

余文华 李文兴◎著

高等时域 有限差分方法

——并行、优化、加速、标准和工程应用

GAODENG SHIYU YOUXIAN CHAFEN FANGFA
BINGXING YOUHUA JIASU BIAOZHUN
HE GONGCHENG YINGYONG

HEUP 哈尔滨工程大学出版社
Harbin Engineering University Press

余文华 李文兴◎著

高等时域 有限差分方法

——并行、优化、加速、标准和工程应用

GAODENG SHIYU YOUXIAN CHAFEN FANGFA
BINGXING YOUHUA JIASU BIAOZHUN
HE GONGCHENG YINGYONG

HEUP 哈尔滨工程大学出版社
Harbin Engineering University Press

内 容 简 介

本书与其他书的不同之处在于该书第一次引入矢量计算逻辑单元(VALU)到计算电磁学中,并用于时域有限差分仿真加速。这种加速技术与 GPU 加速的本质不同在于,VALU 加速是对现有的 CPU 计算功能的扩展和充分利用而不需要任何额外的硬件设备。该书在介绍现代处理器的体系结构的基础上详细地介绍了使用 VALU 的时域有限差分方法的加速技术。

· 本书可以作为电磁场和微波技术专业高年级本科生、研究生的教材及参考书,或者相关专业高校教师的参考书,也可以作为相关专业和领域工程师的培训教材及参考书。

图书在版编目(CIP)数据

高等时域有限差分方法:并行、优化、加速、标准和工程应用/(美)余文华,李文兴著. —哈尔滨:哈尔滨工程大学出版社, 2011.5

ISBN 978 - 7 - 81133 - 909 - 3

I. ①高… II. ①余… ②李… III. ①电磁波 - 时域分析 - 有限差分法 IV. ①TM154.3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 089826 号

出版发行 哈尔滨工程大学出版社
社 址 哈尔滨市南岗区东大直街 124 号
邮政编码 150001
发行电话 0451 - 82519328
传 真 0451 - 82519699
经 销 新华书店
印 刷 哈尔滨工业大学印刷厂
开 本 787mm × 1092mm 1/16
印 张 12.5
字 数 295 千字
版 次 2011 年 5 月第 1 版
印 次 2011 年 5 月第 1 次印刷
定 价 38.00 元
<http://press.hrbeu.edu.cn>
E-mail: heupress@hrbeu.edu.cn

序 言

随着计算机科学与技术的快速发展,计算电磁学已经成为天线和电路设计、电磁辐射和散射、电磁兼容和隐身、电磁防护和干扰分析等方面仿真的技术基础,由于时域有限差分(FDTD)方法的易用性、通用性和实用性,FDTD方法已经成为一种最有效的解决各类电磁问题和现象的计算电磁学工具,在工业、国防、通信、雷达、材料等领域的科学研究和工程技术应用中的作用越来越大,应用也越来越广泛。该书是一本关于高等时域有限差分方法——并行计算技术、程序优化技术、硬件加速技术、商业并行电磁仿真软件标准和工程应用的专著,不但全面系统地讲述了高等时域有限差分方法(FDTD)的基本原理,还结合作者多年的电磁仿真软件开发经验和实际应用研究成果,对时域有限差分方法的并行计算技术、程序优化技术、硬件加速技术及工程应用等进行了详细论述。该书图文并茂,给出了大量并行时域有限差分方法用于解决典型实际工程案例,包括并行仿真理论、方法、步骤和关键技术及硬件平台等。这对读者学习并行时域有限差分方法的理论和技术,无论是开发应用程序,还是解决实际工程问题,都有很大的帮助。

国际知名计算电磁学专家、宾夕法尼亚州立大学访问教授、我校特聘教授余文华博士具有丰富的计算电磁学研究和软件开发经验,已经出版了六部相关学术著作。主持开发了世界上第一个商业化的三维并行全波电磁仿真软件(General Electromagnetic Simulator)。余文华特聘教授和我校李文兴教授合著的高等时域有限差分方法——并行、优化、加速、标准和工程应用的专著,同其他著作相比,首次在著作中给出了并行时域有限差分法的矢量计算逻辑单元(VALU)加速技术的原理和应用技术,在不增加硬件的情况下,能提高几倍的仿真速度,是开拓性的创新,希望能对读者有所帮助,促进计算电磁学的应用和发展。

刘志刚

哈尔滨工程大学校长

前 言

由于时域有限差分(FDTD)方法的易用性和通用性,其已经成为一种最有效解决各类电磁问题和现象的计算电磁学工具。到目前为止,已经有许多关于时域有限差分方法研究和工程应用的文献,包括基本理论和扩展方法,时域有限差分方法已经发展得相当成熟。本书与其他书的不同之处在于该书第一次引入矢量计算逻辑单元(VALU)到计算电磁学中,并用于时域有限差分仿真加速。这种加速技术与GPU加速的本质不同在于,VALU加速是对现有的CPU计算功能的扩展和充分利用而不需要任何额外的硬件设备。该书在介绍现代处理器的体系结构的基础上详细地介绍了使用VALU的时域有限差分方法的加速技术。

假设读者具有时域有限差分方法基础并且对其他计算电磁学方法如矩量法(MoM)、有限元法(FEM)以及时域积分法(FIT)的基本概念有所了解。除此之外,读者也应具有基本的计算机及网络知识。计算机处理器中的每一个核至少包括一个浮点计算单元(FPU)和一个矢量计算逻辑单元(VALU),目前的电磁仿真软件都只用其一个核内的一个浮点计算单元和矢量计算逻辑单元的一部分。一个矢量计算逻辑单元可以同时操作在四个数的运算上,与浮点计算单元相比,它可以提高4倍的运算性能。该书介绍VALU应用于电磁仿真的加速技术以及它与CPU和GPU性能的比较。

目前市场上已有许多电磁仿真软件,如GEMS基于时域有限差分方法、HFSS基于有限元法、CST基于FIT以及FEKO基于MoM。虽然它们有各自的优势,但是它们同时又有很大相似性。也就是说,有许多问题都可以用这些方法很好地解决。虽然不同的软件厂商都有他们的技术参考书,但是到目前为止还没有一本书专门介绍它们的特点和性能比较,本书正是填补了这一空白。

本书分为六章。其中第1章介绍FDTD,MoM,FEM和FIT方法的基本知识。第2章介绍使用VALU加速时域有限差分方法仿真技术以及用于电磁仿真的效率分析。第3章介绍并行时域有限差分方法以及可能影响到时域有限差分仿真的硬件平台包括CPU类型和网络设备。第4章利用一些有代表性的例子介绍使用基于时域有限差分方法的仿真技术。这些技术可以使读者更好地使用已有的电磁仿真软件快速地得到最好的结果。第5章利用一些很简单的问题介绍几个流行的商业软件的特性与比较。这些比较并不代表任何软件制造商的观点,读者可以根据自己的经验得出自己的结论。我们不对结果的正确性和由于软件升级改进所产生的性能差别负责。第6章利用一些实际工程例子介绍先进的时域有限差分的工程应用和仿真技术。书后另附的13个附录介绍与时域有限差分仿真相关的数值处理技术和PC计算机集群的优化技术。

该书可以作为电磁场和微波技术专业高年级本科生或者研究生的教材及参考书,也可作为相关专业高校教师的参考书,以及相关专业和领域工程师的培训教材或者参考书。

我们十分感谢宾夕法尼亚州立大学Raj Mittra教授、杨小玲和刘永俊高级工程师为该书提供的仿真技术资料、仿真结果和工程实例、指导和帮助。我们也十分感谢韩国T-Wave公司、中国台湾亚东技术学院张道治教授、中国传媒大学高性能计算中心、法国CT Systemes

Sarl、加拿大 RIM 公司饶亲江博士、日本 SONY 公司 AkiraMuto、加拿大 CODEV 公司余明博士、东南大学王炎、北京交通大学李铮、上海 802 所李利博士、台湾元智大学黄能添博士、电子科技大学大学张泳和绍伟博士、法国通讯公司 JoeWiat 博士、IBM 刘兑现博士、美国 SEMTEC 公司 GaryBiddle、富士康公司(美国)Kit Ma 博士、徐州师范大学赵雷博士浙江大学伊文言教授和王健博士为本书提供的测试例子和程序测试。

该书的原稿是英文,我们十分感谢哈尔滨工程大学信息与通信工程学院姜弢博士、陈炳才博士、刘玉梅博士、夏云龙博士和孙亚秀博士在该书翻译时提供的帮助与支持。

著 者

2011 年 1 月

目 录

第 1 章 计算电磁学引论	1
1.1 时域有限差分方法	1
1.2 矩量法简介.....	16
1.3 有限元法简介.....	17
1.4 有限积分法简介.....	18
参考文献	19
第 2 章 FDTD 优化和加速技术	23
2.1 CPU 结构简介	24
2.2 SSE 指令集.....	24
2.3 缓存优化.....	28
2.4 任务并行和捆绑.....	29
2.5 预取(Prefetch)	30
2.6 读或者写操作联合.....	30
2.7 材料参数链表.....	31
2.8 多 CPU 计算机的 NUMA 优化方法	31
2.9 VALU FDTD 加速技术	33
参考文献	39
第 3 章 并行 FDTD 方法和电磁仿真系统	40
3.1 并行 FDTD 方法	40
3.2 OpenMP	42
3.3 MPI	43
3.4 网卡、交换机和网线	44
参考文献	46
第 4 章 电磁仿真技术	48
4.1 网格生成技术.....	48
4.2 FDTD 仿真的基本过程	51
4.3 对偶极子.....	53
4.4 Vivaldi 天线	56
4.5 弯曲微波接头.....	60
4.6 平行传输线.....	64
4.7 两端口天线.....	66
4.8 小孔耦合.....	68
4.9 微波滤波器.....	71
4.10 参数优化和扫描	73

4.11 周期结构	77
4.12 探地雷达模型	79
4.13 同轴微波接头	81
参考文献	84
第5章 电磁仿真软件性能比较	85
5.1 电磁仿真的基本过程	85
5.2 硬件平台	87
5.3 贴片天线	88
5.4 Vivaldi 天线	94
5.5 介质球体的散射问题	99
5.6 智能手机天线	107
5.7 电磁带隙结构	112
5.8 标准 SAR 测试	115
5.9 微波波导滤波器	122
参考文献	127
第6章 多尺度大问题仿真技术	128
6.1 无线电频率防护	128
6.2 梳形天线阵列	132
6.3 追踪反射面天线	137
6.4 不完全对称大问题的仿真技术	140
6.5 平板反射面天线	144
6.6 信号集成问题	147
6.7 读卡器的 EMI 分析	151
6.8 伪装结构仿真	152
参考文献	154
附录1 天线能量和效率	155
附录2 有源反射系数	158
参考文献	160
附录3 总有源反射系数	161
参考文献	162
附录4 MEG 和 ECC	163
A4.1 传播环境	163
A4.2 包络相关系数(ECC)	163
A4.3 平均有效增益(MEG)	164
参考文献	165
附录5 有耗媒质仿真技术	166
参考文献	167
附录6 左右旋极化分解技术	168
参考文献	169

附录 7 矢量拟合技术	170
参考文献	171
附录 8 部分对称结构仿真技术	172
参考文献	173
附录 9 时域反射系数 (TDR)	174
参考文献	175
附录 10 S 参数提取技术	176
A10.1 用四个端口电压计算 S 参数	176
A10.2 端口电压、电流和阻抗	177
A10.3 用模式电压和电流计算 S 参数	178
参考文献	179
附录 11 德拜 (Debye) 媒质材料参数	180
附录 12 几何变换技术	182
附录 13 PC 集群优化	187
索引	189

计算电磁学引论

随着计算机科学与技术的快速发展,计算电磁学(Computational Electromagnetics)已经成为天线和电路单元设计、电磁辐射和散射、电磁兼容和干扰分析、电磁防护和治疗等的基本仿真工具。过去二十多年计算电磁学发展的历史告诉我们一个事实,计算机技术对计算电磁学的发展和计算电磁学方法本身的研究起到了同样重要的作用。许多商业的电磁仿真程序包,如 GEMS(www.2comu.com)是基于时域有限差分方法、HFSS(www.ansoft.com)是基于有限元法(Finite Element Method)、CST(www.cst.com)是基于有限积分技术 FIT(Finite Integral Technique)以及 FEKO(www.feko.com)是基于矩量法 MoM(Method of Moment)应运而生的并且已经广泛地应用于仿真各类电磁问题和现象。除此之外,还有许多非常好的学者和专家教授自己开发的软件也应用于解决各类电磁现象研究和工程应用。在这一章我们首先介绍时域有限差分方法的基本知识,然后简要介绍矩量法、有限元法和时域积分法。

1.1 时域有限差分方法

时域有限差分方法是一种基于差分概念上的数值方法,它是通过求解麦克斯韦(Maxwell)方程组来分析电磁波和三维空间物质的相互作用,并可获得在任何时刻三维空间中电磁场的分布。时域有限差分方法是用中心差分近似将麦克斯韦方程组的两个旋度方程即法拉第(Faraday)定理和安培(Ampere)定理在空间和时间上离散化得到一个差分方程组,用显式的时间和空间的递推方法求解时域有限差分方程组得到电场和磁场在每一时刻的空间分布。在这样的仿真过程中,我们所得到的电磁场的解具有二阶精度。须要注意的是,二阶精度的解只有在均匀网格情况下才能得到。任何非均匀网格都会使时域有限差分方法的解失去二阶精度,但是如果在非均匀网格中相邻网格大小比例小于一定的限度的话,时域有限差分方法的解在工程上是可以接受的。在过去的二十多年中,科学家们提出了许多对非均匀网格所带来的误差进行改进的方法。在基于中心差分的时域有限差分方法中,如果时间间隔满足一定的条件(Courant condition),时域有限差分的求解过程是稳定的。

1.1.1 时域有限差分递推方程

在余氏(Yee)的差分格式中,三维问题计算空间使用正方体网格离散化^[1]。电场定义在沿着正方体的棱壁上,磁场定义在正方体表面上并且指向外法线方向,如图1.1所示。这样一个定义方式正好符合麦克斯韦方程组中右手螺旋法则,并且电场和磁场是关于电和磁网格对偶的。

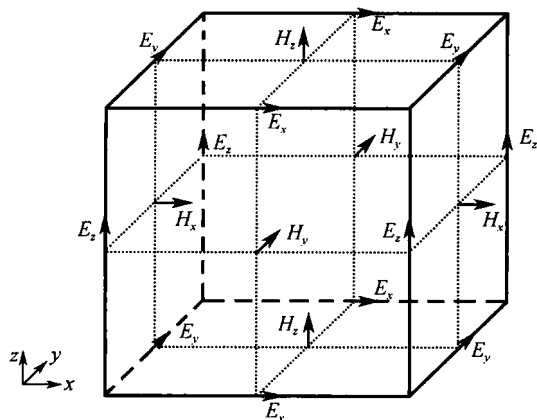


图 1.1 电场和磁场在余氏(Yee)差分格式中的位置

时域有限差分方法在时间域和空间域中使用矩形脉冲作为基函数,意思是说,电场沿着余氏网格的棱壁上均匀分布的,磁场在余氏网格的每个面上也是均匀分布的。电场在时域中的采样时刻为 $n\Delta t$,并且它的值在时间间隔 $(n - \frac{1}{2})\Delta t$ 到 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ 内是不变的。类似地,磁场在时域中的采样时刻为 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$,并且它的值在时间间隔 $(n - \frac{1}{2})\Delta t$ 到 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ 内也是不变的。时域有限差分方法构造了下面两个麦克斯韦方程组中两个旋度方程的解为

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \sigma_M \mathbf{H} \quad (\text{法拉第}) \quad (1.1a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma \mathbf{E} \quad (\text{安培}) \quad (1.1b)$$

应该指出的是,上面两个麦克斯韦方程的解是完备的,它们的解也满足另外两个麦克斯韦散度方程。

在笛卡儿坐标系中,我们重写方程式(1.1a)和式(1.1b)得到六个相互耦合的偏微分方程组为

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu_x} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} - \sigma_{Mx} H_x \right) \quad (1.2a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu_y} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} - \sigma_{My} H_y \right) \quad (1.2b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu_z} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} - \sigma_{Mz} H_z \right) \quad (1.2c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_x} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma_x E_x \right) \quad (1.2d)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_y} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma_y E_y \right) \quad (1.2e)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_z} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma_z E_z \right) \quad (1.2f)$$

其中, ε 和 σ 是对应于电场的材料参数, μ 和 σ_m 是对应于磁场的材料参数。对于各向同性介质, 这些参数的值沿着三个方向是相同的, 也就是说, 我们需要用一个标量来描述每一个参数。对于各向异性介质, 这些参数的值沿着三个方向是不同的, 我们需要用一个矢量来描述每一个参数。方程式(1.2a)到式(1.2f)所形成的时域有限差分方法可以用来模拟电磁波与复杂环境中任意三维物体之间的相互作用。如果我们使用传统的标记方式来描述离散时域和空域中的电场和磁场, 它们可以表示为

$$E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right) = E_x \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) \Delta x, j \Delta y, k \Delta z, n \Delta t \right] \quad (1.3a)$$

$$E_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right) = E_y \left[i \Delta x, \left(j + \frac{1}{2} \right) \Delta y, k \Delta z, n \Delta t \right] \quad (1.3b)$$

$$E_z^n \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) = E_z \left[i \Delta x, j \Delta y, \left(k + \frac{1}{2} \right) \Delta z, n \Delta t \right] \quad (1.3c)$$

$$H_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) = H_x \left[i \Delta x, \left(j + \frac{1}{2} \right) \Delta y, \left(k + \frac{1}{2} \right) \Delta z, \left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t \right] \quad (1.3d)$$

$$H_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) = H_y \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) \Delta x, j \Delta y, \left(k + \frac{1}{2} \right) \Delta z, \left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t \right] \quad (1.3e)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) = H_z \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) \Delta x, \left(j + \frac{1}{2} \right) \Delta y, k \Delta z, \left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t \right] \quad (1.3f)$$

从方程组(1.2)和(1.3)我们注意到, 在时域有限差分方法中电场和磁场分布在时间和空间上是相互交错的。例如, 在时刻 $n\Delta t$ 采样电场而在时刻 $\left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t$ 采样磁场; 同样的, 电场和磁场在空间上也是相互交错的, 如图 1.1 所示。如果忽略它们在空间和时间上的相互错位将导致时域有限差分方法仿真结果的不精确或者是完全错误的。

使用式(1.3a)到式(1.3f)的表达方法, 我们可以将式(1.2a)到式(1.2f)表达成为下面的显式递推形式^[2-4], 即

$$\begin{aligned} H_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) &= \frac{\mu_x - 0.5\Delta t\sigma_{mx}}{\mu_x + 0.5\Delta t\sigma_{mx}} H_x^{n-\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + \\ &\frac{\Delta t}{\mu_x + 0.5\Delta t\sigma_{mx}} \left[\frac{E_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) - E_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta z} - \right. \\ &\left. \frac{\Delta t}{\mu_x + 0.5\Delta t\sigma_{mx}} \left[\frac{E_z^n \left(i, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) - E_z^n \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right)}{\Delta y} \right] \right] \end{aligned} \quad (1.4a)$$

$$H_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) = \frac{\mu_y - 0.5\Delta t\sigma_{my}}{\mu_y + 0.5\Delta t\sigma_{my}} H_y^{n-\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) +$$

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{\mu_y + 0.5\Delta t\sigma_{My}} \left[\frac{E_z^n \left(i + 1, j, k + \frac{1}{2} \right) - E_z^n \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right)}{\Delta x} \right] - \\ & \frac{\Delta t}{\mu_y + 0.5\Delta t\sigma_{My}} \left[\frac{E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, j, k + 1 \right) - E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right)}{\Delta z} \right] \end{aligned} \quad (1.4b)$$

$$\begin{aligned} H_z^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) &= \frac{\mu_z - 0.5\Delta t\sigma_{Mz}}{\mu_z + 0.5\Delta t\sigma_{Mz}} H_z^{n-\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) + \\ & \frac{\Delta t}{\mu_z + 0.5\Delta t\sigma_{Mz}} \left[\frac{E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, j + 1, k \right) - E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right)}{\Delta y} \right] - \\ & \frac{\Delta t}{\mu_z + 0.5\Delta t\sigma_{Mz}} \left[\frac{E_y^n \left(i + 1, j + \frac{1}{2}, k \right) - E_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta x} \right] \end{aligned} \quad (1.4c)$$

$$\begin{aligned} E_x^{n+1} \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right) &= \frac{\varepsilon_x - 0.5\Delta t\sigma_x}{\varepsilon_x + 0.5\Delta t\sigma_x} E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right) + \\ & \frac{\Delta t}{\varepsilon_x + 0.5\Delta t\sigma_x} \left[\frac{H_z^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) - H_z^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta y} \right] - \\ & \frac{\Delta t}{\varepsilon_x + 0.5\Delta t\sigma_x} \left[\frac{H_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2} \right)}{\Delta z} \right] \end{aligned} \quad (1.4d)$$

$$\begin{aligned} E_y^{n+1} \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right) &= \frac{\varepsilon_y - 0.5\Delta t\sigma_y}{\varepsilon_y + 0.5\Delta t\sigma_y} E_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right) + \\ & \frac{\Delta t}{\varepsilon_y + 0.5\Delta t\sigma_y} \left[\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2} \right)}{\Delta z} \right] - \\ & \frac{\Delta t}{\varepsilon_y + 0.5\Delta t\sigma_y} \left[\frac{H_z^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) - H_z^{n+\frac{1}{2}} \left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta x} \right] \end{aligned} \quad (1.4e)$$

$$\begin{aligned} E_z^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) &= \frac{\varepsilon_z - 0.5\Delta t\sigma_z}{\varepsilon_z + 0.5\Delta t\sigma_z} E_z^n \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) + \\ & \frac{\Delta t}{\varepsilon_z + 0.5\Delta t\sigma_z} \left[\frac{H_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right)}{\Delta x} \right] - \\ & \frac{\Delta t}{\varepsilon_z + 0.5\Delta t\sigma_z} \left[\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right)}{\Delta y} \right] \end{aligned} \quad (1.4f)$$

为了简单起见,我们在公式(1.4)中省去了材料参数的位置下标,实际上材料参数具有和相应的电磁场分量相同的位置下标。在上面的时域有限差分递推方程组(1.4)中,没有包含任何的显式或者隐式边界条件。因此,我们需要将递推方程组(1.4)与相应的初始条件和边界条件结合才能得到一个电磁问题的解。对于时域方法来讲,除非特别指出,否则初始时认为电磁场的值均为零。然而,空间边界条件的应用就显得复杂得多。我们在时域有

有限差分方法中需要处理两类边界条件问题。第一类是相互接触的物体具有不同的材料,在两种材料的交界面上材料的值具有不确定性,所以我们需要对交界面上的材料作特殊处理。例如,与电场相联系的物体个数可能有两个、三个或者最多四个,那么边界上的电参数值将与和它相连接的几种物质相关。对于非均匀网格,它的值还与相邻的网格尺寸大小有关。与之不同的是,磁材料仅与它穿过的两种材料和网格尺寸大小相关。对于弯曲表面,共形时域有限差分技术将处理弯曲的金属和介质表面^[5,6]。第二类边界条件是计算区域的边界。我们可以将它们大体分为几类:(1)开放空间问题,如大部分辐射和散射问题,对于这类问题我们需要吸收边界条件消除问题空间边界的非物理反射,同时我们也希望优秀的吸收边界条件能使计算区域最小;(2)封闭空间问题,如谐振腔问题,我们可以用自然边界条件如电边界或者磁边界截断计算区域;(3)周期结构问题,如频率选择表面问题,虽然原始问题本身是无限大的,但是我们可以通过周期边界条件只仿真它的一个单元。周期边界条件的作用是把一个单元扩展为无限大的周期结构。

我们现在介绍在 FDTD 仿真中磁边界条件的应用技巧。因为磁场位于网格面的中点,所以它总与物体界面有半个网格的偏移,这个偏移将使磁边界的位置随着边界上的网格尺寸大小而变化。为了克服这个问题,我们通常把磁边界也同电边界一样定义在网格的边界上。换一种方式说,磁边界内侧磁场值是已知的,我们计算磁边界外侧磁场值时(它位于计算区域外,因此需要额外定义)需要通过磁边界条件来计算,磁边界上的电场需要通过磁边界内外的磁场计算。

在近些年时域有限差分方法的研究中,人们主要把精力集中在以下几个方面:用共形(Conformal)技术描述弯曲物体表面减少阶梯近似误差和用亚网格(Sub-gridding)技术实现局域网格细化描述局域细微结构^[7-9];变换方向隐式技术(Alternative Direction Implicit (ADI) FDTD Algorithm)用于突破 Courant 条件的约束增加时间步长^[10-11];基于时域有限差分方法而扩展出的新方法 MRTD (Multi-Resolution Time Domain)^[12] 和 PSTD (Pseudo-Spectrum Time Domain)^[13] 企图在矩形网格上得到最小的网格色散解。虽然这些方法在不同程度上克服了传统时域有限差分方法的一些缺点,然而它们都不能取代传统的时域有限差分方法,或者说,只是对传统时域有限差分方法的一些补充。与上面的策略不同,随着计算机科学和技术的发展,并行计算技术对时域有限差分方法的推动已远超上面的任何一种方法。更重要的是,并行计算技术可以更进一步地加强上面的任何一种方法,如共形时域有限差分方法^[4,14-16]。并行计算技术的主要特点是把计算负担分配给计算机集群中的每一个计算机,也就是说,每一个计算机只需处理整个问题的一部分。

1.1.2 时域有限差分稳定性分析

当我们开发一个基于时间步进技术的计算电磁软件时,最重要的一点就是解的稳定性。时域有限差分方法的稳定特征依赖于差分格式、网格质量以及边界条件等诸多因素。例如,基于前向差分的时域有限差分方法是不稳定的;基于中心差分的时域有限差分方法是有条件稳定的;基于后向差分的时域有限差分方法是无条件稳定的,但是它的求解过程是隐式的。为了理解基于中心差分的时域有限差分方法的稳定特征,我们把色散关系表达为^[4]

$$\omega = \frac{2}{\Delta t} \arcsin \left[c \Delta t \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k_x \Delta x}{2} \right) + \frac{1}{\Delta y^2} \sin^2 \left(\frac{k_y \Delta y}{2} \right) + \frac{1}{\Delta z^2} \sin^2 \left(\frac{k_z \Delta z}{2} \right)} \right] \quad (1.5)$$

如果 ω 是一个虚数, 电磁波 $\Psi(t, r) = \Psi_0 e^{j(\omega t - k \cdot r)}$ 要么很快衰减为零, 要么以指数增长直至最后发散。而这取决于 ω 的虚部是正还是负。为了保证 ω 是一个实数, 表达式(1.5)方括号中的表达式的值必须满足条件:

$$c\Delta t \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) + \frac{1}{\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) + \frac{1}{\Delta z^2} \sin^2\left(\frac{k_z \Delta z}{2}\right)} \leq 1 \quad (1.6)$$

因为根号下的正弦项的最大可能值为 1, 为了得到稳定解, 时域有限差分方法中的时间步长必须满足如下条件:

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (1.7)$$

上述约束是时域有限差分方法的稳定条件, 就是著名的 Courant 条件或者称为 Courant, Friedrichs 和 Lewy 条件^[17]。方程式(1.7)告诉我们, 时域有限差分方法中的时间步长是由 x, y , 和 z 方向的网格大小和介质中的光速决定的。

为了帮助读者进一步理解稳定条件式(1.7)的意义, 对于一维情况, Courant 条件可以简化为 $\Delta t \leq \Delta x/c$ 。电磁波从第 n 个格点传播到第 $(n+1)$ 个格点的时间为 $\Delta t = \Delta x/c$ 。假设我们在时域有限差分中选择时间步长为 $\Delta t = \Delta x/c$, 那么时域有限差分将在电磁波到达第 $(n+1)$ 个格点前产生非零解, 这将违背因果律并将导致不稳定解。

1.1.3 吸收边界条件

对于一个开放空间问题, 吸收边界条件在时域有限差分仿真中用于消除电磁波在计算区域边界的非物理反射, 因此吸收边界条件在时域有限差分方法中起着极其重要的作用。虽然时域有限差分方法早在 1966 年就被提出了, 但是当时它并没有被用于解决实际工程问题, 主要原因是当时没有可利用的吸收边界条件。直到 20 世纪 80 年代, 当 Mur 吸收边界条件^[18]出现时, 时域有限差分方法才用于解决实际问题。尽管今天看来 Mur 吸收边界条件很简单, 但是它的确曾经用于解决许多工程实际问题。在之后的几年中, 人们在改进 Mur 吸收边界条件方面做过许多尝试, 具有代表性的是 Mei 和 Fang^[19] 的超吸收边界条件技术。Chew 把在力学研究中使用的 Liao 边界条件引入计算电磁学^[20], 其特性要比 Mur 吸收边界条件好得多, 特别是对于倾斜入射波的情况。但是 Liao 边界条件的表现无论在精度还是在稳定性方面都有许多问题, 因而人们迫切需要一个高效的吸收边界条件。PML (Perfectly Matched Layer) 就是在这种背景下于 1994 年由法国数学家 J. P. Berenger 提出的^[21]。他首先把 PML 的论文投到 IEEE 天线与电波会刊, 然而由于种种原因论文并没有被录用。之后他又把它改投到计算数学杂志并于 1994 年刊出。除了 J. P. Berenger 外真正对 PML 发展有特殊贡献的是美国肯德基大学的 Steven Gedney 教授 (他毕业于美国 UIUC, 是 Prof. Mittra 的学生)^[22]。PML 的几个版本都是基于 J. P. Berenger 的思想^[22-24], 但是它们之间并不等价, 也就是说, 它们的物理内涵是有本质区别的。PML 的出现彻底改变了时域有限差分方法的状况, 使之与矩量法 MoM 和有限元法 FEM 并驾齐驱, 成为计算电磁学的主要方法之一。换句话说, 没有 PML 的出现, 在解决工程实际问题方面, 时域有限差分方法远不是 MoM 和 FEM 的对手。尽管之后的许多年中, 人们一直试图把 PML 移植到 FEM 中, 但是始终无法得到它在时域有限差分方法中的效果。进一步解释 PML 在 FEM 中的应用将超出本书的范围。

在不同版本的 PML 方法中,最具代表性最有效的一种是 CPML(Convolution PML),它是基于伸展坐标(Stretched Coordinate) PML 基础上的^[23,24]。在 CPML 中,六个相互耦合的麦克斯韦方程的分量形式为^[25]

$$j\omega\varepsilon E_x + \sigma_x E_x = \frac{1}{S_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{S_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (1.8a)$$

$$j\omega\varepsilon E_y + \sigma_y E_y = \frac{1}{S_z} \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{1}{S_x} \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (1.8b)$$

$$j\omega\varepsilon E_z + \sigma_z E_z = \frac{1}{S_x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{S_y} \frac{\partial H_x}{\partial y} \quad (1.8c)$$

$$j\omega\mu_x H_x + \sigma_{mx} H_x = \frac{1}{S_z} \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{1}{S_y} \frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (1.8d)$$

$$j\omega\mu_y H_y + \sigma_{my} H_y = \frac{1}{S_x} \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{1}{S_z} \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (1.8e)$$

$$j\omega\mu_z H_z + \sigma_{mz} H_z = \frac{1}{S_y} \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{1}{S_x} \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (1.8f)$$

为了从式(1.8)中导出 CPML 的递推方程,我们首先对式(1.8a)取拉普拉斯(Laplace)变换获得如下方程,即

$$\varepsilon_x \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_x E_x = \bar{S}_y(t) * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \bar{S}_z(t) * \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (1.9)$$

式中, $\bar{S}_y$ 和 $\bar{S}_z$ 分别是 $\frac{1}{S_y}$ 和 $\frac{1}{S_z}$ 的拉普拉斯变换。

CPML 是要把式(1.9)转化成为一个具有和传统时域有限差分格式相似的显式递推形式。更进一步地,为了克服传统的 PML 的缺点,例如 CFL - PML 改进低频和表面波的吸收特性,因此把 S_x , S_y 和 S_z 修正为

$$S_x = K_x + \frac{\sigma_{x,PML}}{\alpha_x + j\omega\varepsilon_0}, S_y = K_y + \frac{\sigma_{y,PML}}{\alpha_y + j\omega\varepsilon_0}, S_z = K_z + \frac{\sigma_{z,PML}}{\alpha_z + j\omega\varepsilon_0}$$

式中, $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ 和 $\sigma_{x,PML}, \sigma_{y,PML}, \sigma_{z,PML}$ 是实数, K_x, K_y, K_z 大于 1。 $\bar{S}_x, \bar{S}_y$ 和 $\bar{S}_z$ 可以通过拉普拉斯变换得到,即

$$\bar{S}_x = \frac{\delta(t)}{K_x} - \frac{\sigma_x}{\varepsilon_0 K_x} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_{x,PML}}{\varepsilon_0 K_x} + \frac{\alpha_{x,PML}}{\varepsilon_0}\right)tu(t)\right] = \frac{\delta(t)}{K_x} + \xi_x(t) \quad (1.10)$$

$$\bar{S}_y = \frac{\delta(t)}{K_y} - \frac{\sigma_y}{\varepsilon_0 K_y} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_{y,PML}}{\varepsilon_0 K_y} + \frac{\alpha_{y,PML}}{\varepsilon_0}\right)tu(t)\right] = \frac{\delta(t)}{K_y} + \xi_y(t) \quad (1.11)$$

$$\bar{S}_z = \frac{\delta(t)}{K_z} - \frac{\sigma_z}{\varepsilon_0 K_z} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_{z,PML}}{\varepsilon_0 K_z} + \frac{\alpha_{z,PML}}{\varepsilon_0}\right)tu(t)\right] = \frac{\delta(t)}{K_z} + \xi_z(t) \quad (1.12)$$

式中, $\delta(t)$ 和 $u(t)$ 分别是冲击函数和阶梯函数。将式(1.11)和式(1.12)代入到式(1.9)中,我们得到

$$\varepsilon_x \varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_x E_x = \frac{1}{K_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{K_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \xi_y(t) * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \xi_z(t) * \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (1.13)$$

我们很难直接求解式(1.13),因此我们引入一个新变量 $Z_{0y}(m)$, 即

$$\begin{aligned}
 Z_{0y}(m) &= \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \xi_y(\tau) d\tau \\
 &= -\frac{\sigma_y}{\varepsilon_0 K_y} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_{y,\text{PML}}}{\varepsilon_0 K_y} + \frac{\alpha_{y,\text{PML}}}{\varepsilon_0}\right)\tau\right] d\tau \\
 &= a_y \exp\left[-\left(\frac{\sigma_{y,\text{PML}}}{K_y} + \alpha_{y,\text{PML}}\right)\left(\frac{m\Delta t}{\varepsilon_0}\right)\right]
 \end{aligned} \tag{1.14}$$

其中

$$a_y = \frac{\sigma_{y,\text{PML}}}{\sigma_{y,\text{PML}} K_y + K_y \alpha_y} \left\{ \exp\left[-\left(\frac{\sigma_{y,\text{PML}}}{K_y} + \alpha_y\right)\left(\frac{m\Delta t}{\varepsilon_0}\right)\right] - 1 \right\} \tag{1.15}$$

在 PML 区域内部,利用式(1.14)和式(1.15)时域有限差分递推方程可以表示为

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_x \varepsilon_0 \frac{E_x^{n+1}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - E_x^n\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right)}{\Delta t} + \sigma_x \frac{E_x^{n+1}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) + E_x^n\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right)}{2} \\
 = \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k\right) - H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k\right)}{K_y \Delta y} - \\
 \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}\right) - H_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2}\right)}{K_z \Delta z} + \\
 \sum_{m=0}^{N-1} Z_{0y}(m) \frac{H_z^{n-m+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k\right) - H_z^{n-m+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k\right)}{K_y \Delta y} - \\
 \sum_{m=0}^{N-1} Z_{0z}(m) \frac{H_y^{n-m+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}\right) - H_y^{n-m+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2}\right)}{K_z \Delta z}
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

最后,我们可以将式(1.16)中的求和表示为显式递推,时域有限差分递推方程可进一步表示为

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_x \varepsilon_0 \frac{E_x^{n+1}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - E_x^n\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right)}{\Delta t} + \sigma_x \frac{E_x^{n+1}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) + E_x^n\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right)}{2} \\
 = \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k\right) - H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k\right)}{K_y \Delta y} - \\
 \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}\right) - H_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2}\right)}{K_z \Delta z} + \\
 \psi_{\varepsilon_x, y}^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - \psi_{\varepsilon_x, x}^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right)
 \end{aligned} \tag{1.17}$$

其中

$$\psi_{\varepsilon_x, y}^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) = b_y \psi_{\varepsilon_x, y}^{n-\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) +$$