封 面 ：

分类号________________ 密级________________

U D C________________ 编号________________

厦 门 大 学

博 士 后 研 究 工 作 报 告

电磁场本征值问题的高效混合谱元及混合有限元数值算法研究

刘 娜

工作完成日期 2017.03.16

报告提交日期 2017.03.16

厦门大学

2017 年 03 月

题名页

电磁场本征值问题的高效混合谱元及混合有限元数值算法研究

The Efficient Mixed Spectral Element Method and the Mixed Finite Element Method for Maxwell's Eigenvalue Problem

博　士　后　姓　名　刘娜

流动站（一级学科）名称　仪器科学与技术

专　业（二级学科）名称　计算电磁学

研究工作起始时间　2013 年 11 月

研究工作期满时间　2017 年 03 月

厦 门 大 学

2017 年 03 月

厦门大学博士后研究工作报告
著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用博士后研究工作报告的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交该报告的纸质版和电子版，有权将该报告用于非赢利目的的少量复制并允许该报告进入学校图书馆被查阅，有权将该报告的内容编入有关数据库进行检索，有权将博士后研究工作报告的标题和摘要汇编出版。保密的博士后研究工作报告在解密后适用本规定。

本研究报告属于： 1、保密（ ）， 2、不保密（ ）

纸本在 年解密后适用本授权书；

电子版在 年解密后适用本授权书。

（请在以上相应括号内打“ √ ”）

作者签名： 日期： 年 月 日

导师签名: 日期： 年 月 日

中文摘要

电磁场本征值问题求解是计算电磁学的一个重要部分。本文的主要工作是研究电磁场本征值问题的快速高效数值方法。依照基函数选取不同分为两部分内容。第一部分研究了高精度混合谱元法，第二部分发展了混合有限元法，提出可质量矩阵对角化混合有限元法及传输阻抗边界混合有限元法。第一部分具体包括以下两方面工作：

一、运用 Kikuchi 混合变分格式耦合高斯定律提出了混合谱元法，用于求解二维及三维非均匀介质、耗散介质、及各向异性介质的电磁场本征值问题。该方法使用 Gauss-Lobatto-Legendre (GLL) 多项式构造切向相容的矢量基函数及全连续的标量基函数分别近似电场场量及拉格朗日乘子辅助函数。给出二维混合谱元法严格的数学收敛性分析。数值结果表明混合谱元新算法不仅保持数值解的谱收敛性，而且可以彻底消除本征值问题的所有伪解。

二、对于 2.5-D 波导问题，发展了基于亥姆霍兹方程的切向分量与高斯定律新变分形式下的混合谱元法。且由于使用 GLL 多项式构造的基函数产生对角质量矩阵，使得最终只需求解仅含有电场切向分量自由度的特征值问题，加快了波导模式分析求解速度。在损耗介质、各向异性介质波导结构及 PML 截断的开波导仿真数值结果表明新方法不但保持谱精度，而且具有很高的计算效率。

表面等离激元 (SPP) 因为能够突破衍射极限，被认为是最有可能实现下一代集成光学回路的器件之一。而表面等离激元光波导具备亚波长束缚的能力，成为近几年微纳光波导的研究热点。为了实现表面等离激元波导的快速模式分析计算，我们分别发展了可质量矩阵对角化混合有限元法及传输阻抗边界混合有限元法，具体内容为：

一、可质量矩阵对角化混合有限元法由亥姆霍兹方程的切向分量及高斯定律组成，运用改进的二阶结点基函数得到对角质量矩阵，使得离散的广义本征值问题简化为一个更小规模的线性特征值问题。大量波导算例验证了方法的有效性，得到计算效率远优于传统混合有限元法的数值结果。

二、针对石墨烯等离激元波导，只有一个单原子层厚度石墨烯薄片需要密集网格离散、花费大量的 CPU 计算时间和内存消耗，我们提出传输阻抗边界混合有限元法，该方法通过引入等价边界条件来替代二维石墨烯材料，极大的减少了本征值问题求解的自由度。石墨烯等离激元波导数值结果表明新方法可以保持有限元的精确，在 CPU 计算时间和内存消耗上有很大的优势。

关键词： 电磁场本征值问题，伪解，混合谱元法，混合有限元法，表面等离激元波导

Abstract

The Maxwell's eigenvalue problem is an important part of computational electromagnetics. The main work of the research report is to investigate the fast and efficient numerical methods for the Maxwell's eigenvalue problem. In terms of the differences in basis functions the work consists of the two part. The first part is about the higher-order mixed spectral element method, and the second part is the mixed finite element method including the mass-lumping mixed finite element method and the mixed finite element method with the impedance transmission boundary condition. The first part contains the following two issues:

1. We propose the mixed spectral element method by employing the Kikuchi's mixed weak form which includes the divergence-free condition given by Gauss' law to solve the two dimensional and three dimensional vector Maxwell's eigenvalue problem with inhomogeneous, lossy isotropic, and anisotropic media. It utilizes Gauss-Lobatto-Legendre (GLL) polynomials to construct the vector curl-conforming basis functions for the electric field and the completely continuous nodal basis functions for the auxiliary variable. A rigorous analysis of the convergence of the mixed SEM for the two dimensional problem is presented, based on the higher order edge element interpolation error estimates, which fully confirms the robustness of our method. numerical examples are given to verify that the mixed SEM is free of any spurious eigenmodes and has spectral accuracy with analytic eigenvectors.

2. For the 2.5-D waveguide problem, we develop the mixed spectral element method based on the tangential part of Helmholtz equation and the Gauss' law. Note that the mass-lumping technique can be performed when the Gaussian quadrature is used to obtain the mass matrix for the longitudinal part. Thus, only a smaller scale eigenvalue problem needs to be solved for the unknowns associated with the transversal components of the electric field, and the smaller eigenvalue equation speeds up the computation. Several numerical examples with lossy, anisotropic media and PML are given to verify that the mixed SEM has the spectral accuracy with the propagation constant and the high computational efficiency.

Due to its beyond diffraction limit, surface plasmon polariton (SPP) is thought to be most likely to achieve one of the next generation of integrated optical circuit device. Since the capability of subwavelength bound of the SPP waveguides, they have become the focus in the micro-nano optical waveguide in recent years. In order to efficiently and accurately analyze the optical response of plasmons, we propose the mixed finite-element method with mass lumping and the mixed finite element method with the impedance transmission boundary condition for graphene plasmonic waveguides. The contents of the second part are:

1. The mixed finite-element method with mass lumping is based on the tangential part of Helmholtz equation and the Gauss' law, and employ the modified nodal-based scalar basis functions for the longitudinal component. The smaller scale generalized eigenvalue problem is obtained by employing the mass lumping technique. Numerical examples verify that the mixed finite-element method with mass lumping has the higher efficiency than the conventional mixed finite element method.

2. For the graphene plasmonic waveguides problem, an extremely fine mesh as well as high costs of CPU time and memory are needed for the one-atom thickness of the graphene sheets. We propose the mixed finite element method with the impedance transmission boundary condition for graphene plasmonic waveguides, the graphene sheet is replaced by a one-dimensional line for efficient calculation. Numerical results on some designed graphene-based waveguides clearly demonstrate that the proposed method can keep the FEM accuracy but with less computational costs.

Key words: Maxwell's eigenvalue problem; spurious mode; mixed spectral element method; mixed finite element method; graphene plasmonic waveguide

目 录

中文摘要 I
英文摘要 II
中文目录 V
插图索引 VII
表格索引 X
第一章 绪论 1
1.1 研究背景 1
1.2 有限元、谱元算法 2
1.3 本文主要工作 3
第二章 二维及三维电磁场本征值问题的混合谱元法 5
2.1 问题介绍 5
2.2 二维混合谱元法 5
2.2.1 二维混合谱元法基函数 8
2.3 二维混合谱元法收敛性分析 12
2.4 数值算例 13
2.4.1 各向同性均匀介质正方形腔体 13
2.4.2 L 形腔体 16
2.4.3 同轴腔体 17
2.5 三维混合谱元算法 19
2.5.1 三维混合谱元法基函数及离散方程 20
2.6 数值算例 21
2.6.1 三维矩形腔体 21
2.6.2 三维圆形介质开问题 22
第三章 2.5D 电磁场本征值问题的混合谱元算法 26
3.1 2.5D 波导结构的电磁场方程及变分形式 26
3.2 谱元基函数及离散的本征值方程 28
3.3 数值算例 31
3.3.1 均匀各向同性矩形波导 31

3.3.2 屏蔽镜像波导 . . . 32
3.3.3 耗散、各向异性介质波导 . . . 34
3.3.4 圆形介质开波导 . . . 35
第四章 波导模式计算的可质量矩阵对角化的混合有限元法 . . . 38
4.1 三角形 LT/QN 和可质量矩阵对角化的基函数 . . . 38
4.2 离散后的本征值方程 . . . 40
4.3 数值算例 . . . 41
4.3.1 矩形波导 . . . 41
4.3.2 脊形波导 . . . 42
4.3.3 石墨烯三明治纳米带波导 . . . 43
4.3.4 混合式的等离激元波导 . . . 44
第五章 石墨烯等离激元波导模式计算的传输阻抗边界混合有限元法 . . . 48
5.1 问题介绍 . . . 48
5.2 ITBC 适用于石墨烯材料的验证 . . . 49
5.3 ITBC 在混合有限元方法中实施 . . . 51
5.4 数值算例 . . . 53
5.4.1 石墨烯三明治纳米带波导 . . . 53
5.4.2 石墨烯-金等离激元波导 . . . 56
5.4.3 屋脊型石墨烯波导 . . . 56
第六章 结论与展望 . . . 59
6.1 本文结论 . . . 59
6.2 工作展望 . . . 60
参考文献 . . . 61
博士后期间发表的学术论文、专著 . . . 69
致谢 . . . 73

插图索引

图 2.1 $N=3$ 时混合阶矢量基函数在参考元上的分布。 10
图 2.2 $N=5$ 时 GLL 点在参考元上的分布。 10
图 2.3 各向同性均匀介质正方形腔体前 25 个本征值数值结果。(a) 四阶基函数 32 个规则四边形网格下，传统谱元法会产生 961 个零伪模。正方形腔体的本征值解析解有横线表示，其中(1)，(2) 表示该本征值的重数。(b) 混合谱元法可以消除所有零伪模。 14
图 2.4 混合谱元法计算所得前 7 个本征值相对误差在 Semilog 坐标系下随基函数阶数变化关系。 15
图 2.5 混合谱元法所计算得到 L 形腔体最小的前五个本征值相对误差随基函数阶数的变化。 16
图 2.6 混合谱元法求解同轴腔体时所使用的曲边四边形网格及 $N=5$ 时曲边四边形上 GLL 点的分布。 . 18
图 2.7 混合谱元法得到最小的前十个本征值平均误差、第二个及第十个本征值相对误差随基函数阶数变化。 18
图 2.8 基函数 $N=3$，$\zeta=-1$ 面上三维切向相容矢量基函数的分布。 20
图 2.9 三维矩形腔体的本征值分布。左: 当基函数 $N=4$ 八个正交六面体网格中，传统谱元法计算数值结果中有 343 零伪模。右: 混合谱元法可以消除伪解的产生。这里矩形腔体的解析本征值由横线表示出，其中 (1)，(2) 代表该本征值的重数。 22
图 2.10 三维矩形腔体前八个最小本征值的平均相对误差及第一个、第八个最小本征值相对误差随基函数阶数增大变化情况。 23
图 2.11 三维圆形介质开问题。 23
图 2.12 圆形介质开问题的 XY 平面视图下曲边六面体网格。 24
图 2.13 圆形介质开问题的最小本征值所对应的电场强度 $|\mathbf{E}|$ (V/m) 在 z = 4.5 m 处的分布。 25
图 3.1 $N=3$ 时参考单元上基函数分布，其中箭头向量代表电场切向分量近似的矢量基函数，红点为电场纵向分量开展的结点基函数。 29
图 3.2 均匀各向同性矩形波导中传播常数 k_z 的相对误差随混合谱元基函数阶数的变化。 31
图 3.3 二阶基函数下不考虑高斯定律的传统谱元法所求解得到传播常数 k_z 分布情况。传统谱元法会产生 257 个零伪模，分布在横坐标 542 至 798 处。 32
图 3.4 二阶基函数下混合谱元法所求解得到传播常数 k_z 分布情况。混合谱元法无伪解出现。 33
图 3.5 屏蔽镜像波导几何结构，其中 h = 3.2 mm，w = 2.15625 h，b = 1.144783 w， a = 2 b 及 $\boldsymbol{\epsilon_1}=\epsilon_0$， $\boldsymbol{\epsilon_2}=9\epsilon_0$， $\boldsymbol{\mu_1}=\boldsymbol{\mu_2}=\mu_0$。 33
图 3.6 屏蔽镜像波导结构前 6 个传输模式的色散关系：归一化传播常数 k_z/k_0 归一化频率 wk_0 的变化关系，其中 $\diamond$ 为 $N=4, 4,144$ 个自由度下混合谱元法结果； —为文献[67] 中结果。 34

图 3.7 圆形各向异性波导结构的第一、第五个模式相对误差及前五个模式的平均相对误差随混合谱元法中基函数阶数的变化。 . . . 35
图 3.8 圆形开波导的几何结构及曲边四边形单元，其中最外层为 PML 区域。 . . . 36
图 3.9 混合谱元法计算得到圆形开波导两个 HE_{11} 模式的 $|\mathbf{e}_t|$ 场强分布。(a) 第一个传输模式，(b) 第一个传输模式。 . . . 37
图 3.10 圆形开波导 HE_{11} 模式的色散关系。—: 各向同性介质下圆形开波导的解析色散关系($\boldsymbol{\epsilon_r} = 2.56$); ·: $N = 6$，2028 个自由度下混合谱元法计算得到的各向同性介质圆形开波导色散关系; ∘: 相同阶数下混合谱元法计算得到的各向异性介质(3-16)的圆形开波导色散曲线。 . . . 37
图 4.1 参考单元上基函数的分布。(左) LT/QN 矢量基函数的分布情况; (右) 改进的二阶结点基函数分布。 . . . 40
图 4.2 脊形波导的几何结构。 . . . 42
图 4.3 脊形波导的准 TE 模式归一化 $|e_x|$ (左) 和 $|e_y|$ (右) 场强分布。 . . . 43
图 4.4 石墨烯三明治纳米带波导放置在真空背景中，其中 $W = 300$ nm， $d = 2$ nm 及 $n_d = 1.4$ 为中间介质带的折射率。 . . . 44
图 4.5 石墨烯波导结构在不同介质带折射率下的模式谱。×, + 和 ∗ 符号数据代表 COMSOL 结果。 . . . 44
图 4.6 图 4.5 表示模式的 e_y 场量分布。模式 1-3 是束缚模，模式 4 为非束缚模 . . . 45
图 4.7 束缚模式 1 和非束缚模式 4 的 $|\mathbf{e}|$ 分布放大图。 . . . 45
图 4.8 当 $w_{sb} = 150$，$g = 15$ nm 时，对称混合式波导结构的等离激元模式电场 $|\mathbf{e}|$ 分布。 . . . 46
图 4.9 [95] 中对称混合式波导的模式分析。(a) 有效折射率 n_{eff} 随底部槽缝的宽度 w_{sb} 和缝隙厚度 g 的变化。(b) 传播距离 L 随底部槽缝的宽度 w_{sb} 和缝隙厚度 g 的变化。▷，+，∗ 符号代表新算法结果。−，−.，−− 线型数据代表 COMSOL 仿真结果。 . . . 47
图 5.1 石墨烯薄片不同的处理方式。左：石墨烯为单原子层厚度薄片；右：一维有限长度的线段 L 替代石墨烯薄片。 . . . 50
图 5.2 在 $[1, 600]$ THz 频率范围下 $\tau = 0.5$ nm, $T = 300$ K, $\Gamma = 0.1$ meV 时，对不同的电化学势 μ_c 趋肤深度 δ 和波长 τ 对波长 λ 的比率。 . . . 50
图 5.3 两个 ITBC 相邻单元 T_1 和 T_2 上自由度的分布，ITBC 公共棱 L 上的二阶矢量基函数 LT/QN 和结点基函数是不连续的，在两个单元中有不同的自由度。 . . . 52
图 5.4 不同石墨烯处理方法所产生的有限元网格。(a) 石墨烯薄片直接离散所产生的密集有限元网格。(b) 石墨烯薄片被线段替代后使用的稀疏网格。 . . . 54
图 5.5 石墨烯三明治纳米带波导结构所支持的前 12 个传输模式的归一化传播常数 $|k_z/k_0|$。 . . . 55
图 5.6 石墨烯三明治纳米带波导的场分布，模式 1-3 为束缚模式，而模式 12 为反束缚模式。 . . . 55
图 5.7 石墨烯-金等离激元波导的几何结构，其中石墨烯宽度 $W = 300$ nm，介质带折射率 $n = 1.5$ 其厚度设为 G。 . . . 56

图 5.8 图 5.7 所示石墨烯-金波导结构对不同费米能级和介质带厚度的模式谱。图中线型符号 $-$， $--$， $-\cdot$， $\cdots$ 代表 COMSOL 计算结果，离散标记符号代表新算法的数值结果。. 57
图 5.9 屋脊型石墨烯等离激元波导几何结构。. 58
图 5.10 图 5.9 波导结构归一化传播常数与传播距离的色散关系。线型 $-$， $--$ 结果出自于文献[50]，离散标记符号代表新算法的数值结果。. 58
图 5.11 图 5.9 屋脊型石墨烯波导传输模式 A 和模式 B 的 $|\mathbf{e}_t|$ 电场分布。. 58

表格索引

表 2.1 $N=1$ 时均匀各向同性正方形腔体的 TE_{11} 模式随网格 h 的收敛性分析。 14
表 2.2 当 $N=1$ 时，混合谱元法求解的正方形腔体本征值的收敛速度。 15
表 2.3 N=3时传统谱元法及混合谱元法所得到 L 形腔体的五个本征值。 17
表 2.4 N=3 时混合谱元法得到同轴腔体最小的前五个本征值。 19
表 2.5 基函数 $N=4$ 时混合谱元法计算圆形介质开问题得到的最小的两个本征值及其 COMSOL 数值结果。 25
表 3.1 带耗散介质的圆形波导在基函数 $N=6$ 时的混合谱元法和 COMSOL 数值结果比较。 34
表 3.2 $N=5$ 时混合谱元法计算得到各向异性介质下圆形波导的前五个模式值。 35
表 3.3 $N=6$ 时混合谱元法计算得到两个传输模式及其对应的解析解。 36
表 4.1 可质量矩阵对角化的混合有限元法和 COMSOL 分别计算得到的矩形波导五个模式值。 42
表 4.2 由新算法，COMSOL，传统混合有限元法得到脊形波导的归一化传播常数 k_z/k_0。 43
表 5.1 传输阻抗边界混合有限元和传统有限元方法在计算石墨烯三明治纳米带波导前 5 个传输模式所消耗的 CPU 计算时间和内存比较结果。 54
表 5.2 在参数 $G=4$ nm，$\mu_c=0.7$ eV 下计算前 5个传输模式 COMSOL 和传输阻抗边界混合有限元法所使用的 CPU 计算时间和内存消耗。 57