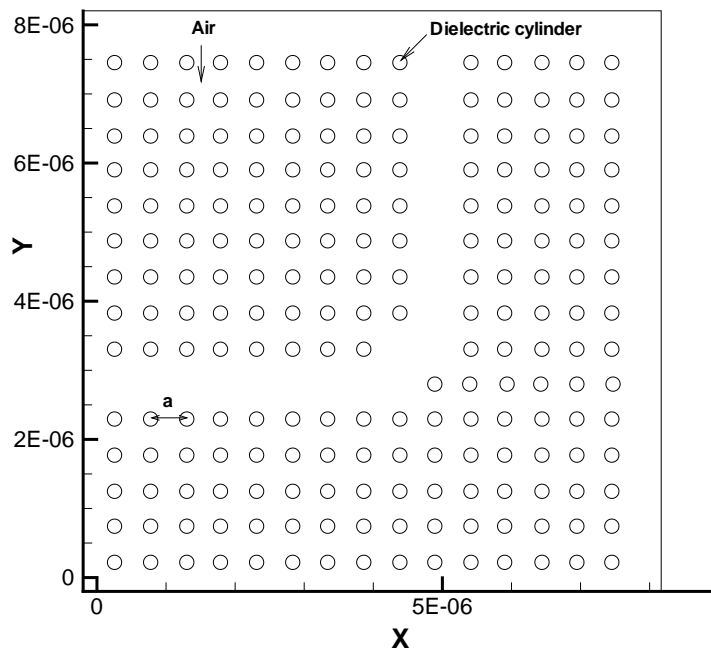


圖 5.32: 光子晶體通道之示意圖

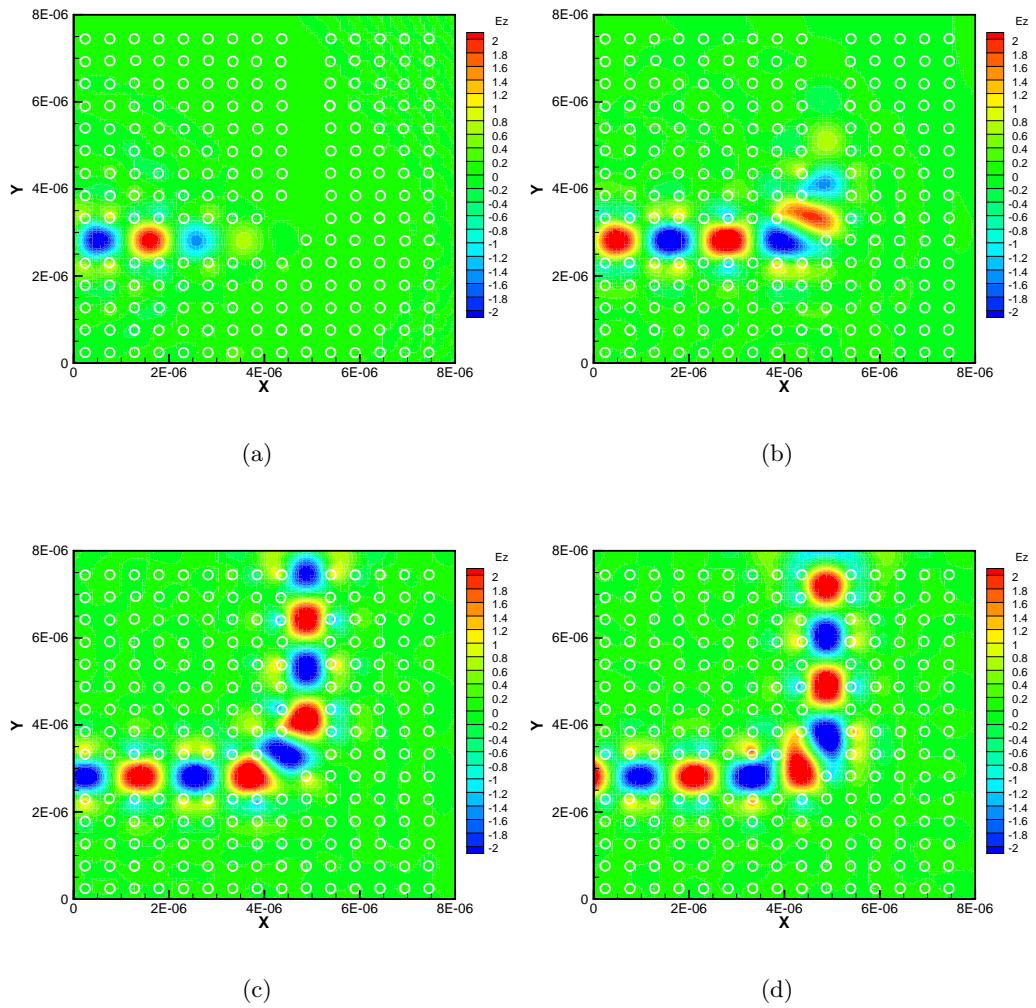
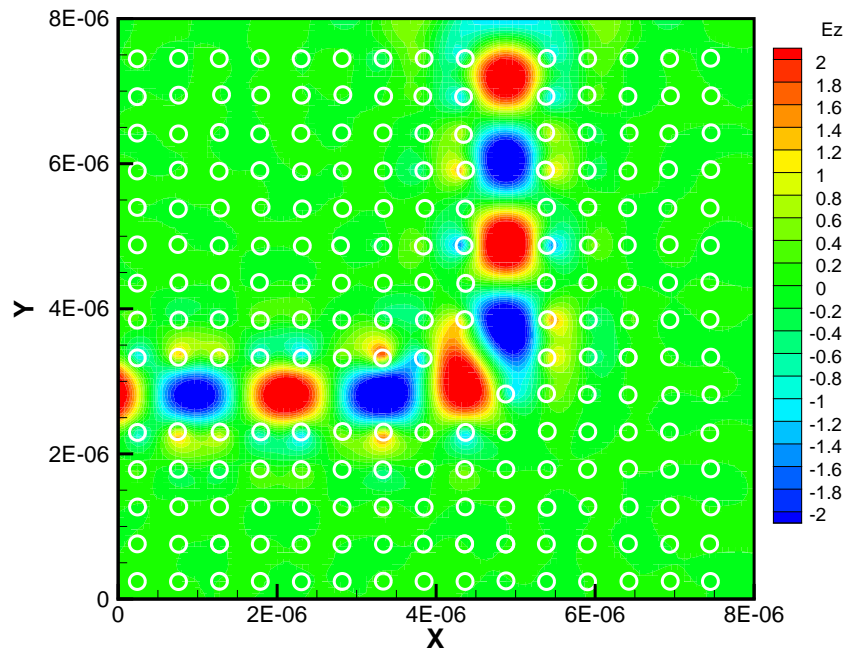
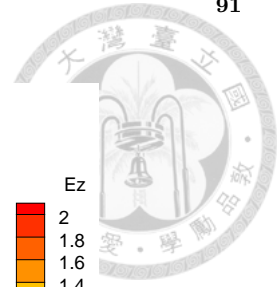
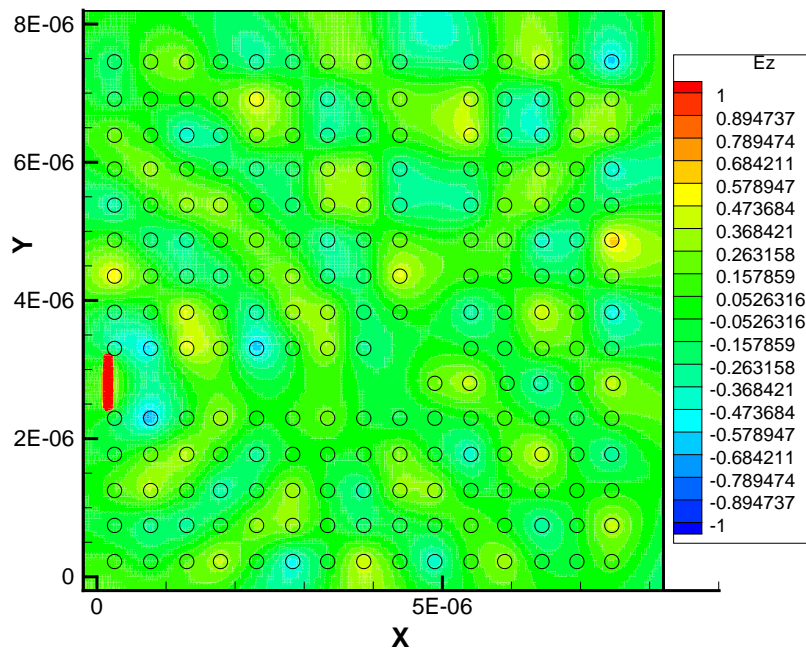


圖 5.33: 當歸一頻率 (normalized frequency) 為 $0.353 (c/a)$ 時, 電場 E_z 之分佈 ($\Delta t = 0.05337 fs$)。 (a) 時間步為 575; (b) 時間步為 1075; (c) 時間步為 1750; (d) 時間步為 2325

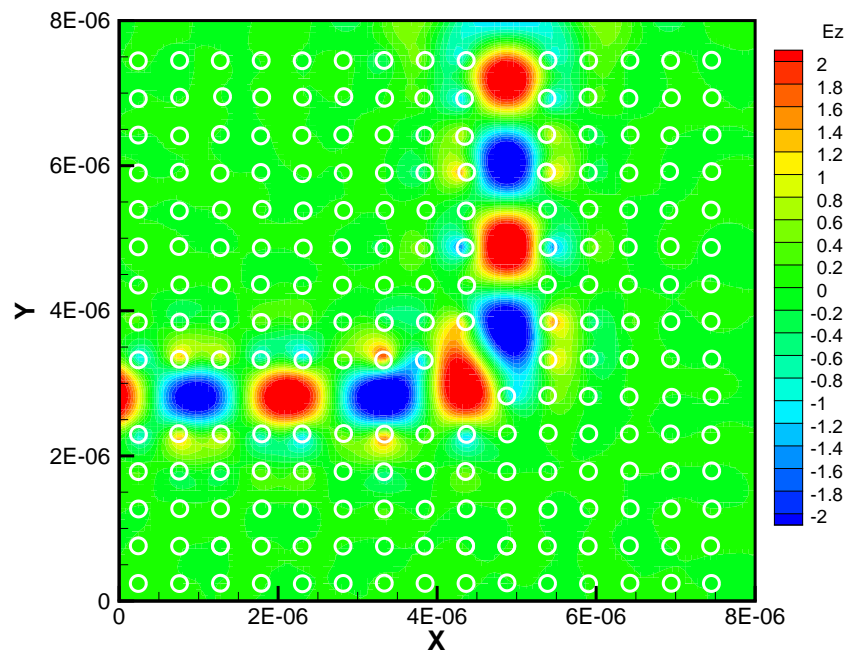
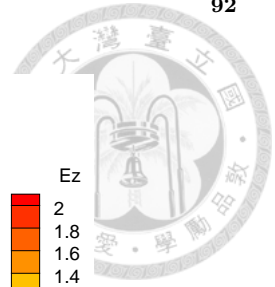


(a)

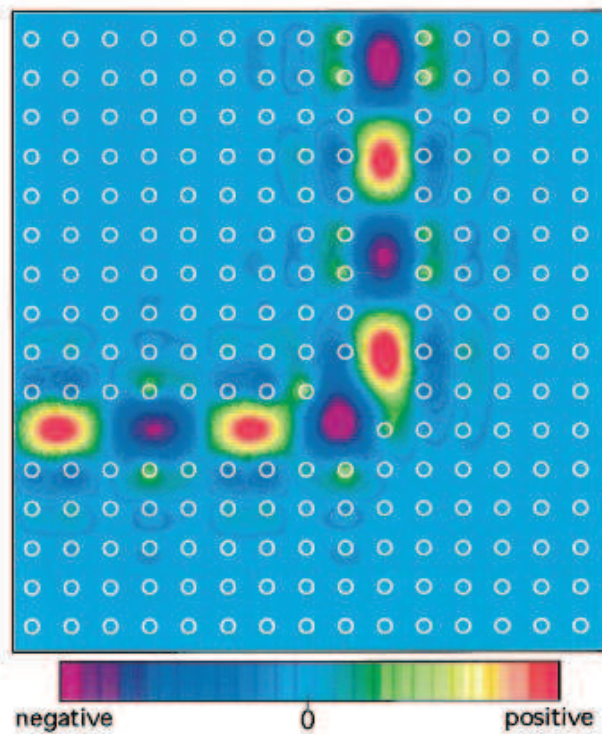


(b)

圖 5.34: 當時間步為 2325 時, 比較歸一頻率 (normalized frequency) 為 0.353 (c/a) 與 0.206 (c/a) 之結果比較圖 ($\Delta t = 0.05337 fs$)。 (a) 0.353 (c/a); (b) 0.206 (c/a)



(a)



(b)

圖 5.35: 當時間步為 2325、歸一頻率 (normalized frequency) 為 0.353 (c/a) 時 ($\Delta t = 0.05337 fs$)，與文獻比較之結果 (a) Present method; (b) Mekis et al. [38]



第六章

結論

6.1 研究成果與討論

本論文在三維交錯網格的分析系統下，採用顯示具辛結構 (Symplectic) 性質之時間離散及于空間用具對稱型式之離散，發展出一具色散關係方程 (Dispersion Relation Equation, DRE) 保持性的方法，並以此核心概念，優化數值與實解相速度之間誤差的觀念，將色散關係方程與相速度實解之間的誤差降至最小，並成功的將時間離散與空間離散做了與物理性質上的聯結。根據計算的結果顯示，與 box scheme [26]、symplectic method [26] 及 Yee's method [26] 相較，在波數保持的能力上有著大幅度的提升，且能在同樣網格尺寸下有效地降低因各向異性帶來的誤差。由程式驗證的結果亦顯示，本離散方法以直接計算求得法拉第定律與安培定律求解電場和磁場的方式，能高度的滿足高斯定律與漢彌爾頓守恆的性質。與 Yee 之離散方法比較，它具有更準確且更高的空間收斂階數。透過三種典型之色散介質 Debye、Lorentz、Drude 的介質模型的電磁波模擬，皆達到相當好的結果，證明了本論文亦所開發的方法通用性與有效性。最後，應用於求解三維實際問題時，本離散方法有非常好之模擬結果，再再證明了本論文所開發數值方法之通用性、準確性與有效性。



6.2 未來工作與展望

對於一般的模擬，時間離散與空間離散兩者之間缺少物理性質的搭配；本論文利用時間離散尺度 Δt 與空間離散尺度 Δx 所求得之色散關係方程，已成功將時間離散與空間離散在物理性質上作了有效的聯結，於三維自由空間中的電磁波模擬，亦得到了很好的結果。

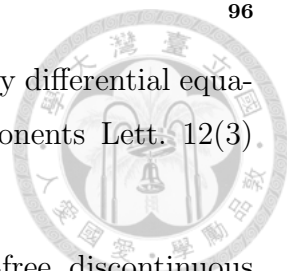
對於未來發展方向，有以下三點之建議：

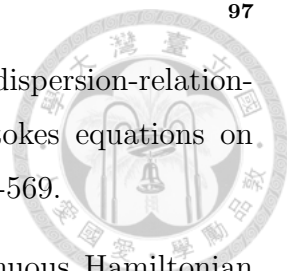
- 一、在模擬複雜的電磁散射于三維問題時，涉及龐大的計算量，故可以發展建置 GPU 的平行計算環境，以期大幅度的提升在複雜問題下的計算效率。
- 二、對於色散關係方程之推導，未來可針對除了相速度以外的不同物理量，如群速度與角頻率之物理量為基準，進一步的分析其色散關係保持之差異，從中得到更詳細地頻散關係特性。
- 三、對於頻散光電材料的部分，目前只針對相對介電係數隨頻率變化之材料特性做研究（即非磁化材料），未來可進一步地將相對磁導係數隨頻率變化之材料特性也納入考量（即磁化材料），如此一來，將會有著更廣泛的頻散光電材料之研究，如左手材料（負折率）、等離子 (Plasma) 隱身衣等等的熱門主題。

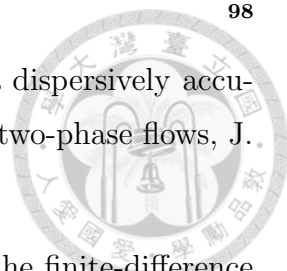


參考文獻

- [1] K. S. Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media, *IEEE Trans. Antennas Propagat.* AP4 (1966) 302-307.
- [2] G. Mur, Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations, *IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility* 23 (1981) 377-382.
- [3] J. P. Berenger, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *J. Com. Physics* 114 (1994) 185-200.
- [4] J. P. Berenger, Perfectly matched layer for the FDTD solution of wavestructure interaction problems, *IEEE Trans. Antennas Propagat.* 44 (1996) 110-117.
- [5] J. A. Roden and S. D. Gedney, Convolutional PML(CPML): An efficient FDTD implementation of the CFS-PML for arbitrary media, *Microwave Optical Tech. Lett.* 27 (2000) 334-339.
- [6] R. J. Luebbers, F. Hunsberger, and K. S. Kunz, et al., A frequency-dependent finite-difference time-domain formulation ofr dispersive material, *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility.* 32(3) (1990) 222-227.
- [7] D. F. Kelley and R. J. Lubbers, Piecewise linear recursive convolution for dispersive media using FDTD, *IEEE Transactions on Antennas Propagat.* 44(6) (1996) 792-797.
- [8] R. Siushansiana and J. Lovetri, A comparison of numerical techniques for modeling electromagnetic dispersive media, *IEEE Microwave and Guided Wave Letters.* 5(12) (1995) 426-428.

- 
- [9] Y. Takayama and W. Klaus, Reinterpretation of the auxiliary differential equation method for FDTD, *IEEE Microwave Wireless Components Lett.* 12(3). (2002) 102-104.
- [10] B. Cockburn, F. Y. Li, C. W. Shu, Locally divergence-free discontinuous Galerkin methods for the Maxwell's equations, *J. Comput. Phys.* 194 (2004) 588-610.
- [11] R. A. Nicolaides, D. Q. Wang, Helicity and variational principles for Maxwell's equations, *Int. J. Electron.* 54 (1983) 861-864.
- [12] J. S. Kole, M. T. Figge, De Raedt, Higher-order unconditionally stable algorithms to solve the time-dependent Maxwell's equations, *Phys. Rev. E* 65 (2002) 0667051 1-12.
- [13] S. D. Gedney, An Anisotropic perfectly matched layer-absorbing medium for the truncation of FDTD lattices, *IEEE Trans. Antennas Propagat.* 44 (1996) 1630-1639.
- [14] S. Abarbanel, D. Gottlieb, J. S. Hesthaven, Non-linear PML equations for time dependent electromagnetics in three dimensions, *J. Sci. Comput.* 28 (2006) 125-136.
- [15] Kuzuoglu, M. and R. Mittra, "Frequency dependence of the constitutive parameters of causal perfectly matched anisotropic absorbers," *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, Vol. 6, 1996, pp.164-168.
- [16] Bing Wei, Shi-quan Zhang, Fei Wang, and Debiao Ge, "A novel UPML FDTD absorbing boundary condition for dispersive media," *Waves in Random and Complex Media.*, Vol. 20, No. 3, August 2010, 511-527.
- [17] K. S. Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media, *IEEE Trans. Antennas Propagat.* 14 (3) 302 - 307.
- [18] Tony W. H. Sheu, R. K. Lin, An incompressible Navier-Stokes model implemented on nonstaggered grids, *Numer. Heat Transfer B* 44 (2003) 277-294.

- 
- [19] P. H. Chiu, Tony W. H. Sheu, R. K. Lin, Development of a dispersion-relation-preserving upwinding scheme for incompressible Navier-Stokes equations on non-staggered grids, *Numer. Heat Transfer B* 48 (2005) 543-569.
- [20] P. J. Morrison, The Maxwell-Vlasov equations as a continuous Hamiltonian system, *Phys. Lett.* 80 (1980) 383-386.
- [21] J. E. Marsden, A. Weinstein, The Hamiltonian structure of the Maxwell-Vlasov equations, *Physica D* 4 (1982) 394-406.
- [22] X. W. Lu, R. Schmid, Symplectic algorithms for Maxwell's equations, *Proc. for International Conference on New Applications of Multisymplectic Field Theories*, Salamanca, Spain, Sept. (1999) 10-25.
- [23] Z. X. Huang, X. L. Wu, Symplectic partitioned Runge-Kutta scheme for Maxwell's equations, *Int. J. Quantum Chem.* 106 (2006) 839-842.
- [24] I. Saitoh, Y. Suzuki, N. Takahashi, The symplectic finite difference time domain method, *IEEE Trans. Magn.* 37(5) (2001) 3251-3254.
- [25] A. Taflove, M. E. Brodwin, Numerical Solution of Steady-State Electromagnetic Scattering Problems Using the Time-Dependent Maxwell's Equations, *IEEE Trans. Micro. The. Tech.* 23(8) (1975) 623-630.
- [26] Y. Sun, P.S.P. Tse, Symplectic and multisymplectic numerical methods for Maxwell's equations, *J. Comput. Phys.* 230 (2011) 2076-2094.
- [27] C. K. Tam, J. C. Webb, Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics, *J. Comput. Phys.* 107 (1993) 262-281.
- [28] L. Gao, B. Zhang, D. Liang, The splitting finite-difference time-domain methods for Maxwell's equations in two dimensions, *J. Comput. and A. Math.* 205 (2007) 207-230.
- [29] Bing Wei, Xiao-Yong Li, Fei Wang, and De-Biao Ge, A finite difference time domain absorbing boundary condition for general frequency-dispersive media, *Acta Physica Sinica.* 58(7) (2009) 6174-6178.
- [30] E. Olsson, G. Kreiss, A conservative level set method for two phase flow, *J. Comput. Phys.* 210 (2005) 225-246.

- 
- [31] Tony W. H. Sheu, C. H. Yu, P. H. Chiu, Development of a dispersively accurate conservative level set scheme for capturing interface in two-phase flows, *J. Comput. Phys.* 228 (2009) 661-686.
- [32] C. M. Furse, S. P. Mathur, O. P. Gandhi, Improvements to the finite-difference time-domain method for calculating the radar and cross section of a perfectly conducting target, *IEEE Trans. Microwave Theory and Tech.* 38 (1990) 919-927.
- [33] D. M. Sullivan, Mathematical methods for treatment planning in deep regional hyperthermia, *IEEE Trans. Microwave Theory and Tech.* 39 (1991) 864-872.
- [34] R. Harrington, *Time-harmonic electromagnetic fields*, New York, McGraw-Hill (1991).
- [35] E. Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electrons, *Phys. Rev. Lett.* 58 (1987) 2059-2062.
- [36] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices, *Phys. Rev. Lett.* 58 (1987) 2486-2489.
- [37] R. D. Meade, A. Devenyi, J. D. Joannopoulos, O. L. Alerhand, D. A. Smith, K. Kash, Novel applications of photonic band gap materials: Low-loss bends and high Q cavities, *J. App. Phys.* 75 (1994) 4753-4755.
- [38] A. Mekis, J. C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3787-3790.