A09

Antonio Boezio
Alessandro Lanave

Meep

Teoria, sintassi ed esercizi progettuali

www.aracneeditrice.it
info@aracneeditrice.it

via Quarto Negroni, 15
00040 Ariccia (RM)
(06) 93781065

ISBN 978-88-548-7487-9

I edizione: settembre 2014

INDICE

Prefazione

Lo scopo di questo libro è quello di fornire dei modelli pratici di progettazione e risoluzione, tramite il simulatore Meep© su computer, a studenti, scienziati, ingegneri, e chiunque sia interessato ad approfondire e prevedere il comportamento dei campi elettromagnetici (e.m.) in differenti strutture e dispositivi fisici, prima della loro fabbricazione.

In un solo libro non è possibile realizzare una trattazione esaustiva relativa a tutte le topiche legate al Meep©, ma ci si pone l'obiettivo di semplificarne il primo approccio e fornirne i concetti basilari.

Introduzione

Il Meep è un simulatore open source che implementa il metodo della FDTD (metodo delle Differenze Finite nel Dominio del Tempo) per lo studio di fenomeni elettromagnetici che può essere utilizzato per modellare la propagazione della luce in guide d'onda, cristalli fotonici, nanostrutture plasmoniche e altre strutture ottiche, nonché l'irradiazione dei campi e.m. di varie tipologie di antenne. Il metodo FEM (Metodo degli Elementi Finiti), utilizzato dalla maggior parte dei simulatori che effettuano uno studio nel dominio della frequenza, presenta vari svantaggi rispetto ai metodi delle differenze finite. Il metodo di propagazione del fascio (BPM) è adatto solo per problemi in cui i parametri fisici della struttura variano gradualmente in una direzione. Invece, un punto di forza dei metodi nel dominio temporale è la capacità di ottenere l'intero spettro della risposta in frequenza tramite una singola simulazione. Le simulazioni possono essere eseguite in modo efficiente in parallelo utilizzando le librerie MPI (Message Passing Interface) e può essere utilizzato per gestire strutture fotoniche in 2D e 3D.

CAPITOLO 1

METODO FDTD PER LA RISOLUZIONE DELLE EQUAZIONI DI MAXWELL

1.1 Metodo FDTD

La tecnica FDTD (Finite-Difference Time-Domain) consente di risolvere le equazioni di Maxwell nel dominio del tempo effettuando una discretizzazione degli operatori differenziali per mezzo delle differenze finite. Il metodo FDTD è largamente applicato per simulare la propagazione dei campi elettromagnetici.

La regione che racchiude la struttura (o il dispositivo) che vogliamo analizzare è discretizzata in una griglia di punti, di cui sono noti i parametri fisici dei materiali, e su questi punti è calcolato l'andamento nel tempo del campo elettromagnetico (e.m.). Il passaggio dal dominio continuo a un dominio che è discreto nello spazio e nel tempo, comporta delle approssimazioni ed un errore rispetto ai valori del campo e.m. nella struttura continua; tale errore numerico può essere ridotto a valori trascurabili aumentandone il numero di passi temporali.

Il metodo FDTD trova applicazione in molte aree:

- Progetto/simulazione di antenne
- Calcolo di radar cross section (RCS)
- Progetto/simulazione di circuiti integrati
- Studio della propagazione in materiali complessi (gas, tessuti biologici …)
- Studio della propagazione in micro e nano-strutture

1.2 Differenze finite

Il metodo delle differenze finite consiste nel risolvere numericamente le equazioni differenziali ed approssimare il valore della derivata di una funzione *u(x)* in un punto *x* (per il quale sarebbe necessario conoscere gli infiniti valori della funzione in un intorno di *x*), con un'espressione che tenga in conto solo un numero finito di valori. Le equazioni differenziali da approssimare sono prevalentemente ordinarie e spesso sono usate come schema di avanzamento nel tempo per problemi alle derivate parziali. È di gran lunga il metodo più semplice e intuitivo tra tutti e permette anche una facile analisi di convergenza.

L'idea di base di questo metodo è quello di sostituire le derivate con dei rapporti incrementali.

Ciò permette, ad esempio, di trasformare un'equazione alle derivate parziali in un problema algebrico. In particolare se il problema di partenza è lineare, si ottiene un sistema lineare del tipo A·x = b, con A matrice sparsa, la cui dimensione dipende dal numero di valori usati nell'approssimazione delle derivate.

Consideriamo l'espansione in serie di Taylor di una funzione u(x) attorno al punto x_i a destra e a sinistra di un intervallo Δx.

$$u(x_i+\Delta x)=u(x_i)+\Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^3}{6}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^4}{24}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{x=x_i}+\ldots \quad (1.1)$$

$$u(x_i-\Delta x)=u(x_i)-\Delta x\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x=x_i}-\frac{\Delta x^3}{6}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^4}{24}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{x=x_i}-\dots \quad (1.2)$$

L'operatore di derivata può essere approssimato tramite il rapporto incrementale:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=x_i}=\frac{u(x_i+\Delta x)-u(x_i)}{\Delta x}+O(\Delta x) \quad (1.3)$$

che equivale anche a:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=x_i}=\frac{u(x_i)-u(x_i-\Delta \mathrm{x})}{\Delta x}+O(\Delta x) \quad (1.4)$$

dove O(Δx) esprime l'accuratezza dell'errore di troncamento che approssima la derivata e che in questo caso è del primo ordine.

Effettuando la differenza delle eqq. 1.1 e 1.2 si ottiene l'eq. 1.5 che approssima la derivata seconda:

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x=x_i}=\frac{u(x_i+\Delta x)+u(x_i-\Delta \mathrm{x})-2\cdot u(x_i)}{\Delta x^2}+O(\Delta x^2) \quad (1.5)$$

Si nota che nella derivata seconda l'accuratezza $O(\Delta x^2)$ è del secondo ordine. Se si vuole migliorare l'accuratezza della derivata prima bisogna ridurre il passo Δx, magari della metà. Riscrivendo nuovamente l'espansione della serie di Taylor e soffermandosi al terzo ordine di grandezza della derivata, si ottengono le eqq. 1.6 e 1.7.

$$u\left(x_i+\frac{\Delta x}{2}\right)=u(x_i)+\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^2}{8}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^3}{48}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\bigg|_{x=\xi_1}\qquad \xi_1\in\left(x_i,x_i+\frac{\Delta x}{2}\right)\quad(1.6)$$

$$u\left(x_i-\frac{\Delta x}{2}\right)=u(x_i)-\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{x=x_i}+\frac{\Delta x^2}{8}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{x=x_i}-\frac{\Delta x^3}{48}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\bigg|_{x=\xi_2}\qquad \xi_2\in\left(x_i-\frac{\Delta x}{2},x_i\right)\quad(1.7)$$

Dalla differenza e dalla somma delle eqq. 1.6 e 1.7 si ottengono:

$$\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{x=x_i}=\frac{u\left(x_i+\frac{\Delta x}{2}\right)-u\left(x_i-\frac{\Delta x}{2}\right)}{\Delta x}+O(\Delta x^2)\qquad(1.8)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{x=x_i}=\frac{u\left(x_i+\frac{\Delta x}{2}\right)+u\left(x_i-\frac{\Delta x}{2}\right)-2\cdot u(x_i)}{\Delta x^2/4}+O(\Delta x^2)\qquad(1.9)$$

Le differenze centrate per la derivata prima, così come per la derivata seconda, presentano un'accuratezza $O(\Delta x^2)$ del secondo ordine [1].

La bontà della soluzione discreta ottenuta dipende principalmente da due fattori:

- Il numero di informazioni *k* usate per costruire la formula di approssimazione della derivata;
- Il passo di discretizzazione Δx.

È chiaro che l'ordine di accuratezza dell'errore di troncamento O(Δx), e quindi, in linea di principio, l'ordine di convergenza, dipendono dal numero k. In particolare più alto è k maggiore sarà l'ordine di accuratezza.

Il prezzo da pagare è che dobbiamo risolvere un sistema più costoso in termini computazionali, in quanto la matrice da invertire è meno sparsa. D'altra parte, riducendo il passo Δx non si migliora l'ordine di accuratezza, ma si riduce l'errore. Ciò è vero fino ad un certo punto poiché da una parte, prima o poi, ci si scontrerà con gli errori di macchina e dall'altra al diminuire di Δx spesso il numero di condizionamento della matrice A aumenta e ciò può portare ad una soluzione imprecisa (oltre che a maggiori oneri computazionali). Un altro fattore che determina la scelta di uno schema è la natura fisica del problema. Ad esempio in un'equazione di diffusione del trasporto, se il termine di trasporto b è positivo (negativo), cioè se il trasporto avviene da sinistra (destra) verso destra (sinistra), si preferirà uno schema decentrato all'indietro (in avanti) per discretizzare la derivata prima.