

前 言

近年来,保结构几何算法在物理及工程领域获得广泛应用,使得人们对物理的、内在的性质有了更为深入的认识。在采用数值方法求解问题的过程中,应该力求算法能够保持这些内在性质,如各种守恒律等。而一切守恒的物理过程,无论是经典的、量子的或相对论的,无论自由度为有限或无限,总能表示成为适当的哈密顿系统。该系统随着时间的演化永远是辛变换演进,从而为探讨数值方法的对称和守恒奠定了理论基础。辛算法就是保持哈密顿系统基本特征的离散算法,其基本特点是保持相空间体积不变。哈密顿系统辛算法在长时间计算的优越性使得天体物理学、量子物理学、纳米材料和分子生物学等众多领域的科学家进一步认识了这一研究方法在科学发展中的重要作用。

本书主要介绍辛算法基本数学理论及其在电磁计算应用中涉及的技术细节与关键技术处理等。全书分为9章,主要内容包括:辛算法理论基础、电磁计算中辛算法的构建、电磁计算中辛算法的关键技术处理、电磁计算中辛算法的网格剖分及高阶边界处理、辛算法在波导仿真中的应用、色散媒质辛算法的构建、辛算法在含时薛定谔方程中的应用等。为了便于读者掌握辛算法的基本理论及相关技术处理方法,在附录中还给出了典型物理问题的源代码以供参考。

本书的撰写过程得到了王辉博士、任信钢博士及沈晶博士的帮助,同时本书的部分研究内容得到了国家自然科学基金(60931002,61101064,51277001,61201122)、教育部新世纪优秀人才基金(NCET-12-0596)、安徽省杰出青年基金(1108085J01)等项目的支持与资助。

由于作者水平有限,书中的疏漏和不足在所难免,恳请专家学者批评指正!

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 计算电磁学的意义	1
1.2 计算电磁学中的常用方法	1
1.3 时域麦克斯韦方程的解决方案	4
参考文献	11
第 2 章 辛算法理论基础	16
2.1 引言	16
2.2 预备知识	17
2.2.1 线性空间、欧氏空间、酉空间	17
2.2.2 辛内积、辛空间、辛变换、辛矩阵	18
2.2.3 哈密顿系统和辛变换	19
2.3 麦克斯韦方程、空间网格和辛矩阵	21
2.3.1 重要的三个定理	21
2.3.2 时间连续空间连续的麦克斯韦方程的辛性质	23
2.3.3 时间连续空间离散的麦克斯韦方程的辛性质	26
2.3.4 时间离散空间离散的麦克斯韦方程的辛性质	28
2.4 小结	29
参考文献	29
第 3 章 电磁计算中辛算法的构建	32
3.1 引言	32
3.2 高阶辛时域有限差分法的基本形式	32
3.2.1 FDTD 基本理论	32
3.2.2 FDTD 迭代格式	33
3.2.3 辛 FDTD 算法	36
3.2.4 初步算例	46
3.3 数值稳定性、色散性分析	48
3.3.1 稳定性分析	48
3.3.2 数值色散特性分析	52
3.4 数值稳定性、色散性优化	55

3.5 小结	63
参考文献	63
第 4 章 电磁计算中辛算法的关键技术处理	66
4.1 引言	66
4.2 高阶总场散射场分离技术	67
4.2.1 TF/SF 技术验证	72
4.2.2 斜入射条件下 TF/SF 技术处理	73
4.3 高阶完全匹配层 (PML)	79
4.3.1 高阶 PML 理论	80
4.3.2 PML 吸收效果测试	83
4.4 高阶近远场变换	85
4.4.1 等效原理	85
4.4.2 频域近场远场的转换	86
4.4.3 高阶进场远场插值技术	89
4.5 数值算例	92
4.6 小结	93
参考文献	94
第 5 章 电磁计算中辛算法的网格剖分及高阶边界处理	96
5.1 引言	96
5.2 阶梯近似模型	97
5.3 高阶子网格技术	99
5.3.1 高阶子网格处理技术	100
5.3.2 计算实例	103
5.4 高阶共形网格技术	108
5.4.1 磁场修正	109
5.4.2 具体计算实例	113
5.5 小结	116
参考文献	117
第 6 章 辛算法在波导仿真中的应用	119
6.1 引言	119
6.2 关键技术	120
6.2.1 源的加入	120
6.2.2 具体操作	120
6.3 金属边界处理	121
6.3.1 吸收边界条件	122

6.3.2 参数抽取	124
6.4 数值算例	125
6.5 小结	130
参考文献	130
第 7 章 色散介质辛算法的构建	132
7.1 引言	132
7.2 光波段贵金属金及银的 Drude 与 Lorentz 模型	132
7.2.1 Drude 模型	134
7.2.2 Lorentz 模型	135
7.2.3 金和银的 Drude 模型及其参数	135
7.3 FDTD 方法及其相关技术	137
7.3.1 RC-FDTD 方法	137
7.3.2 Z 变换方法	138
7.3.3 ADE 方法	140
7.4 色散介质辛 FDTD 方法处理	140
7.4.1 Drude 模型的辛 FDTD 处理	140
7.4.2 Lorentz-Drude 模型的辛 FDTD 处理	142
7.5 结果验证	147
7.5.1 一维金板传输系数提取	147
7.5.2 完美透镜仿真	148
7.5.3 三维 SRRs 环的特性分析	150
7.6 小结	152
参考文献	152
第 8 章 辛算法在含时薛定谔方程中的应用	154
8.1 引言	154
8.2 薛定谔方程的相关知识	154
8.2.1 薛定谔方程的背景	154
8.2.2 含时薛定谔方程的基本概念	155
8.2.3 薛定谔方程的研究现状	156
8.3 薛定谔方程辛 FDTD 的基本形式	156
8.3.1 薛定谔方程 FDTD 的基本形式	156
8.3.2 薛定谔方程的高阶辛 FDTD 算法	159
8.3.3 薛定谔方程的辛性质	161
8.4 数值稳定性和色散性分析	162
8.4.1 数值稳定性分析	162

8.4.2 数值色散性分析	164
8.5 边界条件处理	166
8.6 高阶辛 FDTD 在纳米器件本征问题中的应用	167
8.6.1 一维薛定谔方程	167
8.6.2 一维谐振子情形	172
8.7 二维薛定谔方程	173
8.7.1 二维量子阱	173
8.7.2 谐振子	174
8.8 麦克斯韦方程和薛定谔方程多物理耦合	175
8.9 小结	176
参考文献	176
第 9 章 展望	179
附录	181