Propiedades Numéricas de Distintas Formulaciones para la Incorporación de Dieléctricos con Pérdidas en Simuladores FDTD

Luis F. Velarde, Angel Vegas, Andrés Prieto y José A. Pereda Departamento de Ingeniería de Comunicaciones (DICom), Universidad de Cantabria, Email: pereda@dicom.unican.es

Abstract—Three different extensions of the FDTD method for the treatment of lossy dielectrics are considered: the time-average (TA), the time-forward (TF) and the timebackward (TB) difference schemes. An analytical study of the stability properties and numerical dispersion of these schemes is presented. Analytical stability conditions, based on the von Neumann method, are obtained and validated through numerical simulations. The numerical dispersion properties are established in terms of the discrete lossy dielectrics wavelength and skin depth. The expressions obtained are also validated numerically.

Keywords— FDTD methods, Lossy dielectrics, Numerical Dispersion, Stability

I. INTRODUCCIÓN

En su formulación original, el método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) no permitía emplear medios dieléctricos con pérdidas; sin embargo, en poco tiempo esta limitación fue eliminada. Para ello, se incluyó un término de corriente de conducción, $\sigma \vec{E}$, en la ecuación de Ampère-Maxwell, el cual debía aproximarse, mediante diferencias finitas, de forma consistente con el esquema FDTD original.

Se dieron dos soluciones distintas a este problema. La primera, y quizá también la más extendida, consistió en discretizar el término $\sigma \vec{E}$ mediante diferencias finitas centradas [1]; la segunda, consistía en emplear diferencias finitas hacia adelante [2]. Nos referiremos a ellas como esquema centrado y esquema hacia adelante o *forward*, respectivamente. Ambas formulaciones han coexistido durante más de dos décadas sin haberse realizado, hasta recientemente, estudios de sus propiedades numéricas [3]-[6].

En este trabajo se aborda el estudio de la estabilidad y dispersión numérica de los dos esquemas anteriormente mencionados; por completitud, también se incluye una tercera formulación basada en aproximar el término $\sigma \vec{E}$ mediante diferencias finitas hacia atrás o *backward*.

En cuanto a la estabilidad, se obtienen condiciones de estabilidad explícitas para los tres esquemas, cuya validez se comprueba mediante simulaciones FDTD.

En lo referente a la dispersión, se obtiene la ecuación numérica de dispersión y se identifica el valor numérico de la permitividad compleja. Se calculan también los valores numéricos de las longitudes de onda y de penetración por efecto pelicular. Estos parámetros se utilizan de base para un estudio comparativo de la exactitud de los tres esquemas considerados.

II. ESQUEMAS FDTD PARA MEDIOS CON PÉRDIDAS

Como punto de partida consideraremos las ecuaciones de Maxwell del rotacional

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\mathrm{d}\vec{H}}{\mathrm{d}t},\tag{1a}$$

$$\nabla \times \vec{H} = \epsilon \frac{\mathrm{d}\vec{E}}{\mathrm{d}t} + \sigma \vec{E} \tag{1b}$$

donde se ha incluido el término de corriente de conducción. De acuerdo con el método FDTD original, la aproximación en diferencias del sistema anterior es

$$\mathbf{R}\vec{E}^n = -\mu \frac{\boldsymbol{\delta}_t}{\Delta_t} \vec{H}^n, \qquad (2a)$$

$$\mathbf{R}\vec{H}^{n+\frac{1}{2}} = \epsilon \frac{\boldsymbol{\delta}_t}{\Delta_t} \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} + \sigma \vec{E}^{n+\frac{1}{2}}, \qquad (2b)$$

donde

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\delta_z}{\Delta_z} & \frac{\delta_y}{\Delta_y} \\ \frac{\delta_z}{\Delta_z} & 0 & -\frac{\delta_x}{\Delta_x} \\ -\frac{\delta_y}{\Delta_y} & \frac{\delta_x}{\Delta_x} & 0 \end{pmatrix}$$

representa la aproximación en diferencias del rotacional. En las expresiones anteriores $\boldsymbol{\delta}_{\alpha}$ ($\alpha = x, y, z, t$) denota el operador diferencia centrada respecto a la coordenada indicada en el subíndice.

Como resultado de esta discretización, el campo eléctrico se evalúa en instantes enteros de tiempo, salvo en el término $\sigma \vec{E}^{n+\frac{1}{2}}$, que aparece evaluado en un instante semientero. La solución a esta inconsistencia da lugar a las tres formulaciones que discutiremos en lo que sigue.

A. Esquema centrado

Consiste en emplear la siguiente aproximación centrada para el término $\sigma \vec{E}^{n+\frac{1}{2}}$

$$\sigma \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} \simeq \sigma \mu_t \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\sigma}{2} (\vec{E}^{n+1} + \vec{E}^n).$$
(3)

donde μ_t es el operador promedio centrado. Sustituyendo esta aproximación en (2b) y despejando \vec{E}^{n+1} se obtiene la formulación buscada.

B. Esquema hacia adelante

En este caso, la aproximación realizada es:

$$\sigma \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} \simeq \sigma \mathbf{S}_t^{\frac{1}{2}} \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} = \sigma \vec{E}^{n+1}, \tag{4}$$

donde \mathbf{S}_t representa el operador desplazamiento. Como se observa en la expresión anterior, el valor de \vec{E} en $t = (n + \frac{1}{2})\Delta_t$ se aproxima por su valor medio paso hacia adelante en el tiempo.

C. Esquema hacia atrás

Este esquema consiste en aproximar $\vec{E}^{n+\frac{1}{2}}$ por \vec{E}^{n} , esto es,

$$\sigma \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} \simeq \sigma \mathbf{S}_t^{-\frac{1}{2}} \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} = \sigma \vec{E}^n.$$
(5)

En lo siguiente analizaremos las propiedades de estabilidad y dispersión numérica de estos esquemas.

III. ESTABILIDAD

Un aspecto esencial en la aplicación del método FDTD es la elección de ciertos parámetros —paso temporal, tamaño de la celda espacial, etc.— de forma que el algoritmo sea estable, es decir, que los errores de redondeo no crezcan indefinidamente durante la simulación.

El método de von Neumann es una de las técnicas más populares para el estudio de la estabilidad de aproximaciones en diferencias de problemas espacio-temporales. En la práctica, para estudiar la estabilidad de un esquema se sustituyen, en las ecuaciones en diferencias, soluciones de la forma

$$F^{n}(i,j,k) = \tilde{F}_{0}Z^{n}e^{\mathbf{j}(i\Delta_{x}\tilde{k}_{x}+j\Delta_{y}\tilde{k}_{y}+k\Delta_{z}\tilde{k}_{z})}, \qquad (6)$$

donde Z es una variable compleja llamada factor de amplificación; esto conduce a un polinomio S(Z). La condición de estabilidad puede expresarse entonces como $|Z_i| \leq 1$, donde Z_i son las raíces de S(Z). Esto significa que, para que el esquema sea estable, las raíces de S(Z) deben estar dentro o sobre el círculo unidad en el plano complejo Z.

A. Esquema centrado

Sustituyendo (3) en (2b) y siguiendo el procedimiento arriba descrito llegamos al siguiente polinomio de estabilidad:

$$S_{\rm C} = \left(1 + \frac{\Delta_t}{2\tau}\right) Z^2 + \left(4\nu^2 - 2\right) Z + 1 - \frac{\Delta_t}{2\tau},$$

donde $\tau = \epsilon / \sigma$ es la constante de relajación del medio y

$$\nu^2 = \frac{\Delta_t^2}{\epsilon\mu} \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\sin^2\left(\frac{\tilde{k}_{\alpha}\Delta_{\alpha}}{2}\right)}{\Delta_{\alpha}^2}.$$

A partir de la condición $|Z_{1,2}| \leq 1$ se obtiene el siguiente criterio de estabilidad:

$$\Delta_t \le \Delta_{t_{\max}}^{\mathcal{C}} = \sqrt{\epsilon \mu} \left(\sum_{\alpha = x, y, z} \frac{1}{\Delta_{\alpha}^2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \qquad (7)$$

con la restricción adicional $\sigma \geq 0$. Por consiguiente, el esquema centrado preserva la condición de estabilidad del método FDTD original (sin pérdidas).

B. Esquema hacia adelante

Para este esquema se obtiene el siguiente polinomio de estabilidad:

$$S_{\rm F} = \left(1 + \frac{\Delta_t}{\tau}\right) Z^2 + \left(4\nu^2 - 2 - \frac{\Delta_t}{\tau}\right) Z + 1;$$

en este caso se llega a la condición de estabilidad:

$$\Delta_t \le \Delta_{t_{\max}}^{\mathrm{F}} = \sqrt{\epsilon \mu} \left(\sum_{\alpha = x, y, z} \frac{1}{\Delta_{\alpha}^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(A + \sqrt{A^2 + 1} \right),$$
(8)

donde

$$A = \frac{\sqrt{\epsilon\mu}}{4\tau} \left(\sum_{\alpha = x, y, z} \frac{1}{\Delta_{\alpha}^2} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

con la restricción $\sigma \geq 0$. El factor $(A + \sqrt{A^2 + 1})$ es siempre mayor que la unidad, por tanto, este esquema permite emplear pasos temporales mayores que en el caso sin pérdidas. Se observa también que A es función de σ a través de τ .

C. Esquema hacia atrás

En este caso el polinomio de estabilidad resulta:

$$S_{\rm B} = Z^2 + \left(4\nu^2 - 2 + \frac{\Delta_t}{\tau}\right)Z + 1 - \frac{\Delta_t}{\tau},$$

el cual conduce a la siguiente condición de estabilidad:

$$\Delta_t \le \Delta_{t_{\max}}^{\mathrm{B}} = \sqrt{\epsilon\mu} \left(\sum_{\alpha = x, y, z} \frac{1}{\Delta_{\alpha}^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(-A + \sqrt{A^2 + 1} \right).$$
(9)

IV. DISPERSIÓN NUMÉRICA

La ecuación de dispersión es la relación existente entre la frecuencia y el número de onda para las ondas planas solución del problema diferencial. La ecuación numérica de dispersión nos da esta misma relación, pero obtenida a partir de las ecuaciones en diferencias que aproximan al problema diferencial. Estas dos relaciones de dispersión son en general distintas, por ello la dispersión numérica es una importante limitación a la exactitud de las soluciones numéricas

Una vez obtenido el polinomio de estabilidad, la ecuación numérica de dispersión se puede calcular simplemente evaluando dicho polinomio en el círculo unidad del plano Z, es decir, haciendo

$$S(Z)|_{Z=\exp(\mathbf{j}\omega\Delta_t)}=0,$$

lo cual conduce al siguiente resultado

$$\tilde{\epsilon}\mu \frac{\sin^2\left(\frac{\omega\Delta_t}{2}\right)}{\Delta_t^2} = \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\sin^2\left(\frac{\tilde{k}_\alpha \Delta_\alpha}{2}\right)}{\Delta_\alpha^2}, \quad (10)$$

donde $\tilde{\epsilon}$ representa la permitividad compleja numérica, cuya expresión es distinta para cada uno de los esquemas considerados. Aparte de esto, se observa que esta ecuación tiende a la exacta a medida que mejoramos la resolución espacial y temporal de la discretización. Veamos ahora las expresiones de $\tilde{\epsilon}$ para cada esquema.

A. Esquema centrado

La permitividad compleja numérica para el esquema centrado es:

$$\tilde{\epsilon}_{\mathrm{C}} = \epsilon - \frac{\mathbf{j}\sigma}{\frac{2}{\Delta_t}\tan\left(\frac{\omega\Delta_t}{2}\right)}.$$

Se observa que la parte imaginaria se ve afectada por el proceso de discretización; no obstante, su valor tiende al exacto a medida que $\omega \Delta_t$ tiende a cero.

B. Esquema hacia adelante

Para este esquema la permitividad numérica resulta:

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{F}} = \epsilon \left(1 + \frac{\Delta_t}{2\tau} \right) - \frac{\mathbf{j}\sigma}{\frac{2}{\Delta_t}\tan\left(\frac{\omega\Delta_t}{2}\right)}.$$

En este caso, la parte real se ve afectada por el término $\Delta_t/(2\tau)$.

C. Esquema hacia atrás

Por último, para el esquema hacia atrás se obtiene

$$\tilde{\epsilon}_{\rm B} = \epsilon \left(1 - \frac{\Delta_t}{2\tau} \right) - \frac{\mathbf{j}\sigma}{\frac{2}{\Delta_t}\tan\left(\frac{\omega\Delta_t}{2}\right)};$$

resultado similar al del esquema hacia adelante. Se observa que la parte imaginaria de $\tilde{\epsilon}$ es igual para los tres esquemas.

V. Resultados

Consideraremos, por sencillez, el caso 1D consistente en ondas polarizadas en la dirección x y propagándose en la dirección z. Para este caso, la ecuación numérica de dispersión sigue siendo (10), pero con el sumatorio extendido solamente a z. A partir de esta ecuación, la constante de propagación numérica resulta

$$\tilde{k}_z = \frac{2}{\Delta_z} \sin^{-1} \left[\sqrt{\tilde{\epsilon}_r} \frac{\Delta_z}{c\Delta_t} \sin\left(\frac{\omega\Delta_t}{2}\right) \right].$$

La longitud de onda numérica en el conductor es

$$\tilde{\lambda} = \frac{2\pi}{\Re[\tilde{k}_z]},$$

y el valor numérico de la longitud de penetración por efecto pelicular vale

$$\tilde{\delta}_s = \frac{1}{\Im[-\tilde{k}_z]}.$$

En todos los resultados que se muestran se ha tomado $\omega = 2 \times \pi \times 10^{10}$ rad/s y $\Delta_z = \lambda/20$, siendo λ la longitud de onda exacta. Además, los resultados se han obtenido en función de la conductividad con una variación entre $\sigma = 10^{-6}$ S/m y $\sigma = 10^{8}$ S/m. Podemos entonces distinguir la zona de buen dieléctrico ($\omega \tau \gg 1$), zona intermedia y la zona de buen conductor ($\omega \tau \ll 1$). En nuestro caso, delimitaremos estas zonas por los valores de conductividad $\sigma = 10^{-2}$ S/m y $\sigma = 10^{2}$ S/m. Nótese que al aumentar σ , λ disminuye y por tanto Δ_z también.



Fig. 1. Valor máximo del paso temporal, normalizado al caso sin pérdidas, en función de la conductividad

En la figura 1 se muestra el valor de $\Delta_{t_{\max}}$, normalizado al caso sin pérdidas, en función de la conductividad. Las curvas mostradas se han obtenido empleando (7), (8) y (9). Se observa como en la región de buen dieléctrico $(\sigma \leq 10^{-2} \text{S/m})$ los tres esquemas tienen el mismo valor de $\Delta_{t_{\max}}$, que coincide, esencialmente con el valor para el caso sin pérdidas. Al aumentar la conductividad, sin embargo, $\Delta_{t_{\max}}$ disminuye fuertemente, siendo esta disminución más importante para el esquema hacia atrás.



Fig. 2. Comportamiento inestable en una lámina conductora.

Para ilustrar la validez de las condiciones de estabilidad obtenidas en el apartado anterior (y empleadas en la figura 1), hemos considerado la simulación de una onda plana incidiendo en una lámina conductora situada en el espacio libre. En la figura 2 se muestra una "foto" del campo eléctrico en la iteración temporal n = 1110 obtenido empleando el esquema hacia atrás con un paso temporal $\Delta_t = 1.01\Delta_{t\,\text{max}}^{\text{B}}$. Como cabe esperar, la simulación resulta inestable, observándose como el origen del comportamiento inestable está en la región conductora. Repitiendo esta simulación con $\Delta_t = 0.99\Delta_{t\,\text{max}}^{\text{B}}$ resulta estable, lo cual confirma la validez de la condición (9). De forma análoga, se pueden validar las condiciones (7) y (8) para los esquemas centrado y hacia adelante, respectivamente.



Fig. 3. Error relativo para $\tilde{\lambda}$ y $\tilde{\delta}_s$ en función de la conductividad. Cada esquema utiliza su paso temporal máximo.

En la figura 3 se muestra el error relativo para $\lambda y \delta_s$, con respecto a sus correspondientes valores exactos, en función de la conductividad del medio. Se muestra una curva para cada esquema, la cual se ha obtenido utilizando el paso temporal máximo que permite la condición de estabilidad del esquema. Se aprecia como en la región de buen dielectrico los tres esquemas se comportan igual, con error nulo. En la región de buen conductor los esquemas centrados y hacia atrás tienen el mismo error; para el esquema hacia adelante el error es ligeramente mayor y de signo opuesto. En esta región domina la parte imaginaria de la permitividad compleja, que es la misma para los tres esquemas, por tanto estas diferencias se deben a que el paso temporal para el esquema hacia adelante es mayor que para los otros dos esquemas. En la región intermedia es donde mayores diferencias hay, observándose como el esquema centrado es el que mejores resultados produce.

Por último, en la figura 4 se repiten los mismos resultados que en la figura 3, pero en este caso tomando como paso temporal, para todos los esquemas, el valor máximo permitido por el esquema centrado. También se han incluido, marcados con puntos, los resultados obtenidos mediante simulaciones FDTD. Para este paso temporal el esquema hacia atrás es inestable y por ello no se incluye en esta figura. Se observa que en las regiones de buen dieléctrico y buen conductor los esquemas se comportan de igual manera, sin embargo, en la zona intermedia el esquema centrado da mejores resultados.



Fig. 4. Error relativo para $\tilde{\lambda}$ y $\tilde{\delta}_s$ en función de la conductividad. Se utiliza el paso temporal máximo del esquema centrado para todos los resultados.

VI. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado un estudio de la estabilidad y la dispersión numérica de tres formulaciones orientadas a la incorporación de medios conductores en simuladores FDTD. A partir de los resultados obtenidos se aprecia como las tres formulaciones se comportan esencialmente igual para buenos dieléctricos; para buenos conductores los errores que producen son también similares. La diferencia para región está en el valor máximo del paso temporal permitido: el esquema centrado preserva la condición del caso sin pérdidas; el esquema hacia atrás obliga a reducir fuertemente el paso temporal, lo cual le hace prácticamente inservible; y el esquema hacia adelante permite utilizar pasos temporales mayores que los que permite el espacio libre mallado con la misma resolución, lo cual es de interés sólo si se emplea mallado no uniforme. Por último, en la región intermedia, el esquema centrado da resultados mucho mejores que los otros dos esquemas, lo cual hace de este esquema una elección adecuada para simulaciones de propósito general.

References

- [1] A. Taflove, Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, Artech House, London, 1995.
- [2] K. S. Kunz and R. J. Luebbers, The Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetics, CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [3] R. Luebbers, K. K. Kumagai, S. Adachi and T. Uno, "FDTD Calculation of Transient Propagation Though a Nonlinear Magnetic Sheet" IEEE Trans. Electromagn. Compat., vol. 35, pp. 90-94, Feb. 1993.
- [4] P. G. Petropoulos, "Analysis of Exponential Time-Differencing for FDTD in Lossy Dielectrics", IEEE Trans. on antennas and Propagat., Vol. 45, no. 6, pp. 1054-1057, June 1997.
- [5] J. A. Pereda, O. García, A. Vegas and A. Prieto, "Numerical Dispersion and Stability Analysis of the FDTD Technique in Lossy Dielectrics", IEEE Microwave and Guided Wave Letters, vol. 8, no.7, pp. 245-247, July 1998.
- [6] C. Schuster, A. Christ and W. Fichtner, "Review of FDTD Time-Stepping Schemes for Efficient Simulation of Electric Conductive Media", Microwave and Optical Technology Letters, vol. 25, no. 1, pp. 16-21, Apr. 2000.