

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 13 за 2025 г.</u>



А.В. Березин, <u>В.Д. Левченко,</u> <u>А.Ю. Перепёлкина</u>, А.М. Федотов

ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Минимальная схема метода решёточных уравнений Максвелла

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Минимальная схема метода решёточных уравнений Максвелла / А.В. Березин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2025. № 13. 24 с. EDN: <u>BAAKDJ</u> https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-13 Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М. В. Келдыша Российской академии наук

А.В.Березин, В.Д.Левченко, А.Ю.Перепёлкина, А.М. Федотов

Минимальная схема метода решёточных уравнений Максвелла

> Москва 2025

УДК 519.688

А.В.Березин, В.Д.Левченко, А.Ю.Перепёлкина, А.М. Федотов

Минимальная схема метода решёточных уравнений Максвелла

Мы представляем новую простую реализацию численной схемы по решению дифференциальных уравнений Максвелла в вакууме. Схема относится к классу методов решёточных уравнений Максвелла (LMM), которые развились из методов решёточных уравнений Больцмана (LBM) — современного класса численных схем, применяемых для решения задач гидрогазодинамики. Схема по своему построению принципиально отличается от методов конечных разностей во временной области (FDTD) и лишена некоторых проблем схем FDTD. Компоненты электрического и магнитного полей выражаются как линейные комбинации двенадцати переменных, которые можно соотнести с пространственно изотропным набором монохроматических плоских волн. Впервые исследуется дисперсия схемы и приводится явная и взаимооднозначная функциональная связь между переменными численной схемы и электромагнитными полями.

Ключевые слова: метод решёточных уравнений Больцмана; метод решёточных уравнений Максвелла; уравнения Максвелла

A. Berezin, V. Levchenko, A. Perepelkina, A. Fedotov

Minimal scheme for the lattice Maxwell method

We introduce a new simple implementation of a numerical scheme for solving Maxwell's equations in vacuum. The scheme belongs to the lattice Maxwell methods (LMM) class, which was developed from modern lattice Boltzmann methods (LBM) for fluid dynamics problems. The scheme differs fundamentally in construction from the finite difference time domain methods (FDTD) and is free of some problems of FDTD schemes. The components of the electric and magnetic fields are expressed as linear combinations of twelve variables that can be related to a spatially isotropic set of monochromatic plane waves. For the first time, the numerical dispersion of the scheme is investigated and an explicit one-to-one functional relationship between the variables of the numerical scheme and the electromagnetic fields is given. **Key words:** Lattice-Boltzmann method; Lattice-Maxwell method; Maxwell's

Key words: Lattice-Boltzmann method; Lattice-Maxwell method; Maxwell's equations

1 Введение

Уравнения Максвелла [1] — фундаментальные уравнения физики, описывающие динамику электромагнитных полей. Они являются составляющей многих современных областей исследований, таких как оптика [2–4], магнитная гидродинамика (MHD) [5–8], методы частиц в ячейках (PIC) [9–11] и др. Уравнения Максвелла в среде с диэлектрической проницаемостью ε , магнитной проницаемостью μ и при наличии источников ρ , **ј** имеют вид

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho, \qquad \nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \qquad \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \qquad (1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0,$$
 $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},$ $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H},$ (1b)

где c — скорость света, а **E** и **H** — напряжённости электрического и магнитного полей соответственно. В классическом вакууме ($\varepsilon = \mu = 1, \rho = 0, \mathbf{j} = \mathbf{0}$) уравнения (1) представляют из себя линейную однородную систему уравнений в частных производных относительно полей **E**, **H**. Однако при наличии среды или учёте эффекта поляризации вакуума [12–14] величины ε , μ , ρ , **j** могут включать в себя сложную нелинейную зависимость от полей.

Наиболее распространённым инструментом для численного решения уравнений Максвелла на текущий момент являются методы конечных разностей во временной области (FDTD) [2,15–18]. При этом производные в (1) аппроксимируются конечными разностями компонент электромагнитных полей, отнесённых к смещённым относительно друг друга пространственным сеткам. Также значения полей **E** и **H** вычисляются на разных срезах по времени. Одним из основных ограничений схем FDTD является необходимость достаточно малого шага пространственной сетки для моделирования полей сложной геометрии. Условие Куранта – Фридрихса – Леви [19] ограничивает временной шаг схемы схожим порядком. Точность схемы удобно описывать в терминах численной дисперсии — ошибки дисперсионного соотношения $\omega^2 = (\mathbf{k}c)^2$ для решения в виде плоской волны, **E**, **H** ~ cos($\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$). Для подавления численной дисперсия схемы FDTD требуют порядка 20 узлов сетки на самую короткую длину волны в задаче [17].

Развитие численных методов приводит к созданию новых схем решения уравнений Максвелла. Одно из таких расширений появилось из методов решёточных уравнений Больцмана (LBM) [20,21] для задач гидрогазодинамики. Схемы LBM по своему построению принципиально отличаются от конечно-разностных схем. В LBM решается система функциональных уравнений относительно популяций — дискретных в пространстве скоростей значений кинетической функции Больцмана. При этом наблюдаемые физические величины (в случае гидрогазодинамики — плотность, скорость потока и температура) выражаются как линейные комбинации популяций. Эволюция популяций на одном временном шаге разделяется на два этапа: шаг переноса, на котором популяции перемещаются по узлам пространственной сетки согласно фиксированным скоростям (набор скоростей называется шаблоном LBM), и шаг столкновения, на котором популяции локально перемешиваются, получая приращение, зависящее от наблюдаемых величин. Со временем стали появляться адаптации LBM для задач диффузии [22], магнитной гидродинамики [7,8] и переноса излучения [23–25]. В работе [8] ротор электрического поля впервые был выражен через набор популяций LBM. В 2010 году появилась первая модификация LBM для уравнений Максвелла [26].

В работе [26] предложена численная схема LBM класса, решающая уравнения Максвелла в среде с произвольной диэлектрической $\varepsilon(t, \mathbf{r})$ и магнитной $\mu(t, \mathbf{r})$ проницаемостями, проводимостью $\sigma(t, \mathbf{r})$ ($\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$) и при наличии зарядов $\rho(t, \mathbf{r})$. Схема оперирует шаблоном из 13 скоростей, соответствующих центрам рёбер куба вместе с нулевой скоростью. Учёт среды с произвольными свойствами приводит к относительно большому числу переменных схемы — 50 на один узел пространственной сетки. Работа [26] положила начало развитию методов решёточных уравнений Максвелла (LMM) [27–36]. В работах [29,30] предложен альтернативный шаблон скоростей, соответствующий центрам граней куба. На его основе в работе [32] сформулирована самая простая на текущий момент схема LMM с 12 переменными на один узел. В работах [26,32–34] приводится сравнение эффективности схем LMM со схемами FDTD. Согласно тестам, схемы LMM работают быстрее схем FDTD при заданном уровне точности и обладают большей стабильностью, тем самым выступая многообещающей альтернативой FDTD.

В текущей работе мы строим и анализируем простую, минимально возможную схему LMM для решения уравнений Максвелла в вакууме. Для построения схемы мы используем более изотропный шаблон скоростей работы [26] и придерживаемся лаконичности изложения работы [32]. В отличие от схем LBM, итоговая схема, как и уравнения Максвелла в вакууме, является линейной, что значительно упрощает её аналитический анализ. Мы впервые приводим дисперсионный анализ схемы LMM, который показывает наличие 12 направлений, для которых дисперсия может быть полностью подавлена. Также мы впервые указываем взаимооднозначную связь между переменными схемы и значениями полей вместе с их пространственными производными.

В работе используются тензорные обозначения. При этом индексы *i*, *j* относятся к номерам популяций, а индексы *a*, *b*, *d* — к декартовым координатам. Таким образом, к примеру, k_{ia} — *a*-я декартова компонента *i*-й скорости шаблона LMM.

Повторяющиеся в произведении индексы стандартным образом предполагают суммирование по этим индексам. Однако далее исключением в этом правиле станет индекс *i*, суммирование по которому всегда будет указываться явно.

2 Описание метода

Схемы LMM даже на текущий момент не имеют некоторого исходного уравнения, которое могло бы в полной мере описать их физическую природу, подобно уравнению Больцмана для схем LBM. В связи с этим мы, как и все предшествующие авторы, начнём с непосредственного описания самой схемы и только после этого укажем её связь с уравнениями Максвелла.

2.1 Минимальная численная схема

Рассмотрим однородную линейную систему уравнений¹

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{r} + c_{\#} \Delta t \, \hat{\mathbf{k}}_i) - f_i(t, \mathbf{r}) = -2 \left(f_i(t, \mathbf{r}) - f_i^{\text{eq}}(t, \mathbf{r}) \right), \qquad i \in \{1, \dots, m\}, \qquad (2)$$

относительно популяций f_i , в которой

$$f_i^{\text{eq}} = \frac{1}{4} (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{E} + \hat{\mathbf{h}}_i \cdot \mathbf{H}), \qquad \mathbf{E} \equiv \sum_{i=1}^m \hat{\mathbf{e}}_i f_i, \qquad \mathbf{H} \equiv \sum_{i=1}^m \hat{\mathbf{h}}_i f_i, \tag{3}$$

 Δt — шаг по времени, $c_{\#}$ — скорость переноса популяций, а $\hat{\mathbf{k}}_i$, $\hat{\mathbf{e}}_i$, $\hat{\mathbf{h}}_i$ — векторные коэффициенты (Табл. 1). Выражения f_i^{eq} называются равновесными популяциями.

2.1.1 Восстановление уравнений Максвелла

Представим рассматриваемую систему в эквивалентной форме с точностью до слагаемых порядка $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Используя разложение

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{r} + c_{\#}\hat{\mathbf{k}}_i \Delta t) \simeq \left(1 + \Delta t D_i + \frac{\Delta t^2 D_i^2}{2}\right) f_i(t, \mathbf{r}), \qquad D_i \equiv \frac{\partial}{\partial t} + c_{\#}\hat{k}_{ia}\frac{\partial}{\partial x_a}, \quad (4)$$

уравнения (2) можно переписать в виде

$$\Delta t D_i \left(1 + \frac{\Delta t D_i}{2} \right) f_i = -2 \left(f_i - f_i^{\text{eq}} \right).$$
(5)

¹Ниже символ ^ является обозначением единичного вектора. Для произвольного вектора **v** существует $\hat{\mathbf{v}} \equiv \mathbf{v}/v$.

Действуя на (5) оператором $(1 - \Delta t D_i/2)$ и пренебрегая слагаемыми ~ Δt^3 , получаем искомую форму, содержащую только производные первого порядка:

$$D_i f_i^{\text{eq}} = -2 \left(f_i - f_i^{\text{eq}} \right) / \Delta t.$$
(6)

Для восстановления динамических уравнений Максвелла домножим равенства (6) на $\hat{\mathbf{e}}_i$, $\hat{\mathbf{h}}_i$ и просуммируем их по индексу *i*, соответственно получив

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c \, \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H} = 0, \qquad \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + c \, \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} = 0, \qquad c = c_{\#}/2. \tag{7}$$

При этом мы использовали явный вид коэффициентов $\hat{\mathbf{k}}_i$, $\hat{\mathbf{e}}_i$, $\hat{\mathbf{h}}_i$ (Табл. 1).

С учётом (7) векторы **E** и **H**, определённые в (3), отождествляются с электрическим и магнитным полем соответственно.

2.1.2 Структура векторных коэффициентов

Для указанного перехода от системы (6) к уравнениям Максвелла (7) векторные коэффициенты должны удовлетворять соотношениям

$$\sum_{i=1}^{m} \hat{e}_{ia} \hat{h}_{ib} = 0, \qquad \sum_{i=1}^{m} \hat{k}_{ia} \hat{e}_{ib} \hat{e}_{ic} = \sum_{i=1}^{m} \hat{k}_{ia} \hat{h}_{ib} \hat{h}_{ic} = 0, \tag{8a}$$

$$\sum_{i=1}^{m} \hat{e}_{ia} \hat{e}_{ib} = \sum_{i=1}^{m} \hat{h}_{ia} \hat{h}_{ib} = 4\delta_{ab}, \qquad \sum_{i=1}^{m} \hat{k}_{ia} \hat{e}_{ib} \hat{h}_{ic} = 2\varepsilon_{abc}.$$
 (8b)

С учётом (8) справедливы равенства

$$\sum_{i=1}^{m} \hat{\mathbf{e}}_i f_i^{\text{eq}} = \mathbf{E}, \qquad \qquad \sum_{i=1}^{m} \hat{\mathbf{h}}_i f_i^{\text{eq}} = \mathbf{H}, \qquad (9a)$$

$$\sum_{i=1}^{m} \hat{\mathbf{e}}_{i} D_{i} f_{i}^{\mathrm{eq}} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \frac{c_{\#}}{2} \, \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H}, \qquad \sum_{i=1}^{m} \hat{\mathbf{h}}_{i} D_{i} f_{i}^{\mathrm{eq}} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + \frac{c_{\#}}{2} \, \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E}. \tag{9b}$$

Условия (8а) выражают изотропность распределения векторов $\hat{\mathbf{k}}_i, \hat{\mathbf{e}}_i, \hat{\mathbf{h}}_i$ в пространстве. Для их выполнения достаточно только последней строки в Табл. 1. Более содержательными являются условия (8b), первое из которых согласует моменты f_i^{eq} с моментами f_i — равенства (9а), а второе позволяет преобразовать операторы ($\hat{\mathbf{k}}_i \cdot \nabla$) в ротор — равенства (9b).

На данный момент найдено только два принципиально разных набора векторов $\hat{\mathbf{k}}_i$, $\hat{\mathbf{e}}_i$, $\hat{\mathbf{h}}_i$. Рассматриваемый в данной работе набор (Табл. 1) предложен ещё в оригинальной статье [26], при этом направления переноса популяций $\hat{\mathbf{k}}_i$ соответствуют двенадцати серединам рёбер куба. Другой вариант предложен в работах [29,30] и позже применён для построения простой схемы в работе [32]. В этом случае векторы $\hat{\mathbf{k}}_i$ отвечают шести центрам

i	$\hat{\mathbf{k}}_i$	$\hat{\mathbf{e}}_i$	$\hat{\mathbf{h}}_i = \hat{\mathbf{k}}_i imes \hat{\mathbf{e}}_i$
1	$(0, -1, -1)/\sqrt{2}$	$(0, -1, 1)/\sqrt{2}$	(-1, 0, 0)
2	$(-1, 0, -1)/\sqrt{2}$	$(1, 0, -1)/\sqrt{2}$	(0, -1, 0)
3	$(-1, -1, 0)/\sqrt{2}$	$(-1, 1, 0)/\sqrt{2}$	(0, 0, -1)
4	$(0, 1, -1)/\sqrt{2}$	$(0, 1, 1)/\sqrt{2}$	(1, 0, 0)
5	$(-1, 0, 1)/\sqrt{2}$	$(1, 0, 1)/\sqrt{2}$	(0, 1, 0)
6	$(1, -1, 0)/\sqrt{2}$	$(1, 1, 0)/\sqrt{2}$	(0, 0, 1)
7-12	$-\hat{\mathbf{k}}_{13-i}$	$-\hat{\mathbf{e}}_{13-i}$	$\hat{\mathbf{h}}_{13-i}$

Таблица 1: векторные коэффициенты $\hat{\mathbf{k}}_i, \, \hat{\mathbf{e}}_i, \, \hat{\mathbf{h}}_i.$

граней куба, но для построения минимальной схемы требуют дублирования, снова приводя к двенадцати популяциям. Второй вариант позволяет использовать более простую геометрию пространственной решётки, однако обладает меньшей пространственной изотропностью.

2.1.3 Уточнение начальных популяций

Два векторных соотношения в (3) не позволяют однозначно восстановить популяции по значениям полей. Это приводит к стандартной для схем LBM проблеме задания начальных популяций [37,38]. В качестве начальных условий можно использовать, например, выражения f_i^{eq} , однако это вносит дополнительную ошибку в схему. Чтобы устранить такой источник ошибок, найдём взаимооднозначную связь между популяциями f_i и полями **E**, **H**.

Систему уравнений (6) можно рассматривать как соотношения между популяциями и пространственными производными полей. Для этого необходимо выразить входящие в указанные равенства производные по времени с помощью уравнений Максвелла (7). После этого система примет вид

$$f_i = f_i^{\text{eq}} + f_i^{\text{neq}},\tag{10}$$

где неравновесные популяции

$$f_i^{\text{neq}} \equiv f_i - f_i^{\text{eq}} = \frac{c\,\Delta t}{8} \left((\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H}) \cdot \hat{\mathbf{e}}_i - (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{h}}_i + 2(\hat{\mathbf{k}}_i \cdot \boldsymbol{\nabla})(\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{E} + \hat{\mathbf{h}}_i \cdot \mathbf{H}) \right).$$
(11)

Явный вид f_i^{eq} и f_i^{neq} для векторных коэффициентов Таблицы 1 приведён в приложении А.

Выражения (10), (11) можно использовать для уточнения начальных популяций, однако они всё ещё не задают искомую взаимооднозначную связь. Чтобы её установить, попробуем обратить полученную систему, выразив комбинации производных, входящие в (11),

$$\frac{\partial E_x}{\partial x}, \quad \frac{\partial E_y}{\partial y}, \quad \frac{\partial E_z}{\partial z}, \quad \frac{\partial H_x}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial x}, \quad \frac{\partial H_x}{\partial z} + \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad \frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial H_z}{\partial y}$$
(12)

через популяции f_i . Такая система окажется несовместной, ранг основной матрицы равен пяти, а ранг расширенной — шести. Но рассматриваемая численная схема должна разрешать произвольную динамику электромагнитных полей, следовательно, несовместность системы в исходном виде связана с наличием дополнительной связи между популяциями f_i . Действительно, исходя из явного вида популяций (40), (41) легко убедиться, что

$$\sum_{i=1}^{m} f_i = 0.$$
 (13)

Исключая с помощью (13) из системы (10), к примеру, f_1 , для производных (12) находим

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{2}{c\Delta t}(f_2 + f_5 + f_8 + f_{11}),$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial y} - \frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{2}{c\Delta t}(f_2 + f_3 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_{10} + f_{11}),$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial x} = \frac{\sqrt{2}}{c\Delta t}(f_3 + 2f_5 + f_6 + f_7 + 2f_9 + f_{10} + 2f_{11} + 2f_{12}),$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} + \frac{\partial H_z}{\partial x} = \frac{\sqrt{2}}{c\Delta t}(f_2 + 2f_4 + f_5 + 2f_7 + f_8 + 2f_{10} + f_{11} + 2f_{12}),$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial H_z}{\partial y} = \frac{\sqrt{2}}{c\Delta t}(-f_2 - f_3 - f_5 + f_6 - f_7 + f_8 + f_{10} + f_{11}).$$
(14)

Соотношения (14) вместе с условием (13) и определениями (3) задают явную и однозначную связь между набором популяций LMM и электромагнитными полями.

2.2 Дисперсия минимальной схемы

Исследуем ошибку схемы с помощью анализа фон Неймана [39, 40]. Будем искать решения системы (2) в виде монохроматических плоских волн

$$f_j(t, \mathbf{r}) = a_j \, e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}, \qquad \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z). \tag{15}$$

Подстановка (15) в (2) приводит к однородной системе линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов a_i :

$$M_{jk}a_k = 0, \qquad M = M_0 + 4\alpha M_{\text{diag}}, \tag{16}$$

где $\alpha = \exp(-i\omega \Delta t),$

— постоянная матрица внедиагональных элементов матрицы M, а

$$M_{\text{diag}} = \text{diag}\left(\frac{1}{\alpha_y \alpha_z}, \frac{1}{\alpha_x \alpha_z}, \frac{1}{\alpha_x \alpha_y}, \frac{\alpha_y}{\alpha_z}, \frac{\alpha_z}{\alpha_x}, \frac{\alpha_x}{\alpha_y}, \frac{\alpha_y}{\alpha_x}, \frac{\alpha_z}{\alpha_z}, \frac{\alpha_z}{\alpha_y}, \alpha_x \alpha_y, \alpha_x \alpha_z, \alpha_y \alpha_z\right)$$
(18)

— диагональная матрица, содержащая в переменных

$$\alpha_x = e^{i\sqrt{2}k_x c\,\Delta t}, \qquad \alpha_y = e^{i\sqrt{2}k_y c\,\Delta t}, \qquad \alpha_z = e^{i\sqrt{2}k_z c\,\Delta t} \tag{19}$$

всю зависимость от волнового вектора k.

Равенство $\det M(\omega, \mathbf{k}) = 0$ неявно описывает дисперсию схемы. Разрешить его аналитически в общем виде не представляется возможным, поэтому мы исследуем частотную дисперсию $\omega = \omega(\mathbf{k})$ вдоль некоторых выделенных направлений. Тем не менее дальнейшее рассмотрение в полной мере отражает характер численных ошибок схемы.

Пусть волновой вектор исследуемого решения сонаправлен с одной из декартовых осей, $\mathbf{k} = \pm k \hat{\mathbf{e}}_a$, тогда

$$\det M \big|_{\mathbf{k}=\pm k\hat{\mathbf{e}}_a} = \frac{4\,194\,304}{\alpha_e^3} \,(-1+\alpha)^2 \,(1+\alpha)^4 \,(\alpha+\alpha_e) \,(1+\alpha\alpha_e) \times \left(2\alpha_e + 2\alpha^2\alpha_e - \alpha \,(1+\alpha_e)^2\right)^2, \quad (20)$$

где $\alpha_e = \exp(i\sqrt{2} kc \Delta t)$. Приравнивания (20) к нулю, мы получаем уравнение двенадцатой степени относительно переменной α , разрешив которое, частоты можно записать следующим образом:

$$\alpha \equiv e^{-i\omega\,\Delta t} = g\left(\alpha_e(k)\right) \quad \Rightarrow \quad \omega = \frac{1}{\Delta t} \left(\operatorname{atan2}\left(-\operatorname{Im} g, \operatorname{Re} g\right) + 2\pi n + i\ln|g|\right), \quad (21)$$

где atan2(y, x) — арктангенс с двумя аргументами [41], $n \in \mathbb{N}$.

В рассматриваемом случае $\mathbf{k} = \pm k \hat{\mathbf{e}}_a$ находим (с точностью до аддитивного слагаемого $2\pi n/\Delta t$) дисперсионные ветви

$$\omega_1 = 0, \qquad \omega_{3,5} = \frac{1}{\Delta t} \operatorname{atan2} \left(\sqrt{4 + 2\gamma_1} \sin\left(\frac{\Delta\phi}{\sqrt{2}}\right), \gamma_1 \right),$$

$$\omega_{7,9} = \frac{\pi}{\Delta t}, \qquad \omega_{11} = \frac{\pi}{\Delta t} - \sqrt{2} \, kc, \qquad \omega_{2n} = -\omega_{2n-1}, \ n \le 6, \tag{22}$$

в которых

$$\Delta \phi = kc \,\Delta t, \qquad \gamma_1 = 1 + \cos\left(\sqrt{2}\,\Delta\phi\right).$$
 (23)

Для удобства последующего анализа мы разложим ветви, явно содержащие функцию atan2 при $\Delta \phi \rightarrow 0$, что соответствует реалистичному количеству (≥ 10) узлов численной схемы на длину волны:

$$\omega_{3,5} \simeq kc \left(1 - \frac{\Delta \phi^2}{24} - \frac{7 \Delta \phi^4}{1920} + \mathcal{O}\left(\Delta \phi^6\right) \right).$$
(24)

Также мы исследуем дисперсию для направлений $\mathbf{k} = k \hat{\mathbf{k}}_j$. В этом случае

$$\det M \Big|_{\mathbf{k}=k\hat{\mathbf{k}}_{j}} = \frac{2\,097\,152}{\alpha_{k}^{5}} \left(\alpha - \alpha_{k}\right) \left(-1 + \alpha \alpha_{k}\right) \left(\alpha + 2\alpha_{k} + \alpha \alpha_{k} \left(2 + 2\alpha + \alpha_{k}\right)\right) \times \\ \times \left(-1 + \alpha^{2}\right)^{2} \left(2\alpha \left(-1 + \alpha_{k}\right)^{2} \alpha_{k}^{2} + 2\alpha^{3} \left(-1 + \alpha_{k}\right)^{2} \alpha_{k}^{2} + 4\alpha_{k}^{3} + 4\alpha^{4} \alpha_{k}^{3} - \alpha^{2} \left(1 + \alpha_{k} \left(2 + \alpha_{k} \left(3 + \alpha_{k} \left(-4 + \alpha_{k} \left(3 + \alpha_{k} \left(2 + \alpha_{k}\right)\right)\right)\right)\right)\right), \quad (25)$$

 $\alpha_k = \exp(ikc\,\Delta t),$ и дисперсионные ветви имеют вид

$$\omega_{1} = 0, \quad \omega_{3} = kc, \quad \omega_{5} = \frac{1}{\Delta t} \operatorname{atan2} \left(2\sqrt{2(\gamma_{2} - \gamma_{3})} \sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right), 2 - 2\cos\left(\Delta\phi\right) + \gamma_{3} \right),$$
$$\omega_{7} = \pm \frac{\pi}{\Delta t}, \qquad \omega_{11} = \frac{1}{\Delta t} \operatorname{atan2} \left(2\sqrt{2(\gamma_{2} + \gamma_{3})} \sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right), 2 - 2\cos\left(\Delta\phi\right) - \gamma_{3} \right),$$
$$\omega_{9} = \frac{1}{\Delta t} \operatorname{atan2} \left(\sqrt{4 + 2\gamma_{1}} \sin\left(\frac{\Delta\phi}{\sqrt{2}}\right), -\gamma_{1} \right), \qquad \omega_{2n} = -\omega_{2n-1}, n \leq 6,$$
(26)

$$\gamma_{2} = 18 + 18\cos(\Delta\phi) + 4\cos(2\,\Delta\phi), \gamma_{3} = \sqrt{22 + 16\cos(\Delta\phi) + 18\cos(2\,\Delta\phi) + 8\cos(3\,\Delta\phi)}.$$
(27)

При $\Delta \phi \rightarrow 0$

$$\omega_5 \simeq kc \left(1 - \frac{\Delta \phi^2}{16} - \frac{5 \Delta \phi^4}{512} + \mathcal{O} \left(\Delta \phi^6 \right) \right),$$

$$\omega_9 \simeq \frac{\pi}{\Delta t} - \frac{kc}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\Delta \phi^2}{48} - \frac{7 \Delta \phi^4}{7680} + \mathcal{O} \left(\Delta \phi^6 \right) \right),$$

$$\omega_{11} = \frac{\pi}{\Delta t} - \sqrt{\frac{3}{2}} kc \left(1 - \frac{\Delta \phi^2}{48} - \frac{25 \Delta \phi^4}{4608} + \mathcal{O} \left(\Delta \phi^6 \right) \right).$$
(28)



Рис. 1: Двенадцать дисперсионных ветвей схемы LMM в направлениях осей декартовой системы координат (слева) и в направлениях $\hat{\mathbf{k}}_i$ (справа) для параметров c = 1, $\Delta t = 1/\sqrt{2}$. Зелёным цветом обозначены основные ветви, синим — побочные. Штрихпунктирные линии отвечают дублирующимся ветвям. Серые штрихованные линии соответствуют (слева направо) 20/10/5/2/1 узлам на длину волны.

Дисперсионные ветви для ещё одного характерного набора направлений, соответствующего диагоналям куба, приведены в приложении В.

Ветви (22), (26) изображены на рис. 1. Они имеют схожее распределение: их можно разделить на пары, соответствующие прямому (нечётные) и обратному (чётные) распространению волны. Кроме того, все дисперсионные ветви являются строго действительными. Мы проиллюстрировали это только на примере некоторых волновых векторов, однако утверждение справедливо для всех направлений. Как следствие, численная схема не должна быть подвержена диссипации или неустойчивости.

Ветви №7-12 находятся далеко от области $\omega \Delta t \ll 2\pi$, $kc \Delta t \ll 2\pi$, в которой оперирует схема, и являются побочными. Перейти на них возможно только с помощью специальных начальных условий.

Ветви №1-6 являются для схемы основными. Первые две в точности соответствуют стационарным решениям уравнений Максвелла. Ветви №9-12 описывают динамические решения, соответствуя дисперсионному соотношению для плоской монохроматической волны, $\omega^2 = (\mathbf{k}c)^2$. В направлениях декартовых осей эти ветви дублируются, расщепляясь при переходе к направлениям $\hat{\mathbf{k}}_i$. При этом две из четырёх ветвей становятся точными (светлозелёные линии на рис. 1), т.е., находясь на них, решение распространяется без дисперсии.

Наличие двух пар основных динамических ветвей легко объяснить, вычислив собственные векторы системы. Наиболее просто это сделать для бездисперсионной ветви одного из направлений $\hat{\mathbf{k}}_i$. К примеру, для $\hat{\mathbf{k}}_{12}$ собственное решение, отвечающее ветви $\omega = kc$, имеет вид

$$f_j = \frac{a}{2\sqrt{2}}(0, 0, 0, 0, 1, 0, -1, 0, 0, 1, -1, 0)_j e^{-i\omega(t - \hat{\mathbf{k}}_{12} \cdot \mathbf{r})}$$
(29)

и соответствует полям

$$\mathbf{E} = a\hat{\mathbf{h}}_{12}e^{-i\omega(t-\hat{\mathbf{k}}_{12}\cdot\mathbf{r})}, \qquad \mathbf{H} = a\hat{\mathbf{e}}_{12}e^{-i\omega(t-\hat{\mathbf{k}}_{12}\cdot\mathbf{r})}.$$
(30)

Аналогично, но уже используя численный расчёт в силу громоздкости выражения для ω_5 в (26), легко убедиться, что собственное решение основной ветви с дисперсией соответствует полям

$$\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{a}\hat{\mathbf{e}}_{12}e^{-i\omega(t-\hat{\mathbf{k}}_{12}\cdot\mathbf{r})}, \qquad \tilde{\mathbf{H}} = \tilde{a}\hat{\mathbf{h}}_{12}e^{-i\omega(t-\hat{\mathbf{k}}_{12}\cdot\mathbf{r})}.$$
(31)

Таким образом, две пары динамических дисперсионных ветвей отвечают двум ортогональным поляризациям электромагнитной волны. Зафиксировав поляризацию соответствующим образом, мы можем однозначно двигаться только вдоль определённой дисперсионной ветви. В итоге можно утверждать, что схема обладает двенадцатью бездисперсионными направлениями, при условии выбора определённой поляризации поля.

Наконец, обратим внимание на то, что когда ошибка дисперсии присутствует, она не только является $\mathcal{O}(\Delta \phi^2)$, но и дополнительно подавлена множителем ~ 10⁻¹ (соотношения (24), (28)).

2.3 Численная реализация

Алгоритм решения системы уравнений LMM (2) является стандартным для схемы на основе LBM. Эволюция популяций, соответствующая временному шагу Δt , разделяется на два последовательных этапа [21],

• Шаг переноса:
$$f_i^*(t, \mathbf{r}) = f_i(t - \Delta t, \mathbf{r} - \Delta \mathbf{r}_i), \quad \Delta \mathbf{r}_i \equiv c_{\#} \Delta t \, \hat{\mathbf{k}}_i; \quad (32)$$

• Шаг столкновения:
$$f_i(t, \mathbf{r}) = f_i^*(t, \mathbf{r}) - 2\left(f_i^*(t, \mathbf{r}) - f_i^{eq}(t, \mathbf{r})\right),$$
 (33)

где f_i^* обозначают промежуточные предстолкновительные популяции.

На шаге переноса (32), который соответствует левой части равенств (2), популяции независимо перемещаются на вектора $\Delta \mathbf{r}_i$. При этом предполагается, что перемещение каждой популяции происходит строго из одного узла пространственной решётки в другой узел. В частном случае рассматриваемого набора направлений $\hat{\mathbf{k}}_i$ (Таблица 1) для этого достаточно использовать обычную декартову решётку с пространственным шагом $c_{\#}\Delta t/\sqrt{2}$ вдоль каждой оси.

На шаге столкновения (33) популяции локально перемешиваются, получая приращение согласно правой части равенств (2).

Производительность LMM, как и любой схемы на основе LBM, главным образом ограничена скоростью операций доступа к памяти. Чтобы снизить это ограничение, приведённая схема реализована с применением локально-рекурсивного нелокально-асинхронного алгоритма (LRnLA) [42], оптимизирующего операции доступа к памяти.

3 Тесты

Для верификации схемы LMM (2) и результатов разделов 2.1.3 и 2.2 мы смоделируем характерные решения уравнений Максвелла (1) в вакууме — плоские монохроматические волны и гауссовы пучки [43,44]. Областью моделирования выступает однородная кубическая декартова решётка. Шаг схемы по времени и пространственный шаг решётки вдоль каждой оси равны $\Delta t = 1/\sqrt{2}$ и $\Delta x = 1$ соответственно. При этом $c_{\#} = 2$, и, следовательно, в соответствии с (7), $c = 1^2$.

3.1 Дисперсия плоской монохроматической волны

Поле плоской монохроматическую волны с частотой ω и волновым вектором **k** можно записать в виде

$$\mathbf{E}(t,\mathbf{r}) = \operatorname{Re}\left(\boldsymbol{\epsilon}A_0 e^{i\varphi}\right) \qquad \mathbf{H} = \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}, \qquad \omega^2 = (\mathbf{k}c)^2, \tag{34}$$

где

$$\boldsymbol{\epsilon} = \cos\theta\,\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1 + e^{i\delta}\sin\theta\,\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_2\tag{35}$$

— вектор поляризации, в котором параметры $\theta \in [0, \pi)$ и $\delta \in [0, 2\pi)$ определяют тип поляризации ($\delta = 0$ — линейная; $\theta = \pi/4$, $\delta = \pi/2$ или $\theta = 3\pi/4$, $\delta = 3\pi/2$ правая круговая; $\theta = \pi/4$, $\delta = 3\pi/2$ или $\theta = 3\pi/4$, $\delta = \pi/2$ — левая круговая), $\hat{\epsilon}_1$, $\hat{\epsilon}_2$ — два единичных ортогональных вектора в плоскости, ортогональной вектору **k**, A_0 — постоянный множитель, пропорциональный амплитуде поля,

$$\varphi(t, \mathbf{r}) = -\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \varphi_0 \tag{36}$$

— фаза, φ_0 — начальная фаза.

²Строго говоря, указанный набор параметров является избыточным, поскольку минимальная схема не различает случаев $c \Delta t = \text{const.}$ Мы задаём $\Delta x = 1$, $c \Delta t = 1/\sqrt{2}$ и считаем, что $\Delta t = 1/\sqrt{2}$, c = 1. В общем случае выбор c и Δt в отдельности произволен.



Рис. 2: Относительная ошибка точного дисперсионного соотношения для плоской волны, распространяющейся в направлении $\hat{\mathbf{k}}_{12}$ (плюсы, поляризация линейная: $\theta = \pi/2$, $\delta = 0$) и в направлении $\hat{\mathbf{e}}_z$ (круги, поляризация круговая: $\theta = \pi/4$, $\delta = \pi/2$) в двойном логарифмическом масштабе. Зелёные линии соответствуют аналитическим выражениям рассматриваемых дисперсионных ветвей, а чёрная линия отвечает второму порядку степенной зависимости. Другие параметры моделирования: сетка 256 х 256 х 256 узлов, $t = 128 \Delta t$, A0 = 1, $\varphi_0 = 0$.

Векторы $\hat{\epsilon}_1$, $\hat{\epsilon}_2$ в (35) определим следующим образом:

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{1} = \begin{cases} \frac{\hat{\mathbf{e}}_{z} \times \hat{\mathbf{k}}}{|\hat{\mathbf{e}}_{z} \times \hat{\mathbf{k}}|}, & \mathbf{k} \not\parallel \hat{\mathbf{e}}_{z}, \\ \operatorname{sgn}(k_{z}) \hat{\mathbf{e}}_{x}, & \mathbf{k} \parallel \hat{\mathbf{e}}_{z}, \end{cases} \qquad \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{2} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{1}. \tag{37}$$

Мы начнём с исследования фазовой ошибки, зачастую являющейся основной при моделировании задач электродинамики. Относительная ошибка частоты (или же, в силу выбранных параметров, абсолютная ошибка фазовой скорости) для основных ветвей с дисперсией в направлениях $\hat{\mathbf{k}}_{12}$ и $\hat{\mathbf{e}}_z$ приведена на рис. 2. Для направления $\hat{\mathbf{k}}_{12}$ выбрана линейная поляризация $\theta = \pi/2$, соответствующая ветви с дисперсией $\omega_5(\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{k}}_i)$ в (26) и направлениям полей (31). Для направления $\hat{\mathbf{e}}_z$ основные дисперсионные ветви сливаются, и фазовая ошибка волны с любой поляризацией будет описываться выражением $\omega_{3,5}(\mathbf{k} = \pm k\hat{\mathbf{e}}_a)$ в (22). Чтобы продемонстрировать это утверждение, мы смоделировали волну с правой круговой поляризацией. Численные значения фазы, частоты и амплитуды определяются из результата трёхмерного дискретного преобразования Фурье всей области моделирования в



Рис. 3: Отличие фазы плоской волны от аналитически предсказанного как функция времени для направления $\hat{\mathbf{k}}_{12}$ и линейной поляризации $\theta = \pi/2$ (слева); амплитуда наблюдаемых осцилляций в зависимости от модуля волнового вектора (справа).

конечный момент времени и обозначаются нижним индексом «num».

Как видно из рис. 2, опибка фазы при моделировании плоской волны в точности описывается аналитическими выражениями (22), (26). Незначительные отличия при малых k связаны со случайной ошибкой, вызванной ограниченной машинной точностью (мы используем вещественный тип float в схеме), и могут быть устранены путём увеличения времени наблюдения. Отметим, что приведённый график возможно построить в столь широкой области значений k только при условии точного совпадения численных данных с аналитическими. С учётом короткого времени наблюдения $t = 128 \Delta t$ численные значения при малых k могут быть легко искажены неточностью начальных условий, к примеру, если не учитывать поправку в виде неравновесной популяции (11). В свою очередь, для больших значений k определение точной разности фаз возможно только при сравнении численных данных с аналитическими (дискретное преобразование Фурье неспособно различить набег фазы > 2π).

На рис. 2 не приведены результаты моделирования бездисперсионной ветви направления $\hat{\mathbf{k}}_{12}$. Это связано с тем, что в этом случае, как и для ветвей с дисперсией, численные результаты отлично согласуются с аналитическими и относительная ошибка частоты для плоской волны, соответствующей бездисперсионной ветви, на несколько порядков меньше, чем для ветвей с дисперсией. Отличие численных результатов от аналитически предсказанных значений можно увидеть на рис. 3. Соответствующая временная зависимость имеет вид осцилляций с постоянной амплитудой. Амплитуда этих осцилляций растёт с увеличением модуля волнового вектора, кроме



Рис. 4: Амплитуда плоской волны как функция времени для направления $\hat{\mathbf{k}}_{12}$ и линейной поляризации $\theta = \pi/2$ (слева); амплитуда наблюдаемых осцилляций в зависимости от модуля волнового вектора (справа).

случая бездисперсионной ветви, в котором она остаётся близкой к машинной точности.

Поведение ошибки амплитуды волны схоже с только что рассмотренным различием численного и аналитического поведения фазы. Зависимость амплитуды плоской волны от времени также имеет вид осцилляций с постоянной амплитудой, при этом сама эта амплитуда растёт с увеличением модуля волнового вектора — рис. 4, снова исключая случай бездисперсионной ветви с неизменно малой ошибкой амплитуды.

3.2 Фокусировка гауссовых пучков

Поле сфокусированного по времени и пространству гауссового пучка, распространяющегося в направлении $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{e}}_z$, можно представить в схожем с (34) виде

$$\mathbf{E}(t,\mathbf{r}) = \operatorname{Re}\left(\boldsymbol{\epsilon}Ae^{i\varphi}\right) \qquad \mathbf{H} = \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}, \qquad \omega^2 = (\mathbf{k}c)^2, \tag{38}$$

где

$$A(t, \mathbf{r}) = \frac{A_0}{\kappa} \exp\left(-\phi_{\parallel}^2 - \frac{\phi_{\perp}^2}{\kappa}\right), \qquad \kappa = 1 + i\phi_z,$$

$$\phi_{\parallel} = (z/c - t)/\tau, \qquad \phi_{\perp} = \sqrt{x^2 + y^2}/w, \qquad \phi_z = 2cz/\omega w^2, \tag{39}$$

 τ — длительность импульс, w — ширина фокусировки.

Гауссовы пучки являются суперпозицией бесконечного набора плоских волн и непосредственно не подчиняются дисперсионным соотношениям раздела 2.2. В данной работе они рассмотрены главным образом для демонстрации производительности численной схемы LMM, реализованной на базе



Рис. 5: Эволюция компоненты поля H_x трёх сфокусированных гауссовых пучков. Параметры моделирования: $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3/2 = \pi/16$, $A_{0,l} = 1$, $\tau_l = 10/\omega_1$, $w_l = 5/\omega_1$, поляризации линейные, $\theta_l = 0$, $l \in \{1, 2, 3\}$.

алгоритма LRnLA. Эволюция полей в кубической области $512 \times 512 \times 512$ в течение времени $256 \Delta t$, показанная на рис. 5, занимает порядка 24 секунд на процессоре AMD Ryzen R9 9900X.

4 Заключение

Мы рассмотрели минимальную схему, реализующую метод решёточных уравнений Максвелла, LMM, для решения задач электродинамики в вакууме. По своему построению LMM схожа со схемами LBM для задач гидрогазодинамики, однако, в силу отсутствия слагаемого с вязкостью в уравнениях Максвелла, минимальная схема LMM является полностью линейной, что в значительной степени упрощает её аналитический анализ.

Мы впервые описали процедуру восстановления уравнений Максвелла без использования стандартного для схем LBM анализа Чепмена–Энскога и указали явную однозначную локальную связь между переменными схемы, популяциями, и значениями электромагнитных полей и их пространственных производных, включая неочевидное ограничение (13) на сами популяции. Найденная связь позволяет корректным образом задавать начальные популяции, не внося дополнительные для рассматриваемой схемы ошибки.

Рассмотрев одну из простейших возможных схем LMM, мы также смогли впервые привести полное описание дисперсии этой схемы. Проведённый дисперсионный анализ обладает большой ценностью в том числе потому, что по своему определению описывает поведение плоских монохроматических волн, составляющих полную ортогональную систему решений уравнений Максвелла. Каждое пространственное направление схемы LMM обладает двенадцатью строго действительными частотными дисперсионными ветвями. Из них главными являются четыре ветви, соответствующие динамическим решениям уравнений Максвелла. При этом две ветви отвечают волне, распространяющейся в прямом направлении, а другие две волне в обратном направлении. Мы показали, что две дисперсионные ветви для волны с заданным волновым вектором **k** отвечают двум независимым ортогональным линейным поляризациям этой волны. При этом существует двенадцать выделенных для схемы направлений, вдоль которых волна с определённой поляризацией может распространяться без дисперсии.

Проведённый анализ дисперсии схемы отлично согласуется с численными тестами. Ошибки схемы целиком описываются предсказанными дисперсионными формулами, что даёт беспрецедентный контроль над оценкой ошибки моделируемых полей. Отличие численных результатов от аналитических заметно только при экстремально малом числе узлов схемы на длину волны. Кроме того, видно, что схема всегда является устойчивой и не подвержена диссипации, согласуясь с результатами дисперсионного анализа.

Хотя оригинальная схема LMM была предложена ещё в 2010 году, до текущего момента отсутствовало её простое и последовательное аналитическое описание, а характерные особенности не были изучены. Как показывает наша работа, схемы на основе LMM обладают рядом уникальных свойств для контроля и увеличения точности моделирования электродинамических задач, что со временем позволит стать LMM эффективной альтернативой схемам FDTD.

А Равновесные и неравновесные популяции

Равновесные и неравновесные популяции, определённые в (3) и (11) соответственно, для векторных коэффициентов Таблицы 1 имеют вид

$$f_{1}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{y} + \sqrt{2}E_{z} - 2H_{x}\right)/8, \qquad f_{2}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} - \sqrt{2}E_{z} - 2H_{y}\right)/8,$$

$$f_{3}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} + \sqrt{2}E_{y} - 2H_{z}\right)/8, \qquad f_{4}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{y} + \sqrt{2}E_{z} + 2H_{x}\right)/8,$$

$$f_{5}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} + \sqrt{2}E_{z} + 2H_{y}\right)/8, \qquad f_{6}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} + \sqrt{2}E_{y} + 2H_{z}\right)/8,$$

$$f_{7}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} - \sqrt{2}E_{y} + 2H_{z}\right)/8, \qquad f_{8}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} - \sqrt{2}E_{z} + 2H_{y}\right)/8,$$

$$f_{9}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{y} - \sqrt{2}E_{z} + 2H_{x}\right)/8, \qquad f_{10}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} - \sqrt{2}E_{y} - 2H_{z}\right)/8,$$

$$f_{11}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{x} + \sqrt{2}E_{z} - 2H_{y}\right)/8, \qquad f_{12}^{eq} = \left(-\sqrt{2}E_{y} - \sqrt{2}E_{z} - 2H_{x}\right)/8, \qquad (40)$$

$$\begin{split} f_1^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_2^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_3^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_y}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_4^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} + \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial x} + \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \right), \\ f_5^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_6^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial x} + \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_7^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_8^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_{10}^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_{10}^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \right), \\ f_{10}^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} - \frac{\partial H_x}{\partial z} + \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \right), \\ f_{11}^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial H_y}{\partial x} + \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right), \\ f_{12}^{\mathrm{neq}} &= \frac{c\,\Delta t}{8} \left(-\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial z} + \frac{\sqrt{2}}{2} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial H_y}{\partial x} + \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \right). \end{split}$$



Рис. 6: Двенадцать дисперсионных ветвей схемы LMM в направлениях, соответствующих диагоналям куба, для параметров c = 1, $\Delta t = 1/\sqrt{2}$. Зелёным цветом обозначены основные ветви, синим — побочные. Штрихпунктирные линии отвечают дублирующимся ветвям.

В Дисперсионные ветви для диагоналей куба

Приведём дисперсионные ветви для ещё одного характерного набора направлений — $\hat{\mathbf{l}}_p = (\pm 1, \pm 1, \pm 1)/\sqrt{3}, \ p \in \{1, \dots, 8\}$, соответствующего восьми вершинам куба. Определитель матрицы M (16) в этом случае принимает вид

$$\det M \Big|_{\mathbf{k}=k\hat{\mathbf{l}}_{p}} = \frac{524\,288}{\alpha_{l}^{6}} \,(-1+\alpha)^{2} \left(\alpha+2\left(1+\alpha+\alpha^{2}\right)\alpha_{l}^{2}+\alpha\alpha_{l}^{4}\right) \times \\ \times \left(\alpha\left(1+\alpha\left(4+\alpha\right)\right)-2\left(2+\alpha+\alpha^{3}+2\alpha^{4}\right)\alpha_{l}^{2}+\alpha\left(1+\alpha\left(4+\alpha\right)\right)\alpha_{l}^{4}\right)^{2}, \quad (42)$$

где $\alpha_l = \exp(i\sqrt{2/3}\,kc\,\Delta t)$. Соответствующие дисперсионные ветви равны

$$\omega_{1} = 0, \qquad \omega_{3,5} = \frac{1}{\Delta t} \operatorname{atan2} \left(2\sqrt{56 + 2\gamma_{4} + 2\gamma_{5}} \sin\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\Delta\phi\right), -4 + \gamma_{4} + \gamma_{5} \right),$$

$$\omega_{7,9} = \frac{1}{\Delta t} \operatorname{atan2} \left(2\sqrt{56 + 2\gamma_{4} - 2\gamma_{5}} \sin\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\Delta\phi\right), -4 + \gamma_{4} - \gamma_{5} \right),$$

$$\omega_{11} = \frac{1}{\Delta t} \operatorname{atan2} \left(\sqrt{4 + \gamma_{4}} \sin\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\Delta\phi\right), -\gamma_{4}/2 \right), \qquad \omega_{2n} = -\omega_{2n-1}, n \leq 6, \quad (43)$$

где

$$\gamma_4 = 2 + 2\cos\left(2\sqrt{2/3}\,\Delta\phi\right), \qquad \gamma_5 = \sqrt{14 + 60\gamma_4 + 2\cos\left(4\sqrt{2/3}\,\Delta\phi\right)}, \tag{44}$$

и изображены на рис. 6.

При $\Delta \phi \to 0$ ветви (43) принимают вид

$$\omega_{3,5} \simeq kc \left(1 - \frac{\Delta \phi^2}{36} - \frac{7 \Delta \phi^4}{864} + \mathcal{O} \left(\Delta \phi^6 \right) \right),$$

$$\omega_{7,9} \simeq \frac{\pi}{\Delta t} - \frac{kc}{\sqrt{3}} \left(1 + \frac{\Delta \phi^2}{36} - \frac{13 \Delta \phi^4}{4320} + \mathcal{O} \left(\Delta \phi^6 \right) \right),$$

$$\omega_{11} \simeq \frac{\pi}{\Delta t} - \frac{2kc}{\sqrt{3}} \left(1 - \frac{\Delta \phi^2}{18} - \frac{7 \Delta \phi^4}{1080} + \mathcal{O} \left(\Delta \phi^6 \right) \right).$$
(45)

Список литературы

- Maxwell J. C. VIII. A dynamical theory of the electromagnetic field // Philosophical transactions of the Royal Society of London. - 1865. - no. 155. - P. 459-512.
- [2] Taflove A., Oskooi A., Johnson S. G. Advances in FDTD computational electrodynamics: photonics and nanotechnology. Artech house, 2013.
- [3] Chen Z., Taflove A., Backman V. Photonic nanojet enhancement of backscattering of light by nanoparticles: a potential novel visible-light ultramicroscopy technique // Optics express. — 2004. — Vol. 12, no. 7. — P. 1214–1220.
- [4] Universal design of waveguide bends in silicon-on-insulator photonics platform / M. Bahadori, M. Nikdast, Q. Cheng, K. Bergman // Journal of Lightwave Technology. - 2019. - Vol. 37, no. 13. - P. 3044-3054.
- [5] Davidson P. A. Introduction to magnetohydrodynamics. Cambridge university press, 2017. - Vol. 55.
- [6] Rashidi S., Esfahani J. A., Maskaniyan M. Applications of magnetohydrodynamics in biological systems-a review on the numerical studies // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2017. - Vol. 439. - P. 358-372.
- [7] Succi S., Vergassola M., Benzi R. Lattice Boltzmann scheme for twodimensional magnetohydrodynamics // Physical Review A. – 1991. – Vol. 43, no. 8. – P. 4521.

- [8] Dellar P. J. Lattice kinetic schemes for magnetohydrodynamics // Journal of Computational Physics. 2002. Vol. 179, no. 1. P. 95-126.
- Birdsall C. K., Langdon A. B. Plasma physics via computer simulation. CRC press, 2018.
- [10] Verboncoeur J. P. Particle simulation of plasmas: review and advances // Plasma Physics and Controlled Fusion. -2005. Vol. 47, no. 5A. P. A231.
- [11] Smilei: A collaborative, open-source, multi-purpose particle-in-cell code for plasma simulation / J. Derouillat, A. Beck, F. Pérez et al. // Computer Physics Communications. - 2018. - Vol. 222. - P. 351-373.
- [12] Heisenberg W., Euler H. Folgerungen aus der diracschen theorie des positrons // Zeitschrift für Physik. — 1936. — Vol. 98, no. 11. — P. 714–732.
- [13] Berestetskii V. B., Lifshitz E. M., Pitaevskii L. P. Quantum electrodynamics: volume 4. — Butterworth-Heinemann, 1982. — Vol. 4.
- [14] Berezin A. V., Fedotov A. M. Analytical formula for signal optimization in stimulated photon-photon scattering setup with three laser pulses // Physical Review D. - 2024. - Vol. 110, no. 1. - P. 016009.
- [15] Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transactions on antennas and propagation. — 1966. — Vol. 14, no. 3. — P. 302–307.
- [16] Kunz K. S., Luebbers R. J. The finite difference time domain method for electromagnetics. — CRC press, 1993.
- [17] Taflove A., Hagness S. C., Piket-May M. Computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method // The Electrical Engineering Handbook. - 2005. - Vol. 3, no. 629-670. - P. 15.
- [18] Finite-difference time-domain methods / F. L. Teixeira, C. Sarris, Y. Zhang et al. // Nature Reviews Methods Primers. 2023. Vol. 3, no. 1. P. 75.
- [19] Courant R., Friedrichs K., Lewy H. Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik // Mathematische annalen. – 1928. – Vol. 100, no. 1. – P. 32–74.
- [20] McNamara G. R., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // Physical review letters. — 1988. — Vol. 61, no. 20. — P. 2332.
- [21] The lattice Boltzmann method: principles and practice / K. Timm, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin et al. // Cham, Switzerland: Springer International Publishing AG. -2016.

- [22] Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems / M. R. Swift, E. Orlandini, W. R. Osborn, J. M. Yeomans // Physical Review E. - 1996. - Vol. 54, no. 5. - P. 5041.
- [23] Asinari P., Mishra S. C., Borchiellini R. A lattice Boltzmann formulation for the analysis of radiative heat transfer problems in a participating medium // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals. — 2010. — Vol. 57, no. 2. — P. 126–146.
- [24] Perumal D. A., Dass A. K. A Review on the development of lattice Boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer // Alexandria Engineering Journal. - 2015. - Vol. 54, no. 4. - P. 955-971.
- [25] Beyond moments: relativistic lattice Boltzmann methods for radiative transport in computational astrophysics / L. R. Weih, A. Gabbana, D. Simeoni et al. // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2020. — Vol. 498, no. 3. — P. 3374–3394.
- [26] Mendoza M., Muñoz J. D. Three-dimensional lattice Boltzmann model for electrodynamics // Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. - 2010. - Vol. 82, no. 5. - P. 056708.
- [27] Mendoza M., Muñoz J. D. A reliable lattice-Boltzmann solver for electrodynamics: New applications in non-linear media // Progress In Electromagnetics Research. -2011. Vol. 1633.
- [28] Galindo-Torres S. A., Scheuermann A., Puscasu R. A Lattice Boltzmann solver for Maxwell equations in dielectric media // Journal of Geophysics and Engineering (submitted). - 2015.
- [29] Liu Y. A multi-energy-level lattice Boltzmann model for Maxwell's equations without sources // Journal of Electrostatics. - 2011. - Vol. 69, no. 6. -P. 564-570.
- [30] Liu Y., Yan G. A lattice Boltzmann model for Maxwell's equations // Applied Mathematical Modelling. -2014. Vol. 38, no. 5-6. P. 1710–1728.
- [31] Hauser A., Verhey J. L. Stable lattice Boltzmann model for Maxwell equations in media // Physical Review E. - 2017. - Vol. 96, no. 6. -P. 063306.
- [32] Hauser A., Verhey J. L. Comparison of the lattice-Boltzmann model with the finite-difference time-domain method for electrodynamics // Physical Review E. - 2019. - Vol. 99, no. 3. - P. 033301.
- [33] Warner C., Markley L., Chau K. J. Comparison of electromagnetic forces evaluated in Yee-lattice finite-difference time-domain and lattice-Boltzmann

method // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. — 2022. — Vol. 70, no. 12. — P. 12405–12410.

- [34] Warner C., Markley L., Chau K. J. Comparative analysis of mode excitation with the Yee-lattice finite-difference method and the electrodynamic lattice-Boltzmann method // 2023 IEEE USNC-URSI Radio Science Meeting (Joint with AP-S Symposium) / IEEE. – 2023. – P. 119–120.
- [35] A novel frequency-dependent lattice Boltzmann model with a single force term for electromagnetic wave propagation in dispersive media / H. Ma, M. Tang, H. Ren et al. // Scientific Reports. - 2023. - Vol. 13, no. 1. -P. 11182.
- [36] Rubiano-Murcia J. I., Salas-Estrada A. M., Hernandez-Ortega J. D. A comparison of two lattice Boltzmann models for electrodynamics // arXiv preprint arXiv:2309.08068. — 2023.
- [37] Skordos P. A. Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method // Physical review E. -1993. Vol. 48, no. 6. P. 4823.
- [38] Consistent initial conditions for lattice Boltzmann simulations / R. Mei, L. S. Luo, P. Lallemand, D. d'Humières // Computers & Fluids. - 2006. --Vol. 35, no. 8-9. - P. 855-862.
- [39] Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type // Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society. — 1947. — Vol. 43, no. 1. — P. 50–67.
- [40] Charney J. G., Fjörtoft R., Neumann J. V. Numerical integration of the barotropic vorticity equation // Tellus. - 1950. - Vol. 2, no. 4. - P. 237-254.
- [41] Organick E. I. Some processors also offer the library function called ATAN2 a function of two arguments (opposite and adjacent) // A FORTRAN IV primer. Addison-wesley. — 1966. — P. 42.
- [42] Levchenko V., Perepelkina A. Heterogeneous LBM simulation code with LRnLA algorithms // Commun. Comput. Phys. - 2023. - Vol. 33. - P. 214-244.
- [43] Goubau G., Schwering F. On the guided propagation of electromagnetic wave beams // IRE Transactions on Antennas and Propagation. — 1961. — Vol. 9, no. 3. — P. 248–256.
- [44] Siegman A. E. Lasers. University science books, 1986.