

2 METODA KONEČNÝCH DIFERENCÍ V ČASOVÉ OBLASTI

V této části práce se budeme zabývat metodou konečných diferencí. Metoda je založena na tom, že původně spojitá hledaná funkce je nahrazena sadou diskretních funkčních hodnot. Nehledáme již tedy průběh funkce, ale jen sadu jejích hodnot v uzlových bodech diskretizační sítě (odtud též plyne alternativní pojmenování – metoda sítě).

Nejprve se budeme krátce zabývat metodou konečných diferencí ve frekvenční oblasti (Finite-Difference Frequency-Domain, FDFD), poté metodou konečných diferencí v časové oblasti (Finite-Difference Time-Domain, FDTD). Na závěr kapitoly srovnáme obě metody při řešení jednoduchého příkladu.

2.1 Metoda konečných diferencí ve frekvenční oblasti

Při řešení radioelektronických a mikrovlnných obvodů je tato metoda nejčastěji užívána k řešení Helmholtzovy rovnice

$$\Delta E + k^2 E = 0 \quad (2.1)$$

Ve které E značí hledanou hodnotu – zde intenzitu elektrického pole a k je vlnové číslo. Tato rovnice má stejný tvar pro celou řadu veličin harmonicky proměnného elektromagnetického pole. Na místě E ve vztahu (2.1) mohou stát například fázy indukci elektrického a magnetického pole D a B , intenzita magnetického pole H , magnetického vektorového potenciálu A nebo Hertzových vektorů. Laplaceův operátor obsahuje druhé parciální derivace podle prostorových proměnných. Jeho diferenční aproximaci v ekvidistantní kartézské síti s diskretizačním krokem h získáme snadno Taylorovým rozvojem funkce E takto:

$$E_1 = E_0 + h \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 E}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 E}{\partial x^4} + \dots \quad (2.2a)$$

$$E_2 = E_0 - h \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 E}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 E}{\partial x^4} - \dots \quad (2.2b)$$

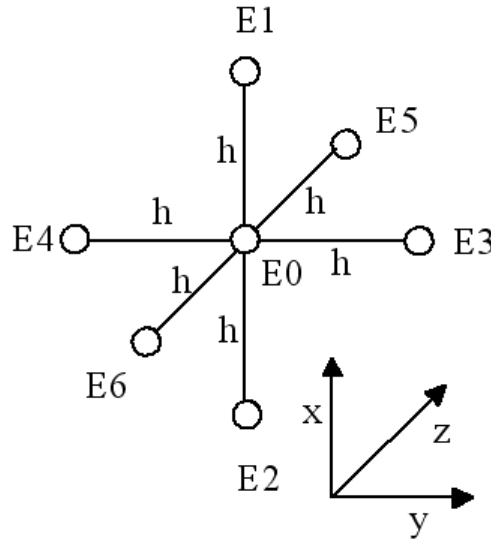
$$E_3 = E_0 + h \frac{\partial E}{\partial y} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 E}{\partial y^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 E}{\partial y^4} + \dots \quad (2.2c)$$

$$E_4 = E_0 - h \frac{\partial E}{\partial y} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 E}{\partial y^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 E}{\partial y^4} + \dots \quad (2.2d)$$

$$E_5 = E_0 + h \frac{\partial E}{\partial z} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 E}{\partial z^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 E}{\partial z^4} + \dots \quad (2.2e)$$

$$E_6 = E_0 - h \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 E}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 E}{\partial x^4} + \dots \quad (2.2f)$$

kde tečkami vyznačujeme pokračování rozvoje a situaci ilustruje obr. 2.1.



Obr. 2.1. K odvození diferenční náhrady Laplaceova operátoru pro metodu konečných diferencí ve frekvenční oblasti

Sečtením rovnic (2.2a) až (2.2f) obdržíme

$$\begin{aligned} E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5 + E_6 &= \\ &= 6E_0 + h^2 \Delta E + \frac{2h^4}{4!} \left(\frac{\partial^4 E}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 E}{\partial y^4} + \frac{\partial^4 E}{\partial z^4} \right) + \dots \end{aligned} \quad (2.3)$$

Uvážíme-li, že diskretizační krok h je malý, je pak dominantní příčinou chyby určení druhých derivací nenulovost čtvrtých derivací a tato chyba klesá se čtvercem velikosti diskretizačního kroku, neboli uvedený výraz určuje derivaci s přesností druhého řádu

$$\Delta E = \frac{E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5 + E_6 - 6E_0}{h^2} + O(h^2) \quad (2.4a)$$

Analogickým postupem lze odvodit diferenční náhrady Laplaceova operátoru pro 2D problémy:

$$\Delta E = \frac{E_1 + E_2 + E_3 + E_4 - 4E_0}{h^2} + O(h^2) \quad (2.4b)$$

a 1D problémy:

$$\Delta E = \frac{E_1 + E_2 - 2E_0}{h^2} + O(h^2) \quad (2.4c)$$

Nyní diferenční náhradu (2.4a) aplikujeme na Helmholtzovu rovnici (2.1). Hledanou (spojitou) veličinu E nahradíme vektorem jejích diskretních hodnot v uzlech sítě. Vzhledem k tomu, že rovnice (2.4a) udává hodnotu Laplaceova operátoru v uvažovaném uzlu sítě s pomocí hodnot v okolních uzlech sítě, obdržíme soustavu lineárních rovnic

$$-\mathbf{A}\mathbf{E} + k^2\mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (2.5)$$

kde matice \mathbf{A} v sobě obsahuje jak diferenční náhrady druhých derivací, tak i okrajové, popř. hraniční podmínky. Nalezení hodnot hledané veličiny je možné, pokud známe hodnotu vlnového čísla k . Velmi často je však právě toto číslo neznámé. Uvažujme například úlohu, při níž hledáme rezonanční frekvenci dutiny vyplněné dielektrikem. Pro vlnové číslo k platí

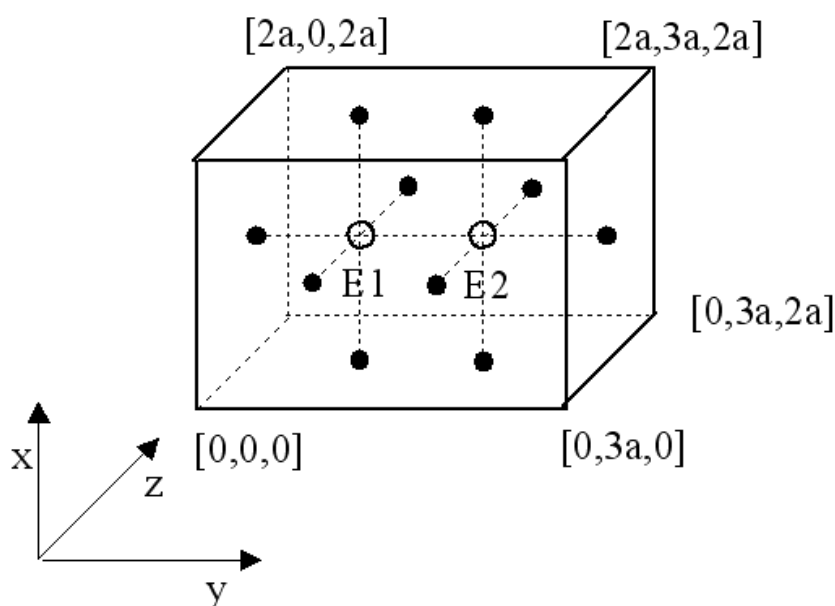
$$k = 2\pi f \sqrt{\mu\epsilon} \quad (2.6)$$

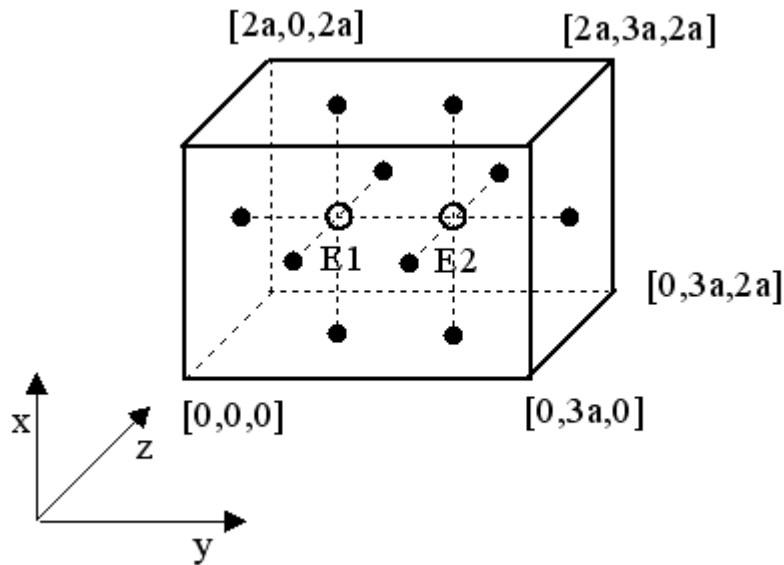
Nalezení vlnového čísla k je možné následujícím postupem: Nejprve přepíšeme vztah (2.5) do standardního zápisu soustavy lineárních rovnic:

$$(k^2\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (2.7)$$

kde \mathbf{I} je jednotková matice stejného řádu, jako matice \mathbf{A} . Tato soustava rovnic bude mít netriviální (nenulové) řešení právě tehdy, když determinant výrazu v závorce na levé straně (2.7) bude nulový, tedy když k^2 bude vlastním číslem matice \mathbf{A} (srovnej [2.5]). Matice \mathbf{A} má obecně řadu vlastních čísel, která odpovídají jednotlivým rezonančním frekvencím dutiny. Vlastní vektory této matice pak odpovídají rozložení elektromagnetického pole při rezonanci na příslušné vlastní frekvenci dutiny. Hustota (počet uzlů) diskretizační sítě přitom určuje počet vlastních čísel matice \mathbf{A} a tím i počet módů kmitání, které je numerický model schopen postihnout.

Uvedený postup si nyní můžeme demonstrovat na zjednodušeném příkladu: Mějme dutinu v dobrém vodiči ve tvaru kvádru, přičemž jeho strany jsou po řadě $2a$, $3a$, $2a$ (obr. 2.2.). Hledejme rezonanční frekvence módů, které mají intenzitu elektrického pole toliko ve směru x .





Obr. 2.2. Ilustrace řešení jednoduchého rezonátoru metodou konečných diferencí ve frekvenční oblasti.

Pro složku intenzity E_x platí Dirichletova okrajová podmínka $E_x = 0$ na čtyřech stěnách rezonátoru, totiž na stěně levé, pravé, přední a zadní, tedy po řadě pro stěny splňující podmínky $y = 0, y = 3a, z = 0, z = 2a$. Pro zbývající stěny rezonátoru pak platí Neumannova podmínka $\frac{\partial E_x}{\partial x} = 0$ na spodní a horní stěně, tedy pro $x = 0$ a $x = 2a$. S uvažováním těchto podmínek lze pro hodnoty ve dvou vnitřních uzlech sítě v rezonátoru napsat soustavu lineárních rovnic. Uzel E1 obklopuje šest dalších uzlů sítě. Tři z nich leží na stěnách s Dirichletovou okrajovou podmínkou, hodnoty E v těchto bodech tedy budou nulové. Dva z nich leží na stěně s Neumannovou podmínkou. Podmínku nulovosti derivace podle normály zajistíme tak, že hodnotu funkce E v těchto bodech položíme rovnu E1. Zbývajícím uzlem v sousedství je již jen uzel E2. Na základě obdobné úvahy pro druhý uzel s neznámou hodnotou E2 již lze sestavit matici soustavy \mathbf{A} :

$$\left(k^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{4}{a^2} & -\frac{1}{a^2} \\ -\frac{1}{a^2} & \frac{4}{a^2} \end{bmatrix} \right) \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (2.8)$$

přičemž vlastní čísla této soustavy dávají $k_1 = \sqrt{\frac{5}{a^2}}, k_2 = \sqrt{\frac{3}{a^2}}$. Řešení jsou dvě a popisují pole dvou modů, díky velkému diskretizačnímu kroku a ne dosti přesně. Vliv velikosti diskretizačního kroku na přesnost určení rezonančních frekvencí rezonátoru bude v této kapitole rozebrán podrobněji na jiném místě.

Metoda konečných diferencí ve frekvenční oblasti je metodou, která se k výpočtům elektromagnetických polí používá již jen zřídka. V současné době je jednoznačně překonána jinými metodami, občas bývá užívána k určení vlastních frekvencí kmitů soustav. V tomto díle ji popisujeme

především jako pomocný prostředek k pochopení metody FDTD, které se budeme věnovat v dalších odstavcích.

2.2 Základní principy metody konečných diferencí v časové oblasti

Pokud bychom plně znali současný stav nějaké soustavy a všechny zákony, kterými se řídí, mohli bychom plně předpovědět libovolně vzdálenou budoucnost takové soustavy. Bylo by k tomu zapotřebí jen dostatečně výkonného počítače. Bohužel (nebo možná bohudík) je vesmír natolik rozlehlý a zákony, kterými se řídí natolik složité, že je možnost jeho kompletního popisu zcela mimo naše možnosti.

V mnohem jednodušším případě elektromagnetického pole však toto omezení nemusí platit. Na makroskopické úrovni je toto pole velmi přesně popsáno Maxwellovými rovnicemi, které popisují souvislost časové změny elektromagnetického pole a jeho okamžitého rozložení. Jeho výpočet zpravidla požadujeme v omezeném prostoru, který není nijak s okolím spojen. Navíc je počet veličin pole příznivě nízký – zpravidla jen dva vektory \mathbf{E} a \mathbf{H} . Ve většině technických úloh můžeme navíc vyjít z podmínky nulových hodnot veličin pole v počátečním čase (tedy máme k dispozici přesnou znalost pole v celém vyšetřovaném objemu). Tyto skutečnosti hovoří pro možnost výpočtu elektromagnetických polí v časové oblasti. Je ovšem třeba rovněž tak uvést, že při praktické realizaci výpočtu pole v časové oblasti můžeme vždy brát v úvahu hodnoty pole v konečném počtu bodů a časů, navíc pak jen s konečnou přesností. To musí nutně vést k tomu, že vypočtená pole se budou od polí skutečných do jisté míry odchýlovat.

2.2.1. Základní vztahy pro FDTD

Při metodě konečných diferencí v časové oblasti vycházíme z diferenciálního tvaru Maxwellových rovnic

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}_{ind} + \vec{J}_{en} , \quad (2.9)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.10)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad (2.11)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.12)$$

$$\vec{D} = \vec{\epsilon} \cdot \vec{E} \quad (2.13)$$

$$\vec{B} = \vec{\mu} \cdot \vec{H} \quad (2.14)$$

$$\vec{J} = \vec{\sigma} \vec{E} \quad (2.15)$$

Přitom \vec{E} a \vec{H} značí vektory intenzity elektrického a magnetického pole, \vec{D} a \vec{B} jsou vektory elektrické a magnetické indukce, \vec{J}_{ind} a \vec{J}_{en} značí vektor plošné hustoty proudu indukovaného a proudu vnučeného zdroji, ρ je objemová hustota náboje a $\vec{\nabla}$ diferenciální (tzv. nabla) operátor. Interakce elektromagnetického pole s prostředím je zde popsána (tenzory) permitivity $\vec{\epsilon}$, permeability $\vec{\mu}$ a

vodivosti $\vec{\sigma}$. Obecný popis v dalším výkladu této kapitoly aplikujeme na izotropní prostředí, v němž jsou uvedené veličiny dány skaláry ε, μ, σ .

Prvé dvě Maxwellovy rovnice (2.9 a 2.10) obsahují na pravé straně časové derivace vektorů elektromagnetického pole. Podle Taylorova rozvoje (2.10) můžeme hodnoty magnetické indukce \vec{B} zapsat jako

$$\vec{B}(t + \Delta t) = \vec{B}(t) - \Delta t \vec{\nabla} \times \vec{E} \quad (2.16),$$

pokud v rozvoji zanedbáme časové derivace druhého a vyššího řádu.

Derivace podle času i prostorových souřadnic nahrazujeme při výpočtech metodou FDTD diferencemi. Takovou náhradu lze provést několika způsoby. Derivace lze nahradit diferencemi, a to dopřednými

$$\partial F / \partial x \approx \frac{F(x + \Delta) - F(x)}{\Delta} \quad (2.17)$$

zpětnými
$$\partial F / \partial x \approx \frac{F(x) - F(x - \Delta)}{\Delta} \quad (2.18)$$

nebo centrálními
$$\partial F / \partial x \approx \frac{F(x + \Delta/2) - F(x - \Delta/2)}{\Delta} \quad (2.19)$$

Pro náhradu prostorových derivací lze nalézt takové uspořádání diskretizačních uzlů pro jednotlivé složky pole, aby potřebné derivace byly vždy počítány z diferencí centrálních, které aproximují hodnotu derivace věrněji.

Pokud se časových derivací týče, neužívají se zpětné diference (vedou k divergenci výpočtu pro libovolnou velikost časového kroku). Dopředné diference umožňují nalézt výpočetní postupy bezpodmínečně stabilní pro libovolnou délku kroku. Stabilita je vykoupena nutností inverze matice v každém kroku výpočtu. Stabilita výpočtu sama o sobě neznamená přesný výpočet. Po počátečním nadšení zájem o bezpodmínečně stabilní metody opadl, neboť pro stejnou přesnost výpočtu nepřinášejí úsporu výpočetního času. Proto je nejrozšířenější metodou diskretizace v čase ta, která i časové derivace nahrazuje centrálními diferencemi.

Taková diskretizace při vhodném rozdělení složek pole, z nichž některé jsou diskretizovány v časech $n\Delta t$ a jiné v časech $(1/2+n)\Delta t$, je stabilní pokud časový krok Δt nepřekročí jistou mez, tzv. Courantovu podmínku. Tato kritická hodnota je známa přesně pro kartézský souřadný systém, pro některé další byla určena přibližně. Metoda výpočtu s takto posunutými časovými řezy se v angličtině nazývá „leapfrog method“. Určení meze stability se budeme v této kapitole zabývat později.

V kartézské souřadné soustavě byla metoda FDTD poprvé použita v [2.1]. Elektromagnetické pole má šest složek, jmenovitě $E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z$. Pro časový vývoj pole lze pak odvodit

$$\begin{aligned}
 E_{x\,i,j,k}^{n+1} &= \left(\frac{1 - \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) E_{x\,i,j,k}^n + \\
 &+ \left(\frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) \left(\frac{H_{z\,i,j+1/2,k}^{n+1/2} - H_{z\,i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} - \frac{H_{y\,i,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_{y\,i,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} \right)
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

$$\begin{aligned}
 E_{y\,i,j,k}^{n+1} &= \left(\frac{1 - \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) E_{y\,i,j,k}^n + \\
 &+ \left(\frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) \left(\frac{H_{x\,i,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_{x\,i,kj-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{H_{z\,i+1/2,j,k}^{n+1/2} - H_{z\,i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} \right)
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

$$\begin{aligned}
 E_{z\,i,j,k}^{n+1} &= \left(\frac{1 - \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) E_{z\,i,j,k}^n + \\
 &+ \left(\frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) \left(\frac{H_{y\,i,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_{y\,i,kj-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{H_{x\,i+1/2,j,k}^{n+1/2} - H_{x\,i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta y} \right)
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

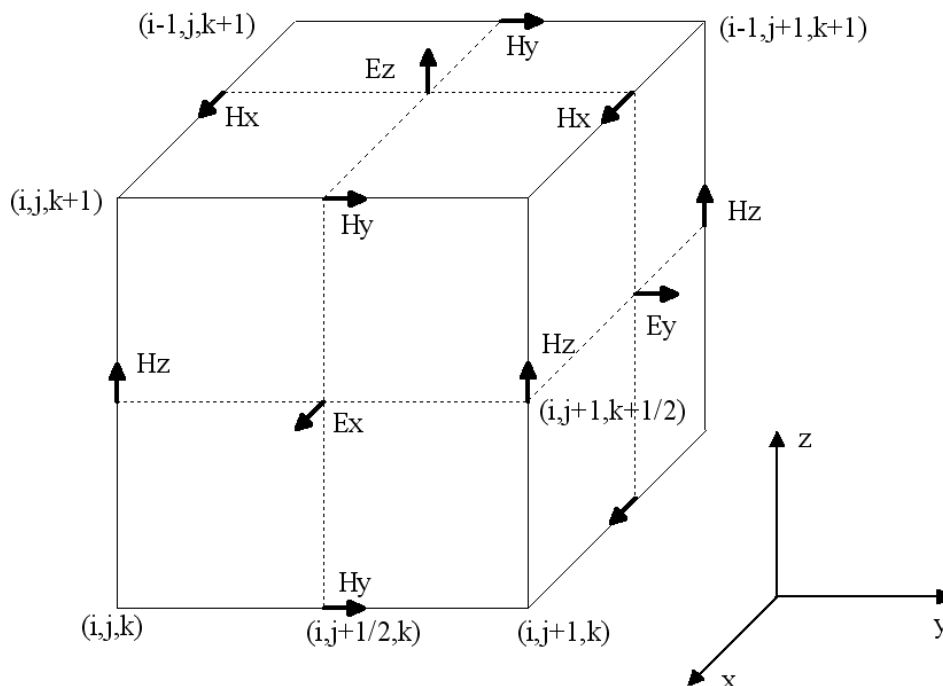
$$\begin{aligned}
 H_{xi,j,k}^{n+1/2} &= \left(\frac{1 - \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}}{1 + \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}} \right) H_{xi,j,k}^{n-1/2} + \\
 &+ \left(\frac{\frac{\Delta t}{\mu}}{1 + \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}} \right) \left(\frac{E_{y\,i,j,k+1/2}^n - E_{y\,i,j,k-1/2}^n}{\Delta z} - \frac{E_{z\,i,j+1/2,k}^n - E_{z\,i,j-1/2,k}^n}{\Delta y} \right)
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

$$H_{y,i,j,k}^{n+1/2} = \left(\frac{1 - \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}}{1 + \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}} \right) H_{y,i,j,k}^{n-1/2} + \left(\frac{\frac{\Delta t}{\mu}}{1 + \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}} \right) \left(\frac{E_{z,j+1/2,j,k}^n - E_{z,j-1/2,j,k}^n}{\Delta x} - \frac{E_{x,j,j,k+1/2}^n - E_{x,j,j,k-1/2}^n}{\Delta z} \right) \quad (2.24)$$

$$H_{z,i,j,k}^{n+1/2} = \left(\frac{1 - \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}}{1 + \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}} \right) H_{z,i,j,k}^{n-1/2} + \left(\frac{\frac{\Delta t}{\mu}}{1 + \frac{\Delta t}{2\mu\sigma'}} \right) \left(\frac{E_{x,j,j,k+1/2}^n - E_{x,j,j,k-1/2}^n}{\Delta y} - \frac{E_{y,j+1/2,j,k}^n - E_{y,j-1/2,j,k}^n}{\Delta x} \right) \quad (2.25)^1$$

kde zápisem $E_{x,i,j,k}$ máme na mysli hodnotu složky intenzity elektrického pole ve směru x v uzlu sítě s indexy i, j, k . Horní index pak používáme pro vyznačení času – E^n značí hodnotu veličiny E v n -tém časovém kroku, tedy v čase $t = n \Delta t$. Posun diskretizace v čase vede na neceločíselné hodnoty indexu n a posun jednotlivých veličin v prostoru stejným způsobem vede na neceločíselné hodnoty indexů i, j, k . Geometrická interpretace těchto indexů je ukázána v nákresu jedné buňky diskretizační sítě na obr. 2.3.

¹ V rovnicích (2.23) až (2.25) je zaveden vliv ztrát při střídavém magnetování prostředí pomocí „vodivosti“ σ' . Její fyzikální význam bude ještě v dalším textu zmíněn. Vodivost σ v rovnicích (2.20) až (2.22) v sobě obsahuje jak skutečnou ohmickou vodivost prostředí, tak i vliv dielektrických ztrát.



Obr. 2.3. Buňka prostorové diskretizační sítě FDTD v kartézské souřadné soustavě

Vztahy (2.20 až 2.25) mají velkou výhodu v tom, že hodnoty intenzit elektrického pole jsou počítány z hodnot intenzity magnetického pole a naopak. To umožňuje ukládat v paměti počítače každou uzlovou veličinu toliko jednou. Jakmile je vypočtena hodnota v dalším časovém kroku, lze ji stávající hodnotu přepsat.

V celé řadě případů je výpočet prováděn mimo magnetika a vodiče, v prostředí bez dielektrických i magnetizačních ztrát ($\mu = \mu_0, \sigma = 0, \sigma' = 0$), popř. mimo vodiče v prostředí s konstantní permeabilitou. Počet numerických operací lze pak snížit zavedením měřítka pro jednu z intenzit pole. Tím lze ušetřit tři násobení při přepočtu každé buňky. Zavedeme-li například měřítko pro intenzitu elektrického pole tak, že

$$E^i = \frac{\Delta t}{\mu \Delta x} E \quad (2.26)$$

a uvažujeme-li stejně velké diskretizační kroky ve všech třech prostorových souřadnicích $\Delta x = \Delta y = \Delta z$, můžeme psát

$$H_{x,i,j,k}^{n+1/2} = H_{x,i,j,k}^{n-1/2} + E_{y,i,j,k+1/2}^n - E_{y,i,j,k-1/2}^n + E_{z,i,j-1/2,k}^n - E_{z,i,j+1/2,k}^n \quad (2.27)$$

$$H_{y,i,j,k}^{n+1/2} = H_{y,i,j,k}^{n-1/2} + E_{z,i+1/2,j,k}^n - E_{z,i-1/2,j,k}^n + E_{x,i,j,k-1/2}^n - E_{x,i,j,k+1/2}^n \quad (2.28)$$

$$H_{z,i,j,k}^{n+1/2} = H_{z,i,j,k}^{n-1/2} + E_{x,i+1/2,j,k}^n - E_{x,i-1/2,j,k}^n + E_{y,i-1/2,j,k}^n - E_{y,i+1/2,j,k}^n \quad (2.29)$$

$$E_{x,i,j,k}^{m+1} = E_{x,i,j,k}^m + C \left(H_{z,i,j+1/2,k}^{n+1/2} - H_{z,i,j-1/2,k}^{n+1/2} + H_{y,i,j,k-1/2}^{n+1/2} - H_{y,i,j,k+1/2}^{n+1/2} \right) \quad (2.30)$$

$$E_{y,i,j,k}^{m+1} = E_{y,i,j,k}^m + C \left(H_{x,i,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_{x,i,j,k-1/2}^{n+1/2} + H_{z,i-1/2,j,k}^{n+1/2} - H_{z,i+1/2,j,k}^{n+1/2} \right) \quad (2.31)$$

$$E_{z,i,j,k}^{m+1} = E_{z,i,j,k}^m + C \left(H_{y,i+1/2,j,k}^{n+1/2} - H_{y,i-1/2,j,k}^{n+1/2} + H_{x,i,j-1/2,k}^{n+1/2} - H_{x,i,j+1/2,k}^{n+1/2} \right) \quad (2.32)$$

$$\text{kde} \quad C = \frac{(\Delta t)^2}{\mu \varepsilon (\Delta x)^2}$$

Tato změna měřítka intenzity elektrického pole má výhodu v tom, že k přepočtení všech šesti složek elektromagnetického pole v jedné buňce FDTD je třeba toliko tři násobení a 24 sčítání.

Vztahy (2.20) až (2.25) definují numerický model, který zachovává důležité veličiny, totiž náboj, proud a indukční toky. Výpočty s pomocí tohoto modelu mají jednu důležitou vlastnost, kterou velice ocení ti, kdo „ladí“ programy založené na FDTD: Pole v každém kroku výpočtu má přímý fyzikální význam elektromagnetického pole existujícího v dané struktuře v určitém čase.

2.2.2. Buzení numerického modelu a korespondence mezi frekvenční a časovou oblastí

Soustava rovnic (2.20 až 2.25) umožňuje vypočítat časový vývoj elektromagnetického pole ze známého počátečního stavu. Počáteční podmínkou je ve většině řešených úloh stanovena nulová hodnota vektorů pole v celé vyšetřované oblasti. Toto zadání je doplněno buzením – tím, že vnutíme do některých uzlů sítě v příslušném čase nenulové hodnoty pole. Jednou z možností je například použít harmonický budicí signál. Takový signál se bude numerickou sítí postupně šířit. Po dostatečně velkém počtu kroků se hodnoty vektorů pole v uzlech sítě přiblíží ustálenému stavu, takže máme k dispozici kompletní řešení pole v uvažované struktuře na dané frekvenci. Takové využití FDTD je možné, v případě lineárních soustav (obvodů, prostředí) však existuje řešení efektivnější. Získáme – li pomocí FDTD časovou odezvu lineární soustavy na vhodný vstupní signál, můžeme ji transformovat do frekvenční oblasti pomocí Fourierovy transformace. Tak můžeme při jediném běhu analýzy získat odezvu soustavy v širokém pásmu frekvencí.

Důležitá je volba vhodného průběhu budicího signálu. Zdánlivě vhodným vstupním signálem je Diracův impuls, neboť obsahuje rovnoměrně všechny frekvence. Prakticky však jej pro FDTD nemůžeme využít, neboť (diskrétní) numerický model má ze své podstaty omezenou frekvenční charakteristiku (Omezení vyplývá jednak ze Shannon-Kotělnikovova vzorkovacího teorému, jednak i z disperze numerického modelu – viz oddíl 2.2.4). Namísto něj se užívají signály, které mají omezené spektrum. V praxi se nejčastěji používá buď impuls Gaussův

$$S(t_n) = e^{-\left(\frac{t_n - t_c}{N}\right)^2} \quad (2.33)$$

nebo Blackmann-Harrisův v časovém okně

$$S(t_n) = 0,35875 + 0,48829 \cos\left(\frac{\pi(t_n - t_c)}{N}\right) + \\ + 0,14128 \cos\left(\frac{2\pi(t_n - t_c)}{N}\right) + 0,01168 \cos\left(\frac{3\pi(t_n - t_c)}{N}\right) \quad (2.34)$$

přítom t_n je doba, příslušející n -tému časovému kroku, t_c poloviční šířka impulsu a N počet časových kroků výpočtu připadající na t_c . Signál se uvažuje jako nenulový jen v časovém okně od $t - t_c$ do $t + t_c$. Tak je tento signál omezen nejen ve frekvenční, ale i v časové oblasti.

Uvedený signál vnutíme přímo do příslušných uzlů sítě. Je přitom důležité, aby tento signál trval nejvýše tak dlouho, nežli k těmto uzlům dorazí vlna odražená od vlastního obvodu. Pokud bychom tuto zásadu nedodrželi, odrazila by se v místě buzení vlna zpět do vyšetřované struktury a tím by zkreslila vypočtené rozložení pole.

Při výpočtu vlastností mikrovlnných obvodů je ke správnému vybuzení struktury třeba znát a aplikovat rozložení pole vlny na vedení, kterým je vyšetřovaná struktura napájena. Rovněž tak pro určení hodnot přenosů a odrazů je vhodné za výstupní signál soustavy brát nikoli hodnotu v jednom uzlu sítě, ale skalární součin vypočteného rozložení elektromagnetického pole s rozložením pole příslušného modu vystupující vlny. Zvláště vhodné je to tehdy, když jsou na uvažovaném vedení jednotlivé mody ortogonální. Pak totiž můžeme popsání skalárního součinu využít k vyloučení zbytků vyšších vidů, které by ovlivnily hodnotu snímanou v jednom nebo několika málo uzlech sítě.

Ozřejmíme to na příkladu výpočtu pole v koaxiální struktuře. Na vstupní i výstupní bráně lze předpokládat dominantní mod TEM. Elektrická intenzita příslušná k tomuto modu má radiální směr. Pokud se rozhodneme pro buzení Gaussovým impulsem, budeme do buněk vstupní brány vnučovat hodnotu

$$E_r(r, t) = \frac{e^{-\left(\frac{t_n - t_i}{N}\right)^2}}{r} \quad (2.35)$$

Za výstupy vln na jednotlivých branách bereme

$$S(t) = \sum_i E_r(r_i) \cdot \frac{1}{r_i} \quad (2.36)$$

kde sumace je prováděna přes všechny buňky v daném řezu koaxiálního vedení, r_i je vzdálenost od osy struktury.

Tento postup je jednoduchý v případě, kdy jsou rozložení intenzit elektromagnetického pole známa, tedy zejména v případě vlnodů s kovovým pláštěm, kde lze rozložení snadno odvodit nebo nalézt v literatuře [2.8, 2.13]. Pro jiné typy vedení je někdy třeba rozložení pole vidů určit dalším výpočtem metodou FDTD.

2.2.3. Disperze numerického modelu, Courrantova podmínka

Doposud jsme uvedli základní vztahy pro výpočet elektromagnetických polí v časové oblasti pomocí metody FDTD. Opomíjeli jsme při tom důležitou skutečnost, které se nyní budeme věnovat podrobněji. Diskretizací původně spojitého pole a náhradou derivací diferencemi – jak prostorovými, tak i časovými – se nutně dopouštíme určité chyby. Pro praktické užití je znalost této možné chyby důležitá. Znalost vztahu mezi velikostí diskretizačního kroku a chybou výpočtu zpětně umožňuje stanovení hustoty diskretizační sítě pro dosažení požadované přesnosti.

Uvažujme řešení pole v homogenním izotropním stacionárním dielektriku, přičemž použijeme jednotek normalizovaných tak, aby platilo $\varepsilon = 1$, $\mu = 1$, $\sigma = 0$. Pak můžeme vynásobit vztah (2.9) imaginární jednotkou a sečíst s (2.10), čímž obdržíme kompaktní formulaci prvních dvou Maxwellových rovnic

$$j\vec{\nabla} \times (\vec{H} + j\vec{E}) = \frac{\partial}{\partial t} (\vec{H} + j\vec{E}) \quad (2.37)$$

Substitucí $\vec{\Lambda} = (\vec{H} + j\vec{E})$ získáme zápis

$$j\vec{\nabla} \times \vec{\Lambda} = \frac{\partial}{\partial t} \vec{\Lambda} \quad (2.38)$$

Uvažujme nyní rovinnou vlnu, která se šíří prostorem v obecném úhlu. Můžeme pro ni psát

$$\vec{\Lambda}_{I,J,K}^n = \vec{\Lambda}_0^0 e^{(k_x I \Delta x + k_y J \Delta y + k_z K \Delta z - \omega n \Delta t)} \quad (2.39)$$

kde jsme polohu vzorků pole v diskretizační síti označili velkými písmeny, aby nedošlo k záměně indexu K s konstantou šíření $\vec{k} = \vec{k}_x + \vec{k}_y + \vec{k}_z$. S uvažováním vztahů (2.20) až (2.25) pak získáme

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\bar{x}^0}{\Delta x} \sin\left(\frac{\vec{k}_x \Delta x}{2}\right) + \frac{\bar{y}^0}{\Delta y} \sin\left(\frac{\vec{k}_y \Delta y}{2}\right) + \frac{\bar{z}^0}{\Delta z} \sin\left(\frac{\vec{k}_z \Delta z}{2}\right) \right] \times \vec{\Lambda}_{I,J,K}^n = \\ & = \frac{j}{\Delta t} \vec{\Lambda}_{I,J,K}^n \sin\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Rozepsáním vektorového součinu na levé straně (2.40) do rovnic pro tři složky $\Lambda_x, \Lambda_y, \Lambda_z$ obdržíme homogenní soustavu rovnic. Vzhledem k tomu, že triviální řešení znamená nulové hodnoty pole, je z technického hlediska zajímavé jen řešení netriviální. To existuje právě, když je determinant soustavy nulový. Podmínkou pro to je

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\Delta t} \sin\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \right]^2 = \\ & = \left[\frac{1}{\Delta x} \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta y} \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta z} \sin\left(\frac{k_z \Delta z}{2}\right) \right]^2 \end{aligned} \quad (2.41)$$

Odnormujeme-li nyní prostředí, objeví se rychlost světla c na levé straně rovnice:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{c \Delta t} \sin\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \right]^2 = \\ & = \left[\frac{1}{\Delta x} \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta y} \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta z} \sin\left(\frac{k_z \Delta z}{2}\right) \right]^2 \end{aligned} \quad (2.42)$$

Po vyšetření disperze numerického modelu zbývá provést srovnání se šířením vlny spojitým (skutečným) prostředím. Disperzní rovnice zde má tvar

$$\frac{\omega^2}{c^2} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (2.43)$$

Srovnáním (2.43) a (2.42) snadno nahlédneme, že pro diskretizační kroky blízké se nule jsou obě rovnice identické. Poněkud obtížnější je určení chyby v případě konečných kroků. Je možné je provést numericky [2.2]. Výsledný poměr fázových rychlostí šíření ve volném prostoru a v numerickém modelu závisí na směru šíření vlny. Tak pro pět diskretizačních řezů na vlnovou délku se podle směru šíření vlny pohybuje mezi 0,942 až 0,982, pro deset řezů mezi 0,988 až 0,995 a pro 20

řezů na vlnovou délku kolísá mezi 0,997 až 0,999. Minimální chyba přitom nastává při šíření ve směru diagonály, maximální při šíření podél některé ze souřadných os, při zmenšení diskretizačního kroku na polovinu klesá chyba přibližně 4x.

Numerický model (2.20 až 2.25) se tedy chová jako anizotropní prostředí, a to i v případě, že jeho prostřednictvím modelujeme izotropní prostředí. Vlny se v tomto modelu šíří vždy pomaleji, nežli ve skutečnosti. Vzniklá chyba v určení rychlosti šíření roste s elektrickými rozměry vyšetřované struktury. Tak např. pro 20 diskretizačních řezů na vlnovou délku a vzdálenost odpovídající 10 vlnovým délkám dojde k fázové chybě asi 11 stupňů. Tyto vlastnosti jsou uvažovanému modelu vlastní a nelze je snadno odstranit. Ovlivňují především přesnost určení fáze přenosů vyšetřovaných struktur a přesnost určení rezonančních frekvencí rezonátorů.

Vzhledem k náhradě časových derivací centrálními diferencemi je výpočetní proces stabilní jen do určité velikosti časového kroku. Tuto velikost kroku je snadné určit pro kartézskou souřadnou síť. Kritická mez (Courrantova podmínka) je dána jako

$$\Delta t \leq \frac{\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2} \right)^{-1/2}}{c} \quad (2.44)$$

c je přitom rychlost světla v opticky nejrychlejším prostředí v uvažované struktuře.

Při praktickém návrhu diskretizační sítě postupujeme zpravidla tak, že nejprve určíme počet diskretizačních řezů v prostoru. Volíme jej zpravidla tak, aby na jednu délku vlny v opticky nejhustším prostředí připadalo alespoň 10 diskretizačních řezů. Vlnovou délkou přitom rozumíme délku vlny o největší frekvenci, na níž chceme vyhodnocovat vlastnosti obvodu. Přitom musíme zajistit, aby budící signál neobsahoval významné množství frekvenčních složek s frekvencí ještě vyšší. Úměrně zvolené diskretizaci pak určíme velikost časového kroku podle (2.44).

Povšimněme si, že pro zmenšení fázové chyby 4x je třeba snížit prostorový diskretizační krok 2x. To vyvolá osminásobné zvýšení počtu uzlových veličin a zároveň zkrácení časového kroku na polovinu, výpočet tedy bude pravděpodobně trvat 16x déle.

2.2.4. Implementace okrajových podmínek

K nalezení řešení pro konkrétní elektromagnetické pole je třeba Maxwellovy rovnice v diferenciálním tvaru doplnit o okrajové podmínky. Bez nich je zadání úlohy neúplné. V metodě FDTD tyto podmínky nutně potřebujeme pro přepočítání okrajových uzlů sítě. Každá veličina je totiž počítána z hodnot dvou jiných veličin, které s ní sousedí. Uzly na okraji struktury však takové sousedy nemají, a proto je musíme určit jinak.

Poměrně jednoduché je zavedení elektrických a magnetických stěn, ne kterých požadujeme nulovost tečné složky příslušné intenzity pole nebo nulovost derivace podle normály. Postačí pak požadovat buď nulovost tečné složky, nebo nulovou derivaci (to je totožné s nastavením hodnoty rovné hodnotě složky téhož druhu a směru ležící nejbližší ve směru normály).

Poměrně obtížnější je zavedení podmínek absorpčních, které by měly zaručit bezodrazové zakončení sítě. Přitom právě tento druh podmínky je velmi potřebný pro řešení mnohých polí, například pro nalezení vyzařovacích diagramů antén, řešení odrazů vln od překážek a polí v bezodrazových komorách.

Poměrně dobře lze realizovat bezodrazové zakončení numerické sítě v případě, kdy je znám směr vlny dopadající na stěnu sítě. Taková situace nastává na vedeních dostatečně daleko od všech

diskontinuit. Protože se vlna šíří směrem ven z obvodu známou rychlostí, můžeme do buněk na hranici numerické sítě dosadit hodnoty ze sousedících vnitřních buněk, odebrané ve vhodném předchozím okamžiku. Tak pokud by rozhraní leželo v rovině $x = 0$ a vlna se k němu blížila proti směru osy x sítí s diskretizačním krokem Δx , můžeme použít

$$S_{0,y,z}^{n+1} = S_{1,y,z}^{n+1-M}, \quad M = \frac{\Delta x}{c\Delta t} \quad (2.45)$$

kde musíme použít takový časový krok, aby M vyšlo celočíselné. Takto provedené bezodrazové zakončení se od ideálního liší jen kvůli numerické disperzi, která mění rychlost šíření vlny (viz oddíl 2.2.3). Prakticky lze realizovat odrazy na úrovni -100 dB.

Ve většině úloh neznáme předem směr, ze kterého bude vlna na rozhraní dopadat. To znemožňuje účinnou absorpci výše uvedeným zakončením sítě. Proto bylo postupem času vyvinuto několik dalších metod zakončení sítě (absorpčních podmínek, anglicky Absorbing Condition, zkráceně ABC).

Engquist a Majda zvolili přístup tzv. jednosměrné vlnové rovnice. Myšlenku můžeme ukázat následovně:

Zapišme vlnovou rovnici pro libovolnou intenzitu pole U

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = 0 \quad (2.46)$$

Uvážíme-li harmonickou závislost $U = Ue^{j(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$, můžeme psát pro derivace

$$\frac{\partial U}{\partial x_i} \approx -jk_i U \quad a \quad \frac{\partial U}{\partial t} \approx j\omega U. \quad \text{Pak platí}$$

$$\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \right) U = 0 \quad (2.47)$$

což můžeme rozepsat následovně:

$$\left(k_x - \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - k_y^2 - k_z^2} \right) \left(k_x + \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - k_y^2 - k_z^2} \right) U = 0 \quad (2.48)$$

Rovnici (2.48) lze operátorově zapsat

$$LU = L^+ L^- U = 0 \quad (2.49)$$

kde operátor $L = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ umožňuje šíření v libovolném směru. Naproti

tomu operátory L^+ respektive L^- popisují šíření vln pouze v kladném, resp. záporném smyslu osy x . Kdybychom tyto operátory znali, mohli bychom je aplikovat na funkci U a tím zcela odstranit odraz od zakončení. I když bylo dokázáno [2.11], že tyto operátory umožňují totální pohlcení vln dopadajících pod libovolným úhlem, nejsou dosud přesně známy. Různí autoři je různým způsobem aproximovali, čímž získali zakončení numerické sítě umožňující úplně absorbovat vlny dopadající pod jedním nebo i několika různými úhly.

Užívanou aproximaci přizpůsobenou diskretizovaným hodnotám polí uvedla práce [2.12]. Necht' W značí libovolnou tečnou složku pole na hranici $x = 0$, tedy E_z, E_y, H_z, H_y . Nejprve určíme derivace v půli diskretizačního kroku pomocí příslušných diferencí:

$$\frac{\partial^2 W}{\partial t^2} \Big|_{\frac{1}{2},j,k}^n = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial t^2} \Big|_{0,j,k}^n + \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} \Big|_{1,j,k}^n \right) \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial W}{\partial x \partial t} \Big|_{\frac{1}{2},j,k}^n = \frac{1}{2\Delta_t} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \Big|_{\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\partial W}{\partial x} \Big|_{\frac{1}{2},j,k}^{n-\frac{1}{2}} \right) \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} \Big|_{\frac{1}{2},j,k}^n = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} \Big|_{1,j,k}^n + \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} \Big|_{0,j,k}^n \right) \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \Big|_{\frac{1}{2},j,k}^n = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \Big|_{1,j,k}^n + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \Big|_{0,j,k}^n \right) \quad (2.53)$$

Druhé derivace pak nahradíme průměrem druhých derivací v okolních bodech dosadíme do a po úpravě obdržíme postup pro aktualizaci hodnot uzlů ležících na hranici

$$\begin{aligned} W_{0,j,k}^{n+1} = & -W_{1,j,k}^{n-1} + \frac{c\Delta_t - \Delta_x}{c\Delta_t + \Delta_x} \left(W_{1,j,k}^{n+1} + W_{0,j,k}^{n-1} \right) + \frac{2\Delta_x}{c\Delta_t + \Delta_x} \left(W_{0,j,k}^n + W_{1,j,k}^n \right) + \\ & + \frac{(c\Delta_t)^2 \Delta_x}{2(\Delta_y)^2 (c\Delta_t + \Delta_x)} \left(W_{0,j+1,k}^n - 2W_{0,j,k}^n + W_{0,j-1,k}^n + W_{1,j+1,k}^n - 2W_{1,j,k}^n + W_{1,j-1,k}^n \right) + \\ & + \frac{(c\Delta_t)^2 \Delta_x}{2(\Delta_z)^2 (c\Delta_t + \Delta_x)} \left(W_{0,j,k+1}^n - 2W_{0,j,k}^n + W_{0,j,k-1}^n + W_{1,j,k+1}^n - 2W_{1,j,k}^n + W_{1,j,k-1}^n \right) \end{aligned} \quad (2.54)$$

Murova podmínka umožňuje dosáhnout odrazu 0.05 až 0.01.

Vyšší tlumení odražené vlny je možno dosáhnout dalším přístupem – pomocí tzv. dokonale přizpůsobené vrstvy (Perfectly Matched Layer – PML). V následujícím textu se budeme věnovat této podmínce, přičemž budeme čerpat přímo z [2.6].

Dopadá – li elektromagnetická vlna na rozhraní dvou prostředí, dojde zpravidla k odrazu tehdy, pokud nejsou vlnové impedance obou prostředí shodné. Vlnová impedance je přitom dána vztahem

$$Z_v = \sqrt{\frac{j\omega\mu}{j\omega\varepsilon + \sigma}} \quad (2.55)$$

Ve velké většině úloh dopadá vlna na hranici vyšetřované oblasti z prostředí s malými nebo žádnými ztrátami, tedy z prostředí s reálnou hodnotou impedance. Má-li docházet ke tlumení vlny, musí být prostředí ztrátové. To podle () znamená, že jeho vlnová impedance je komplexní číslo, a proto by při dopadu z bezztrátového prostředí na prostředí ztrátové docházelo k odrazu. Tento problém lze vyřešit tehdy, má-li pohltivé prostředí nejen komplexní permitivitu, ale i permeabilitu (tedy dochází ke

vzniku tepla při přepolarizování kterékoli z intenzit pole). Impedanci takového prostředí můžeme popsat vztahem

$$Z_v = \sqrt{\frac{j\omega\mu + \sigma'}{j\omega\varepsilon + \sigma}} \quad (2.56)$$

ve kterém σ' zastupuje ztráty při přemagnetování prostředí. Takto lze konstruovat pohlcující materiály umožňující bezodrazově přikrýt kovové konstrukce. Podobným způsobem je v časové oblasti navrženo prostředí, které má oba typy ztrát a umožňuje účinně pohltit vlny nezávisle na směru dopadu.

Základní myšlenka je dále uvedena podle [2.6] pro vlnu TE, která má na rozhraní $x = 0$ složky E_x, E_y, H_z . Nejprve využijeme linearity Maxwellových rovnic a rozdělíme složku H_z na dva díly H_{zx}, H_{zy} :

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_x E_x = \frac{\partial}{\partial y} (H_{zx} + H_{zy}) \quad (2.57)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_y E_y = -\frac{\partial}{\partial x} (H_{zx} + H_{zy}) \quad (2.57)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x' H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.58)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y' H_{zy} = \frac{\partial E_x}{\partial y} \quad (2.59)$$

Uvedená soustava rovnic ve vztazích (2.58) a (2.59) umožňuje oddělit složky intenzity magnetického pole podle toho, se kterou složkou intenzity elektrického pole rovinné vlny souvisí. Navíc nyní máme k dispozici celkem čtyři vlastnosti prostředí, kterými můžeme ovlivňovat odraz vln, totiž $\sigma_x, \sigma_x', \sigma_y, \sigma_y'$. Pokud bude mít prostředí prvé dva z těchto parametrů nenulové, bude pohlcovat vlnu šířící se ve směru y , pokud budou nenulové druhé dvě “vodivosti”, bude prostředí účinně pohlcovat vlnu šířící se ve směru x . Tak je navrženo uspořádání numerického modelu, který je ohraničen dokonalým vodičem. Vodič na okraji je přikryt vrstvou “pohltivého materiálu” – PML – tak, že ztráty tohoto materiálu postupně směrem od povrchu ke kovu rostou, přičemž je dodrženo podmínka impedance shodné s volným prostorem

$$\frac{\sigma_x}{\varepsilon_0} = \frac{\sigma_x'}{\mu_0} \text{ případně } \frac{\sigma_y}{\varepsilon_0} = \frac{\sigma_y'}{\mu_0} \quad (2.60)$$

Amplituda vlny je tlumena takto:

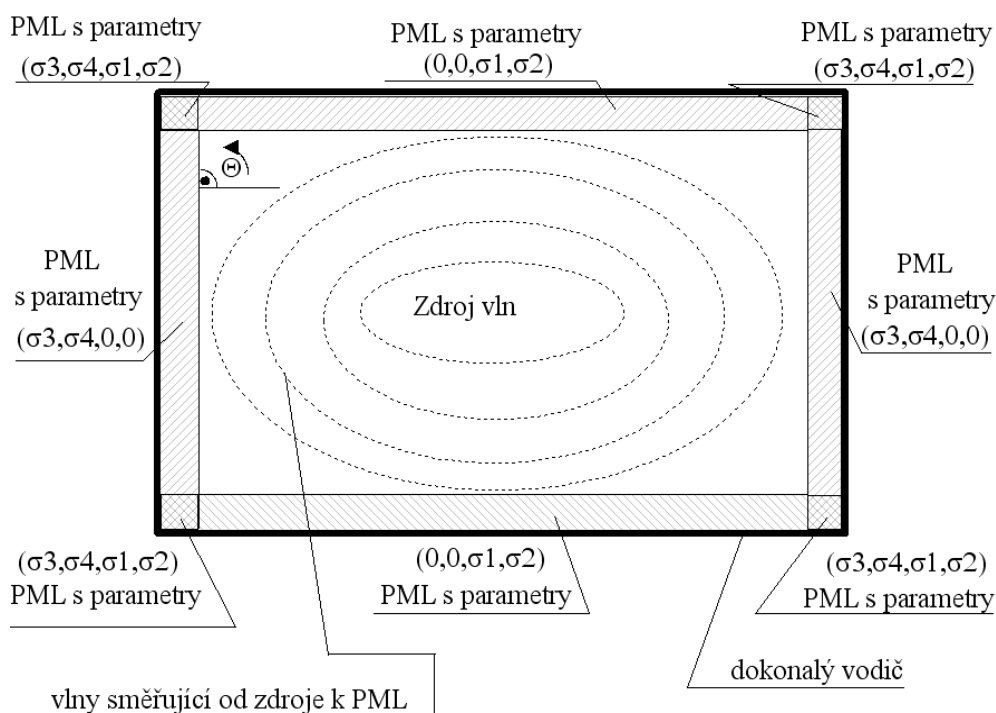
$$|U| = |U_0| e^{-\frac{\sigma_x \cos \Phi}{\varepsilon_0 c} x} e^{-\frac{\sigma_y \sin \Phi}{\varepsilon_0 c} y} \quad (2.61)$$

kde úhel Φ je úhel sevřený mezi intenzitou \vec{E} dopadající vlny a osou y . Na příslušných stěnách jsou umístěna prostředí pohlcující vždy pouze vlnu dopadající ve směru normály. Prostor v rozích, kde se jednotlivé stěny překrývají, má nenulové všechny čtyři složky “vodivosti”, viz obr. 2.4. Autor [2.6] udává, že pro účinné potlačení odrazů na úroveň -70 dB postačuje pět vrstev PML, z nichž každá má sílu jedné buňky numerického modelu. Ztráty jednotlivých vrstev silných δ rostou tak, že

$\sigma_n = \rho_{\max} (\sigma / \delta)^n$, přitom ρ značí buď σ_x nebo σ_y . Koeficient odrazu v závislosti na úhlu dopadu vlny je pak

$$R(\Theta) = e^{\frac{-2\sigma_{\max} \delta \cos \Theta}{(n+1)\epsilon_0 c}} \quad (2.62)$$

Pro vlnu šířící se rovnoběžně s rozhraním vychází sice velký odraz, taková vlna je však účinně utlumena sousední stěnou s PML.



Obr. 2.4. Ilustrace použití PML

Koncept PML (někdy též nazývaný podle svého autora Berengerova okrajová podmínka) umožňuje dostatečně účinné potlačení odrazů pro naprostou většinu aplikací. V novějších pracích byla

2.2.5. Stabilita algoritmu

Pro řešení elektromagnetických polí metodou FDTD² má velký význam určení velikosti tzv. maximálního stabilního časového kroku. Pokud zvolíme časový krok velmi malý, bude výpočet jistě stabilní, bude však velmi náročný na zdroje (především na čas výpočtu). Naproti tomu příliš velký časový krok vede nevyhnutelně k nestabilitě, tedy k tomu, že vypočtené hodnoty v některých uzlech sítě postupně rostou nade všechny meze. Máme-li zajistit stabilitu výpočtu, musíme přesně určit nebo alespoň přibližně určit kritickou hodnotu časového kroku. Za kritickou hodnotu časového kroku

² Máme na mysli výpočet s využitím centrálních diferencí v časové i prostorové oblasti, tak jako v celé kapitole 2.

považujeme takovou jeho velikost, kdy každý krok větší než kritický vede k nestabilitě výpočtu. Jeho velikost je přesně známa pro rozlehlé sítě v kartézském souřadném systému, kde je dána vztahem (2.44). Pro křivočaré souřadnice je dosud velikost kritického kroku často odhadována metodou pokusu a omylu, pro některé případy sítí již byla stanovena (např. [2.9, 2.10]).

Pokusme se nyní názorně přiblížit princip potenciální nestability u FDTD algoritmu: Síť, ve které je prováděn výpočet, má konečné rozměry. Modeluje těleso o konečných rozměrech. V objemu tohoto tělesa může elektromagnetické pole kmitat na celé řadě frekvencí. Těmto frekvencím přísluší různé způsoby rozložení elektromagnetického pole – módy. Je známo, že řešením Helmholtzovy rovnice pro pole v takovém objemu je množina tzv. módů (jistých rozložení pole) a k těmto módům příslušejí tzv. charakteristická čísla. Je zvykem seřadit a očíslovat módy přirozenými čísly podle vzrůstajících charakteristických čísel. Kdybychom kterýkoli mód použili jako počáteční podmínku pro Maxwellovy rovnice a chtěli znát jeho vývoj v čase, zjistili bychom, že jeho prostorové rozložení se nemění, pouze dochází ke změnám amplitudy v rytmu časové závislosti. Pokud je prostředí v uvažovaném objemu lineární, jde o závislost harmonickou s frekvencí úměrnou příslušnému charakteristickému číslu módu. Tato situace je obdobná i v diskrétním případě:

Řešením FDFD rovnic je možné získat (diskrétní) módy s příslušnými charakteristickými hodnotami. Kdybychom některý z těchto módů položili jako počáteční podmínku pro algoritmus FDTD, ze kterého dané FDFD rovnice vznikly, výsledkem by byl tento mód, kmitající v rytmu jisté (diskrétní) časové závislosti s frekvencí úměrnou charakteristickému číslu a časovému kroku FDTD. Kdybychom pak použili vyšší mód (s vyšším pořadovým číslem), kmitání by mělo (při stejném časovém kroku) větší frekvenci. V případě modelované struktury je počet módů (a rezonančních frekvencí) neomezený. V případě diskretizovaného modelu odpovídají vlastním módům struktury vlastní módy diskretizační mříže modelu. Zde je však zvětšování frekvence limitováno, na rozdíl od spojitého případu, vzorkováním časové závislosti. Pokud již reprezentaci modu nedovolí malá hustota sítě v čase (frekvence již nemůže být zobrazena, neboť nesplňuje podmínku danou vzorkovacím teorémem), dojde ke kvalitativně odlišnému jevu – k exponenciálnímu růstu amplitudy módu, tedy k nestabilitě.

Mohlo by se zdát, že nestabilitě můžeme zamezit takovým způsobem buzení modelu, aby v síti FDTD nebyly přítomny nestabilní módy. Konečná přesnost aritmetiky počítače však způsobí, že se v síti vždy objeví všechny možné módy, přesněji všechny módy, které zvolená prostorová diskretizační síť může reprezentovat. Pokud jsou mezi nimi i módy nestabilní, jejich amplituda s časem roste, může v relativně krátkém čase mnohokrát převýšit amplitudu stabilních módů a způsobit tak přinejmenším ztrátu přesnosti, případně naprosto zhroucení výpočtů.

Pro praktické výpočty je tedy nezbytné zajistit stabilitu všech módů, které se mohou v síti vyskytnout. k nestabilitě dojde, při zvyšování časového kroku, dříve u módu s vyšší charakteristickou hodnotou. Naštěstí je diskrétních módů jen konečný počet, na rozdíl od spojitého případu, a existuje tedy mód s nejvyšším charakteristickým číslem. Časový krok tedy lze nastavit tak, aby byly stabilní všechny módy. Pro určení kritického časového kroku FDTD je tedy rozhodující nejvyšší charakteristická hodnota módů odpovídajících FD rovnic. Z teoretického hlediska je tím úloha vyřešena, zbývá jen rozebrat některé způsoby řešení FD rovnic.

Zavedme nejprve následující zápis Maxwellových rovnic, ve kterém je pomocí centrálních diferencí rozepsána pouze časová změna veličin pole:

Uvažujme diferenční rovnice FDTD, ve kterých je pomocí indexu (n) rozepsané pouze časové schéma:

$$\vec{E}^{n+1} = a_E \vec{E}^n + b_E \vec{\nabla} \times \vec{H}^{n+\frac{1}{2}} \quad (2.63)$$

$$\vec{H}^{n+\frac{1}{2}} = a_M \vec{H}^{n-\frac{1}{2}} - b_M \vec{\nabla} \times \vec{E}^n \quad (2.64)$$

koeficienty a_E , a_M , b_E a b_M vyplývají z vlastností prostředí a velikosti časového kroku. Mějme nyní nějaký vlastní mod dané struktury:

$$\vec{E}^n = \tilde{\vec{E}}^S e^{j\varphi n} \quad (2.65a)$$

$$\vec{H}^{n+\frac{1}{2}} = \tilde{\vec{H}}^S e^{j\varphi(n+\frac{1}{2})} \quad (2.65b)$$

$\tilde{\vec{E}}^S$ a $\tilde{\vec{H}}^S$ jsou, podobně jako ve vztazích (3), vektorové vzorkované funkce, závislé na prostorových souřadnicích, komplexní a nezávislé na čase. Diskretizace (vzorkování) v prostoru není znázorněno žádným indexem; toto vzorkování vyplývá z prostorového uspořádání diskretizační sítě. Nebudeme jeho tvar omezovat, abychom neomezili použitelnost postupu, φ koresponduje s úhlovou frekvencí.

Časová závislost ve tvaru (2.65) skutečně přinese po dosazení do (2.63 a 2.64) výsledky. Získáme totiž

$$\left(e^{+j\frac{1}{2}\varphi} - a_E e^{-j\frac{1}{2}\varphi} \right) \frac{1}{b_E} \tilde{\vec{E}}^S = +\vec{\nabla} \times \tilde{\vec{H}}^S \quad (2.66)$$

$$\left(e^{+j\frac{1}{2}\varphi} - a_M e^{-j\frac{1}{2}\varphi} \right) \frac{1}{b_M} \tilde{\vec{H}}^S = -\vec{\nabla} \times \tilde{\vec{E}}^S \quad (2.67)$$

Tyto vztahy představují rovnice pro neznámou φ . Časová závislost (2.65) je omezená (jinak řečeno „je stabilní“), pokud

$$\text{Im}\{\varphi\} > 0 \quad (2.68)$$

Pokud tuto podmínku zaručíme pro všechny možné hodnoty neznámé φ , bude stabilní i celý algoritmus FDTD. Koeficienty na levých stranách soustavy (2.66) jsou závislé na časovém kroku Δt , proto tento krok bude ovlivňovat i výsledná řešení φ . To poskytuje naději, že volbou časového kroku bude skutečně možné zajistit podmínku (2.68). Úplnou diskusi je však nutné provádět pro konkrétní způsob rozpisu koeficientů a_E , a_M , b_E a b_M .

Předpokládejme nyní bezeztrátového prostředí a koeficienty $a_E = a_M = 1$, $b_E = \Delta t/\varepsilon$ a $b_M = \Delta t/\mu$. Pro přehlednost v dalším budeme vynecháme horní index S , nebudeme zdůrazňovat komplexní charakter veličin. Soustava (6) po úpravě následuje:

$$j \underbrace{\frac{2}{\Delta t} \sin\left(\frac{1}{2}\varphi\right)}_k \varepsilon \vec{E} = +\vec{\nabla} \times \vec{H} \quad (2.69)$$

$$j \underbrace{\frac{2}{\Delta t} \sin\left(\frac{1}{2}\varphi\right)}_k \mu \vec{H} = -\vec{\nabla} \times \vec{E} \quad (2.70)$$

V těchto vztazích jsme definovali (pomocí svorek) koeficient k . To umožní provádět výpočet časového kroku ve dvou nezávislých krocích: Určíme-li z uvedených rovnic neznámou k , platí

$$\frac{1}{2} k \Delta t = \sin\left(\frac{1}{2}\varphi\right) \quad (2.71)$$

Na hranici stability je $\varphi = \pi$ (vzorkování v čase pak probíhá právě dvakrát za periodu).

Pro určení časového kroku na hranici stability, tedy kritického časového kroku Δt_c , musí být do (2.71) dosazena největší možná hodnota koeficientu k (tj. k_m) ze všech možných řešení soustavy (2.69, 2.70). Nestabilita nastává pro $\Delta t \geq \Delta t_c$. Potom

$$\frac{1}{2} k_m \Delta t_c = 1 \quad (2.72)$$

Pro určení kritického časového kroku je nezbytné řešit soustavu rovnic (2.69, 2.70). Nastíníme zde pouze řešení, které odpovídá 2-dimenzionálnímu FDTD algoritmu, popisujícímu pouze určitou podmnožinu módů:

$$jk\mu H_z = -(\vec{\nabla} \times [E_x, E_y, 0])_z \quad (2.73a)$$

$$jk\varepsilon E_x = +(\vec{\nabla} \times [0, 0, H_z])_x \quad (2.73b)$$

$$jk\varepsilon E_y = +(\vec{\nabla} \times [0, 0, H_z])_y \quad (2.73c)$$

Soustava vektorových rovnic (2.68) je zde rozepsána po složkách.

Soustava (13) představuje diskretizovanou Helmholtzovu rovnici.

$$\underbrace{-\frac{1}{\mu} (\vec{\nabla} \times [\frac{1}{\varepsilon} (\vec{\nabla} \times [0, 0, H_z])_x], \frac{1}{\varepsilon} (\vec{\nabla} \times [0, 0, H_z])_x, 0]}_{\frac{1}{\mu\varepsilon} \vec{\nabla}^2 H_z} + \dots \quad (2.74)$$

$$+ k^2 H_z = 0$$

Pro dané rozložení vzorků H_z je vyčíslen člen $\frac{1}{\mu\varepsilon} \vec{\nabla}^2 H_z$ ve všech bodech sítě a tyto hodnoty jsou použity k výpočtu k pomocí (2.74). Protože rovnice (2.74) v této fázi postupu nemusí platit pro dané rozložení H_z , dostaneme odlišné hodnoty k (k_i) v každém bodě i sítě. Rayleighova vztah (viz níže) je použit pro výpočet odhadu k (tj. k_{estim}) z hodnot k_i . Označme dané rozložení H_z jako H_z^n (n -tá iterace). Pomocí vztahu (2.74) je vypočítáno nové rozložení (iterace $n+1$) vzorků H_z :

$$\frac{1}{\mu\varepsilon} \vec{\nabla}^2 H_z^n + k_{\text{estim}} H_z^{n+1} = 0 \quad (2.75)$$

Procedura je zastavena, když je změna k_{estim} mezi iteracemi je dostatečně malá a odhad provádíme pomocí Raileighova vztahu [2.16, 2.17]

$$k_{\text{estim}} = \frac{\sum_i (H_{z,i})^2 k_i}{\sum_i (H_{z,i})^2} \quad (2.76)$$

K tomu, aby výsledkem popsaného postupu byla správná hodnota k (a tedy i výsledný kritický časový krok Δt_c), použijeme být diskretizaci FDFD jako prostorové schéma původní metody FDTD.

Popsanou iterační metodou lze řešit i složité tvary sítě za přítomnosti více dielektrik.

2.3 Programy v MATLABu

Popsané algoritmy konečných diferencí byly implementovány v prostředí MATLAB v6.1. Zvolenou testovací úlohou je analýza rezonančních frekvencí trojrozměrného dutinového rezonátoru o rozměrech $20 \times 30 \times 50$ mm.

2.3.1 Program FDFD

Program využívající metodu konečných diferencí ve frekvenční oblasti (FDFD) řeší problém vlastních čísel příslušných k matici soustavy \mathbf{A} (2.7). Z takto získaných vlastních čísel lze po jednoduché úpravě získat rezonanční kmitočty dané struktury. Řešena je pouze jedna složka E pole, pro kterou jsou na stěnách rezonátoru stanoveny příslušné okrajové podmínky. Na čtyřech stěnách rovnoběžných s danou složkou je zavedena Dirichletova okrajová podmínka a složka zde musí být rovna nule. Na zbývajících dvou protilehlých stěnách kolmých k vyšetřovanému vektoru musí být splněna Neumannova podmínka, a to pomocí sudé symetrie složky podle rozhraní. Zbývajících dvě složky pole mohou být jednoduše vyřešeny permutací rozměrů rezonátoru. Jednotlivé složky tak nejsou umístěny ve stejných bodech v prostoru, ale prokládaně, tedy analogicky Yeeovu algoritmu. V úvahu byly brány všechny prostorové módy, tedy sjednocení výsledků všech tří složek.

V tabulce 2.1 je uvedeno prvních deset vypočtených rezonančních kmitočtů pro různé hustoty sítě. Základní diskretizační síť má rozměry $2 \times 3 \times 5$ buněk, jemnější sítě mají dvojnásobnou, pětinásobnou a desetinásobnou hustotu buněk na hranu. Chyba rezonančního kmitočtu s frekvencí stoupá, avšak už pro pětinásobně hustší síť nepřesahuje jedno procento.

vidová čísla m,n,p	Rezonanční kmitočty [2.GHz]				
	Zjemnění sítě				přesné řešení
	Žádné	2×	5×	10×	
0,1,1	5,609	5,772	5,818	5,825	5,827
0,1,2	7,364	7,693	7,787	7,800	7,805
1,0,1	7,364	7,890	8,043	8,065	8,072
1,1,0	8,264	8,817	8,977	9,000	9,008
1,1,1	8,775	9,309	9,464	9,486	9,494
1,0,2	8,775	9,388	9,564	9,590	9,598
0,1,3	8,775	9,974	10,238	10,276	10,289
0,2,1	9,076	9,999	10,363	10,416	10,433
1,1,2	9,988	10,608	10,787	10,812	10,821
0,2,2	9,988	11,218	11,583	11,636	11,654

Tab. 2.1 Rezonanční kmitočty získané metodou FDFD

2.3.2 Program FDTD

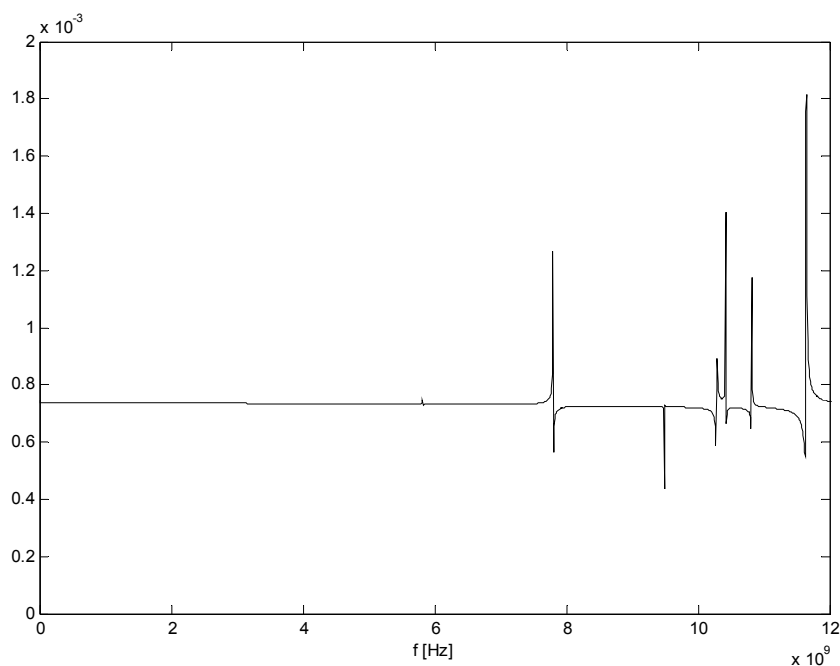
Algoritmus založený na metodě konečných diferencí v časové oblasti (FDTD) aplikuje Yeeho algoritmus (2.20–2.25) pro homogenní a bezeztrátové prostředí. Počet časových kroků potřebných pro získání dostatečně přesných výsledků je zde dán požadovaným frekvenčním rozlišením ve spektru. Vybuzeny jsou všechny tři prostorové složky elektrické intenzity v jednom programovém běhu a všechny tři jsou také snímány. Tím získáme tři spektra se třemi sadami rezonančních kmitočtů, jejichž sjednocením opět dostaneme úplný soubor rezonancí všech prostorových vidů. Buzení a snímání je

provedeno v protilehlých rozích rezonátoru, čímž je zajištěno vybudzení všech požadovaných vidů. Budicím impulsem je jednotkový impuls.

V tabulce 2.2 jsou opět uvedeny vypočtené rezonanční kmitočty, tentokrát pro metodu FDTD. Přesnost je řádově stejná pro obě metody.

Vidová čísla m,n,p	Rezonanční kmitočty [GHz]				přesné řešení
	Zjemnění sítě				
	Žádné	2×	5×	10×	
0,1,1	5,693	5,794	5,822	5,825	5,827
0,1,2	7,560	7,746	7,796	7,803	7,805
1,0,1	7,560	7,948	8,053	8,067	8,072
1,1,0	8,547	8,898	8,990	9,003	9,008
1,1,1	9,118	9,404	9,479	9,490	9,494
1,0,2	9,118	9,485	9,580	9,594	9,598
0,1,3	9,118	10,091	10,257	10,281	10,289
0,2,1	9,458	10,117	10,383	10,421	10,433
1,1,2	10,512	10,750	10,810	10,818	10,821
0,2,2	10,512	11,387	11,612	11,643	11,654

Tab. 2 Rezonanční kmitočty získané metodou FDTD



Obr. 2.5 Spektrum odezvy získané metodou FDTD pro složku E_x , 10× zjemněnou síť a frekvenční rozlišení 1 MHz

Doba výpočtu je pro metodu FDTD mnohem větší, i kvůli nastavenému frekvenčnímu rozlišení 1 MHz. Při použití hrubšího spektrálního rastru, např. 10 MHz, by se přesnost odečtu rezonančních frekvencí ze spektra snížila na 2 desetinná místa, avšak zároveň by klesly strojové časy na desetinu původních hodnot. Také je třeba mít na paměti, že program FDFD je nutné proběhnout třikrát pro

získání úplného souboru frekvencí, zatímco FDTD počítá se všemi složkami elektrického pole současně.

program	Strojový čas [hod:min:sec]			
	zjemnění sítě			
	žádné	2×	5×	10×
FDFD	0:00:00	0:00:00	0:00:04	0:03:45
FDTD	0:00:10	0:00:27	0:15:00	6:52:01

Tab. 3 Strojové časy programů FDFD a FDTD

Ze srovnání výpočetních časů vychází metoda FDFD vítězně. Přesto však je metoda FDTD v praxi využívána mnohem více. Zatímco metoda FDTD provedla ve srovnávacím testu kompletní výpočet časového vývoje pole v dané struktuře, byly metodou FDFD stanoveny právě jen rezonanční frekvence. Zatímco metodou FDTD umožňuje řešení široké třídy úloh, je metoda FDFD pro řešení obecných třídimeználních struktur použitelná jen omezeně. Metody proto bylo možno srovnat jen při analýze problému, který je řešitelný oběma přístupy, což v uvedeném případě znamená řešení problému „šitého na míru“ pro metodu FDFD.

Literatura

- [2.1] Yee K. S.: Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media, IEEE Transactions on Antennas and Propagation 14(1966)5, pp. 302-7
- [2.2] Taflove, A.: Computational Electrodynamics – The Finite-Difference Time-Domain Method, Artech House, London 1995
- [2.3] Chen Y.- Mittra, R. – Harms, P.: Finite-Difference Time-Domain Algorithm for Solving Maxwell's Equations in Rotationally Symmetric Geometries, IEEE Trans. on MTT 44(1996)6, pp. 832-839
- [2.4] Time-Domain Methods for Microwave Structures. (Edited by T. Itoh and B. Houshmand), IEEE Press, Piscataway 1998
- [2.5] Rektorys, K. a kol.: Přehled užití matematiky. SNTL, Praha 1988.
- [2.6] Berenger, J.: A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves, Journal on Computation Physics, October 1994
- [2.7] Time-Domain Methods for Microwave Structures. (Edited by T. Itoh and B. Houshmand), IEEE Press, Piscataway 1998
- [2.8] Tysl, V.-Růžička. Obvody a technika velmi vysokých kmitočtů. SNTL, Praha 1985
- [2.9] Pauk, L. – Škvor, Z.: Stability of FDTD in Curvilinear Coordinates. In: EUROCON 2001. Bratislava, IEEE, 2001, p. 314-317, vol. 2.
- [2.10] Pauk. L., Škvor, Z: FDTD Stability: Critical Time Increment. Radioengineering, Vol. 11(2003)2, pp. 82-5
- [2.11] Engquist, B, Majda, A.: Absorbing Boundary Conditions for the Numerical Simulation of Waves, Mathematics of Computation, vol. 31, 1977, pp. 629-651.
- [2.12] Mur, G.: Absorbing Boundary Conditions for the Finite-Difference Approximation of the Time-Domain Electromagnetic Field Equations, IEEE Trans. on EMC, November 1981
- [2.13] Marcuwitz : Waveguide Handbook, McGraw-Hill, London 1956
- [2.14] Allen Taflove : Advances in Computational Electrodynamics, Artech House 1998
- [2.15] Sacks, Z.S., D.M. Kingsland R.Lee: "A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition", IEEE Trans. on Antennas and Propagation Vol. 43, 1995
- [2.16] Ralston, A. Základy numerické matematiky. Academia, Praha 1973.

[2.17] Macháč, J., Novotný, K., Vokurka, J, Škvor, Z.: Numerické metody elektromagnetického pole, skriptum ČVUT, Praha 2001.