面向对象的粒子模拟 CAD 建模系统

周 俊, 刘大刚, 刘盛纲
(电子科技大学物理电子学院, 四川成都 610054)

摘 要: 针对当前粒子模拟软件建模效率普遍偏低的问题, 在软件设计中引入了计算机辅助设计(CAD)技术, 考虑到粒子模拟具有复杂多样的物理模型和计算环境, 采用面向对象的方法将整个 CAD 系统划分为基本设置、算法设置、结构建模、观测设置、模拟控制和数据处理等六个功能模块, 以及用户界面、数据管理和计算接口等三个系统层次, 并分别对每个功能模块和系统层次进行了详细分析与设计. 最后, 将所实现的 CAD 系统与核心计算程序整合, 形成一套较为实用的粒子模拟软件, 并应用到高功率微波器件的设计中, 结果表明该系统具有很高的实用性.

关键词: 粒子模拟; 计算机辅助设计; 面向对象方法
中图分类号: O462.4; TP391.72 文献标识码: A 文章编号: 0372-2112 (2008) 03-0556-06

Object-Oriented Design of CAD System for PIC Simulation

ZHOU Jun, LIU Dar-gang, LIU Sheng-gang
(*School of Physical Electronics, University of Electronics Science and Technology of China, Chengdu, Sichuan 610054, China*)

Abstract: At present, the low modeling efficiency is a prevalent problem in particle-in-cell (PIC) simulation softwares. The CAD technology was introduced into the design of PIC simulation software to solve this problem. Considering the various complex physical models and numerical conditions in PIC simulation, the whole CAD system was divided into six functional modules and three system layers with object-oriented method. The six functional modules contained basic setting, algorithm setting, structure modeling, probe setting, simulation control and data process. The system layers were user interface layer, data managing layer and computing interface layer. Each of the modules and layers was well analyzed and designed. Finally, after integrating the CAD system and the kernel calculation code, a more practical PIC simulation software was formed and applied to design of high power microwave devices. The results show that the CAD system has very high practicability.

Key words: PIC (particle-in-cell) simulation; CAD (computer aided design) technology; object-oriented method

1 引言

粒子模拟方法是由 Buneman 和 Dawson 分别在 1959 年和 1962 年对电子薄层进行模拟时独立提出的[1,2], 以此为基础的研究已经有数十年历史了, 经过几十年的不断完善, 该方法已经发展成为一种非常重要的数值计算方法, 并且成功用于工程实践[3~6]. 特别是近年来高速大容量计算机技术的快速发展, 极大地促进了粒子模拟方法在微波真空电子学和高功率微波领域的研究与应用[7~9]. 与粒子的流体处理方法和基于统计物理的模拟方法不同, 粒子模拟在很少近似的条件下求解 Maxwell 方程组和带电粒子受力与运动方程组, 是对物理过程最实质性的描述, 而这一点在微波器件的研究中是非常重要的, 所以它具有无可比拟的优越性.

国际上对粒子模拟的具体应用研究得到多方面的支持, 已形成几款较为成熟的大型粒子模拟软件, 如美国 MRC 公司的 MAGIC[10]、俄罗斯的 KARAT[11]、德国 CST 公司的 MAFIA[12]、以及美国伯克利加州大学的 XOOPIC[13]等等. 这些软件都经过十几年甚至几十年不断完善和升级, 可靠性和稳定性都得到很大提高, 应用范围也越来越广, 但是建模方式都还停留在早期所使用的文本输入方式上, 这一点限制了该方法的进一步推广. 虽然部分软件提供了从其他软件所生成的文件导入数据的功能, 但还是没有从根本上解决粒子模拟软件建模效率低的问题.

作为当前比较热门的研究领域, CAD 软件技术可以用来完成各种复杂的建模工作, 并且可以提供友好的可视化用户界面, 大大减轻用户的工作量, 降低工作的

收稿日期: 2006-12-26; 修回日期: 2007-05-15
基金项目: 国家 863 高技术研究发展计划(No. 2006AA803403)

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

复杂程度并减少错误[14]. 例如, 一些著名的大型电磁计算软件, 如 CST Studio 和 HFSS 等都是采用 CAD 方法进行目标描述. 在这些软件的设计中, 建模部分的工作量占了相当大的比重, 甚至是算法部分的几倍, 由此可见建模的复杂程度和重要性, 而这些软件的广泛推广也体现了计算方法和 CAD 技术的结合是计算方法走向实用化的一个重要步骤. 另一方面, 由于人们对快速建模的强烈需求, 出现了一些通用的 CAD 软件工具, 其中较为著名的有 Pro/ ENGINEER、AutoCAD、SolidWorks 等, 该类软件能生成特定格式的数据, 如果将这些数据与具体的计算程序相结合来进行二次开发, 也能满足一定的工程需求. 总之, CAD 技术的引入已经在许多科学领域使数值计算向实用化方面迈出了一大步.

本文基于面向对象的软件思想, 开发出专用于粒子模拟的 CAD 系统. 文中先对粒子模拟 CAD 系统进行了功能分析和层次划分, 再对每个功能模块和系统层次进行了详细设计, 然后讨论了一些设计原则上的问题, 最后将开发出的 CAD 系统与已编制的粒子模拟计算程序整合在一起, 形成一套较为实用的粒子模拟软件.

2　系统的功能分析

在微波真空电子学和高功率微波领域, 粒子模拟软件主要用于计算各类微波器件, 并研究微波产生机理. 由于它所解决问题的复杂性, 决定了其 CAD 系统的设计方法与一般纯电磁问题的计算软件有所不同, 主要体现在以下三点:

(1) 计算环境的复杂性与多样性. 首先, 粒子模拟算法所涉及到的边界条件不仅包括电磁场边界条件, 而且包括各类更为复杂的粒子边界条件; 其次, 考虑到器件的工作环境, 需要对初始静场、气体电离、等离子体加载等等相关条件进行预设置; 另外, 还要考虑实际中一些特殊结构和特殊元件的引入. 这就要求 CAD 系统能提供一个全面而有层次的模型库.

(2) 特殊物理问题的针对性考虑. 由于带电粒子的引入, 使得物理过程更为丰富, 如有时需要特别考虑空间电荷效应、相对论效应等方面的修正, 以及场致发射、二次电子产生等细节问题的处理, 等等. 而这些修正或处理在很多情况下又不需要考虑, 为了使用户能够根据具体情况来选择, 就要求 CAD 系统能提供一些相应的接口.

(3) 数值计算方法上的优化考虑. 同样是由于带电粒子的引入, 使得数值稳定性条件更为苛刻, 如宏粒子运动引起的数值噪声有可能导致数值发散, 边界参数的选取不当也可能导致模拟无法进行, 选取的坐标系不同会导致计算精度也有所不同, 等等. 这就要求 CAD 系统能提供多种用于不同情况下的算法.

从以上三点可以看出, 粒子模拟中需要考虑的内容是非常多的, 这些内容种类繁多且较难分类, 给 CAD 系统的设计带来很大难度, 因此主流粒子模拟软件基本上仍采用文本输入方式来表述这些内容, 而主流电磁计算软件却由于其简单性而发展较快, 基本上都采用了图形化的 CAD 建模系统.

为了缩短微波器件的设计周期、提高微波器件的设计质量, 采用 CAD 技术对微波器件进行辅助设计是十分必要的. 我们结合粒子模拟的特点, 对计算程序进行了深入分析, 认为依照实际的建模流程来设计 CAD 系统较为合理, 如图 1 所示, 可以划分出六个最基本的功能模块: (1) 基本设置模块, 包括模型信息、坐标系、单位、模拟区域、网格大小、自定义元素等; (2) 算法设置模块, 包括时域、频域、电磁场计算、带电粒子计算的各类算法和参数; (3) 结构建模模块, 是 CAD 系统中最重要的功能模块, 包括模型结构的数据定义和分类, 可以进一步细分为基本结构建模、源与边界建模、模型环境建模三个子模块; (4) 观测设置模块, 包括对计算过程中各类物理量的前台实时观测; (5) 模拟控制模块, 包括模拟的启动、结束、暂停、继续及计算过程中的各种显示和控制选项等; (6) 数据处理模块, 包括计算结果数据的导出和查看等.

以上六个功能模块独立性较强, 并能进一步划分出多种具体的对象模型, 所以采用面向对象的方法对各个功能模块进行详细设计是比较可行的. 为了使 CAD 系统具有更好的通用性, 我们可以分三个层次来

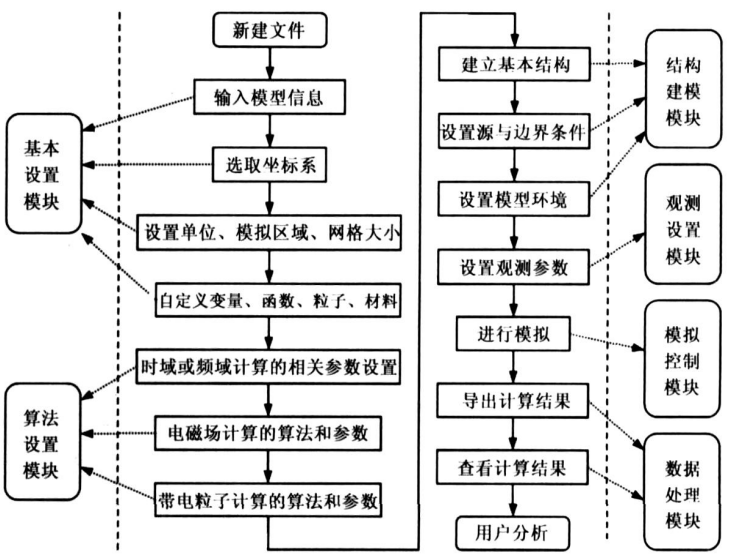


图 1　粒子模拟的建模流程及其 CAD 系统的功能模块划分

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

实现. 用户界面层给用户提供一个快速建模平台; 数据管理层提供所有数据的后台管理; 计算接口层提供与计算程序之间的交互功能. 另外, 在 CAD 系统与计算程序之间还需要一个公共数据区用以辅助交互功能, 这个公共数据区包括各类中间文件和内存数据. 该 CAD 系统分层方式兼顾了已有计算程序的实际情况, 使设计过程独立于计算过程, 避免计算部分的重复开发, 对当前已有粒子模拟软件较为适用.

3 系统的详细设计

在上述功能分析部分, 我们既作了横向的功能模块划分, 又作了纵向的系统层次划分. 该 CAD 系统的具体实现上, 采用面向对象方法来进行设计, 采用 C++ 语言来进行编写. 面向对象方法的核心思想是将一切客观实体都看成对象, 每个对象由数据(描述事物的属性) 和作用于数据的操作(体现事物的行为) 构成独立的整体, 每个对象都属于某个对象“类”. 下面我们将对六个基本功能模块和三个主要系统层次进行详细设计:

3.1 基本设置模块

基本设置模块中的内容较为基础, 主要是为模拟过程作铺垫, 可以通过创建六个类来表述, 分别是: (1) 模型信息类, 封装了当前模型的器件名称、作者、所属机构、备注等信息, 用于构造一个模型信息对象, 以供用户设置和读取. (2) 工程设置类, 封装了坐标系类型、工作区大小、网格步长、以及长度、角度、时间、频率的单位等基本参数, 用于构造一个工程设置对象, 以供用户对整个工程最基本的属性进行设置和读取. (3) 变量类, 封装了变量的类型、名称和取值, 用于构造一个变量对象, 并添加到变量链表中以供用户使用. (4) 函数类, 封装了函数的名称、返回类型、表达形式、参数信息等, 用于构造一个函数对象, 并添加到函数链表中以供用户使用. (5) 材料类, 封装了材料的名称、原子系数、原子质量数、密度、电导率、介电常数等等属性, 用于构造一个材料对象, 并添加到材料链表中以满足一些对材料属性要求较为严格的特殊场合. (6) 粒子类, 封装了粒子的电荷和质量, 用于构造一个粒子对象, 并添加到粒子链表中以满足一些用到非常规基本粒子的特殊场合.

3.2 算法设置模块

算法设置模块包含所有算法设置方面的内容, 虽然内容多, 但基本上都是一些参数输入, 所以只需创建一个算法设置类来表述这些内容. 算法设置类所包含的内容有: (1) 时域计算中计算时间、时间步长的等常规设置; (2) 频域计算中萃取特征模式的方式、萃取特征频率的范围、扫频窗口宽度、多项式迭代次数和迭代安全因子等; (3) 电磁场计算中算法的选择和为了计算简化而对电磁场模式的设置, 其中考虑到微波器件中各种情况(如相对论粒子、谐振腔型结构、等离子体填充等) 在数值上的影响, 提供了几种有针对性的算法, 并允许用户对算法的参数进行灵活设置; (4) 带电粒子计算中算法的选择, 考虑了空间电荷效应和相对论效应, 并提供了用以保证电荷和电流连续性的一些修正方法.

值得说明的是, 算法设置是粒子模拟中比较特殊且非常重要的一个环节, 用户需要熟练掌握一些粒子模拟计算方法的知识, 这些还要依赖于该系统提供的算法参考手册.

2.1 结构建模模块

结构建模模块在整个 CAD 系统的设计中是最为重要的, 所包含的内容也最多, 为了使设计更有层次性, 可以进一步细分为基本结构、源与边界和模型环境三部分.

3.3.1 基本结构建模

微波器件的主体结构是由各种形状的导体或介质构成, 对应的基本结构建模过程就是先构造多个具有一定形状和属性的结构对象, 然后将这些结构对象组合搭建成整个器件. 在构造结构对象之前要先创建一个基本结构类, 它所包含的内容有: 结构名称、结构形状、确定形状的坐标点数目和位置、结构的材料类型和材料属性. 其中, 结构形状可以根据实际需要预先提供多种类型, 也可以自己添加参数进行扩充; 材料类型包括理想导体和自定义材料, 如果选择了自定义材料, 则可以在材料属性中设置电导率和介电常数等.

3.3.2 源与边界建模

微波器件的粒子模拟中, 还需要设置合适的源与边界, 如粒子发射源、电磁场激励源、吸收边界、对称边界等, 由于源本身也可以看作是特定的边界条件, 所以我们将二者放在一起讨论. 当然本文所说的源与边界远远不止这些, 我们还把泊松电场、磁场线圈以及各种特殊结构和集总参数元件等等模型都归入该模块, 以

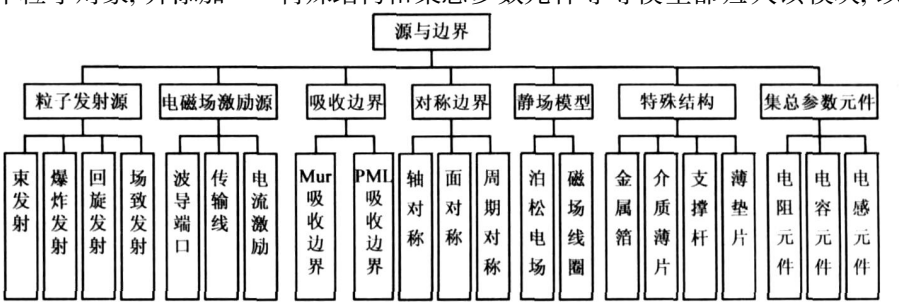


图 2 源与边界模型库的类层次结构

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

ticles[M]. Bristol and Philadelphia: Adam Hilger, 1988.

[5] Birdsall C K, Langdon A B. Plasma Physics Via Computer Simulation[M]. New York: McGraw-Hill, 1991.

[6] Matsumoto H, Omura Y. Computer Space Plasma Physics: Simulation Techniques and Software[M]. Tokyo: Terra Scientific Publishing Company, 1993.

[7] Usui H, Verboncoeur J P, Birdsall C K. Development of 1D object-oriented particle-in-cell code (1d-XOOPIC)[J]. IEICE Transactions on Electronics, 2000, (6): 989- 992.

[8] Pukhov A. Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL[J]. Journal of Plasma Physics, 1999, 61(3): 425- 433.

[9] Batygin Y K. Particle-in-cell code BEAMPATH for beam dynamics simulations in linear accelerators and beamlines[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2005, 539(3): 455- 489.

[10] Goplen B, Ludeking L, Smithe D, Warren G. User-configurable MAGIC for electromagnetic PIC calculation[J]. Computer Physics Communications, 1995, 87: 54- 86.

[11] Tarakanov V P. User's Manual for Code KARAT[Z]. Berkeley Research Associates, Inc. Springfiels, VA, 1999.

[12] CST GmbH. MAFIA EM simulation software, Version 4.x[Z]. http://www.cst.com, Computer Simulation Technology GmbH, Darmstadt, Germany, 2004.

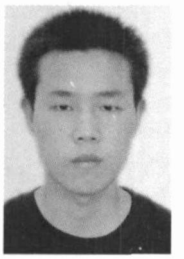
[13] Verboncoeur J P, Langdon A B, Cladd N T. An object-oriented electromagnetic PIC code[J]. Computer Physics Communications, 1995, 87: 199- 211.

[14] 李明之, 刘友健, 王长清, 徐承和. 用 CAD 技术实现复杂目标 FDTD 方法几何-电磁建模[J]. 电子学报, 1999, 27(3): 131- 133.
Li Ming-zhi, Liu You-jian, Wang Chang-qing, Xu Cheng-he. Using CAD technique to realize the geometric-electromagnetic modeling of the FDTD calculation of complex objects[J]. Acta Electronica Sinica, 1999, 27(3): 131- 133. (in Chinese)

[15] 狄雋, 祝大军, 刘盛纲. CHIPIC 软件的电磁场计算方法[J]. 电子科技大学学报, 2005, 34(4): 485- 488.
Di Jun, Zhu Da-jun, Liu Sheng-gang. Electromagnetic field algorithms of CHIPIC code[J]. Journal of University of Electronic Science and Technology of China, 2005, 34(4): 485- 488. (in Chinese)

[16] 刘大刚, 祝大军, 周俊, 等. 3 维电磁粒子模拟程序设计[J]. 强激光与粒子束, 2006, 18(1): 110- 114.
Liu Da-gang, Zhu Da-jun, Zhou Jun, et al. Design of 3D particle-in-cell simulation software[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2006, 18(1): 110- 114. (in Chinese)

作者简介:



周　俊　男, 1980 年 11 月出生于湖北襄樊, 电子科技大学博士研究生. 主要研究领域为粒子模拟算法和 CAD 技术.
E-mail: zhoujun123@uestc.edu.cn

刘大刚　男, 1973 年 9 月出生于贵州遵义, 电子科技大学讲师. 主要研究领域为高功率微波技术和粒子模拟算法.
E-mail: ldg12345@uestc.edu.cn

刘盛纲　男, 电子科技大学教授、博士生导师, IEEE 会员, 1980 年当选中国科学院院士, 2003 年国际 K. J. BUTTON 奖获得者. 研究方向包括电子回旋脉塞、自由电子激光与高功率微波、微波电子学与等离子体电子学、生物电子学、太赫兹电子学等领域.

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net