

формуле (18), которая позволяет по данным p и T определить объем системы, а значит, и величину $pV/(p_0V_0)$. Экспериментальные данные обозначены точками. Получено согласие теоретических и экспериментальных данных в пределах точности эксперимента.

Заключение

Полученное в данной работе асимптотически точное выражение для свободной энергии системы несферических молекул в приближении твердых тел (12) позволяет описать данные численного эксперимента с высокой степенью точности. Для оптимального использования данного подхода необходимо, как и в случае твердых сфер, иметь значения не менее четырех первых вириальных коэффициентов. В этом случае обеспечивается возможность количественного описания всех термодинамических величин таких систем. Как показали расчеты, модель несферических твердых тел может быть эффективно использована в качестве базовой системы для двухатомных молекул.

Литература

1. Song Y., Mason E.A. // Phys. Rev. 1990. **A41**. P. 3121.
2. Calleja M., Rickayzen G. // Phys. Rev. Lett. 1995. **74**. P. 4452.
3. Гиришфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., 1961 (Hirschfelder J.O., Curtiss Ch. F., Bird R.B. Molecular Theory of Gases and Liquids. N.Y.; L., 1954).
4. Boublik T., Nezbeda I. // Coll. Czechos. Chem. Comm. 1986. **51**. P. 2301.
5. Николаев П.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1995. № 5. С. 21 (Moscow University Phys. Bull. 1995. No. 5. P. 19).
6. Kihara T., Myoshi K. // J. Stat. Phys. 1975. **13**. P. 337.
7. Базаров И.П., Николаев П.Н., Щурова Е.В. // Журн. физ. химии. 1998. **72**, № 3. С. 404.
8. Зыков Н.А., Севастьянов Р.М., Чернявская Р.А. // Инж.-физ. журн. 1984. **47**, № 1. С. 108.
9. Таблицы физических величин. М., 1976.

Поступила в редакцию
20.03.98

УДК 519.6:621.372.8

РАСЧЕТ ВОЛНОВЕДУЩИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ КОРРЕКЦИИ И ОГРАНИЧЕНИЯ СПЕКТРА

А. Н. Боголюбов, М. Е. Сухов

(кафедра математики)

Рассматривается применение метода параболической коррекции и метода ограничения спектра и выделения спектральной полосы для построения устойчивых численных алгоритмов расчета волноведущих систем сверхвысокочастотной электродинамики, интегральной и волоконной оптики. Приведены примеры численных расчетов.

Одна из интересных и трудных задач математической физики — это количественное и качественное описание волновых процессов, происходящих в волоконно-оптических системах передачи и обработки информации и в устройствах интегральной оптики и техники СВЧ. Такие системы обладают, как правило, сложной геометрией и неоднородным заполнением, вследствие чего точное аналитическое решение можно получить только для очень узкого круга задач расчета малоинтересных в практическом отношении волноведущих устройств. Это определяет необходимость разработки новых численных методов, а также исследования и реализации известных методов расчета. Математической моделью задачи возбуждения диэлектрических волноведущих систем служит краевая задача для уравнения или системы уравнений эллиптического типа с переменными коэффициентами в области сложной формы. При решении таких задач наиболее универсальным и гибким является метод конечных разностей.

Расчет волноведущих систем конечно-разностным методом требует ограничения области, в которой ищется решение. Если неоднородность имеет локальный характер, можно воспользоваться парциальными

условиями излучения [1]. При этом получается задача в ограниченной вдоль оси волноведущей системы области, которая после дискретизации сводится к системе алгебраических уравнений весьма высокого порядка с разреженными матрицами. При расчете открытых волноведущих систем, таких, как волоконные световоды или диэлектрические волноводы, необходимо ограничивать область также и в поперечном направлении, используя, например, эффективные граничные условия [1]. Однако практическая реализация такой методики обычно вызывает значительные трудности при расчете неоднородных волноведущих систем нерегулярной геометрии. Во-первых, для использования парциальных условий излучения необходимо строить систему функций сечения, что невозможно сделать, если сечение волновода имеет достаточно сложную форму. Во-вторых, обращение матриц высокого порядка при расчете трехмерных волноведущих систем прямыми методами является весьма трудоемкой процедурой. Наконец, скорость сходимости итерационных методов для решения подобных задач оказывается, как правило, невысокой. Все это заставляет искать новые подходы к получению устойчивых алгоритмов для реше-

ния конечно-разностными методами задач возбуждения [1]. Весьма перспективны методы, основанные на замене исходной эллиптической системы уравнений на близкую к ней систему, для которой возможно использование устойчивых экономичных численных алгоритмов. В этом отношении представляют интерес методы параболического уравнения и опорной волны. Другой подход для получения устойчивых алгоритмов заключается в регуляризации уравнения Гельмгольца и использовании алгоритма ограничения спектра и выделения спектральной полосы [1].

Параболическое уравнение в теории дифракции было предложено в 1944 г. М. А. Леонтовичем при исследовании задачи о распространении электромагнитных волн вблизи плоской поглощающей поверхности, характеризуемой импедансным граничным условием (граничное условие Леонтовича). В 70-е годы был предложен метод коррекции решения, полученного по методу параболического приближения. Сущность этого подхода изложена в работах Э. А. Полянского [2]. Для расчета плоского волновода строится параболическое приближение, и полученная начально-краевая задача решается методом конечных разностей. Далее, используя интегральную связь между решениями параболического уравнения типа Шрёдингера и уравнения Гельмгольца, можно осуществить переход от параболического приближения к решению исходной задачи.

Рассмотрим задачу о расчете поля в плоском металлодиэлектрическом волноводе с импедансными стенками. Пусть заполняющая волновод среда является однородной в продольном направлении и неоднородной в поперечном. Введем прямоугольную систему координат, ось X которой направим вдоль оси волновода, а ось Y — перпендикулярно к границе. На вход волновода подается сигнал, описываемый функцией $f(y)$. Волновой процесс считается гармоническим с временной зависимостью $\exp(-i\omega t)$.

В результате в полуполосе $\bar{D} \equiv \{0 \leq x \leq \infty; 0 \leq y \leq d\}$, где d — ширина волновода, получаем следующую краевую задачу для уравнения Гельмгольца:

$$\begin{aligned} \Delta U + k^2 \varepsilon(y) U &= 0, & (x, y) \in D, \\ U_y + h_1 U &= 0, & y = 0, \\ U_y - h_2 U &= 0, & y = d, \\ U(0, y) &= f(y), & 0 \leq y \leq d, \\ \text{условие при } x &= \infty. \end{aligned} \quad (1)$$

В формуле (1) $\varepsilon(y)$ — диэлектрическая проницаемость, которую считаем вещественной, а U — продольная электрическая или магнитная компонента поля.

В работе [2] показано, что решение задачи (1) можно вычислить с помощью интегрального соотношения

$$U(x, y) = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{\pi}} x \int_0^\infty V\left(\frac{k}{4t}, y\right) e^{ix^2 t} \frac{dt}{\sqrt{t}}, \quad (2)$$

где $V(x, y)$ — решение начально-краевой задачи для уравнения параболического типа в полуполосе $\bar{D}$:

$$\begin{aligned} ikV_x + V_{yy} + k^2 \varepsilon(y) V &= 0, & (x, y) \in D, \\ V_y + h_1 V &= 0, & y = 0, \\ V_y - h_2 V &= 0, & y = d, \\ V(0, y) &= f(y), & 0 \leq y \leq d. \end{aligned} \quad (3)$$

Для решения задачи (3) эффективен конечно-разностный метод.

Определенные сложности связаны с численной реализацией интеграла (2). Он представляется в виде суммы двух интегралов: от $t = 0$ до $t = T$ и от $t = T$ до $t = \infty$, причем параметр T выбирается так, чтобы второй интеграл был достаточно мал (для этого интеграла справедлива оценка $O(x/T)$). Методом дифференцирования по параметру первый интеграл сводится к дифференциальному уравнению, для которого ставится задача Коши. Для решения этой задачи строится ее конечно-разностная аппроксимация. Решение полученной конечно-разностной задачи выписывается в явном виде. Для реализации рассматриваемого метода параболической коррекции написана программа на языке системы Matlab. На рис. 1 приведен пример решения задачи расчета плоского волновода с синусоидальным профилем функции диэлектрической проницаемости $\varepsilon(y) = \sin(\pi y/d)$ и идеально проводящими стенками. В качестве входного сигнала использовалось синусоидальное распределение поля $f(y) = \sin(\pi y/d)$. Задача решалась в два этапа. Сначала конечно-разностным методом решалась начально-краевая задача (3) для уравнения параболического типа. Результат решения этой задачи приведен на рис. 1, а, где показано распределение действительной части решения V . Затем с помощью численной реализации интегрального преобразования (2) по решению задачи (3) строится решение задачи (1). Полученное таким образом решение задачи (1) показано на рис. 1, б, где приведена действительная часть функции U . Проведенные численные эксперименты показали, что применение процедуры параболической коррекции дает значительное улучшение решения параболического уравнения (3), позволяя получить численное решение задачи (1) для уравнения Гельмгольца с гарантированной точностью. Однако процедура параболической коррекции требует для своей реализации значительного времени, около 90% которого затрачивается на численную реализацию интегрального преобразования. Кроме того, метод не может быть непосредственно обобщен на трехмерный случай.

Этого недостатка лишен метод ограничения спектра и выделения спектральной полосы, который позволяет строить устойчивые численные алгоритмы решения начально-краевой задачи для уравнения или системы уравнений эллиптического типа, исключая из решения экспоненциально растущие волны. В основе метода лежит идея регуляризации формфактором суммирования ряда Фурье для решения $U(x, y)$

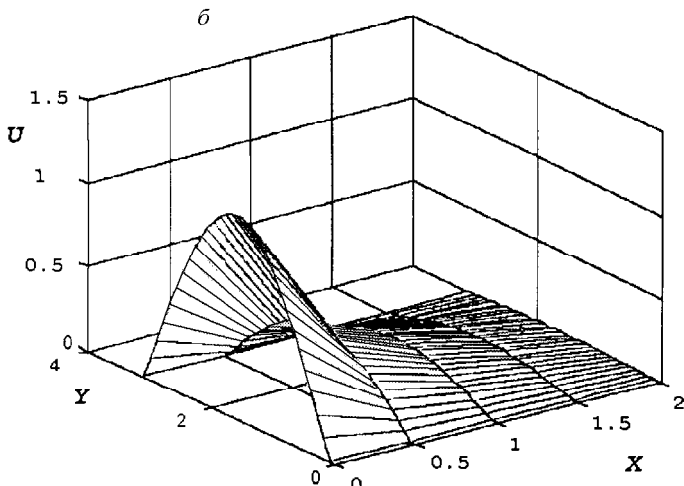


Рис. 1. Расчет плоского волновода с синусоидальным профилем функции диэлектрической проницаемости: *а* — параболическое приближение; *б* — результат применения параболической коррекции

задачи (1) по системе функций сечения. При этом строить функции сечения и разлагать по ним решение задачи (1) не нужно [3]. Для реализации процедуры коррекции спектра и выделения спектральной полосы для функции $f(y) = U(x, y)$ в сечении $x = \bar{x}$ строится итерационный процесс

$$\tau_s \{ 2L f_s(y) - (\Lambda_1 + \Lambda_2) f_s(y) \} + (\Lambda_2 - \Lambda_1) f_s(y) = (\Lambda_2 - \Lambda_1) f_{s-1}(y), \quad s = 1, 2, \dots, p, \quad (4)$$

где L — поперечная часть оператора исходной задачи для уравнения или системы эллиптического типа, τ_s — итерационный параметр: $\tau_s = \exp\{i\pi/p(2s-1)\}$, p — четное число, Λ_1 и Λ_2 — границы спектра.

При достаточно большом числе итераций p из вещественного спектра λ приближенно вырезается полоса $\Lambda_1 \leq \lambda \leq \Lambda_2$, определяемая задаваемыми параметрами Λ_1 и Λ_2 , т.е. гармоники, спектр которых лежит вне этой полосы, подавляются, а гармоники, спектр которых принадлежит отрезку $[\Lambda_1, \Lambda_2]$, практически не искажаются. Таким образом, итерационный процесс (4) является математической моделью частотного фильтра. После итераций получается функция $\tilde{U}(\bar{x}, y) = f_p(y)$, в спектре кото-

рой практически отсутствуют растущие гармоники. На рис. 2 показан результат применения процедуры ограничения спектра к решению задачи возбуждения для плоского волновода с идеально проводящими стенками. Приведен график зависимости действительной части решения $U(x; 0,5d)$ задачи (1) на оси волновода от продольной координаты x . Кривая 1 соответствует точному решению уравнения Гельмгольца при $k = 2$ и $\epsilon = 1$, кривая 2 — решению без применения процедуры ограничения спектра и выделения спектральной полосы и кривая 3 — решению уравнения Гельмгольца после проведения процедуры ограничения спектра.

Большим достоинством указанного алгоритма является то, что он практически без изменений переносится на случай трехмерных волноводных структур. На рис. 3 показан результат применения процедуры ограничения спектра и выделения спектральной полосы при расчете металлического волновода прямоугольного сечения с идеально проводящими стенками при $k^2\epsilon = 10$. Результаты расчета поля (вещественная часть) без применения процедуры ограничения спектра и выделения спектральной полосы приведены на рис. 3, *а*, а с применением процедуры коррекции — на рис. 3, *б*. Аналогичные результаты для круглого металлического волновода (распределение вещественной части решения по сечению) приведены на рис. 4. Число итераций для волновода прямоугольного сечения составило $p = 10$, а для волновода круглого сечения — $p = 30$. Приведенные примеры позволяют сделать вывод, что применение метода ограничения спектра и выделения спектральной полосы дает возможность строить устойчивые алгоритмы для расчета волноведущих структур. Отметим, что итерационный процесс (4) может быть использован и в случае комплексного спектра.

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы.

1. Метод параболической коррекции может быть достаточно эффективно использован при расчете плоских волноведущих систем. К основным досто-

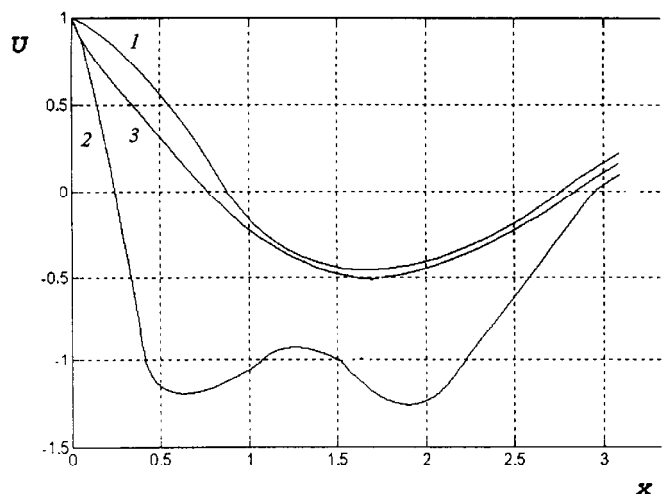


Рис. 2. Расчет плоского волновода с использованием процедуры ограничения спектра: 1 — точное решение; 2 — параболическое приближение; 3 — решение с использованием процедуры ограничения спектра

Рис. 3. Расчет прямоугольного металлического волновода: *a* — без процедуры ограничения спектра и выделения спектральной полосы; *b* — с использованием процедуры

инствам этого метода следует отнести его устойчивость и возможность гарантированной оценки точности. В то же время он обладает относительно невысокой скоростью сходимости, что не позволяет рекомендовать его для использования без существенной модернизации в задачах синтеза, где необходимо многократное решение прямой задачи с направленно изменяемыми параметрами.

2. Метод ограничения спектра и выделения спектральной полосы, в отличие от метода параболической коррекции, обладает большим быстродействием и легко обобщается на трехмерный случай. Он может быть использован при решении обратных задач, и в частности задач синтеза, в том числе и при проведении расчетов на ПЭВМ. К определенным недостаткам метода следует отнести его неполное теоретическое исследование, в частности в плане оценки точности.

Рис. 4. Расчет круглого металлического волновода: *a* — без процедуры ограничения спектра и выделения спектральной полосы; *b* — с использованием процедуры

Дальнейшее развитие метода ограничения спектра и выделения спектральной полосы связаны с обобщением метода на произвольные неоднородные и анизотропно заполненные волноведущие системы и получением удобных в практическом отношении оценок точности.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 97-01-01081).

Литература

1. Свешников А.Г., Боголюбов А.Н., Минаев Д.В., Сычкова А.В. // Радиотехн. и электроника. 1993. **38**, № 5. С. 804.
2. Полянский Э.А. Метод коррекции решения параболических уравнений в неоднородном волноводе. М., 1985.
3. Завадский В.Ю. Метод сеток для волноводов. М., 1986.

Поступила в редакцию
15.04.98