

一种色散介质 FDTD 通用吸收边界^{*}

魏 兵[†] 李小勇 王 飞 葛德彪

(西安电子科技大学物理系, 西安 710071)

(2009 年 1 月 8 日收到, 2009 年 1 月 13 日收到修改稿)

由单轴各向异性介质所满足的场方程出发, 并根据相位匹配原理以得到介质中的色散关系和无反射条件. 结合频域到时域的转换关系(即用 $\partial/\partial t$ 代替 $j\omega$)和移位算子时域有限差分(SO-FDTD)方法提出了一种适用于各向同性常见色散介质模型, 包括德拜模型、洛伦兹模型、德鲁德模型等的通用 UPML 吸收边界. 数值结果表明了该算法的通用性和高效性.

关键词: 时域有限差分, 吸收边界, 移位算子, 色散介质

PACC: 4110H, 5170, 5210

1. 引言

由于计算机容量的限制, 时域有限差分(finite difference time domain, FDTD)方法模拟电磁问题只能在有限区域进行. 为了能模拟开域的电磁散射过程, 在计算域的截断边界处必须给出吸收边界条件. 自从 FDTD 方法产生以来, 对于吸收边界的研究一直是热点问题之一^[1-7]. 吸收边界从最初开始的差值边界, 到后来广泛采用的 Mur 吸收边界^[2], 以至于上世纪 90 年代发展起来的完全匹配层吸收边界^[4, 5], 其吸收效果越来越好. 近年来, 人们对 FDTD 方法应用于色散介质进行了大量的研究. 目前 FDTD 中适用于截断色散介质的最为常用和有效的吸收边界为卷积完全匹配层(convolutional perfect match layer, CPML)吸收边界^[6].

CPML 的设置和处理与计算域内同吸收边界相邻的色散介质类型有关. 若与吸收边界相邻的介质为单极点德拜介质, 则 CPML 区域内安培定律的 x 方向分量的表达式为^[8]

$$\begin{aligned} \epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_s E_x + J_d \\ = \left(\frac{1}{\kappa_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\kappa_y} \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) + \left(\zeta_y * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \zeta_z * \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

对于其他色散介质模型, 例如洛伦兹模型、德鲁德模型等, 方程(1)的右端保持形式不变, 而左端随着介

质类型的变化而变化. 这一特性使得 CPML 在处理不同类型的色散介质时需要编制不同的程序, 算法和程序的通用性差.

文献[9]给出了一种适用于各种常见色散介质模型的通用时域计算方法——移位算子时域有限差分方法(shift-operator finite difference time domain, SO-FDTD). 本文给出建立在各向异性完全匹配层^[7](uniaxial perfect match layer, UPML)吸收边界的基础之上适用于 SO-FDTD 计算的通用吸收边界. 首先, 由单轴各向异性介质所满足的场方程出发, 并根据相位匹配原理以得到介质中的色散关系和无反射条件. 然后, 结合频域到时域的转换关系和色散介质相对介电常数可用 $j\omega$ 的分式多项式表示的特点, 给出一种适用于常见色散介质模型, 包括德拜模型、洛伦兹模型、德鲁德模型等的通用 UPML 吸收边界. 文中时谐因子取 $\exp(j\omega t)$.

2. 色散介质 UPML 的通用时域公式

UPML 吸收边界中, 由单轴各向异性介质所满足的场方程出发, 根据相位匹配原理可得到各向异性介质中的色散关系. 适当的选取单轴各向异性介质的本构参数可以使各向异性介质成为无反射的完全匹配层. 然后, 引入匹配矩阵处理计算域中的棱边和角顶区对电磁波的吸收问题. 本文方法对上述问题的处理与通常 UPML 吸收边界相同^[10], 在此不再赘述.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 60871071)和中国博士后基金(批准号: 20070421109)资助的课题.

[†] E-mail: bwei@xidian.edu.cn

UPML 吸收边界中平面区、棱边区和角顶区的参数设置情况有所不同,以下推导针对角顶区 UPML 的情况(此时,介电系数可表示为 $\epsilon = \epsilon_1 \cdot \text{diag}(s_x s_z / s_x, s_x s_z / s_y, s_x s_y / s_z)$, s_x, s_y, s_z 为匹配矩阵中的元素),适当简化后可用于棱边区或平面区的情形.与吸收层相邻介质的介电系数和磁导系数 ϵ_1, μ_1 可取以下形式:

$$\begin{aligned} s_x &= \kappa_x + \sigma_x / j\omega\epsilon_0, \quad s_y = \kappa_y + \sigma_y / j\omega\epsilon_0, \\ s_z &= \kappa_z + \sigma_z / j\omega\epsilon_0. \end{aligned} \tag{2}$$

各向异性介质麦克斯韦旋度方程(无源)在时谐场情形为

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= j\omega\epsilon \cdot \mathbf{E}, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}, \tag{3} \\ \text{设与 UPML 相邻的色散介质的介电系数为 } \epsilon_1(\omega) &= \epsilon_0 \epsilon_r(\omega), \text{ 其中 } \epsilon_r(\omega) \text{ 为相对介电常数, 引入中间变量 } \mathbf{P}, \\ P_x &= \epsilon_0 \epsilon_r(\omega) (s_z / s_x) E_x, \quad P_y = \epsilon_0 \epsilon_r(\omega) (s_x / s_y) E_y, \\ P_z &= \epsilon_0 \epsilon_r(\omega) (s_y / s_z) E_z. \end{aligned} \tag{3} \text{ 式第一式可写为}$$

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} \partial H_z / \partial y - \partial H_y / \partial z \\ \partial H_x / \partial z - \partial H_z / \partial x \\ \partial H_y / \partial x - \partial H_x / \partial y \end{bmatrix} \\ &= j\omega \begin{bmatrix} s_y & 0 & 0 \\ 0 & s_z & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{4}$$

取 UPML 的参数如(2)式,将(2)式代入(4)式,并利用频域到时域的转换关系 $j\omega \rightarrow \partial / \partial t$, 将其过渡为时域公式得

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} \partial H_z / \partial y - \partial H_y / \partial z \\ \partial H_x / \partial z - \partial H_z / \partial x \\ \partial H_y / \partial x - \partial H_x / \partial y \end{bmatrix} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \kappa_y & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_z & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix} + \frac{1}{\epsilon_0} \begin{bmatrix} \sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_z & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{5}$$

(5) 式的分量式为(为节省篇幅以 x 分量为例, y 和 z 分量公式类似,下同)

$$\begin{aligned} \partial H_z / \partial y - \partial H_y / \partial z &= \kappa_y \partial P_x / \partial t + (\sigma_y / \epsilon_0) P_x, \tag{6} \\ \text{显然, 方程(6)与通常麦克斯韦方程直角坐标系中的} & \\ \text{分量式相似. 引入中间变量 } D_x, & \end{aligned}$$

$$D_x = P_x / \epsilon_1(\omega), \tag{7}$$

此时有

$$D_x = \epsilon_0 (s_z / s_x) E_x. \tag{8}$$

将(2)式代入(8)式得

$$\begin{aligned} (\kappa_x + \sigma_x / j\omega\epsilon_0) D_x &= \epsilon_0 (\kappa_z + \sigma_z / j\omega\epsilon_0) E_x. \end{aligned} \tag{9}$$

同样,利用频域到时域的转换关系 $j\omega \rightarrow \partial / \partial t$ 可得(9)式对应的时域形式

$$\kappa_x \partial D_x / \partial t + \sigma_x / \epsilon_0 D_x = \epsilon_0 (\kappa_z \partial E_x / \partial t + \sigma_z / \epsilon_0 E_x), \tag{10}$$

(10) 式为 D 和 E 满足的一阶偏微分方程.

可以证明,常见色散介质模型包括德拜模型、洛伦兹模型和德鲁德模型等的相对介电系数 $\epsilon_r(\omega)$ 均可以写成有理分式函数形式^[9], 即

$$\epsilon_r(\omega) = \left[\sum_{n=0}^N p_n \cdot (j\omega)^n \right] / \left[\sum_{n=0}^N q_n \cdot (j\omega)^n \right], \tag{11}$$

其中 p_n 和 q_n 为多项式系数, N 为整数. 将(11)式代入(7)式得

$$\left[\sum_{n=0}^N q_n \cdot (j\omega)^n \right] P_x = \left[\sum_{n=0}^N p_n \cdot (j\omega)^n \right] D_x, \tag{12}$$

上式的时域形式为

$$\sum_{n=0}^N q_n (\partial^n P_x / \partial t^n) = \sum_{n=0}^N p_n (\partial^n D_x / \partial t^n), \tag{13}$$

这是一个 N 阶偏微分方程, N 与吸收边界相邻的介质类型有关. 通常情形下,工程实际中(13)式是一阶或二阶的微分方程. 例如单极点德拜模型为 $N=1$ 时的情形,而非磁等离子体、双极点德拜模型、单极点洛伦兹模型和单极点德鲁德模型为 $N=2$ 时的情形. 当 $N=2$ 时(13)式可写为

$$\begin{aligned} q_0 P_x + q_1 (\partial P_x / \partial t) + q_2 (\partial^2 P_x / \partial t^2) \\ = p_0 D_x + p_1 (\partial D_x / \partial t) + p_2 (\partial^2 D_x / \partial t^2). \end{aligned} \tag{14}$$

3. 色散介质通用吸收边界的 FDTD 实现

要实现递推计算,需要根据 FDTD 算法的空间离散方式 Yee 元胞对偏微分方程(6)(14)和(10)进行离散并得到时域递推公式.

3.1. 磁场强度到中间变量 P 的递推 ($H \rightarrow P$)

取 P 的采样点和电场 E 的采样点相同,离散(6)可得

$$\begin{aligned} &P_x^{n+1}(i+1/2, j, k) \\ &= \text{CAX}(m) \cdot P_x^n(i+1/2, j, k) + \text{CBX}(m) \\ &\quad \times [\mathcal{H}_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) \\ &\quad - \mathcal{H}_z^{n-1/2}(i+1/2, j-1/2, k)] \Delta y \\ &\quad - [\mathcal{H}_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1/2) \\ &\quad - \mathcal{H}_y^{n-1/2}(i+1/2, j, k-1/2)] \Delta z, \end{aligned} \tag{15}$$

式中系数

$$\text{CAX}(m)=\frac{1-[\sigma_y(m)\Delta t][2\varepsilon_0\kappa_y(m)]}{1+[\sigma_y(m)\Delta t][2\varepsilon_0\kappa_y(m)]},$$
$$\text{CBX}(m)=\frac{\Delta t/\kappa_y(m)}{1+[\sigma_y(m)\Delta t][2\varepsilon_0\kappa_y(m)]}\quad(16)$$

上式中标号 $m=(i+1/2,j,k)$ 表示空间采样点.

3.2 中间变量 P 到中间变量 D 的递推 ($P\rightarrow D$)

取 D 的采样点和 P 的采样点相同,利用一阶、二阶微分的中心差分近似离散(14)可得

$$D_x^{n+1}(m)=\text{PD}_1\cdot P_x^{n+1}(m)+\text{PD}_2\cdot P_x^n(m)+\text{PD}_3\cdot P_x^{n-1}(m)+\text{PD}_4\cdot D_x^n(m)+\text{PD}_5\cdot D_x^{n-1}(m),\quad(17)$$

式中 m 的含义与(16)相同,表示节点位置.

$$\text{PD}_1=\frac{q_0(\Delta t)^2/2+q_1\Delta t+q_2}{p_0(\Delta t)^2/2+p_1\Delta t+p_2},$$
$$\text{PD}_2=\frac{q_0(\Delta t)^2/2-q_1\Delta t-2q_2}{p_0(\Delta t)^2/2+p_1\Delta t+p_2},$$
$$\text{PD}_3=\frac{q_2}{p_0(\Delta t)^2/2+p_1\Delta t+p_2},$$
$$\text{PD}_4=-\frac{p_0(\Delta t)^2/2-p_1\Delta t-2p_2}{p_0(\Delta t)^2/2+p_1\Delta t+p_2},$$
$$\text{PD}_5=-p_2[p_0(\Delta t)^2/2+p_1\Delta t+p_2].\quad(18)$$

3.3 中间变量 D 到电场强度 E 的递推 ($D\rightarrow E$)

利用中心差分近似离散(10)式可得

$$E_x^{n+1}=\text{DEX}_1\cdot D_x^{n+1}+\text{DEX}_2\cdot D_x^n+\text{DEX}_3\cdot E_x^n,$$
$$(19)$$

式中

$$\text{DEX}_1=\varepsilon_0\frac{\kappa_x/\Delta t+\sigma_x/2\varepsilon_0}{\kappa_z/\Delta t+\sigma_z/2\varepsilon_0},$$
$$\text{DEX}_2=-\varepsilon_0\frac{\kappa_x/\Delta t-\sigma_x/2\varepsilon_0}{\kappa_z/\Delta t+\sigma_z/2\varepsilon_0},$$
$$\text{DEX}_3=\frac{\kappa_z/\Delta t-\sigma_z/2\varepsilon_0}{\kappa_z/\Delta t+\sigma_z/2\varepsilon_0}.\quad(20)$$

这样,利用(15)式可以实现磁场强度 H 到中间变量 P 的 FDTD 迭代,利用(17)式可以实现中间变量 P 到中间变量 D 的 FDTD 迭代,利用(19)式可以实现中间变量 D 到电场强度 E 的 FDTD 迭代.本文中设色散介导磁系数 μ_1 为常数,与频率无关.此时从 E 到 H 的迭代式与通常 FDTD 的迭代式相同.

4. 色散介质通用吸收边界的实现框图

总之,色散介质通用 UPML 吸收边界实现的技术路径如图 1 所示.

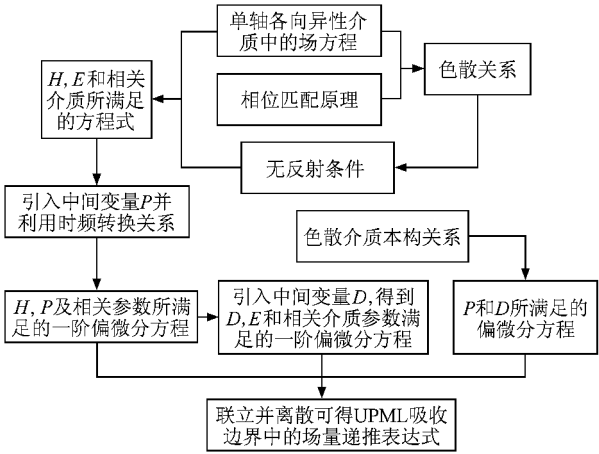


图 1 色散介质通用吸收边界的实现框图

5. 数值结果

例 1 色散介质通用 UPML 在真空和绝缘介质情形与 Mur,UPML 吸收边界的比较. FDTD 计算中取空间离散间隔 $\delta=0.4\text{ mm}$,时间离散间隔 $\Delta t=0.67\text{ ps}$,高斯脉冲入射,脉冲宽度为 $80\Delta t$,通用 UPML 吸收边界的层数设置为 9 层.三种吸收边界反射系数的比较如图 2 所示,图中虚线、圆圈和实线分别代表

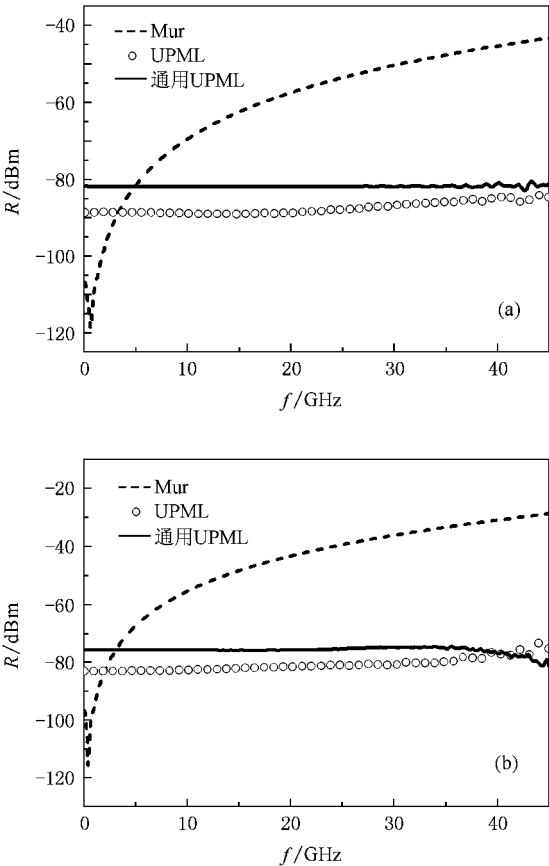


图 2 本文方法与 Mur 和 UPML 吸收边界的比较 (a)真空中的情形 (b)非色散绝缘介质的情形

Mur,UPML 和通用 UPML. 图 2 (a)为真空情形,图 2 (b)为吸收边界相邻为非色散绝缘介质(相对介电常数为 $\epsilon_r = 4$)的情形.由图可见本文方法吸收效果与 UPML 相近,优于 Mur 吸收边界.

例 2 测试本文吸收边界的 FDTD 计算区域的截面见图 3. FDTD 空间离散网格尺寸为 $\delta = 5\text{ cm}$,时间离散间隔 $\Delta t = \delta/2c$.总计算域为 $40\delta \times 40\delta \times 40\delta$,通用吸收边界厚度设为 8δ ,电偶极子位于计算域中心,电偶极子周围16个元胞为自由空间,吸收

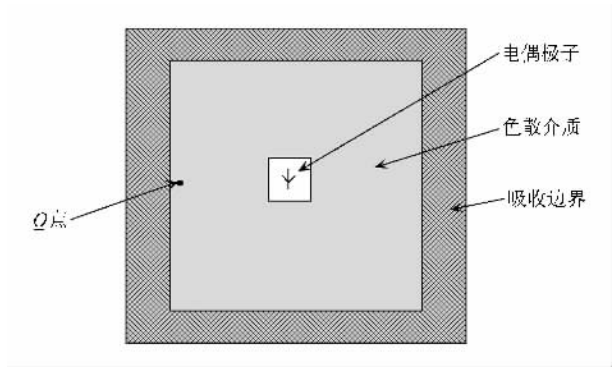


图 3 吸收边界性能测试的截面示意图

边界内部其余区域为色散介质.计算中辐射源采用调制高斯脉冲,其表达式为

$$P_i(t) = -10^{-10} \cos(\omega t) \exp\left[-\frac{4\pi(t-t_0)^2}{\tau^2}\right],$$

(21)

式中 t_0 为高斯函数包络峰值出现的时刻, τ 为脉冲宽度, $\omega = 2\pi \times 0.3 \times 10^9 \text{ rad/s}$, $t_0 = 9\pi/2\omega$, $\tau = 80\Delta t$. 计算测试中 Debye 介质参数为 $\epsilon_\infty = 7$, $\Delta\epsilon_1 = 3$, $\tau_1 = 7.0 \times 10^{-10} \text{ s}$; Lorentz 介质参数为 $\epsilon_\infty = 1.5$, $\Delta\epsilon_1 = 1.5$, $\omega_p = 40\pi \text{ GHz}$, $\delta_p = 4\pi \text{ GHz}$; Drude 介质参数为 $\epsilon_\infty = 1$, $f_p = 2.87 \text{ GHz}$, $\omega_p = 2\pi f_p$, $\nu_c = 200 \text{ GHz}$. 图 4 (a) 是三种色散介质相对介电系数随频率变化情况,图中实线、虚线、实心圆、圆圈、实心星形、星形分别表示 Debye, Lorentz 和 Drude 介质相对介电系数的实部和虚部.图 4 (b) (c) (d) 中的实线表示吸收边界内部填充 Debye 介质、Lorentz 介质和 Drude 介质时观察点 Q (如图 3 所示,距离辐射源 10δ ,吸收层内侧两个元胞处)的时域波形.作为比较图中还给出了将 FDTD 计算区域扩大,电磁波没有到达吸收边界时的计算结

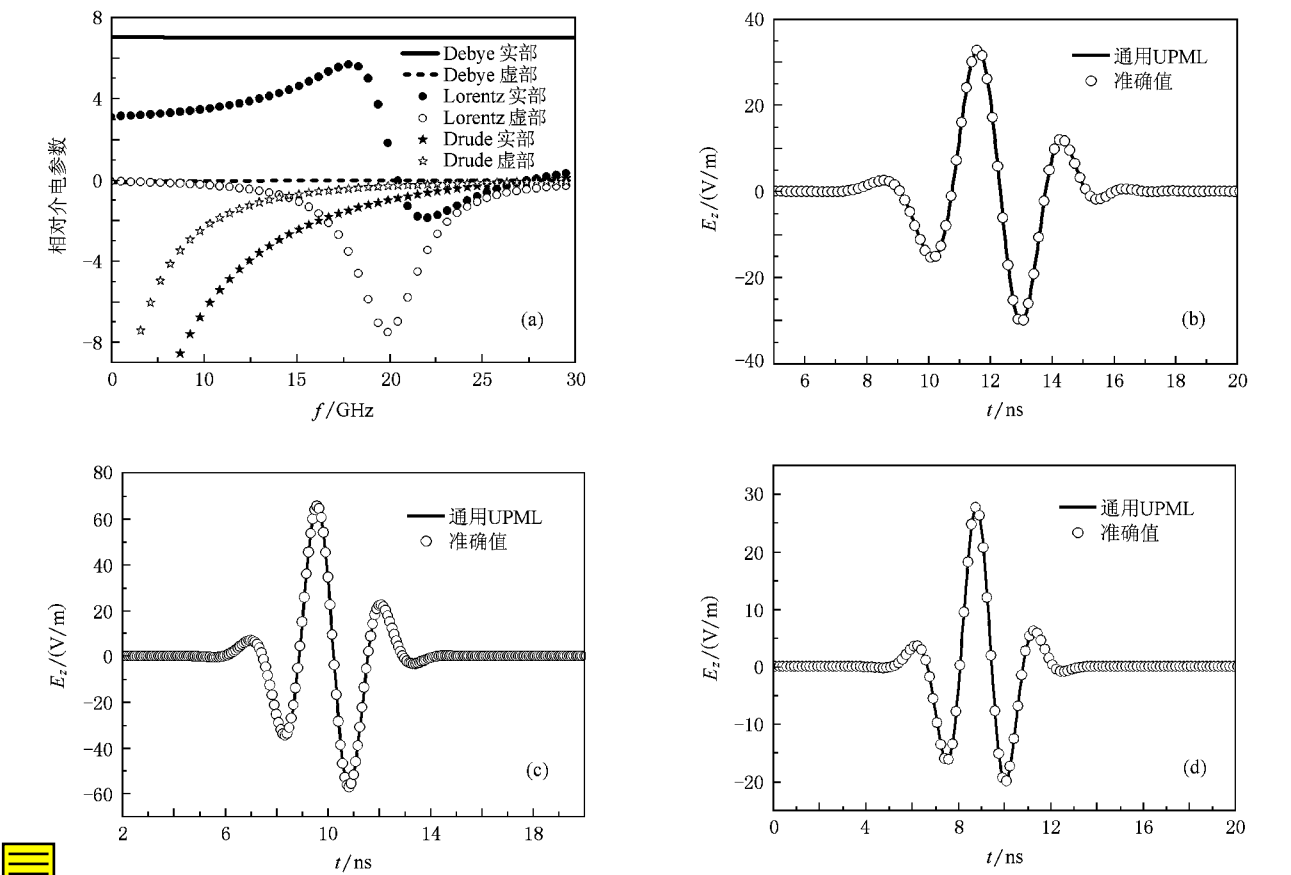


图 4 计算域内填充三种典型色散介质模型时 Q 点的时域波形 (a)色散介质相对介电参数随频率的变化关系 (b) Debye 模型下色散介质中时域波形 (c) Lorentz 模型下色散介质中时域波形 (d) Drude 模型下色散介质中时域波形

果(在此视为准确解).由图可见两种符合得很好.

6. 结 论

本文给出了一种基于 UPML 吸收边界可用于色

散介质 FDTD 计算的通用吸收边界.数值结果表明这一吸收边界对三种典型的色散介质模型,即德拜模型、洛伦兹模型和德鲁德模型等均有良好的吸收效果.充分说明了本文算法的通用性和有效性.

[1] Engquist B , Majda A 1977 *Math . Comput .* , **31** 629

[2] Mur G. 1981 *IEEE Trans . Electromagn . Compat .* **23** 377

[3] Berenger J P 1994 *J. Comput . Phys .* **114** 185

[4] Sacks Z S , Kingsland D M , Lee D M , Lee J F 1995 *IEEE Trans . Antennas Propagat .* **43** 1460

[5] Gedney S D 1996 *IEEE Trans . Antennas Propagat .* **44** 1630

[6] Roden J A , Gedney S D 2000 *Micro . Opt . Tech . Lett .* **27** 334

[7] Zhang B , 2005 *Acta Phys . Sin .* **54** 5677 [in Chinese] 张波 2005 物理学报 **54** 5677]

[8] Taflove A (Ed). 2005 *Advances in Computational Electromagnetics : The FDTD Method .* Norwood , MA : Artech House .

[9] Wei B , Ge D B , Wang F 2008 *Acta Phys . Sin .* **57** 6290 [in Chinese] 魏 兵、葛德彪、王 飞 2008 物理学报 **57** 6290]

[10] Ge D B , Yan Y B 2005 *Fintie-Difference Time-Domain method for Electromagnetic waves* 2thed. (in Chinese] 葛德彪、闫玉波 2005 电磁波时域有限差分方法(第二版) [西安电子科技大学出版社])

A finite difference time domain absorbing boundary condition for general frequency-dispersive media *

Wei Bing[†] Li Xiao-Yong Wang Fei Ge De-Biao
(Department of Physics , Xi ' dian University , Xi ' an 710071 , China)
(Received 8 January 2009 ; revised manuscript received 13 January 2009)

Abstract

The dispersion relations and the reflectionless conditions are obtained by the Maxwell ' s curl equations in a uniaxial anisotropic medium and the phase - matching. Using the shift operator finite difference time domain(SO-FDTD) method and the transform relationship of frequency domain to time domain($j\omega$ replaced by $\partial/\partial t$), an FDTD absorbing boundary condition for three kinds of general dispersive media model , i. e. the Debye model , Lorentz model and Drude model , is given. The characteristics of our absorbing boundary condition are tested. The computed results illustrated the generality and the feasibility of the scheme.

Keywords : FDTD , absorbing boundary condition , shift operator , dispersive media

PACC : 4110H , 5170 , 5210

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60871071) and the Foundation for Post-doctoral Scientist of China (Grant No. 20070421109).

[†] E-mail : bwei@xidian.edu.cn