

折射率补偿法修正边界元电磁场模拟误差

舒方杰¹ 胡平林² 李健聪³

¹ 商丘师范学院物理与电气信息学院, 河南 商丘 476000
² 中国人民解放军, 96325 部队, 湖南 怀化 418000
³ 中国人民解放军, 海军航空仪器计量站, 上海 200436

摘要 边界元方法是一种数值求解偏微分方程的高效算法,在微纳光学求解电磁场问题中有广泛的应用。在实际计算中,边界元数目的选择直接关系到数值模拟的精度。研究不同边界元数目下微腔谐振频率的计算误差,发现主要误差可视作微腔对电磁波的吸收或放大,因此提出折射率补偿法对离散求解边界积分方程引入的误差加以修正。加入折射率补偿之后,边界元方法计算谐振频率的精度能提高至少一个数量级,并且该修正可以有效用于较大频率范围内的所有模式。因此折射率补偿使边界元方法的计算精度和运算速度得到大幅提升,时间和内存消耗锐减。同时,从物理角度分析、修正数值计算误差的思想也可以推广到其他数值计算方法中。

关键词 微纳光学;误差修正;边界元方法;回音壁模式微腔

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.0826001

Refractive Index Compensation to Fix the Error of Electromagnetic Field Simulation by Boundary Element Method

Shu Fangjie¹ Hu Pinglin² Li Jiancong³

¹ College of Physical and Electrical Information, Shangqiu Normal University, Shangqiu, Henan 476000, China
² Troops 96325, Chinese People's Liberation Army, Huaihua, Hunan 418000, China
³ Navy Aviation Instrument Metering Station, Chinese People's Liberation Army, Shanghai 200436, China

Abstract The boundary element method is a highly efficient algorithm for numerical solution of partial differential equations, which is widely used in solving electromagnetic field problems in micro- and nano-optics. The complex resonance frequency of circular cavity with different numbers of boundary elements is obtained, and its error is discussed. Major error can be regarded as absorption or amplification of electromagnetic waves by microcavity, which is concluded from the analysis of the quality factor. Then refractive index compensation method for fixing the error introduced by discrete process of boundary integral equation is proposed. The accuracy of the boundary element method is improved at least an order of magnitude after the amendment. Moreover, the correction amount obtained by a center frequency is valid, when it is used in a wide range of frequency around the central frequency. Therefore, the refractive index compensation method makes the calculation accurate and the computing speed significantly improved, the time and memory consumption sharply dropped. At the same time, correcting the simulation error from the physical point of view can be extended to other numerical methods.

Key words micro-nano optics; error correction; boundary element method; whispering-gallery mode microcavity

OCIS codes 350.3950; 260.5740; 130.3120

1 引 言

近年来,随着微纳科学技术的快速发展,利用人工微结构材料制作的光学元件种类越来越丰富,观察到的新光学现象层出不穷。近场光学^[1]、金属表

面等离子体^[2]、集成光学^[3]、光子晶体^[4]、光学微腔^[5-7]、负折射材料^[8]等微纳光学分支成为热门的研究方向。微纳光学研究中的一个首要问题是确定微纳结构中及其周围的电磁场分布和与之相联系的

收稿日期: 2013-02-06; 收到修改稿日期: 2013-04-14

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金(11204169)、理论物理专项基金(11247289)

作者简介: 舒方杰(1980—),男,博士,副教授,主要从事微纳光子学方面的研究。E-mail: fjsu@mail.ustc.edu.cn

辐射远场性质。实验中,可以通过近场扫描显微镜测量微纳结构附近的场分布,也可以通过远场的测量数据反推近场分布。但是,无论是近场还是远场探测都不能得到完整的电磁场分布,只能依据具体问题得到部分电磁场分布的信息。因此,只能从麦克斯韦方程出发,代入具体光源和微纳结构的参数,计算各种情况下的电磁场分布。然而,只有在极少数规则的和高度对称的微纳结构中才可以解析求解麦克斯韦方程组。对于更一般的情况,只能将空间离散化后数值求解麦克斯韦方程组。时域有限差分(FDTD)^[9]和有限元(FEM)^[10-11]是两种常用的电磁场数值计算方法,有成熟的商业软件可供使用,能非常方便地求解任意边界形状的电磁场问题。但是,即使是求解二维问题,计算机时间和内存的消耗仍然很严重,所能求解的光学结构的尺寸和数值计算精度都受到极大限制。这是因为计算区域二维离散的网格数目与模型的尺寸成平方关系,计算复杂度和计算时间都相应大幅度地增长。而这两种计算方法的另一个局限性是必须人为设定特别的计算区域边界条件从而带来不可避免的误差。

最近,在光学微腔研究中采用更为高效的边界元方法(BEM)来数值求解其谐振模式和散射问题^[12]。该方法的核心思想是利用格林函数将二维微分方程化为一维边界积分方程,然后把边界积分离散化为求和再数值求解,因此能大大降低计算的复杂程度且不需要设定截断边界条件。对电磁性质分区均匀的微纳光学电磁场问题都可以采用该方法求解^[13-15]。但是边界元法的计算精度仍然受到计算资源的限制^[16],特别是准确求解高品质因子

(Q)模式($Q > 10^6$)对应的复谐振频率虚部存在困难。此前文献^[17]开创性地提出用计算辐射场坡印亭矢量的方法避开谐振频率的计算误差求得超高 Q (10^{10})的精确值。然而,这种方法能提高边界元计算精度的原理并未弄清。只有更进一步地对BEM中数值误差的来源和具体表现进行研究,才能更加有效地改进和利用BEM。

本文在简要介绍BEM之后,分析计算误差,并从物理上解释微腔复谐振频率计算误差的意义,然后通过修正腔的折射率来有效补偿计算误差。采用这种补偿方法将大大提高边界元法的计算精度,并且补偿值在较大的频率范围内均有效。

2 BEM简介

二维简化模型如图1(a)所示,空气中存在单个介质腔,空间被划分成两个电磁性质均匀的区域(用 Ω 表示),它们的边界曲线以 Γ_j 表示。空间中的电磁场分布应满足麦克斯韦方程组,在二维情形下简化为标量场的亥姆霍兹方程:

$$(\nabla^2 + n_j^2 k^2)\psi_j = 0, \quad (1)$$

式中 ψ 表示电磁场复振幅的分布(波函数), n_j 是折射率, $k = \omega/c$ 是真空波矢的大小。以横磁模(TM)的束缚态问题为例, ψ 决定电场强度矢量的 z 方向(垂直纸面方向)分量 $E_z(r, t) = \text{Re}[\psi(r)\exp(-i\omega t)]$,其他不为零的电磁场分量可以由 E_z 求出。由边界条件,即 E_z 和 E_z 法向导数在腔边界连续,无穷远处的场强为零,可以求解以上本征值方程得到谐振模式 ψ 和谐振波矢 k 。

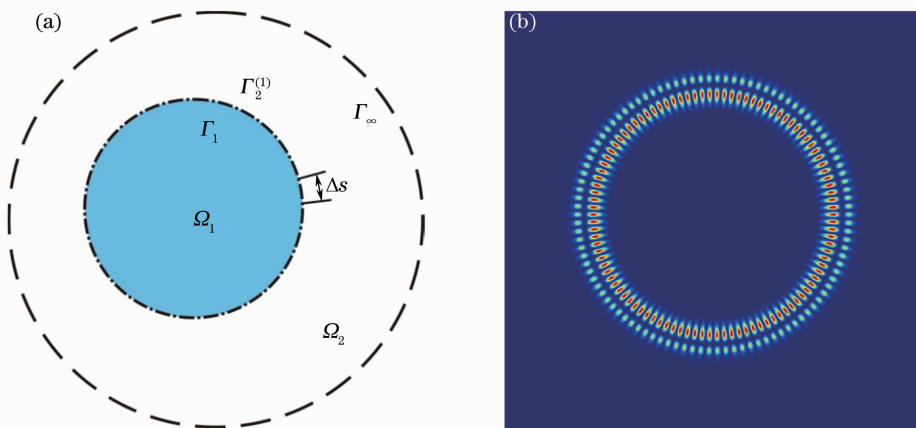


图1 (a) BEM原理图; (b) BEM求解得到模式1的场强

Fig.1 (a) Schematic of BEM; (b) field intensity of mode 1 calculated by BEM

定义格林函数 $G: [\nabla^2 + n^2 k^2]G(r, r'; k) = \delta(r - r')$, 将以上二维偏微分方程化为一维边界积分方程^[11]:

$$\oint_{r_j} ds [\psi(s) \partial_n G(s, r'; k) - G(s, r'; k) \partial_n \psi(s)], \quad (2)$$

式中 r' 是区域中的坐标点, s 是边界上的坐标点, ∂_n 是沿边界法向的偏导。求出边界上的波函数及其法向导数就可以通过(2)式积分得到区域内任意点的函数值。若(2)式的 r' 取边界上的坐标点(记做 s'), 可推知边界场满足的积分方程:

$$\oint_{r_j} ds [B(s', s) \phi(s) + C(s', s) \psi(s)] = 0, \quad (3)$$

式中 $B(s', s) = -2G(s, s'; k)$, $C(s', s) = 2\partial_n G(s, s'; k) - \delta(s - s')$, $\phi(s) = \partial_n \psi(s)$ 。

将边界离散化为足够短的 N_j 个线元, 称其为边界元。将同一边界元上的场及其法向导数视为常数, 则(3)式可以近似为 N_j 个元素的求和:

$$\sum_{l=1}^{N_j} (B_{il} \phi_l + C_{il} \psi_l) = 0, \quad (4)$$

其中, $B_{il} = \int_l ds B(s_i, s)$, $C_{il} = \int_l ds C(s_i, s)$ 。将各边界上离散的线性方程综合起来写成矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 \\ B_2 & C_2 \\ \vdots & \vdots \\ B_j & C_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi \\ \psi \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \phi \\ \psi \end{bmatrix} = 0. \quad (5)$$

其中 B_j 和 C_j 是 $N_j \times N$ 的矩阵, \mathbf{M} 是 $2N \times 2N$ 的方阵。以上线性方程组有解条件是 \mathbf{M} 矩阵对应的行列式等于 0, 由此可以解出谐振波矢, 从而求出边界上的波函数 $\psi(s)$ 及其法向导数 $\phi(s)$ 。

3 误差分析及计算耗时

边界积分方程离散过程中, 将同一边界元上的波函数及其导数当作常数处理会引入误差。另外, 数值计算 B_{il} 和 C_{il} 的积分也会引入误差。这些误差在增加积分内插点特别是增加边界元数目时会显著减小。文献[12]推荐采用最大边界元长度 Δs 约为介质中的波长 $\lambda = 2\pi/n\text{Re}(k)$ 的 $1/16$ 求解一般谐振模式。但是对于长寿命的模式, 为了确定虚部 k 这个很小的数值就需要大大增加边界元的数目。相应地, 内存和计算时间的消耗将大增, 往往会导致内存需求超出计算机的内存总量或者计算时间过长。下面

以圆腔的一个二阶模式(模式 1)为例, 分析 BEM 计算 k 的误差和时间消耗随着边界元数目的变化。

设二维圆腔的折射率 $n = 1.45$ 。归一化频率 kR (其中 R 是腔半径, k 取实部计算) 表征微腔的尺寸和波长的比例关系, 它与微腔折射率 n 的乘积决定了数值求解的规模。在 $kR = 43$ 附近(此时与 $1.55 \mu\text{m}$ 波长对应的腔半径约为 $11 \mu\text{m}$) 通过分离变量法解析求得模式 1 的归一化谐振频率 $kR_0 = 42.92178 - 0.00079i$, 其相应的谐振场强与图 1(b) 给出的数值解极为接近^[17]。 k 是复数, 从前述 E_z 的表达式可以看出, 其实部的大小对应通常的波矢 $2\pi/\lambda$; 虚部表示在无源腔中振幅指数衰减系数, 是一个小的负值。定义 Q 为以角频率 ω 作比例系数的模式总能量和单位时间损耗的能量比值, Q 值越高表示腔场衰减越慢, 或者说光子保留在腔内的平均时间(寿命)就越长, 它是衡量微腔中模式质量的一个重要指标。由定义可以推出 $Q = -\text{Re}(kR)/2\text{Im}(kR)$, 将模式 1 的解析解 kR_0 代入上式得到 Q 为 27166。

用基于 BEM 的广义本征值法^[18]数值求解模式 1 的 kR 。关键步骤是建立线性方程组的系数矩阵 \mathbf{M} , 其矩阵元 B_{il} 和 C_{il} 用含 20 个内插点的高斯积分求出, 以提高求解精度。因为 \mathbf{M} 是非厄密的复数矩阵, 因此求解得到广义本征值 kR 也是复数。分别考察 kR 的实部、虚部误差绝对值和 Q 的相对误差随计算采用的边界元数目 N 的变化[图 2(a)~(c), 圆圈线]。由图可见, 误差变化的整体趋势是随边界元数目的增大而减小, 并且减小的速度逐渐放缓。在 N 由 400 增加到 1200 的过程中, kR 虚部的误差从 1.6×10^{-2} 降低为 1.4×10^{-3} , 减小约一个数量级。实部的误差在 N 由 50 增加到 200 的过程中急剧下降, 下降后其误差的绝对值均小于虚部误差绝对值, 但是二者没有数量级上的差别。注意到 kR 的解析解中, 实部比虚部大 4 个数量级, 因此在 Q 较高的这个二阶模式中, 数值计算误差对 kR 的虚部影响较大。例如, 在文献推荐的 $N = 16nkR \approx 1000$ 处, 实部和虚部误差绝对值分别为 9.6×10^{-4} 和 2.1×10^{-3} , 而相对误差分别为 0.002% 和 260%。显然采用 N 的推荐值求解 kR 实部的精度已经足够高, 但是虚部的误差过大, 从而无法求得正确的 Q 值。 Q 的相对误差也是随 N 的增大而减小, 但减小的速度放缓, 在 N 由 50 增加到 1200 的过程中, Q 的计算误差从接近 100% 仅下降到 64% 左右。

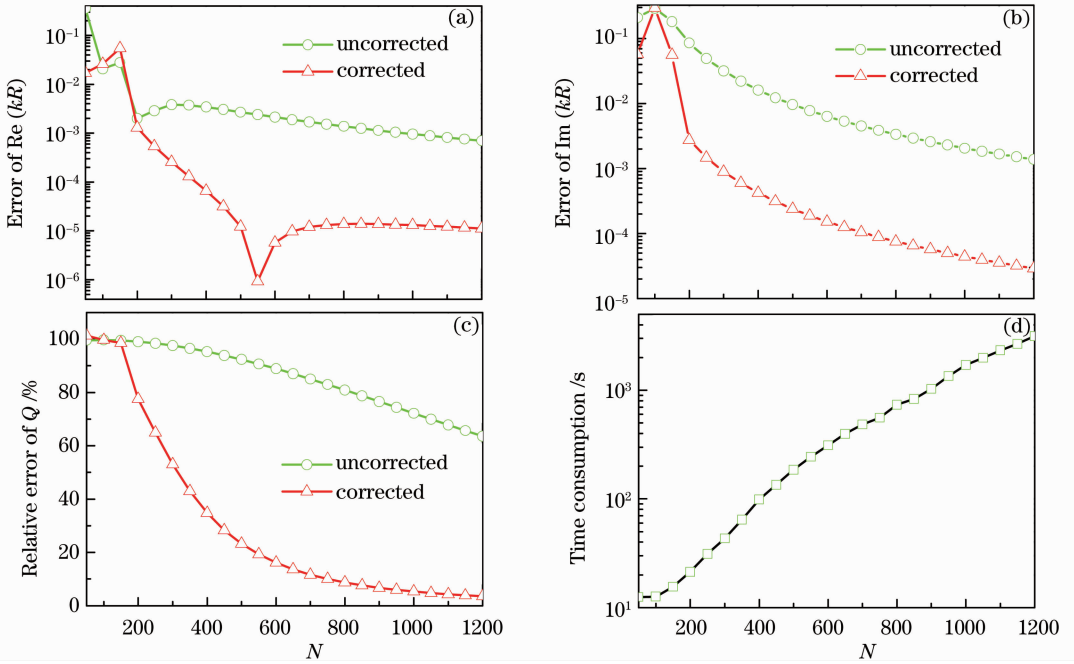


图 2 误差和修正。(a) kR 实部; (b) kR 虚部; (c) Q ; (d) 计算耗时随边界元数目的变化曲线

Fig. 2 Errors and corrections. (a) Real part of kR ; (b) imaginary part of kR ; (c) Q ;

(d) time-consumptions vary with numbers of boundary elements

由图 2 可知,直到 $N=1200$ 时,计算精度仍然无法满足通常对数值计算结果的要求。若要将虚部的相对误差减小到 5% 以内,根据曲线的趋势估计 N 取值应大于 10000。而二维矩阵 M 随着 N 的增大,其特征值求解的内存和时间消耗快速增长。依据经验, Linux 操作系统下 4 G 内存的工作站在 Matlab 软件中 N 最大仅能取到 4000, 否则将报错:“内存不足”。即使计算机拥有足够大的内存,近指数增长的计算时间消耗[图 2(d)]在取较多边界元数目时将严重妨碍 BEM 的实际应用。

4 折射率修正

上述理想模型中,腔场衰减的现象是由于腔边界倏逝场的辐射造成的,由它决定的品质因子记为 Q_{rad} ,这是品质因子的理论值。但是在边界元数目不足时(不是无穷大),求解谐振频率 kR 得到的 Q 与 Q_{rad} 总是存在差异。参考实验中微腔 Q 的综合表达式为

$$\frac{1}{Q} = \frac{1}{Q_{\text{rad}}} + \frac{1}{Q_{\text{abs}}} + \frac{1}{Q_{\text{sca}}}, \quad (6)$$

其中, Q_{abs} 是由于材料不均匀和对光的吸收或者放大引入的, Q_{sca} 是由于微腔边界不光滑造成光的散射引入的。在 BEM 离散化过程中,用有限的离散边界元代替连续的边界会增大光在边界上的散射,造

成额外的散射损耗,与(6)式中的第三项 Q_{sca} 相对应。另外,其他数值误差引起的类似材料不均匀和对光的吸收或者放大的误差由 Q_{abs} 概括。

在 Q_{abs} 和 Q_{sca} 这两项中只有 Q_{sca} 项才对腔模总能量与向外辐射能流的比例产生影响。文献[17]采用计算腔模能量与辐射能流比例的方法能够得到非常精确的 Q ,这说明在 BEM 误差中 Q_{sca} 可以忽略。实际上,因为选取的边界元长度都比波长小得多,离散化造成的边界不光滑的尺度不易被光波“察觉”,因此产生的散射效应不明显。注意,采用文献[17]方法获取精确的高 Q 必须先计算场分布,这在 BEM 计算中是非常耗时的,并且该方法没有从根本上提高矩阵 M 的精度,因此在用 BEM 解决其他非本征值问题,如计算散射场时,误差没有被减小。

下面考虑如何修正 BEM 数值计算得到的 Q 使之接近理论值 Q_{rad} ,即将 Q_{abs} 造成的误差补偿掉。由第 3 节 kR 误差分析可知, Q_{abs} 的存在造成 kR 的实部和虚部均有误差。其中 kR 的实部误差类似于实验中材料不均匀所造成的有效折射率变化的误差,而 kR 的虚部的误差类似于材料对光的吸收或放大。也就是说, BEM 中的离散处理产生的误差从整体上可当作在原材料折射率 n 的基础上附加一个复数误差项 Δn 。那么只需要找出 Δn 的值,然后将它的影响消除,就能修正特征矩阵 M ,从而得出较

精确的 kR 。这一点从 n 和 k 在亥姆霍兹方程中的相同地位也可以看出。

将 kR 当作以 n 为自变量的函数,考虑 BEM 误差的线性部分,参照理论值 kR_0 ,利用牛顿迭代法找出 Δn 的值。数值计算与模式 1 临近的另一 2 阶模式(模式 2,谐振频率理论值为 $kR'_0 = 42.17768 - 0.00101i$),取 $N=400$,在 4 次迭代后收敛的 $\Delta n = -0.00012 + 0.00055i$ 。以 $n' = n - \Delta n$ 作为修正之后的复数折射率,BEM 在 $N=400$ 时计算得到 kR 绝对误差的实部和虚部均小于 10^{-6} , Q 的相对误差小于千分之一。

相反,在不同的 N 下分别求出模式 2 的 n' ,用这些 n' 修正模式 1,得到修正之后 kR 误差随 N 的变化曲线[图 2(a)、(b),三角线]。修正以后误差在边界元大于 400 点之后都比未修正的值至少低一个数量级。由相应的修正后 Q 值随 N 的变化曲线[图 2(c),三角线]所示,在 N 大于 200 之后 Q 的相对误差与修正前相比有显著的下降,在 $N=1000$ 时相对误差仅 5%,不到修正前的十分之一。

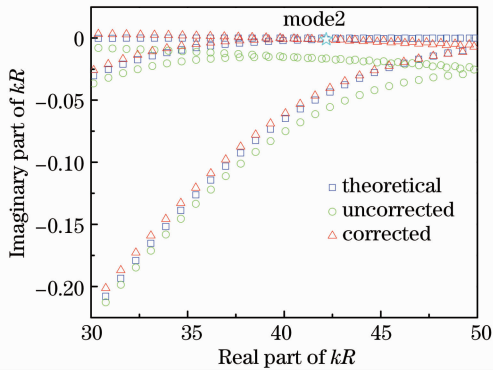


图 3 kR 在复平面的分布

Fig. 3 Distribution of kR in complex plane

既然由模式 2 的理论值和数值解的差别出发求得修正后的 n' 可以有效修正另一模式 1 的 BEM 计算误差,可以推测 BEM 误差与 kR 的关系较小。在 $N=400$ 时,以上面找出的那个 n' 对 $kR=30\sim 50$ 的所有 1、2、3 阶模式做修正。画出这些模式 kR 的理论值、修正前后的 BEM 计算值(图 3)。由图可见,在很大的 kR 范围内的各阶模式中,修正后(三角线)的值都比修正前(圆圈线)要更接近理论值(方框线),由此证明补偿方法在较大频率范围对各阶模式都有效。

5 结 论

BEM 的计算误差严重影响其在计算高 Q 模式

时的有效性,而折射率补偿法可以在不计算场分布、不增加过多计算量的情况下,通过直接修正 BEM 的特征矩阵使误差降低至少一个数量级。这将大大节约数值计算时间和计算资源,拓展边界元方法的适用性。注意在没有理论值做修正参考量的情况下,补偿法需参照计算辐射场坡印亭矢量的方法^[17]得到的较精确结果,那么在求解某一特定模式时不具备高精度和低消耗的优势。但是做频率扫描计算时无需对每一个频率都寻找修正量,这将发挥补偿法的优势。虽然是以微腔的边界元方法为例,但是该修正可以直接推广到其他分区域均匀的微纳结构的边界元求解中。从物理角度分析,修正数值计算误差这样的数学问题的思想也可以推广到有限差分法和有限元方法等其他数值计算方法中。

参 考 文 献

- 1 E Betzig, J K Trautman. Near-field optics: microscopy, spectroscopy, and surface modification beyond the diffraction limit [J]. *Science*, 1992, 257(5067): 189–195.
- 2 E Ozbay. Plasmonics: Merging photonics and electronics at nanoscale dimensions [J]. *Science*, 2006, 311(5758): 189–193.
- 3 A Ksendzov, Y Lin. Integrated optics ring-resonator sensors for protein detection [J]. *Opt Lett*, 2005, 30(24): 3344–3346.
- 4 K Sakoda. *Optical Properties of Photonic Crystals* [M]. New York: Springer, 2004.
- 5 Y F Xiao, C L Zou, Y Li, *et al.*. Asymmetric resonant cavities and their applications in optics and photonics; a review [J]. *Front Optoelectron China*, 2010, 3(2): 109–124.
- 6 Shu Fangjie, Yang Qifan. Research progress of asymmetric microcavity [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, 49(6): 060006.
舒方杰, 杨起帆. 非对称微腔研究进展 [J]. *激光与光电子学进展*, 2012, 49(6): 060006.
- 7 Zou Changling, Dong Chunhua, Cui Jinming, *et al.*. Whispering gallery mode optical microresonators: fundamentals and applications [J]. *Sci Sin-Phys Mech Astron* 2012, 42(11): 1155–1175.
邹长铃, 董春华, 崔金明, 等. 回音壁模式光学微腔: 基础与应用 [J]. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2012, 42(11): 1155–1175.
- 8 J Yao, Z Liu, Y Liu, *et al.*. Optical negative refraction in bulk metamaterials of nanowires [J]. *Science*, 2008, 321(5891): 930.
- 9 K Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. *IEEE Trans Antennas Propag*, 1966, 14(3): 302–307.
- 10 O C Zienkiewicz, R L Taylor, J Z Zhu. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals* [M]. London: Butterworth-Heinemann, 2005.
- 11 Lu Qijing, Wu Genzhu, Chen Daru, *et al.*. Optimal design and application of surface plasmon polaritons microdisk [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(7): 0714002.
卢启景, 吴根柱, 陈达如, 等. 表面等离子体微盘的优化设计及应用 [J]. *光学学报*, 2012, 32(7): 0714002.
- 12 J Wiersig. Boundary element method for resonances in dielectric microcavities [J]. *J Opt A: Pure Appl Opt*, 2003, 5(1): 53–60.
- 13 J J Xiao, C T Chan. Calculation of the optical force on an infinite

- cylinder with arbitrary cross section by the boundary element method [J]. *J Opt Soc Am B*, 2008, 25(9): 1553–1561.
- 14 F J Shu, C L Zou, F W Sun. Dynamic process of free space excitation of asymmetric resonant microcavity [J]. *J Lightwave Technol*, 2013, 31(12): 1884–1889.
- 15 H H Zheng, J J Xiao, Y Lai, *et al.*. Exterior optical cloaking and illusions by using active sources: a boundary element perspective [J]. *Phys Rev B*, 2010, 81(19): 195116.
- 16 J Elisee, M Bonnet, S Arridge. Accelerated boundary element method for diffuse optical imaging [J]. *Opt Lett*, 2011, 36(20): 4101–4103.
- 17 C L Zou, Y Yang, C H Dong, *et al.*. Accurately calculating high quality factor of whispering-gallery modes with boundary element method [J]. *J Opt Soc Am B*, 2009, 26(11): 2050–2053.
- 18 C L Zou, H G L Schwefel, F W Sun, *et al.*. Quick root searching method for resonances of dielectric optical microcavities with the boundary element method [J]. *Opt Express*, 2011, 19(17): 15669–15678.

栏目编辑: 韩 峰