

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 vacio 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

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	Mét	odo 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		21
	2.4	Lenguaje de programación	22
3	Res	ultados	22
	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	Aná	ilisis de resultados	28
5	Con	aclusiones	29
Referencias			30

Introducción teórica 1

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 el marco de esta dificultad 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.

Materiales lineales 1.1

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 P y de magnetización M son proporcionales a los campos eléctrico \vec{E} y magnético \vec{H} que los inducen, respectivamente.

Ecuaciones de Maxwell 1.1.1

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:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \tag{1.1}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \tag{1.2}$$

Las leyes de Faraday y Ampere pueden escribirse de forma general para materiales lineales como:

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

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{E} - \vec{K}$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{H} - \vec{J}$$
(1.3)

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

El vector 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 $\vec{I} = \sigma \vec{E}$. De manera análoga al vector \vec{I} , 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:

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

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{1}{\varepsilon} \sigma \vec{E}$$
 (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 las expresamos de manera explícita quedarían:

Ley de Faraday:

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

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

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

Ley de Ampere:

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

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

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

Vemos, por tanto, que obtener una solución analítica de estás ecuaciones es complicado. Aunque es posible manipular las escuaciones (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 ecuacioness 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).

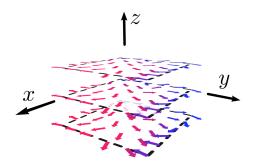


Figura 1: Visualización conceptual de la restricción impuesta. El campo electromagnético puede variar en las direcciones x e y pero permanece constante en la dirección z

Ley de Faraday:

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

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

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

Ley de Ampere:

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

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

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

Podemos comprobar que en las ecuaciones (1.16), (1.17)y (1.15) unicamente 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 donomina TM_z . Estos modos son dos sistemas de ecuaciones diferenciales independientes que pueden resolverse de forma seprada y que no interfieren entre sí. Por simplicidad nos centraremos solo en el **modo** TE_z :

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

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

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

- **Dipersión lineal**: La permitividad/permeabilidad varía con la frecuencia de la onda electromagnética para bajas intensidades.
- **No linearidad**: La permitividad/permeabilidad varía con la intensidad de la onda.
- **Dispersión no lineal**: La *no linearidad* del material varía con la frecuencia de la onda.
- Ganancia: Un material dieléctrico activo (laser) 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 unicamente el de dispersión lineal. Recordemos que en un material lineal la relación entre el vector de polarización y el campo eléctrico es:

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \hat{\chi}_e \vec{E} \tag{1.22}$$

Done $\hat{\chi}_e$ es la llamada susceptibilidad eléctricia, que contiene la información de como responde el material al campo. El gorro sobre la susceptibilidad indica que en 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 dependecia muy empleada para modelar el comportamineto electromagnético de medios como el agua es el llamado *medio de Debye*.

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

$$\vec{P}(t) = \varepsilon_0 \chi_e(t) \vec{E}(t)$$

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 cuena que la interacción con la onda es gradual. Una forma de modelar este fenómeno de retardo es mediante una convolución [1]:

$$\vec{P}(t) = \varepsilon_0 \int_0^t \chi_e(\tau) \vec{E}(t-\tau) d\tau$$
 (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:

$$\vec{D}(t) = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}(t) + \varepsilon_0 \int_0^t \chi_e(\tau) \vec{E}(t-\tau) d\tau$$
 (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 pera resolverlas. En este caso se ha optado por el métod 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

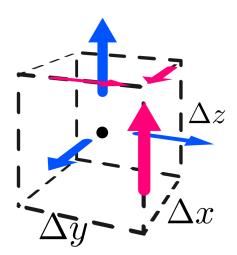


Figura 2: Celda de Yee. Los vectores azules representan las componentes del campo eléctrico \vec{E} y los morados las del campo magnético \vec{H}

contínuos 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.

$$\vec{E}(x,y,t) \rightarrow \vec{E}_{ij}^{n}$$
 (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 [2] 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 campor 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 Δx , j Δy , k Δz)

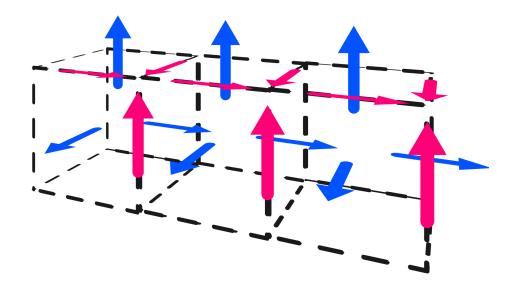


Figura 3: Retículo de Yee. Visualización de la distribución de las celdas de Yee por todo el espacio.

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:

- $= E_x(i+\frac{1}{2},j,k)$
- $E_{v}(i, j+1/2, k)$
- $E_z(i, j, k+\frac{1}{2})$

Para el campo magnético:

- $H_x(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2})$
- $H_{\nu}(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})$
- $H_z(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)$

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 unicamente 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:

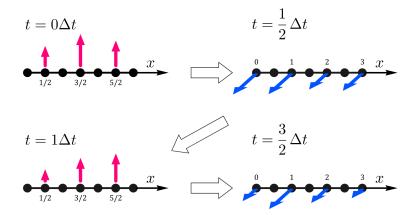


Figura 4: Representación conceptual del algoritmo de Yee para 1D. Puede verse el intercalado espacial y temporal entre los campos E_y y H_z

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

La diferencia con una derivada centrada ususal 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 manéra análoga a como expusimos 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 intantes $t=(n+\frac{1}{2})\Delta t$ lo están unicamente 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:

$$\frac{(E_{x})_{i+1/2,j}^{n+1/2} - (E_{x})_{i+1/2,j}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{(H_{z})_{i+1/2,j+1/2}^{n} - (H_{z})_{i+1/2,j-1/2}^{n}}{\Delta y} - \sigma(E_{x})_{i+1/2,j}^{n} \right)$$

$$\frac{(E_{y})_{i,j+1/2}^{n+1/2} - (E_{y})_{i,j+1/2}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{(H_{z})_{i+1/2,j+1/2}^{n} - (H_{z})_{i-1/2,j+1/2}^{n}}{\Delta x} - \sigma(E_{y})_{i,j+1/2}^{n} \right)$$

$$\frac{(H_{z})_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} - (H_{z})_{i+1/2,j+1/2}^{n}}{\Delta t} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{(E_{y})_{i+1/2,j+1}^{n+1/2} - (E_{y})_{i+1/2,j}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{(E_{x})_{i+1/2,j+1}^{n+1/2} - (E_{x})_{i+1/2,j}^{n+1/2}}{\Delta y} + \sigma^{*}(H_{z})_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} \right)$$

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:

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

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

$$(E_{x})_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{1-\frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}{1+\frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}\right)(E_{x})_{i+\frac{1}{2},j}^{n-\frac{1}{2}} + \left(\frac{1/\varepsilon\Delta t}{1+\frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}\right)\left(\frac{(H_{z})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n} - (H_{z})_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n}}{\Delta y}\right)$$
(2.3)

$$(E_{y})_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{1-\frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}{1+\frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}\right)(E_{y})_{i,j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \left(\frac{1/\varepsilon\Delta t}{1+\frac{\sigma}{2\varepsilon}\Delta t}\right)\left(-\frac{(H_{z})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n} - (H_{z})_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}}{\Delta x}\right)$$
(2.4)

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

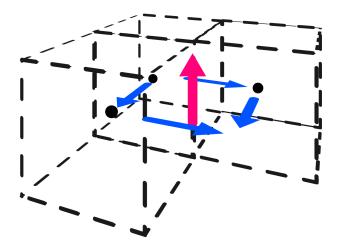


Figura 5: Versión discreta de Yee de la circulación del campo eléctrico inducida por el campo magnético $(H_z)_{i+\frac{1}{2},i+\frac{1}{2}}^n$

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 $(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n$ está determinada por la circulación de los cuatro vectores adyecentes 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 órden 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 $E_x^{\frac{3}{2}}$.
- 4. Se toma H_z^1 y se le aplica la ecuacion (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 descretizamos el tiempo nos quedaría la siguiente expresión:

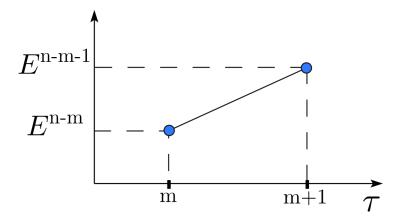


Figura 6: Interpolación lineal entre los puntos temporales conocidos

$$\vec{D}^{n} = \varepsilon_{0} \varepsilon_{\infty} \vec{E}^{n} + \varepsilon_{0} \int_{0}^{n\Delta t} \chi_{e}(\tau) \vec{E}(n\Delta t - \tau) d\tau$$
 (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 . Para calcular esta integral numéricamente empleamos el método del trapecio compuesto, para ello primero debemos tomar una interpolación lineal entre los puntos temporales conocidos 2 :

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

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

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

Adaptamos la expresión de la interpolación temporal del campo:

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

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.

$$* = \sum_{m=0}^{n-1} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_{e}(\tau) \left[\vec{E}^{n-m} + \frac{\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}}{\Delta t} (\tau - m\Delta t) \right] d\tau =
= \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_{e}(\tau) d\tau + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \frac{1}{\Delta t} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_{e}(\tau) (\tau - m\Delta t) d\tau \right] =
= \sum_{m=0}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \chi^{m} + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \xi^{m} \right]$$

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

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

Tomemos de nuevo la ecuaciones de Ampere y Faraday:

$$\frac{\vec{D}^{n+1} - \vec{D}^n}{\Delta t} = \qquad \vec{\nabla} \times \vec{H}^{n+\frac{1}{2}} \tag{2.9}$$

$$\frac{\vec{H}^{n+\frac{1}{2}} - \vec{H}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = -\frac{1}{u} \vec{\nabla} \times \vec{E}^{n}$$
 (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 afecada 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} .

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

Dado que más tarde, vamos a tener que sustituir esta exprersión 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 sumatario de \vec{D}^{n+1} :

$$^{*} = \varepsilon_{0}\varepsilon_{\infty}\vec{E}^{n+1} + \varepsilon_{0}\sum_{m=-1}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m}\chi^{m+1} + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m})\xi^{m+1} \right] =$$

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

$$+ \varepsilon_{0} \left[\vec{E}^{n+1}\chi^{0} + (\vec{E}^{n} - \vec{E}^{n+1})\xi^{0} \right]$$

Si agrupamos los términos llegamos a:

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

Si sustituimos ahora las expersiones 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:

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

Donde hemos hecho $\Delta \chi^m = \chi^m - \chi^{m+1}$ y $\Delta \xi^m = \xi^m - \xi^{m+1}$. 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:

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

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

$$\vec{\psi}^{n} = \vec{E}^{n} \Delta \chi^{0} + (\vec{E}^{n-1} - \vec{E}^{n}) \Delta \xi^{0} + \sum_{m=1}^{n-1} \left[\vec{E}^{n-m} \Delta \chi^{m} + (\vec{E}^{n-m-1} - \vec{E}^{n-m}) \Delta \xi^{m} \right]$$
(2.14)
$$= \vec{E}^{n} \Delta \chi^{0} + (\vec{E}^{n-1} - \vec{E}^{n}) \Delta \xi^{0} + \sum_{m=0}^{n-2} \left[\vec{E}^{n-(m+1)} \Delta \chi^{m+1} + (\vec{E}^{n-(m+1)-1} - \vec{E}^{n-(m+1)}) \Delta \xi^{m+1} \right]$$
(2.15)
$$= (\Delta \chi^{0} - \Delta \xi^{0}) \vec{E}^{n} + \Delta \xi^{0} \vec{E}^{n-1} + \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m} \Delta \chi^{m+1} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m}) \Delta \xi^{m+1} \right]$$
(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 $\Delta \xi^m$ en realidad se tiene $\Delta \chi^{m+1}$ y $\Delta \xi^{m+1}$. 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 $\Delta \xi^{m+1}$ con cada tipo de material. Sin poder simplificar ya más las ecuaciones, escribimos el resultado final:

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

$$\vec{E}^{n+1} = \frac{\varepsilon_{\infty} - \xi^{0}}{\varepsilon_{\infty} - \xi^{0} + \chi^{0}} \vec{E}^{n} + \frac{1}{\varepsilon_{\infty} - \xi^{0} + \chi^{0}} \vec{\psi}^{n} + \frac{\Delta t/\varepsilon_{0}}{\varepsilon_{\infty} - \xi^{0} + \chi^{0}} \vec{\nabla} \times \vec{H}^{n+\frac{1}{2}}$$

$$\vec{H}^{n+\frac{1}{2}} = \vec{H}^{n-\frac{1}{2}} - \Delta t/\mu \vec{\nabla} \times \vec{E}^{n}$$
(2.18)

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 dificil 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 $\chi^{\rm m}$, $\zeta^{\rm m}$, $\Delta\chi^{\rm m}$ y $\Delta\zeta^{\rm m}$. En la próxima sección se particularizará para una dispersión de tipo Debye.

Los superínidices 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 $\vec{H}^{\frac{1}{2}}$.
- 2. Se aplica la ecuación (2.18) sobre \vec{E}^0 , $\vec{\psi}^0$ y $\vec{H}^{\frac{1}{2}}$ 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 $\vec{H}^{\frac{1}{2}}$ y \vec{E}^{1} para hallar $\vec{H}^{\frac{3}{2}}$.
- 5. Se repiten los pasos 2, 3 y 4 hasta llegar el número de intervalos temporales deaseado.

(2.23)

2.1.3 Medio de Debye

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

$$\chi^{m} = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi_{e}(t) dt$$

$$= \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \frac{\Delta \varepsilon}{\tau_{p}} e^{-t/\tau_{p}} dt$$

$$= -\Delta \varepsilon e^{-t/\tau_{p}} \Big|_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t}$$

$$= \Delta \varepsilon \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_{p}}\right) e^{-m\Delta t/\tau_{p}}$$

$$\chi^{m} = \Delta \varepsilon \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_{p}}\right) e^{-m\Delta t/\tau_{p}}$$
(2.20)

A partir de la expresión anterior puede comprobarse facilmente 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 $\Delta \chi^m$:

$$\Delta \chi^{m} = \chi^{m} - \chi^{m+1}$$

$$= \chi^{m} - \chi^{m} e^{-\Delta t/\tau_{p}}$$

$$= \chi^{m} \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_{p}} \right)$$

$$\Delta \chi^{m} = \chi^{m} \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_{p}} \right)$$
(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.

$$\Delta \chi^{m+1} = \chi^{m+1} \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p} \right)$$

$$= \chi^m \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_p} \right) e^{-\Delta t/\tau_p}$$

$$= \Delta \chi^m e^{-\Delta t/\tau_p}$$

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 $\Delta \xi^m$ donde aparecen $\Delta \chi^{m+1}$ y $\Delta \xi^{m+1}$. Ahora vemos que es

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

posible expresar $\Delta \chi^{m+1}$ en función de $\Delta \chi^m$, si ocurriera lo mismo para $\Delta \xi^{m+1}$ sería posible llegar a la deseada fórmula recursiva. Calculamos ahora ξ^m :

$$\xi^{\mathbf{m}} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\mathbf{m}\Delta t}^{(\mathbf{m}+1)\Delta t} \chi_{e}(t)(t - \mathbf{m}\Delta t) dt
= \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\Delta \varepsilon}{\tau_{p}} \int_{\mathbf{m}\Delta t}^{(\mathbf{m}+1)\Delta t} t e^{-t/\tau_{p}} dt - \mathbf{m}\Delta t \frac{\Delta \varepsilon}{\tau_{p}} \int_{\mathbf{m}\Delta t}^{(\mathbf{m}+1)\Delta t} e^{-t/\tau_{p}} dt \right)
= \Delta \varepsilon \left[\mathbf{m} e^{-\mathbf{m}\Delta t/\tau_{p}} - (\mathbf{m} + 1)e^{-(\mathbf{m}+1)\Delta t/\tau_{p}} + \frac{\tau_{p}}{\Delta t} \left(1 - e^{\Delta t/\tau_{p}} \right) e^{-\mathbf{m}\Delta t/\tau_{p}} - \mathbf{m} \left(1 - e^{\Delta t/\tau_{p}} \right) e^{-\mathbf{m}\Delta t/\tau_{p}} \right]
= \Delta \varepsilon \frac{\tau_{p}}{\Delta t} \left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\tau_{p}} + 1 \right) e^{\Delta t/\tau_{p}} \right]^{-\mathbf{m}\Delta t/\tau_{p}}
\xi^{\mathbf{m}} = \Delta \varepsilon \frac{\tau_{p}}{\Delta t} \left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\tau_{p}} + 1 \right) e^{\Delta t/\tau_{p}} \right] e^{-\mathbf{m}\Delta t/\tau_{p}} \right]$$
(2.24)

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

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

Seguimos calculando ahora:

$$\Delta \xi^{m} = \xi^{m} - \xi^{m+1}$$

$$= \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_{p}}\right) \xi^{m}$$

Y se comprueba facilmente que:

$$\Delta \xi^{m+1} = \Delta \xi^m e^{-\Delta t/\tau_p} \tag{2.26}$$

Se comprueba por tanto que tanto $\Delta \xi^{m+1}$ 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):

$$\vec{\psi}^{n} = (\Delta \chi^{0} - \Delta \xi^{0}) \vec{E}^{n} + \Delta \xi^{0} \vec{E}^{n-1} + \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m} \Delta \chi^{m+1} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m}) \Delta \xi^{m+1} \right]
= (\Delta \chi^{0} - \Delta \xi^{0}) \vec{E}^{n} + \Delta \xi^{0} \vec{E}^{n-1} + \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m} \Delta \chi^{m} e^{-\Delta t/\tau_{p}} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m}) \Delta \xi^{m} e^{-\Delta t/\tau_{p}} \right]
= (\Delta \chi^{0} - \Delta \xi^{0}) \vec{E}^{n} + \Delta \xi^{0} \vec{E}^{n-1} + e^{-\Delta t/\tau_{p}} \sum_{m=0}^{(n-1)-1} \left[\vec{E}^{(n-1)-m} \Delta \chi^{m} + (\vec{E}^{(n-1)-m-1} - \vec{E}^{(n-1)-m}) \Delta \xi^{m} \right]
= (\Delta \chi^{0} - \Delta \xi^{0}) \vec{E}^{n} + \Delta \xi^{0} \vec{E}^{n-1} + e^{-\Delta t/\tau_{p}} \vec{\psi}^{n-1}
\vec{\psi}^{n} = (\Delta \chi^{0} - \Delta \xi^{0}) \vec{E}^{n} + \Delta \xi^{0} \vec{E}^{n-1} + e^{-\Delta t/\tau_{p}} \vec{\psi}^{n-1}$$
(2.27)

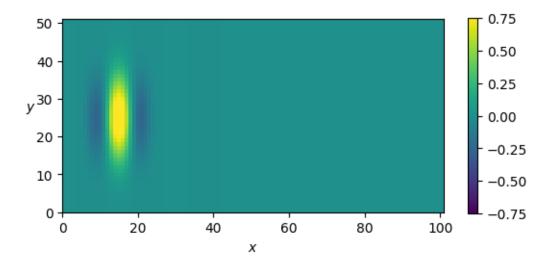


Figura 7: Condición inicial para la componente E_y del campo eléctrico, el color representa la intensidad.

Se hea 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, una condición inicial sencilla y realista al mismo tiempo es la de una gaussiana modulada por una función coseno (7).

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 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 ondad electromagnéticas parezcan *salirse* de las fronteras establecidas, como si fuera un sistema abierto. De esta manera evitamos que ha-

yan 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:

$$(E_{\nu})_{0}^{n+1} = (E_{\nu})_{1}^{n} \tag{2.28}$$

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

Frontera derecha:

$$(E_y)_{\rm N}^{\rm n+1} = (E_y)_{\rm N-1}^{\rm n} \tag{2.30}$$

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

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 vacio, sin embargo este sistema ya es resoluble por métodos analíticos, luego solo nos servirá para comprobar la bondad del modelo computacional. Resulta más interesante añadir a la simulación geometrías complejas y estudiar como interactua 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 alectromagnética, 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 bastan con sustituir $\varepsilon \to \varepsilon_{i,j}$ y $\mu \to \mu_{i,j}$ en las expresiones (2.3 - 2.5). El valor específico de $\varepsilon_{i,j}$ y $\mu_{i,j}$ en cada punto vendrá dado por la geometría elegida. Sería posible hacer variar $\varepsilon_{i,j}$ y $\mu_{i,j}$ de forma continua, pero en este caso me he limitado a saltos abruptos, de forma que podemos distinguir una frontera entre dos materiales distintos.

Por geometrías opacas me refiero a que no permiten el paso de la onda electromágnetica, es decir, que el campo es nulo para los puntos contenidos en al misma. La restricción es similar a las condiciones de contorno de barrera infinita, con la diferencia de que la imposición se hace sobre el borde de 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.

3 RESULTADOS 22

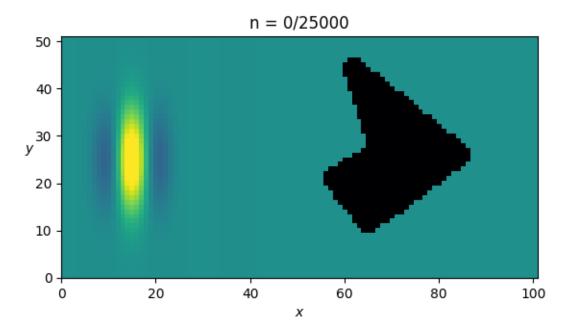


Figura 8: Ejemplo de una geometría opaca con forma arbitraria. La forma de esta geometría se ha hecho con el programa *Paint*.

2.4 Lenguaje de programación

Por último comentaré brevemente el lenguaje de programación empleado. Tanto para el cálculo numérico como para las representaciones gráficas se ha empleado el lenguaje de programación *Python 3*. 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 los tiempos de cómputo y la precisión de los resultados.

3 Resultados

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

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 ter-

23 3 RESULTADOS

cera 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, es solo el campo \vec{H} el que se sale del plano, ya que tenemos su componente H_z . Representando el campo eléctrico podemos conseguir una visión más global del fenómeno sin tener que 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):

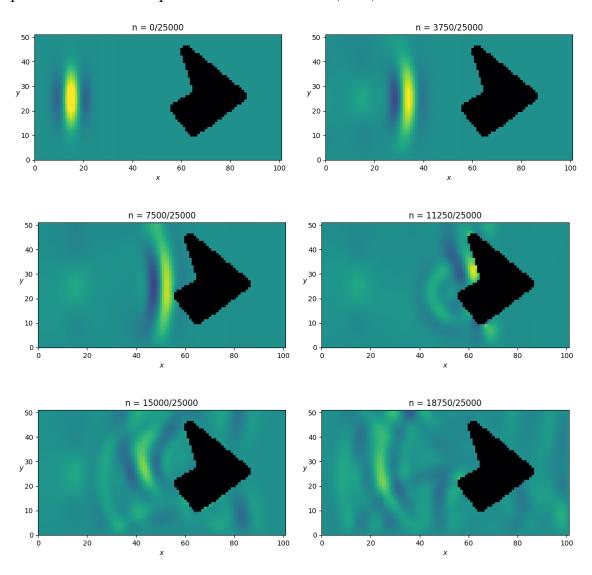


Figura 9: Evolución temporal en régimen lineal para una geometría opaca arbitraria.

Para la simulación que se muestra en (9) se aplicaron las condiciones de con-

3 RESULTADOS 24

torno de de barrera infinita. Además se añadió una geometría opaca arbitraria. Las dimiensiones 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.

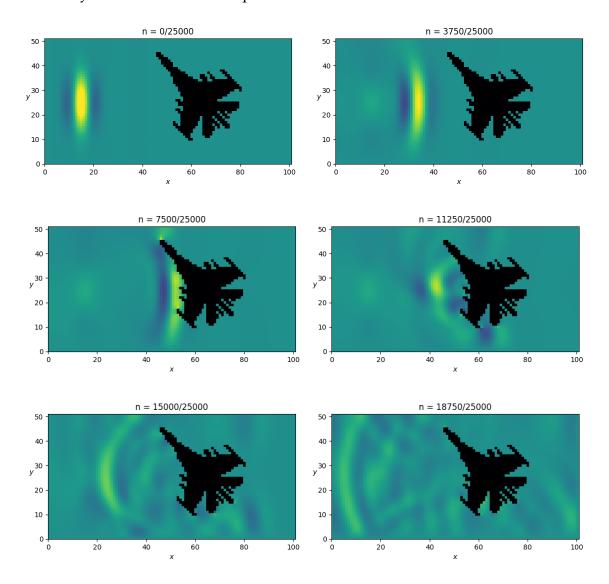


Figura 10: Evolución temporal en régimen lineal para una geometría opaca con la forma de un caza. Podemos replicar el funcionamiento de un radar con este simulador. Se aplicaron las condiciones de contorno de barrera infinita.

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 precisón. Sin embargo, el tiempo de cómputo representa una limitación importante. Para los parámetros especificados el programa tarda aproximadamente 20 minutos en completar los cálculos y otros 2 minutos en generar y guardar la animación. Un mayor número de puntos espaciales o temporales lleva el tiempo de cómputo hasta los 40, 60 o 70 minutos. Sin embargo, a partir de cierto punto, una disminución de Δx , Δy y Δz no supone una diferencia apreciable en

25 3 RESULTADOS

el resultado final, por ello, no había razones para dedicarle más de 20 minutos al cálculo de una simulación.

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 comportamineto de un radar, bastaría con medir el tiempo transcurrido entre el instante inicial en el que se envía el puso electromagnético y el instante en el que se detecta de nuevo la onda para poder determinar la distancia del objeto.

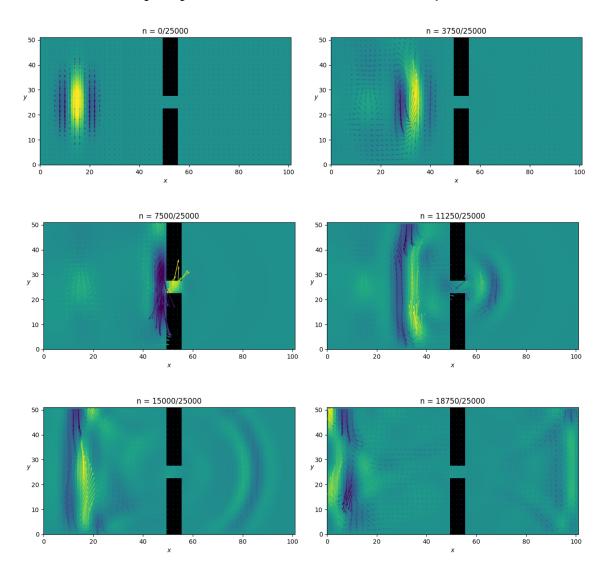


Figura 11: Evolución temporal en régimen lineal para una geometría opaca con forma de rendija. Se comprueba que la simulación es capaz de replicar el fenómeno de difracción. Para esta simulación se representa el campo eléctrico y no solo la componente E_{ν}

En todas las simulaciones anteriores podemos reconocer varios feonómenos 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, es la consecuencia de imponer que el campo no pueda traspasar ciertas regiones. De la misma manera,

3 RESULTADOS 26

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

Para comprobar que la sumilación 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 vacio pero constantes en su interior, tal como se expuso en (2.3).

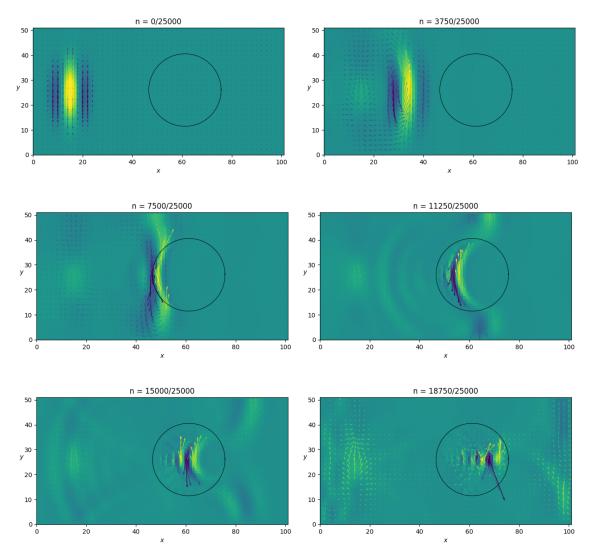


Figura 12: Evolución temporal del campo eléctrico en régimen lineal para una geometría traslúcida con forma de esfera. El ínido de refracción de la esfera es $n_r = 2,5$. Se comprueba que la simulación es capaz de replicar el fenómeno de refracción.

3.1.2 Geometrías traslúcidas

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.

27 3 RESULTADOS

Replicando el ejemplo clásico que se da cuando se estudia por primera vez en el bachillerato la ley de Snell, se ha simulado el comportamiento del campo cuando este incide sobre una superfice plana con un cierto ángulo (13).

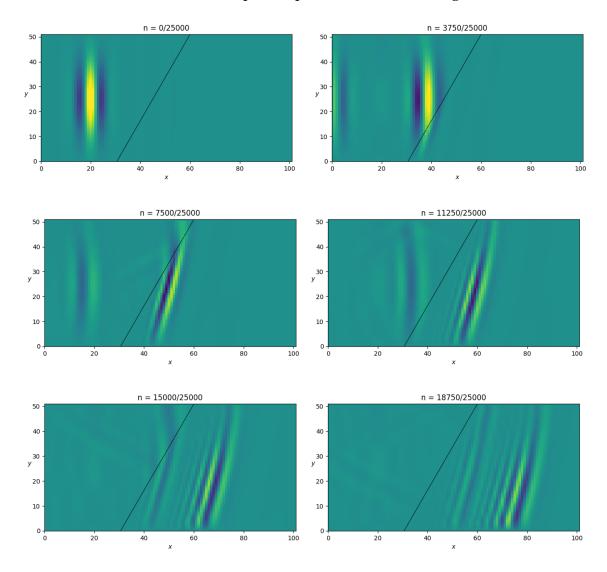


Figura 13: Evolución temporal del campo eléctrico en régimen lineal para una geometría traslúcida con forma de superficie plana. El ínidce de refracción del segundo medio es $n_r = 1,75$. La onda se desvía de su dirección inicial, tal como predice la ley de Snell.

3.2 Dispersión lineal en medio de Debye

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

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 precesión de la que se dispone.

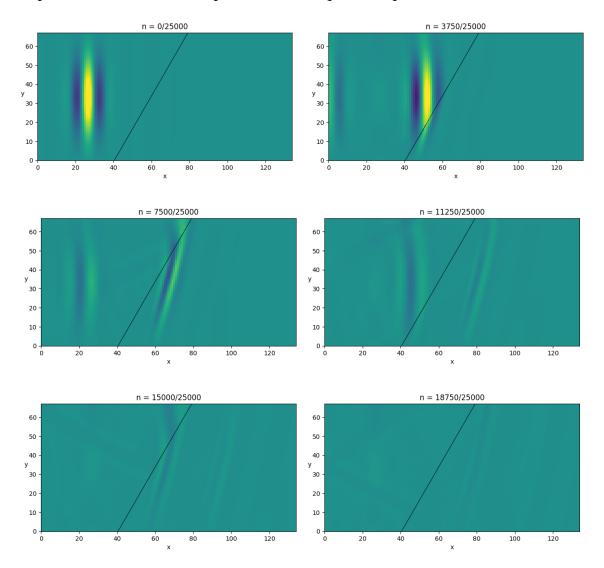


Figura 14: Evolución temporal del campo eléctrico en régimen de dispersión lineal para una geometría con forma de superficie plana. Los parámetros del segundo medio son $n_r = 1,75$, $\tau_p = 0,1$ y $\varepsilon_\infty = 1$. La onda se desvía de su dirección inicial, tal como predice la ley de Snell.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

4 Análisis de resultados

29 5 CONCLUSIONES

5 Conclusiones

Esta sección no debería faltar en todo TFG. Después van las referencias que pueden añadirse en la misma página o en una nueva, como se ha hecho aquí. Hay ejemplos de cómo deben citarse artículos [3], actas de congresos [4], charlas [5], libros [?], tesis doctorales [6] y páginas web [7].

REFERENCIAS 30

Referencias

[1] A. Taflove, S. C. Hagness

Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, Third Edition

Artech House Publishers, 2005.

[2] k. S. Yee

Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media,

IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1966.

[3] T. Sjostrand, S. Mrenna and P. Z. Skands,

PYTHIA 6.4 Physics and Manual,

JHEP 0605 (2006) 026 [hep-ph/0603175].

[4] F. Wilczek,

A long view of particle physics,

Proceedings of the 25th Solvay Conference on Physics, p. 210-249, Brussels, Belgium, October 19-25, 2011.

[5] D. Gross,

Quantum Field Theory: Past, Present and Future,

Talk at the Conference in Honour of the 90th Birthday of Freeman Dyson, Institute of Advanced Studies, Singapore, August 26-29, 2013.

[6] M. R. Chala,

Collider Signatures of a Non-Standard Higgs Sector, PhD Thesis, Universidad de Granada, 2014.

[7] Particle Physics News and Resources,

http://www.interactions.org/