用于非均匀介质中电磁问题模态分析的广义亥姆霍兹分解

Jie Zhu、Thomas E. Roth，*IEEE* 会员，Dong-Yeop Na，*IEEE* 会员，以及 Weng Cho Chew，*IEEE* 会士

arXiv:2301.03446v1 [physics.optics] 9 Jan 2023

摘要——**采用广义洛伦兹规范的基于势的表述可用于非均匀介质中电磁场的量子化 [1]。然而，从基于势的表述中求取本征模时，常常会遇到模式冗余问题。在自由空间中，这可以通过其与众所周知的亥姆霍兹分解之间的联系来解释。本文将亥姆霍兹分解推广为广义形式，与广义洛伦兹规范在非均匀介质中的应用相呼应 [2]。我们采用矢量势形式建立电磁学特征值问题，这种形式常用于数值量子化 [1]。本文从数学上分析了微分算子的性质，并证明了连续空间和离散空间中两类模式之间的正交关系。我们通过数值方法验证了非均匀各向异性介质中两组模式的完备性及其正交关系。本研究为采用基于势的表述对非均匀介质中的电磁场进行数值量子化奠定了基础。**

一、引言

基于**E**、**H**、**D**和**B** 构建的电磁理论公式能够提供物理洞见，并促成了许多电磁相关技术的发展。然而，以 **E-H** 为变量建立的经典电磁方程会出现低频或长波长崩溃 [2]。许多基于**E-H**公式的数值方法在低频下不稳定。因此，**E-H**公式并非真正的多尺度公式；当物体尺寸远小于局部波长，或频率较低时，它会发生灾难性崩溃。

以往大量研究致力于消除**E-H** 公式的低频崩溃。对于微分方程求解器，Manges 和 Cendes [3]提出了一种广义树-余树规范，以消除静磁旋度-旋度方程的矩阵零空间。在另一项研究中 [4],，采用层次基函数和树-余树分解来提高有限元过程的稳定性。对于时域求解器，有研究提出将旋度-旋度算子改为拉普拉斯算子，以处理系统矩阵的病态性 [5]。对于积分方程求解器，最初提出了环-树分解，将静电物理与静磁物理分离 [6]–[11]。随后提出了增广电场积分方程，从而无需搜索环路 [12]。

基于势理论的电磁场表述近年来受到越来越多的关注，因为它消除了低频失效问题。它通过将奇异矩阵转换为满秩类拉普拉斯矩阵，消除了零空间解。在均匀介质中，很容易发现它与亥姆霍兹分解之间的联系。此前已有许多研究探讨了基于势的（或 **A**-Φ）表述，涵盖微分方程 [13]–[16], 和积分方程 [17]–[24]。此外，基于势的表述与量子理论更加兼容。阿哈罗诺夫-玻姆效应是量子理论中的一个例子：此时 **E-H** 为零，但矢量势 **A**不为零，然而仍能感受到**A** 的作用 [25]。此外，在许多量子光学研究中，将电磁场纳入薛定谔方程 [15]时，会同时使用矢量势**A** 和标量势 Φ ¨。

采用基于势的表述，在模态图像中对电磁场进行数值量子化，通常需要通过数值方法求出非均匀介质系统的电磁本征模 [1],[26], [27]。将基于势的表述作为电磁特征值问题求解时，不存在零空间解，但通常会得到一些“额外解”：尽管**E** 和**H** 为零，**A** 和 Φ 却不为零。在均匀介质中，可以通过联系亥姆霍兹分解来解释这一现象，详见第二节。

由于现代量子技术 [1], [26],需要在复数介质中进行数值量子化，因此有必要理解一般非均匀介质中矢量势波动方程的解空间。应当明确额外模式与解空间之间的联系，并需要一种通用方案来解释非均匀介质中的这一现象。

本文研究如何将亥姆霍兹分解推广至非均匀介质。我们采用矢量势形式构建电磁学特征值问题，并研究求解系统方程所得的模式。该形式可直接用于量子电磁学中的数值量子化方案[1], [26], [27]。我们首先回顾亥姆霍兹定理，并说明将其推广的必要性。随后，我们在第二节通过分析与矢量势波动方程相关的微分算子展开证明。在第三节中，我们定义非均匀介质中的无散ε模，这对应于均匀情形中的无散模。我们通过连续空间和离散空间微积分，从解析上证明，在无源非均匀区域中，无散ε模与无旋模式正交

。通过连续空间和离散空间微积分，我们证明了无源非均匀区域中的无散模与无旋模式正交。文献中尚未发现此类证明。该证明可直接推广至各向异性介质。我们在第四节给出数值结果：首先通过数值方法表明，亥姆霍兹分解可扩展至非均匀情形，我们称之为广义亥姆霍兹分解（GHD）。随后，我们通过数值方法验证正交条件。最后，我们在第五节总结全文。

II. 亥姆霍兹定理回顾及推广动机

A. 一种传统证明

两个重要定理确立了电磁理论中时不变问题解存在性与唯一性的条件。第一个是 [28]:

> 给出一个向量场的
> 散度和旋度，以及在单连通
> 区域内的场值及其在边界上的法向分量。

可以通过反证法证明。假设两个不同的向量场$\mathbf{A}$ 和$\mathbf{A}'$ 具有相同的散度和旋度

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla \cdot \mathbf{A}' = s \tag{1}$$

$$\nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{A}' = \mathbf{c} \tag{2}$$

并且它们在边界上的法向分量$\mathbf{A}_n$ 和$\mathbf{A}'_n$ 也相同。令$\mathbf{F} = \mathbf{A} - \mathbf{A}'$。那么 $\nabla \cdot \mathbf{F}$、 $\nabla \times \mathbf{F}$和$\mathbf{F}_n$都为零。因此存在一个 ϕ，使得$\mathbf{F} = -\nabla\phi$，且它满足

$$\nabla^2 \phi = 0. \tag{3}$$

根据恩肖定理，方程（3）的解必定在边界上取最大值和最小值。结合条件$\mathbf{F}_n = 0$，或 $\dfrac{\partial \phi}{\partial n} = 0$，可知 ϕ 处处为常数。因此$\mathbf{F} = 0$ 处处成立。于是$\mathbf{A}$ 和$\mathbf{A}'$ 完全相同。

给出唯一性证明后，我们接着回顾亥姆霍兹定理。亥姆霍兹定理指出 [28]–[30]:

> 一个源密度和环流密度在无穷远处均趋于零的向量$\mathbf{A}$，可以写成两部分之和，其中一部分是无旋的、旋度为零的，或纵向的；另一部分是无散的、散度为零的，或横向的。

也就是说,

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_{\parallel} + \mathbf{A}_{\perp} = -\nabla\phi + \nabla \times \mathbf{P} \tag{4}$$

其中$\mathbf{A}_{\parallel} = -\nabla\phi$ 和$\mathbf{A}_{\perp} = \nabla \times \mathbf{P}$。这里我们用$\mathbf{A}$∥和$\mathbf{A}_{\perp}$ 分别表示纵向场和横向场。[1] 显然， $\nabla \times \mathbf{A}_{\parallel} = 0$ 且 $\nabla \cdot \mathbf{A}_{\perp} = 0$。由于一个向量可以由其散度唯一确定， $\nabla \cdot \mathbf{A} = s$ 以及旋度 $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{c}$，对上式取散度和旋度，得到

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = -\nabla^2 \phi = s \tag{5}$$

$$\nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{P} = \mathbf{c} \tag{6}$$

其中 s 是泊松方程的源项，而$\mathbf{c}$ 是$\mathbf{P}$的源项。我们通过给出能够恢复 s 和$\mathbf{c}$的 ϕ 和$\mathbf{A}$ 表达式，继续证明亥姆霍兹定理。由于式（6）中$\mathbf{P}$ 的解并不唯一，我们令 $\nabla \cdot \mathbf{P} = 0$, 于是式（6）变为具有唯一解的矢量泊松方程。式（5）和式（6）的解因此是众所周知的 [30]

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \tag{7}$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\mathbf{c}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \tag{8}$$

上述结论可通过将式（7）和式（8）直接代入式（5）和式（6）来证明。

B. 波动方程的解空间

亥姆霍兹定理可用于解释电场波动方程的零空间解。我们考虑均匀介质中无源情况下的电场波动方程

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \omega^2 \varepsilon \mu \mathbf{E}. \tag{9}$$

它可以表述为一个特征值问题。根据亥姆霍兹定理，式 (9) 的解必定是无散的或无旋的。显然，无旋解是式 (9) 的零空间解，其特征值为零。另一方面，无散解是非零空间解。这是因为当 $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ 时，我们可以在不改变方程的情况下，将 $-\nabla\nabla \cdot \mathbf{E}$ 加到式 (9) 左端。此时左端变为 $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - \nabla\nabla \cdot \mathbf{E} = -\nabla^2 \mathbf{E}$，而拉普拉斯算子 ∇^2 是负定算子。因此，无散解的特征值必定非零。

亥姆霍兹定理还将矢量势波动方程的解与电场波动方程的解联系起来。我们考虑同一均匀介质中无源条件下采用洛伦兹规范的矢量势波动方程 $\nabla \cdot \mathbf{A} = -\varepsilon\mu\partial_t \Phi$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \nabla\nabla \cdot \mathbf{A} = \omega^2 \varepsilon \mu \mathbf{A}. \tag{10}$$

根据亥姆霍兹定理，(9) 和 (10) 都有两类解。(9) 的无散解必定也是 (10) 的无散解，反之亦然。这是因为对于无散解，(10) 的第二项可以舍去。然而，由于拉普拉斯算子负定，(10) 中不存在零空间解，因此 (9) 的零空间解所张成的空间必须由数量相同的非零空间解来填补。同样根据亥姆霍兹定理，这些解在 (10) 中也是无旋解。(9) 和 (10) 的解空间之间的映射如图 1 所示。显然，在电动力学中，无旋矢量势会导致 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{H}$为零，即使 $\mathbf{A}$ 和 Φ 不为零。这也证明了采用洛伦兹规范来消除冗余是合理的,

[1]需要注意的是，“纵向”和“横向”这两个术语最初用于描述平面波，其中 $\nabla \times \mathbf{A} = 0 \to \mathbf{k} \times \mathbf{A} = 0$ 和$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \to \mathbf{k} \cdot \mathbf{A} = 0$，表明在傅里叶空间中，纵向（横向）场与传播方向平行（垂直）。这里我们将这两个术语推广到一般情形下的无旋场和无散场，但需注意，它们的物理含义与平面波中的含义并不相同。

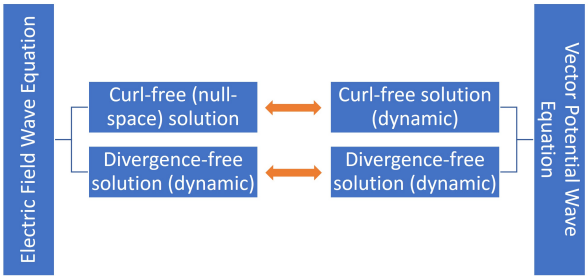


图 1. 电场波动方程与矢量势波动方程的解空间之间的映射。双向箭头表示两个方程的特征向量所张成的相同空间。

对于许多实际问题，在均匀情形下的无旋解。

C. 重新审视亥姆霍兹定理

我们也可以从不同的角度，通过考察 (9) 来证明亥姆霍兹定理。首先，我们利用内积证明旋度算子是自伴算子 [31] 。我们从以下内容开始

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{A}^*, \overline{\mathcal{C}}\mathbf{B}\rangle &= \int_V d\mathbf{r}\, \mathbf{A}^* \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) \\ &= \int_V d\mathbf{r}\, \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}^*) - \int_S d\mathbf{r}\, \hat{n} \cdot (\mathbf{A}^* \times \mathbf{B})\end{aligned} \tag{11}$$

其中 $\overline{\mathcal{C}}$ 表示旋度算子。在边界条件 $\hat{n} \times \mathbf{A} = 0$ 和 $\hat{n} \times \mathbf{B} = 0$ 下，[2]，曲面积分项为零，因此，对于满足所规定边界条件的场，旋度算子是自伴的。采用相同的方法，还可以证明 $\nabla \times \nabla \times$ 是自伴算子 [16]。因此，(9) 的解向量构成一个完备基。

上述证明还表明，旋度算子与其幂具有相同的零空间。一般而言，当一个算子将定义域空间中的函数（若该算子是有限维矩阵，则为行空间向量）映射到其值域空间（或列空间）时，所得函数可能包含零空间分量。然而，旋度算子的自伴性和对称性确保其定义域空间与值域空间相同，且其（右）零空间与左零空间相同。因此，旋度算子将定义域空间中的函数映射到同一空间，从而不会产生零空间分量。

现在，我们可以通过分析 (9) 来证明亥姆霍兹定理。我们只考虑 (9) 的非平凡解，其中 $\mathbf{E} \neq 0$ 几乎处处成立。对 (9) 取散度，得到 $\omega^2 \nabla \cdot \mathbf{E} = 0$。它有三类可能的解：(i) $\omega = 0$ 且 $\nabla \cdot \mathbf{E} \neq 0$；(ii) $\omega \neq 0$ 且 $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$；以及 (iii) $\omega = 0$ 且 $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$。我们可以排除 (iii)，因为这会使 (9) 与 (10) 相同，而 (10) 中不存在 $\omega = 0$ 解。这是因为 $\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \nabla\nabla \cdot \mathbf{A} = -\nabla^2 \mathbf{A}$，且拉普拉斯算子 ∇^2 是负定算子。对于 (i)，显然 $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = 0$，进而 $\nabla \times \mathbf{E} = 0$。对于 (ii)，我们有 $\nabla \times \mathbf{E} \neq 0$。综上所述，我们可以清楚地看到，(9) 有两类与亥姆霍兹定理类似的解，其中

1) $\nabla \times \mathbf{E} = 0, \nabla \cdot \mathbf{E} \neq 0$;
2) $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \nabla \times \mathbf{E} \neq 0$.

由于 $\nabla \times \nabla \times$ 算子的自伴性，式 (9) 的解构成整个空间的完备基。因此，任何满足所提出边界条件的函数都可以分为两类。这就完成了亥姆霍兹定理的证明。请注意，分析式 (10) 也会得到上述相同的两类解。下一节将以与非均匀介质情形类似的方式，进一步详细说明这一点。

D. 推广的动机

如上所示，亥姆霍兹定理能够很好地解释均匀介质中电场波动方程以及采用洛伦兹规范的矢量势波动方程的解空间。然而，对于非均匀无色散介质，建议改用广义洛伦兹规范 [2]。因此，为了更好地解释基于势的表述所得到的本征模，若能以如下方式推广亥姆霍兹定理，将更为理想：$\nabla \cdot \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}(\mathbf{r}) = 0$,[3] 其中 $\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 表示无散度的 ε（或广义横向）场。鉴于此，我们试图证明以下广义亥姆霍兹分解：

> 由无源非均匀介质中的亥姆霍兹波动方程给出的矢量场 $\mathbf{A}$ 可分解为两个分量 $\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 和 $\mathbf{A}_{\parallel}$，其中散度为零（或广义横向）的场满足 $\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} = 0$，而旋度为零（或纵向）的场满足 $\nabla \times \mathbf{A}_{\parallel} = 0$。

在本文余下部分，我们利用矢量势 $\mathbf{A}$ 的波动方程解推导广义亥姆霍兹分解。这里采用一种修正的广义洛伦兹规范 $\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A} = -\varepsilon_0^2 \mu_0 \partial_t \Phi$。证明过程通常遵循矩阵理论。我们将证明，矢量势波动方程有两类解。在自由空间中，它们退化为亥姆霍兹分解。因此，非均匀介质中的矢量势波动方程可用于引出广义亥姆霍兹分解。我们还注意到，所得广义特征值问题不存在零空间。

III. 正交性证明

我们首先证明广义亥姆霍兹分解中提出的两族场之间的正交性，并假设该分解确实存在。我们将在下一节通过数值算例证明该分解的存在性。

我们考虑一个由连续理想电导体（PEC）边界围成、内部填充非均匀介质的空间（图2）。由于规范 $\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A} = -\varepsilon_0^2 \mu_0 \partial_t \Phi$，$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}$ 的边界条件实际上是在 Φ 上的

[2] 下一节将解释这一边界条件的依据。

[3] 位置相关的 $\varepsilon(\mathbf{r})$ 在下文中均为默认假设。为简便起见，我们只写 ε。

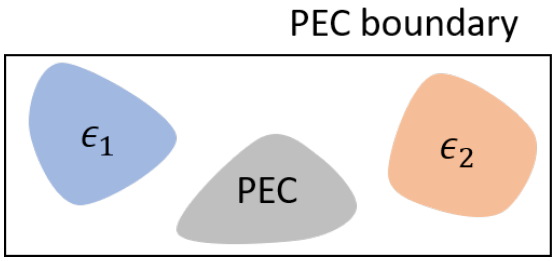


图2. 感兴趣区域示意图。

理想电导体（PEC），即 Φ 等于恒定电压 [16], [18]。如果只有一个理想电导体（PEC），我们可以将其选作参考。因此

$$\hat{n} \times \mathbf{A} = 0 \tag{12}$$

这与 $\hat{n} \times \mathbf{E} = 0$一致，并且

$$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A} = 0. \tag{13}$$

当理想电导体的电压为零，即“接地”时，后者等价于 $\Phi = 0$ 边界上的条件。

如果区域内部还有其他理想电导体，它们可能并未接地。在这种情况下，$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A} = \Phi$ 在每个导体上都等于一个恒定电压。此外，还可以对每个导体施加电荷中性约束，要求 [16], [18]

$$\int_S d\mathbf{r}\, \hat{n} \cdot \varepsilon \mathbf{A} = 0. \tag{14}$$

其中，曲面积分是在每个理想电导体的表面上进行的。

接下来，我们先在连续空间中证明正交性，然后在离散空间中采用类似的步骤。我们将讨论正交性的不同定义。还将说明，只要处理得当，麦克斯韦方程组的离散近似与连续情形是同态的。

A. 连续空间

波动方程通常是许多**A**-Φ 求解器的起点。我们从定义适当的算子和向量空间入手，开始证明模式正交性的数学过程。我们考虑有损、无色散的非均匀各向同性介质[4]中，在修正的广义洛伦兹规范 [2]下的矢量势**A** 的波动方程

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} - \frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0} \varepsilon \nabla \nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A} = \omega^2 \varepsilon \mathbf{A}. \tag{15}$$

Let

$$\overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}}_1 = \nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \tag{16}$$

$$\overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}}_2 = -\frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0} \varepsilon \nabla \nabla \cdot \varepsilon \tag{17}$$

$$\overline{\boldsymbol{\mathcal{L}}} = \overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}}_1 + \overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}}_2 \tag{18}$$

$$\overline{\boldsymbol{\mathcal{U}}} = \varepsilon \tag{19}$$

$$\lambda = \omega^2. \tag{20}$$

[4]为了满足克拉默斯–克罗尼希关系，这一假设仅在狭窄带宽内有效。

于是，式（15）可抽象而简洁地写为

$$(\overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}}_1 + \overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}}_2)\mathbf{A} = \lambda \overline{\boldsymbol{\mathcal{U}}} \mathbf{A} \tag{21}$$

其中，算子符号定义为作用于函数**A**上的微分算子。请注意，我们用带上划线的粗体花体字表示希尔伯特空间算子。上述空间中的函数**A** 则是平方可积的 [32]。

已证明，在本节开头定义的边界条件下，$\boldsymbol{\mathcal{L}}$ 算子在无损介质中是自伴的 [16]。这里我们研究有损介质这一一般情形。由于$\boldsymbol{\mathcal{L}}$ 算子由两项组成，即$\boldsymbol{\mathcal{W}}_1$ 和$\boldsymbol{\mathcal{W}}_2$，，因此分别考察这两项会更清楚 [16]。

我们首先定义$\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 为特征值问题$\boldsymbol{\mathcal{W}}_1 \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} = \lambda_{\varepsilon\perp} \boldsymbol{\mathcal{U}} \mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 的解，其特征值为 $\lambda_{\varepsilon\perp}$。这里我们只研究特征值非零的解。根据上述定义，可得

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} = \lambda_{\varepsilon\perp} \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp}. \tag{22}$$

对上述方程取散度，得到

$$0 = \lambda_{\varepsilon\perp} \nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp}. \tag{23}$$

因此，$\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 属于式（17）中定义的$\overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}_2}$ 算子的零空间，同时也是原特征值问题（21）在特征值为 $\lambda_{\varepsilon\perp}$时的一个解。

类似地，我们将$\mathbf{A}_\parallel$ 定义为$\boldsymbol{\mathcal{W}}_2 \mathbf{A}_\parallel = \lambda_\parallel \boldsymbol{\mathcal{U}} \mathbf{A}_\parallel$ 在非零特征值 $\lambda_\parallel$下的解，更明确地说，

$$-\frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0} \varepsilon \nabla \nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_\parallel = \lambda_\parallel \varepsilon \mathbf{A}_\parallel. \tag{24}$$

将上式除以 ε，并对所得方程取旋度，得到

$$0 = \lambda_\parallel \nabla \times \mathbf{A}_\parallel. \tag{25}$$

因此，$\mathbf{A}_\parallel$ 属于式（16）中定义的$\overline{\boldsymbol{\mathcal{W}}_1}$ 算子的零空间，同时也是原特征值问题（21）在特征值为 $\lambda_\parallel$时的一个解。

接下来，我们将对上述方程进行处理，并利用 and (25) (23)
证明两组模式的正交性。

1）证明 *1*：首先，我们对式（24）取$\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$的左点积，并在电介质所占据的空间内对其积分，得到

$$-\frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0} \int_V d\mathbf{r} \left(\mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \cdot \varepsilon \nabla \nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_\parallel \right) = \int_V d\mathbf{r} \left(\mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \cdot \lambda_\parallel \varepsilon \mathbf{A}_\parallel \right). \tag{26}$$

利用分部积分，等式左边变为

$$\frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0} \int_V d\mathbf{r} \, (\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp})(\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_\parallel) - \frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0} \int_S d\mathbf{r}\, \hat{n} \cdot \left[(\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_\parallel) \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \right] \tag{27}$$

其中曲面积分是在理想电导体表面上进行的。由（23）可知，第一项为零。在接地的理想电导体边界处，

$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_{\parallel} = 0$，因此第二项也为零。在未连接到地的理想电导体处，第二项变为

$$-\frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0}(\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A}_{\parallel}) \int_S d\mathbf{r}\, \hat{n} \cdot \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} = 0 \tag{28}$$

其中，散度项移至积分号外，因为Φ 在导体上等于恒定电压，而由于电荷中性约束 (14)，积分为零。因此

$$\langle \mathbf{A}_{\varepsilon\perp}, \varepsilon \mathbf{A}_{\parallel} \rangle = 0 \tag{29}$$

只要 $\lambda_{\parallel} \neq 0$，其中 $\langle \mathbf{F}, \mathbf{G} \rangle = \int \mathbf{F} \cdot \mathbf{G}\ d\mathbf{r}$ 由 Rumsey [33] 定义为反应内积。换言之，两组模式$\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 和$\mathbf{A}_{\parallel}$ 彼此 ε-正交。

2) 证明*2*： 现在，对 (22) 与$\mathbf{A}_{\parallel}$取左点积，并在整个空间上积分，得到

$$\int_V d\mathbf{r} \left(\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \right) = \int_V d\mathbf{r} \left(\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \lambda_{\varepsilon\perp} \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \right). \tag{30}$$

右端记为 $\lambda_{\varepsilon\perp} \langle \mathbf{A}_{\parallel}, \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \rangle$。利用分部积分，左端变为

$$\int_V d\mathbf{r} \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \right) \cdot \left(\nabla \times \mathbf{A}_{\parallel} \right) + \int_S d\mathbf{r}\, \hat{n} \cdot \left[\left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \right) \times \mathbf{A}_{\parallel} \right]. \tag{31}$$

由 (25) 可知，第一项为零。应用边界条件 $\hat{n} \times \mathbf{A}_{\parallel} = 0$ 后，第二项也为零。因此

$$\langle \mathbf{A}_{\parallel}, \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \rangle = 0 \tag{32}$$

只要 $\lambda_{\varepsilon\perp} \neq 0$。换言之，两组模式$\mathbf{A}_{\parallel}$ 和$\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 彼此 ε-正交。

在上述推导中，如果将$\mathbf{A}_{\parallel}$ 替换为$\mathbf{A}_{\parallel}^*$，推导仍然成立。即

$$\langle \mathbf{A}_{\parallel}^*, \varepsilon \mathbf{A}_{\varepsilon\perp} \rangle = 0. \tag{33}$$

然而，同样的论证并不适用于 III-A 中的证明 *1* 。这或许促使我们为涉及基于势的表述的问题重新定义内积。

B. 离散空间

如果我们利用子空间投影方法[34], （包括有限差分法 [35], 有限元法 [36],或离散外微分法 [37]）求得算子的矩阵表示，那么上一小节中的问题就与数值线性代数同构。应当恰当选择这些方法，以保留连续体微积分的某些性质，即 $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0$和 $\nabla \times \nabla f = 0$。在本工作中，我们采用有限差分法。离散化后，我们得到

$$\nabla \times \mathbf{A} \Rightarrow \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_1 \tag{34}$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \Rightarrow \overline{\mathbf{C}}_2 \cdot \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_1 \tag{35}$$

$$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A} \Rightarrow \overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \mathsf{A}_1 \tag{36}$$

$$\varepsilon \nabla f \Rightarrow \overline{\mathbf{E}}_1 \cdot \mathsf{f}_1 \tag{37}$$

$$\varepsilon \Rightarrow \overline{\mathbf{U}} \tag{38}$$

其中，左侧的算子属于连续希尔伯特空间，而右侧则是连续空间的线性代数近似。这里，我们用带上划线的粗体表示有限维矩阵，并用无衬线字体表示存储在计算机中的有限长度向量（一维数组）。

由于离散化，每个算子会根据其作用空间的不同而具有不同的表示。为使用有限差分法，我们构造了同时包含原网格和对偶网格的 Yee网格 [35], [38]。在每个网格上，我们将一个三维向量放置在立方体的面上，并将一个标量放置在立方体的中心。离散化方案的详情见附录A。

在式 (34) 至 (38) 中，下标为 1 的离散算子表示在原网格上的运算，而下标为 2 的离散算子表示在对偶网格上的运算。离散旋度算子$\mathbf{C}_1$ 作用于原网格上的向量，得到对偶网格上的向量；而$\mathbf{C}_2$作用于对偶网格上的向量，得到原网格上的向量。可以证明，这两个离散旋度算子互为转置 $\mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_2^T$，其中 ^{T} 表示矩阵转置。此外，很容易证明，离散散度算子与离散梯度算子的负值互为转置$\mathbf{D}_{1,2}^T = -\mathbf{E}_{1,2}$。$\mathbf{U}$ 算子是一个方阵，其维数取决于它所作用的向量。采用有限差分法进行离散化后，以下向量恒等式仍然成立 [39]–[41]

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0 \Rightarrow \overline{\mathbf{D}}_2 \cdot \overline{\mathbf{U}}_2^{-1} \cdot \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_1 = 0 \quad \text{and } \overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \cdot \overline{\mathbf{C}}_2 \cdot \mathsf{A}_2 = 0 \tag{39}$$

$$\nabla \times \nabla f = 0 \Rightarrow \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \cdot \overline{\mathbf{E}}_1 \cdot \mathsf{f}_1 = -\overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \cdot \overline{\mathbf{D}}_1^T \cdot \mathsf{f}_1 = 0. \tag{40}$$

不失一般性，令 $\mu = 1$.[5] 此外，记$\alpha = 1/\varepsilon_0^2 \mu_0$。假设解向量位于原网格上，因此省略下标 1。于是，式 (21) 变为

$$\overline{\mathbf{C}}_2 \cdot \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A} - \alpha \overline{\mathbf{E}}_1 \cdot \overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \mathsf{A} = \lambda \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}. \tag{41}$$

我们将上述问题拆分为两个特征值问题，分别对应左端的两个算子

$$\overline{\mathbf{C}}_2 \cdot \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} = \lambda_{\varepsilon\perp} \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} \tag{42}$$

$$-\alpha \overline{\mathbf{E}}_1 \cdot \overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\parallel} = \lambda_{\parallel} \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\parallel}. \tag{43}$$

将 (42) 与 $\mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{U}_1^{-1}$ 作左点积，得到

$$\overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \cdot \overline{\mathbf{C}}_2 \cdot \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} = \lambda_{\varepsilon\perp} \overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \cdot \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp}. \tag{44}$$

[5]可以看出，当 μ 为非均匀、各向异性或复数时，证明仍然成立。

根据（39），上式左端为零。因此

$$\overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} = 0. \tag{45}$$

将 (43) 与 $\mathbf{C}_1 \cdot \mathbf{U}_1^{-1}$ 作左点积，得到

$$-\alpha \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \cdot \overline{\mathbf{E}}_1 \cdot \overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\|} = \lambda_{\|} \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \cdot \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\|}. \tag{46}$$

由于 (40)，上述等式左侧为零。因此

$$\overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\|} = 0. \tag{47}$$

1) 证明*1*：将 (43) 与$\mathsf{A}_{\varepsilon\perp}^T$ 作左点积，并利用散度算子与梯度算子之间的对称性，得到

$$\alpha \mathsf{A}_{\varepsilon\perp}^T \cdot \overline{\mathbf{D}}_1^T \cdot \overline{\mathbf{D}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\|} = \lambda_{\|} \mathsf{A}_{\varepsilon\perp}^T \cdot \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\|}. \tag{48}$$

由于 (45) 及其转置，上述等式左侧为零。因此

$$\mathsf{A}_{\varepsilon\perp}^T \cdot \overline{\mathbf{U}} \cdot \mathsf{A}_{\|} = 0. \tag{49}$$

这与 (29) 类似。

2) 证明*2*：现在，将 (42) 与 $\mathsf{A}_{\|}^T$ 作左点积，其中 † 表示共轭转置，并利用旋度算子的对称性，得到

$$\mathsf{A}_{\|}^T \cdot \overline{\mathbf{C}}_1^T \cdot \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} = \lambda_{\varepsilon\perp} \mathsf{A}_{\|}^T \cdot \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp}. \tag{50}$$

由于式（47）及其转置，上式左端为零。因此

$$\mathsf{A}_{\|}^T \cdot \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} = 0 \tag{51}$$

它与式（32）同态。然而，我们也可以对式（42）与 $\mathsf{A}_{\|}^\dagger$ 作左点积，得到

$$\mathsf{A}_{\|}^\dagger \cdot \overline{\mathbf{C}}_1^T \cdot \overline{\mathbf{C}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} = \lambda_{\varepsilon\perp} \mathsf{A}_{\|}^\dagger \cdot \overline{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp}. \tag{52}$$

由于式（47）及其厄米共轭，并且在有限差分法下旋度算子为实，上式左端为零。因此

$$\mathsf{A}_{\|}^\dagger \cdot \overline{\mathbf{U}} \cdot \mathsf{A}_{\varepsilon\perp} = 0 \tag{53}$$

这与式（33）类似。上述结果表明，如果采用适当的方法，麦克斯韦方程组的有限差分近似与连续情形同态。

C. 各向异性情形

前面两个小节中的数学证明同样适用于各向异性介质。考虑在频域 [2] 中、采用修正的广义洛伦兹规范时，无色散非均匀各向异性介质中的矢量势 $\mathbf{A}$ 所满足的波动方程

$$\nabla \times \overline{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \nabla \times \mathbf{A} - \frac{1}{\varepsilon_0^2 \mu_0} \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \nabla \left(\nabla \cdot \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{A} \right) = \omega^2 \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{A}. \tag{54}$$

模式正交性的数学证明，对于连续空间与第三节A完全相同，对于离散空间则与第III-B节完全相同，要求

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \tag{55}$$

这意味着该材料是互易的 .

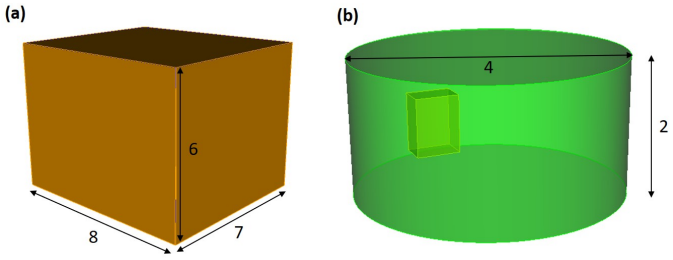


图3. 数值算例的几何结构及尺寸。

IV. 数值结果

A. 完备性的数值验证

本节首先证明上一节给出的两组模式在离散空间中是完备的。我们对（15）进行数值求解。采用有限差分法，对应于第III节中离散空间的证明。采用均匀离散化，离散化方案遵循 [15], [39],，如附录A所述。

对于空腔或均匀结构，所提出的广义亥姆霍兹分解退化为通常的亥姆霍兹分解。为说明这一点，我们考虑一个如图3(a)所示、均匀填充了$\varepsilon_r = 3$材料的矩形 $7 \times 8 \times 6$ 腔体。离散步长为0.5，得到 6938×6938 个矩阵。我们采用自然单位，使得 $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$。求解广义特征值问题后，对每个模式求散度和旋度，以识别这两类模式。结果如图4所示。注意，在(b)和(c)中分别省略了无旋模式和散度-ε-自由模式的指标。散度-ε-自由模式与无旋模式的总数等于特征值问题的维数。这清楚地表明，存在两组不同的模式对应于亥姆霍兹分解，它们完备地张成离散空间，并且在基于场的表述和基于势的表述中保持一致。

接下来，我们考虑一个含有各向异性材料的更一般示例。如图3(b)所示，我们构造了一个半径为 $r = 2$ 、高度为 $h = 2$ 的圆柱形腔体。腔体内填充了一块各向异性材料，其中心位于 (1，0。4，0。2)，尺寸在 x， y， z 方向上分别为 0。6，0。4，0。8。离散化步长为 0。2，得到 5822×5822 个矩阵。各向异性材料的介电常数张量为

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1+3i \\ 0 & 3+0.2i & 0 \\ 1+3i & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{56}$$

其满足互易性。各向异性介电常数矩阵的处理方式与 [42] 相同。离散化后的算子满足离散向量恒等式 (39) 和 (40)。

求解广义特征值问题后，可以观察到模式简并。我们应用附录 B 中所述的分析方法来分离简并模式。结果如图5所示。我们发现，这些模式可以分为两组：

1) 散度-ε-自由（或广义横向）模式（图5(a)）：$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{A} = 0$ 适用于整个网格；

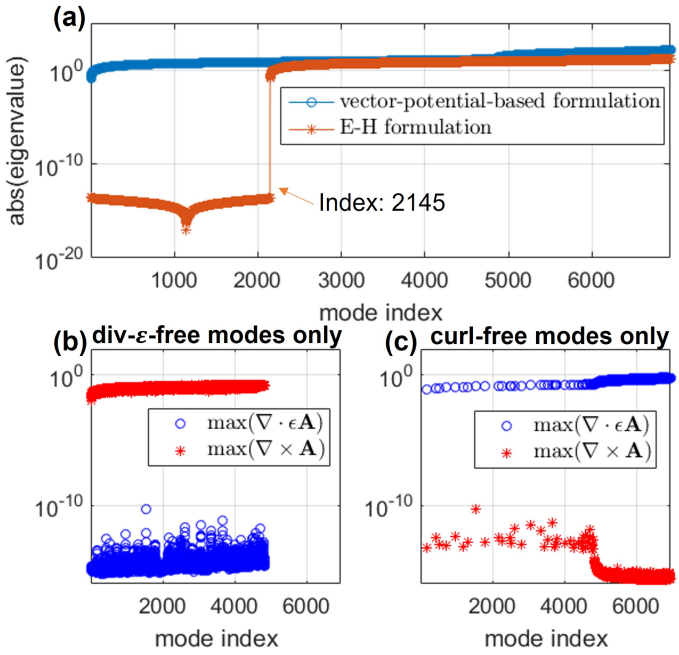


图4. 图3(a)所示几何结构中发现的两组模式可以清楚地区分。(a) 显示了基于势的表述和**E-H** 表述的特征值绝对值。可以清楚地看到，基于势的表述不存在零空间。对于基于势的表述，(b)中仅显示散度为零（或广义横向）模式，(c)中仅显示无旋（或纵向）模式。(b)中共有4793个散度为零模式，(c)中共有2145个无旋模式。后者与(a)中**E-H** 表述的零空间特征值数量一致。两类模式的总数等于特征值问题的维数。(b)和(c)中分别跳过了无旋模式和散度为零模式的索引。可以看到，散度为零模式满足 $\nabla\cdot\varepsilon\mathbf{A}=0$，而无旋模式满足$\nabla\times\mathbf{A}=0$。蓝色空心圆：对于每个模式，取 $\nabla\cdot\varepsilon\mathbf{A}$，并记录整个网格中abs($\nabla\cdot\varepsilon\mathbf{A}$)的最大值。红色星号：对于每个模式，取 $\nabla\times\mathbf{A}$，并记录整个网格中所有分量的最大幅值。

2) 无旋（或纵向）模式（图5(b)）： $\nabla\times$**整个网格的** $=0$。[6]

可以看出，每个模式要么是散度-ε-自由模式，要么是无旋模式。散度-ε-自由模式与**E-H** 公式得到的模式一致，因为（15）恢复为**E**场的波动方程 [2], [43]。由于$\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}=0$，无旋模式的**E** 场和**H** 场均为零。

在这两个数值算例中，两类模式构成完备基。尽管数值算例中离散空间的特征向量所展开的基的完备性，并不一定能保证连续希尔伯特空间中这两组模式的完备性，但可以利用有限差分近似 [44]求解偏微分方程时数值解的收敛性与存在性，来推断这些模式在连续希尔伯特空间中的完备性。因此，这一数值证明可为未来在连续希尔伯特空间中的进一步研究提供启发。

[6]可通过 $\Phi=0$ 规范消除无旋模式。未来的工作中将对此进行说明。

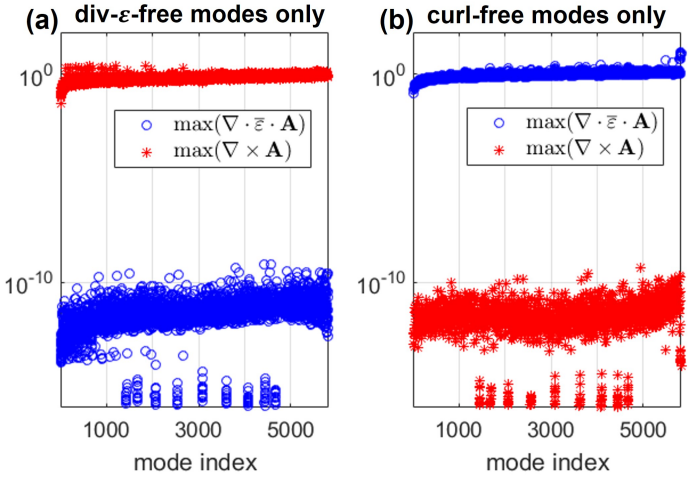


图5. 在图3(b)所示几何结构中找到的两组模式可以清楚地区分。总共有4049个散度为零的模式和1773个无旋模式。图的说明参见图4(b)和(c)的图注。

B. 正交性的数值验证

接下来，我们验证正交条件。对于图 3(b)所描述的数值示例，在分离简并模式后，我们计算了第三节-B中定义的散度-ε-自由模式与无旋模式之间的四组内积。所得矩阵的色彩图如图6所示，矩阵元素的最大模值列于表 I。为便于阅读，图6仅显示每个矩阵的前100×100 个元素，但这些结果能够代表完整矩阵。由图6和表 I可见，

$$\langle\mathbf{A}_{\varepsilon\perp},\varepsilon\mathbf{A}_{\parallel}\rangle=0 \tag{57}$$

$$\langle\mathbf{A}_{\parallel},\varepsilon\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}\rangle=0 \tag{58}$$

$$\langle\mathbf{A}^{*}_{\varepsilon\perp},\varepsilon\mathbf{A}_{\parallel}\rangle\neq0 \tag{59}$$

$$\langle\mathbf{A}^{*}_{\parallel},\varepsilon\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}\rangle=0 \tag{60}$$

这些结果与第 III 节中的数学证明一致。结合上一小节对完备性的数值证明，这一结果完成了我们对广义亥姆霍兹分解的论证。

表 I 第二个数值示例的正交性结果。表中给出了相应矩阵中矩阵元素幅值的最大值。此处 $|\cdot|$ 表示逐元素幅值。

$\max(\lvert\nabla^{T}_{\varepsilon\perp}\cdot\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\nabla_{\parallel}\rvert)$	5.1694e-10
$\max(\lvert\nabla^{T}_{\parallel}\cdot\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\nabla_{\varepsilon\perp}\rvert)$	5.1694e-10
$\max(\lvert\nabla^{\dagger}_{\varepsilon\perp}\cdot\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\nabla_{\parallel}\rvert)$	0.5779
$\max(\lvert\nabla^{\dagger}_{\parallel}\cdot\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\nabla_{\varepsilon\perp}\rvert)$	7.2430e-10

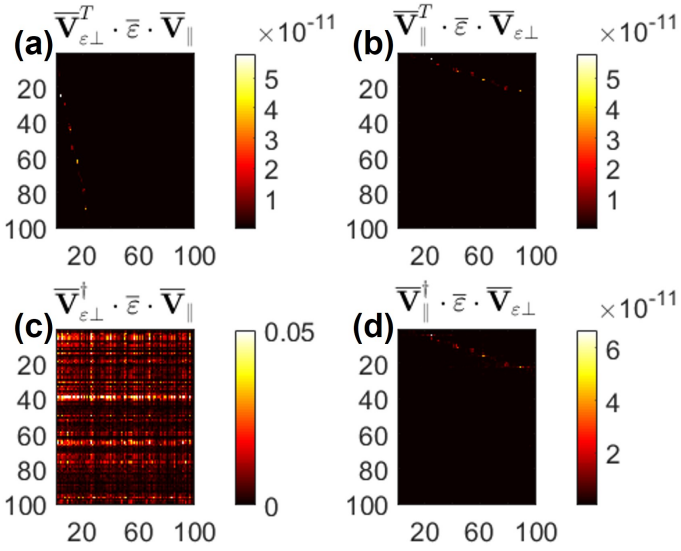


图6. 图3(b)所述数值示例中四组内积的色彩图。(a) $\mathbf{V}_{\varepsilon\perp}^{T}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{V}_{\parallel}$；(b) $\mathbf{V}_{\parallel}^{T}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{V}_{\varepsilon\perp}$；(c) $\mathbf{V}_{\varepsilon\perp}^{\dagger}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{V}_{\parallel}$；(d) $\mathbf{V}_{\parallel}^{\dagger}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{V}_{\varepsilon\perp}$。这里，$\mathbf{V}_{\varepsilon\perp}$(或$\mathbf{V}_{\parallel}$)是一个矩阵，其中每个列向量都是无散度（无旋度）模态。每个像素表示相应矩阵元素的幅值。索引即矩阵元素的索引。请注意色标的尺度不同。(a)、(b) 和 (d) 中所得矩阵的值基本为 0。

V. 结论

在这项工作中，我们结合数学证明和数值结果，展示了亥姆霍兹分解向非均匀介质的推广。广义亥姆霍兹分解中的两类场——散度为零的场和无旋场——与矢量势波动方程的两类解相对应。正如数值结果及其讨论所展示的那样，散度为零的解和无旋解构成一组完备的基。它们彼此正交。散度为零的场体现了无电荷条件，而无旋场则与电荷相关。文献中通常通过设置 $\Phi = 0$来消去无旋场。然而，存在电荷时，我们需要这两类解。这也为基于广义洛伦兹规范的数值量子化 [1] 提供了理论基础。未来的工作将致力于应用 $\Phi = 0$ 规范，并严格确定在一般非均匀介质中消去无旋模式的适当条件，同时确保所得系统矩阵保持满秩，以满足实际应用需求。

附录A 网格上的离散矢量分析

Yee晶格上的离散矢量分析 [35], [38] 是证明离散空间中正交性的基础。我们简要概述离散化过程。详细内容见 [39]。

图 7 展示了同时包含原始网格（实线）和对偶网格（虚线）的交错网格。对偶网格沿

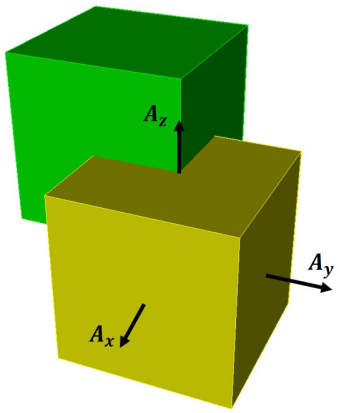


图 7. 网格示意图。原始网格与对偶网格相差半个网格步长。解向量$\mathbf{A}$ 位于原始网格的面上。

三个方向均相对于原始网格偏移半个网格宽度。在每个网格上，我们将一个三维向量置于立方体的面上，并将一个标量置于立方体的中心。

我们用整数 (i, j, k) 对原始网格立方体中心处的网格点进行编号。下面明确表述离散微分运算，其中使用中心差分。

原始网格上的离散梯度$\mathbf{g} = \nabla f$ 定义为

$$g_x^{i+0.5,j,k} = \frac{f^{i+1,j,k} - f^{i,j,k}}{\Delta x}, \tag{61}$$

$$g_y^{i,j+0.5,k} = \frac{f^{i,j+1,k} - f^{i,j,k}}{\Delta y}, \tag{62}$$

$$g_z^{i,j,k+0.5} = \frac{f^{i,j,k+1} - f^{i,j,k}}{\Delta z}. \tag{63}$$

原始网格上的离散散度 $f = \nabla\cdot\mathbf{g}$定义为

$$\begin{aligned} f^{i,j,k} = &\frac{g_x^{i+0.5,j,k} - g_x^{i-0.5,j,k}}{\Delta x} \\ &+ \frac{g_y^{i,j+0.5,k} - g_y^{i,j-0.5,k}}{\Delta y} \\ &+ \frac{g_z^{i,j,k+0.5} - g_z^{i,j,k-0.5}}{\Delta z}. \end{aligned} \tag{64}$$

作用于原始网格上的向量并得到对偶网格上向量的离散旋度 $\mathbf{h} = \nabla\times\mathbf{g}$ 为

$$\begin{aligned} h_x^{i,j+0.5,k+0.5} = &\frac{g_z^{i,j+1,k+0.5} - g_z^{i,j,k+0.5}}{\Delta y} \\ &- \frac{g_y^{i,j+0.5,k+1} - g_y^{i,j+0.5,k}}{\Delta z}, \end{aligned} \tag{65}$$

$$\begin{aligned} h_y^{i+0.5,j,k+0.5} = &\frac{g_x^{i+0.5,j,k+1} - g_x^{i+0.5,j,k}}{\Delta z} \\ &- \frac{g_z^{i+1,j,k+0.5} - g_z^{i,j,k+0.5}}{\Delta x}, \end{aligned} \tag{66}$$

$$\begin{aligned} h_z^{i+0.5,j+0.5,k} = &\frac{g_y^{i+1,j+0.5,k} - g_y^{i,j+0.5,k}}{\Delta x} \\ &- \frac{g_x^{i+0.5,j+1,k} - g_x^{i+0.5,j,k}}{\Delta y}. \end{aligned} \tag{67}$$

作用于对偶网格上的向量并得到原始网格上向量的离散旋度 $\mathbf{g} = \nabla \times \mathbf{h}$ 为

$$g_x^{i+0.5,j,k} = \frac{h_z^{i+0.5,j+0.5,k} - h_z^{i+0.5,j-0.5,k}}{\Delta y} - \frac{h_y^{i+0.5,j,k+0.5} - h_y^{i+0.5,j,k-0.5}}{\Delta z}, \tag{68}$$

$$g_y^{i,j+0.5,k} = \frac{h_x^{i,j+0.5,k+0.5} - h_x^{i,j+0.5,k-0.5}}{\Delta z} - \frac{h_z^{i+0.5,j+0.5,k} - h_z^{i-0.5,j+0.5,k}}{\Delta x}, \tag{69}$$

$$g_z^{i,j,k+0.5} = \frac{h_y^{i+0.5,j,k+0.5} - h_y^{i-0.5,j,k+0.5}}{\Delta x} - \frac{h_x^{i,j+0.5,k+0.5} - h_x^{i,j-0.5,k+0.5}}{\Delta y}. \tag{70}$$

附录 B 简并模式分析

给定一组本征模 $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \ldots, \mathbf{A}_n$，以及通过广义特征值问题求得的对应特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$，其张成的空间

$$\frac{1}{\lambda_i}\varepsilon^{-1}\nabla \times \frac{1}{\mu}\nabla \times \mathbf{A}_i \tag{71}$$

与独立无散-ε-自由模式的数量相同。这是因为，根据（25）$\lambda_{\parallel}\nabla\times\mathbf{A}_{\parallel} = 0$ 所进行的运算消除了无旋模式，而根据（22）$\nabla\times\frac{1}{\mu}\nabla\times\mathbf{A}_{\varepsilon\perp} = \lambda_{\varepsilon\perp}\varepsilon\mathbf{A}_{\varepsilon\perp}$ 恢复了无散-ε-自由模式。此外，由

$$-\frac{1}{\lambda_i}\frac{1}{\varepsilon_0^2\mu_0}\nabla\nabla\cdot\varepsilon\mathbf{A}_i \tag{72}$$

与独立无旋模式的数量相同。这是因为，根据（23）$\lambda_{\varepsilon\perp}\nabla\cdot\varepsilon\mathbf{A}_{\varepsilon\perp} = 0$ 所进行的运算消除了无散-ε-自由模式，而根据（24）$-\frac{1}{\varepsilon_0^2\mu_0}\varepsilon\nabla\nabla\cdot\varepsilon\mathbf{A}_{\parallel} = \lambda_{\parallel}\varepsilon\mathbf{A}_{\parallel}$ 恢复了无旋模式。

图3(b)所示数值算例中两个空间的维数如图 8 所示。非零奇异值的数量表示一组向量所张成空间的维数。可以看出，式（71）和式（72）所对应空间的维数之和等于问题的维数。因此，这证明了正文中定义的 div-ε-free 模式和无旋模式构成了离散空间的完备基。否则，若存在一个特征模在经过式（71）和式（72）的运算后仍非零，它必定会贡献一个“额外维数”。

具有相同特征值的简并模式也可以通过此分析加以分离。给定具有相同特征值的 n 个简并模式$\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \ldots, \mathbf{A}_n$，我们首先通过计算式（71）和式（72）所展开子空间的维数，确定相互独立的 div-ε-free 模式和无旋模式的数量，如图 9 所示。根据式（22），通过式（71）分离出 div-ε-free 模式；根据式（24），通过式（72）分离出无旋模式。随后分别在每个子空间内进行格拉姆-施密特正交化，以提取相互独立的 div-ε-free 模式和无旋模式。

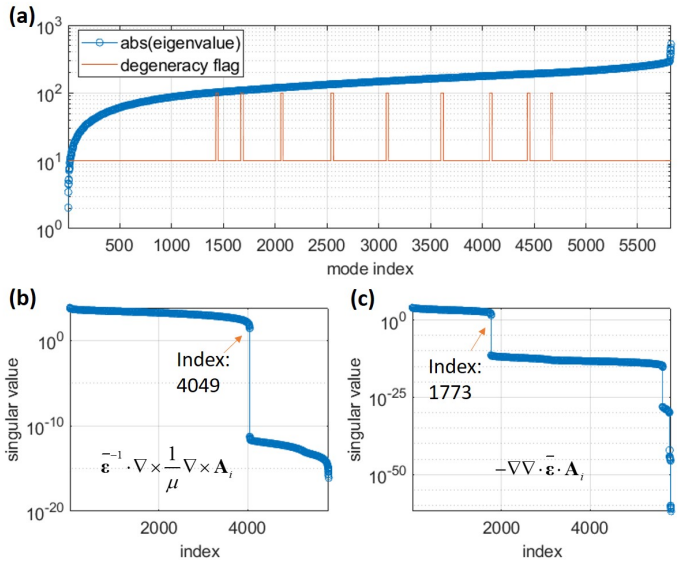


图 8. 图 3(b)所述几何结构的特征值及由此得到的解空间如图所示。(a) 蓝色曲线表示特征值；橙色向上尖峰表示一簇简并模式。(b) 展示了将 $\boldsymbol{\varepsilon}^{-1}\cdot\nabla\times\frac{1}{\mu}\nabla\times\mathbf{A}_i$ 排列起来构造的矩阵的奇异值。可以看出，非零奇异值有 4049 个。(c) 展示了将 $-\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{A}_i$ 排列起来构造的矩阵的奇异值。可以看出，非零奇异值有 1773 个。非零奇异值的数量表示一组向量所张成空间的维数。(b)和(c)中的非零奇异值总数为 5822，等于该问题的维数。

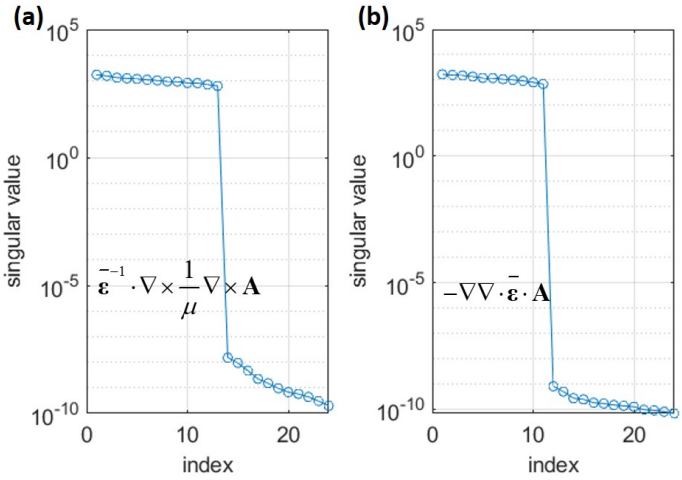


图 9. 图 8(a)中第一簇简并模式（索引 1428 至 1451）的局部放大图。其他简并模式簇也观察到类似结果。(a)和(b)的奇异值采用与图 8(b)和(c)相同的方法得到。(a)和(b)中的非零奇异值总数为 24，等于简并子空间的维数。

参考文献

[1] D.-Y. Na、J. Zhu、W. C. Chew 和 F. L. Teixeira，“量子信息保真计算电磁学”，*Physical Review A*，第 102 卷，第 1 期，页码 013711，2020年。[2] W. C. Chew，“非均匀介质中采用广义规范的矢量位电磁学：公式”，*Progress In Electromagnetics Research*，第 149 卷，页码 69–84，2014年。[3] J. B. Manges 和 Z. J. Cendes，“用于磁场计算的广义树-余树规范”，*IEEETransactions onMagnetics*，第 31 卷，第 3 期，页码 1342–1347，1995年。

[4] S.-C. Lee、J.-F. Lee 和 R. Lee，“用于分析波导结构的分层矢量有限元”，IEEE 微波理论与技术汇刊，第 51 卷，第 8 期，页码 1897–1905，2003年。[5] L. Xue 和 D. Jiao，“通过将旋度-旋度算子变为拉普拉斯算子，加速病态电磁问题时域解的快速方法”，IEEE 微波理论与技术汇刊，第 69 卷，第 11 期，页码 4613–4622，2021年。[6] D. Wilton、J. Lim 和 S. Rao，“一种计算任意形状表面电磁散射的新技术”，载于 URSI 无线电科学会议，1993年，页码 322。[7] M. Burton 和 S. Kashyap，“对一种近期矩量法算法的研究：该算法在极低频率下仍具有精度”，应用计算电磁学会期刊，第 10 卷，页码 58–68，1995年。[8] W.-L. Wu、A. W. Glisson 和 D. Kajfez，“低频下电场积分方程两种数值求解流程的研究”，应用计算电磁学会期刊，第 10 卷，第 3 期，页码 69–80，1995年。[9] G. Vecchi，“电场积分方程离散化中基函数的环-星分解”，IEEE 天线与传播汇刊，第 47 卷，第 2 期，页码 339–346，1999年。[10] J.-S. Zhao 和 W. C. Chew，“从零频到微波频率求解麦克斯韦方程组的积分方程方法”，IEEE 天线与传播汇刊，第 48 卷，页码 1645，2000年，第 10 期，页码 1635。[11] J. Mautz 和 R. Harrington，“尺寸远小于或与波长相当的导电表面的电场解”，IEEE 天线与传播汇刊，第 32 卷，第 4 期，页码 330–339，1984年。[12] Z. G. Qian 和 W. C. Chew，“用于高速互连分析的增广电场积分方程”，微波与光学技术快报，第 50 卷，第 10 期，页码 2658–2662，2008年。[13] Y.-L. Li、S. Sun、Q. I. Dai 和 W. C. Chew，“用于低频电路建模的广义洛伦兹规范 A-Φ 公式的有限元实现”，IEEE 天线与传播汇刊，第 64 卷，第 10 期，页码 4355–4364，2016年。[14] R. Dyczij-Edlinger、G. Peng 和 J.-F. Lee，“一种采用切向连续矢量有限元的快速矢量位方法”，IEEE 微波理论与技术汇刊，第 46 卷，第 6 期，页码 863–868，1998年。[15] C. J. Ryu、A. Y. Liu、W. E. I. Sha 和 W. C. Chew，“麦克斯韦–薛定谔系统的时域有限差分仿真”，IEEE 多尺度与多物理场计算技术期刊，第 1 卷，页码 40–47，2016年。[16] T. E. Roth 和 C. A. Braun，“基于势函数的有限元方法中波端口边界条件的理论与数值研究”，2022年，稿件已投稿。[17] P. De Doncker，“应用于电磁散射的矩量法体/面势函数公式”，边界元工程分析，第 27 卷，第 4 期，页码 325–331，2003年。[18] F. Vico、M. Ferrando、L. Greengard 和 Z. Gimbutas，“时谐电磁散射的解耦势函数积分方程”，纯粹与应用数学通讯，第 69 卷，第 4 期，页码 771–812，2016年。[19] Q. S. Liu、S. Sun 和 W. C. Chew，“用于低频电磁问题的基于势函数的积分方程方法”，IEEE 天线与传播汇刊，第 66 卷，第 3 期，页码 1413–1426，2018年。[20] J. Li、X. Fu 和 B. Shanker，“介质物体电磁散射的解耦势函数积分方程”，IEEE 天线与传播汇刊，第 67 卷，第 3 期，页码 1729–1739，2018年。[21] B. Khalichi、 ¨O. Erg¨ul 和 V. B. Ert¨urk，“采用 NSPWMLFMA 的势函数积分方程宽带解”，IEEE 天线与传播汇刊，第 67 卷，第 6 期，页码 4307–4312，2019年。[22] T. E. Roth 和 W. C. Chew，“用于多尺度电磁学的稳定 A-Φ 时域积分方程的开发”，IEEE 多尺度与多物理场计算技术期刊，第 3 卷，页码 255–265，2018年。[23] ——，“用于分析亚波长可穿透区域的洛伦兹规范势函数时域积分方程”，IEEE 多尺度与多物理场计算技术期刊，第 6 卷，页码 24–34，2021年。[24] R. Chen、H. A. Ulku、F. P. Andriulli 和 H. Bagci，“理想电导体散射体矢量位积分方程的低频特性”，IEEE 天线与传播汇刊，2022年。[25] Y. Aharonov 和 D. Bohm，“电磁势在量子理论中的意义”，物理评论，第 115 卷，第 3 期，页码 485，1959年。[26] D.-Y. Na、J. Zhu 和 W. C. Chew，“有限尺寸色散介质的哈密顿量对角化：采用数值模态分解进行正则量子化”，*Physical Review A*，第 103 卷，063707，2021年 6，第 p. .[27] W. C. Chew、A. Y. Liu、C. Salazar-Lazaro 和 W. E. I. Sha，“量子电磁学：新视角——第二部分”，*IEEE* 多尺度与多物理场计算技术期刊，第 1 卷，第 85–97 页，2016年。[28] G. B. Arfken 、 H.-J. Weber 和 F. E. Harris，物理学家的数学方法（马萨诸塞州沃尔瑟姆。爱思唯尔，2013年。[29] R. E. Collin，微波工程基础。约翰·威利父子公司，2007年。[30] J. D. Jackson，经典电动力学。美国物理教师协会，1999年。[31] W. C. Chew，非均匀介质中的波与场。IEEE出版社，1995年。[32] O. Axelsson 和 V. A. Barker，边值问题的有限元解法：理论与计算。工业与应用数学学会，2001年。[33] V. Rumsey，“电磁理论中的反应概念”，物理评论，第 94 卷，第 6 期，第 1483 页，1954年。[34] W. C. Chew，“电磁场理论讲义”，2022年。[在线]。可访问：https://engineering.purdue.edu/wcchew/ece604f22/EMFTEDX103122R.pdf[35] A. Taflove 和 S. C. Hagness，计算电动力学：时域有限差分法。Artech House，2005年。[36] J.-M. Jin，电磁学中的有限元法。约翰·威利父子公司，2015年。[37] S. C. Chen 和 W. C. Chew，“基于离散外微分法的电磁理论”，*Progress In Electromagnetics Research*，第 159 卷，第 59–78 页，2017年。[38] K. Yee，“各向同性介质中涉及麦克斯韦方程组的初边值问题的数值解”，*IEEE* 天线与传播汇刊，第 14 卷，第 3 期，第 302–307 页，1966年。[39] W. C. Chew，“格点上的电磁理论”，应用物理学杂志，第 75 卷，第 10 期，第 4843–4850 页，1994年。[40] F. L. Teixeira 和 W. Chew，“从拓扑观点看格点电磁理论”，数学物理学杂志，第 40 卷，第 1 期，第 169–187 页，1999年。[41] T. Weiland，“采用有限差分法的时域电磁场计算”，国际数值建模期刊：电子网络、器件与场，第 9 卷，319，1996年 4，295 no. pp. – .[42] R. C. Rumpf、C. R. Garcia、E. A. Berry 和 J. H. Barton，“用于模拟一般各向异性物体电磁散射的有限差分频域算法”，*Progress In Electromag- netics ResearchB*，第 61 卷，第 55–67 页，2014年。[43] A. Raman 和 S. Fan，“表述为厄米特征值问题的色散超材料光子能带结构”，物理评论快报，第 104 卷，第 8 期，第 087401 页，2010年。[44] R. J. LeVeque，常微分方程与偏微分方程的有限差分法：稳态问题与时变问题。工业与应用数学学会，2007年。