



UNIVERSIDAD DE GRANADA

Facultad de Ciencias

GRADO EN FÍSICA

TRABAJO FIN DE GRADO

IMPLEMENTACIÓN DE MÉTODOS EN DIFERENCIAS FINITAS PARA LAS ECUACIONES DE MAXWELL INCLUYENDO MATERIALES NO LINEALES

Presentado por:
D. Yone del Castillo Bermúdez

Curso Académico 2023/2024

Resumen

El objetivo de este trabajo es desarrollar un programa capaz de simular el comportamiento de las ecuaciones de Maxwell tanto en el vacío como en materiales dispersivos. Para ello se ha implementado el algoritmo de Yee o método FDTD (Finite Difference Time Domain). Se comprobará que las simulaciones reproducen los comportamientos esperables bajo la teoría ondulatoria de la luz, tales como la reflexión, la refracción y la difracción.

Abstract

The objective of this work is to develop a program that can simulate the behavior of solutions to Maxwell's equations both in vacuum and in dispersive materials. To accomplish this goal, the FDTD (Finite Difference Time Domain) method, also known as Yee's algorithm, has been implemented. It will be verified whether the simulations reproduce the known behaviors predicted by wave theory of light, such as reflection, refraction, and diffraction.

Índice

1	Introducción teórica	4
1.1	Materiales lineales	4
1.1.1	Ecuaciones de Maxwell	4
1.1.2	Particularización de las ecuaciones a 2D	5
1.2	Materiales no lineales	7
2	Método computacional	8
2.1	FDTD o algoritmo de Yee	8
2.1.1	Materiales lineales	11
2.1.2	Dispersión lineal	13
2.1.3	Medio de Debye	18
2.2	Condiciones inicial y de contorno	20
2.3	Geometrías	22
2.4	Lenguaje y entorno de programación	23
3	Resultados	23
3.1	Medio lineal	23
3.1.1	Geometrías opacas	23
3.1.2	Geometrías traslúcidas	26
3.2	Dispersión lineal en medio de Debye	27
4	Análisis de resultados	28
5	Conclusiones	31
	Referencias	32

1 Introducción teórica

Se conocen soluciones analíticas de las ecuaciones de Maxwell para ciertos sistemas sencillos pero, no es posible hallar una solución general a cualquier tipo de problema. Es en este contexto que se comprende la necesidad de desarrollar métodos computacionales que den solución a escenarios que de otra forma no serían resolubles. En esta sección se discutirán brevemente los aspectos teóricos de las ecuaciones de Maxwell y de cómo adaptarlas para el cálculo computacional.

1.1 Materiales lineales

De manera general, cuando un campo electromagnético incide sobre un material este puede inducir desplazamiento de cargas, la polarización de las moléculas que lo componen o corrientes de imanación según el tipo de material (metales, dieléctricos, paramagnéticos, etc.). En la teoría electromagnética decimos que un material se comporta de forma lineal cuando los campos de polarización \vec{P} y de magnetización \vec{M} son proporcionales a los campos eléctrico \vec{E} y magnético \vec{H} que los inducen, respectivamente.

1.1.1 Ecuaciones de Maxwell

En este trabajo nos limitaremos a escenarios con ausencia de cargas o corrientes, esto implica que las ecuaciones de Gauss para los campos eléctrico y magnético se anulen:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \quad (1.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.2)$$

Las leyes de Faraday y Ampere [1] pueden escribirse, de forma general para materiales lineales, como:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{E} - \vec{K} \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{H} - \vec{J} \quad (1.4)$$

donde, por tratarse de materiales lineales, se cumple que $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ y $\vec{B} = \mu \vec{H}$.

El vector \vec{J} representa la densidad de corriente inducida en el material. Esta corriente podemos expresarla también en función del campo eléctrico a través de la conductividad como $\vec{J} = \sigma \vec{E}$. De manera análoga al vector \vec{J} , se introduce el término \vec{K} para modelar las pérdidas energéticas debido a la disipación magnética. Este vector cumple por tanto que $\vec{K} = \sigma^* \vec{H}$. Expresando de nuevo estas dos

ecuaciones unicamente en función de los campos \vec{E} y \vec{H} nos queda:

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \vec{\nabla} \times \vec{E} - \frac{1}{\mu} \sigma^* \vec{H} \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{1}{\varepsilon} \sigma \vec{E} \quad (1.6)$$

Aunque estén expresadas de forma compacta en notación vectorial, se tiene un conjunto de 6 ecuaciones diferenciales acopladas con 6 incógnitas (2 ecuaciones vectoriales cada una con las 3 componentes cartesianas). Si se expresan de manera explícita se obtiene:

Ley de Faraday:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) - \frac{1}{\mu} \sigma^* H_x \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) - \frac{1}{\mu} \sigma^* H_y \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) - \frac{1}{\mu} \sigma^* H_z \quad (1.9)$$

Ley de Ampere:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) - \frac{1}{\varepsilon} \sigma E_x \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) - \frac{1}{\varepsilon} \sigma E_y \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) - \frac{1}{\varepsilon} \sigma E_z \quad (1.12)$$

Vemos, por tanto, que obtener una solución analítica de estas ecuaciones es complicado. Aunque es posible manipular las ecuaciones (1.5) y (1.6) para desacoplar los campos \vec{E} y \vec{H} , se trabajará con las ecuaciones acopladas para proporcionar mayor robustez a la simulación y permitir un estudio del campo electromagnético en su conjunto.

1.1.2 Particularización de las ecuaciones a 2D

Aunque las ecuaciones son en tres dimensiones nos limitaremos al caso bidimensional. Para ello, vamos a imponer la restricción de que el campo electromagnético es constante a lo largo de la dirección z tal como puede verse en la figura (1). De esta manera las derivadas parciales con respecto a esta variable se anulan. Esto permite simplificar el sistema de ecuaciones (1.7 - 1.12).

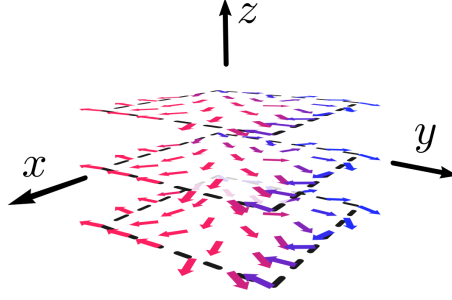


Figura 1: Visualización conceptual de la restricción impuesta. El campo electromagnético puede variar en las direcciones x e y pero permanece constante en la dirección z

Ley de Faraday:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} + \sigma^* H_x \right) \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(-\frac{\partial E_z}{\partial x} + \sigma^* H_y \right) \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} + \sigma^* H_z \right) \quad (1.15)$$

Ley de Ampere:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \sigma E_x \right) \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right) \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (1.18)$$

Podemos comprobar que en las ecuaciones (1.16), (1.17) y (1.15) únicamente aparecen los campos E_x , E_y y H_z , por lo que forman un sistema independiente. A este conjunto se le denomina modo TE_z . De la misma manera, en las ecuaciones (1.13), (1.14) y (1.18) solo aparecen las componentes H_x , H_y y E_z , a este modo se le denomina TM_z . Estos modos son dos sistemas de ecuaciones diferenciales independientes que pueden resolverse de forma separada y que no interfieren entre sí. Por simplicidad nos centraremos solo en el **modo TE_z** :

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \sigma E_x \right) \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right) \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} + \sigma^* H_z \right) \quad (1.21)$$

1.2 Materiales no lineales

Las ecuaciones (1.19 - 1.21) son válidas dentro del régimen lineal de los materiales, sin embargo, son pocos los que presentan este comportamiento. Desde un punto de vista electromagnético podemos clasificar los materiales en cuatro categorías, según si responden de alguna de las siguientes maneras a campos externos:

- **Dispersión lineal:** La permitividad/permeabilidad varía con la frecuencia de la onda electromagnética para bajas intensidades.
- **No linealidad:** La permitividad/permeabilidad varía con la intensidad de la onda.
- **Dispersión no lineal:** La *no linealidad* del material varía con la frecuencia de la onda.
- **Ganancia:** Un material dieléctrico activo (láser) transfiere potencia desde una fuente externa para progresivamente incrementar la amplitud de la onda electromagnética que se propague por el material.

De estos cuatro comportamientos, en este trabajo se estudiará únicamente el de dispersión lineal. Recordemos que en un material lineal la relación entre el vector de polarización y el campo eléctrico es:

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \hat{\chi}_e \vec{E} \quad (1.22)$$

Donde $\hat{\chi}_e$ es la llamada susceptibilidad eléctrica, que contiene la información de cómo responde el material al campo [2]. El gorro sobre la susceptibilidad indica que para el caso general esta puede ser un tensor (materiales anisótropos) pero, nos limitaremos al caso escalar.

Para materiales que presenten dispersión lineal la susceptibilidad es una función de la frecuencia $\chi_e(\omega)$. Según la forma específica de esta dependencia el material tendrá distintas propiedades. Una dependencia muy empleada para modelar el comportamiento electromagnético de medios como el agua es el llamado *medio de Debye*.

$$\chi_e(\omega) = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + j\omega\tau_p} \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi_e(t) = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{\tau_p} e^{-t/\tau_p} u(t) \quad (1.23)$$

Podemos ver la dependencia de la susceptibilidad con la frecuencia y su transformada de Laplace al dominio temporal. τ_p representa el tiempo de relajación, es decir el tiempo promedio que necesita el material para alcanzar el equilibrio. ϵ_s representa la permitividad dieléctrica del medio para campos estáticos y ϵ_∞ la que alcanza en el límite cuando la frecuencia se hace infinita. Por último $u(t)$ es la función escalón. Observando la función en el dominio del tiempo se comprueba que, después de que la onda incida por primera vez sobre el material, la polarización tendrá un tiempo de respuesta antes de anularse.

Si tratamos de sustituir $\chi_e(t)$ en la ecuación (1.22) pronto nos encontraremos con un problema:

$$\vec{P}(t) = \epsilon_0 \chi_e(t) \vec{E}(t)$$

Esta expresión solo sería válida bajo dos supuestos. El primero es que la onda incida sobre el material exactamente en el instante $t = 0$. El segundo es que la onda afecte instantáneamente a todo el volumen del material desde el primer contacto entre ambos. El segundo supuesto es el más problemático de los dos, ya que no tiene en cuenta que la interacción con la onda es gradual. Una forma de modelar este fenómeno de retardo es mediante una convolución [3]:

$$\vec{P}(t) = \epsilon_0 \int_0^t \chi_e(\tau) \vec{E}(t - \tau) d\tau \quad (1.24)$$

No confundir este τ con el del tiempo de relajación del material. De esta forma se tiene en cuenta el tiempo de reacción del medio, comportándose como una especie de *inercia electromagnética*.

De esta manera el vector de desplazamiento eléctrico quedaría:

$$\vec{D}(t) = \epsilon_0 \epsilon_\infty \vec{E}(t) + \epsilon_0 \int_0^t \chi_e(\tau) \vec{E}(t - \tau) d\tau \quad (1.25)$$

Tomando de nuevo las ecuaciones de Faraday (1.3) y Ampere (1.4), y la última expresión para \vec{D} , se tienen las ecuaciones diferenciales que gobiernan nuestro sistema. Para el escenario en 2D se tendrían que volver a particularizar como ya se hizo en la sección anterior.

2 Método computacional

2.1 FDTD o algoritmo de Yee

Una vez acotadas las ecuaciones diferenciales de nuestro problema, se ha de elegir un método computacional para resolverlas. En este caso se ha optado por el método de Diferencias Finitas en el Dominio Temporal o FDTD por sus siglas en inglés.

La expresión *Diferencias Finitas* se refiere al hecho de que en lugar de considerar diferencias infinitesimales como en el cálculo diferencial, se tomarán las expresiones discretas de las derivadas espaciales. Además, en lugar de tener campos

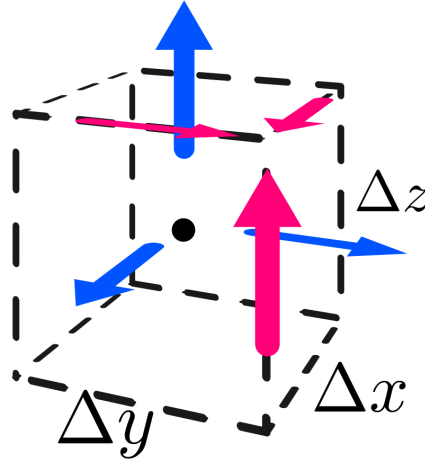


Figura 2: Celda de Yee. Los vectores azules representan las componentes del campo eléctrico \vec{E} y los morados las del campo magnético \vec{H}

continuos definidos en cada punto del espacio, se pasará a tener una colección finita de puntos, separados entre ellos por una distancia Δx , Δy o Δz según el eje de coordenadas, para los que el valor de los campos es conocido.

$$\vec{E}(x, y, t) \rightarrow \vec{E}_{ij}^n \quad (2.1)$$

Los subíndices j e i representan las coordenadas espaciales, mientras que el superíndice n representa el instante temporal.

Bajo este marco conceptual, la implementación parece inmediata. Bastaría con definir un retículo de puntos con el interespaciado deseado y aplicar las ecuaciones de Maxwell antes vistas, pero ahora discretizadas. Sin embargo, el matemático Kane S. Yee desarrolló en su artículo de 1966 [4] un algoritmo que aporta mayor precisión y robustez al método de *Diferencias Finitas*.

La idea general que Yee desarrolla en su artículo es la de intercalar los campos eléctrico y magnético en el retículo de puntos. En lugar de que para un mismo punto $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$ estén definidas todas las componentes de ambos campos \vec{E} y \vec{H} , se tiene por ejemplo que la componente E_x está definida en el punto $\left((i + \frac{1}{2})\Delta x, j\Delta y, k\Delta z\right)$ y la componente H_z en el punto $\left((i + \frac{1}{2})\Delta x, (j + \frac{1}{2})\Delta y, k\Delta z\right)$ ¹. Puede consultarse la figura (2) para visualizar la disposición espacial de las componentes en cada punto.

Existe libertad de elección sobre donde situar el punto de referencia $[i, j, k]$ dentro de la celda delimitada por Δx , Δy y Δz . Yee coloca el punto en uno de los vértices de la celda, en mi caso me ha resultado más intuitivo situarlo en el centro de la misma.

¹Por volver más simple la notación, a partir de ahora escribiré simplemente (i, j, k) para referirme al punto $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$

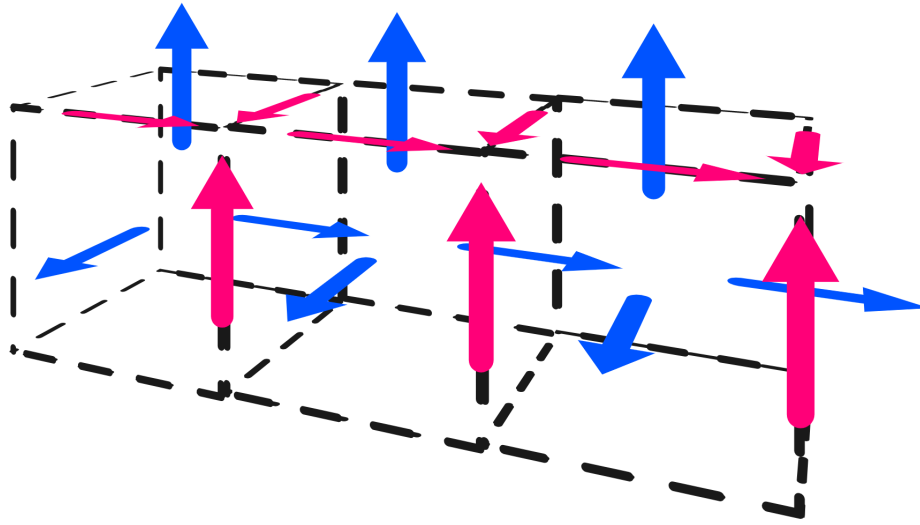


Figura 3: Retículo de Yee. Visualización de la distribución de las celdas de Yee por todo el espacio.

Según esta elección del origen, las coordenadas de cada componente del campo dentro de la celda $[i,j,k]$ quedarían de la siguiente manera:

Para el campo eléctrico:

- $E_x(i+1/2, j, k)$
- $E_y(i, j+1/2, k)$
- $E_z(i, j, k+1/2)$

Para el campo magnético:

- $H_x(i, j+1/2, k+1/2)$
- $H_y(i+1/2, j, k+1/2)$
- $H_z(i+1/2, j+1/2, k)$

Aun a riesgo de repetirme, creo que es importante enfatizar el hecho que fuera de las coordenadas especificadas las componentes del campo no están definidas. Por ejemplo, en el punto $(i, j + \frac{1}{2}, k)$ está definida únicamente la componente E_y , pero no lo están el resto.

Como se observa en la figura (3), cuando llenamos el espacio con estas celdas se genera una malla que intercala los campos eléctrico y magnético. No solo eso, además cada componente del campo eléctrico está rodeada por cuatro vectores de campo magnético que circulan a su alrededor y viceversa. Esta disposición del campo electromagnético captura la esencia de las ecuaciones de Faraday y Ampere, donde la circulación de un campo induce al otro, y fue lo que llevó a Yee a desarrollar este método.

El segundo objetivo que se busca con esta disposición es el de poder tomar las derivadas centradas en el punto, lo que implica menor error. Para un campo arbitrario que llamaremos $F(x,y)$ definimos su derivada discretizada en el punto (i,j) como:

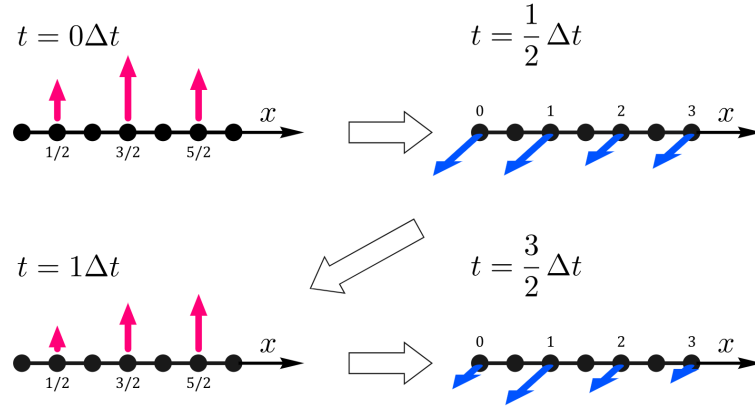


Figura 4: Representación conceptual del algoritmo de Yee para 1D. Puede verse el intercalado espacial y temporal entre los campos E_y y H_z

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{i,j} \rightarrow \frac{F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}}{\Delta x} \quad (2.2)$$

La diferencia con una derivada centrada usual es que en este caso los puntos están espaciados por distancias de $\frac{1}{2}\Delta x$, de ahí que en el denominador aparezca Δx y no $2\Delta x$.

Para terminar de exponer el método desarrollado por Yee faltaría determinar la discretización de la derivada temporal. La clave final es que los campos \vec{E} y \vec{H} no están solo intercalados en el espacio, sino que también lo están en el tiempo. De forma análoga a la disposición espacial de las componentes, los instantes temporales están separados por intervalos de $\frac{1}{2}\Delta t$, de manera que en los instantes $t = n\Delta t$ solo están definidas las componentes del campo magnético, y en los instantes $t = (n + \frac{1}{2})\Delta t$ lo están únicamente las del eléctrico (4).

2.1.1 Materiales lineales

Vamos a aplicar todo lo expuesto hasta ahora al caso de materiales lineales, para ello escribimos las ecuaciones (1.19 - 1.21) en su forma discretizada:

$$\begin{aligned}
\frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} - (E_x)_{i+\frac{1}{2},j}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - (H_z)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} - \sigma(E_x)_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) \\
\frac{(E_y)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (E_y)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - (H_z)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} - \sigma(E_y)_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right) \\
\frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{(E_y)_{i+\frac{1}{2},j+1}^{n+\frac{1}{2}} - (E_y)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right. \\
&\quad \left. - \frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2},j+1}^{n+\frac{1}{2}} - (E_x)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} + \sigma^*(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right)
\end{aligned}$$

Nos fijamos en que nos han aparecido los términos $(E_x)^n$, $(E_y)^n$ y $(H_z)^{n+\frac{1}{2}}$, pero como hemos visto, dichas componentes no están definidas en esos instantes temporales. El valor que tomaremos para esos instantes será la media de los dos puntos temporales adyacentes, es decir:

$$\begin{aligned}
(E_x)^n &= \frac{(E_x)^{n+\frac{1}{2}} + (E_x)^{n-\frac{1}{2}}}{2} \\
(E_y)^n &= \frac{(E_y)^{n+\frac{1}{2}} + (E_y)^{n-\frac{1}{2}}}{2} \\
(H_z)^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{(H_z)^{n+1} + (H_z)^n}{2}
\end{aligned}$$

Si sustituimos estas expresiones en las ecuaciones anteriores y reordenamos los términos se llega a las fórmulas que nos permiten calcular el siguiente paso temporal a partir del instante anterior:

$$(E_x)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{1 - \frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}{1 + \frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t} \right) (E_x)_{i+\frac{1}{2},j}^{n-\frac{1}{2}} + \left(\frac{1/\varepsilon\Delta t}{1 + \frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t} \right) \left(\frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - (H_z)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} \right) \quad (2.3)$$

$$(E_y)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{1 - \frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}{1 + \frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t} \right) (E_y)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \left(\frac{1/\varepsilon\Delta t}{1 + \frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t} \right) \left(-\frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - (H_z)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} \right) \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned}
(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \left(\frac{1 - \frac{\sigma^*}{2\mu}\Delta t}{1 + \frac{\sigma^*}{2\mu}\Delta t} \right) (H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - \left(\frac{1/\mu\Delta t}{1 + \frac{\sigma^*}{2\mu}\Delta t} \right) \left(\frac{(E_y)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (E_y)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right. \\
&\quad \left. - \frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2},j+1}^{n+\frac{1}{2}} - (E_x)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right) \quad (2.5)
\end{aligned}$$

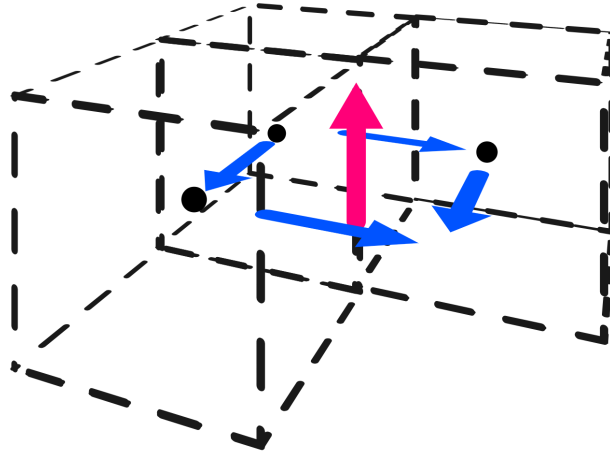


Figura 5: Versión discreta de Yee de la circulación del campo eléctrico inducida por el campo magnético $(H_z)_{i+1/2,j+1/2}^n$

Es ahora con estas ecuaciones cuando se comprende mejor la lógica detrás de la celda de Yee. Si nos fijamos en la ecuación (2.5) podemos comprobar la relación entre cada componente y su localización en la celda de Yee (5). La evolución del campo $(H_z)_{i+1/2,j+1/2}^n$ está determinada por la circulación de los cuatro vectores adyacentes de E_x y E_y , y son justamente estos cuatro vectores los que aparecen en la ecuación (2.5).

Los superíndices temporales en las ecuaciones (2.3 - 2.5) nos determinan un orden de cómputo de la evolución temporal de los campos. El **algoritmo** a seguir es el siguiente:

1. Se establecen las condiciones iniciales de ambos campos H_z^0 , $E_x^{1/2}$ y $E_y^{1/2}$.
2. Se aplica la ecuación (2.5) para calcular H_z^1 .
3. Se toma el valor recién calculado para H_z^1 y se le aplica la ecuación (2.3) para calcular $E_x^{3/2}$.
4. Se toma H_z^1 y se le aplica la ecuación (2.4) para calcular $E_y^{3/2}$.
5. Se repiten los pasos 2, 3 y 4 hasta llegar al número de intervalos temporales deseados.

2.1.2 Dispersión lineal

Recordemos que para los materiales que presenten dispersión lineal, a parte de las ecuaciones de Faraday y Ampere, se añadía una tercera al problema (1.25). Las dos primeras ya hemos visto como discretizarlas, ahora debemos buscar la manera de hacer lo mismo con la tercera.

Si discretizamos el tiempo nos quedaría la siguiente expresión:

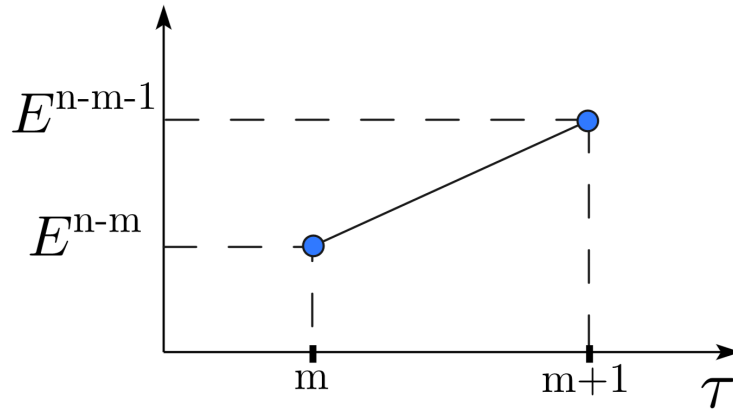


Figura 6: Interpolación lineal entre los puntos temporales conocidos

$$\vec{D}^n = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}^n + \varepsilon_0 \int_0^{n\Delta t} \chi_e(\tau) \vec{E}(n\Delta t - \tau) d\tau \quad (2.6)$$

Fijémonos que aunque en esta expresión aparezca el término $\vec{E}(n\Delta t - \tau)$, donde τ varía de forma continua, realmente solo conocemos los valores del campo para un conjunto discreto de instantes temporales \vec{E}^n . De manera similar al método del trapecio compuesto [5], para calcular esta integral numéricamente primero debemos tomar una interpolación lineal entre los puntos temporales conocidos ²:

$$\vec{E}(t) = \vec{E}^m + \frac{\vec{E}^{m+1} - \vec{E}^m}{\Delta t} (t - m\Delta t) \quad ; \quad t \in [m\Delta t, (m+1)\Delta t]$$

La integral total será por tanto la suma de integrales entre los intervalos $[m\Delta t, (m+1)\Delta t]$:

$$\int_0^{n\Delta t} \chi_e(\tau) \vec{E}(n\Delta t - \tau) d\tau = \sum_{m=0}^{n-1} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(\tau) \vec{E}(n\Delta t - \tau) d\tau =^* \quad (2.7)$$

Adaptamos la expresión de la interpolación temporal del campo:

$$\vec{E}(n\Delta t - \tau) = \vec{E}^{n-m} + \frac{\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}}{\Delta t} (\tau - m\Delta t) \quad ; \quad \tau \in [m\Delta t, (m+1)\Delta t]$$

Si sustituimos esta expresión en (2.7) y reordenamos los términos:

²Se omiten aquí los subíndices espaciales porque no son relevantes y además vuelven la notación muy recargada.

$$\begin{aligned}
* &= \sum_{m=0}^{n-1} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(\tau) \left[\vec{E}^{n-m} + \frac{\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}}{\Delta t} (\tau - m\Delta t) \right] d\tau = \\
&= \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(\tau) d\tau + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \frac{1}{\Delta t} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(\tau) (\tau - m\Delta t) d\tau \right] = \\
&= \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \chi^m + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \zeta^m \right]
\end{aligned}$$

dónde $\chi^m = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(\tau) d\tau$ y $\zeta^m = \frac{1}{\Delta t} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(\tau) (\tau - m\Delta t) d\tau$. Esto nos da el siguiente resultado para el **vector desplazamiento**:

$$\vec{D}^n = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}^n + \varepsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \chi^m + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \zeta^m \right] \quad (2.8)$$

Tomemos de nuevo la **ecuaciones de Ampere y Faraday**:

$$\frac{\vec{D}^{n+1} - \vec{D}^n}{\Delta t} = \vec{\nabla} \times \vec{H}^{n+1/2} \quad (2.9)$$

$$\frac{\vec{H}^{n+1/2} - \vec{H}^{n-1/2}}{\Delta t} = -\frac{1}{\mu} \vec{\nabla} \times \vec{E}^n \quad (2.10)$$

Se han omitido las corrientes eléctrica y magnética \vec{J} y \vec{K} , ya que no se van a modelar materiales con propiedades conductoras y de dispersión lineal a la vez. La ecuación (2.10) no se ve afectada por el término de dispersión lineal, es en la ecuación (2.9) donde debemos sustituir la expresión calculada para el vector desplazamiento. Antes de poder hacer esto hay que calcular \vec{D}^{n+1} .

$$\begin{aligned}
\vec{D}^{n+1} &= \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}^{n+1} + \varepsilon_0 \sum_{m=0}^{(n+1)-1} \left[\vec{E}^{(n+1)-m} \chi^m + (\vec{E}^{(n+1)-m-1} - \vec{E}^{(n+1)-m}) \zeta^m \right] = \\
&= \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}^{n+1} + \varepsilon_0 \sum_{m=0}^n \left[\vec{E}^{n-(m-1)} \chi^m + (\vec{E}^{n-m} - \vec{E}^{n-(m-1)}) \zeta^m \right] = *
\end{aligned}$$

Dado que más tarde, vamos a tener que sustituir esta expresión en (2.9) junto con \vec{D}^n convendría expresar ambos sumatorios de la misma manera para poder agruparlos en uno solo. Para ello vamos a intentar ajustar un poco el sumatorio de \vec{D}^{n+1} :

$$\begin{aligned}
^* &= \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}^{n+1} + \varepsilon_0 \sum_{m=1}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \chi^{m+1} + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \zeta^{m+1} \right] = \\
&= \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}^{n+1} + \varepsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \chi^{m+1} + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \zeta^{m+1} \right] \\
&\quad + \varepsilon_0 \left[\vec{E}^{n+1} \chi^0 + (\vec{E}^n - \vec{E}^{n+1}) \zeta^0 \right]
\end{aligned}$$

Si agrupamos los términos llegamos a:

$$\vec{D}^{n+1} = \varepsilon_0 (\varepsilon_\infty - \zeta^0 + \chi^0) \vec{E}^{n+1} + \varepsilon_0 \zeta^0 \vec{E}^n + \varepsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \chi^{m+1} + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \zeta^{m+1} \right] \quad (2.11)$$

Si sustituimos ahora las expresiones de \vec{D}^{n+1} y \vec{D}^n en la ecuación (2.9), despejamos y agrupamos los términos se llega a la ecuación final:

$$\begin{aligned}
\vec{E}^{n+1} &= \frac{\varepsilon_\infty - \zeta^0}{\varepsilon_\infty - \zeta^0 + \chi^0} \vec{E}^n + \frac{1}{\varepsilon_\infty - \zeta^0 + \chi^0} \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \Delta \chi^m + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \Delta \zeta^m \right] \\
&\quad + \frac{\Delta t / \varepsilon_0}{\varepsilon_\infty - \zeta^0 + \chi^0} \vec{\nabla} \times \vec{H}^{n+1/2} \quad (2.12)
\end{aligned}$$

Donde hemos hecho $\Delta \chi^m = \chi^m - \chi^{m+1}$ y $\Delta \zeta^m = \zeta^m - \zeta^{m+1}$. Con esta fórmula y la ecuación de Faraday es posible, en principio, calcular la evolución temporal del campo electromagnético. Sin embargo, si lo intentamos tal como está expresada ahora (2.12) el costo computacional sería enorme. Fijémonos que para cada punto espacial (i,j,k) se tiene que calcular el sumatorio sobre todos los puntos temporales previos, de modo que cada vez se va volviendo más costoso este cálculo. Sería por tanto deseable encontrar una forma de calcular el sumatorio de forma recursiva, aprovechando los cálculos previos ya hechos.

Definimos la variable $\vec{\psi}^n$ como:

$$\vec{\psi}^n = \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \Delta \chi^m + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \Delta \zeta^m \right] \quad (2.13)$$

Podemos manipular esta expresión para intentar que nos aparezca $\vec{\psi}^{n-1}$:

$$\vec{\psi}^n = \vec{E}^n \Delta\chi^0 + (\vec{E}^{n-1} - \vec{E}^n) \Delta\zeta^0 + \sum_{m=1}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \Delta\chi^m + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \Delta\zeta^m \right] \quad (2.14)$$

$$= \vec{E}^n \Delta\chi^0 + (\vec{E}^{n-1} - \vec{E}^n) \Delta\zeta^0 + \sum_{m=0}^{n-2} \left[\vec{E}^{n-(m+1)} \Delta\chi^{m+1} + (\vec{E}^{n-(m+1)-1} - \vec{E}^{n-(m+1)}) \Delta\zeta^{m+1} \right] \quad (2.15)$$

$$= (\Delta\chi^0 - \Delta\zeta^0) \vec{E}^n + \Delta\zeta^0 \vec{E}^{n-1} + \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m} \Delta\chi^{m+1} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m}) \Delta\zeta^{m+1} \right] \quad (2.16)$$

Pareciera que podemos sustituir el sumatorio del final por $\vec{\psi}^{n-1}$, sin embargo, démonos cuenta de que donde deberían aparecer $\Delta\chi^m$ y $\Delta\zeta^m$ en realidad se tiene $\Delta\chi^{m+1}$ y $\Delta\zeta^{m+1}$. Esto impide que $\vec{\psi}^n$ se pueda calcular de forma recursiva para el caso general, dependerá de la forma concreta que tomen $\Delta\chi^{m+1}$ y $\Delta\zeta^{m+1}$ con cada tipo de material. Sin poder simplificar ya más las ecuaciones, escribimos el resultado final:

$$\vec{\psi}^n = (\Delta\chi^0 - \Delta\zeta^0) \vec{E}^n + \Delta\zeta^0 \vec{E}^{n-1} + \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m} \Delta\chi^{m+1} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m}) \Delta\zeta^{m+1} \right] \quad (2.17)$$

$$\vec{E}^{n+1} = \frac{\varepsilon_\infty - \zeta^0}{\varepsilon_\infty - \zeta^0 + \chi^0} \vec{E}^n + \frac{1}{\varepsilon_\infty - \zeta^0 + \chi^0} \vec{\psi}^n + \frac{\Delta t / \varepsilon_0}{\varepsilon_\infty - \zeta^0 + \chi^0} \vec{\nabla} \times \vec{H}^{n+1/2} \quad (2.18)$$

$$\vec{H}^{n+1/2} = \vec{H}^{n-1/2} - \Delta t / \mu \vec{\nabla} \times \vec{E}^n \quad (2.19)$$

Es posible explicitar más esta ecuación señalando los subíndices espaciales al igual que se hizo para caso lineal (2.3 - 2.5) pero, considero que lo único que se conseguiría es volver más difícil su comprensión.

Para la deducción de (2.18) no se ha usado la forma explícita del funcional $\chi_e(t)$, por lo que es válida para cualquier medio que presente dispersión lineal. Faltaría por tanto, particularizar las expresiones para un medio concreto y determinar las variables que hemos ido definiendo a lo largo de la deducción, que son χ^m , ζ^m , $\Delta\chi^m$ y $\Delta\zeta^m$. En la próxima sección se particularizará para un medio de tipo Debye.

Los superíndices en las ecuaciones (2.17 - 2.19) determinan el orden correcto de cómputo de los campos eléctrico y magnético. El **algoritmo** a seguir es:

1. Se establecen las condiciones iniciales: \vec{E}^0 , $\vec{\psi}^0$ y $\vec{H}^{1/2}$.
2. Se aplica la ecuación (2.18) sobre \vec{E}^0 , $\vec{\psi}^0$ y $\vec{H}^{1/2}$ para calcular \vec{E}^1 .
3. Se aplica (2.17) sobre \vec{E}^1 , \vec{E}^0 y $\vec{\psi}^0$ para hallar $\vec{\psi}^1$.

4. Se aplica la ecuación (2.19) sobre $\vec{H}^{1/2}$ y \vec{E}^1 para hallar $\vec{H}^{3/2}$.
5. Se repiten los pasos 2, 3 y 4 hasta llegar el número de intervalos temporales deseado.

2.1.3 Medio de Debye

A continuación calcularemos las variables χ^m , ζ^m , $\Delta\chi^m$ y $\Delta\zeta^m$ para el medio de Debye. Partimos de la expresión de la susceptibilidad eléctrica vista en (1.23):

$$\begin{aligned}
 \chi^m &= \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(t) dt \\
 &= \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \frac{\Delta\epsilon}{\tau_p} e^{-t/\tau_p} dt \\
 &= -\Delta\epsilon e^{-t/\tau_p} \Big|_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \\
 &= \Delta\epsilon \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p}\right) e^{-m\Delta t/\tau_p} \\
 \chi^m &= \Delta\epsilon \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p}\right) e^{-m\Delta t/\tau_p}
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

A partir de la expresión anterior puede comprobarse fácilmente que:

$$\chi^{m+1} = \chi^m e^{-\Delta t/\tau_p} \tag{2.21}$$

Conocidas las expresiones para χ^m y χ^{m+1} podemos hallar la de $\Delta\chi^m$:

$$\begin{aligned}
 \Delta\chi^m &= \chi^m - \chi^{m+1} \\
 &= \chi^m - \chi^m e^{-\Delta t/\tau_p} \\
 &= \chi^m \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p}\right) \\
 \Delta\chi^m &= \chi^m \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p}\right)
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Nos interesa también calcular $\Delta\chi^{m+1}$ para sustituirlo en la expresión (2.17) y comprobar si es posible expresar $\vec{\psi}^n$ de forma recursiva para medios tipo Debye.

$$\begin{aligned}
 \Delta\chi^{m+1} &= \chi^{m+1} \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p}\right) \\
 &= \chi^m \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p}\right) e^{-\Delta t/\tau_p} \\
 &= \Delta\chi^m e^{-\Delta t/\tau_p} \\
 \Delta\chi^{m+1} &= \Delta\chi^m e^{-\Delta t/\tau_p}
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

Cuando se llegó a la ecuación (2.17) buscando una fórmula recursiva para $\vec{\psi}^n$, encontramos que, para poder sustituir el sumatorio por $\vec{\psi}^{n-1}$, deberían de aparecer los términos $\Delta\chi^m$ y $\Delta\zeta^m$ donde aparecen $\Delta\chi^{m+1}$ y $\Delta\zeta^{m+1}$. Ahora vemos que es posible expresar $\Delta\chi^{m+1}$ en función de $\Delta\chi^m$, si ocurriera lo mismo para $\Delta\zeta^{m+1}$ sería posible llegar a la deseada fórmula recursiva. Calculamos ahora ζ^m :

$$\begin{aligned}
 \zeta^m &= \frac{1}{\Delta t} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_e(t)(t - m\Delta t) dt \\
 &= \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\Delta\varepsilon}{\tau_p} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} t e^{-t/\tau_p} dt - m\Delta t \frac{\Delta\varepsilon}{\tau_p} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} e^{-t/\tau_p} dt \right) \\
 &= \Delta\varepsilon \left[m e^{-m\Delta t/\tau_p} - (m+1) e^{-(m+1)\Delta t/\tau_p} + \frac{\tau_p}{\Delta t} \left(1 - e^{\Delta t/\tau_p} \right) e^{-m\Delta t/\tau_p} - m \left(1 - e^{\Delta t/\tau_p} \right) e^{-m\Delta t/\tau_p} \right] \\
 &= \Delta\varepsilon \frac{\tau_p}{\Delta t} \left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\tau_p} + 1 \right) e^{\Delta t/\tau_p} \right] e^{-m\Delta t/\tau_p}
 \end{aligned}$$

$$\zeta^m = \Delta\varepsilon \frac{\tau_p}{\Delta t} \left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\tau_p} + 1 \right) e^{\Delta t/\tau_p} \right] e^{-m\Delta t/\tau_p} \quad (2.24)$$

Se han saltado algunos pasos triviales en el cálculo. Vuelve a cumplirse:

$$\zeta^{m+1} = \zeta^m e^{-\Delta t/\tau_p} \quad (2.25)$$

Seguimos calculando ahora:

$$\begin{aligned}
 \Delta\zeta^m &= \zeta^m - \zeta^{m+1} \\
 &= \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p} \right) \zeta^m
 \end{aligned}$$

Y se comprueba facilmente que:

$$\Delta\zeta^{m+1} = \Delta\zeta^m e^{-\Delta t/\tau_p} \quad (2.26)$$

Se comprueba por tanto que tanto $\Delta\zeta^{m+1}$ como $\Delta\chi^{m+1}$ pueden expresarse de forma recursiva. Eso nos permite sustituir sus expresiones (2.23) y (2.26) en la ecuación para $\vec{\psi}^n$ (2.17):

$$\begin{aligned}
\vec{\psi}^n &= (\Delta\chi^0 - \Delta\zeta^0)\vec{E}^n + \Delta\zeta^0\vec{E}^{n-1} + \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m}\Delta\chi^{m+1} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m})\Delta\zeta^{m+1} \right] \\
&= (\Delta\chi^0 - \Delta\zeta^0)\vec{E}^n + \Delta\zeta^0\vec{E}^{n-1} + \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m}\Delta\chi^m e^{-\Delta t/\tau_p} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m})\Delta\zeta^m e^{-\Delta t/\tau_p} \right] \\
&= (\Delta\chi^0 - \Delta\zeta^0)\vec{E}^n + \Delta\zeta^0\vec{E}^{n-1} + e^{-\Delta t/\tau_p} \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m}\Delta\chi^m + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m})\Delta\zeta^m \right] \\
&= (\Delta\chi^0 - \Delta\zeta^0)\vec{E}^n + \Delta\zeta^0\vec{E}^{n-1} + e^{-\Delta t/\tau_p}\vec{\psi}^{n-1} \\
\vec{\psi}^n &= (\Delta\chi^0 - \Delta\zeta^0)\vec{E}^n + \Delta\zeta^0\vec{E}^{n-1} + e^{-\Delta t/\tau_p}\vec{\psi}^{n-1} \tag{2.27}
\end{aligned}$$

Se ha conseguido finalmente hallar una forma recursiva para $\vec{\psi}^n$, lo que supone un gran ahorro de cómputo.

2.2 Condiciones inicial y de contorno

Al igual que en la resolución analítica de las ecuaciones diferenciales, debemos especificar tanto las condiciones iniciales como las del contorno espacial de la simulación.

Para el caso de la condición inicial existe bastante libertad de elección en los valores que se le pueden dar a los campos. Sin embargo, en este trabajo se han estudiado dos casos sencillos y realistas al mismo tiempo. La primera es una gaussiana modulada por una función coseno y la segunda es un frente de ondas circular, pueden verse en la figura (7).

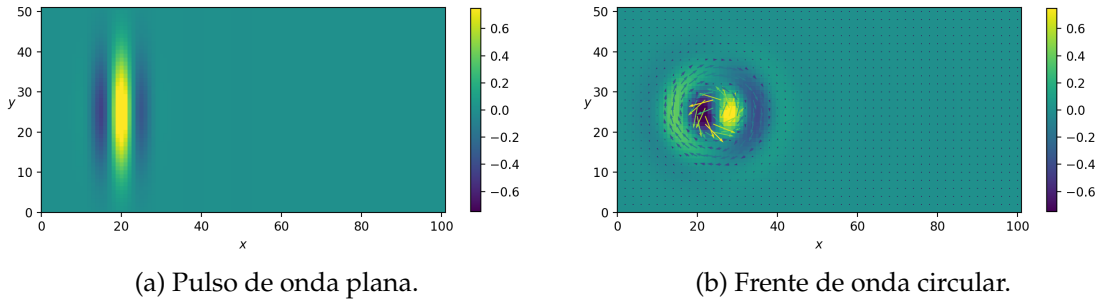


Figura 7: Diferentes condiciones iniciales para el campo eléctrico, el color representa la intensidad. En ambos caso se muestra la componente E_y , pero en a la figura de la derecha además se le superpone el campo vectorial eléctrico.

Las expresiones matemáticas que describen estas dos condiciones iniciales son:

Pulso gaussiano de onda plana:

$$\begin{aligned} E_x &= 0 \\ E_y &= \cos(k_x(x - x_0)) e^{-\left(\left(\frac{x-x_0}{2\sigma_x}\right)^2 + \left(\frac{y-y_0}{2\sigma_y}\right)^2\right)} \\ H_z &= \cos(k_x(x - x_0)) e^{-\left(\left(\frac{x-x_0}{2\sigma_x}\right)^2 + \left(\frac{y-y_0}{2\sigma_y}\right)^2\right)} \end{aligned}$$

Frente de onda circular:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= E_x \hat{i} + E_y \hat{j} = \cos(k_r|\vec{r}|) e^{-\left(\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|}{2\sigma}\right)^2} (-\sin\theta \hat{i} + \cos\theta \hat{j}) \\ H_z &= e^{-\left(\left(\frac{x-x_0}{2\sigma}\right)^2 + \left(\frac{y-y_0}{2\sigma}\right)^2\right)} \end{aligned}$$

Por otra parte, también existe una gran variedad de condiciones de contorno posibles, que influirán de manera distinta en la evolución del sistema. Las dos categorías más importantes son por un lado la condición de **barrera infinita** y por otro las condiciones **absorbentes**.

La condición de barrera infinita es sencilla de implementar. Implica simplemente imponer en el programa que el valor de los campos en cualquier punto de la frontera sea nulo. Un metal podría ser un ejemplo de material que cumpla esta propiedad. En electrostática los metales cumplen que el potencial escalar $\varphi(\vec{r})$ es constante a lo largo todo su volumen. Dado que $\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi(\vec{r})$, en el interior de un metal es cierto que $\vec{E} = 0$. Aunque en nuestro caso no estamos simulando campos electrostáticos, la analogía de la frontera infinita con un metal sigue siendo válida, así es por ejemplo como funcionan las jaulas de Faraday.

Las condiciones de frontera absorbente o ABC (*Absorbing Boundary Conditions*) se pueden plantear de distintas maneras. El objetivo final es ser capaces de simular un ambiente donde las ondas electromagnéticas parezcan *salirse* de las fronteras establecidas, como si fuera un sistema abierto. De esta manera evitamos que haya reflexiones indeseadas con las paredes. Hay varias formas de conseguir este efecto y la bibliografía al respecto es extensa, pero se ha optado por el método más sencillo. Su implementación para el caso de 1D sobre el eje x queda de la siguiente manera:

Frontera izquierda:

$$(E_y)_0^{n+1/2} = (E_y)_1^{n-1/2} \quad (2.28)$$

$$(H_z)_{1/2}^{n+1} = (H_y)_{3/2}^n \quad (2.29)$$

Frontera derecha:

$$(E_y)_N^{n+1/2} = (E_y)_{N-1}^{n-1/2} \quad (2.30)$$

$$(H_z)_{N+1/2}^{n+1} = (H_y)_{N-1/2}^n \quad (2.31)$$

Donde N es el índice del último punto espacial del retículo. A partir de estas dos condiciones es sencillo generalizarlas al caso en 2D.

2.3 Geometrías

Con los elementos expuestos hasta ahora podemos estudiar el comportamiento de un pulso electromagnético que evoluciona en el vacío, sin embargo este sistema ya es resoluble por métodos analíticos, luego solo nos servirá para comprobar la bondad del modelo computacional. Para aprovechar mejor las posibilidades que ofrecen los métodos computacionales, resulta más interesante añadir a la simulación geometrías complejas y estudiar como interactúa con ellas el campo electromagnético.

Es posible añadir dos tipos de geometrías según su comportamiento, traslúcidas y opacas. Por traslúcidas me refiero al hecho de que permiten el paso de la onda electromagnética, eso se cumple si la permitividad y la permeabilidad tienen valores distintos a los del vacío dentro de dicha geometría. Esto implica que ϵ y μ ya no son constantes a lo largo de todo el espacio, sino que pasan a ser campos escalares. Para implementar esto basta con sustituir $\epsilon \rightarrow \epsilon_{i,j}$ y $\mu \rightarrow \mu_{i,j}$ en las expresiones (2.3 - 2.5). El valor específico de $\epsilon_{i,j}$ y $\mu_{i,j}$ en cada punto vendrá dado por la geometría elegida. Sería posible hacer variar $\epsilon_{i,j}$ y $\mu_{i,j}$ de forma continua, pero en este caso me he limitado a saltos abruptos, lo que equivaldría a tener una frontera entre dos materiales distintos.

Por geometrías opacas me refiero a que no permiten el paso de la onda electromagnética, es decir, que el campo es nulo para los puntos contenidos en la misma. La restricción es similar a las condiciones de contorno de barrera infinita, con la diferencia de que la imposición se hace sobre la superficie contenida por la geometría. Puede verse un ejemplo de una geometría arbitraria en la figura (8).

El programa se ha hecho de tal manera que permite implementar geometrías generadas con el programa *Paint* que previamente hayan sido guardadas en formato *png*. Esto le otorga una gran versatilidad, ya que puede añadirse cualquier geometría por arbitraria que sea.

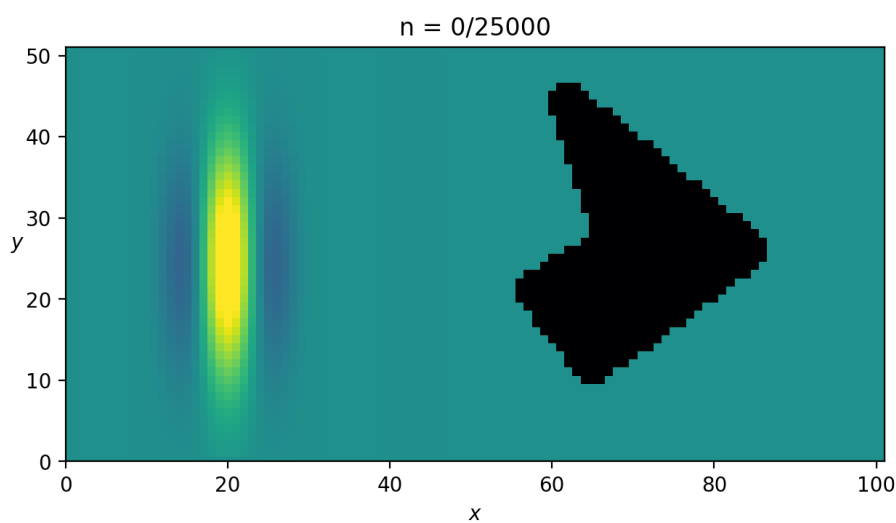


Figura 8: Ejemplo de una geometría opaca con forma arbitraria. La forma de esta geometría se ha hecho con el programa *Paint*.

2.4 Lenguaje y entorno de programación

Tanto para el cálculo numérico como para las representaciones gráficas se ha empleado el lenguaje de programación *Python 3* con los módulos de *numpy* y *matplotlib*. El entorno de programación ha sido *Google Colaboratory*, que permite correr código en los servidores de Google sin necesidad de gastar recursos locales. Las capacidades de hardware que ofrece Google de forma gratuita son 12.67 GB de memoria RAM y 107.72 GB de Disco. En la próxima sección se discutirá como estas limitaciones han condicionado la precisión de los resultados.

3 Resultados

Para estudiar los resultados de la simulación podemos representarlos gráficamente. Dado que estamos calculando la evolución temporal del campo electromagnético es posible generar vídeos con instantáneas sucesivas del sistema.

Existen varias formas de representar los resultados, la más sencilla es mostrar por separado cada componente del campo. Si se toman las componentes por separado, en lugar de tener un campo vectorial, se tienen varios campos escalares que son más sencillos de representar en dos dimensiones. A cada punto (i,j) le corresponde un pixel de la imagen y la intensidad del campo en ese punto se indica con el color de dicho pixel. La desventaja que tiene este método es que, al ver por separado cada componente, se pierde la visión de conjunto.

Una forma de representar el campo vectorial sin tener que recurrir a una tercera dimensión es representar solo al campo eléctrico \vec{E} . Recordemos que en el modo TE_z (1.19 - 1.21) el campo eléctrico está totalmente contenido en el plano XY, solo el campo \vec{H} se sale del plano, ya que tenemos su componente H_z . Representando el campo eléctrico podemos conseguir una visión más global del fenómeno sin necesidad de recurrir a tres dimensiones. A lo largo de las siguientes secciones veremos ejemplos de estos dos tipos de representación.

3.1 Medio lineal

3.1.1 Geometrías opacas

A continuación se muestran los resultados de aplicar el método computacional para medios lineales presentado en la sección (2.1.1).

Para la simulación que se muestra en (9) se aplicaron las condiciones de contorno de barrera infinita. Además se añadió una geometría opaca arbitraria. Las dimensiones del retículo son de 102×52 puntos y el número de pasos temporales es 25000. Este número de puntos espaciales y temporales será el que se use en la mayoría de simulaciones que se muestren.

Se eligieron estas cantidades por varios motivos. Por un lado se busca que el número de puntos espaciales y temporales sea el mayor posible para conseguir una mejor precisión. Para los parámetros especificados el programa tarda aproximadamente 50 segundo en completar los cálculos y 2 minutos en generar y guar-

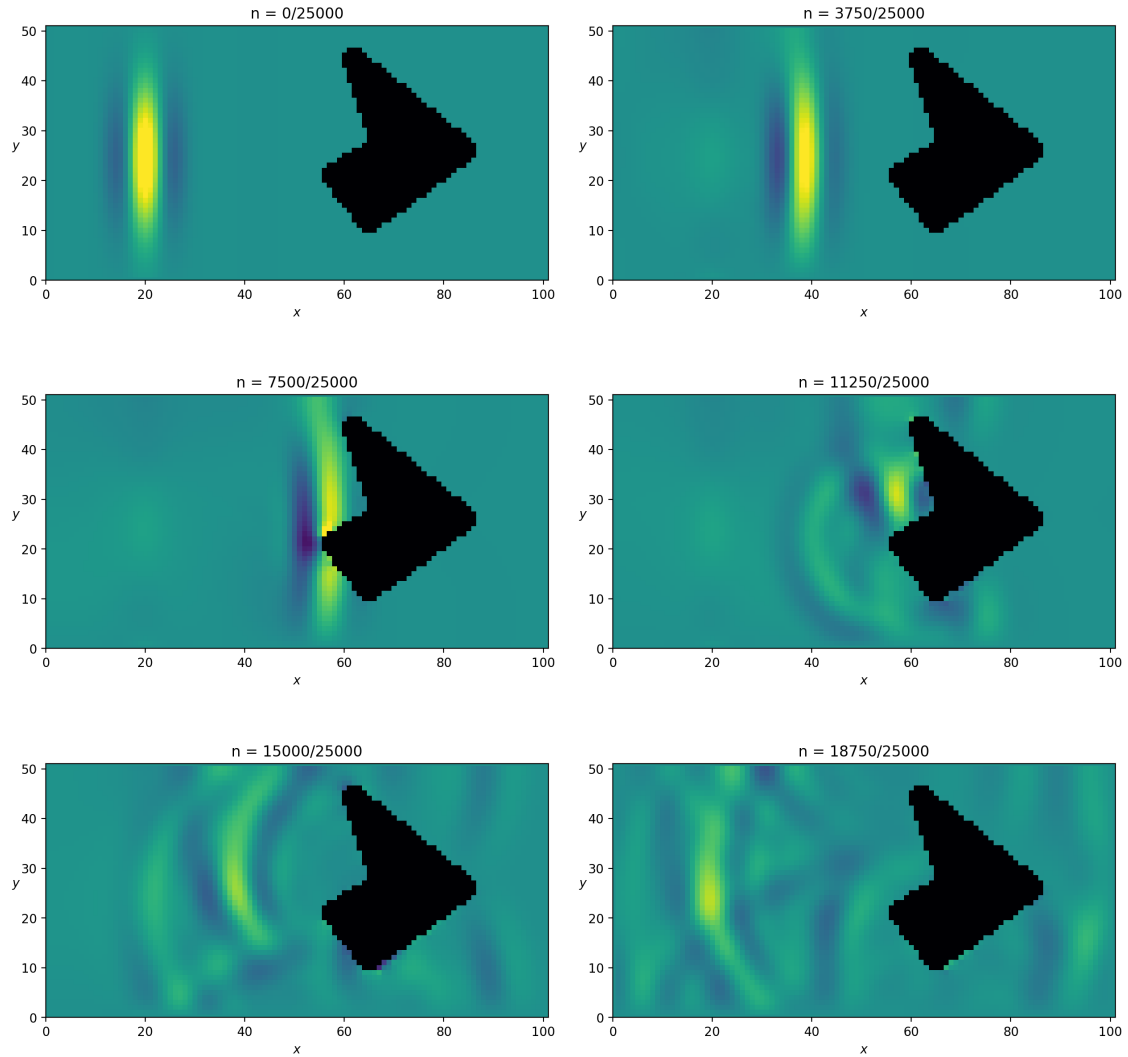


Figura 9: Componente E_y , el color indica la intensidad del campo. Evolución temporal en régimen lineal para una geometría opaca arbitraria.

dar la animación. Sin embargo, la capacidad de almacenamiento de la memoria RAM representa una limitación importante. El código almacena los valores de los campos en un *array* multidimensional, es por esto que un mayor número de puntos espaciales o temporales implica recurrir a más memoria RAM mientras se terminan de hacer los cálculos. A partir de cierto punto, una disminución de Δx , Δy y Δz provoca que la memoria RAM llegue a su límite, en esta situación el servicio de Google reinicia la sesión y se pierden los cálculos. Es por esto que no ha sido posible mejorar la precisión de las simulaciones. En la sección del análisis de resultados (4) se discutirán brevemente algunas posibles soluciones a este problema.

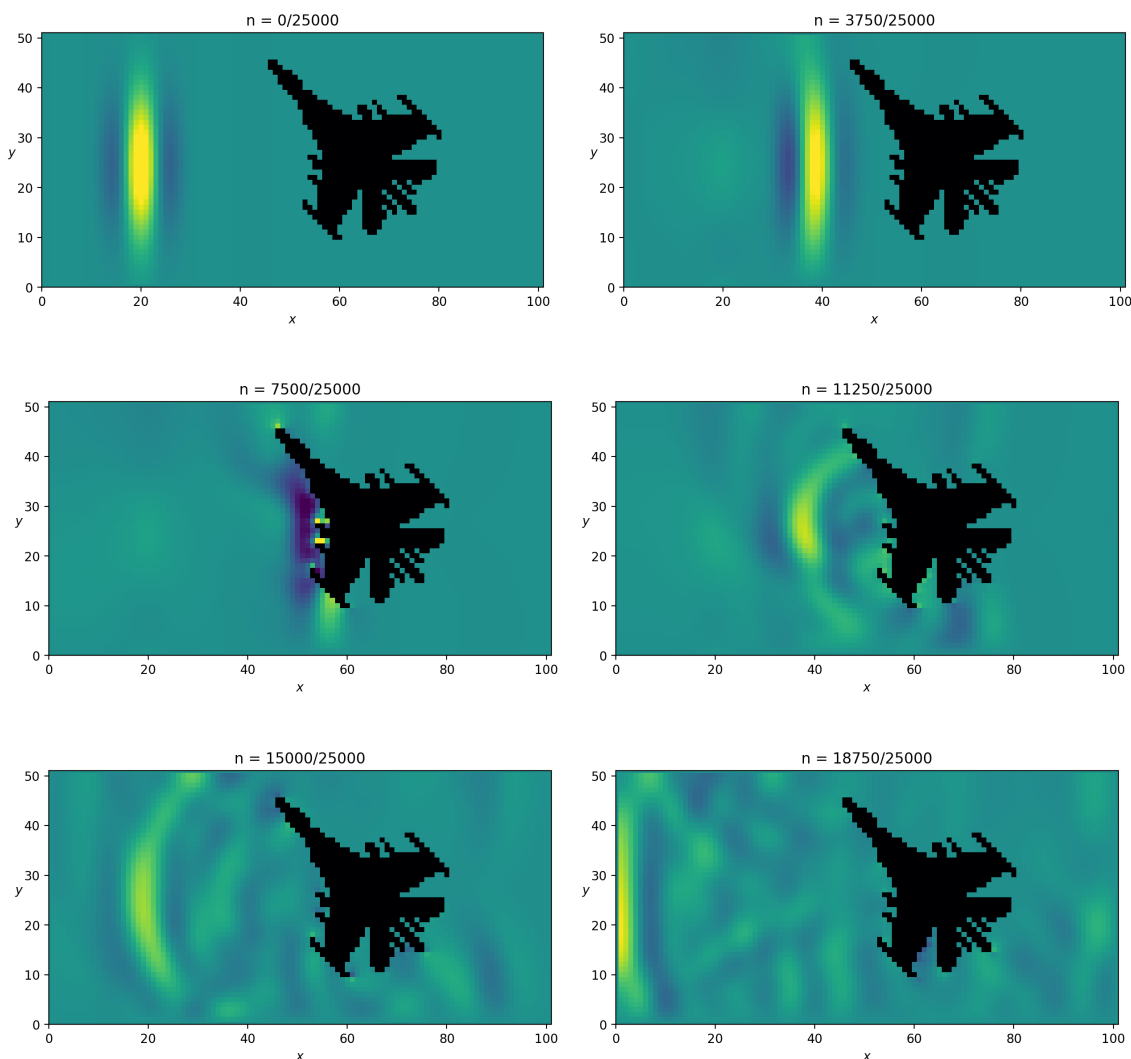


Figura 10: Evolución temporal en régimen lineal para una geometría opaca con la forma de un caza. Podemos replicar el funcionamiento de un radar con este simulador. Se aplicaron las condiciones de contorno de barrera infinita.

En la figura (10) se ha probado a colocar una geometría con forma de caza de combate. Con esta simulación puede replicarse de forma simplificada el comportamiento de un radar, bastaría con medir el tiempo transcurrido entre el instante inicial en el que se envía el pulso y el instante en el que se detecta la onda reflejada para poder determinar la distancia del objeto.

En todas las simulaciones anteriores podemos reconocer varios fenómenos propios de la teoría ondulatoria de la luz. El primero de ellos es la reflexión, esta se da cuando la onda incide sobre las geometrías o sobre alguna de las fronteras. Que este fenómeno se dé no ha sido forzado de antemano, sino que surge de imponer que el campo sea nulo en ciertas regiones.

De la misma manera, en la figura (11), se comprueba a su vez el fenómeno de la difracción. Al pasar la onda a través de la rendija, esta adopta un frente de

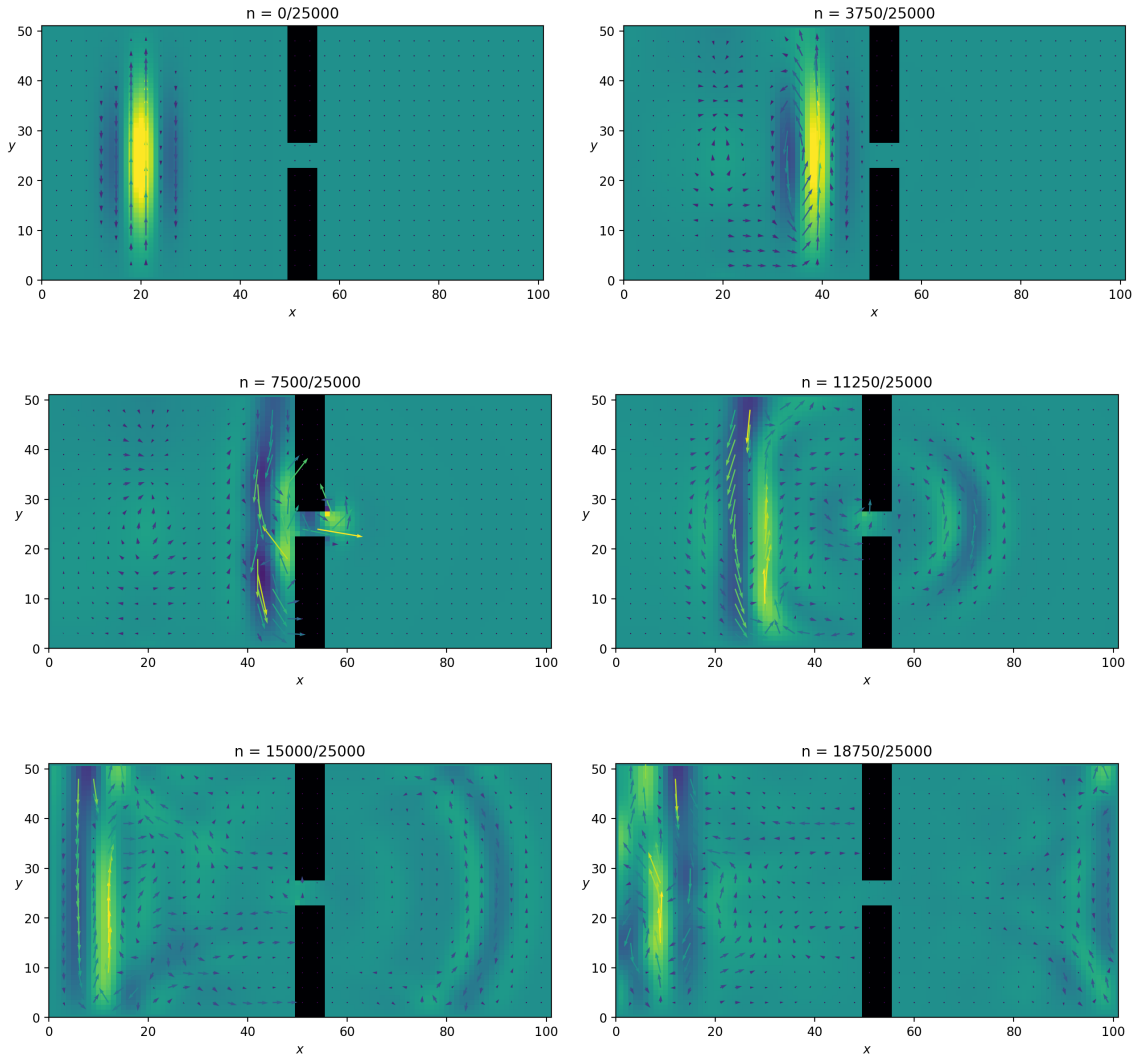


Figura 11: Evolución temporal en régimen lineal para una geometría opaca con forma de rendija. Se comprueba que la simulación es capaz de replicar el fenómeno de difracción. Para esta simulación se representa el campo eléctrico y no solo la componente E_y .

onda circular, propagándose en todas las direcciones. Puede observarse también el fenómeno de la interferencia cuando la onda interactúa con sus propios reflejos.

3.1.2 Geometrías traslúcidas

Para comprobar que la simulación es capaz de replicar el fenómeno de la refracción, se dispondrán geometrías para las que los valores de ϵ y μ sean distintos a los del vacío pero constantes en su interior, tal como se expuso en (2.3).

En la figura (12) puede observarse la interacción del pulso electromagnético con una geometría con un índice de refracción $n_r = 2.5$. Esta geometría replica el efecto lente esperable de un cristal con esa forma, concentrando a la onda en una región reducida del espacio.

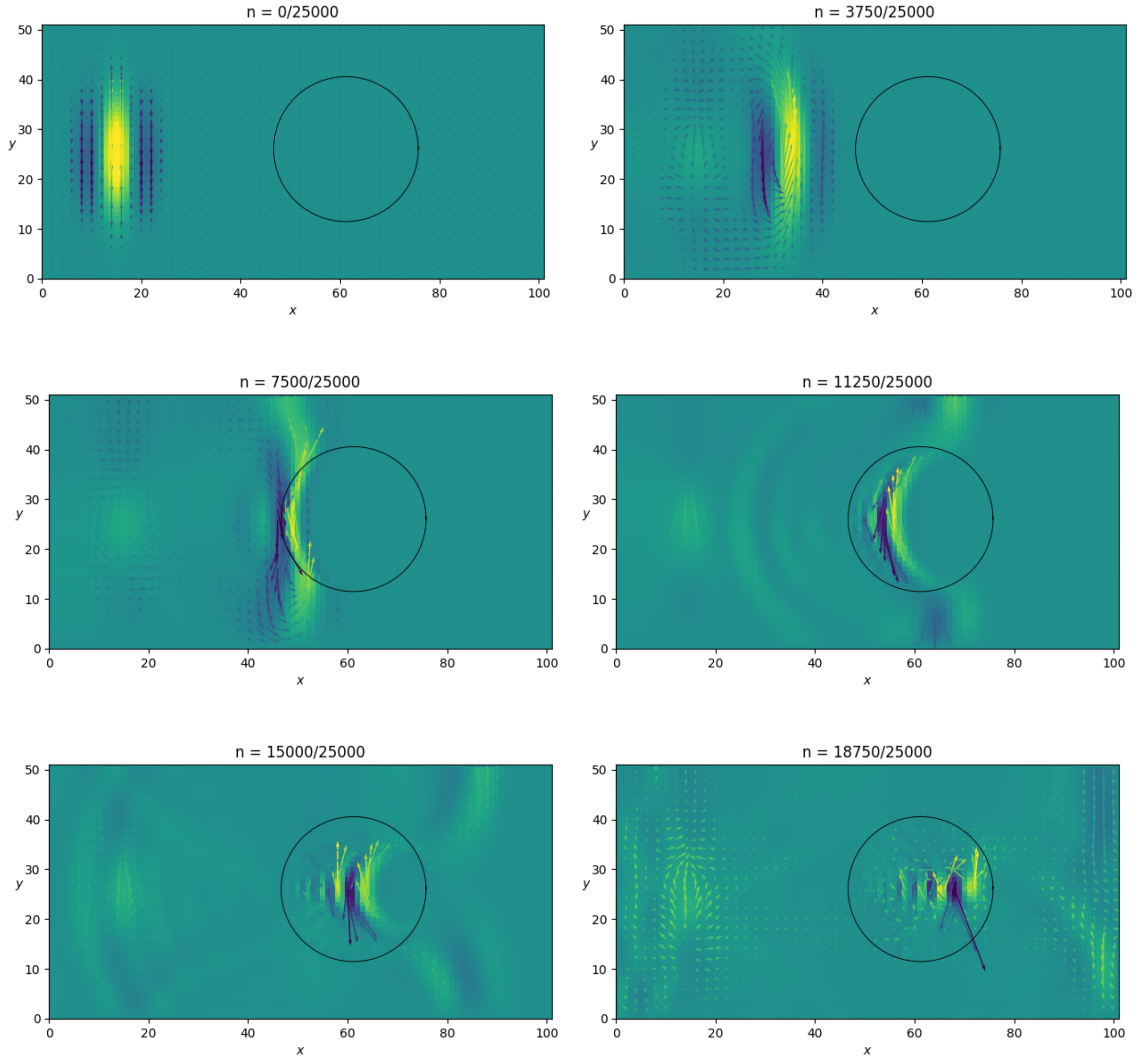


Figura 12: Evolución temporal del campo eléctrico en régimen lineal para una geometría traslúcida con forma de esfera. El índice de refracción de la esfera es $n_r = 2,5$. Se comprueba que la simulación es capaz de replicar el fenómeno de refracción.

Otro sistema óptico clásico es el dioptrio plano, en el cual se manifiesta claramente la Ley de Snell. Haciendo que la onda incida con un cierto ángulo sobre el plano podemos comprobar como esta se desvía de su trayectoria inicial (13).

3.2 Dispersión lineal en medio de Debye

Se ha creado una disposición con parámetros similares a (13) para poder comparar las diferencias entre los materiales lineales que he llamado traslúcidos y un material que presente dispersión lineal. En la figura (14) puede verse cómo el ángulo de difracción parece ser el mismo en ambos casos. La diferencia más significativa es la atenuación que sufre la onda en el caso de (14), que no se observa en la simulación para medios no dispersivos.

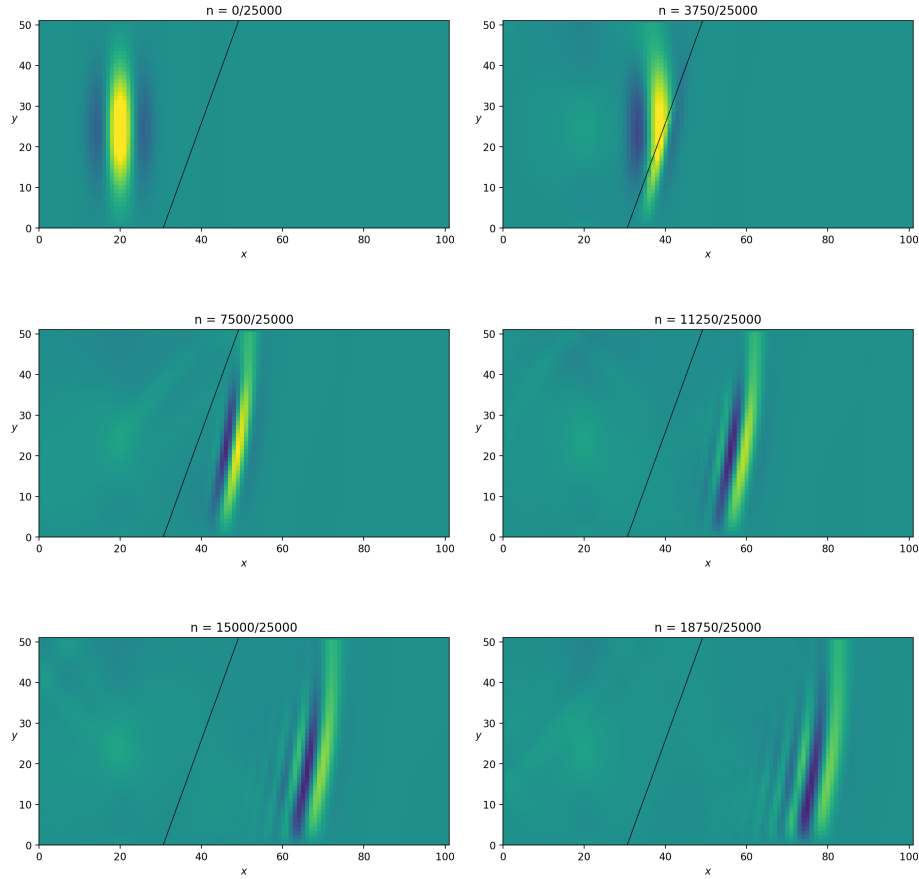


Figura 13: Evolución temporal del campo eléctrico en régimen lineal para una geometría traslúcida con forma de superficie plana. El índice de refracción del segundo medio es $n_r = 1,75$. La onda se desvía de su dirección inicial, tal como predice la ley de Snell.

Otra propiedad esperable de los medios dispersivos lineales es que el índice de refracción varíe con la frecuencia de la onda. Sin embargo, este fenómeno no ha podido detectarse con la precisión de la que se dispone.

4 Análisis de resultados

En la sección anterior se estudiaron los resultados obtenidos de las simulaciones pero de forma cualitativa. En esta sección se pretende hacer un análisis un poco más riguroso que nos indique verdaderamente como de acertados son los resultados que arroja la simulación.

Tomaremos el escenario mostrado en (13) y estudiaremos la dependencia del ángulo de refracción de la onda con el de incidencia, así podremos comprobar si la simulación replica la Ley de Snell.

Recordemos la Ley de Snell [6]:

$$n_i \sin(\theta_i) = n_r \sin(\theta_r)$$

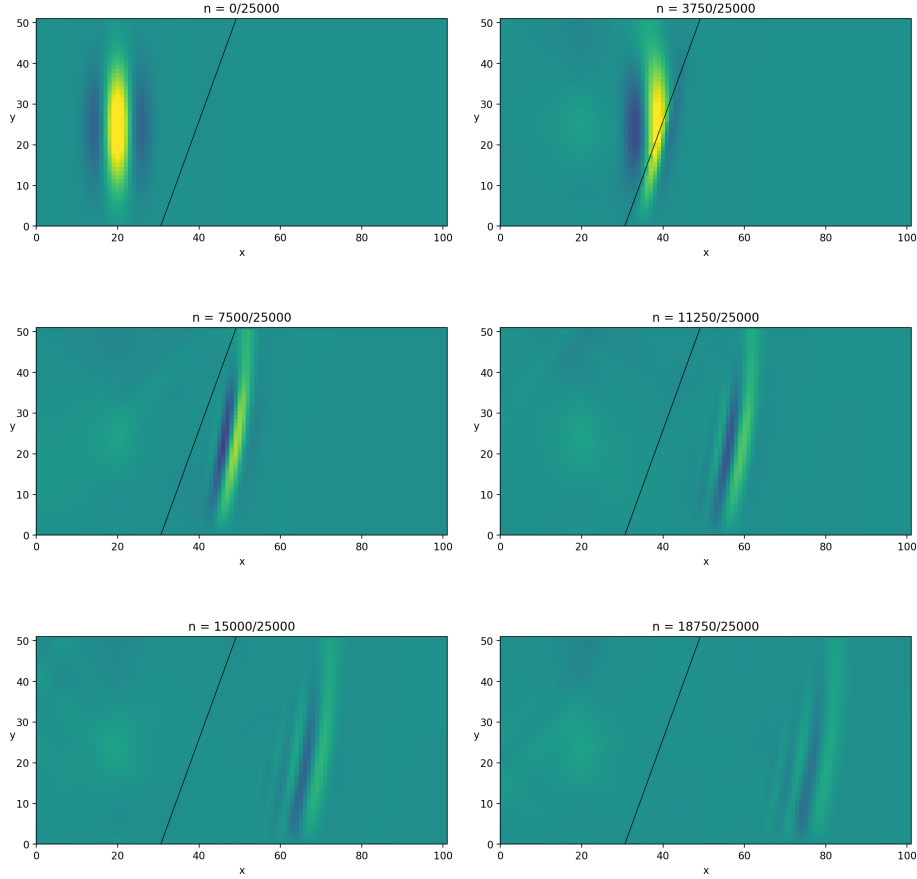


Figura 14: Evolución temporal del campo eléctrico en régimen de dispersión lineal para una geometría con forma de superficie plana. Los parámetros del segundo medio son $n_r = 1,75$, $\tau_p = 0,5$ y $\varepsilon_\infty = 1$. La onda se desvía de su dirección inicial, tal como predice la ley de Snell. Las dimensiones de la maya en este caso son de 135×68 .

Esta Ley de la óptica geométrica nos relaciona el ángulo de refracción de un rayo luminoso con el ángulo de incidencia, ambos ángulos referidos con respecto a la normal de la superficie. Dado que las leyes de la óptica geométrica son en realidad consecuencia de las propiedades electromagnéticas de la luz, este fenómeno debería de emerger de nuestra simulación sin la necesidad de haberlo impuesto de antemano.

Para comprobarlo necesitamos extraer de la simulación la información de la dirección de propagación de la onda después de haber traspasado la frontera. Esta información está contenida en el vector de Poynting \vec{S} cuya expresión viene dada por:

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$$

Sin embargo, el vector de Poynting está definido en todos los puntos del espacio y también del tiempo, por lo que necesitamos un criterio con el que elegir el punto y el instante del que tomar el valor de \vec{S} . Se decidió tomar el punto espacial

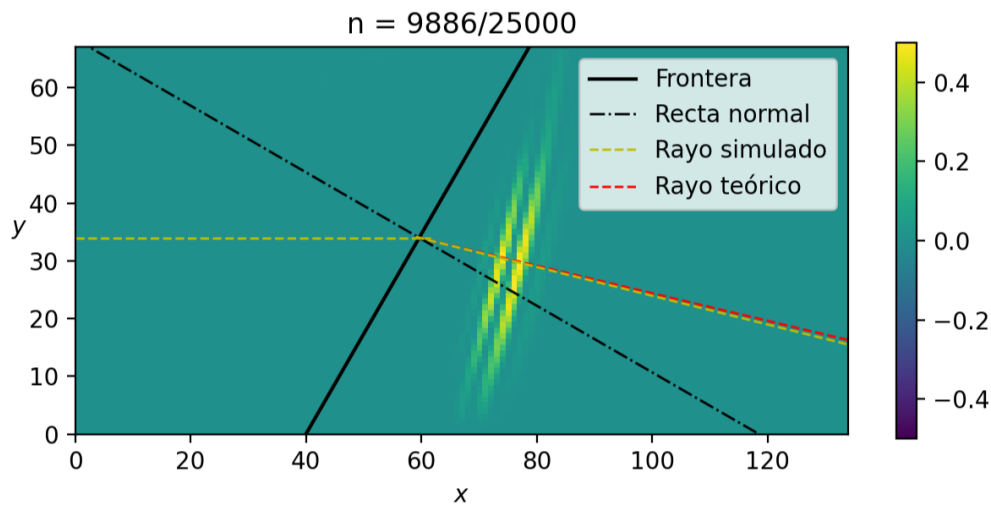


Figura 15: Ley de Snell. En esta figura se muestra la intensidad del vector de Poynting. Para esta simulación el ángulo de incidencia vale $\theta = 30^\circ$, el ángulo de refracción teórico $\theta_r = 16,60^\circ$ y el que se obtuvo $\theta_r = 16,03^\circ$. El índice de refracción del medio vale $n = 1,75$.

en el que el campo tuviera su valor máximo \vec{S}_{max} , ya que este se ubica en el centro del frente de ondas. El segundo problema es elegir el instante temporal. Dado que elegir un único punto temporal resulta arbitrario, lo que se hizo fue promediar la dirección de \vec{S}_{max} para los tiempos posteriores al momento de incidencia de la onda. En la figura (15) puede verse una instantánea del sistema.

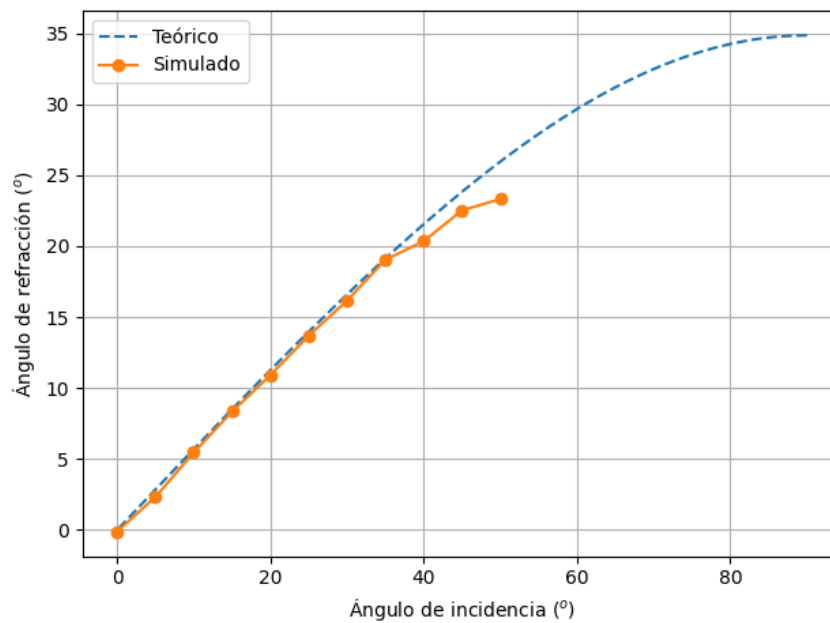


Figura 16: Dependencia del ángulo de refracción con el ángulo de incidencia para un índices de refracción $n = 1,75$.

Los datos de la dirección de la onda refractada obtenidos por este método se relacionaron con los ángulos de incidencia, los resultados pueden verse en la figura (16). Se observa cómo para ángulos de incidencia pequeños la simulación replica los valores predichos por la teoría. Sin embargo, los valores calculados a partir de los 60° de incidencia se alejan mucho de la teoría, esto se debe a las reflexiones de la onda con las fronteras de la simulación. Esa es la razón de que los valores para $\theta_i > 60$ no se muestren en la gráfica. No se encontró una solución a este problema, a pesar de ello, estos resultados parecen corroborar que, efectivamente, la simulación es capaz de reproducir la Ley de Snell.

5 Conclusiones

De los resultados expuestos en las secciones anteriores pueden extraerse varias conclusiones.

En primer lugar, el algoritmo desarrollado por Yee proporciona un esquema computacional general que permite resolver una gran variedad de problemas, cuya solución sería muy difícil de obtener por métodos analíticos. Tomar el campo electromagnético en su conjunto permite un mejor análisis de los resultados, más que si se tomasen las ecuaciones de onda desacopladas de cada uno de los campos.

Podemos concluir también que, a pesar del pequeño número de puntos (del orden de 5000 puntos en toda la malla) y de los escasos recursos de hardware de los que se disponía, los resultados obtenidos replican los fenómenos esperables de las ondas electromagnéticas, tales como la reflexión, difracción, refracción y dispersión; y además en tiempos de ejecución razonables.

Futuras ampliaciones del programa podrían pasar por implementar otro tipo de materiales a parte del de Debye. También sería interesante disponer de una mayor capacidad de cómputo para comprobar si un mayor número de puntos cambiarían significativamente los resultados.

El marco teórico y computacional tratado en este trabajo supone una herramienta aplicable a varias ramas de la ingeniería como la de comunicaciones, eléctrica, materiales, etc.. Gracias a la versatilidad del código, que permite implementar cualquier tipo de geometría, este podría emplearse para investigar nuevos dispositivos eléctricos y estudiar su funcionamiento antes de construirlos en el mundo real. Por ejemplo, versiones del método FDTD en medios de Debye más sofisticadas que las presentadas en este trabajo, son ya usadas para estudiar las propiedades electromagnéticas de sistemas biológicos como tejidos del cuerpo humano [7].

En conclusión, queda abierta la puerta a futuras mejoras y ampliaciones de este programa para que replique más fielmente los fenómenos electromagnéticos, y a su vez permita su aplicación en otras ramas del conocimiento.

Referencias

- [1] J. C. Quintana, F. L. Aguilar
Interacción Electromagnética, Teoría Clásica. Capítulo 7 p. 214.
Editorial Reverté, S.A. , 2007.
- [2] J. C. Quintana, F. L. Aguilar
Interacción Electromagnética, Teoría Clásica. Capítulo 3 p. 102.
Editorial Reverté, S.A. , 2007.
- [3] A. Taflove, S. C. Hagness
Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method,
Third Edition. Capítulo 9, p. 356.
Artech House Publishers, 2005.
- [4] k. S. Yee
Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media,
IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 14, no. 3, pp. 302-307,
May 1966.
- [5] A. M. Molina, I. P. Sánchez
Notas de la asignatura Métodos Numéricos y Simulación, Tema 3
Universidad de Granada, curso 2022/2023.
- [6] J. C. Quintana, F. L. Aguilar
Interacción Electromagnética, Teoría Clásica. Capítulo 10 p. 328.
Editorial Reverté, S.A. , 2007.
- [7] K. Tekbaş, J. P. Berenger, L. M. D. Angulo, M. Ruiz-Cabello, S. G. García
FDTD Voxels-in-Cell Method With Debye Media,
IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 72, no. 5, pp. 4431-4439, May 2024.