

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA E DE COMPUTAÇÃO DEPARTAMENTO DE MICROONDA E ÓPTICA

ANÁLISE NO DOMÍNIO DO TEMPO DE ESTRUTURAS ELETROMAGNÉTICAS UTILIZANDO ELEMENTOS FINITOS VETORIAIS E ORTOGONAIS

Marcos Sergio Gonçalves

Orientador: Aldário Chrestani Bordonalli (FEEC) Co-orientador: Hugo Enrique Hernández Figueroa (FEEC)

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. Aldário Chrestani Bordonalli – FEEC/UNICAMP – Presidente Prof. Dr. Antônio Manoel Ferreira Frasson – DEL/UFES Prof. Dr. Ben-Hur Viana Borges – EESC/USP Prof. Dr. Leonardo Lorenzo Bravo Roger – CESET/UNICAMP Prof. Dr. Basílio Ernesto de Almeida Milani – DT/FEEC/UNICAMP Prof. Dr. Rui Fragassi Souza – DMO/FEEC/UNICAMP

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do grau de DOUTOR EM ENGENHARIA ELÉTRICA

Campinas, fevereiro de 2007

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE -UNICAMP

٦

G586a	Gonçalves, Marcos Sergio Análise no domínio do tempo de estruturas eletromagnéticas utilizando elementos finitos vetoriais e ortogonais / Marcos Sergio GonçalvesCampinas, SP: [s.n.], 2007.	
	Orientadores: Aldário Chrestani Bordonalli, Hugo Enrique Hernández Figueroa. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação.	
	1. Telecomunicações. 2. Comunicações óticas. 3. Análise numérica. 4. Método dos elementos finitos. 5. Análise no domínio do tempo. I. Bordonalli, Aldário Chrestani. II. Figueroa, Hugo Enrique Hernández. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação. IV. Título.	
Títul Pala Área Titul	lo em Inglês: Time-domain analysis of electromagnetic structures using vectorial and orthogonal finite elements vras-chave em Inglês: Telecommunications, Numerical simulation Finite elements method, Time-domain analy de concentração: Telecomunicações e Telemática lação: Doutor em Engenharia Elétrica	n, ysis

Banca examinadora: Antônio Manoel Ferreira Frasson, Bem-Hur Viana Borges, Leonardo Lorenzo Bravo Roger, Basílio Ernesto de Almeida Milani, Rui Fragassi Souza Data da defesa: 27/02/2007

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Elétrica

Resumo

Este trabalho apresenta uma nova formulação para a simulação da propagação de campos eletromagnéticos no domínio do tempo em duas e três dimensões. Os algoritmos desenvolvidos incorporam a discretização por elementos finitos e usam as funções de base de arestas ortogonais em duas e, pela primeira vez, em três dimensões para descrever o comportamento de propagação dos campos elétrico e magnético em diferentes estruturas. Tais funções são baseadas nos elementos de arestas de Whitney e preservam as mesmas características que as funções de bases de arestas convencionais. Com o uso destas funções de bases, obtêm-se, naturalmente, matrizes massas diagonais, eliminando-se, por completo, a resolução, a cada passo temporal, do sistema matricial resultante dos métodos convencionais, resultando em um alto desempenho no processamento de dados. Os campos são analisados no domínio do tempo através do método da envoltória, modelado pela equação de onda vetorial, sendo a principal aplicação o estudo de componentes fotônicos.

Abstract

This work presents a new approach for the simulation of the time-domain electromagnetic fields in two and three dimensions. The developed algorithms incorporate finite-element discretization and make use of two- and three-dimension orthogonal edge basis functions to describe the electric and magnetic fields. Such functions are based on the Whitney's edge elements and preserve the same characteristics as those of the conventional edge basis functions. With the use of these basis functions, solution of diagonal mass matrices appear naturally, eliminating, at each time step, the matrix equations that result from conventional methods and producing a high performance data processing. The fields are analyzed in time-domain using the slow-wave method, modeled by the vector wave equation. The study of photonic components is the main application of this method.

Ao meu pai, Messias, e minha mãe, Dirce

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço a Deus, sem Quem seria impossível a realização deste trabalho.

Eu gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos aos Professores Aldário Chrestani Bordonalli, orientador, e Hugo Enrique Hernández Figueroa, co-orientador, pelo total apoio, confiança, opinião, amizade e objetividade com que conduziram este trabalho.

À Suzete, nossa secretária, e a todos os amigos do DMO, Andrea, Luciano, Carlos Henrique, Leonardo Ambrósio, Kleucio, Sartori, Rafael e aos novos integrantes do departamento Carmen e Robson.

Gostaria de agradecer a toda a minha família, em particular, aos meus pais, ao meu irmão Paulo, aos meus tios e tias que residem na minha querida Botelhos, pelo carinho e incentivo sempre constantes.

Finalmente, agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

2.1 – Intr	odução
2.2 – Intr	odução ao Método dos Elementos Finitos
2.	2.1 - Discretização do domínio e seleção das funções de interpolação
	2.2.1.1 – Discretização em uma dimensão
	2.2.1.2 – Discretização em duas dimensões
	2.2.1.3 – Discretização em três dimensões
2.	2.2 – Funções de base vetoriais de arestas
	2.2.2.1 – Funções de base de arestas para a discretização em duas dimensões
	2.2.2.2 – Funções de base de arestas para a discretização em três dimensões
2.	2.3 – Introdução ao método de Galerkin
	2.2.3.1 – O uso do método de Galerkin na equação de o escalar
	2.2.3.2 – O uso do método de Galerkin na equação de o vetorial
2.	2.4 – Montagem do sistema de equações
	2.2.4.1 – Montagem das matrizes
2.3 – Coi	clusão

Índice

3.2 - Funções de Base de Arestas Ortogonais em Duas Dimensões
3.3 – Aplicação das Funções de Base de Arestas Ortogonais em Duas Dimensões na
Equação de Onda Vetorial43
3.4 – Numeração Global dos Elementos Triangulares de Arestas Ortogonais49
3.5 – Resultados Numéricos53
3.6 – Conclusão75
Capítulo 4 - Funções de Base de Arestas Ortogonais em Três Dimensões
4.1 – Introdução77
4.2 - Funções de Base de Arestas Ortogonais em Três Dimensões
4.3 - Discretização da Equação de Onda Vetorial pelas Funções de Base de Arestas
em Três Dimensões86
4.4 – Matrizes Elementares91
4.5 – Resultados Numéricos92
4.6 – Conclusão100
Capítulo 5 - Conclusão103
Publicações Associadas à Tese106
Referências Bibliográficas109
Apêndice A - Ortogonalização de Funções119
Apêndice B - Introdução à Teoria das PMLs123
B.1 - Definição das PMLs de Berenger123
B.2 – Propagação de uma Onda Plana na Região de PML125
B.3 – Adaptações das PMLs para o Método dos Elementos Finitos127
B.4 – PML Anisotrópica124
Apêndice C - Análise Modal de Estruturas Eletromagnéticas135

Lista de Símbolos

a_l^e	(V/m) ou (A/m)	coeficiente de interpolação linear para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
b_l^e	$\left(V/m^2\right)$ ou $\left(A/m^2\right)$	coeficiente de interpolação linear para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
c_l^e	$\left(V/m^2\right)$ ou $\left(A/m^2\right)$	coeficiente de interpolação linear para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
d_l^{e}	$\left(V/m^2\right)$ ou $\left(A/m^2\right)$	coeficiente de interpolação linear para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
L_i^e		função de base nodal linear associada ao nó <i>i</i> do elemento <i>e</i>
a_q^e	(V/m) ou (A/m)	coeficiente de interpolação quadrático para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
b_q^e	$\left(V/m^2\right)$ ou $\left(A/m^2\right)$	coeficiente de interpolação quadrático para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
C_q^e	$\left(V/m^2\right)$ ou $\left(A/m^2\right)$	coeficiente de interpolação quadrático para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
d_q^{e}	$\left(V/m^3\right)$ ou $\left(A/m^3\right)$	coeficiente de interpolação quadrático para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
e_q^e	$\left(V/m^3\right)$ ou $\left(A/m^3\right)$	coeficiente de interpolação quadrático para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
f_q^{e}	$\left(V/m^3\right)$ ou $\left(A/m^3\right)$	coeficiente de interpolação quadrático para o campo elétrico ou magnético associado ao elemento <i>e</i>
N_i^e		função de base nodal quadrática associada ao nó <i>i</i> do elemento <i>e</i>
$\Delta^{\!e}$	(m^2)	área do elemento e
V^{e}	(m^3)	volume do elemento <i>e</i>
\mathbf{P}_i^e		função de base de arestas não normalizada associada à aresta <i>i</i> do elemento <i>e</i>
\mathbf{W}_{i}^{e}		função de base de arestas normalizada associada à aresta <i>i</i> do elemento <i>e</i>
\mathbf{N}_{i}^{e}		conjunto de funções de base vetoriais
$\delta_{\scriptscriptstyle i,j}$		delta de Kronecker
$u_i(t)$	(V/m) ou (A/m)	Coeficiente de expansão das funções de base de arestas

Δt	(s)	passo temporal
\mathbf{Z}_{i}^{e}		função de base de arestas ortogonais 2D e 3D associada à aresta <i>i</i> do elemento <i>e</i>
\mathbf{B}_{i}^{e}		função auxiliar 2D e 3D associada à aresta <i>i</i> do elemento <i>e</i>
\mathbf{Q}_i^e		função auxiliar 3D associada à aresta <i>i</i> do elemento <i>e</i>
ε	(F/m)	permissividade elétrica
μ	(H/m)	permeabilidade magnética
ϕ	(V/m) ou (A/m)	campo elétrico ou magnético escalar
Φ	(V/m) ou (A/m)	campo elétrico ou magnético vetorial
σ	(S/m)	condutividade
ρ	(m)	distância do início da PML
γ		parâmetro do método de Newmark
β		parâmetro do método de Newmark
ω_0	rad/s	freqüência angular do campo eletromagnético
\mathcal{E}_0	(F/m)	permissividade elétrica do vácuo
μ_0	(H/m)	permeabilidade magnética do vácuo
λ_0	(m)	comprimento de onda central
σ_{e}	(S/m)	condutividade elétrica
σ_m	(S/m)	condutividade magnética
σ_{max}	(S/m)	máxima condutividade da camada de PML
\mathcal{E}_r		permissividade elétrica relativa
μ_r		permeabilidade magnética relativa
а	(m)	periodicidade da simetria de cristais fotônicos
С	(m/s)	velocidade da luz no vácuo
d	(m)	espessura da PML
Е	(V/m)	campo elétrico vetorial
е	(V/m)	envoltória complexa do campo elétrico
$E_{x,y,z}$	(V/m)	componentes do campo elétrico

$e_{x,y,z}$	(V/m)	envoltória complexa do campo elétrico
Н	(A/m)	campo magnético vetorial
h	(A/m)	envoltória complexa do campo magnético
$H_{x,y,z}$	(A/m)	componentes do campo magnético
$h_{x,y,z}$	(A/m)	envoltória complexa do campo magnético
k_0	(rad/m)	número de onda no vácuo
k	(rad/m)	número de onda
k_z	(rad/m)	constante de propagação
l_{ij}	(m)	comprimento da aresta ij
M_e		número de elementos
n		índice de refração
r		Resíduo
R_i		integral dos resíduos ponderados
t	(s)	Tempo
$t^{\tau-1}$	(s)	tempo inicial de cada passo temporal
$\bar{u}(t)$		função degrau
W		funções de peso escalar ou funções de teste escalar
W		funções de peso vetorial ou funções de teste vetorial
W_0	(m)	largura do pulso na direção z
X_0	(m)	posição central do pulso em relação à direção x
y_0	(m)	posição central do pulso em relação à direção y
z_0	(m)	posição central do pulso em relação à direção z

Lista de Figuras

Fig. 2.1	Fluxograma do método dos elementos finitos para a solução da equação	8
	de onda.	

Fig. 2.2	Discretização em uma dimensão em elementos lineares.	9
Fig. 2.3	Funções de base nodais em uma dimensão.	10

Fig. 2.4	Discretização em duas dimensões por elementos finitos utilizando-se elementos triangulares.	12
Fig. 2.5	Numeração dos nós em um elemento triangular (a) linear e (b) quadrático.	12
Fig. 2.6	Funções de base nodais lineares de um triângulo associadas aos nós (a) 1, (b) 2 e (c) 3.	13
Fig. 2.7	Discretização em três dimensões por elementos finitos utilizando-se elementos tetraédricos	15
Fig. 2.8	Numeração dos nós em um elemento tetraédrico (a) linear e (b) quadrático.	15
Fig. 2.9	Elemento de aresta triangular.	19
Fig. 2.10	Distribuição da função de base vetorial \mathbf{W}_{12} .	21
Fig. 2.11	Distribuição da função de base vetorial \mathbf{W}_{23} .	22
Fig. 2.12	Distribuição da função de base vetorial \mathbf{W}_{31} .	22
Fig. 2.13	Elemento de aresta tetraédrico.	23
Fig. 2.14	Exemplo da numeração global em uma malha.	29
Fig. 2.15	Exemplo das matrizes locais geradas pelos elementos 1 e 2 da Fig. 2.9.	30
Fig. 2.16	Matriz global resultante da malha da Fig. 2.14.	30
Fig. 3.1	Formação de um elemento triangular linear através das funções de base de arestas ortogonais.	39
Fig. 3.2	Distribuição das funções (a) $\mathbf{Z}_{12} e$ (b) \mathbf{B}_{12} em um elemento triangular.	40
Fig. 3.3	Distribuição das funções (a) $\mathbf{Z}_{23} e$ (b) \mathbf{B}_{23} em um elemento triangular.	41
Fig. 3.4	Distribuição das funções (a) $\mathbf{Z}_{31} e$ (b) \mathbf{B}_{31} em um elemento triangular.	42
Fig. 3.5	Fluxograma do método da envoltória utilizando as funções de base de arestas ortogonais.	51
Fig. 3.6	Exemplo de elementos triangulares ortogonais.	51

Х

- *Fig. 3.7 Exemplo de uma malha formada por elementos triangulares ortogonais.* 52
- Fig. 3.8 Matriz elementar formada a partir das funções de base de arestas 53 ortogonais.
- *Fig. 3.9 Guia de onda óptico utilizado na avaliação do desempenho da absorção 54 do sinal pelas PMLs.*
- Fig. 3.10 Propagação da envoltória complexa da componente h_y no guia de ondas 55 óptico nos instantes de 50, 70, 100, 130, 160 fs, 180 fs, 200 fs e 220 fs e 10 ps.
- Fig. 3.11 (a) Envoltória complexa h_y observada no ponto de referência, (b) 56módulo de h_y e (c) módulo de h_y considerando um intervalo de 57 simulação de 20 ps.
- Fig. 3.12 Distribuição espectral da refletividade das PMLs do guia de ondas 58 óptico apresentado na Fig. 3.9.
- Fig. 3.13 Rede dielétrica refletora.
- Fig. 3.14 Propagação da (a) envoltória complexa e (b) do módulo da envoltória 60 complexa da componente h_y para a rede dielétrica refletora no modo fundamental TE.
- Fig. 3.15 Propagação da (a) envoltória complexa e (b) do módulo da envoltória 61 complexa da componente e_y para a rede dielétrica refletora no modo fundamental TM.
- Fig. 3.16 Coeficiente de reflexão da rede dielétrica refletora para (a) o modo 62 fundamental TE e (b) para o modo fundamental TM.
- *Fig. 3.17 Estrutura de cristais fotônicos em duas dimensões composta por colunas* 64 *dielétricas em ar.*
- Fig. 3.18 Componentes e_x , $h_y e h_z$ do modo TE para um guia de onda óptico feito a 65 partir de cristais fotônicos com simetria apresentada na Fig. 3.17.
- *Fig. 3.19 Guia de ondas óptico com uma curva de* 90° . 66

58

- Fig. 3.20 Distribuição espectral de potência do sinal refletido e transmitido de um 67 guia de ondas, com uma curva de 90°, feito a partir de cristais fotônicos,
 (a) conforme demonstrado em [33] e (b) obtida pelo método proposto.90° feito a partir de cristais fotônicos.
- Fig. 3.21 Propagação da envoltória das componentes h_y e h_z para o guia de ondas 68 da Fig. 3.19 nos instantes de 100, 130 e 160 fs.

69

- *Fig. 3.22 Divisor de potência em "T".*
- Fig. 3.23 Distribuição espectral de potência do sinal refletido e transmitido para o 70 divisor de potência em "T", feito a partir de cristais fotônicos, (a) conforme demonstrado em [33] e (b) obtida pelo método proposto.
- Fig. 3.24 Propagação da envoltória das componentes h_y e h_z para divisor de 71 potência em "T" da Fig. 3.22 nos instantes de 100, 150 e 200 fs.
- *Fig. 3.25 Microcavidade ressonante feita a partir de cristais fotônicos.* 72
- Fig. 3.26 Característica de transmissão para a microcavidade ressonante da Fig. 73
 3.25, (a) conforme demonstrado em [33] e (b) obtida pelo método proposto.
- *Fig. 3.27 Microcavidade ressonante feita a partir de cristais fotônicos.* 74
- *Fig. 3.28 Características de transmissão para a microcavidade ressonante da Fig.* 74 *3.27.*
- *Fig. 4.1 Distribuição das funções de base de aresta em um elemento tetraédrico.* 78
- Fig. 4.2 Formação básica de uma matriz elementar formada a partir das funções 92 de base de arestas ortogonais 3D.
- Fig. 4.3 Geometria da cavidade ressonante preenchida com meio homogêneo de 93 $\varepsilon_r \ e \ \mu_r$ iguais a 1.
- Fig. 4.4 (a) Um quarto da geometria da cavidade ressonante preenchida com 95 meio não-homogêneo de \mathcal{E}_r igual a 16 e (b) geometria completa da cavidade.

Fig. 4.5	Geometria do guia com uma descontinuidade em seu interior, com a =	97
	19,05 mm, b = 9,524 mm, l = 5,08 mm, w = 1,016 mm e h = 7,619 mm	

- Fig. 4.6 Módulo do parâmetro S₂₁ (experimental e simulado) do guia de ondas 98 com descontinuidade da Fig. 4.5.
- Fig. 4.7 Análise da propagação de um pulso Gaussiano no meio livre através dos 99 métodos convencional e ortogonal.
- *Fig. 4.8 Rede dielétrica refletora.* 100
- Fig. 4.9 Módulo do coeficiente de reflexão do modo TE_{10} da rede dielétrica 100 refletora da Fig. 4.8.
- *Fig. B.1 Formação do campo eletromagnético no modo TE.* 124
- *Fig. B.2 Incidência de uma onda plana na fronteira entre dois meios.* 129
- *Fig. B.3 Distribuição dos parâmetros da PML em uma janela computacional, no* 131 *plano x-y, encerrada por uma parede metálica.*
- *Fig. C.1* (a) guia de onda óptico simples e (b) guia de onda periódico. 135

Lista de Tabelas

Tab. 2.1	Funções de base de arestas para um elemento tetraédrico	24
Tab. 4.1	Distribuição das funções de base de arestas no elemento tetraédrico e	81
Tab. 4.2	<i>Oito primeiros Autovalores</i> (k, cm^{-1}) .	94
Tab. 4.3	Seis primeiros Autovalores (k, m ⁻¹).	95

Capítulo 1

Introdução

Nas últimas décadas, os métodos numéricos ganharam um importante destaque nas pesquisas relacionadas ao eletromagnetismo. O eletromagnetismo computacional surgiu em função do aumento do grau de complexidade de projetos de implementação de novos componentes e circuitos. Assim, com a possibilidade de se prever o comportamento dos campos elétrico e magnético, pode-se reduzir consideravelmente o tempo de execução e os custos destes projetos. Uma conseqüência direta destas vantagens é o aumento no interesse pelo desenvolvimento de ferramentas para a simulação de efeitos eletromagnéticos, área esta que se tornou muito vasta, como pode ser comprovado examinando-se as publicações encontradas na literatura técnica e os modelos matemáticos desenvolvidos ao longo dos últimos anos. Em particular, algumas destas técnicas permitiram aplicar as equações de Maxwell a situações envolvendo um alto grau de complexidade.

Embora as equações de Maxwell tenham sido desenvolvidas e estudas primeiramente no domínio temporal, com o tempo sendo uma variável explícita e independente, a maior parte das análises e pesquisas é realizada no domínio da freqüência, na qual variações harmônicas dos campos eletromagnéticos são assumidas [1-2]. A principal razão que favorece o uso do domínio da freqüência em relação ao domínio do tempo em eletromagnetismo é a facilidade de se obter soluções analíticas em regime permanente. Além disto, os recursos computacionais disponíveis no passado permitiam apenas análises no domínio da freqüência.

A posição inferior das análises no domínio do tempo em relação às análises no domínio da freqüência começou a se modificar profundamente com a introdução dos computadores digitais, que permitiram obter soluções numéricas com excelente precisão [3]. Conseqüentemente, efeitos associados aos transientes, reflexões e não-linearidade, entre outros, passaram a ser estudados de forma ampla, tornando os modelos numéricos mais realistas. Também, evoluindo-se em conjunto com os recursos computacionais, os métodos numéricos tornaram-se altamente complexos e confiáveis, dando-se, desta forma, um importante passo no desenvolvimento de novas estruturas.

Importantes formulações destinadas às análises no domínio do tempo dos campos eletromagnéticos surgiram a partir dos anos 60. Cita-se, por exemplo, o valioso trabalho de Yee [4], que deu origem a um dos métodos mais bem sucedidos atualmente: o método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD – *finite-difference time domain*) [5-7]. O trabalho de Johns e Beurle [8] deu origem ao método da linha de transmissão (TLM – *transmission-line method*). O estudo de espalhamento iniciou-se com o trabalho em acústica de Mitzner [9] e foi seguido por outros trabalhos aplicados em eletromagnetismo [10-13]. Acompanhando o início das pesquisas nos métodos para análises no domínio do tempo, as publicações de Wu [14] e Einarsson [15] deram início ao estudo de transientes em antenas.

Em particular, um método que se tornou muito popular nas diversas áreas da engenharia é o método dos elementos finitos [16-21]. Ao contrário de outros métodos como o FDTD e o TLM, o método dos elementos finitos pode ser usado com elementos de discretização não estruturados, melhorando a capacidade de modelagem em regiões com geometrias arbitrárias [19-21]. Essa característica tornou-se uma grande vantagem para análises de problemas envolvendo o eletromagnetismo, onde dispositivos com geometrias irregulares são comuns.

O método dos elementos finitos foi proposto pela primeira vez na década de 40 por Curant [22], citando o uso de métodos variacionais nas teorias de potencial, seguindo os princípios desenvolvidos por Rayleigh. Porém, a aplicação do método dos elementos finitos só iniciou-se na década de 50, em projetos de aeronaves. Em eletromagnetismo, o uso dos métodos dos elementos finitos iniciou-se com a publicação de P. P. Silvester [23], onde se abordava a solução de problemas envolvendo guias de ondas homogêneos na região de microondas. Atualmente, o método é aplicado em diversas áreas do eletromagnetismo, principalmente nas faixas de microondas e óptica.

Neste método, o estudo da propagação dos campos eletromagnéticos no domínio do tempo, através da equação de onda, é realizado utilizado-se o espectro total [24-30] ou as variações lentas da envoltória [31-39]. No primeiro caso, todas as variações do sinal eletromagnético são observadas, incluindo a portadora e as variações na envoltória. Contudo, o passo temporal em uma simulação, utilizando-se o espectro total, é geralmente

muito pequeno, devido às condições de estabilidade. Mesmo quando esquemas incondicionalmente estáveis são usados, a forma de onda deve ser amostrada num valor mínimo igual ao de duas vezes a freqüência mais alta do sinal, satisfazendo os critérios de amostragem de Nyquist [32]. Nas situações em que a freqüência da portadora é muito elevada, como na faixa de freqüências ópticas, o passo temporal torna-se muito pequeno. No intuito de minimizar este problema, esquemas que levam em consideração apenas a variação lenta da envoltória foram desenvolvidos. Nestas formulações, a portadora é retirada e só a envoltória da onda é levada em consideração. Como as variações temporais da envoltória são muito mais lentas que as variações temporais da onda com a portadora, os passos temporais também serão maiores, diminuindo-se o tempo total de simulação.

Em ambas situações descritas acima, o método dos elementos finitos apresenta uma excelente precisão na solução da equação de onda e alta flexibilidade em discretizar estruturas com geometrias arbitrárias. Porém, há a necessidade da inversão do sistema matricial de equações resultante do processo de discretização espacial e temporal a cada passo de tempo. Quando um grande número de variáveis é envolvido, esta inversão torna-se uma desvantagem do método, resultando em um esforço computacional de grandes proporções. Algumas aproximações foram implementadas a fim de minimizar este esforço computacional. A técnica mais difundida ficou conhecida como método da diagonalização (*lumping*) [17, 30, 40-41]. Nesta aproximação, há uma remontagem em algumas matrizes do sistema, tornando-as matrizes diagonais. Infelizmente, esta técnica freqüentemente introduz erros significativos na solução da equação de onda, levando a um sistema completamente instável ou a resultados não coerentes [21, 42].

Com a finalidade de se obter matrizes diagonais sem o uso do método da diagonalização, White [28] desenvolveu novas funções de interpolação vetoriais em duas dimensões. Em [28], foi aplicado o processo de ortogonalização de funções (Apêndice A) nas funções de base de arestas para elementos triangulares, retirando as componentes normais nos pontos de análise de um elemento. Como as funções de base de arestas apresentam componentes tangenciais e normais nas arestas onde são definidas e somente componentes normais nas demais, ao se retirarem as componentes normais, as funções de base de arestas componentes normais nas demais, ao se retirarem as componentes normais, as funções de base de arestas componentes normais nas demais, ao se retirarem as componentes normais, as funções de base de arestas componentes normais, as funções de base de arestas tornam-se ortogonais entre si. Por este motivo, estas funções passaram a ser conhecidas como funções de base de arestas ortogonais. Com o uso de esquemas explícitos,

o sistema matricial de equações resultante do método dos elementos finitos é resolvido pela simples inversão de matrizes diagonais. Considerando-se que o tempo total de uma simulação utilizando esquemas implícitos, que são incondicionalmente estáveis, porém requer inversão de matrizes, varia exponencialmente com o número de variáveis e em função logarítmica quando esquemas explícitos, que são condicionalmente estáveis, são aplicados [37, 43], pode-se concluir que os esquemas explícitos tornam-se mais vantajosos que os esquemas implícitos quando há um elevado número de variáveis envolvido.

Embora as funções de base de arestas ortogonais levem a uma redução do esforço computacional na solução do sistema matricial de equações, o uso destas funções não foi devidamente explorado nas diversas áreas envolvendo o eletromagnetismo. Na prática, o uso destas funções limitou-se apenas às análises de duas cavidades ressonantes apresentadas no trabalho pioneiro de White. Em face à grande necessidade de simulações numéricas mais realistas e eficientes, esta tese tem por objetivo o desenvolvimento de algoritmos numéricos no domínio do tempo baseados nas funções de base de arestas ortogonais em duas e três dimensões, minimizando o esforço computacional no processamento de dados. Estes algoritmos permitem analisar as características de propagação de estruturas eletromagnéticas através da solução da equação de onda vetorial para os campos elétricos e magnéticos e têm como principal aplicação o estudo de dispositivos fotônicos. Ao contrário das atuais formulações escalares discretizadas pelo método dos elementos finitos para análise temporal de estruturas fotônicas [33-34, 40, 44-45], o uso da equação de onda vetorial proporciona um estudo mais compreensivo da propagação da luz, permitindo, por exemplo, uma modelagem mais realista de efeitos nãolineares e do estudo da propagação em meios dispersivos e anisotrópicos.

Dentro do contexto descrito acima, as principais contribuições desta tese podem ser resumidas da seguinte forma:

- Reformulação das funções de base de arestas ortogonais em duas dimensões, eliminado-se a necessidade da resolução da integração numérica no cálculo dos coeficientes de ortogonalização.
- Aplicação das funções de base de arestas ortogonais em duas dimensões no método da envoltória no domínio do tempo.

4

- Análises temporais de componentes ópticos através da equação de onda vetorial para campos elétrico e magnético.
- Desenvolvimento de novas funções de base de arestas ortogonais em três dimensões.
- Aplicação das funções de base de arestas ortogonais em três dimensões no método da envoltória no domínio do tempo na análise das características de propagação de componentes na faixa de microondas e óptica.

Este trabalho foi dividido em três partes. A primeira delas é apresentada no Capítulo 2, com uma introdução ao método dos elementos finitos na solução da equação de onda, onde os tópicos abordados têm por objetivo fornecer os conceitos básicos para o uso do método em eletromagnetismo; o formalismo será utilizado no processo de formação das funções de base de arestas ortogonais em duas e três dimensões.

O Capítulo 3 mostra a aplicação das funções de base de arestas ortogonais em duas dimensões no método da envoltória no domínio do tempo. Este capítulo demonstra um novo tratamento na formulação destas funções de base, evitando o uso da integração numérica na obtenção dos coeficientes de ortogonalização, conforme demonstrado no trabalho de White [28]. O método da envoltória e seu uso na análise temporal de componentes fotônicos são apresentados. Este método é aplicado na análise de diversas estruturas, demonstrando sua precisão na solução da equação de onda e o seu desempenho no processamento de dados.

O Capítulo 4 apresenta a formação das funções de base de arestas ortogonais em três dimensões. Duas aplicações são apresentadas para a convalidação destas funções de base. A primeira trata de problemas de autovalores para cálculo dos modos em cavidades ressonantes operando na faixa de microondas. Já a segunda, demonstra a aplicação destas funções de base no método da envoltória no domínio do tempo de componentes que atuam na faixa de microondas e óptica.

Por fim, o Capítulo 5 mostra um resumo dos principais resultados, onde as conclusões e as sugestões para futuros trabalhos são apresentadas.

Capítulo 2

O Método dos Elementos Finitos em Eletromagnetismo

2.1 – Introdução

A partir da Teoria Dinâmica do Campo Eletromagnético de J. C. Maxwell de 1865 [46], o estudo do eletromagnetismo tornou-se indispensável em muitas áreas da engenharia elétrica e da física, principalmente àquelas relacionadas à moderna tecnologia, na qual a velocidade e a precisão na transferência de informações são de grande importância. Como exemplo, cita-se as comunicações ópticas, a fotônica, dispositivos de microondas, antenas, radares, circuitos de alta freqüência/velocidade, etc. A teoria eletromagnética clássica de Maxwell é aplicada ao estudo de campos eletromagnéticos dos dispositivos envolvidos nestas tecnologias. Em geral, as análises são realizadas desde campos estáticos até campos com elevada freqüência, situada na região óptica. Inversamente à freqüência, as dimensões dos componentes podem variar de dezenas de metros até as escalas atômicas. Em todos os casos, o uso de métodos computacionais para o estudo dos campos eletromagnéticos tornou-se um passo fundamental no aperfeiçoamento e desenvolvimento de dispositivos eletromagnéticos.

Diversas formulações foram desenvolvidas para o eletromagnetismo. Cita-se, por exemplo, o método da modelagem por linhas de transmissão [47-48], o método dos momentos [49-51], o método das diferenças finitas [5-6] e o método dos elementos finitos [16-21], entre outros. O método dos elementos finitos tem-se tornado uma das formulações mais bem aceita na engenharia elétrica devido à sua considerável precisão, principalmente no estudo de estruturas irregulares, onde outras formulações apresentaram deficiências. Este método é uma técnica numérica que obtém a solução aproximada de um sistema de equações diferencias em domínios finitos. A finalidade deste capítulo é a de apresentar os conceitos básicos do método dos elementos finitos que serão empregados nos capítulos seguintes. Este capítulo apresentará as etapas de discretização em uma, duas e três dimensões, as funções de base nodais e quadráticas, os elementos de arestas, que são as funções de base utilizadas no processo de ortogonalização em duas e três dimensões [28, 37-39, 52-54], o método de Galerkin e a montagem das matrizes elementares e globais.

2.2 – Introdução ao Método dos Elementos Finitos

Diferentemente de outros métodos, como o método das diferenças finitas, onde as equações diferenciais são resolvidas diretamente, no método dos elementos finitos, todo o domínio contínuo é substituído por subdomínios. Nestes subdomínios, a função desconhecida, que neste caso será o campo elétrico ou o campo magnético da equação de onda escalar ou vetorial, passa a ser representada por funções de interpolação, com um determinado número de coeficientes a serem determinados. Assim, a solução original da equação diferencial, que possui um grau de liberdade infinito (domínio contínuo), é convertida à solução de um sistema de equações lineares de um problema com grau de liberdade finito (domínio discreto). No método dos elementos finitos, duas formulações clássicas são empregadas para a obtenção do sistema de equações a partir da equação diferencial original: o método variacional de Ritz e o método de Galerkin [17, 21, 23], sendo que ambos permitem obter a mesma solução. Neste trabalho, apenas o método de Galerkin foi utilizado. De uma foram geral, o uso do método dos elementos finitos na solução de um problema envolvendo a equação de onda para campos elétrico e magnético, pode ser representado pelo fluxograma da Fig. 2.1. Cada passo será discutido a seguir.



Fig. 2.1 – Fluxograma do método dos elementos finitos para a solução da equação de onda.

2.2.1 - Discretização do domínio e seleção das funções de interpolação

O primeiro passo para o uso do método dos elementos finitos é a divisão do domínio em subdomínios e a escolha das funções de interpolação, que irão representar os campos elétrico e magnético. Neste passo, é determinada a forma em que o domínio é discretizado e, em função da discretização, definem-se características como capacidade de armazenamento de dados, tempo de processamento e precisão na obtenção da solução. O processo de ortogonalização das funções de interpolação ou funções de base torna-se de grande valia em um esquema de propagação no domínio do tempo, pois, quando associado com um esquema explícito, elimina-se a necessidade de resolver o sistema de equações a cada passo temporal. A discretização do domínio pode ser classificada em função das coordenadas x, y e z envolvidas no processo. Assim, pode-se ter discretização em uma, duas e três dimensões.

2.2.1.1 – Discretização em uma dimensão

Considerando apenas a variação do campo em uma coordenada, o domínio é discretizado apenas em uma dimensão. Neste caso, cada subdomínio ou elemento *e* será um segmento de reta [19-21]. A Fig. 2.2 ilustra este processo de discretização. Nesta situação, o domínio de x = 0 até x = L foi dividido em 3 elementos, gerando 4 nós ou 4 incógnitas.



Fig. 2.2 – Discretização em uma dimensão em elementos lineares.

Considerando funções de interpolação lineares, o campo $\phi(x)$ dentro do elemento *e* pode ser descrito como:

$$\phi^e(x) = a_l^e + b_l^e x \tag{2.1}$$

onde $a_l^e e b_l^e$ são constantes a serem determinadas, onde o subscrito *l* representa o caso linear. Como cada elemento *e* possui dois nós, $x_1^e e x_2^e$, $\phi^e(x) em (2.1)$ torna-se:

$$\phi_1^e = a_l^e + b_l^e x_1^e \tag{2.2a}$$

$$\phi_2^e = a_1^e + b_1^e x_2^e \tag{2.2b}$$

Isolando-se $a_l^e e b_l^e em (2.2a) e (2.2b) e substituindo-os em (2.1), obtêm-se:$

$$\phi^{e}(x) = L_{1}^{e}\phi_{1}^{e} + L_{2}^{e}\phi_{2}^{e}$$
(2.3)

onde L_1^e e L_2^e são as funções de interpolação, também são conhecidas como funções de base nodais lineares, dadas por:

$$L_1^e(x) = \frac{x_2^e - x}{x_2^e - x_1^e}$$
(2.4a)

$$L_2^e(x) = \frac{x - x_1^e}{x_2^e - x_1^e}$$
(2.4b)

A Fig. 2.3 mostra o comportamento das funções de base nodais em função de x. Pode-se notar que, quando $x = x_1^e$, $L_1^e(x) = 1$ e $L_2^e(x) = 0$ e quando $x = x_2^e$, $L_1^e(x) = 0$ e $L_2^e(x) = 1$. Ou seja, cada função de base nodal possui valor igual a um no nó onde foi definida e valor nulo nos demais nós. Conseqüentemente, as funções de base nodais não introduzirão nenhuma descontinuidade na solução final.



Fig. 2.3 – Funções de base nodais em uma dimensão.

2.2.1.2 - Discretização em duas dimensões

O método dos elementos finitos com discretização em duas dimensões tornou-se um dos métodos mais populares nas análises envolvendo o eletromagnetismo. Diversas formulações bem sucedidas no domínio da freqüência [55-64] foram desenvolvidas. Neste esquema, a precisão nos resultados, a flexibilidade para a geometria da estrutura e o número

razoável de variáveis a serem determinadas tornaram o método bem atrativo. Com a evolução dos recursos computacionais, as formulações no domínio do tempo começaram a ser desenvolvidas, permitindo um estudo mais completo dos campos eletromagnéticos. No domínio do tempo, o processo de ortogonalização das funções de base de arestas ganha um destaque especial, pois, com o uso destas funções de base, há uma grande redução no esforço computacional. Assim, análises envolvendo um número grande de variáveis podem ser realizadas em um simples computador pessoal.

Para domínios em duas dimensões, o triângulo é o elemento mais utilizado na discretização da estrutura [19-21]. A condição essencial para a discretização é não haver sobreposição de elementos nem lacunas dentro da malha. Os triângulos devem ser conectados pelos vértices e nenhum vértice pode estar localizado internamente a um outro elemento. Além destas condições, deve-se evitar elementos com ângulos internos pequenos, pois o erro da solução é inversamente proporcional ao seno de menor ângulo interno [21]. Portanto, a geometria dos elementos deve ser a mais próxima possível da geometria do triângulo eqüilátero. A Fig. 2.4 mostra um exemplo de uma malha em duas dimensões com 104 elementos. Neste exemplo, pode-se observar que não houve sobreposição de elementos nem lacunas e os elementos, em sua maior parte, são triângulos eqüiláteros.

Da mesma forma que na discretização em uma dimensão, na discretização em duas dimensões, os campos são representados por funções de interpolação ou funções de base nodais. Dois tipos de funções de base nodais são mais comuns em eletromagnetismo: as funções de base nodais lineares e as quadráticas. Para o caso linear, cada elemento possui três incógnitas ou nós localizados em cada vértice de cada triângulo. Com a finalidade de se aumentar a precisão na solução, as funções de base nodais quadráticas consideram seis incógnitas por elemento, sendo três localizadas em cada vértice e as demais localizadas no meio de cada aresta do triângulo. Porém, deve-se observar que o esforço computacional na solução do sistema matricial de equações para o caso quadrático é maior que para o caso linear. Assim, para o exemplo da Fig. 2.4, o número de nós para o caso linear foi de 67 enquanto que para o quadrático foi de 237. As Fig. 2.5 (a) e (b) mostram a localização dos nós nos elementos linear e quadrático, respectivamente, na qual adotou-se o sentido anti-horário para a numeração.



Fig. 2.4 – Discretização em duas dimensões por elementos finitos utilizando-se elementos triangulares.



Fig. 2.5 – Numeração dos nós em um elemento triangular (a) linear e (b) quadrático.

O campo $\phi^{e}(x, y)$ dentro de um elemento linear *e*, Fig. 2.5 (a), pode ser aproximado por [19-21]:

$$\phi^{e}(x, y) = a_{l}^{e} + b_{l}^{e} x + c_{l}^{e} y$$
(2.5)

onde a_l^e , b_l^e e c_l^e são coeficientes a serem determinados. Em cada nó, $\phi^e(x, y)$ assume os respectivos valores:

$$\phi_1^e = a_l^e + b_l^e x_1^e + c_l^e y_1^e$$
(2.6a)

$$\phi_2^e = a_l^e + b_l^e x_2^e + c_l^e y_2^e \tag{2.6b}$$

$$\phi_3^e = a_l^e + b_l^e x_3^e + c_l^e y_3^e \tag{2.6c}$$

Resolvendo o sistema linear acima para a_l^e , b_l^e e c_l^e em função de ϕ_1^e , ϕ_2^e e ϕ_3^e e substituindo em (2.5) obtém:

$$\phi^{e}(x, y) = \sum_{j=1}^{3} \phi_{j}^{e} L_{j}^{e}(x, y)$$
(2.7)

onde L_1^e, L_2^e e L_3^e são as funções de base nodais lineares associadas aos nós 1, 2 e 3, respectivamente, dadas por:

$$L_i^e(x, y) = \frac{1}{2\Delta^e} \left(a_i^e + b_i^e x + c_i^e y \right), \quad i = 1, 2, 3$$
(2.8)

onde Δ^e é a área de cada elemento e:

$$a_{1}^{e} = x_{2}^{e} y_{3}^{e} - y_{2}^{e} x_{3}^{e}; \qquad b_{1}^{e} = y_{2}^{e} - y_{3}^{e}; \qquad c_{1}^{e} = x_{3}^{e} - x_{2}^{e}; \\ a_{2}^{e} = x_{3}^{e} y_{1}^{e} - y_{3}^{e} x_{1}^{e}; \qquad b_{2}^{e} = y_{3}^{e} - y_{1}^{e}; \qquad c_{2}^{e} = x_{1}^{e} - x_{3}^{e}; \\ a_{3}^{e} = x_{1}^{e} y_{2}^{e} - y_{1}^{e} x_{2}^{e}; \qquad b_{3}^{e} = y_{1}^{e} - y_{2}^{e}; \qquad c_{3}^{e} = x_{2}^{e} - x_{1}^{e}.$$

A Fig. 2.6 mostra a distribuição das funções de base nodais lineares para um elemento triangular. Pode-se notar que cada função assume valor unitário no nó onde é associada e zero nos demais nós. Esta característica garante a continuidade da solução entre os lados comuns a dois elementos consecutivos.



Fig. 2.6 – Funções de base nodais lineares de um triângulo associadas aos nós (a) 1, (b) 2 e (c) 3.

Para os elementos quadráticos, o campo pode ser expresso da seguinte forma [21]:

$$\phi^{e}(x, y) = a_{q}^{e} + b_{q}^{e}x + c_{q}^{e}y + d_{q}^{e}x^{2} + e_{q}^{e}xy + f_{q}^{e}y^{2}$$
(2.9)

Em (2.9), o subscrito q representa o caso quadrático. Utilizando-se do mesmo procedimento para as funções de base nodais lineares, as funções de base nodais quadráticas são escritas como [19-21]:

$$N_{j}^{e}(x, y) = (2L_{j}^{e} - 1)L_{j}^{e}, \qquad j = 1, 2, 3$$

$$N_{4}^{e}(x, y) = 4L_{1}^{e}L_{2}^{e}, \qquad N_{5}^{e}(x, y) = 4L_{2}^{e}L_{3}^{e}, \qquad N_{6}^{e}(x, y) = 4L_{3}^{e}L_{1}^{e},$$
(2.10)

onde L_i^e são as funções de base nodais lineares.

2.2.1.3 - Discretização em três dimensões

Em uma situação prática, todas as estruturas possuem três coordenadas, ou seja, envolvem as três dimensões. Com a finalidade de reduzir o esforço computacional, utilizam-se aproximações, onde o campo é considerado invariável ao longo de uma ou duas coordenadas. Quando esta representação ou aproximação em uma ou duas dimensões não é possível ou satisfatória, o tratamento em três dimensões torna-se necessário. Atualmente, os métodos mais utilizados nas análises em três dimensões são os métodos das diferenças finitas no domínio do tempo FDTD e dos elementos finitos no domínio do tempo FETD. No método dos elementos finitos, há um aumento na flexibilidade geométrica da estrutura em relação ao FDTD. Porém, o número elevado de variáveis a serem determinadas resulta num esforço computacional de grandes proporções.

Para a discretização em três dimensões, existem vários tipos de elementos, tais como o bloco, tetraedro, prisma, etc. Neste trabalho, somente o tetraedro foi utilizado na discretização em três dimensões, sendo que as mesmas observações feitas para o elemento triangular, em relação à formação da malha, são válidas para o elemento tetraédrico. A Fig. 2.7 mostra um exemplo da discretização de um cubo por elementos tetraédricos. Para este exemplo, utilizaram-se 13 elementos, gerando 9 nós ou variáveis a serem determinadas para o caso linear e 36 nós para o caso quadrático. A Fig. 2.8 (a) e (b) mostra a distribuição dos nós em um elemento tetraédrico linear e quadrático, respectivamente.



Fig. 2.7 – Discretização em três dimensões por elementos finitos utilizando-se elementos tetraédricos.



Fig. 2.8 – Numeração dos nós em um elemento tetraédrico (a) linear e (b) quadrático.

Dentro de um elemento *e* linear, o campo $\phi^e(x, y, z)$ pode ser representado por:

$$\phi^{e}(x, y, z) = a_{l}^{e} + b_{l}^{e}x + c_{l}^{e}y + d_{l}^{e}z$$
(2.11)

onde a_l^e , b_l^e c_l^e e d_l^e são coeficientes a serem determinados. Em cada nó, $\phi^e(x, y, z)$ assume os respectivos valores:

$$\phi_1^e = a_l^e + b_l^e x_1^e + c_l^e y_1^e + d_l^e z_1^e$$
(2.12a)

$$\phi_2^e = a_l^e + b_l^e x_2^e + c_l^e y_2^e + d_l^e z_2^e$$
(2.12b)

$$\phi_3^e = a_l^e + b_l^e x_3^e + c_l^e y_3^e + d_l^e z_3^e$$
(2.12c)

$$\phi_4^e = a_l^e + b_l^e x_4^e + c_l^e y_4^e + d_l^e z_4^e$$
(2.12d)

Resolvendo o sistema linear acima para a_l^e , b_l^e c_l^e e d_l^e em função de ϕ_1^e , ϕ_2^e , ϕ_3^e e ϕ_4^e e substituindo em (2.11), obtém-se:

$$\phi^{e}(x, y, z) = \sum_{j=1}^{4} \phi_{j}^{e} L_{j}^{e}(x, y, z)$$
(2.13)

Onde L_1^e , L_2^e , L_3^e e L_4^e são as funções de base nodais lineares associadas aos nós 1, 2, 3 e 4, respectivamente, dadas por:

$$L_{i}^{e}(x, y, z) = \frac{1}{6V^{e}} \left(a_{i}^{e} + b_{i}^{e} x + c_{i}^{e} y + d_{i}^{e} z \right) \quad i = 1, 2, 3 \, \text{e} \, 4 \tag{2.14}$$

onde V^e é o volume de cada elemento e [19]:

$$a_{1}=x_{2}y_{3}z_{4} + x_{3}y_{4}z_{2} + x_{4}z_{3}y_{2} - z_{2}y_{3}x_{4} - y_{2}x_{3}z_{4} - z_{3}y_{4}x_{2}$$

$$a_{2}=-x_{1}y_{3}z_{4} - x_{3}y_{4}z_{1} - x_{4}z_{3}y_{1} + z_{1}y_{3}x_{4} + y_{1}x_{3}z_{4} + z_{3}y_{4}x_{1}$$

$$a_{3}=x_{1}y_{2}z_{4} + x_{2}y_{4}z_{1} + x_{4}z_{2}y_{1} - z_{1}y_{2}x_{4} - y_{1}x_{2}z_{4} - z_{2}y_{4}x_{1}$$

$$a_{4}=-x_{1}y_{2}z_{3} - x_{2}y_{3}z_{1} - x_{3}z_{2}y_{1} + z_{1}y_{2}x_{3} + y_{1}x_{2}z_{3} + z_{2}y_{3}x_{1}$$

$$b_{1} = -y_{3}z_{4} + z_{3}y_{4} + y_{2}z_{4} - z_{2}y_{4} - y_{2}z_{3} + z_{2}y_{3}$$

$$b_{2} = y_{3}z_{4} - z_{3}y_{4} - y_{1}z_{4} + z_{1}y_{4} + y_{1}z_{3} - z_{1}y_{3}$$

$$b_{3} = -y_{2}z_{4} + z_{2}y_{4} + y_{1}z_{4} - z_{1}y_{4} - y_{1}z_{2} + z_{1}y_{2}$$

$$b_{4} = y_{2}z_{3} - z_{2}y_{3} - y_{1}z_{3} + z_{1}y_{3} + y_{1}z_{2} - y_{2}z_{1}$$

$$c_{1} = x_{3}z_{4} - z_{3}x_{4} - x_{2}z_{4} + z_{2}x_{4} + x_{2}z_{3} - z_{2}x_{3}$$

$$c_{2} = -x_{3}z_{4} + z_{3}x_{4} + x_{1}z_{4} - z_{1}x_{4} - x_{1}z_{3} + z_{1}x_{3}$$

$$c_{3} = x_{2}z_{4} - z_{2}x_{4} - x_{1}z_{4} + z_{1}x_{4} + x_{1}z_{2} - z_{1}x_{2}$$

$$c_{4} = -x_{2}z_{3} + z_{2}x_{3} + x_{1}z_{3} - z_{1}x_{3} - x_{1}z_{2} + x_{2}z_{1}$$

$$d_1 = -x_3y_4 + y_3x_4 + x_2y_4 - y_2x_4 - x_2y_3 + y_2x_3$$

$$d_{2} = x_{3}y_{4} - y_{3}x_{4} - x_{1}y_{4} + y_{1}x_{4} + x_{1}y_{3} - y_{1}x_{3}$$

$$d_{3} = -x_{2}y_{4} + y_{2}x_{4} + x_{1}y_{4} - y_{1}x_{4} - x_{1}y_{2} + y_{1}x_{2}$$

$$d_{4} = x_{2}y_{3} - y_{2}x_{3} - x_{1}y_{3} + y_{1}x_{3} + x_{1}y_{2} - x_{2}y_{1}$$

As funções de base nodais quadráticas são dadas por [19-21]:

$$N_{i}^{e}(x, y, z) = (2L_{i}^{e} - 1)L_{i}^{e} \qquad i = 1, 2, 3, 4$$

$$N_{5}^{e}(x, y, z) = 4L_{1}^{e}L_{2}^{e}, \qquad N_{6}^{e}(x, y, z) = 4L_{1}^{e}L_{3}^{e}$$

$$N_{7}^{e}(x, y, z) = 4L_{1}^{e}L_{4}^{e} \qquad N_{8}^{e}(x, y, z) = 4L_{2}^{e}L_{3}^{e}$$

$$N_{9}^{e}(x, y, z) = 4L_{3}^{e}L_{4}^{e} \qquad N_{10}^{e}(x, y, z) = 4L_{2}^{e}L_{4}^{e}$$
(2.15)

2.2.2 – Funções de base vetoriais de arestas

As funções de base vetoriais [19-21, 65-77] em duas e três dimensões constituem um novo conjunto de funções de base que surgiram em função de soluções espúrias apresentadas pelas funções de bases nodais na solução da alguns problemas envolvendo o eletromagnetismo [71, 78-79]. O uso do método dos elementos finitos utilizando as funções de base nodais se mostrou um método que apresenta excelente precisão e confiabilidade nas análises eletromagnéticas de estruturas com as mais diversas geometrias. Porém, verificouse a presença de soluções espúrias na solução final dos campos eletromagnéticos em algumas formulações vetoriais. Cita-se, por exemplo, a formulação E_z - H_z de problemas de autovalores para o cálculo dos modos propagantes em guias de ondas [21, 80-81]. Estudos demonstraram que, nestas situações, os divergentes $\nabla \cdot (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) = 0$, para campo magnético, e $\nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E}) = \nabla \cdot \mathbf{J} / j\omega_0$, para campo elétrico, ou $\nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E}) = 0$, para campo magnético em um meio sem fonte excitadora, não são satisfeitos. Também, observam-se problemas ao se definir condições de contorno na interface entre diferentes materiais [77-80].

Diversos esquemas surgiram com a finalidade de solucionar os modos espúrios. Dentre os esquemas desenvolvidos, o mais comum é o que introduz um termo de penalidade, forçando as condições dos divergentes acima [78, 79]. Porém, foi observado que a introdução deste termo não elimina por completo os modos espúrios, além de afetar a precisão da solução obtida [21]. Este problema desaparece com o desenvolvimento das funções de base vetoriais. Ao contrário das funções de base nodais, que são funções de interpolação escalares, estes novos conjuntos de funções de base, que são funções de interpolação vetoriais, garantem que os divergentes dos campos elétrico e magnético sejam respeitados, eliminando-se por completo os modos espúrios.

Baseados nos estudos de Whitney [65], este novo conjunto de funções de base vetoriais ou elementos vetoriais considera as arestas de cada elemento, ao invés dos nós, por isto são chamadas de funções de base de arestas. Diversos tipos de elementos foram estudados nas análises em duas e três dimensões. Em 1980, Nedelec [66] analisou os elementos de arestas em tetraedros e blocos, Hano [68] discutiu os elementos de arestas em retângulos. Mur e Hoop [69] consideraram problemas dos campos eletromagnéticos em meio não-homogêneos e Crowley *et al.* [71] desenvolveram elementos de arestas em curva. Neste trabalho, foi empregado o triângulo, para a discretização em duas dimensões, e o tetraedro, para análise em três dimensões, pois ambos elementos envolvem um número menor de variáveis.

2.2.2.1 – Funções de base de arestas para a discretização em duas dimensões

Conforme mencionado, neste trabalho, foi considerado o triângulo para a discretização em duas dimensões. A Fig. 2.9 mostra um elemento de aresta triangular. Para que estas funções possam ser empregadas numa análise pelo método dos elementos finitos torna-se necessário que os vetores possuam componentes tangencial e normal à aresta a qual estão associados e somente componente normal nas demais arestas [19-21, 66]. Assim, a expansão dos campos dentro de cada elemento pode ser feita através dos campos tangenciais a cada aresta. Também, deve-se ressaltar que, ao contrário de outros elementos como os elementos retangulares, as arestas em um elemento triangular não necessitam estar alinhadas com os eixos x ou y. Desta forma, os elementos triangulares aumentam a flexibilidade geométrica na discretização das estruturas em análise.

As funções de base vetoriais de aresta são obtidas a partir das funções de base nodais. Considere o gradiente da função de base nodal associada ao nó 1, como definida em (2.8):

$$\nabla L_1 = \frac{b_1}{2\Delta} \hat{x} + \frac{c_1}{2\Delta} \hat{y}$$
(2.16)



Fig. 2.9 – Elemento de aresta triangular

Substituindo as expressões de b_1 e c_1 acima, obtém-se:

$$\nabla L_1 = \frac{y_2 - y_3}{2\Delta} \hat{x} + \frac{x_3 - x_2}{2\Delta} \hat{y}$$
(2.17)

Fazendo-se o produto interno do gradiente de L_1 com um vetor tangencial ao lado 2-3, dado por $\vec{e}_{23} = (x_3 - x_2)\hat{x} + (y_3 - y_2)\hat{y}$, obtém-se:

$$\nabla L_1 \cdot \vec{e}_{23} = \frac{(y_2 - y_3)(x_3 - x_2) + (x_3 - x_2)(y_3 - y_2)}{2\Delta} = 0$$
(2.18)

Por outro lado, o produto interno do gradiente com vetores tangenciais aos lados 1-2 e 1-3 são diferentes de zero. Assim, pode-se concluir que o vetor ∇L_1 possui componentes normais e tangenciais às arestas 1-2 e 1-3 e apenas componente normal à aresta 2-3 do elemento triangular mostrado na Fig. 2.9. Utilizando-se o mesmo procedimento acima, pode-se concluir que:

 $\nabla L_1 \Rightarrow$ Possui componentes tangenciais e normais às arestas 1-2 e 1-3 e apenas componentes normais à aresta 2-3.

 $\nabla L_2 \Rightarrow$ Possui componentes tangenciais e normais às arestas 1-2 e 2-3 e apenas componentes normais à aresta 1-3.

 $\nabla L_3 \Rightarrow$ Possui componentes tangenciais e normais às arestas 1-3 e 2-3 e apenas componentes normais à aresta 1-2.

Para a formação da função de base associada à aresta 1-2, por exemplo, deve-se considerar os gradientes ∇L_1 e ∇L_2 , pois ambos possuem componentes tangenciais e normais à aresta 1-2. Porém, ∇L_2 também possui componentes tangenciais e normais na aresta 2-3 e ∇L_1 na aresta 1-3. Levando-se em consideração as propriedades das funções de base nodais demonstradas na Fig. 2.6, pode-se verificar que L_1 anula-se na aresta 2-3 e L_2 anula-se na aresta 1-3. Multiplicando-se ∇L_2 por L_1 , anula-se os vetores na aresta 2-3 e multiplicando ∇L_1 por L_2 , anula-se os vetores na aresta 1-3. Fazendo-se uma combinação linear dos dois produtos, obtém-se:

$$\mathbf{P}_{12} = L_1 \nabla L_2 \pm L_2 \nabla L_1 \tag{2.19}$$

A expressão com sinal positivo possui rotacional nulo, tornado seu uso proibitivo na equação de onda vetorial. Portanto, será considerada apenas a expressão com sinal negativo. Fazendo-se a projeção de \mathbf{P}_{12} sobre um vetor unitário tangente à aresta 1-2, dado, por exemplo, como $\hat{\mathbf{e}}_{12} = [(x_2 - x_1)\hat{x} + (y_2 - y_1)\hat{y}]/l_{12}$, onde l_{12} é o comprimento da aresta 1-2, obtém-se:

$$\mathbf{e}_{12} \cdot \mathbf{P}_{12} = \frac{1}{l_{12}} \tag{2.20}$$

Portanto, pode-se concluir que \mathbf{P}_{12} possui componente tangencial constante ao longo da aresta 1-2, dada por $1/l_{12}$ e não possui componente tangencial ao longo das arestas 1-3 e 2-3. Procedendo-se da mesma forma para as demais funções, conclui-se que \mathbf{P}_{23} possui componente tangencial constante ao longo da aresta 2-3 e não possui componente tangencial ao longo das demais arestas e \mathbf{P}_{31} possui componente tangencial constante ao longo da aresta 1-3 e componente tangencial nula nas demais arestas. A fim de normalizar o valor das componentes tangenciais ao longo das arestas, multiplica-se \mathbf{P} pelo comprimento de cada aresta. Desta forma, pode-se escrever:

$$\mathbf{W}_{12} = \mathbf{P}_{12}l_{12} = (L_1 \nabla L_2 - L_2 \nabla L_1)l_{12}$$
(2.21)

$$\mathbf{W}_{23} = \mathbf{P}_{23}l_{23} = (L_2\nabla L_3 - L_3\nabla L_2)l_{23}$$
(2.22)

$$\mathbf{W}_{31} = \mathbf{P}_{31} l_{31} = (L_3 \nabla L_1 - L_1 \nabla L_3) l_{31}$$
(2.23)

As funções de base vetoriais de aresta W formam um conjunto completo de funções de interpolação, capazes de representar corretamente o campo dentro de um elemento triangular. A expansão do campo se faz através dos campos tangenciais a cada aresta, ou seja:

$$\Phi^e = \sum_{i=1}^3 \mathbf{W}_i^e u_i^e$$
(2.24)

onde u_i^e representa o campo tangencial à aresta *i*. As Fig. 2.10, 2.11 e 2.12 mostram a distribuição das funções de base W_{12} , W_{23} e W_{31} em um elemento triangular típico. Como se observa, as funções de base vetoriais possuem apenas componentes tangenciais nas arestas as quais estão associadas. Nas demais arestas, as funções possuem somente componentes normais.



Fig. 2.10 – Distribuição da função de base vetorial W_{12} .



Fig. 2.11 – Distribuição da função de base vetorial W_{23} .



Fig. 2.12 – Distribuição da função de base vetorial W_{31} .

2.2.2.2 - Funções de base de arestas para a discretização em três dimensões

Para a discretização da equação de onda vetorial em três dimensões, utilizam-se, neste trabalho, as funções de base de arestas para o tetraedro. As funções de base de arestas para o tetraedro são as mesmas que para o triângulo. Porém, estas funções são obtidas a partir das funções de base nodais lineares definidas para o tetraedro, conforme demonstrado em (2.13) [81]. A Fig. 2.13 mostra a distribuição das funções de base em um elemento tetraédrico. Similarmente às funções de base de arestas 2D, estas funções possuem componentes tangenciais e normais somente nas arestas onde são definidas, sendo que nas demais arestas possuem apenas componentes normais. Também, a componente tangencial é constante ao longo da aresta a qual cada função está associada. A Tabela 2.1 mostra as funções de base de arestas para o elemento tetraédrico mostrado na Fig. 2.13. O campo dentro de um elemento tetraédrico pode ser representado por:

$$\Phi^e = \sum_{i=1}^6 \mathbf{W}_i^e u_i^e \tag{2.25}$$

onde u_i^e representa o campo tangencial à aresta *i*.



Fig. 2.13 – Elemento de aresta tetraédrico.
Aresta i	Nó i ₁	Nó i ₂	Função de Base i
1	1	2	$\mathbf{W}_{12} = (L_1 \nabla L_2 - L_2 \nabla L_1) l_{12}$
2	1	3	$\mathbf{W}_{13} = (L_1 \nabla L_3 - L_3 \nabla L_1) l_{13}$
3	1	4	$\mathbf{W}_{14} = (L_1 \nabla L_4 - L_4 \nabla L_1) l_{14}$
4	2	3	$\mathbf{W}_{23} = (L_2 \nabla L_3 - L_3 \nabla L_2) l_{23}$
5	4	2	$\mathbf{W}_{42} = (L_4 \nabla L_2 - L_2 \nabla L_4) l_{42}$
6	3	4	$\mathbf{W}_{34} = (L_3 \nabla L_4 - L_4 \nabla L_3) l_{34}$

TABELA. 2.1 – FUNÇÕES DE BASE DE ARESTAS PARA UM ELEMENTO TETRAÉDRICO.

2.2.3 - Introdução ao método de Galerkin

O método de Galerkin pertence à família do método dos resíduos ponderados (*weighted residual method*) [16-21]. O método dos resíduos ponderados, como o próprio nome indica, procura a solução ponderando o resíduo da equação diferencial. Considera-se o seguinte problema de contorno:

$$\xi \phi = f, \qquad (2.26)$$

onde ξ é o operador diferencial e $\phi \in V$, sendo V um espaço de funções. Assumindo que $\tilde{\phi}$ é uma aproximação da solução de (2.26), o resíduo não nulo pode ser definido como:

$$r = \xi \tilde{\phi} - f \neq 0 \tag{2.27}$$

A melhor aproximação de $\tilde{\phi}$ será aquela que reduz *r* ao menor valor em todos os pontos do domínio Ω . Neste sentido, o método dos resíduos ponderados força a condição:

$$R_i = \int_{\Omega} r \, w_i d\Omega = 0, \qquad (2.28)$$

onde R_i é a integral dos resíduos ponderados, w_i são as funções de peso ou funções de teste, com $w \in W$, sendo W um espaço de funções. Quando $R_i = 0$, no ponto *i*, obtém-se a melhor aproximação de ϕ . Desta forma, torna-se possível montar um sistema de equações que determina os valores dos coeficientes de expansão que garantam R = 0 nos nós em análise. Se V = W, o método denomina-se de método de Galerkin. No método dos elementos finitos, discretizado a partir do método de Galerkin, as funções peso ou teste são as mesmas usadas na expansão da solução, ou seja, as funções de base escalares ou vetoriais.

2.2.3.1 - O uso do método de Galerkin na equação de onda escalar

Como exemplo da aplicação do método de Galerkin, será considerada a equação de onda escalar para o campo elétrico ou magnético no domínio do tempo em duas dimensões, considerando o campo invariável ao longo da direção *x*:

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(p\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(p\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) - \frac{q}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = 0, \qquad (2.29)$$

onde $\phi = E_x$, p = 1 e $q = n^2$ para modos TE e $\phi = H_x$, $p = 1/n^2$, q = 1 para modos TM, c a velocidade da luz no vácuo e n o índice de refração do meio. O resíduo definido em (2.28) é agora dado por:

$$r = \frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) - \frac{q}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$$
(2.30)

A integral dos resíduos ponderados em cada nó de um elemento triangular linear é dada por:

$$R_i^e = \iint_{\Omega_e} r \ L_i^e dy dz \quad i = 1, 2, 3,$$
(2.31)

ou seja,

$$R_{i}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) - \frac{q}{c^{2}} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial t^{2}} \right] L_{i}^{e} dy dz$$
(2.32)

A expansão do campo ϕ nas funções de base nodais levaria as derivadas de segunda ordem de (2.32) a zero. Para contornar este problema, faz-se o uso do enfraquecimento do método de Galerkin. Para isto, adotam-se as seguintes relações [21]:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) L_i^e = \frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial y} L_i^e \right) - p \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial L_i^e}{\partial y}$$
(2.33)

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) L_i^e = \frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial z} L_i^e \right) - p \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial L_i^e}{\partial z}$$
(2.34)

e o teorema do divergente:

$$\iint_{\Omega} \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial z} \right) d\Omega = \oint_{\Gamma} (U\hat{y} + V\hat{z}) \cdot \hat{n} \, d\Gamma, \qquad (2.35)$$

onde Γ significa o contorno da área Ω e \hat{n} é o vetor normal. Substituindo (2.33) e (2.34) e (2.35) em (2.32), obtém-se:

$$R_{i}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \left[-p \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial y} - p \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial z} - \frac{q}{c^{2}} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial t^{2}} L_{i}^{e} \right] dy \, dz + \oint_{\Gamma_{e}} p L_{i}^{e} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \, \hat{y} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \, \hat{z} \right) \cdot \hat{n} \, d\Gamma \, (2.36)$$

O último termo em (2.36) leva em consideração apenas o campo no contorno da área Ω . Neste trabalh o, o domínio Ω é encerrado com camadas absorventes, como as camadas de casamento perfeito (PML - *perfect matched layer*), seguida de paredes elétricas ou magnéticas, o que anula o campo tangencial em Γ . Portanto, este termo é desconsiderado. Assim, (2.36) reduz-se a:

$$R_{i}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \left[-p \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial y} - p \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial z} - \frac{q}{c^{2}} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial t^{2}} L_{i}^{e} \right] dy dz$$
(2.37)

Considerando-se R_i em cada nó de um elemento triangular e utilizando-se da expansão da solução (2.7) em (2.26), é possível escrevê-la na forma matricial:

$$\{R\}^{e} = [K]^{e} \{\phi\}^{e} + [M]^{e} \frac{d\{\phi\}^{e}}{dt} = \{0\},$$
(2.38)

onde:

$$\begin{bmatrix} K \end{bmatrix}_{i,j}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \left[-p \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial y} \frac{\partial L_{j}^{e}}{\partial y} - p \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial z} \frac{\partial L_{j}^{e}}{\partial z} \right] dy dz$$
$$\begin{bmatrix} M \end{bmatrix}_{i,j}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \left[-\frac{q}{c^{2}} L_{i}^{e} L_{j}^{e} \right] dy dz$$

onde $\{\phi\}$ representa o vetor coluna dos coeficiente a ser determinado. A matriz $[M]_{i,j}^e$ também é conhecida como matriz massa.

2.2.3.2 – O uso do método de Galerkin na equação de onda vetorial

No caso da equação de onda vetorial, as funções de base vetoriais utilizadas neste trabalho são as funções de base de arestas. Para este caso, a integral dos resíduos ponderados é definida como:

$$R_i = \int_{\Omega} \mathbf{r} \cdot \mathbf{w}_i d\Omega = 0 \tag{2.39}$$

Considerando-se o campo invariável na direção *x*, a equação de onda vetorial para campos elétrico e magnético, no domínio do tempo, é dada por:

$$\nabla \times p \nabla \times \mathbf{\Phi} + \frac{q}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{\Phi}}{\partial t^2} = 0, \qquad (2.40)$$

onde $\mathbf{\Phi} = H_y \hat{y} + H_z \hat{z}$, p = 1 e $q = n^2$ para o campo magnético ou $\mathbf{\Phi} = E_y \hat{y} + E_z \hat{z}$, $p = 1/n^2$, q = 1 para o campo elétrico. A integral dos resíduos ponderados pode ser escrita como:

$$R_i^e = \iint_{\Omega_e} \left[\nabla \times p \nabla \times \mathbf{\Phi} + \frac{q}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{\Phi}}{\partial t^2} \right] \cdot \mathbf{N}_i^e \, dy \, dz, \qquad (2.41)$$

onde N_i^e representa o conjunto de funções de base vetoriais, podendo ser as funções de base de arestas ou as funções de base de arestas ortogonais. Adotando-se identidades similares às (2.33) e (2.34) e do teorema do divergente (2.35), e considerando que a janela computacional é encerrada por paredes elétricas ou magnéticas, (2.41) pode ser escrito como:

$$R_{i}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \left\{ p \left[\nabla \times \mathbf{\Phi} \right] \cdot \left[\nabla \times \mathbf{N}_{i}^{e} \right] + \frac{q}{c^{2}} \frac{\partial^{2} \mathbf{\Phi}}{\partial t^{2}} \cdot \mathbf{N}_{i}^{e} \right\} dy \, dz = 0$$
(2.42)

Conforme descrito, quando as funções de base vetoriais de arestas são utilizadas na expansão dos campos dentro de um elemento *e*, os coeficientes de expansão representam o módulo e o sentido dos campos tangenciais em cada aresta de um triângulo, para a discretização em duas dimensões, ou de um tetraedro, para a discretização em três dimensões. Utilizando-se desta expansão em (2.42) e escrevendo-a na forma matricial, obtém-se:

$$\{R\}^{e} = [K]^{e} \{\phi\}^{e} + [M]^{e} \frac{d\{\phi\}^{e}}{dt} = \{0\}$$
(2.43)

onde:

$$\begin{bmatrix} K \end{bmatrix}_{i,j}^{e} = \iiint_{\Omega_{e}} [\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot [\nabla \times \mathbf{N}_{j}] dy dz$$
$$\begin{bmatrix} M \end{bmatrix}_{i,j}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \left[\frac{q}{c^{2}} \mathbf{N}_{i}^{e} \cdot \mathbf{N}_{j}^{e} \right] dy dz$$

Como na formulação da seção anterior, a matriz $[M]_{i,j}^e$ é conhecida como matriz massa. Embora estes dois exemplos tratem apenas da discretização em duas dimensões, o mesmo procedimento pode ser utilizado na discretização em três dimensões.

2.2.4 – Montagem do sistema de equações

O último passo no método dos elementos finitos é a solução do sistema de equações. O sistema de equações resultante possui uma das duas formas seguintes [20-21]:

$$[K]\{\phi\} = \{b\}$$
(2.44)

$$[A]\{\phi\} = \lambda[B]\{\phi\}$$
(2.45)

A Eq. (2.44) é resultante de problemas determinísticos. Em eletromagnetismo, sistemas determinísticos estão associados a problemas onde existe uma fonte excitadora, tais como problemas de espalhamento e propagação. A Eq. (2.45) é resultante de problemas de autovalores, onde não há uma fonte excitadora, tais como a análise de modos

propagantes em um guia de onda ou de modos ressonantes em uma cavidade ressonante, por exemplo.

2.2.4.1 – Montagem das matrizes

A numeração apresentada para os nós na Fig. 2.5, para o triângulo, e na Fig. 2.8, para o tetraedro, é conhecida como numeração local, pois leva em consideração apenas a numeração interna a um elemento. Na montagem final das matrizes, utiliza-se a numeração global dos elementos e dos nós da malha. A Fig. 2.14 mostra um exemplo da numeração global em uma malha discretizada em duas dimensões por elementos triangulares lineares. Nesta figura, a numeração local é mostrada internamente a cada elemento e a numeração global é a mostrada externamente à Fig. 2.14.



Fig. 2.14 – Exemplo da numeração global em uma malha.

Os elementos desta malha geram matrizes elementares de dimensão 3×3 , porém as matrizes globais deverão ser do tipo 4×4 , pois a malha possui quatro nós. A Fig. 2.15 mostra as matrizes locais geradas pelos elementos 1 e 2, respectivamente. Considerando a numeração global para a formação da matriz global, verifica-se que a numeração local do elemento 1 coincide com a numeração global da malha. Para o elemento 2, o coeficiente $a_{1,1}^2$ passa a ser o coeficiente $a_{4,4}$ da matriz global, o coeficiente $a_{2,2}^2$ passa a somar-se com o coeficiente $a_{1,1}$ da matriz global e assim por diante. A Fig. 2.16 mostra a matriz global

resultante da malha da Fig. 2.14. O mesmo procedimento é aplicado numa situação de discretização em três dimensões.

$$\begin{bmatrix} a_{1,1}^1 & a_{1,2}^1 & a_{1,3}^1 \\ a_{2,1}^1 & a_{2,2}^1 & a_{2,3}^1 \\ a_{3,1}^1 & a_{3,2}^1 & a_{3,3}^1 \end{bmatrix}; \begin{bmatrix} a_{1,1}^2 & a_{1,2}^2 & a_{1,3}^2 \\ a_{2,1}^2 & a_{2,2}^2 & a_{2,3}^2 \\ a_{3,1}^2 & a_{3,2}^2 & a_{3,3}^2 \end{bmatrix}$$

Fig. 2.15 – Exemplo das matrizes locais geradas pelos elementos 1 e 2 da Fig. 2.14.

$\left[a_{1,1}^{1} + a_{2,2}^{2}\right]$	$a_{1,2}^1$	$a_{1,3}^1 + a_{2,3}^2$	$a_{2,1}^2$
$a_{2,1}^{1}$	$a_{2,2}^{1}$	$a_{2,3}^1$	0
$a_{3,1}^1 + a_{3,2}^2$	$a_{3,2}^1$	$a_{3,3}^1 + a_{3,3}^2$	$a_{3,1}^2$
$a_{1,2}^2$	0	$a_{1,3}^2$	$a_{1,1}^2$

Fig. 2.16 – Matriz global resultante da malha da Fig. 2.14.

2.3 – Conclusão

Este capítulo apresentou uma introdução ao método dos elementos finitos para a discretização das equações de onda escalar e vetorial dos campos elétrico e magnético. A metodologia demonstrada neste capítulo teve como objetivo definir conceitos necessários para o desenvolvimento e compreensão dos Capítulos 3 e 4. Estes capítulos tratarão das funções de base de arestas ortogonais para a discretização em duas e três dimensões da equação de onda vetorial, respectivamente, em esquemas de propagação de envoltória no domínio do tempo.

A primeira parte deste capítulo mostrou os passos envolvidos no emprego do método dos elementos finitos em eletromagnetismo. O processo de discretização de estruturas em uma, duas e três dimensões foi discutido. Dois elementos utilizados na discretização ganharam destaque neste capítulo. O triângulo, para a discretização em duas dimensões, e o tetraedro, para a discretização em três dimensões. Estes elementos foram escolhidos para o processo de discretização neste trabalho, pois apresentam excelente

precisão na solução obtida e envolvem um número menor de variáveis. A formulação do sistema de equações foi feita através do método de Galerkin. As equações de onda escalar e vetorial foram utilizadas para demonstrar o uso deste método. Nos próximos capítulos, este método será utilizado para a equação de onda vetorial dos campos elétrico e magnético no domínio do tempo.

Este capítulo também apresentou as funções de base vetoriais. Estas funções surgiram devido a problemas não-físicos na solução final quando as funções de base nodais eram empregadas em uma análise vetorial. Mais uma vez, os elementos utilizados foram os triângulos e os tetraedros para a discretização da estrutura em análise em duas e três dimensões, respectivamente. O estudo destas funções torna-se importante porque elas originarão as funções de base vetoriais de aresta ortogonais para a discretização em duas e em três dimensões. As propriedades das funções de base vetoriais de aresta foram demonstradas, onde se observou a continuidade tangencial na fronteira entre dois elementos.

Capítulo 3

O Método da Envoltória no Domínio do Tempo Usando as Funções de Base de Arestas Ortogonais em Duas Dimensões

3.1 – Introdução

Com a finalidade de contornar algumas limitações apresentadas pela análise da propagação dos campos eletromagnéticos no domínio da freqüência, a análise no domínio do tempo tornou-se um importante esquema no estudo da propagação de campos eletromagnéticos em uma estrutura. Com simulações no domínio do tempo, a análise das reflexões nos sentidos direto e reverso torna-se simples e precisa. Conseqüentemente, é possível observar todos os transientes ocorridos dentro de uma estrutura. Também, a propagação no domínio do tempo permite estudar as características de transmissão em uma ampla faixa de freqüência e a modelagem dos efeitos não-lineares torna-se mais abrangente. Porém, há a necessidade de se discretizar toda a geometria da estrutura, aumentando o número de incógnitas em relação às formulações para análise da propagação dos campos no domínio da freqüência, que levam em consideração apenas a seção transversal.

Em geral, as formulações convencionais baseadas na discretização por elementos finitos e que são destinadas à análise de estrutura fotônicas utilizam a equação de onda escalar como equação governante [33-34, 40, 44-45, 82]. Também, a solução temporal da equação diferencial é obtida através do método implícito, como os algoritmos baseados no esquema de Crank-Nicholson [83], garantindo a estabilidade incondicional do método, independentemente do passo temporal adotado. Porém, a solução final é obtida através da solução de um sistema linear de equações que deve ser resolvido a cada passo temporal. Para estruturas mais complexas e/ou eletricamente longas, o número de variáveis a serem determinadas pode demandar um alto esforço computacional no processamento de dados, inviabilizando as análises em um computador convencional.

Com o propósito de minimizar este esforço computacional, White desenvolveu, pela primeira vez, as funções de base de arestas ortogonais em duas dimensões, a partir das funções de base de aresta de Whitney, para a solução da equação de onda vetorial dos campos eletromagnéticos. Estas novas funções são ortogonais entre si nas coordenadas centrais de cada aresta de um elemento triangular, obtendo, naturalmente, matrizes diagonais. Este capítulo irá apresentar o uso das funções de base de arestas ortogonais em duas dimensões no método de propagação da envoltória complexa dos campos eletromagnéticos para aplicação em fotônica. Além de tornar possível a simulação envolvendo um número grande de variáveis com bom desempenho computacional, as análises empregam a equação de onda vetorial no domínio do tempo, proporcionando um estudo mais compreensivo da propagação da luz nas estruturas fotônicas. Este capítulo está dividido em quatro partes. A primeira parte deste capítulo irá demonstrar o processo de ortogonalização das funções de base de arestas. A segunda parte demonstrará a discretização da equação de onda vetorial, truncada via PML, através das funções de base de aresta ortogonais. A terceira parte irá apresentar o algoritmo utilizado nas simulações e a última parte demonstrará os resultados obtidos.

3.2 - Funções de Base de Arestas Ortogonais em Duas Dimensões

As novas funções de base de arestas ortogonais são obtidas a partir das funções de base de aresta para o elemento triangular, apresentadas no Capítulo 2. O processo de ortogonalização (Apêndice A) das funções de base de aresta deve preservar as suas características originais e garantir que os campos elétrico e magnético continuem a ser representados corretamente dentro de um elemento. Conforme demonstrado em (2.49), os campos elétrico e magnético podem ser representados dentro de um elemento pelo somatório das funções de base de arestas multiplicadas pelos seus respectivos coeficientes de expansão. Porém, a integral do produto interno das funções de base é diferente de zero para diferentes funções e, conseqüentemente, as matrizes massas elementares não serão diagonais. Para torná-las diagonais, as funções de base ortogonais devem atender a seguinte relação [28, 37-39]:

$$\left\langle \mathbf{N}_{i}^{e} \cdot \mathbf{N}_{j}^{e} \right\rangle = \iint_{\Omega_{e}} \mathbf{N}_{i}^{e} \cdot \mathbf{N}_{j}^{e} d\Omega = C \delta_{i,j}$$
(3.1)

onde Ω representa a área do elemento *e*, *C* é uma constante e $\delta_{i,j}$ é o delta de Kronecker. Pela equação (3.1), pode-se verificar que esta relação deve ser satisfeita em todo o domínio Ω de integração, ou seja, que as funções de base sejam ortogonais entre si em qualquer coordenada interna do elemento. Analisando as funções de base de arestas através de suas propriedades e dos seus gráficos apresentados no Capítulo 2, nota-se que construir \mathbf{N}_{i}^{e} , de tal forma que (3.1) seja respeitada e garantida a correta representação dos campos dentro do elemento, é uma tarefa muito difícil [21, 28, 37-39]. A alternativa para este caso é o uso da integração numérica, substituindo o domínio contínuo da integral por um domínio discreto e ortogonalizando as funções de base apenas nos pontos utilizados na integração. Levando-se em consideração esta condição, (3.1) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\left\langle \mathbf{N}_{i}^{e}, \mathbf{N}_{j}^{e} \right\rangle = \sum_{l=1}^{3} \alpha_{l} \mathbf{N}_{i}^{e} (m_{l}) \cdot \mathbf{N}_{j}^{e} (m_{l}) = C \delta_{i,j}$$
(3.2)

onde m_l são as coordenadas no centro de cada aresta e α_l é escolhida de tal forma a obter a melhor precisão na integração numérica. O parâmetro α_l dependerá do algoritmo de integração numérica adotado. Se, por exemplo, for adotado o método de quadratura de Gauss-Legendre, α_l representa as ponderações associadas a este algoritmo. A equação (3.2) leva em consideração apenas as coordenadas centrais de cada aresta do triângulo, tornando-se menos restrita que (3.1).

Conforme foi visto no Capítulo 2, as funções de base de arestas podem ser escritas como:

$$\mathbf{W}_{ij} = \left(L_i \nabla L_j - L_j \nabla L_i\right) l_{ij}$$
(3.3)

onde \mathbf{W}_{ij} é a função associada à aresta *i-j* de um elemento. Esta função poderá ser decomposta em componentes tangencial e normal no centro da aresta *i-j* e apenas em componente normal no centro das demais arestas. Para que a condição descrita em (3.2) seja garantida, **N** não deve ter contribuição das componentes normais nos centros das arestas. Portanto, \mathbf{W}_{ij} não atende (3.2). Utilizando-se de (A-14) para a construção das novas funções de base de arestas ortogonais, tem-se [28]:

$$\mathbf{Z}_{12} = \mathbf{W}_{12} - \frac{\langle \mathbf{W}_{12} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{12} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle} \mathbf{B}_{12} - \frac{\langle \mathbf{W}_{12} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{23} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle} \mathbf{B}_{23} - \frac{\langle \mathbf{W}_{12} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{31} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle} \mathbf{B}_{31}$$
(3.4)

$$\mathbf{Z}_{23} = \mathbf{W}_{23} - \frac{\langle \mathbf{W}_{23} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{12} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle} \mathbf{B}_{12} - \frac{\langle \mathbf{W}_{23} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{23} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle} \mathbf{B}_{23} - \frac{\langle \mathbf{W}_{23} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{31} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle} \mathbf{B}_{31}$$
(3.5)

$$\mathbf{Z}_{31} = \mathbf{W}_{31} - \frac{\langle \mathbf{W}_{31} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{12} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle} \mathbf{B}_{12} - \frac{\langle \mathbf{W}_{31} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{23} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle} \mathbf{B}_{23} - \frac{\langle \mathbf{W}_{31} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{31} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle} \mathbf{B}_{31}$$
(3.6)

onde:

$$\mathbf{B}_{12} = L_1 L_2 \hat{n}_{12} \tag{3.7a}$$

$$\mathbf{B}_{23} = L_2 L_3 \hat{n}_{23} \tag{3.7b}$$

$$\mathbf{B}_{31} = L_3 L_1 \hat{n}_{31} \tag{3.7c}$$

e \hat{n}_{12} é um vetor unitário normal à aresta 1-2, \hat{n}_{23} é um vetor unitário normal à aresta 2-3 e \hat{n}_{31} é um vetor unitário normal à aresta 3-1. As funções auxiliares **B**_{ij} possuem as seguintes propriedades [21, 28]:

- Componente tangencial nula em todas as arestas da malha.
- Possui componente normal apenas na aresta *i-j*.
- As funções são ortogonais entre si, de acordo com a definição em (3.2).

Como estas novas funções de base são ortogonais apenas nos pontos centrais de cada aresta do triângulo, as integrais em (3.4) a (3.6) devem ser resolvidas numericamente.

Conforme descrito no Capítulo 2, os vetores normais \hat{n}_{12} , \hat{n}_{23} e \hat{n}_{31} podem ser escritos como:

$$\hat{n}_{12} = \frac{\nabla L_3}{\left|\nabla L_3\right|} \tag{3.8}$$

$$\hat{n}_{23} = \frac{\nabla L_1}{\left|\nabla L_1\right|} \tag{3.9}$$

$$\hat{n}_{31} = \frac{\nabla L_2}{|\nabla L_2|} \tag{3.10}$$

Utilizando-se de (3.8), (3.9) e (3.10) em (3.4) e resolvendo as integrais através do método de integração numérica por quadratura de Gauss-Legendre de terceira ordem [21, 84], observou-se que os resultados de cada integral de Z_{12} poderiam ser escritos da seguinte forma:

$$\frac{\langle \mathbf{W}_{12} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{12} \cdot \mathbf{B}_{12} \rangle} = \frac{\sum_{i=1}^{3} P_i \mathbf{W}_{12} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e) \cdot \mathbf{B}_{12} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e)}{\sum_{i=1}^{3} P_i \mathbf{B}_{12} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e) \cdot \mathbf{B}_{12} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e)} = 4 (\mathbf{W}_{12} (m_{12}) \cdot \hat{n}_{12}) \quad (3.11)$$

$$\frac{\langle \mathbf{W}_{12} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{23} \cdot \mathbf{B}_{23} \rangle} = \frac{\sum_{i=1}^{3} P_i \mathbf{W}_{12} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e) \cdot \mathbf{B}_{12} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e)}{\sum_{i=1}^{3} P_i \mathbf{B}_{23} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e) \cdot \mathbf{B}_{23} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e)} = -2 |\nabla L_1| l_{12} \quad (3.12)$$

$$\frac{\langle \mathbf{W}_{12} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle}{\langle \mathbf{B}_{31} \cdot \mathbf{B}_{31} \rangle} = \frac{\sum_{i=1}^{3} P_i \mathbf{W}_{12} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e) \cdot \mathbf{B}_{23} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e)}{\sum_{i=1}^{3} P_i \mathbf{B}_{31} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e) \cdot \mathbf{B}_{31} (L_{1i}^e, L_{2i}^e, L_{3i}^e)} = 2 |\nabla L_2| l_{12} \quad (3.13)$$

onde P_i são as ponderações associadas ao algoritmo de integração numérica de terceira ordem e m_{12} é a coordenada central da aresta 1-2. Utilizando-se de (3.11), (3.12) e (3.13) e desenvolvendo o mesmo procedimento para as demais integrais, as funções de base Z resultam em:

$$\mathbf{Z}_{12} = (L_1 \nabla L_2 - L_2 \nabla L_1 + 2L_2 L_3 \nabla L_1 - 2L_1 L_3 \nabla L_2) l_{12} - 4L_1 L_2 [\mathbf{W}_{12}(m_{12}) \cdot \hat{n}_{12}] \hat{n}_{12}$$
(3.14)

$$\mathbf{Z}_{23} = (L_2 \nabla L_3 - L_3 \nabla L_2 + 2L_1 L_3 \nabla L_2 - 2L_2 L_1 \nabla L_3) l_{23} - 4L_2 L_3 [\mathbf{W}_{23}(m_{23}) \cdot \hat{n}_{23}] \hat{n}_{23}$$
(3.15)

$$\mathbf{Z}_{31} = (L_3 \nabla L_1 - L_1 \nabla L_3 + 2L_1 L_2 \nabla L_3 - 2L_2 L_3 \nabla L_1) l_{31} - 4L_1 L_3 [\mathbf{W}_{31}(m_{31}) \cdot \hat{n}_{31}] \hat{n}_{31}$$
(3.16)

As funções de base Z também podem ser obtidas observando as propriedades das funções de base de arestas, descritas no Capítulo 2. Considere o valor da função de base W_{12} nos pontos centrais de cada aresta de um elemento triangular.

$$\mathbf{W}_{12}(m_{23}) = -0.5\nabla L_1 l_{12} \tag{3.17}$$

$$\mathbf{W}_{12}(m_{31}) = 0.5\nabla L_2 l_{12} \tag{3.18}$$

$$\mathbf{W}_{12}(m_{12}) = (0.5\nabla L_2 - 0.5\nabla L_1)l_{12}$$
(3.19)

Em (3.17), (3.18) e (3.19), pode-se verificar, através de (3.9) e (3.10), que \mathbf{W}_{12} possui apenas componente normal na aresta 2-3 e 3-1 e componente normal e tangencial na aresta 1-2. Para tornar \mathbf{W}_{12} ortogonal em relação à normal nestes pontos, novos termos devem ser somados a esta função, de tal forma a cancelar suas componentes normais nas coordenadas centrais das arestas. Assim, na aresta 2-3, o termo a ser somado deve ser igual $0.5\nabla L_1 l_{12}$. Porém, este termo deve ser nulo nas demais arestas. Para isto, deve-se multiplicar $\nabla L_1 l_{12}$ por $L_2 L_3$, que resulta em 0,25 no centro da aresta 2-3 (as funções nodais são iguais a 0,5 no centro da aresta onde é definida). Para se obter 0,5, deve-se multiplicar $L_2 L_3 \nabla L_1 l_{12}$ por 2, resultando em $2L_2 L_3 \nabla L_1 l_{12}$. O mesmo procedimento pode ser realizado para a aresta 1-3. Na aresta 1-2, apenas a componente normal de \mathbf{W}_{12} deverá ser retirada. Pode-se obter a componente normal de \mathbf{W}_{12} através da projeção desta função em um vetor unitário normal a esta aresta, ou seja, $4L_1L_2[\mathbf{W}_{12}(m_{12})\cdot \hat{n}_{12}]\hat{n}_{12}$, sendo que $4L_1L_2$ resulta em 1 no centro da aresta 1-2 e anula este termo nas demais arestas.

As novas funções de base Z_{ij} possuem as seguintes propriedades:

- Preservam a propriedade da continuidade tangencial dos campos nas fronteiras de cada elemento.
- O módulo da componente tangencial de Z_{ij} será igual a 1 em toda a extensão da aresta *ij* e zero nas demais.
- Nas duas arestas restantes, Z_{ij} terá valor nulo nas coordenadas centrais de cada aresta e apenas componentes normais fora destas regiões, satisfazendo a condição de ortogonalidade definida em (3.2).
- A componente normal de Z_{ij} no centro da aresta ij é nula.

Esta última propriedade significa que as funções Z_{ij} não representam corretamente os campos com normais não nulas nestes pontos. Assim, para a correta representação dos campos em duas dimensões, é necessário o uso das funções de B_{ij} . As funções Z_{ij} e B_{ij} formam um conjunto completo de funções de base de arestas e são ortogonais entre si. A Fig. 3.1 demonstra a formação de um elemento triangular em função das funções de base de arestas ortogonais. Pode-se observar que, para a correta representação dos campos nas coordenadas centrais de cada aresta, devem-se utilizar as funções \mathbf{Z}_{ij} em conjunto com as funções \mathbf{B}_{ij} .



Fig. 3.1 – Formação de um elemento triangular linear através das funções de base de arestas ortogonais.

A Fig. 3.2 mostra a distribuição das funções de base Z_{12} e B_{12} no elemento triangular, enquanto que a Fig. 3.3 mostra a distribuição das funções Z_{23} e B_{23} para o mesmo elemento e a Fig. 3.4 mostra a distribuição das funções Z_{31} e B_{31} . Por estes gráficos, percebe-se que a função Z_{ij} possui componente tangencial apenas na aresta *i-j*. Nas demais arestas, a função Z_{ij} possui apenas componente normal. Também, verifica-se que no centro da aresta *i-j*, a função Z_{ij} não possui componente normal, sendo necessário a introdução da função B_{ij} na decomposição dos campos para contornar este problema.

Desta forma, o campo Φ expandido dentro de um elemento triangular através das funções de base de arestas ortogonais, pode ser escrito como:

$$\boldsymbol{\Phi}(x, y, t) = \sum_{i=1}^{6} u_i(t) \mathbf{N}_i(x, y), \qquad (3.20)$$

onde $u_i(t)$ representa os coeficientes de expansão, $N_i = Z_i$ para i = 1 até 3 e $N_i = B_i$ para i = 4 até 6.



Fig. 3.2 – Distribuição das funções (a) $\mathbf{Z}_{12} e$ (b) \mathbf{B}_{12} em um elemento triangular.



Fig. 3.3 – Distribuição das funções (a) $\mathbb{Z}_{23} e$ (b) \mathbb{B}_{23} em um elemento triangular.



(*b*)

Fig. 3.4 – Distribuição das funções (a) $\mathbb{Z}_{31} e$ (b) $\mathbb{B}_{31} em um elemento triangular.$

3.3 – Aplicação das Funções de Base de Arestas Ortogonais em Duas Dimensões na Equação de Onda Vetorial

Conforme foi visto, as funções de base de aresta ortogonais são obtidas a partir das funções de base de aresta de Whitney, forçando a equação governante ser a equação de onda vetorial e permitindo um estudo mais amplo da propagação do sinal de luz em uma estrutura, em relação às formulações que utilizam a equação de onda escalar. Assumindo-se um guia de ondas óptico como variação do campo apenas nas direções *y*-*z*, a equação de onda vetorial no domínio do tempo truncada por PLM para campo elétrico **E** é dada por [21, 85]:

$$\nabla \times \nabla \times \left(\mathbf{L} \ast \mathbf{E} \right) + \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0, \qquad (3.21)$$

onde:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \delta(t) - \sigma_{y} / \varepsilon e^{-\sigma_{y}t/\varepsilon} \,\overline{u}(t) & 0\\ 0 & \delta(t) - \sigma_{z} / \varepsilon e^{-\sigma_{z}t/\varepsilon} \,\overline{u}(t) \end{bmatrix},$$
(3.22)

onde **E** leva em consideração apenas as variações das componentes das direções y e z, t é o tempo, μ_0 é a permeabilidade magnética do espaço livre, c é a velocidade da luz no espaço livre, n é o índice de refração, $\delta(t)$ é a função delta de Kronecker, $\bar{u}(t)$ é a função degrau, ε é a permissividade elétrica. Para otimizar a PML, o perfil de condutividade adotado é $\sigma = \sigma_{max}(\rho/d)^2$ dentro das regiões das PMLs, onde σ_{max} é a máxima condutividade, ρ é a distância do início das PMLs e d é a espessura da camada de PML. Também, σ_y e σ_z são as condutividades das PMLs paralelas às direções y e z, respectivamente.

Conforme demonstrado em [21, 85], a Eq. (3.21) é baseada nos conceitos de PLMs [5, 59, 86-89], onde o operador Nabla ∇ é modificado para a seguinte forma (o Apêndice B descreve uma introdução à teoria das PMLs):

$$\nabla' = \frac{1}{s_B} \nabla, \tag{3.23}$$

sendo que:

$$s_B = 1 - \frac{j\sigma}{\omega_0 \varepsilon},\tag{3.24}$$

onde ω_0 é a freqüência angular do campo. Como s_B está no domínio da freqüência, (3.22) é obtida fazendo-se a transformada inversa de Fourier de 1/s_B, ou seja:

$$\Im^{-1}\left(\frac{1}{s_B}\right) = \delta(t) - \sigma/\varepsilon \, e^{-\sigma/\varepsilon} \, \overline{u}(t) \tag{3.25}$$

Obviamente, fora das regiões das PMLs, (3.21) reduz-se à equação de onda vetorial original no domínio do tempo.

Uma característica que tornaram as formulações baseadas no método dos elementos finitos no domínio do tempo muito populares foi o fato de trabalharem apenas com a variação temporal da envoltória complexa dos campos elétrico e magnético. Como as variações temporais da envoltória são mais lentas que as variações temporais da onda com a portadora, os passos temporais podem ser maiores, diminuindo-se o tempo total de simulação. Por esta razão, esta aproximação também será aqui adotada. Assim, o campo elétrico assumido passa a ser [33]:

$$\mathbf{E}(y, z, t) = \boldsymbol{e}(y, z, t) \exp(j\omega_0 t)$$
(3.26)

onde e é a amplitude complexa do campo elétrico. As derivadas temporais de primeira e segunda ordem de (3.26) podem ser escritas como:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \exp(j\omega_0 t) \left[\frac{\partial \boldsymbol{e}(y, z, t)}{\partial t} + j\omega_0 \boldsymbol{e}(y, z, t) \right]$$
(3.27)

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \exp(j\omega_0 t) \left[\frac{\partial^2 \boldsymbol{e}(y, z, t)}{\partial t^2} + 2j\omega_0 \frac{\partial \boldsymbol{e}(y, z, t)}{\partial t} - \omega_0^2 \boldsymbol{e}(y, z, t) \right]$$
(3.28)

Substituindo (3.26), (3.27) e (3.28) em (3.21), obtém-se:

$$\nabla \times \nabla \times \left\{ \mathbf{L} * \left[\boldsymbol{e}(y, z, t) \exp(j\omega_0 t) \right] \right\} + \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{e}(y, z, t)}{\partial t^2} \exp(j\omega_0 t) + \left(2j\omega_0 \frac{n^2}{c^2} + \sigma \mu_0 \right) \frac{\partial \boldsymbol{e}(y, z, t)}{\partial t} \exp(j\omega_0 t) + \left(j\omega_0 \sigma \mu_0 - \frac{\omega_0^2 n^2}{c^2} \right) \boldsymbol{e}(y, z, t) \exp(j\omega_0 t) = 0,$$
(3.29)

onde a envoltória complexa *e* pode ser expandida dentro de um elemento triangular através das funções de base de arestas ortogonais:

$$e(y, z, t) = \sum_{i=1}^{6} u_i(t) \mathbf{N}_i(y, z)$$
(3.30)

A convolução em (3.29) será analisada primeiramente. O primeiro termo da convolução será a própria amplitude complexa do campo elétrico, pois a convolução de uma função pelo delta de Kronecker resulta na própria função. O segundo termo desta convolução pode ser escrito como:

$$g_{y,z}(y,z,t) = \left[-\sigma_{y,z}/\varepsilon e^{-\sigma_{y,z}t/\varepsilon} \overline{u}(t)\right] * \left[e_{y,z}(y,z,t)\exp(j\omega_0 t)\right]$$
(3.31)

onde $e_{y,z}(y,z,t)$ representa a envoltória das componentes y e z do campo elétrico, respectivamente. A convolução em (3.31) é calculada considerando-se o campo constante em cada passo temporal, somada às contribuições do passo anterior [21, 37-39, 85], resultando em:

$$g_{y,z}^{\tau}(y,z) = \frac{\exp(j\omega_0 t)\sigma_{y,z}e_{y,z}^{\tau}}{(\sigma_{y,z} + j\omega_0\varepsilon)} \exp\left[-(\sigma_{y,z}/\varepsilon + j\omega_0)t^{\tau-1}\right] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-(\sigma_{y,z}/\varepsilon + j\omega_0)\Delta t\right] - 1 \right\} + g_{y,z}^{\tau-1}(y,z),$$
(3.32)

onde Δt é o intervalo de cada passo temporal e $t^{\tau-1}$ é o tempo inicial de cada passo temporal. O processo de discretização temporal será demonstrado mais adiante.

Considerando a expansão do campo elétrico descrito em (3.30), as componentes y e z do campo elétrico em (3.32) podem ser escritas como:

$$e_{y}^{\tau}\hat{y} = \sum_{i=1}^{6} u_{i}^{\tau} [\hat{y} \cdot \mathbf{N}_{i}(y, z)]\hat{y}$$

$$(3.33)$$

$$e_z^{\tau} \hat{z} = \sum_{i=1}^6 u_i^{\tau} [\hat{z} \cdot \mathbf{N}_i(y, z)] \hat{z}$$
(3.34)

Substituindo (3.33) e (3.34) em (3.32), pode-se representá-la em termos dos coeficientes de expansão.

$$g_{y}^{\tau}(y,z)\hat{y} = \sum_{i=1}^{6} \psi_{y,i}^{\tau} [\hat{y} \cdot \mathbf{N}_{i}(y,z)]\hat{y}$$
(3.35)

$$g_{z}^{\tau}(y,z)\hat{z} = \sum_{i=1}^{6} \psi_{z,i}^{\tau} [\hat{z} \cdot \mathbf{N}_{i}(y,z)]\hat{z}, \qquad (3.36)$$

onde:

$$\psi_{y,z,i}^{\tau} = \frac{\sigma_{y,z} u_i^{\tau}}{(\sigma_{y,z} + j\omega_0 \varepsilon)} \exp\left[-\left(\sigma_{y,z} / \varepsilon + j\omega_0\right) t^{\tau-1}\right] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\left(\sigma_{y,z} / \varepsilon + j\omega_0\right) \Delta t\right] - 1 \right\} + \psi_{y,z,i}^{\tau-1} \right\}$$
(3.37)

Aplicando-se o método de Galerkin em (3.29) para a discretização espacial, obtémse:

$$\iint_{\Omega} \{\nabla \times \nabla \times \mathbf{L} * [\boldsymbol{e}(y, z, t) \exp(j\omega_{0}t)] \} \cdot \mathbf{w} \, d\Omega + \iint_{\Omega} \left[\frac{n^{2}}{c^{2}} \frac{\partial^{2} \boldsymbol{e}(y, z, t)}{\partial t^{2}} \exp(j\omega_{0}t) \right] \cdot \mathbf{w} \, d\Omega + \\ \iint_{\Omega} \left[\left(2j\omega_{0} \frac{n^{2}}{c^{2}} + \sigma\mu_{0} \right) \frac{\partial \boldsymbol{e}(y, z, t)}{\partial t} \exp(j\omega_{0}t) \right] \cdot \mathbf{w} \, d\Omega + \\ \iint_{\Omega} \left[\left(j\omega_{0} \sigma\mu_{0} - \frac{\omega_{0}n^{2}}{c^{2}} \right) \boldsymbol{e}(y, z, t) \exp(j\omega_{0}t) \right] \cdot \mathbf{w} \, d\Omega = 0,$$

$$(3.38)$$

onde **w** são as funções de peso ou funções de teste e Ω é a área de um elemento. Fazendo-se **w** = **N**_j, onde *j* varia de 1 a 6, utilizando-se da expansão do campo elétrico pelas funções de base de arestas em um elemento triangular (3.30), das convoluções calculadas acima e assumindo-se que a janela computacional seja encerrada por paredes elétricas ou magnéticas, obtém-se a equação diferencial da propagação do campo elétrico no domínio do tempo:

$$\frac{[M]}{c^{2}}\frac{d^{2}\{u(t)\}}{dt^{2}} + \left(\frac{2j\omega_{0}[M]}{c^{2}} + [M]_{\sigma}\right)\frac{d\{u(t)\}}{dt} + \left([K] - \frac{\omega_{0}^{2}}{c^{2}}[M] + j\omega_{0}[M]_{\sigma}\right)\{u(t)\} + \sum_{e=1}^{M_{e}}\left\{\![K]_{y}^{e}\psi_{y} + [K]_{z}^{e}\psi_{z}\right\} = \{0\},$$
(3.39)

onde M_e é o número de elementos e as matrizes elementares são dadas por:

$$M_{ij}^{e} = \iint_{\Omega e} n^{2} \mathbf{N}_{i} \cdot \mathbf{N}_{j} d\Omega,$$
$$M_{\sigma,ij}^{e} = \iint_{\Omega e} \mu_{0} \mathbf{N}_{i} \cdot \mathbf{N}_{j} d\Omega,$$

$$\begin{split} K^{e}_{ij} &= \iint_{\Omega e} [\nabla \times \mathbf{N}_{i}] . \left[\nabla \times \mathbf{N}_{j} \right] d\Omega , \\ K^{e}_{y,ij} &= \iint_{\Omega e} [\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot \left[\nabla \times (\hat{y} \cdot \mathbf{N}_{j}) \hat{y} \right] d\Omega , \\ K^{e}_{z,ij} &= \iint_{\Omega e} [\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot \left[\nabla \times (\hat{z} \cdot \mathbf{N}_{j}) \hat{z} \right] d\Omega , \end{split}$$

A equação (3.39) já considera a montagem de todos os elementos da malha, com exceção do termo dentro do somatório. Devido ao termo $\exp[-\sigma_{y,z}/(\varepsilon+j\alpha_0)t^{\tau-1}]$ em (3.37), que possui dependência com a geometria da estrutura ($\sigma_{y,z}$ e ε varia de elemento para elemento) e do passo temporal ($t^{\tau-1}$), as matrizes globais formadas pelo produto $[K]_{y,z} \psi_{y,z}$ devem ser remontadas a cada passo temporal, reduzindo a eficiência computacional. Assim, o somatório em (3.39) indica a necessidade de realizar esta operação a cada passo temporal.

Para a discretização temporal de (3.39), utilizou-se o método das diferenças finitas centrais [83].

$$\frac{d^2 u(t)}{dt^2} = \frac{u^{\tau+1} - 2u^{\tau} + u^{\tau-1}}{\Delta t^2}$$
(3.40)

$$\frac{du(t)}{dt} = \frac{u^{\tau+1} - u^{\tau-1}}{2\Delta t}$$
(3.41)

$$u(t) = u^{\tau} \tag{3.42}$$

Deve-se ressaltar que, com o método das diferenças finitas centrais, o método será condicionalmente estável [21]. Substituindo (3.40), (3.41) e (3.42) em (3.39) e expandindose o somatório, obtém-se:

$$\begin{bmatrix} (1+j\omega_{0}\Delta t)[M] + \frac{c^{2}\Delta t[M]_{\sigma}}{2} \end{bmatrix} \{ u^{\tau+1} \} = [(2+\omega_{0}^{2}\Delta t^{2})[M] - j\omega_{0}c^{2}\Delta t^{2}[M]_{\sigma} - c^{2}\Delta t^{2}[K]] \{ u^{\tau} \} + \left[(-1+j\omega_{0}\Delta t)[M] + \frac{c^{2}\Delta t[M]_{\sigma}}{2} \right] \{ u^{\tau-1} \} - c^{2}\Delta t^{2} \{ [K_{\psi}]_{y} + [K_{\psi}]_{z} \} \{ I \}$$

$$(3.43)$$

onde $I = \{1,1,...,1\}^{T}$, $\{I\}$ é um vetor constante e $[K_{\psi}]_{y,z}$ são as matrizes globais resultantes do somatório em (3.39) e que devem ser remontadas a cada passo temporal. Como as matrizes [M] e $[M]_{\sigma}$ são diagonais, devido às funções de base de arestas ortogonais, o vetor $\{u^{\tau+1}\}$, que é a solução do sistema de equações, é obtido pela multiplicação de (3.43) por

 $[(1 + j\omega_0\Delta t)[M] + c^2\Delta t[M]_{\sigma}/2]^{-1}$. A equação (3.43) fornece os coeficientes de expansão em um dado passo temporal. Através do vetor $\{u^{\tau+1}\}$ é possível recuperar as amplitudes complexas das componentes do campo elétrico utilizando-se de (3.33) e (3.34).

O mesmo procedimento pode ser utilizado para o caso do campo magnético. Para esta situação, o sistema matricial de equações será o mesmo que o apresentado em (3.43), porém as matrizes elementares deverão ser modificadas na sua formação. De uma forma geral, pode-se escrever as matrizes elementares da seguinte forma:

$$\left[M\right]_{ij}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} q \mathbf{N}_{i} \cdot \mathbf{N}_{j} \ d\Omega \tag{3.44}$$

$$\left[M\right]_{\sigma,ij}^{e} = \iint_{\Omega e} p\mu_{0}\sigma \mathbf{N}_{i} \cdot \mathbf{N}_{j} d\Omega$$
(3.45)

$$\left[K\right]_{ij}^{e} = \iint_{\Omega e} p\left[\nabla \times \mathbf{N}_{i}\right] \cdot \left[\nabla \times \mathbf{N}_{j}\right] d\Omega$$
(3.46)

$$\left[K_{\psi}\right]_{y,ij}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \psi_{y,ij} p[\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot \left[\nabla \times (\hat{y} \cdot \mathbf{N}_{j})\hat{y}\right] d\Omega$$
(3.47)

$$\left[K_{\psi}\right]_{z,ij}^{e} = \iint_{\Omega_{e}} \psi_{z,ij} p[\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot \left[\nabla \times (\hat{z} \cdot \mathbf{N}_{j})\hat{z}\right] d\Omega$$
(3.48)

Para a análise dos modos TE, têm-se $e = e_y \hat{y} + e_z \hat{z}$, $p = 1/n^2$ e q = 1. Para a análise dos modos TM, têm-se $h = h_y \hat{y} + h_z \hat{z}$ p = 1 e $q = n^2$, onde h é a envoltória complexa do campo magnético e h_y e h_z são suas componentes nas direções y = z, respectivamente.

Conforme descrito anteriormente, as matrizes $[K_{\psi}]_{y,z}$, que são resultantes do processo de discretização das convoluções, necessitam ser remontadas a cada passo temporal. Em uma análise envolvendo um número grande de variáveis, este procedimento poderá afetar o desempenho do tempo de processamento. Com a finalidade de contornar este problema, uma nova aproximação foi proposta. Nesta aproximação, o termo $\exp[-\sigma_{y,z}/(\varepsilon + j\omega_0)t^{\tau-1}]$ de (3.37) é substituído por $\exp[-\sigma_{max}/(\varepsilon_0 + j\omega_0)t^{\tau-1}]$ nas regiões dentro das PMLs. Desta forma, este termo passa a ser dependente apenas do tempo $(t^{\tau-1})$ e (3.37) pode ser reescrito como [37-39]:

$$\psi_{y,z_{i}}^{\tau} = \varphi_{y,z_{i}}^{\tau} O_{y,z} + \psi_{y,z_{i}}^{\tau-1}$$
(3.49a)

$$\varphi_{y,z_i}^{\tau} = u_i^{\tau} \exp\left[-\left(\sigma_{\max}/\varepsilon_0 + j\omega_0\right)t^{\tau-1}\right]$$
(3.49b)

$$O_{y,z_i} = \frac{\sigma_{y,z}}{\sigma_{y,z} + j\omega_0/\varepsilon} \{ \exp[-(\sigma_s/\varepsilon + j\omega_0)\Delta t] - 1 \}$$
(3.49c)

Conforme mencionado, fora das regiões das PMLs, a equação (3.21) reduz-se à equação de onda vetorial original. Nesta situação, (3.37) deve ser igual a zero. Portanto, as condutividades $\sigma_y \in \sigma_z$ devem ser nulas nestas regiões.

O sistema matricial assume a seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} (1+j\omega_{0}\Delta t)[M] + \frac{c^{2}\Delta t[M]_{\sigma}}{2} \end{bmatrix} \{ u^{\tau+1} \} = [(2+\omega_{0}^{2}\Delta t^{2})[M] - j\omega_{0}c^{2}\Delta t^{2}[M]_{\sigma} - c^{2}\Delta t^{2}[K]] \{ u^{\tau} \} + \\ \begin{bmatrix} (-1+j\omega_{0}\Delta t)[M] + \frac{c^{2}\Delta t[M]_{\sigma}}{2} \end{bmatrix} \{ u^{\tau-1} \} - c^{2}\Delta t^{2} \{ [K_{\sigma}]_{y} \{ \varphi_{y}^{\tau} \} + [K_{\sigma}]_{z} \{ \varphi_{z}^{\tau} \} \}$$
(3.50)

onde

$$\left[K_{o}\right]_{y,ij}^{e} = \iint_{\Omega e} O_{y,ij} p\left[\nabla \times \mathbf{N}_{i}\right] \cdot \left[\nabla \times \left(\hat{y} \cdot \mathbf{N}_{j}\right)\hat{y}\right] d\Omega$$
(3.51)

$$\left[K_{o}\right]_{z,ij}^{e} = \iint_{\Omega e} O_{z,ij} p\left[\nabla \times \mathbf{N}_{i}\right] \cdot \left[\nabla \times \left(\hat{z} \cdot \mathbf{N}_{j}\right)\hat{z}\right] d\Omega$$
(3.52)

Em (3.50), as matrizes $[K_o]_{y,z}$ são dependentes apenas da discretização espacial e não da temporal, sendo necessário montá-las apenas uma vez e não a cada passo temporal como anteriormente, sendo que o único vetor { φ^r } é atualizado a cada passo temporal. Fora das regiões das PMLs, a equação (3.50) resume-se à (3.43).

3.4 – Numeração Global dos Elementos Triangulares de Arestas Ortogonais

A numeração utilizada pelos elementos de aresta ortogonais se difere em relação aos elementos lineares nodais. Das Figs. 2.5(a) e 3.1, pode-se verificar que, nos elementos nodais lineares, os nós estão localizados nos vértices do triângulo, enquanto que, nos elementos de arestas ortogonais, os pontos utilizados na integração numérica estão localizados nos centros de cada aresta. Nos elementos nodais, um nó pode compartilhar

dois ou mais elementos e, nos elementos de aresta, cada aresta será comum somente a dois elementos. Os programas comerciais, geradores de malha, não fornecem a numeração para os elementos de arestas ortogonais, sendo necessário construir uma rotina que converterá a numeração dos elementos nodais para os de arestas ortogonais, que foi aqui implementada. Também, é necessária uma rotina que, além de realizar esta conversão, introduz a numeração para as funções auxiliares.

Para melhor compreender a formação da numeração global dos elementos de arestas ortogonais, considere o algoritmo mostrado na Fig. 3.5 para simulações utilizando as funções de base de arestas convencionais. O gerador de malhas utilizado foi o programa computacional GiD, desenvolvido pela *International Center for Numerical Method in Engineering*, sendo utilizada a discretização por elementos lineares nodais. O conversor de numeração tem por função transformar a numeração nodal para a numeração para elementos de arestas. Conforme visto no Capítulo 2, as matrizes na discretização por elementos finitos são matrizes esparsas. A função da rotina de esparsidade é definir a esparsidade das matrizes em função da numeração dos elementos e nós. Em seguida, as matrizes elementares e, depois, as globais são montadas e é definida a condição de contorno, anulando os campos tangenciais nos limites da janela computacional. Finalmente, o sistema matricial de equações é resolvido, por exemplo, através de métodos diretos ou interativos.

Este mesmo algoritmo pode ser usado para representar uma simulação por elementos finitos utilizando as funções de base de arestas ortogonais. A diferença básica está na introdução das funções auxiliares, que afetará a numeração das arestas, a formação das matrizes elementares e a solução do sistema de matrizes. Para descrever a numeração em uma malha discretizada por elementos triangulares ortogonais, considere os dois elementos representados na Fig. 3.6.



Fig. 3.5 – Fluxograma do método da envoltória utilizando as funções de base de arestas ortogonais.



Fig. 3.6 – Exemplo de elementos triangulares ortogonais.

No exemplo da página anterior, em que os elementos ainda estão desacoplados, pode-se notar que cada nó possui uma função tangencial, \mathbf{Z}_i , e outra normal, \mathbf{B}_i . A numeração para cada função de base adotada começa sempre pelas bases \mathbf{Z}_i , no sentido anti-horário. Após numerar as bases \mathbf{Z}_i , enumeram-se as bases \mathbf{B}_i , também no sentido anti-horário. Assim, para o elemento 1, por exemplo, a numeração designada de 1 a 3 refere-se às bases \mathbf{Z}_i e a numeração designada de 4 a 6 refere-se às bases \mathbf{B}_i . Na formação da malha, somente as funções \mathbf{Z}_i pertencentes a uma aresta comum a dois elementos (funções 3 e 8 da Fig. 3.6) são acopladas entre si. As funções \mathbf{B}_i destas arestas são deixadas livres, reforçando a condição de descontinuidade. A Fig. 3.7 mostra a malha formada a partir do acoplamento dos elementos mostrados na Fig. 3.6. Pode-se observar que as funções \mathbf{Z}_3^1 e \mathbf{Z}_8^2 da Fig. 3.6 são acopladas, formando a função \mathbf{Z}_3 comum aos dois elementos da Fig. 3.7. Outro ponto a ser observado é a orientação destas duas funções. Na Fig. 3.6, os vetores resultantes destas funções possuem sentidos opostos, sendo necessária a inversão dos vetores resultantes de uma das funções \mathbf{Z}_i , que neste caso foram os vetores associados à função \mathbf{Z}_8^2 .



Fig. 3.7 – Exemplo de uma malha formada por elementos triangulares ortogonais.

Em função dos conjuntos Z_i e B_i e da numeração adotada, nas matrizes elementares serão realizadas operações de produto interno das funções de base e de produto interno do rotacional das funções de base do tipo Z_i e Z_i ; Z_i e B_i ; B_i e Z_i e B_i e B_i , de tal forma que as matrizes elementares sejam matrizes quadradas. Para exemplificar este procedimento, a Fig. 3.8 mostra a formação de uma matriz elementar.

$\begin{bmatrix} \mathbf{Z}_1^e, \mathbf{Z}_1^e \end{bmatrix}$	$\mathbf{Z}_1^e, \mathbf{Z}_2^e$	$\mathbf{Z}_1^e, \mathbf{Z}_3^e$	$\mathbf{Z}_1^e, \mathbf{B}_1^e$	$\mathbf{Z}_1^e, \mathbf{B}_2^e$	$\mathbf{Z}_1^e, \mathbf{B}_3^e$
$\mathbf{Z}_{2}^{e}, \mathbf{Z}_{1}^{e}$	$\mathbf{Z}_2^e, \mathbf{Z}_2^e$	$\mathbf{Z}_2^e, \mathbf{Z}_3^e$	$\mathbf{Z}_2^e, \mathbf{B}_1^e$	$\mathbf{Z}_2^e, \mathbf{B}_2^e$	$\mathbf{Z}_2^e, \mathbf{B}_3^e$
$\mathbf{Z}_{3}^{e}, \mathbf{Z}_{1}^{e}$	$\mathbf{Z}_3^e, \mathbf{Z}_2^e$	$\mathbf{Z}_3^e, \mathbf{Z}_3^e$	$\mathbf{Z}_3^e, \mathbf{B}_1^e$	$\mathbf{Z}_3^e, \mathbf{B}_2^e$	$\mathbf{Z}_3^e, \mathbf{B}_3^e$
$\mathbf{B}_1^e, \mathbf{Z}_1^e$	$\mathbf{B}_1^e, \mathbf{Z}_2^e$	$\mathbf{B}_1^e, \mathbf{Z}_3^e$	$\mathbf{B}_1^e, \mathbf{B}_1^e$	$\mathbf{B}_1^e, \mathbf{B}_2^e$	$\mathbf{B}_1^e, \mathbf{B}_3^e$
$\mathbf{B}_{2}^{e},\mathbf{Z}_{1}^{e}$	$\mathbf{B}_2^e, \mathbf{Z}_2^e$	$\mathbf{B}_{2}^{e},\mathbf{Z}_{3}^{e}$	$\mathbf{B}_{2}^{e},\mathbf{B}_{1}^{e}$	$\mathbf{B}_2^e, \mathbf{B}_2^e$	$\mathbf{B}_2^e, \mathbf{B}_3^e$
$\mathbf{B}_{3}^{e}, \mathbf{Z}_{1}^{e}$	$\mathbf{B}_3^e, \mathbf{Z}_2^e$	$\mathbf{B}_3^e, \mathbf{Z}_3^e$	${f B}_{3}^{e}, {f B}_{1}^{e}$	${f B}_{3}^{e}, {f B}_{2}^{e}$	${f B}_{3}^{e}, {f B}_{3}^{e}$

Fig. 3.8 – Matriz elementar formada a partir das funções de base de arestas ortogonais.

3.5 – Resultados Numéricos

Para a validação da formulação apresentada, alguns exemplos bem conhecidos na literatura foram utilizados. Nestes exemplos, um pulso inicial foi aplicado na entrada do guia de onda e, através da reflexão ou transmissão, observaram-se as características de propagação da estrutura sob análise. O primeiro exemplo considera a propagação de um pulso no modo fundamental TE em um guia de onda óptico simples. O propósito deste exemplo é avaliar o desempenho das formulações para as PMLs. A Fig. 3.9 mostra o guia de onda utilizado. Este guia de onda foi contornado por camadas de PMLs com espessura de 1 μ m. O pulso inicial é aplicado a 4 μ m de distância do início do guia de ondas e o sinal incidente e refletido é observado a 27 μ m do início do guia de onda. A máxima condutância foi 10⁴ *S/m* e o comprimento de onda central foi de 1,5 μ m. A malha utilizada para a discretização do guia de ondas possui 18.452 elementos triangulares, gerando 83.273 variáveis. O intervalo de tempo total da simulação foi de 300 fs. Para garantir a estabilidade, adotou-se um passo temporal de 0,08 fs.

O pulso inicial assumido possui perfil longitudinal Gaussiano e perfil transversal correspondente ao do modo fundamental TE. O perfil transversal é obtido realizando-se a análise de autovalores e autovetores dos modos propagantes no guia de onda em questão através da formulação descrita no Apêndice C. Para o guia planar apresentado, as componentes da envoltória dos campos elétrico e magnético são e_x , h_y , h_z [90]. Como a componente e_x é perpendicular às arestas dos elementos da malha, somente as componentes h_y e h_z são analisadas, quando o modo TE é considerado. Quando o modo TM é analisado,

as componentes analisadas são $e_y e e_z$. Para t = 0, as componentes $h_y e h_z$ podem ser escritas como:

$$h_{y}(y,z,0) = h_{0y}(y) \exp\left[-(z-z_{0}/W_{0})^{2} - jk_{z}(z-z_{0})\right]$$
(3.53)

$$h_{z}(y, z, 0) = h_{0z}(y) \exp\left[-(z - z_{0}/W_{0})^{2} - jk_{z}(z - z_{0})\right]$$
(3.54)

onde $h_{0,y,z}(y,z)$ corresponde ao modo fundamental (perfil transversal), W_0 é a largura do pulso na direção *z*, *z*₀ é a posição central do pulso inicial e k_z é a constante de propagação.



Fig. 3.9 – Guia de onda óptico utilizado na avaliação do desempenho da absorção do sinal pelas PMLs.

A propagação da envoltória complexa da componente h_y pode ser visualizada na Fig. 3.10, que mostra o módulo da envoltória desta componente nos instantes de 50, 70, 100, 130 160 fs, 180 fs, 200 fs, 220 fs e 10 ps, respectivamente, na qual pode-se observar o momento em que o pulso alcança o final do guia de onda e é absorvido pela camada de PML. A simulação da propagação de h_y no instante de 10 ps foi obtida utilizando (3.50). Através desta figura, é possível observar que não houve instabilidade após um longo período de simulação. Analisando-se a propagação do sinal óptico no ponto de referência, é possível observar a propagação dos pulsos incidente e refletido. A Fig. 3.11 mostra (*a*) a envoltória complexa da componente h_y do sinal óptico, (*b*) o módulo da envoltória complexa desta componente e (*c*) o mesmo módulo demonstrado em (*b*), porém considerando um intervalo de simulação de 20 ps. As Figs. 3.11 (*a*) e (*b*) foram obtidas utilizando-se (3.43) e a Fig. 3.11 (*c*) foi obtida utilizando-se (3.50). Através da Fig. 3.11 (*c*) é possível observar que não houve nenhuma instabilidade após um longo período de simulação. Nota-se que, após um determinado instante, o pulso inicial alcança o ponto de referência, conforme indicado na Fig. 3.11 (*a*). O pulso continua a se propagar até atingir a camada de PML, no final do guia de onda. Neste momento, a maior parte do sinal óptico é absorvida por esta camada. Porém, uma pequena parte é refletida de volta para o início do guia de ondas, passando novamente pelo ponto de referência, que também pode ser visto na Fig. 3.11.



Fig. 3.10 – Propagação da envoltória complexa da componente h_y *no guia de onda óptico nos instantes de 50, 70, 100, 130, 160 fs, 180 fs, 200 fs, 220 fs e 10 ps.*



Fig. 3.11 – (a) Envoltória complexa h_y observada no ponto de referência, (b) módulo de h_y .



Fig. 3.11 – (c) Módulo de h_v considerando um intervalo de simulação de 20 ps.

Para avaliar o desempenho da absorção dos campos pelas PMLs em relação à formulação escalar apresentada em [33], analisaram-se as distribuições espectrais da refletividade do sinal óptico obtidas por meio da formulação completa de (3.44) e simplificada de (3.51), comparando-as àquela obtida pela formulação escalar apresentada em [33]. Para se obter a distribuição espectral, realizou-se a FFT dos sinais incidente e refletido apresentados na Fig. 3.10 (a). A Fig. 3.12 mostra a boa concordância para os resultados obtidos pelos três métodos, em relação à absorção do sinal, considerando os comprimentos de onda acima de 1,3 µm. Abaixo deste comprimento de onda, um comportamento oscilatório foi observado. Em particular, os resultados apresentados pelas formulações apresentadas aqui possuem uma amplitude de oscilação menor que a apresentada pela formulação escalar. Em ambas formulações, para se obter uma absorção maior dos campos eletromagnéticos, deve-se aumentar a espessura da camada PML. Também, é importante ressaltar que o tempo de processamento foi de 1.576 s, quando (3.44) foi utilizada, e cai para 645 s quando a formulação simplificada de (3.51) foi empregada. Os resultados seguintes foram obtidos utilizando (3.51). Um computador Pentium IV-1,7 GHz / 512 MB, Windows XP foi utilizado para as simulações.



Fig. 3.12 – Distribuição espectral da refletividade das PMLs do guia de ondas óptico apresentado na Fig. 3.9.

O próximo exemplo trata da análise do coeficiente de reflexão de uma rede dielétrica refletora (DFB - *Distributed Feedback Reflector*) para os modos fundamentais TE e TM. Este exemplo é bem conhecido na literatura e usado para a convalidação de várias formulações que fazem uso da equação de onda escalar no domínio do tempo [33-34, 40]. Aqui, pela primeira vez, utilizou-se da equação de onda vetorial no domínio do tempo, além da formulação simplificada de (3.51). A Fig. 3.13 mostra a rede dielétrica refletora.



Fig. 3.13 – Rede dielétrica refletora.

Para este caso, o comprimento de onda central foi de 1,5 μ m para o modo fundamental TE e 1,35 µm para o modo fundamental TM, com largura do pulso na direção z de 2 μ m. A malha utilizada possui 18.324 elementos triangulares. O intervalo de tempo total para a simulação foi de 220 fs. Quando a formulação ortogonal é usada, esta malha gera 82.697 variáveis. Se a formulação escalar [33] for empregada, o número de variáveis é de 37.127 pontos nodais para as funções de base nodais quadráticas. O tempo de processamento, com a formulação desenvolvida, foi de 372 s. Para garantir a estabilidade, adotou-se um passo temporal de 0,08 fs. Para a formulação escalar [33], o tempo de processamento foi de 2.520 s (passo temporal de 1 fs). O passo temporal para a formulação escalar é maior que ao do método aqui proposto por se tratar de um esquema incondicionalmente estável, sendo limitado apenas pela precisão dos resultados obtidos. A mesma observação vale para os próximos exemplos. Embora o número de variáveis gerado pela formulação com as funções de base de arestas ortogonais seja maior que o número de variáveis obtido com a aplicação da formulação escalar, além do passo temporal menor, observou-se que, para este caso, a simulação que usa as funções de base ortogonais foi 6,77 vezes mais rápida que a da formulação escalar.

As Fig. 3.14 e 3.15 mostram a propagação de envoltória complexa e do módulo da envoltória da componente h_y , para o modo fundamental TE, e e_y , para o modo fundamental TM, respectivamente, no ponto de referência. Através destas figuras, pode-se observar claramente o sinal incidente e o sinal refletido pela rede dielétrica refletora. Fazendo-se a FFT dos sinais incidente e refletido, obtém-se os coeficientes de reflexão para os modos fundamentais TE e TM. A Fig. 3.16 mostra os respectivos coeficientes de reflexão obtidos com a formulação ortogonal e a formulação escalar. Uma boa concordância entre os resultados obtidos pelas duas formulações pode ser observada.



(a)



Fig. 3.14 – Propagação da (a) envoltória complexa e (b) do módulo da envoltória complexa da componente h_y *para a rede dielétrica refletora no modo fundamental TE.*




Fig. 3.15 – *Propagação da (a) envoltória complexa e (b) do módulo da envoltória complexa da componente e*_v para a rede dielétrica refletora no modo fundamental TM.



Fig. 3.16 – Coeficiente de reflexão da rede dielétrica refletora para (a) o modo fundamental TE e (b) para o modo fundamental TM.

Cristais fotônicos têm inspirado grande interesse em fotônica devido ao seu potencial no guiamento da luz em um guia de onda óptico [91-102]. Cristais fotônicos são estruturas periódicas que obedecem a uma determinada simetria. Dependendo da simetria utilizada, formam-se regiões de freqüências com bandas proibidas, onde o sinal óptico não consegue propagar. Um meio de construir um guia de onda nesta estrutura é a introdução de um defeito na periodicidade, criando um modo de propagação para o sinal óptico dentro da banda proibida [91-93]. Diversas estruturas baseadas em cristais fotônicos, tais como guias de onda, cavidades ressonantes, filtros ópticos, chaves totalmente ópticas e lasers, entre outros, estão sendo amplamente estudadas. Um passo fundamental no desenvolvimento de um componente baseado em cristais fotônicos é a simulação computacional.

O grande problema em uma simulação no domínio do tempo envolvendo cristais fotônicos é o elevado número de variáveis envolvido. Conseqüentemente, o esforço computacional torna-se elevado e, em muitos casos, impossibilita as simulações em um computador convencional. Com o uso das funções de base de arestas ortogonais, este esforço computacional é reduzido consideravelmente. A fim de demonstrar o uso da formulação proposta aqui em análises envolvendo cristais fotônicos, quatro exemplos serão discutidos. Para estes exemplos, utilizou-se uma simetria em duas dimensões composta por colunas dielétricas com índice de refração de n = 3,4 inseridas em ar, conforme mostrado na Fig. 3.17, criando uma região de banda proibida apenas para os modos TE na faixa de freqüência entre $0,32 \times 2\pi c/a$ e $0,443 \times 2\pi c/a$ [33, 103], sendo *a* a periodicidade da simetria.



Fig. 3.17 – Estrutura de cristais fotônicos em duas dimensões composta por colunas dielétricas em ar, com direção de propagação no plano y-z.

O pulso inicial assumido possui perfil longitudinal Gaussiano e perfil transversal correspondente ao do modo fundamental TE, sendo este periódico na direção longitudinal. As envoltórias complexas das componentes h_y e h_z do modo fundamental TE podem ser escritas para t = 0 como:

$$h_{y}(y,z,0) = h_{0y}(y,z) \exp\left[-(z-z_{0}/W_{0})^{2} - jk_{z}(z-z_{0})\right]$$
(3.55)

$$h_{z}(y,z,0) = h_{0z}(y,z) \exp\left[-(z-z_{0}/W_{0})^{2} - jk_{z}(z-z_{0})\right], \qquad (3.56)$$

onde $h_{0,y,z}(y,z)$ é uma função periódica correspondente ao modo fundamental de cristais fotônicos. A título de ilustração, a Fig. 3.18 mostra o módulo das componentes e_x , $h_y e h_z$ do modo TE para um guia de onda que utiliza a simetria mostrada na Fig. 3.17, obtidas com o uso da formulação de análise modal demonstrada no Apêndice C. Esta análise utilizou uma estrutura com 11 colunas na direção y e o comprimento de 0,58 µm na direção z. Para formar o guia de ondas, a sexta coluna foi retirada, introduzindo um modo de guiamento dentro da região da banda proibida.



Fig. 3.18 – *Componentes* e_x , h_y e h_z do modo *TE* para um guia de onda óptico feito a partir de cristais fotônicos com simetria apresentada na Fig. 3.17.

O primeiro exemplo considerando cristais fotônicos é um guia de ondas com uma curva de 90°. A Fig. 3.19 mostra este guia de onda. A malha utilizada na discretização do guia de ondas possui 78.753 elementos triangulares, gerando 354.688 variáveis. O passo temporal Δt foi de 0,05 fs e o intervalo de tempo total de 300 fs. O tempo de processamento foi de 1.951 s. Esta mesma simulação pode ser encontrada na literatura [33], porém o tempo

de processamento foi de 106 s para cada passo temporal de $\Delta t = 1$ fs. Devido à largura da banda passante apresentada pelo guia de ondas [103], foi necessário simular as características de propagação duas vezes, a primeira no comprimento de onda de $\lambda_0 = 1,45$ µm e a segunda no comprimento de onda de $\lambda_0 = 1,65$ µm. A Fig. 3.20 mostra a distribuição espectral de potência do sinal refletido e transmitido conforme demonstrado em [33] e pelo método aqui proposto. Esta figura é formada pela resposta em freqüência gerada pelas simulações nos dois comprimentos de onda.

Como pode ser visto, este guia de ondas apresenta maior transmissão para freqüências normalizadas abaixo de $0,4 \times 2\pi c/a$. Acima desta freqüência, a reflexão tende a aumentar. Porém, pode-se verificar facilmente que não há perda de guiamento do sinal óptico durante a sua passagem pela curvatura. A Fig. 3.21 mostra a propagação da envoltória complexa h_y e h_z nos instantes de 100, 130 e 160 fs. Nesta Fig., observa-se o exato momento em que o pulso óptico atinge a curvatura de 90° do guia de onda. Neste instante, a maior parte da onda é direcionada para a porta 2 do guia de onda. Apenas uma pequena parte da onda é refletida de volta para a porta 1. Contudo, verifica-se que não houve espalhamento do sinal óptico ao atingir a curvatura, comprovando o excelente guiamento do sinal óptico apresentado por este tipo de guia de ondas.

	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~	~
	ž	ž	ž	ž	č	ž	ĭ	ž	ž	č	ž	ž	ž	ž	č	ž	ž	ž	ž	č	ž	ž	ž
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
_	0	0	0	ο	ο	0	0	ο	0	0	ο	0	ο	0	ο	0	0	ο	ο	0	ο	0	0
Porta 1																			0	0	0	o	0
	0	0	0	0	o	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	o	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	٥	0	0	0	0		0	٥	0	0	٥
	~	~	~	~	~	~		~	~	~	~	~	~	~	~	~	~		~	~	~	~	~
	~	~	2	ž	ž	ž	ž	ž	ž	ž	ž	~	2	ž	ž	ž	ž		ž	ž	č	~	2
	Ŷ	•	9	0	0	0	0	0	0	0	0	9	0	0	0	0	0		0	0	0	9	9
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0
													0	0	0	0	0		0	0	0	0	0
													ο	0	0	0	0		ο	0	0	0	0
													0	0	0	0	0		ο	٥	0	0	0
													0	0	ο	ο	ο		ο	٥	0	0	0
													٥	0	0	0	0		0	٥	0	0	٥
													ő	ò	ò	õ	ő		õ	ò	ő	0	0
													~	~	~	~	õ		~	~	~	~	~
													~	č	~	č	~		č	~	~	~	2
													0	0	0	0	0		0	0	0	0	0
													Q	¢	o	¢	Q		Q	o	Q	Q	Q
													0	0	0	0	0		0	٥	0	0	0
																_				-			
																р	0	rt	a	2			
																*	<u> </u>	- L	u	_			

Fig. 3.19 – Guia de ondas óptico com uma curva de 90° .



(a)



(b)

Fig. 3.20 – Distribuição espectral de potência do sinal refletido e transmitido de um guia de ondas, com uma curva de 90°, feito a partir de cristais fotônicos, (a) conforme demonstrado em [33] e (b) obtida pelo método proposto.



Fig. 3.21 – Propagação da envoltória das componentes h_y e h_z para o guia de ondas da Fig. 3.19, nos instantes de 100, 130 e 160 fs.

O próximo exemplo, considerando os cristais fotônicos, é um divisor de potência em forma de "T". A Fig. 3.22 mostra este divisor. Esta mesma estrutura é encontrada em [33]. A malha para discretizar esta estrutura possui 100.628 elementos triangulares, gerando 453.428 variáveis. Também, para este exemplo, foi necessário simular as características de propagação duas vezes, nos comprimentos de onda de $\lambda_0 = 1.45 \ \mu m$ e $\lambda_0 = 1.65 \ \mu m$, respectivamente. Para garantir a estabilidade, o passo temporal foi de 0,05 fs e o intervalo de tempo total de simulação foi de 650 fs. O tempo de processamento foi de 5.493 s. A Fig. 3.23 mostra a distribuição espectral de potência do sinal refletido e transmitido para o divisor de potência em "T", conforme demonstrado em [33] e pelo método aqui proposto. Como pode ser visto, esta estrutura apresenta uma alta transmissão (aproximadamente, 46% para cada saída) para as freqüências por volta de $0.4 \times 2\pi c/a$. Porém, a reflexão da luz tende a aumentar quando a freqüência do sinal óptico se afasta deste valor. A Fig. 3.24 mostra a propagação da envoltória complexa $h_v e h_z$ nos instantes 100, 150 e 200 fs. Nesta figura, pode-se observar toda a evolução temporal do sinal óptico dentro do divisor de potência. Como no exemplo anterior, pode-se verificar que não houve espalhamento da onda na estrutura, demonstrando o excelente guiamento do sinal óptico. Assim, a maior parte da onda é direcionada para as portas 2 e 3 do divisor e apenas uma pequena parcela do sinal é refletida de volta para a porta 1.



Fig. 3.22 – Divisor de potência em "T".







(b)

Fig. 3.23 – Distribuição espectral de potência do sinal refletido e transmitido para o divisor de potência em "T", feito a partir de cristais fotônicos, (a) conforme demonstrado em [33] e (b) obtida pelo método proposto.



150 fs



200 fs



Fig. 3.24 – Propagação da envoltória das componentes h_y e h_z para o divisor de potência em "T" da Fig. 3.22, nos instantes de 100, 150 e 200 fs.

Os dois últimos exemplos, a seguir, demonstram a aplicação dos cristais fotônicos em cavidades ressonantes. Para a primeira cavidade analisada, utilizou-se a estrutura mostrada na Fig. 3.25. Esta mesma estrutura é encontrada em [33]. Para discretizar esta malha, utilizou-se uma malha com 66.038 elementos triangulares, resultando em 297.750 variáveis. O passo temporal foi de 0,05 fs e o intervalo total de simulação de 20 ps. A Fig. 3.26 mostra a distribuição espectral de potência para esta cavidade, conforme demonstrado em [33] e pelo método aqui proposto. Este resultado mostra que esta estrutura age como um filtro passa-faixa, com freqüência de ressonância de $0.389 \times 2\pi c/a$, banda passante de 2,2 nm e perda de inserção praticamente nula. Para a segunda cavidade, acrescentou-se uma coluna dielétrica à esquerda e à direita, conforme mostrado na Fig. 3.27. Esta cavidade corresponde à uma variação da cavidade do exemplo anterior e foi implementa somente neste trabalho. A malha utilizada possui 66.252 elementos triangulares e gerou 298.713 variáveis. O intervalo de tempo total foi de 20 ps. A Fig. 3.28 mostra a distribuição espectral de potência para esta cavidade. Pode-se verificar que não houve deslocamento na freqüência central de ressonância, porém a banda passante fica em torno de 0,17 nm e a perda de inserção aumenta para 2,2 dB, aproximadamente.

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	۰	٥	٥	0	٥	0	٥	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0
0	۰	•	۰	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	•	0	0	0	•	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
													0	0		0	0														
0	0	•	0	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	•	0	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	•	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	•	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	•	0	۰	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	•	٥	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	•	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	٥	0	0	٥	0	0	0	0	0	0
0	0	0	٥	0	0	•	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	٥	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Fig. 3.25 – Microcavidade ressonante feita a partir de cristais fotônicos.



Fig. 3.26 – Característica de transmissão para a microcavidade ressonante da Fig. 3.25, (a) conforme demonstrado em [33] e (b) obtida pelo método proposto.



Fig. 3.27 – Microcavidade ressonante feita a partir de cristais fotônicos.



Fig. 3.28 – Características de transmissão para a microcavidade ressonante da Fig. 3.27.

3.6 – Conclusão

Este capítulo apresentou, pela primeira vez, o uso das funções de base de arestas ortogonais no estudo da propagação da envoltória complexa dos campos elétrico e magnético, no domínio do tempo, para problemas em duas dimensões. Com o uso destas funções ortogonais, obtiveram-se matrizes massas diagonais como resultado da formulação desenvolvida. Associando-se estas funções de base a esquemas explícitos, a solução final do sistema matricial é obtida pela simples inversão de matrizes diagonais. Uma outra vantagem do método desenvolvido é o uso da equação de onda vetorial, ao invés da equação de onda escalar, permitindo análise mais completa da propagação dos campos eletromagnéticos.

Baseado no trabalho original de White, as funções de base de arestas ortogonais em duas dimensões foram obtidas a partir das funções de base de arestas originais de um elemento triangular, preservando suas características. Além da demonstração original de White, este capítulo também demonstrou uma nova interpretação das funções de base de arestas ortogonais. Com esta nova interpretação, foi possível formular estas funções em duas dimensões, sem o uso da integração numérica para o cálculo dos coeficientes de ortogonalização e gerar os requisitos necessários para desenvolver as funções de base de arestas ortogonais em três dimensões, que será apresentada no Capítulo 4 deste trabalho.

O objetivo principal deste capítulo foi o uso das novas funções de base para as análises no domínio do tempo de estruturas fotônicas. O método de análise escolhido para este intento foi o método da envoltória. Com o uso das funções de base de arestas ortogonais, forçou-se o uso da equação de onda vetorial ao invés da equação de onda escalar, que é normalmente utilizada nas análises em fotônica, tornando-se mais uma vantagem da formulação apresentada. Diversas estruturas ópticas foram utilizadas para a convalidação do método, principalmente componentes baseados em cristais fotônicos, que envolvem um grande número de variáveis. Desta forma, foi possível observar a excelente precisão nas soluções obtidas e o alto desempenho no processamento de dados do método desenvolvido.

Capítulo 4

Funções de Base de Arestas Ortogonais em Três Dimensões

4.1 – Introdução

O capítulo anterior demonstrou o uso das funções de base de arestas ortogonais 2D em esquemas de propagação da envoltória complexa no domínio do tempo. Associando-se estas funções a um esquema explícito, há uma grande redução no esforço computacional gerado pelo processamento de dados, tornando-se possível análises em grandes janelas computacionais. Porém, as formulações em uma dimensão ou duas dimensões são aproximações adotadas quando se deseja justamente minimizar o esforço computacional. Em um componente real, as três dimensões x, y, e z estarão sempre presentes. Quando a representação ou aproximação em uma ou duas dimensões não é possível ou satisfatória, o tratamento em três dimensões torna-se necessário.

Diferentes técnicas são usadas na formulação 3D. O método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo (FDTD) é o mais popular, pois apresenta uma boa eficiência computacional. Com o método dos Elementos Finitos no Domínio do Tempo (FETD), a flexibilidade relativa à geometria aumenta, e, com o uso das funções da base de aresta em elementos tetraédricos, torna-se possível a modelagem de estruturas mais complexas e irregulares, uma vez que se utiliza a equação de onda vetorial ao invés da equação escalar. Porém, o grande número de variáveis para a modelagem 3D-FETD resulta em um esforço computacional de grandes proporções, pois há a necessidade da inversão do sistema matricial de equações a cada passo temporal, tornando o método pouco atrativo, neste caso.

A técnica mais difundida para minimizar o alto esforço computacional gerado pelo FETD é o método da diagonalização [17, 30, 40-41]. Nesta aproximação, há uma remontagem da matriz massa do sistema, tornando-a uma matriz diagonal. Infelizmente, esta técnica freqüentemente introduz erros significativos na solução da equação de onda, levando a um sistema completamente instável ou a resultados não coerentes. Para se obter matrizes diagonais sem o uso do método de diagonalização, novos conjuntos de funções de base ortogonais em 2D, baseados nos elementos de aresta de Whitney, e 3D [104], baseados nos elementos de faces de Whitney, foram desenvolvidos. Contudo, as funções de base de faces originais possuem rotacionais nulos, o que limita a sua aplicação à equação de onda vetorial, fazendo com que as funções de base de arestas passem a ser a escolha natural para esta aplicação.

Este capítulo apresentará as funções de base vetoriais ortogonais em três dimensões para a solução da equação de onda vetorial por elementos finitos [52-54]. Tais funções são baseadas nos elementos de aresta de Whitney e preservam as mesmas características que as funções de base convencionais. Com o uso destas funções de base, obtêm-se, naturalmente, matrizes diagonais, eliminando-se por completo a resolução, a cada passo temporal, do sistema linear de equações resultante de métodos numéricos convencionais. A primeira parte deste capítulo irá apresentar as novas funções de base ortogonais. A segunda parte demonstrará a aplicação das funções de base ortogonais na discretização da equação de onda vetorial 3D. A terceira parte irá apresentar o algoritmo utilizado nas simulações e a última parte demonstrará os resultados obtidos.

4.2 - Funções de Base de Arestas Ortogonais em Três Dimensões

O processo de ortogonalização das funções de base de aresta para os elementos tetraédricos é semelhante ao processo de ortogonalização dos elementos triangulares. Primeiramente, deve-se observar a distribuição de cada função de base na aresta onde está associada e nas demais arestas. Para isto, considere o elemento tetraédrico da Fig. 4.1.



Fig. 4.1 – Distribuição das funções de base de aresta em um elemento tetraédrico.

A Tabela 4.1 mostra a distribuição das funções de base nas arestas do tetraedro. Cada função terá a componente normal e tangencial somente na aresta onde é associada e, nas demais arestas, somente a componente normal. Na aresta oposta à aresta onde a função de base está associada, o valor da função será nulo. Observando esta tabela e aplicando o processo de ortogonalização, Apêndice A, à função de base **W** de um tetraedro formado pelos nós 1, 2, 3 e 4 obtêm-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{12}^{e} &= \mathbf{W}_{12}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{12}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{13}^{e} dV} \mathbf{B}_{13}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{14}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{23}^{e} dV} \mathbf{B}_{13}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{23}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{23}^{e} dV} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{23}^{e} \cdot \mathbf{B}_{23}^{e} dV} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{12}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1a)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{23}^{e} \cdot \mathbf{B}_{23}^{e} dV} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{13}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1a)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{13}^{e} \cdot \mathbf{B}_{13}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{13}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{13}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\iiint_{V_{e}} \mathbf{W}_{13}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} \cdot \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{43}^{e} - \frac{(4.1a)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{44}^{e} - \frac{(4.1a)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1a)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1a)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1a)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1b)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1b)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{(4.1b)}{\iiint_{V_{e}} \mathbf{B}_{42}^{e} \mathbf{B}_{42}^{e} dV} \mathbf{B}_{42}^{e} d$$

onde

$$\mathbf{B}_{12}^{e} = L_{1}^{e} L_{2}^{e} \hat{n}_{12} \tag{4.2}$$

$$\mathbf{B}_{13}^{e} = L_{1}^{e} L_{3}^{e} \hat{n}_{13} \tag{4.3}$$

$$\mathbf{B}_{14}^{e} = L_{1}^{e} L_{4}^{e} \hat{n}_{14} \tag{4.4}$$

$$\mathbf{B}_{23}^{e} = L_{2}^{e} L_{3}^{e} \hat{n}_{23} \tag{4.5}$$

$$\mathbf{B}_{42}^{e} = L_{4}^{e} L_{2}^{e} \hat{n}_{42} \tag{4.6}$$

$$\mathbf{B}_{34}^{e} = L_{3}^{e} L_{4}^{e} \hat{n}_{34} \tag{4.7}$$

Os vetores \hat{n}_{ij} são vetores normais às arestas do tetraedro e deverão possuir a mesma direção e sentido que a componente normal do vetor gerado pelas funções de base no meio de cada aresta. As funções **Z** são ortogonais entre si conforme a relação:

$$\left\langle \mathbf{N}_{i}^{e} \cdot \mathbf{N}_{j}^{e} \right\rangle = \iiint_{Ve} \mathbf{N}_{i}^{e} \cdot \mathbf{N}_{j}^{e} dV = C \delta_{i,j},$$
(4.8)

onde **N** representa o conjunto completo de funções de base, *C* é uma constante, δ_{ij} é a função delta de Kronecker e *V* é o volume do tetraedro.

Funções/ Aresta	1-2	1-3	1-4	2-3	4-2	3-4
\mathbf{W}_{12}	$(L_1\nabla L_2 - L_2\nabla L_1)l_{12}$	$L_1 \nabla L_2 l_{12}$	$L_1 \nabla L_2 l_{12}$	$-L_2 \nabla L_1 l_{12}$	$-L_2 \nabla L_1 l_{12}$	0
\mathbf{W}_{13}	$L_1 \nabla L_3 l_{13}$	$(L_1\nabla L_3 - L_3\nabla L_1)l_{13}$	$L_1 \nabla L_{31} l_{13}$	$-L_3 \nabla L_1 l_{13}$	0	$-L_3 \nabla L_1 l_{13}$
\mathbf{W}_{14}	$L_1 abla L_4 l_{14}$	$L_1 abla L_4 l_{14}$	$(L_1\nabla L_4 - L_4\nabla L_1)l_{14}$	0	$-L_4 \nabla L_1 l_{14}$	$-L_4 \nabla L_1 l_{14}$
W ₂₃	$L_2 \nabla L_3 l_{23}$	$-L_3 \nabla L_2 l_{23}$	0	$(L_2\nabla L_3 - L_3\nabla L_2)l_{23}$	$L_2 \nabla L_3 l_{23}$	$-L_3 \nabla L_2 l_{23}$
\mathbf{W}_{42}	$-L_2 \nabla L_4 l_{42}$	0	$L_4 \nabla L_2 l_{42}$	$-L_2 \nabla L_4 l_{42}$	$(L_4\nabla L_2 - L_2\nabla L_4)l_{42}$	$L_4 abla L_2 l_{42}$
W ₃₄	0	$L_3 abla L_4 l_{34}$	$-L_4 \nabla L_3 l_{34}$	$L_3 abla L_4 l_{34}$	$-L_4 \nabla L_3 l_{34}$	$(L_3\nabla L_4 - L_4\nabla L_3)l_{34}$

 Tabela. 4.1 – Distribuição das funções de base de arestas no elemento tetraédrico e

Da mesma forma que no caso das funções de base de arestas em duas dimensões, obter funções que respeitem (4.8) e garantam a correta representação dos campos dentro de um elemento tetraédrico é uma tarefa muito difícil. Assim, será utilizada a mesma aproximação do Capítulo 3, onde a integração numérica é calculada, substituindo-se o domínio contínuo por um domínio discreto e ortogonalizando as funções de base apenas nos pontos utilizados na própria integração. O novo produto interno entre as funções de base passa a ser definido como:

$$\left\langle \mathbf{N}_{i}^{e}, \mathbf{N}_{j}^{e} \right\rangle = \sum_{l=1}^{6} \alpha_{l} \mathbf{N}_{i}^{e}(m_{l}) \cdot \mathbf{N}_{j}^{e}(m_{l}) = C \delta_{i,j}, \qquad (4.9)$$

onde m_l são as coordenadas do centro de cada aresta e α_l é escolhida de tal forma a obter a melhor precisão na integração numérica. Substituindo (4.9) em (4.1), obtém-se:

$$\mathbf{Z}_{12}^{e} = \mathbf{W}_{12}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{12}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{13}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{14}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{42}^{e}$$

$$(4.10a)$$

$$\mathbf{Z}_{13}^{e} = \mathbf{W}_{13}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{12}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{13}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{14}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e}$$

$$(4.10b)$$

$$\mathbf{Z}_{14}^{e} = \mathbf{W}_{14}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{12}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{13}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{12}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{14}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e}$$
(4.10c)

$$\mathbf{Z}_{23}^{e} = \mathbf{W}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{12}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{13}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e}$$
(4.10d)

$$\mathbf{Z}_{42}^{e} = \mathbf{W}_{42}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{12}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{14}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{42}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{13}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{34}^{e}, \mathbf{B}_{34}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{34}^{e} - \frac{\left\langle \mathbf{W}_{34}^{e}, \mathbf{W}_{34}^{$$

Observando o comportamento das funções **W**, definidas no Capítulo 2 e na Tabela 4.1, é possível analisar a formação das funções **Z** em (4.10). Será analisada apenas **Z**₁₂ em (4.10a), sendo que o mesmo procedimento é aplicado às demais funções **Z**. O primeiro termo de (4.10a) só terá efeito na aresta 1-2 devido ao termo **B**₁₂ e irá subtrair de **W**₁₂, na coordenada central desta aresta, a sua componente normal, deixando apenas a componente tangencial. O segundo termo agirá na aresta 1-3 e irá retirar a componente normal de **W**₁₂ na coordenada central desta aresta. Porém, como **W**₁₂ só possui componente normal nesta aresta, a função **Z**₁₂ terá valor nulo nesta coordenada. O mesmo comportamento ocorre para as arestas 1-4, 2-3 e 2-4. Para a aresta 3-4, **W**₁₂ possui valor nulo, não sendo necessário o acréscimo de nenhum termo em (4.10a).

Os coeficientes de ortogonalização de (4.10a) podem ser resolvidos numericamente, conforme descrito no Capítulo 3 para as funções de base em duas dimensões. Contudo, estes coeficientes também podem ser resolvidos a partir das propriedades da função Z_{12} descritas acima. Considere o valor da função de base W_{12} nos pontos centrais de cada aresta de um elemento tetraédrico:

$$\mathbf{W}_{12}(m_{13}) = 0.5\nabla L_2 l_{12} \tag{4.11}$$

$$\mathbf{W}_{12}(m_{14}) = 0,5\nabla L_2 l_{12} \tag{4.12}$$

$$\mathbf{W}_{12}(m_{23}) = -0.5\nabla L_1 l_{12} \tag{4.13}$$

$$\mathbf{W}_{12}(m_{42}) = -0.5\nabla L_1 l_{12} \tag{4.14}$$

$$\mathbf{W}_{12}(m_{12}) = (0.5\nabla L_2 - 0.5\nabla L_1)l_{12}$$
(4.15)

Para as coordenadas centrais das arestas 1-3, 1-4, 2-3 e 4-2, onde a função \mathbf{Z}_{12} possui valor nulo e utilizando-se (4.11) – (4.14) em (4.10a), obtêm-se as seguintes relações:

$$-\frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{13}^{e}, \mathbf{B}_{13}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{13}^{e} = -0.5 \nabla L_{2} l_{12}$$
(4.16)

$$-\frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{14}^{e}, \mathbf{B}_{14}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{14}^{e} = -0.5 \nabla L_2 l_{12}$$

$$(4.17)$$

$$-\frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{23}^{e}, \mathbf{B}_{23}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{23}^{e} = 0,5\nabla L_{1}l_{12}$$
(4.18)

$$-\frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{42}^{e}, \mathbf{B}_{42}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{42}^{e} = 0.5 \nabla L_{1} l_{12}$$
(4.19)

Na coordenada central da aresta 1-2, a função W_{12} terá componente tangencial e componente normal, conforme demonstrado em (4.15). Neste ponto, W_{12} pode ser escrito na seguinte forma:

$$\mathbf{W}_{12}(m_{12}) = (0.5\nabla L_2 - 0.5\nabla L_1)l_{12} = \mathbf{W}_{t12}(m_{12}) + \mathbf{W}_{n12}(m_{12})$$
(4.20)

onde $\mathbf{W}_{t12}(m_{12})$ e $\mathbf{W}_{n12}(m_{12})$ são as componentes tangencial e normal de \mathbf{W}_{12} , respectivamente. Como a função $\mathbf{Z}_{12}(m_{12})$ deve possui apenas componente tangencial, pode-se escrever que:

$$-\frac{\left\langle \mathbf{W}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{B}_{12}^{e}, \mathbf{B}_{12}^{e} \right\rangle} \mathbf{B}_{12}^{e} = -\mathbf{W}_{n12}(m_{12})$$
(4.21)

Escrevendo-se a componente normal de W_{12} no ponto m_{12} como:

$$\mathbf{W}_{12}(m_{12}) - \left(\mathbf{W}_{12}(m_{12}) \cdot \hat{t}_{12}\right) \hat{t}_{12}, \qquad (4.22)$$

onde \hat{t}_{12} é um vetor unitário tangente à aresta 1-2 e utilizando-se das relações (4.16), (4.17), (4.18), (4.19) e (4.21) em (4.10a), obtém-se:

$$\mathbf{Z}_{12}^{e} = (L_1 \nabla L_2 - L_2 \nabla L_1 - 2L_1 L_3 \nabla L_2 - 2L_1 L_4 \nabla L_2 + 2L_2 L_3 \nabla L_1 + 2L_2 L_4 \nabla L_1) l_{12} - (4.23a) - 4L_1 L_2 [\mathbf{W}_{12}(m_{12}) - (\mathbf{W}_{12}(m_{12}) \cdot \hat{t}_{12}) \hat{t}_{12}]$$

Sendo que os termos $2L_1L_3$, $2L_1L_4$, $2L_2L_3$ e $2L_2L_4$ resultam em 0,5 no centro das arestas 1-3, 1-4, 2-3 e 2-4, respectivamente, e zero ao longo das demais arestas e o termo $4L_1L_2$ resulta em 1 no centro da aresta 1-2 e zero nas demais arestas. Para as demais funções **Z**, têm-se:

$$\mathbf{Z}_{13}^{e} = (L_{1}\nabla L_{3} - L_{3}\nabla L_{1} - 2L_{1}L_{2}\nabla L_{3} - 2L_{1}L_{4}\nabla L_{3} + 2L_{2}L_{3}\nabla L_{1} + 2L_{3}L_{4}\nabla L_{1})l_{13} - (4.23b)$$

$$- 4L_{1}L_{3}[\mathbf{W}_{13}(m_{13}) - (\mathbf{W}_{13}(m_{13}) \cdot \hat{t}_{13})\hat{t}_{13}]$$

$$\mathbf{Z}_{14}^{e} = (L_{1}\nabla L_{4} - L_{4}\nabla L_{1} - 2L_{1}L_{2}\nabla L_{4} - 2L_{1}L_{3}\nabla L_{4} + 2L_{2}L_{4}\nabla L_{1} + 2L_{3}L_{4}\nabla L_{1})l_{14} - (4.23c)$$

$$- 4L_{1}L_{4}[\mathbf{W}_{14}(m_{14}) - (\mathbf{W}_{14}(m_{14}) \cdot \hat{t}_{14})\hat{t}_{14}]$$

$$\mathbf{Z}_{23}^{e} = (L_{2}\nabla L_{3} - L_{3}\nabla L_{2} - 2L_{1}L_{2}\nabla L_{3} - 2L_{2}L_{4}\nabla L_{3} + 2L_{1}L_{3}\nabla L_{2} + 2L_{3}L_{4}\nabla L_{2})l_{23} - (4.23d) - (4.23d) - (4.23d)$$

$$\mathbf{Z}_{42}^{e} = (L_{4}\nabla L_{2} - L_{2}\nabla L_{4} - 2L_{1}L_{4}\nabla L_{2} - 2L_{3}L_{4}\nabla L_{2} + 2L_{1}L_{2}\nabla L_{4} + 2L_{2}L_{3}\nabla L_{4})l_{42} - (4.23e) - (4.23e$$

$$\mathbf{Z}_{34}^{e} = (L_{3}\nabla L_{4} - L_{4}\nabla L_{3} - 2L_{1}L_{3}\nabla L_{4} - 2L_{2}L_{3}\nabla L_{4} + 2L_{1}L_{4}\nabla L_{3} + 2L_{2}L_{4}\nabla L_{3})l_{34} - 4L_{3}L_{4}[\mathbf{W}_{34}(m_{34}) - (\mathbf{W}_{34}(m_{34}) \cdot \hat{t}_{34})\hat{t}_{34}]$$
(4.23f)

Estas novas funções de base Z continuam preservando a propriedade da continuidade tangencial dos campos nas fronteiras de cada elemento. O módulo da componente tangencial de Z será igual a 1 em toda a extensão da aresta onde ela é definida e zero nas demais. Nas cinco arestas restantes, Z terá valor nulo nas coordenadas centrais de cada aresta e apenas componentes normais fora destas regiões. Desta forma, a condição de ortogonalidade definida em (4.9) é satisfeita. Porém, a componente normal de Z no centro da aresta onde ela é definida é nula, o que não representaria corretamente campos com normais não nulas nestes pontos. Assim, para a correta representação dos campos nas três dimensões, é necessário utilizar dois outros conjuntos de bases, dados por:

$$\mathbf{B}_{ij}^e = L_i L_j \hat{n}_{ij} \tag{4.24a}$$

$$\mathbf{Q}_{ij}^{e} = L_{i}L_{j}(\hat{t}_{ij} \times \hat{n}_{ij}), \qquad (4.24b)$$

onde *i-j* pode ser as arestas 1-2, 1-3, 1-4, 2-3, 4-2 e 3-4. Evidentemente, $\mathbf{Q} \in \mathbf{B}$ são ortogonais entre si. As três funções \mathbf{Z} , $\mathbf{Q} \in \mathbf{B}$ constituem um conjunto completo de funções de bases vetoriais ortogonais em três dimensões baseadas nos elementos de arestas de Whitney. O campo total ou a envoltória complexa da onda dentro de um elemento tetraédrico pode ser representado por [52-54]:

$$\boldsymbol{\phi}^{e}(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{18} u_{i}^{e}(t) \mathbf{N}_{i}^{e}(x, y, z), \qquad (4.25)$$

onde $u_i^e(t)$ são os coeficientes de expansão de um elemento *e*. Para a discretização dos campos ou envoltória complexa dos campos de acordo com (4.25), $\mathbf{N}_i = \mathbf{Z}_i$ para *i* variando de 1 a 6, $\mathbf{N}_i = \mathbf{Q}_i$ para *i* variando de 7 a 12 e $\mathbf{N}_i = \mathbf{B}_i$ para *i* variando de 13 a 18. Levando-se em consideração estas funções de base ortogonais em (4.8) e associando-as a um esquema explícito, a resolução do sistema matricial de equações dá-se através de uma simples inversão de matrizes diagonais e da multiplicação de matrizes.

4.3 - Discretização da Equação de Onda Vetorial pelas Funções de Base de Arestas em Três Dimensões

As funções de base de arestas ortogonais foram desenvolvidas inicialmente para as análises no domínio do tempo. Porém, para a convalidação destas novas funções de base 3D, serão utilizados problemas de autovalores para a obtenção dos modos ressonantes de cavidades. Assim, nesta seção, serão apresentadas duas formulações envolvendo a equação de onda vetorial no domínio da freqüência, para os problemas de autovalores, e no domínio do tempo, para as análises das características de propagação.

A equação de onda vetorial no domínio da freqüência para o campo elétrico é dada por [21]:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu_r} \nabla \times \mathbf{E} - k^2 \varepsilon_r \mathbf{E} = 0, \qquad (4.26)$$

onde μ_r é a permeabilidade magnética relativa, ε_r é a permissividade elétrica relativa e *k* é o número de onda. Aplicando-se o método de Galerkin em (4.26), obtém-se:

$$R_{i}^{e} = \iiint_{Ve} \left[\nabla \times \frac{1}{\mu_{r}} \nabla \times \mathbf{E} \cdot \mathbf{N}_{i} - k^{2} \varepsilon_{r} \mathbf{E} \cdot \mathbf{N}_{i} \right] dV = 0$$
(4.27)

Utilizando-se a expansão do campo elétrico (4.25) em (4.27) e considerando-se que a cavidade seja terminada em paredes elétricas, obtém-se o sistema matricial de autovalores [105]:

$$[K]{E} = k^{2}[M]{E}, \qquad (4.28)$$

onde o número de onda k corresponde ao autovalor e $\{E\}$ corresponde ao autovetor. As matrizes elementares do sistema acima são dadas por:

$$\begin{bmatrix} K^e \end{bmatrix}_{i,j} = \iiint_{V_e} \frac{1}{\mu_r^e} \left[\nabla \times \mathbf{N}_i^e \right] \cdot \left[\nabla \times \mathbf{N}_j^e \right] dV$$
(4.29)

$$\left[M^{e}\right]_{i,j} = \iiint_{V_{e}} \varepsilon_{r}^{e} \mathbf{N}_{i}^{e} \cdot \mathbf{N}_{j}^{e} dV$$
(4.30)

A segunda formulação apresentada nesta seção corresponde ao método de propagação temporal em banda completa da envoltória complexa dos campos elétrico ou magnético de uma onda. A formulação que será apresentada é uma extensão, para três dimensões, da formulação em duas dimensões apresentada no Capítulo 3. A equação de onda vetorial, considerando as PMLs, em meios com permeabilidade magnética igual a permeabilidade magnética do espaço livre μ_0 para os campos elétricos e magnéticos, pode ser escrita da seguinte forma [52-54]:

$$\nabla \times p \nabla \times (\mathbf{L} \ast \mathbf{\Phi}) + \frac{q}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{\Phi}}{\partial t^2} + p \mu_0 \sigma \frac{\partial \mathbf{\Phi}}{\partial t} = 0, \qquad (4.31)$$

onde $\Phi = H_x \hat{x} + H_y \hat{y} + H_z \hat{z}$, $p = 1/\varepsilon_r$ e q = 1 para o campo magnético ou $\Phi = E_x \hat{x} + E_y \hat{y} + E_z \hat{z}$, p = 1 e $q = \varepsilon_r$ para o campo elétrico, sendo H_x , H_y e H_z as componentes do campo magnético e E_x , E_y e E_z as componentes do campo elétrico nas direções x, y e z, respectivamente. A matriz L é dada por:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varsigma}_x & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\varsigma}_y & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\varsigma}_z \end{bmatrix},$$
(4.32)

onde

$$\varsigma_s = \delta(t) - \sigma_s / \varepsilon \, e^{-\sigma_s t/\varepsilon} \, \overline{u}(t) \tag{4.33}$$

e s = x, y ou z. A condutividade σ é zero para as regiões fora da PML e $\sigma_{max}(\rho/d)^2$ dentro da PML. Também, σ_x , σ_y e σ_z são as condutividades para as regiões da PML paralelas às direções x, y e z, respectivamente. O parâmetro ζ é obtido através da transformada inversa de Fourier do parâmetro s_B , conforme demonstrado no Capítulo 3.

Considerando-se apenas a propagação da envoltória complexa da onda, o campo pode ser escrito como:

$$\boldsymbol{\Phi}(x, y, z, t) = \boldsymbol{\phi}(x, y, z, t) \exp(j\omega_0 t), \qquad (4.34)$$

onde ω_0 é a freqüência angular e $\phi(x, y, z, t)$ é a envoltória complexa. A convolução, em (4.31), pode ser resolvida para cada passo temporal considerando o campo constante dentro do passo temporal τ , resultando em:

$$\psi_{s,i}^{\tau} = \frac{\sigma_s u_i^{\tau}}{(\sigma_s + j\omega_0 \varepsilon)} \exp\left[-(\sigma_s / \varepsilon + j\omega_0) t^{\tau-1}\right] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-(\sigma_s / \varepsilon + j\omega_0) \Delta t\right] - 1 \right\} + \psi_{s,i}^{\tau-1},$$
(4.35)

onde Δt é o intervalo do passo temporal e o termo $\exp(j\alpha_0 t)$ foi desconsiderado por ser um termo comum a todos os membros. Substituindo-se (4.35) e (4.34) em (4.31) e usando a discretização por elementos finitos através do método de Galerkin para a discretização espacial, a equação diferencial matricial de segunda ordem pode ser escrita como:

$$[K] [u(t)] + \frac{[M]}{c^2} \frac{\partial^2 \{u(t)\}}{\partial t^2} + \frac{2 j \omega_0 [M]}{c^2} \frac{\partial \{u(t)\}}{\partial t} - \frac{\omega_0^2}{c^2} [M] \{u(t)\} + [M]_{\sigma} \frac{\partial \{u(t)\}}{\partial t} + j \omega_0 [M]_{\sigma} \{u(t)\} + \sum_{e=1}^{M_e} \{ [K]_x^e \psi_x(t) + [K]_y^e \psi_y(t) + [K]_z^e \psi_z(t) \} = \{0\},$$

$$(4.36)$$

onde M_e representa o número total de elementos e {0} é um vetor nulo. O somatório em (4.36) foi mantido para indicar que as matrizes globais $[K]_s$ devem ser preenchidas a cada passo temporal devido ao termo $\exp[-\sigma_s/(\varepsilon+j\omega_0)t^{\tau-1}]$ em (4.35). Este termo depende da geometria (σ_s e ε varia para cada tetraedro) e do intervalo de tempo ($t^{\tau-1}$). Porém, foi demonstrado no Capítulo 3 e em [37-39] que, se σ_s e ε forem mantidos constantes na região da PML, (4.35) pode ser simplificada afetando muito pouco o desempenho da absorção dos campos pela PML. Com a simplificação, não há a necessidade de preencher as matrizes globais $[K]_s$ a cada passo temporal, mantendo-se, desta forma, o desempenho de

processamento. Devido ao elevado número de variáveis envolvido numa análise tridimensional e o acréscimo das funções de base auxiliares (4.23) e (4.24), neste capítulo será adotada apenas esta simplificação. Assim, (4.35) pode ser escrita da forma:

$$\psi_{s,i}^{\tau} = \varphi_{s,i}^{\tau} O_s + \psi_{s,i}^{\tau-1}, \qquad (4.37)$$

onde

$$\varphi_{s,i}^{\tau} = u_i^{\tau} \exp\left[-\left(\sigma_{\max}/\varepsilon_0 + j\omega_0\right)t^{\tau-1}\right]$$
(4.38)

$$O_{s} = \frac{\sigma_{s}}{\sigma_{s} + j\omega_{0}/\varepsilon} \{ \exp[-(\sigma_{s}/\varepsilon + j\omega_{0})\Delta t] - 1 \}$$
(4.39)

Utilizando-se de (4.38) e (4.39) em (4.36) e evoluindo-se o somatório, obtém-se:

$$[K]{u(t)} + \frac{[M]}{c^2} \frac{\partial^2 \{u(t)\}}{\partial t^2} + \frac{2j\omega_0[M]}{c^2} \frac{\partial \{u(t)\}}{\partial t} - \frac{\omega_0^2}{c^2} [M]{u(t)} + [M]_{\sigma} \frac{\partial \{u(t)\}}{\partial t} + j\omega_0[M]_{\sigma} \{u(t)\} + [K]_s \{\varphi_s(t)\} = \{0\}$$

$$(4.40)$$

Aplicando o método das diferenças finitas centrais (4.40) para a discretização temporal, obtém-se:

$$[A] \{ u^{\tau+1} \} = [B] \{ u^{\tau} \} + [C] \{ u^{\tau-1} \} - c^2 \Delta t^2 [K]_s \{ \varphi_s^{\tau} \},$$
(4.41)

onde A, B, C e as matrizes elementares são dadas por:

$$[A] = (1 + j\omega_0 \Delta t)[M] + c^2 \Delta t[M]_{\sigma}/2$$

$$[B] = (2 + \omega_0^2 \Delta t^2)[M] - j\omega_0 c^2 \Delta t^2[M]_{\sigma} - c^2 \Delta t^2[K]$$

$$[C] = (-1 + j\omega_0 \Delta t)[M] + c^2 \Delta t[M]_{\sigma}/2$$

$$[M^e]_{ij} = \iiint_{Ve} q \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j dV$$

$$[M^e]_{\sigma,ij} = \iiint_{Ve} p \mu_0 \sigma \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j dV$$

$$[K^e]_{ij} = \iiint_{Ve} p [\nabla \times \mathbf{N}_i] \cdot [\nabla \times \mathbf{N}_j] dV$$

$$\begin{split} & \left[K^{e}\right]_{x,ij} = \iiint_{V_{e}} O_{x,ij} p[\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot \left[\nabla \times (\hat{x} \cdot \mathbf{N}_{j}) \hat{x}\right] dV \\ & \left[K^{e}\right]_{y,ij} = \iiint_{V_{e}} O_{y,ij} p[\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot \left[\nabla \times (\hat{y} \cdot \mathbf{N}_{j}) \hat{y}\right] dV \\ & \left[K^{e}\right]_{z,ij} = \iiint_{V_{e}} O_{z,ij} p[\nabla \times \mathbf{N}_{i}] \cdot \left[\nabla \times (\hat{z} \cdot \mathbf{N}_{j}) \hat{z}\right] dV \end{split}$$

Como [A] é uma matriz diagonal, o sistema matricial de equações é resolvido multiplicando-se (4.41) por $[A]^{-1}$.

Para a discretização temporal da equação diferencial matricial de segunda ordem resultante do método dos elementos finitos vetoriais e ortogonais 2D e 3D, foi utilizado o método das diferenças finitas centrais. Uma outra forma de se obter a discretização temporal da equação diferencial matricial é através do método de Newmark [21, 106].

Neste método, as funções u(t) e du(t)/dt são aproximadas através da série de Taylor, assumindo a seguinte forma:

$$u^{\tau} = u^{\tau-1} + \Delta t \frac{du^{\tau-1}}{dt} + (0, 5 - \beta) \Delta t^2 \frac{d^2 u^{\tau-1}}{dt^2} + \beta \Delta t^2 \frac{d^2 u^{\tau}}{dt^2}$$
(4.42)

$$\frac{du^{\tau}}{dt} = \frac{du^{\tau-1}}{dt} + (1-\gamma)\Delta t \frac{d^2 u^{\tau-1}}{dt^2} + \gamma \Delta t \frac{d^2 u^{\tau}}{dt^2}, \qquad (4.43)$$

onde $\beta e \gamma s$ ão parâmetros escolhidos de tal forma a controlar a estabilidade e precisão.

Aplicando o método de Newmark em (4.40), obtém-se o sistema matricial resultante da discretização espacial e temporal da equação de onda vetorial no domínio do tempo. Para maiores detalhes do uso do método de Newmark na equação de onda, ver [21, 36].

$$\begin{cases} 1+2j\omega_{0}\gamma\Delta t [M]+c^{2}\Delta t [M]_{\sigma}+\beta \left([K]-\frac{\omega_{0}^{2}}{c^{2}}[M]+j\omega_{0}[M]_{\sigma} \right) \right\} \{u\}^{\tau+1} = \\ = \left\{ [2-2j\omega_{0}\Delta t (1-2\gamma)][M]+c^{2}\Delta t (1-2\gamma)[M]_{\sigma} - \\ -(0,5+\gamma-2\beta) \left([K]-\frac{\omega_{0}^{2}}{c^{2}}[M]+j\omega_{0}[M]_{\sigma} \right) \right\} \{u\}^{\tau} - \\ -(0,5+\gamma-2\beta) [K]_{s} \{\varphi_{s}\}^{\tau} - \{ [1-2j\omega_{0}\Delta t (1-\gamma)][M] - \\ -c^{2}\Delta t (1-\gamma)[M]_{\sigma} + (0,5+\gamma-2\beta) \left([K]-\frac{\omega_{0}^{2}}{c^{2}}[M]+j\omega_{0}[M]_{\sigma} \right) \right\} \{u\}^{\tau-1} \end{cases}$$
(4.44)

Fazendo $\beta = 0$, obtém-se:

Quando $\gamma = 0,5$, (4.45) reduz-se à (4.41). Portanto, quando o método das diferenças finitas não apresentar uma boa convergência na solução do sistema matricial de equações, o método de Newmark pode ser utilizando com o parâmetro $\beta = 0$ e com pequenas variações no parâmetro γ em torno de 0,5. O mesmo procedimento pode ser observado na discretização temporal da equação diferencial matricial de segunda ordem em duas dimensões, apresentada no Capítulo 3.

4.4 – Matrizes Elementares

O algoritmo apresentado no Capítulo 3 e que foi utilizado para descrever as etapas do programa de simulação envolvendo as funções de base de arestas ortogonais 2D, também pode ser utilizado para descrever a aplicação das funções de base de arestas ortogonais 3D nas simulações da propagação dos campos eletromagnéticos. A diferença entre os algoritmos é a formação das matrizes elementares, pois no caso 3D, utiliza-se duas funções auxiliares. O acréscimo das funções auxiliares, juntamente com as funções **Z**, resulta em matrizes elementares com dimensão 18×18 . A Fig. 4.2 mostra a formação

básica de uma matriz elementar utilizada nas operações de produto interno e de produto interno do rotacional entre as funções de base. Evidentemente, com as operações de produto interno entre as funções, obtêm-se matrizes elementares diagonais.



Fig. 4.2 – Formação básica de uma matriz elementar formada a partir das funções de base de arestas ortogonais 3D.

4.5 – Resultados Numéricos

Nesta seção, serão apresentados os resultados numéricos envolvendo dois tipos de análises: análise de autovalores dos modos de cavidades ressonantes e análises no domínio do tempo das características de propagação dos campos eletromagnéticos para estruturas que operam nas faixas de microondas e óptica. A análise de autovalores dos modos de ressonância de cavidades ressonantes não é uma aplicação prática para as funções de base de arestas ortogonais 3D. Devido às funções auxiliares, há um aumento no número de variáveis em relação às funções de base de arestas convencionais. Como, neste trabalho, foi utilizada a sub-rotina *Eigs* do programa MATLAB[®] para o cálculo dos autovalores e autovetores, o tempo total das simulações envolvendo as análise realizadas com as funções de base de arestas ortogonais foi maior que o tempo total das análises realizadas com as funções de base de aresta convencionais. O objetivo para esta aplicação é a análise do erro provocado pelas funções de base de arestas ortogonais na solução da equação de onda para meios homogêneos e meios com diferentes permissividades elétricas, comparando o seu desempenho em relação às funções de base de arestas convencionais.

Para este primeiro exemplo de análise de autovalores, utilizou-se uma cavidade ressonante retangular terminada com paredes metálicas e com dimensões de 1 cm de largura, 0,5 cm de altura e 0,75 cm de espessura, em um meio com permeabilidade magnética e permissividade elétrica iguais às do vácuo. A Fig. 4.3 mostra a geometria da cavidade ressonante. Para este exemplo, utilizou-se uma malha com 880 tetraedros, gerando 1.280 variáveis para funções de base de arestas convencionais e 11.840 para funções de base de arestas ortogonais. O aumento observado se dá devido ao acréscimo das duas funções de base auxiliares. A cavidade foi encerrada com paredes elétricas, anulando as componentes tangenciais do campo elétrico. A Tabela 4.2 mostra os oito primeiros autovalores (k, cm⁻¹).



Fig. 4.3 – Geometria da cavidade ressonante preenchida com meio homogêneo de ε_r e μ_r iguais a 1.

Mada	Analítico	Conve	encional	Ortogonal					
Modo	[1]	k	Erro (%)	k	Erro (%)				
TE ₁₀₁	5,236	5,221	0,286	5,264	0,535				
TM ₁₁₀	7,025	7,017	0,114	7,098	1,039				
TE ₀₁₁	7,551	7,526	0,331	7,494	0,755				
TE ₂₀₁	7,551	7,539	0,159	7,582	0,411				
TM ₁₁₁	8,179	8,156	0,281	8,163	0,196				
TE ₁₁₁	8,179	8,181	0,024	8,177	0,024				
TM ₂₁₀	8,886	8,860	0,293	8,744	1,598				
TE ₁₀₂	8,947	8,887	0,671	8,987	0,447				

TABELA 4.2. OITO PRIMEIROS AUTOVALORES (k_0 , cm⁻¹).

Pela Tabela 4.2, pode-se verificar uma boa concordância entre os resultados obtidos através das funções de base de arestas ortogonais e das funções de base de arestas convencionais, em relação à solução analítica [1]. Os erros obtidos com o método ortogonal superam ligeiramente aqueles do método convencional, uma vez que o acréscimo das funções auxiliares (4.24) aumenta o número de variáveis de cada ponto de interpolação do elemento. Conseqüentemente, o erro numérico associado nestes pontos tende a aumentar. Também, o uso da integração numérica ao invés da integração analítica provoca um aumento neste erro. Outra importante característica observada é a ausência de modos espúrios. O problema dos modos espúrios foi explorado em [105] quando as funções de base nodais foram utilizadas no cálculo dos autovalores. Da mesma forma que ocorre com as funções de base de arestas convencionais, quando as funções de base ortogonais são utilizadas, todos os modos espúrios desaparecem.

O próximo exemplo leva em consideração uma cavidade preenchida com meios não-homogêneos. A Fig. 4.4 mostra um quarto da geometria da cavidade considerada para esta análise. O material inserido no interior da cavidade possui permissividade elétrica relativa igual a 16. Para este exemplo, utilizou-se uma malha com 2.507 tetraedros, gerando 3.460 variáveis para as funções de base de arestas convencionais e 33.544 para as funções

de base de arestas ortogonais. Utilizaram-se, também, paredes magnéticas nos lados internos de simetria da cavidade e paredes elétricas nos demais lados [107]. A Tabela 4.3 mostra os seis primeiros autovalores (k, m^{-1}) obtidos através das funções de base de arestas convencionais e ortogonais, além dos autovalores calculados por um método apresentado em [107]. (b)



Fig. 4.4 – (a) Um quarto da geometria da cavidade ressonante preenchida com meio nãohomogêneo de ε_r igual a 16 e (b) geometria completa da cavidade.

Modo	Bardi <i>et al</i> . [107]	Convencional	Ortogonal
1	5,397	5,321	5,376
2	7,814	7,847	7,835
3	9,916	9,900	9,843
4	10,635	10,580	10,580
5	11,600	11,569	11,525
6	12,409	12,342	12,438

TABELA 4.3. Seis primeiros Autovalores (k, m^{-1}) .

Comparando-se os resultados apresentados na Tabela 4.3, pode-se verificar uma boa concordância entre os autovalores obtidos por meio das funções de base de arestas ortogonais e de base de arestas convencionais e aqueles obtidos pelo método apresentado em [107]. Mais uma vez, não foi observado os modos espúrios na solução do sistema matricial. Desta forma, pode-se concluir que as funções de base de arestas ortogonais apresentaram um bom desempenho para meios homogêneos e meios não-homogêneos.

Os dois exemplos anteriores envolvendo análises de autovalores demonstraram que o processo de ortogonalização das funções de base de arestas de um elemento tetraédrico manteve as suas características originais. Os problemas reportados em análises vetoriais envolvendo as funções de base nodais, como modos espúrios, dificuldades no tratamento de cantos de materiais metálicos e dielétricos e imposição das condições de contorno [71, 77-80], não foram observados nas análises envolvendo estes dois exemplos. Os próximos casos irão tratar da análise, no domínio do tempo, das características de propagação dos campos eletromagnéticos. O terceiro exemplo refere-se à análise no domínio do tempo das características de transmissão de um guia de onda com uma obstrução metálica em seu interior. Para esta simulação, assumiu-se um campo inicial com perfil longitudinal Gaussiano e perfil transversal correspondente ao do modo fundamental TE₁₀. Para t = 0 s, o pulso inicial é dado por:

$$e_{x}, h_{x}(x, y, z, t=0) = e_{x0}, h_{x0}(x, y) \exp\left[-(z-z_{0}/W_{0})^{2}\right] \exp\left[-jk_{z}(z-z_{0})\right]$$
(4.46a)

$$e_{y}, h_{y}(x, y, z, t=0) = e_{y_{0}}, h_{y_{0}}(x, y) \exp\left[-(z-z_{0}/W_{0})^{2}\right] \exp\left[-jk_{z}(z-z_{0})\right]$$
(4.46b)

$$e_{z}, h_{z}(x, y, z, t=0) = e_{z0}, h_{z0}(x, y) \exp\left[-(z-z_{0}/W_{0})^{2}\right] \exp\left[-jk_{z}(z-z_{0})\right], \quad (4.46c)$$

sendo que, no modo TE_{10} , e_{y0} , $e_{z0} = 0$ quando se utiliza o campo elétrico para as análises e $h_{x0} = 0$, quando se utiliza o campo magnético [1, 90]. As componentes $e_{x,y,z,0}$ e $h_{x,y,z,0}$ foram calculadas através da análise modal descrita no Apêndice C. A Fig. 4.5 mostra a geometria do guia de onda utilizado. O guia de onda foi terminado com camadas de PMLs, de espessura igual à de dois comprimentos de onda central e de condutividade máxima igual a 20 S/m. A freqüência central foi de 13 GHz. Utilizou-se uma malha com 26.444 tetraedros,

o que gerou 353.831 variáveis. Para garantir a estabilidade, o passo temporal foi de $\Delta t = 0,2$ ps. O intervalo total de simulação foi de 1,5 ns e o tempo total de simulação foi de 3.138 s. A Fig. 4.6 mostra o módulo do coeficiente S_{21} obtido através de simulações e usando as funções de base de arestas ortogonais e medições experimentais [108]. Pode-se notar uma boa concordância entre os resultados obtidos através da simulação e das medições experimentais, com o guia de onda apresentando a menor transmissão em torno de, aproximadamente, 14,3 GHz, o que o caracteriza como um filtro rejeita-faixa. Para esta e as demais análises, utilizou-se um computador Pentium IV, 1,7 GHz e Windows XP.



Fig. 4.5 – Geometria do guia com uma descontinuidade em seu interior, com a = 19,05mm, b = 9,524 mm, l = 5,08 mm, w = 1,016 mm e h = 7,619 mm.

As três primeiras análises apresentadas neste capítulo referem-se à aplicação das funções de base de arestas ortogonais na região de microondas. Uma outra aplicação é a análise de estruturas fotônicas. Para este intuito, primeiramente, compara-se o desempenho da formulação proposta ao da formulação convencional. Neste exemplo, utilizou-se uma onda gaussiana para representar a envoltória da componente x do campo elétrico propagando na direção z no espaço livre. Esta onda pode ser escrita da forma:

$$e_{x}(x, y, z, t=0) = e\left[-(x-x_{0}/W_{0})^{2}\right]e\left[-(y-y_{0}/W_{0})^{2}\right]e\left[-(z-z_{0}/W_{0})^{2}\right]e\left[-jk_{0}(z-z_{0})\right], \quad (4.47)$$
com $W_0 = 2 \ \mu$ m. Utilizou-se um volume computacional com 5 μ m x 5 μ m x 8 μ m e o comprimento de onda central foi de 1,55 μ m. A malha para este caso possui 9.962 elementos, gerando 3.460 e 33.544 variáveis para os métodos convencional e ortogonal, respectivamente. O intervalo total de simulação foi de 30 fs. O tempo total de simulação foi de 2.550 s, quando se utilizou a sub-rotina ME28 para a solução do sistema linear de equações, para o método convencional e 75 s para o método ortogonal, ou seja, para este caso, o método ortogonal foi 34 vezes mais rápido que o método convencional. A Fig. 4.7 mostra o módulo da componente *x* do campo elétrico. Pode-se observar uma boa concordância entre as formulações ortogonal e convencional.



Fig. 4.6 – Módulo do parâmetro S_{21} (experimental e simulado) do guia de ondas com descontinuidade da Fig. 4.5.



Fig. 4.7 – Análise da propagação de um pulso gaussiano no meio livre através dos métodos convencional e ortogonal.

Um grande problema em uma análise tridimensional no domínio do tempo de dispositivos ópticos é o elevado número de variáveis envolvido, impossibilitando o uso de computadores convencionais. Para componentes com grandes geometrias, estas análises podem envolver centenas de milhares de variáveis, sendo necessário o uso de processamento paralelo para a solução do sistema matricial de equação. Com o uso das funções de base de arestas ortogonais, há uma grande redução do esforço computacional, permitindo a análise de pequenas estruturas. Assim, para demonstrar o uso do método aqui desenvolvido em óptica integrada, a Fig. 4.8 mostra uma rede dielétrica refletora DFB projetada para operar em 1,5 μ m. A malha utilizada possui 44.437 tetraedros, gerando 588.168 variáveis. O passo temporal utilizado foi de 0,02 fs e o intervalo de tempo foi de 240 fs. O tempo total gasto para o processamento dos dados foi de 9.059 s. A Fig. 4.9 mostra o módulo do coeficiente de reflexão do modo TE₁₀ desta rede dielétrica refletora.



Fig. 4.8 – Rede dielétrica refletora.



Fig. 4.9 – *Módulo do coeficiente de reflexão do modo* TE_{10} *da rede dielétrica refletora da Fig.* 4.8.

4.6 - Conclusão

As funções de base de arestas ortogonais em três dimensões foram apresentadas neste capítulo. Estas novas funções de bases originaram-se dos elementos de arestas de Whitney para o tetraedro, preservando as mesmas características originais das funções de bases de arestas. Com o seu uso, obtêm-se matrizes massas diagonais sem o uso do método de diagonalização. Desta forma, o sistema matricial de equações é resolvido diretamente pela simples inversão de matrizes diagonais.

Para convalidar este novo conjunto de funções de base, dois tipos de análises foram utilizados. A primeira trata-se da análise de autovalores dos modos de ressonância de cavidades ressonantes. Duas cavidades foram utilizadas nestas análises. A primeira levou em consideração um meio homogêneo com permissividade elétrica e permeabilidade magnética iguais às do vácuo. A segunda cavidade foi preenchida com um meio não-homogêneo. Em ambas situações, pôde-se comparar o desempenho entre as funções de base de arestas ortogonais e convencionais, onde se verificou uma boa concordância entre ambos os resultados obtidos. Uma outra característica, observada nos resultados obtidos com o uso das funções de base de arestas ortogonais, foi a ausência dos modos espúrios, demonstrando que estas novas funções preservaram as propriedades das funções originais.

O segundo tipo de análise utilizado foi a análise no domínio do tempo das características de propagação de estruturas eletromagnéticas. Através destas análises, podese observar sua excelente precisão em relação às funções de base de arestas convencionais e medições experimentais e o alto desempenho no processamento de dados apresentado pelo uso destas novas funções, possibilitando a análises tridimensionais de dispositivos que operam na faixa de microondas e de pequenas estruturas ópticas. Para grandes estruturas, pretende-se investigar, em futuros trabalhos, o uso das funções de base de arestas ortogonais no processamento paralelo. Também, para estas situações, não foram observados os modos espúrios.

Capítulo 5

Conclusão

O grande avanço da tecnologia nos dias atuais se deve, em grande parte, às conquistas realizadas no desenvolvimento de novos componentes ativos e passivos, tanto na região de microondas, quanto na região óptica. Uso de microprocessadores em computadores pessoais capazes de executar tarefas em elevadas taxas de bits, redes de comunicações em faixa larga e processamento de informações totalmente no domínio óptico são apenas alguns exemplos de resultados da evolução científica que estamos presenciando. Por outro lado, a enorme demanda de serviços exige uma constante busca de novos conhecimentos, suscitando dispositivos cada vez mais eficientes e complexos. Dentro desta perspectiva, a evolução das ferramentas de simulações computacionais tornase indispensável. Análises mais realistas e precisas com alto desempenho no processamento de dados são características cada vez mais necessárias ao desenvolvimento dos novos dispositivos.

Nesta linha de pesquisa, optou-se pela elaboração de uma nova formulação para a simulação de campos eletromagnéticos em duas e três dimensões que permite analisar, de forma eficiente, as características de propagação de componentes eletromagnéticos, principalmente os destinados à região fotônica. De uma forma geral, três fatores caracterizam a formulação desenvolvida: a análise no domínio do tempo, o uso do método dos elementos finitos e das funções de base de arestas ortogonais. Com as análises realizadas no domínio do tempo, foi possível observar todos os fenômenos relacionados à propagação dos campos ocorridos dentro dos dispositivos. A escolha do método dos elementos finitos para a discretização espacial deu-se devido à sua excelente precisão e fácil adequação onde outros métodos apresentaram deficiências. Em sua versão vetorial, foi possível substituir a equação de onda escalar, que é normalmente empregada em fotônica em análises temporais, pela equação de onda vetorial. Finalmente, com o uso das funções de base de arestas ortogonais em duas e três dimensões, obteve-se um alto desempenho na resolução do sistema matricial de equações.

A apresentação deste trabalho se fez em cinco capítulos. No Capítulo 1, descreveuse a evolução histórica de alguns métodos computacionais, enfatizando principalmente o método dos elementos finitos. Discutiram-se também as vantagens de se analisar os campos eletromagnéticos no domínio do tempo em relação ao domínio da freqüência. O Capítulo 2 apresentou uma introdução ao método dos elementos finitos e sua aplicação em eletromagnetismo. Foram demontrados os fundamentos e propriedades deste método, necessários ao desenvolvimento dos programas em duas e três dimensões apresentados nos Capítulo 3 e 4, respectivamente. Iniciou-se este capítulo com os principais elementos utilizados na discretização espacial, dando-se ênfase ao triângulo, para a discretização em duas dimensões, e ao tetraedro, para a discretização em três dimensões. Baseada na geometria de cada elemento, as funções de base nodais lineares e quadráticas foram definidas. Em seguida, descreveram-se as funções de base vetoriais e sua importância nas análises vetoriais dos campos eletromagnéticos. Dentro deste contexto, ganharam destaque as funções de base de aresta para os elementos triangulares e tetraédricos, pois, além de serem desenvolvidas para a solução da equação de onda vetorial, estas funções originarão as funções de base de arestas ortogonais. Finalizando este capítulo, apresentou-se o método de Galerkin e seu uso na solução das equações de onda escalar e vetorial.

O Capítulo 3 apresentou a aplicação das funções de base de arestas ortogonais, em duas dimensões, ao método da envoltória no domínio do tempo. Baseando-se nas propriedades das funções de base de arestas e observando-se resultados de integrações numéricas, obtiveram-se as funções de base de arestas ortogonais de forma mais simplificada que as descritas no trabalho original de White, sem a necessidade de resolver as integrais numéricas para o cálculo dos coeficientes de ortogonalização. Utilizando-se as funções de base de arestas ortogonais no método da envoltória, foi possível analisar as características de propagação de diversas estruturas ópticas e compará-las às geradas por simuladores que utilizam a equação de onda escalar e a resultados publicados na literatura. Desta forma, foi possível demonstrar a excelente precisão do método proposto e seu alto desempenho no processamento de dados. Especial atenção foi dada aos componentes feitos a partir de cristais fotônicos, como guias de onda e cavidades ressonantes ópticos. Nesta situação, pode-se verificar que, para uma malha com aproximadamente 78.000 elementos, o método aqui desenvolvido foi 16 vezes mais rápido que os métodos escalares referenciados.

O Capítulo 4 dedicou-se à análise tridimensional de estruturas eletromagnéticas. Utilizando-se da metodologia para ortogonalização de funções de interpolação, desenvolvida no Capítulo 3, foi possível obter um novo conjunto de funções de base de arestas ortogonais em três dimensões para o elemento tetraédrico. Duas aplicações foram utilizadas para a convalidação destas funções: análise de modos ressonantes de cavidades ressonantes através de problemas de autovalores; e análise temporal das características de propagação de dispositivos eletromagnéticos através do método da envoltória. Devido à escassez de análises tridimensionais de componentes fotônicos, principalmente no domínio do tempo, duas cavidades ressonantes (análise de autovalores) e um filtro rejeita-faixa (análise no domínio do tempo), todos operando na região de microondas, foram utilizados para verificar a precisão do método proposto. De posse destes resultados, além de averiguar a excelente precisão do método, pôde-se observar que os resultados não foram corrompidos por soluções espúrias, demonstrando que as propriedades das funções de base originais foram preservadas. O alto desempenho no processamento de dados foi avaliado através da propagação de um pulso gaussiano no espaço livre, discretizado por 9.962 elementos tetraédricos. Com simulações realizadas utilizando-se as funções de base de arestas ortogonais e as convencionais, aplicando-se a decomposição LU (low-up - sub-rotina ME28) para a solução do sistema matricial de equações, constatou-se que o método aqui apresentado foi 34 vezes mais rápido que o método convencional.

Os programas computacionais desenvolvidos neste trabalho foram feitos utilizando a linguagem programação Fortran e utilizou-se um computador Pentium IV-1,7 GHz / 512 MB, Windows XP em todas as simulações. Desconsiderado-se as análises modais, que foram utilizadas para formar os campos inicias e determinar as constantes de propagação, o programa computacional utilizado para o estudo temporal dos campos eletromagnéticos em duas dimensões possui, em média, 2950 linhas. Já para o caso tri-dimensional, o programa desenvolvido possui, em média, 6000 linhas. Para exemplificar o uso de memória envolvido durante as simulações, realizaram-se algumas medições. Para a rede dielétrica refletora mostrada na Fig. 3.13, Capítulo 3, o uso de memória foi de 38 MB para a formulação aqui desenvolvida e 160 MB para a formulação escalar. Para o exemplo da propagação no espaço livre, Fig. 4.7, o uso de memória foi de 53 MB quando as funções de base de arestas ortogonais foram utilizadas e 77 MB quando as funções de base de arestas convencionais foram utilizadas. Já para o caso do filtro mostrado na Fig. 4.5, o uso de memória foi de 140 MB quando as funções de base de arestas ortogonais foram utilizadas. Porém, não foi possível verificar o uso de memória quando as funções de base de arestas convencionais foram utilizadas.

Programas computacionais que analisam campos eletromagnéticos no domínio do tempo oferecem ampla aplicação no desenvolvimento de novos componentes. Portanto, características peculiares de cada projeto devem ser avaliadas e implementadas separadamente. Porém, algumas sugestões para futuros trabalhos podem ser citadas, como análises em meios anisotrópicos, dispersivos e não-lineares. Dando continuidade aos estudos iniciados neste trabalho, uma outra sugestão de linha de pesquisa que deve ser mencionada é a análise tridimensional, no domínio do tempo, de componentes fotônicos. Devido ao enorme número de variáveis associado a este tipo de estudo, há a necessidade de se associar o método ortogonal ao uso de processamento paralelo, no qual uma dada tarefa é dividida em sub-tarefas, ficando cada processador responsável pela execução de cada uma delas. Desta forma, torna-se possível o estudo de estruturas com grandes geometrias. Uma outra linha de pesquisa que deve ser estuda no futuro é a análise das condições de estabilidade. Análise de estabilidade em elementos finitos no domínio do tempo é mais complicado que em FDTD, conforme J. Jin descreve em seu livro [21]. Quando estas análises envolvem as funções de base de arestas ortogonais, o grau de complexidade aumenta. Desta forma, há a necessidade de um estudo mais profundo para determinar de forma mais precisa as condições de estabilidade. Finalmente, pesquisas relacionadas a esquemas explícitos estáveis ou esquemas que permitam passos temporais maiores que o método das diferenças finitas centrais devem ser sugeridas, pois estes esquemas permitiriam uma redução no tempo total de simulação.

Publicações Associadas à Tese

- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "A novel and Efficient Time Domain Full-Band Method for Photonics Applications", nos Anais do *IEEE International Microwave & Optoelectronics Conference*, Brasília, 2005.
- 2. M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "A new time domain full-band method using orthogonal edge basis functions for photonics applications", nos

Anais do 89th OSA Annual Topical Meeting – Frontiers in Optics 2005 / Lasers Science XXI, Tucson, EUA, 2005.

- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "Time-domain fullband method using orthogonal edge basis functions", *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 18, no. 1, pp. 52-54, 2006.
- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "Novas funções de base ortogonais 3D para a equação de onda vetorial", nos Anais do XII Simpósio Brasileiro de Microondas e Optoeletrônica, Belo Horizonte, MG, 2006.
- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "Novel 3D orthogonal basis functions for the vector wave equation solution", nos Anais do 2006 *International Telecommunications Symposium*, Fortaleza, 2006.
- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "A new 3d time domain full-band method using orthogonal edge basis functions for photonics applications", nos Anais do 90th OSA *Annual Topical Meeting – Frontiers in Optics* 2006 / Lasers Science XXII, Rochester, New York, EUA, 2006.
- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "New set of 3D orthogonal edge basis functions for the vector wave equation solution", aceito pela *Microwave and Optical Technology Letters*.
- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "Analysis of electromagnetic structures using vectorial and orthogonal finite elements method", submetido em *IEEE International Microwave & Optoelectronics Conference*, 2007.
- M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "New set of 3D orthogonal edge basis functions for simulation of waveguide structures", submetido em OSA Topical Meeting Integrated Photonics and Nanophotonics Research and Applications (IPNRA) 2007.

Referências Bibliográficas

- D. K. Cheng, "Field and waves electromagnetics", segunda edição, Addison-Wesley, EUA, 1992.
- [2] J. D. Kraus e D. A. Fleisch, "Electromagnetics with applications", quinta edição, McGraw-Hill, New York, 1999.
- [3] S. M. Rao, "Time domain electromagnetics", Academic Press, primeira edição EUA, 1999.
- [4] K. S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problem involving Maxwell's equations in isotropic media", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 14, pp. 302-307, 1996.
- [5] A. Taflove e S. C. Hagness, "Computational electrodynamics the finite-difference time-domain method", terceira edição, Artech House, EUA, 2005.
- [6] K. L. Shlager e J. B. Schneider, "A selective survey of the finite-difference time domain literature", *IEEE Antennas Propagat. Mag.*, vol. 37, pp. 39-57, 1995.
- [7] S. Xiao, R. Vahldieck e H. Jin, "Full-wave analysis of guided wave structures using a novel 2-D FDTD", *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, vol. 2, pp. 165-167, 1992.
- [8] P. B. Johns e R. L. Beurle, "Numerical solution of two-dimensional scattering problems using a transmission-line matrix", *Proc. IEEE*, vol. 18, Pt. H, pp. 1203-1208, 1971.
- [9] K. M. Mitzner, "Numerical solution for transient scattering from a hard surface of arbitrary shape-retarded potential technique", J. Acoust. Soc. Am., vol. 42, pp. 391-397, 1967.
- [10] C. L. Bennet e W. L. Weeks, "Electromagnetic pulse response of cylindrical scatteres", in *1968 IEEE G-AP International Symposium*, Northeastern University, pp. 176-183, Boston, 1968.
- [11] C. L. Bennet e W. L. Weeks, "Transient scattering from conducting cylinders", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 18, pp. 627-633, 1970.

- [12] E. P. Sayre e R. F. Harrington, "Transient response of straight wire scatteres and antennas", in *1968 IEEE G-AP International Symposium*, Northeastern University, pp. 160-164, Boston, 1968.
- [13] E. P. Sayre e R. F. Harrington, "Time domain radiation and scattering by thin wires", *Appl. Sci. Res.*, vol. 26, pp. 413-444, 1972.
- [14] T.T. Wu, "Transient response of a dipole antenna", J. Math, Phys., vol. 2, pp. 982-984, 1961.
- [15] O. Einarsson, "The step-voltage current response of an infinite conducting cylinder", *Trans. R. Inst. Technol.*, Estocolmo, Suécia, pp. 191, 1962.
- [16] H. C. Martin e G. F. Carey, "Introduction to finite element analysis: theory and application", primeira edição, McGraw-Hill, New York, 1973.
- [17] O. C. Zienkiewicz e R. L. Taylor, "The finite element method", quarta edição, vol. 1: *Basic Formulation and Linear Problems*, McGraw-Hill, New York, 1989.
- [18] K. H. Huebner, E. A. Thornton e T. G. Byron, "The finite method for engineers", terceira edição, Wiley, New York, 1995.
- [19] P. P. Silvester e R. L. Ferrari, "Finite elements for electrical engineers", terceira edição, Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [20] M. Koshiba, "Optical waveguide theory by the finite element method", primeira edição, KTK Scientific Publishers, Tokyo, 1992.
- [21] J. M. Jin, "The finite element method in electromagnetics", segunda edição, Weley, New York, 2002.
- [22] R. L Courant, "Variational methods for the solution of the problem of equilibrium and vibration", *Bulletin of American Mathematical Society*, vol. 1, pp. 1-23, 1943.
- [23] P. P. Silvester, "Finite elements solution of homogeneous waveguide problems", *Alta Frequenza*, vol. 38, pp. 313-317, 1969.
- [24] G. Mur, "The finite-element modeling of three-dimensional time-domain electromagnetic fields in strongly inhomogeneous media", *IEEE Trans. Magn.*, vol. MAG-28, pp. 1130-1133, 1992.

- [25] S. Barkeshli, H. A. Sabbagh, D. J. Radecki e M. Melton, "A novel implicit timedomain boundary-integral/finite element algorithm for computing transient electromagnetic field coupling to a metallic enclosure", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. AP-40, pp. 1155-1164, 1992.
- [26] J. F. Lee, "WETD: A finite-element time-domain approach for solving Maxwell's equations", *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, vol. 4, pp. 11-13, 1994.
- [27] S. D. Gedney e U. Navsariwala, "An unconditionally stable finite-element timedomain solution of the vector wave equation", *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, vol. 5, pp. 332-334, 1995.
- [28] D. A. White, "Orthogonal vector basis functions for time domain finite element solution of the vector wave equation", *IEEE Trans. Magn.*, vol. MAG-35, pp. 1458-1461, 1999.
- [29] D. Jiao e J. M. Jin, "Time-domain finite element modeling of dispersive media", *IEEE Microwave Wireless Comp. Lett.*, vol. 11, pp. 220-223, 2001.
- [30] S. Benhassine, W. P. Carpes e L. Pichon, "Comparison of mass lumping techniques for solving the 3D Maxwell's equations in the time domain", *IEEE Trans. Magn.*, vol. MAG-36, pp. 1548-1552, 2000.
- [31] H. E. Hernández-Figueroa, "Simple nonparaxial beam-propagation method for integrated optics", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 12, pp. 644-649, 1994.
- [32] Y. Wang e T. Itoh, "Envelope-finite-element (EVFE) technique a more efficient timedomain scheme", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 49, pp. 2241-2247, 2001.
- [33] M. Koshiba, Y. Tsuji e M. Hikari, "Time-domain beam propagation method and its application to photonic crystal circuits", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 18, pp. 102-110, 2000.
- [34] V. F. Rodriguez-Esquerre e H. E. Hernandez-Figueroa, "Novel time-domain step-bystep scheme for integrated optic applications", *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol. 13, pp. 311-313, 2001.

- [35] T. Fujisawa, M. Koshiba, "Full-vector finite-element beam propagation method for three-dimensional nonlinear optical waveguides", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 20, pp 1876-1884, 2002.
- [36] A. M. Frasson, "Simulação por elementos finitos 3D de problemas eletromagnéticos no tempo e freqüência", Tese de doutorado, FEEC, Unicamp, 2002.
- [37] M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "Time-Domain Full-Band Method Using Orthogonal Edge Basis Functions", *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol. 18, pp. 52-54, 2006.
- [38] M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "A Novel and Efficient Time Domain Full-Band Method for Photonics Applications", in *IEEE International Microwave & Optoelectronics Conference*, Brasilia 2005.
- [39] M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "A new time domain full-band method using orthogonal edge basis functions for photonics applications", nos Anais do 89th OSA Annual Topical Meeting – *Frontiers in Optics* 2005/*Lasers Science* XXI, Tucson, EUA, 2005.
- [40] S. S. A. Obayya, "Efficient finite-element-based time-domain beam propagation analysis of optical integrated circuits", *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 40, pp. 591-595, 2004.
- [41] A. Fisher, R. N. Rieben, G. H. Rodrigue e D. A. White, "A generalized mass lumping technique for vector finite-element solutions of the time-dependent Maxwell's equations", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 53, pp. 2900-2910, 2005.
- [42] J. F. Lee, R. Lee e A. C. Cangellaris, "Time-domain finite element method", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 45, pp. 430-442, 1997.
- [43] H. E. Hernández-Figueroa, "Progress in Finite Element Modeling of Integrated Optics", artigo convidado no *Integrated Photonics Research*, Washington, EUA, 2003.
- [44] M. Koshiba, Y. Tsuji e S. Sasaki, "High-performance absorbing boundary conditions for photonic crystal waveguide simulations", *IEEE Microwave Wireless Compon. Lett.*, vol. 11, pp. 152–154, Apr. 2001.

- [45] T. Fujisawa e M. Koshiba, "Time-domain beam propagation method for nonlinear optical propagation analysis and its application to photonic crystal circuits", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 22, pp 684-691, 2004.
- [46] J. C. Maxwell, " A dynamical theory of the electromagnetic field", *Philosophical Transaction of the Royal Society of London*, vol. 155, pp. 459-512, 1865.
- [47] P. B. Johns e R. L. Beurle, "Numerical solution of 2-Dimensional scattering problems using a transmission-line matrix", *Proc. IEEE*, vol. 118, pp. 1203-1209, 1971.
- [48] C. Cristopoulos, "The transmission line modeling method TLM", Oxford Univ. Press, Oxford, 1995.
- [49] R. Mittra, Ed., "Computer techniques for electromagnetics", primeira edição, Elmsford, Pergamon Press., New York, 1973.
- [50] R. C. Hansen, ED., "Moment methods in antennas and scattering", primeira edição, MA: Artech House, Norwood, 1990.
- [51] A. F. Peterson, S. L. Ray e R. Mittra, "Computational method for electromagnetics", *IEEE Press.*, New York, 1998.
- [52] M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "Novas funções de base ortogonais 3D para a equação de onda vetorial", nos Anais do XII Simpósio Brasileiro de Microondas e Optoeletrônica, Belo Horizonte, MG, 2006.
- [53] M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "Novel 3D orthogonal basis functions for the vector wave equation solution", nos Anais do 2006 *International Telecommunications Symposium*, Fortaleza, 2006.
- [54] M. S. Gonçalves, H. E. Hernandez-Figueroa e A. C. Bordonalli, "A new 3D time domain full-band method using orthogonal edge basis functions for photonics applications", nos Anais do 90th OSA Annual Topical Meeting – *Frontiers in Optics* 2006 / Lasers Science XXII, Rochester, New York, EUA, 2006.
- [55] M. Koshiba e Y. Tsuji, "A wide-angle finite-element beam propagation method", *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol. 8, pp. 1208-1210, 1996.

- [56] Y. Tsuji e M. Koshiba, "A wide-angle beam propagation method based on a finite element scheme", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 33, pp. 1544-1547, 1997.
- [57] M. Koshiba, Y. Tsuji e M. Hikari, "Finite element beam propagation method with perfectly matched layer boundary conditions", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 35, pp. 1482-1485, 1999.
- [58] Y. Tsuji, M. Koshiba e N. Takimoto, "Finite element beam propagation method for anisotropic optical waveguides", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 17, pp 723-728, 1999.
- [59] Y. Tsuji e M. Koshiba, "Finite element beam propagation method with perfectly matched layer boundary conditions for three-dimensional optical waveguides", *Int. J. Numer. Model.*; 13:115-126, 2000
- [60] Y. Tsuji e M. Koshiba, "Finite element method using port truncation by perfectly matched layer boundary conditions for optical waveguide discontinuity problems", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 20, pp 463-468, 2002.
- [61] Y. Tsuji e M. Koshiba, "Full-vector finite-element beam propagation method for three-dimensional nonlinear optical waveguides", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 20, pp 1876-1884, 2002.
- [62] S. S. A. Obayya, B. M. A. Rahman e H. A. El-Mikati, "New full-vectorial numerically efficient propagation algorithm based on the finite element method," *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 18, pp. 409–415, 2000
- [63] J. P. Silva, H. E. Hernandez-Figueroa e A. M. F. Frasson, "Improved vectorial finite element BPM analysis for transverse anisotropic media," *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 21, pp. 567–576, 2003.
- [64] H. F. Pinheiro, A. P. L. Barbero e H. E. Hernández-Figueroa, "Full-vectorial FE-BPM approach for the analysis of anisotropic medium with off-diagonal permittivity terms", *Microwave Optical Tech. Letters*, vol. 25, pp. 12-14, 2000.
- [65] H. Whitney, "Geometric Integration Theory", Priceton U.P., 1957.

- [66] J. C. Nedelec, "Mixed finite elements in R³", *Numer. Meth.*, vol. 35, pp. 315-341, 1980.
- [67] A. Bossavit e J. C. Verite, "A mixed FEM-BIEM method to solve 3-D eddy, current problems", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 18, pp. 431-435, 1982.
- [68] M. Hano, "Finite-element analysis of dielectric-loaded waveguides", IEEE Trans. Microwave Theory Tech., vol. 32, pp 1275-1279, 1984.
- [69] G. Mur e A. T. Hoop, "A finite-element method for computing three-dimensional electromagnetic fields in inhomogeneous media", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 21, pp. 2239-2241, 1985.
- [70] A. Bossavit, "Whitney forms: a class of finite elements for three-dimensional computations in electromagnetism", *IEE Proceedings*, vol. 135, Pt. A, pp. 493-500, 1988.
- [71] C. W. Crowley, P. P. Silvester e H. Hurwitz, "Covariant projection elements for 3D vector fields problems", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 24, pp. 397-400, 1988.
- [72] Z. J. Cendes, "Vector finite elements for electromagnetic field computation", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 27, pp. 3958-3966, 1991.
- [73] J. F. Lee, D. K. Sun e Z. J. Cendes, "Tangential vector finite elements for electromagnetic field", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 27, pp. 4032-4035, 1991.
- [74] R. D. Graglia, D. R. Wilton e A. F. Peterson, "Higher order interpolatory vector bases for computational electromagnetics", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 45, pp. 329-342, 1997.
- [75] S. V. Polstyanko e J. F. Lee, "H₁ (curl) tangential vector finite element method for modeling anisotropic optical fibers", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 13, pp. 2290-2295, 1995.
- [76] A. Bossavit e I. Mayergoyz, "Edge-elements for scattering problems", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 25, pp. 2816-2821, 1989.

- [77] J. F. Lee, D. K. Sun e Z. J. Cendes, "Full-wave analysis of dielectric waveguides using tangential vector finite elements", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 39, pp. 1262-1271, 1991.
- [78] K. Ise, K. Inoue e M. Koshiba, "Three-dimensional finite-element solution of dielectric scattering obstacles in a rectangular waveguide", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 38, pp. 1352-1359, 1990.
- [79] K. D. Paulsen e D. R. Lynch, "Elimination of vector parasite in finite element Maxwell solution", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 39, pp. 395-404, 1991.
- [80] R. Miniowitz e J. P. Webb, "Covariant-projection quadrilateral elements for the analysis of waveguides with sharp edges", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 39, pp. 501-505, 1991.
- [81] J. P. Webb e B. Forgani, "Hierarchal scalar and vector tetrahedral", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 29, pp. 1495-1498, 1993.
- [82] V. F. Rodriguez-Esquerre, "Modelagem de estruturas fotônicas por elementos finitos 2D no domínio do tempo", Tese de doutorado, FEEC, Unicamp, 2003.
- [83] M. N. O. Sadiku, "Numerical techniques in electromagnetic" primeira edição, CRC Press., EUA, 1992.
- [84] J. Scott e A. F. Peterson, "Quadrature rules for numerical integration over triangles and tetrahedral", *IEEE Antennas Propagat. Magazine*, vol. 38, pp. 100-102, 1996.
- [85] D. Jiao e J. M. Jin, "An effective algorithm for implementation perfectly matched layers in time-domain finite element simulation of open-region EM problems", *IEEE Antennas Propagat.*, vol. 51, pp. 1615- 1623, 2002.
- [86] J. P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves", J. Compt. Phys., vol. 114, pp. 185-200, 1994.
- [87] W. C. Chew e W. H. Weedon, "A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equation with stretched coordinates", *Microwave Opt. Tech. Lett.*, vol. 7, pp. 599-604, 1994.

- [88] W. P. Huang, C. L. Xu e K. Yokoyama, "The perfectly matched layer boundary condition for modal analysis of optical waveguides: leaky mode calculations", *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol. 8, pp. 652-654, 19966.
- [89] U. Pekel e R. Mittra, "An application of the perfectly matched layer (PML) concept to the finite element method frequency domain analysis of scattering problems", *IEEE Microwave Guided Lett.*, vol. 5, pp. 258-260, 1995.
- [90] D. L. Lee, "Electromagnetic principles of integrated optics", primeira edição John Wiley & Sons, New York, 1986.
- [91] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade e J. N. Winn, "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light", primeira edição, Princeton, EUA, 1995.
- [92] K. Sakoda, "Optical properties of photonic crystals", Springer-Verlag New York, Incorporated, 2001.
- [93] S. G. Johnson, "Photonic crystals: from theory to practice", Tese de doutorado, departamento de Física, Massachusetts Institute of Technology MIT, EUA, 2001.
- [94] E. Yablanovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, pp. 2486-2489, 1987.
- [95] R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer e J. D. Joannopoulos, "Accurate theoretical analysis of photonic band-gap materials", *Phys. Rev. Lett. B*, vol. 48, pp. 8434-8437, 1993.
- [96] E. Yablanovitch, "Photonic band-gap structures", J. Optical Society of America B, vol. 10, pp. 283-295, 1993.
- [97] J. S. Foresi, P. R. Villeneuve, J. Ferrera, E. R. Thoen, G. Steinmeyer *et al.*, "Photonicbandgap microcavities in optical waveguides", *Nature*, vol. 390, pp. 143-145, 1997.
- [98] E. Chow, S. Y. Lin, S. G. Johnson, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos *et al.*, "Three-dimensional control of light in a two-dimensional photonic crystal slab", *Nature*, vol. 407, pp. 983-986, 2000.
- [99] S. Noda, A. Chutinan e M. Imada, "Trapping and emission of photons by a single defect in a photonic bandgap structure", *Nature*, vol. 407, pp. 608-610, 2000.

- [100] M. Koshiba, "Wavelength division multiplexing and demultiplexing with photonic crystal waveguide couplers," *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 19, pp. 1970– 1975, 2001.
- [101] M. F. Yanik, S. Fan, M. Soljacic e J. D. Joannopoulos, "All-optical transistor action with bistable switching in a photonic crystal cross-waveguide geometry", *Optics Lett.*, vol. 28, pp. 2506-2508, 2003.
- [102] T. Fujisawa e M. Koshiba, "Finite-element modeling of nonlinear Mach–Zehnder interferometers based on photonic-crystal waveguides for all-optical signal processing", *IEEE/OSA J. Lightwave Technol.*, vol. 24, pp. 617–623, 2006.
- [103] A. Mekis, J. C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P.R. Villeneuve e J. D. Joannopoulos, "High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, pp. 3787-3790, 1996.
- [104] D. Jian e J. M. Jin, "Three-dimensional orthogonal vector basis functions for timedomain finite element solution of vector wave equations", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 51, pp. 59-66, 2003.
- [105] A. Chatterjee, J. M. Jin e J. L. Volakis, "Computation of cavity resonances using edge-based finite elements", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 40, pp. 2106-2108, 1992.
- [106] T. J. R. Hughes, "The FEM linear static and dynamic analysis", primeira edição, Prentice-Hall, EUA, 1997.
- [107] I. Bardi, O. Biro e K. Preis, "Finite element scheme for 3D cavities without spurious modes", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 27, pp. 4036-4039, 1991.
- [108] R. R. Mansour, R. S. K. Tong e R. H. Macphie, "Simplified description of the field distribution in finlines and ridge wageguides and its application to the analysis of *E*plane discontinuities", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 36, pp. 1825-1832, 1988.

Apêndice A

Ortogonalização de Funções

Este apêndice tem por objetivo demonstrar o processo de ortogonalização de uma função. Sejam duas funções $f_1(x)$ e $f_2(x)$, não-nulas, definidas no intervalo (x_1, x_2) . A função $f_1(x)$ pode ser aproximada através da função $f_2(x)$ da seguinte forma:

$$f_1(x) \cong C f_2(x) \tag{A.1}$$

onde C é uma constante. Para que a representação seja exata, deve-se envolver na equação anterior uma função erro $f_e(x)$:

$$f_1(x) = C f_2(x) + f_e(x)$$
 (A.2)

O erro pode ser quantizado através do valor quadrático médio da função erro, denominado de erro quadrático médio:

$$\overline{f_e^2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_1} \int_{x_1}^{x_2} f_e^2(x) dx$$
(A.3)

como $f_e(x) = f_1(x) - C f_2(x)$, tem-se:

$$\overline{f_e^2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_1} \int_{x_1}^{x_2} [f_1(x) - C f_2(x)]^2 dx$$
(A.4)

$$\overline{f_e^2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_1} \int_{x_1}^{x_2} \left[f_1^2(x) - 2Cf_1(x)f_2(x) + C^2 f_2^2(x) \right] dx$$
(A.5)

A equação acima pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{1}{x_2 - x_1} = \mathbf{K}_0$$
$$\int_{x_1}^{x_2} f_1^2(x) dx = \mathbf{K}_1$$
$$\int_{x_1}^{x_2} f_1(x) f_2(x) dx = \mathbf{K}_2$$

$$\int_{x_1}^{x_2} f_2^2(x) dx = \mathbf{K}_3$$

ou seja,

$$\overline{f_e^2}(x) = K_0 \left[K_1 - 2CK_2 + C^2 K_3 \right]$$
(A.6)

Através de (A.6), pode-se perceber que o erro quadrático médio é função da constante C. O valor de C pode ser obtido derivando (A.6) e igualando o resultado a zero. Nestas condições, o erro quadrático médio poderá ser o menor possível.

$$\frac{d f_e^2(x)}{dC} = K_0 [0 - 2K_2 + 2K_3 C] = 0$$
(A.7)

Resultando em:

$$C = \frac{K_2}{K_3}$$
(A.8)

A derivada segunda será:

$$\frac{d^2 \bar{f}_e^2(x)}{dC^2} = 2K_0 K_3 > 0$$
(A.9)

pois, K₀ e K₃ são positivos. Assim, o valor de C encontrado é o mínimo. Portanto:

$$C = \frac{\int_{x_1}^{x_2} f_1(x) f_2(x) dx}{\int_{x_1}^{x_2} f_2(x) f_2(x) dx} = \frac{\langle f_1(x) f_2(x) \rangle}{\langle f_2(x) f_2(x) \rangle}$$
(A.10)

e

$$f_e(x) = f_1(x) - \left[\frac{\langle f_1(x)f_2(x)\rangle}{\langle f_2(x)f_2(x)\rangle}\right] f_2(x)$$
(A.11)

Quando C = 0, diz-se que $f_1(x)$ não pode ser representada em função de $f_2(x)$. Neste caso, a funções $f_1(x)$ e $f_2(x)$ são ortogonais entre si, ou seja:

$$\left\langle f_1(x)f_2(x)\right\rangle = 0 \tag{A.12}$$

Uma propriedade do processo de ortogonalização de funções, que pode ser observada a partir de (A.11), é a de que a função de erro é ortogonal à função $f_2(x)$ utilizada para a decomposição de $f_1(x)$:

$$\left\langle f_e(x)f_2(x)\right\rangle = \left\langle f_1(x)f_2(x)\right\rangle - \left[\frac{\left\langle f_1(x)f_2(x)\right\rangle}{\left\langle f_2(x)f_2(x)\right\rangle}\right] \left\langle f_2(x)f_2(x)\right\rangle = 0$$
(A.13)

A equação (A.11) pode ser generalizada quando se utiliza mais de uma função na decomposição de $f_1(x)$:

$$f_e(x) = f_1(x) - \sum_{l=1}^k \left[\frac{\langle f_1(x) f_l(x) \rangle}{\langle f_l(x) f_l(x) \rangle} \right] f_l(x)$$
(A.14)

Apêndice B

Introdução à Teoria das PMLs

B.1 - Definição das PMLs de Berenger [86]

Neste apêndice, será demonstrado, de forma resumida, a teoria das PMLs de Berenger [86] e as modificações realizadas para o seu uso no método dos elementos finitos. Em coordenadas cartesianas, considere o campo elétrico variando apenas nas direções x e y, Fig. B.1. Nesta situação, as equações de Maxwell para o campo eletromagnético no modo TE são resumidas em três equações. De modo geral, em um meio com condutividade elétrica σ_e e condutividade magnética σ_h , estas equações podem ser escritas como:

$$\mathcal{E}_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_e E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y}$$
(B.1a)

$$\mathcal{E}_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_e E_y = -\frac{\partial H_z}{\partial x}$$
(B.1b)

$$\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma_h H_z = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}$$
(B.1c)

Além disto, se a condição:

$$\frac{\sigma_e}{\varepsilon_0} = \frac{\sigma_m}{\mu_0} \tag{B.2}$$

é satisfeita, a impedância do meio definido em (B.1) é igual à do vácuo e nenhuma reflexão ocorre quando uma onda se propaga normal à fronteira meio/vácuo.

Para definir as PMLs de Berenger, para o caso TE, o princípio fundamental é dividir a componente H_z em duas sub-componentes, H_{zx} e H_{zy} , onde $H_z = H_{zx}+H_{zy}$. Assim, uma região de PML, para o caso TE, é definida como um meio em que o campo eletromagnético possui quatro componentes, E_x , E_y , H_{zx} e H_{zy} , interligadas através de quatro equações:

$$\mathcal{E}_{0} \frac{\partial E_{x}}{\partial t} + \sigma_{ey} E_{x} = \frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial y}$$
(B.3a)

$$\mathcal{E}_{0} \frac{\partial E_{y}}{\partial t} + \sigma_{ex} E_{y} = -\frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial x}$$
(B.3b)

$$\mu_0 \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_{hx} H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial x}$$
(B.3c)

$$\mu_0 \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_{hy} H_{zy} = \frac{\partial E_x}{\partial y}$$
(B.3d)

onde σ_{ex} , σ_{ey} , σ_{hx} , σ_{hy} são as condutividades elétrica e magnética nas direções x e y, respectivamente.

A primeira observação pode ser feita observando (B.3). Se $\sigma_{hy} = \sigma_{hx}$ as duas equações resumem-se em (B.1c). Se $\sigma_{ey} = \sigma_{ex} = \sigma_{hy} = \sigma_{hx} = 0$, (B.3) reduz-se às equações de Maxwell para o vácuo. Se $\sigma_{ey} = \sigma_{ex}$ e $\sigma_{hy} = \sigma_{hx} = 0$, (B.3) reduz-se às equações para um meio condutor e, finalmente, se $\sigma_{ey} = \sigma_{ex}$ e $\sigma_{hy} = \sigma_{hx}$, (B.3) reduz-se às equações de um meio absorvente, conforme definido em (B.1).

A segunda observação pode ser feita antes de realizar qualquer cálculo. Se $\sigma_{ey} = \sigma_{hy} = 0$, o meio das PMLs pode absorver as componentes E_y e H_{zx} ao longo da direção x, conforme pode ser observado em (B.3b) e (B.3c), mas não absorve as componentes E_x e H_{zy} na direção y. Se $\sigma_{ex} = \sigma_{hx} = 0$, ocorre o inverso para as componentes E_y e H_{zx} e para as componentes E_x e H_{zy} .



Fig. B.1 – Formação do campo eletromagnético no modo TE.

B.2 – Propagação de uma Onda Plana na Região de PML

Considere a amplitude do campo elétrico \mathbf{E} dado por E_0 . As componentes do campo eletromagnético podem ser escritas como:

$$E_{x} = -E_{0} \operatorname{sen}(\varphi) \exp[j\omega(t - \alpha_{p}x - \beta_{p}y)]$$
(B.4a)

$$E_{y} = E_{0}\cos(\varphi)\exp[j\omega(t - \alpha_{p}x - \beta_{p}y)]$$
(B.4b)

$$H_{zx} = H_{zx0} \exp[j\omega(t - \alpha_p x - \beta_p y)]$$
(B.4c)

$$H_{zy} = H_{zy0} \exp[j\omega(t - \alpha_p x - \beta_p y)]$$
(B.4d)

onde H_{zx0} e H_{zy0} são as amplitudes das componentes H_{zx} e H_{zy} , respectivamente, ω é a freqüência angular, *t* é o tempo e α_p e β_p são constantes complexas. No sistema (B.4), H_{zx0} , H_{zy0} , α_p e β_p são as incógnitas. Substituindo-se as componentes (B.4) em (B.3), obtêm:

$$\varepsilon_0 E_0 \operatorname{sen} \varphi - j \frac{\sigma_y}{\omega} E_0 \operatorname{sen} \varphi = \beta_p \left(H_{zx0} + H_{zy0} \right)$$
(B.5a)

$$\varepsilon_0 E_0 \cos \varphi - j \frac{\sigma_x}{\omega} E_0 \cos \varphi = \alpha_p \left(H_{zx0} + H_{zy0} \right)$$
(B.5b)

$$\mu_0 H_{zx0} - j \frac{\sigma_{hx}}{\omega} H_{zx0} = \alpha_p E_0 \cos \varphi$$
(B.5c)

$$\mu_0 H_{zy0} - j \frac{\sigma_{hy}}{\omega} H_{zy0} = \beta_p E_0 \operatorname{sen} \varphi$$
(B.5d)

O sistema (B.5) resulta em dois conjuntos de α_p e β_p com sinais opostos para as duas direções de propagação. Escolhendo o sinal positivo, têm-se que

$$\alpha_{p} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{0}\mu_{0}}}{G} \left(1 - j\frac{\sigma_{ex}}{\varepsilon_{0}\omega}\right) \cos\varphi$$
(B.6a)

$$\beta_{p} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{0}\mu_{0}}}{G} \left(1 - j\frac{\sigma_{ey}}{\varepsilon_{0}\omega}\right) \operatorname{sen}\varphi$$
(B.6b)

onde

$$G = \sqrt{w_x \cos^2 \varphi + w_y \sin^2 \varphi}$$
(B.7)

$$w_{x} = \frac{1 - j(\sigma_{ex}/\varepsilon_{0}\omega)}{1 - j(\sigma_{hx}/\mu_{0}\omega)}$$
(B.8a)

$$w_{y} = \frac{1 - j(\sigma_{ey} / \varepsilon_{0} \omega)}{1 - j(\sigma_{hy} / \mu_{0} \omega)}$$
(B.8b)

Representando ψ_p como qualquer componente do campo eletromagnético, ψ_{p0} como sua amplitude, *c* a velocidade da luz no vácuo e com (B.4) e (B.6), pode-se escrever que:

$$\psi_{p} = \psi_{p0} \exp\{j\omega[t - (x\cos\varphi + y\sin\varphi)/cG]\}\exp[(-\sigma_{ex}\cos\varphi/\varepsilon_{0}cG)x] \exp[(-\sigma_{ey}\sin\varphi/\varepsilon_{0}cG)y]$$
(B.9)

As incógnitas H_{zx0} , H_{zy0} podem ser escritas em função de α_p e β_p , resultando em:

$$H_{zx0} = E_0 \sqrt{(\varepsilon_0/\mu_0)} \frac{w_x}{G} \cos^2 \varphi$$
 (B.10a)

$$H_{zy0} = E_0 \sqrt{(\varepsilon_0/\mu_0)} \frac{W_y}{G} \operatorname{sen}^2 \varphi$$
 (B.10b)

Levando-se em consideração (B.7), a soma de H_{zx} , H_{zy} pode ser escrita como:

$$H_0 = E_0 \sqrt{\frac{\mathcal{E}_0}{\mu_0}} \frac{1}{\mathrm{G}}$$
(B.11)

Das relações (B.9) e (B.11), uma importante observação pode ser feita quando σ_{ex} , σ_{ey} , σ_{hx} e σ_{hy} satisfazem (B.2). Nesta situação, as relações *G*, w_x e w_y tornam-se iguais a um em qualquer freqüência e as expressões da onda (B.9) e impedância (B.11) podem ser escritas como:

$$\psi_{p} = \psi_{p0} \exp\{j\omega[t - (x\cos\varphi + y\sin\varphi)/c]\}\exp[(-\sigma_{ex}\cos\varphi/\varepsilon_{0}c)x] \\ \exp[(-\sigma_{ey}\sin\varphi/\varepsilon_{0}c)y]$$
(B.12)

$$H_0 = E_0 \sqrt{\frac{\mathcal{E}_0}{\mu_0}} \tag{B.13}$$

A primeira exponencial de (B.12) indica que a fase da onda propaga normalmente em relação ao campo elétrico (isto significa que $\varphi = v$ na Fig. B.1), com velocidade igual à velocidade da luz. As duas últimas exponenciais indicam um decréscimo na amplitude da onda ao se propagar nas direções x e y. A relação (B.13) indica que a impedância do meio será a impedância do vácuo. Também, através de (B.9), verifica-se que a onda, ao se propagar ao longo da direção y, (cos $\varphi = 0$), com $\sigma_{ey} = \sigma_{hy} = 0$, não será absorvida. Da relação (B.12), se $\sigma_{ey} = \sigma_{hy} = 0$, a sua última exponencial será igual a um e a absorção será função apenas da coordenada x.

B.3 – Adaptações das PMLs para o Método dos Elementos Finitos [21]

As PMLs de Berenger foram desenvolvidas inicialmente para o método das diferenças finitas. Chew e Weedon [87] modificaram a PML para o método dos elementos finitos, realizando um "alongamento" das coordenadas (*coordinate stretching*) no domínio da freqüência. Para introduzir esta interpretação de PML, Chew e Weedon alteraram as equações de Maxwell para o espaço livre da seguinte forma. [21].

$$\nabla_{SB} \times \mathbf{E} = -j\omega_0 \mu \mathbf{H} \tag{B.14}$$

$$\nabla_{SB} \times \mathbf{H} = j\omega_0 \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E} \tag{B.15}$$

$$\nabla_{SB} \cdot \left(\mathcal{E} \mathbf{E} \right) = 0 \tag{B.16}$$

$$\nabla_{SB} \cdot (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) = 0 \tag{B.17}$$

onde ∇_{SB} é definido como:

$$\nabla_{SB} = \hat{x} \frac{1}{s_{Bx}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{1}{s_{By}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{1}{s_{Bz}} \frac{\partial}{\partial z}$$
(B.18)

Considere, agora, uma onda plana em que os campos elétrico e magnético são dados por:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{0} \exp(-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \mathbf{E}_{0} \exp\left[-j\left(k_{x}x + k_{y}y + k_{z}z\right)\right]$$
(B.19)

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\mathbf{0}} \exp(-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \mathbf{H}_{\mathbf{0}} \exp\left[-j\left(k_{x}x + k_{y}y + k_{z}z\right)\right]$$
(B.20)

Substituindo E e H nas equações modificadas de Maxwell, obtêm-se:

$$\mathbf{k}_{SB} \times \mathbf{E} = \boldsymbol{\omega}_0 \boldsymbol{\mu} \mathbf{H} \tag{B.21}$$

$$\mathbf{k}_{SB} \times \mathbf{H} = -\omega_0 \mu \mathbf{E} \tag{B.22}$$

$$\mathbf{k}_{SB} \cdot \mathbf{E} = 0 \tag{B.23}$$

$$\mathbf{k}_{SB} \cdot \mathbf{H} = \mathbf{0},\tag{B.24}$$

onde

$$\mathbf{k}_{SB} = \frac{k_x}{s_{Bx}} \hat{x} + \frac{k_y}{s_{By}} \hat{y} + \frac{k_z}{s_{Bz}} \hat{z}$$
(B.25)

O produto vetorial de (B.21) com $\mathbf{k}_{\scriptscriptstyle SB}$ é dado por:

$$\mathbf{k}_{SB} \times (\mathbf{k}_{SB} \times \mathbf{E}) = \omega_0 \mu \, \mathbf{k}_{SB} \times \mathbf{H} = -\omega_0^2 \, \mu \varepsilon \, \mathbf{E}$$
(B.26)

Fazendo-se o uso de identidade vetorial e de (B.23), (B.26) torna-se:

$$\left(\mathbf{k}_{SB}\cdot\mathbf{k}_{SB}\right)\mathbf{E} = \boldsymbol{\omega}_{0}^{2}\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{E}$$
(B.27)

A relação de dispersão é dada por:

$$\mathbf{k}_{SB} \cdot \mathbf{k}_{SB} = \omega_0^2 \mu \varepsilon = k^2 \tag{B.28}$$

ou

$$\left(\frac{k_x}{s_{Bx}}\right)^2 + \left(\frac{k_y}{s_{By}}\right)^2 + \left(\frac{k_z}{s_{Bz}}\right)^2 = k^2$$
(B.29)

Considerando a Fig. B.2, uma solução para esta equação é:

$$k_x = ks_{Bx} \operatorname{sen} \theta \cos \varphi \tag{B.30a}$$

$$k_{y} = ks_{By} \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \tag{B.30b}$$

$$k_z = ks_{Bz} \cos\theta \tag{B.30c}$$



Fig. B.2 – Incidência de uma onda plana na fronteira entre dois meios.

Aparentemente, quando s_{Bx} é complexo, a onda será atenuada na direção x e o mesmo ocorre para as outras direções. A impedância do meio será:

$$\eta = \frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{H}|} = \frac{|k_{SB}|}{\omega_0 \varepsilon} = \frac{\omega_0 \mu}{|k_{SB}|} = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}},$$
(B.31)

o que indica que a modificação feita no operador ∇ não altera a impedância do meio. Para o caso TE_z, os campos elétricos incidente, refletido e transmitido podem ser escritos como:

$$\mathbf{E}^{i} = \mathbf{E}_{0} \exp\left(-j\mathbf{k}^{i} \cdot \mathbf{r}\right)$$
(B.32)

$$\mathbf{E}^{r} = R^{TE} \mathbf{E}_{0} \exp\left(-j\mathbf{k}^{r} \cdot \mathbf{r}\right)$$
(B.33)

$$\mathbf{E}^{t} = T^{TE} \mathbf{E}_{0} \exp\left(-j\mathbf{k}^{t} \cdot \mathbf{r}\right), \qquad (B.34)$$

onde \mathbf{E}_0 é um vetor constante, Fig. B.2, e R^{TE} e T^{TE} são os coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente, para o modo TE_z. O coeficiente de reflexão do modo TE_z pode ser escrito como:

$$R^{TE} = \frac{k_{1z}s_{B_{2z}}\mu_2 - k_{2z}s_{B_{1z}}\mu_1}{k_{1z}s_{B_{2z}}\mu_2 + k_{2z}s_{B_{1z}}\mu_1},$$
(B.35)

onde 1 representa o meio de onde a onda incide e 2 o meio para onde a onda é transmitida. Para o caso TM_z , tem-se:

$$R^{TE} = \frac{k_{1z} s_{B_{2z}} \varepsilon_2 - k_{2z} s_{B_{1z}} \varepsilon_1}{k_{1z} s_{B_{2z}} \varepsilon_2 + k_{2z} s_{B_{1z}} \varepsilon_1}$$
(B.36)

Da condição de casamento de fase, têm-se que $k_{1x} = k_{2x}$ e $k_{1y} = k_{2y}$, obtendo-se:

$$k_1 s_{1x} \operatorname{sen} \theta_1 \cos \varphi_1 = k_2 s_{2x} \operatorname{sen} \theta_2 \cos \varphi_2$$
(B.37)

$$k_1 s_{1y} \operatorname{sen} \theta_1 \operatorname{sen} \varphi_1 = k_2 s_{2y} \operatorname{sen} \theta_2 \operatorname{sen} \varphi_2$$
(B.38)

Ao se adotar $\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_2$, $\mu_1 = \mu_2$, $s_{B_{1x}} = s_{B_{2x}}$ e $s_{B_{1y}} = s_{B_{2y}}$, obtêm-se:

$$\boldsymbol{\theta}_1 = \boldsymbol{\theta}_2, \quad \boldsymbol{\varphi}_1 = \boldsymbol{\varphi}_2 \tag{B.39}$$

e, conseqüentemente,

$$R^{TE} = 0 \quad e \quad R^{TM} = 0 \tag{B.40}$$

Estas relações permanecem nulas independentemente da escolha de s_{B1z} , s_{B2z} , do ângulo de incidência e da freqüência. Fazendo-se $s_{B2z} = s'_B - js''_B$ uma constante, onde s'_B e s''_B são números reais, com $s'_B \ge 1$, para um rápido decaimento das ondas evanescentes, e $s''_B \ge 0$, para absorção da onda propagante, tem-se que $k_{2z} = k_2(s'_B - js''_B)\cos\theta$ e a onda transmitida será atenuada pelo fator $\exp(k_2 s''_B z \cos\theta)$ na direção z.

Uma parede metálica pode ser usada para terminar a janela computacional. O esquema básico é mostrado na Fig. B.3, que é terminada por uma parede metálica. Portanto, a janela computacional torna-se finita. A escolha dos parâmetros da PML depende da posição. Para uma camada de PML perpendicular ao eixo *x*, têm-se:

$$s_{B_x} = s'_B + s''_B, \qquad s_{B_y} = s_{B_z} = 1$$

Similarmente, para uma camada de PML perpendicular ao eixo y, têm-se:

$$s_{B_y} = s'_B + s''_B, \qquad s_{B_x} = s_{B_z} = 1$$

Para os quatro cantos, têm-se:

$$s_{B_y} = s_{B_y} = s'_B + s''_B, \qquad s_{B_z} = 1$$



Fig. B.3 – Distribuição dos parâmetros da PML em uma janela computacional, no plano °*x-y, encerrada por uma parede metálica.*

B.4 – PML Anisotrópica [5]

A PML introduzida por Berenger é um meio hipotético baseado em um modelo matemático. Uma outra interpretação considera as PMLs como um meio anisotrópico [5, 21], composto pelos tensores permissividade elétrica e permeabilidade magnética. A PML anisotrópica evita a divisão não física dos campos e também tem aplicação no método dos elementos finitos. Considere uma onda plana $\mathbf{H}_{inc} = \mathbf{H}_0 e^{-j\beta_{l_x}x-j\beta_{l_y}y}$ propagando-se em um meio isotrópico denominado meio 1 (x < 0) para um meio 2 anisotrópico uniaxial (x > 0), com tensores permissividade e permeabilidade dados por:

$$\overline{\overline{\varepsilon}}_{2} = \varepsilon_{2} \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix}, \qquad \overline{\overline{\mu}}_{2} = \mu_{2} \begin{bmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix}$$
(B.41)

onde assume-se que $\mathcal{E}_{yy} = \mathcal{E}_{zz}$ e $\mu_{yy} = \mu_{zz}$.

Os campos excitados no interior do meio 2 também são ondas planas e satisfazem as equações de Maxwell. Desta forma, obtêm-se:

$$\boldsymbol{\beta}_2 \times \mathbf{E} = \omega \overline{\mu}_2 \mathbf{H}, \qquad \boldsymbol{\beta}_2 \times \mathbf{H} = -\omega \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}_2 \mathbf{E}$$
 (B.42)

onde $\beta_2 = \beta_{2_x} \hat{x} + \beta_{2_y} \hat{y}$. A equação de onda pode ser escrita como:

$$\boldsymbol{\beta}_{2} \times \left[\left(\boldsymbol{\overline{\varepsilon}}_{2}^{-} \right)^{-1} \boldsymbol{\beta}_{2} \right] \times \mathbf{H} + \boldsymbol{\omega}_{0}^{2} \mathbf{H} = 0$$
 (B.43)

Expressando o produto vetorial como operadores de matriz, essa equação de onda pode ser escrita na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} k_{2}^{2}c - (\beta_{2_{y}})^{2}b^{-1} & \beta_{2_{x}}\beta_{2_{y}}b^{-1} & 0 \\ \beta_{2_{x}}\beta_{2_{y}}b^{-1} & k_{2}^{2}d - (\beta_{2_{x}})^{2}b^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & k_{2}^{2}d - (\beta_{2_{x}})^{2}b^{-1} - (\beta_{2_{y}})^{2}a^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{x} \\ H_{y} \\ H_{z} \end{bmatrix} = 0 \quad (B.44)$$

onde $k_2^2 = \omega_0^2 \mu_2 \varepsilon_2$. A relação de dispersão para o meio 2 é obtida a partir do determinante do operador matricial. Resolvendo para β_{2_x} , verificam-se que as soluções envolvem quatro autovalores. Estas soluções podem ser desacopladas em modos TE e TM diretos e reversos, que satisfazem as seguintes relações de dispersão:

$$k_{2}^{2} - (\beta_{2_{x}})^{2} b^{-1} d^{-1} - (\beta_{2_{y}})^{2} a^{-1} d^{-1} = 0 \implies \text{TE}(H_{x}, H_{y} = 0)$$
(B.45)

$$k_{2}^{2} - (\beta_{2_{x}})^{2} b^{-1} d^{-1} - (\beta_{2_{y}})^{2} b^{-1} c^{-1} = 0 \implies \text{TM} (H_{z} = 0)$$
(B.46)

O coeficiente de reflexão na interface x = 0 das regiões 1 e 2 pode ser agora obtido. Considere uma onda incidente TE no meio 1. Neste meio, os campos podem ser representados como uma superposição dos campos incidente e refletido por:

$$\mathbf{H}_{1} = H_{0} \left(1 + \Gamma e^{2j\beta_{1_{x}}x} \right) e^{-j\beta_{1_{x}}x - j\beta_{1_{y}}y} \hat{z}$$
(B.47)

$$\mathbf{E}_{1} = \left[-\frac{\beta_{1_{y}}}{\omega_{0}\varepsilon_{1}} \left(1 + \Gamma e^{2j\beta_{1_{x}}x} \right) \hat{x} + \frac{\beta_{1_{x}}}{\omega_{0}\varepsilon_{1}} \left(1 + \Gamma e^{2j\beta_{1_{x}}x} \right) \hat{y} \right] H_{0} e^{-j\beta_{1_{x}}x - j\beta_{1_{y}}y}$$
(B.48)

A onda transmitida para o meio 2 é também uma onda TE_z , com características governadas por (B.45). Estes campos podem ser representados por:

$$\mathbf{H}_{2} = H_{0} \tau e^{-j\beta_{2_{x}}x - j\beta_{2_{y}}y} \hat{z}$$
(B.49)

$$\mathbf{E}_{2} = \left[-\frac{\beta_{2_{y}}}{\omega_{0}\varepsilon_{2}a} \hat{x} + \frac{\beta_{2_{x}}}{\omega_{0}\varepsilon_{2}b} \hat{y} \right] H_{0} \tau e^{-j\beta_{2_{x}}x - j\beta_{2_{y}}y}, \qquad (B.50)$$

onde Γ e τ são os coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente. Estes coeficientes são obtidos forçando a continuidade tangencial dos campos em x = 0 e são dados por:

$$\Gamma = \frac{\beta_{1_x} - \beta_{2_x} b^{-1}}{\beta_{1_x} + \beta_{2_x} b^{-1}}, \qquad \tau = 1 + \Gamma = \frac{2\beta_{1_x}}{\beta_{1_x} + \beta_{2_x} b^{-1}}$$
(B.51)

Para todos os ângulos da onda incidente, tem-se que:

$$\boldsymbol{\beta}_{2_{y}} = \boldsymbol{\beta}_{1_{y}} \tag{B.52}$$

devido ao casamento de fase em x = 0. Substituindo (B.52) em (B.45) e resolvendo para β_{2_x} , obtém-se:

$$\beta_{2_x} = \sqrt{k_2^2 b d - a^{-1} b \left(\beta_{1_y}\right)^2}$$
(B.53)

Para a condição de casamento entre os meios ser assegurada, assume-se que $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\mu_1 = \mu_2$, d = b e $a^{-1} = b$. Portanto, tem-se que $k_2 = k_1$ e (B.53) se torna:

$$\beta_{2_x} = b \sqrt{k_1^2 - (\beta_{1_y})^2} = b \beta_{1_x}$$
(B.54)

Substituindo (B.54) em (B.51), verifica-se que $\Gamma = 0$ para todos os valores de β_{I_x} .

O mesmo procedimento pode ser feito para o modo TM. Para este caso, o coeficiente de reflexão e é obtido trocando-se *b* por *d* e *a* por *c* adequadamente em (B.51). A condição de não reflexão é garantida quando $b = d e c^{-1} = d$.

Combinando os resultados dos casos TE e TM, pode escrever que:

$$\begin{array}{c} = \\ \varepsilon_{2} = \varepsilon_{1}s, \\ \end{array} \begin{array}{c} = \\ \mu_{2} = \\ \mu_{1}s, \\ \end{array} \begin{array}{c} = \\ s = \\ \end{array} \begin{array}{c} s_{B_{x}}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s_{B_{x}} & 0 \\ 0 & 0 & s_{B_{x}} \end{array} \right)$$
(B.55)

A condição de não reflexão é independente do ângulo de incidência, polarização e freqüência da onda incidente e, similarmente às PMLs de Berenger, esta condição é válida para qualquer valor de s_{Bx} . Por exemplo, se $s_{B_x} = 1 - \sigma/j\omega_0\varepsilon_1$ ou $s_{B_x} = 1 + \sigma/j\omega_0\varepsilon_1$, temse:

$$\beta_{2_x} = s_{B_x} \beta_{1_x} = (1 - \sigma / j \omega_0 \varepsilon_1) \beta_{1_x}$$
(B.56)

Nota-se que a parte real de β_{2_x} é idêntica à de β_{1_x} . Isto implica que as velocidades de fase da onda incidente na interface entre os dois meios e da onda transmitida para o meio 2 são iguais para todos os ângulos de incidência. A impedância da onda no meio 2 é idêntica à do meio 1, que é conseqüência do fato dos meios estarem perfeitamente casados.

Finalmente, substituindo-se (B.52) e (B.56) em (B.49) e (B.50), os campos transmitidos para o meio 2, para o caso TE, podem ser escritos como:

$$\mathbf{H}_{2} = H_{0} \tau e^{-j\beta_{1_{x}}x - j\beta_{1_{y}}y} e^{-\sigma x \eta_{1} \cos \theta} \hat{z}$$
(B.57)

$$\mathbf{E}_{2} = \left(-s_{B_{x}}\eta_{1} \operatorname{sen} \theta \,\hat{x} + \eta_{1} \cos \theta \,\hat{y}\right) H_{0} e^{-j\beta_{1_{x}}x - j\beta_{1_{y}}y} e^{-\sigma \,x \,\eta_{1} \cos \theta}, \qquad (B.58)$$

onde $\eta_1 = \sqrt{\mu_1/\varepsilon_1}$ e θ é o ângulo de incidência relativo ao eixo *x*. Através de (B.57) e (B.58), pode-se observar que a onda no meio 2 se propaga com a mesma velocidade de fase do meio 1, porém a amplitude desta decai exponencialmente à medida que se desloca no eixo *x*. Também, verifica-se que o fator de atenuação é independente da freqüência, embora seja dependente do ângulo θ e da condutividade σ .

Apêndice C

Análise Modal de Estruturas Eletromagnéticas

Este apêndice demonstrará as formulações empregadas na análise modal das estruturas eletromagnéticas envolvidas nesta tese. Através da análise modal, obtêm-se a constante de propagação k_z e a distribuição espacial dos campos eletromagnéticos que são utilizados na formação do campo inicial para as análises no domínio do tempo.

Para as estruturas planares simples e periódicas estudadas no Capítulo 3, a formulação leva em consideração as variações dos campos eletromagnéticos em uma direção da seção transversal e na direção de propagação. A Fig. C.1 mostra um exemplo de um (a) guia de onda óptico simples e um (b) guia de onda feito de cristais fotônicos, ambos utilizados em análises modais.



Fig. C.1 – (a) guia de onda óptico simples e (b) guia de onda periódico.

Considerando o campo invariável na direção *x*, a equação de onda escalar no domínio da freqüência para o campo elétrico e o campo magnético pode ser escrita como [20]:

$$\frac{\partial}{\partial y} p \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} p \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \frac{\omega_0^2}{c^2} q \Phi = 0$$
 (C.1)

onde $\Phi = E_x$, p = 1 e $q = n^2$ para o modo TE e $\Phi = H_x$, $p = 1/n^2$ e q = 1 para o modo TM. Devido à periodicidade do campo no sentido de propagação, Φ pode ser escrito como [33]:

$$\Phi(y,z) = \phi(y,z) \exp(-jk_z z)$$
(C.2)

Substituindo-se (C.2) em (C.1), obtém-se:

$$-\frac{\partial}{\partial y}p\frac{\partial\phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z}p\frac{\partial\phi}{\partial z} + 2jk_zp\frac{\partial\phi}{\partial z} + k_z^2p\phi = \frac{\omega_0^2}{c^2}q\phi \qquad (C.3)$$

Aplicando o método de Galerkin para a discretização espacial, pode-se escrever (C.3) na forma matricial de problemas de autovalores.

$$[A]\{\phi\} = \left(\frac{\omega_0}{c}\right)^2 [B]\{\phi\},\tag{C.4}$$

onde $(\omega_0/c)^2$ e { ϕ } são o autovalor e o autovetor, respectivamente. As matrizes [A] e [B] são dadas por:

$$\left[A^{e}\right]_{ij} = \iint_{\Omega_{e}} \left[p \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial y} \frac{\partial L_{j}^{e}}{\partial y} + p \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial z} \frac{\partial L_{j}^{e}}{\partial z} + 2jk_{z}p \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial z} L_{j}^{e} + k_{z}^{2}pL_{i}^{e}L_{j}^{e} \right] d\Omega \qquad (C.5)$$

$$\left[B^{e}\right]_{ij} = \iint_{\Omega_{e}} qL^{e}_{i}L^{e}_{j}d\Omega, \qquad (C.6)$$

O sistema matricial (C.4) é resolvido utilizando-se a função *Eigs* do programa computacional MATLAB[®], sendo que, para uma dada constante de propagação k_z , obtém-se a freqüência angular ω_0 . As demais componentes do campo magnético, para o modo TE, e campo elétrico, para o modo TM, foram obtidas inserindo { ϕ } nas equações de Maxwell e resolvendo-as através do método dos elementos finitos. Para o caso TE, têm-se:

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - jk_z E_x = -j\omega_0 \mu_0 H_y$$
(C.7a)

$$\frac{\partial E_x}{\partial y} = j\omega_0 \mu_0 H_z, \qquad (C.7b)$$
Aplicando-se o método de Galerkin em (C.7a) e (C.7b), obtêm-se os seguintes sistemas matriciais:

$$[M_{z}]\{\phi\} - jk_{z}[M]\{\phi\} = -j\omega_{0}\mu_{0}[M]\{H_{y}\}$$
(C.8a)

$$[M_{y}]\{\phi\} = j\omega_{0}\mu_{0}[M]\{H_{z}\}$$
(C.8b)

onde as matrizes elementares são dadas por:

$$\left[M_{z}^{e}\right] = \iint_{\Omega_{e}} \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial z} L_{j}^{e} d\Omega$$
(C.9)

$$\left[M_{y}^{e}\right] = \iint_{\Omega_{e}} \frac{\partial L_{i}^{e}}{\partial y} L_{j}^{e} d\Omega$$
(C.10)

$$\left[M^{e}\right] = \iint_{\Omega_{e}} L_{i}^{e} L_{j}^{e} d\Omega \tag{C.11}$$

Analogamente, para o modo TM, têm-se:

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - jk_z H_x = j\omega_0 \varepsilon_0 n^2 E_y \qquad (C.12a)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial y} = -j\omega_0 \varepsilon_0 n^2 E_z, \qquad (C.12b)$$

Aplicando o método de Galerkin em (C.12a) e (C.12b), obtêm-se os seguintes sistemas matriciais:

$$[M_{z}]\{\phi\} - jk_{z}[M]\{\phi\} = j\omega_{0}\varepsilon_{0}[M_{n}]\{E_{y}\}$$
(C.13a)

$$[M_{y}]\{\phi\} = -j\omega_{0}\varepsilon_{0}[M_{n}]\{E_{z}\}$$
(C.13b)

onde

$$\left[M_{n}^{e}\right] = \iint_{\Omega_{e}} n^{2} L_{i}^{e} L_{j}^{e} d\Omega$$
(C.14)

No caso das estruturas estudas no Capítulo 4, a formulação utilizada leva em consideração apenas as variações dos campos nas direções da seção transversal. O campo Φ pode ser escrito como:

$$\Phi(x, y) = \phi(x, y) \exp(-jk_z z)$$
(C.15)

Aplicando (C.15) na equação de onda escalar no domínio da freqüência, obtém-se [20]:

$$\frac{\partial}{\partial y} p \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} p \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\omega_0^2}{c^2} q \phi = k_z^2 p \phi \qquad (C.16)$$

Aplicando o método de Galerkin em (C.16), obtém-se o sistema matricial de problemas de autovalores:

$$[A]\{\phi\} = (k_z)^2 [B]\{\phi\},$$
(C.17)

onde $(k_z)^2 \in {\phi}$ são o autovalor e o autovetor, respectivamente. As matrizes [A] e [B] são dadas por:

$$\left[A^{e}\right]_{ij} = \iint_{\Omega_{e}} \left[-p \frac{\partial L^{e}_{i}}{\partial y} \frac{\partial L^{e}_{j}}{\partial y} - p \frac{\partial L^{e}_{i}}{\partial z} \frac{\partial L^{e}_{j}}{\partial z} + \frac{\omega_{0}^{2}}{c^{2}} q L^{e}_{i} L^{e}_{j}\right] d\Omega$$
(C.18)

$$\left[B^{e}\right]_{ij} = \iint_{\Omega_{e}} pL_{i}^{e}L_{j}^{e}d\Omega$$
(C.19)

O sistema matricial (C.17) resulta em uma constante de propagação k_z para uma dada freqüência angular ω_0 . As demais componentes dos campos são obtidas utilizando-se o mesmo procedimento descrito acima e considerando o campo invariável na direção de propagação.