

非齐次波导方程基于状态转移算子和 DtN 映射的算法

王 寅 黄晋阳*

(北京化工大学 理学院, 北京 100029)

摘 要: 针对存在内光源的导波方程, 即非齐次 Helmholtz 方程, 将波导方程的边值问题转化为可用步进算法的类“初值”处置问题, 然后给出了一种基于 Dirichlet-to-Neumann (DtN) 映射和状态转移算子的算法。并给出了两个算例, 算例表明此算法是非齐次周期波导问题的一种高效的计算方法。

关键词: 非齐次 Helmholtz 方程; 周期结构; 状态转移算子; Dirichlet-to-Neumann 映射

中图分类号: O241.8; O436

引 言

由于二维频域的波导主控方程是 Helmholtz 方程, 因此对于波导方程的数值求解就转变成对 Helmholtz 方程的数值求解。由于光波波长很短, 在进行数值计算时, 须取大量节点, 光波导问题在求解时通常规模很大。对于齐次的 Helmholtz 方程的数值解法, 已经有了很多成熟的算法。例如有限差分方法、有限元法、谱方法等传统数值算法。这些方法虽然具有普遍应用性, 可用性很强, 但在计算过程中, 会产生庞大的线性系统, 占用大量内存, 耗费大量时间。后来出现了 BMP 算法, 但是当折射率依赖于传播方向时, 这种方法会导致永恒的误差。随后出现了基于 DtN 映射的一些算法^[1-3], 这些算法相比较于传统方法, 对实用性波导结构计算有了显著改善, 减少了对内存和时间的消耗。

在实际应用中, 常常需要研究具有内光源的光波传播情况, 这就要用非齐次的 Helmholtz 方程来刻画。对此类波导问题计算, 目前主要是传统的算法, 尚没有基于 DtN 映射的算法。为此, 本文构造了基于 DtN 映射和状态转换算子的算法。此算法先利用 DtN 映射先将非齐次 Helmholtz 波导方程的边值问题转化为可用步进算法分段计算的类“初值”问题, 然后计算每一小段的状态转移算子, 利用状态转

移算子从小段的一端导出小段另一端的 DtN 映射, 最后可递推算出方程的解。状态转移算子计算只需要求解与波导结构有关的一阶算子常微分方程的初值问题。对具有同样波导结构的小段, 其状态转移算子均是相同的, 只需要计算其中的一个小段的状态转移算子即可。因此这种方法特别适合具有周期结构或部分周期结构的波导问题。最后给出两个算例, 对此算法进行了验证。

1 非齐次 Helmholtz 方程

考虑内光源的二维横向电极化 (TE) 的波导结构。假设 z 方向为波导的轴方向, 其主控方程为

$$u_{zz} + u_{xx} + k^2(x, z)u = f(x, z) \quad (1)$$

其中, u 是电场中的 y 分量, $k(x, z) = k_0 n(x, z)$, k_0 是自由空间的波数, n 是介质折射率函数, $f(x, z)$ 代表的是波导中的内光源。

由于大多数光波传播问题都是在无界区域上提出来的, 需要将无界区域截断, 得到有限区域。在频率域上, PML^[4-5] 对应一种复坐标的延伸。对于开放的波导, $-\infty < x < +\infty$, 此时必须将 x 轴截断为一个有限的区间。为此引入一个复变量 \hat{x}

$$\hat{x} = x + i \int_0^x \sigma(\tau) d\tau$$

其中, $\sigma(x) = 0, -H \leq x \leq H$; $\sigma(x) > 0, x < -H$ 或 $x > H$ 。这里, 还需要假定 n 在 $x \geq H$ 和 $x \leq -H$ 时为一个常数。现在, 将 $\partial_x^2 u$ 这一项换为 $\partial_{\hat{x}}^2 u$, 仍记 \hat{x} 为 x , 令 $s(x) = 1 + i\sigma(x)$, 则有

$$\partial_z^2 u + \frac{1}{s(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{s(x)} \frac{\partial}{\partial x} \right) u + k_0^2 n^2(x, z)u = f(x, z)$$

收稿日期: 2012-06-04

第一作者: 女, 1986 年生, 硕士生

* 通讯联系人

E-mail: huangjy@mail.buct.edu.cn

记 $L = \frac{1}{s(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{s(x)} \frac{\partial}{\partial x} \right) + k_0^2 n^2(x, z)$, 则有 $\partial_z^2 u + Lu = f(x, z)$

对数值计算, 将 x 变量在 $x = \pm D$ 处截断, 则区间 (H, D) 和 $(-D, -H)$ 就是 PML 层。在式(1)的基础上, 可以在 $x = \pm D$ 处加上适当的边界条件, 通常假设当 $x = \pm D$ 时 $u = 0$ 。

经过分析可以知道, 原方程的辐射条件和修改后方程的零边值条件是高精度近似的。

在光传播方向(z 方向), 主要考虑区间 $[z_0, z_m]$, 将其分段为 $z_0 < z_1 < \dots < z_m$, 记 $z_{-1} = -\infty, z_{m+1} = +\infty$ 。设

$$n(x, z) = n_j(x, z), \quad z_{j-1} < z < z_j \quad (j=0, 1, \dots, m)$$

设当 $z < z_0$ 和 $z > z_m$ 时, 波导是 z 不变的, 即当 $z < z_0$ 时 $n = n_0(x)$, 当 $z > z_m$ 时 $n = n_{m+1}(x)$ 。假设在 $z < z_0$ 处, 给定一个时频与内光源一样的入射波, 记为 u^+ , 同时又存在界面反射回来的反射波, 记为 u^- , 反射波是未知的, 则 $u = u^+ + u^-$; 因为 $u_z^+ = i\sqrt{L(z_0^-)}u^+, u_z^- + i\sqrt{L(z_0^-)}u^- = 0$, 可得

$$(\partial_z u + i\sqrt{L(z_0^-)}u)|_{z=z_0} = 2i\sqrt{L(z_0^-)}u^+(x, z_0^-) \quad (2)$$

当 $z > z_m$ 时, 只存在传播波, 可以表示为 $u = u^+$, 注意, 此处没有反射波。根据上面的假设可知在 $z > z_m$ 处, 此区间只有传播波, 因此满足齐次的 Helmholtz 方程, 即 $\partial_z^2 u + Lu = 0$, 根据平方根算子的定义, 可以知道式(3)成立, 即 $u_z^+ = i\sqrt{L}u^+$, 也就是

$$(u_z - i\sqrt{L(z_m^+)}u)|_{z=z_m} = 0 \quad (3)$$

综上所述, 可以得到给定一个时频与内光源一样的入射波时, 非齐次 Helmholtz 方程及其边界条件可以表示为

$$\begin{cases} \partial_z^2 u + Lu = f(x, z) \quad (x \in (-D, D), z \in (z_0, z_m)) \\ \left(L = \frac{1}{s(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{s(x)} \frac{\partial}{\partial x} \right) + k_0^2 n^2(x, z) \right) \\ u(-D, z) = u(D, z) = 0 \\ (\partial_z u + i\sqrt{L(z_0^-)}u)|_{z=z_0} = 2i\sqrt{L(z_0^-)}u^+(x, z_0^-) \\ (\partial_z u - i\sqrt{L(z_m^+)}u)|_{z=z_m} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

2 基于 DtN 映射和状态转移算子的算法

在第1章中, 介绍了非齐次 Helmholtz 方程及其

边界条件的设定, 本章将给出基于 DtN 映射和状态转移算子 P 的一种高效算法。

所谓的 Riccati 方法^[2], 对于齐次的 Helmholtz 方程来说, 它是基于 Dirichlet-to-Neumann 映射 $Q(z)$, 该映射将 Helmholtz 方程的解映到它的关于 z 的导数, 即: $u_z = Q(z)u$ 。

然而, 对于非齐次 Helmholtz 方程来说, 需要做适当的修改。定义关于 z 的 DtN 映射 $Q(z)$ 和函数 $g(x, z)$, 满足

$$Q(z)u + g = u_z \quad (5)$$

再定义基本解算子 $Y(z)$ 和函数 $h(x, z)$, 满足

$$Y(z)u(\cdot, z) + h(\cdot, z) = u(\cdot, z_m) \quad (6)$$

若 u 满足式(4), 由式(5)和(6)可得式(7)

$$\begin{cases} Q(z_m) = i\sqrt{L(z_m^+)} \\ Y(z_m) = I \\ g(z_m) = 0 \\ h(z_m) = 0 \end{cases} \quad (7)$$

若能通过已知的 $Q(z_j), g(z_j)$ 和 $Y(z_j), h(z_j)$ 计算出 $Q(z_{j-1}), g(z_{j-1})$ 和 $Y(z_{j-1}), h(z_{j-1})$, 则由式(7)可递推地得到 $k = m-1, \dots, 0$ 时, $Q(z_k), g(z_k)$ 和 $Y(z_k), h(z_k)$ 的值。

为此, 定义一种状态转移算子 $P(z)$ 和向量函数 $r(x, z)$, 在区间 (z_{j-1}, z_j) 内满足下列关系

$$\begin{bmatrix} u(x, z) \\ \partial_z u(x, z) \end{bmatrix} = P(z) \begin{bmatrix} u(x, z_j) \\ \partial_z u(x, z_j) \end{bmatrix} + r(x, z) \quad (8)$$

其中, $r(x, z_j) = 0$ 。

根据 P 算子的表达式, 令 $v = u_z$, 则 $v_z = -Lu + f$, 进一步得到

$$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_z = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -L & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ f \end{bmatrix} \quad (9)$$

记 $A = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -L & 0 \end{bmatrix}$, 由式(8)和(9)得

$$r'(z) + P'(z) \begin{bmatrix} u(z_j) \\ \partial_z u(z_j) \end{bmatrix} = AP(z) \begin{bmatrix} u(z_j) \\ \partial_z u(z_j) \end{bmatrix} +$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ f \end{bmatrix} + Ar(z)$$

进一步可以得到

$$\begin{cases} P'(z) = AP \quad (z_{j-1} < z < z_j) \\ P(z_j) = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \end{cases} \quad (10)$$

$$\begin{cases} r'(z) = Ar + \begin{bmatrix} 0 \\ f \end{bmatrix} \quad (z_{j-1} < z < z_j) \\ r(z_j) = 0 \end{cases} \quad (11)$$

可以用合适矩阵来近似算子 L , 进而近似 A , 方程 (10) 成为一阶矩阵常微分方程初值问题, 式 (9) 成为一阶向量常微分方程初值问题。用常用算法可求解方程 (10) 和 (11), 即可得到 $P(z_{j-1})$ 和 $r(z_{j-1})$ 。

将 $P(z_{j-1})$ 和 $r(z_{j-1})$ 写成分块矩阵的形式,

$$P(z_{j-1}) = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{bmatrix}, r(z_{j-1}) = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \end{bmatrix}。$$

分别令式 (5) 和 (6) 中, $z = z_{j-1}$ 和 z_j , 结合式 (8), 可以得到关于 Q, Y, g 和 h 的递推公式, 即

$$\begin{cases} Q(z_{j-1}) = (P_{21} + P_{22}Q(z_j))(P_{11} + P_{12}Q(z_j))^{-1} \\ Y(z_{j-1}) = Y(z_j)(P_{11} + P_{12}Q(z_j))^{-1} \\ g(z_{j-1}) = P_{22}g(z_j) + r_2 - Q(z_{j-1})(P_{12}g(z_j) + r_1) \\ h(z_{j-1}) = h(z_j) - Y(z_{j-1})(P_{12}g(z_j) + r_1) \end{cases} \quad (12)$$

由式 (6) 通过式 (12) 分别算出 $k = m-1, \dots, 0$ 时的 $Q(z_k), g(z_k)$ 和 $Y(z_k), h(z_k)$ 的值后, 由 $\partial_z u(x, z_0) = Q(z_0)u(x, z_0) + g(z_0)$ 结合式 (2), 消去 $\partial_z u(x, z_0)$, 整理后, 有式 (13) 成立

$$u(x, z_0) = [Q(z_0) + iB_0]^{-1} [2iB_0 u^+(x, z_0^-) - g(z_0)] \quad (13)$$

算出 $u(x, z_0)$ 后, 可得到 $z = z_0$ 处的反射波

$$u^-(x, z_0^-) = u(x, z_0) - u^+(x, z_0^-)$$

由式 (5) 可得 $u(x, z_m) = Y(z_0)u(x, z_0) + h(z_0)$ 和 $u(x, z_k) = Y(z_k)^{-1}(u(x, z_m) - h(z_0)), k = 1, \dots, m-1$ 。

值得注意的是, 因为方程 (10) 只与 (z_{j-1}, z_j) 段的波导结构有关, 若有若干小段波导结构皆相同, 只需求解一次式 (10) 即得到这些小段上的状态转移算子。同理, 若有若干小段除波导结构外 f 的相应点的值也皆相同, 只需求解一次式 (11) 即可。

此算法的优点是将原微分方程的边值问题转变成关于算子 P 及向量函数 r 的微分方程初值问题, 并且算子 P 的计算充分地利用了结构的重复性和周期性。即使非齐次项不具有周期性, 也只需要计算每小段中的 r 的初值问题, 并不增加太多的计算量。因此大大减少了存储量和计算量。

当 A 不依赖于 z 时, 式 (10) 的解为 $P(z_{j-1}) = e^{A(z_{j-1}-z_j)}$, 若输入有误差而求解过程精确, 根据 A 结构, 经过简单分析可知, $P(z_{j-1})$ 的相对误差增加不多, 绝对误差约是 $e^{2N(z_j-z_{j-1})}$ 的放大因子, 其中 N 是 L 离散近似矩阵的阶数。因此当 $N(z_j - z_{j-1})$ 不太大时计算是稳定的, 但当 $N(z_j - z_{j-1})$ 较大时会出现数值不稳定。因此, 计算时 $N(z_j - z_{j-1})$ 不宜过大。

3 算例

本节考虑两个算例。使用第 2 节介绍的数值算法来计算 COST 268 模型^[6]中的例子。这是一个具有短波长、高对比性的 Bragg 光栅的光波导。该波导分为三层, 下面一层是 SiO_2 层, 折射率 n_s ; 中间层, 即中心层, 是 Si_3N_4 层, 假设厚度为 $d_g = 0.5 \mu\text{m}$, 折射率 n_g ; 上面一层为空气层, 折射率 n_a 。这种三层的厚板型波导, 从介质构造来看, 层与层之间的折射率存在很大的差异, 在中心层是带有短格栅的。波导的图示如图 1。

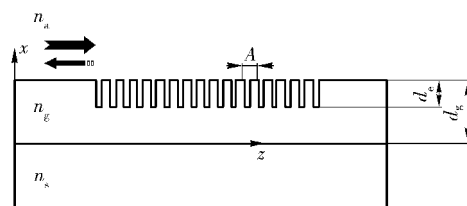


图 1 波导格栅的示意图

Fig. 1 Bragg grating in a planar waveguide

对于格栅, 假设它的“牙”和“槽”的宽度都是 $0.215 \mu\text{m}$, 也就是格栅的周期是 $0.43 \mu\text{m}$ 。设波导有 20 个槽, 即 $m = 39, z_j - z_{j-1} = 0.215, j = 1, \dots, m$ 。设槽的深度 $d_e = 0.125 \mu\text{m}$, 下面层的厚度取为 $1 \mu\text{m}$, 中间层 (核心层) 取为 $0.5 \mu\text{m}$, 上面空气层的厚度取为 $1 \mu\text{m}$ 。

在通过 PML 技术进行截断时, 取两端 PML 层为 $0.25 \mu\text{m}, N = 119$ 。在离散 PML 层时, 按照文献 [5, 7] 进行选取, 即 $\sigma(x) = S\sigma_0(x)$ 在 x 正方向的 PML 层, 也就是当 $D < x < H$, 将 $\sigma(x)$ 取为如式 (14) 的多项式

$$\sigma_0(x) = (p+1) \left(\frac{x-H}{D-H} \right)^p \quad (14)$$

其中, S 是一个标量参数, 取 $p = 3, S = 600$ 。

例 1: 为了比较算法, 先考虑 $f=0$ 的特例, 即齐次情形。设只有入射波, 入射波为基波, 计算 TE 下基波能量的传播率 $T(\lambda)$ 、反射率 $R(\lambda)$ 和损失率 $L(\lambda) = 1 - T(\lambda) - R(\lambda)$ 对波长 λ 的依赖关系, 波长从 $0.8 \mu\text{m}$ 到 $1.6 \mu\text{m}$ 。计算结果与文献 [3] 的结果吻合, 见图 2。

例 2: 对于有内光源, $f(x, z) = \sin \left(\frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{x}{D} \right) \right)$, 又有入射波的波导。波长为 $1.8 \mu\text{m}$, 入射波为基波。数值结果如图 3 所示。

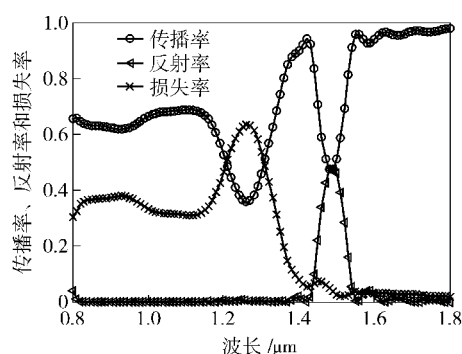


图2 传播率、反射率和损失率与波长的依赖关系(当入射波为基波时)

Fig. 2 Relation between the transmitted ratio, reflected ratio and loss ratio of the incident wave and the wavelength (when the incident wave is the fundamental mode)

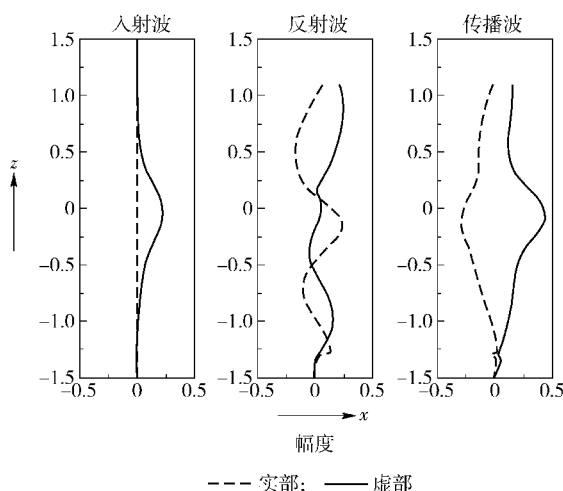


图3 在 TE 模型中入射波、反射波和传播波的图示

Fig. 3 The incident wave (the fundamental TE mode) and the corresponding reflected wave and transmitted wave
数值算例表明,上述计算过程稳定,存储空间的
需求小,计算量小,计算结果精确可靠。

4 结论

本文给出了求解二维分段波导结构的非齐次导波方程的算法格式,是基于 DtN 映射和状态转移算子发展得到的。此算法化边值问题为“初值问题”,充分利用结构的周期性,大大节省了存储空间和计算时间。对于周期长度与横向离散格点数之积不太大的周期光波导计算,此算法是一个高效的算法。

参考文献:

- [1] Lu Y Y. Some techniques for computing wave propagation in optical waveguides [J]. Communications in Computational Physics, 2006, 1(6): 1056-1075.
- [2] Lu Y Y, McLaughlin J R. The riccati method for the Helmholtz equation[J]. The Journal of the Acoustical Society of America, 1996, 100(3): 1432-1446.
- [3] Yuan L J, Lu Y Y. An efficient bidirectional propagation method based on Dirichlet-to-Neumann maps [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2006, 18(17/18/19/20): 1967-1969.
- [4] Berenger J P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves[J]. J Comput Phys, 1994, 114(2): 185-200.
- [5] Lu Y Y. Minimizing the discrete reflectivity of perfectly matched layers [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2006, 18(1/2/3/4): 487-489.
- [6] Čtyrský J, Helfert S, Pregla R. Bragg waveguide grating as a 1D photonic band gap structure: COST 268 modeling task [J]. Optical and Quantum Electronics, 2002, 34: 455-470.
- [7] Kleckner T C, Modotto D, Locatelli A, et al. Design, fabrication, and characterization of deep-etched waveguide gratings[J]. Journal of Lightwave Technology, 2005, 23(11): 3832-3842.

An algorithm of the transfer operator P for a non-homogeneous waveguide equation based on Dirichlet-to-Neumann maps

WANG Yin HUANG JinYang

(School of Science, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: An algorithm for the equation of a guided wave with an internal light source, i. e. a non-homogeneous Helmholtz waveguide equation, based on Dirichlet-to-Neumann (DtN) maps, where the boundary value problem of the waveguide equation is changed to an initial value-like problem (IVP) which can be computed in a segmented manner by marching along the propagation direction is described, and the state transfer operators have been constructed. Two numerical examples are given which demonstrate that the algorithm is an efficient algorithm for periodic waveguide problems.

Key words: non-homogeneous Helmholtz waveguide equation; periodic structure; state transfer operator; Dirichlet-to-Neumann maps

<http://www.journal.buct.edu.cn>