SYMPLECTİC ZAMANDA SONLU FARKLAR TEKNİĞİ (FDTD)'NİN KARARLIK SINIRININ İYİMSERLEŞTİRİLMESİ

Mehmet KUŞAF[1] **Abdullah Y. ÖZTOPRAK**[2]

[1,2]Elektrik ve Elektronik Mühendisliği Bölümü
Mühendislik Fakültesi
Doğu Akdeniz Üniversitesi, Gazi Mağusa, Mersin 10, K.K.T.C.

[1]e-posta:mehmet.kusaf@emu.edu.tr [2] e-posta: abdullah.oztoprak@emu.edu.tr

Anahtar sözcükler:Zamanda Sonlu FarklarTekniği (FDTD), Smyplectic FDTD

ÖZETÇE

Bu bildiride, Symplectic Zamanda Sonlu Farklar Tekniği (Symplectic FDTD) yönteminin performansını iyimserleştiren yeni bir tasarım ortaya konulmaktadır. Symplectic FDTD yönteminde kararlılık sınırı ve sayısal saçılma, ζ işlevi tarafından kararlaştırılır. ζ büyüme oranını etkileyen bir işlevdir. Büyüme oranının mutlak değerinin bire eşit veya birden küçük olabilmesi için, ζ işlevinin de mutlak değerinin bire eşit veya birden küçük olması gerekir. Bu bildiride, ζ işlevi bir birinci tür Chebyshev çok terimlisi olduğu zaman, kararlılık sınırı ile üstel işleç katsayı miktarının doğru orantılı olduğu ispat ediliyor. Böylece üstel işleç katsayı adeti artırılarak kararlılık sınırı istenilen miktarda artırılabilir. Üç boyutlu ve dördüncü mertebe uzay ayırıklaştırması için, 2 üstel işleçli tasarımın (FDTD(2,4)) kararlılık sınırı 0.4948 dir, 10 üstel işleçli tasarımın kararlılık sınırı ise bu sayının 5 katı olan 2.4743'dür. Aynı Chebishev çokterimlisini oluşturabilmek için birden fazla üstel işleç katsayıları kümesi mevcuttur. Üstel işleç sayısı çift olduğu zaman, çözüm kümelerinden bir tanesinde katsayılar birbirlerine eşittir. Aynı uzay ve zaman artırımı ve işleç sayısı için, yeni tasarımın sayısal saçılımı daha önce yayınlanmış Symplectic FDTD tasarımının sayısal saçılımından daha düşüktür.

1. GİRİŞ

FDTD yöntemi elektromanyetik problemlerin çözümünde yaygın olarak kullanılmaktadır[1]. Alışılagelmiş Yee algoritmasında, uzay ve zaman ayrıklaştırılması için ikinci mertebe sonlu farkı kullanılmaktadır, bundan dolayı sayısal saçılma uzay artırımı büyük olduğu hallerde kabul edilemiyecek bir hataya dönüşmektedir. Eğer daha düşük bir uzay arıtırımına gidilirse sayısal saçılma istenilen seviyeye düşürülebilir, bu durum hesaplama domeni boyutunun ve merkezi işlem birimi (CPU) zamanının kabul edilmez bir şekilde artmasına neden olur. Yüksek mertebeli FDTD tasarımları[2,3], FDTD yöntemindeki sayısal saçılmayı düşürmek için geliştirilmiştir. Bu, daha büyük uzay artırımının kullanılmasını mümkün kılarken, hesaplama domeni boyutunun küçülmesine sebeb olmaktadır. Bu özellik yüksek bilişimsel zamanın ve yüksek bilgisayar belleğinin gereksinimini düşürür. Kaynak [4]'de Symplectic FDTD isimli yeni bir tasarım geliştirilmiştir. Bu tasarımda uzay ayrışımı için alışılagelmiş dördüncü mertebe sonlu farkı ve zaman ayrışımı için ise dördüncü mertebe Sympletic integral alıcı yaydırıcı (symplectic integrator propagator) kullanılmıştır. Sayısal bir tasarımın kararlı olabilmesi için büyüme oranının mutlak değerinin de bire eşit veya birden küçük olması gerekir. ζ büyüme oranını etkileyen bir işlevdir, bu bildiride ζ işlevi bir birinci tür Chebyshev çokterimlisi haline dönüştürülerek yüksek kararlılık sınırı elde edilmektedir. Elde edilen kararlılık sınırı daha önce yayınlamış [4] Symplectic FDTD tasarımından çok daha yüksekdir. Bu tasarım ayrıca daha düşük sayısal saçılım hatası sağlamaktadır.

2. CHEBYSHEV ÇOKTERİMLİSİ KULLANILARAK ÜSTEL İŞLEÇ KATSAYILARININ BULUNMASI

Maxwell denklemleri homojen, kayıpsız ve kaynaksız bir ortamda

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{U}(t) = (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{U}(t) \qquad (1)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $\boldsymbol{U}(t)$=(H_x H_y H_z E_x E_y E_z)^T matrisini göstermektedir, H_x, H_y ve H_z manyetik alan bileşenlerini; E_x, E_y, ve E_z ise elektrik alan bileşenlerini ifade etmektedir. $\boldsymbol{A}$ ve $\boldsymbol{B}$ aşağıdaki türevsel işleç matrisleridir,

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\{\mathbf{0}\} & -\mu^{-1}\boldsymbol{R}\\ \{\mathbf{0}\} & \{\mathbf{0}\}\end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}\{\mathbf{0}\} & \{\mathbf{0}\}\\ \varepsilon^{-1}\boldsymbol{R} & \{\mathbf{0}\}\end{pmatrix} \tag{2}$$

Burada $\{\mathbf{0}\}$ bir 3×3 sıfır matrisi, $\boldsymbol{R}$ ise 3×3 üç boyutlu (3-D) rotasyonel işleç matrisdir. ε ortamın permittivitisini ve μ ise ortamın permeabilitisini belirtmektedir. $\boldsymbol{A}$ ve $\boldsymbol{B}$ birbirleri ile commute (kısacası $\boldsymbol{AB}\neq\boldsymbol{BA}$) etmezler ve ayrıca $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}^3=....=0$, ve $\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{B}^3=....=0$ dir[4].

Denklem (1) birinci derece doğrusal bir türevsel denklemler sistemini göstermektedir, bu sistemin çözümü,

$$\boldsymbol{U}(t+\Delta t)=\mathrm{e}^{\Delta t(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})}\,\boldsymbol{U}(t) \tag{3}$$

dir, Δt zaman artırımını göstermektedir. Denklem (3)'deki üstel işleç, Taylor açılımı ve bununla birlikte $\boldsymbol{A}$ ve $\boldsymbol{B}$'nin yukarda bahsedilen özellikleri de kullanılarak aşağıdaki biçimde yazılabilir,

$$\mathrm{e}^{\Delta t(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})}=I+\Delta t\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)+\frac{\Delta t^2}{2!}\left(\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{BA}\right)+... \tag{4}$$

Bir başka açılım ise üstel işleçin ayrıştırılmasından elde edilebilir[4]. Bu açılım $\mathrm{e}^{c_p\Delta t\boldsymbol{A}}$ ve $\mathrm{e}^{d_p\Delta t\boldsymbol{B}}$ çarpımlarından oluşmaktadır. Kısacası,

$$\mathrm{e}^{\Delta t(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})}\cong\prod_{p=1}^{m}\left(I+c_p\Delta t\boldsymbol{A}\right)\left(I+d_p\Delta t\boldsymbol{B}\right)+\boldsymbol{O}\left(\left(\Delta t\right)^{n+1}\right) \tag{5}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada c_p ve d_p belirlenmesi gereken katsayıları, m yaydırıcının aşama sayısını, ve n ise yaklaşım mertebesini ifade etmektedir. Herhangi bir aşama için Denklem (4) ve (5)'deki Δt teriminin katsayıları eşitlendiğinde en temel koşul olan

$$c_1+c_2+c_3+...+c_p=1 \tag{6}$$

$$d_1+d_2+d_3+...+d_p=1 \tag{7}$$

elde edilmektedir. Tasarımın kararlı olabilmesi için büyüme oranının her zaman bire eşit veya birden küçük olması gerekmektedir. Symplectic FDTD'nin büyüme oranı aşağıdaki gibi ifade edilebilir[4],

$$\alpha=\zeta\pm\sqrt{\zeta^2-1} \tag{8}$$

$$\zeta=1+\left(\frac{1}{2}\right)\sum_{p=1}^{m}g_p\left\{-v^2\Delta t^2\left(\eta_x^2+\eta_y^2+\eta_z^2\right)\right\}^p \tag{9}$$

$$g_p=\sum_{1\le i1\le j1<i2\le j2<...<ip\le jp\le m}c_{i1}d_{j1}c_{i2}d_{j2}...c_{ip}d_{jp}+\sum_{1\le i1<j1\le i2<j2\le...\le ip<jp\le m}d_{i1}c_{j1}d_{i2}c_{j2}...d_{ip}c_{jp} \tag{10}$$

η_x, η_y, ve η_z'in ifadeleri [4]'de verilmektedir, v ise ortam içindeki ışık hızını belirtmektedir.

Kolaylıkla gösterilebilir ki; $|\zeta|\le1$ olduğu zaman, $|\alpha|=1$ dir. $|\zeta|\le1$ koşulu tasarımın kararlı olmasını ve ayrıca büyüme oranı bire eşit olduğundan dolayı tasarımın yitirğen olmamasını sağlar.

Kararlılık sınırının elde edilebilmesi için η_x, η_y, ve η_z'in en yüksek değerleri Denklem (9)'daki yerlerine konmalıdır (bu durumda $\zeta_m\equiv\zeta$) . Daha yüksek kararlılık sınırı elde edilebilmesi için ζ işlevinin katsayıları $|\zeta|\le1$ bölgesinin en geniş halini alacak şekilde belirlenmelidir.

Üç boyutlu dördüncü mertebe uzay yaklaşımı ile birlikte uzay artırımları için $\Delta x=\Delta y=\Delta z=\Delta$ kullanıldığında,

$$\zeta_m=1+\left(\frac{1}{2}\right)\sum_{p=1}^{m}g_p\left(-3\right)^p\left(qs\right)^{2p} \tag{11}$$

dir. s ($s=v\Delta t/\Delta$) kararlılık faktörünü, q ise $\eta_x\Delta x$, $\eta_y\Delta y$, ve $\eta_z\Delta z$'in en yüksek değerlerini belirtmektedir. Dördüncü mertebe uzay ayırıklaştırması için q'nün değeri 7/3'dür. Yapılan çalışmalar, en yüksek kararlılık sınırının ζ işlevinin katsayılarının birinci tür Chebyshev çokterimlisinin katsayılarına eşit olduğu zaman elde edildiğini göstermektedir.
Chebyshev çokterimlisi aşağıdaki gibi ifade edilmektedir,

$$T_n\left(x\right)=2^{n-1}\prod_{k=1}^{n}\left\{x-\cos\left[\frac{\left(2k-1\right)\pi}{2n}\right]\right\} \tag{12}$$

Bu çokterimli $|x|\le1$ iken $T_n(x)=\cos\{n\cos^{-1}(x)\}$'dir ve $|x|>1$ iken $T_n(x)=\cosh\{n\cosh^{-1}(x)\}$'dir, bundan dolayı $|x|\le1$ bölgesinde $|T_n(x)|\le1$'dir ve $|x|>1$ bölgesinde $|T_n(x)|>1$'dir.

g_p değerlerini ve kararlılık sınırını elde etmek için, aynı mertebedeki ζ_m işlevi ile $T_n(x)$ çokterimlisi n'nin çift katları (n=2,4,..) için, $x=t_ns$ kullanılınarak, birbirlerine denkleştirilirler. Burada t_n belirlenmesi gereken gerçek bir dönüşüm katsayısını göstermektedir.

Her bir çift üstel işleçli tasarıma denk bir üstel işleç daha fazla bir tek üstel işleçli tasarım vardır. Ancak işlem sayısı daha az olduğundan çift üstel işleçli tasarımlar tercih edilmiştir.

Tasarım bir örnekle daha iyi açıklanabilir. Üç boyutlu (3-D) 4 veya 5 üstel işleçli bir tasarım için ζ_m dördüncü mertebe bir işlevdir:

$$\zeta_m = 1-(3/2)g_1(qs)^2+(3^2/2)g_2(qs)^4 \quad (13)$$

Buna karşılık gelen Chebyshev çokterimlisi (n=4) şöyledir,

$$T_4(t_4s) = 1-8(t_4s)^2+8(t_4s)^4 \quad (14)$$

Denklem (6) ve (7)'den faydalanarak $c_1+c_2=1$ ve $d_1+d_2=1$ dir, g_1 ise Denklem (10)'daki tanımından dolayı her zaman $g_1=(c_1+c_2)(d_1+d_2)=1$ dir. Denklem (13) ve (14)'deki s^2'in katsayıları birbirlerine eşitlendiğinde,

$$t_4 = \left(\sqrt{3}/4\right)q \quad (15)$$

olur, ve s^4'ün katsayıları birbirlerine eşitlendiğinde ise, g_2=1/16 olarak bulunur.

$|T_n(x)|\leq 1$ olduğu bölgede x'in en yüksek değeri $|x|$=1'dir, bundan dolayı s'in en yüksek değeri, başka bir deyişle tasarımın kararlılık sınırı (CLF) $s_{max}=1/t_4=0.9897$'dir. Daha yüksek mertebelerdeki ζ işlevleri için s_{max} aynı şekilde bulunabilir. n üstel işleçli tasarım için çift mertebeli Chebyshev çokterimlisindeki x^2 teriminin katsayısı $2*(n/2)^2$ olduğundan, genel olarak dönüşüm katsayısı,

$$t_n = \left(\sqrt{3}/n\right)q \quad (16)$$

ve kararlılık sınırı,

$$s_{max} = 1/t_n \equiv n\Big/\left(\sqrt{3}q\right) \quad (17)$$

şeklinde olur. Herhangi bir mertebedeki ζ_m ile $T_n(x)$'nin s^4, s^6, s^8, ... katsayıları birbirlerine denkleştirilmesi ile g_2, g_3, g_4, ... değerleri yukardaki örnekte olduğu gibi bulunabilir.

Üstel işleç katsayıları Denklem (10), (6) ve (7) kullanılınarak bulunabilir. Herhangi bir çokterimliyi elde etmek için birden fazla çözüm kümesi bulmak mümkündür. Tasarımın kararlılık sınırı ve sayısal saçılımı tamamen ζ işlevine bağlı olduğundan, tasarımın performansı g_p değerleri ile η_x, η_y, ve η_z'in ifadelerine bağlıdır.

3. TASARIMIN PERFORMANSI

Tasarımın performansını incelemek için 4 aşamalı 8 üstel işleçli bir tasarım seçilmiş ve bu tasarımın performansı [4]'deki 5 aşamalı 9 üstel işleçli tasarım ile karşılaştırılmıştır. 8 üstel işleçli bir tasarımda belirlenmesi gereken 8 katsayı mevcuttur, bunlar { c_1, d_1, c_2, d_2, c_3, d_3, c_4, d_4 } dür.

Üç boyutlu 8 üstel işleçli bir tasarım için ζ_m sekizici mertebe bir işlevdir, bundan dolayı bu işlevin içerisinde belirlenmesi gereken g_2, g_3, g_4 katsayıları bulunmaktadır, burada yine g_1=1'dir. Buna karşılık gelen Chebyshev çokterimlisi ise $T_8(t_8s)$ dir, burada n=8 dir.

n ve q'nün değerleri Denklem (16)'daki yerlerine konulduğunda, tasarım dönüşüm katsayısı bulunur, daha sonra Denklem (17)'den faydalanarak kararlılık sınırı elde edilir. Dördüncü mertebe uzay ayrıklaştırılması için bu tasarımın kararlılık sınırı s_{max}=1.97948'dir. [4]'deki 5 aşamalı 9 üstel işleçli tasarımın kararlılık sınırı ise 0.743'dür.

g_2, g_3, g_4 katsayıları ζ_m ve $T_8(t_8s)$'in her bir terimi birbirine eşilenerek bulunabilir. Bu değerler g_2=5/64, g_3=1/512, ve g_4=1/65536 dir.

Denklem (10)'dan da görüleceği gibi g_2, g_3, g_4 katsayıları üstel işleç katsayılarına bağımlıdır, dolayısıyla sağlanması gereken 3 denkem mevcuttur, diğer sağlanması gereken Denklemler ise (6) ve (7) dir. Toplam denklem sayısı 5 dir, fakat bilinmeyen katsayı adeti ise 8 dir. Eğer katsayılar simetrik hale dönüştürülürse { $c_1=d_4$, $d_1=c_4$, $c_2=d_3$, $d_2=c_3$ } olur, ve bilinmeyen katsayı adeti 4'e, öteki taraftan Denklem (6) ise Denklem (7)'ye eşitlendiğinden denklem sayısıda 4'e düşer. Bu denklemler söyledir:

$$c_1+c_2+d_2+d_1 = 1 \quad (18)$$

$$g_2 = \left\{\begin{array}{l} 2c_1d_1c_2\left(c_1+c_2+d_2\right)+ \\ d_2\left(2c_1d_1+c_1d_2+c_2d_2\right)\left(c_1+c_2\right) \\ +2c_2d_1d_2(d_1+d_2)+d_1^2\left(c_1^2+c_2^2\right) \end{array}\right\} \equiv \frac{5}{64} \quad (19)$$

$$g_3 = \left\{\begin{array}{l} 2c_1d_1c_2d_2^2\left(c_1+c_2\right)+c_1^2d_1^2c_2 \\ \left(c_2+d_2\right)+d_1^2d_2c_2\left(c_1^2+c_2d_2\right) \end{array}\right\} \equiv \frac{1}{512} \quad (20)$$

$$g_4 = c_1^2d_1^2+c_2^2d_2^2 \equiv \frac{1}{65536} \quad (21)$$

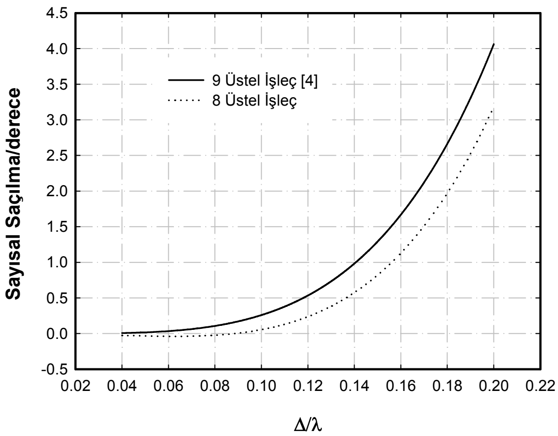
Bu denklemleri sağlayan birden fazla çözüm kümesi bulunabilir; eğer katsayıların tamamı gerçek bir sayı ve ayrıca bire eşit veya küçük ise bunların hangisinin kullanılacağı önemli değildir. Yukarıdaki 4 denklem MAPLE 7 programı kullanılarak çözülmüştür ve tüm elemanları gerçek sayı olan 23 çözüm kümesi elde edilmiştir. Bu kümelerden bir tanesinde katsayıların tümü 1/4'e eşittir.

Sayısal şacılmayı bulmak için $\cos(2\pi f\Delta t)$ Denklem (9)'a eşitlenmiştir[4], f dalga frekansını belirtmektedir.

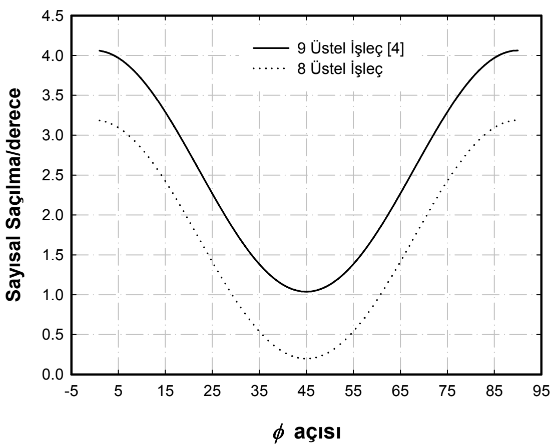
Şekil 1 ve Şekil 2, üç boyutlu düz dalga yayılımı kullanılarak 4 aşamalı 8 üstel işleçli ile 5 aşamalı 9 üstel işleçli[4] Symplectic FDTD tasarımları için elde edilen sayısal saçılım performansını göstermektedir. Burada sayısal saçılım

$$360\left(\left(k/\tilde{k}\right)-1\right) \qquad (22)$$

derece olarak tanımlanmıştır. k dalga sayısını $\tilde{k}$ ise sayısal dalga sayısını göstermektedir.



Şekil 1 Sayısal saçılımın Δ/λ'ya göre değişimi (θ=90°, ϕ=0°, s=0.74)



Şekil 2 Sayısal saçılımın ϕ açısına göre değişimi (Δ=λ/5, θ=90°, s=0.74).

θ ve ϕ küresel koordinat sistemindeki açıları, λ ise dalga boyunu göstermektedir.

Bu şekilerden görüleceği gibi bu bildiride sunulan tasarım yüksek kararlılık sınırına ek olarak daha düşük sayısal saçılım sağlamaktadır.

4. SONUÇ

Symplectic FDTD tasarımında bulunan üstel türevsel işleçlerin katsayılarının bulunmasında yeni bir yöntem ortaya konmuştur. Üstel işleç katsayılarının bulunması için gereken denklemler büyüme oranını etkileyen bir işlevin içerisindeki katsayıların denklemlerinden faydalanılmıştır. Bu işlevin içerisindeki katsayılar Chebyshev çokterimlisi kullanılarak bulunmuştur. Chebyshev çokterimlisi kullanılarak elde edilen tasarımlarda kararlılık sınırının üstel işleç sayısıyla doğru orantılı olduğu gösterilmiştir. Bu kararlılık sınırı daha önce yayınlanmış Symplectic FDTD tasarımının kararlılık sınırının oldukça üzerindedir. Ayrıca elde edilen yeni tasarımın sayısal saçılımı da daha düşüktür. Üstel işleç sayısı düşürüldüğü takdirde işlem sayısı azalacağından merkezi işlem birimi (CPU) zamanı da azalır. Sayısal modellemesi yapılan elektromanyetik problemin özelliklerine göre üstel işleç sayısı istenilen şekilde seçilebilir.

KAYNAKLAR

[1] Yee K. S., Numerical solution of initial boundary value problem involving Maxwell's equation in isotropic media, IEEE TRANSACTIONS ON ANTENNAS AND PROPAGATION, Vol 14, Iss 3, pp 302-307, 1966.

[2] Shlager K. L., Moloney J. G., Ray S. L., Peterson A. F., Relative accuracy of several finite-difference time-domain method in two and three dimensions, IEEE TRANSACTIONS ON ANTENNAS AND PROPAGATION, Vol 41, Iss 12, pp 1732-1737, 1993.

[3] Young J. L., Gaitonde D., Shang J. J. S., Toward the construction of a fourth-order difference scheme for transient EM wave simulation: Staggered grid approach, IEEE TRANSACTIONS ON ANTENNAS AND PROPAGATION, Vol 45, Iss 11, pp 1573-1580, 1997.

[4] Hirono T., Lui W., Seki S., Yoshikuni, Y., A three-dimensional fourth-order finite-difference time-domain scheme using a symplectic integrator propagator, IEEE TRANSACTIONS ON MICROWAVE THEORY AND TECHNIQUES, Vol 49, Iss 9, pp 1640-1648, 2001.