Effiziente Transparente Randbedingungen für Finite-Differenzen Ausbreitungsrechnungen

M. Lohmeyer, M. Shamonin, P. Hertel

Fachbereich Physik der Universität Osnabrück

Die Arbeit wird unter dem Titel "Boundary Conditions for the Finite Difference Beam Propagation Method based on Plane Wave Solutions of the Fresnel Equation" im IEEE Journal of Quantum Electronics *erscheinen.*

Bei jeder Implementierung der Strahlausbreitungsmethode (BPM) müssen Algorithmen verwendet werden, die gewährleisten, daß nicht geführte Feldanteile den Bereich des Rechenfensters verlassen. Unser Verfahren stellt auch für Randpunkte feldunabhängige Differenzenschemata zur Verfügung, die zunächst eine gleichartige Behandlung aller Punkte des Rechenfensters erlauben. Feldkorrekturen wie zu den transparenten Randbedingungen (TBC) nach G. R. Hadley [7] vervollständigen die Methode und erzeugen eine den TBC vergleichbare Transparenz der Ränder. Die neuen Randbedingungen sind in zwei– und dreidimensionalen Simulationen gleichermaßen einfach zu programmieren. Durch die Wiederverwendung bereits bearbeiteter Ausbreitungsmatrizen lassen sich viele Rechnungen erheblich beschleunigen.

Die Arbeit wurde im Rahmen des SFB 225 von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützt.

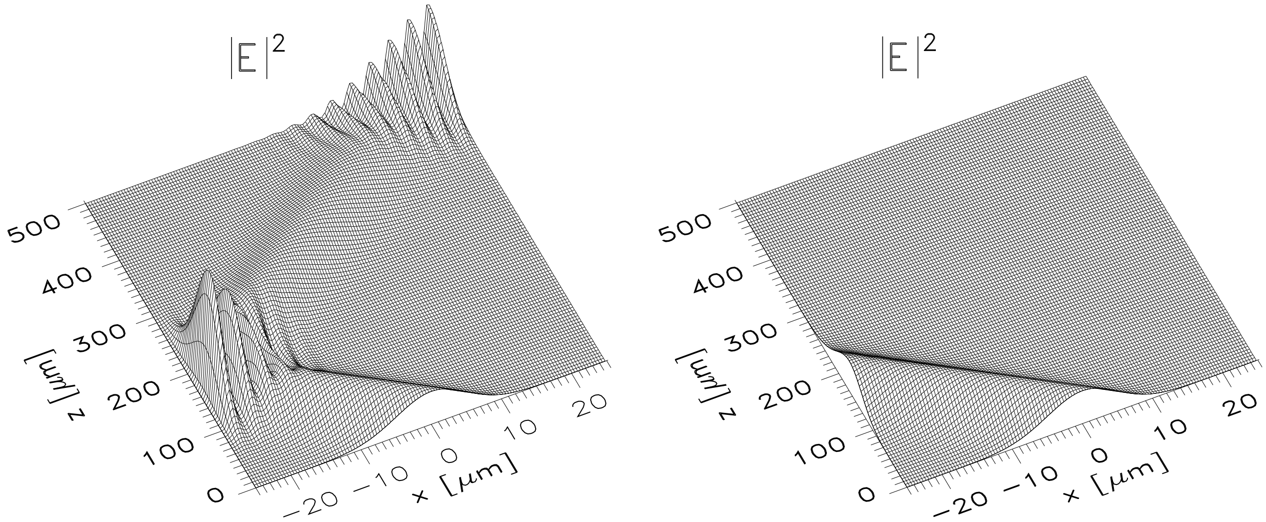
Posterbeitrag zur Sommerschule
" Partielle Differentialgleichungen, Numerik und Anwendungen " *02.–06.09.96, Jülich*

Fachbereich Physik, Unversität Osnabrück *Barbarastraße 7, 49069 Osnabrück*
Tel.: 0541/969-2641 *Fax: 0541/969-2670* *e-mail: manfred.lohmeyer@physik.uni-osnabrueck.de*

I Transparente Randbedingungen

Standard-Randbedingungen — Vorgabe von Feld oder Richtungsableitung — führen bei Implementationen der „Beam Propagation Method“ (BPM) [6], [11], [12] nicht zum gewünschten Ergebnis:

Randbedingung $E = 0$ *Transparente Randbedingungen*



2-D Rechungen zur Ausbreitung Gaußscher Strahlen im freien Raum. Vorgabe: Gauß-Profil in $z = 0$ zum Strahlwinkel 8° gegen die Ausbreitungsrichtung z. Dirichlet-Randbedingungen ergeben reflektierende Ränder (links), Transparente Randbedingungen simulieren ein unbegrenztes Rechenfenster (rechts).

Bereits vorgeschlagene Verfahren zur Abhilfe:

- Absorbierende Randbedingungen [6],[11]: Brechzahlen mit nach außen wachsendem Imaginärteil in den Randzonen des Rechenfensters.
- Integrationsmethoden [2], [1], [10]: Analytische Beschreibung der Felder am Rand mit Hilfe Green'scher Funktionen.
- „Transparent Boundary Conditions“ (TBC) [7], [8]: Korrekturen in Feldern *und Ausbreitungsmatrizen* abhängig von der Feldform in Randnähe.

Dieser Beitrag stellt einen alternativen Ansatz vor, der

- auch für die Randpunkte feste Differenzenschemata zur Verfügung stellt, deshalb keinen nur durch die Ränder bedingten zusätzlichen Bedarf an Zeit und/oder Speicherplatz verursacht,
- nicht strukturabhängig angepaßt werden muß,
- in Verbindung mit einem Teil des TBC-Algorithmus eine den TBC vergleichbare Transparenz der Ränder garantiert,
- in dreidimensionalen, vektoriellen Simulationen ohne Aufspaltung des Laplace-Operators anwendbar ist und korrekt funktioniert,
- Rechenzeiten für längshomogene Abschnitte im Vergleich zu den TBC erheblich reduziert: $O(N_z \cdot (N_x \cdot N_y)^3) \longrightarrow O((N_x \cdot N_y)^3 + N_z \cdot (N_x \cdot N_y)^2)$

II Wellengleichungen und finite Differenzen

- Ausgangspunkt: **Maxwell-Gleichungen** in einem — wenigstens in den Randbereichen — linearen, isotropen und homogenen Medium mit Brechungsindex n für optische Felder mit harmonischer Zeitabhängigkeit $\sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$:

  $$\Delta F + k^2 n^2 F = 0$$

  F: eine der Komponenten zu $\boldsymbol{E}$ oder $\boldsymbol{H}$, $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$.

- **Koordinaten:** kartesisches Koordinatensystem mit Achsen x, y, z;
  z: Ausbreitungs- oder Longitudinalrichtung,
  x, y: Transversalrichtungen.

- **Modulationsfeld** M: $\quad F(x,y,z) =: M(x,y,z)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kn_r z}$
  n_r: geeignet gewählter Referenzbrechungsindex

- Die paraxiale Näherung $\dfrac{\partial^2 M}{\partial z^2} \approx 0$ führt zur **Fresnel-Gleichung**

  $$\frac{\partial M}{\partial z} = \frac{\mathrm{i}k}{2n_r}(n_r^2 - n^2)M - \frac{\mathrm{i}}{2kn_r}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)M.$$

  Je nach Struktur gelten andere, ggfs. vektorielle Gleichungen [3], [9], [4], [5].

- **Transversale Diskretisierung** $M(x,y,z) \longrightarrow M_{a,b}(z)$,
  Schrittweiten Δx, Δy:

  $$\left(\frac{\partial M}{\partial z}\right)_{a,b} = \frac{\mathrm{i}k}{2n_r}(n_r^2 - n^2)M_{a,b} - \frac{\mathrm{i}}{2kn_r}\left(\frac{1}{\Delta x^2}(M_{a+1,b} - 2M_{a,b} + M_{a-1,b}) + \frac{1}{\Delta y^2}(M_{a,b+1} - 2M_{a,b} + M_{a,b-1})\right).$$

  Nicht anwendbar in den Randpunkten des Rechenfensters !

- **Longitudinale Diskretisierung** $M_{a,b}(z) \longrightarrow M_{a,b}^s$,
  Schrittweite Δz:

  $$\frac{1}{\Delta z}(M_{a,b}^{s+1} - M_{a,b}^s) = \alpha\left(\frac{\partial M}{\partial z}\right)_{a,b}^{s+1} + (1-\alpha)\left(\frac{\partial M}{\partial z}\right)_{a,b}^{s}, \qquad \alpha \geq \frac{1}{2}.$$

Ausbreitungsschritt:
Berechnung von $\boldsymbol{M}^{s+1}$ bei gegebenem $\boldsymbol{M}^s$ als Lösung des Gleichungssystems

$$\mathsf{A}\boldsymbol{M}^{s+1} = \mathsf{B}\boldsymbol{M}^s.$$

$\boldsymbol{M}^s$: Vektor aus $M_{a,b}^s$; $\quad \mathsf{A}, \mathsf{B}$: Matrizen mit Einträgen aus obigen Gleichungen.

III Lösungsangepaßte Differenzenschemata

Die Idee an einem Beispiel:

Gesucht werden diskrete Werte $u_k = u(k\Delta x)$ der Lösung u der Schwingungsgleichung

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \omega^2 u = 0$$

zu gegebenen Anfangswerten u_0, u_1. Mögliche Vorgehensweisen sind:

(1) Die Diskretisierung des Differentialoperators in der Schwingungsgleichung

$$\frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{k+1}-u_k}{\Delta x} - \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x}\right) + \omega^2 u_k = 0$$

führt auf eine Näherungsformel zur Berechnung von u_{k+1} aus u_k und u_{k-1}:

$$u_{k+1} = (2 - \omega^2\Delta x^2)u_k - u_{k-1}.$$

(2) Man rät eine Schemaform

$$u_{k+1} = c_1 u_k + c_2 u_{k-1}$$

mit zunächst unbekannten Koeffizienten c_1, c_2, und gibt Probefunktionen

$$v(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega x}, \qquad w(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x}$$

vor, die das Schema später reproduzieren soll. D mißt die Abweichung zwischen den exakten Werten der Probefunktionen und den mit der geratenen Schemaform berechneten:

$$\begin{aligned} D(c_1, c_2) &= \left|v_{k+1} - (c_1 v_k + c_2 v_{k-1})\right|^2 + \left|w_{k+1} - (c_1 w_k + c_2 w_{k-1})\right|^2 \\ &= \left|c_1 + c_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\Delta x} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\Delta x}\right|^2 + \left|c_1 + c_2\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\Delta x} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\Delta x}\right|^2 \quad . \end{aligned}$$

Das Minimum des Fehlers D bestimmt die optimalen Koeffizienten zu $c_1 = 2\cos\omega\Delta x$ und $c_2 = -1$. Jetzt gibt die Rekursionsformel

$$u_{k+1} = (2\cos\omega\Delta x)u_k - u_{k-1}$$

beliebige Lösungen der Schwingungsgleichung sogar exakt wieder:

$$\begin{aligned} a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(x+\Delta x)} + b\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(x+\Delta x)} &= 2\cos\omega\Delta x\left(a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x} + b\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega x}\right) \\ &\quad - \left(a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(x-\Delta x)} + b\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(x-\Delta x)}\right). \end{aligned}$$

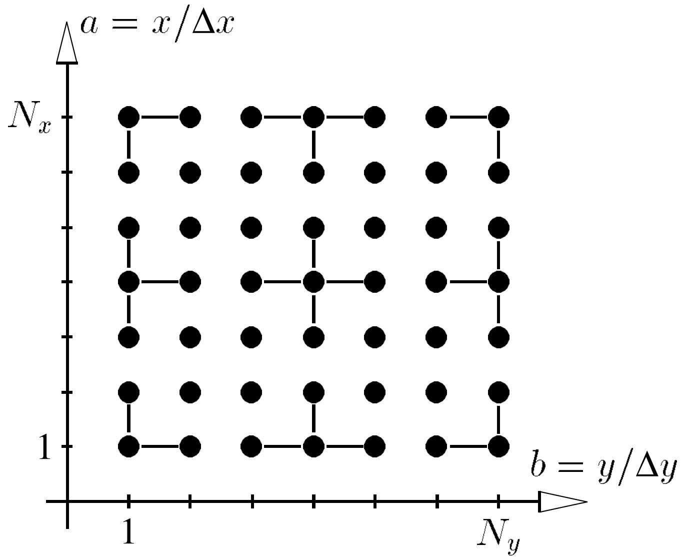
IV Differenzenschemata für Randpunkte

Die in den Matrizen A, B noch fehlenden Beziehungen der Form

$$\left(\frac{\partial M}{\partial z}\right)_{a,b} = \sum_j c_j M_{a+a_j,b+b_j}$$

lassen sich mit der Methode aus III(2) erzeugen:

- **Schemaformen:**



- **Probefunktionen:** ebene Wellen, indiziert durch einen Polarwinkel θ gegen die Ausbreitungsrichtung und einen Azimutwinkel φ:

$$F^{\theta\varphi}(x,y,z) = \exp \mathrm{i}k \left((\frac{n_r}{2} - \frac{n^2}{2n_r}\cos\theta)z - (\frac{n}{\sqrt{2}}\sin\theta\,\cos\varphi)x - (\frac{n}{\sqrt{2}}\sin\theta\,\sin\varphi)y \right).$$

  Die $F^{\theta\varphi}$ erfüllen die Fresnel–Gleichung für kleine θ bis zur 3. Ordnung in θ.

- **Fehlerfunktion:**

$$D(\{c_j\}) = \sum_{\theta,\varphi} g^2_{\theta\varphi} \left| \left(\frac{\partial F^{\theta\varphi}}{\partial z}\right)_{a,b} - \sum_j c_j F^{\theta\varphi}_{a+a_j,b+b_j} \right|^2$$

  Die Gewichte $g_{\theta\varphi}$ werden so gewählt, daß nur auswärts gerichtete Wellenvektoren, konzentriert um einen bestimmten Polarwinkel, beitragen. D hängt von a, b und z nicht ab. Die Minima von D liefern optimale Koeffizienten c_j zu den gezeigten Schemaformen.

Im Gegensatz zu den TBC erhält man vom berechneten Feld unabhängige Ausbreitungsmatrizen A, B: Innerhalb eines längshomogenen Abschnittes ist nur *eine* Zerlegung von A in Dreiecksmatrizen erforderlich.

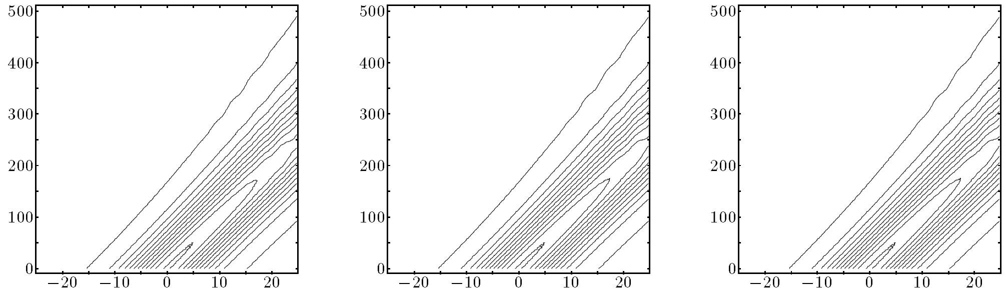
Nach jedem Ausbreitungsschritt werden die Feldvariablen an den Randpunkten wie im TBC–Algorithmus [7] korrigiert.

V Gaußsche Strahlen

- **2-D Simulationen**, eindimensionales Rechenfenster:

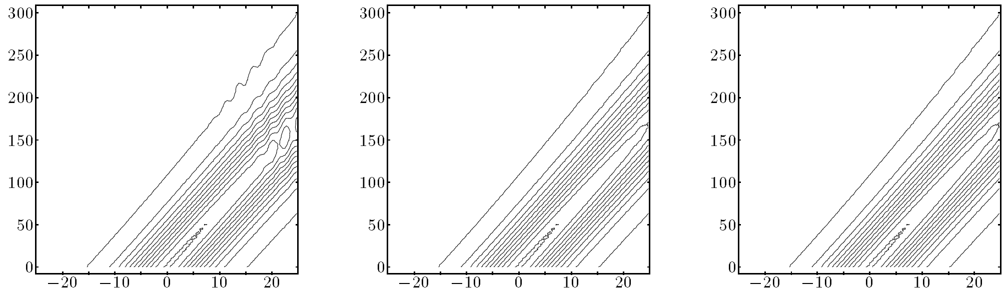
Strahlwinkel 5.7^0*:*

(a) $R = 8.56 \cdot 10^{-7}$ *(b)* $R = 3.84 \cdot 10^{-6}$ *(c) TBC* $R = 3.94 \cdot 10^{-6}$



Strahlwinkel 8.5^0*:*

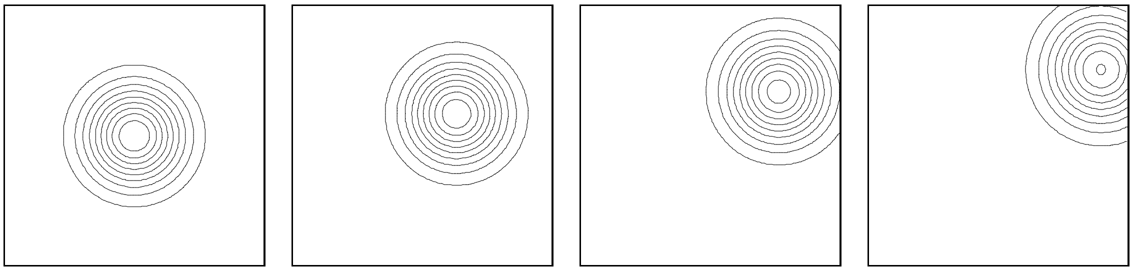
(a) $R = 1.16 \cdot 10^{-7}$ *(b)* $R = 8.49 \cdot 10^{-9}$ *(c) TBC* $R = 8.55 \cdot 10^{-9}$



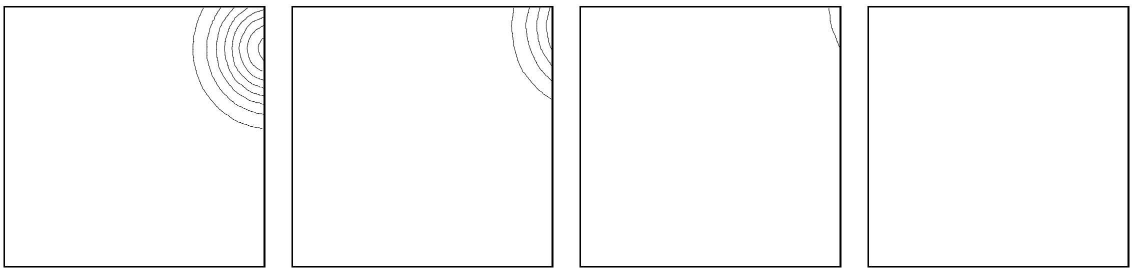
Konturlinien zu $|M|^2$*. Senkrecht: Ausbreitungsdistanz* z *in* μ*m; waagerecht: Ort* x *in* μ*m.* R*: Reflektionsfaktoren bei* $1000\,\mu$*m Ausbreitungsdistanz. (a), (b): Programme zum neuen Randbedingungsalgorithmus, (a) ohne, (b) mit Feldkorrekturen; (c): TBC-Ränder.*

- **3-D Simulation**, zweidimensionales Rechenfenster:

$z = 0.0\,\mu$m $z = 50.0\,\mu$m $z = 100.0\,\mu$m $z = 150.0\,\mu$m



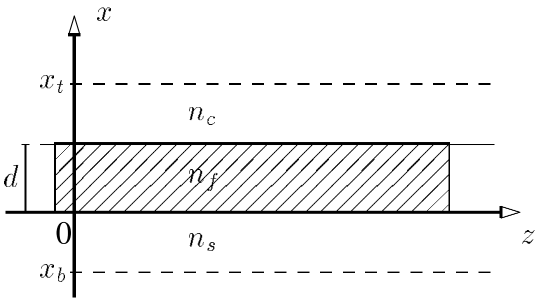
$z = 200.0\,\mu$m $z = 250.0\,\mu$m $z = 300.0\,\mu$m $z = 350.0\,\mu$m



Konturlinien zu $|M|$ *auf dem Fensterbereich. Parameter:* $N_x = N_y = 100$*,* $\Delta x = \Delta y = 0.5\,\mu m$*,* $\Delta z = 0.5\,\mu m$*;* $\lambda = 0.825\,\mu m$*. Strahlwinkel:* $8^o, 5^o$*.* $R = 4.08 \cdot 10^{-6}$ *in* $z = 400\,\mu m$*.*

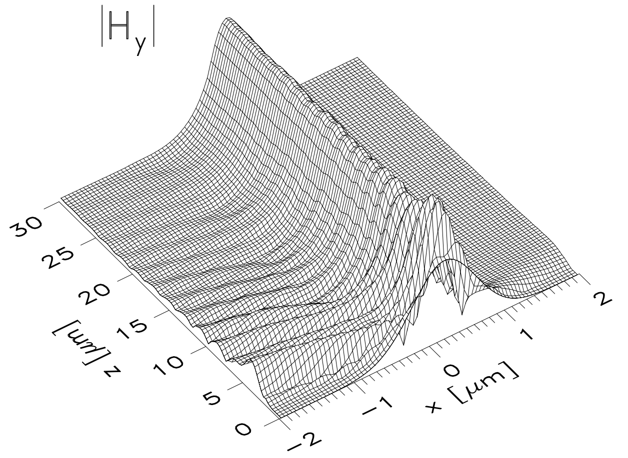
Zeitdauer der 3-D Rechnung (HP-715 Workstation): 14 min, davon 4 min zur Zerlegung der Ausbreitungsmatrizen. Zeitbedarf eines analogen TBC-Programmes: über 2 Tage.

VI Planare Wellenleiter

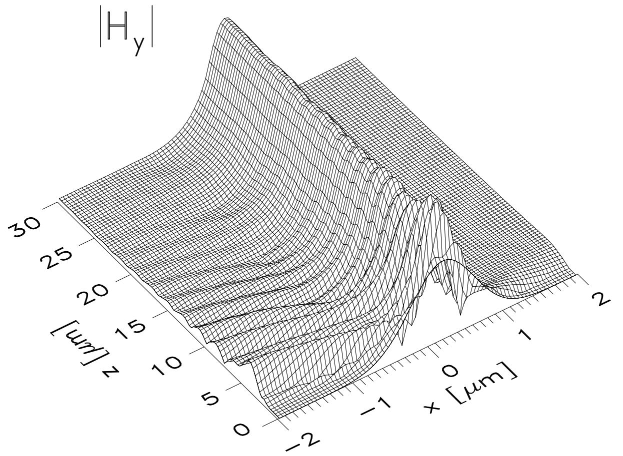


Parameter:
Brechzahlen $n_c = 1.0$, $n_f = 2.3$, $n_s = 1.95$,
Filmdicke $d = 0.6\,\mu$*m, Wellenlänge* $\lambda = 1.3\,\mu$*m;*
Rechenfenster $x_b = -2.0\,\mu$*m,* $x_t = 2.0\,\mu$*m;*
$N_x = 80$*, Schrittweiten* $\Delta x = \Delta z = 0.05\,\mu$*m.*

Abstrahlung bei der Ausbreitung Gaußscher Anfangsfelder:



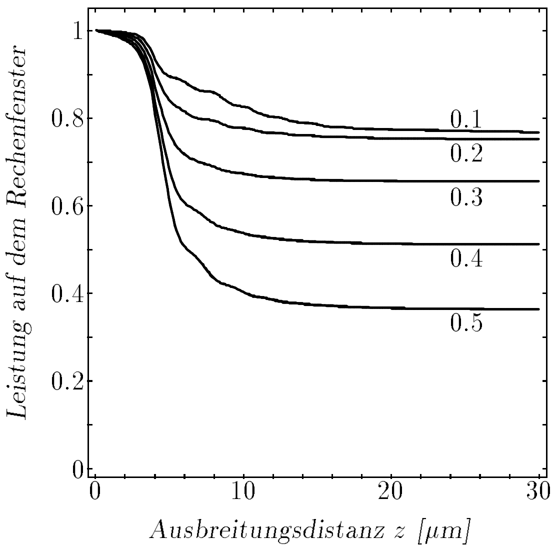
neue Randbedingungen



TBC

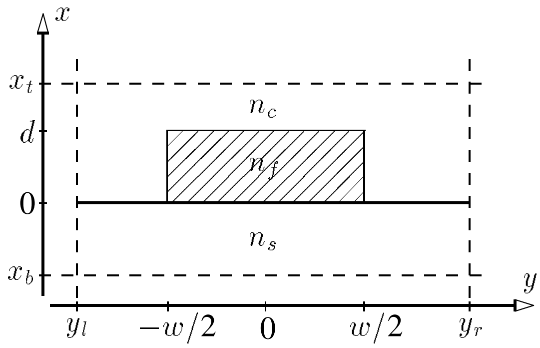
- Differenz der Gesamtleistungen auf dem Rechenfenster: maximal 0.07% (bezogen auf die Anfangsleistung), mit wechselndem Vorzeichen
- Rechenzeiten: 3 sec (neue Randbed.) und 12 sec (TBC) für 600 Schritte
- Aufweitung des Rechenfensters auf $[-6.0\,\mu\text{m}, 6.0\,\mu\text{m}]$ bzw. von 80 auf 240 Punkte: Größte Leistungsänderung im Intervall $[-2.0\,\mu\text{m}, 2.0\,\mu\text{m}]$: 0.2%.

Versetzte Initialisierungen:



Abstrahlprozesse zu Gaußschen Anfangsfeldern gleicher Strahlbreite. Kurvenparameter: Ort x $[\mu m]$ *des Feldstärkemaximums in* $z = 0$*. Es sind jeweils Kurven zu beiden Randbedingungstypen eingetragen. Maximale Differenzen: zwischen* 0.07% *und* 0.16%*, auf der Ebene* $z = 30\,\mu m$ *bei allen Kurvenpaaren unter* 0.04%*.*

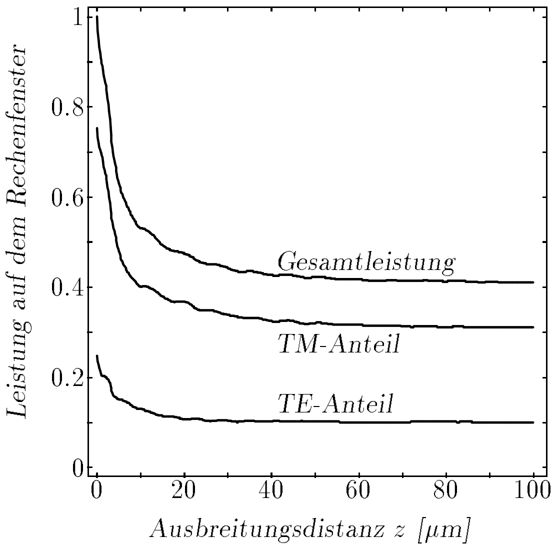
VII Rippenwellenleiter



Parameter:
Brechzahlen $n_c = 1.0$, $n_f = 2.3$, $n_s = 1.95$,
Rippenhöhe $d = 0.6\,\mu$*m, Breite* $w = 1.0\,\mu$*m,*
Wellenlänge $\lambda = 1.3\,\mu$*m;*
Rechenfenster $x_b = -1.725\,\mu$*m,* $x_t = 1.225\,\mu$*m,*
$y_l = -1.725\,\mu$*m,* $y_r = 1.725\,\mu$*m,*
$N_x = 60$, $N_y = 70$,
Schrittweiten $\Delta x = \Delta y = 0.05\,\mu$*m,* $\Delta z = 0.05\,\mu$*m;*
Referenzbrechungsindex $n_r = 2.073$.

- Vektorielle Rechnung: Die simultane Ausbreitung der Komponenten H_x, H_y, H_z ergibt 12600 Feldvariablen, schwach besetzte Matrizen mit 64344 Einträgen.
- Speicherplatzbedarf: etwa 30 MB zur Ablage der Dreiecksmatrizen.
- Rechenzeiten: ca. 6 min für eine Zerlegung, 2 sec für einen Einsetzvorgang, also 1 Stunde (neue Randbedingungen) bzw. 8 Tage (TBC) für 2000 Schritte.

Leistungsführung:

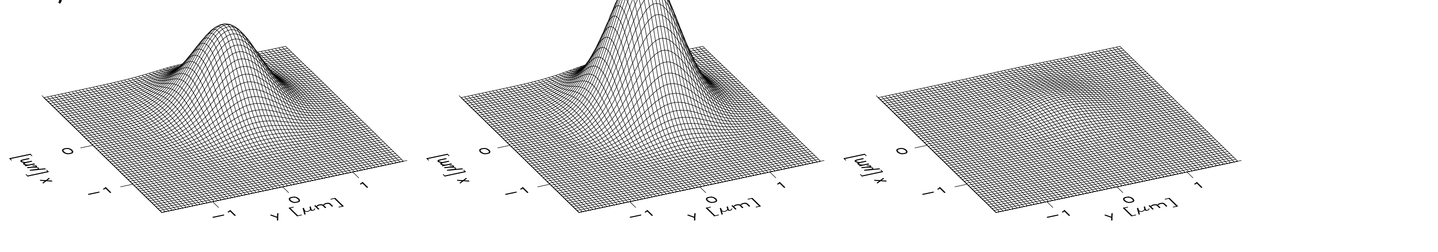


Abstrahlung nach Vorgabe eines Gaußschen Anfangsfeldes. Strahlparameter:
$5^o/2^o$ *horizontale/vertikale Verkippung,*
$1.2\,\mu$m $1/e$*-Breite,*
Zentrum in $(x, y) = (0.2, 0.3)\,\mu$*m,*
Polarisation 30^o *gegen die TM-Richtung.*

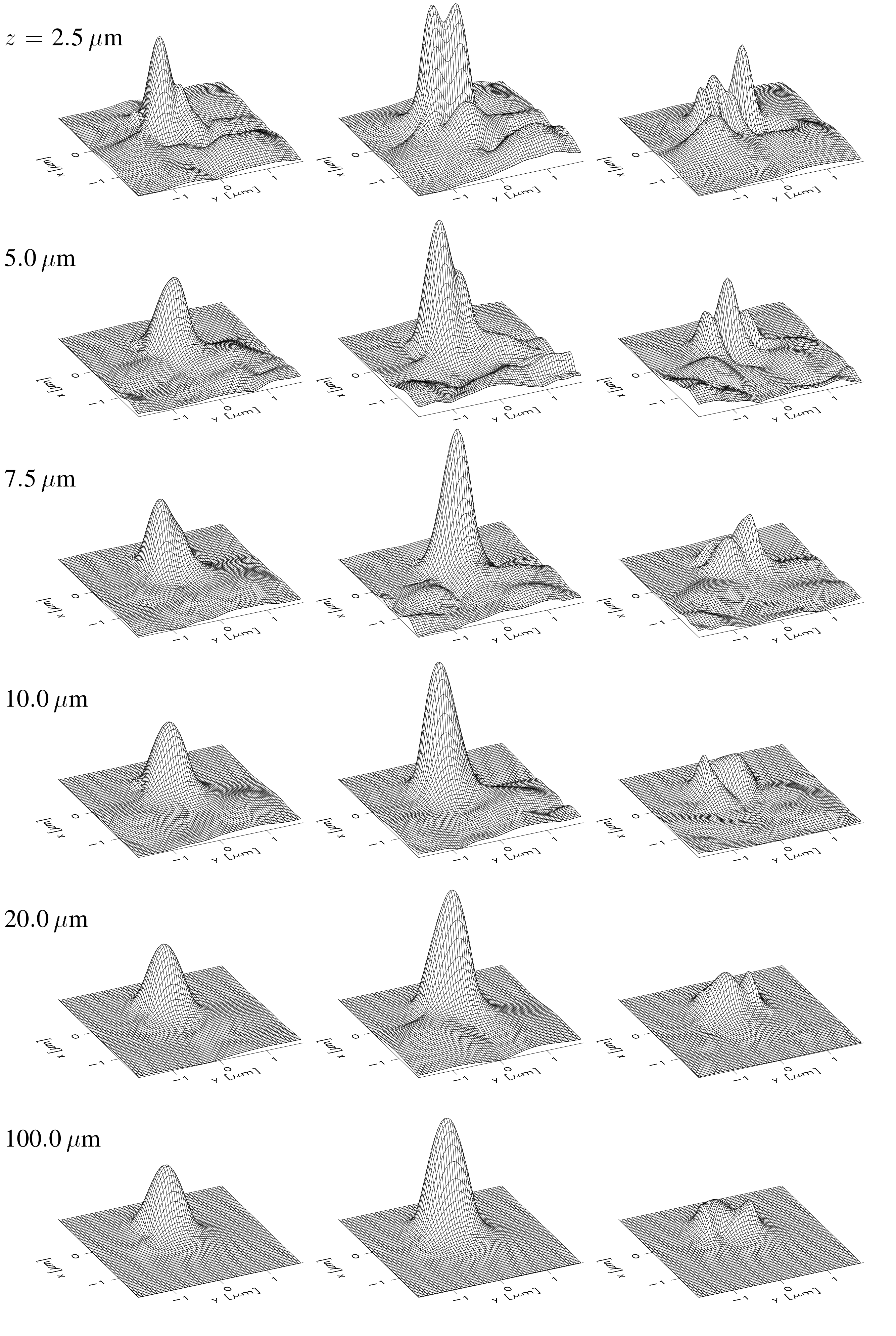
Feldformen:

$|H_x|$ $|H_y|$ $|H_z|$

$z = 0\,\mu$m



$\lvert H_x \rvert$	$\lvert H_y \rvert$	$\lvert H_z \rvert$



Literatur

[1] R. Accornero, M. Artiglia, G. Coppa, P. Di Vita, G. Lapenta, M. Potenza, P. Ravetto. Finite difference methods for the analysis of integrated optical waveguides. *Electronics Letters*, 26(23):1959–1960, 1990.

[2] V.A. Baskakov, A.V. Popov. Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the schrödinger equation. *Wave Motion*, 14:123–128, 1991.

[3] Y. Chung, N. Dagli. An Assessment of Finite Difference Beam Propagation Method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 26(8):1335–1339, 1990.

[4] A. Erdmann. Beam-propagation analysis of magneto-optic waveguide couplers. In C. C. Righini, D. Yevick (Hrsg.), *Linear and Nonlinear Integrated Optics*, S. 675–685, 1994. SPIE Proceedings, Vol. 2212.

[5] A. Erdmann, P. Hertel. Beam-Propagation in Magnetooptic Waveguides. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 31(8):1510–1516, 1995.

[6] M. D. Feit, J. A. Fleck. Light Propagation in Graded-Index Optical Fibers. *Applied Optics*, 17(24):3990–3998, 1978.

[7] G. R. Hadley. Transparent boundary condition for beam propagation. *Optics Letters*, 16(9):624–626, 1991.

[8] G. R. Hadley. Transparent Boundary Condition for the Beam Propagation Method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 28(1):363–370, 1992.

[9] W. Huang, C. Xu, S. Chu, S. K. Chaudhuri. The Finite Difference Vector Beam Propagation Method: Analysis and Assessment. *Journal of Lightwave Technology*, 10(3):295–305, 1992.

[10] G. Hugh Song. Transparent boundary conditions for beam-propagation analysis from the Green's funtion method. *Journal of the Optical Society of America A*, 10(5):896–904, 1993.

[11] P. E. Lagasse, R. Baets. The Beam Propagation Method in Integrated Optics. In L. B. Felsen (Hrsg.), *Hybrid Formulation of Wave Propagation and Scattering*, S. 375–393, Dordrecht, Boston, Lancaster, 1984. Martinus Nijhoff Publishers.

[12] C. Vassallo. Reformulation for the Beam Propagation Method. *Journal of the Optical Society of America*, 10(10):2208–2216, 1993.