

# 双色散模型的辛时域有限差分算法\*

王辉<sup>1)3)</sup> 黄志祥<sup>1)†</sup> 吴先良<sup>1)2)</sup> 任信钢<sup>3)</sup> 吴博<sup>1)</sup>

1)(安徽大学计算智能与信号处理教育部重点实验室, 合肥 230039)

2)(合肥师范学院电子信息工程学院, 合肥 230061)

3)(香港大学电机电子工程学院, 香港, 薄扶林道)

(2013年11月11日收到; 2013年12月31日收到修改稿)

结合有耗的 Drude-Lorentz 色散模型, 提出了处理双色散模型的辛时域有限差分算法. 基于矩阵分裂, 辛传播算子和辅助差分方程技术, 结合严格而巧妙的公式推导, 构建了算法框架, 并给出了详细的公式推导过程. 为了验证本文算法的有效性和精确性, 首先计算了一维空间双色散平板的透射系数, 并与解析解对比, 结果较好地符合, 证明了该算法是有效而精确的. 然后计算了三维空间中有实际意义的银分裂环, 金属银的介电参数由 Drude 模型拟合. 计算了该结构的透射系数, 反射系数和吸收系数, 得到了银分裂环的谐振频率和吸收频率, 为实际实验结果提供了可供参考的计算结果.

**关键词:** 有耗 Drude-Lorentz 色散模型, 辛时域有限差分算法, 双色散模型, 矩阵分裂

**PACS:** 02.70.Bf, 82.70.-y

**DOI:** 10.7498/aps.63.070203

## 1 引言

色散媒质在电磁场领域有着广泛的应用<sup>[1-3]</sup>, 比如等离子体, 双负媒质, 吸波材料等都属于色散媒质. 如果媒质的介电常数或者磁导率是频率的函数, 那么这种媒质被称为色散媒质. 现实中的很多物质都是色散的, 比如海水, 雪等. 由于色散媒质的复杂特性, 使得解析法在求解色散媒质的电磁场问题上变的十分困难. 因此对它们的研究只能借助于数值方法以及科学实验. 在诸多数值方法中, 时域有限差分方法(FDTD)<sup>[4,5]</sup>是研究色散媒质电磁特性的有力工具. 因为FDTD方法具有宽带特性, 一次运行可以得到宽频结果. 电通量密度  $\mathbf{D}$  和电场  $\mathbf{E}$ , 磁通量密度  $\mathbf{B}$  和电场  $\mathbf{H}$  之间的关系反应了材料的复杂性, 很多时候并不简单的假设本构关系式  $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$  中的  $\epsilon$ ,  $\mu$  是一个恒定的标量,  $\epsilon$ ,  $\mu$  可以是一个张量, 从而可以描述媒质的各项异性.

当研究非线性媒质时也可以把  $\epsilon$ ,  $\mu$  写成非线性函数, 当然媒质参数也可以是随时间变化的函数. 介电常数也可以是位置的函数, 即表征空间媒质的非均匀性. 本文研究的重点是  $\epsilon$ ,  $\mu$  是频率的复杂函数的情形. 色散媒质能更好的描述现实世界, 因此我们有必要对色散媒质的FDTD方法展开研究. 为了仿真色散媒质, 研究者们提出了多种色散模型, 比如 Debye, Drude, Lorentz 以及 Drude-Lorentz 模型<sup>[6-8]</sup>.

辛时域有限差分算法(SFDTD)<sup>[9-11]</sup>在稳定性, 长时间迭代以及色散误差等方面比普通FDTD算法有很大的优势. 构造SFDTD算法需要将包含媒质参数的Maxwell方程写成矩阵形式  $\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t} = \mathbf{L}\mathbf{G}$ , 在计算时间演化矩阵  $\exp(\Delta t\mathbf{L})$  时, 要求  $\mathbf{L}$  分裂成的两个矩阵  $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{V}$  满足矩阵指数  $\exp(c_l\Delta t\mathbf{U})$ ,  $\exp(d_l\Delta t\mathbf{V})$  收敛. 但是由于色散媒质的电磁参数相对复杂, 使得矩阵  $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{V}$  的构造相当困难. 文献[12]对无耗散项的Drude模型构造

\* 国家自然科学基金(批准号: 51277001, 61101064)、教育部新世纪优秀人才基金(批准号:NCET-12-0596)、教育部博士点基金(批准号: 20123401110009)、安徽省杰出青年基金(批准号: 1108085J01)和安徽省高校重点项目(批准号: KJ2012A103)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn

了SFDTD算法. 针对更具有普遍意义的有耗散项Drude-Lorentz模型, 本文建立了可以处理双色散模型的SFDTD算法.

## 2 理论和数值推导

### 2.1 Drude-Lorentz色散模型的辛算法框架

Drude模型是比较常用的色散模型, 它可以很好地拟合一些材料的电磁参数, 有时候为了进一步提高对材料电磁参数的拟合, 需要引入Lorentz修正项, 即通过Drude和Lorentz模型的叠加来提高拟合的精度. 此时复的相对介电常数 $\epsilon$ 及复的相对磁导率 $\mu$ 可表示为

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_{eD}^2}{\omega(\omega - j\gamma_{eD})} - \frac{\Delta\epsilon \cdot \Omega_{eL}^2}{(\omega^2 - \Omega_{eL}^2) - j\omega\Gamma_{eL}}, \quad (1)$$

$$\mu_r(\omega) = \mu_\infty - \frac{\omega_{hD}^2}{\omega(\omega - j\gamma_{hD})} - \frac{\Delta\mu \cdot \Omega_{hL}^2}{(\omega^2 - \Omega_{hL}^2) - j\omega\Gamma_{hL}}, \quad (2)$$

其中,  $\epsilon_\infty$ 及 $\mu_\infty$ 分别为无限频率的相对介电常数和相对磁导率,  $\omega_{eD}$ 和 $\omega_{hD}$ 分别为电等离子体角频率和磁等离子体角频率,  $\gamma_{eD}$ 及 $\gamma_{hD}$ 分别为电碰撞频率和磁碰撞频率,  $\Delta\epsilon$ 及 $\Delta\mu$ 为引入Lorentz修正项后介电常数及磁导率的相对改变量,  $\Omega_{eL}$ 及 $\Omega_{hL}$ 为非损耗谐振频率,  $\Gamma_{eL}$ 及 $\Gamma_{hL}$ 是损耗系数. 为简单起见, 这里只考虑一项修正, 对于多项修正可类推.

无耗, 各项同性, 均匀介质空间中的Maxwell方程组的频域形式为

$$j\omega\epsilon_0\epsilon_r(\omega)\mathbf{E}(\omega) = \nabla \times \mathbf{H}(\omega), \quad (3)$$

$$j\omega\mu_0\mu_r(\omega)\mathbf{H}(\omega) = -\nabla \times \mathbf{E}(\omega). \quad (4)$$

考虑到本构关系, 引入如下辅助变量:

$$\mathbf{J}_D(\omega) = j\omega \frac{\omega_{eD}^2}{\omega^2 - j\omega\gamma_{eD}} \mathbf{E}(\omega), \quad (5)$$

$$\mathbf{J}_L(\omega) = j\omega \frac{\Delta\epsilon\Omega_{eL}^2}{\omega^2 - \Omega_{eL}^2 - j\omega\Gamma_{eL}} \mathbf{E}(\omega), \quad (6)$$

$$\mathbf{Q}(\omega) = j\omega\mathbf{J}_L(\omega), \quad (7)$$

$$\mathbf{K}_D(\omega) = j\omega \frac{-\omega_{hD}^2}{\omega^2 - j\omega\gamma_{hD}} \mathbf{H}(\omega), \quad (8)$$

$$\mathbf{K}_L(\omega) = j\omega \frac{-\Delta\mu\Omega_{hL}^2}{\omega^2 - \Omega_{hL}^2 - j\omega\Gamma_{hL}} \mathbf{H}(\omega), \quad (9)$$

$$\mathbf{P}(\omega) = j\omega\mathbf{K}_L(\omega). \quad (10)$$

因此, (3), (4)式可改写为

$$j\omega\epsilon_\infty\mathbf{E}(\omega) = \frac{1}{\epsilon_0}\nabla \times \mathbf{H}(\omega) + \mathbf{J}_D(\omega) + \mathbf{J}_L(\omega), \quad (11)$$

$$j\omega\mu_\infty\mathbf{H}(\omega) = -\frac{1}{\mu_0}\nabla \times \mathbf{E}(\omega) - \mathbf{K}_D(\omega) - \mathbf{K}_L(\omega). \quad (12)$$

结合逆傅里叶变换, (5)—(12)式对应的时域形式为

$$\frac{\partial \mathbf{J}_D}{\partial t} = -\omega_{eD}^2\mathbf{E} - \gamma_{eD}\mathbf{J}_D, \quad (13)$$

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \Delta\epsilon\Omega_{eL}^2\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\Omega_{eL}^2\mathbf{J}_L - \Gamma_{eL}\mathbf{Q}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \mathbf{J}_L}{\partial t} = \mathbf{Q}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \mathbf{K}_D}{\partial t} = \omega_{hD}^2\mathbf{H} - \gamma_{hD}\mathbf{K}_D, \quad (16)$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} - \Delta\mu\Omega_{hL}^2\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\Omega_{hL}^2\mathbf{K}_L - \Gamma_{hL}\mathbf{P}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \mathbf{K}_L}{\partial t} = \mathbf{P}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_\infty} \left[ \frac{1}{\epsilon_0} \nabla \times \mathbf{H} + \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_L \right], \quad (19)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_\infty} \left[ \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E} + \mathbf{K}_D + \mathbf{K}_L \right]. \quad (20)$$

方程(13)—(20)可进一步改写成矩阵形式

$$\mathbf{W} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t} = \mathbf{M}\mathbf{G}, \quad (21)$$

其中,  $\mathbf{G} = (\mathbf{H} \ \mathbf{E} \ \mathbf{K}_L \ \mathbf{J}_L \ \mathbf{P} \ \mathbf{Q} \ \mathbf{K}_D \ \mathbf{J}_D)^T$ ,

$$\mathbf{W} = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -\Delta\mu\Omega_{hL}^2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta\epsilon\Omega_{eL}^2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right), \quad (22)$$

及

$$M = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 0 & \frac{-\nabla \times}{\mu_\infty \mu_0} & \frac{-1}{\mu_\infty} & 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{\mu_\infty} & 0 \\ \frac{\nabla \times}{\varepsilon_\infty \varepsilon_0} & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon_\infty} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon_\infty} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -\Omega_{\text{hL}}^2 & 0 & -\Gamma_{\text{hL}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Omega_{\text{eL}}^2 & 0 & -\Gamma_{\text{eL}} & 0 & 0 \\ \omega_{\text{hD}}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_{\text{hD}} & 0 \\ 0 & -\omega_{\text{eD}}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_{\text{eD}} \end{array} \right). \quad (23)$$

方程 (21) 可表示为

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t} = \mathbf{W}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{G} \doteq \widehat{\mathbf{M}} \mathbf{G}, \quad (24)$$

其中,

$$\widehat{\mathbf{M}} = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 0 & \frac{-\nabla \times}{\mu_\infty \mu_0} & \frac{-1}{\mu_\infty} & 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{\mu_\infty} & 0 \\ \frac{\nabla \times}{\varepsilon_\infty \varepsilon_0} & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon_\infty} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon_\infty} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \frac{-\Delta \mu \Omega_{\text{hL}}^2 \nabla \times}{\mu_\infty \mu_0} & \frac{-(\Delta \mu + \mu_\infty) \Omega_{\text{hL}}^2}{\mu_\infty} & 0 & -\Gamma_{\text{hL}} & 0 & \frac{-\Delta \mu \Omega_{\text{hL}}^2}{\mu_\infty} & 0 \\ \frac{-\Delta \varepsilon \Omega_{\text{eL}}^2 \nabla \times}{\varepsilon_\infty \varepsilon_0} & 0 & 0 & \frac{-(\Delta \varepsilon + \varepsilon_\infty) \Omega_{\text{eL}}^2}{\varepsilon_\infty} & 0 & -\Gamma_{\text{eL}} & 0 & \frac{-\Delta \varepsilon \Omega_{\text{eL}}^2}{\varepsilon_\infty} \\ \omega_{\text{hD}}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_{\text{hD}} & 0 \\ 0 & -\omega_{\text{eD}}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_{\text{eD}} \end{array} \right). \quad (25)$$

为简化记号, 引入

$$\widehat{\mathbf{M}} = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 0 & A_{12} & A_{13} & 0 & 0 & 0 & A_{17} & 0 \\ A_{21} & 0 & 0 & A_{24} & 0 & 0 & 0 & A_{28} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{35} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{46} & 0 & 0 \\ \hline 0 & A_{52} & A_{53} & 0 & A_{55} & 0 & A_{57} & 0 \\ A_{61} & 0 & 0 & A_{64} & 0 & A_{66} & 0 & A_{68} \\ A_{71} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{77} & 0 \\ 0 & A_{82} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{88} \end{array} \right). \quad (26)$$

引入辛算法近似, 考虑时间步进从  $t = 0$  到  $t = \Delta t$ , 结合 (24) 式有

$$\mathbf{G}(\Delta t) = \exp(\widehat{\mathbf{M}} \Delta t) \mathbf{G}(0). \quad (27)$$

由于无法得到算子  $\exp(\widehat{\mathbf{M}} \Delta t)$  的解析表达式, 我们将  $\widehat{\mathbf{M}}$  分裂成两个矩阵  $\mathbf{U}$  及  $\mathbf{V}$  的叠加.

$$\mathbf{U} = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 0 & A_{12} & A_{13} & 0 & 0 & 0 & A_{17} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{46} & 0 & 0 \\ \hline 0 & A_{52} & A_{53} & 0 & A_{55} & 0 & A_{57} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{82} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{88} \end{array} \right), \quad (28)$$

$$\mathbf{V} = \left( \begin{array}{cccc|cccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 A_{21} & 0 & 0 & A_{24} & 0 & 0 & 0 & A_{28} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & A_{35} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \hline
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 A_{61} & 0 & 0 & A_{64} & 0 & A_{66} & 0 & A_{68} \\
 A_{71} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{77} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right). \quad (29)$$

考虑到  $\mathbf{U}$  及  $\mathbf{V}$  不可交换性, 利用基本辛矩阵的乘积, 矩阵算符可近似为

$$\begin{aligned}
 \exp(\widehat{\mathbf{M}}\Delta t) &= \exp((\mathbf{U} + \mathbf{V})\Delta t) \\
 &= \prod_{l=1}^m \exp(d_l \Delta t \mathbf{V}) \exp(c_l \Delta t \mathbf{U}) \\
 &\quad + O(\Delta t^{p+1}), \quad (30)
 \end{aligned}$$

其中, 对应参数的定义与普通辛算法一致. 尽管  $\mathbf{U}^\alpha \neq 0$  及  $\mathbf{V}^\alpha \neq 0 (\alpha \geq 2)$ , 指数算符  $\exp(d_l \Delta t \mathbf{V})$  及  $\exp(c_l \Delta t \mathbf{U})$  可由表达式 (31), (32) 定义并计算:

$$\exp(d_l \Delta t \mathbf{V}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(d_l \Delta t \mathbf{V})^n}{n!}, \quad (31)$$

$$\exp(c_l \Delta t \mathbf{U}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(c_l \Delta t \mathbf{U})^n}{n!}. \quad (32)$$

可以证明按照 (28), (29) 式分裂成的矩阵  $\mathbf{U}$  及  $\mathbf{V}$  使得 (31), (32) 式收敛, 无需近似, 具体推导细节可参考本文后面的附录. 这里需要注意的是前文将矩阵  $\widehat{\mathbf{M}}$  分裂成的  $\mathbf{U}$  及  $\mathbf{V}$  两个矩阵不是任意的, 需要满足分裂后的矩阵的矩阵指数收敛. 最后得到场及相关变量的递推关系如下:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}^{n+\frac{l}{m}} &= \mathbf{E}^{n+\frac{l-1}{m}} + \frac{d_l \Delta t}{\varepsilon_\infty \varepsilon_0} \nabla \times \mathbf{H}^{n+\frac{l-1}{m}} \\
 &\quad + \frac{d_l \Delta t}{\varepsilon_\infty} \left( \mathbf{J}_L^{n+\frac{l-1}{m}} + \mathbf{J}_D^{n+\frac{l-1}{m}} \right), \\
 \mathbf{K}_L^{n+\frac{l}{m}} &= \mathbf{K}_L^{n+\frac{l-1}{m}} + d_l \Delta t \mathbf{P}^{n+\frac{l-1}{m}}, \\
 \mathbf{Q}^{n+\frac{l}{m}} &= e^{-d_l \Delta t \Gamma_{eL}} \mathbf{Q}^{n+\frac{l-1}{m}} \\
 &\quad + \frac{\Delta \varepsilon \Omega_{eL}^2}{\varepsilon_\infty \varepsilon_0 \Gamma_{eL}} (e^{-d_l \Delta t \Gamma_{eL}} - 1) \nabla \\
 &\quad \times \mathbf{H}^{n+\frac{l-1}{m}} + \frac{(\Delta \varepsilon + \varepsilon_\infty) \Omega_{eL}^2}{\varepsilon_\infty \Gamma_{eL}} \\
 &\quad \times (e^{-d_l \Delta t \Gamma_{eL}} - 1) \mathbf{J}_L^{n+\frac{l-1}{m}} + \frac{\Delta \varepsilon \Omega_{eL}^2}{\varepsilon_\infty \Gamma_{eL}} \\
 &\quad \times (e^{-d_l \Delta t \Gamma_{eL}} - 1) \mathbf{J}_D^{n+\frac{l-1}{m}},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_D^{n+\frac{l}{m}} &= e^{-d_l \Delta t \gamma_{hD}} \mathbf{K}_D^{n+\frac{l-1}{m}} \\
 &\quad - \frac{\omega_{hD}^2}{\gamma_{hD}} (e^{-d_l \Delta t \gamma_{hD}} - 1) \mathbf{H}^{n+\frac{l-1}{m}}. \quad (33)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}^{n+\frac{l}{m}} &= \mathbf{H}^{n+\frac{l-1}{m}} + \frac{-c_l \Delta t}{\mu_\infty \mu_0} \nabla \times \mathbf{E}^{n+\frac{l-1}{m}} \\
 &\quad + \frac{-c_l \Delta t}{\mu_\infty} \left( \mathbf{K}_L^{n+\frac{l-1}{m}} + \mathbf{K}_D^{n+\frac{l-1}{m}} \right), \\
 \mathbf{J}_L^{n+\frac{l}{m}} &= \mathbf{J}_L^{n+\frac{l-1}{m}} + c_l \Delta t \mathbf{Q}^{n+\frac{l-1}{m}}, \\
 \mathbf{P}^{n+\frac{l}{m}} &= e^{-c_l \Delta t \Gamma_{hL}} \mathbf{P}^{n+\frac{l-1}{m}} + \frac{\Delta \mu \Omega_{hL}^2}{\mu_\infty \mu_0 \Gamma_{hL}} \\
 &\quad \times (e^{-c_l \Delta t \Gamma_{hL}} - 1) \nabla \times \mathbf{E}^{n+\frac{l-1}{m}} \\
 &\quad + \frac{(\Delta \mu + \mu_\infty) \Omega_{hL}^2}{\mu_\infty \Gamma_{hL}} (e^{-c_l \Delta t \Gamma_{hL}} - 1) \\
 &\quad \times \mathbf{K}_L^{n+\frac{l-1}{m}} + \frac{\Delta \mu \Omega_{hL}^2}{\mu_\infty \Gamma_{hL}} (e^{-c_l \Delta t \Gamma_{hL}} - 1) \\
 &\quad \times \mathbf{K}_D^{n+\frac{l-1}{m}}, \\
 \mathbf{J}_D^{n+\frac{l}{m}} &= e^{-c_l \Delta t \gamma_{eD}} \mathbf{J}_D^{n+\frac{l-1}{m}} + \frac{\omega_{eD}^2}{\gamma_{eD}} \\
 &\quad \times (e^{-c_l \Delta t \gamma_{eD}} - 1) \mathbf{E}^{n+\frac{l-1}{m}}. \quad (34)
 \end{aligned}$$

至于空间一阶偏导数的离散可借助于四阶交错差分, 即

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=i\Delta x} &\approx \frac{27 \left( f \left( i + \frac{1}{2} \right) - f \left( i - \frac{1}{2} \right) \right)}{24\Delta x} \\
 &\quad - \frac{f \left( i + \frac{3}{2} \right) - f \left( i - \frac{3}{2} \right)}{24\Delta x}. \quad (35)
 \end{aligned}$$

因而, 结合时间及空间离散, 最终建立了空间四阶时间任意阶的 SFDTD 算法以处理双色散媒质, 而且本文构建的方法可以直接退化为单色散媒质及普通媒质的 SFDTD 算法.

### 3 数值算例

#### 3.1 双色散平板模型的传输问题

为了验证本文方法的有效性, 首先考虑平板的传输问题. 以结构为 50 nm 厚且为双色散材质的平板作为研究对象, 参考贵金属金的相对介电常数, 设置该平板的相对介电常数为一个 Drude 项加一个 Lorentz 修正项, 其对应的参数分别为:  $\varepsilon_\infty = 1.17152$ ,  $\Delta \varepsilon = 2.233994$ ,  $\gamma_{eD} = 3.21 \times 10^{13}$  rad/s,  $\omega_{eD} = 1.37 \times 10^{16}$  rad/s,  $\Gamma_{eL} = 2\pi \times 6.22 \times 10^{13}$  rad/s 及  $\omega_{eL} = 2\pi \times 1.31 \times$

$10^{15}$  rad/s. 另外设置该平板的相对磁导率与相应的相对介电常数相同, 即  $\mu_{\infty} = 1.17152$ ,  $\Delta\mu = 2.233994$ ,  $\gamma_{hD} = 3.21 \times 10^{13}$  rad/s,  $\omega_{hD} = 1.37 \times 10^{16}$  rad/s,  $\Gamma_{hL} = 2\pi \times 6.22 \times 10^{13}$  rad/s,  $\omega_{hL} = 2\pi \times 1.31 \times 10^{15}$  rad/s, 为了对SFDTD和普通FDTD算法进行比较, 计算区域设为300 nm, 平板置于计算区域的中心, 最外层为20个网格的PML, 入射的平面波源为调制的高斯激励

$$\exp\left(-0.5\left(\frac{t-t_0}{\tau}\right)^2\right) \cos(\omega(t-t_0)),$$

其中  $\omega = 4\pi \times 10^{14}$  rad/s,  $\tau = 5.0 \times 10^{-15}$  s,  $t_0 = \tau$ , 其他相关计算参数见表1. 图1给出了该平板在125—275 THz频段透射系数的精确解, SFDTD解以及普通FDTD解. 由图1可以看出SFDTD(红色圆点), FDTD(黑色三角形)和精确解(蓝色实线)的误差相当. 表1给出了两种算法结果对应的内存以及计算时间的比较. 由表1可以看出, 在相同精度下, SFDTD可以设置较大的稳定性系数以及网格步长, 从而可以减少计算时间. 结果证明本文建立的Drude-Lorentz双色散模型的辛算法框架是有效的.

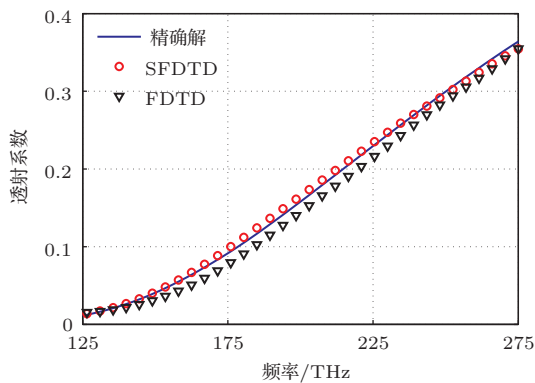


图1 (网刊彩色) 透射系数比较

表1 算法性能比较

算法	网格步长/nm	CFL	时间步数 $T/\Delta t$	计算时间/s	内存/MB
SFDTD	2.5	0.6	9000	11.4	132
FDTD	1.0	0.3	45000	15.2	101

### 3.2 三维U形开口谐振环(SRRs)的特性分析

U形SRRs环具有周期性结构, 它在开关, 传感器等方面有着广泛的应用. 作为第二个例子, 利

用本文构建的色散模型SFDTD算法, 计算分析U形SRRs环的透射系数, 反射系数以及吸收系数. U形SRRs环结构如图2所示, 该结构在x, y方向上是周期, 且是周期长为  $p = 250$  nm的正方形结构. 其他结构参数为  $a = 150$  nm,  $w = 50$  nm,  $d = 75$  nm,  $h_g = 60$  nm,  $h_s = 40$  nm. 下层蓝色区域为介质基板(GaAs材料介电常数  $\epsilon_r = 11.0$ ); 上层黄色区域为贵金属银, 考虑到研究的波长范围为[1200, 2400]nm, 用一个Drude项拟合银在该波段的介电常数, 其相应的Drude参数为  $\epsilon_{\infty} = 1.0$ ,  $\omega_{eD} = 1.37 \times 10^{16}$  rad/s,  $\gamma_{eD} = 2.73 \times 10^{13}$  rad/s. 电磁波垂直于SRRs平面入射, 其电极化方向平行于y轴, z方向上设置15层厚度的高阶分裂场PML作为吸收边界. 图3是仿真后得到的透射系数(黑色实线), 反射系数(蓝色实线)和吸收系数(绿色实线), 而且给出了FDTD算法结果的对比. 表2是SFDTD和FDTD计算参量的对比, 可以看出, 由于SFDTD算法可以将CFL以及网格步长设置的较大, 从而在计算时间和内存上比FDTD占优.

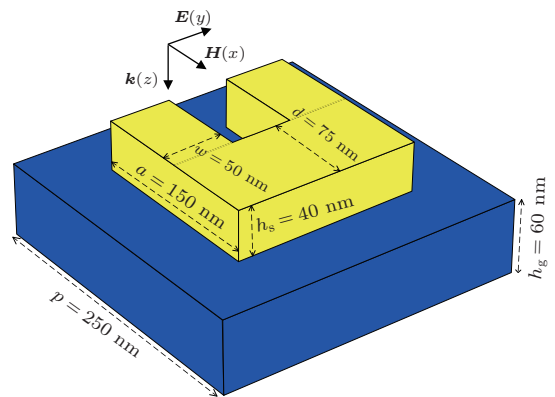


图2 (网刊彩色) SRRs结构示意图

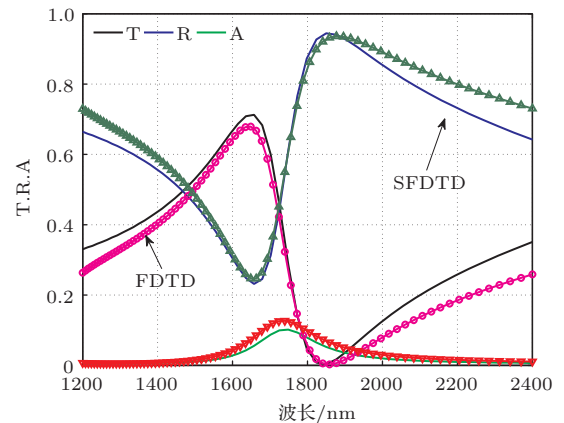


图3 (网刊彩色) 垂直入射时SRRs结构的透射系数, 反射系数和吸收系数

图 3 中, 根据透射系数的变化可以看出该 S-RRs 结构的谐振频率对应的波长位于 1850 nm 附近, 吸收峰位于 1740 nm 附近.

表 2 算法性能比较

算法	网格步长/nm	CFL	时间步数 $T/\Delta t$	计算时间/s	内存/MB
SFDTD	25	0.4	6000	84	10664
FDTD	12.5	0.3	12000	249	15468

### 4 结 论

SFDTD 算法是一种能量守恒, 条件稳定且能得到宽频带特性的有效数值方法, 本文基于矩阵分裂, 辛算子技术以及 ADE 方法构建了 Drude-Lorentz 电磁双色散模型的辛算法框架, 该算法在时间上为任意阶, 可以灵活处理. 通过严格的公式推导, 得到了一个 Drude 和一个 Lorentz 项叠加的双色散模型的 SFDTD 算法迭代公式, 对于多个 Drude 或者 Lorentz 项叠加的色散模型, 需要引入更多的中间变量, 可以类似推导. 数值仿真结果证明了构建的双色散模型的 SFDTD 算法的可行性和有效性. 该算法为色散材料的研究提供了有力的算法支持.

### 附录 A 矩阵指数展开

以 (32) 式为例, 下面可以证明其展开后的计算结果是收敛的, 展开后矩阵指数的收敛这是本文构建的算法的基础. 矩阵  $U$  的表达式为 (28) 式, 根据矩阵的乘法运算, 可以得到任意整数个  $U$  矩阵乘积的结果:

$$U^2 = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & A_{52}A_{55} & A_{53}A_{55} & 0 & A_{55}^2 & 0 & A_{57}A_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{82}A_{88} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{88}^2 \end{array} \right),$$

$$U^n = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & A_{52}A_{55}^{n-1} & A_{53}A_{55}^{n-1} & 0 & A_{55}^n & 0 & A_{57}A_{55}^{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{82}A_{88}^{n-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{88}^n \end{array} \right).$$

令

$$B = \exp(c_l \Delta t U) = I + c_l \Delta t U + \dots + \frac{(c_l \Delta t U)^n}{n!} + \dots$$

其中  $I$  为单位阵. 那么  $B$  矩阵中的非零元素可计算得到

$$\begin{aligned} b_{11} &= b_{22} = b_{33} = b_{44} = b_{66} = b_{77} = I, \\ b_{12} &= \frac{-c_l \Delta t \nabla \times}{\mu_\infty \mu_0}, \quad b_{13} = \frac{-c_l \Delta t}{\mu_\infty}, \\ b_{17} &= \frac{-c_l \Delta t}{\mu_\infty}, \quad b_{46} = c_l \Delta t. \end{aligned}$$

简单记  $\alpha = c_l \Delta t$ , 于是

$$\begin{aligned} b_{52} &= \alpha A_{52} + \frac{\alpha^2 A_{52} A_{55}}{2!} + \dots + \frac{\alpha^n A_{52} A_{55}^{n-1}}{n!} + \dots \\ &= \frac{A_{52}}{A_{55}} \left( I + \alpha A_{55} + \frac{(\alpha A_{55})^2}{2!} + \dots + \frac{(\alpha A_{55})^n}{n!} + \dots - I \right) \\ &= \frac{A_{52}}{A_{55}} (\exp(\alpha A_{55}) - I) \\ &= \frac{\Delta \mu \Omega_{hL}^2 \nabla \times}{\mu_\infty \mu_0 \Gamma_{hL}} (\exp(-c_l \Delta t \Gamma_{hL}) - I), \\ b_{55} &= I + \alpha A_{55} + \frac{(\alpha A_{55})^2}{2!} + \dots + \frac{(\alpha A_{55})^n}{n!} + \dots \\ &= \exp(\alpha A_{55}) = \exp(-c_l \Delta t \Gamma_{hL}); \end{aligned}$$

同样可以得到

$$\begin{aligned} b_{53} &= \frac{A_{53}}{A_{55}} (\exp(\alpha A_{55}) - I) \\ &= \frac{(\Delta \mu + \mu_\infty) \Omega_{hL}^2}{\mu_\infty \Gamma_{hL}} (\exp(-c_l \Delta t \Gamma_{hL}) - I), \\ b_{57} &= \frac{A_{57}}{A_{55}} (\exp(\alpha A_{55}) - I) \\ &= \frac{\Delta \mu \Omega_{hL}^2}{\mu_\infty \Gamma_{hL}} (\exp(-c_l \Delta t \Gamma_{hL}) - I), \\ b_{82} &= \frac{A_{82}}{A_{88}} (\exp(\alpha A_{88}) - I) \\ &= \frac{\omega_{eD}^2}{\gamma_{eD}} (\exp(-c_l \Delta t \gamma_{eD}) - I), \\ b_{88} &= \exp(\alpha A_{88}) = \exp(-c_l \Delta t \gamma_{eD}). \end{aligned}$$

## 参考文献

- [1] Ai F, Bai Y, Xu F, Qiao L J, Zhou J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4189 (in Chinese)[艾芬, 白洋, 徐芳, 乔利杰, 周济 2008 物理学报 **57** 4189]
- [2] Liu R, Shi J H, Plum E, Fedotov V, Zheludev N 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 154101 (in Chinese)[刘冉, 史金辉, E. Plum, V.A.Fedotov, N.I.Zheludev 2012 物理学报 **61** 154101]
- [3] Wang W S, Zhang L W, Ran J, Zhang Y W 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 184203 (in Chinese)[王五松, 张利伟, 冉佳, 张治文 2013 物理学报 **62** 184203]
- [4] Taflove A, Hagness S C 2005 *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, third ed.* (Boston: Artech House)
- [5] Sullivan D M, Hagness S C 2005 *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method* (New York: IEEE Press)
- [6] Prokupidis K P, Tsiboukis T D 2007 *Appl. Comput. Electron.* **22** 287
- [7] Deinega A, John S 2012 *Opt. Lett.* **37** 112
- [8] Vial A, Grimault A-S, Macías D, Barchiesi D, Chapelle M L 2005 *Phys. Rev. B* **71** 085416
- [9] Sha W, Huang Z X, Chen M S, Wu X L 2008 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **56** 493
- [10] Hirono T, Lui W, Seki S, Yoshikuni Y 2001 *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.* **49** 1640
- [11] Wang H, Huang Z X, Wu X L, Ren X G 2011 *Chin. Phys. B* **20** 114701
- [12] Ren X G, Huang Z X, Wu X L, Lu S L, Wang H, Wu L, Li S 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 1192

## Symplectic FDTD algorithm for the simulations of double dispersive materials\*

Wang Hui<sup>1)3)</sup> Huang Zhi-Xiang<sup>1)†</sup> Wu Xian-Liang<sup>1)2)</sup> Ren Xin-Gang<sup>3)</sup> Wu Bo<sup>1)</sup>

1) (The Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing, Ministry of Education, Anhui University, Hefei 230039, China)

2) (Department of Physics and Engineering, Hefei Normal College, Hefei 230061, China)

3) (Department of Electrical and Electronic Engineering, The University of Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong, China)

(Received 11 November 2013; revised manuscript received 31 December 2013)

### Abstract

Combined with the Lossy Drude-Lorentz dispersive model, a symplectic finite-difference time-domain (SFDTD) algorithm is proposed to deal with the double dispersive model. Based on matrix splitting, symplectic integrator propagator and the auxiliary differential equation (ADE) technique, with the rigorous and artful formula derivation, the algorithm is constructed, and detailed formulations are provided. Excellent agreement is achieved between the SFDTD-calculated and exact theoretical results when transmittance coefficient in simulation of double dispersive film in one dimension is calculated. As to numerical results for a more realistic structure in three dimensions, the simulation of periodic arrays of silver split-ring resonators using the Drude dispersion model are also included. The transmittance, reflectance, and absorptance of the structure are presented to test the efficiency of the proposed method. Our method can be used as an efficiency simulation tool for checking the experimental data.

**Keywords:** Lossy Drude-Lorentz dispersive model, symplectic finite-difference time-domain, double dispersive model, matrix splitting

**PACS:** 02.70.Bf, 82.70.-y

**DOI:** 10.7498/aps.63.070203

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51277001, 61101064), the NCET (Grant No. NCET-12-0596), the DFMEC (Grant No. 20123401110009), the Fund for Distinguished Young Scholars of Anhui Province, China (Grant No. 1108085J01), and the Key Program of the Higher Education Institutions of Anhui Province, China (Grant No. KJ2012A103).

† Corresponding author. E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn