

第三章 有限元素法

本章主要是探討有限元素法分析技巧，首先提到的是如何將選定區域作離散化，並且對離散單元作編碼，最後是對有限元素法於光子晶體計算的應用作介紹。

3.1 有限元素法簡介

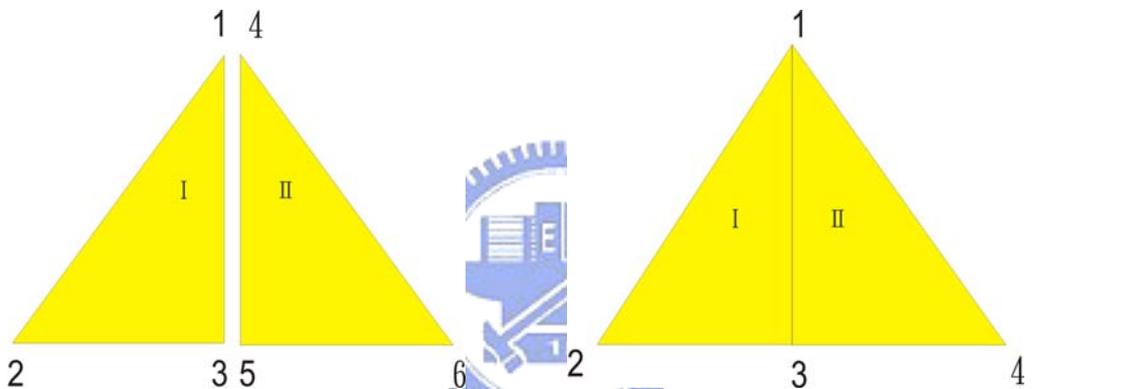
有限元素法是一種解析方法，而它的發展歷史是由1850年到1875年，法國彈性力學家如那維爾及聖維農等人所開啟。有限元素法與其它方法擬建立數值模擬解相類似，皆需要推導及解析代數方程式，其快速發展已經普遍被人重視，且由早期的結構力學應用，如今已廣泛的被應用於熱傳導、能流及電磁波等現象分析。有限元素法的基本觀念是任何連續量均可用一不連續函數的型式作近似表示。此型式乃為有限區域的集合分段連續函數所組成。使用連續量的值，以定義分段連續函數在其有限數次域 (subdomain)。

3.2 二維有限元素法之區域離散化

運用有限元素分析法[42][50]，首先需將區域 Ω 分成眾多的二維單元，比如三角形單元。我們必須使離散的單元間沒有重疊且無間隔，且單元的頂點應相連，也就是一個頂點只連接於它相鄰的單元頂點之上，不可在其它單元的邊之上。較好的離散也應避免窄形單元的產生，意即銳角單元。雖然這些單元是允許存在的，但是可證實有限元素解的誤差反比於最小內角的正弦，因此窄形單元會增加計算誤差。所以全部的單元應接近正三角形。此切割單元若越小，計算結果越佳。然而，愈小的單元則產生未知量增加，因此增加記憶體的需求且耗時，所

以對我們所希望的精度，應當維持於單元數最少化的要求。因此我們可知最好的方法是在計算變化較大的區域採用較小的切割單元，而在計算變化較小的的區域採用較大的切割單元。

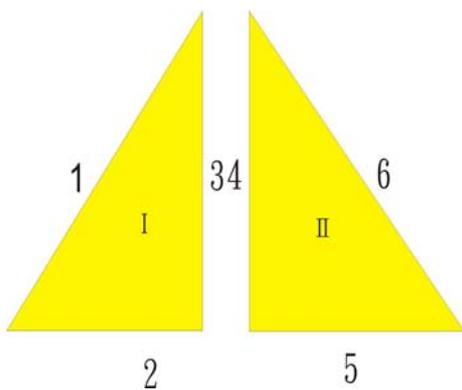
標示計算的每個組成單元時，單元編碼可由單一組整數表示；此外，若是其它的組成切割單元頂點處之節點，可採用另一組整數作為其它節點的編碼。因為每一個單元皆與數個節點有關連，因此，一節點除了具有在整個區域中的位置外，還有在其相對應的切割單元中的位置，因此可將編碼分為下述幾種，分別為整體邊編碼、局部節點編碼、局部邊編碼、單元編碼與整體節點編碼。為了方便了解，可用圖3-1、3-2描述。



【圖3-1 不相連的兩個元素其相鄰三

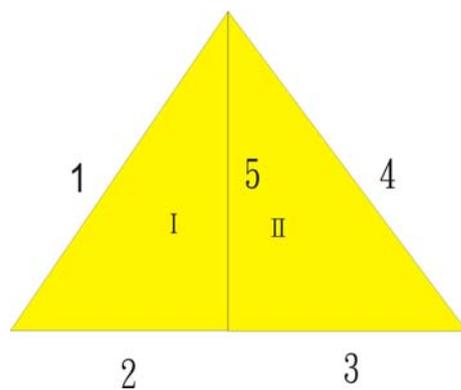
角形切割單元的節點編碼】

【圖3-2 兩個相鄰三角形單元要求連



【圖3-3 不相連的兩個元素其相鄰三

角形切割單元的邊編碼】



【圖3-4 相鄰兩個三角形切割單元要求

連續，其相對應邊需作重新編碼】

由圖3-1~3-4可知，當所連續的三角形切割單元增加，其節點與邊的編碼會比不

連續的節點與邊的編碼數目較少。計算的過程中，也需很確定知道各個對應的編號，我們可將對應的編號以下表表示。以圖3-1~3-4為例，以表3-1、3-2作整理。

e	n(1, e)	n(2, e)	n(3, e)
1	1	2	3
2	1	3	4

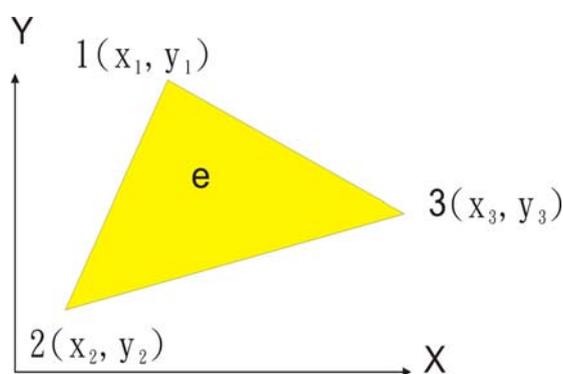
【表3-1 紀錄相對應節點編碼】

e	edge(1, e)	edge(1, e)	edge(1, e)
1	1	2	5
2	5	3	4

【表3-2 紀錄相對應邊編碼】

實際上而言，此種編碼方式並非唯一，也可將第一個三角形切割單元的三個不同節點編成3、1、2或2、3、1，只要遵從逆時針方向即可。因此可知，邊的編碼也非唯一，但仍須遵從逆時針方向。

3.3 單元插值



【圖3-5典型的三角形切割單元】

若將欲切割區域劃分完成後，有限元素法的第二步驟是，需要將每一單元內的未知函數 Φ 作近似表示。若以線性的三角形為單元，則每一單元內的未知函數 Φ 可近似表示為

$$\Phi^e(x, y) = a^e + b^e x + c^e y \quad (3.1)$$

(3.1)式中， a^e 、 b^e 和 c^e 是待定的常係數，取決於每個頂點上之座標與電位， e 則表示單元編碼。若按逆時鐘方向以1、2和3作這三個節點編碼，並用 Φ_1^e 、 Φ_2^e 和 Φ_3^e 分別作為各別相應的電位 Φ 值，將所定義的電位和相應頂點帶入上式，就可得以下三個方程式：

$$\Phi_1^e = a^e + b^e x_1^e + c^e y_1^e \quad (3.2)$$

$$\Phi_2^e = a^e + b^e x_2^e + c^e y_2^e \quad (3.3)$$

$$\Phi_3^e = a^e + b^e x_3^e + c^e y_3^e \quad (3.4)$$

以上三個方程式解聯立，並代回(3.1)，可得

$$\Phi^e(x, y) = \sum_{j=1}^3 N_j^e(x, y) \Phi_j^e \quad (3.5)$$

上式中， $N_j^e(x, y)$ 表示插值函數或展開函數

$$N_j^e(x, y) = \frac{1}{2\Delta^e} (a_j^e + b_j^e x_j + c_j^e y_j) \quad j=1,2,3 \quad (3.6)$$

其中

$$a_1^e = x_2^e y_3^e - y_2^e x_3^e; \quad b_1^e = y_2^e - y_3^e; \quad c_1^e = x_3^e - x_2^e$$

$$a_2^e = x_3^e y_1^e - y_3^e x_1^e; \quad b_2^e = y_3^e - y_1^e; \quad c_2^e = x_1^e - x_3^e$$

$$a_3^e = x_1^e y_2^e - y_1^e x_2^e; \quad b_3^e = y_1^e - y_2^e; \quad c_3^e = x_2^e - x_1^e$$

$$\Delta^e = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_1^e & y_1^e \\ 1 & x_2^e & y_2^e \\ 1 & x_3^e & y_3^e \end{vmatrix} = \frac{1}{2} (b_1^e c_2^e - b_2^e c_1^e) = \text{第}e\text{個單元面積} \quad (3.7)$$

上式中， x_j^e 和 y_j^e ($j=1,2,3$)表示第 e 個單元中第 j 個節點座標

3.4 有限元素法之光子晶體計算

根據電磁波理論，光子晶體內的電磁波傳播是由馬克斯威爾方程式(Maxwell Equation)出發。

$$\nabla \cdot B = 0 \quad (3.8)$$

$$\nabla \cdot D = \rho \quad (3.9)$$

$$\nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t} + J \quad (3.10)$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (3.11)$$

式中 E 和 H 分別表示電場強度和磁場強度，而 D 和 B 為電通密度及磁通密度， ρ 表示自由電荷密度， J 是電流密度，我們可由此出發模擬光子晶體的特性。就非均勻填充波導的分析而言，邊界值問題的向量波動方程式為

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times E \right) - k_0^2 \epsilon_r E = 0 \quad (3.12)$$

在 Ω 中邊界條件為：

$$\hat{n} \times E = 0 \text{ 在 } \Gamma^1 \text{ 上} \quad (3.13)$$

$$\hat{n} \times (\nabla \times E) = 0 \text{ 在 } \Gamma^2 \text{ 上} \quad (3.14)$$

Ω 表示結構的橫截面，邊界是由電壁 Γ^1 和磁壁 Γ^2 所組成。由變分原理在 ϵ_r 和 μ_r 為實數時可等效為下列變分問題

$$\begin{cases} \delta F(E) = 0 \\ \hat{n} \times E = 0 \end{cases} \text{ 在 } \Gamma^1 \text{ 上} \quad (3.15)$$

其中

$$F(E) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times E) \cdot (\nabla \times E)^* - k_0^2 \varepsilon_r E \cdot E^* \right] d\Omega \quad (3.16)$$

已知的z相關因子為 $E(x, y, z) = E(x, y) e^{-jk_z z}$ ，其中 k_z 是傳播常數，則

$$F(E) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla_t \times E_t) \cdot (\nabla_t \times E_t)^* - k_0^2 \varepsilon_r E \cdot E^* \right. \\ \left. + \frac{1}{\mu_r} (\nabla_t E_z + jk_z E_t) \cdot (\nabla_t E_z + jk_z E_t)^* \right] d\Omega \quad (3.17)$$

上式中 ∇_t 為橫向梯度運算子， E_t 為電場的橫向分量， E_z 為電場的z分量。將其

作離散，可得一特徵方程組，對給定的 k_z 求解該方程組可解出 k_0^2 。一般而言，通

常給定工作頻率，再解傳播常數，並引入下列變量變換

$$\Phi_t = k_z E_t \quad (3.18)$$

$$\Phi_z = -jE_z \quad (3.19)$$

將上式帶回原式並與 k_z^2 相乘，可得

$$F(e) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} \left\{ \frac{1}{\mu_r} (\nabla_t \times \Phi_t) \cdot (\nabla_t \times \Phi_t)^* - k_0^2 \varepsilon_r \Phi_t \cdot \Phi_t^* \right. \\ \left. + k_z^2 \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla_t \Phi_z + \Phi_t) \cdot (\nabla_t \Phi_z + \Phi_t)^* - k_0^2 \varepsilon_r \Phi_z \Phi_z^* \right] \right\} d\Omega \quad (3.20)$$

可看出只要給定 k_0 ，就可導出一個特徵值為 k_z^2 的方程組

將上式作離散，橫截面 Ω 分割為許多小矩形或三角形元素。在每個元素裡，向量

橫向場可展開為

$$\Phi_t^e = \sum_{i=1}^n N_i^e \Phi_{ti}^e = \{N^e\}^T \{\Phi_t^e\} = \{\Phi_t^e\} \{N^e\} \quad (3.21)$$

n表示單元的邊數。對三角形元素，n=3；矩形元素，n=4。使用節點基差值函數，

將縱向分量 Φ_z 展開為

$$\Phi_z^e = \sum_{i=1}^n N_i^e \Phi_{zi}^e = \{N^e\}^T \{\Phi_z^e\} = \{\Phi_z^e\}^T \{N^e\} \quad (3.22)$$

並帶入原式，得到

$$F = \frac{1}{2} \sum_{e=1}^M [\{\Phi_t^e\}^T [A_{tt}^e] \{\Phi_t^e\}^* + k_z^2 \begin{Bmatrix} \Phi_t^e \\ \Phi_z^e \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} B_{tt}^e & B_{tz}^e \\ B_{zt}^e & B_{zz}^e \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_t^e \\ \Phi_z^e \end{Bmatrix}^*] \quad (3.23)$$

其中單元矩陣為

$$[A_{tt}^e] = \iint_{\Omega^e} \left[\frac{1}{\mu_r^e} \{\nabla_t \times N^e\} \bullet \{\nabla_t \times N^e\}^T - k_0^2 \varepsilon_r^e \{N^e\} \bullet \{N^e\}^T \right] d\Omega \quad (3.24)$$

$$[B_{tt}^e] = \iint_{\Omega^e} \frac{1}{\mu_r^e} \{N^e\} \bullet \{N^e\}^T d\Omega \quad (3.25)$$

$$[B_{tz}^e] = \iint_{\Omega^e} \frac{1}{\mu_r^e} \{N^e\} \bullet \{\nabla_t N^e\}^T d\Omega \quad (3.26)$$

$$[B_{zt}^e] = \iint_{\Omega^e} \frac{1}{\mu_r^e} \{\nabla_t N^e\} \bullet \{N^e\}^T d\Omega \quad (3.27)$$

$$[B_{zz}^e] = \iint_{\Omega^e} \left[\frac{1}{\mu_r^e} \{\nabla_t \times N^e\} \bullet \{\nabla_t \times N^e\}^T - k_0^2 \varepsilon_r^e \{N^e\} \bullet \{N^e\}^T \right] d\Omega \quad (3.28)$$

各式中， Ω^e 表示相對介電常數和相對磁導率為 $(\varepsilon_r^e, \mu_r^e)$ 的元素 e 。若在該元素中 ε_r^e

和 μ_r^e 都是常數，對於矩形和三角形元素，使用全局標記，可寫為

$$F = \frac{1}{2} \{\Phi_t\}^T [A_{tt}] \{\Phi_t\}^* + \frac{1}{2} k_z^2 \begin{Bmatrix} \Phi_t \\ \Phi_z \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} B_{tt} & B_{tz} \\ B_{zt} & B_{zz} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_t \\ \Phi_z \end{Bmatrix}^* \quad (3.29)$$

並利用里茲法[42]可得到廣義特徵值問題。

$$\delta F_a = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} A_{tt} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_t \\ \Phi_z \end{bmatrix} = -k_z^2 \begin{bmatrix} B_{tt} & B_{tz} \\ B_{zt} & B_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_t \\ \Phi_z \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

$$[B_{zt}] \Phi_t = -[B_{zz}] \Phi_z \quad (3.31)$$

$$[A_{tt}] \Phi_t = -k_z^2 [B_{tt}] \Phi_t - k_z^2 [B_{tz}] \Phi_z = k_z^2 \left([B_{tz}] [B_{zz}]^{-1} [B_{zt}] - [B_{tt}] \right) \Phi_t = k_z^2 [B_{tt}'] \Phi_t \quad (3.32)$$

$$\left([A_{tt}] - k_z^2 [B_{tt}'] \right) \Phi_t = 0 \quad (3.33)$$

將(3.33)式解特徵值，可得 k_z 。

3.5 Berenger的PML完美匹配層

Berenger的PML吸收邊界條件雖然需要較多的記憶體，但卻是目前最有效的吸收邊界條件。PML層的原理是在邊界設置一特殊的介質層，而真空中阻抗為 Z_0 ，而在介質中傳遞的阻抗為 Z ，這兩個阻抗的值分別可表示為

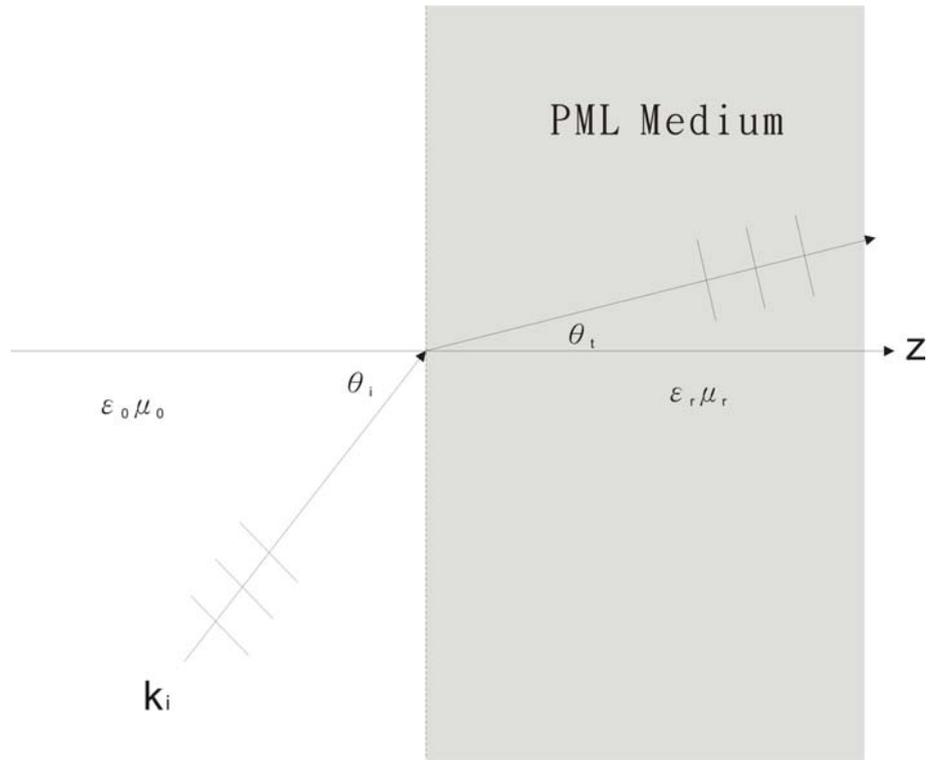
$$Z_0 = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \quad (3.34)$$

$$Z = \sqrt{\frac{\mu + \frac{\sigma^*}{j\omega}}{\varepsilon + \frac{\sigma}{j\omega}}} \quad (3.35)$$

由阻抗匹配的條件 $Z_0=Z$ 而得到

$$\frac{\sigma}{\varepsilon_0} = \frac{\sigma^*}{\mu_0} \quad (3.36)$$

如滿足上式的條件時反射係數為0，由於電磁波不反射因此可視為電磁波完全穿透介質。或是 σ 、 σ^* 變得非常大時，穿透波會很快地衰減，即使PML為有限厚度，它對於入射波仍有很好的吸收效果。因此如果以這種介質包圍所要解析區域便可得到良好的吸收邊界。



【圖3-6 PML介面】

對二維的TE波來說，只有 H_z 、 E_x 與 E_y 分量，可將其寫成

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (3.37)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (3.38)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (3.39)$$

Berenger在PML介質中，假設電場 E_x 分裂為兩個子分量 E_{xy} 、 E_{xz} ，電場 E_y 分裂為兩個子分量 E_{yx} 、 E_{yz} ，磁場 H_z 分裂為兩個子分量 H_{zx} 、 H_{zy} ，因此，(3.37)~(3.39)式可

改寫成

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial(H_{zx} + H_{zy})}{\partial y} \quad (3.40)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = -\frac{\partial(H_{yx} + H_{zy})}{\partial y} \quad (3.41)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{yz}}{\partial t} + \sigma_z E_{yz} = \frac{\partial(H_{xy} + H_{xz})}{\partial z} \quad (3.42)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{yx}}{\partial t} + \sigma_x E_{yx} = -\frac{\partial(H_{zx} + H_{zy})}{\partial x} \quad (3.43)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{zx}}{\partial t} + \sigma_x E_{zx} = -\frac{\partial(H_{yx} + H_{yz})}{\partial x} \quad (3.44)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{zy}}{\partial t} + \sigma_y E_{zy} = -\frac{\partial(H_{xy} + H_{xz})}{\partial y} \quad (3.45)$$

式中 $\sigma_{x,y,z}$ 為導電係數，可知 $\sigma_{x,y,z}=0$ 時，式 (3.40) ~ (3.45) 就退化為 (3.37) ~ (3.39) 式。

若假設解析區域為真空 (3.40)、(3.41) 可表示為

$$(j\omega\epsilon_0 + \sigma_y) E_{xy} = \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (3.46)$$

$$(j\omega\epsilon_0 + \sigma_z) E_{xz} = \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (3.47)$$

我們可定義

$$s_i = 1 + \frac{\sigma_i}{j\omega\epsilon_0} \quad i=x, y, z \quad (3.48)$$

若將 (3.46) 與 (3.47) 式相加，且假設 E_x 分裂為兩個子分量 $E_x = E_{xy} + E_{xz}$ ，可得

$$j\omega\epsilon_0 E_x = \frac{1}{s_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{s_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (3.49)$$

可定義

$$E_i = \frac{E'_i}{s_i} \quad (3.50)$$

$$H_i = \frac{H'_i}{s_i} \quad (3.51)$$

對 s_i 作正規化且可定義為

$$j\omega\epsilon_0 \frac{s_y s_z}{s_x} E'_x = (\nabla \times H'_x) \quad (3.52)$$

同理，其餘分量也可作相同整理。

$$\nabla \times H = j\omega\epsilon_0 \overline{\epsilon_r} E \quad (3.53)$$

其中

$$\overline{\epsilon_r} = \begin{pmatrix} \frac{s_y s_z}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_x s_z}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{s_x s_y}{s_z} \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

同理，我們也可對磁場作計算，可表示成

$$\nabla \times E = -j\omega\mu_0 \overline{\mu_r} H \quad (3.55)$$

經由匹配條件

$$\overline{\mu_r} = \overline{\epsilon_r} \quad (3.56)$$

(3.53)與(3.55)，就FEM而言，若以垂直z軸的面來看，當 $\sigma_x = \sigma_y = 0$ 時， $s_x = s_y = 1$

，則介電常數與導磁率張量為

$$\overline{\epsilon_r} = \overline{\mu_r} = \begin{pmatrix} s_z & 0 & 0 \\ 0 & s_z & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{s_z} \end{pmatrix} \quad (3.57)$$



由入射波側的介質狀況，Gedney對 s_z 作兩種選擇[49]：

$$s_z = 1 - j \frac{\sigma}{\omega\epsilon_0 n^2} \text{ 入射波側為有損耗介質} \quad (3.58)$$

或

$$s_z = 1 \text{ 入射波側為無損耗介質} \quad (3.59)$$