

Схема Йи с улучшенными дисперсионными свойствами

В.П. Жуков¹, М.П. Федорук^{1,2}

¹ ФИЦ ИВТ – Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Лаврентьева, д. 6;

² Новосибирский государственный университет, 630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Пирогова, д. 2

Аннотация

Конечно-разностная схема Йи широко и успешно применяется для численного решения уравнений Максвелла. Но она не лишена недостатков, исправлению которых посвящена предлагаемая работа. Эти недостатки заключаются в неизотропности схемы при решении задачи в декартовой системе координат, отклонении положения фокуса от истинного вследствие погрешностей численного метода, понижении точности расчета при наличии контактной границы. В сложных задачах шаг разностной сетки ограничен доступными вычислительными ресурсами, а на грубых сетках упомянутые недостатки могут привести к недопустимо большим ошибкам численных решений. В настоящей работе предложена простая модификация схемы Йи, успешно решающая проблему неизотропии и в определенных, важных для практики задачах проблемы положения фокуса и описания контактной границы на грубых сетках.

Ключевые слова: уравнения Максвелла, схема Йи, фемтосекундный лазерный импульс, ресурсоемкие вычисления, контактная граница, изотропная разностная схема, математическое моделирование.

Цитирование: Жуков, В.П. Схема Йи с улучшенными дисперсионными свойствами / В.П. Жуков, М.П. Федорук // Компьютерная оптика. – 2026. – Т. 50, № 4. – 1771. – doi: 10.18287/COJ1771.

Citation: Zhukov VP, Fedoruk MP. Yee scheme with improved dispersion properties. Computer Optics. 2026; 50(4): 1771. doi: 10.18287/COJ1771.

Введение

Решение задач, требующих больших, на пределе возможного вычислительных ресурсов, нуждается в индивидуальном подходе. Нередко одни свойства решения задачи необходимо передавать с высокой точностью, а другие – нет. Важным требованием к методу решения является его простота: незначительные изменения в постановке задачи не должны приводить к радикальной перестройке вычислительного алгоритма и программы или тем более к невозможности их использования.

В настоящей работе изложены простые и эффективные способы преодоления некоторых проблем, возникающих при численном решении уравнений Максвелла широко и успешно используемой конечно-разностной схемой Йи [1]. При этом предлагаемая модификация схемы Йи не улучшает всех её свойств. В частности, порядок аппроксимации предлагаемой схемы по-прежнему остается вторым, но она воспроизводит некоторые особенности решения уравнений Максвелла значительно лучше исходной схемы Йи уже на очень грубых сетках.

Предлагаемые в настоящей работе изменения в схеме Йи нацелены на решение трех проблем, возникающих при моделировании процессов, происходящих при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов на материалы [2, 3]. Одно из предлагаемых улучшений – повышение изотропности схемы – может быть использовано в широком круге задач. Применимость двух других изменений ограничена моделированием упомянутых процессов. Однако практическая значимость этого моделирования очень велика, т.к. оно имеет непосредственное отношение к совершенствованию технологий микрообработки материалов лазерными импульсами.

Первая из упомянутых проблем типична для многих задач в различных областях физики. Уравнения, описывающие поведение среды, в том числе уравнения Максвелла, учитывающие отклик материала на электромагнитное излучение, во многих случаях изотропны. При решении этих уравнений конечно-разностными методами декартовая сетка вносит искажения, в результате которых, например, цилиндрически симметричная волна при её распространении на большие расстояния перестает быть таковой. Приведем пример физического процесса, для адекватного расчета которого необходимо использовать изотропную конечно-разностную схему для уравнений Максвелла. При фокусировке последовательности из сотен фемтосекундных лазерных импульсов с распределением интенсивности, близким к аксиально симметричному, вглубь стекла в определенных режимах в окрестности фокуса возникают нанорешетки модифицированного стекла с четкой плоской структурой [4 – 6]. Возникновение похожих структур (LIPS) [7, 8] на поверхности металлов и полупроводников объясняется интерференцией падающей лазерной волны с волнами, возникающими при рассеянии падающей волны на шероховатостях поверхности. В обсуждаемом случае этот механизм неприменим, т.к. решетка возникает вдали

от поверхности. Кроме того, размер шероховатостей поверхности стекла очень мал. Предлагаемые объяснения [4 – 6] нельзя признать убедительными. Очевидно, что при численном моделировании подобных явлений метод решения уравнений Максвелла должен одинаково хорошо описывать как аксиально-симметричные волны, так и плоские. Схема не должна порождать отклонение от аксиальной симметрии, не связанное с физическими процессами. При этом очевидно, что расчет большого количества импульсов в 3-мерной геометрии возможен только на грубых сетках, даже на суперкомпьютерах. Поэтому преодоление проблемы нарушения изотропности численного метода простым уменьшением шагов сетки невозможно в силу ограниченности вычислительных мощностей.

Использование спектральных методов затруднительно при наличии нелинейных членов или отклонения формы расчетной области от простейшей декартовой геометрии. Кроме того, спектральные методы более сложны в реализации, и их сложнее адаптировать к изменяющимся условиям задач.

Конечно-разностные методы 4-го порядка [9 – 12] также сложны в реализации, требуют определённых усилий при аппроксимации граничных и начальных условий. Их обобщение на уравнения с дисперсией и нелинейностью неочевидны. При вычислениях пространственных производных по этим схемам оказываются задействованы узлы, находящиеся на расстоянии в 3 раза больше от точки вычисления производной, чем в схеме Йи. При ограниченности пространственного шага это не способствует точности расчета.

Для повышения свойств изотропности схем также предлагают использование сетки, состоящей из 6-угольников [13, 14]. Этот метод не обобщается на существенно 3-мерный случай (например, распространение сферической волны), является более громоздким, имеются проблемы с постановкой условий на границе, которая во многих случаях является плоской.

В настоящей работе предложен простой и эффективный метод улучшения изотропности схемы Йи. При этом схема имеет 2-й порядок аппроксимации, как и схема Йи.

Вторая проблема, решение которой предлагается в настоящей работе, связана с необходимостью точной передачи пространственного расположения фокуса лазерного импульса. Пусть, например, производится расчет лазерного импульса, фокус которого располагается в 200 микронах (мкм) от границы расчетной области, на которой этот импульс задается. Пусть в результате погрешностей аппроксимации в расчетах фокус располагается в 199 мкм от границы. Это несущественно для одиночного импульса или серии импульсов с одинаковой длиной волны, и при интерпретации результатов расчетов этим можно пренебречь. Однако если рассматривать последовательность импульсов с разными длинами волн, например, если второй импульс имеет в 2 раза меньшую длину волны, то в расчетах по конечно-разностной схеме 2-го порядка фокус этого 2-го импульса будет располагаться в 196 мкм от границы. Размер области сильных изменений физических свойств стекла, вызванных первым импульсом и влияющим на второй импульс, может быть мал – порядка 1 мкм. Очевидно, что подобный расчет абсолютно не описывает эволюцию второго импульса. Если бы второй импульс распространялся линейно до расстояний порядка 1 мкм от фокуса, то эту проблему можно было бы решить простым изменением параметров, отвечающих за фокусное расстояние второго импульса. Можно было бы задать их такими, чтобы фокус второго импульса был немного дальше 200 мкм. Однако в этих задачах, помимо области большой модификации, существует обширная, простирающаяся на десятки микрон область небольших изменений в стекле, которые могут влиять на распространение второго импульса, но не производят остаточной модификации стекла. Поскольку все эти изменения определяются нелинейными процессами, то простым изменением фокусного расстояния второго импульса этой проблемы не решить. Необходимо, чтобы схема локально обеспечивала правильное положение фокуса.

В настоящей работе предлагается простое решение этой проблемы для узкого класса задач [2, 15], в которых частотный спектр сосредоточен в окрестности несущей частоты лазера ω так, что характерная ширина спектра $\Omega \ll \omega$. Другими словами, произведение характерного времени изменения амплитуды импульса t_L и несущей частоты $\omega t_L \gg 1$. В экспериментах типичные значения t_L составляют порядка десятков фемтосекунд ($1 \text{ фс} = 10^{-15} \text{ с}$), ω – порядка единиц фс^{-1} . Длина волны лазерного излучения – порядка 1 мкм. Обсуждаемый класс задач является узким с точки зрения диапазона параметров, но очень широким с точки зрения потребности решения подобных задач для нужд микрообработки материалов и исследований взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом.

Третья проблема, решаемая в настоящей работе, – наличие контактной границы, т.е. в расчетной области могут находиться несколько материалов с существенно отличающимися оптическими свойствами или в процессе облучения материала они меняют свои свойства. В этом случае нормальная к контактной границе компонента электрического поля терпит разрыв. Для решения подобных задач нередко используется некоторое среднее электрическое поле на границе, вычисляемое по определённым образом усредненным значениям оптических коэффициентов [16 – 18]. Этот подход имеет два существенных недостатка.

1) При решении нелинейных задач необходимо вычислять квадрат электрического поля, отвечающий за нелинейные эффекты. В узлах конечно-разностной сетки, примыкающих к контактной границе, использование некоторого среднего электрического, без учета разрыва, поля даст неверный результат. Если есть возможность уменьшать шаг сетки, это не создает проблем. Необходимо лишь учитывать, что в

ближайших к контактной границе узлах сетки значение квадрата поля будет отличаться от точного даже при стремлении шага сетки к нулю. Однако в ресурсоемких задачах возможности существенно уменьшать шаг сетки нет.

2) Второй недостаток заключается в том, что разные материалы могут описываться разными уравнениями.

В настоящей работе предложено обобщение схемы Йи на случай контактной границы. Формально эта схема применима для любого пространственного распределения оптических коэффициентов. Можно утверждать, что она дает хорошие результаты в случае плоской контактной границы, совпадающей с плоскостями узлов конечно-разностной сетки. Эффективность предлагаемого метода в случае произвольной формы контактной границы требует отдельного исследования и далеко не очевидна. Безусловно, подобное усовершенствование не претендует на общие результаты в этой области, но, на наш взгляд, оно достаточно интересно и полезно, например, для моделирования слоистых сред [18].

Для полноты картины заметим, что в случае контактной границы сложной формы используется, например, метод конечных объемов с использованием двух значений электрического поля по разные стороны контактной границы [19 – 21]. Эти методы сложны в реализации (построение неструктурированной сетки уже является отдельной непростой задачей) и требуют неочевидного обобщения на среды с дисперсией. Кроме того, в случае задачи о взаимодействии лазерного импульса с материалами в большей части расчетной области импульс распространяется в среде с относительно плавно меняющимися оптическими свойствами. В этой области использование простейших конечно-разностных сеток выглядит более естественным.

Следующий параграф посвящен краткому описанию классической схемы Йи и её достоинств, её обобщению на случай среды с дисперсией. Затем описываются модификации этой схемы, позволяющие решить три обсуждаемые выше проблемы. Далее приведены результаты расчетов, демонстрирующих эффективность предлагаемых модификаций, и сформулировано заключение.

1. Схема Йи

Схема Йи для простейшего случая уравнений Максвелла в вакууме в стандартных [24] обозначениях

$$c^{-1} \partial E / \partial t = \text{rot } B, \quad (1)$$

$$c^{-1} \partial B / \partial t = -\text{rot } E, \quad (2)$$

$$\text{div} B = 0, \quad (3)$$

$$\text{div} E = 0 \quad (4)$$

строится следующим образом. Разобьем расчетную область на кубические ячейки $x_i \leq x \leq x_{i+1}$, $y_j \leq y \leq y_{j+1}$, $z_k \leq z \leq z_{k+1}$, $x_i = ih$, $y_j = jh$, $z_k = kh$ с ребром h и центрами в полуцелых узлах $x_{i+1/2}$, $y_{j+1/2}$, $z_{k+1/2}$. Будем вычислять компоненты магнитного поля, параллельные ребрам ячеек, в центрах этих ребер в целые моменты времени $t^n = n\tau$. Компоненты электрического поля, перпендикулярные граням ячеек, будем вычислять в центрах этих граней в полуцелые моменты времени $t^{n+1/2} = (n + 1/2)\tau$. Обозначим величины компонент полей в соответствующих узлах сетки обычным образом $B_{xi+1/2,j,k}^n$, $B_{yi,j+1/2,k}^n$, $B_{zi,j,k+1/2}^n$, $E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2}$, $E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}$, $E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2}$. Схема Йи для уравнений (1) – (4) имеет вид

$$\frac{E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2}}{\tau} = \frac{B_{zi,j+1,k+1/2}^n - B_{zi,j,k+1/2}^n}{h} - \frac{B_{yi,j+1/2,k+1}^n - B_{yi,j+1/2,k}^n}{h}, \quad (5)$$

$$\frac{E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n-1/2}}{\tau} = \frac{B_{xi+1/2,j,k+1}^n - B_{xi+1/2,j,k}^n}{h} - \frac{B_{zi+1,j,k+1/2}^n - B_{zi,j,k+1/2}^n}{h}, \quad (6)$$

$$\frac{E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2}}{\tau} = \frac{B_{yi+1,j+1/2,k}^n - B_{yi,j+1/2,k}^n}{h} - \frac{B_{xi+1/2,j+1,k}^n - B_{xi+1/2,j,k}^n}{h}, \quad (7)$$

$$\frac{B_{xi+1/2,j,k}^{n+1} - B_{xi+1/2,j,k}^n}{\tau} = \frac{E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_{yi+1/2,j,k-1/2}^{n+1/2}}{h} - \frac{E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - E_{zi+1/2,j-1/2,k}^{n+1/2}}{h}, \quad (8)$$

$$\frac{B_{yi,j+1/2,k}^{n+1} - B_{yi,j+1/2,k}^n}{\tau} = \frac{E_{xi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - E_{xi-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2}}{h} - \frac{E_{zi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_{zi,j,k+1/2}^{n+1/2}}{h}, \quad (9)$$

$$\frac{B_{zi,j,k+1/2}^{n+1} - B_{zi,j,k+1/2}^n}{\tau} = \frac{E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - E_{xi,j-1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{h} - \frac{E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_{yi-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}}{h}, \quad (10)$$

$$\frac{B_{xi+1/2,j,k}^n - B_{xi-1/2,j,k}^n}{h} + \frac{B_{yi,j+1/2,k}^n - B_{yi,j-1/2,k}^n}{h} + \frac{B_{zi,j,k+1/2}^n - B_{zi,j,k-1/2}^n}{h} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{E_{xi+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{h} + \frac{E_{yi+1/2,j+1,k+1/2}^{n+1/2} - E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}}{h} + \frac{E_{zi+1/2,j+1/2,k+1}^{n+1/2} - E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2}}{h} = 0. \quad (12)$$

Вводя разностные аналоги оператора ротора, уравнения (5) – (10) можно переписать, как

$$\frac{E^{n+1/2} - E^{n-1/2}}{\tau} = \text{rot}_h B^n, \quad \frac{B^{n+1} - B^n}{\tau} = -\text{rot}_h E^{n+1/2}. \quad (13)$$

Схема Йи обладает следующими достоинствами.

1. В этой схеме различные компоненты электрического и магнитного поля вычисляются на сдвинутых на полшага узлах конечно-разностной сетки. Это дает возможность вычислять производные с помощью центральных разностей, используя ближайшие узлы сетки. Схема получается компактной и легко реализуемой.
2. Она имеет 2-й порядок аппроксимации по времени и пространству.
3. Она имеет физически оправданное для нестационарных задач условие устойчивости типа $ct/h \leq 1$.
4. Как и в дифференциальной задаче, амплитуда плоской волны не увеличивается и не уменьшается со временем. Модуль множителя перехода с одного временного слоя на другой равен 1.
5. Имеется разностный аналог закона сохранения энергии.
6. Имеется разностный аналог равенства нулю дивергенции от ротора вектора $\mathbf{i}$, как следствие, $\text{div} \mathbf{B} = 0$.
7. Различные варианты граничных условий на компоненты полей в дифференциальном и конечно-разностном случаях совпадают. Каких-либо дополнительных усилий не требуется. В частности, при моделировании распространения лазерного импульса в некотором объеме достаточно задать тангенциальные электрические поля на входной поверхности, ограничивающей этот объем.

2. Обобщение схемы Йи на случай среды с дисперсией

Для описания сред с частотной дисперсией существует множество моделей. В настоящей работе для краткости ограничимся моделью Друде, в которой учитывается показатель преломления среды n , существование свободных носителей (плазмы) с постоянной плотностью ρ_e , зарядом $-e$, массой m и скоростью v . Допускаются диссипативные эффекты: прямое поглощение энергии электромагнитных волн, например, вследствие фотоионизации, с коэффициентом α и сопротивлением среды, например, вследствие трения свободных зарядов при их движении, с коэффициентом ν . Тогда, вместо уравнения (1), имеем уравнения

$$\partial(n^2 \mathbf{E}) / \partial t = 4\pi e v + c \text{rot } \mathbf{B} - \alpha \mathbf{E}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\left(\frac{e}{m}\right) \mathbf{E} - \nu v. \quad (15)$$

Уравнения (2), (3) остаются прежними. Не представляет труда обобщить излагаемые ниже результаты настоящей работы на более сложную модель Друде–Лоренца [18, 19]. Для целей настоящей работы эти усложнения излишни.

Запишем (2), (14), (15) в более удобном виде. Для этого введем величину $\mathbf{J} = (m/e)v$ и плазменную частоту $\omega_p^2 = 4\pi e^2/m$. Перейдем к комплексным амплитудам, выделив несущую частоту ω : $\mathbf{E} = (\mathbf{E}^C e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^{C*} e^{i\omega t})/2$ (аналогично для $\mathbf{J}$ и $\mathbf{B}$). При этом каких-либо предположений о плавности огибающей или о выделении волнового вектора не делается. Это целесообразно, поскольку во многих задачах время изменения $\mathbf{E}^C$ значительно больше периода колебаний с частотой ω . Уравнения (2), (14), (15) для комплексных амплитуд имеют вид (знак C у векторов для краткости опускаем)

$$\partial(n^2 \mathbf{E}) / \partial t - i\omega n^2 \mathbf{E} = \omega_p^2 \mathbf{J} + c \text{rot } \mathbf{B} - \alpha \mathbf{E}, \quad (16)$$

$$\partial \mathbf{J} / \partial t - i\omega \mathbf{J} = -\mathbf{E} - \nu \mathbf{J}, \quad (17)$$

$$\partial \mathbf{B} / \partial t - i\omega \mathbf{B} = -c \text{rot } \mathbf{E}. \quad (18)$$

Уравнения (16–18) при постоянных коэффициентах имеют решение в виде плоской волны, пропорциональной $e^{-i\Omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ (Ω – отстройка от несущей частоты ω) двух типов. Первый соответствует поперечной волне ($\text{div} \mathbf{E} = 0$) с законом дисперсии

$$k^2 c^2 / (\omega + \Omega)^2 = \varepsilon, \quad \varepsilon = n^2 - \frac{\omega_p^2}{(\omega + \Omega)^2} \cdot \frac{\omega + \Omega}{\omega + \Omega + i\nu} + i \frac{\alpha}{\omega + \Omega}. \quad (19)$$

Диэлектрическую проницаемость ε можно также представить в виде

$$\varepsilon = n^2 - \frac{\omega_p^2}{(\omega + \Omega)^2 + \nu^2} + i \frac{\omega_p^2}{(\omega + \Omega)^2 + \nu^2} \cdot \frac{\nu}{\omega + \Omega} + i \frac{\alpha}{\omega + \Omega}.$$

Второй тип волн соответствует плазменным колебаниям с затуханием. Для дальнейшего изложения он не интересен, и рассматривать его не будем.

Для решения (16–18) успешно применяется схема [25]

$$n^2 \left(\frac{E^{n+1/2} - E^{n-1/2}}{\tau} - i\omega \frac{E^{n+1/2} + E^{n-1/2}}{2} \right) = -\omega_p^2 \frac{J^{n+1/2} + J^{n-1/2}}{2} + c \cdot \text{rot}_h \mathbf{B}^n - \alpha \frac{E^{n+1/2} + E^{n-1/2}}{2}, \quad (20)$$

$$\frac{J^{n+1/2} - J^{n-1/2}}{\tau} - i\omega \frac{J^{n+1/2} + J^{n-1/2}}{2} = -\frac{E^{n+1/2} + E^{n-1/2}}{2} - \nu \frac{J^{n+1/2} + J^{n-1/2}}{2}, \quad (21)$$

$$\frac{B^{n+1} - B^n}{\tau} - i\omega \frac{B^{n+1} + B^n}{2} = -c \cdot \text{rot}_h E^{n+1/2}. \quad (22)$$

Эта схема обладает всеми достоинствами схемы Йи, перечисленными выше. Только утверждение 4) выполняется, разумеется, в отсутствие диссипативных эффектов.

3. Решение проблемы 1 (изотропность конечно-разностной схемы)

Чтобы решить проблему с изотропией, достаточно в (13), (20), (22), вместо $\text{rot}_h E$ и $\text{rot}_h B$, взять $\text{rot}_h \tilde{E}$ и $\text{rot}_h \tilde{B}$, где дискретные функции $\tilde{E}$ и $\tilde{B}$ определяются как

$$\tilde{E}_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} = E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} + \sigma \left(E_{xi+1,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - 2E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} + E_{xi-1,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} \right), \quad (23)$$

$$\tilde{E}_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} = E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} + \sigma \left(E_{yi+1/2,j+1,k+1/2}^{n+1/2} - 2E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} + E_{yi+1/2,j-1,k+1/2}^{n+1/2} \right), \quad (24)$$

$$\tilde{E}_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} = E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} + \sigma \left(E_{zi+1/2,j+1/2,k+1}^{n+1/2} - 2E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} + E_{zi+1/2,j+1/2,k-1}^{n+1/2} \right), \quad (25)$$

$$\tilde{B}_{xi+1/2,j,k}^n = B_{xi+1/2,j,k}^n + \sigma \left(B_{xi+3/2,j,k}^n - 2B_{xi+1/2,j,k}^n + B_{xi-1/2,j,k}^n \right), \quad (26)$$

$$\tilde{B}_{yi,j+1/2,k}^n = B_{yi,j+1/2,k}^n + \sigma \left(B_{yi,j+3/2,k}^n - 2B_{yi,j+1/2,k}^n + B_{yi,j-1/2,k}^n \right), \quad (27)$$

$$\tilde{B}_{zi,j,k+1/2}^n = B_{zi,j,k+1/2}^n + \sigma \left(B_{zi,j,k+3/2}^n - 2B_{zi,j,k+1/2}^n + B_{zi,j,k-1/2}^n \right). \quad (28)$$

Приблизительно (23 – 28) можно записать в виде $\tilde{E}_\alpha \approx E_\alpha + \sigma h^2 \partial^2 E_\alpha / \partial \alpha^2$, $\tilde{B}_\alpha \approx B_\alpha + \sigma h^2 \partial^2 B_\alpha / \partial \alpha^2$, где $\alpha = x, y, z$. Везде в этой работе конечно-разностная сетка полагается равномерной.

Покажем, что при $\sigma = 1/12$ аналог дисперсионного уравнения (19) в случае схемы Йи, использующей $\text{rot}_h \tilde{E}$ и $\text{rot}_h \tilde{B}$, обладает лучшими с точки зрения изотропии свойствами, чем исходная схема Йи (5 – 13), (20 – 22). Для этого рассмотрим дискретный аналог плоской волны

$$\begin{aligned} B_{xi+\frac{1}{2},j,k}^n &= B_{x0} \exp \left(-i\Omega n\tau + i\bar{q}_x \left(i + \frac{1}{2} \right) h + i\bar{q}_y j h + i\bar{q}_z k h \right), \\ B_{yi,j+\frac{1}{2},k}^n &= B_{y0} \exp \left(-i\Omega n\tau + i\bar{q}_x i h + i\bar{q}_y \left(j + \frac{1}{2} \right) h + i\bar{q}_z k h \right), \\ B_{zi,j,k+\frac{1}{2}}^n &= B_{z0} \exp \left(-i\Omega n\tau + i\bar{q}_x i h + i\bar{q}_y j h + i\bar{q}_z \left(k + \frac{1}{2} \right) h \right), \\ E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} &= E_{x0} \exp \left(-i\Omega (n+1/2)\tau + i\bar{q}_x i h + i\bar{q}_y (j+1/2)h + i\bar{q}_z (k+1/2)h \right), \\ E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} &= E_{y0} \exp \left(-i\Omega (n+1/2)\tau + i\bar{q}_x (i+1/2)h + i\bar{q}_y j h + i\bar{q}_z (k+1/2)h \right), \\ E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} &= E_{z0} \exp \left(-i\Omega (n+1/2)\tau + i\bar{q}_x (i+1/2)h + i\bar{q}_y (j+1/2)h + i\bar{q}_z k h \right). \end{aligned}$$

Здесь i – мнимая единица. После стандартных выкладок для схемы Йи получаем

$$\begin{aligned} (\bar{\omega} + \bar{\Omega})^2 \varepsilon(\bar{\omega} + \bar{\Omega}) &= (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) c^2, \\ K_{x,y,z}^2 &= \frac{\sin^2 \left(\frac{q_{x,y,z} h}{2} \right)}{(h/2)^2} \approx q_{x,y,z}^2 \left(1 - \frac{h^2 q_{x,y,z}^2}{12} \right), \\ \bar{\omega} &= \omega \cos(\Omega \tau / 2), \quad \bar{\Omega} = \sin(\Omega \tau / 2) / (\tau / 2). \end{aligned} \quad (29)$$

Правая часть (29) в пределе малых h имеет вид

$$q^2 c^2 - \frac{c^2 h^2}{12} (q_x^4 + q_y^4 + q_z^4) + O(h^4),$$

где $q^2 = q_x^2 + q_y^2 + q_z^2$. Поскольку $q_x^4 + q_y^4 + q_z^4$ не является функцией от q^2 , отличия от изотропии появляются уже во 2-м порядке по h .

Дисперсионное уравнение для предлагаемой схемы с $\tilde{E}$ и $\tilde{B}$ имеет вид

$$\begin{aligned} (\bar{\omega} + \bar{\Omega})^2 \varepsilon(\bar{\omega} + \bar{\Omega}) &= ((1 - \sigma h^2 K_x^2)(1 - \sigma h^2 K_y^2) K_x^2 + (1 - \sigma h^2 K_z^2)(1 - \sigma h^2 K_x^2) K_y^2 + \\ &+ (1 - \sigma h^2 K_x^2)(1 - \sigma h^2 K_y^2) K_z^2) c^2, \end{aligned}$$

или при $\sigma = 1/12$ в пределе малых h

$$(\bar{\omega} + \bar{\Omega})^2 \varepsilon(\bar{\omega} + \bar{\Omega}) = q^2 c^2 - (q^2)^2 c^2 h^2 / 12 + O(h^4). \quad (30)$$

Таким образом, отклонения от изотропии появляются только в 4-м порядке по h . При этом дисперсионное уравнение по-прежнему аппроксимируется со 2-м порядком по h .

Для иллюстрации возможностей новой схемы приведем результаты расчета распространения расходящейся двумерной аксиально симметричной волны в вакууме, инициируемой начальными условиями для комплексных амплитуд

$$\begin{aligned} E_x &= (zr/w^2) \exp(-(r/w)^2 + ik_0 r), \quad E_z = -(xr/w^2) \exp(-(r/w)^2 + ik_0 r), \\ B_y &= (r/w)^2 \exp(-(r/w)^2 + ik_0 r), \quad E_y = 0, \quad B_x = B_z = 0, \\ k_0 &= 2\pi/\lambda, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}. \end{aligned}$$

Длина волны λ в расчетах равнялась 0,8 мкм, а ширина импульса – 2 мкм, шаг пространственной конечно-разностной сетки $h = 0,1$ мкм, число Куранта $\sigma\tau/h = 0,4$. На рис. 1 приведены распределения величины $|E|^2$

(интенсивности) в момент времени 150 фс, а также распределение реальной части B_y вдоль оси и вдоль линии $x = z$ (по диагонали). Сравнение результатов расчетов по схеме Йи и предлагаемой изотропной модификации схемы Йи однозначно говорит о преимуществе последней. Аналогичные результаты получаются в случае более сложного закона дисперсии при ω_p , α , $\nu \neq 0$.

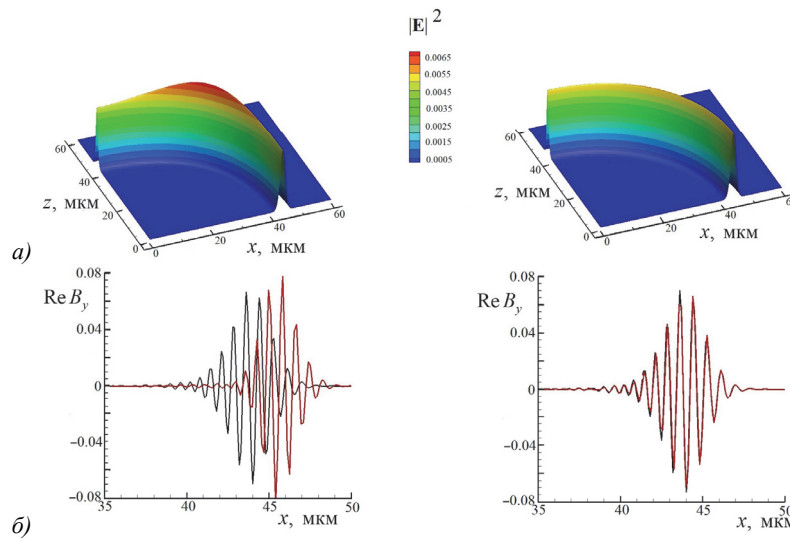


Рис. 1. Распределение интенсивности цилиндрической волны (а) и распределение $Re B_y$ (б) на оси (черная кривая) и вдоль диагонали (красная кривая). Слева – расчет по исходной схеме Йи, справа – по изотропной схеме с $\tilde{E}$, $\tilde{B}$

Предлагаемая схема с $\tilde{E}$ и $\tilde{B}$ обладает всеми достоинствами исходной схемы Йи, за исключением того, что

1. При вычислении разностных аналогов оператора ротора используются узлы, отстоящие на $(\sqrt{5}/2)h \approx h$, а не $h/2$ от точки вычисления оператора (в схемах 4-го порядка это расстояние равно $3h/2$)
2. Постановка граничных условий оказывается незначительно сложнее, чем в схеме Йи (см. ниже).

4. Граничные условия для модифицированной схемы Йи

Возможны различные варианты постановки граничных условий. В рассмотренном выше примере (рис. 1) распределение полей обладает симметрией, позволяющей легко реализовывать граничные условия для любых схем. В задачах о взаимодействии лазерного импульса с материалами часто полагается, что импульс распространяется вдоль оси z в положительном направлении, а некоторая плоскость $z = z_b$ является границей. На ней задаются тангенциальные компоненты электрического поля E_x, E_y . Узлы конечно-разностной сетки в этом случае удобно расположить так, чтобы эти компоненты поля вычислялись на границе, т.е. $z_{k+1/2}$ при некотором $k = k_b$ равнялось z_b . В случае схемы Йи знание E_x, E_y во всех узлах расчетной области, включая узлы на границе, и остальных компонент электромагнитного поля только во внутренних узлах сетки достаточно для определения значений поля в следующий момент времени. При $\sigma \neq 0$ вычисление B_x, B_y в ближайшей к границе точке $k_b + 1$ требует знания $\tilde{E}_{zi+1/2, j+1/2, k_b+1}$, которое, в свою очередь, требует знания $E_{zi+1/2, j+1/2, k_b}$ в фиктивной точке за пределами расчетной области на расстоянии $h/2$ от границы. Эту величину можно вычислить из следующих соображений. Как правило, граница расчетной области в этих задачах не является реальной границей. Полагается, что через данное сечение проходит поперечная волна от удаленного источника, компоненты полей которой в этом сечении известны. Соответственно, на границе выполняется уравнение $\text{div} E = 0$, конечно-разностный аналог которого

$$\frac{E_{zi+1/2, j+1/2, k_b+1} - E_{zi+1/2, j+1/2, k_b}}{h} + \frac{E_{xi+1, j+1/2, k_b+1/2} - E_{xi, j+1/2, k_b+1/2}}{h} + \frac{E_{yi+1/2, j+1, k_b+1/2} - E_{yi+1/2, j, k_b+1/2}}{h} = 0$$

позволяет вычислить искомую величину $E_{zi+1/2, j+1/2, k_b}$, т.к. E_x, E_y известны из граничных условий, $E_{zi+1/2, j+1/2, k_b+1}$ вычисляется в узле внутри расчетной области и определяется из уравнений.

Заметим, что многие варианты неотражающих граничных условий (PML-слоев), использующих различного типа дополнительную диссипацию возле границы, могут непосредственно применяться для предлагаемой схемы. Кроме того, интересующие нас фемтосекундные импульсы настолько коротки, что ко времени, когда импульс доходит до границы, все интересные процессы уже завершаются и требования к эффективности PML-слоев невелики.

5. Решение проблемы 2 (положение фокуса)

Для повышения точности вычисления расположения фокуса конечно-разностной схемой в расчетах перепишем дисперсионное уравнение для изотропного варианта схемы Йи ((30) при $\sigma = 1/12$) в пределе малых h в виде

$$(\bar{\omega} + \bar{\Omega})^2 \varepsilon(\bar{\omega} + \bar{\Omega}) = q^2 c^2 (1 - q^2 h^2 / 12) + O(h^4). \quad (31)$$

Обсуждаемую проблему будем решать с учетом того, что в реальных задачах амплитуда поля изменяется намного медленнее периода волны, т.е. $\Omega \ll \omega$. Также полагается, что реальная часть диэлектрической проницаемости существенно больше ее мнимой части (случай диэлектрика, стекла). В противоположном случае (металл) обсуждаемая проблема с расположением фокуса в расчетах отсутствует, т.к. волна быстро затухает на небольших расстояниях. В этих предположениях $q^2 \approx q_\omega^2$, где q_ω^2 определяется из уравнения $\omega^2 \text{Re}(\varepsilon(\omega)) = q_\omega^2 c^2$. Если заменить в (31) $\varepsilon(\Omega + \omega)$ на $\bar{\varepsilon}(\Omega + \omega) = \varepsilon(\Omega + \omega)(1 - h^2 q_\omega^2 / 12)$, то можно уменьшить различия между точным дисперсионным уравнением и его конечно-разностным аналогом до величины порядка $\varepsilon(\omega)(q^2 - q_\omega^2)h^2 / 12 \ll \varepsilon(\omega)q^2 h^2 / 12$.

Замена $\varepsilon \rightarrow \bar{\varepsilon}$ осуществляется простым умножением коэффициентов n^2 , ω_p^2 , α на число $1 - h^2 q_\omega^2 / 12$. При этом коэффициент ν остается прежним. Ниже эти преобразованные коэффициенты будем обозначать как $\bar{n}^2$, $\bar{\omega}_p^2$, $\bar{\alpha}$. Разностные уравнения (20), (22) примут вид

$$\bar{n}^2 \left(\frac{E^{n+1/2} - E^{n-1/2}}{\tau} - i\omega \frac{E^{n+1/2} + E^{n-1/2}}{2} \right) = -\bar{\omega}_p^2 \frac{J^{n+1/2} + J^{n-1/2}}{2} + c \cdot \text{rot}_h \tilde{B}^n - \bar{\alpha} \frac{E^{n+1/2} + E^{n-1/2}}{2}, \quad (32)$$

$$\frac{B^{n+1} - B^n}{\tau} - i\omega \frac{B^{n+1} + B^n}{2} = -c \cdot \text{rot}_h \tilde{E}^{n+1/2}. \quad (33)$$

Для тока по-прежнему имеем уравнение (21). Для $\tilde{E}$, $\tilde{B}$ имеем (23 – 28) при $\sigma = 1/12$.

Подчеркнем, что порядок аппроксимации по-прежнему остается вторым. Но количественно погрешность значительно уменьшается. В качестве примера рассмотрим двумерную плоскую (x, z координаты) задачу о фокусировке волны в линейном случае вглубь стекла. Предполагается, что волна имеет поляризацию, в которой $E_y = B_x = B_z = 0$. Она инициируется с помощью граничного условия при $z = 0$

$$E_x(z = 0) = E_0 \exp(-t^2 / t_L^2 - x^2 / w^2 - ik_0 x^2 / (2f)),$$

где $k_0 = (\omega/c)\sqrt{\text{Re}(\varepsilon(\omega))}$, $\omega = 2\pi c/\lambda$, $f = d(1 + z_f^2/d^2)$, $w = w_f \sqrt{1 + d^2/z_f^2}$, $z_f = k_0 w_f^2 / 2$. На остальных границах задаются простейшие поглощающие граничные условия, как в [2, 25]. Их влияние на решение мало. Параметры расчета были следующими: перетяжка $w_f = 1,27$ мкм, длительность импульса $t_L = 40$ фс, расстояние до фокуса $d = 60$ мкм, длина волны в вакууме $\lambda = 0,8$ мкм, $n = 1,45$ (стекло), $\omega_p^2 = 0,1\omega^2$, $\alpha = 0,001$, $\nu = 0,002$.

Для расчетов использовалась стандартная схема Йи и изотропная схема, точнее передающая положение фокуса (ИСТФ) (21), (23 – 28), (32), (33) с $\sigma = 1/12$. На рис. 2а изображены изолинии интенсивности $|E|^2$ в момент времени, когда ее максимум находится на расстоянии 10 мкм от фокуса. Видно, что при грубых шагах сетки ИСТФ не только практически правильно передает положение максимума, но и дает распределение, более близкое к точному, чем исходная схема Йи. На рис. 2б изображена зависимость $\max|E|^2$ от времени. Интересная особенность схемы Йи состоит в том, что эта зависимость передается практически точно, даже на грубой сетке. ИСТФ передает эту зависимость с точностью $O(h^2)$. Однако если рассматривать зависимость $\max|E|^2$ от координаты z , в которой этот максимум достигается (рис. 2в), то схема Йи и ИСТФ меняются местами – точность последней намного лучше. Как упоминалось выше, для задач моделирования взаимодействия лазерных импульсов с прозрачными материалами точность в позиционировании волны намного важнее точности зависимостей от времени.

6. Решение проблемы 3 (контактная граница)

Если среда, в которой распространяется электромагнитная волна, состоит из материалов с различными оптическими свойствами, то определенные компоненты электрического поля терпят разрыв на контактной границе между этими материалами. Соответственно, будем использовать 2 набора компонент электрического поля $E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}$, $E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}$, $E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{(\pm)n+1/2}$. '+' соответствует $E_x(x_i + \varepsilon, y_{j+1/2}, z_{k+1/2})$ и вычисляется по уравнениям, описывающим материал, находящийся справа от поверхности $x = x_i$. '-' соответствует $E_x(x_i - \varepsilon, y_{j+1/2}, z_{k+1/2})$ и вычисляется по уравнениям, описывающим материал, находящийся слева от $x = x_i$. Предполагается, что ячейка пространственной сетки с центром в $x_{i+1/2}, y_{j+1/2}, z_{k+1/2}$ занята только одним материалом. Положительное число $\varepsilon \rightarrow 0$. Аналогичные формулы используются для $E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}$, $E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{(\pm)n+1/2}$. Таким образом, разностные уравнения для x -компоненты электрического поля в случае области, включающей материалы с различными оптическими свойствами для модели Друде (16 – 18), имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\bar{n}^2}{c} \left(\frac{E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} - E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{\tau} - i\omega \frac{E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} \right) = & \bar{\omega}_p^2 \frac{J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} + \\ & + \frac{\bar{B}_{zi,j+1,k+1/2}^{n+1} - \bar{B}_{zi,j,k+1/2}^{n+1}}{h} - \frac{\bar{B}_{yi,j+1/2,k+1}^{n+1} - \bar{B}_{yi,j+1/2,k}^{n+1}}{h} - \bar{\alpha} \frac{E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2}, \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} & \frac{J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} - J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} - i\omega \frac{J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} = \\ & = - \frac{\tau}{2} \frac{E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} - v_{i\pm 1/2,j+1/2,k+1/2} \frac{J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + J_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2}, \\ & \frac{\tilde{n}_{i+1/2,j\pm 1/2,k+1/2}^2}{c} \left(\frac{E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} - E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{\tau} - i\omega \frac{E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} \right) = \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} & = \tilde{\omega}_{pi+1/2,j\pm 1/2,k+1/2}^2 \frac{J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} + \frac{h}{2} \frac{\tilde{B}_{xi+1/2,j,k+1}^{n+1} - \tilde{B}_{xi+1/2,j,k}^{n+1}}{2} - \\ & - \frac{\tilde{B}_{zi+1/2,j,k+1/2}^{n+1} - \tilde{B}_{zi,j,k+1/2}^{n+1}}{h} - \tilde{\alpha}_{i+1/2,j\pm 1/2,k+1/2} \frac{E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2}, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} & \frac{J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} - J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} - i\omega \frac{J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} = \\ & = - \frac{\tau}{2} \frac{E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2} - v_{i+1/2,j\pm 1/2,k+1/2} \frac{J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+3/2} + J_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(\pm)n+1/2}}{2}. \end{aligned} \quad (37)$$

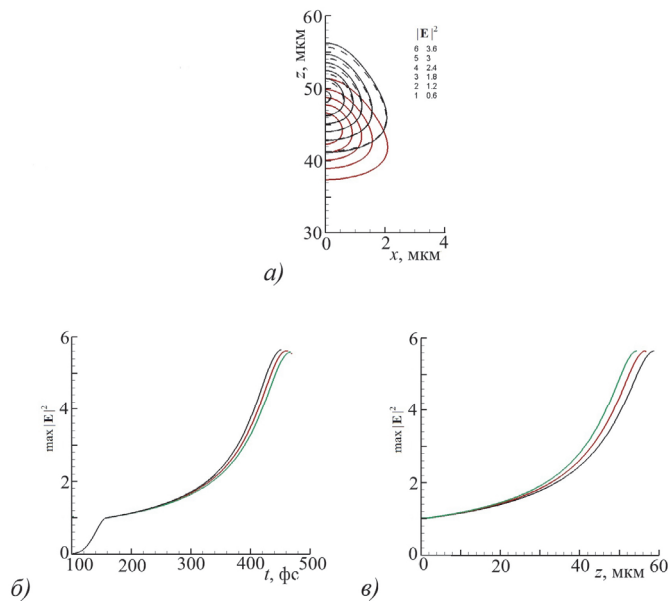


Рис. 2. а) Изолинии $|E|^2$ вблизи фокуса при $h, \tau \rightarrow 0$ (черные линии), в случае ИСТФ при $h = 0,07$ мкм (черные штриховые линии) и схемы Йи при $h = 0,07$ мкм (красные линии); б) зависимость $\max |E|^2$ от времени в случае схемы Йи (черная линия, близкая к точному решению) и ИСТФ при $h = 0,07$ мкм (зеленая линия) и $h = 0,05$ мкм (красная линия); в) зависимость $\max |E|^2$ от координаты z положения $\max |E|^2$ в случае ИСТФ (черная линия, близкая к точному решению) и схема Йи при $h = 0,07$ мкм (зеленая линия) и $h = 0,05$ мкм (красная линия)

Уравнения для z -компоненты электрического поля записываются аналогично. Для компонент $\tilde{B}$ используются формулы (26 – 28). Для вычисления компонент магнитных полей на следующем шаге по времени будем использовать разностные уравнения (33), в которых под $\tilde{E}$ подразумеваются величины

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{xi,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} &= \left(E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(+n+1/2)} + E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(-n+1/2)} \right) / 2 + \\ &+ \sigma \left(E_{xi+1/2,j+1/2,k+1/2}^{(-n+1/2)} - (E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(+n+1/2)} + E_{xi,j+1/2,k+1/2}^{(-n+1/2)}) + E_{xi-1/2,j+1/2,k+1/2}^{(+n+1/2)} \right), \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{yi+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} &= \left(E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(+n+1/2)} + E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(-n+1/2)} \right) / 2 + \\ &+ \sigma \left(E_{yi+1/2,j+1/2,k+1/2}^{(-n+1/2)} - (E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(+n+1/2)} + E_{yi+1/2,j,k+1/2}^{(-n+1/2)}) + E_{yi+1/2,j-1/2,k+1/2}^{(+n+1/2)} \right), \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{zi+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} &= \left(E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{(+n+1/2)} + E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{(-n+1/2)} \right) / 2 + \\ &+ \sigma \left(E_{zi+1/2,j+1/2,k+1}^{(-n+1/2)} - (E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{(+n+1/2)} + E_{zi+1/2,j+1/2,k}^{(-n+1/2)}) + E_{zi+1/2,j+1/2,k-1}^{(+n+1/2)} \right). \end{aligned} \quad (40)$$

Схема (26 – 28), (33 – 40) обладает разностным законом сохранения энергии. Причем при достаточно малых числах Куранта $\sigma \tau / h$ плотность энергии будет положительно определена, что обеспечивает устойчивость схемы [26]. Приводить выкладки в настоящей работе не будем по причине их громоздкости.

Заметим, что если в начальный момент времени компонента с (+) равна компоненте с (–) и соседние ячейки конечно-разностной сетки имеют одни и те же оптические свойства, то компонента с (+) будет равна

компоненте с $(-)$ и в последующие моменты времени. Таким образом, схема при $\sigma = 1/12$ в случае однородной среды переходит в ИСТФ. Это позволяет использовать компоненты с $(\pm)$ только около контактной границы и экономить ресурсы задачи.

Рассмотрим аппроксимационные свойства схемы (33 – 40). Легко видеть, что в узлах вне контактной границы она обладает вторым порядком аппроксимации по пространству и времени. Как уже отмечалось во Введении, хотя схема (33 – 40) формально справедлива для любого распределения материалов в расчетной области, она обладает хорошими свойствами, только если контактная граница является плоской и содержит узлы, в которых вычисляется компонента поля, терпящая разрыв. Пусть контактная граница является плоскостью $z = z_{int} = z_k$, $k = k_{int}$. В этом случае члены с σ для z -компоненты электрического поля по сути являются разностью производных $\partial E_z / \partial z$ с 2 сторон от границы. Поскольку в задачах о распространении поперечных волн вне контактной границы $\text{div} \mathbf{E} = 0$ и $\text{div} \mathbf{B} = 0$ и тангенциальные компоненты полей, как и их производные, вдоль границы непрерывны, то $\partial E_z / \partial z$ и $\partial B_z / \partial z$ непрерывны при переходе через контактную границу. Соответственно, члены с σ в (33 – 40) имеют порядок $O(h^2)$. Поэтому выясним порядок аппроксимации (33 – 40) на контактной границе $z = z_{int}$ в случае $\sigma = 0$. Проблемным является уравнение для тангенциальных магнитных полей (33) в точках контактной границы, т.к. производные $\partial E_x / \partial z$, $\partial E_y / \partial z$ терпят в них разрыв. Очевидно, что остальные уравнения в других узлах аппроксимируют исходные уравнения со вторым порядком. Уравнения (33) для, например, y -компоненты можно получить из следующих соображений. С учетом непрерывности B_y на контактной границе имеем

$$\frac{1}{c} \left(\frac{\partial B_y(z=z_{int})}{\partial t} - i\omega B_y(z = z_{int}) \right) = \frac{\partial E_z(z=z_{int}+\varepsilon)}{\partial x} - \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right)_{z=z_{int}+\varepsilon}, \quad (41)$$

$$\frac{1}{c} \left(\frac{\partial B_y(z=z_{int})}{\partial t} - i\omega B_y(z = z_{int}) \right) = \frac{\partial E_z(z=z_{int}-\varepsilon)}{\partial x} - \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right)_{z=z_{int}-\varepsilon}. \quad (42)$$

Здесь $0 < \varepsilon \rightarrow 0$.

Аппроксимируем левые части (41), (42) со вторым порядком, как в (33), а $\partial E_z(z = z_{int} \pm \varepsilon, x) / \partial x$ в правых частях – как $(E_{zi+1/2,j+1/2,k_{int}}^{(\pm)} - E_{zi-1/2,j+1/2,k_{int}}^{(\pm)})/h$. Обозначим E_x на границе через $E_{xi,j+1/2,k_{int}}$ и аппроксимируем $\left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right)_{z=z_{int}+\varepsilon}$ и $\left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right)_{z=z_{int}-\varepsilon}$ с учетом непрерывности E_x как

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right)_{z=z_{int}+\varepsilon} &= \frac{E_{xi,j+1/2,k_{int}+1/2} - E_{xi,j+1/2,k_{int}}}{h/2}, \\ \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right)_{z=z_{int}-\varepsilon} &= \frac{E_{xi,j+1/2,k_{int}} - E_{xi,j+1/2,k_{int}-1/2}}{h/2}. \end{aligned} \quad (43)$$

Складывая (41), (42) с учетом сказанного, получаем (33) для B_y . Эта аппроксимация имеет только первый порядок по h , т.к. $\partial B_y / \partial z$ разрывное. Попытка показать, что (33) для y - (и аналогично для x -компонент) имеет место 2-й порядок аппроксимации по h за счет связей между производными в решении дифференциальных уравнений, не удалась. Заметим, что соотношения (41 – 43) позволяют вычислить E_x на контактной границе $\equiv E_{xi,j+1/2,k_{int}}$ с погрешностью $O(h^2)$. Приведенные ниже примеры говорят о том, что в случае рассматриваемой здесь плоской контактной границы разностные уравнения (33 – 40) имеют второй порядок сходимости по шагу h .

Пример 1. Падение плоской волны на контактную границу $z = 0$. Для краткости рассмотрим двумерную (x, z) задачу с частотой волны, совпадающей с несущей частотой ω и поляризацией с E_x , E_z , B_y . Эта поляризация содержит наиболее проблематичную разрывную компоненту E_z . Решение этой задачи в комплексных амплитудах (множитель $e^{-i\omega t}$ отсутствует) имеет вид [24]

$$\begin{aligned} E_x(z < 0) &= E_{x0} e^{ik_x x + ik_{z1} z} + E_{x1} e^{ik_x x - ik_{z1} z}, \quad E_x(z > z_{int}) = E_{x2} e^{ik_x x + ik_{z2} z}, \\ E_{x0} + E_{x1} &= E_{x2}, \\ B_y(z < z_{int}) &= B_{y0} e^{ik_x x + ik_{z1} z} + B_{y1} e^{ik_x x - ik_{z1} z}, \quad B_y(z > 0) = B_{y2} e^{ik_x x + ik_{z2} z}, \\ B_{y0} + B_{y1} &= B_{y2}, \\ E_z(z < 0) &= E_{z0} e^{ik_x x + ik_{z1} z} + E_{z1} e^{ik_x x - ik_{z1} z}, \quad E_z(z > 0) = E_{z2} e^{ik_x x + ik_{z2} z}. \end{aligned}$$

Здесь индекс внизу '0', '1' и '2' относится к падающей, отраженной и прошедшей волнам. Волновые вектора по z определяются из формул $(k_x^2 + k_{z1,2}^2)c^2/\omega^2 = \varepsilon_{1,2}$, где ε_1 и ε_2 – диэлектрическая проницаемость на частоте ω , вычисленная по параметрам среды в области $z < 0$ и $z > 0$ соответственно. Задавая ω , k_x , E_{x0} и используя уравнения Максвелла и условия непрерывности тангенциальных компонент полей, можно вычислить $k_{z1,2}$, $E_{x1,2}$, $E_{z1,2,3}$, $B_{y1,2,3}$. Решим эту задачу, используя следующие варианты схем.

Схема 1. Уравнения (26 – 28), (33 – 40) с $\sigma = 1/12$.

Схема 2. Схема 1, в которой $\sigma = 0$ и вместо $\bar{n}^2$, $\bar{\omega}_p^2$, $\bar{\alpha}$ взяты исходные величины n^2 , ω_p^2 , α .

Схема 3. Схема Йи, в которой при вычислении $E_{zi+1/2,j+1/2,k=0}$ используются оптические коэффициенты из области $z > 0$, дающие диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_* = \varepsilon_2$.

Схема 4. Схема Йи, в которой при вычислении $E_{zi+1/2,j+1/2,k=0}$ используются оптические коэффициенты из области $z < 0$, дающие диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_* = \varepsilon_1$.

Схема 5. Схема Йи, в которой при вычислении $E_{zi+1/2,j+1/2,k=0}$ используются оптические коэффициенты, дающие диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_* = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$.

Схема 6. Схема Йи, в которой при вычислении $E_{zi+1/2,j+1/2,k=0}$ используются оптические коэффициенты, дающие диэлектрическую проницаемость $1/\varepsilon_* = (1/\varepsilon_1 + 1/\varepsilon_2)/2$.

Для схем 1 и 2 разностное решение ищется в виде

$$E_{xi,k+\frac{1}{2}} = e^{ik_x h i} \begin{cases} E_{x0} e^{iq_{z1} h (k+\frac{1}{2})} + E_{x1} e^{-iq_{z1} h (k+\frac{1}{2})}, & k \leq -1 \\ E_{x2} e^{iq_{z2} h (k+\frac{1}{2})}, & k \geq 0 \end{cases}, \quad (44)$$

$$B_{yi,k} = e^{ik_x h i} \begin{cases} B_0 e^{iq_{z1} h k} + B_1 e^{-iq_{z1} h k}, & k \leq 0 \\ B_2 e^{iq_{z2} h k}, & k \geq 0, B_2 = B_0 + B_1 \end{cases}, \quad (45)$$

$$E_{zi+\frac{1}{2},k}^{(-)} = e^{ik_x h (i+\frac{1}{2})} (E_{z0} e^{iq_{z1} h k} + E_{z1} e^{-iq_{z1} h k}), \quad k \leq 0, \quad (46)$$

$$E_{zi+\frac{1}{2},k}^{(+)} = e^{ik_x h (i+\frac{1}{2})} E_{z2} e^{iq_{z2} h k}, \quad k \geq 0, \quad (47)$$

$$E_{zi+\frac{1}{2},k}^{(-)} = E_{zi+\frac{1}{2},k}^{(+)}, \quad k \geq 1, \quad (48)$$

$$E_{zi+\frac{1}{2},k}^{(+)} = E_{zi+\frac{1}{2},k}^{(-)}, \quad k \leq -1, \quad (49)$$

$$\tilde{E}_{zi+\frac{1}{2},k} = e^{ik_x h (i+\frac{1}{2})} (1 - \sigma h^2 K_{z2}^2) E_{z2} e^{iq_{z2} h k}, \quad k \geq 1, \quad (50)$$

$$\tilde{E}_{zi+\frac{1}{2},k} = e^{ik_x h (i+\frac{1}{2})} \left(\frac{E_{z2} + E_{z0} + E_{z1}}{2} + \sigma (E_{z2} (e^{iq_{z2} h} - 1) + E_{z0} (e^{-iq_{z1} h} - 1) + E_{z1} (e^{iq_{z1} h} - 1)) \right), \quad k = 0, \quad (51)$$

$$\tilde{E}_{zi+1/2,k} = e^{ik_x h (i+\frac{1}{2})} (1 - \sigma h^2 K_{z1}^2) (E_{z0} e^{iq_{z1} h k} + E_{z1} e^{-iq_{z1} h k}), \quad k \leq -1. \quad (52)$$

Чтобы отличить мнимую единицу от индекса, она обозначена как $\bar{i}$. Как правило, в задачах падающая волна инициируется заданием на границе $z = \text{const}$ величин, соответствующих точным значениям. Поэтому в качестве конечно-разностного аналога волнового вектора по x взято точное значение k_x .

Несложные, но громоздкие выкладки по аналогии с аналитическим решением этой задачи показывают, что, за исключением условия непрерывности тангенциального электрического поля $E_{x0} + E_{x1} = E_{x2}$, все соотношения между амплитудами компонент полей соответствуют аналитическим соотношениям со 2-м порядком точности. Уравнения для $q_{z1,2}$ имеют вид $\omega^2 \varepsilon_{1,2}(\omega) = ((1 - \sigma h^2 K_{z1,2}^2) K_x^2 + (1 - \sigma h^2 K_x^2) K_{z1,2}^2) c^2$, $K_x^2 = (h/2)^{-2} \sin^2(k_x h/2)$, $K_{z1,2}^2 = (h/2)^{-2} \sin^2(q_{z1,2} h/2)$. В случае схемы 1 конечно-разностные аналоги волнового вектора $q_{z1,2}$ по z равны точным значениям с погрешностью $O(h^4)$, а в случае схемы 2 – с погрешностью $O(h^2)$.

Разностный аналог условия непрерывности x -компоненты электрического поля $E_{x0} + E_{x1} = E_{x2}$ получается подстановкой (44 – 52) в разностное уравнение (33) для B_y при $k = 0$ (на контактной границе). Это дает

$$\frac{\omega}{c} B_2 = \frac{\omega}{c} (B_0 + B_1) = (1 - \sigma h^2 K_x^2) \frac{E_{x2} e^{iq_{z2} h/2} - E_{x0} e^{-iq_{z1} h/2} - E_{x1} e^{iq_{z1} h/2}}{ih} - K_x \left(\frac{E_{z2} + E_{z0} + E_{z1}}{2} + \sigma (E_{z2} e^{iq_{z2} h} - (E_{z2} + E_{z0} + E_{z1}) + E_{z0} e^{-iq_{z1} h} + E_{z1} e^{iq_{z1} h}) \right).$$

Из этого равенства, используя разложения в ряд Тейлора при малом h и учитывая соотношения, следующие из других конечно-разностных уравнений, можно получить, что $E_{x2} - E_{x0} - E_{x1} = O(h^2)$.

В случае схем 3 – 6 выражение для E_z следует брать в виде

$$E_{zi+1/2,k} = e^{ik_x h (i+1/2)} \begin{cases} E_{z0} e^{iq_{z1} h k} + E_{z1} e^{-iq_{z1} h k}, & k < 0 \\ E_{z*}, & k = 0 \\ E_{z2} e^{iq_{z2} h k}, & k > 0 \end{cases}.$$

Существует дополнительное уравнение $\frac{\omega \varepsilon_*}{c} E_{z*} = -K_x B_2$, а уравнение (33) на контактной границе дает соотношение

$$\frac{\omega}{c} B_2 = \frac{\omega}{c} (B_0 + B_1) = \frac{E_{x2} e^{iq_{z2} h/2} - E_{x0} e^{-iq_{z1} h/2} - E_{x1} e^{iq_{z1} h/2}}{ih} - K_x E_{z*}.$$

Приведем результаты решения этой задачи без деталей громоздкого анализа.

1. Комплексные амплитуды прошедших и отраженных волн в случае схем 3 и 4 отличаются друг от друга комплексным сопряжением. Комплексные амплитуды схем 2 и 6 совпадают, но в случае схемы 2 на контактной границе имеется два значения E_z^+ и E_z^- в соответствии с разрывом E_z , а в случае схемы 6 используется одно некоторое среднее E_{z*} .

2. Модули комплексных амплитуд различных компонент прошедших и отраженных волн передаются всеми схемами с погрешностью $O(h^2)$ и не сильно отличаются друг от друга численно. Однако фаза комплексных амплитуд схемами 1, 2, 6 передается точно, а схемами 3, 4, 5 – с погрешностью $O(h)$. В случае многих волн это может очень плохо сказаться на качестве численного решения вследствие неправильной передачи интерференции.

3. В реальных 2-мерных расчетах важнейшей величиной, определяющей нелинейные эффекты, является квадрат модуля электрического поля. Обычно он вычисляется в центре ячеек сетки, например, по формуле

$$|E|_{i+1/2,k+1/2}^2 = \frac{|E_{zi+1/2,k}^{(+)}|^2 + |E_{zi+1/2,k+1}^{(-)}|^2}{2} + \frac{|E_{xi,k+1/2}|^2 + |E_{xi+1,k+1/2}|^2}{2}.$$

В силу того, что E_z на контактной границе терпит разрыв, а в схемах 3 – 6 оно принимает некоторое среднее значение $E_{z1} + E_{z0} \leq E_{z*} \leq E_{z2}$, то в узлах, примыкающих к контактной границе, квадрат поля в схемах 3 – 6 вычисляется неправильно. Как упоминалось во Введении, это может иметь негативные последствия для решения ресурсоемких нелинейных задач. Заметим, что точность схемы 1 несколько лучше, чем схемы 2, в области $z < 0$ и несколько хуже – в области $z > 0$.

4. Еще раз отметим, что схема 1 в этой задаче передает величины волновых векторов наилучшим образом, с 4-м порядком.

Пример 2. Рассмотрим задачу о нормальном падении на стекло сфокусированного лазерного импульса. Постановка задачи и параметры импульса совпадают с задачей, описанной в параграфе о решении Проблемы 2 (рис. 2), за исключением следующего отличия. Полагается, что от $z = 0$ до $z = z_{int} = 30$ мкм импульс распространяется в вакууме, а затем, при $z > 30$ мкм, – в стекле. Основной целью расчетов было выяснить, как воспроизводят $|E|^2$ на контактной границе $z = 30$ мкм различные схемы, упомянутые в Примере 1. В частности, сравнивались распределения $|E|^2$ по x в ближайших по z к контактной границе узлах сетки в момент времени t_m , когда $|E|^2$ на контактной границе в стекле достигает максимума. Распределение $|E|^2$ оказалось практически непрерывным по z , поскольку для используемых параметров терпящая разрыв на контактной границе компонента $|E_z|^2$ существенно меньше $|E_x|^2$. При этом схема 1 показала несколько лучшую сходимость, чем схемы 2, 3, 4.

Таким образом, этот типичный для экспериментов и технологий вариант параметров импульса оказался мало интересен с точки зрения демонстрации воспроизведения схемой разрыва на контактной границе. Данный расчет, тем не менее, имеет ценность в том плане, что он свидетельствует о том, что простейшая схема Йи хорошо описывает переход через контактную границу лазерного импульса с параметрами, достаточно часто встречающимися в приложениях. Подчеркнем, однако, что для воспроизведения распространения импульса вглубь стекла с хорошей точностью преимущества предлагаемой схемы 1 бесспорны.

Пример 3. Решим предыдущую задачу, но при наклонном, под углом 45° , падении сфокусированного импульса на контактную границу. В этом случае $E_z \sim E_x$ и преимущества схем 1 и 2 при описании контактной границы перед схемами с усреднением оптических параметров очевидны. На рис. 3 изображено распределение $|E|^2$ в момент времени t_m достижения этой величиной максимума на контактной границе, а также ее зависимость от x в различных сечениях по z при различных шагах h в случае схем 1, 2, 3.

При малых шагах $h \leq 0,0167$ мкм распределение $|E|^2$ в сечении $z = z_{int} - 3h/2$ (предпоследние ячейки разностной сетки в области вакуума) в случае схем 1, 2, 3 и в сечении $z = z_{int} - h/2$ (последние ячейки разностной сетки в области вакуума) в случае схем 1, 2 практически совпадают (кривая 1 на рис. 3б). Схема 3 не учитывает разрыв E_z , а использует некоторое среднее значение E_z . Поэтому распределение $|E|^2$ в сечении $z = z_{int} - h/2$, полученное с помощью схемы 3 и представленное кривой 2, существенно отличается от распределения, изображаемого кривой 1. В сечении $z = z_{int} + h/2$ (ближайшие к контактной границе ячейки в области, занятой стеклом) все три схемы дают близкие распределения $|E|^2$ (кривая 3).

В случае крупного шага разностной сетки $h = 0,07$ мкм схема 1 дает распределение $|E|^2$ в сечениях $z = z_{int} - 3h/2$, $z = z_{int} \mp h/2$, незначительно отличающимся от случая мелкого шага (кривые 1, 3 на рис. 3б). В случае схемы 2 эти различия существенны (кривые 4, 5). Заметим, что в случае схемы 3 распределение $|E|^2$ в сечениях $z = z_{int} - 3h/2$ и $z = z_{int} + h/2$ не сильно отличаются от кривых 4 и 5 соответственно. При $z = z_{int} - h/2$ распределение $|E|^2$ в случае схемы 3 отображается кривой 6. Оно значительно отличается от распределений, полученных по схемам 1 и 2.

Таким образом, предлагаемая схема 1 наилучшим образом описывает пересечение контактной границы лазерным импульсом. Кроме того, она успешно описывает дальнейшее распространение и фокусировку этого импульса в глубине стекла.

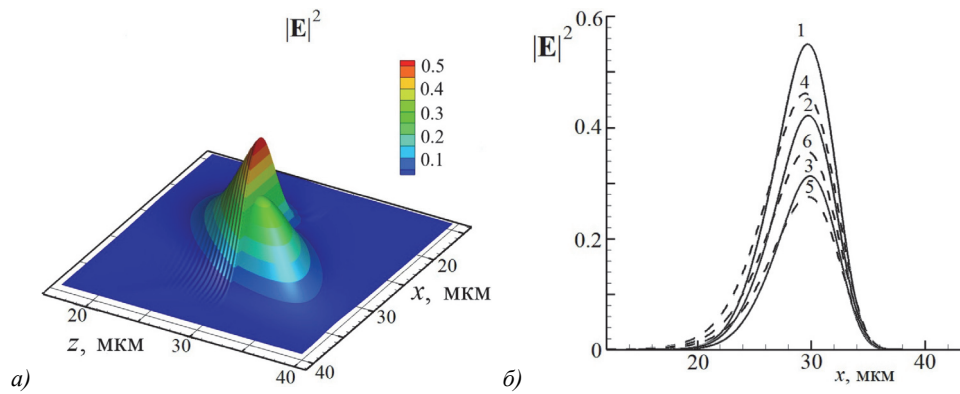


Рис. 3. Распределение $|E|^2$ в наклонном импульсе в момент пересечения им контактной границы. Пояснения см. в тексте

Заключение

Из сказанного следует, что предложенная в настоящей работе схема 1 (формулы (33 – 40) (при $\sigma = 1/12$) описывает распространение лазерного импульса в материалах значительно точнее исходной схемы Йи. При этом предлагаемая схема по-прежнему является легко реализуемой, не требует дополнительных вычислительных ресурсов и обладает многими достоинствами схемы Йи. Часть предложенных в настоящей работе улучшений применимы только для определенных задач распространения лазерного импульса в прозрачных материалах. Например, модификация схемы Йи для задач с контактной границей применима только для плоской, специальным образом ориентированной контактной границы. В дальнейшем предполагается попытаться обобщить ее на неплоскую контактную границу. Однако модификация схемы Йи, обеспечивающая повышение свойств изотропии схемы, может быть использована в любых задачах.

Сделаем несколько замечаний по поводу дальнейшего развития схем с $E^{(\pm)}$ для среды с разрывными оптическими свойствами. По-видимому, этот подход применим для описания среды с плавно меняющимися оптическими коэффициентами. Для этого можно предложить следующую модификацию схемы 1:

1. Пусть известны значения компонент электрических полей (единых, без разделения на (+) и (–)) $E^{n-1/2}$ на $n - 1/2$ -м и магнитных полей B^n на n -м шаге по времени.

2. Вычисляем $E^{(+n+1/2)}$, $E^{(-n+1/2)}$ согласно (34 – 37) полагая, что $E^{(+n-1/2)} = E^{(-n-1/2)} = E^{n-1/2}$.

3. Находим $\tilde{E}^{n+1/2}$ по (38 – 40) и запоминаем $E^{n+1/2} = (E^{(+n+1/2)} + E^{(-n+1/2)})/2$.

4. Находим B^{n+1} по (33).

Реализация пунктов 2 и 3 производится в одном цикле по пространственным индексам и не требует дополнительной памяти компьютера. В частотном представлении такой подход эквивалентен интерполяции диэлектрической проницаемости из центров ячеек в точку вычисления компоненты электрического поля вида

$$1/\varepsilon_{i,j+1/2,k+1/2} = (1/\varepsilon_{i+1,j+1/2,k+1/2} + 1/\varepsilon_{i,j+1/2,k+1/2})/2.$$

В частности, если среда описывается только показателем преломления, то это эквивалентно интерполяции n^2 из узлов $i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2$, где оно задается, в узлы, где вычисляется электрическое поле $E_{xi,j+1/2,k+1/2}$ (аналогично y, z компонент) согласно формуле

$$1/n_{i,j+1/2,k+1/2}^2 = (1/n_{i+1,j+1/2,k+1/2}^2 + 1/n_{i-1,j+1/2,k+1/2}^2)/2.$$

Благодарности

Результаты исследований, представленные в параграфах 1, 3, 4, 6 (связанные с постановкой задачи, разработкой изотропной схемы и учетом контактной границы), получены в рамках государственного задания Минобрнауки России для ФИЦ ИВТ. Результаты исследований, представленные в параграфах 2 и 5 (связанные с учетом частотной дисперсии и положением фокуса в расчетах), получены за счет гранта Российского научного фонда (проект № 25-61-00010, <https://rscf.ru/project/25-61-00010/>).

References

- [1] Yee KS. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. IEEE Transactions on Antennas and Propagation 1966; 14(3): 302-307. DOI: 10.1109/TAP.1966.1138693.
- [2] Bulgakova NM, Zhukov VP, Mirza I., Meshcheryakov YuP, Tomáščík J, Michálek V, Haderka O, Fekete L, Rubenchik AM, Fedoruk MP, Mocek T. Ultrashort-pulse laser processing of transparent materials: insight from numerical and semi-analytical models. Proc. SPIE 9735, Laser Applications in Microelectronic and Optoelectronic Manufacturing (LAMOM) XXI, 97350N (March 14, 2016) (16pages). DOI: 10.1117/12.2217585.
- [3] Castillejo M, Ossi PM, Zhigilei L. Laser in Materials Science. Springer Series in Materials Science 191. Springer; 2014. DOI: 10.1007/978-3-319-02898-9.

- [4] Taylor R, Hnatovsky C, Simova E. Applications of femtosecond laser induced self-organized planar nanocracks inside fused silica glass. *Laser & Photon. Rev.* 2008; 2(1-2): 26-46. DOI: 10.1002/lpor.200710031.
- [5] Bulgakova NM, Zhukov VP, Meshcheryakov YuP. Theoretical treatments of ultrashort pulse laser processing of transparent materials: Towards understanding the volume nanograting formation and "quill" writing effect. *Appl. Phys. B.* 2013; 113(3): 437-449. DOI: 10.1007/s00340-013-5488-0.
- [6] Bhardwaj VR, Simova E, Rajeev PP, Hnatovsky C, Taylor RS, Rayner DM, Corkum PB. Optically produced arrays of planar nanostructures inside fused silica. *Phys. Rev. Letters.* 2006; 96: 057404(4). DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.057404.
- [7] Temple P, Soileau M. Polarization charge model for laser-induced ripple patterns in dielectric materials. *Quantum Electron. IEEE J.* 1981; 17(10): 2067-2072. DOI: 10.1109/QE.1981.1070638.
- [8] van Driel HM, Sipe JE, Young JF. Laser-induced coherent modulation of solid and liquid surfaces. *J. Lumin.* 1985; 30(1): 446-471. DOI: 10.1016/0022-2313(85)90071-7.
- [9] Liang D, Yuan Q. The spatial fourth-order energy-conserved S-FDTD scheme for Maxwell's equations. *Journal of Computational Physics.* 2013; 243: 344-364. DOI: 10.1016/j.jcp.2013.02.040.
- [10] Nguyen DD, Zhao S. A new high order dispersive FDTD method for Drude material with complex interfaces. *J. Comput. Appl. Math.* 2015; 285: 1-14. DOI: 10.1016/j.cam.2015.02.002.
- [11] Zhao S. A fourth order finite difference method for waveguides with curved perfectly conducting boundaries. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2010; 199: 2655-2662. DOI: 10.1016/j.cma.2010.05.005.
- [12] Zhao S, Wei GW. High-order FDTD methods via derivative matching for Maxwell's equations with material interfaces. *J. Comput. Phys.* 2004; 200: 60-103. DOI: 10.1016/j.jcp.2004.03.008.
- [13] Joaquin, Scheer S. Finite-difference time-domain method for three-dimensional grid of hexagonal prisms. *Wave Motion.* 2016; 63: 32-54. DOI: 10.1016/j.wavemoti.2016.01.005.
- [14] Matyushkin IV. Cellular automata methods in mathematical physics classical problems solving on hexagonal grid. Part 2. *Computer research and modeling.* 2017; 9(4): 547-566. DOI: 10.20537/2076-7633-2017-9-4-547-566.
- [15] Zhukov VP, Bulgakova NM. On Volumetric Modification of Transparent Materials with Two-Color Laser Irradiation: Insight from Numerical Modeling. *Materials MDPI.* 2024; 17(8): 1763. DOI: 10.3390/ma17081763.
- [16] Hwang KP, Cangellaris AC. Effective Permittivities for Second-Order Accurate FDTD Equations at Dielectric Interfaces. *IEEE MICROWAVE AND WIRELESS COMPONENTS LETTERS.* 2001; 11(4): 158-160. DOI: 10.1109/7260.916329.
- [17] Farjadpour A, Roundy D, Rodriguez A, Ibanescu M, Bermel P, Joannopoulos JD, Johnson SG, Burr G. Improving accuracy by subpixel smoothing in FDTD. *Optics Letters.* 2006; 31(20): 2972-2974. DOI: 10.1364/OL.31.002972.
- [18] Belov AA, Dombrovskata ZhO. Highly Accurate Methods for Solving One-Dimensional Maxwell Equations in Stratified Media. *Computational Mathematics and Mathematical Physics.* 2022; 62(1): 84-97. DOI: 10.1134/S0965542522010043.
- [19] Lebedev AS, Fedoruk MP, Shtyrina OV. Finite-Volume Algorithm for Solving the Time-Dependent Maxwell Equations on Unstructured Meshes. *Computational Mathematics and Mathematical Physics.* 2006; 46(7): 1219-1233. DOI: 10.1134/S0965542506070141.
- [20] Hermeline F. A finite volume method for solving Maxwell equations in inhomogeneous media on arbitrary meshes. *Comptes Rendus Mathematique.* 2004; 339(12): 893-898. DOI: 10.1016/j.crma.2004.09.027.
- [21] Tabon LE, Ren Q, Lin QH. A new efficient 3D Discontinuous Galerkin time domain (DGTD) method for large multiscale electromagnetic simulations. *J. Comp. Phys.* 2015; 283: 374-387. DOI: 10.1016/j.jcp.2014.12.008.
- [22] Jackson JD. *Classical Electrodynamics* New York-London-Sydney: John Wiley & Sons, Inc.; 1999. ISBN: 0471-30932-X.
- [23] Ismagilov TZ. Second order finite volume scheme for Maxwell's equations with discontinuous electromagnetic properties on unstructured meshes. *J. Comp. Phys.* 2015; 282: 33-42. DOI: 10.1016/j.jcp.2014.11.001.
- [24] Landau LD, Lifshitz EM. *Electrodynamics of continuous media.* New-York: Pergamon Press.; 1984. ISBN 0-08-030276-9.
- [25] Zhukov V P, Fedoruk MP. Numerically Implemented Impact of a Femtosecond Laser Pulse on Glass in the Approximation of Nonlinear Maxwell Equations. *Mathematical Models and Computer Simulations.* 2020; 12(1): 77-89. DOI: 10.1134/S207004822001010X.
- [26] Piperno S, Remaki M, Fezoui L. A nondiffusive finite volume scheme for the three-dimensional Maxwell's equations on unstructured meshes. *SIAM J. Numer. Anal.* 2002; 39(6): 2089-2108. DOI: 10.1137/S0036142901387683.

Сведения об авторах

Жуков Владимир Петрович, 1962 года рождения, в 2005 году защитил диссертацию на соискание степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 «Математическое моделирование МГД течений плазмы с особенностями магнитного поля». В настоящий момент работает в должности ведущего научного сотрудника Федерального Исследовательского центра информационных и вычислительных технологий (Новосибирск), а также профессора на кафедре электрофизических установок и ускорителей НГТУ. Сфера научных интересов: математическое моделирование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с материалами и в физике плазмы (процессы пересоединения, магнитная гидродинамика). E-mail: zukov@ict.nsc.ru

Федорук Михаил Петрович, 1956 года рождения, учился в Новосибирском государственном университете (НГУ). Академик РАН, доктор физико-математических наук, ректор НГУ. Также работает заведующим лабораторией вычислительных технологий в Федеральном Исследовательском центре информационных и вычислительных технологий (Новосибирск). Область научных интересов: нелинейная фотоника, компьютерная оптика, физика плазмы. E-mail: rector@nsu.ru

Поступила в редакцию 03 июля 2025 г.



Окончательный вариант – 18 декабря 2025 г.

Yee scheme with improved dispersion properties

V.P. Zhukov¹, M.P. Fedoruk^{1,2}

¹ Federal Research Center for Information and Computational Technologies, Prospekt Akad. M.A. Lavrentieva 6, Novosibirsk, 630090, Russia;

² Novosibirsk State University, Pirogova Str. 1, Novosibirsk, 630090, Russia

Abstract

Yee finite-difference scheme is widely and successfully used for numerical solution of Maxwell equations. But it is not without its shortcomings, the correction of which is the objective of the proposed work. The shortcomings include scheme's nonisotropy when using Cartesian coordinates, deviation of the focal position, and decreased calculation accuracy in the presence of contact interfaces. The step size of finite-difference calculation is limited by a large value in resource-intensive calculations. The above shortcomings can lead to unacceptably large errors. In this work, a simple modification of the Yee scheme is proposed, which addresses the non-isotropy issue, and, in certain, practically relevant problems it also resolves the issues of focus deviation and interface problems even on coarse grids.

Keywords: Maxwell equations, Yee scheme, femtosecond laser pulse, resource-intensive calculations, interface, isotropic finite-difference scheme.

Citation: Zhukov VP, Fedoruk MP. Yee scheme with improved dispersion properties. *Computer Optics*. 2026; 50(4): 1771. doi: 10.18287/COJ1771.

Acknowledgements: This work was financially supported by the Russian Science Foundation (Project No. _ 25-61-00010, <https://rscf.ru/project/25-61-00010/>).

Author's information

Vladimir Petrovich Zhukov, (b. 1962), Professor (2005, Mathematical modeling of MHD, plasma flows with magnetic field peculiarities). At present, he is working in Federal Research Center for Information and Computational Technologies (senior researcher) and in Novosibirsk State Technical University (professor). The area of interests includes mathematical modeling of interaction of femtosecond pulses with materials, plasma physics (reconnection, MHD). E-mail: zhukov@ict.nsc.ru

Mikhail Petrovich Fedoruk (b. 1956), Academician of RAS, Professor, chancellor of Novosibirsk State University, head of Computational Technologies laboratory in Federal Research Center for Information and Computational Technologies. The area of interests includes nonlinear photonics, computer optics, plasma physics. E-mail: rector@nsu.ru

Received July 03, 2025. The final version – December 18, 2025.
