

PSTD 算法及其吸收边界分析

马弘舸^{1,2}, 聂在平¹, 赵延文¹

(1. 电子科技大学电子工程学院, 四川成都 610054; 2. 中国工程物理研究院应用电子学研究所, 四川绵阳 621900)

摘 要: 在解时域电大尺寸电磁场问题时, 由于受到有限差分格式二阶精度的限制, 传统 FDTD 算法的效率很低, 对内存的要求高. 采用以伪谱方法离散 Maxwell 微分方程为核心的 Pseudospectral time-domain (PSTD) 算法计算电大尺寸电磁场时域问题, 将大大提高计算效率, 降低内存需求. 本文重点探讨了在 PSTD 技术中, 电大尺寸问题的高效实现, 并和传统 FDTD 算法进行了比较. 此外还分析了其吸收边界 - 完全匹配层 (PML) 所发挥的作用, PML 的设置以及各参数对场吸收的影响.

关键词: 时域伪谱方法; 时域有限差分方法; 完全匹配层; 快速傅立叶变换

中图分类号: O441.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2003) 06-0871-04

Pseudospectral Time-Domain (PSTD) Algorithm and the Analysis of Its Absorbing Boundary

MA Hong-ge^{1,2}, NIE Zai-ping¹, ZHAO Yan-wen¹

(1. The college of Electronics Engineering, University of Electronics Science and Technology of China, Chengdu, Sichuan 610054, China;

2. Applied Electronics institute of China Academy of Engineering Physics, Mianyang, Sichuan 621900, China)

Abstract: Due to limitation of computer's memory and speed, many traditional numerical computational electromagnetic method such as FDTD meets difficulties in solving electrical-large objects problems. A pseudospectral time-domain (PSTD) algorithm is developed recently to overcome limitations in the conventional solution methods for Maxwell's equations. This technique uses the fast Fourier transform (FFT) algorithm for the spatial derivatives and uses the perfectly matched layer (PML) to absorb exocentric wave and eliminate the wraparound effect. Because the Fourier transform has an infinite order of accuracy, only two cells per wavelength are required, compared to 10 ~ 16 cells per wavelength required by the FDTD method for the same accuracy. In this paper, the PSTD algorithm is introduced to solve electrical-large objects problems. A perfectly matched layer (PML) for the absorption of electromagnetic waves in this algorithm is also analyzed.

Key words: pseudospectral time-domain; FDTD; perfectly matched layer; FFT

1 引言

时域电大尺寸问题的电磁场求解历来困顿着时域电磁学的发展. 传统时域电磁场计算方法 FDTD, 受差分精度的限制, 每最小波长分格数应达到 10 - 20, 其对内存和计算时间的需求难以容忍, 从而不便于电大尺寸目标的计算. 1994 年 Berenger 提出 PML 层后^[1], 运用 FFT 离散微分, 解微分方程的谱方法开始应用于解电磁场偏微分方程. 在此基础上, 时域伪谱算法, 即 Pseudospectral time-domain (PSTD) 方法得到了发展^[2-4]. 其主要思想是在空间域上借助付氏变换及其反变换完成空间微分. 由于 FFT 理论上可达到无穷阶精度^[5], 其每最小波长只需要两个网格, 从而使时域算法所需的计算量和存储空间均得到了大幅度的下降, 也使得时域方法能处理更为大型的问题, 并使得电大尺寸问题的电磁场求解更为快速. 本

文将对 PSTD 算法及其所使用的吸收边界进行探讨, 并和传统 FDTD 算法及 MRFD (时域多分辨率) 算法进行比较.

2 PSTD 算法的实现

Maxwell 方程是宏观电磁场的普遍规律. PSTD 算法的分析仍从含有时间变量的 Maxwell 旋度方程入手. 在本文中, 采用了 W. C. Chew 的 stretched coordinate. 其优点是吸收边界和计算空间采用同一程序, 便于编程; 吸收层可吸收从不同角度入射的波, 实现远场辐射条件.

$$\nabla_e \times H = j E \quad (1)$$

$$\nabla_h \times E = -j \mu H \quad (2)$$

其中:

$$\nabla_e = \nabla_h = \hat{x} \frac{1}{s_x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{1}{s_z} \frac{\partial}{\partial z} \quad (3)$$

收稿日期: 2002-01-04; 修回日期: 2002-11-26

基金项目: 国家自然科学基金 (No. 49874032)

$$= + \frac{1}{j} \mu = \mu + \frac{1}{j} \quad (4)$$

S_x, S_y, S_z 是扩展坐标在 x, y, z 方向的变量. 上面的式 (1)、(2) 实际上代表了 12 个方程. 将式 (1) 按坐标方向可分为三个方程, 以 E_x 分量为例有:

$$\frac{\partial}{\partial t} E_x = \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} H_z - \frac{1}{s_z} \frac{\partial}{\partial z} H_y \quad (5)$$

将上式分解为两个方程:

$$\frac{\partial}{\partial t} E_{xy} = \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} H_z, \quad \frac{\partial}{\partial t} E_{xz} = \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial z} H_y \quad (6)$$

在本文中, 采用指数形式的 PML 并假设有有限域总单元数为 $N_x * N_y * N_z$, 网格大小 $x * y * z$. 与 FDID 的交错网格形式不同, PSID 算法中其电、磁场分量都在一个中心点上.

将式 (6) 中的扩展坐标变量用指数格式表示^[1] 并将对空间的微分用伪谱方法离散, 可得:

$$\left. \begin{aligned} E_{xz}^{n+1}(i, j, k) &= e^{-\frac{m(i, j, k) t}{0}} E_{xz}^n(j_x, j_y, j_z) \\ &+ \left(\frac{1 - e^{-\frac{m(i, j, k) t}{0}}}{\mu(i, j, k)} \right) \tilde{H}_y^{n+1/2}(k_z) j_2 k_z e^{j^2 k_z z} dk_z \\ E_{xy}^{n+1}(i_x, j_y, k_z) &= e^{-\frac{m(i, j, k) t}{0}} E_{xy}^n(j_x, j_y, j_z) \\ &- \left(\frac{1 - e^{-\frac{m(i, j, k) t}{0}}}{\mu(i, j, k)} \right) \tilde{H}_z^{n+1/2}(k_y) j_2 k_y e^{j^2 k_y y} dk_y \\ E_x^{n+1}(i_x, j_y, j_z) &= E_{xy}^{n+1}(i_x, j_y, j_z) + E_{xz}^{n+1}(i_x, j_y, j_z) \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

根据空间离散方式的不同, 以对 x 方向的一阶微分为例, 可将 PSID 和 FDID、MRID^[5] 三种电磁场计算方法做一个

比较:

$$\text{令 } \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = D_x \{ u(x, t) \} \quad (8)$$

$$\text{有 } D_x \{ f(x) \} = F_x^{-1} \{ ik_x F_x \{ f(x) \} \}, \quad \text{PSID 算法} \quad (9)$$

$$D_x \{ f(x) \} = \frac{1}{x} \sum_{j=1}^{P/2} a_j \left\{ f \left[x + \left(j - \frac{1}{2} \right) x \right] - f \left[x - \left(j - \frac{1}{2} \right) x \right] \right\}, \quad \text{FD/MRID} \quad (10)$$

上式中, 对于二阶 FDID 方法 $P=2, a_1=1$; 对 MRID 方法, p 为整数, a_j 为实常数. 而 PSID 方法中 F_x, F_x^{-1} 为正逆傅氏变换 (用 FFT 完成). 更具体的说, PSID 方法用三角函数多项式表达微分:

$$[(D_x \{ u(x, t) \})_{ps}]_{x=s_j} = \frac{1}{L} \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} ik_m \tilde{u}(m) e^{ik_m x_j} \quad (11)$$

其中, $k_m = 2\pi m/L, \tilde{u}(m)$ 是傅立叶系数

$$\tilde{u}(m) = \sum_{j=0}^{N_x-1} u(x_j) e^{-ik_m x_j}$$

由此可得各场分量的递推算式, 其计算复杂度为 $O(N_x \log 2N_x)$. 表 1 将 FDID、MRID 和 PSID 三种算法的稳定性 and 色散特性做了一个比较.

PSID 算法的突出优点是能够节约内存, 提高计算时间效率, 可分析电大尺寸目标. 对于电大尺寸目标, 它比 FDID 算法更为有效的根本原因在于, 用 FFT 完成空间离散, 提供奈奎斯特采样率下准确的偏微分. 因此相比 FDID, PSID 实质上需要的未知量的个数要少一些. 从上表中也可以看到, 谱域方法每波长只需两个单元 (网格), 这是由奈奎斯特采样率决定的.

表 1 PS、FD、MRID 算法比较

| 项 目 | FDID | MRID | PSID |
|--------|---|---|---|
| 空间场量 | 交 错 | 交 错 | 中 心 |
| 时域微分 | 中心差分 | 中心差分 | 中心差分 |
| 色散特性 | $\sin \frac{ct}{2} = \frac{ct}{x} \sqrt{\frac{\sin^2(k_x x/2)}{+ \sin^2(k_y y/2)} + \sin^2(k_z z/2)}$ | $\sin \frac{ct}{2} = \frac{ct}{x} \sqrt{\sum_{j=1}^{P/2} a_j \sin^2 k (j-1/2)}$ | $\sin \frac{ct}{2} = \frac{ct}{2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ |
| 稳定性 | $\frac{ct}{x} \frac{1}{\sqrt{D}}$ | $\frac{ct}{x} \frac{1}{1.5684 \sqrt{D}}$ (D 为维数) | $\frac{ct}{x} \frac{2}{\sqrt{D}}$ |
| 所需网格密度 | 8 - 16 | > 2 | 2 |
| 最小结构尺寸 | min/8 | | min/2 |

3 PSID 中的吸收边界

在 PSID 算法中仍然可以使用 PML (完全匹配层) 来模拟吸收边界条件, 不过这时候的边界又增加了一项要求——消除由于 FFT 周期性带来的边缘串扰现象. 由于在 PSID 中使用了 FFT 来离散空间微分, 需要对整个空间进行一维 FFT 运算. 又因为空间采样是离散有界的, 在相应的谱域内也是离散有界的 (受计算机资源的限制). 若没有吸收边界, 则将导致在空间坐标的边缘产生周期串扰, 即相邻两个周期的边缘值迭加, 称为周期性效应 (Wraparound effect). 它对谱域的影响很大, 从

而使计算出现极大的不稳定性. 在使用了 PML 层后, 这一外层吸收边界条件将衰减其它空间周期的串扰, 能最大限度的吸收外溢场, 从而消除边界串扰效应. 从数学上看, 它使得谱域和空域积分在整个积分空间近似连续. 另外, 由于 PML 层是媒质吸收边界条件, 除了少数参数要适当选取外, 不需要进行过多的特殊处理. 但是, 在一般情况下, PSID 算法所选取的层数应该大于 FDID 算法所需层数.

图 1 中所示为当渐变变指数为 2, m 取 0.2 时, 边界反射系数与 PML 层数的相对变化规律. 可以看到, PML 在 PSID 中的作用是成功的. 虽然比 FDID 方法要求略高, 但当 PML 层数选

为 8 层时,其表现已经相当令人满意了.

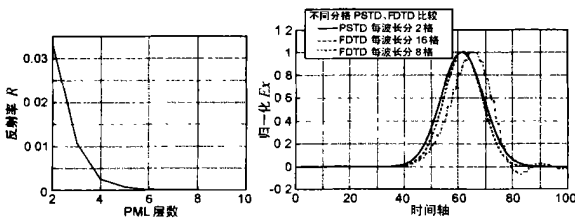


图 1 反射系数随 PML 层数变化曲线
图 2 PSID 和不同分格 FDID 的精度比较

图 2 为自由空间中传播的高斯脉冲,采用 PSID 算法和不同空间分格数,相同时间步长 FDID 算法计算得到的波形比较.从图中可得,当 FDID 算法每最小波长分 16 格时,它和 PSID 结果基本相同,但当分格数小于等于 8 时,其波形发生明显变形,这是其数值色散特性决定的.由此可知,在保持同样精度的情况下,PSID 每最小波长的分格数可比 FDID 少 8 倍,从而可节省约 8^D 的内存和计算时间 (D 为处理问题的维数).

下面,利用上述 PML 吸收边界来计算二维空间中的典型算例,以检验 PML 的吸收效果.PSID 中的 PML 层效果由三个主要参数来决定:PML 厚度 w (即单元层数),层内渐变指数 n ,最外层电导率 m .我们可以把 PML 层记为 $PML(w-n-m)$.在本文中,我们将 \int 和 $*$ 表示为积分中项的形式,即 $x(i) = \frac{1}{x} \int_{x(i)+x/2}^{x(i)+x/2} x(x) dx$ 式中 $x(i)$ 为从 0 到 w 的等距分割.电(磁)导率采用幂指数渐变,有: $() = m \left(\frac{ }{ } \right)^n$.考虑一个单元数为 112×112 的计算区域,采用每最小波长取两个网格的分格方式计算.为了说明问题,计算区域为理想自由空间,设定源激励形式为面平滑高斯脉冲源: $f(t) = A \exp \left\{ - \left[\frac{t-t_0}{T} \right]^2 \right\}$.在计算区域的中心点馈入激励源,并在接近 PML 层场点处 $(80, i)$ 接收.

图 3 所示为 $w=8$,渐变指数取 0.2 时,最外层电导率变化对反射系数的影响.可以看到,最外层电导率 m 对于吸收效果有较大影响:如果 m 较小,电磁波难以在 PML 层中迅速衰减,到最外层边界后反射较大;当 m 较大时,由于离散化,各层之间的 m 变化剧烈,同样引起较大的数值反射,而且还可能导致 FFT 的吉布斯现象.因此 m 选取也应适中,在 0.2 - 0.6 范围内都是可取的.

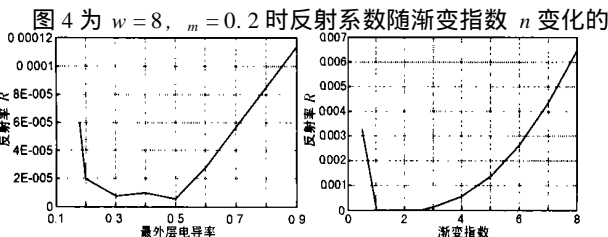


图 3 反射系数随 m 变化曲线
图 4 反射系数随渐变指数变化曲线

曲线.如图所示,如果 n 较小时,如 n 接近零时(常数情形),由于从计算区到 PML 层的电导率或磁阻率出现较大突变,所以在其界面上会呈现明显的数值反射并出现吉布斯现象;而如果 n 选择较大,则在 PML 内层的吸收效果很差,而将近外层时也出现 m 的突变,从而反射也十分明显.由此, n 在 1 - 3 范围内选择比较合适.图 5 所示为 $w=8$ 情况下, m 和 n 参数综合变化图形.从图中可以看到,在 $m:0.2 - 0.6, n:1 - 3$ 的范围内设置 PML 层参数都是可取的.

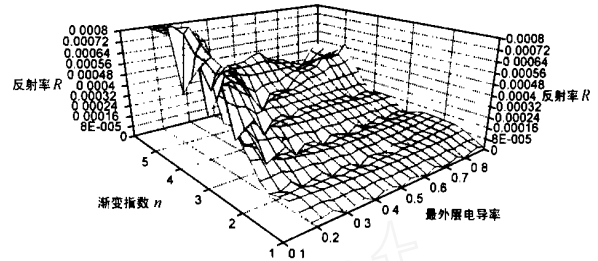


图 5 $w=8$ 时,反射率随 n 和 m 变化曲面

4 数值结果

4.1 三层介质情况

假设一平面波照射无限大介质平板, E_y 场高斯脉冲激励源设置在 $x=15m$ 处, $x=0.3m$,为激励源最小波长的一半.最小时间步为 $2.5 \times 10^{-10}s$.背景介质参数为 $\epsilon_r=4, \mu_r=1, \sigma_r=0$.在 $x=24.6m$ 处放置一 $\epsilon_r=1, \mu_r=1, \sigma_r=0$,厚度为 $6m$ 的介质板,并在 $21m$ 和 $33m$ 处进行检测.

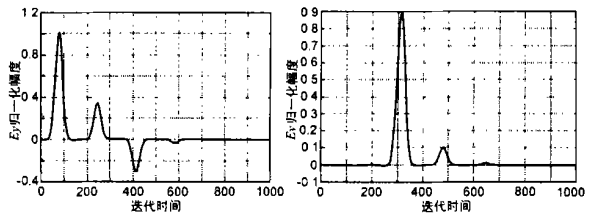


图 6 21m 处 E_y 波形
图 7 33m 处 E_y 波形
相比每最小波长分 16 格的 FDID 算法,其内存和计算时间均可减少近 8 倍.

4.2 二维物体探测

对于 $4.8m \times 4.8m$ 的二维自由空间,在距点激励源 (TM 波) 3 米处放置一参数为 $\epsilon_r=5, \mu_r=1, \sigma_r=0$ 的 $0.5m \times 0.5m$

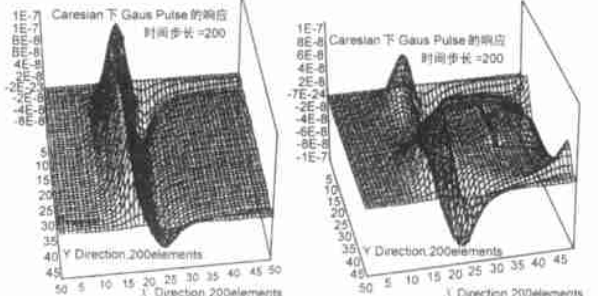


图 8 H_y 分量在自由空间中的传播
图 9 脉冲经过介质质块后的波形

矩形介质块. 空间网格取 $x = y = 0.15\text{m}$, 为激励源最小波长的一半. 最小时间步长为 $6 \times 10^{-11}\text{s}$. 图 8 为激励脉冲 H_y 分量在自由空间中的传播, 图 9 为脉冲经过介质块后的波形变化. 采用相同配置的微机进行计算, 用 PSTID 方法计算需费时 0.12s, 相比每最小波长分 16 格的 FDTD 算法 (费时约 6.53s), 可节约内存和计算时间近 54 倍.

5 结论

本文分析了便于电大尺寸目标求解的 PSTID 技术, 探讨了 PSTID 所使用的吸收边界条件 (PML), 以及其不同于 FDTD 中 PML 的新作用, 并讨论了指数型 PML 吸收边界条件各参数的设置. 通过结合具体算例可知, 与传统 FDTD 算法相比, PSTID 算法具有节约内存, 提高计算时间效率的突出优点, 因此便于分析电大尺寸目标.

此外, 从 PSTID 情况下 PML 介质参数对吸收性能影响的计算和比较中可以看出, 在 PSTID 技术中采用 PML 可以很好的匹配远场边界条件, 回波反射很小; 特别是当参数选取适当 (参照图 5) 时, 吸收效果可以达到令工程使用相当满意的程度. 文中给出了参数设置的最佳范围, 并做了评述. 另一方面, 由于 PML 介质的引入, 会导致计算量的增加, 这就需要参照具体问题对边界反射的要求来综合衡量, 适当选取 PML 参数.

参考文献:

- [1] J P Berenger. Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves [J]. Computational Physics, 1996, 127: 363 - 379.

- [2] Q H Liu. The PSTID algorithm: a time-domain method requiring only two cells per wavelength [J]. Microwave Opt. Tech. Lett, 1997, 10: 158 - 165.
- [3] Q h Liu. An FDTD algorithm with perfectly matched layers for conductive media [J]. Microwave Opt. Technol. Lett, 1997, 14(2): 134 - 137.
- [4] Q h Liu. PML and PSTID algorithm for arbitrary lossy anisotropic media [J]. IEEE Microwave Guided Wave Lett, 1999, 9(2).
- [5] Krumpholz M. MRID: New time domain schemes based on multi-resolution analysis [J]. IEEE Trans. Microwave Theory Tech, 1996, 44: 555 - 571.
- [6] H J 威佛. 离散和连续傅立叶分析理论 [M]. 王中德, 张辉, 译. 北京: 北京邮电学院出版社.

作者简介:



马弘舸 男, 1973 年 11 月生于四川, 1996 年毕业于西安电子科技大学电磁场与微波技术专业, 同年, 到中国工程物理研究院应用电子学研究所五室工作, 开始从事高功率微波技术的研究, 1999 年考入电子科技大学电子工程学院电磁场与微波技术专业攻读硕士学位, 2001 年开始攻读电磁场与微波技术博士学位, 主要从事的研究方向为瞬态电磁脉冲学、超宽带技术以及高功率微波技术.

聂在平 男, 1946 年 10 月生于西安, 现任电子科技大学教授、电磁场与微波技术专业博士生导师, 长期致力于电磁辐射、散射与逆散射研究 (电磁散射与逆散射课题组), 先后主持包括国家“八五”科技攻关项目、国家自然科学基金项目和国家 863 高技术研究项目等多项科研课题, 目前是享受政府特殊津贴的专家.