Absorbing Boundary Conditions, Periodic Boundary Conditions and Perfectly Matched Layers for Time Domain FEM Analysis of Photonic Chrystal Waveguides

ryujimiya

2019 年 12 月 28 日

1　はじめに

時間領域 FEM でフォトニック結晶導波路を解析する場合、ポート境界の界を扱う方法としていくつか考えられる。

(1) 完全整合層 (Perfectly Matched Layers, PML)
(2) 吸収境界条件 (Absorbing Boundary Conditions, ABC)
(3) 周期境界条件 (Periodic Boundary Conditions, PBC)

(1),(2) は伝搬方向に一様な通常の導波路で成功している手法である。フォトニック結晶導波路は周期構造導波路なので通常の導波路と同じような手法がどの程度適用できるかどうかを検討した。

2　完全整合層 (PML)

Jiao-Jin-Michielssen-Riley の PML を用いた時間領域 FEM の定式化を示す。X 方向 PML のときの周波数領域の弱形式は、

$$\iint_\Omega p\frac{1}{s_x}\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x} + ps_x\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial u}{\partial y} - \omega^2\epsilon_0\mu_0 q s_x N_i u d\Omega = 0 \tag{1}$$

$$s_x = 1 + \frac{\sigma_x}{j\omega\epsilon_0\epsilon_r} \tag{2}$$

● $\dfrac{1}{s_x}u$

$$\begin{aligned}\frac{1}{s_x}u &= \frac{1}{1+\dfrac{\sigma_x}{j\omega\epsilon_0\epsilon_r}}u \\ &= \left(1-\frac{1}{1+j\omega\dfrac{\epsilon_0\epsilon_r}{\sigma_x}}\right)u \qquad (3)\end{aligned}$$

変換公式

$$\frac{1}{1+j\omega X} \leftrightarrow \frac{1}{X}e^{-\frac{t}{X}}\overline{u}(t) \qquad (4)$$

$$1 \leftrightarrow \delta(t) \qquad (5)$$

を使用すると

$$\frac{1}{s_x}u \Rightarrow \left(\delta(t)-\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}e^{-\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}t}\overline{u}(t)\right)\bigstar\, u(t) \qquad (6)$$

ここで、$\overline{u}(t)$: uint step function、★: temporal convolution である。
または、

$$\frac{1}{s_x}u \Rightarrow u-\psi_x \qquad (7)$$

$$\psi_x = \frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}e^{-\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}t}\overline{u}(t)\bigstar\, u(t) \qquad (8)$$

● $s_x u$

$$\begin{aligned}s_x u &= \left(1+\frac{\sigma_x}{j\omega\epsilon_0\epsilon_r}\right)u \qquad (9)\\ &\Rightarrow u+\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}\int u dt \qquad (10)\end{aligned}$$

または、

$$s_x u \Rightarrow u+v_x \qquad (11)$$

$$\begin{aligned}v_x &= \frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}\int u dt \\ \rightarrow \frac{\partial v_x}{\partial t} &= \frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}u \qquad (12)\end{aligned}$$

● $-\omega^2 s_x u$

$$\begin{aligned}-\omega^2 s_x u &= -\omega^2\left(1+\frac{\sigma_x}{j\omega\epsilon_0\epsilon_r}\right)u \\ &= -\omega^2 u + j\omega\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}u \qquad (13)\\ &\Rightarrow \ddot{u}+\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}\dot{u} \qquad (14)\end{aligned}$$

以上から (12) 式に対応する時間領域の弱形式は、

$$\iint_\Omega p\frac{\partial N_i}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{\partial \psi_x}{\partial x}\right)+p\frac{\partial N_i}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v_x}{\partial y}\right)+\epsilon_0\mu_0 qN_i\left(\ddot{u}+\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}\dot{u}\right)d\Omega=0 \tag{15}$$

または、

$$[K_x]u-[K_x]\psi_x+[K_y]u+[K_y]v_x+[M]\ddot{u}+\frac{\sigma_x}{\epsilon_0\epsilon_r}[M]\dot{u}=0 \tag{16}$$

PML 領域は一様媒質にするか、周期構造を維持するかの選択肢がある。周期構造を維持する方が PML からの反射が少ないようである。

ただ、正方格子フォトニック導波路で PML 領域にも誘電体ロッドを設けた場合は問題なかったたが、三角形格子フォトニック導波路で PML 領域にもエアホールを設けたところ解析端のエアホールで発散する不具合が生じた。そのため三角形格子フォトニック結晶導波路では PML を一様媒質にして解析した。

3 吸収境界条件 (ABC)

支配方程式

$$p\nabla^2 u-\frac{1}{c_0^2}q\ddot{u}=0$$

or

$$p\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+p\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}-\frac{1}{c_0^2}q\ddot{u}=0 \tag{17}$$

に対応する弱形式は u の試行関数を w とすると、

$$\iint_\Omega \frac{1}{c_0^2}q\ddot{u}+p\nabla w\cdot\nabla u d\Omega-\int_B pw\frac{\partial u}{\partial x}dB=0 \tag{18}$$

境界 B 上の界が次の吸収境界条件 (ABC) を満たすものとする。

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)u=0 \tag{19}$$

c としては、

$$c=\frac{\omega}{\beta} \tag{20}$$

を用いた。ここで β は角周波数 ω のときの周期構造導波路における Floquet(Bloch) モードの波数である。

(19) 式を (18) 式に代入すると、

$$\iint_\Omega \frac{1}{c_0^2}q\ddot{u}+p\nabla w\cdot\nabla u d\Omega+\frac{1}{c}\int_B pw\dot{u}dB=0 \tag{21}$$

以上は通常導波路の定式化を周期構造導波路に適用したものだが、残念ながら周期構造導波路の場合、(19) 式を満たさない。

正方格子フォトニック導波路に適用した場合悪くはない結果が得られたが、三角形格子フォトニック導波路に適用した場合は失敗に終わった。

4 周期境界条件 (PBC)

周波数領域の周期境界条件 (PBC) は、

$$u(x+d,\omega) = u(x,\omega)e^{-j\beta d} \tag{22}$$

ここに、d は周期構造単位長さ、ω は角周波数、β は Floquet(Bloch) モードの波数である。
フーリエ変換

$$g(x,t-t_0) \leftrightarrow G(x,\omega)e^{-j\omega t_0} \tag{23}$$

の関係を用いると (21) 式に対する時間領域の PBC は、

$$u(x+d,t) = u(x,t-\tau) \tag{24}$$

$$\tau = \frac{\beta d}{\omega} \tag{25}$$

or

$$u_1(t) = u_2(t-\tau) \tag{26}$$

ここに、u_1, u_2 はそれぞれ $x+d$、x の位置の界である。時間領域 FEM で PBC を用いる場合は、ポート境界の界 u_1 に内部領域の過去の界 u_2 を代入することで解いた。
正方格子フォトニック導波路に適用してみたところ、一定時間経過するとポート境界からの反射のためか解析領域内に定在波が立ち始め徐々に発散してしまった。

5 固有モード展開複素吸収境界条件 (Modal ABCZ)

ABC、PBC 共にうまくいかなかったので、他の方法がないか試していたところ、固有モード展開の定式化を思いついた。
弱形式

$$\iint_\Omega \frac{1}{c_0^2}q\ddot{u} + p\nabla w\cdot\nabla u d\Omega - \int_B pw\frac{\partial u}{\partial x}dB = 0 \tag{27}$$

の境界積分項に現れる $p\dfrac{\partial u}{\partial x}$ を固有モードで表すことを考える。
まず周波数領域の関係式を導く。以下 TE モード (TMz) について導出するが TM モード (TEz) も同様に導出できる。

$$u = E_z \tag{28}$$

$$E_z = b_0 e^{-j\beta_0 x} f_0 \tag{29}$$

$$H_y = b_0 e^{-j\beta_0 x} g_0 \tag{30}$$

$$H_y = \frac{p}{j\omega\mu_0}\frac{\partial E_z}{\partial x} \tag{31}$$

$$= \frac{p}{j\omega mu_0}b_0\left(-j\beta_0 e^{-j\beta_0 x}f_0 + e^{-j\beta_0 x}\frac{\partial f_0}{\partial x}\right)$$

$$= -\frac{\beta_0 p}{\omega\mu_0}b_0 e^{-j\beta_0 x}\left(f_0 - \frac{1}{j\beta_0}\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) \tag{32}$$

$$g_0 = -\frac{\beta_0 p}{\omega\mu_0}\left(f_0 - \frac{1}{j\beta_0}\frac{\partial f_0}{\partial x}\right)$$
$$= -\frac{\beta_0 p}{\omega\mu_0}\overline{f}_0 \tag{33}$$
$$\overline{f}_0 = f_0 - \frac{1}{j\beta_0}\frac{\partial f_0}{\partial x} \tag{34}$$
$$\int_B f_0 g_0^* dB = -\frac{\beta_0^*}{|\beta_0|} \tag{35}$$
$$b_0 = -\frac{|\beta_0|}{\beta_0^*}\int_B E_z g_0^* dB \tag{36}$$
$$= \int_B E_z \frac{|\beta_0| p^*}{\omega\mu_0}\overline{f}_0^* dB \tag{37}$$

以上からモード展開吸収境界条件は

$$\begin{aligned} p\frac{\partial u}{\partial x} &= p\frac{\partial E_z}{\partial x} \\ &= j\omega\mu_0 H_y \\ &= j\omega\mu_0 b_0 g_0 \\ &= -j\omega\mu_0 b_0 \frac{\beta_0 p}{\omega\mu_0}\overline{f}_0 \\ &= -j\omega\mu_0 \frac{\beta_0 p}{\omega\mu_0}\overline{f}_0 \int_B E_z \frac{|\beta_0| p^*}{\omega\mu_0}\overline{f}_0^* dB \\ &= -\frac{j}{\omega\mu_0}\beta_0|\beta_0| p\overline{f}_0 \int_B E_z p^* \overline{f}_0^* dB \end{aligned} \tag{38}$$

境界積分項に代入して時間領域に変換する。

$$-\int_B pw\frac{\partial u}{\partial x}dB = -\int_B pw\frac{\partial E_z}{\partial x}dB \tag{39}$$
$$= \frac{j}{\omega\mu_0}\beta_0|\beta_0|\int_B wp\overline{f}_0 dB \int_B E_z p^* \overline{f}_0^* dB \tag{40}$$
$$= [B]E_z \tag{41}$$
$$= j\omega\frac{[B]}{j\omega}E_z \tag{42}$$
$$\to \frac{1}{j\omega}[B]\dot{u} \tag{43}$$
$$[B]_{ij} = \frac{j}{\omega\mu_0}\beta_0|\beta_0|\int_B N_i p\overline{f}_0 dB \int_B N_j p^* \overline{f}_0^* dB \tag{44}$$

ここで N_i,N_j は三角形要素の形状関数である。この吸収境界条件を固有モード展開複素吸収境界条件と呼ぶことにする。略称は Modal ABCZ で Z は複素数を意味する。この吸収境界条件用いると解くべき方程式は

$$[M]\ddot{u} + [K]u + \frac{1}{j\omega}[B]\dot{u} = 0 \tag{45}$$

となる。

吸収境界条件が複素数なため入射波として FDTD 法で用いられている sin/cos 法を用いた。その場合入射パルスは

$$e^{j\omega_0 t}e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2T^2}} \tag{46}$$

で励振する。

Modal ABCZ を適用して解析したところ正方格子フォトニック結晶、三角形格子フォトニック結晶ともにまずまずの結果が得られた。

6 まとめ

周期構造導波路、特にフォトニック結晶導波路のための吸収境界条件（PML、ABC、PBC) について検討した。

7 参考文献

[1] Dan Jiao, Jian-Ming Jin, Eric Michielssen, and Douglas J. Riley, "Time-domain finite-element simulation of three-dimensional scattering and radiation problems using perfectly matched layers.", https://engineering.purdue.edu/~djiao/publications/DanJiao_pml3d.pdf, IEEE Transactions on Antennas and Propagation vol. 51, no. 2, February 2003
[2] Dongying Li and Costas D. Sarris, "Efficient Finite-Difference Time-Domain Modeling of Driven Periodic Structures and Related Microwave Circuit Applications", IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 56, no. 8, August 2008